Atmosferik Basınç Plazma Jet ile Bazı Formazan Moleküllerinin

Yapısının Belirlenmesi

Robert Bülent Winter

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Haziran 2021

Investigation of Some Formazan Molecules Structure with Atmospheric Pressure Plasma Jet

Robert Bülent Winter

MASTER OF SCIENCE THESIS

Department of Physics

Haziran 2021

Atmosferik Basınç Plazma Jet ile Bazı Formazan Moleküllerinin Yapısının Belirlenmesi

Robert Bülent Winter

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Fizik Anabilim Dalı
Atom ve Molekül Fiziği Bilim Dalında
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır

Danışman: Prof. Dr. Erol Taşal

Haziran 2021

ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Prof. Dr. Erol Taşal danışmanlığında hazırlamış olduğum "Atmosferik Basınç Plazma Jet ile Bazı Formazan Moleküllerinin Yapısının Belirlenmesi" başlıklı YÜKSEK LİSANStezimin özgün bir çalışma olduğunu; tez çalışmamın tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallara uygun davrandığımı; tezimde verdiğim bilgileri, verileri akademik ve bilimsel etik ilke ve kurallara uygun olarak elde ettiğimi; tez çalışmamda yararlandığım eserlerin tümüne atıf yaptığımı ve kaynak gösterdiğimi ve bilgi, belge ve sonuçları bilimsel etik ilke ve kurallara göre sunduğumu beyan ederim.17/06/2021

Robert Bülent Winter

İmza

ÖZET

İlk aromatik formazan örnekleri 1892 yılında sentezlenmiş ve “formazan bileşikleri” olarak adlandırılmıştır (Nineham, 1955; Gökçe, 2004) ve Von Pechmann ve Bamberger tarafından incelenmiştir (Pechmann, 1892; Bamberger, 1894).

Yapılarında bulunan konjuge pi (π) bağlarından dolayı renkli bileşiklerdir. Bu da formazanların en önemli özelliklerinden biridir. Kırmızıdan mora kadar değişen yapıları boyarmadde olarak kullanılmalarını sağlamıştır. 1946’da ilk olarak Ciba firmasınca boyarmadde olarak patente bağlamıştır (Ciba, 1949). Bu tarihten sonra tekstil elyaf boyamacılığında boyarmadde olarak kullanılmalarının yanı sıra indikatör ve analitik reaktif, redox işlemlerinde biyokimyasal işaretleyici, fotokromik ve termokromik madde olarak kullanılmaktadır.

Formazanlar yükseltgendiğinde renksiz tetrazolyum tuzları oluşturur. Tetrazolyum tuzları da indirgenerek formazanlara dönüşürler. Tetrazolyum tuzları hücrede bulunan enzimler tarafından formazanlara indirgenerek renk değişimlerine neden olurlar. Bu da formazan/tetrazolyum sistemlerinin canlılığın test ayıracı olarak bilinmesini sağlamıştır (Tezcan, vd., 2002).

Canlılığın test ayıracı olarak bilinmesiyle tıpta birçok alanda kullanılmaya başlanmıştır. Canlılığın testinde renk değişimine neden olduklarından dolayı dokulardaki tümörlerin saptanmasında ve böylece kanser tedavisinde aynı zaman da kanser ilaçlarının seçilmesinde kullanılmıştır.

Formazanlar aynı zamanda antiviral, anti-fertile, anti-enflamatuar, analjezik, anti-tüberküler, anti-mikrobiyel aktivitelerine de sahip olduğu ispatlanmıştır (Mariappan vd., 2010). Bu nedenle formazanlar önemli bir araştırma konusu olmuştur.

Anahtar kelimeler: 1-(o-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans, 1-(p-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans, formazan, UV, IR, solvatokromizim.

SUMMARY

The first aromatic formazan samples were synthesized in 1892 and named as "formazan compounds" (Nineham, 1955; Gökçe, 2004) and were studied by Von Pechmann and Bamberger (Pechmann, 1892; Bamberger, 1894).

They are colored compounds due to the conjugated pi (π) bonds in their structure. This is one of the most important features of formazans. Their structure ranging from red to purple has enabled them to be used as dyestuff. In 1946, it was first patented by the Ciba firm as a dyestuff (Ciba, 1949). After this date, besides being used as dyestuff in textile fiber dyeing, it is used as indicator and analytical reagent, biochemical marker, photochromic and thermochromic material in redox processes.

Formazans form colorless tetrazolium salts when oxidized. Tetrazolium salts are also reduced to formazans. Tetrazolium salts are reduced to formazan by enzymes in the cell and cause color changes. This has enabled formazan / tetrazolium systems to be known as a viability test reagent (Tezcan vd., 2002).

With the recognition of viability as a test reagent, it has been used in many areas of medicine. Since they cause color change in the vitality test, it has been used in the detection of tumors in tissues and thus in the treatment of cancer and also in the selection of cancer drugs.

Formazans have also been proven to have antiviral, anti-fertile, anti-inflammatory, analgesic, anti-tubercular, and anti-microbial activities (Mariappan vd., 2010). For this reason, formazans have become an important research subject.

Keywords: 1-(o-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans, 1-(p-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans, UV, IR, azo dye, solvatochromism.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET vi

SUMMARY vii

TEŞEKKÜR viii

İÇİNDEKİLER ix

ŞEKİLLER DİZİNİ xi

ÇİZELGELER DİZİNİ xiv

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ xv

1. GİRİŞ 1

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI 4

2.1 . Plazmadaki Güç Kaynakları 4

2.2 . Atmosferik Jetler 4

2.4. Formazanlar 8

2.4.1. Formazanların yapısı ve özellikleri 9

3 MOLEKÜL TANIMI 13

3.1. H1 Molekülü 13

3.2. H3 Molekülü 14

4. SPEKTROSKOPİ 15

4.1 . Moleküler Spektroskopi 16

4.2 . Moleküler Titreşim Spektroskopisi 17

4.3 . İnfrared Spektroskpisi 18

4.4 . Titreşim Spektroskopisi 19

İÇİNDEKİLER (devam)

4.5 . Kırmızı altı Spektroskopisi 19

4.6 . Moleküler Titreşim 20

4.7 . Absorbsiyon Spektroskopisi 21

5. MOLEKÜLLERDE ELEKTRONİK GEÇİŞLER..... 24

5.1 σ→σ* Geçişleri.....25

5.2 . n→σ* Geçişleri.....26

5.3 . n→π* ve π→π* Geçişleri 26

5.4 . n→π* ve π→π* Geçişleri 26

5.5 . Moleküler Orbitaller 29

5.6 . Kromoforlar 33

6. MATERYAL VE YÖNTEM..... 34

6.1 . H1 Molekülü İşlemleri 34

6.2 . H3 Molekülü İşlemleri.....35

7. BULGULAR VE TARTIŞMA..... 36

7.1 . H1 FT-IR Spektrumu Bulguları 36

7.2 . UV Spektrum Bulguları 60

7.3 H1 NMR Spektrumu Bulguları.....66

7.4 .H3 FT-IR Spektrumu Bulguları 70

7.5 . H3 Molekülü UV Spektrum Bulguları.....103

7.6 . H3 NMR Spektrumu Bulguları.....110

8. SONUÇ VE ÖNERİLER..... 114

KAYNAKLAR DİZİNİ 116

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil **Sayfa**

1.1. Maddenin plazma hali 2
2.1. Atmosferik basınç deşarj sistemi 5
2.2. Yüksek Voltaj Kaynağı 7
2.3. Deneysel Çalışmada Ar Gazından Elde Edilen Plazma Jetin Numuneye (H1) Uygulanması 7
2.4. $C_{20}H_{18}N_4O$ Molekülünün Yapısı 8
2.5. Formazanların Genel Yapısı 9
2.6. 1,3,5 trifenil formazan (TFF) 10
2.7. Formazanlardaki Moleküler Şelatlaşma Ve Tautomeri 11
2.8. Formazanlardaki Geometrik İzomerizm 11
2.9. Formazanların Renkleri 12
3.1. 1-(o-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans $C_{20}H_{18}N_4O$ Molekülünün Yapısı. 13
3.2. 1-(p-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans C20H18N4O Molekülünün Yapısı 14
4.1. Elektromanyetik Tayf 15
4.2. İnfrared Ve Ultraviyole Bölgelerini Gösteren Elektromanyetik Spektrum 22
5.1. Moleküler Orbitallerde Elektronik Geçişler 25
5.2. s ve p Orbitallerinin Şekilleri 27
5.3. Bazı ikinci sıra elementlerinin elektron dizilişleri 28
5.4. Çekirdekler Arası Uzaklığın Hidrojen Molekülünün Potansiyel Enerjisine Etkisi 29
5.5. Aynı Faz İşaretli İki Hidrojen 1s Atomik Orbitalinin Örtüşerek Bir Bağlayıcı Moleküler Orbital Oluşturması 31
5.6. Zıt Faz İşaretli İki Hidrojen 1s Atomik Orbitalinin Örtüşerek Bir Karşıt Bağlayıcı Moleküler Orbital Oluşturması 32
5.7. Hidrojen Molekülü İçin Enerji Şeması 33
7.1. H1 DMSO öncesi APPT H1 DMSO Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 36
7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Dmso Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 39

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

Şekil **Sayfa**

7.3. Molekül H1 Ethanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 42

7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 44

7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 47

7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 50

7.7. DMSO Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu.....60

7.8. Argon Plazma Uygulanmış H1 DMSO Molekülünün UV Spektrumu 61

7.9. Ethanol Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu.....62

7.10. Argon Plazma Uygulanmış H1 Ethanol Molekülünün UV Spektrumu.....63

7.11. Methanol Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu 64

7.12. Argon Plazma Uygulanmış H1 Methanol Molekülünün UV Spektrumu.....65

7.13. APTT uygulandıktan sonra DMSO içinde çözünen başlık molekülünün 1H NMR spektrumu 66

7.14. APTT uygulandıktan sonra metanol içinde çözülen başlık molekülünün 1H NMR spektrumu 67

7.15. APTT uygulandıktan sonra etanol içinde çözülen başlık molekülünün 1H NMR spektrumu 68

7.16. H3 Molekül FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 70

7.17. H3 Molekülü DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 74

7.18. H3 Molekülü EHT FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 77

7.19. H3 Ethanol Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 80

7.20. Molekül H3 Meth FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 83

7.21. H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları.....89

7.22. H3 DMSO öncesi Molekülünün UV Spektrumu.....103

7.23. H3+DMSO Sonrası UV Spektrumu 104

ŞEKİLLER DİZİNİ (devam)

Sekil **Sayfa**

7.24. H3 Ethanol öncesi UV Spektrumu 105
7.25. H3 Ethanol Sonrası UV Spektrumu.....106
7.26. H3 Methanol öncesi UV Spektrumu 107
7.27. H3 Methanol sonrası UV Spektrumu 108
7.28. APTT uygulandıktan sonra DMSO içinde çözünen başlık molekülünün H3 NMR spektrumu 110
5.29. APTT uygulandıktan sonra metanol içinde çözülen başlık molekülünün H3 NMR spektrumu 111
7.30. APTT Uygulandıktan Sonra Ethanol Içinde Çözülen Başlık Molekülünün H3 NMR Spektrumu.....112

ÇİZELGELER DİZİNİ

Cizelge **Sayfa**

7.1. Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 37

7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 DMSO Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 40

7.3. Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 43

7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 44

7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 47

7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 50

7.7. Molekül H3 DMSO FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 70

7.8. Molekül H3 DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 74

7.9. H3 Molekülü ETH FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 77

7.10. Molekül H3 Eth Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 80

7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları 83

7.12. Molekül H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları 89

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	Açıklama
π	Pi bağları
n	n bağları
σ	sigma
°C	Santigrad derece
ν	Enerji yoğunluğu
ε	Enerji
μ	mü

Kısaltmalar	Açıklama
R	Bağlı gruplar
cm	Santimetre
nm	Nanometre
mm	Milimetre
L	Litre
UV	Ultraviyole
IR	İnfrared
FT-IR	Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi
NMR	Nükleer manyetik rezonans
DC	Doğru Akım
AC	Alternatif Akım
RF	Radyo Frekansı
ESR	Elektron paramanyetik rezonans
DMF	Dimetilformamid
MVa	Mega volt amper
MHz	Mega hertz
DFE	Dielectric free electrode
DBD	Dielektrik bariyer deşarj
Ar	Argon
K	Kelvin
ref	Referans
meth	Methanol
Eth	Ethanol
DMSO	Dimetil Sülfoksit çözücü
T	Geçirgenlik
vb	Ve benzeri

1. GİRİŞ

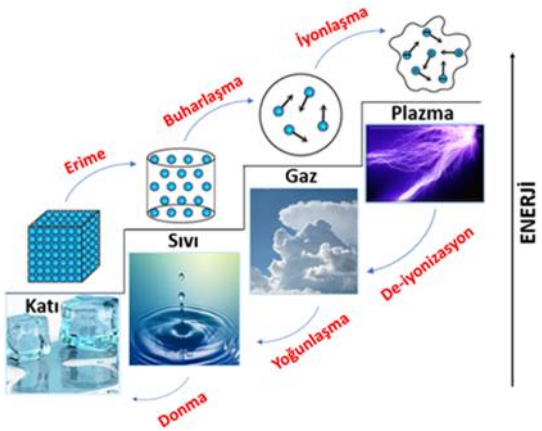
Plazma, kısaca maddenin dördüncü hali olarak tanımlanabilir. Irving Langmuir tarafından, parçacıkların hareketlerinin, kan plazmasındaki hareketlere benzemesi sebebiyle plazma ismini almıştır.

Plazmanın oluşumu için, katıdan sıvıya, sıvıdan da gaza geçiş durumlarındaki gibi maddeye enerji verilmesiyle gerçekleşir. Enerji artışı, ısı veya elektrik enerjisiyle sağlanabilir. Gaz halindeki madde, aldığı enerji sebebiyle plazma haline, iyonlaşma yoluyla geçer. Bunun yanında, gaz haldeki madde içerisinde yalnızca iyonlar bulunmaz. Plazma, quasi-nötral olarak isimlendirilen bir yapıdadır. Bu yapı, enerji aktarımı sonucu oluşan iyonlara ek olarak, yüksüz atomlar, serbest elektronlar ve molekülleri de barındırır.

Özetle plazma, kendi içerisinde yükler barındırsa da normal şartlarda toplam yükü sıfır olan, maddenin 4. halidir.

Maddenin bilinen katı, sıvı ve gaz halinin dışında plazma hali de vardır. Katı bir maddeye yeterli enerji verildiği zaman moleküller arası çekim kuvveti azalır ve katı madde önce sıvı hale gelir. Daha sonra moleküller serbest hale gelerek maddenin gaz halini oluşturur. Enerji verilmeye devam edilirse madde iyonlaşarak maddenin plazma halini oluşturur (Şekil 1.1) [Nineham, 1955]

Plazma terimi ilk Irving Langmuir tarafından tanımlanmıştır. Irving Langmuir Amerikan fizikçi ve kimyacıdır. General Electrical şirketinin araştırma laboratuvarında çalıştığı sıralarda elektron ve iyonların iyonize gazlar tarafından nasıl taşındığını gözlemlemiş ve alyuvar ve akyuvarların kan plazması tarafından taşınma şekline benzettiğinden iyonize gazları plazma olarak adlandırmıştır.



Şekil 1.1. Maddenin plazma hali [Nineham, 1995]

Pechman'ın formazan sentezinden beri [Gökçe, 2004], çok sayıda formazan tanımlanmış ve yapısal özellikleri değerlendirilmiştir. [Pechmann, 1892, Tezcan, 2002]. Son yıllarda, baş formazanlar populer hale geldi [Mariappan, 2010,Yanık,2019, Debnam, 1997, Barsoum, 1998]. Farklı komplekslerin sentezi [Yuzhen, vd., Yuzhen, 1995], termogravimetrik analizleri [Misra, Dhar, 1978] ve ayrışma ve stabilite sabitleri bildirilmiştir [Mukerjee, 1981]. İyonlaşma ve kompleksleşme sabitleri potansiyometriklik ve iletlenlik açısından belirlenmiştir [Desai, vd. 2006], ve redoks daavranışları değerlendirilmiştir [Samel, Pai, 2010]. Formazanların önemli tıbbi uygulamarı vardır; tetrazolium-formazan sistemi, canlılığın destekçisi olarak sınıflandırılır [Desai, vd. 2006]. Formazanlar, sütte halka testinde [Desai, vd. 2006] ve anti kanser ilaçlarının etkilerinin belirlenmesinde kullanılır [Bhardwaj, vd. 1997, Sigeikin, vd. 2006].

Yeni formazanlar sentezleyip fiziksel, kimyasal, spektral, elektrokimyasal iyonseçici elektrot olarak kullanımlarını açıklamakla zaten "bilimsel birikme" ve "toplumsal refaha" büyük katkı sağlanmış olacaktır. Çünkü bu maddeler sanayinin birtek koluna yarar sağlamak değil, doğrudan insan, hayvan ve bitkilerde kanser, HIV virüsü gibi önemli hastalıkların teşisinde, kanser ilaçlarının elenmesinde (yani hangi hastaya hangi kanser ilacının daha iyi olacağının belirlenmesinde), sütte Brucella mikrobunun saptanmasında, crown formazan

sınıfı ise hazırlanan iyon seçici elektrotlarla akıl hastalarının kanında rutin olarak Li oranın saptanmasında vb. gibi hayati önemi olan kullanım alanlarına sahip, insanlığa dolaylı yoldan değil direkt olarak hizmet eden maddeler sınıfıdır. Bu alana ne kadar çeşitli, özellikleri belirli madde sağlanırsa, bu alanlardaki çalışmalar da o derece ileri gidecektir.

Ayrıca formazanlar çok canlı renklerde boyar maddelerdir. Verim arttırmak yoluyla boya sanayinde yeni maddeler kazandırılarak bu alanada hizmet edilebilecektir.

Formazanlar iyi birer polidentat ligant özellik gösterdikleri için, hem eser element tayininde kullanılmak üzere analizle ilgilenen alanlara, hem de metal kompleks oluşturarak gene boya sanayine katkı sağlanacaktır.

Proje kapsamında, atmosferik basınç plazması kullanarak moleküllerdeki bağların açılarak yeni grupların bağlanabileceği ya da farklı yapılara bağlanabilen daha etkin formazan molekülleri üretilebileceği ve geliştirmeleri yapılacaktır. Moleküllerin yapı-aydınlatması plazmayla deneysel spektroskopik (UV, IR, NMR) yöntemlerle açıklanacaktır.

2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

2.1. Plazmadaki Güç Kaynakları

Termal dengede olmayan plazmaların üretiminde, amaca yönelik farklı güç kaynakları kullanılabilir [19,20]

- Doğru akım (DC) deşarjlar**,** durgun durumu (steady-state) da içerir ve periyodik pulslu (tekrarlı) deşarjlar için kullanılır.
- Alternatif akım (AC) deşarjlar, geleneksel olarak 100kHz frekans değerine kadar uygulanabilir ve micro-hollow-cathode deşarjlar için kullanılır.
- Radyo frekans (RF) deşarjlar, 100kHz ile 100MHz frekans değerine ulaşabilir.
- Mikrodalga (MWa) deşarjlar, 100MHz frekanstan sonrasının uygulandığı deşarjlardır.

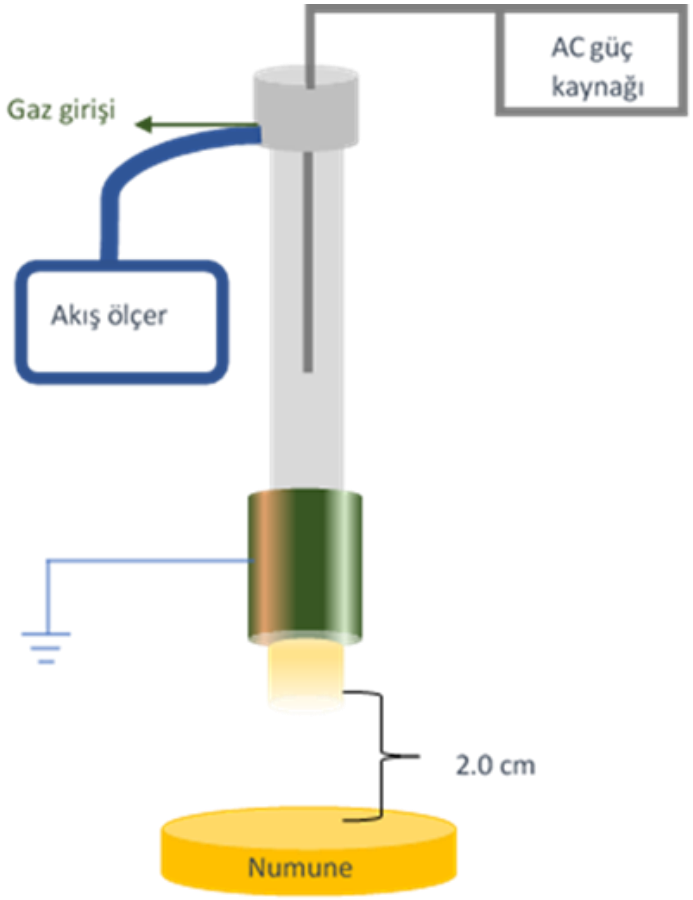
2.2. Atmosferik Jetler

Atmosferik jetler genellikle soygazlarla çok küçük yüzde değerlerinde oksijen gibi reaktif gazların karışımıyla oluşturulur. Soygazlarla oluşturulan bu tip plazmalar 4 farklı kategoride incelenebilir; dielektrik serbest elektrot (dielectric free electrode - DFE), dielektrik bariyer deşarj (DBD), DBD-benzeri (DBD-like) ve tek elektrot (single electrode - SE) [21]. DBD, için farklı elektrot ve deşarj boşluğu tasarımları vardır. Dielektrik tüp üzerinde iki dış halka elektrot, dielektrik üzerine tek bir halka elektrot, dielektrik içerisinde ayrı bir dielektrik tüple sarılmış bir tel elektrot ile dışında bir halka elektrot, dielektrik içerisinde, yine bir dielektrik tüple sarılı bir tel elektrot tasarımları en çok kullanılanlardır. Bunun dışında farklı tasarımlarla DBD jetler oluşturulabilir. DBD-benzeri, sistemlerde tasarımlar, dielektrik içerisinde tek bir tel elektrot ve dielektrik dışında bir halka elektrot ile

dielektrik içerisinde aralıklı iki tel elektrot ve dielektrik dışında bir halka elektrot şeklindedir [20,22].

2.3. Atmosferik Basınç Deşarj Sistemi

Atmosferik basınç plazma jet ile formazanların yapısının teorik ve deneysel olarak çalışmaları yapılmıştır. Alternatif akım güç kaynağı kullanılarak atmosferik basınç ortamında elektriksel deşarj elde edilmiştir.



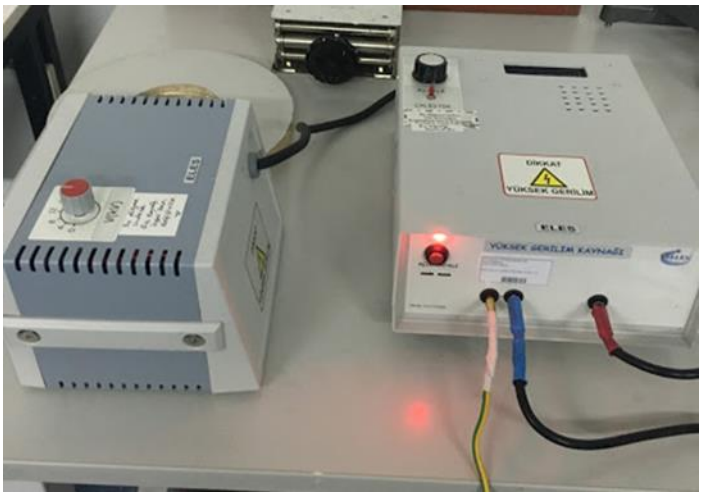
Şekil 2.1. Atmosferik basınç deşarj sistemi

Atmosferik basınçta elde edilen plazma deşarjının elde edildiği deney sistemine ait bir şema yukarıdaki şekilde görülmektedir. Plazma deşarj dielektrik malzemeden oluşan tüpünün dışındaki bakır elektrot ile doğrudan etkileşmediğinde ve tüpün içerisinde bir tel olduğu için burada elde edilen plazma dielektrik bariyer deşarj benzeri (DBD-like) deşarjı olarak tanımlanır. Yapılan çalışmalarda argon (Ar) gaz kullanılarak atmosferik basınç deşarjlar elde edilebilir.

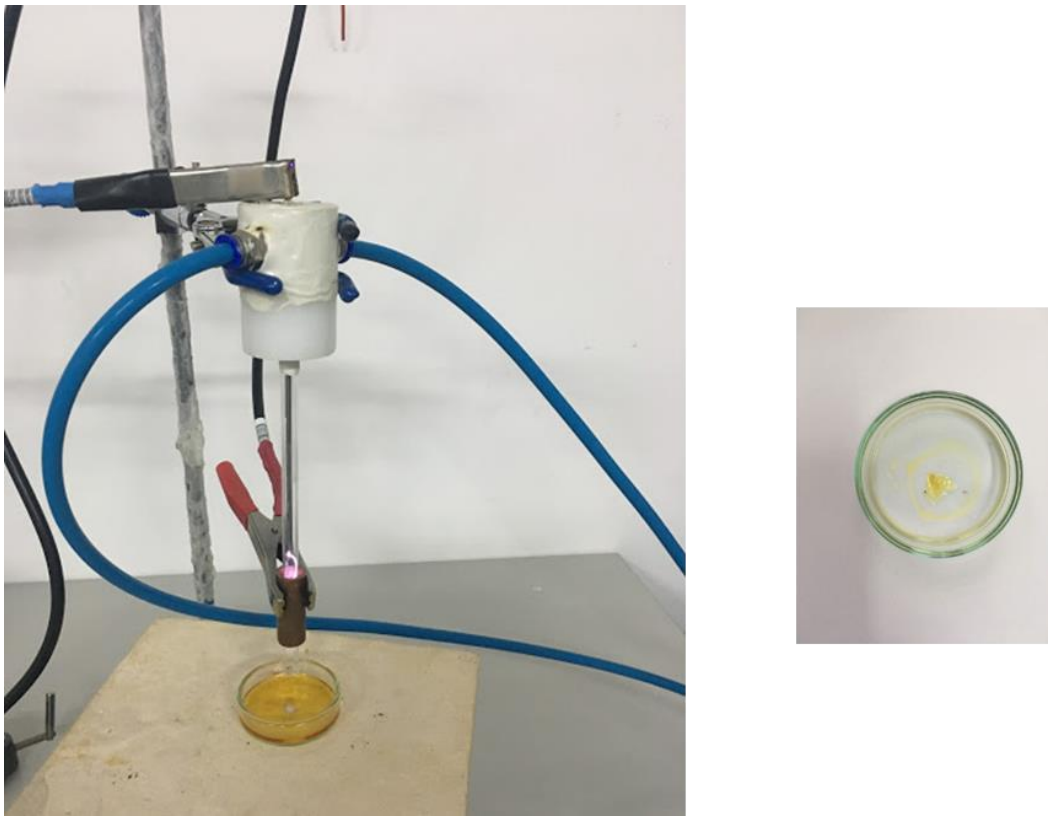
Atmosferik basınç sistemi,

Çalışma Voltajı : 1 faz 1 nötr, 220V
Güç Verimi : HVRF-120: 120W, HVRF-200:200W
Çalışma Frekansı : 50 Hz
Gecikme zamanı : 2-5 ms
Çalışma Sıcaklığı : -5°C-50°C
Çıkış Frekansı : 5-25kHz tek veya sürekli ayarlanabilir (+-0.01 Hz duyarlılık)
Çıkış Voltajı : 10-20kV(p-p) tek ya da ayarlanabilir
Boyutları : 280x220x100 mm

Teknik özelliklerine sahip ELES yüksek voltaj AC güç kaynağı ve frekans kontrol sistemi ile kuartz tüpte oluşturulmuştur. Bu çalışmada kullanılan güç kaynağının voltaj değeri 12 kV ve frekansı 12 kHz olarak seçilmiştir.

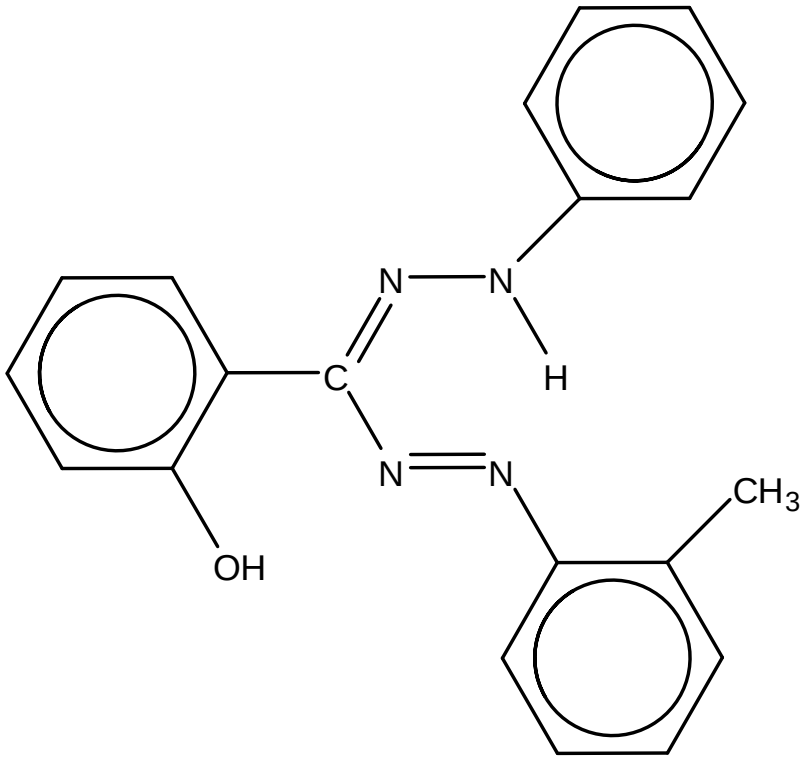


Şekil 2.2. Yüksek Voltaj Kaynağı



Şekil 2.3. Deneysel Çalışmada Ar Gazından Elde Edilen Plazma Jetin Numuneye (H1) Uygulanması

DBD-benzeri sistem ile elde edilen plazma jet 4 lt/dk akış hızındaki Ar gazından elde edilmiştir. Elde edilen Ar plazma jet ethanol kullanılarak hazırlanan sıvı fazdaki H1 molekülüne 2 cm uzaklıktan 3 dakika süreyle uygulanmıştır. Elde edilen plazma jetin H1 molekülüne uygulanması yukarıdaki şekilde (Şekil 2.3.) görülmektedir.



Şekil 2.4. $C_{20}H_{18}N_4O$ Molekülünün Yapısı

2.4.Formazanlar

Formazanlar, geniş uygulama yelpazelerinden dolayı önemli hetorosiklik bileşik sınıfıdır. Anti-viral, mantar önleyici, anti-fertilite, anti-enflamatuar, tüberküloz, anti-

mikrobiyal gibi çeşitli biyolojik aktivitelere sahip oldukları bilinmektedir [23-28]. Formazanlar, polidintat özellikleri nedeniyle metallerle kolayca kompleksleşir [29].

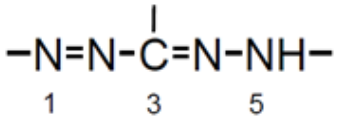
Formazanlar, π bağları nedeniyle renkli bileşiklerdir ve azohidrazon konjuge çift bağ içerir (Şekil 2.4). İlk formazanın Von Pechmann tarafından sentezlendiğinden beri, sayısız formazan sentezlendi ve yapısal özellikleri yanında tatometrik ve fotokromik izomerleri incelenmiştir [30].

Metal kompleks boyalar, tekstil yüzelerinde, ışığa, ıslak işlemlere ve diğer maddelere karşı yüksek dayanıklılık tonları sağladıkları için yaygın olarak kullanılır [31]. Sentez, yapı, kompleks stabilite, spektroskopik karakterizasyon, spektrofotometri, ekstraksiyon ve sıyırma davranışı, Salmonella mutejenisi ve ayrıca sübstitüe edilmiş formazan metal komplekslerinin tasarımı incelenmiştir [32-34].

2.4.1. Formazanların yapısı ve özellikleri

Formazanlar yapılarında –N=N–C=N–NH– zinciri içeren bileşiklerdir. Yapıları ilk defa Pechmann ve Bamberger tarafından tanımlanmış ve formazil olarak adlandırılmıştır.

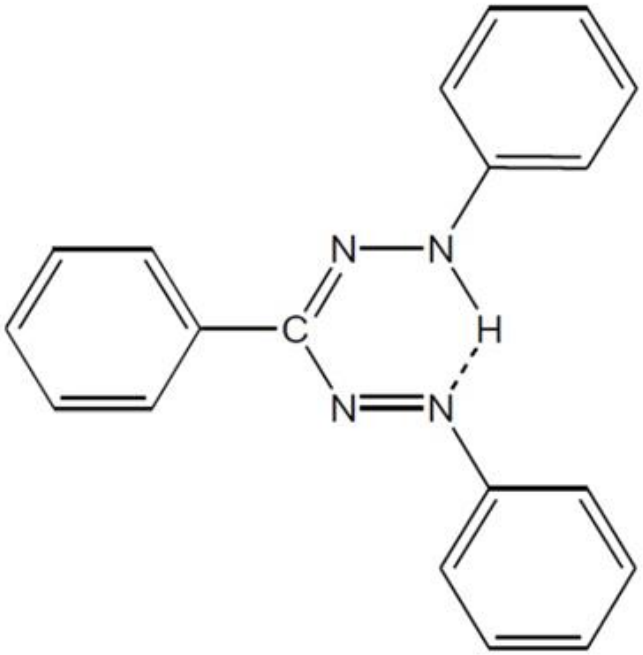
Formazanların genel yapısı;



Şekil 2.5. Formazanların Genel Yapısı

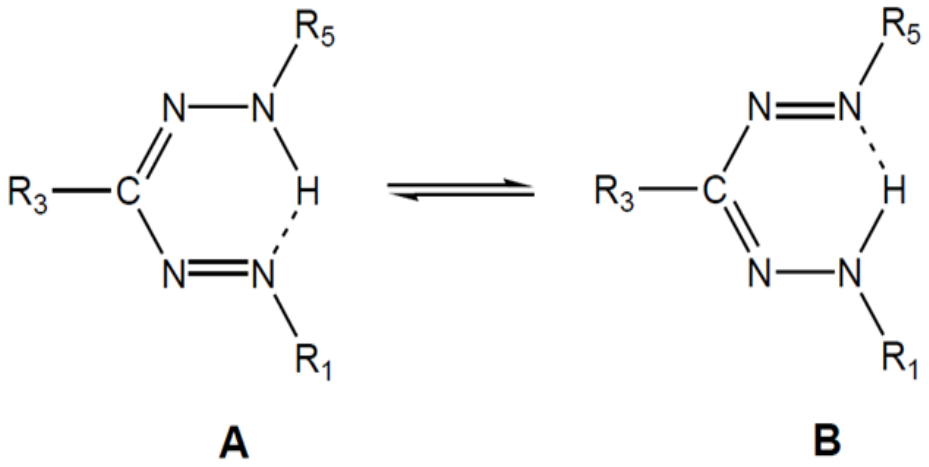
1, 3, 5- atomlarına bağlı çeşitli sübstitüentler bulunabilir. Bu sübstitüentlerin bağlanmasıyla çok sayıda formazan bileşiği elde edilebilmektedir. Bu konumlara bağlanan sübstitüe gruplarının adları sırasıyla belirtilip sonuna formazan kelimesi eklenerek adlandırılmıştır.

Örneğin;



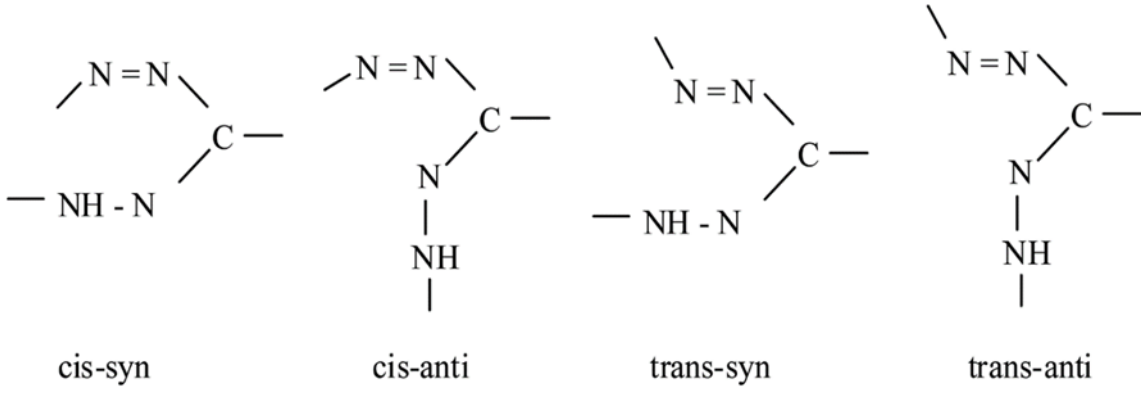
Şekil 2.6. 1,3,5 trifenil formazan (TFF)

Formazanların yapıları oldukça karmaşıktır. Hunter ve Robert (1941) formazanların şelatlı hidrojen yapısına sahip rezonans hibritleri olduğunu ve tautomeri özellik gösterdiğini ileri sürmüştür (Şekil 2.7.). Formazanlar tautomeri özellik gösterdiklerinden dolayı molekülde simetri bulunur.

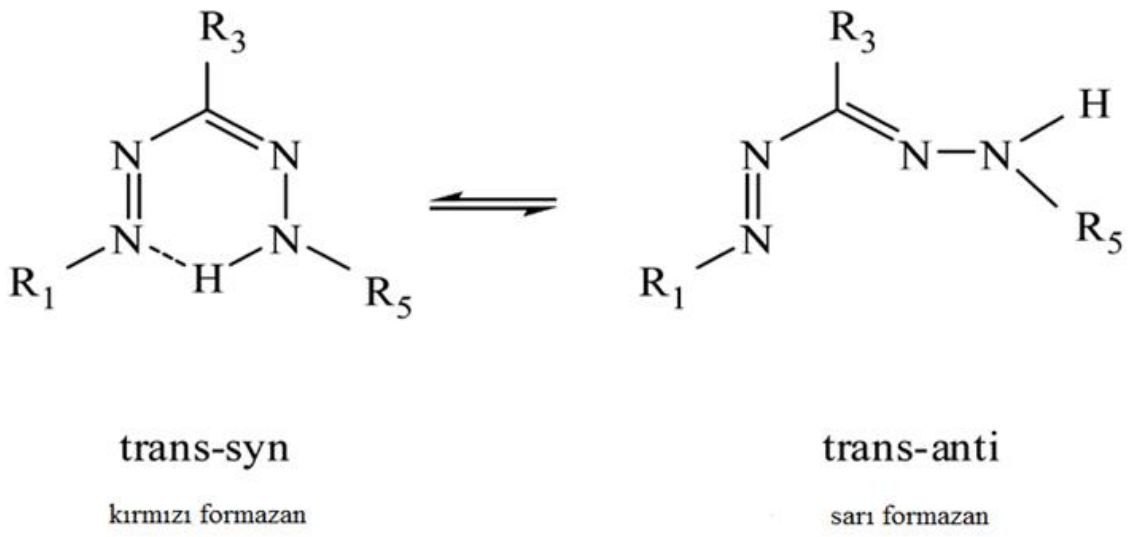


Şekil 2.7. Formazanlardaki Moleküler Şelatlaşma Ve Tautomeri (Karabulut, 2015)

Formazan molekülü N=N bağının cis/trans ve C=N syn/anti özelliğinden dolayı dört tane geometrik izomerizm yapısının varlığını gösterir (Şekil 2.8.). cis/trans ve trans/anti formundaki N-H' nin konumuna bağlı şelat yapısı göstermezken trans/syn hidrojen bağını içeren şelat yapısı görülmektedir. trans/syn formu şelat için en uygun olanıdır. Şelat içeren formazan molekülleri kırmızı iken şelat yapısı içermeyenler sarıdır (Şekil 2.9.).



Şekil 2.8. Formazanlardaki Geometrik İzomerizm (Şenöz, 2012).



Şekil 2.9. Formazanların Renkleri (Şenöz, 2012).

Formazanlar yapılarındaki π elektronlarının varlığından dolayı hem zayıf hem de zayıf baz olarak davranırlar. Formazanların en önemli özelliklerinden biri metal kompleks tuzları oluşturmalarıdır. Özellikle bakır, nikel, kobalt ve gümüş gibi ağır metallerle koyu renkli ve suda az çözünen kompleksler oluştururlar. İlk nikel-formazan kompleksi 1941 yılında Hunter ve Roberts tarafından sentezlenmiştir (Hunter vd., 1941).

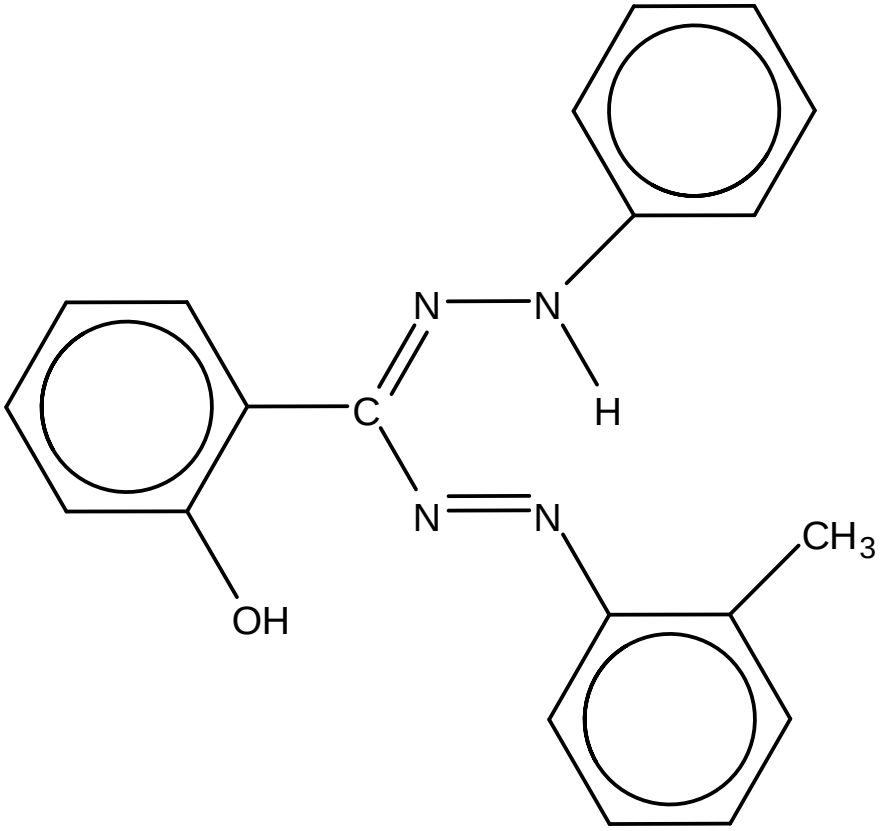
Formazanların metal kompleksleri renkli bileşiklerdir. Bu yüzden boyarmadde olarak kullanılmalarının yanı sıra komplekslerin sentezi, yapısal kararlılığı ve spektroskopik özelliklerinin incelenmesi de önem kazanmıştır. FT-IR, UV-Vis, NMR gibi çeşitli spektroskopik yöntemler kullanılarak özellikleri ve yapıları aydınlatılmıştır.

Formazanların IR spektrumları değerlendirildiğinde C=N gerilme bandı 1500-1510 cm^{-1} de şelat yapısı gösterirken, 1551-1561 cm^{-1} deki C=N gerilme bandı şelatsız yapı göstermektedir (Tezcan, 2008; Lewis vd., 1983). C=N gerilme bandı 1520-1530 cm^{-1} aralığında ise şelat ve şelat olmayan yapılar dengededir (Wang, 2000). Ayrıca, N-H gerilme bandı 3011-3090 cm^{-1} aralığında şelat yapısı gösterir.

Formazanların renkli bileşikler olması ve sübstitüente bağlı olarak dalga boyu değerlerinin değişmesinden dolayı UV-Vis çalışmaları da önemlidir. Formazanların UV-Vis spektrumlarında dikkat çeken bantlar N=N bağındaki n→π* geçişlerinden kaynaklanan 400-600 nm arasında değişen absorpsiyon bantlarıdır (Sherif, 1997)

3 MOLEKÜL TANIMI

3.1. H1 Molekülü

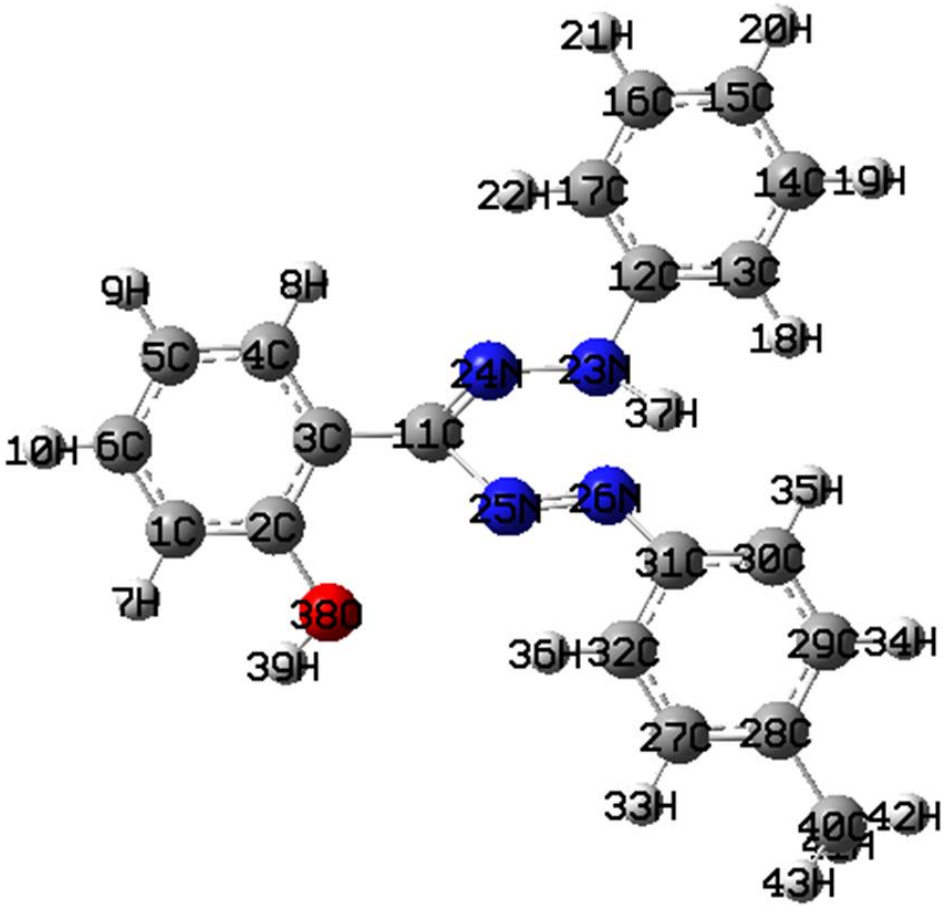


Şekil 3.1. 1-(o-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans $C_{20}H_{18}N_4O$ Molekülünün Yapısı.

1-(o-tolyl)-3-(o-hidroxyphenyl)-5-phenylformazan molekülü toplamda 43 atomlu, 174 elektronlu ve 330 g/mol kütleye sahip bir molekül olup kapalı formülü C20H18N4O dir.

C-C, C=C, -O-H, C=N, N-N, N-H, N=N, C-N, -CH3, C-N-N-C moleküler bağlardan oluşmaktadır.

3.2. H3 Molekülü



Şekil 3.2. 1-(p-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans C20H18N4O Molekülünün Yapısı

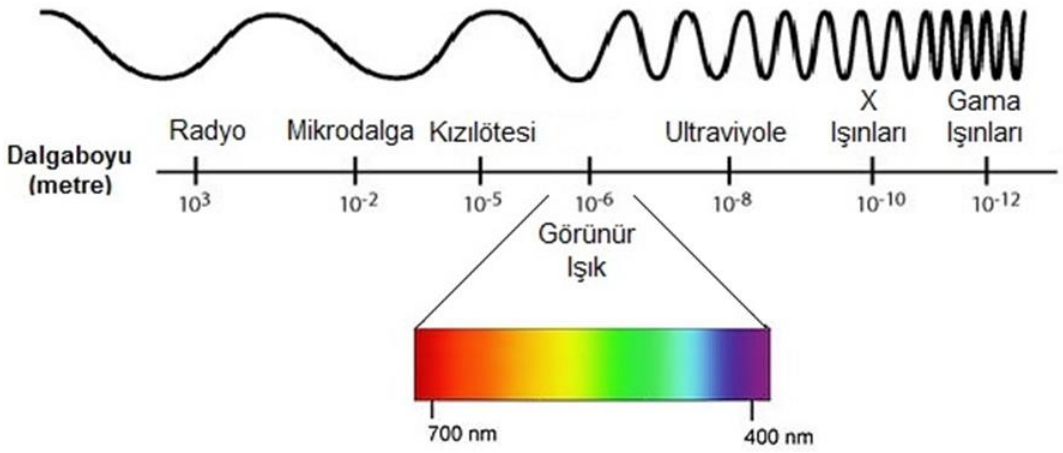
1-(p-tolyl)-3-(o-hydroxyphenyl)-5-phenylformazans molekülü toplamda 43 atomlu, 174 elektronlu ve 330 g/mol kütleye sahip bir molekül olup kapalı formülü $C_{20}H_{18}N_4O$ dir.

C-C, C=C, -O-H, C=N, N-N, N-H, N=N, C-N, -CH3, C-N-N-C moleküler bağlardan oluşmaktadır.

4. SPEKTROSKOPİ

Spektroskopi, bir numunedeki atom, molekül ya da iyonların enerji düzeyleri arasındaki geçişleri sırasında soğurulan veya yayılan elektromanyetik ışımanın ölçülmesidir.

Elektromanyetik ışıma, uzayda yüksek hızla ilerleyen bir enerjidir. Gözlerimizle algılayabildiğimiz görünür ışık ve ısı olarak algıladığımız kızılötesi ışınları elektromanyetik ışımanın en sık rastlanan türleridir.



Şekil 4.1. Elektromanyetik Tayf [Anonim,2020]

Elektromanyetik ışınlar, hem dalga hem de tanecik özelliği göstererek haraket etmektedir. Bir metal yüzeyinden ışıma yoluyla elektron koparılması yada ışıma yoluyla bir madde tarafından absorbsiyonu yada emisyonu bu ışımanın tanecik özelliği de gösterdiğini açıklar. Girişim ve kırınım deseni ise dalga özelliği göstermesiyle açıklanmaktadır.

4.1. Moleküler Spektroskopi

Spektroskopi elektromanyetik ışıma ile madde arasındaki etkileşmeyi inceleyerek moleküllerin geometrik ve elektronik yapılarını, aralarındaki etkileşmeyi vb. birçok bilgiyi elde etmek için kullanılan bir yöntemdir. Molekül, elektromanyetik dalgayla etkileştiğinde, sahip olduğu enerji miktarı bu dalgayı soğurması ve yayması ile değişir. Soğurulan ve yayılan elektromanyetik dalganın frekansı, bant şiddeti, molekülün bağ uzunlukları, bağ kuvvetleri ve kararlılığı gibi önemli bilgilere ulaşmamızı sağlar.

Serbest bir molekülün toplam iç enerjisi, elektron hareketi, dönme hareketi ve titreşim hareketi olarak adlandırılan üç tip harekete karşılık gelen enerjilerin toplamı şeklinde ifade edilebilir. Born-Oppenheimer adı verilen bu yaklaşımın dayandığı temel, elektronların kütlesinin çekirdeklerin kütlesinden çok daha küçük olmasıdır. Bu nedenle elektronik enerji, çekirdeğin elektronik enerjisine göre çok büyük olduğundan ikisi arasındaki etkileşme ihmal edilir. Sonuç olarak toplam enerji, çekirdek ve elektron enerjilerinin toplamı şeklindedir. Çekirdek enerjisi de çekirdeklerin titreşim ve molekülün bütününün dönme hareketinden kaynaklanır. Titreşim enerjisi dönme enerjisinden yaklaşık 103 kat büyük olduğundan Born-Oppenheimer yaklaşımına göre ihmal edilir.

Molekülün saf dönme spektrumu mikrodalga spektroskopisi ile titreşim ve titreşim-dönme infrared (IR) spektroskopisi ile, elektronik spektrumu ise görünür ve mor-ötesi (UV) spektroskopisi ile incelenir. Dönme ve titreşim spektroskopileri ayrıca farklı bir teknik olan Raman spektroskopisi ile de incelenebilir.

4.2. Moleküler Titreşim Spektroskopisi

Titreşim spektroskopisi (IR ve Raman), maddenin kırmızı altı ışınlarını absorblaması veya yayması üzerine kurulmuş olan bir spektroskopi dalıdır. Homo nükleer moleküller (N2, O2 ve Cl2 gibi) hariç bütün moleküller kırmızı altı ışınlarını absorblarlar ve kırmızı altı spektrumu verir. Homo nükleer moleküller de Raman aktif moleküllerdir. CO2 gibi polar moleküllerin titreşimleri ise Raman spektrumlarında gözlenmezler.

Moleküller üzerlerine düşen elektromanyetik enerjiyi absorblarlar. Bu arada bağın gerilmesi sonucu atomlar birbirine yaklaşır veya uzaklaşır. Eğer atom sayısı ikiden fazla ise bağlar arasındaki açı değişir. Moleküldeki bağlar, açılar ve kütleler (atomlar) farklı olduğu için her birinin titreşim enerjisi de farklıdır ve bununla birlikte dönme, sallanma, eğilme gibi karışık titreşimler gözlenecektir.

Moleküldeki her bir atomun konumunu ve hareketini tanımlamak için üç kartezyen koordinat kullanılırsa, N atomlu bir molekülü tanımlamak için toplam 3N kartezyen koordinat gerekecektir. Bu koordinatların tümü (3N) sistemin serbestlik derecesini belirtir. Molekülün 3N serbestlik derecesinin üçü tüm sistemin ötelenme hareketlerine, diğer üçü ise dönme hareketlerine bağlı olduğu için N atomlu molekülün titreşim serbestlik derecesi 3N-6 olarak bulunur. Molekül lineer ise, moleküler dönme hareketi moleküler eksene dik çizilebilen sadece iki eksen etrafında oluşabilir. Böylece lineer moleküller için 3 tam öteleme ve 2 tam dönme toplam 3N serbestlik derecesinden çıkarılır ve 3N-5 iç titreşim serbestlik derecesi kalır.

Çok atomlu moleküllerin titreşim hareketleri oldukça karışıktır. Bir molekülün titreşimini “normal titreşim” dediğimiz, molekülün bütün atomlarının farklı fazda ve farklı frekansta yaptıkları titreşim hareketleri ile inceleyebiliriz. Bir moleküler sistemde her normal titreşim sonucunda titreşimsel enerji seviyeleri oluşur ve seçim kuralı uygun ise, titreşimsel enerji seviyelerindeki $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$ geçişine karşılık gelen absorbsiyon bandı gözlenir.

Bundan başka overton ve kombinasyon bantları da gözlenebilir. Bu bantların şiddetleri, normal titreşim bantlarına göre daha küçüktür.

4.3. İnfrared Spektroskpisi

İnfrared (IR) spektroskopisi yöntemi ile kırmızı-altı bölgedeki elektromanyetik dalganın madde ile etkileşimi sonucu soğurulan ışın incelenerek molekülün yapısı hakkında bilgi edinilir. IR spektroskopisi üç bölgede incelenir.

Uzak-IR bölgesinde ağır atomların titreşimleri ve örgü titreşimleri incelenir. Bu bölge 200-10 cm^{-1} aralığındadır. Yakın-IR bölgede molekül titreşim frekanslarının üsttonları ve harmonikleri 12000-4000 cm^{-1} aralığında incelenir. Orta-IR bölge 4000-200 cm^{-1} aralığındadır. Çoğu moleküllerin titreşimi orta-kırmızı altı bölgesine düşer. IR spektroskopisinde bir titreşim frekansının gözlenebilmesi için molekülün değişen bir elektrik dipol momentinin olması gereklidir. Molekülün titreşimi sırasında değişen dipol moment ile elektromagnetik dalganın elektrik alan bileşeni etkileşir ve enerji alışverişi olur. Dolayısıyla enerji seviyeleri arasında geçişler meydana gelir. O halde geçiş olabilmesi için;

$$\mu_{nm} = \int \Psi_n^* \mu_{nm} \Psi_m d\tau \neq 0 \tag{4.1}$$

olmalıdır. Ψ_n ve Ψ_m üst ve alt taban titreşim dalga fonksiyonları, μ_{nm} elektrik dipol momenti, $d\tau$ ise hacim elemanıdır. Geçiş momenti, geçiş esnasındaki ışımanın şiddetini belirler. Şiddet ise μ_{nm}'nin büyüklüğünün karesiyle orantılıdır. Bu şiddet, klasik düşüncedeki dipol momentin titreşim genliğine karşılık gelir. Benzer şekilde, klasik düşüncede genliğin sıfır olduğu geçişin yasak olduğu durumda, kuantum mekaniksel olarak $\mu_{nm} = 0$'dır.

4.4. Titreşim Spektroskopisi

Titreşim spektroskopisi (IR ve Raman), maddenin kırmızı altı ışınlarını absorblaması veya yayması üzerine kurulmuş olan bir spektroskopi dalıdır. Homo nükleer moleküller (N_2, O_2 ve Cl_2 gibi) hariç bütün moleküller kırmızı altı ışınlarını absorplar ve kırmızı altı spektrumu verirken homo nükleer moleküller de Raman'da sinyal verirler.

Moleküller üzerlerine düşen elektromanyetik enerjiyi absorplar. Bu arada bağın gerilmesi sonucu atomlar birbirine yaklaşır veya uzaklaşır. Eğer atom sayısı ikiden fazla ise bağlar arasındaki açı değişir. Moleküldeki bağlar, açılar ve kütleler (atomlar) farklı olduğu için her birinin titreşim enerjisi de farklıdır.

4.5. Kırmızı altı Spektroskopisi

Kırmızı altı spektroskopisi yöntemi ile kırmızı-altı bölgedeki elektromagnetik dalganın madde ile etkileşimi sonucu soğurulan ışın incelenerek molekülün yapısı hakkında bilgi edinilir. Kırmızı altı spektroskopisi üç bölgede incelenir.

Uzak-kırmızı altı bölgesinde ağır atomların titreşimleri ve örgü titreşimleri incelenir. Bu bölge 200-10 cm^{-1} aralığındadır. Yakın-kırmızı altı bölgede molekül titreşim frekanslarının üsttonları ve harmonikleri 12000-4000 cm^{-1} aralığında incelenir. Orta-kırmızı altı bölge 4000-200 cm^{-1} aralığındadır. Çoğu moleküllerin titreşimi orta-kırmızı altı bölgesine düşer. Bu nedenle genellikle orta-kırmızı altı bölge söz konusudur. Kırmızı altı spektroskopisinde bir titreşim frekansının gözlenebilmesi için molekülün değişen bir elektrik dipol momentinin olması gereklidir. Molekülün titreşimi sırasında değişen dipol moment ile elektromagnetik dalganın elektrik alan bileşeni etkileşir ve enerji alışverişi olur. Dolayısıyla enerji seviyeleri arasında geçişler meydana gelir. O halde geçiş olabilmesi için;

$$\mu_{nm} = \int \Psi_n^* \, \mu_{nm} \, \Psi_m \, d\tau \neq 0 \qquad (4.2)$$

olmalıdır. Ψ_n ve Ψ_m üst ve alt taban titreşim dalga fonksiyonları , μ elektrik dipol momenti, $d\tau$ ise hacim elemanıdır. Geçiş momenti, geçiş esnasındaki ışımanın şiddetini belirler. Şiddet ise μ_{nm} in büyüklüğünün karesiyle orantılıdır. Bu şiddet, klasik düşüncedeki dipol momentin titreşim genliğine karşılık gelmektedir. Benzer şekilde, klasik düşüncede genliğin sıfır olduğu geçiş yasaklanmışsa, kuantum mekaniksel olarak $\mu_{nm} = 0$ ise bu soğurma da yasaklanmıştır.

4.6. Moleküler Titreşim

Moleküldeki her bir atomun konumunu ve hareketini tanımlamak için üç kartezyen koordinat kullanılırsa, N atomlu bir molekülü tanımlamak için toplam 3N kartezyen koordinat gerekecektir. Bu koordinatların tümü (3N) sistemin serbestlik derecesini belirtir. Molekülün 3N serbestlik derecesinin üçü tüm sistemin ötelenme hareketlerine, diğer üçü ise dönme hareketlerine bağlı olduğundan için N atomlu molekülün titreşim serbestlik derecesi 3N-6 olarak bulunur. Molekül lineer ise, moleküler dönme hareketi moleküler eksene dik çizilebilen sadece iki eksen etrafında oluşabilir. Böylece lineer moleküller için 3 tam öteleme ve 2 tam dönme toplam 3N serbestlik derecesinden çıkarılır ve 3N-5 iç titreşim serbestlik derecesi kalır.

Çok atomlu moleküllerin titreşim hareketi oldukça karışıktır. Bir molekülün titreşimini “normal titreşim” dediğimiz, molekülün bütün atomlarının aynı fazda ve aynı frekansta yaptıkları titreşim hareketi ile inceleyebiliriz. Bir moleküler sistemde her normal titreşim sonucunda titreşimsel enerji seviyeleri oluşur ve seçim kuralı uygun ise, titreşimsel enerji seviyelerindeki $v=0 \rightarrow v=1$ geçişine karşılık gelen absorbsiyon bandı gözlenir. Bundan başka overton ve kombinasyon bandları da gözlenebilir. Bu bandların şiddetleri, normal titreşim bandlarına göre daha küçüktür. Fakat, çözücü etkisi ve sıcaklık etkisi gibi durumlarda bu bandların şiddetleri rezonans ile artabilir (Kuş, 1998).

4.7. Absorbsiyon Spektroskopisi

Mor ötesi ışıması 10-400 nm dalga boyu arasında görülen ışımadır ve elektromanyetik spektrumda X-ışınları ve görünür bölge arasında bulunur. 10-200 nm bölgesi uzak mor ötesi ve 200-400 nm bölgesi mor ötesi olarak adlandırılır. 400-800 nm arasındaki bölge ise görünür (UV-vis) bölgedir (Şekil 4.1.) (Erdik, 1998).

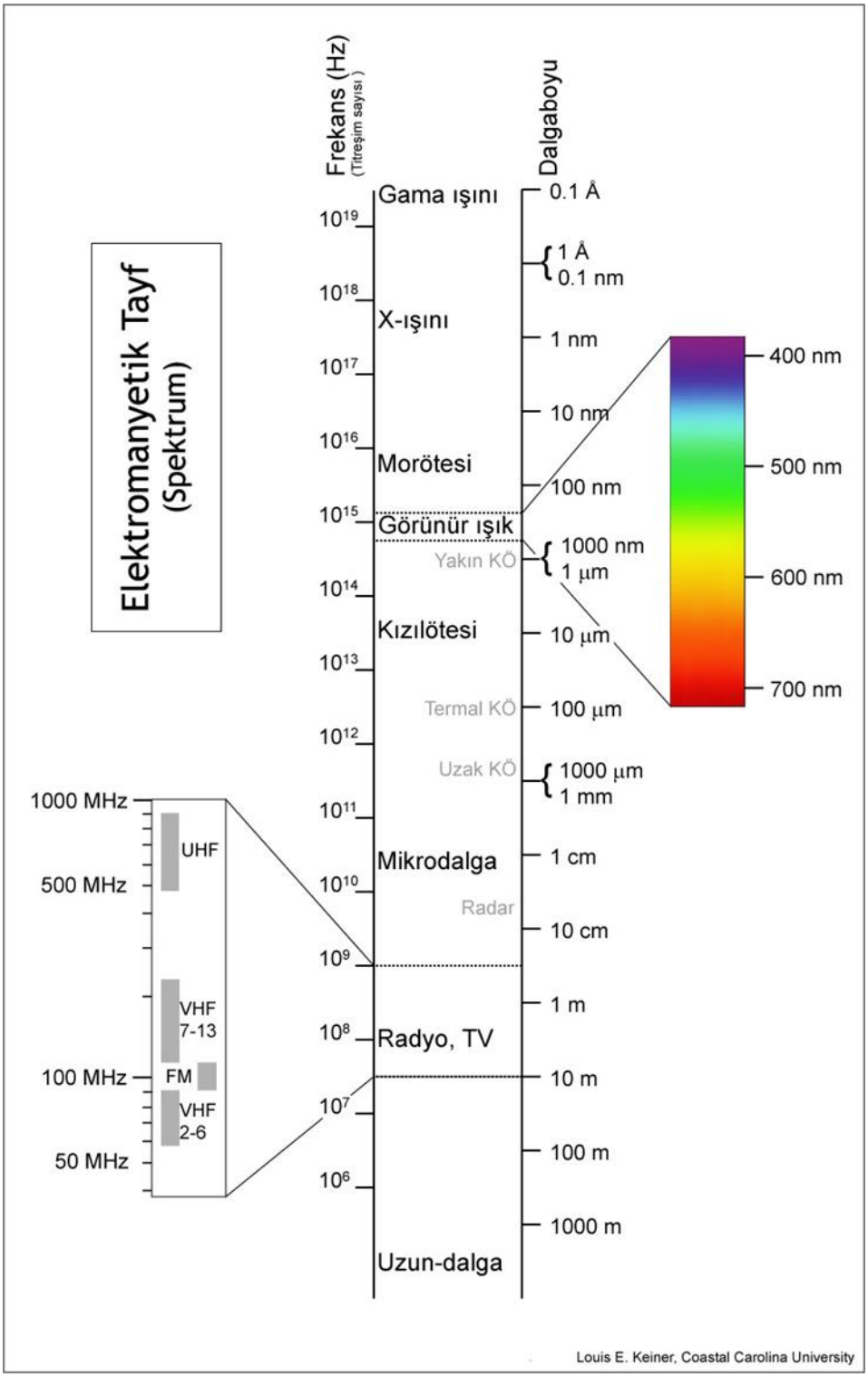
Absorbsiyon spektroskopisi, uyarılmış maddelerin elektronik geçişlerini tanımlayan bir metot olduğundan dolayı elektronik spektroskopi adını da alır. Organik bileşiklerin ışımayı soğurması her zaman elektronların bir seviyeden daha yüksek enerjili bir seviyeye uyarılmasıyla sonuçlanmayabilir. Elektronik geçiş olasılığı, P, aşağıda tanımlanan molar absorbtivite, ε_{maks}, denklemindeki parametrelere bağlıdır. ε_{maks}, 0-200000 arasında değer alabilir. Belirli bir absorbsiyon piki için, ε_{maks}'ın büyüklüğü ilgili türün yakalanma etki tesir kesiti ve enerji absorblayan geçişin gerçekleşme olasılığına bağlıdır (Skoog, vd., 1998)

$$\varepsilon_{maks} = 0{,}87 x 10^{20} P.A \qquad (4.3.)$$

olarak gösterilmiştir.

Burada P; geçiş olasılığı ve A; hedef bölgesinin cm^2 cinsinden kesit alanıdır (Braude, 1950). Organik moleküllerin hedef yüzey kesiti genel olarak 10^{-15} birimi kadardır. P geçiş ihtimali, 0-1 arasında değişir.

Kuantum mekaniğine göre, izinli geçişlerde P, 0,1-1 arasında değerler alabilir. P değeri 0,1-1 olan moleküllerin absorbsiyon katsayıları 10^4-10^5 arasında değişir. Molar absorbtiviteleri 10^3'den küçük olan moleküllere, düşük şiddetli moleküller denir. Böyle moleküllerin geçiş olasılık katsayıları 0,01'den küçüktür.



Şekil 4.2. İnfrared Ve Ultraviyole Bölgelerini Gösteren Elektromanyetik Spektrum

Absorsiyon Yapan Türler ve Kromoforlar

Ultraviyole ve görünür alanlarda foton (hν) absorplayan bir iyon veya molekül (M), önce uyarılmış hale gelir. Uyarılan tür (M*);

$$M + h\nu \rightarrow M^* \qquad (4.4.)$$

Bu durumda, yaklaşık 10^{-8} saniye kalır ve absorbladığı ışın enerjisini ortama vererek taban durumuna döner. Bir türün absorbladığı enerjiyi ortama vererek taban durumuna dönmesi olayına relaksasyon denir. Relaksasyon olayı, absorbsiyon yapan türün parçalanmasıyla sonuçlanırsa buna fotokimyasal reaksiyon denir. Uyarılan tür, floresans veya fosforesans ışımaları yaparak da taban durumuna dönebilir. Uyarılmış taneciklerin (M*) ömrü çok kısa olduğu için, herhangi bir andaki konsantrasyonu ihmal edilecek kadar azdır.

Bir maddenin üzerine gelen ışığı absorblaması, bağ elektronları üzerinden gerçekleşir. Bu nedenle her absorbsiyon piki, üzerinde çalışılan maddenin kimyasal bir bağını temsil eder. Buna göre moleküler absorbsiyon spektroskopisi, maddede bulunan fonksiyonel grupları tespit etmede kullanılır. Bütün bunların da ötesinde, ultraviyole ve görünür alan spektroskopisi yardımıyla absorbsiyon yapan maddeler kantitatif olarak tayin edilebilir (Skoog, vd., 1998).

Mor ötesi ışıması, her ne kadar bir elektronun temel düzeyden uyarılmış düzeye çıkmasıyla soğuruluyorsa da, soğurulan ışımanın dalgaboyu, atomların bağlanma türüyle ilgilidir. Bağların türü, yani oluşma şekli ve enerjisi, temel ve uyarılmış seviyeler arasındaki enerjiyi belirleyeceğinden, mor ötesi soğurmasına yol açan elektronik uyarılma enerjisi, elektronlardan çok bu elektronları içeren atom gruplarının özelliğine bağlıdır. Soğurma yapan elektronları bulunan atom gruplarına kromofor (C=C, N=N, C=O gibi) denir. Bir kromofor, mor ötesi-görünür bölgede soğurma yapan izole fonksiyonlu grup olarak tanımlanır. Oksokrom, kromofor üzerinde soğurmanın dalgaboyunu veya şiddetini değiştiren substituent olarak tanımlanır. Oksokrom 200 nm'den daha yüksek dalgaboylarında soğurma yapmayan bir gruptur. Oksokromlar, alkil grupları, hidroksi, amino grup, halojen gibi heteroatomlu

substituentlerdir. Soğurmanın oksokromun varlığından (veya çözücü değişmesinden dolayı) daha yüksek dalgaboyuna kaymasına kırmızıya kayma (batokromik etki) ve daha düşük dalgaboyuna kaymasına maviye kayma (hipsokromik etki) denir. Soğurmanın şiddetinin artması, hiperkromik etki, azalması ise hipokromik etki olarak bilinir.

5. MOLEKÜLLERDE ELEKTRONİK GEÇİŞLER

Elektronik geçişler, üç temel gruba ayrılırlar:

- σ, π ve n elektronlarının elektronik geçişi.
- d ve f elektronlarının elektronik geçişi.
- Yük aktarım kompleksleri elektronlarının elektronik geçişi.

σ, π ve n geçişleri daha çok organik bileşiklerde görülür. Böyle geçişler moleküler orbital teorisine göre açıklanır. Moleküler orbital teorisi, atomik orbitallerin kabulu üzerine kurulmuştur.

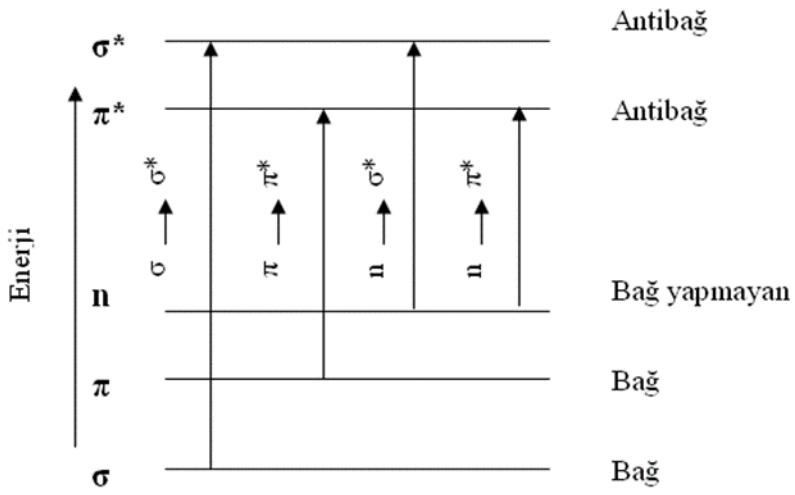
Bir molekülde absorbsiyona katkıda bulunan elektronlar, atomlar arası bağ oluşumuna doğrudan katılan ve dolayısıyla birden fazla atomla ilişkili olanlar ve esas olarak oksijen, halojenler, kükürt ve azot gibi atomların çevresinde bulunan ve bağ yapmayan veya ortaklanmamış dış elektronlardır.

Bağ elektronlarınca işgal edilmiş ve sınırı kesin belli olmayan alanlara moleküler orbitaller denir. Atomik orbitallerin çakışmasından ortaya çıktığı düşünülebilir. İki atomik orbital birleştiğinde, ya düşük enerjili bir bağ molekül orbitali ya da yüksek enerjili bir anti bağ molekül orbitali oluşur. Kararlı halde bir molekülün elektronları, bağ orbitallerini işgal eder (Skoog, vd., 1998; Pavia, vd., 2001).

Organik moleküllerde tek bağların oluşturduğu moleküler orbitaller sigma (σ) orbitalleri olarak adlandırılır ve bu orbitaldeki elektronlar σ elektronlarıdır. Bir organik

molekülde çift bağ, iki tür moleküler orbital içerir: ilki çift bağ elektronuna karşılık olan sigma (σ) orbitali, diğeri ise elektron çiftlerinin oluşturduğu pi (π) moleküler orbitaldir. Pi orbitalleri, atomik p orbitallerinin çakışmasıyla oluşurlar. Bununla birlikte, organik bileşiklerin çoğunda bağ yapmayan elektronlar vardır. Bu ortaklanmamış elektronlar n sembolüyle gösterilir (Skoog, vd., 1998; Pavia, vd., 2001).

Bu orbitallerdeki elektronlar ışığı absorbe ettiklerinde dört tür elektronik geçiş meydana gelir (Şekil 5. 1.). Bu geçişler σ − σ*, n−σ*, π−π* ve n−π* geçişleridir.



Şekil 5.1. Moleküler Orbitallerde Elektronik Geçişler

5.1 σ→σ* Geçişleri

Bir molekülün bir σ bağ orbitalinde yer alan elektronlar uyarıldıklarında ışığı absorblayıp karşıt gelen antibağ orbitaline (σ*) uyarılır. Bu durum, σ-σ* uyarılmış durum diye tanımlanır. Diğer elektronik geçişlere göre σ-σ* geçişlerini sağlamak için gerekli enerji oldukça yüksektir.

5.2. n→σ* Geçişleri

Ortaklanmamış elektron çiftleri içeren doymuş bileşikler (bağ yapmayan elektronlar taşıyanlar), n→σ* geçişleri gösterebilirler. Genelde bu geçişler σ→σ* tipinden daha az enerji gerektirir ve absorbsiyon piklerinin çoğunun 200 nm'nin altında görüldüğü 150−250 nm aralığındaki bölgede yer alan ışınla sağlanabilirler.

5.3. n→π* ve π→π* Geçişleri

Ortaklanmamış elektron çiftleri içeren doymuş bileşikler (bağ yapmamış elektron taşıyanlar) n-σ* geçişleri gösterebilirler. Genelde bu geçişler σ-σ* geçişinden daha az enerji gerektirir ve absorbsiyon piklerinin çoğunun 200 nm'nin altında görülür.

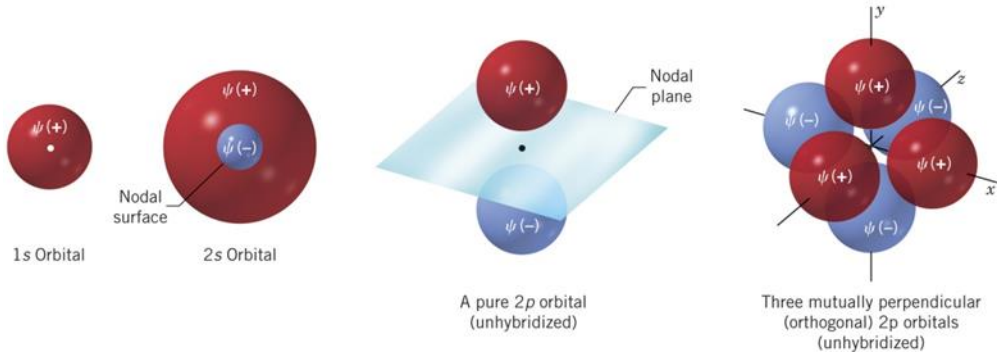
5.4. n→π* ve π→π* Geçişleri

Absorbsiyon spektroskopisinin organik bileşiklere uygulamalarının çoğu, n veya π elektronlarının π* uyarılmış düzeyine geçişine dayanır. Çünkü bu geçişler için gerekli enerjiler, absorbsiyon piklerini deneysel olarak elverişli spektral bölgeye (200–700 nm) getirir. Bu geçişlerin her ikisi de, π orbitallerini sağlamak üzere doymamış fonksiyonel gruplara gereksinim duyarlar. Organik kromofor bulunduran moleküller bu geçişleri gösterirler.

n, π* Haline uyarmaya ilişkin piklerin molar absorbtiviteleri çoğu kez düşük olup, normal de 10-100 L cm^{-1} mol^{-1} aralığında yer alırlar. Buna karşılık π→π* geçişlerine ait molar absorbtivite değerleri 1000-10000 arasındadır. Bu iki absorbsiyon tipi arasındaki diğer

bir karakteristik fark, çözücünün piklerinin dalgaboyu üzerine etkisidir (Skoog, vd., 1998; Pavia, vd., 2001; Erdik, 1998).

Bir orbital uzayın herhangi bir bölgesinde bir elektronun bulunma olasılığı fazla olduğu yerlerde olabilir. Şekil 5.2'de s ve p orbitallerinin şekilleri gösterilmiştir. Çekirdekten çok fazla uzaklıklarda bir elektronun bulunma olasılığı çok az da olsa vardır. Bir orbitali göstermek için kullandığımız tipik hacimler, elektronun bulunma olasılığının %90-95'ini içeren hacimlerdi (Solomon, 2003). Tüm s orbitalleri küreseldir (Şekil 5.2.). 2s orbitalleri $\psi=0$ olan bir düğüm yüzeyi içerirler. 2s orbitalinin en iç kısmında ψ_{2s} negatiftir (Solomon, 2003).

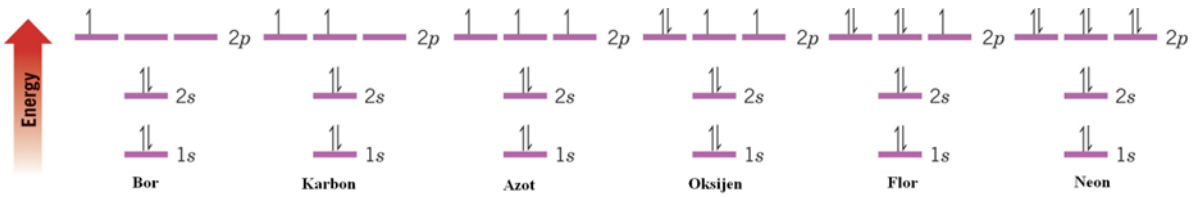


Şekil 5.2. s ve p Orbitallerinin Şekilleri

2p orbitalleri birbirlerine neredeyse değecek küreler (ya da lobe, halter) şeklindedir. 2p dalga fonksiyonunun ψ, 2p faz işareti bir kürede pozitif, diğerinden negatiftir. 1p orbitalinin iki kürenin bir düğüm düzlemi ayırır ve 3p orbitali, eksenleri birbirine dik olacak şekilde uzayda yerleşmiştir (Solomon, 2003). Dalga fonksiyonunun işaretinin elektrik yüküyle herhangi bir biçimde ilişkisi yoktur. ψ ile ilgili (+) ve (-) işaretleri dalga fonksiyonunun uzayın o bölgesindeki aritmetik işaretleridir. Bu (+) ve (-) işaretleri elektronun bulunma olasılığının çok ya da az olduğunu göstermez. Bir elektronun bulunma olasılığı ψ^2 'dir ve ψ^2 her zaman pozitiftir. Bu nedenle, elektronun 1p orbitalinin (-) küresinde bulunma olasılığı (+) küresindekiyle aynıdır (Solomon, 2003).

Bir orbitalin düğüm sayısıyla enerjisi arasında bir ilişki vardır. Düğüm sayısı arttıkça enerji artar. Örneğin, 2s ve 2p orbitallerinin her birinin bir düğümü vardır ve enerjileri düğümü olmayan 1s orbitalinden yüksektir.

Düşük enerjili orbitallerin bağıl enerjileri şu sırayı izler: pozitif yüklü çekirdeğe en yakın oldukları için 1s orbitallerinin elektronlarının enerjileri düşüktür. Bunu izleyen en düşük enerjili elektronlar 2s orbitalindedir 2p orbitallerinin elektronları, birbirleriyle eşit, ancak 1s ve 2s'den yüksek enerjiye sahiptir (Hart, vd., çeviri editörü: Tahsin Uyar, 2005). Bağıl enerjileri periyodik çizelgenin ilk iki sırasındaki herhangi bir atomun dizilimini belirlemede kullanılabilir. Bu amaç için sadece birkaç basit kurala vardır.



Şekil 5.3. Bazı ikinci sıra elementlerinin elektron dizilişleri.

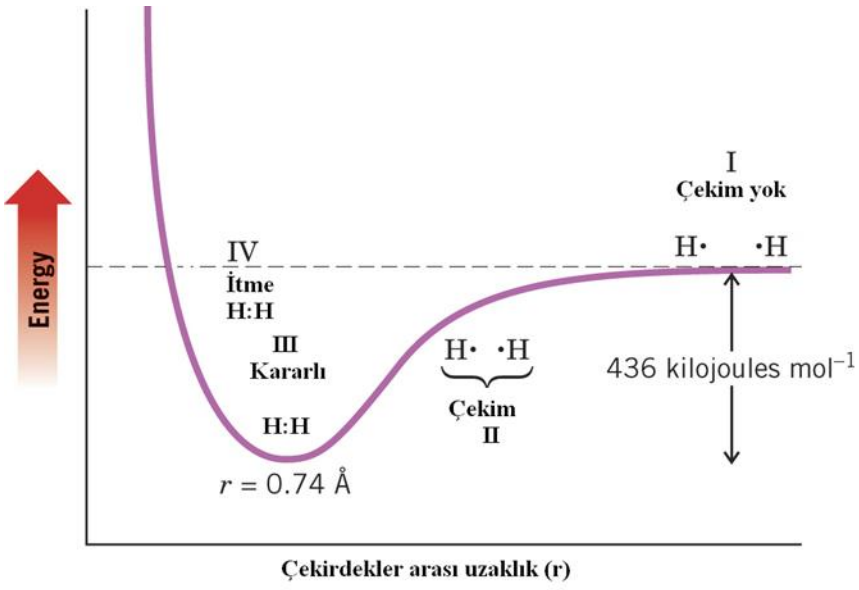
- Aufbau kuralı**:** Orbitaller en düşük enerjiliden başlayarak doldurulur.
- Pauli dışarlama kuralı**:** Her bir orbitale elektron spinleri eşleşmiş en fazla iki elektron yerleşebilir. Elektron kendi ekseni etrafında döner. Bir elektron iki dönme yönünden sadece birini seçmek zorundadır. Bu yönleri genellikle ↑ ya da ↓ şeklindeki oklarla gösteririz. Bu nedenle spinleri eşleşmiş iki elektron ⇅ ile gösterilir. Eşleşmemiş elektronlar aynı orbitalde bulunmazlar ve bunlar ↑↑ (ya da ↓↓) şeklinde gösterilirler. Bir elektron aynı kuantum sayılarına sahip orbitallerde bulunamaz.
- Hund kuralları: Üç p orbitali gibi eşit enerjili orbitallerin her birine, spini eşleşmemiş bir elektronu, her bir dejenere orbitalde bir elektron olacak şekilde yerleştiririz. Sonra,

her bir dejenere orbitale spinleri eşleşecek şekilde ikinci birer elektron yerleştirmeye başlarız (Zengin vd., 1998) (Hart, vd., çeviri editörü: Tahsin Uyar, 2005) (Solomon, 2003) (Bransden, 1999).

5.5. Moleküler Orbitaller

Atomik orbitallerin en büyük yararı, atomların molekülleri oluşturmak için nasıl bir araya geldiklerinin anlaşılması amacıyla atomik orbitallerin model olarak kullanılmasıdır. Kovalent bağların incelenmesi temeldir. İki hidrojen atomu bir hidrojen molekülü oluşturmak için bir araya gelirse kovalent bağ oluşur. Bu H-H bağının oluşumunun açıklanmasının, daha karmaşık moleküllerin bağlarının açıklanmasıyla aynı ya da en azından benzerdir.

Zıt spinli elektronları olan iki hidrojen atomu birbirine yaklaştırıldığında toplam enerjilerinin nasıl değiştiği Şekil 5.4. görülmektedir.



Şekil 5.4. Çekirdekler Arası Uzaklığın Hidrojen Molekülünün Potansiyel Enerjisine Etkisi.

Hidrojen atomları birbirlerinden oldukça uzakta (I) iken toplam enerjileri iki ayrı hidrojen atomunun enerjisidir. Hidrojen atomları birbirlerine yaklaştıkça (II), her birinin çekirdeği diğerinin elektronunu çeker. Bu çekim iki çekirdek (ya da iki elektron) arasındaki itme kuvvetinden fazladır ve bu çekim sonucunda, toplam sistem enerjisi azalır. İki çekirdek 0,74 Å, hidrojen molekülü için bağ uzunluğudur. Eğer çekirdekler birbirlerine daha da yaklaşırsa (IV), pozitif yüklü iki çekirdeğin itmesi fazlalaşır ve sistem enerjisi artar.

Bu basit bağ modelinde elektronlar hareketli olduğu dikkate alınmaz. Buna rağmen, elektronlar bağ civarında hareketlidirler. Heisenberg belirsizlik kuramına göre, bir elektronun yerini ve çizgisel momentumu aynı anda bilinmez (Haken, 2004).

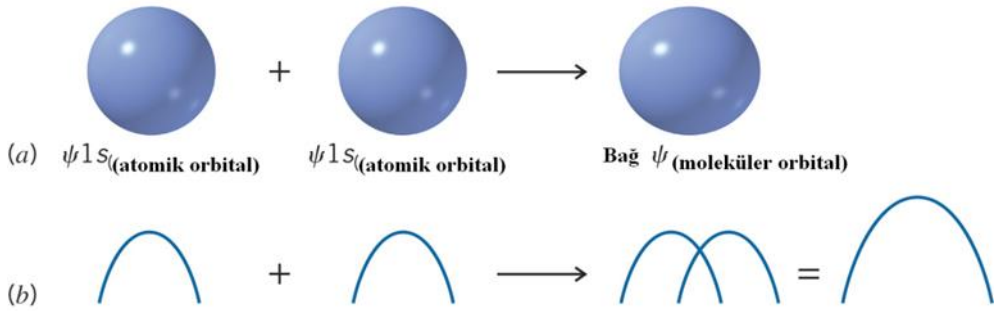
Orbitallere dayanan bir model kullanarak, elektronu belli yerlerde bulunma olasılığı (ψ^2) ile tanımlanır. Elektronun konumu kesin olarak, belirlenemediği için elektronun bu şekilde ele alınması belirsizlik kuramına ters düşmez. Böylelikle sedece elektron yoğunluğu olasılığının büyük ya da küçük olduğunu belirlenmiş olur (Haken, 2004).

İki hidrojen atomu bir hidrojen molekülü oluşturmak için bir araya geldiğinde, hidrojen atomları birbirlerine yaklaştıkça 1s orbitalleri (ψ_{1s}) örtüşmeye başlar. Atomlar birbirilerine yaklaştıkça, atomik orbitaller (AO'ler), moleküler orbitalleri (MO'ler) oluşturuncaya kadar orbital örtüşmesi artar. Oluşan moleküler orbitaller her iki çekirdeği ve etraflarında dönen elektronları kapsar. Elektronlar sadece bir çekirdeğin çevresinde ya da sadece bir atomik orbitalde değildir. Atomik orbitaller gibi moleküler orbitaller de spini eşleşmiş iki elektron içerebilir (Haken, 2004) (Solomon, 2003).

Atomik orbitaller moleküler orbitalleri oluşturmak için bir araya geldiklerinde, oluşan moleküler orbital sayısı bunları oluşturan atomik orbitallerin sayısına eşittir. Bu nedenle, hidrojen molekülü oluşumunda, iki atomik orbitalden iki moleküler orbital meydana gelir. Dalga fonksiyonları aynı ya da zıt fazda bir araya gelebilirler (Solomon, 2003).

Bağlayıcı moleküler orbital (ψ_{molek}) olan bir moleküler orbital, hidrojen molekülünün en düşük enerjili ya da temel haldeki iki elektronunu içerir. Bu orbital, atomik orbitaller

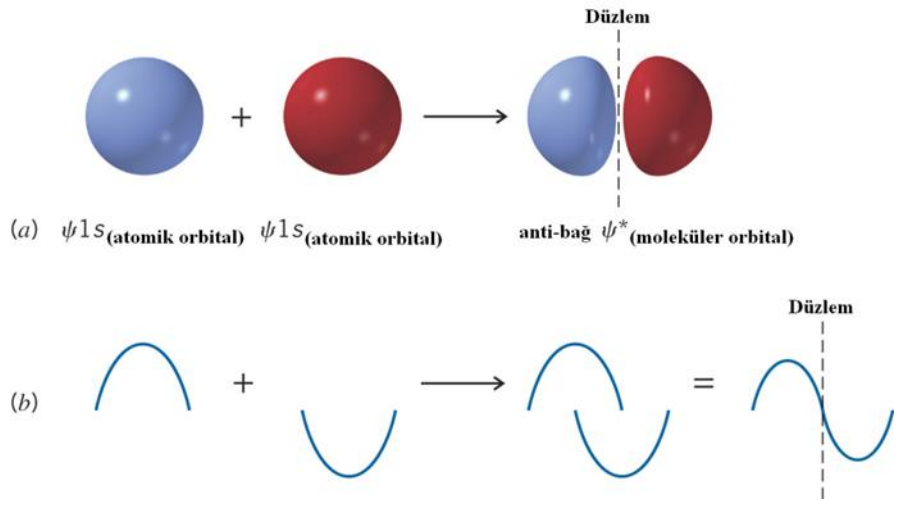
katılmasıyla bir araya gelirler ve bu, aynı faz işaretli atomik orbitallerin *örtüşmesi* anlamına gelir. Bu örtüşme iki çekirdek arasındaki bölgede dalga fonksiyonunun *kuvvetlenmesine* yol açar. Dalga fonksiyonunun kuvvetlenmesi, iki çekirdek arasındaki ψ değerinin büyümesi yanında ψ^2 'nin de büyümesi anlamına gelir. Bunun ötesinde, ψ^2 elektronun uzayın bu bölgesinde bulunma olasığıdır. Elektron bulunma olasılığı çekirdekler arasındaki bölgede artırılarak bağ oluşumunu sağlamış olur. Bu bölgede elektron yoğunluğu fazla olduğundan çekirdeklerin elektronları çekme kuvvetleri iki çekirdek arasındaki (ve iki elektron arasındaki) itme kuvvetinden büyüktür. Dolayısıyla bu çekici kuvvet, atomları bir arada tutar (Zengin vd., 1998) (Hart, vd., çeviri editörü: Tahsin Uyar, 2005) (Solomon, 2003) (Bransden, 1999)



Şekil 5.5. Aynı Faz İşaretli İki Hidrojen 1s Atomik Orbitalinin Örtüşerek Bir Bağlayıcı Moleküler Orbital Oluşturması.

Karşıt bağlayıcı moleküler orbital (ψ^*_{molek}) denen ikinci orbital, molekülün temel halindeki elektronları içermez. Bu moleküler orbital Şekil 5.5.'de gösterilen çıkarılma ile oluşur. Burada zıt fazlı orbitaller örtüştüğü için dalga fonksiyonları iki çekirdeğin arasındaki bölgede girişim yapar ve bir düğüm oluşturur. Düğümde ψ=0'dır ve düğümün iki tarafında ψ küçüktür. Bunun sonucunda çekirdekler arası bölgede ψ^2 küçük olur. Eğer karşıt bağlayıcı orbitalde elektronlar bulunursa, bu elektronlar çekirdekler arası bölgeden kaçınırlar. Çekirdekler, elektronlar nedeniyle çok küçük bir kuvvetle birbirini çekerler. İtici kuvvetler (iki çekirdek arasında ve iki elektron arasında) çekici kuvvetlerden daha büyük olur. Karşıt

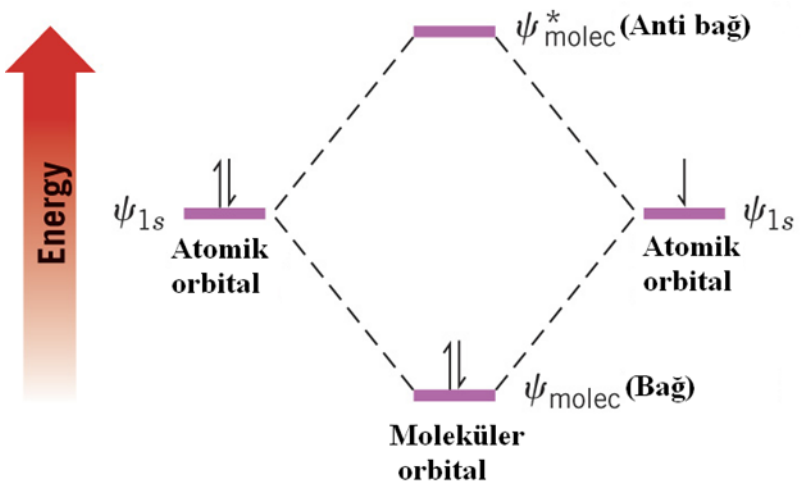
bağlayıcı orbitalde elektronların bulunması, atomları bir araya getirici değil, uzaklaştırıcı etki yapar (Solomon, 2003).



Şekil 5.6. Zıt Faz İşaretli İki Hidrojen 1s Atomik Orbitalinin Örtüşerek Bir Karşıt Bağlayıcı Moleküler Orbital Oluşturması.

Buraya kadar açıklananların matematiksel karşılığı LCAO (atomik orbitallerin doğrusal bileşimi–İng. Lineer Combination of Atomic Orbitals) yöntemidir. LCAO yönteminde atomik orbitallerin dalga fonksiyonları, moleküler orbitaller için yeni dalga fonksiyonları oluşturmak için yeni dalga fonksiyonları oluşturmak amacıyla doğrusal şekilde birleştirilir (Solomon, 2003).

Atomik orbitaller gibi moleküler orbitaller de bir elektron için belirli enerji haline karşılık gelir. Hidrojen molekülünün bağlayıcı moleküler orbitalindeki bir elektronun bağıl enerjisinin, ψ_{1s} atomik orbitalindekinden az olduğunu hesaplamalar göstermektedir. Karşıt bağlayıcı moleküler orbitalindeki bir elektronun enerjisinin ψ_{1s} atomik orbitalindeki enerjisinden epeyce fazla olduğunu da göstermektedir (Solomon, 2003).



Şekil 5.7. Hidrojen Molekülü İçin Enerji Şeması.

Hidrojen molekülünün moleküler orbitallerinin enerji şeması Şekil 5.7.‘de gösterilmiştir. Elektronlar moleküler orbitallere atomik orbitallerdekiyle aynı şekilde yerleşmiştir. İki elektron, toplam enerjisi iki atomik orbitalden az olan bağlayıcı moleküler orbitalde (zıt spinli olarak) bulunur. Bu hale hidrojen molekülünün en düşük elektronik hali ya da temel hali denir (Hart, vd ., çeviri editörü: Tahsin Uyar, 2005) (Solomon, 2003) (Bransden, 1999).

5.6. Kromoforlar

Mor ötesi ışıması, her ne kadar bir elektronun temel düzeyden uyarılmış düzeye çıkmasıyla soğuruluyorsa da, soğurulan ışımanın dalgaboyu, atomların bağlanma türüyle ilgilidir. Bağların türü, yani oluşma şekli ve enerjisi, temel ve uyarılmış düzeyler arasındaki enerjiyi belirleyeceğinden, mor ötesi soğurmasına yol açan elektronik uyarılma enerjisi, elektronlardan çok bu elektronları içeren atom gruplarının özelliğine bağlıdır. Soğurma yapan elektronları bulunan atom gruplarına kromofor (C=C, N=N, C=O gibi) denir. Bir kromofor, mor ötesi görünür bölgede soğurma yapan izole fonksiyonlu grup olarak tanımlanır.

Oksokrom, kromofor üzerinde soğurmanın dalgaboyunu veya şiddetini değiştiren substituent olarak tanımlanır; oksokrom, gerçekte 200 nm'den daha yüksekte soğurma yapmayan bir fonksiyonlu gruptur. Oksokromlar, alkil grupları ve hidroksi, amino grup, halojen gibi heteroatomlu substituentlerdir. Soğurmanın oksokromun varlığından (veya çözücü değişmesinden dolayı) daha yüksek dalgaboyuna kaymasına kırmızıya kayma (batokromik etki) ve daha düşük dalgaboyuna kaymasına maviye kayma (hipsokromik etki) denir. Soğurmanın şiddetinin artması, hiperkromik etki; azalması, hipokromik etki olarak bilinir.

Moleküler orbital yaklaşımında, π elektronlarının yayılımı, yani yerleşik olmayışı konjugasyonla daha da artar; orbitaller böylece dört (ya da daha fazla) atomik merkezle ilişkili olurlar. Bu yayılımın etkisi, π* orbitalinin enerji seviyesini düşürmesi ve ona daha az anti bağ karakteri vermesidir. Absorbsiyon maksimumları bunun sonucu olarak daha uzun dalgaboylarına kayarlar (Skoog, vd ., 1998) (Gündüz, 2004).

6. MATERYAL VE YÖNTEM

6.1. H1 Molekülü İşlemleri

Öncelikle sıvı H1 proje molekülü plazma uygulanmadan önceki IR ve UV spektrumları çekildi.

Sıvı H1 proje molekülüne plazma uygulanması gerçekleştirildi.

Sıvı H1 proje molekülüne plazma uygulandıktan sonraki IR ve UV spektrumları çekildi ve ilk veriler yorumlandı.

Sıvı H1 proje molekülüne plazma uygulanmadan önceki IR ve UV spektrumlarının analiz ve yorumlarının yapılması tamamlandı, ve deneysel verilerin değerlendirilip gerekli analizler yapıldı.

Sıvı H1 proje molekülüne plazma uygulandıktan sonraki sonuçlarının analizi yapıldı ve elde edilen sonuçlar değerlendirildi.

6.2. H3 Molekülü İşlemleri

Sıvı H3 proje molekülü plazma uygulanmadan önceki IR ve UV spektrumları çekildi.

Sıvı H3 proje molekülüne plazma uygulanması gerçekleştirildi.

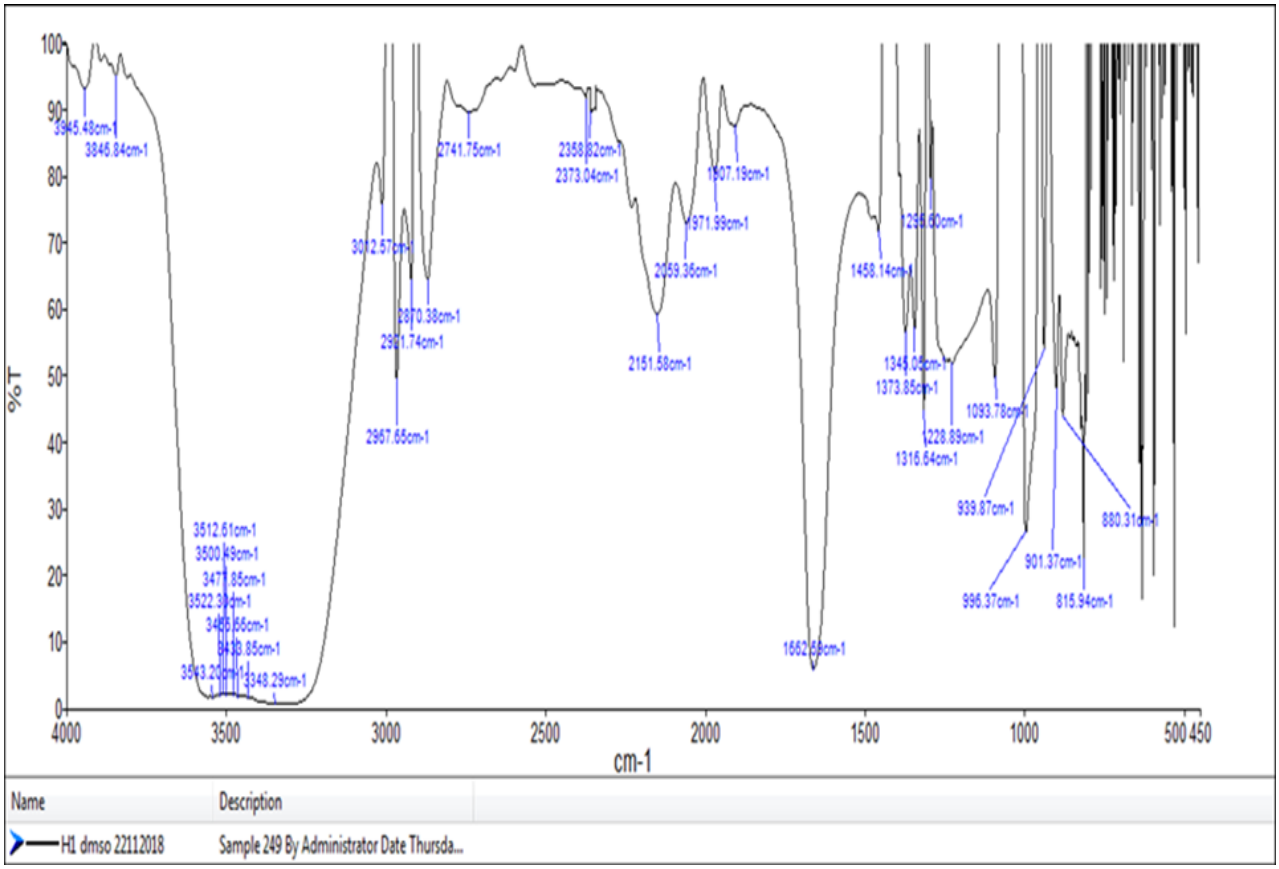
Sıvı H3 proje molekülüne plazma uygulandıktan sonraki IR ve UV spektrumları çekildi ve ilk veriler yorumlandı.

Sıvı H3 proje molekülüne plazma uygulanmadan önceki IR ve UV spektrumlarının analiz ve yorumlarının yapılması tamamlandı, ve deneysel verilerin değerlendirilip gerekli analizler yapıldı.

Sıvı H3 proje molekülüne plazma uygulandıktan sonraki sonuçlarının analizi yapıldı ve elde edilen sonuçlar değerlendirildi.

7. BULGULAR VE TARTIŞMA

7.1. H1 FT-IR Spektrumu Bulguları



Şekil 7.1. H1 DMSO öncesi APPT H1 DMSO Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları.

Çizelge 7.1. Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

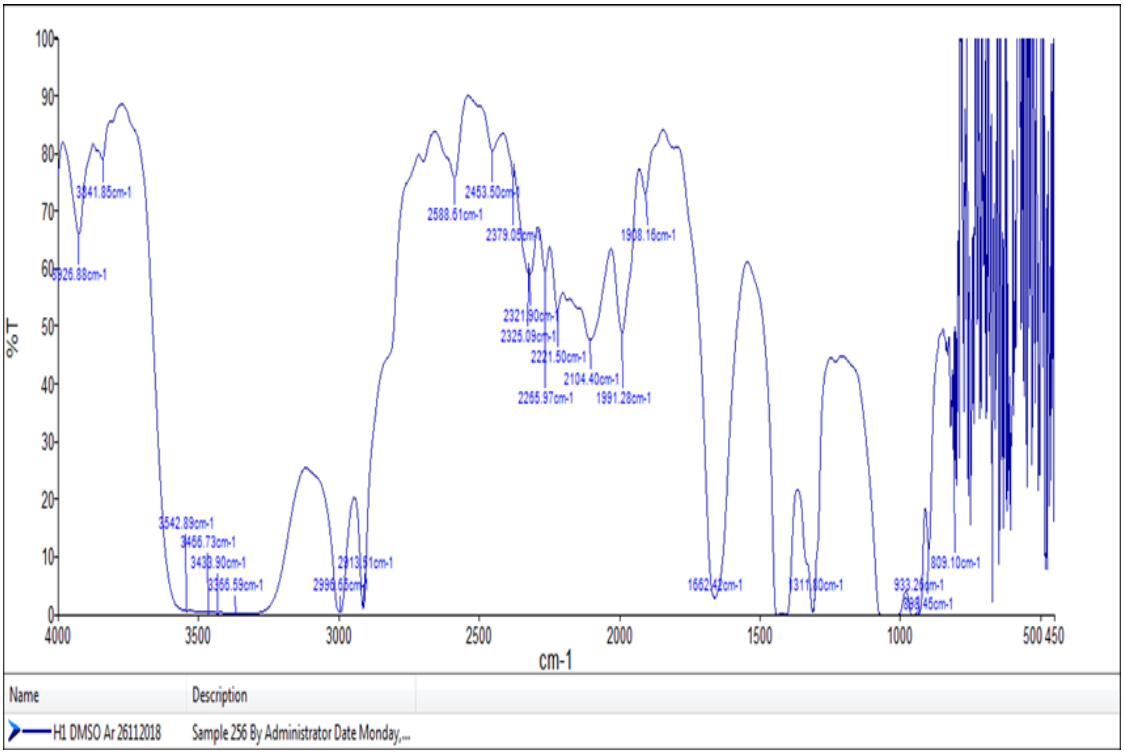
No	cm^{-1}	T	Intensity	Yaklaşık mod tanımlamaları
1	3945.48		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
2	3846.84		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
3	3543.20		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
4	3348.29		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
5	3012.67		W, Weak, Zayıf, Sivri	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
6	2967.65		S, Strong, Güçlü, Sivri	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
7	2901.74		S, Strong, Güçlü, Sivri	N-H Rocking Modu (Rocking mod)
8	2870.38		S, Strong, Güçlü, Sivri	N-H Rocking Modu (Rocking mod)
9	2741.76		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
10	2373.04		W, Weak, Zayıf, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
11	2358.82		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
12	2151.58		S, Strong, Güçlü, Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
13	2059.36		S, Strong, Güçlü, Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
14	1971.99		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu Modu
15	1807.18		M, Medium Orta, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu Modu
16	1662.58		S, Strong, Güçlü, Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
17	1458.14		W, Weak, Zayıf, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C=N Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.1. Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

18	1373.85		S, Strong, Güçlü, Sivri	C=N Gerilme Modu(Stretching mod)
19	1345.05		S, Strong, Güçlü, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
20	1316.64		S, Strong, Güçlü, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
21	1236.60		W, Weak, Zayıf, Sivri	-O-H Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
22	1228.88		S, Strong, Güçlü, Geniş	-O-H Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
23	1093.78		M, Medium, Orta, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
24	996.37		S, Strong, Güçlü, Sivri	-C-N-N-C- Bending Vibrations, C-H Out Of Plane Bending, C-C Bendings Vibrations mod, C-N Torsion mod
25	939.78		S, Strong, Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.1. Molekül H1 FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

26	901.37		S, Strong, Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
27	880.31		S, Strong, Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
28	816.94		S, Strong, Güçlü,Sivri	-C-N-N-C- Bending Vibrations, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)



Şekil 7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Dmso Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları.

Çizelge 7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 DMSO Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

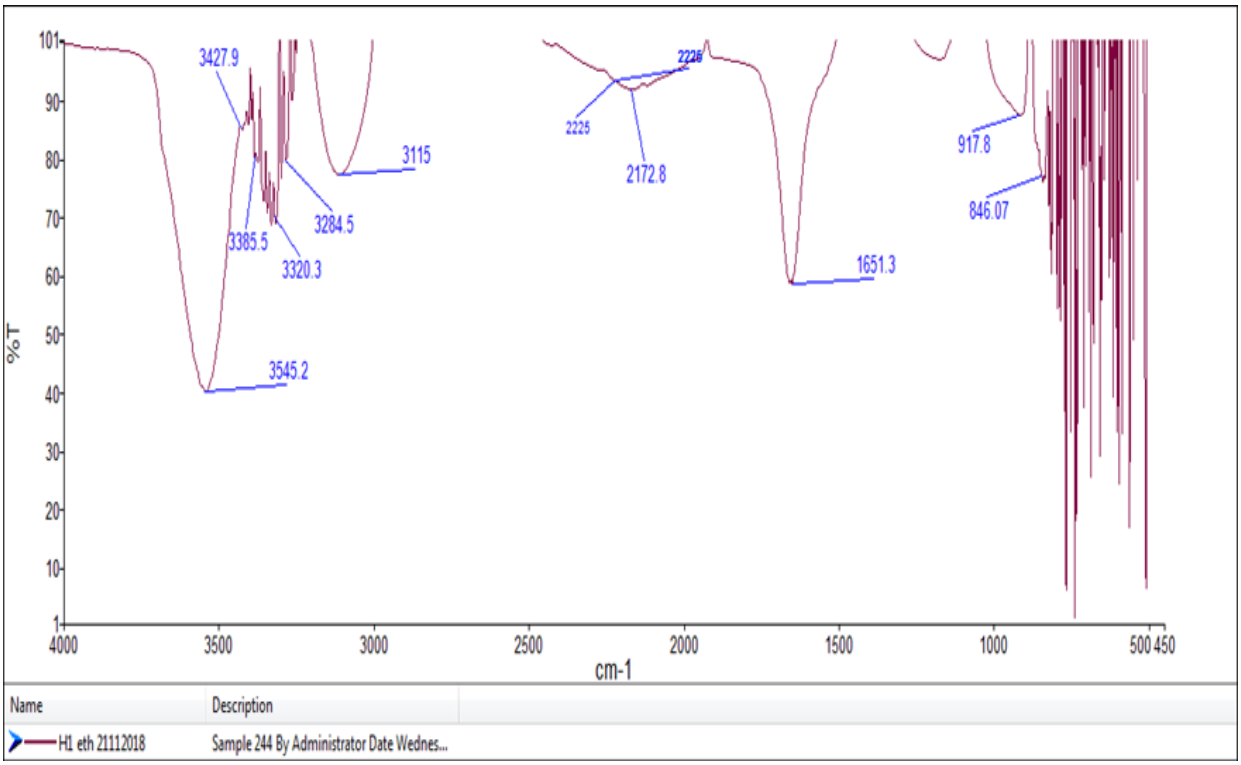
No	cm^{-1}	% T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3826.88		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod),
2	3841.86		M, Medium Orta, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod),
3	3433.90		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod),
4	2986.65		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilmesi Modu (Stretching mod),
5	2813.51		S, Strong, Güçlü, Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilmesi Modu (Stretching mod),
6	2588.61		S, Strong, Güçlü, Geniş	
7	2453.50		M, Medium, Orta, Geniş	
8	2379.06		W, Weak, Zayıf, Dar	
9	2326.09		S, Strong, Güçlü, Geniş	
10	2266.87		M, Medium, Orta,Geniş	
11	2221.50		M, Medium, Orta, Geniş	
12	2104.40		S, Strong, Güçlü, Geniş	

Çizelge 7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 DMSO Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

13	1991.28		S, Strong, Güçlü, Geniş	
14	1809.16		M, Medium Orta, Geniş	
15	1662.42		S, Strong, Güçlü, Geniş	C=C Gerilme Modu (Stretching mod)
16	1400.00		S, Strong, Güçlü, Geniş	C=N- Gerilme Modu (Stretching mod)
17	1311.00		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod)
18	1100.00		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
19	898.45		M,Medium, Orta, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod)
20	833.26		M, Medium, Orta,Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod)-C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.2. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 DMSO Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

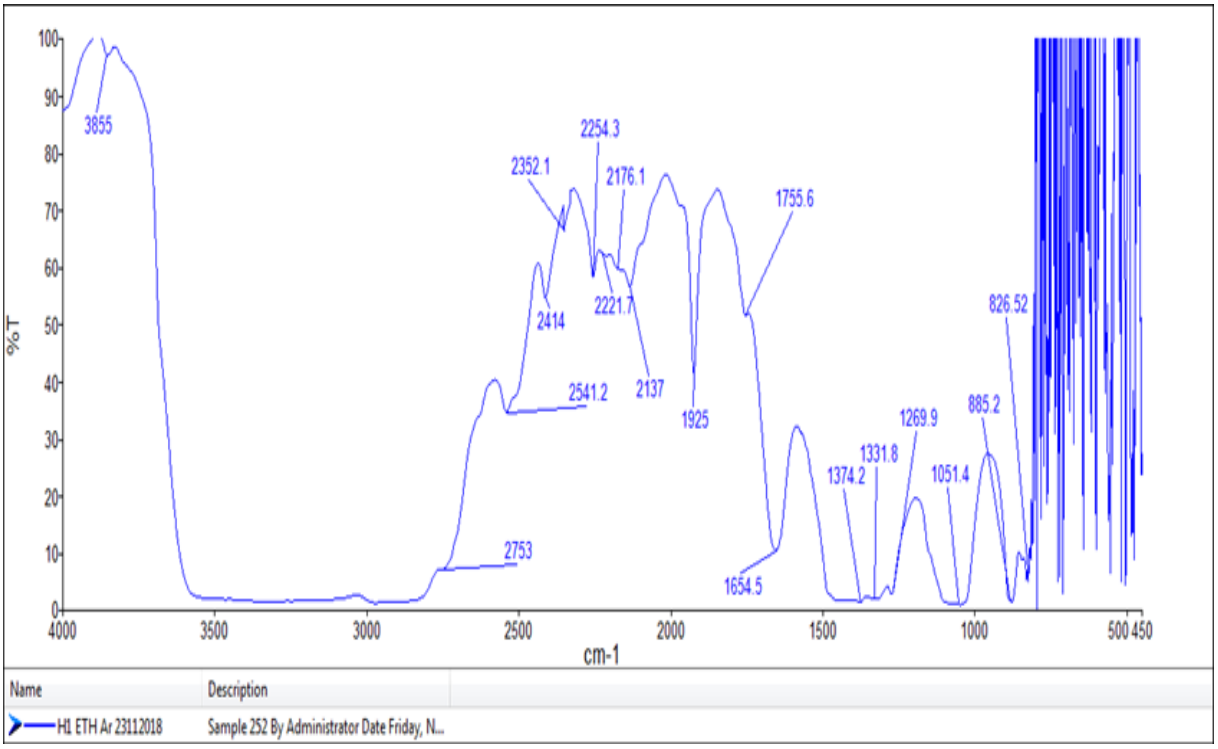
21	809.10		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.3. Molekül H1 Ethanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.3. Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

No	cm^{-1}	% T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3545.2		S,Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
2	3427.9		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
3	3385.5		M, Medium, Orta, Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
4	3320.3		S, Strong, Güçlü, Dar	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
5	3284.5		S, Strong, Güçlü, Dar	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
6	3115		S, Strong, Güçlü, Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
7	2225		M, Medium, Orta, Dar	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
8	2172.8		M, Medium, Orta, Dar	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
9	2225		W, Weak, Zayıf, Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
10	1651.3		S, Strong, Güçlü, Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
11	917.8		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
12	846.07		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod) C-N-N-C Bending Vibrations Pikleri



Şekil 7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

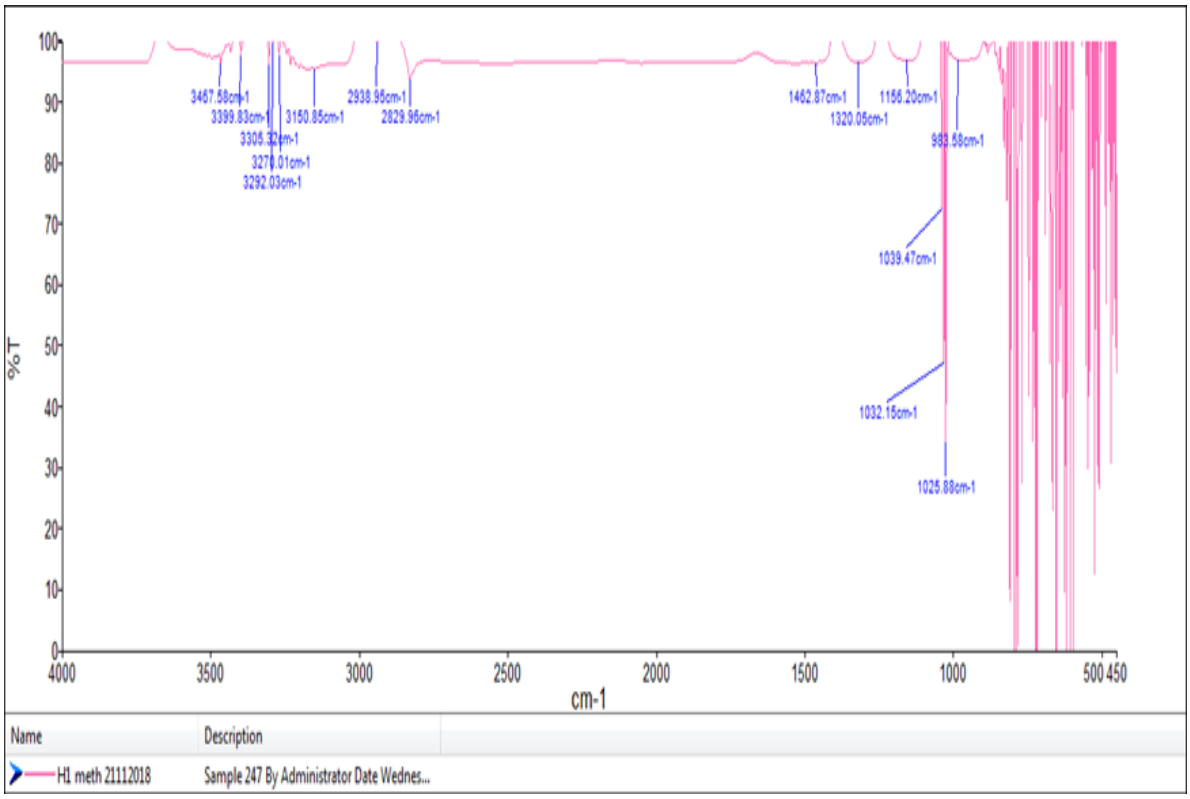
No	cm-1	%T	Intensity	Yaklaşık mod tanımlamaları
1	3855		M, Medium, Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu
2	2753		M, Medium, Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
3	2541.2		M, Medium, Orta,Geniş	N-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu

Çizelge 7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

4	2414		M, Medium, Orta,Geniş	N-H Titreşim Gerilme Modu, CH_3 Titreşim Modu
5	2352.1		M, Medium, Orta,Geniş	C-H Titreşim Gerilme Modu, CH_3 Titreşim Modu
6	2254.3		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
7	2176.1		W, Weak, Zayıf, Geniş	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
8	2137		M, Medium, Orta, Geniş	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
9	1925		M, Medium, Orta, Dar	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
10	1755.6		W, Weak, Zayıf, Geniş	C-H Titreşim Modu, CH_3 Titreşim Modu
11	1654.5		S, Strong, Güçlü, Geniş	C=C Gerilme Modu (Stretching mod)
12	1374.2		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
13	1331.8		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.4. Argon Plazma Uygulanmış Molekül H1 Ethanol Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

14	1269.9		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
15	1051.4		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
16	885.2		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), -C-N-N-C- Bending Vibrations
17	826.52		M, Medium, Orta, Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları.

Çizelge 7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

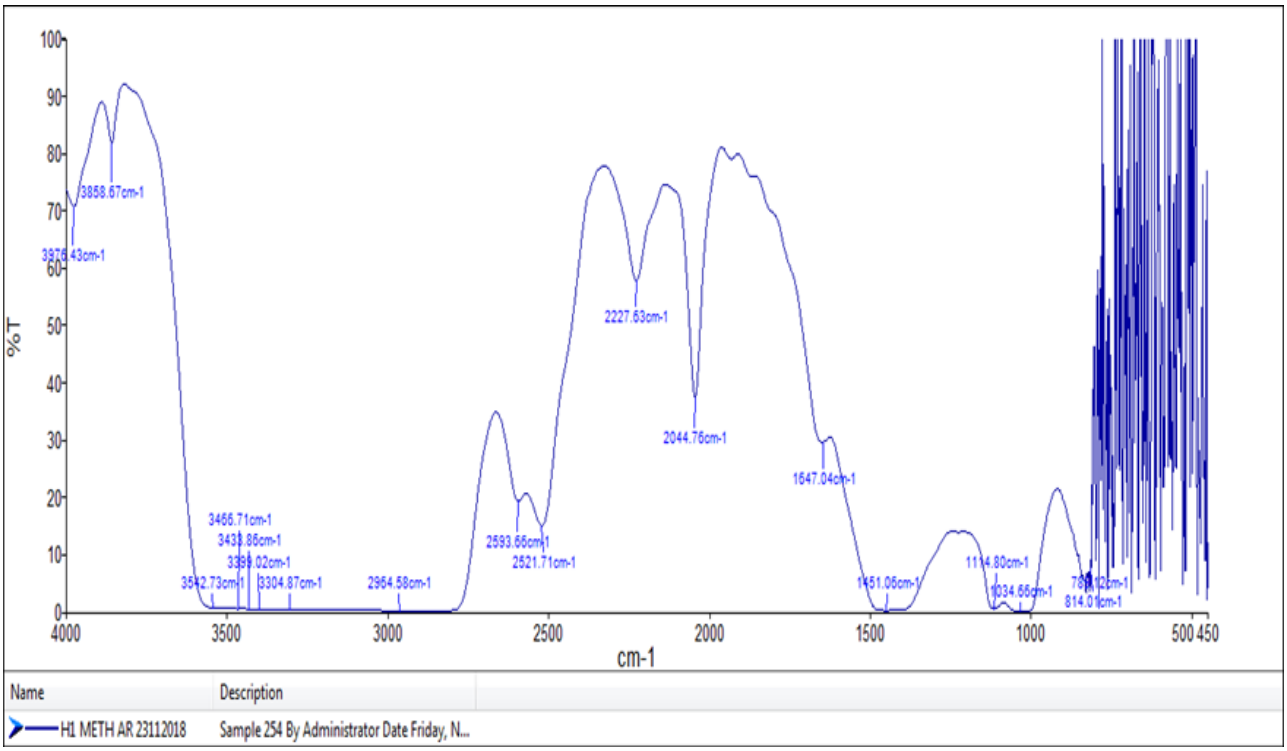
No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3467.58		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Stretching Modu, O-H Stretching Modu CH_3 Vbration mod
2	3399.83		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Stretching Modu, O-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod

Çizelge 7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

3	3305.32		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Stretching Modu, O-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
4	3292.03		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Stretching Modu O-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
5	3270.01		W, Weak, Zayıf, Dar	C-H Stretching Modu, O-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
6	3150.85		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Stretching Modu, O-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
7	2938.95		S, Strong, Güçlü, Dar	N-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
8	2829.96		W, Weak, Zayıf, Dar	N-H Stretching Modu, CH_3 Vbration mod
9	1462.87		S, Strong, Güçlü, Geniş	-C=N- Gerilme Modu (Stretching mod), O-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
10	1320.06		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu (Stretching mod) ,O-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
11	1156.06		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.5. Molekül H1 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

12	1039.47		S, Strong, Güçlü, Sivri	-N=N- Gerilme Modu (Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
13	1032.15		S, Strong, Güçlü, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
14	1025.88		S, Strong, Güçlü, Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
15	983.58		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık mod tanımlamaları
1	3876.43		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod)
2	3858.67		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod), CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
3	3466.71		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilme Modu (Stretching mod)

Çizelge 7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

4	2964.58		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod), Ch3 Gerilme Modu (Stretching mod)
5	2593.66		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilme Modu (Stretching mod)
6	2621.71		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu (Stretching mod)
7	2227.63		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilme Modu (Stretching mod)
8	2044.76		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Gerilme Modu (Stretching mod), CH_3 Gerilme Modu (Stretching mod)
9	1647.04		M, Medium Orta, Geniş	C=C Gerilme Modu (Stretching mod)
10	1451.05		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu (Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
11	1114.80		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
12	1034.55		S, Strong, Güçlü, Geniş	-N=N- Gerilme Modu (Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.6. Argon Uygulanmış Molekül H3 Methanol FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

13	788.12		S, Strong, Güçlü, Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), -C-N-N-C- Bending Vibrations
14	814.01		S, Strong, Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu (Stretching mod), -C-N-N-C- Bending Vibrations

FT-IR spektrumları formazan türevleri karakteristik absorpsiyon bantları gösterdi 2921-3066 cm^{-1} N-H,

1586-1638 cm^{-1} aromatik C = C,

1487-1524 cm-1 C = N.

Formazanların FT-IR spektrumları, C-C, C = C, -O-H, C = N, N-N, N-H, N = N, C-N, $-CH_3$'ün gerilme titreşimlerinin bazı karakteristik bantlarını içerir.

FT-IR spektrumlarında 3016-3024cm^{-1}'de gözlenen zayıf bantlar;

N-H simetrik gerilme modu.

Literatürde, farklı ikame edici formazanlar için gözlemlenen bazı N-H gerilme modları deneysel olarak 3000-3600 cm^{-1} ve 2850-3120 cm^{-1}'dir.

Bu sonuçlar, farklı sübstitüent-formazan şelatlı veya şelatsız yapılara göre bazı bant kaymalarını indirmiştir.

Molekül içi hidrojen bağına sahip şelat halkası, çözelti içinde daha az kararlı göründü. Halka, çözücüler içinde kolayca açıldı ve şelatlı veya şelatsız formlar arasında bir denge ile sonuçlandı.

N-H Modları;

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 2967.65 cm^{-1} ve 2151.58cm-1, 2059.36 cm^{-1} ve 2901.74, 2870.38 cm^{-1} N-H rocking modları görülmektedirler.

Şekil 7.3. ve Çizelge 7.3. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 3320.3 cm^{-1} ve 3284.5 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 2414 ve 2352.1 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu 3150.85 cm^{-1} ve 2938.95, 2829.96 cm^{-1} görülmektedirler.

CH3;

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 2986.65, 2813.51 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 2753 ve 2352.1cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H_3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 3150.85 cm^{-1} ve 2938.95 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 3466.71 ve 2964.58 cm^{-1} görülmektedirler.

C=N gerilme titreşimi;

Formazan türevi spektrumunun karakteristik bölgesi 1450-1600 cm-1'dir ve bu C = N gerilme titreşimine atfedilir.

Bu bandın daha düşük veya daha yüksek frekansına kayma şelatlı veya şelatsız yapıyı belirler.

1500-1510 cm-1'deki C = N gerilme bandı şelat yapılarını gösterir.

1551-1565 cm-1'deki C = N gerilme bandı şelat olmayan yapıları gösterir.

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C=N stretching bands vibrations 1373.85 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C=N stretching band 1400.00 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C=N stretching bands vibrations 1462.87 cm^{-1} görülmektedir.

N=N gerilme bandı titreşimleri;

N=N 1330-1455 cm^{-1}'de N = N gerilme bandı titreşimleri gözlendi.

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki N=N stretching bands vibrations. 1345.05 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki N=N stretching band 1311.00 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki N=N stretching bands vibrations mod 1374.2 cm^{-1} de ve 1331.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki N=N stretching bands vibrations mod 1320.06 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.’dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki N=N stretching bands vibrations mod 1451.05 cm^{-1} görülmektedirler.

C-N gerilme titreşimleri;

1382-1266 cm^{-1}'de C-N gerilme titreşimleri gözlendi.

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N stretching vibrations. 1345.05 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-N stretching vibrations. 1331.8 cm^{-1} de ve 1269.9 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-N stretching vibrations 1320.06 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N stretching vibrations. 1114.80 cm^{-1} görülmektedirler.

C-H;

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 DMSO daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri. 996.37cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.3. ve Çizelge 7.3.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri. 917.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 1051.4cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlemdışı eğilme vibrations. 885.2 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations 1156.06, 1039.47, cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme vibrations 983.58 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 1114.80 ve 1034.55 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 788.12 cm^{-1} görülmektedirler.

C-H;

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 DMSO daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme vibrations. 996.37cm-1 de görülmektedir.

Şekil 7.3. ve Çizelge 7.3. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 917.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations 1051.4 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlemdışı eğilme vibrations 885.2cm-1 görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations 1156.06, 1039.47 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme vibrations 983.58 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 1114.80 ve 1034.55 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme vibrations. 788.12 cm^{-1} görülmektedirler.

C-C Gerilme titreşimleri;

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-C stretching vibrations. 1100.00 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.3. ve Çizelge 7.3. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-C stretching vibrations. 917.8cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-C stretching vibrations. 1051.4cm^{-1} de ve 885.2cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.5. ve Çizelge 7.5. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-C stretching vibrations. 1032.15, 983.58 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.6. ve Çizelge 7.6.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-C stretching vibrations 1114.80, 1034.55 ve 814.01 cm^{-1} görülmektedirler.

O-H Gerilme titreşimleri;

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki -O-H stretching vibrations. 1228.88cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR –O-H- stretching vibrations. 1320.06 cm^{-1} görülmektedirler.

C-N-N-C bükülme titreşimleri;

C-N-N-C bükülme titreşimi pikleri 900-1000 cm^{-1}'de gözlendi.

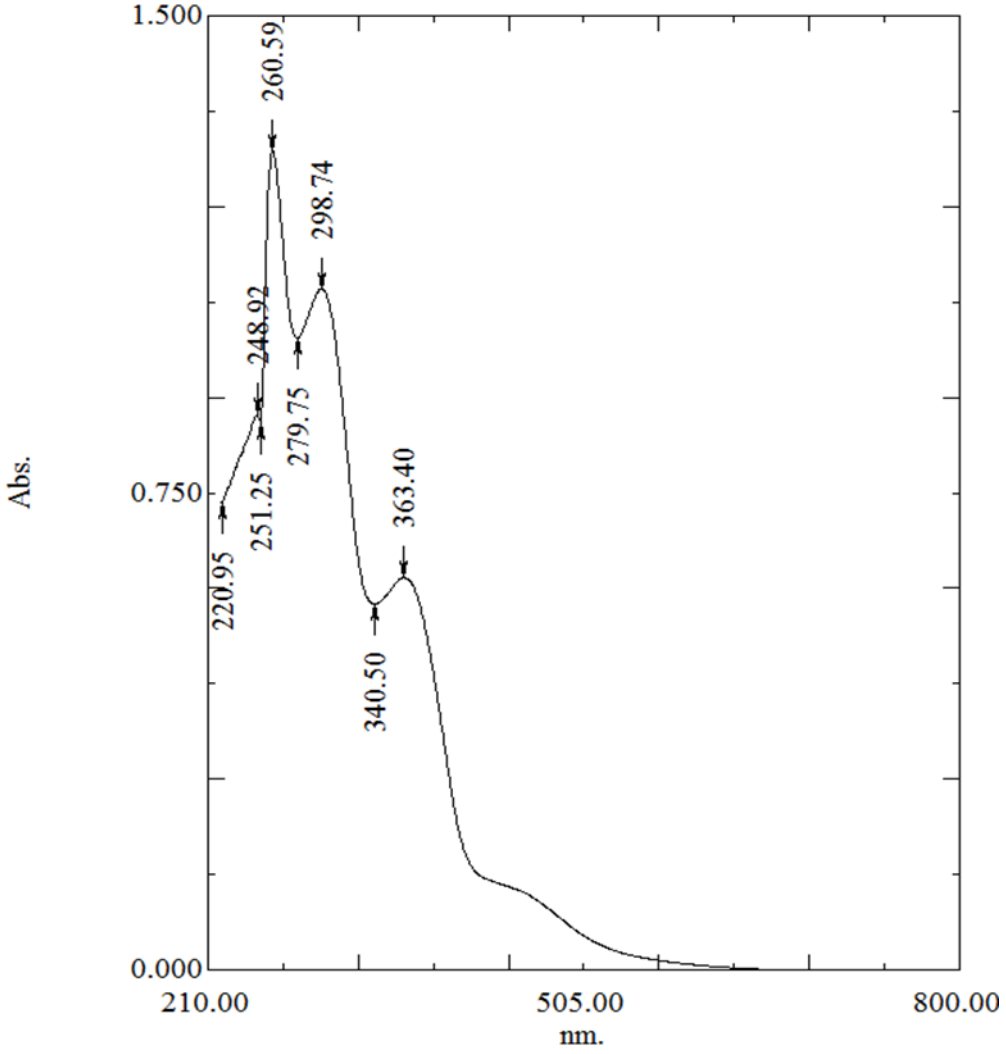
Şekil 7.1. ve Çizelge 7.1. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşimi pikleri 996.37, 816.94cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.2. ve Çizelge 7.2. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşimi pikleri 833.26cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.3. ve Çizelge 7.3. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşimi pikleri 846.07 cm^{-1} görülmektedir.

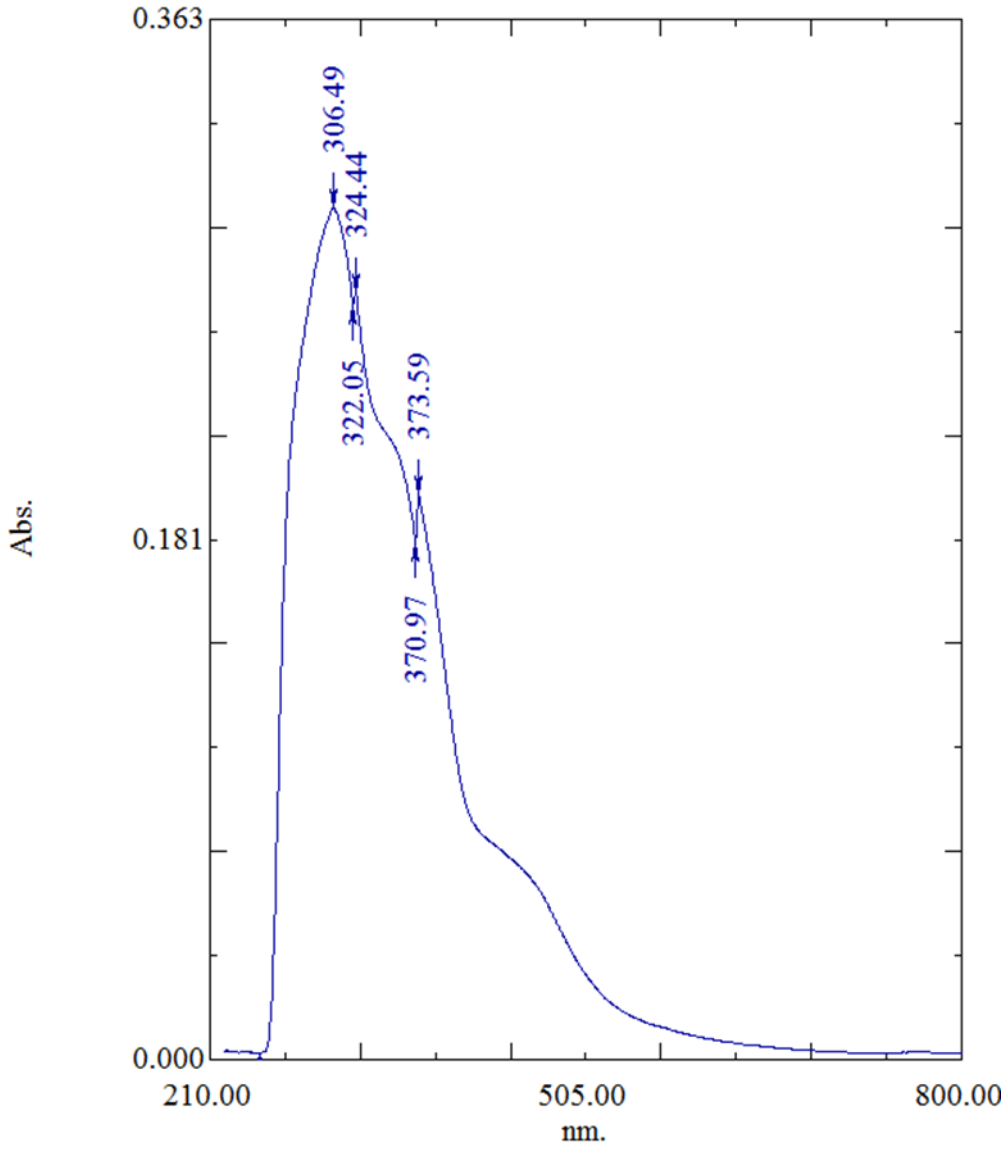
Şekil 7.4. ve Çizelge 7.4. den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşimi pikleri. 983.58cm^{-1} de görülmektedirler.

7.2. UV Spektrum Bulguları



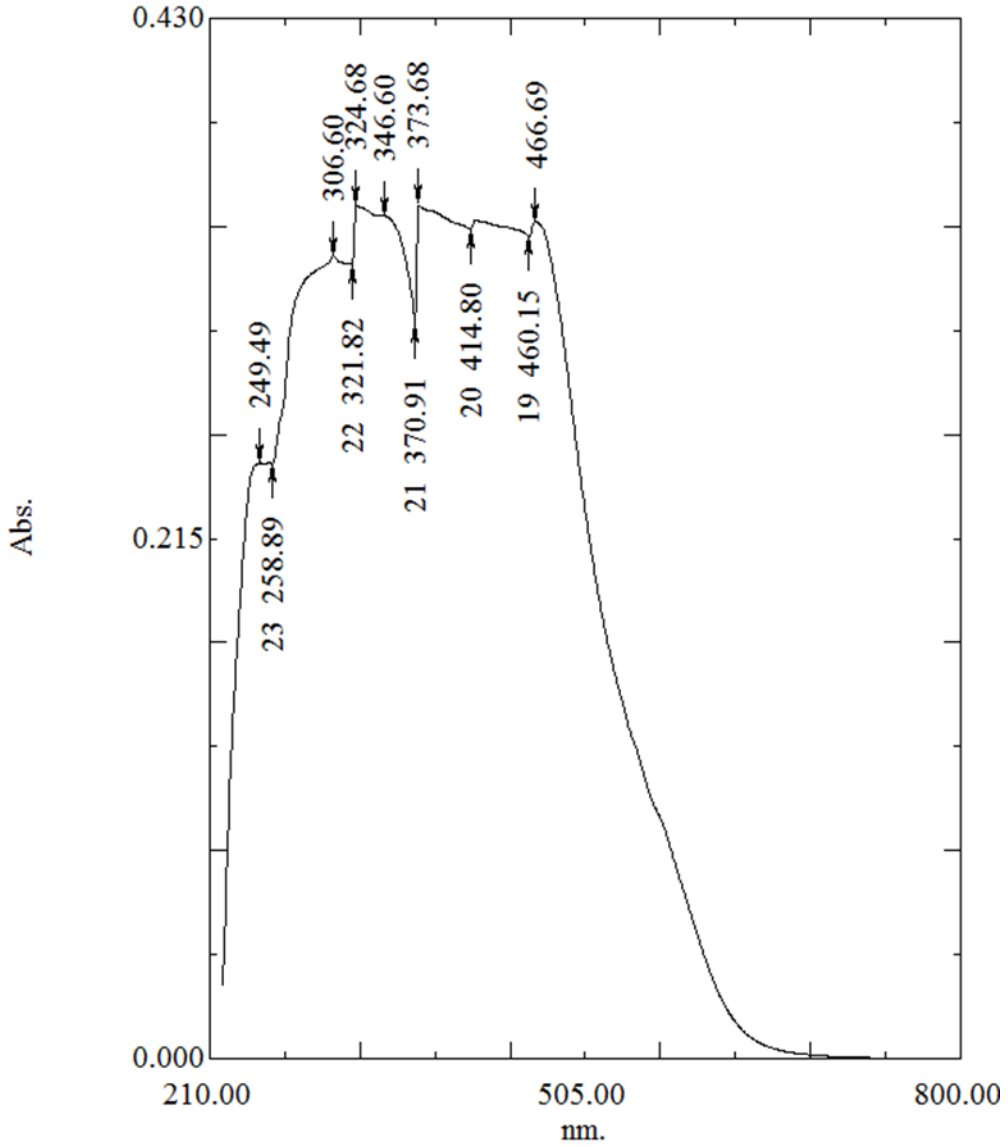
Şekil 7.7. DMSO Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu.

260.59 nm-298.74 nm birincil π→π* geçişi, 298.74 nm-363.40 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.



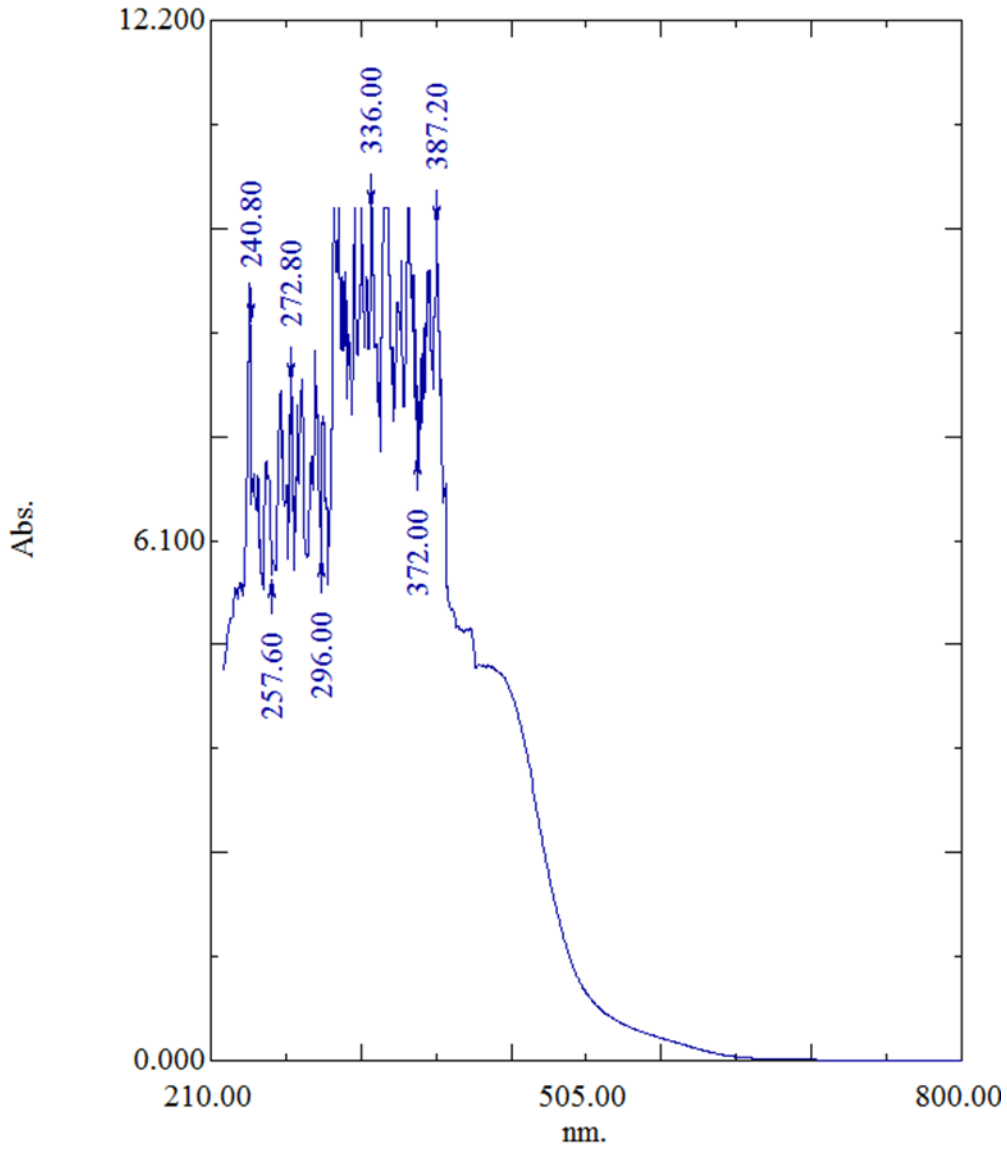
Şekil 7.8. Argon Plazma Uygulanmış H1 DMSO Molekülünün UV Spektrumu

306.49 nm-324.44nm birincil π→π* geçişi, 324.44 nm-373.59nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.



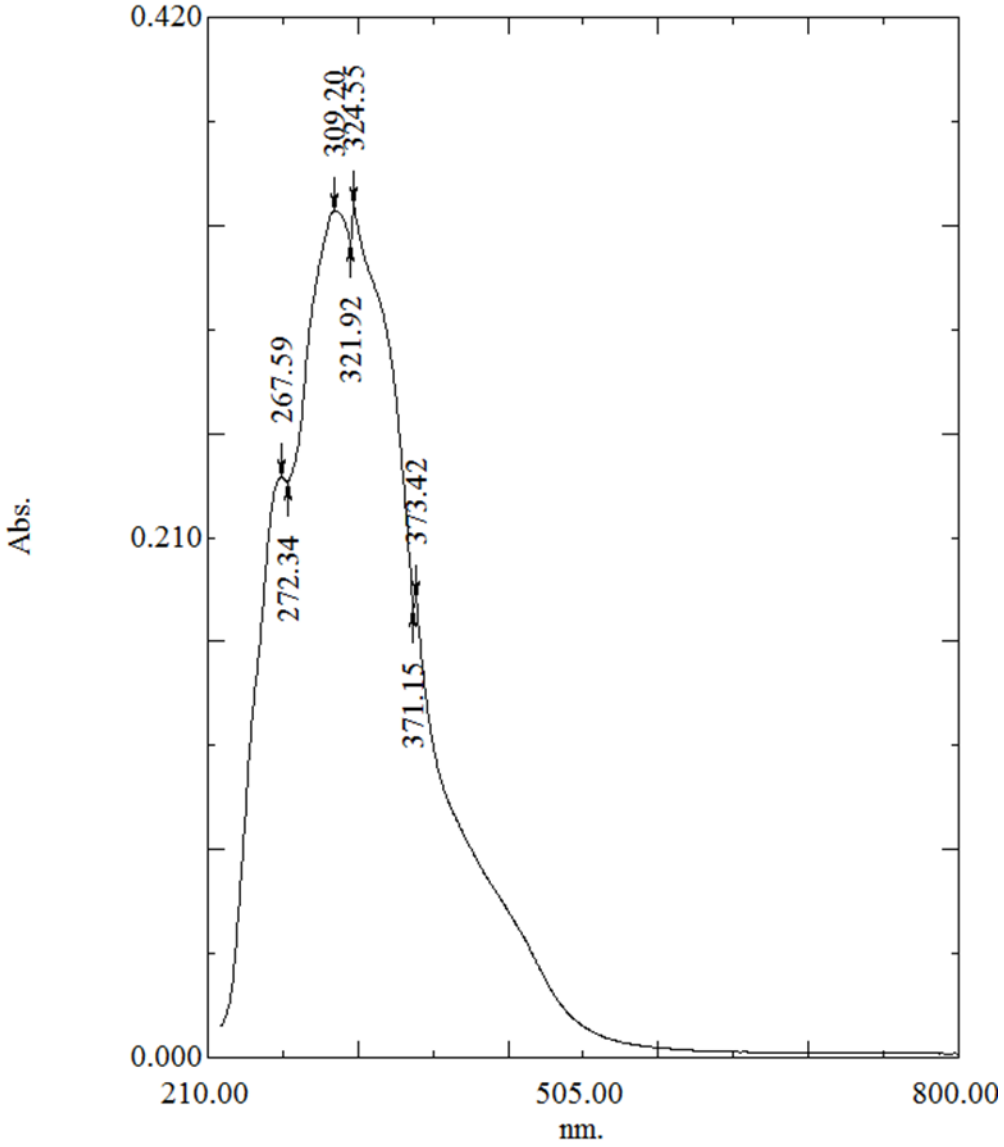
Şekil 7.9. Ethanol Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu.

306.60 nm-324.68nm birincil π→π* geçişi, 324.68 nm-346.60nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.



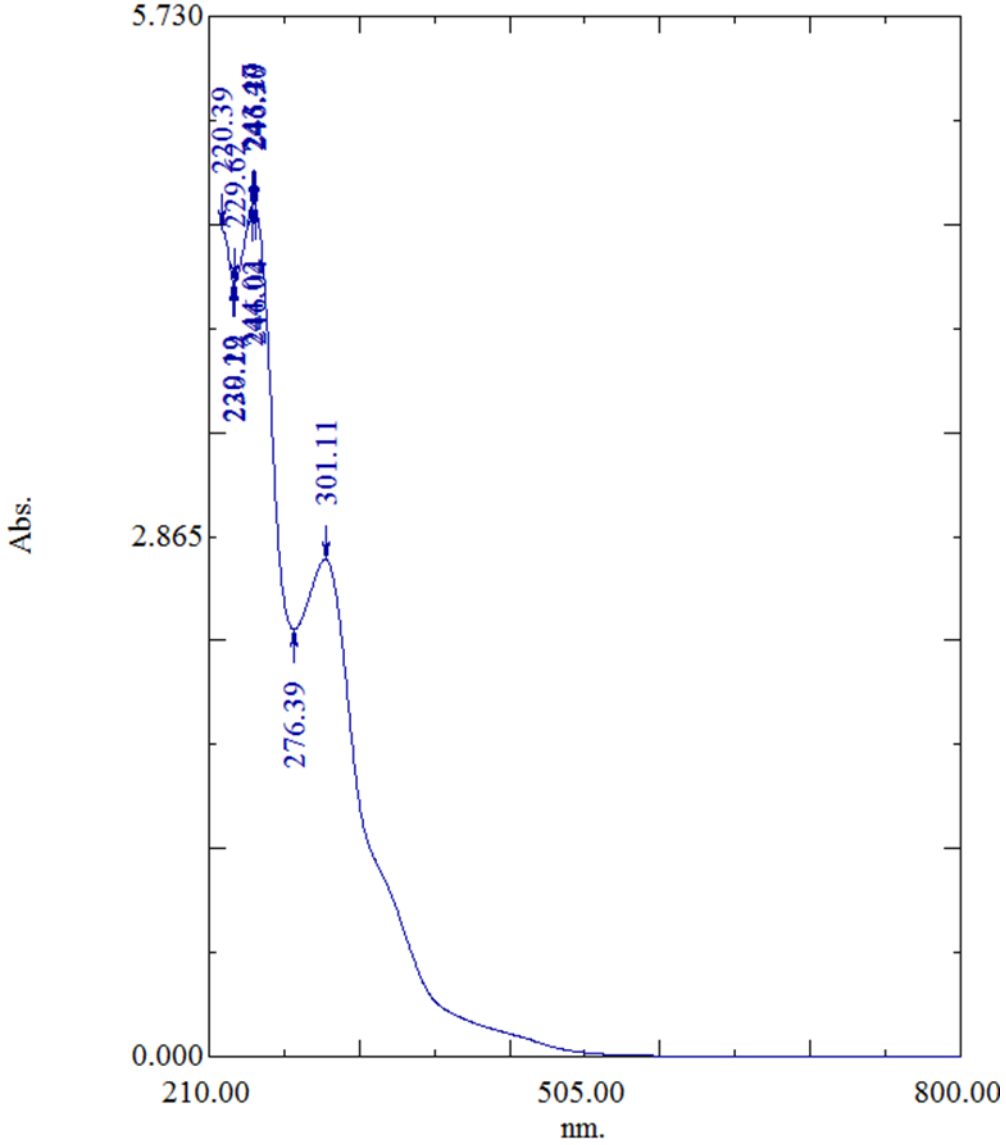
Şekil 7.10. Argon Plazma Uygulanmış H1 Ethanol Molekülünün UV Spektrumu

240.80 nm-272.80 nm birincil π→π* geçişi, 272.80 nm-336.00nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.



Şekil 7.11. Methanol Öncesi H1 Molekülünün UV Spektrumu

267.59 nm-309.20 nm birincil π→π* geçişi, 309.20 nm-324.55 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir

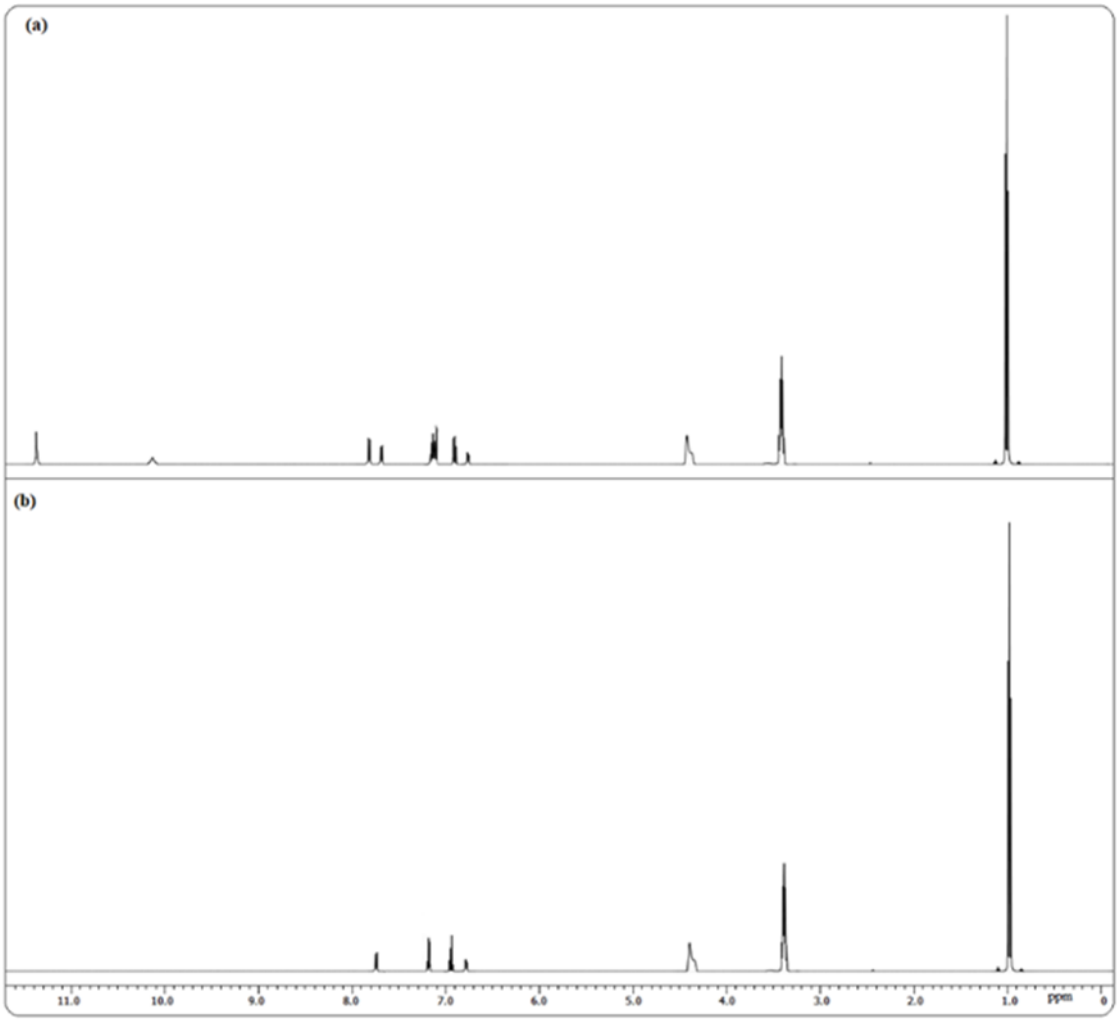


Şekil 7.12. Argon Plazma Uygulanmış H1 Methanol Molekülünün UV Spektrumu

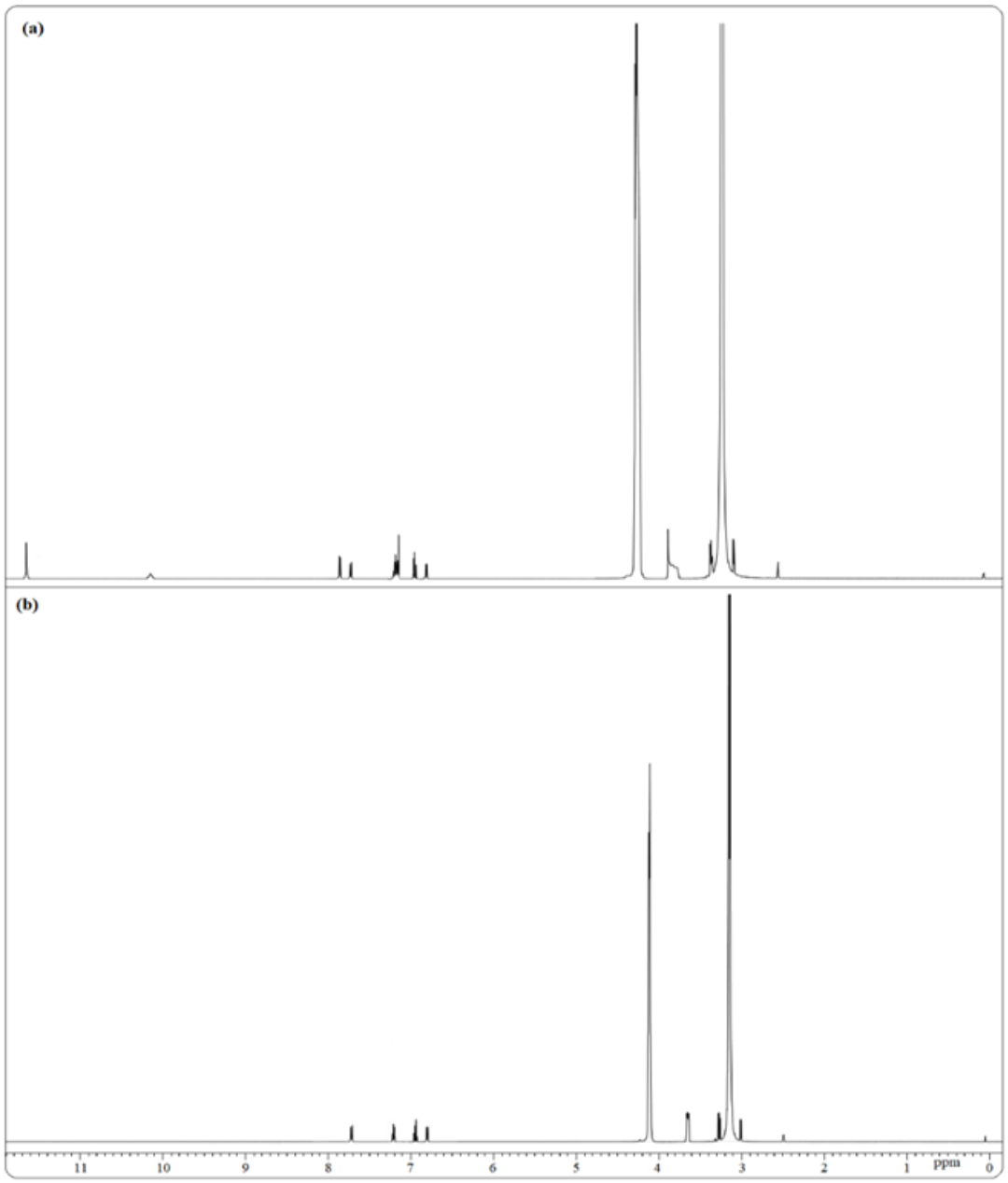
220.39 nm-246.10 nm birincil π→π* geçişi, 246.10 nm-301.11 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.

7.3 H1 NMR Spektrumu Bulguları

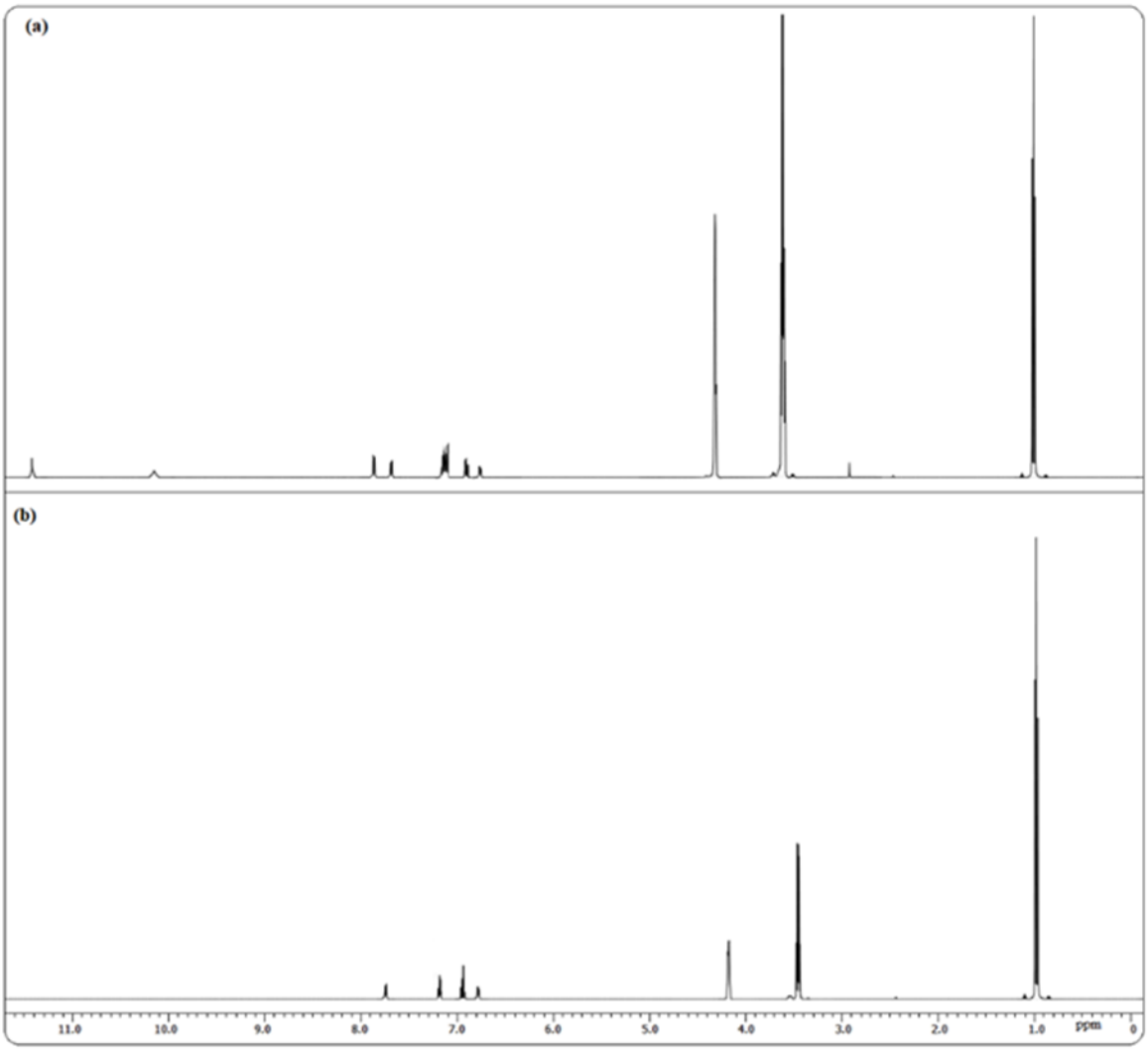
H1 NMR spektrumlarının tamamı JEOL ECZ 500R spektrometre ile oda sıcaklığında gerçekleştirildi. Çözücü ve dahili standart olarak döteryum DMSO ve tetra metil silan (TMS) kullanıldı. Ayrıca protonun rezonans frekansı 500.13 MHz olarak ayarlandı.



Şekil 7.13. APTT uygulandıktan sonra DMSO içinde çözünen başlık molekülünün ^{1}H NMR spektrumu.



Şekil 7.14. APTT uygulandıktan sonra metanol içinde çözülen başlık molekülünün ^{1}H NMR spektrumu.



Şekil 7.15. APTT uygulandıktan sonra etanol içinde çözülen başlık molekülünün ^{1}H NMR spektrumu.

Etanol, metanol, DMSO ve 1H spektrumlarında çözündürülen baş molekülün Ar APPT uygulamasından sonraki Proton (1H) NMR spektrumu Şekil 7.13. – Şekil 7.15. de verilmiştir.

DMSO'da çözünen numunenin NMR spektrumu belirtildiğinde, aromatik halkaların protonları 6.8 ppm ila 8 ppm aralığında gözlendi. Dahası, metil grubunun protonları 1.02 ppm'de görüldü. APPT başlık molekülüne uygulandıktan sonra OH grubu ve NH grubu

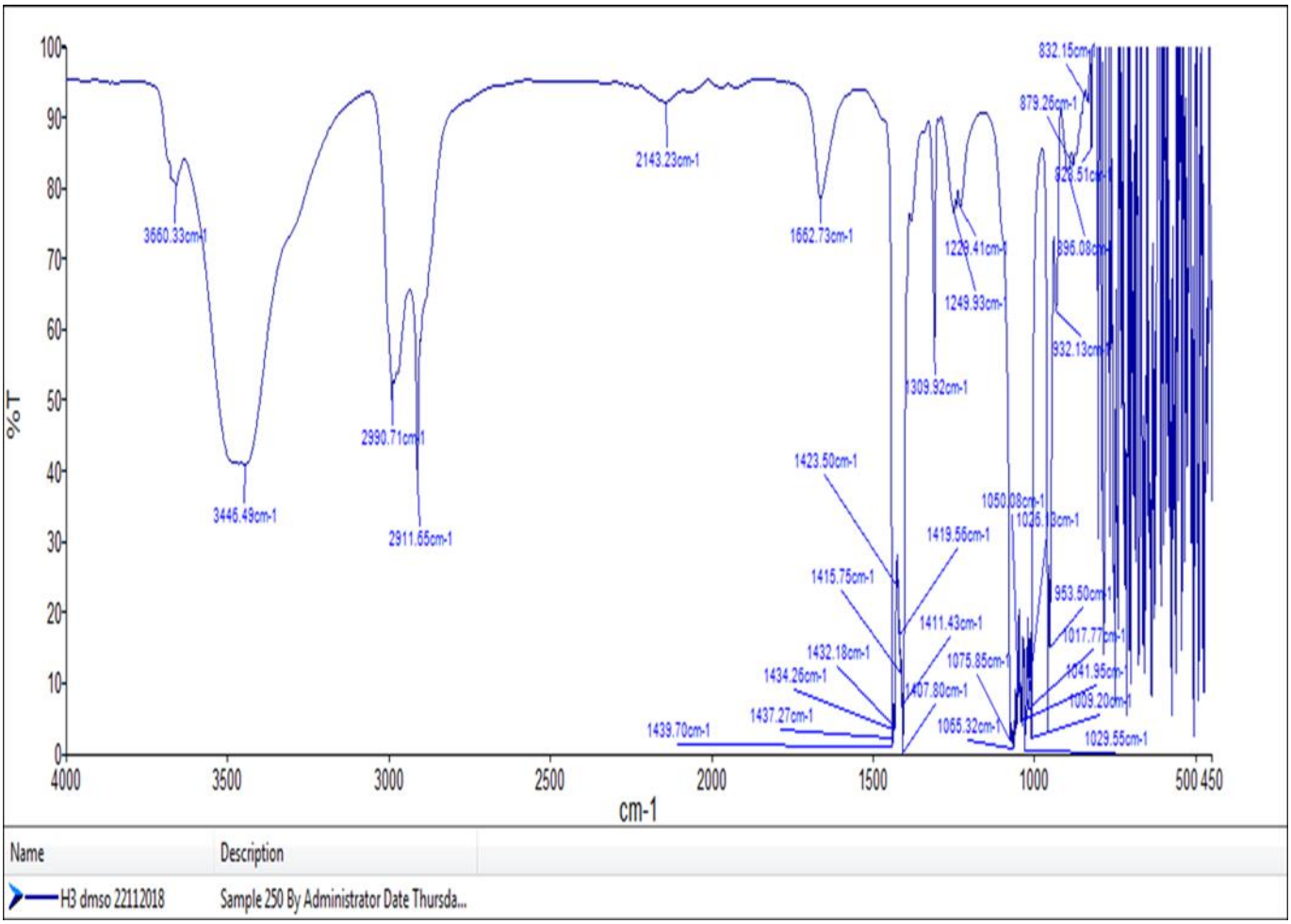
pikleri çıkarıldı. Aromatik halkaların protonlarının kimyasal kayma değerlerinde çok fazla değişiklik olmamıştır. Metanol içinde çözünen molekül ve APPT ile muamele edilmiş molekül için benzer sonuçlar gözlendi.

Şekil 7.14. de Etanolde çözünen numunenin NMR spektrumuna göre belirtilmiş olup, aromatik halkaların protonları 6.5 ppm-8.00 ppm aralığında gözlenmiştir. OH ve NH gruplarının protonları sırasıyla 11.41 ppm ve 10.18 ppm'de gözlendi. APPT, başlık moleküle uygulandıktan sonra, OH ve NH gruplarının zirveleri çıkarıldı ve metil tepe noktasında herhangi bir değişiklik gözlenmedi.

Sonuç olarak;

Tüm NMR spektrumlarına göre, tüm NMR zirveleri başlık molekülüne aittir. APTT'nin tüm spektrumlarda numuneye uygulanmasından sonra NMR spektrumlarında özellikle NH ve OH gruplarının protonlarının gözlenmediği görüldü. Metil grubu protonları ve aromatik halkaların protonları gözlenmedi. Baş molekülünün OH, NH grupları kırıldı.

7.4.H3 FT-IR Spektrumu Bulguları



Şekil 7.16. H3 Molekül FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.7. Molekül H3 DMSO FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

No	cm^{-1}	%T Yoğunluk	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3360.33	M,Medium,Orta,Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
2	3446.49	S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)

Çizelge 7.7. Molekül H3 DMSO FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

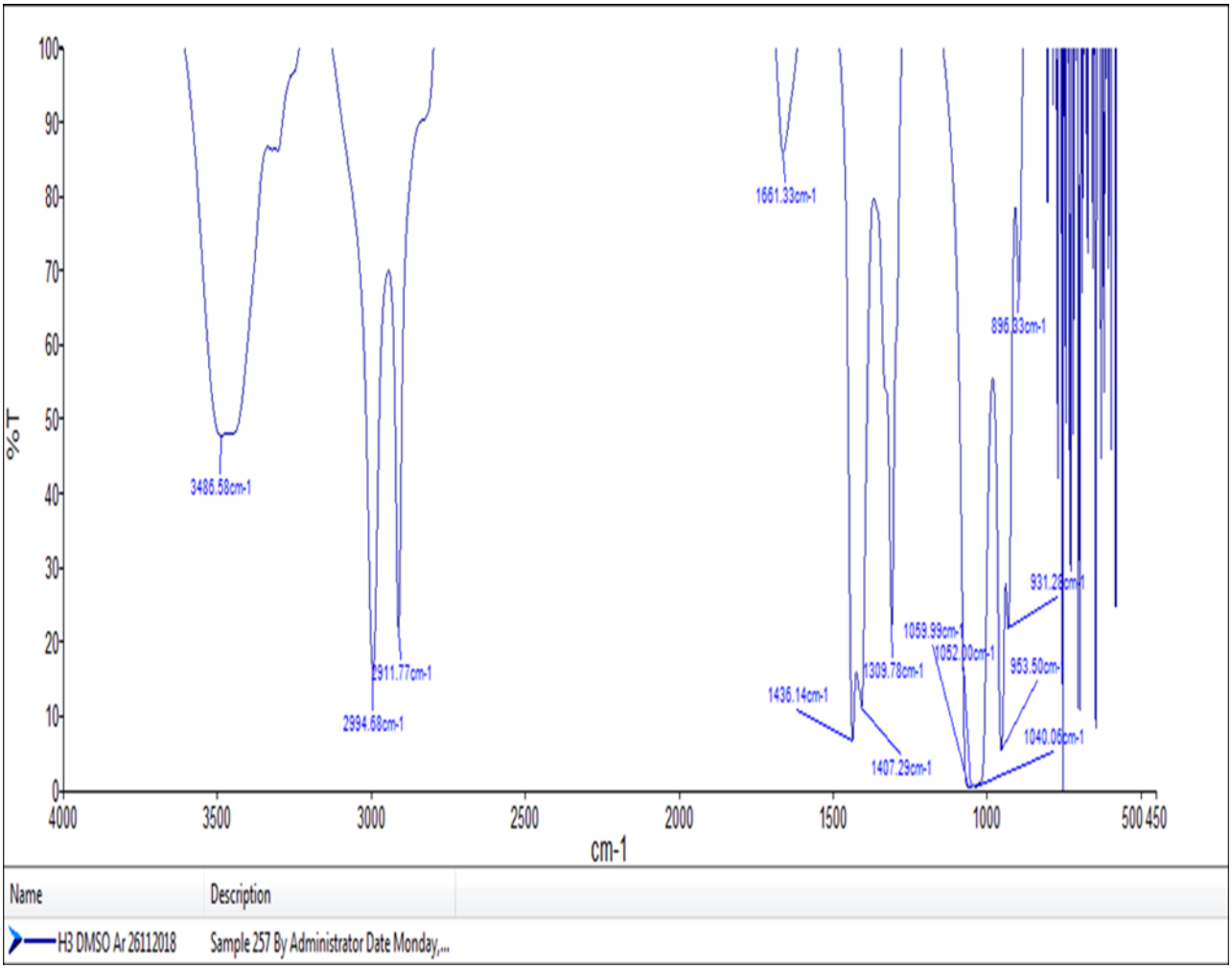
3	2990.71	S,Strong,Güçlü,Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
4	2991.65	S,Strong,Güçlü,Dar	N-H Rocking Modu (Rocking mod)
5	2143.23	M,Medium,Orta,Geniş	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
6	1662.73	M,Medium,Orta,Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
7	1439.70	S,Strong,Güçlü,Sivri	C=N Gerilme Modu(Stretching mod)
8	1437.27	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
9	1434.26	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C- Gerilme Modu(Stretching mod)
10	1432.18	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C=N Gerilme Modu(Stretching mod)
11	1423.50	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), -O-H in Plane Bending mod
12	1415.75	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod), -O-H İn Plane Bending mod
13	1419.56	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
14	1411.43	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.7. Molekül H3 DMSO FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

15	1407.80	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
16	1309.92	M,Medium,Orta,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
17	1249.93	M,Medium,Orta,Dar	-O-H Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
18	1229.41	M,Medium,Orta,Dar	-O-H Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
19	1075.85	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
20	1065.32	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
21	1050.08	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
22	1029.55	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
23	1041.95	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
24	1017.77	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.7. Molekül H3 DMSO FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

25	1009.20	S,Strong,Güçlü,Sivri	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
26	953.50	S,Strong,Güçlü,Sivri	-C-N-N-C- Bending Vibrations, C-H Out Of Plane Bending, C-C Bendings Vibrations mod, C-N Torsion mod
27	932.13	S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
28	896.13	S,Strong,Güçlü,Dar	-C-N-N-C- Bending Vibrations, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
29	823.51	S,Strong,Güçlü,Dar	N-H Out Of Plane Bending mod
30	876.26	S,Strong,Güçlü,Dar	-C-N-N-C- Bending Vibrations, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)



Şekil 7.17. H3 Molekülü DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

Çizelge 7.8. Molekül H3 DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

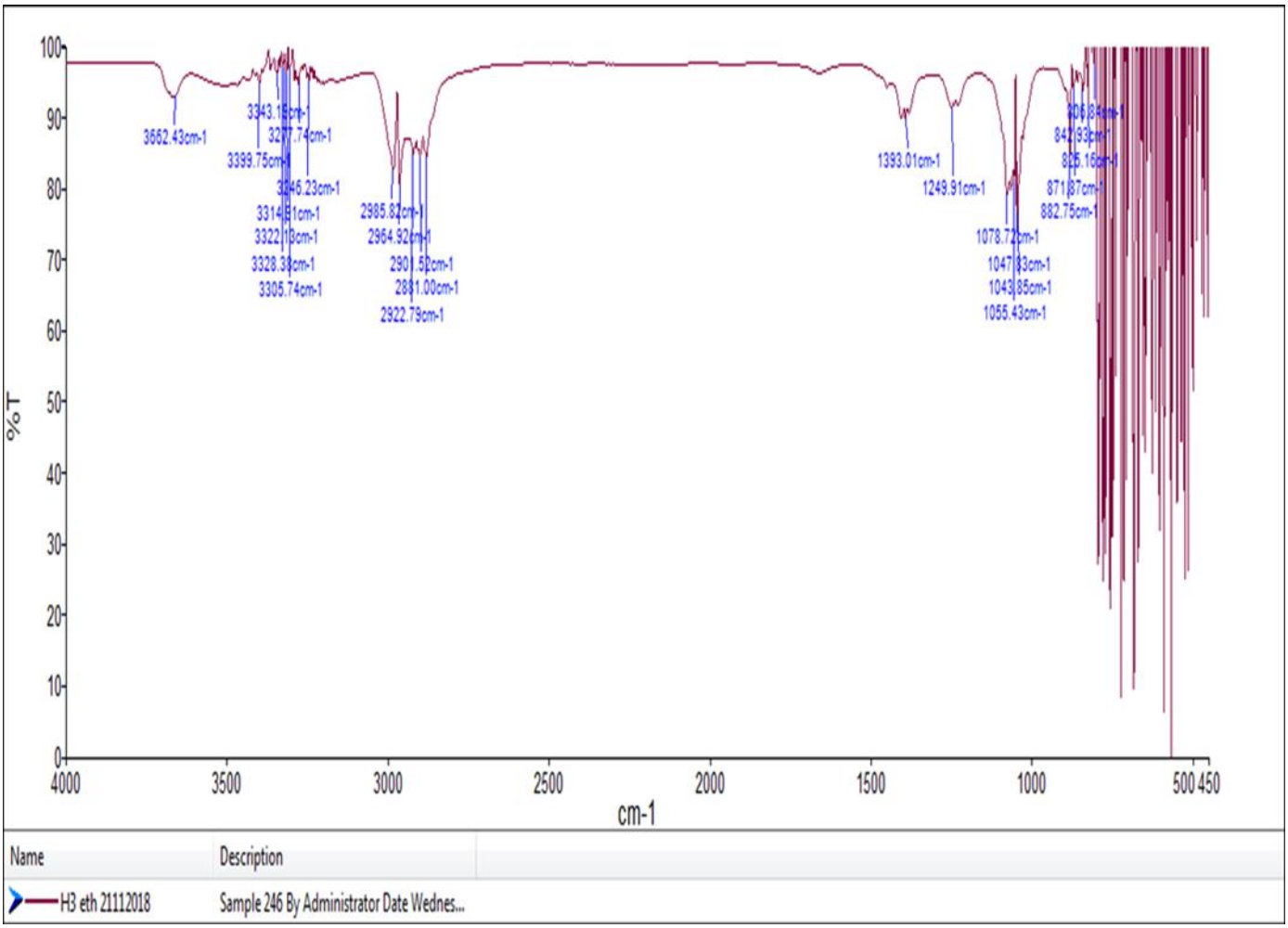
No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3486.58		S,Strong,Güçlü,Geniş	, C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod),

Çizelge 7.8. Molekül H3 DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

2	2994.68		S,Strong,Güçlü,Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), CH3 Gerilmesi Modu (Stretching mod),
3	2911.77		S,Strong,Güçlü,Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod) Ch3 Gerilmesi Modu (Stretching mod),
4	1661.33		M,Medium,Orta,Dar	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
5	1436.14		S,Strong,Güçlü,Dar	C=N- Gerilme Modu(Stretching mod)
6	1407.29		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod), C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
7	1309.78		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
8	1059.99		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.8. Molekül H3 DMSO Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

9	1052.00		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
10	1040.06		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
11	953.50		S,Strong,Güçlü,Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
12	931.28		S,Strong,Güçlü,Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
13	896.33		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu, C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.18. H3 Molekülü ETH FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

Çizelge 7.9. H3 Molekülü ETH FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

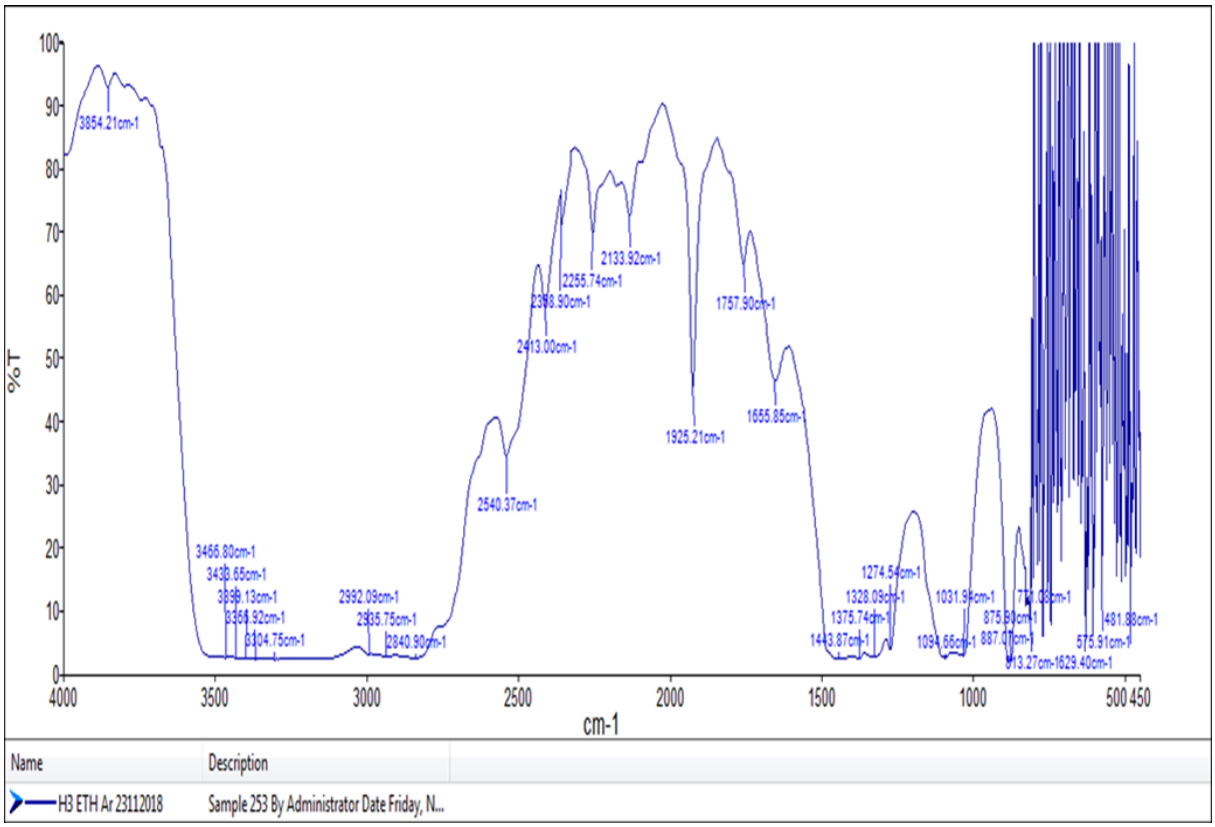
No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık mod tanımlamaları
1	3662.43		M,Medium,Orta,Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
2	3399.75		W,Weak,Zayıf,Dar	C-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)
3	2985.82		S,Strong,Güçlü,Dar	N-H Gerilmesi Modu (Stretching mod)

Çizelge 7.9. H3 Molekülü ETH FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

4	1393.01		M,Medium,Orta,Geniş	-O-H Gerilme Modu(Stretching mod) -N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
5	1249.91		M,Medium,Orta,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
6	1078.72		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
7	1047.83		S,Strong,Güçlü,Dar	C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
8	1043.85		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
9	1055.43		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
10	882.75		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.9. H3 Molekülü ETH FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

11	871.87		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod)
12	825.16		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
13	842.93		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
14	806.84		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.19. H3 Ethanol Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.10. Molekül H3 Eth Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

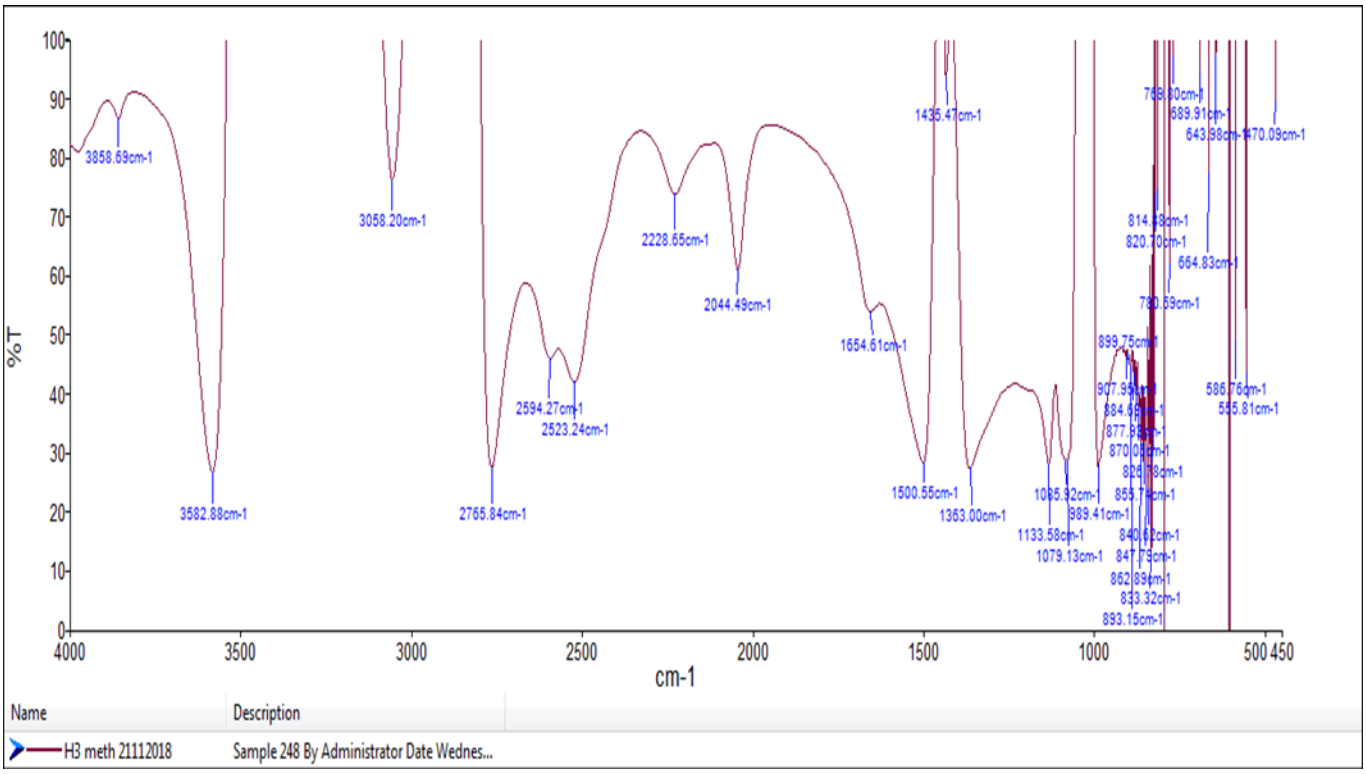
No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık mod tanımlamaları
1	3854.21		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu
2	2540.37		M,Medium,Orta,Geniş	N-H Düzlem İçi Eğilme Modu
3	2413.00		M,Medium,Orta,Geniş	N-H Düzlem İçi Eğilme Modu
4	2358.90		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu

Çizelge 7.10. Molekül H3 Eth Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

5	2255.74		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu
6	2133.92		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu
7	1925.21		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu
8	1757.21		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Titreşim Modu CH_3 Titreşim Modu
9	1655.85		M,Medium,Orta,Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
10	1094.66		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
11	1031.94		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
12	887.01		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.10. Molekül H3 Eth Molekülüne Argon Plazma Uygulanmış Ft-Ir Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

13	875.90		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
14	813.27		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
15	771.08		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
16	629.40		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
17	575.91		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
18	481.88		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations



Şekil 7.20. Molekül H3 Meth FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları

No	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3858.69		M,Medium,Orta, Dar	C-H Stretching Modu O-H Stretching Modu Ch3 Vbration mod
2	3582.88		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Stretching Modu O-H Stretching Modu Ch3 Vbration Modu

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

3	3058.20		M,Medium,Orta, Geniş	C-H Stretching Modu
4	2765.84		S,Strong,Güçlü,Geniş	N-H Stretching Modu Ch3 Vbration Modu
5	2594.27		S,Strong,Güçlü,Geniş	N-H Rocking Modu
6	2523.24		S,Strong,Güçlü,Geniş	N-H Rocking mod
7	2228.65		M,Medium,Orta, Geniş	N-H Stretching Modu
8	2044.49		S,Strong,Güçlü,Geniş	N-H Stretching Modu
9	1654.61		M,Medium,Orta, Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
10	1500.55		S,Strong,Güçlü,Geniş	C=N- Gerilme Modu(Stretching mod)
11	1435.47		M,Medium,Orta, Geniş	-C=N- Gerilme Modu(Stretching mod) O-H Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
12	1363.00		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) O-H Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

13	1133.58		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
14	1058.92		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
15	1079.13		S,Strong,Güçlü,Dar	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
16	907.95		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
17	899.75		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
18	989.41		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

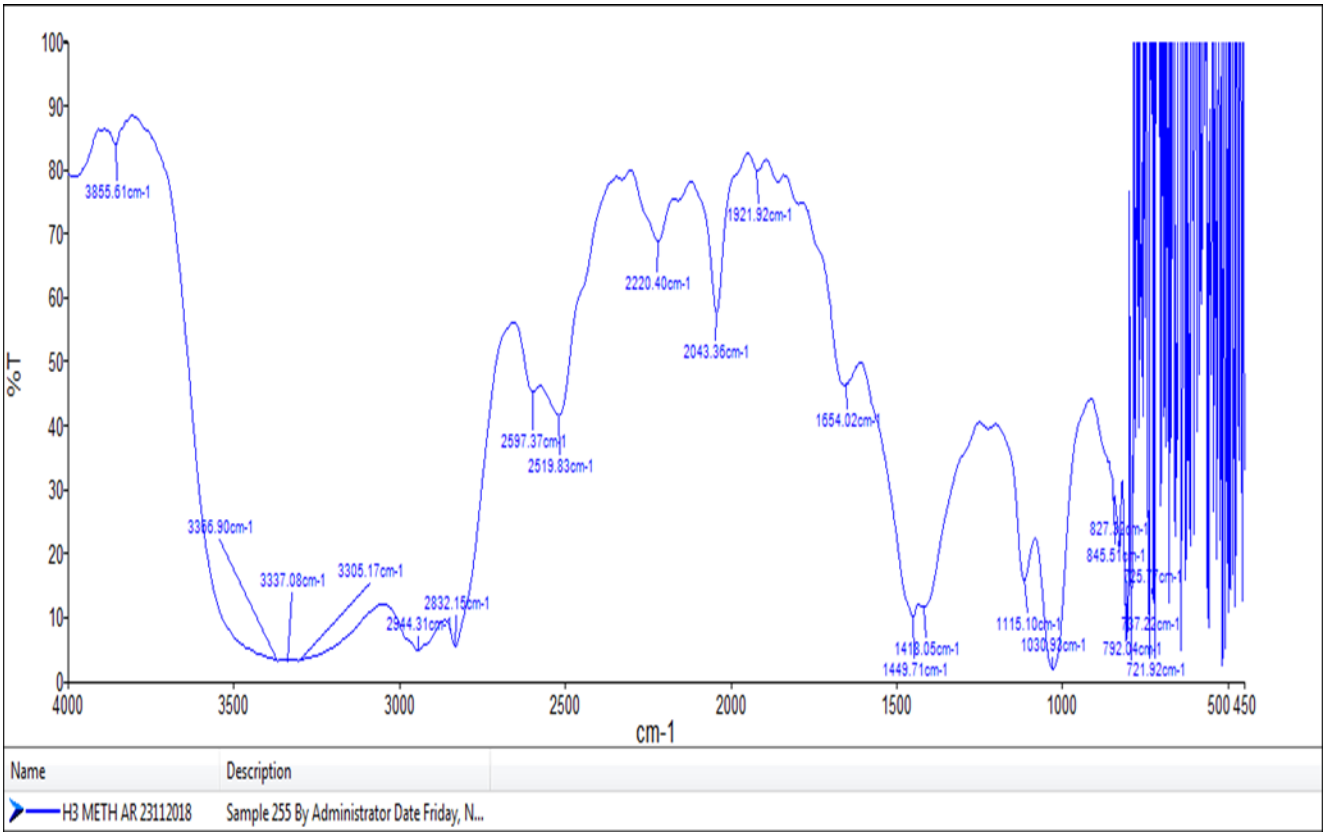
19	884.69		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
20	877.93		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
21	870.06		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
22	893.15		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
23	862.89		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
24	855.74		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

25	847.79		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
26	840.62		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
27	833.32		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
28	826.78		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
29	769.80		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
30	689.91		M,Medium,Orta, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.11. Molekül H3 meth FT-IR deneysel metotlarıyla hesaplanan titreşim frekansları (devam)

31	643.98		M,Medium,Orta, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
32	664.83		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
33	586.76		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
34	555.81		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Torsion Vibrations
35	470.09		M,Medium,Orta, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Torsion Modu (Torsion mod) C-N Torsion Modu(Torsion mod) -C-N-N-C- Torsion Vibrations



Şekil 7.21. H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

Çizelge 7.12. Molekül H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları

no	cm^{-1}	%T	Intensity	Yaklaşık Mod Tanımlamaları
1	3855.61		M,Medium,Orta,Sivri	C-H Gerilme Modu(Stretching mod)
2	3337.08		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)

Çizelge 7.12. Molekül H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

3	2944.31		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
4	2832.15		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
5	2597.37		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
6	2519.83		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
7	2220.40		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
8	2043.36		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
9	1921.92		M,Medium,Orta,Geniş	C-H Gerilme Modu(Stretching mod) CH_3 Gerilme Modu(Stretching mod)
10	1654.02		M,Medium,Orta,Geniş	C=C Gerilme Modu(Stretching mod)
11	1449.71		S,Strong,Güçlü,Geniş	C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
12	1413.05		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu

Çizelge 7.12. Molekül H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

13	1115.10		S,Strong,Güçlü,Geniş	-N=N- Gerilme Modu(Stretching mod) C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) C-H Düzlem İçi Eğilme Modu
14	1030.93		S,Strong,Güçlü,Geniş	
15	845.51		M,Medium,Orta,Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
16	827.39		M,Medium,Orta,Dar	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
17	792.04		S,Strong,Güçlü,Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod) C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
18	737.22		S,Strong,Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations
19	725.70		S,Strong,Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

Çizelge 7.12. Molekül H3 Meth Argon Plazma Uygulanmış FT-IR Deneysel Metotlarıyla Hesaplanan Titreşim Frekansları (devam)

20	721.92		S,Strong,Güçlü, Sivri	C-H Düzlem Dışı Eğilme Modu C-C Gerilmesi Modu (Stretching mod), C-N Gerilme Modu(Stretching mod) -C-N-N-C- Bending Vibrations

FT-IR spektrumları formazan türevleri 2921-3066 cm^{-1} N-H karakteristik absorpsiyon bantları gösterdi,

1586-1638 cm^{-1} aromatik C = C,
1487-1524 cm^{-1} C = N.

Formazanların FT-IR spektrumları, C-C, C = C, -O-H, C = N, N-N, N-H, N = N, C-N, $-CH_3$'ün gerilme titreşimlerinin bazı karakteristik bantlarını içerir.

FT-IR spektrumlarında 3016-3024 cm^{-1}'de gözlenen zayıf bantlar N-H simetrik germe modu.

Literatürde, farklı substituent formazanlar için gözlemlenen bazı N-H germe modları deneysel olarak 3000-3600 cm^{-1} ve 2850-3120 cm^{-1}'dir.

Bu sonuçlar, farklı sübstitüent-formazan şelatlı veya şelatsız yapılara göre bazı bant kaymalarını indirmiştir.

Molekül içi hidrojen bağına sahip şelat halkası, çözelti içinde daha az kararlı göründü. Halka, çözücüler içinde kolayca açıldı ve şelatlı veya şelatsız formlar arasında bir denge ile sonuçlandı.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7. den de görüldüğü gibi H3 molekülünün dmso daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu 2990.49 cm^{-1} ve 2143.23 cm^{-1} ve N-H rocking mod'u görülmektedirler.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün eth daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 2990.49 cm^{-1} ve 2985.8 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün eth daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 2540.2 ve 2413.0 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün meth daki IR spektrumundaki N-H gerilme modu stretching mod 3058.2 cm^{-1} ve 2765.8,2594.2,2523.2 cm^{-1} görülmektedirler.

CH_3;

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO'daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 2994.68 ve2911.77 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 2358.9 ve 2133.9 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'dende görüldüğü gibi H3 molekülünün METH'daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 3858.6, cm^{-1} ve 3582.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki CH_3 gerilme modu stretching mod 3337.08 ve 2944.31 cm^{-1} görülmektedirler.

N-H düzlem içi deformasyon titreşimleri normalde 1500-1630 cm^{-1} bölgesinde ortaya çıkar ve güçlü IR bantlarından oluşur.

IR spektrumunda 1416-1519 cm^{-1}'deki güçlü bantlar, düzlem bükme modunda N-H'ye karşılık gelir.

N-H düzlem dışı bükülme modları, 832-844 cm^{-1}'de IR'da zayıf bir bant olarak gözlenebilir.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO'daki IR spektrumundaki N-H düzlem dışı bükülme modları 876,26 cm^{-1}'de IR'da zayıf bir bant olarak görülebilir.

C-H;

C-H gerilme titreşimlerinin tanımlanmasında karakteristik bölge olarak 2900-3150 cm^{-1} bölgesindeki aromatik gerilme titreşimleri gözlenir.

Bu bölgede bantlar, ikame edicinin doğasından önemli ölçüde etkilenmez.

C-H aromatik germe modları 2971-2977 cm^{-1}'de gözlendi.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'dende görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO'daki IR spektrumundaki C-H gerilme titreşimleri 3360.33 ve 3446.49 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO'daki ır spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3486.58 cm^{-1} ve 2994.68,2911.77 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3662.4 cm^{-1} ve 3399.7 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3854.2 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH'daki IR spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3858.6, cm^{-1} ve 3582.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3337.31 ve 2944.31 cm^{-1} görülmektedirler.

Düzlemde bükülen aromatik C-H 1100-1500 cm^{-1} ve C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri sırasıyla 1000-750 cm^{-1} frekans aralıklarıdır.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri. 923.13 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO'daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri 1040.06 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.18 ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki düzlem içi bükme titreşimleri stretching mod 1078.7 cm^{-1} ve 1047.8 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri stretching mod 971.87 cm^{-1} ve 825.16 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi bükme titreşimleri 1094.6 ve 1031.9 cm^{-1} ve 887.01 cm^{-1} germe modlarında görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH'daki IR spektrumundaki C-H gerilme modu stretching mod 3858.6, cm^{-1} ve 3582.8 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri stretching mod 899.75 cm^{-1} ve 877.93 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi bükülme titreşimleri stretching mod 1449.71 ve 1413.05 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı bükülme titreşimleri stretching mod 845.51 ve 792.04 cm^{-1} görülmektedirler.

Deneysel C = C germe bantları 1561-1601 cm^{-1}'de gözlendi.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO' daki IR spektrumundaki C=C gerilme bandı titreşimleri 1662.73cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C=C gerilme bandı titreşimleri 1661.33 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C=C germe bandı titreşimleri 1655.8 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C=C gerilme bandı titreşimleri 1654.6 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C=C gerilme bandı titreşimleri.1654.02 cm^{-1} görülmektedirler.

Formazan türevi spektrumunun karakteristik bölgesi 1450-1600 cm^{-1}'dir ve bu C = N germe titreşimine atfedilir.

Bu bandın daha düşük veya daha yüksek frekansına kayma şelatlı veya şelatsız yapıyı belirler.

1500-1510 cm^{-1}'deki C = N germe bandı şelat yapılarını gösterir.

1551-1565 cm^{-1}'deki C = N germe bandı şelatsız yapıları gösterir.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C=N gerilme bandı titreşimleri. 1439.70 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C=N gerilme bandları 1436.14 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C=N gerilme bandları titreşimleri 1500.5 cm^{-1} görülmektedir.

N = N germe bandı titreşimleri 1330-1455 cm^{-1}'de gözlendi.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki N=N gerilme bandı titreşimleri. 1437.27 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 3 ve Çizelge 2'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki N=N gerilme bandları 1309.78 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9. 'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki n=n stretching bands vibrations mod 1249.9 ve 1078.7 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki N=N gerilme bandları titreşimleri modu 1094.6 cm^{-1} de ve 1031.9 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki N=N gerilme bandları titreşimleri modu 1363.0, 1133.5 ve 1079.1 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki N=N germe bandı titreşim modları .1413.05 ve 1115.10 cm^{-1} de görülmektedirler.

C-N germe titreşimleri 1382-1266 cm^{-1}'de gözlendi.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N germe titreşimleri. 1309.78 ve 1059.99 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N germe titreşimleri 1094.6 cm^{-1} de ve 1031.9, 887.01, 771.08 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-N germe titreşimleri 1363.0, 1133.5 ve 1079.1 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N germe titreşimleri.1449.71 ve 1030.93 ve 792.04 cm^{-1} de görülmektedirler.

C-H;

Şekil 7.17. ve Çizelge 27.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 DMSO' daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri. 1040.06 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-H düzlemdışı eğilme titreşimleri. 953.50 cm^{-1}de görülmektedir.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlemdışı eğilme titreşimleri. 1043.8 ve 1055.4 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri. 1094.6 cm^{-1} de ve 1031.9, 887.01 ve 771.08 cm^{-1} görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki spektrumundaki C-H düzlemdışı eğilme titreşimleri. 887.01 cm^{-1} de ve 875.90, 813.27, 771.08 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.20 ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri.. 1435.4, 1363.0 ve 1058.9 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.20 ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-H düzlem dışı eğilme titreşimleri 907.95, 899.75 ve 884.69 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri. 1413.05 ve 1115.10 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-H düzlem içi eğilme titreşimleri 1413.05 ve 1115.10 cm^{-1} de görülmektedirler.

C-C

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-C gerilme titreşimleri 931.28 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH'daki IR spektrumundaki C-C gerilme titreşimleri. 882.75 ve 871.87 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.10.'dan da görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-C gerilme titreşimleri 1094.6 cm^{-1} de ve 887.01, 875.90, 629.40 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi h3 molekülünün METH daki IR spektrumundaki C-C gerilme titreşimleri 1079.1, 907.95, 989.41, 870.06 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.21. ve Çizelge 7.12.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-C gerilme titreşimleri 1115.10, 1030.93 ve 792.04 cm^{-1} de görülmektedirler.

-O-H;

Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki -O-H gerilme titreşimleri 1393.0 cm^{-1} görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR -O-H- gerilme titreşimleri 1435.4, ve 1363.0 cm^{-1} görülmektedirler.

C-N-N-C eğilme titreşimleri pikleri 900-1000 cm^{-1}'de gözlendi.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.7.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşim pikleri 896.13 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.17. ve Çizelge 7.8.'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmış h3 molekülünün DMSO daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşim pikleri 896.33 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.19. ve Çizelge 7.9.'dan da görüldüğü gibi H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşim pikleri 806.84 cm^{-1} de görülmektedir.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11'den de görüldüğü gibi argon plazma uygulanmiş H3 molekülünün ETH daki IR spektrumundaki C-N-N-C bükülme titreşim pikleri 887.01 cm^{-1} de görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR –O-H- stretching vibrations. 899.75 cm-1 görülmektedirler.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11.'den de görüldüğü gibi H3 molekülünün METH daki IR –O-H- stretching vibrations. 899.75 cm^{-1} de görülmektedirler.

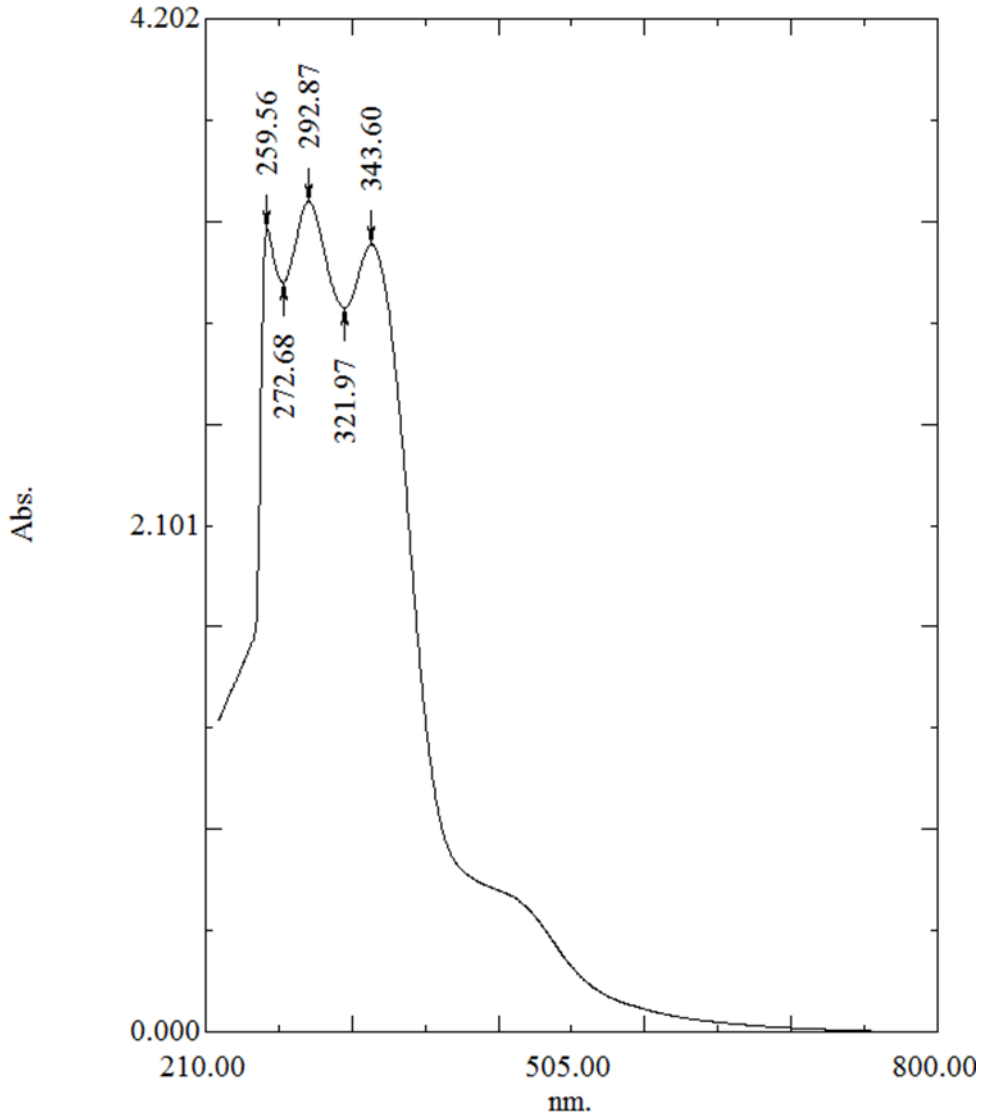
Şekil 7.16. ve Çizelge 7.11 de olan 2143.23 cm^{-1} deki N-H piki ve 1249.93 ve 1229.41 cm^{-1} deki O-H pikleri şekil 7.18. Çizelge 7.8. de yok oldular.

Şekil 7.20 ve Çizelge 7.11 de olan 2765.84 cm^{-1} deki N-H piki ve 1363.00 cm^{-1} deki O-H pikleri şekil 7.21. Çizelge 7.12. de yok oldular.

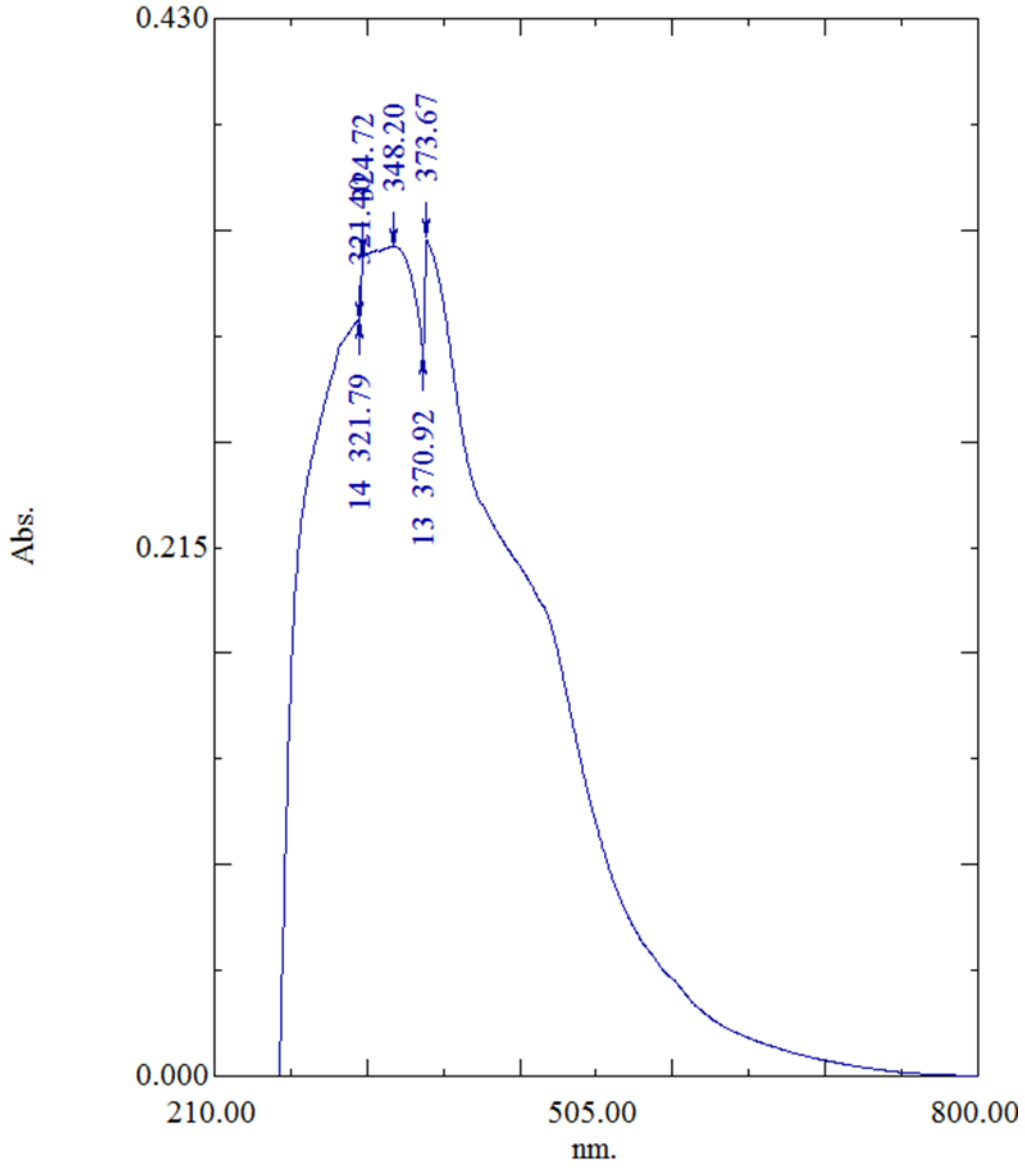
Şekil 7.18. ve Çizelge 7.9. de olan 2985.82 cm^{-1} deki N-H piki 1393.01 cm^{-1} deki O-H pikleri şekil 7.19. Çizelge 7.10 da yok oldular.

Şekil 3.2.'den de görüldüğü gibi 23N-37H bağı kırıldı ve37H bağı koptu. 380-39H bağı kırıldı ve 39H bağı koptu. Molekülün 2 hidrojeni koptu ve yeni bir molekül oluştu. 20C18H4NO molekülü 20C16O4NO yeni bir moleküle dönüştü.

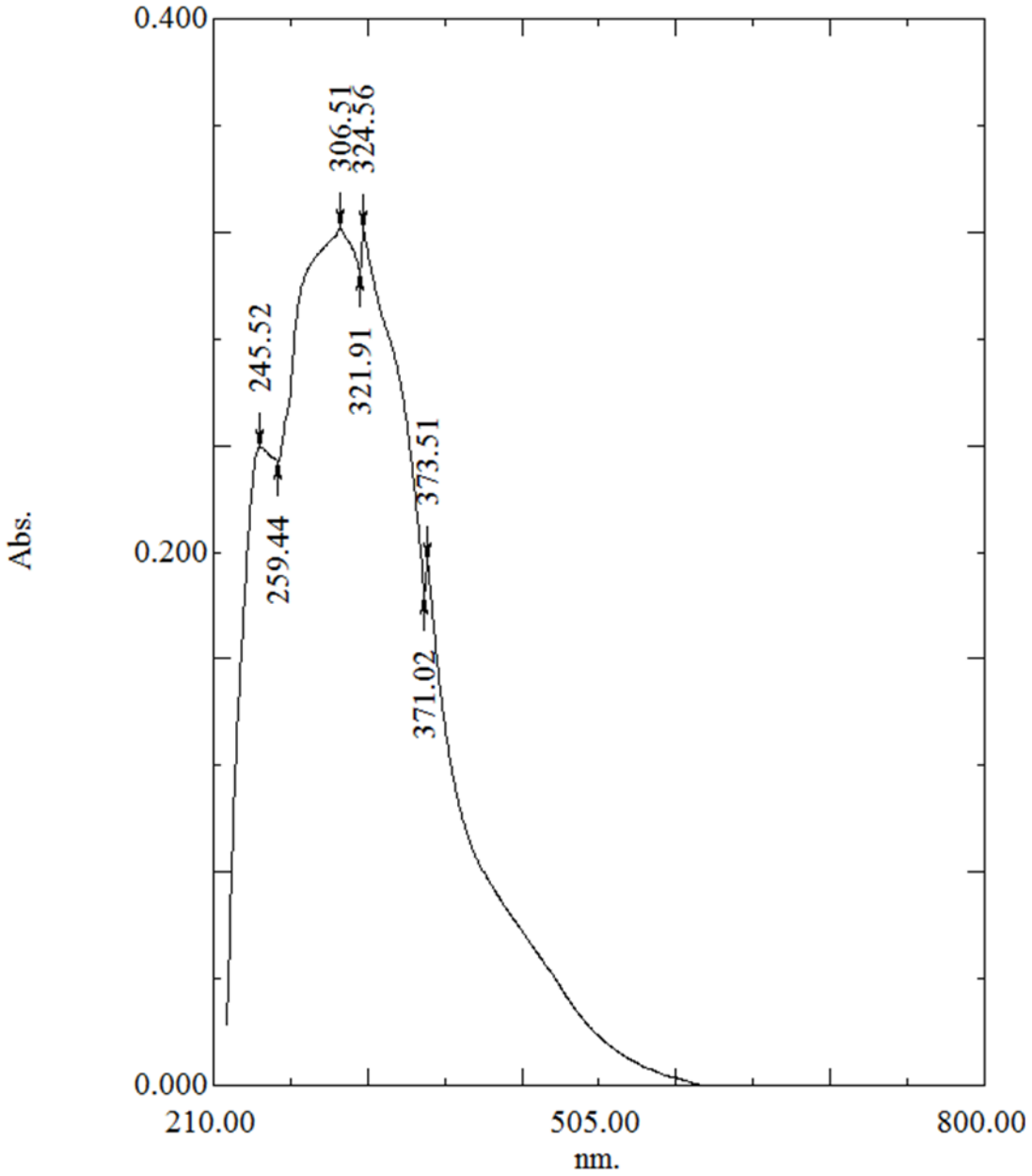
7.5. H3 Molekülü UV Spektrum Bulguları



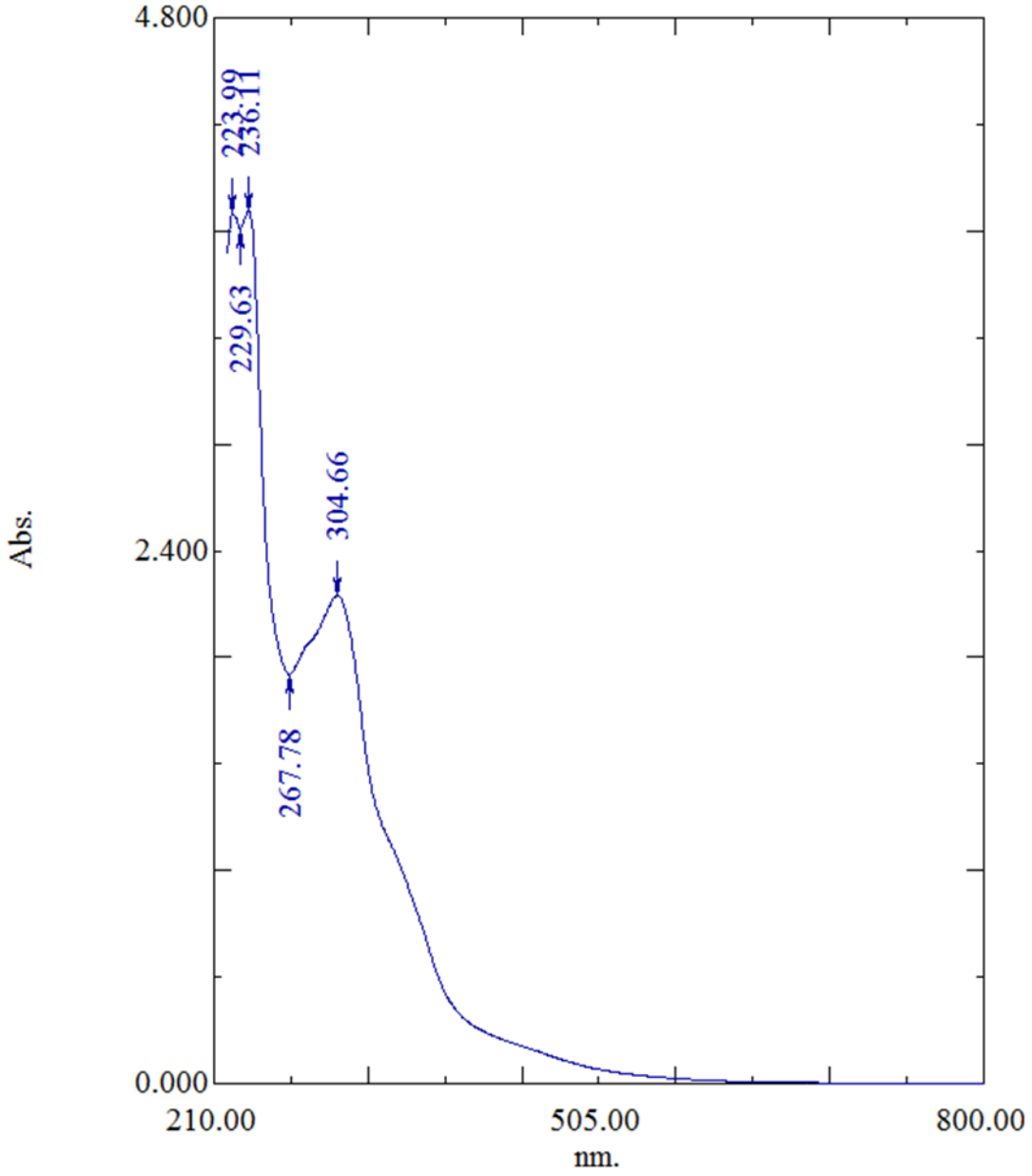
Şekil 7.22. H3 DMSO öncesi Molekülünün UV Spektrumu



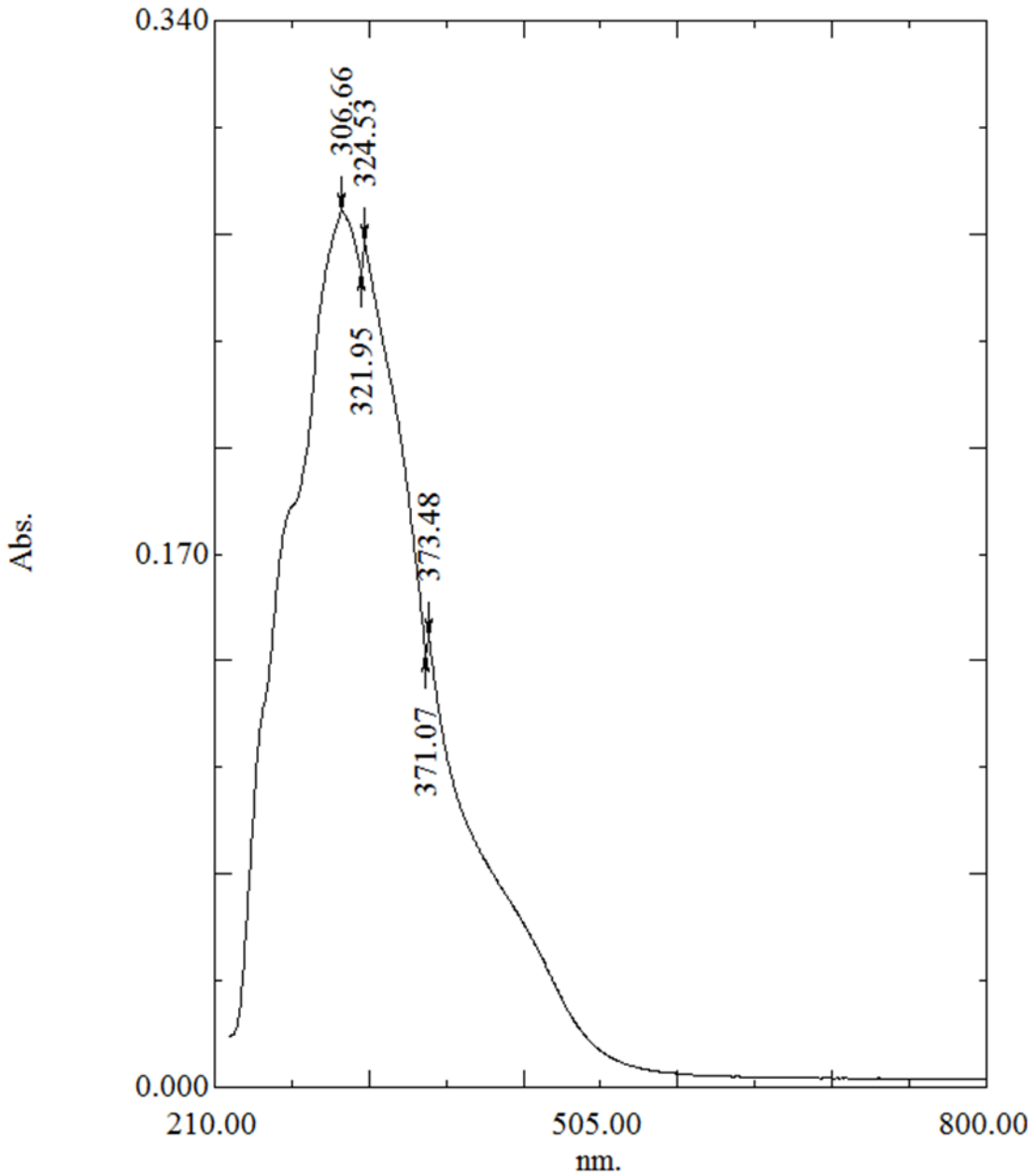
Şekil 7.23. H3+DMSO Sonrası UV Spektrumu



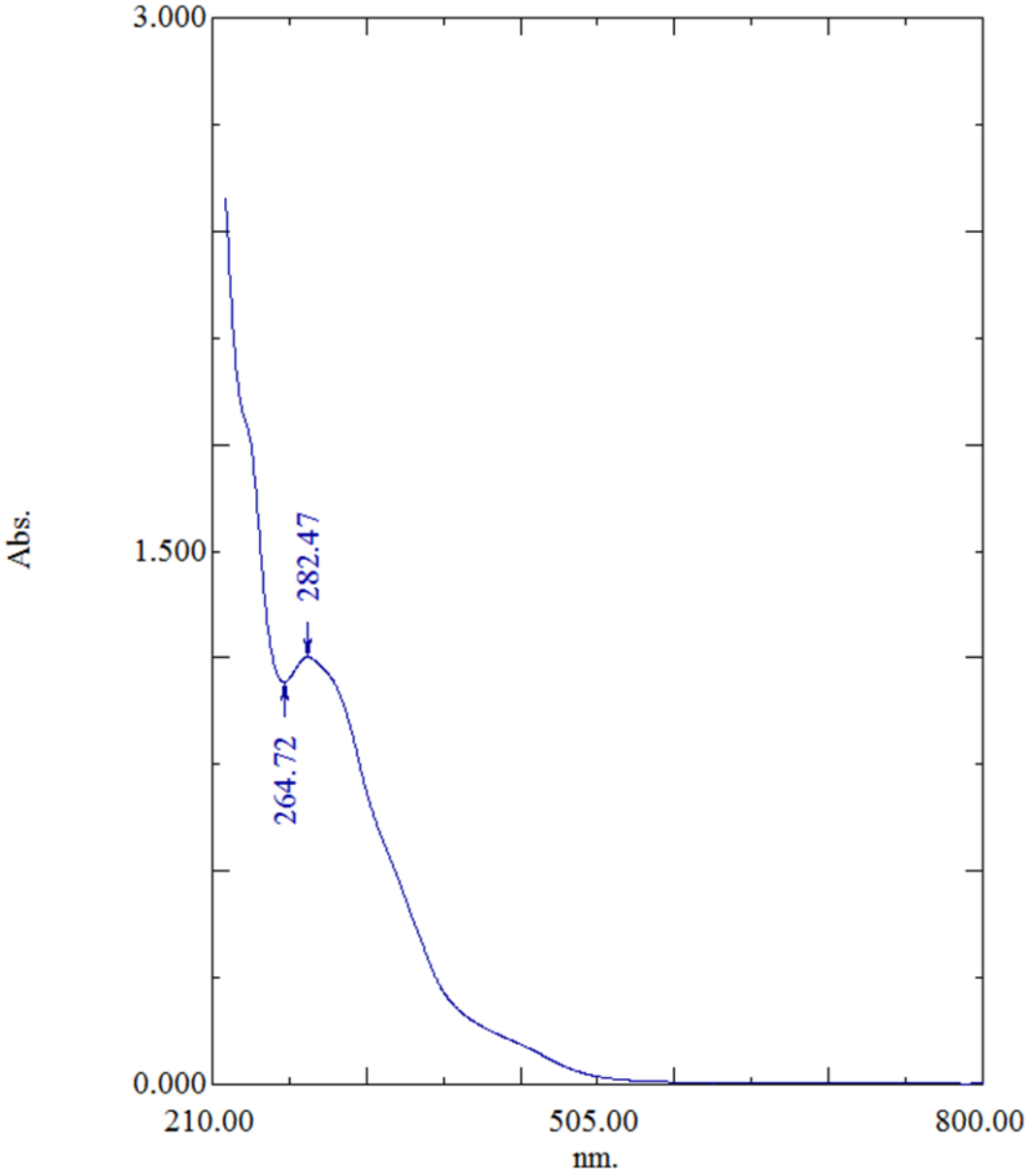
Şekil 7.24**.** H3 Ethanol öncesi UV Spektrumu



Şekil 7.25. H3 Ethanol Sonrası UV Spektrumu



Şekil 7.26. H3 Methanol öncesi UV Spektrumu



Şekil 7.27. H3 Methanol sonrası UV Spektrumu

Şekil 7.22. de 259.56 - 292.87 nm birincil π→π* geçişi, 292.87 - 343.60 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.

Şekil 7.23. de 321.30 - 348.20 nm birincil π→π* geçişi, 348.20 - 373.67 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.

Şekil 7.24. de 245.52-306.51 nm birincil π→π* geçişi, 306.51-324.56 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.

7.25. de 223.99 - 236.11 nm birincil π→π* geçişi, 236.11 - 304.66 nm aralığında ikincil π→π* geçişi gözlenmiştir.

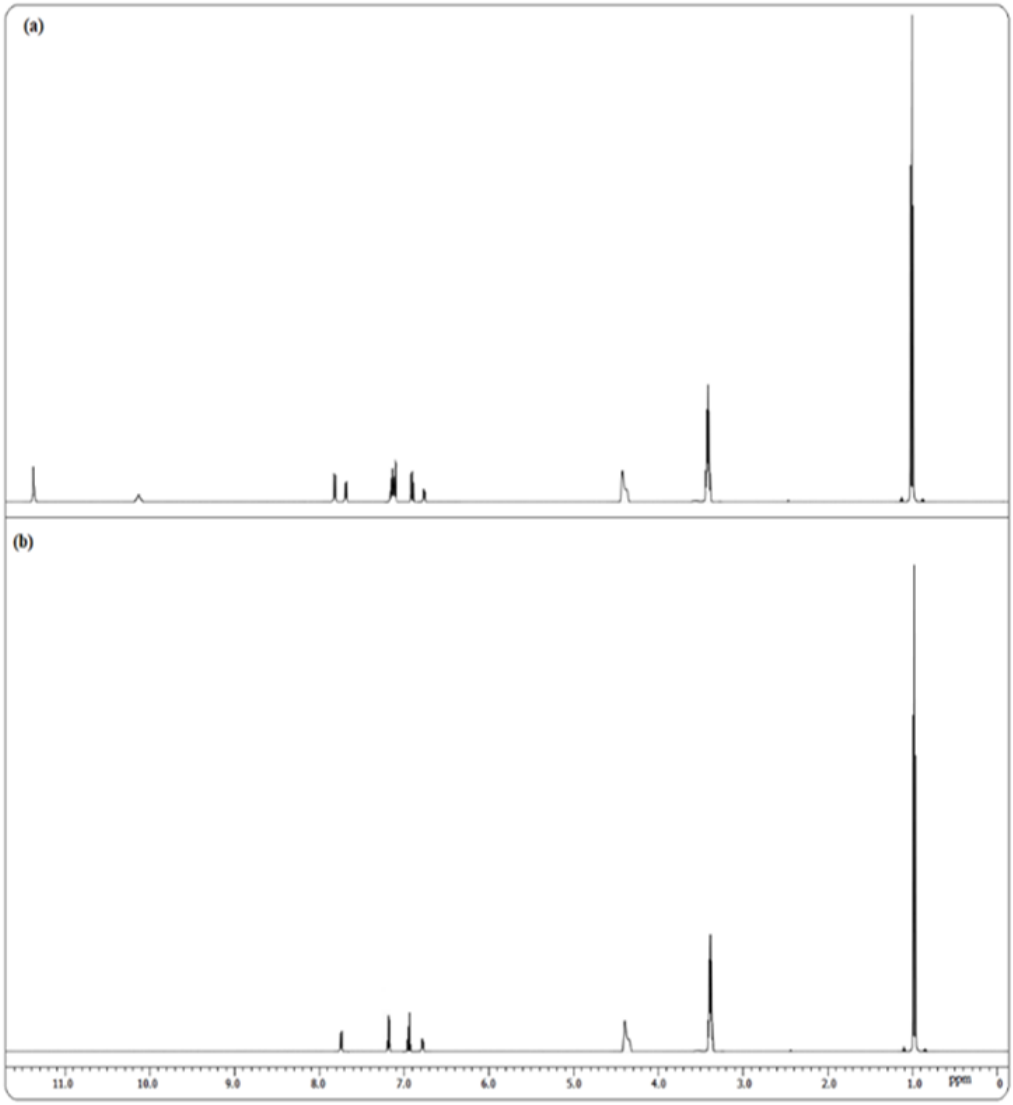
7.26. da 306.66 - 324.53 nm π→π* geçişi gözlenmiştir.

7.27. de 210 - 282.47 nm π→π* geçişi gözlenmiştir.

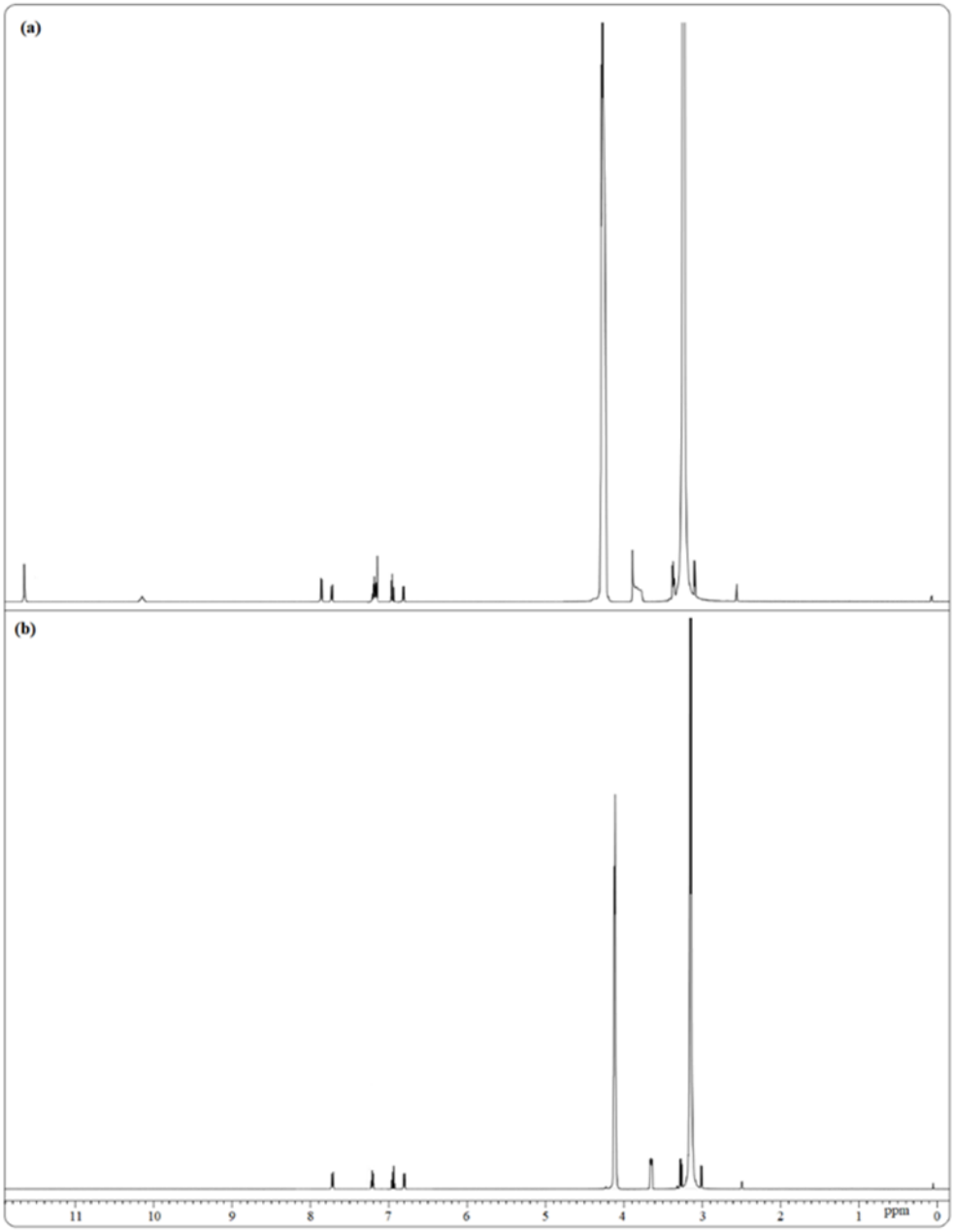
Bu çalışmada çözücünün absorpsiyon spektrumuna etkisini aydınlatmak amacıyla farklı polaritelere sahip çözücüler içinde UV spektrumları alındı. Bu UV spektrumlarında genellikle iki veya üç tane maksimum band değeri olduğu görülmüştür. Genel olarak görülen λ_{max} değerleri 200-400 nm aralığında formazanların yapılarında bulunan konjuge π bağlarından dolayı π→π* elektronik geçişlerine karşılık geldiği belirlendi. Her bir çözücünün farklı λ_{max} değeri vermesi, çözücülerin polaritelerinin etkisiyle açıklanmaktadır. Bu durum, çözücülerin polarlığına bağlı olarak spektrumda daha kısa veya uzun dalga boyuna kaymalar gösterir.

7.6. H3 NMR Spektrumu Bulguları

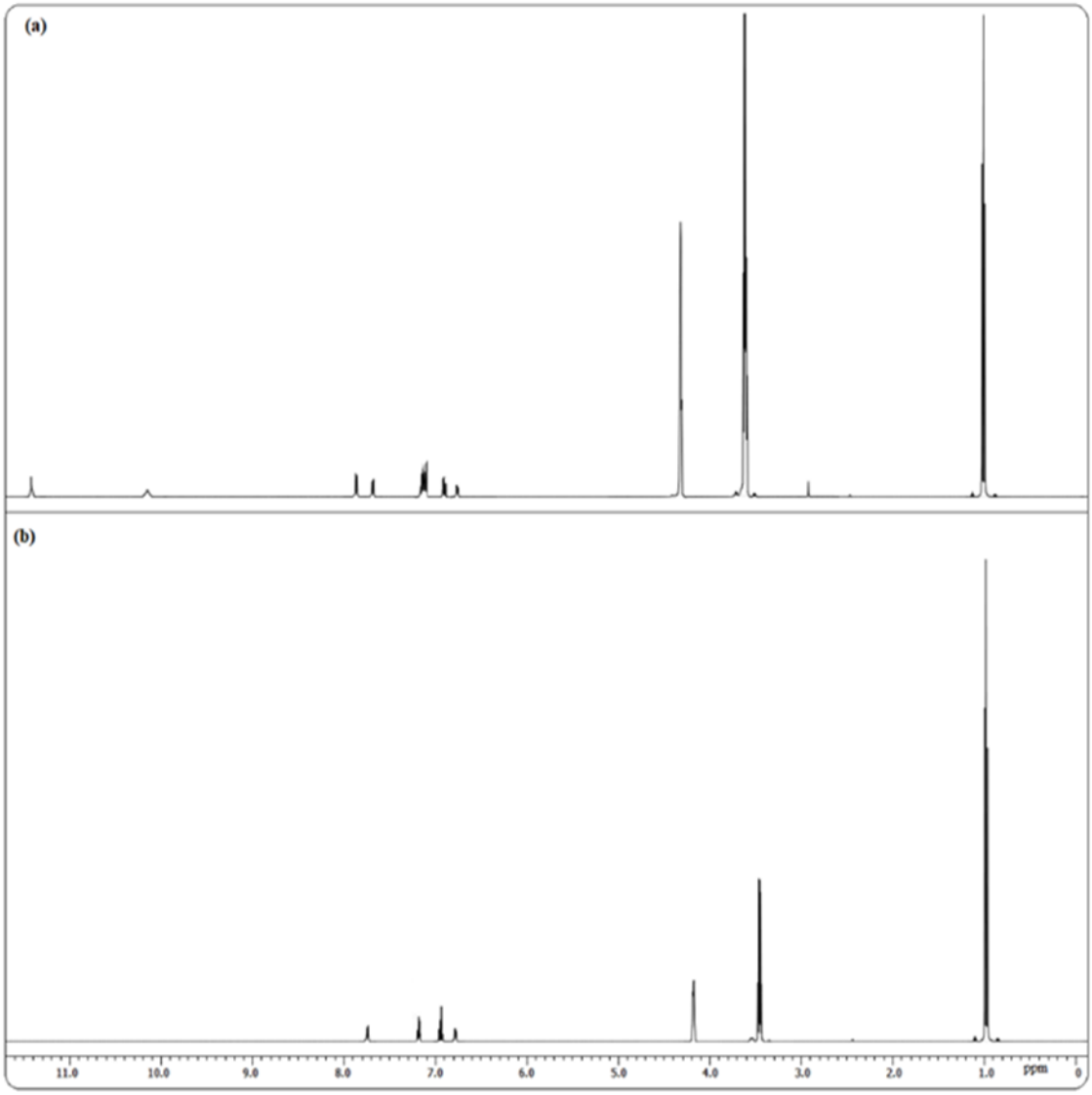
1H NMR spektrumlarının tamamı JEOL ECZ 500R spektrometre ile oda sıcaklığında gerçekleştirildi. Çözücü ve dahili standart olarak döteryum DMSO ve tetra metil silan (TMS) kullanıldı. Ayrıca protonun rezonans frekansı 500.13 MHz olarak ayarlandı.



Şekil 7.28. APTT uygulandıktan sonra DMSO içinde çözünen başlık molekülünün H3 NMR spektrumu



Şekil 5.29. APTT uygulandıktan sonra metanol içinde çözülen başlık molekülünün H3 NMR spektrumu



Şekil 7.30. APTT Uygulandıktan Sonra Ethanol Içinde Çözülen Başlık Molekülünün H3 NMR Spektrumu

Şekil 7.28 de Metanol içinde çözünen numunenin NMR spektrumunda görüldüğü gibi, sırasıyla 11.63, 10.15, 7.86 ve 7.72 ppm'de H37, H39, H35 & H36 ve H8 protonlarının pikleri gözlendi. Ayrıca, H10, H21 & H22 ve H18 & H19 atomlarının çoklu pik olarak 7.25 ppm ila 7.10 ppm aralığında olduğu görülmüştür.

Şekil 7.29.da 6,98 ve 6,81 ppm'de gözlenen pikler, sırasıyla H9 & H20 ve H7 atomlarına aittir. APPT başlık molekülüne uygulandıktan sonra NMR spektrumuna bakıldığında, OH (H37) ve NH (H39) gruplarının pikleri çıkarıldı ve ayrıca nitrojen atomlarına bağlı aromatik halkalar da kayboldu

7.30. da Etanol içinde çözünen numunenin NMR spektrumuna göre belirtilmiş olup, sırasıyla 11.41, 10.13, 7.87 ve 7.66 ppm'de H37, H39, H35 & H36 ve H8 protonlarının pikleri gözlenmiştir. Dahası, H10, H21 & H22 ve H18 & H19 atomlarının çoklu pik olarak 7.2 ppm ila 7.1 ppm aralığında olduğu görüldü. 6.89 ve 6.75 ppm'de gözlemlenen zirveler, sırasıyla H9 & H20 ve H7 atomlarına aittir. APPT başlık molekülüne uygulandıktan sonra NMR spektrumuna bakıldığında, OH (H37) ve NH (H39) gruplarının zirveleri çıkarıldı ve dahası, nitrojen atomlarına bağlı aromatik halkalar da kayboldu.

8. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada çözücünün absorpsiyon spektrumuna etkisini aydınlatmak amacıyla farklı polaritelere sahip çözücüler içinde UV spektrumları alındı. Bu UV spektrumlarında genellikle iki veya üç tane maksimum band değeri olduğu görülmüştür. Genel olarak görülen λ_{max} değerleri 200-400 nm aralığında formazanların yapılarında bulunan konjuge π bağlarından dolayı $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronik geçişlerine karşılık geldiği belirlendi. Her bir çözücünün farklı λ_{max} değeri vermesi, çözücülerin polaritelerinin etkisiyle açıklanmaktadır. Bu durum, çözücülerin polarlığına bağlı olarak spektrumda daha kısa veya uzun dalga boyuna kaymalar gösterir.

IR spektrumları incelendiğinde ise 1500-1561 cm^{-1} aralığında karakteristik olan C=N gerilme bandları ve 3011-3090 cm^{-1} de aralığındaki N-H gerilme titreşimlerinin görülmesi literatürle uyumlu olarak beklendiği gibidir.

Tüm spektrumlara göre, piklerin kimyasal değişimleri benzer olarak görülüyordu. AR APTT'nin numuneye tüm spektrumlarda uygulanmasından sonra, başlık molekülünün azot atomlarına bağlı OH, NH grupları ve aromatik halkaların kırıldığı görülmüştür.

Şekil 7.16. ve Çizelge 7.11 de olan 2143.23 cm^{-1} deki N-H piki ve 1249.93 ve 1229.41 cm^{-1} deki O-H pikleri şekil 7.18. Çizelge 7.8. de yok oldular.

Şekil 7.20. ve Çizelge 7.11 de olan 2765.84 cm^{-1} deki N-H piki ve 1363.00 cm^{-1} deki O-H pikleri Şekil 7.21 Çizelge 7.12 de yok oldular.

Şekil 4 ve Çizelge 3 de olan 2985.82 cm^{-1} deki N-H piki 1393.01 cm^{-1} deki O-H pikleri Şekil 7.19. Çizelge 7.10. da yok oldular.

Şekil 3.2’den de görüldüğü gibi,

23N-37H bağı kırıldı ve37H bağı koptu. 38O-39H bağı kırıldı ve 39H bağı koptu. Molekülün 2 H idrojeni koptu ve yeni bir molekül oluştu. 20C18H4NO molekülü 20C16O4NO yeni bir moleküle dönüştü.

Sonuç olarak yapılan bu çalışmada, incelenen molekül hakkında bilgiler verilmiş ve bu bilgilere dayanarak formazanların tıpta canlılığı test ayıracı olarak kullanılması, kanser ilaçlarının değerlendirilmesi, antiviral, anti-fertile, anti-mikrobiyel vb. aktivitelerine sahip olmasının yanı sıra birçok kullanım alanına yönelik uygulamalar için yararlı olacağı amacıyla formazanın yapısı aydınlatılmıştır. Bahsedilen kullanım alanlarına ve yeni çalışma alanlarına katkı sağlayabileceği düşünülmektedir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

Bellamy, L. J., 1975, The Infrared Spectra of Complex Molecules, Chapman and Hall, London.

Coates, J., 2000, in: R. A. Meyers (Ed.), Interpretation of Infrared Spectra. A Practical Approach, John Wiley and Sons Ltd., Chichester.

Colthup, N. B., Daly, L. H. and Wiberly, S. E., 1990, Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, third ed., Academic Press, Boston.

https://diyot.net/elektromanyetik-dalgalar/ 2020.

Kepez, M., 1986, Heteroaril formazanlar, Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 2, s45-57.

Kohn, W., Sham, L. J., 1965, Self consistenet equations including exchange and correlation effects, Physical Review, 140, A1133-1138.

Mariappan, G., Korim, R., Joshi, N. M., Alam, F., Hazarika, R., Kumar, D., Uriah, T., 2010, Synthesis and biological evaluation of formazan derivatives, Journal of Advanced Pharmaceutical Technology Research, 1, s196-400.

Nineham, A. W., 1955, The Chemistry of formazans and tetrazolium salts, Chemical Reviews, 55, 355-483.

Nineham, A. W., 1955, The chemistry of formazans and tetrazolium salts, Chemical Reviews, 55, s480.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Pavia, D. l., Lampman, G. M. and Kriz G.S., Physics Editor: Vondeling J., 2001, Introduction to Spectroscopy: A guide for student of organic chemistry, Third Edition, Thomson Learning, 579 p.

Pechmann, H. V., 1892, Ueber die Einwirkung von Diazobenzol auf Malonsäure, Chemische Berichte, 25, 2, 3175-3190.

Rao, C. N. R., 1963, Chemical Applications of Infrared Spectroscopy, Academic Press, New York and London.

Roeges, N. P. G., 1994, A Guide to the Complete Interpretation of Infrared Spectra of Organic Structures, Wiley, New York.

Saraç, K., 2017, 4-klorometil-6-etoksikumarin bileşiğinin deneysel ve kuantum kimyasal hesaplamaları, Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi B-Teorik Bilimler, 5, 2, 120-128.

Sherif, O. E., 1997, Effects on the electronic absorption spectra of some substitued diarlyformazans, Monatshefte für Chemie, 128, 981-990.

Skoog, D. A., Holler, F.J. and Nieman, T. A., Çeviri Editörleri: Kılıç E., Köseoğlu F. ve Yılmaz H., 1998, Principles of Instrumental Analysis, Bilim yayıncılık, 849s.

Skoog, D. A., West, D. M.,1980, Principles of Instrumental Analysis, Saunders College, p.769

Stuart, B., January 2008, Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons, Ltd.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Szabo, A. and Ostlund, N. S., 1989, Modern Quantum Chemistry, McGraw-Hill, New York.

Şenöz, H., 2012, The chemistry of formazans and tetrazolium salts, Hacettepe Journal of Biology and Chemistry, 40, 3, 193-301.

Taşal, E., 2018, 4-((2-methoxyphenyl)diazenyl)benzene-1,3-diol molekülünün bazı spektroskopik özelliklerinin incelenmesi, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 22, 2, 998-1006.

Taşal, E., 2018, 2-((4-Hidroksifenil)Diazenil)Benzen-1,3,5-Triol molekülünün titreşim spektroskopisi ve moleküler yapısının konformasyonel kararlılığının ab initio Hartree-Fock ve Density Fonksiyon Teorisi ile incelenmesi, Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 3, 1, s1-19.

Tezcan, H., Can, S., Tezcan, R., 2002, The synthesis and spectral properties determination of 3-substituted phenyl-1,5-diphenylformazans, Dyes and Pigments, 52, 121-127.

Tezcan, H., 2008, Synthesis and spectral properties of some bis-substitutes formazans, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 69, 971-979.

Tezcan, H., Aksu, M. L., 2010, Electrochemical properties of 1-(o-, m-, p-nitrophenyl)-3-(m-nitrophenyl)-5-phenylformazans ans their nickel complexes, Turkish Journal of Chemistry, 34, 465-479.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Türkoğlu, G., 2012, Bazı yeni formazan türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı fiziksel sabitlerinin belirlenmesi, Doktora tezi, Anadolu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 198 .

Türkoğlu, G., Çınar, M. E., 2017, Experimental and computational studies on the absorption properties of novel formazan derivatives, Turkısh Journal of Chemistry, 41, 710-727.

Varsanyi, G., 1979, Assignments of Vibrational Spectra of Seven Hundred Benzene Derivatives, Wiley, New York.

Wang, J., 2000, Analytical Electrochemistry, 2nd Edition, Wiley-VCH, p.236.

Yanık, S., Temmuz 2019, Spektral Çizgilerin Şiddet OranI Metoduyla Düşük Sıcaklıktaki Deşarjlarin Optik Özelliklerinin Incelenmesinde Yeni Bir Yaklaşim Eskişehir Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi Eskişehir

Yüksek, H., Aytemiz, F., Medetalibeyoğlu, H., Bahçeci, Ş., 2016, DFT/B3LYP ve HF metodları kullanılarak 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin teorik özelliklerinin incelenmesi, Nevşehir Bilim ve Teknoloji Dergisi, 5, 2, 44-64.

Zollinger, H., 1991, Color chemistry: Synthesis, properties and applications of organic dyes and pigments, 2nd ed., VCH, Weinheim.

Zollinger, H., 2003, Color Chemistry, Syntheses, Properties, and Applications of Organic Dyes and Pigments, third edn., Wiley-VCH, Weinheim.