

**HgY ve AgY ZEOLİTLERİNE ADENİN VE TİMİN
BAZLARININ ADSORPSİYONUNUN TEORİK ÇALIŞMASI**

**THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF ADENINE
AND THYMINE BASES ON HgY and AgY ZEOLITES**

Özlem KINIK

PROF. DR. FATMA SEVİN DÜZ

Tez Danışmanı

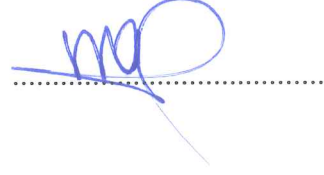
Hacettepe Üniversitesi
Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmenliğinin
Kimya Anabilim Dalı için Öngördüğü
YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.

2018

Özlem KINIK' in hazırladığı “**HgY ve AgY Zeolitlerine Adenin ve Timin Bazlarının Adsorpsiyonunun Teorik Çalışması**” adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından **KİMYA ANABİLİM DALI**' nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

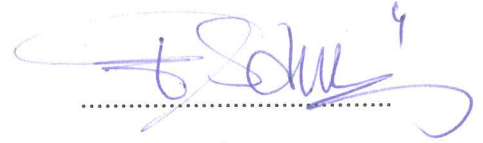
Prof..Dr.Mustafa GÜLLÜ

Başkan



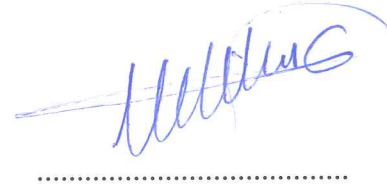
Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ

Danışman



Prof.Dr. Vildan GÜRİSOY

Üye



Prof.Dr. Ali SINAĞ

Üye



Dr. Öğr. Üyesi Hakan KAYI

Üye



Bu tez Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak onaylanmıştır.

Prof.Dr.Menemşe GÜMÜŞDERELİOĞLU

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

YAYINLAMA VE FİKRİ MÜLKİYET HAKLARI BEYANI

Enstitü tarafından onaylanan lisansüstü tezimin / raporunun tamamını veya herhangi bir kısmını, basılı (kağıt) ve elektronik formatta arşivleme ve aşağıda verilen koşullarla kullanıma açma iznini Hacettepe Üniversitesine verdiğimi bildiririm. Bu izinle Üniversiteye verilen kullanım hakları dışındaki tüm fikri mülkiyet haklarım bende kalacak, tezimin tamamının ya da bir bölümünün gelecekteki çalışmalarda (makale, kitap, lisans ve patent vb.) kullanım hakları bana ait olacaktır.

Tezin kendi orijinal çalışmam olduğunu, başkalarının haklarını ihlal etmediğimi ve tezimin tek yetkili sahibi olduğumu beyan ve taahhüt ederim. Tezimde yer alan telif hakkı bulunan ve sahiplerinden yazılı izin alınarak kullanılması zorunlu metinlerin yazılı izin alınarak kullandığımı ve istenildiğinde suretlerini Üniversiteye teslim etmeyi taahhüt ederim.

Yükseköğretim Kurulu tarafından yayınlanan “ Lisansüstü Tezlerin Elektronik Ortamda Toplanması, Düzenlenmesi ve Erişime Açılmasına İlişkin Yönerge” kapsamında tezim aşağıda belirtilen koşullar haricinde YÖK Ulusal Tez Merkezi / H. Ü. Kütüphaneleri Açık Erişim Sisteminde erişime açılır.

- o Enstitü / Fakülte yönetim kurulu kararı ile tezimin erişime açılması mezuniyet tarihimden itibaren 2 yıl ertelenmiştir. ⁽¹⁾
- o Enstitü / Fakülte yönetim kurulunun gerekçeli kararı ile tezimin erişime açılması mezuniyet tarihimden itibaren Ay ertelenmiştir. ⁽²⁾
- o Tezimle ilgili gizlilik kararı verilmiştir. ⁽³⁾

07/09/2018

(İmza)

Öğrencinin Adı SOYADI

ÖZLEM KINIK

“Lisansüstü Tezlerin Elektronik Ortamda Toplanması, Düzenlenmesi ve Erişime Açılmasına İlişkin Yönerge”

- (1) Madde 6. 1. Lisansüstü teze ilgili patent başvurusu yapılması veya patent alma sürecinin devam etmesi durumunda, tez danışmanının önerisi ve enstitü anabilim dalının uygun görüşü üzerine enstitü veya fakülte yönetim kurulu iki yıl süre ile tezin erişime açılmasının ertelenmesine karar verebilir
- (2) Madde 6. 2. Yeni teknik, materyal ve metotların kullanıldığı, henüz makaleye dönüşmemiş veya patent gibi yöntemlerle korunmamış ve internetten paylaşılması durumunda 3. Şahıslara veya kurumlara haksız kazanç imkanı oluşturabilecek bilgi ve bulguları içeren tezler hakkında tez danışmanının önerisi ve enstitü anabilim dalının uygun görüşü üzerine enstitü veya fakülte yönetim kurulunun gerekçeli kararı ile altı ayı aşmamak üzere tezin erişime açılması engellenebilir.
- (3) Madde 7. 1. Ulusal çıkarları veya güvenliği ilgilendiren, emniyet, istihbarat, savunma ve güvenlik, sağlık vb. konulara ilişkin lisansüstü tezlerle ilgili gizlilik kararı, tezin yapıldığı kurum tarafından verilir*. Kurum ve kuruluşlarla yapılan işbirliği protokolü çerçevesinde hazırlanan lisansüstü tezlere ilişkin gizlilik kararı ise, ilgili kurum ve kuruluşun önerisi ile enstitü veya fakültenin uygun görüşü üzerine üniversite yönetim kurulu tarafından verilir. Gizlilik kararı verilen tezler Yükseköğretim Kuruluna bildirilir.
Madde 7. 2. Gizlilik kararı verilen tezler gizlilik süresince enstitü veya fakülte tarafından gizlilik kuralları çerçevesinde muhafaza edilir, gizlilik kararının kaldırılması halinde Tez Otomasyon Sistemine yüklenir.

* Tez danışmanının önerisi ve enstitü anabilim dalının uygun görüşü üzerine enstitü veya fakülte yönetim kurulu tarafından karar verilir.

ETİK

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada,

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- başkalarının eserlerinden yararlanması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversitede veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı

beyan ederim.

07/09/2018

Özlem KINIK

ÖZET

HgY VE AgY ZEOLİTLERİNE ADENİN ve TİMİN BAZLARININ ADSORPSİYONUNUN TEORİK ÇALIŞMASI

Özlem KINIK

Yüksek Lisans, Kimya Bölümü

Tez Danışmanı: Prof. Dr. FATMA SEVİN DÜZ

Eylül 2018, 94 sayfa

Günümüzde metal-aracılı DNA baz çiftlerinin kararlılığı ve DNA baz çiftlerine metallerin katılmasını ya da uzaklaştırılmasının kontrol edilebilmesi, metallo-DNA sensörlerin ve DNA bilgisayar anahtarların oluşturulmasında önemli katkı sağlayabilecek çalışmalardır. Bu tezde, iki farklı alüminyum pozisyonlarına sahip zeolit Y küme modelleri ele alınarak, Hg²⁺ ve Ag⁺ metalleri ile HgY ve AgY zeolitlerinin, yapıları, enerjetikleri ve spektroskopik özellikleri B3LYP/LANL2DZ seviyesinde, DFT metodu kullanarak hesaplanmıştır.

Hg²⁺ ve Ag⁺ li model zeolit ikili baz komplekslerinde, Adenin Timin'e göre tercihlidir. Metal iyonlarına koordine olan baz sayısı arttıkça HOMO-LUMO bant aralığı yaklaşık 1 eV azalmaktadır. HOMO-LUMO bant genişliği en fazla olanlar, her iki metal iyonlarını içeren KM2' ye bağlı A-T kompleksleridir. En düşük sertlik derecesine sahip kompleks KM2-Ag-T-T dir. Hesapsal UV-Vis absorpsiyon sonuçları göstermiştir ki; her iki metal iyonu için, model zeolit kümelerine bazların koordinasyon sayısının artması ile daha uzun dalga boylarında absorpsiyon yapmaktadır (KM1-Hg-A-T; 248 nm, KM1-Ag-A-T; 574 nm).

Anahtar Kelimeler: Zeolit Y, DNA baz çiftleri, DFT, Hg²⁺, Ag⁺

ABSTRACT

THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF ADENINE AND THYMINE BASES ON HgY and AGY ZEOLITES

Özlem KINIK

Master of Science, Department of Chemistry

Supervisor: Prof. Dr. FATMA SEVİN DÜZ

September 2018, 91 pages

Nowadays, the stability of metal-mediated DNA base pairs and their ability to control the incorporation or removal of metals into pairs of DNA bases is an important contribution to the creation of metallo-DNA sensors and DNA computer keys. In this thesis, considering zeolite Y cluster models with two different aluminum positions structures, energetics and spectroscopic properties of HgY and AgY zeolites with Hg²⁺ and Ag⁺ metals were calculated using the DFT method at the level of M06L-LANL2DZ.

Hg²⁺ and Ag⁺ model binary base complex zeolites are preferred Adenine to Thymine. As the number of bases coordinated to metal ions increases, the HOMO-LUMO band gap decreases about 1 eV. A-T coordinations of KM2 which contains both metal ions have the largest HOMO-LUMO band widths. KM2-Ag-T-T complex has the lowest degree of hardness. Computational UV-Vis adsorption results show that; for both metal ions, increasing the number of coordination of bases to model zeolite clusters causes absorptions at longer wave lengths. (eg. KM1-Hg-A-T; 248 nm, KM1-Ag-A-T; 574 nm)

Keywords: Zeolite Y, DNA base pairs, DFT, Hg²⁺, Ag⁺

TEŐEKKÜR

Danışmanlığımı üzerine alırken arkamda durarak bana güvenen, tez çalışmalarım boyunca manevi desteğini hep hissettiğim çok değerli hocam Prof. Dr. Fatma Sevin Düz' e,

Güler yüzünü hiç esirgemeyen, gece gündüz demeden bütün sorularıma cevap veren, bu tezin yazılması sırasında büyük katkısı olan çok değerli arkadaşım Kübra Sarıkavak' a,

Tezi yazmaya başlamamda gerekli ilk adımı atmamı sağlayan Dr. Demet Baykan Özer' e

Maddi, manevi bütün desteğini her zaman üzerimde hissettiğim, varlıklarına şükrettiğim aileme,

Hayatıma girdiği günden beri hayatımı güzelleştiren, bana sabreden, moral kaynağım olan, vazgeçtiğim anda tekrar başlamamı sağlayan yol arkadaşım Mustafa Bolat' a,

Sonsuz teşekkürler...

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT.....	iii
TEŞEKKÜRLER.....	v
İÇİNDEKİLER	iv
TABLOLAR.....	vii
ŞEKİLLER.....	viii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	ix
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER.....	2
2.1 Zeolitler	2
2.1.1 Yapıları ve Genel Özellikleri	2
2.1.2.Zeolit Çeşitleri	4
2.1.2.1. Doğal Zeolitler	4
2.1.2.2.Yapay Zeolitler	5
2.1.3.Zeolit Sentez Yöntemleri	5
2.1.4. Zeolitlerin Kullanım Alanları	6
2.1.4.1.İyon Değişirme	6
2.1.4.2. Katalizör	7
2.1.4.3.Adsorpsiyon	8
2.2. Nükleik Asitler	8
2.2.1 Deoksiribonükleikasit (DNA).....	9
2.2.2 Ribonükleikasit (RNA):.....	11
2.3 Kuantum Kimyasal Metodlar	2
2.3.1 Yöntemler	22
2.3.1.1 Moleküler mekanik(MM).....	22
2.3.1.2 Kuantum mekaniği (QM).....	23
2.3.1.3 Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory, DFT).....	23
2.3.2 Temel Kümeler	24
3. ÇALIŞMA PLANI	15
4. BULGULAR.....	16
4.1 Yapısal Özellikler.....	16
4.1.1 Bağ Uzunluğu	16
4.1.2 Dipol Moment	19

4.2 Elektronik Özellikler	21
4.2.1 Geometri Optimizasyonu	21
4.2.2 Komplekslerin Toplam ve Bağlı Enerjileri	23
4.2.3 Sınır Moleküler Orbital ve Enerjileri	25
4.2.4 Global Reaktivite Tanımlayıcıları	30
4.4 Komplekslerin UV-VIS Spektrumları ve Osilatör Güç	36
5. SONUÇLAR	41
KAYNAKÇA	42
EKLER	46
ÖZGEÇMİŞ	81

TABLULAR

	<u>Sayfa</u>
Tablo 1. Birim hücre başına ortak zeolit bileşimleri	3
Tablo 2. Zeolit sınıfları	6
Tablo 3. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 molekülünün dipol momentleri (D).....	20
Tablo 4. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM2 molekülünün dipol momentleri (D)	20
Tablo 5. Optimize edilmiş KM1 ve KM2 yapıları.....	22
Tablo 6. DNA bazlarının ve zeolit kümelerinin, Hg ²⁺ , Ag ⁺ 'nın ve bunların oluşturduğu komplekslerinin toplam enerjileri (kcal/mol).....	23
Tablo 7. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 molekülünün band aralığı ΔE (eV).....	26
Tablo 8. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM2 molekülünün band aralığı ΔE (eV).....	26
Tablo 9. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin sınır orbital görüntüleri	28
Tablo 10. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin sınır orbital görüntüleri	29
Tablo 11. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 molekülünün kimyasal sertliği	31
Tablo 12. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM2 molekülünün kimyasal sertliği	31
Tablo 13. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 molekülünün kimyasal potansiyel değeri.....	33
Tablo 14. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM2 molekülünün kimyasal potansiyel değeri.....	33
Tablo 15. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM1 molekülünün elektrofilité değeri	35
Tablo 16. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ içeren KM2 molekülünün elektrofilité değeri	35
Tablo 17. KM1-Hg UV Spektrumları	37
Tablo 18. KM2-Hg UV Spektrumları	38
Tablo 19. KM1-Ag UV Spektrumları	39
Tablo 20. KM2-Ag UV Spektrumları	40

ŞEKİLLER

Sayfa

Şekil1. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ iyon aracılımodel zeolite küme modelleri ve Adenin, Timin bazları	1
Şekil 2.Zeolitın ana yapısı	2
Şekil 3.Zeolit yapı birimleri	3
Şekil 4.Zeolittteki Brönsted ve Lewis asit merkezleri.....	7
Şekil 5. Nükleotit Yapısı	9
Şekil 6.Pürin bazları, Pirimidin bazları.....	9
Şekil 7. Hg ²⁺ ve Ag ⁺ iyon aracılı model zeolite küme modelleri ve Adenin, Timin bazları	16
Şekil 8. KM1-Hg-A-T bağ uzunlukları	17
Şekil 9. KM1-Ag-A-T bağ uzunlukları	17
Şekil 10.Bağlı enerji hesaplaması	24
Şekil 11. Bağlı enerji grafiği.....	24

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ SAYFASI

Simgeler

χ : Elektronegativite

η : Kimyasal sertlik

μ : Kimyasal potansiyel

S: Kimyasal yumuşaklık

I: İyonlaşma potansiyeli

A: Elektron afinitesi

ω : Elektrofilite indeksi

f : osilatör güç

D: debye

A°: Angstrom

Kısaltmalar

DNA: deoksiribonükleik asit

RNA: ribonükleik asit

DFT: yoğunluk fonksiyonel teorisi

B3LYP: Becke' nin Lee-Young-Parr ile üç parametrelili hibrit fonksiyonu

LANL2DZ: Los Alamos Ulusal Laboratuvarı çift zeta temel seti

KM1: küme bir

KM2: küme iki

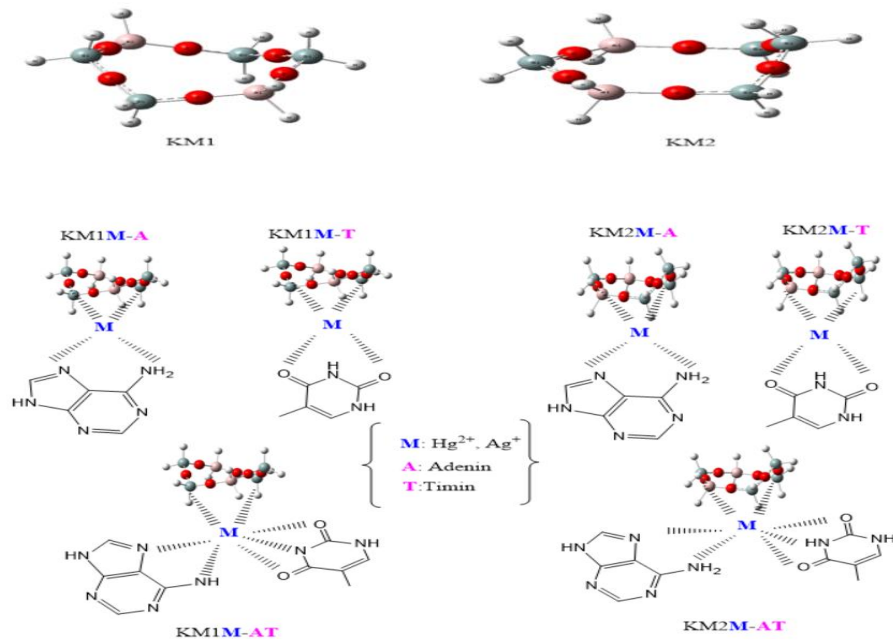
D: debye

1. GİRİŞ

Kristalik mikroporoziteye sahip alüminasilikat kafeslerden oluşan zeolitler primitif hücreler, biyopolimerler ve biyomoleküllerin tasarımı için önemli role sahip yapılardır. X ve Y olarak adlandırılan sentetik zeolitler Milton ve Breck tarafından sentezlenmiştir.¹⁻² Zeolitlerde bulunan Si/Al oranı adsorpsiyon, kataliz, iyon değişimi gibi özelliklerinin belirlenmesinde rol oynamaktadır.

Diğer taraftan nükleik asitler, bütün canlı ve virüslerde bulunan farklı yapılardaki bazları (A= Adenin, T= Timin, G= Guanin, ve C= Sitozin) içeren biyopolimerlerdir. Nükleik asitler genetik bilginin depolanmasını, transferini, kopyalanmasını sağlayan ve en temel gösterimiyle hidrojen bağlı Watson-Crick baz çiftleridir.³

Hidrojen bağları yerine metal koordinasyon bağlarının yer alması, tamamıyla farklı alternatif baz çiftlerini, yani yapay-DNA baz çiftlerini sunmaktadır. Özellikle, metal-aracılı DNA baz çiftlerinin kararlılığı ve DNA baz çiftlerine metallerin katılmasını ya da uzaklaştırılmasının kontrol edilebilmesi, metallo-DNA sensörlerin ve DNA bilgisayar anahtarların oluşturulmasında önemli katkı sağlayabilecek çalışmalardır. Bu tezde, model zeolite kümeleri ile metallo-DNA yapılarının, yani Hg^{2+} ve Ag^+ kationları ile oluşturacakları, HgY-DNA ve AgY-DNA baz çiftlerinin elektronik, yapısal ve spektroskopik özellikleri incelenmiştir.



Şekil 1: Hg^{2+} ve Ag^+ iyon aracılı model zeolite küme modelleri ve Adenin, Timin bazları

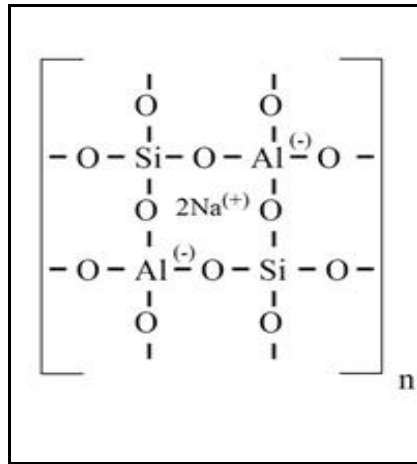
2. GENEL BİLGİLER

2.1. Zeolitler

2.1.1. Yapıları ve Genel Özellikleri

İlk zeolit, 1756 yılında İsveçli mineralojist Axel Fredrik Gronstedt tarafından, bir üfleme borusu alevinde toplanan taşların ısıtılmasıyla bulunmuştur⁴. Sıcak sıvının ve buharın bir köpükte dans ettiğini gözlemlemiş ve bu sırada taşların sanki kaynıyormuş gibi görüldüğünü belirtmiştir. Böylece, Yunanca türetme (zein, kaynar kaynama, lithos, taş) "kaynayan kayalar" anlamına gelen "zeolit" adı ortaya çıkmıştır⁵.

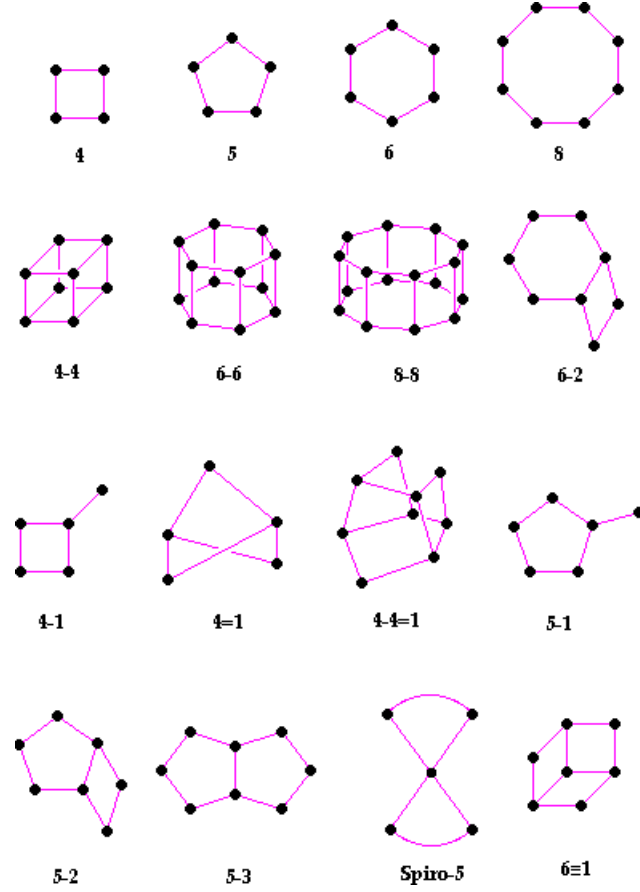
Zeolitler, doğal olarak meydana gelen hidratlanmış alüminosilikatlardır. "Tektosilikatlar" olarak bilinen mineral sınıfına aittirler⁶. Zeolitler, SiO_4 ve AlO_4 tetrahedra yapılarıyla üç boyutlu iskelet yapılarından oluşurlar. Alüminyum iyonunun yeterince küçük olmasından dolayı tetrahedra yapıdaki dört oksijen atomunun merkezine yerleşir ve Si^{4+} ile Al^{3+} eş zamanlı yer değiştirmesiyle kafes içerisinde negatif yük oluşturur. Bu negatif yükler değiştirilebilir katyonlar (sodyum, potasyum veya kalsiyum) ile net yük dengeliği sağlamaktadırlar. Katyonlar Pb^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} , Mn^{2+} çözeltilerindeki bu iyonlarla yer değiştirirler⁷.



Şekil 2. Zeolitin ana yapısı

Zeolitler gözenek çaplarına ve halka boyutuna göre sınıflandırılırlar. Alüminosilikat zeolitler arasında 3Å, 4Å, 5Å ve erionitin 8 adet halka içerenleri 3-5Å aralığında gözenek çapları vardır. 10'lu ve 8'li halka içeren ZSM-5 ve mordenit sırasıyla 3-5Å aralığında gözenek çapına sahiptirler. Öte yandan 12 halkalı faujasite X ve Y 7-8Å' dan daha büyük gözenek çapına sahiptirler. Alüminofosfatlar ise önemli ölçüde geniş gözenek çapına

sahiptir. 12'li halka içeren alüminofosfatlar 10 Å gözenek çapına sahipken, 18'li halka içeren alüminofosfatların gözenek çapı 10-15 Å aralığındadır.⁸



Şekil 3. Zeolit yapı birimleri

Tablo 1. Birim Hücre Başına Ortak Zeolit Bileşimleri

Zeolit Türü	Na	AlO ₂	SiO ₂	H ₂ O
Zeolit A	12	12	12	27
Zeolit X	86	86	106	264
Zeolit Y	56	56	136	264
ZSM-5	9	9	87	16
Mordenit	8	8	40	24

Zeolitler, suyun türüne ve hatta diğer sıvıların türüne bağlı olarak, kendi hacminin yarısının büyük bir oranını emme yeteneği olmasından dolayı önemli bir özelliğine dair önemli bir ipucu yapılan çalışmalarla sağlamıştır. Katyon değişimi ve mikro gözenekli

kapasitenin kombinasyonu, zeolitlere artiküler özellikler kazandırır ve bunlara zengin uygulamalar sunar. Yaklaşık 150 civarında doğal zeolitin olduğu bilinmekte olup çok sayıda da yapay olarak sentezlenmiştir⁹. Sentetik zeolitler, spesifik görevleri seçici olarak gerçekleştirmek üzere ve doğal olarak oluşan muadillerinde daha homojen bir bileşim ile tasarlanabilmektedir.

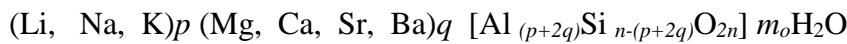
2.1.2 Zeolit Çeşitleri

2.1.2.1 Doğal Zeolitler

Doğal zeolitler volkanizma kuvvetleri tarafından üretilir ve genellikle Kafkaslar ve Balkanlar gibi dağlık bölgelerle bulunurken, volkanik bir geçmişi olan Meksika'nın Körfezi çevresinde (Küba da dahil olmak üzere) Himalayalar'da, İsviçre ve ABD'de de yer almaktadır¹⁰. Ergimiş magma, volkanik bir havalandırma deliğinden kaçabilir, oluşan volkanik kayalar (katılaştırılmış lav) ve kül tabakaları, alkali özellikteki göl ile temasa girip reaksiyona girerlerse, kristalleşerek bir zeolit haline dönüşebilir.

Doğada bulunan zeolitler genellikle, yıllar boyunca bazaltik kayaların küçük boşluklarında kristaller olarak ya da volkanik tüflerin veya camların tuzlu su ile etkileşime girmesiyle oluşmuşlardır. Bu doğal zeolitler, nispeten düşük sıcaklıkta alkali çöller, göl tortuları, kül havuzları ve deniz çökelleri gibi bir dizi jeolojik doğal koşullar altında oluşmaktadır. Ayrıca dağlık bölgelerdeki jeolojik olarak genç metamorfik kayalarda kristalleşirler. 1950' lerde jeologlar, çoğunlukla zeolitik malzemelerden oluşan milyon tonluk volkanik tüf tortullarının nadir olmadığını keşfetti¹¹. Bu zeolitik kristaller, ısıtılarak uzaklaştırılabilen su ile yapılarındaki gözenekler doldurulur. Isıtılarak kurutulan zeolitlerin yaklaşık ~ 2-10Å büyüklüğündeki düzenli boşlukları petek benzeri yapılara benzemektedir¹².

Doğal zeolitlerin en genel formülü aşağıda açıklanmıştır;



bu formülde "p" tek değerli metal iyonu sayısı "q" iki değerli metal iyonlarının sayısı "n" oksijen atomunun sayısının yarısı ve "m_o", su moleküllerinin sayısının yarısını ifade etmektedir¹³.

Klinoptilolit (Clino zeolitler olarak da bilinir) ve Kabazit gibi doğal zeolitler, su arıtma, toprak ıslahı için suni gübre uygulamaları ve bitki yetiştirme sürecinde minerallerin daha iyi tutunmasını sağlama gibi alanlarda kullanılmaktadır. Klinoptilolit, daha yüksek asit

dirençli silika (Si / Al = 1-5) içeriği nedeniyle tarımda, toprak ıslahında ve yem katkı maddelerinde geniş kullanım alanına sahiptirler¹⁷. Bununla birlikte, bu tür zeolitler diğer mineraller (örn., Fe²⁺, SO₄²⁻, kuvars, diğer zeolitler ve amorf cam) tarafından kirletilmekte ve bu nedenle, tekdüzelik ve saflığın gerekli olduğu bazı önemli ticari uygulamalar için uygun olmayabilirler¹⁴.

2.1.2.2 Yapay Zeolitler

Y zeolitinin ticari sentezi, 1964'de Breck tarafından, A ve X tiplerinin ilk sanayi üretiminden sonra Milton tarafından gerçekleştirilmiştir¹⁵. Zeolit NaY, tip X alüminosilikat çerçevesi ile topolojik olarak benzerlik taşımaktadır. Bütün bu alüminosilikatların kübik birim hücresi 192 (Si, Al)O₄ tetrahedronları içerir. Y zeoliti, 4 endüstriyel FCC katalizörünün ana bileşeni olarak, petrokimyasal proseslerde çevre dostu ve aşındırıcı olmayan özelliklerinden dolayı yaygın bir şekilde kullanılmıştır¹⁶. Protonik formunun, hidrokarbonların katalitik parçalanması için önemli bir aktif bileşen olduğu bulunmuştur. Geçmiş yıllar boyunca, Y zeolitlerinin yapısal özelliklerini ve buna karşılık gelen performansını anlamak için büyük ilerleme kaydedilmiştir. Diğer parametreler arasında Si/Al oranının zeolit yapıları ve özellikleri üzerine büyük etkisi olduğu rapor edilmiştir¹⁷. Liu ve grubu 4, 5-6, 4 Si/Al oranlarına sahip yüksek silikonlu Y zeoliti sentezlemiş ve sentezlenen zeolitin yüksek N₂ adsorpsiyonu ve BET yüzey alanı gösterdiği sonucuna varılmıştır¹⁸. Namuangruk ve arkadaşlar doymamış hidrokarbonlar üzerindeki çerçeve yapısının etkisini incelemiş ve adsorpsiyon performansının özünün Bronsted asit bölgesi ile C = C bağları arasındaki etkileşim olduğunu belirtmiştir¹⁹.

2.1.3. Zeolit Sentez Yöntemleri

Zeolitler, kimyasal proseslerle sentezlenirler. Bu yüzden kafes yapıları, gözenek büyüklükleri bakımından doğal zeolitler ile karşılaştırıldığında daha düzgün ve saflık dereceleri yüksektir. Sentetik zeolitlerin sentezi için kullanılan başlıca hammaddeler, silika ve alümina bakımından zengin saf kimyasallar, yeryüzünde bulunan mineraller veya endüstrinin yan ürünleri olabilir. Uçucu kül, bol miktarda ve ucuz olarak temin edilebilen endüstriyel yan ürün olup, silika ve alümina içeren mineraller açısından zengin olduğundan dolayı sentetik zeolitlerin sentezi için alternatif bir malzeme olabilmektedir²⁰. Oluşan zeolitlerin tipi sıcaklık, basınç, reaktif çözeltilerinin konsantrasyonu, pH, aktivasyon ve yaşlanma süreci, hammaddelerin SiO₂ ve Al₂O₃ içeriklerine bağlı olarak değişmektedir²¹. Zeolitler uçucu kül içerisindeki Si/Al oranına bağlı olarak " düşük silika

zeolitleri " , "orta silika zeolitleri ve "yüksek silika zeolitleri " olmak üzere Tablo 2' de sınıflandırılmaktadır.

Tablo 2. Zeolit sınıfları

Zeolit Sınıfları	Si/Al molar oranı	Bazı ortak mineral isimleri ve bunların kafes kodları
Düşük Silika	≤ 2	Analcime (ANA), Cancrinite (CAN), Na-X (FAU), Natrolite (NAT), Phillipsite(PHI), Sodalite (SOD)
Orta Silika	2-5	Chabazite (CHA), Faujasite (FAU), Mordenite (MOR), Na-Y (FAU)
Yüksek Silika	>5	ZSM-5(MFI), Zeolite- β (BEA)

Genel olarak, sentetik zeolitler doğal zeolitlerine göre bazı önemli avantajlara sahiptir. A, X, Y, P ve Na-P1 tipi zeolitler, doğal zeolitlerden daha geniş bir endüstriyel uygulama alanına sahip uçucu külden sentezlenen iyi bilinen sentetik zeolitlerdir ²².

2.1.4. Zeolitlerin Kullanım Alanları

2.1.4.1. İyon Değişirme

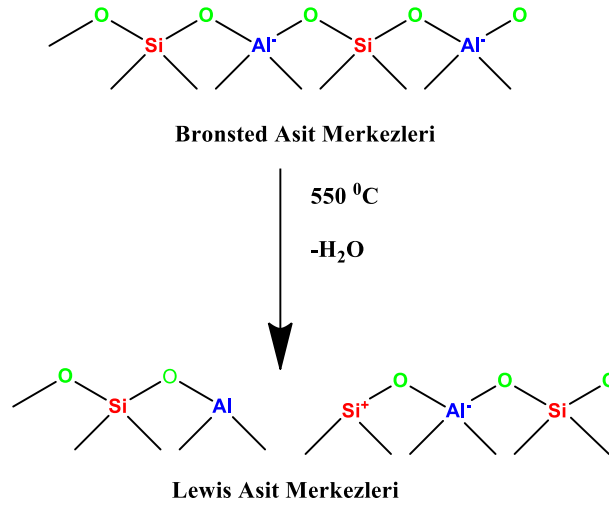
Zeolitin bulunduğu sulu ortam içerisinde dengede olduğunu varsayarsak, iyon değişirme uygulamalarında üç ana özellik önem kazanmaktadır: bunlar değişim kinetiği, iyon değişirme kapasitesi ve katyon seçiciliğidir. Doğal zeolitler, yüksek iyon değişirme kapasitesine ve seçiciliğe sahip olan ve doğal çevre ile uyum gösteren en önemli inorganik katyon değiştiricilerdir²³. Zeolit iyon değişirme özelliğinden dolayı endüstriyel atık sulardaki istenmeyen ağır metallerin uzaklaştırılmasında kullanılmaktadır. Doğal zeolitlerin ilk uygulama alanlarından biri Cs⁺ ve Sr²⁺ radyoizotoplarının arındırılması ve uzaklaştırılmasıdır²⁴.

Zeolitler ve zeolit esaslı maddeler, zehirli maddelerin ortamdan uzaklaştırılması ve zehirli atık oluşumundan sonra toksik döküntülerin temizlenmesi için iyon değiştirici olarak kullanılabilirler. Nükleer felaketten sonra Çernobil'de, kırık reaktörden çıkan başta 134°C, 137°C ve 90°C Sr gibi katyon-değişim radyoaktif katyon atıkları için 500.000 ton zeolitin

kullanılması zehirli atıkların ortamdaki uzaklaştırılmasına mükemmel bir örnektir²⁵. Zemin ve yer altı sularının, galvanizli çatılar aracılığı ile çeşitli kalay lehimlerinden geçerek kirliliğe neden olması giderek artan bir endişedir. Hem klinoptilolit hem de jeotekstil filtreleri, çeşitli toksik katyonları kesme çalışmaları için kullanılmaktadır²⁶. Doğal Türk klinoptilolitinin, metal işlemlerinin atık suyundan Co^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} ve Mn^{2+} 'nin uzaklaştırılması potansiyel uygulanması da mevcuttur²⁷. Ag, Rb, Cd, Cs, Ba, Pb, Zn, Sr, Hg, Cu, Co gibi ağır metal katyonları ve Cr' nin zeolitlere karşı yüksek afinitesi bulunmaktadır²⁸. Bununla birlikte zeolitler tarafından değişim için bağl seçicilikleri, katyonların hidratlanmış moleküler boyutuna, işlemle ilişkili ortamdaki bağl derişimlerine ve zeolit çerçevesinin Si/Al molar oranına da bağlıdır.

2.1.4.2.Katalizör

Zeolitlerin moleküler elek yapıları ve yüksek asidik özellikleri katalizör olarak kullanılabilmelerini sağlayan özelliklerinin başında gelir. Zeolitler, Brönsted ve Lewis asidi özelliğine sahiptirler ve Şekil 4' de bu özellik gösterilmiştir.



Şekil 4. Zeolitlerdeki Brönsted ve Lewis asit merkezleri

Zeolitler, özellikle alkanların parçalanması ve izomerleşmesi, aromatik hidrokarbonların alkillenmesi gibi karbonyum iyonunun oluştuğu tepkimeler için son derece kullanışlı katalizörlerdir. Katalitik merkezler, yapıdaki katyonların bulunduğu bölgelerdir²⁹.

Zeolitler, petrolün benzin gibi yakıtlara dönüştürülmesinde önemli olan, hidrokarbon kırma, izomerizasyon ve alkilasyon gibi çok sayıda işlemde kullanılan katı asit katalizörlerdir³⁰.

Zeolitlerin mikro gözenekli olmasından dolayı (bunlar tipik olarak çapları 13 Å'nın altında olan gözeneklere sahip bir petek benzeri yapı içerdikleri ve bu nedenle basit organik molekülleri kolayca yerleştirebildikleri anlamı ile), "Yeşil" kimyasal reaksiyonların yürütülmesinde de kullanılmaktadır.

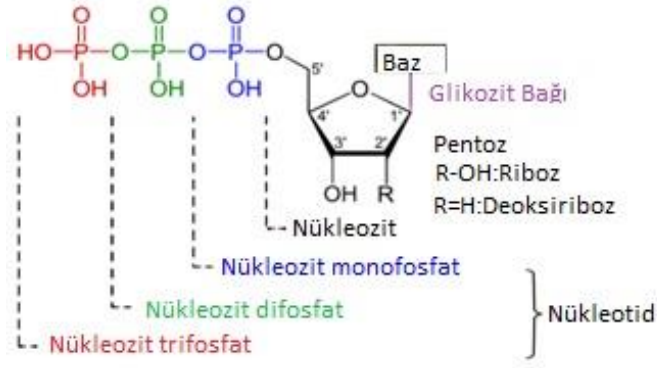
Zeolitler sahip oldukları asidik özellik nedeniyle bir çok farklı kimyasal reaksiyonda katalizör olarak kullanılmaktadır. Kendileri asidik özellikleri nedeniyle katalizör olarak davranabildikleri gibi, sahip oldukları kararlılık, yüksek yüzey alanı ve oldukça düzenli yapıları nedeniyle bazı katalizörler için destek maddesi olarakta kullanılırlar. Zeolitlerin yapısında bulunan katyonlar, başka metal katyonları ile yer değiştirebilirler ve bu sayede zeolit yapısında yeni katalitik olarak aktif merkezlerin oluşmasını sağlar

2.1.4.3. Adsorpsiyon

Zeolitler moleküler elek yapısına sahip alüminosilikatlardır. Bu özellikleri sayesinde çözeltideki iyonları, katıları adsorplarlar .Zeolit sahip olduğu boşluklardan geçebilecek büyüklükteki molekülleri adsorplayabilirler. Zeolitler, kristal yapılarının anyonik nitelikte olması ve bu yapıdaki yükü dengeleyen katyonlardan kaynaklanan bir elektriksel alan sebebi ile özellikle polar molekülleri adsorplama konusunda yüksek verime sahiptirler³¹.

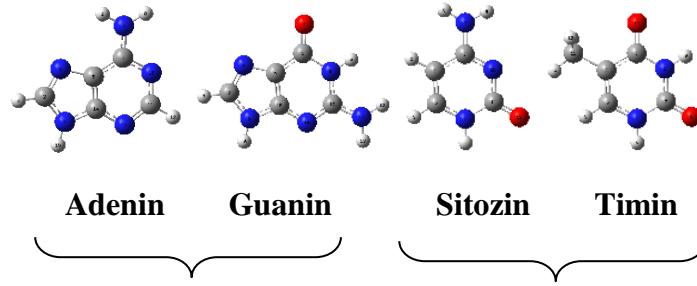
2.2. Nükleik Asitler

Nükleik asitler 1868 yılında İsviçreli bilim adamı Friedrich Miescher tarafından balık spermeleri ve akvaryuvarlar üzerindeki çalışmaları sırasında keşfedilmiştir. Friedrich Miescher, hücre çekirdeklerinde asidik özellikli bir takım yeni maddeler olduğunu belirleyerek karbon, hidrojen, oksijen, azot ve fosfat içeren ve yapı bakımından proteinlerden büyük bu maddelere çekirdekte yer aldığı için "nükleik asitler" adını vermiştir³². Nükleik asitlerin temel yapısal birimine "Nükleotid" denilmektedir. Binlerce nükleotid biriminin şeker ve fosfat birimlerinin birbirine bağlanarak oluşturduğu uzun zincirler (polinükleotid) nükleik asitleri oluşturur. Nükleotid birimi 5 karbonlu bir şeker, azotlu organik bir baz ve bir fosfat grubundan oluşur.



Şekil 5. Nükleotit Yapısı

Nükleotit biriminde yer alan bazlar, halka yapılarına göre iki gruba ayrılırlar. Pürin grubunda çift heterosiklik halka var iken, pirimidin grubunda tek heterosiklik halka bulunmaktadır.



Şekil 6. Pürin bazları, Pirimidin bazları

Şeker tipine göre canlılarda nükleik asitler deoksiribonükleik asit (DNA) ve ribonükleik asit (RNA) olarak iki gruba ayrılır. Tüm canlı organizmalarda bulunurlar ve kodlama, aktarma ve genetik bilgi ifadesi gibi önemli işlevlere sahiptirler³³.

2.2.1 Deoksiribonükleik asit (DNA)

DNA'nın yapısı ilk defa Watson ve Crick tarafından 1953 yılında modellenmiştir. Her bir DNA peş peşe dizilmiş nükleotid zincirlerinin 3'-5' fosfodiester bağları ile bağlanmasıyla oluşmuştur³⁴.

DNA bazları Adenin(A), Guanin (G), Sitozin (C) ve Timin (T) dir. DNA molekülünde adenin (A) ve Timin (T) miktarları ile Guanin (G) ve sitozin (C) miktarlarının eşit olduğu belirlenmiş ve Watson, Crick ve Wilkins yaptıkları çalışmalar sonunda DNA yapısını ve çift sarmallı heliks modelini öne sürmüşlerdir.

DNA molekülü, kimyasal kararlılığı, sentezlenebilir olması ve kendine özgü tasarımı nedeniyle nanoteknoloji uygulamalarında da ilgi çekici bir malzemedir. Metal aracılı doğal ve yapay baz çiftleri ile ilgili yeni keşifler ve kapsamlı çalışmalar, fonksiyonel DNA moleküllerinin tasarım olasılığını önemli ölçüde genişletmektedir. Civa aracılı T-T baz çifti (T-Hg²⁺-T) elli yıldan fazla süredir araştırılmaktadır. Son zamanlarda yapılan araştırmalarla, Hg²⁺ iyonunun T çiftine bağlanmasıyla DNA dubleksini seçici olarak önemli ölçüde kararlı hale getirdiği görülmüştür. Bu olguya dayanarak DNA temelli Hg²⁺ sensörleri geliştirilmiştir³⁵.

Deneysel çalışmaların yanı sıra kuantum kimyasal hesaplamaları, zeolit-adsorbat etkileşimleri hakkında moleküler ölçekli bilgi sağlayabilmekte, ayrıca zeolit katalizörlerinin kanalları ve gözeneklerinde oluşan önemli reaksiyonların enerjisel değişimlerini ve dinamiklerini modelleyebilmektedir³⁶.

Ag-DNA kompleksleri floresan özelliklere sahiptir. Bu alternatif biyomoleküller son yıllarda aktif bir araştırma konusu haline gelmiştir³⁷⁻³⁸. Bu problemler, hassas ve spesifik DNA saptaması için de kullanılmaktadır. Çeşitli elektronik spektrumlarına ve geniş emisyon yoğunluklarına sahip oldukları için optik kromofor olarak da görülmektedir. Suda kararlı Ag-DNA komplekslerinde mikrojeller, peptitler ve DNA oligomerleri ile kararlı hale getirilmiş metal moleküllerin temel özelliklerini açığa çıkarmada yararlanılmaktadır. Bu kompleksler; çeşitli metal iyonlarının tayini, moleküler görüntüleme ve biyolojik etiketleme çalışmalarında yer almaktadır. Ag-DNA baz çiftlerinin DFT ve TD-DFT yöntemleri ile teorik hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalar sonucunda Ag_n ($n = 1-6$) kümelerinin DNA molekülüne baz çiftlerinde bulunan azotlar üzerinden bağlandığı görülmüştür³⁹.

Metal aracılı baz çiftleri ile metallo-DNA komplekslerinin oluşturulması genetik kodlama dilinin gelişmesine ve fonksiyonlandırılmış yeni DNA yapılarının oluşturulmasına olanak sunar. Örneğin, metal modifiyeli DNA kompleksleri önceden dizayn edilmiş metalik yapıların bilgilerini içerir ve metal aracılı baz çiftleri metalin özelliklerini DNA sarmalına yansıtır. Sonuçta çeşitli analitlere duyarlı sensörlerin tasarımı, metallo-DNA yapılarının mantık kapılarının çıkarımı, asimetric kataliz, modifiye edilmiş yük transfer özellikleri gibi birçok uygulama alanı bulunmaktadır. Bu alanlar arasından son yıllarda sensör çalışmaları üzerine çok sayıda çalışma yapılmaktadır. Metal aracılı nükleik asitler enantioseçici katalizde de kullanılabilir. Bu alanda yapılan çalışmalardan biri

Diels Alder reaksiyonu üzerinedir. Bakır aracılı DNA baz çiftleri kullanılarak enantioselektif Cu(II)-katalizli Diels-Alder reaksiyonu gerçekleştirilmiştir⁴⁰.

Kovalent bağlanma, DNA etkileşimli anti kanser ilaçların tasarımı için etkileşiminin genel bir yöntemdir. DNA ile şelat yapısı oluşturan platin kompleksler tipik olarak antikanser aktivitesi sergilemektedir. Birçok rutenyum (II) polipiridil kompleks, önemli spektroskopik özelliklere ve nispeten düşük toksisiteye sahiptir. Bu kompleksler iyi bir DNA interkalatörleri olmaları nedeniyle ideal teşhis ajanı olarak kullanılmaktadır. Rutenyum metalinin yanı sıra bu amaçla kobalt, altın, palladyum ve platin metalleri de kullanılmaktadır.

Çok fonksiyonlu nanomalzemelerin tasarımı ve sentezi, ilaç salınımı, gen tedavisi gibi biyomedikal uygulamalara olanak sağlamaktadır. Canlı hücrelere biyoaktif moleküllerin taşınmasını sağlamak için gözenekli parçacıkların üretilmesi nanotıp için güçlü araçların geliştirilmesine yönelik önemli bir hedefdir. Literatürde yer alan bir çalışmada, DNA oligonükleotidlerinin ve organik moleküllerin canlı hücrelere eş zamanlı olarak taşınması için zeolit nano kristaller multifonksiyonel nano taşıyıcılar olarak kullanılmıştır. Çok işlevli zeolit gözenek sistemi konuk moleküllerle doldurularak hazırlanırken, DNA elektrostatiksel olarak yüzeye adsorbe edilmiştir. DNA'nın ve konuk moleküllerin canlı hücrelere salınım kinetiği, sistemin çoklu ilaç dağıtım özelliğini kanıtlamak için incelenmiş ve elde edilen sonuçların bu alanda yeni bir portatip oluşturulabileceği sonucuna varılmıştır.

2.2.2 Ribonükleikasit (RNA):

RNA tek nükleikasit zincirinden (polinükleotid) oluşur. RNA' da bulunan şeker "Riboz" adını alır. Adenin, Guanin, Sitozin ve Urasil bazlarına sahiptir. Timin RNA zincirinde yoktur. Canlılarda hücre içerisinde çekirdekte, çekirdekçikte, ribozomda ve bir miktar stoplazmada bulunur.

3 tip RNA vardır;

- 1) Ribozomal RNA (rRNA)
- 2) Messenger RNA (mRNA)
- 3) T-RNA (Taşıyıcı RNA)

Ribonükleik asit (RNA) birçok canlı hücrede bulunan bir moleküldür ve kodlama, düzenleme, bilgi taşıma ve gen ifadesinde birden çok önemli role sahiptir. RNA tek iplikli bir nükleotiddir. Ribozomal RNA(rRNA), proteinleri oluşturmak için Ribozom'a bağlanarak aminoasitleri bir araya getirir. mRNA bazı proteinlerin direk sentezlenmesi için genetik bilginin aktarılmasında kullanılır. rRNA ribozoma bağlanarak proteinleri oluşturmak için amino asitleri bir araya getirdiği sırada, amino asitlerin taşınması için taşıyıcı RNA(tRNA) moleküllerini kullanır⁴¹.

2.3 Kuantum Kimyasal Metodlar

Kimya maddenin atomik ve moleküler yapısını, atom ve moleküllerin aralarındaki etkileşimi ve bu etkileşimlerin özelliklerini araştıran deneysel bilim dalı olarak bilinir. Oysaki, deneysel kimyaya yardımcı olmak amacıyla bilgisayar simülasyonları ile kimyasal problemleri çözmek için hesaplamalı kimya kullanılır. Hesaplamalı kimya, biyomoleküller, polimerler gibi büyük moleküllerin bilgisayarda modellenmesi, simülasyonu ile ilgilenen ve hızlıca gelişmekte olan bir disiplindir. Hesaplamalı kimyada Moleküler Mekanik ve Kuantum Mekanik olmak üzere moleküllerin yapı ve etkinliğine bakılarak iki yöntem kullanılır. Kuantum Mekanik de; Ab initio, Yarı-denel ve Yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) olmak üzere üçe ayrılır.

Yapılan çalışmalarda; geometri optimizasyonu, elektrofilite indeksleri, titreşim frekansları, HOMO-LUMO enerjileri, atomik yük ve bağ uzunlukları, termal enerji hesaplamaları, dipol momentler, IR spektrumları, UV spektrumları gibi özellikler bu yöntemlerle hesaplanabilmektedir.

2.3.1 Yöntemler

2.3.1.1 Moleküler mekanik (MM): Bu yöntem molekül yapılarını klasik fizik yasalarına göre hesaplayarak bulur. Moleküler mekanik yöntemler diğer hesaplama yöntemlerine göre oldukça hızlıdır. Bu yöntemler genellikle enzimler gibi çok sayıda atom içeren yapıların hesaplanmasında kullanılır. Molekülleri birbirlerine bağlanmış atomlar olarak düşünür ama bağlı olmayan atomlar arasındaki etkileşimleri de dikkate alır. Elektronların hareketleri ihmal edilerek sistemin enerjisini sadece çekirdeğin konumuna göre hesaplar.

$$E_T = E_{bük} + E_{dön} + E_{vdw} + E_{ger} + E_{diğer}$$

$E_{bük}$ = Bağların bükülmesi, E_{ger} = Bağların esneyip gerilmesi, $E_{dön}$ = Molekül içi tekli bağların dönmesi, E_{vdw} = van der Waals etkileşimleri gibi moleküller arası etkileşim terimleridir.

2.3.1.2 Kuantum mekaniği (QM): Elektronik yapı yöntemleri kuantum mekaniği kanunlarını kullanır . Bu yöntemlerinin esas amacı, atomların ve moleküllerin elektronik yapılarını belirlemektir. Elektronik yapı yöntemleri, moleküler mekanik yöntemlerine göre daha karmaşık ve uzun hesaplamalar yapar. Schrödinger tarafından 1920 yılında Modern elektronik yapı belirleme yöntemlerinin temelleri atılmıştır.

$$H\Psi=E\Psi$$

H: Hamilton Operatörü E: Enerji Ψ : Dalga Fonksiyonu

Hamilton operatörü, moleküldeki parçacıkların birbirleri ile olan etkileşimlerini ve bu parçacıkların enerjisini simgeler. Schrödinger denklemi, tek bir elektrona sahip olan hidrojen atomu için tam olarak çözülebilmiştir. Çok elektronlu atomlar ve moleküller için bu denklem kolayca yazılabilirse de, tam olarak çözümlenmek mümkün değildir. Çözümü yapmak için bazı yaklaşımlara gereksinim vardır.

2.3.1.3 Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory, DFT)

Yoğunluk fonksiyonu teorisine dayalı yöntemler son yıllarda önem kazanmaktadır. Düşük kapasiteli bilgisayarlar kullanılarak büyük moleküllere uygulanabilmesi ve sonuçların doğruluğu açısından popüler bir yöntem haline gelmiştir.

DFT yöntemleri, elektron yoğunluğu üzerinden elektron korelasyonunun hesaplanmasını sağlar. Elektronik enerji, ayrı ayrı hesaplama bileşenlerine ayırır: Kinetik enerji, elektron-çekirdek, elektron-elektron etkileşimleri ve Coulomb itmesi geri kalan terimlerini açıklayan değişim-korelasyon terimleridir.

DFT, atom ve moleküllerin elektronik yapılarını belirlemek için ortaya çıkmış bir yaklaşım olmasına rağmen yaklaşık 1990'lı yıllarda ilgi görmeye başlamıştır. DFT'nin HF yaklaşımından farkı; HF teorisinde çok elektronlu dalga fonksiyonu Slater determinantı ile ifade edilmektedir. Slater determinantı, tek elektronlu N tane dalga fonksiyonunu kapsayacak şekilde kurulur (N=moleküldeki elektron sayısı) ve N-elektronlu dalga fonksiyonu hesaplanır. DFT yaklaşımı da tek elektronlu dalga fonksiyonlarını kullanarak sadece toplam elektronik enerjiyi ve elektronik yoğunluk dağılımını hesaplamaya çalışır.

DFT nin temeli toplam elektronik enerji ile toplam elektronik yoğunluk arasında bir ilişkinin var olduğuna dayanmaktadır. DFT yöntemindeki yoğunluk fonksiyonelleri ile *ab initio* yöntemindeki temel fonksiyonlar birbirlerine benzerler. Birçok standart fonksiyonel programda hazır olarak bulunur. Bunlar; BLYP (Becke' nin Lee, Yang ve Parr hibrit fonksiyonu), B3LYP (Becke' nin Lee-Young-Parr ile üç parametrelili hibrit fonksiyonu) gibi kısaltılmış adlandırmalara sahiptirler.

2.3.2 Temel Kümeler

Hesaplamalarda temel küme (basis set) olarak bilinen ve atom orbitallerini açıklamaya yarayan fonksiyonlar kullanılır. Bilindiği gibi orbitaller; elektronların çekirdek etrafında bulunma ihtimalinin en yüksek olduğu bölgelerdir ve orbitaller ne kadar iyi tanımlanırsa moleküler orbitaller, sistemin enerjisi ve geometrisi gerçek durumuna daha da yaklaşır.

Teorik bir hesaplamada bir model ve bir temel küme kombinasyonu kullanılır. Temel kümelerin büyüklüğü arttıkça, elektronların yerleri üzerine az sınırlamalar getirerek orbitalleri daha doğru yaklaşırlar.

Temel küme çeşitleri ikiye ayrılır:

1. Minimum temel küme

Orbitallerin en temel yönlerini açıklayan bir temel kümedir. Örneğin; (STO-nG): STO-3G, STO-4G gibi. Minimum temel kümeler herhangi bir atom için iç kabuk ve değerlik kabuğundaki her tip orbital için birer tane olmak üzere gereken en az sayıda temel fonksiyon içerir.

2. Genişletilmiş temel küme

Ayrıntılı olarak belirtilen temel kümelerdir. Bunlar; Korelasyon Uyumlu Temel Küme, Bölünmüş Değerlik (Spin-Valence) Temel Küme, Polarize Temel Küme, Difüzyon Fonksiyonları Temel Küme, Korelasyon Uyumlu Temel Kümeler⁴².

3. ÇALIŞMA PLANI

Bu tezdeki hesaplamalarda Gaussian 09 moleküler modelleme programı kullanılmıştır. Hesaplamalar için DFT fonksiyonlarından B3LYP (Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr) fonksiyoneli seçilmiştir. Seçilen yöntemlerle birlikte LANL2DZ temel kümesi ile çalışmalar gerçekleştirilmiştir.

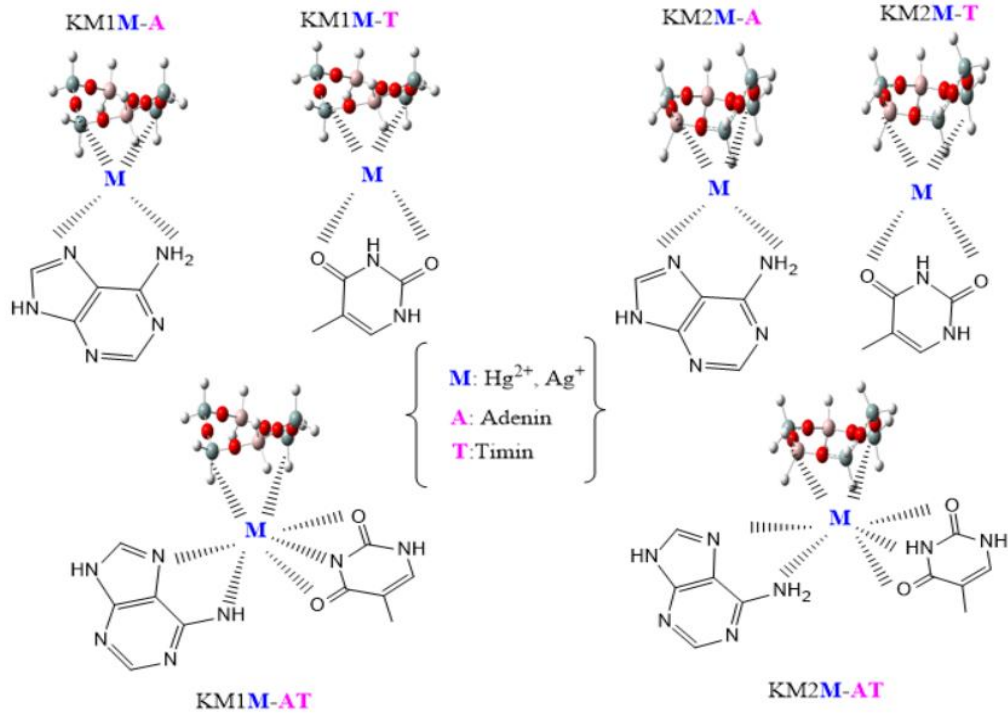
Optimize edilen moleküllerin global minimum yapı olup olmadığı frekans hesaplamalarından belirlendikten sonra, hesapsal absorpsiyon spektrumları çıkarılmıştır. Elde edilen global minimum enerji değerleri ile olası denge kararlılıkları hesaplanmış, sınır orbitalleri belirlenerek kimyasal reaktiviteleri belirlenmiştir.



Tüm hedef moleküllerin yapısal özellikleri (bağ uzunlukları, bağ açıları, dihedral açıları, dipol moment, polarlaşma), enerjileri (toplam enerjileri, sıfır noktası titreşim enerjileri, HOMO, LUMO enerjileri, bant aralıkları) ve absorpsiyon spektrumu özellikleri (UV-vis) hesaplanmıştır.

4. BULGULAR

Bu tezde, iki farklı iki farklı alüminyum pozisyonlarına sahip zeolit Y küme modelleri ele alınmıştır. Zeolit küme yapıları (KM1 ve KM2) ile metallo-DNA yapılarının, yani Hg^{2+} ve Ag^+ kationları ile oluşturacakları, HgY-DNA ve AgY-DNA baz çiftlerinin elektronik, yapısal ve spektroskopik özelliklerinin incelenerek aydınlatılması amaçlanmıştır.

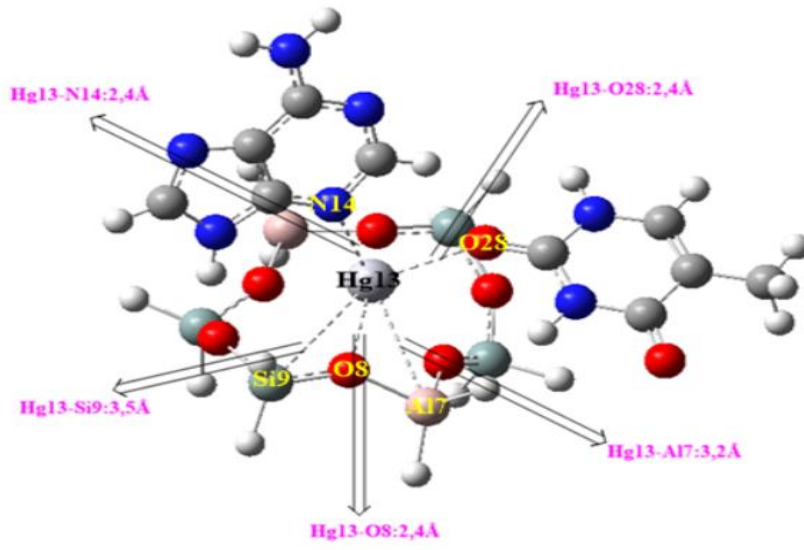


Şekil 7. Hg^{2+} ve Ag^+ iyon aracılı model zeolite küme modelleri ve Adenin, Timin bazları

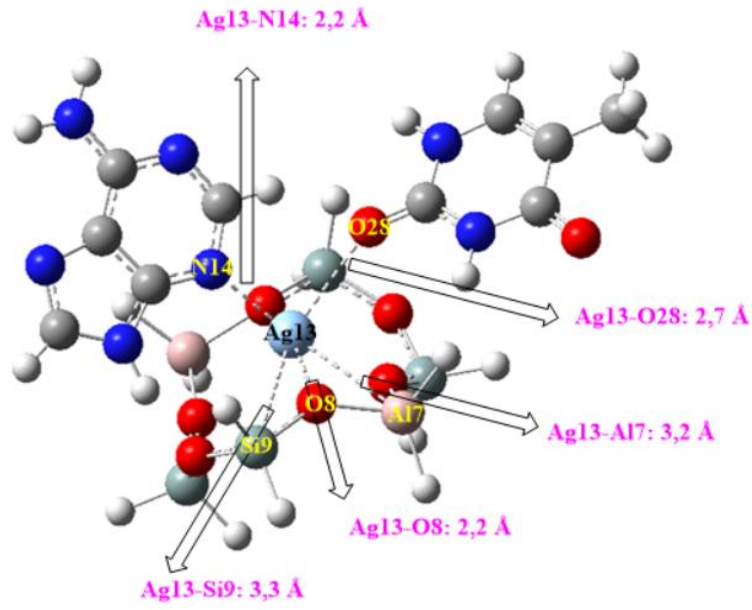
4.1 Yapısal Özellikler

4.1.1. Bağ uzunluğu

KM1 ve KM2 moleküllerindeki Hg^{2+} ve Ag^+ metallerin bazlar ile yaptıkları bağ uzunlukları Ek1-Ek4' de verilmiştir. Örnek olarak Şekil 8' de KM1-Hg-A-T kompleksinin, Şekil 9' da ise KM1-Ag-A-T kompleksinin bağ uzunlukları verilmiştir.



Şekil 8. KM1-Hg-T-A bağ uzunlukları



Şekil 9. KM1-Ag-A-T bağ uzunlukları

Bu örnekler incelendiğinde Hg^{2+} nin KM1' e olan uzaklığı yaklaşık 2, 4 Å iken, Ag^+ nin 2, 2 Å dur. Ayrıca her iki metalin bazlara olan uzaklığı incelendiğinde Hg^{2+} nin daha kısa bağla bağlandığı görülmüştür.

Genel olarak Ek1-Ek4 incelendiğinde, Hg^{2+} nin KM1' e olan uzaklığı daha uzun iken, KM2' ye olan uzaklığı yaklaşık 0, 4 Å daha kısadır. Bunun yanında, Ag^+ nin ise KM2' ye olan uzaklığı KM1' e olan uzaklığından yaklaşık 0, 5 Å daha fazladır. Ayrıca her iki metalin bazlara olan uzaklıkları incelendiğinde, metallerin T-T kompleksi ile yaptıkları bağ uzunluğu en büyüktür.

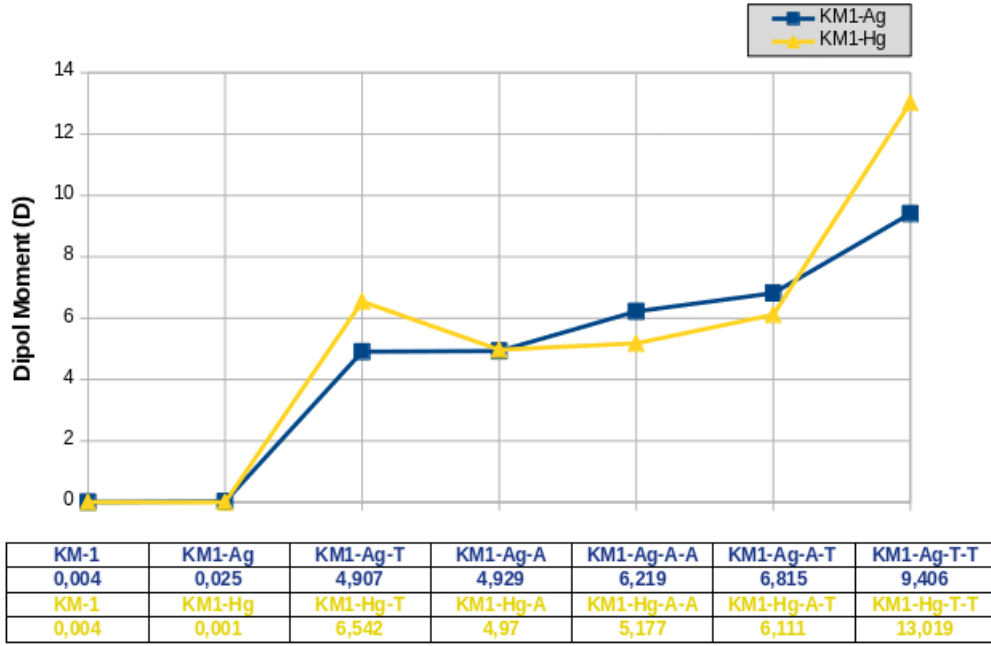
4.1.2 Dipol moment

Dipol moment, molekülün elektron dağılımına bakılarak polaritesi hakkında bilgi vermektedir.

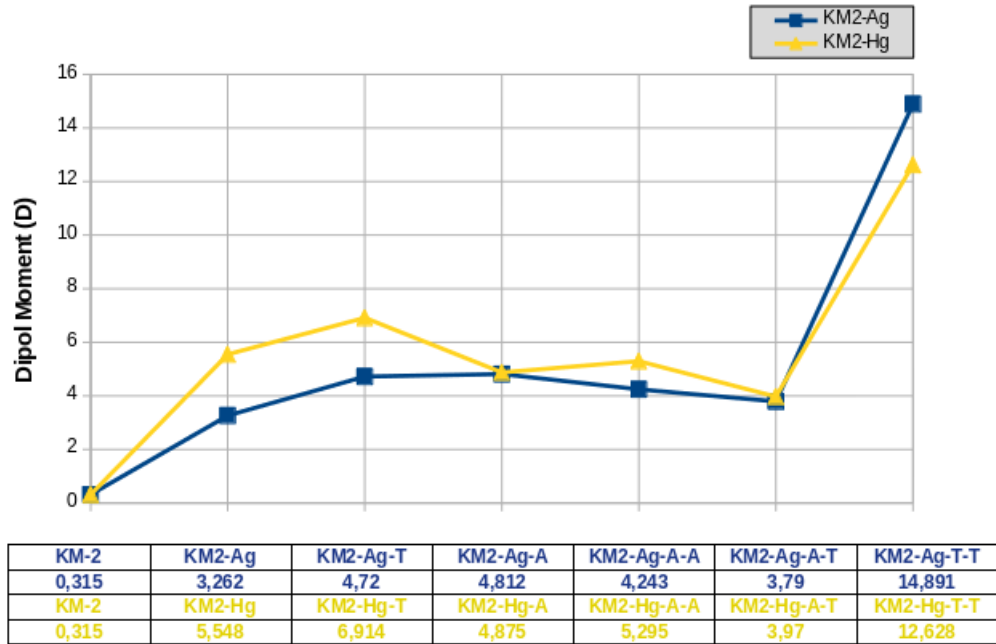
Tablo 3 ve Tablo 4' de Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin tekli ve ikili DNA bazlı komplekslerine ait dipol moment değerleri verilmiştir. Bu değerler incelendiğinde KM1-Hg-T-T 13, 01 D ve KM2-Ag-T-T 14, 89 D olarak en yüksek dipol moment değerini almıştır. KM1 molekülüne Hg^{2+} ve Ag^+ metalleri bağlandığında dipol momentlerinde bir artış gözlenmezken, A ve T tekli bazları bağlandığında dipol moment değerlerinde artış gözlenmiş ve bu artış 4-6D arasındadır. KM1 molekülünün ikili baz komplekslerinde ise KM1-Hg-T-T en yüksek değeri almakta ve ikili komplekslerde dipol momentinde yaklaşık 1-2D arasında artış gözlemlenmektedir

. KM2 molekülüne ise metal atomları bağlandığında dipol momentlerinde 3-5D arasında bir artış gözlenirken, yapıya Adenin ve Timin bağlanması sonucu dipol momentinde yaklaşık 1, 5D' lik bir artış olmakta, KM2-Ag-A-T ve KM2-Hg-A-T komplekslerinin dipol momentlerinde düşüş görülmektedir. KM2-Ag-T-T ve KM2-Hg-T-T komplekslerinin dipol momentleri sırasıyla 14, 8D ve 12, 6D olmak üzere en büyük değeri almıştır.

Tablo 3. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün KM1 dipol momentleri (D)



Tablo 4. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün KM2 dipol momentleri (D)



4.2 Elektronik Özellikler

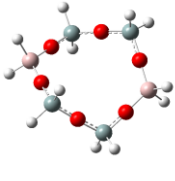
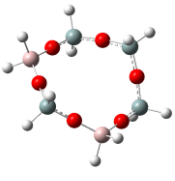
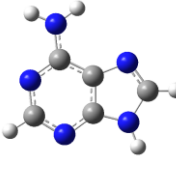
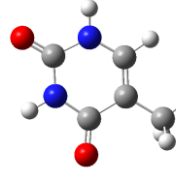
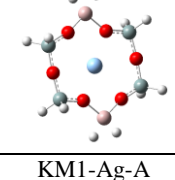
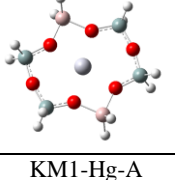
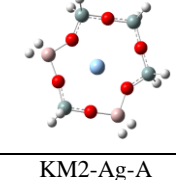
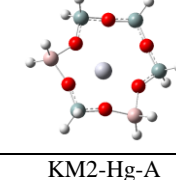
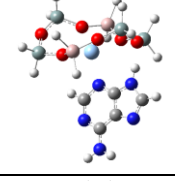
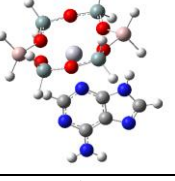
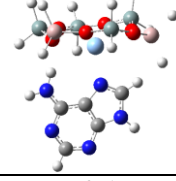
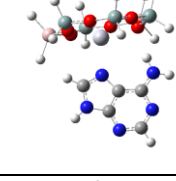
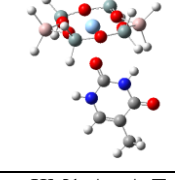
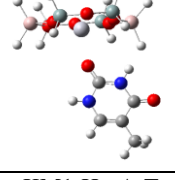
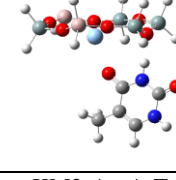
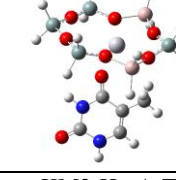
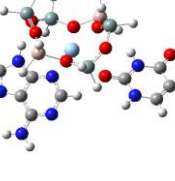
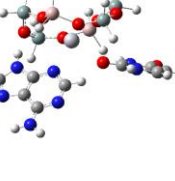
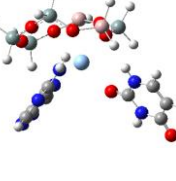
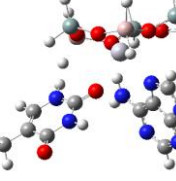
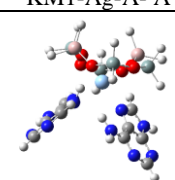
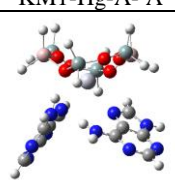
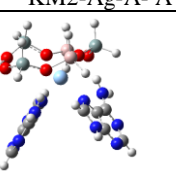
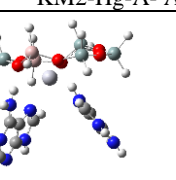
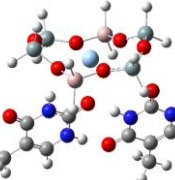
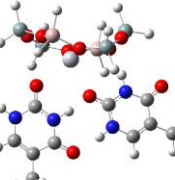
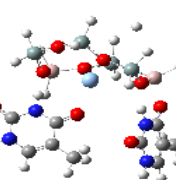
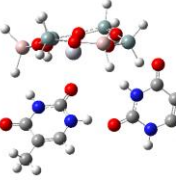
Optimize edilmiş yapıların enerjileri, bağıl kararlılıkları, moleküler orbital enerjileri ve elektronik özellikleri hesaplanmıştır.

4.2.1 Geometri Optimizasyonu

Geometri optimizasyonu minimum enerjiyi bulmayı amaçlamaktadır. Yani matematiksel olarak, enerjinin koordinatlara göre birinci türevinin (gradient) sıfır ve ikinci türevinin (kuvvet sabiti) pozitif olması anlamına gelir. Sistemin geometrik parametreleri değiştirilerek (bağ uzunluğu, bağ açısı, dihedral açılar vb.) geometri optimizasyonu ile enerjisi minimum hale getirilir.

Bu tez kapsamında incelenen moleküllerin, geometri optimizasyonları B3LYP/LANL2DZ yöntem ve temel kümesi ile gerçekleştirilmiş, en düşük enerjili yani en kararlı hallerine ulaşılmıştır. Tablo 5’de temel alınan model zeolit kümelerinin (KM1 ve KM2) Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren DNA bazları ile olan kompleksleri optimize edilmiş yapıları verilmiştir.

Tablo 5. Optimize edilmiş KM1 ve KM2 yapıları.

KM1	KM2	ADENİN	TİMİN
			
KM1-Ag	KM1-Hg	KM2-Ag	KM2-Hg
			
KM1-Ag-A	KM1-Hg-A	KM2-Ag-A	KM2-Hg-A
			
KM1-Ag-T	KM1-Hg-T	KM2-Ag-T	KM2-Hg-T
			
KM1-Ag-A-T	KM1-Hg-A-T	KM2-Ag-A-T	KM2-Hg-A-T
			
KM1-Ag-A-A	KM1-Hg-A-A	KM2-Ag-A-A	KM2-Hg-A-A
			
KM1-Ag-T-T	KM1-Hg-T-T	KM2-Ag-T-T	KM2-Hg-T-T
			

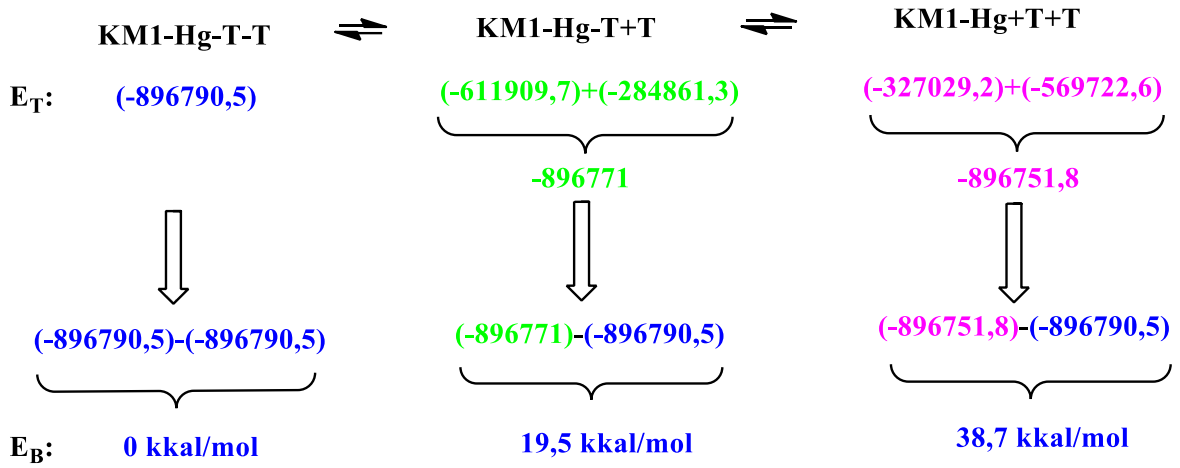
4.2.2 Komplekslerin Toplam ve Bağlı Enerjileri

Zeolit-Y Hg^{2+} ve Ag^+ iyonu komplekslerinin ortamdaki Adenin ve/veya Timin bazları ile olası dengedeki kompleks kararlılıklarını belirlemek için hesaplanan toplam enerji değerleri Tablo 6 'de sunulmuştur.

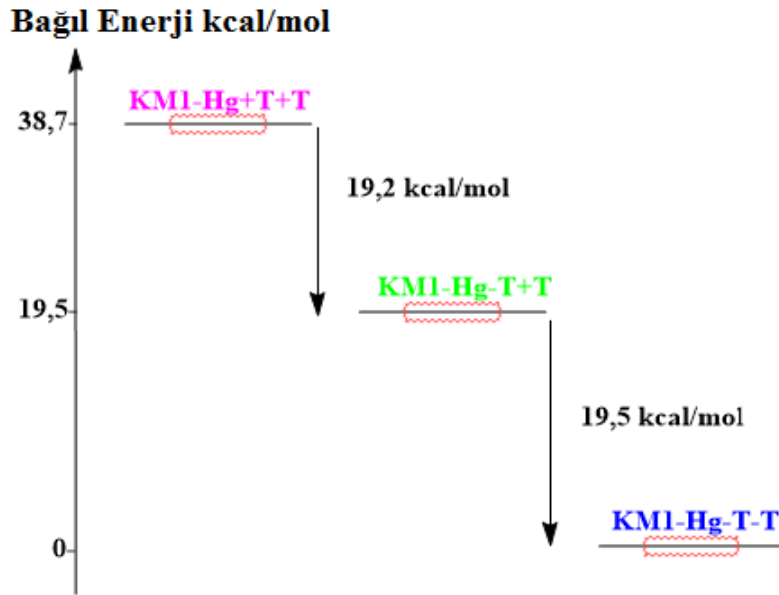
Tablo 6. DNA bazlarının, zeolit kümelerinin, Hg^{2+} , Ag^+ 'nın ve bunların oluşturduğu komplekslerinin toplam enerjileri (kcal/mol).

Kompleks	E_T	Kompleks	E_T
Adenin	-293118, 32	KM-1	-300088, 60
Timin	-284861, 33	KM-2	-300090, 86
Hg^{2+}	-26225, 50	Ag^+	-91286, 190
KM1-Ag	-391651, 29	KM2-Ag	-391651, 16
KM1-Hg	-327029, 22	KM2-Hg	-327022, 61
KM1-Ag-T	-676528, 30	KM2-Ag-T	-676520, 79
KM1-Hg-T	-611909, 80	KM2-Hg-T	-611901, 20
KM1-Ag-A	-684787, 69	KM2-Ag-A	-684784, 75
KM1-Hg-A	-620174, 18	KM2-Hg-A	-620165, 19
KM1-Ag-A-A	-977914, 07	KM2-Ag-A-A	-977916, 08
KM1-Ag-T-A	-969659, 33	KM2-Ag-T-T	-961416, 77
KM1-Ag-T-T	-961406, 54	KM2-Ag-A-T	-969661, 16
KM1-Hg-A-A	-913294, 27	KM2-Hg-A-A	-913296, 61
KM1-Hg-T-A	-905044, 84	KM2-Hg-A-T	-905040, 44
KM1-Hg-T-T	-896790, 56	KM2-Hg-T-T	-896781, 16

Örnek olarak, Şekil 11 ve Şekil 12' de KM1-Hg nin Timin bazları ile oluşturduğu komplekslerin bağlı enerji hesaplaması ve grafiği verilmiştir. KM1-Hg nin ikili koordinasyonu en karardır. Diğer hesaplanan yapıların bağlı enerjileri Ek 6' da verilmiştir. Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin ikili baza koordinasyonları incelendiğinde yine KM1 ve KM2 nin ikili baz koordinasyonları en karardır. Her iki küme modeli içinde, Hg^{2+} ve Ag^+ nin ikili baz komplekslerinde Adenin bazı Timin bazına göre daha karardır.



Şekil 10. Bağlı enerji hesaplaması.



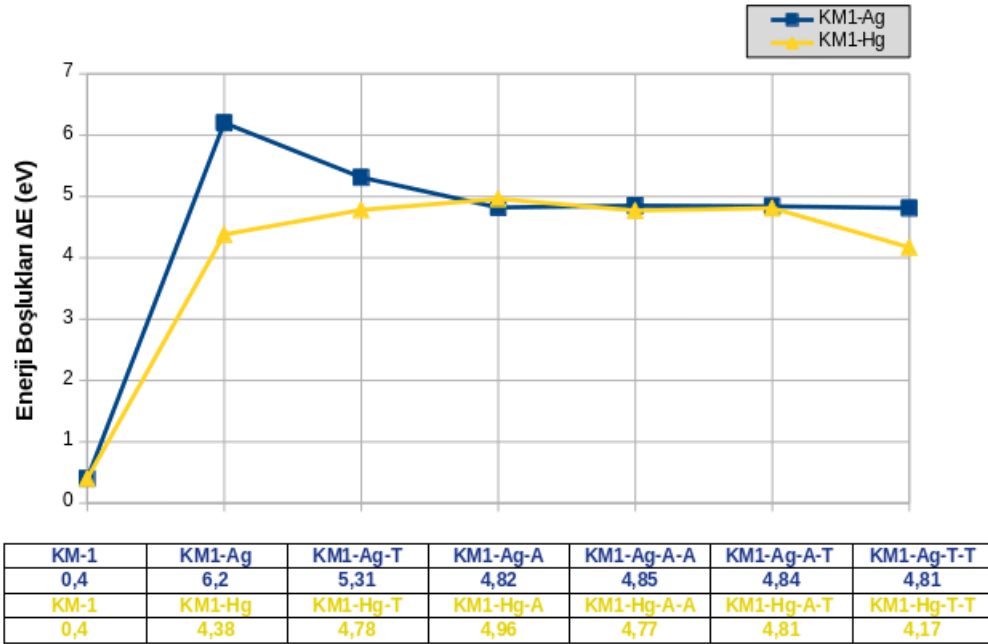
Şekil 11. Bağlı enerji grafiği.

4.2.3 Sınır Moleküler Orbital Enerjileri

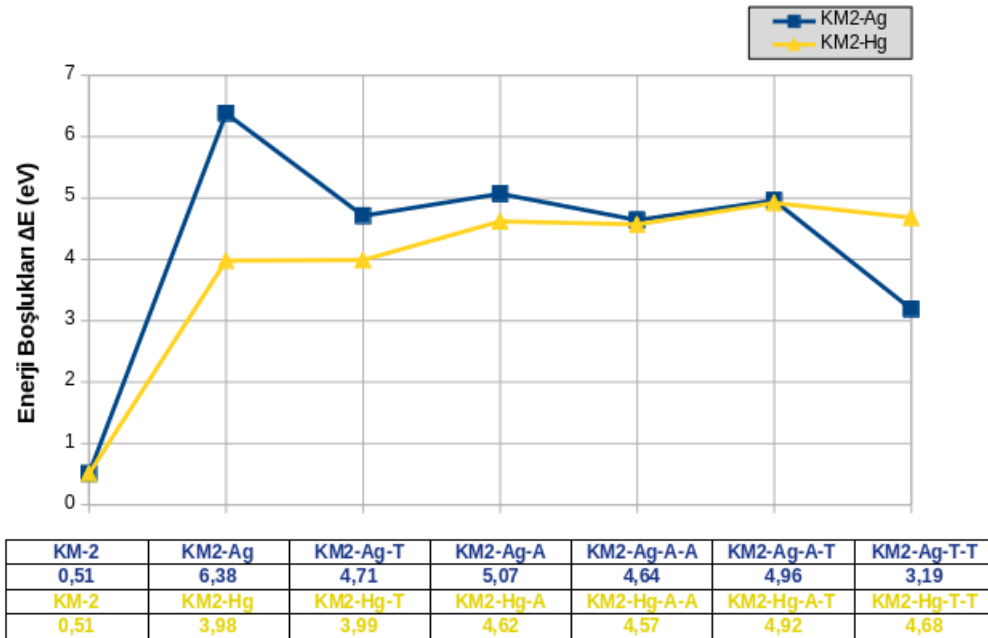
HOMO, en yüksek dolu moleküler orbital, LUMO ise en düşük boş moleküler orbitaldir. HOMO enerjisi iyonlaşma potansiyelini verirken, LUMO enerjisi ise elektron ilgisini gösterir. Molekölün reaktifliğini ise enerji aralığı yansıtmaktadır. HOMO-LUMO enerji farkı yük transferinin bir ölçüsü olarak düşünüldüğü için moleköl reaktifliği ve elektriksel iletim gibi özelliklerin belirlenmesinde önemli bir parameter olarak görülmektedir.

Tablo 7 ve Tablo 8' de hesaplanan tüm yapıların HOMO-LUMO enerji farkları verilmiştir. Tablolar incelendiğinde, Ag^+ iyonunun bağlı olduğu her iki küme modeline ait bant aralığı en yüksektir. Ag^+ iyonları ile koordine olmuş her iki küme modelleri tekli DNA bazlarıyla yaptığı komplekslerde bant aralığında yaklaşık 1eV-2eV kadar düşmektedir. Hg^{2+} nın bağlı olduğu küme modellerinde HOMO-LUMO bant aralığında yaklaşık 3 eV-4eV lik artış görülmektedir. Bu kompleksin tekli ve ikili DNA bazlarıyla oluşturduğu komplekslerde değişim çok azdır. Metal iyonlarına koordine olan baz sayısı arttıkça HOMO-LUMO bant aralığı yaklaşık 1 eV azalmaktadır. Her iki metal iyonu için en büyük HOMO-LUMO bant genişliği A-T baz çiftleri ile yaptığı komplekslere aittir.

Tablo 7. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün bant aralığı ΔE (eV).



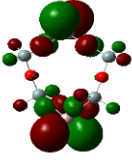
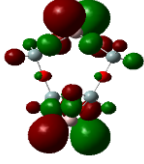
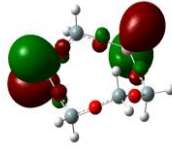
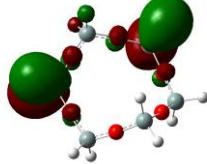
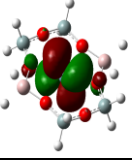
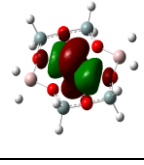
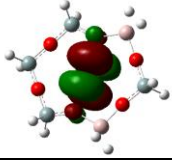
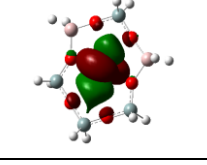
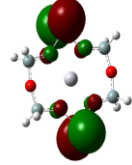

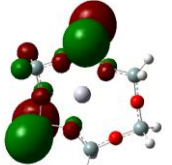
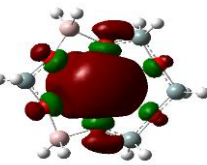
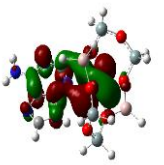
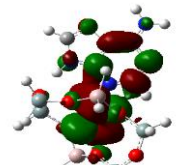

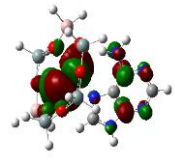
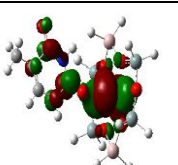
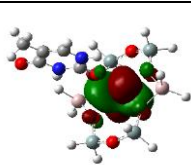
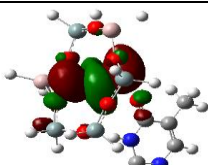
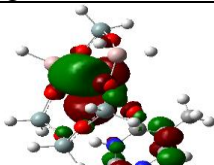
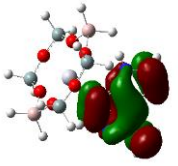
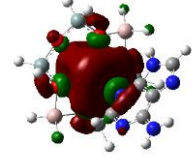
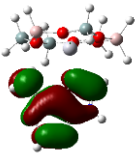
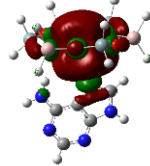
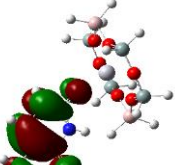
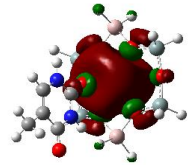
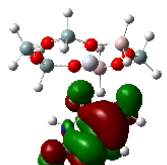
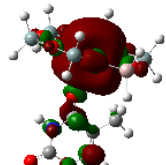
Tablo 8. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM2 molekülünün bant aralığı ΔE (eV).



Tablo 9 ve Tablo 10 da Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin sınır orbital görüntüleri verilmiştir. Önerilen model kümelerdeki her iki modelin tek bazlı koordinasyonları incelendiğinde; HOMO'ları daha çok bazlarda, LUMO'ları ise daha çok metal iyonu üzerindedir.

Ag^+ li seçilen model kümelerin, Ag^+ iyonunun ikili bazlar ile yaptığı komplekslerin HOMO ve LUMO orbitalleri incelendiğinde, A-A'de hem bazlar hem de metal iyonu üzerinde moleküler orbitaller varken, T-T bazları ile komplekslerinde, sadece hem HOMO hem de LUMO' da metal iyonu üzerinde bulunmaktadır. Oysa, Hg^{2+} iyonunun her iki bazla da oluşturduğu komplekslerde, HOMO ve LUMO'larında bazlara ait moleküler orbitaller görülmektedir.

Tablo 9. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin sınır orbital görüntüleri.

KM1		KM2	
HOMO	LUMO	HOMO	LUMO
			
KM1-Ag		KM2-Ag	
			
KM1-Hg		KM2-Hg	
			
KM1-Ag-A		KM2-Ag-A	
			
KM1-Ag-T		KM2-Ag-T	
			
KM1-Hg-A		KM2-Hg-A	
			
KM1-Hg-T		KM2-Hg-T	
			

Tablo 10. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin sınır orbital görüntüleri.

KM1-Ag-A-T		KM2-Ag-A-T	
HOMO	LUMO	HOMO	LUMO
KM1-Ag-T-T		KM2-Ag-T-T	
KM1-Ag-A-A		KM2-Ag-A-A	
KM1-Hg-A-T		KM2-Hg-A-T	
KM1-Hg-T-T		KM2-Hg-T-T	
KM1-Hg-A-A		KM2-Hg-A-A	

4.2.4 Global Reaktivite Tanımlayıcılar

Global tanımlayıcılar, bir molekülün reaktivitesiyle ilgili bilgi veren kavramlardır. Kimyasal sertlik / yumuşaklık, elektronegatiflik, elektrofilisite indeksi ve kimyasal potansiyel moleküler tanımlamanın parametreleridir. Sertlik (η), kimyasal potansiyelin elektron sayısındaki değişime direncidir ve moleküler yapının kararlılığı ile doğru orantılıdır. İyonlaşma potansiyeli (I) ile elektron afinitesi (A) arasındaki farkın yarısıdır. Düşük sertlik değerine sahip moleküller (yumuşak moleküller), yük transferine karşı duyarlı olup daha reaktiftirler. Yumuşaklık sertliğin tersi olarak gösterilmektedir. Sertlik ve yumuşaklık arasındaki eşitlik aşağıda verilmiştir.

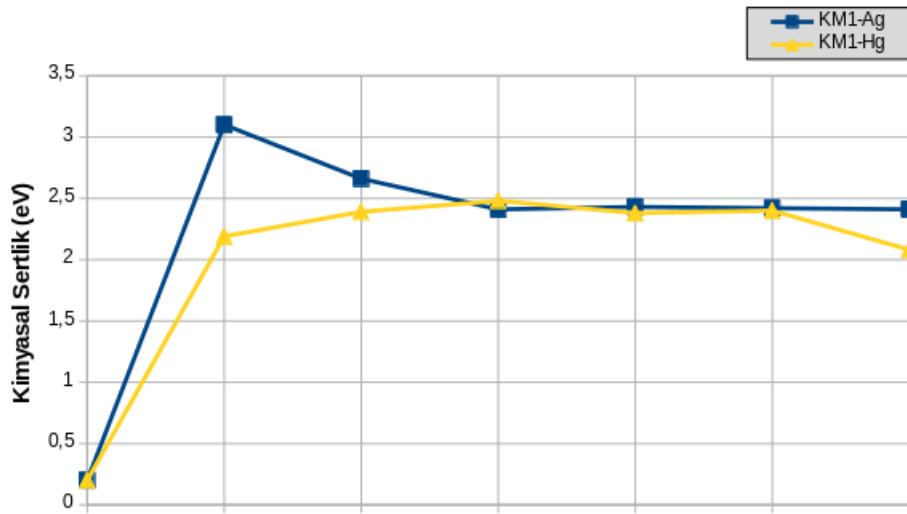
$$\eta = (I - A) / 2 \quad \text{Eşitlik-1}$$

$$S = 1/\eta \quad \text{Eşitlik-2}$$

Tablo 11 ve Tablo 12 de Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin kimyasal sertlik değerleri (η), Ek 8' de hesaplanan Hg^{2+} ve Ag^+ komplekslerine ait global reaktivite tanımlayıcıları (eV) verilmiştir. KM1 ve KM2 moleküllerinin sertlik derecesi birbirine yakın bulunmuştur. KM1 ve KM2 moleküllerine Hg^{2+} ve Ag^+ iyonları bağlandığında sertlik derecesi en yüksek Ag^+ iyonlu yapılarda olduğu görülmektedir. Ag^+ iyonu ile kompleksleşmiş KM1 ve KM2 moleküllerinin tekli ve ikili DNA bazlarıyla oluşturduğu komplekslerde, koordinasyon sayısı artışı ile sertlik derecesi azalmakta iken, Hg^{2+} iyonlu komplekslerde sertlik derecesi artmaktadır. En düşük sertlik derecesine sahip kompleks KM2-Ag-T-T dir.

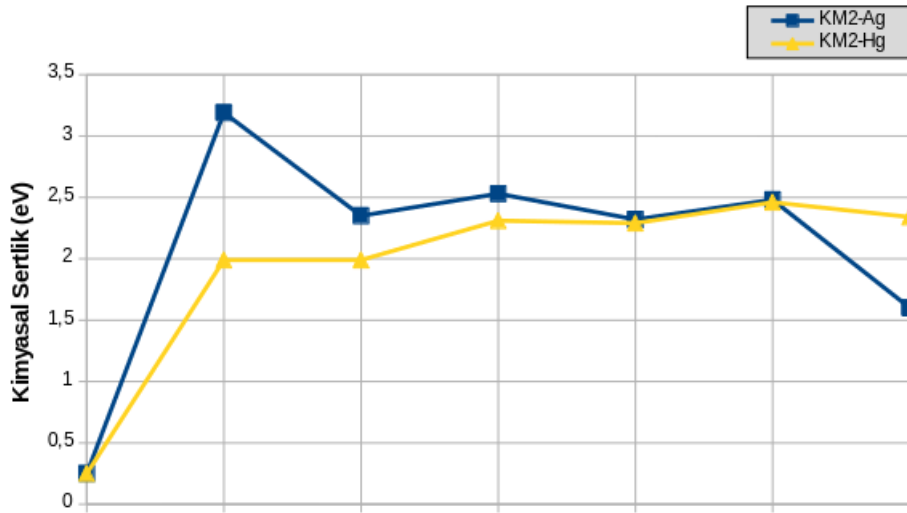
EK 8' de, yumuşaklık ve sertlik değerleri grafik halinde verilmiştir.

Tablo 11. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün kimyasal sertlik değerleri (η).



KM-1	KM1-Ag	KM1-Ag-T	KM1-Ag-A	KM1-Ag-A-A	KM1-Ag-A-T	KM1-Ag-T-T
0,2	3,1	2,66	2,41	2,43	2,42	2,41
KM-1	KM1-Hg	KM1-Hg-T	KM1-Hg-A	KM1-Hg-A-A	KM1-Hg-A-T	KM1-Hg-T-T
0,2	2,19	2,39	2,48	2,38	2,4	2,08

Tablo 12. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM2 molekülünün kimyasal sertliği (η)



KM-2	KM2-Ag	KM2-Ag-T	KM2-Ag-A	KM2-Ag-A-A	KM2-Ag-A-T	KM2-Ag-T-T
0,25	3,19	2,35	2,53	2,32	2,48	1,6
KM-2	KM2-Hg	KM2-Hg-T	KM2-Hg-A	KM2-Hg-A-A	KM2-Hg-A-T	KM2-Hg-T-T
0,25	1,99	1,99	2,31	2,29	2,46	2,34

Elektronegatiflik, bir molekülün elektron çekme eğilimini gösteren dolayısıyla molekülün kimyasal aktifliğinin verimliliği açısından önemli bir parametredir. Elektronegatifliği yüksek olan moleküller, yük transferine yatkın olduklarından dolayı reaktiflikleri yüksektir. Elektronegatiflik (χ) eşitliği aşağıdaki verilmiştir;

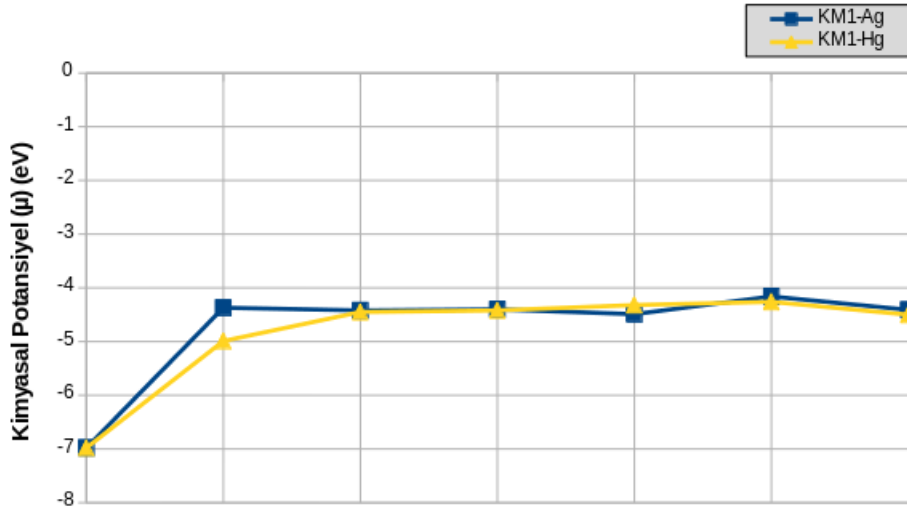
$$\chi = (I + A) / 2 \quad \text{Eşitlik-3}$$

Kimyasal potansiyel, elektronegatifliğin ters işaretlisidir yani, kararlılıkla ters orantılıdır. Kimyasal potansiyel ne kadar düşük ise kararlılık o kadar fazladır. Kimyasal potansiyel (μ);

$$\chi = -\mu \quad \text{Eşitlik-4}$$

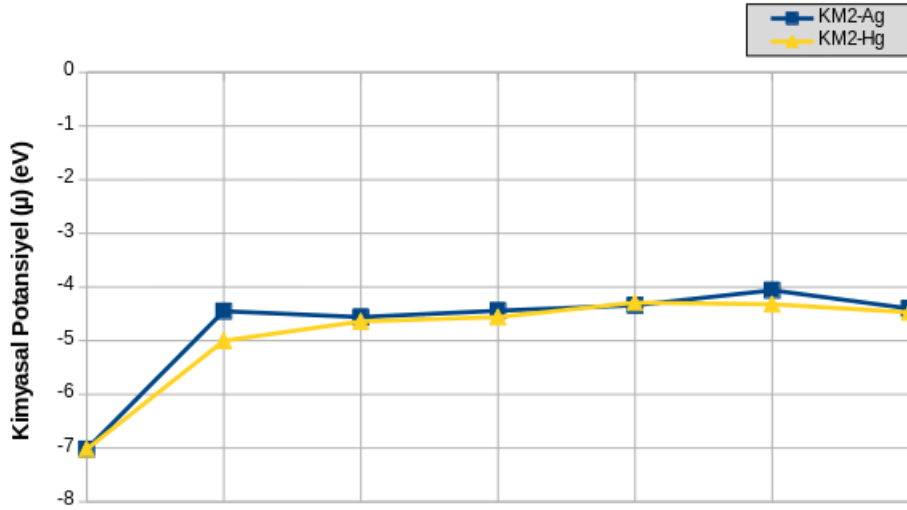
Tablo 13 ve Tablo 14 de Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin kimyasal potansiyel değerleri verilmiştir. Bu değerler incelendiğinde, kimyasal potansiyel değeri düştükçe reaktiflikleri arttığından dolayı KM1 (-6, 98 eV) ve KM2 (-7, 02 eV), molekülleri en yüksek reaktifliğe sahiptir.

Tablo 13. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün kimyasal potansiyel değeri (μ) (eV).



KM-1	KM1-Ag	KM1-Ag-T	KM1-Ag-A	KM1-Ag-A-A	KM1-Ag-A-T	KM1-Ag-T-T
-6,98	-4,37	-4,42	-4,4	-4,49	-4,16	-4,41
KM-1	KM1-Hg	KM1-Hg-T	KM1-Hg-A	KM1-Hg-A-A	KM1-Hg-A-T	KM1-Hg-T-T
-6,98	-4,99	-4,45	-4,42	-4,32	-4,26	-4,5

Tablo 14. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM2 molekülünün kimyasal potansiyel değeri (μ) (eV).



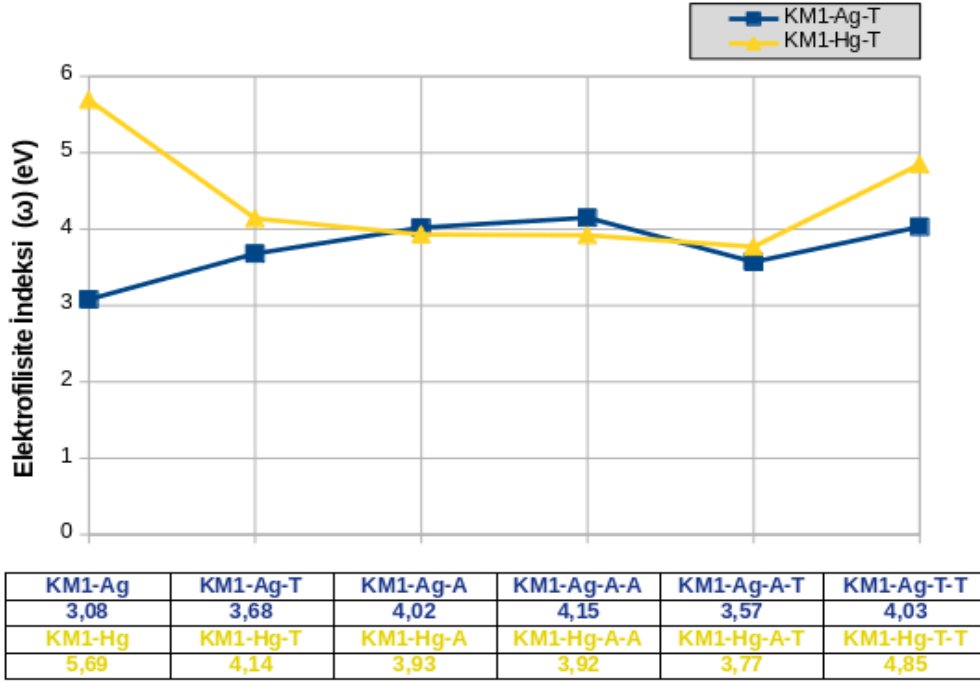
KM-2	KM2-Ag	KM2-Ag-T	KM2-Ag-A	KM2-Ag-A-A	KM2-Ag-A-T	KM2-Ag-T-T
-7,02	-4,45	-4,56	-4,44	-4,34	-4,06	-4,4
KM-2	KM2-Hg	KM2-Hg-T	KM2-Hg-A	KM2-Hg-A-A	KM2-Hg-A-T	KM2-Hg-T-T
-7,02	-5	-4,64	-4,56	-4,29	-4,32	-4,47

Elektrofilisite indeks (ω), bir molekülün elektron kabul etme eğilimini gösteren önemli bir parametredir. Elektrofilisite indeks (ω) ;

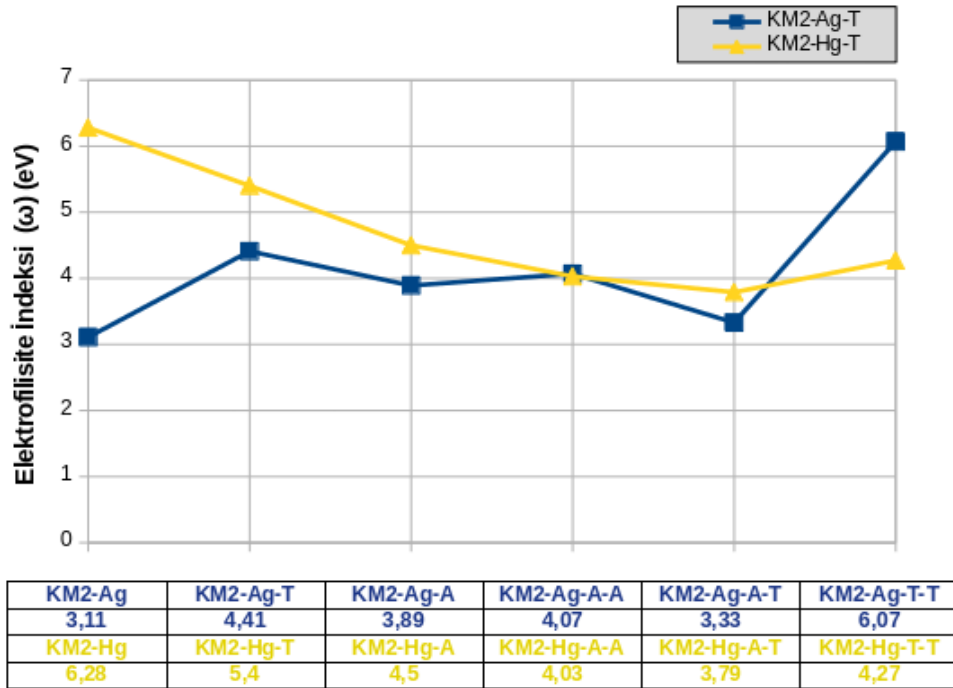
$$\omega = \mu^2 / 2\eta = \chi^2 / 2\eta \quad \text{Eşitlik-5}$$

Elektrofilisite indeksi, elektronegatiflikle doğru orantılıdır. elektronegatifliği en yüksek olan moleküller KM1 ve KM2 molekülleridir. Tablo 15 ve Tablo 16 da Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin elektrofilisite değerleri verilmiştir. Ek 8' e bakıldığında KM1 molekülünün elektrofilisite indeksi 122, 75 eV ve KM2 molekülünün ise 97, 58 eV dir. Tablo 15. ve Tablo 16. incelendiğinde elektrofilisite indeks değeri en yüksek olan yapılar Hg^{2+} ve Ag^+ içeren KM1 ve KM2' ye aittir. İkili komplekslerde KM2-Ag-T-T kompleksi 6, 07 eV ile tekli baz içeren KM2-Hg-T kompleks ise 5, 4 eV değeriyle en yüksek elektrofilisite indeks değerine sahiptir.

Tablo 15. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 molekülünün elektrofilisite değeri (ω) (eV)



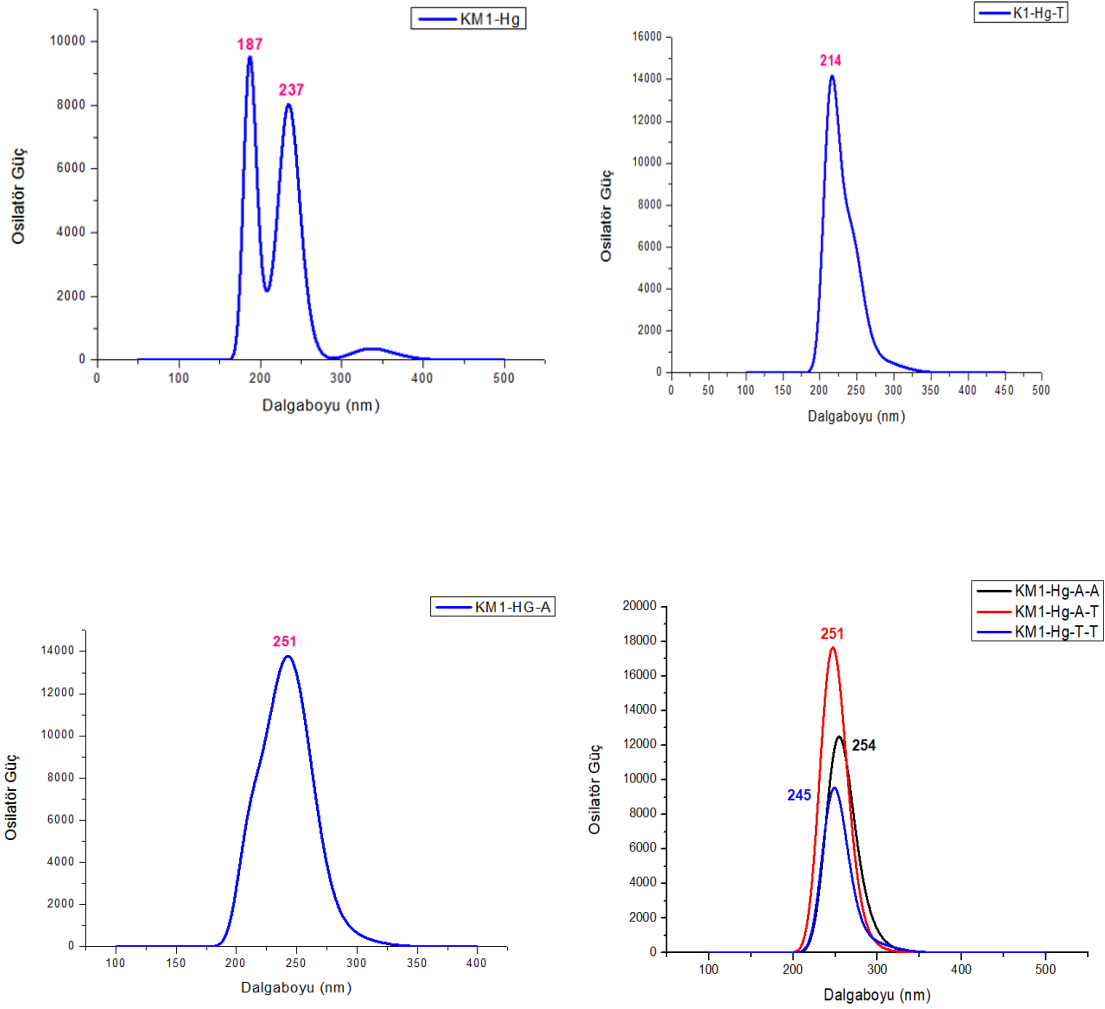
Tablo 16. Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM2 molekülünün elektrofilisite değeri (ω) (eV)



4.3 Komplekslerin UV-VIS Spektrumları ve Osilatör Güç

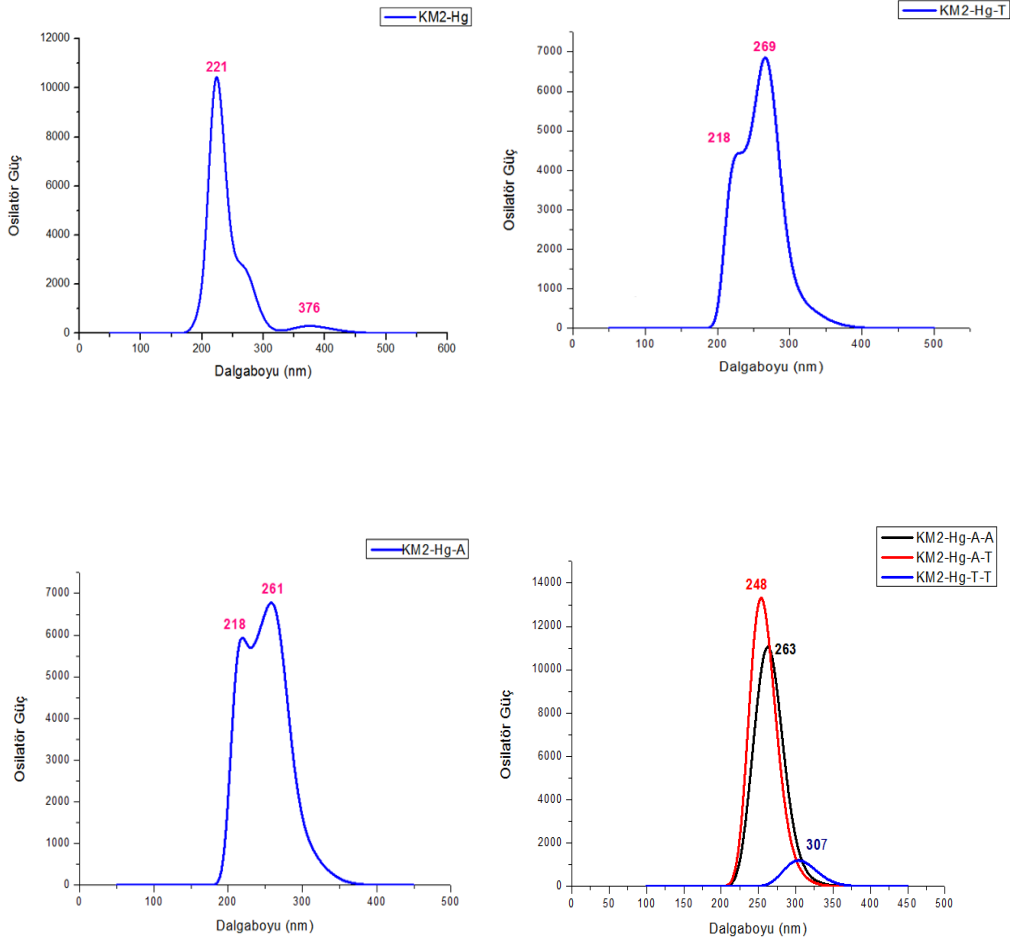
Absorpsiyon spektrumu, moleküllerin yapısal özelliklerini belirlemede kullanılan analitik yöntemlerden biridir. İncelenen bileşiklerin maksimum absorpsiyon pikleri (λ_{max}), TD-DFT metodu kullanılarak belirlenmiştir. TD-DFT yöntemi hesaplamaları kısa sürede vermesi ve doğru sonuçlar elde edilmesi nedeniyle yaygın olarak kullanılmaktadır. Tablo 17 ve Tablo 18 de Hg^{2+} li, Tablo 19 ve Tablo 20 de Ag^+ li KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin UV λ_{max} ve osilatör güç değerleri verilmiştir.

Tablo 17. KM1-Hg UV Spektrumları



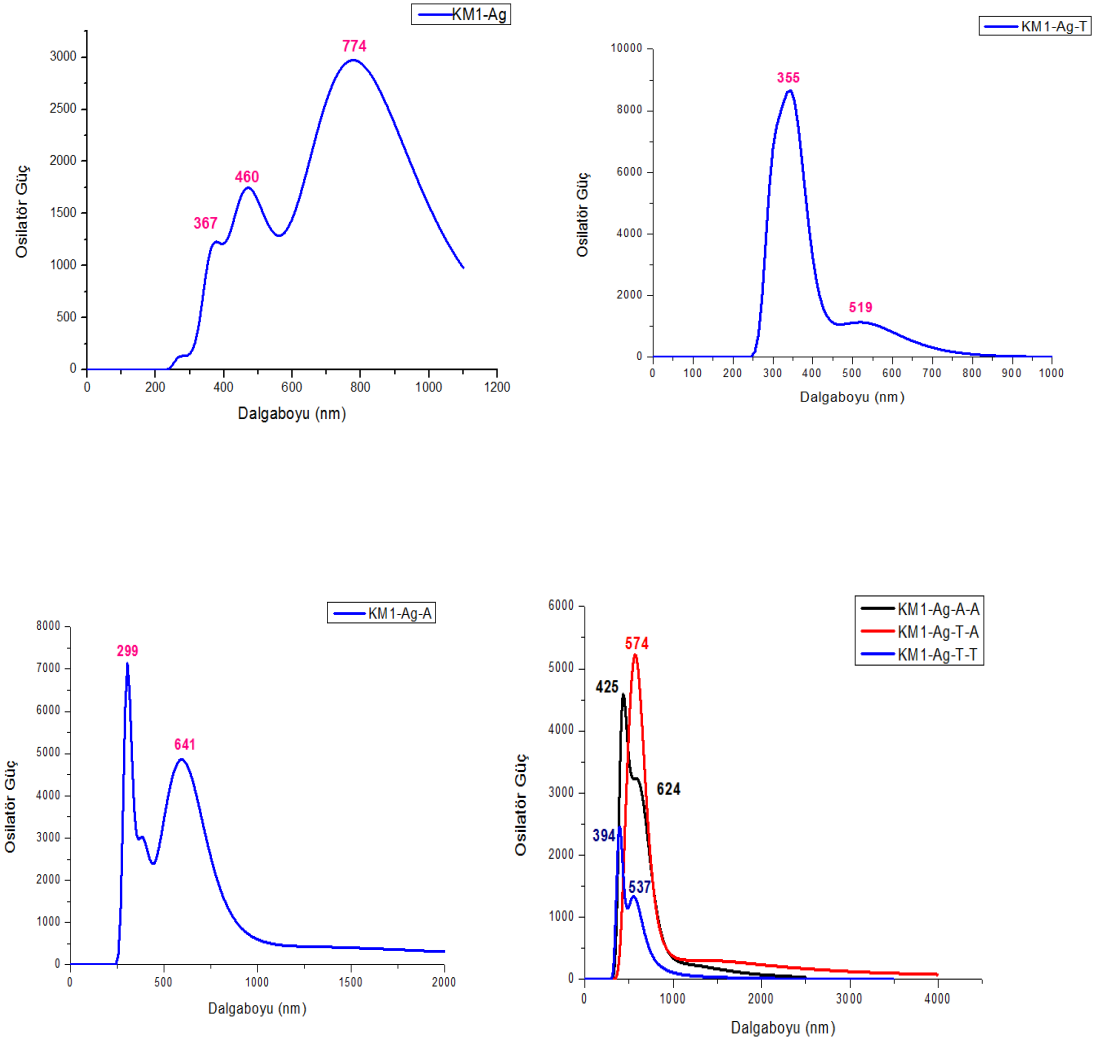
Hg²⁺ içeren KM1 molekülüne ait UV spektrumları incelendiğinde, KM1-Hg yapısına tekli koordine olan Timin bazının λ_{max} absorpsiyon değeri 214 nm' dir. İkili koordinasyonu daha uzun dalga boyunda yani 245 nm de absorpsiyon yapmaktadır. Oysa T-T yerine A-A olması durumunda 254 nm' de en uzun dalga boyunda absorpsiyon vermektedir

Tablo 18. KM2-Hg UV Spektrumları



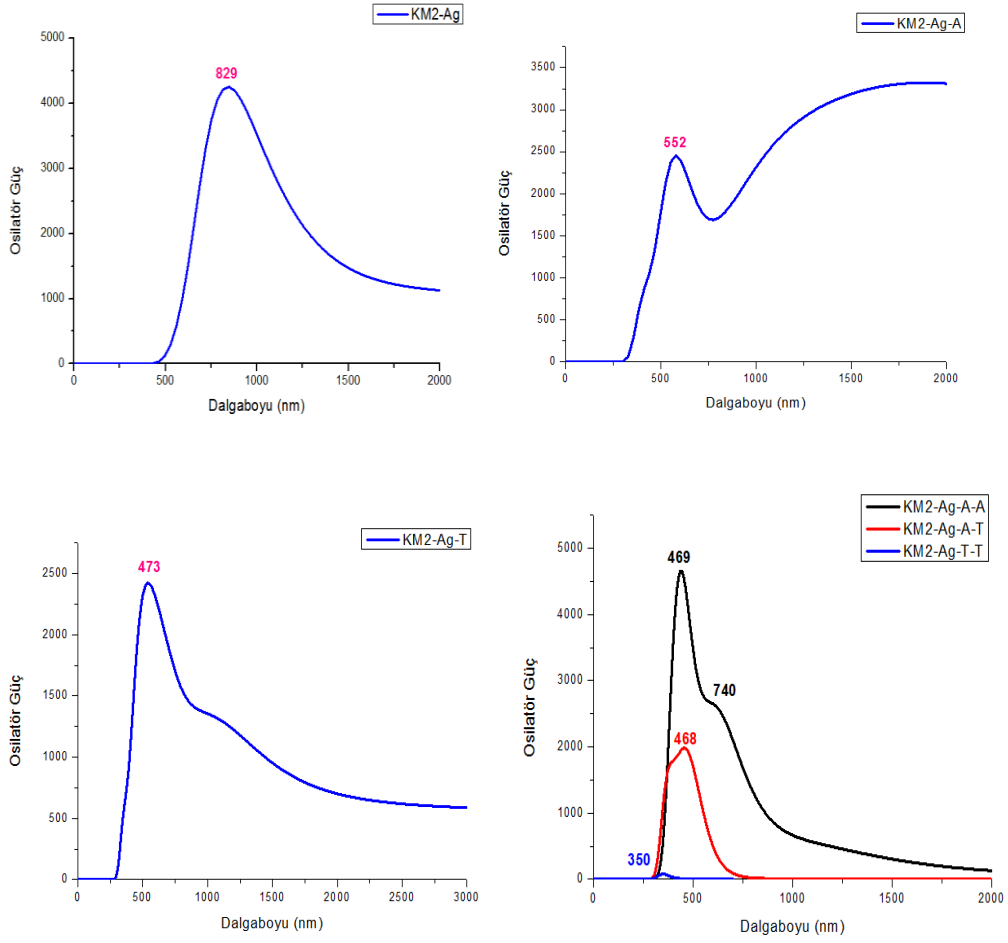
Hg²⁺ içeren KM2 molekülüne ait UV spektrumları incelendiğinde, KM2-Hg yapısına koordine olan Timin bazının λ_{\max} absorbans değeri 269 nm' dir. T-T ikili baz koordinasyonunda ise λ_{\max} absorbans değeri 307 nm olarak daha geniş dalga boyuna sahiptir. Bu yapıya T-T yerine A-A bağlandığında 263 nm' de en uzun dalga boyunda absorbsiyon vermektedir.

Tablo 19. KM1-Ag UV Spektrumları



Ag⁺ içeren KM1 molekülüne ait UV spektrumları incelendiğinde, KM1-Ag yapısına koordine olan Timin bazının λ_{\max} absorbans değeri 355 nm' dir. T-T ikili baz koordinasyonunda ise λ_{\max} absorbans değeri 394 nm olarak daha uzun dalga boyuna sahiptir. Bu yapıya T-T yerine A-T bağlandığında 574 nm' de en uzun dalga boyunda absorbsiyon vermektedir.

Tablo 20. KM2-Ag UV Spektrumları



Ag⁺ içeren KM2 molekülüne ait UV spektrumları incelendiğinde, KM2-Ag yapısına koordine olan Timin bazının λ_{\max} absorbans değeri 473 nm' dir. T-T ikili baz koordinasyonunda ise λ_{\max} absorbans değeri 350 nm' de daha kısa boyuna sahiptir. Bu yapıya T-T yerine A-T bağlandığında 468 nm' de en uzun dalga boyunda absorbsiyon vermektedir.

5.SONUÇLAR

1. Her iki küme modeli içinde, Hg^{2+} ve Ag^+ nin ikili baz komplekslerinde Adenin bazı Timin bazına göre daha kararlıdır.
2. Her iki metal iyonunun bazlara olan uzaklıkları incelendiğinde, metallerin T-T kompleksi ile yaptıkları bağ uzunluğu en büyüktür.
3. Metal iyonlarına koordine olan baz sayısı arttıkça, HOMO-LUMO bant aralığı yaklaşık 1 eV azalmaktadır. HOMO-LUMO bant genişliği en fazla olan yapılar, her iki metal iyonlarını içeren KM2' ye bağlı A-T koordinasyonuna aittir.
4. En düşük sertlik derecesine sahip kompleks KM2-Ag-T-T dir. Kimyasal potansiyel değeri en yüksek moleküller; KM1 (-6, 98 eV) ve KM2 (-7, 02 eV) dir. Elektrofilisite değeri en yüksek olan molekül KM2-Ag-T-T (6, 07 eV) dir.
5. Hesapsal UV-Vis absorpsiyon sonuçları göstermiştir ki; her iki metal iyonu için, model zeolit kümelerine bazların koordinasyon sayısının artması ile daha uzun dalga boylarında absorpsiyon vermektedir (KM1-Hg-A-T; 248 nm, KM1-Ag-A-T; 574 nm).

KAYNAKÇA

1. Cronstedt, A.F., Kongl Vetenskaps Academiens Handlingar Stockholm, 17, p. 120, 1756 1. Chester, A.W. and Derouane, E.G., Zeolite characterization and catalysis: *A Tutorial Springer Science & Business Media*, 360, **2009**
2. Wright, A.C., Rupert, J.P. and Granquist, W.T., High and low silica faujasites: substitutional series, *The American Mineralogist*, 53, **1968**.
3. Lodish, H., Berk, A., Zipursky, L., Matsudaira, P., Baltimore, D. and Darnell J. . *Molecular Cell Biology*, 4th edition New York: W. H. Freeman; **2000**. ISBN-10: 07167-3136-3
4. Cronstedt, A.F., Kongl Vetenskaps Academiens Handlingar Stockholm, 17, p. 120, **1756**
5. Pohl, W.L. *Economic Geology: Principles and practice*, Wiley-Blackwell, 678, **2011**, ISBN: 978-1-4443-3663-4
6. Clifton, R., *Natural and synthetic zeolites* , United States of Department of Interior , **1987**.
7. Rhodes, C., *The properties and applications of zeolites Science Progress* 93(3), 1–63, **2010**.
8. Linda J. Broadbelt, Randall Q. Snurr, *Applications of molecular modeling in heterogeneous catalysis research*, *Applied Catalysis A: General* 200 (**2000**) 23–46
9. Clifton, R., *Natural and synthetic zeolites* , United States of Department of Interior , **1987**.
10. Rhodes, C., *The properties and applications of zeolites Science Progress* 93(3), 1–63, **2010**.
11. Clifton, R., *Natural and synthetic zeolites* , United States of Department of Interior , **1987**

12. T. Sano, Y. Kiyozumi, M. Kawamura, F. Mizukami, and H. Takaya, T. Mouri, W. Inaoka, and Y. Toida, M. Watanabe and K. Toyoda, *ZEOLITES*, 11(1991) 842-845
13. Tsitsishvili, G.V., Andronikashvili, T.G., Kirov, G.N., Filizova, L.D., *Natural Zeolites*, Simon and Schuster International Group, 101-204 **1992**
14. Smirniotis, P.G. and Zhang, W. Effect of the Si/Al Ratio and of the Zeolite Structure on the Performance of Dealuminated Zeolites for the Reforming of Hydrocarbon Mixtures, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35 (9), pp 3055–3066, **1996**.
15. Cejka, J, Zeolites and ordered mesoporous materials: progress and prospects, Elsevier Science, 394, **2005**.
16. Martínez, J., Li, K. and Krishnaiah, G., A mesostructured Y zeolite as a superior FCC catalyst from lab to refinery, *Chem. Commun.*, 48, 11841–11843, **2012**.
17. Smirniotis, P.G. and Zhang, W. Effect of the Si/Al Ratio and of the Zeolite Structure on the Performance of Dealuminated Zeolites for the Reforming of Hydrocarbon Mixtures, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35 (9), pp 3055–3066, **1996**.
18. Namuangruk S, Tantanak D, Limtrakul J. Application of ONIOM calculations in the study of the effect of the zeolite framework on the adsorption of alkenes to ZSM5. *J Mol Catal A Chem.* 2006;256:113–121.10.1016/j.molcata.2006.04.060.
19. Dahm, R.J. Discovering DNA: Friedrich Miescher and the early years of nucleic acid research, *Human Genetics* 122, 565–581, **2008**.
20. Hollman, G.G., Steenbruggen, G., Janssen, J.M.: A two-step process for the synthesis of zeolites from coal fly ash. *Fuel* 78, 1225–1230 (**1999**)
21. Jha, B., Singh, D.N.: A review on synthesis, characterization and industrial application of fly ash zeolites. *J. Mater. Edu.* 33(1–2), 65–132 (**2011**)
22. J. L.C. Fajin, M. Natalia, D.S. Cordeiro, J. R.B. Gomes, *Applied Catalysis A: General* 458 (**2013**) 90–102
23. Pınar, A., Uğurlu, A., “Doğal Zeolitlerin Atıksu Arıtımında Kullanımı”, *Jeoloji Mühendisliği Dergisi* 28 (2) : 13-20, **2004**.

24. M.B. Hafez, A.F. Nazmy, F. Salem, M. Eldesoki, J. Radioanal. Chem. 47 (1978) 115.
25. Dyer, A., LasM, T., Zubair, M., The Use of natural zeolites for radioactive waste treatment: studies on leaching from zeolite/cement composites, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 243,3, pp 839–841, **2000**.
26. Athanasiadis,K., Helmreich,B. and Wilderer, P.A., Elimination of zinc from roof runoff through geotextile and clinoptilolite filters, Clean Soil Air Water, 32 (6), 419– 428, **2005**.
27. Öz, B. Doğal zeolitlerin modifiye edilmesiyle elde edilen anyonik reçinelerin sulardaki bazı metal iyonlarının gideriminde kullanımı **2012** HİTİT ÜNİVERSİTESİ
28. Jha, Bhagwanjee, Singh, Devendra Narain, Fly Ash Zeolites Innovations , Applications, and Directions Advanced Structured Materials, **2016**. ISBN 978-981-101404-
29. Namuangruk S, Tantanak D, Limtrakul J. Application of ONIOM calculations in the study of the effect of the zeolite framework on the adsorption of alkenes to ZSM5. J Mol Catal A Chem. 2006;256:113–121.10.1016/j.molcata.**2006**.04.060
30. Lemoine, W., Comparison of different types of zeolites used as solid acid catalysts in the transesterification reaction of jatropha-type oil for biodiesel production, Worcester Polytechnic institute **2013**
31. Gülen,J., Zorbay, F., Arslan, S. “Zeolitler ve Kullanım Alanları” Karaelmas Science and Engineering Journal 2 (1), 63-68, **2012**.
32. Dahm, R.J. Discovering DNA: Friedrich Miescher and the early years of nucleic acid research, *Human Genetics* 122, 565–581, **2008**.
33. Petty, J. T., Fan, C., Story, S., Sengupta, B., Iyer, A.S., Prudowsky, Z. and Dickson, R.M., DNA encapsulation of ten silver atoms produces a bright, modulatable, near infrared-emitting cluster, J Phys Chem Lett. 17, 2524–2529, **2010**.

34. Dervan, P.B., **1998**, Design of Sequence-specific DNA-binding molecules, *Science*, 232: 464-471 pp
35. Dahm, R.J. Discovering DNA: Friedrich Miescher and the early years of nucleic acid research, *Human Genetics* 122, 565–581, **2008**.
36. Nakazaki, Y., Goto, N. and Inui, T. Simulation of dynamic behaviors of simple aromatic hydrocarbons inside the pores of a pentasil zeolite *Journal of Catalysis* 136 (1), 141-148, **1992**
37. Petty, J.T., Fan, C., Story, S., Sengupta, B., Iyer, A.S., Prudowsky, Z. and Dickson, R.M., DNA encapsulation of ten silver atoms produces a bright, modulatable, near infrared-emitting cluster, *J Phys Chem Lett.* 17, 2524–2529, **2010**.
38. Shah, P., Rørvig-Lund, A., Chaabane, S., Thulstrup, P., Kjaergaard, H., Fron, E., Hofkens, J., Yang, S. and Vosch, T., Design aspects of bright red emissive silver nanoclusters/DNA probes for microRNA detection. *ACS Nano*, 10, 8803–8814, **2012**.
39. Srivastava, R., Complexes of DNA bases and Watson–Crick base pairs interaction with neutral silver Ag_n (n = 8, 10, 12) clusters: a DFT and TDDFT study, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 1-13, **2017**.
40. Petty, J.T., Fan, C., Story, S., Sengupta, B., Iyer, A.S., Prudowsky, Z. and Dickson, R.M., DNA encapsulation of ten silver atoms produces a bright, modulatable, near infrared-emitting cluster, *J Phys Chem Lett.* 17, 2524–2529, **2010**
41. M. Ganjtabesh, J. M. Steyaert, Enumerating RNA structures, including pseudoknots of any topology, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 66 (**2011**) 399–414.
42. Erdem, S, S, Hesapsal Organik Kimya Ders Notları, Temmuz **2006**

EKLER

EK 1 KM1 Hg²⁺ komplekslerin bağ uzunlukları

Bağ Uzunluğu	KM1-Hg-A-T	Bağ Uzunluğu	KM1-Hg-A-A	Bağ Uzunluğu	KM1-Hg-T-T
Al1-O2	1, 847	Al1-O2	1, 853	Al1-O2	1, 863
Si3-O4	1, 676	Si3-O4	1, 684	Si3-O4	1, 693
Si5-H43	1, 483	Si5-H43	1, 482	Si5-H43	1, 484
Al7-H44	1, 631	Al7-H44	1, 613	Al7-H44	1, 619
Hg13-Al1	3, 227	Hg13-Al1	3, 315	Hg13-Al1	3, 216
Hg13-Si3	3, 521	Hg13-Si3	3, 619	Hg13-Si3	3, 532
Hg13-O2	2, 414	Hg13-O2	2, 517	Hg13-O2	2, 346
Hg-13-O4	3, 433	Hg-13-O4	3, 459	Hg-13-O4	3, 601
Hg13-O28	2, 497	Hg13-H23	3, 765	Hg13-O28	2, 605
Hg13-N34	4, 253	Hg13-N21	4, 447	Hg13-N34	4, 859
Hg13-H36	3, 925	Hg13-C17	4, 559	Hg13-H36	5, 128
Hg13-N30	4, 680	Hg13-C16	3, 793	Hg13-N30	3, 786
Hg13-C29	3, 619	Hg13-N24	2, 550	Hg13-C29	3, 558
Hg13-N14	2, 431	Hg13-C25	3, 216	Hg13-H42	3.132
Hg13-C19	3, 271	Hg13-H28	3, 129	Hg13-O14	2, 487
Hg13-H20	3, 158	Hg13-H29	3, 526	Hg13-C15	3, 567
Hg13-C15	3, 472	Hg13-C30	3, 409	Hg13-N16	3, 916
Hg13-N26	3, 923	Hg13-N31	2, 499	Hg13-H17	3, 343
Hg13-H27	3, 618	Hg13-C32	3, 589	Hg13-N26	4, 782
O28-N14	3, 255	Hg13-C33	4, 155	Hg13-H27	4, 976
O28-C19	3, 077	Hg13-N34	3, 834	Hg13-H42	3.132
O28-C15	4, 600	Hg13-H35	3, 108	O28-O14	3, 271
O28-N26	5, 554	C30-C25	4, 547	O28-H27	1, 569
H36-H20	3, 329	H29-H28	4, 069	O19-H37	1, 893
C15-N30	6, 545	N31-N24	3, 440	C30-N26	3, 505
N26-N30	7, 357	C32-C16	4, 730	C30-C18	4, 090
H20-O28	2.250	C33-C17	4, 597	N26-N34	3, 611
H20-C29	3, 227	N34-N21	3, 079	N26-C18	3, 702
O28-H27	5, 580	H35-H23	2, 406	O19-H25	3, 798

EK 2 KM 1 Ag⁺ komplekslerin bağ uzunlukları

Bağ Uzunluğu	KM1-Ag-A-A	Bağ Uzunluğu	KM1-Ag-T-T	Bağ Uzunluğu	KM1-Ag-T-A
Al1-O2	1, 813	Al1-O2	1, 703	Al1-O2	1, 884
Si3-O4	1, 661	Si3-O4	1, 853	Si3-O4	1, 699
Si5-H43	1, 486	Si5-H43	1, 613	Si5-H43	1, 483
Al7-H44	1, 622	Al7-H44	1, 479	Al7-H44	1, 619
Ag13-Al1	3, 465	Ag13-Al1	3, 087	Ag13-Al1	3, 257
Ag13-Si3	3, 883	Ag13-Si3	3, 387	Ag13-Si3	3, 367
Ag13-O2	2, 204	Ag13-O2	2, 181	Ag13-O2	2, 226
Ag-13-O4	3, 240	Ag-13-O4	3, 363	Ag-13-O4	3, 474
Ag13-H23	3, 170	Ag13-O28	2, 626	Ag13-H20	2, 943
Ag13-N21	3, 819	Ag13-N34	3, 701	Ag13-C19	3, 037
Ag13-C17	4, 033	Ag13-H36	3, 076	Ag13-N14	2, 215
Ag13-C16	3, 376	Ag13-N30	4, 803	Ag13-C15	3, 277
Ag13-N24	2, 237	Ag13-C29	3, 527	Ag13-N26	3, 790
Ag13-C25	3, 110	Ag13-H42	5, 099	Ag13-H27	3, 535
Ag13-H28	3, 216	Ag13-O19	5, 823	Ag13-O28	2, 703
Ag13-H29	4, 136	Ag13-O14	3, 979	Ag13-C29	3, 844
Ag13-C30	3, 028	Ag13-C15	4, 613	Ag13-N30	4, 437
Ag13-N31	2, 259	Ag13-N16	5, 964	Ag13-H42	4, 045
Ag13-C32	3, 479	Ag13-H17	6, 376	Ag13-N34	4, 955
Ag13-C33	4, 230	Ag13-N26	4, 429	Ag13-H36	4, 971
Ag13-N34	4, 123	Ag13-H27	3, 572	O28-H20	2, 175
Ag13-H35	3, 420	O28-O14	3, 727	O28-C19	3, 072
C30-C25	4, 332	O28-H17	1, 715	O28-N14	3, 382
H29-H28	3, 882	H42-O19	1, 700	O28-C15	4, 727
N31-N24	3, 225	N26-N30	3, 719	O28-N26	5, 729
C32-C16	4, 506	C15-N30	3, 621	O28-H27	5, 793
C33-C17	4, 457	C15-C31	4, 037	H42-H20	3, 264
N34-N21	3, 099	H42-H27	2, 577	H36-N26	5, 276
H35-H23	2, 439	O28-C15	4, 939	N34-N26	5, 484

EK 3 KM 2 Hg²⁺ komplekslerin bağ uzunlukları

Bağ Uzunluğu	KM2-Hg-T-T	Bağ Uzunluğu	KM2-Hg-A-A	Bağ Uzunluğu	KM2-Hg-A-T
Al1-O2	1, 875	Al1-O2	1, 875	Al1-O2	1, 784
Si3-O4	1, 675	Si3-O4	1, 662	Si3-O4	1, 680
Si5-H43	1, 480	Si5-H43	1, 488	Si5-H43	1, 486
Al7-H44	1, 635	Al7-H44	1, 617	Al7-H44	1, 607
Hg13-Al1	3, 199	Hg13-Al1	3, 316	Hg13-Al1	3, 282
Hg13-Si3	3, 484	Hg13-Si3	3, 705	Hg13-Si3	3, 186
Hg13-Si5	4, 096	Hg13-Si5	4, 456	Hg13-Si5	4, 298
Hg13-O2	2, 300	Hg13-O2	2, 399	Hg13-O2	2, 528
Hg13-O4	3, 396	Hg13-O4	3, 863	Hg13-O4	3, 771
Hg13-O28	2, 362	Hg13-H28	3, 434	Hg13-O28	2, 480
Hg13-C29	3, 485	Hg13-C25	3, 323	Hg13-C29	3, 634
Hg13-N34	4, 109	Hg13-C15	3, 277	Hg13-N34	4, 249
Hg13-H36	3, 796	Hg13-N24	2, 434	Hg13-H36	3, 900
Hg13-N30	4, 539	Hg13-C16	3, 535	Hg13-N30	4, 732
Hg13-H42	4.598	Hg13-C17	4, 124	Hg13-H42	4.764
Hg13-O14	5, 560	Hg13-N21	3, 847	Hg13-H23	3, 051
Hg13-C15	5, 764	Hg13-H23	3, 085	Hg13-N21	3, 828
Hg13-N16	5, 156	Hg13-H35	3, 186	Hg13-C17	4, 076
Hg13-H17	4, 408	Hg13-N34	3, 923	Hg13-C16	3, 470
Hg13-O19	5, 616	Hg13-C33	4, 210	Hg13-N24	2, 364
Hg13-C18	5, 848	Hg13-C32	3, 619	Hg13-C25	3, 240
O14-H42	1, 732	Hg13-N31	2, 505	Hg13-H27	3, 338
C18-N30	3, 863	Hg13-C30	3, 379	O28-N24	3, 033
N16-C29	4, 929	Hg13-H29	3, 473	N34-N21	4, 224
N16-O28	4, 453	N24-N31	3, 265	N30-N24	5, 026
O14-H42	3, 901	C25-C32	3, 758	O28-C17	3, 606
N26-N30	4, 428	C25-N24	3, 532	O28-C16	3, 443

EK 4 KM 2 Ag⁺ komplekslerin bağ uzunlukları

Bağ Uzunluğu	KM2-Ag-A-A	Bağ Uzunluğu	KM2-Ag-T-T	Bağ Uzunluğu	KM2-Ag-A-T
Al1-O2	1, 871	Al1-O2	1, 725	Al1-O2	1, 832
Si3-O4	1, 665	Si3-O4	1, 673	Si3-O4	1, 684
Si5-H43	1, 482	Si5-H43	1, 490	Si5-H43	1, 484
Al7-H44	1, 624	Al7-H44	1, 593	Al7-H44	1, 642
Ag13-Al1	3, 238	Ag13-Al1	3, 596	Ag13-Al1	3, 119
Ag13-Si3	3, 559	Ag13-Si3	3, 254	Ag13-Si3	3, 397
Ag13-Si5	4, 543	Ag13-Si5	3, 475	Ag13-Si5	4, 670
Ag13-O2	2, 276	Ag13-O2	2, 340	Ag13-O2	2, 240
Ag13-O4	3, 839	Ag13-O4	3, 155	Ag13-O4	4, 215
Ag13-H28	3, 259	Ag13-O14	5, 306	Ag13-H27	3, 373
Ag13-C25	3, 096	Ag13-C15	5, 101	Ag13-C25	3, 163
Ag13-N24	2, 162	Ag13-N16	4, 265	Ag13-N24	2, 192
Ag13-C16	3, 246	Ag13-H17	3, 608	Ag13-C16	3, 234
Ag13-C17	3, 855	Ag13-C18	4, 645	Ag13-C17	3, 802
Ag13-N21	3, 637	Ag13-O19	4.360	Ag13-N21	3, 577
Ag13-H23	2, 915	Ag13-N26	6, 117	Ag13-H23	2, 897
Ag13-H35	3, 107	Ag13-H27	6, 847	Ag13-H22	4, 503
Ag13-N34	3, 758	Ag13-O28	5, 579	Ag13-O28	2, 563
Ag13-C33	3, 958	Ag13-C29	4, 956	Ag13-C29	3, 595
Ag13-C32	3, 346	Ag13-N30	3, 593	Ag13-N30	4, 856
Ag13-N31	2, 274	Ag13-C31	3, 348	Ag13-H42	5, 051
Ag13-C30	3.203	Ag13-O35	2, 372	Ag13-N34	3, 960
Ag13-H29	3, 372	O35-N16	3, 858	Ag13-H36	3, 442
Ag13-H29	3, 473	C31-C18	5, 653	O28-N14	3, 517
C25-N34	4, 271	C32-C15	4, 917	N34-N21	4, 832
N24-N31	3, 160	O35-O14	4, 066	N34-C17	5, 354
N21-C30	3, 271	O35-O19	4, 903	C29-N24	4, 603

EK 5 Hg²⁺ ve Ag⁺ komplekslerinin hesaplanmış dipol momentleri dipol moment değerleri

Kompleks	μ_x	μ_y	μ_z	μ_t
Adenin	2, 238	-1, 365	0, 001	2, 622
Timin	1, 228	-4, 747	0, 000	4, 903
KM-1	-0, 001	-0, 004	0, 001	0, 004
KM-2	-0, 267	0, 002	0, 167	0, 315
KM1-Ag	-0, 004	0, 023	-0, 007	0, 025
KM1-Hg	0, 000	0, 000	-0, 001	0, 001
KM2-Ag	3, 228	0, 470	0, 002	3, 262
KM2-Hg	-5, 548	-0, 002	0, 001	5, 548
KM1-Ag-T	-2, 637	0, 187	-4, 134	4, 907
KM1-Hg-T	-4, 660	0, 061	-4, 591	6, 542
KM1-Ag-A	-4, 738	-0, 486	-1, 267	4, 929
KM1-Hg-A	-4, 748	0, 002	1, 467	4, 970
KM2-Ag-T	-3, 269	-1, 122	-3, 215	4, 720
KM2-Hg-T	-6, 804	1, 195	-0, 287	6, 914
KM2-Ag-A	-2, 075	-0, 541	-4, 308	4, 812
KM2-Hg-A	1, 527	1, 968	4, 190	4, 875
KM1-Ag-A-A	-1, 987	2, 883	-5, 140	6, 219
KM1-Ag-T-A	-0, 830	6, 764	-0, 063	6, 815
KM1-Ag-T-T	1, 383	9, 287	-0, 549	9, 406
KM1-Hg-A-A	-0, 122	2, 649	-4, 446	5, 177
KM1-Hg-T-A	-0, 120	5, 999	1, 160	6, 111
KM1-Hg-T-T	3, 956	12, 398	0, 377	13, 019
KM2-Ag-A-A	0, 012	4, 173	0, 772	4, 243
KM2-Ag-T-T	10, 827	9, 280	-4, 620	14, 891
KM2-Ag-A-T	-0, 058	-0, 468	-2, 588	3, 790
KM2-Hg-A-A	-1, 809	4, 552	2, 012	5, 295
KM2-Hg-A-T	0, 635	3, 047	2, 464	3, 970
KM2-Hg-T-T	11, 005	-2, 116	-5, 821	12, 628

EK 6 Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin denge kararlılıkları (kcal/mol) (Eşitlik 1-12)

Eşitlik 1	$\text{KM1-Hg-T-A} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg-A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg} + \text{A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM1} + \text{Hg} + \text{A} + \text{T}$				
	-905044, 84	-905028, 112	-905035, 51	-905008, 862	-904294, 113
	0	16, 728	9, 33	35, 978	750, 727
Eşitlik 2	$\text{KM1-Hg-A-A} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg-A+A} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg} + \text{A+A} \rightleftharpoons \text{KM1+Hg+2A}$				
	-913294, 269	-913292, 507	-913265, 863	-912551, 045	
	0	1, 762	28, 406	743, 225	
Eşitlik 3	$\text{KM1-Hg-T-T} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg-T+T} \rightleftharpoons \text{KM1-Hg} + \text{T+T} \rightleftharpoons \text{KM1+Hg+2T}$				
	-896790, 560	-896771, 127	-896751, 879	-896037, 121	
	0	19, 433	38, 681	753, 499	
Eşitlik 4	$\text{KM1-Ag-T-A} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag-A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag} + \text{A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM1+Ag} + \text{A+T}$				
	-969659, 33	-969646, 612	-969649, 02	-969630, 942	-969357, 064
	0	12, 718	2, 408	28, 388	302, 266
Eşitlik 5	$\text{KM1-Ag-A-A} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag-A+A} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag} + \text{A+A} \rightleftharpoons \text{KM1+Ag+2A}$				
	-977914, 070	-9779908, 012	-977887, 938	-768811, 070	
	0	6, 058	26, 132	300, 012	
Eşitlik 6	$\text{KM1-Ag-T-T} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag-T+T} \rightleftharpoons \text{KM1-Ag} + \text{T+T} \rightleftharpoons \text{KM1+Ag+2T}$				
	-961406, 539	-961389, 627	-961373, 954	-961100, 072	
	0	16, 912	32, 585	306, 467	
Eşitlik 7	$\text{KM2-Hg-T-A} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg} + \text{A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM2+Hg+A+T}$				
	-905040, 44	-905019, 522	-905026, 51	-905002, 264	-904296, 373
	0	20, 918	13, 93	38, 176	744, 067
Eşitlik 8	$\text{KM2-Hg-A-A} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg-A+A} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg} + \text{A+A} \rightleftharpoons \text{KM2+Hg+2A}$				
	-913296, 615	-913283, 506	-913259, 256	-912553, 365	
	0	13, 109	37, 359	743, 25	
Eşitlik 9	$\text{KM2-Hg-T-T} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg-T+T} \rightleftharpoons \text{KM2-Hg} + \text{T+T} \rightleftharpoons \text{KM2+Hg+2T}$				
	-896781, 165	-896762, 535	-896745, 272	-843587, 659	
	0	18, 63	35, 893	53, 193	
Eşitlik 10	$\text{KM2-Ag-T-A} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag-T} + \text{A} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag} + \text{A} + \text{T} \rightleftharpoons \text{KM2+Ag+A+T}$				
	-969661, 15	-969639, 102	-969646, 06	-969630, 802	-96935
	0	22, 048	15, 09	30, 348	279, 826
Eşitlik 11	$\text{KM2-Ag-A-A} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag-A+A} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag} + \text{A+A} \rightleftharpoons \text{KM2+Ag+2A}$				
	-977916, 080	-977903, 075	-977887, 799	-977616, 316	
	0	13, 005	28, 281	299, 764	
Eşitlik 12	$\text{KM2-Ag-T-T} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag-T+T} \rightleftharpoons \text{KM2-Ag} + \text{T+T} \rightleftharpoons \text{KM2+Ag+2T}$				
	-961396, 92	-961382, 12	-961373, 815	-961102, 33	
	0	14, 8	23, 105	294, 588	

EK 7 Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 ile DNA bazlarının oluşturduğu komplekslerin enerjileri (eV).

Kompleks	E_{HOMO}	E_{LUMO}	ΔE	Kompleks	E_{HOMO}	E_{LUMO}	ΔE
KM-1	-7, 18	-6, 78	0, 51	KM-2	-7, 28	-6, 77	0, 51
KM1-Ag	-7, 47	-1, 27	6, 20	KM2-Ag	-7, 64	-1, 26	6, 38
KM1-Hg	-7, 18	-2, 80	4, 38	KM2-Hg	-6, 99	-3, 01	3, 98
KM1-Ag-T	-7, 08	-1, 77	5, 31	KM2-Ag-T	-6, 91	-2, 20	4, 71
KM1-Hg-T	-6, 83	-2, 06	4, 78	KM2-Hg-T	-6, 63	-2, 65	3, 99
KM1-Ag-A	-6, 81	-1, 99	4, 82	KM2-Ag-A	-6, 97	-1, 90	5, 07
KM1-Hg-A	-6, 90	-1, 94	4, 96	KM2-Hg-A	-6, 87	-2, 25	4, 62
KM1-Ag-A-A	-6, 91	-2, 06	4, 85	KM2-Ag-A-A	-6, 66	-2, 03	4, 64
KM1-Ag-T-A	-6, 58	-1, 73	4, 84	KM2-Ag-T-T	-6, 00	-2, 81	3, 19
KM1-Ag-T-T	-6, 81	-2, 00	4, 81	KM2-Ag-A-T	-6, 54	-1, 58	4, 96
KM1-Hg-A-A	-6, 71	-1, 94	4, 77	KM2-Hg-A-A	-6, 57	-2, 00	4, 57
KM1-Hg-T-A	-6, 66	-1, 85	4, 81	KM2-Hg-A-T	-6, 77	-1, 86	4, 92
KM1-Hg-T-T	-6, 58	-2, 41	4, 17	KM2-Hg-T-T	-6, 81	-2, 13	4, 68

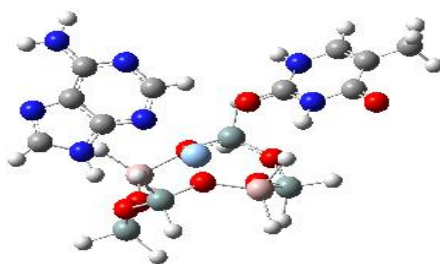
EK 8 Hesaplanan Hg²⁺ ve Ag⁺ komplekslerine ait global reaktivite tanımlayıcıları (eV)

	I	A	X	η	S	μ	ω
KM-1	7, 18	6, 78	6, 98	0, 20	5, 04	-6, 98	122,75
KM-2	7, 28	6, 77	7, 02	0, 25	3, 95	-7, 02	97,58
KM1-Ag	7, 47	1, 27	4, 37	3, 10	0, 32	-4, 37	3,08
KM1-Hg	7, 18	2, 80	4, 99	2, 19	0, 46	-4, 99	5,69
KM2-Ag	7, 64	1, 26	4, 45	3, 19	0, 31	-4, 45	3,11
KM2-Hg	6, 99	3, 01	5, 00	1, 99	0, 50	-5, 00	6,28
KM1-Ag-T	7, 08	1, 77	4, 42	2, 66	0, 38	-4, 42	3,68
KM1-Hg-T	6, 83	2, 06	4, 45	2, 39	0, 42	-4, 45	4,14
KM1-Ag-A	6, 81	1, 99	4, 40	2, 41	0, 42	-4, 40	4,02
KM1-Hg-A	6, 90	1, 94	4, 42	2, 48	0, 40	-4, 42	3,93
KM2-Ag-T	6, 91	2, 20	4, 56	2, 35	0, 43	-4, 56	4,41
KM2-Hg-T	6, 63	2, 65	4, 64	1, 99	0, 50	-4, 64	5,40
KM2-Ag-A	6, 97	1, 90	4, 44	2, 53	0, 39	-4, 44	3,89
KM2-Hg-A	6, 87	2, 25	4, 56	2, 31	0, 43	-4, 56	4,50
K1-Ag-A-A	6, 91	2, 06	4, 49	2, 43	0, 41	-4, 49	4,15
KM1-Ag-T-A	6, 58	1, 73	4, 16	2, 42	0, 41	-4, 16	3,57
KM1-Ag-T-T	6, 81	2, 00	4, 41	2, 41	0, 42	-4, 41	4,03
KM1-Hg-A-A	6, 71	1, 94	4, 32	2, 38	0, 42	-4, 32	3,92
KM1-Hg-T-A	6, 66	1, 85	4, 26	2, 40	0, 42	-4, 26	3,77
KM1-Hg-T-T	6, 58	2, 41	4, 50	2, 08	0, 48	-4, 50	4,85
KM2-Ag-A-A	6, 66	2, 03	4, 34	2, 32	0, 43	-4, 34	4,07
KM2-Ag-T-T	6, 00	2, 81	4, 40	1, 60	0, 63	-4, 40	6,07
KM2-Ag-A-T	6, 54	1, 58	4, 06	2, 48	0, 40	-4, 06	3,33
KM2-Hg-A-A	6, 57	2, 00	4, 29	2, 29	0, 44	-4, 29	4,03
KM2-Hg-A-T	6, 77	1, 86	4, 32	2, 46	0, 41	-4, 32	3,79
KM2-Hg-T-T	6, 81	2, 13	4, 47	2, 34	0, 43	-4, 47	4,27

EK 9 Hg²⁺ ve Ag⁺ Kompleklerinin Absorpsiyon Spektrumu ve Osilatör Güç Değerleri

Kompleks	λ_{\max} UV	f_{osc}
Adenin	170, 30	0, 236
Timin	170, 13	0, 458
KM-1	1209, 41	0, 118
KM-2	980, 88	0, 104
KM1-Ag	837, 78	0, 034
KM1-HG	255, 55	0, 186
KM2-Ag	1089, 39	0, 082
KM2-Hg	230, 92	0, 072
KM1-Ag-T	348, 88	0, 166
KM1-Hg-T	214, 66	0, 179
KM1-Ag-A	299, 18	0, 123
KM1-Hg-A	251, 89	0, 183
KM2-Ag-T	473, 57	0, 019
KM2-Hg-T	269, 75	0, 142
KM2-Ag-A	552, 66	0, 018
KM2-Hg-A	261, 92	0, 064
KM1-Ag-A-A	427, 40	0, 037
KM1-Ag-T-A	574, 62	0, 049
KM1-Ag-T-T	394, 97	0, 034
KM1-Hg-A-A	254, 63	0, 114
KM1-Hg-T-A	251, 24	0, 186
KM1-Hg-T-T	245, 73	0, 121
KM2-Ag-A-A	469, 63	0, 039
KM2-Ag-T-T	362, 08	0, 002
KM2-Ag-A-T	468, 95	0, 016
KM2-Hg-A-A	268, 06	0, 069
KM2-Hg-A-T	248, 45	0, 134
KM2-Hg-T-T	306, 77	0, 011

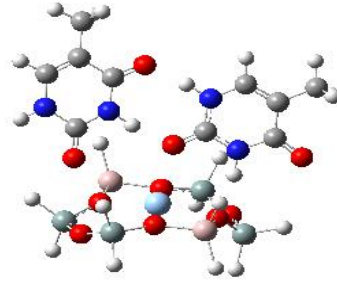
EK 10 KM1-Ag-A-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINCLEVREK108\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H23Ag1Al2N7O8Si4(2)\ROOT\25
-Oct-2016\0\#\#N Geom=AllCheck Guess=TCheck SCRF=Check GenChk UB3LYP/LAN
L2DZ Freq\K1-AG-T-A-250\1, 1\Si, 1.4206037382, 2.6935741157, 0.382153318 1\H,
2.6545105416, 2.6683565779, -0.4396485942\H, 1.4570272351, 3.779130884 7,
1.3912802047\O, 0.0931489259, 2.9361250901, -0.6092388875\Si, -1.0136970 355,
2.1890624459, -1.6219751781\H, -0.8498694638, 2.6892430782, -3.0052438 202\H, -
2.3803490893, 2.4629403588, -1.1151563532\O, -0.6685562755, 0.52590 40915, -
1.5770847394\Al, -0.0175204284, -0.7237093407, -2.8291060868\O, 1.1 667209769, -
1.5749716882, -1.7874431683\Si, 2.3073709624, -2.5855280482, -1 .1735301897\H,
2.5754278464, -3.7583378654, -2.0405402842\H, 3.5627690049, -1.8952094894, -
0.7825638753\O, 1.6416444875, -3.2521362986, 0.2770184408\ Si, 1.6097449022, -
2.884510781, 1.9378045805\H, 0.6433333961, -3.8342215618 , 2.5303246154\H,
2.966958228, -3.015041714, 2.5182362653\O, 1.0818613105, - 1.2899192143,
2.0771991583\Al, 1.6777950261, 0.3287190466, 2.7242337471\O, 1.2167112395,
1.2041885582, 1.1690140772\H, 0.6891204924, 0.8610286018, 3.8 961081871\H, -
1.2277206363, -1.7160527893, -3.2457048648\H, 0.6602198264, 0 .1808169717, -
3.9910009249\H, 3.2573430243, 0.2943780306, 3.0273025393\C, - 2.247384732,
2.2130310182, 2.3806833155\N, -3.2887089605, 3.0977796336, 2.1 278755829\C, -
3.6015105488, 4.1711665228, 2.964326098\C, -2.899578346, 4.42 93249333,
4.103833775\C, -1.7705919135, 3.5417234933, 4.446502083\N, -1.532 0065385,
2.4803354678, 3.53045869\H, -4.4389259499, 4.7827036732, 2.6466570 705\O, -
2.0010334221, 1.2486764582, 1.6031581475\O, -1.0467163198, 3.675278 9755,
5.458673693\H, -3.8108887637, 2.9322248614, 1.2751292915\H, -0.735733 4388,
1.8574768324, 3.7370506378\C, -3.2025713771, 5.5722476241, 5.03759583 85\H, -
4.0536300339, 6.164399551, 4.6825513504\H, -3.4273548447, 5.19946883 33,
6.0444538515\H, -2.331169017, 6.23089035, 5.1371143125\C, -1.9021146823 , -
3.0952863999, -0.2604794531\C, -3.0857960349, -3.7911417683, -0.61263171 44\C, -
```

4.3043661074, -3.0694126106, -0.6184989284\C, -3.1139502101, -1.1670 115426,
0.0648314217\C, -1.4798961823, -5.2255495265, -0.7341211336\H, -3.1 340127171, -
0.1255178604, 0.35464249\H, 0.1169437814, -3.8516712158, -0.148 201874\H, -
0.9036492799, -6.1261765768, -0.8796371181\N, -2.7994507596, -5. 1266081865, -
0.9073085432\N, -0.8905544472, -4.0261937452, -0.3380941763\N , -1.8902967309, -
1.7731786852, 0.0869815879\N, -4.284380392, -1.7475180485 , -0.2595390619\N, -
5.4857559502, -3.6407964944, -0.9648835454\H, -5.511653 4079, -4.611908969, -
1.2460648904\H, -6.326815603, -3.0800018114, -0.963700 9703\Ag, -0.201484446, -
0.374110988, 0.4048371744\\Version=ES64L-G09RevD. 01\State=2-A\HF=-
1545.6103273\S2=0.752994\S2-1=0.\S2A=0.750008\RMSD=3. 034e-09\RMSF=6.434e-
06\ZeroPoint=0.3598849\Thermal=0.3974609\Dipole=-2 .674462, -0.0986958, 0.1619833

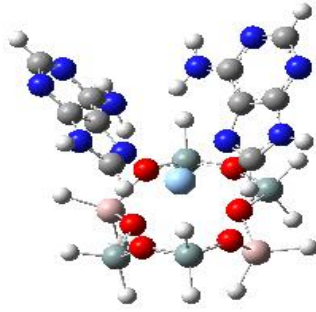
EK 11 KM1-Ag-T-T kompleksinin log dosyaları



```
l\1\GINCLEVREK26\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H24Ag1Al2N4O10Si4(2)\ROOT\08
-Nov-2016\0\#\#N Geom=AllCheck Guess=TChek SCRF=Check GenChk UB3LYP/LAN
L2DZ Freq\K1-AG-T-T-250\1, 1\Si, -2.672500489, -0.2953646759, 2.83775507 14\H, -
2.1052224859, 0.9019496301, 3.4944711937\H, -3.4080726898, -1.148648 523,
3.801535764\O, -3.6982108645, 0.1154624091, 1.5948486017\Si, -3.984999 9292,
0.5473005849, 0.0127868281\H, -4.225412923, 1.9998276757, -0.13153066 08\H, -
5.1570557767, -0.2287210123, -0.4621092381\O, -2.621760522, 0.075040 9914, -
0.8932487808\Al, -1.9693352235, 0.0713475333, -2.6285216674\O, -0.75 06980538, -
1.2608633345, -2.1717608974\Si, 0.196114763, -2.4877122909, -2.8 702324675\H,
1.5271382741, -1.9494893064, -3.2416502633\H, -0.5176131331, - 3.0527675077, -
4.0380476818\O, 0.3894438193, -3.664028127, -1.7054164058\Si, 0.4145279893, -
4.2343641108, -0.1387895425\H, -0.7633728216, -5.10261667 21, 0.090455683\H,
1.694212863, -4.9169559294, 0.1348048748\O, 0.2934843793 , -2.8304535841,
0.8482210125\Al, -0.1693469713, -2.5144171131, 2.644242511 1\O, -1.4262952454, -
1.2396031956, 2.1492321485\H, -0.8737854762, -3.829536 3917, 3.2534396187\H, -
3.0635585157, -0.4857018921, -3.6757530601\H, -1.216 884372, 1.4578480657, -
2.9686059634\C, 2.3067182153, 0.0432655509, 0.189118 0734\N, 3.3264911268,
0.9179830026, -0.0961370302\C, 4.6518621676, 0.501622 2841, -0.1762188102\C,
5.0317598783, -0.7982863958, 0.0100760805\C, 3.98607 40664, -1.7903446956,
0.3091753488\N, 2.6689562245, -1.267846888, 0.3847014 872\H, 5.3663750887,
1.2858450556, -0.4009888928\O, 1.0850961272, 0.4201456 495, 0.2654804794\O,
4.1837084427, -3.0164933504, 0.489979519\H, 3.06250390 74, 1.9152895253, -
0.2466589027\H, 1.9016416375, -1.9173623191, 0.627130409 4\C, 6.4577406559, -
1.2778201579, -0.0737934818\H, 7.1425124551, -0.4538488 039, -0.3043586305\H,
6.7676822671, -1.7394499233, 0.8719510527\H, 6.562381 6466, -2.0498577803, -
0.8461968654\C, -0.9670468911, 3.4170226957, 0.715015 4708\N, -1.2382632042,
```

4.7867119885, 0.6200956197\C, -0.3071458376, 5.72101 0109, 0.1840813961\C,
0.9626974281, 5.3677098392, -0.1788141773\C, 1.320448 357, 3.9479603051, -
0.0963553673\N, 0.3229988264, 3.0692369249, 0.332562969 6\H, -0.6499622022,
6.7495846636, 0.1508964506\O, -1.8213285264, 2.59390577 07, 1.1142622201\O,
2.4747231673, 3.5050375844, -0.3896486486\H, -2.1754613 378, 5.0649056528,
0.8883691195\H, 0.5568680872, 2.0504053177, 0.341586097\ C, 2.0041767068,
6.3476425544, -0.6548449071\H, 1.6104119389, 7.37028005, -0 .6697648226\H,
2.8884998096, 6.322347611, -0.0063686154\H, 2.3470833814, 6. 0900535206, -
1.6643385485\H, 1.0703732706, -1.8297868794, 3.4059170184\Ag, -1.0111504765, -
1.1423516857, 0.0098662094\\Version=ES64L-G09RevD.01\HF= -
1532.4610998\S2=0.752872\S2-1=0.\S2A=0.750007\RMSD=2.611e-09\RMSF=9.0 41e-
06\ZeroPoint=0.3623203\Thermal=0.4004968\Dipole=0.5441065, 3.653866 7, -0.2159105

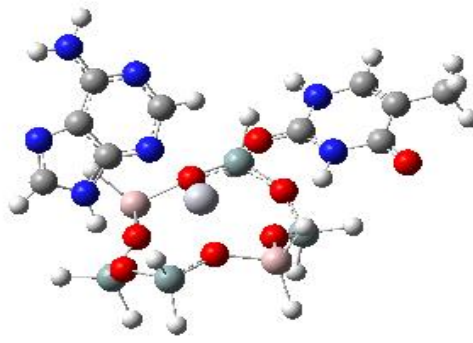
EK 12 KM1-Ag-A-A kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINCLEVREK86\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H22Ag1Al2N10O6Si4(2)\FSEVIN
DUZ\31-Oct-2016\0\#\#N Geom=AllCheck Guess=TChech SCRF=Check GenChk UB3LY
P\LANL2DZ Freq\K1-HG-A-A-250\1, 1\Si, 3.732517737, 0.0373203634, -0.4419
107695\H, 4.7406348968, -1.0080944575, -0.1496503663\H, 4.3379643031, 1.387
8471699, -0.5190580789\O, 3.0176258107, -0.2688411327, -1.9399181635\Si, 2.
4961063262, -1.491373154, -2.9987285531\H, 3.6822697464, -2.2433091335, -3.
4784079976\H, 1.8239565262, -0.7756998726, -4.1142253371\O, 1.3986359712, -
2.4371003979, -2.1853365088\Al, 1.3492989971, -3.5573929807, -0.7599174374 \O,
0.3630746855, -2.4962427169, 0.4430714775\Si, -0.7202587791, -3.0589289 655,
1.6427531294\H, -2.0764385267, -3.2222729642, 1.0672717486\H, -0.19697 84282, -
4.33134006, 2.1925017926\O, -0.805090356, -1.9076868247, 2.83969618 09\Si, -
0.2730712132, -0.6334655646, 3.7813718038\H, -1.4719018633, 0.10434 20952,
4.2508999651\H, 0.5240125064, -1.1600507154, 4.9145028242\O, 0.64476 71752,
0.4022014916, 2.8178636941\Al, 2.4351202125, 0.6419596038, 2.4984867 278\O,
2.5035599614, 0.0299522189, 0.7341203145\H, 2.7527401542, 2.22812831 07,
2.4437664446\H, 0.3623261951, -4.8195260369, -1.0138226219\H, 2.8521475 717, -
3.8083152265, -0.2280156843\H, 3.3169806568, -0.3124036029, 3.4555820 119\C, -
3.5976421915, -1.0676423919, -1.9534155908\C, -2.9226690423, -0.369 7287646, -
0.9183658846\C, -3.7461650112, 0.4284783727, -0.0673479708\C, -5. 6078725017, -
0.2687502391, -1.343324604\C, -1.4042251482, -1.5241858727, -2 .0373790849\H, -
6.681607664, -0.2075499948, -1.4831331264\H, -2.7768751711 , -2.3941970781, -
3.4227340355\H, -0.4518375332, -1.9645891339, -2.33692764 12\N, -1.5448254977, -
0.6807185063, -1.0010236462\N, -2.6132806102, -1.7758 650032, -2.6380543608\N, -
4.9229098828, -1.0518415567, -2.2135253994\N, -5. 094091142, 0.4474371045, -
0.3160821829\N, -3.3149770214, 1.1804369213, 0.97 82015155\H, -2.3471443263,
1.3084675832, 1.2525917451\H, -4.023679184, 1.69 39209376, 1.4881568608\C,
```


0.1262808958, 4.0234581639, -1.0916586162\C, -0.0 570340637, 3.0142068745, -
0.1154345384\C, -0.6586897443, 3.4201784943, 1.11 14498489\C, -0.9069902151,
5.5700279838, 0.1706049585\C, 0.9834332732, 2.08 44693759, -1.8180134859\H, -
1.2852496055, 6.5774022448, 0.3056737462\H, 1.0 986805799, 3.8692747574, -
2.9968414119\H, 1.5240122012, 1.3768333403, -2.42 86428695\N, 0.4718143315,
1.8068060825, -0.6122866916\N, 0.7964737148, 3.40 78088724, -2.1479911719\N, -
0.2766703701, 5.3093562682, -1.0029130499\N, -1 .1020642696, 4.7115462236,
1.2023711858\N, -0.8363577104, 2.5961087543, 2.1 862595912\H, -0.223062463,
1.7660276432, 2.3625607291\H, -1.2225861023, 3.0 584474341, 3.0049043362\Ag,
0.4144452083, -0.3246223384, 0.0656862487\\Ver sion=ES64L-G09RevD.01\HF=-
1558.7632684\S2=0.753172\S2-1=0.\S2A=0.75000 9\RMSD=4.112e-09\RMSF=7.068e-
06\ZeroPoint=0.3580642\Thermal=0.3944034\ Dipole=-0.7815772, 1.1343747, -
2.0220591

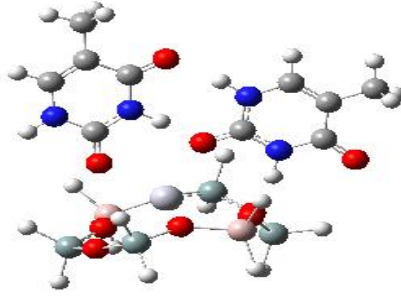
EK 13 KM1-Hg-A-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINC-LEVREK18\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H23Al2Hg1N7O8Si4\ROOT\27-
Oct-2016\0\#N      Geom=AllCheck      Guess=TCheck      SCRF=Check      GenChk
RB3LYP/LANL2DZFreq\K1-HG-T  A250\2,  1\Si,  1.3491594179,  2.8996614607,
0.7467987806\H,    2.6545695021,  3.0198275408,  0.0499655006\H,  1.2079422971,
3.9276787248, 1.8 073917919\O, 0.1108174196, 3.1422531564, -0.3571197876\Si, -
0.8063555952, 2 .5785291807, -1.6420901593\H, -0.4089935021, 3.2783053482, -
2.8875373653\H , -2.2312764046, 2.8623971459, -1.3198112851\O, -0.5350924737,
0.9236281724 , -1.767835794\Al, 0.1770066457, -0.3014807057, -2.9535832888\O,
0.95803454 15, -1.3232133255, -1.6287523152\Si, 2.0286700836, -2.5704692226, -
1.335854 2096\H, 1.9106884868, -3.6651788643, -2.3264054195\H, 3.4287684252, -
2.1029 361451, -1.1852703514\O, 1.5448062598, -3.2423542579, 0.1690653547\Si, 1.78
72083534, -2.8551494034, 1.8178846584\H, 0.9616796423, -3.8328547676, 2.561
13111\H, 3.2293224192, -2.9731606414, 2.1412087371\O, 1.2449435942, -1.2805
372754, 1.998447537\Al, 1.6472177491, 0.309459391, 2.8206259058\O, 1.168961 4658,
1.35336758, 1.397100488\H, 0.5226183572, 0.5835588902, 3.9709105367\H , -
0.9877481514, -1.157451023, -3.6760636813\H, 1.2987406316, 0.4123619715, -
3.8767181137\H, 3.199385179, 0.3970397918, 3.2390906676\Hg, -0.2467799808 , -
0.3158896278, 0.2836043855\C, -2.181670896, 2.1139404442, 2.1421772756\N , -
3.0830392616, 3.0965346843, 1.7729043988\C, -3.3684608159, 4.2081280004,
2.5682135223\C, -2.7778610505, 4.3982969918, 3.7816272859\C, -1.797243891,
3.3983149583, 4.2476315863\N, -1.5716151393, 2.3067488001, 3.3586844606\H, -
4.0898738802, 4.9048811343, 2.1562895449\O, -1.9707836027, 1.1146403295, 1
.3885093355\O, -1.1810326826, 3.4612583732, 5.3336914992\H, -3.4969874834,
2.9924903466, 0.8529680014\H, -0.854972647, 1.6185357989, 3.6451755423\C, -
3.0564693909, 5.577450966, 4.6766845737\H, -3.7934830073, 6.2540288616, 4.2
```

297054283\H, -3.4299177747, 5.2424959882, 5.6521242293\H, -2.1346452796, 6.
1387260544, 4.8721642906\C, -2.0735179919, -3.2484918852, -0.0668102419\C, -
3.2388186002, -4.0275239909, -0.2717454811\C, -4.4908897095, -3.364717350 6, -
0.2391792656\C, -3.3443356084, -1.3648014127, 0.1887026038\C, -1.574063 1245, -
5.3938246036, -0.394255591\H, -3.4034859469, -0.3032017073, 0.387450 9196\H, -
0.0119169749, -3.9116588991, -0.0411953347\H, -0.9640270419, -6.27 72015214, -
0.504741175\N, -2.9058380785, -5.3711851837, -0.4771129681\N, -1 .0200061558, -
4.1386339878, -0.1459048048\N, -2.0875961153, -1.899968477, 0 .1662197431\N, -
4.5101631819, -2.0169944335, 0.001801468\N, -5.6656419498, -4.0179162355, -
0.4350263851\H, -5.6647979378, -5.0120652802, -0.619691677 7\H, -6.5315782832, -
3.4972069984, -0.4066132973\\Version=ES64L-G09RevD.0 1\State=1-A\HF=-
1442.6406698\RMSD=2.866e-09\RMSF=3.896e-06\ZeroPoint=0
.3599649\Thermal=0.3976261\Dipole=-2.4017067, -0.1112992, 0.0175752

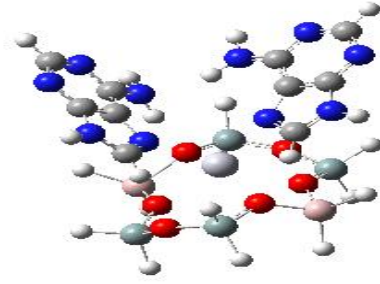
EK 14 KM1-Hg-T-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINC-LEVREK108\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H24Al2Hg1N4O10Si4\ROOT\25-
Oct-2016\0\#N      Geom=AllCheck      Guess=TCheck      SCRF=Check      GenChk
RB3LYP/LANL2DZFreq\K1-AG-T-T-250\2, 1\Si, 0.3188674375, -2.561616807, -
3.159249847\H, 1.1555926589, -1.8325602271, -4.145107085\H, -0.3105526292, -
3.7574248189, -3.769250318\O, 1.2780959241, -3.0160469064, 1.8780441824\Si,
1.8748415121, -3.063739293, -0.3178759646\H, 3.3050270221, 2.6625725777, -
0.3524125841\H, 1.7319413488, 4.4478009775, 0.199528354\O, 0.9622029854, -
1.9914139 323, 0.6055869913\Al, 0.7135589622, -1.3361051703, 2.3041841462\O, -
0.6710473312, -0.2099245705, 1.7686028453\Si, -2.0940363271, 0.4055310608, 2.45086
30978\H, -2.0785340619, 1.8887527078, 2.3991473089\H, -2.2516918381, -0.089
1063342, 3.8379308198\O, -3.3671926834, -0.1321799705, 1.5122184427\Si, -4.
0419687112, -0.8634304933, 0.1694602412\H, -4.0730840326, -2.3337095881, 0.
3624423131\H, -5.3905069728, -0.2966430521, -0.0430407769\O, -3.0214748311 , -
0.4771065525, -1.1447436906\Al, -2.6880936039, -1.1940940479, -2.8294545 261\O, -
0.8878162396, -1.5353659408, -2.5450233091\H, -3.4938241684, -2.577 4236988, -
3.0333267014\H, 0.1341434297, -2.4479983126, 3.3243032035\H, 2.00 2908766, -
0.4723705609, 2.7670616434\C, -1.8382828363, 2.7267095249, -1.492 2601267\N, -
1.6286514641, 4.0524249561, -1.771553832\C, -2.6849389116, 4.89 20204279, -
2.1358435321\C, -3.9727922474, 4.4482941107, -2.2251078377\C, -4 .2501527941,
3.0277639922, -1.9327855903\N, -3.1086077063, 2.2543477566, -1 .5815622375\H, -
2.4062293863, 5.919327271, -2.340625932\O, -0.8522403858, 1 .9601191497, -
1.1600059147\O, -5.3813028454, 2.4959438783, -1.9749035542\H , -0.6587354673,
4.4124420007, -1.7377114592\H, -3.2158297319, 1.2206762302 , -1.427185693\C, -
5.1360582108, 5.3230982329, -2.6126923093\H, -4.81545349 42, 6.3520510289, -
2.8099933709\H, -5.6319505052, 4.9288230238, -3.50816090 04\H, -5.8921414689,
5.3341170259, -1.8180155156\C, 2.4584703143, 1.4794305 223, -1.3976223344\N,
```

3.8147935261, 1.7233142289, -1.5500922437\C, 4.319967 7465, 3.0051252907, -
1.7736441729\C, 3.5177002242, 4.1110408299, -1.8688428 093\C, 2.0709232944,
3.9099988309, -1.7227218326\N, 1.6643859136, 2.5974662 51, -1.4808226186\H,
5.3981501794, 3.0697042897, -1.8699630155\O, 1.9806861 038, 0.3242573577, -
1.1993055894\O, 1.1893728407, 4.8196867574, -1.80251934 29\H, 4.4309784615,
0.9207581672, -1.4773219693\H, 0.6362098874, 2.41868618 9, -1.3512334053\C,
4.0349603381, 5.5047944844, -2.1150847799\H, 5.12633793 24, 5.5158368586, -
2.2096367777\H, 3.5999445069, 5.9234094747, -3.030814233 2\H, 3.7483198562,
6.1750588749, -1.2955067705\H, -2.8332494464, 0.00204368 5, -3.9045672032\Hg, -
0.4335710199, -0.416579218, -0.5568169678\\Version=E S64L-G09RevD.01\State=1-
A\HF=-1429.4887341\RMSD=3.703e-09\RMSF=7.991e-
06\ZeroPoint=0.3620677\Thermal=0.4004372\Dipole=3.4296413, 3.5564285, -1 .350991

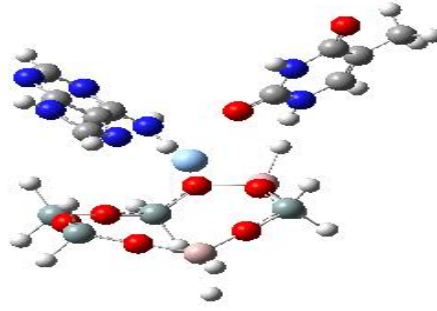
EK 15 KM1-Hg-A-A kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINC-LEVREK14\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H22Al2Hg1N10O6Si4\ROOT\25-  
Oct -2016\0\#\#N  Geom=AllCheck  Guess=TCheck  SCRF=Check  GenChk  
RB3LYP/LANL2DZ\Freq\K1-HG-A-A 250\2, 1\Si, 3.0015689053, 2.1425825775,  
1.3332810719\H , 4.1151527613, 2.4664310615, 0.4064811259\H, 3.3517562027,  
2.4626730012, 2. 7380494975\O, 1.6719393531, 3.1041275091, 0.9338460298\Si,  
0.5812375704, 3. 529501791, -0.2714082258\H, 1.2264281852, 4.4045554331, -  
1.2793028667\H, -0 .5368140178, 4.2255385994, 0.4160426051\O, 0.0355984259,  
2.0912961884, -0.9 581858413\Al, 0.1371793225, 1.3046322989, -2.6331046743\O,  
0.308098675, -0. 4039945705, -1.9836243393\Si, 0.3863414367, -1.9769752785, -  
2.5956961921\H , -0.9316677984, -2.4034113342, -3.1255796267\H, 1.4427990039, -  
2.078469099 7, -3.6331023545\O, 0.7725623963, -2.9764983236, -1.3157923531\Si,  
1.398889 5859, -3.4359611334, 0.152050128\H, 0.4428955791, -4.360222593,  
0.809634358 7\H, 2.72720557, -4.063639963, -0.0287367517\O, 1.5351813379, -  
2.0388124418 , 1.1249436933\Al, 3.0630461743, -1.1292714022, 1.7267263676\O,  
2.528994595 4, 0.5351847409, 1.1724546087\H, 3.0751458809, -1.1871261607,  
3.3427335766\ H, -1.2993621772, 1.4676635717, -3.3704641275\H, 1.4562172706,  
1.8278895418 , -3.4015289981\H, 4.3370833712, -1.682495991, 0.9067325465\C, -  
4.380287082 3, -0.783783286, -0.6510586176\C, -3.302828742, -1.2794064632,  
0.1267303637 \C, -3.5054516278, -2.5613493785, 0.7201090383\C, -5.6088119965, -  
2.6405104 899, -0.3481623031\C, -2.7080127087, 0.7000048858, -0.6041762774\H, -  
6.5069 412524, -3.2196807724, -0.533857526\H, -4.50369765, 1.079394332, -1.7037472  
914\H, -2.1306973706, 1.5844639381, -0.8264527201\N, -2.2539233355, -0.3282 871519,  
0.1285392174\N, -3.9762211289, 0.4743214754, -1.0876736496\N, -5.54 74981876, -  
1.4118574134, -0.9191575606\N, -4.6724216527, -3.2228314474, 0.4 393034087\N, -  
2.6338093447, -3.1854895158, 1.5571717476\H, -1.8066841923, - 2.750014987,  
1.9572592852\H, -2.9162714224, -4.093962473, 1.9042016992\C, - 1.0908947312,  
0.7641514655, 4.9094002869\C, -0.6662054231, -0.1033769481, 3 .8744941362\C, -
```

0.6685770508, -1.4926948635, 4.1769770016\C, -1.5845682196 , -0.9499139225,
6.2782036127\C, -0.4156038246, 1.9355742654, 3.1234737618\ H, -1.9706607612, -
1.3244386493, 7.2198755655\H, -1.1018564801, 2.908815727 9, 4.9098201914\H, -
0.1451095162, 2.7854344675, 2.5168047857\N, -0.26608571 01, 0.6573417814,
2.7575746657\N, -0.9119784769, 2.0511946565, 4.407252059\ N, -1.5608991544,
0.3974450271, 6.1226532992\N, -1.160557006, -1.8849972188 , 5.3885920975\N, -
0.2131342228, -2.4622301909, 3.3181736968\H, 0.463009402 2, -2.2361224039,
2.5695772033\H, -0.1550177728, -3.3901497653, 3.727993181 \Hg, 0.2615549316, -
0.0111913446, 0.4078744828\\Version=ES64L-G09RevD.01\ State=1-A\HF=-
1455.7848701\RMSD=2.530e-09\RMSF=4.337e-06\ZeroPoint=0.3
578695\Thermal=0.3946846\Dipole=-1.0819241, 1.3928746, 1.0184397

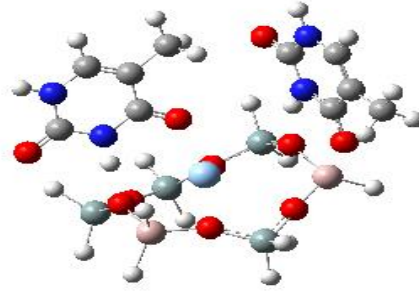
EK 16 KM2-Ag-A-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINCLEVREK27\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H23Ag1Al2N7O8Si4(2)\KSARIKA
VAK\08-Nov-2016\0\#\#N  Geom=AllCheck  Guess=TCheck  SCRF=Check  GenChk
UB3LYP/LANL2DZ Freq\Title Card Required\1, 1\O, 1.174977032, -3.6148004885, -
1.2119311109\Si, -0.2340330016, -3.6408779665, -0.31615238\H, -0.216605752 2, -
4.8314447012, 0.5709325677\H, -1.3738762098, -3.690252346, -1.266613370 1\O, -
0.3556523765, -2.2519427359, 0.6299035674\Al, -0.4762084874, -1.73570 13934,
2.3843652302\O, 0.7296924156, -0.3841095355, 2.463568752\Si, 2.35071 09833, -
0.1827215343, 2.846005409\H, 2.4765947262, 0.7341041929, 4.00731854 31\H,
2.9775342773, -1.5008274613, 3.1261683594\O, 3.1965201724, 0.52371752 37,
1.5900912854\Si, 4.0620616596, 1.2798432775, 0.4002806069\H, 3.46341943 72,
2.6120397594, 0.1359352673\H, 5.4720176551, 1.3971783328, 0.8494759981\ O,
4.0550177344, 0.4382820698, -1.0350914667\O, 3.4259061624, -1.9532365889 , -
2.2729275455\Si, 4.1188865882, -0.4538814125, -2.4338807973\H, 5.5431165 257, -
0.6112621932, -2.8199008635\H, 3.3641643134, 0.298287177, -3.47542631 42\Al,
2.6656818644, -3.469409481, -2.031502003\C, 0.3410904037, 4.11214529 35, -
0.9028309947\C, 0.1957317902, 2.9676945425, -0.0840538235\C, -0.176049 5873,
3.1966855568, 1.2780370704\C, -0.2611924772, 5.5020656191, 0.75392620 02\C,
0.7754342493, 2.2538535514, -2.0769906177\H, -0.4696111854, 6.5029168 498,
1.1172470845\H, 0.9078957791, 4.2050394316, -2.9670139459\H, 1.0355867 912,
1.6248939919, -2.9130443513\N, 0.4643114697, 1.8172875118, -0.85330243 81\N,
0.7197267476, 3.6307338157, -2.1555103248\N, 0.1333245754, 5.39918552 53, -
0.5421445588\N, -0.4185014739, 4.4981971182, 1.6491016127\N, -0.308622 5516,
2.2414582605, 2.2301918713\H, -0.0023174724, 1.258912677, 2.149745776 8\H, -
0.6008270484, 2.5686505352, 3.1442982235\C, -3.6236836662, -0.2893623 436, -
0.6468386862\N, -3.8568087582, -0.6433242666, 0.6681473343\C, -5.1351 451144, -
0.8376057867, 1.1818369657\C, -6.2682565707, -0.6993162599, 0.4301 409989\C, -
```


6.1185656723, -0.3291194717, -0.9851621046\N, -4.7749178656, -0.1515756494, -
1.4137476445\H, -5.1681968656, -1.1088982818, 2.2315343294\O, -2.4718044165, -
0.0996305827, -1.1296506128\O, -7.0588017147, -0.1669250395, -1.7996064595\H, -
3.0403594352, -0.7723213967, 1.2868678543\H, -4.63994176, 0.1069471757, -
2.3879858383\C, -7.6627422985, -0.9026404908, 0.9646869535\H, -7.6465689074, -
1.1670396105, 2.0280508476\H, -8.2637389266, 0.0063255757, 0.8377411794\H, -
8.1789554627, -1.6978430037, 0.4125518374\Ag, -0.0430392042, -0.2489616635, -
0.3241149724\H, 3.7665871707, -4.7452756919, -1.7117915515\H, 2.7927522987, -
4.4977583966, -3.4011253803\H, -0.1588417054, -2.9573429967, 3.3862375603\H, -
1.9620988551, -1.0481540238, 2.5174904593\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=2-
A\HF=-1545.60922\S2=0.758756\S2-1=0.\S2A=0.750014\RMSD=3.826e-
09\RMSF=2.944e-06\ZeroPoint=0.355871\Thermal=0.395019\Dipole=1.0051077,
0.0144246, -1.101399

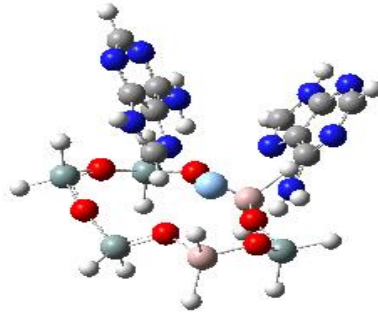
EK 17 KM2-Ag-T-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINCBARBUN15\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H24Ag1Al2N4O10Si4(2)\FSEVIN
DU Z\12-Aug-2018\0\#N Geom=AllCheck Guess=TCheck SCRF=Check GenChk
UB3LYP/LANL2DZ Freq\KM2-AG-T-T-400-d1\1, 1\O, 2.8497646873, -0.627681485, -
1. 0280644262\Si, 3.5269698613, -1.6208177772, 0.1358988062\H, 4.8402721405, -
1.0869530877, 0.5906190745\H, 3.6963561042, -3.0080656932, -0.3820007666\O ,
2.4720548567, -1.6484173823, 1.4304228102\Al, 1.4089544101, -1.7952878931 ,
2.7805692281\O, 0.1031235189, -0.5267171072, 2.7028368993\Si, -0.13529158 45,
1.1019623595, 3.01599754\H, -1.5879149823, 1.3579973466, 3.1491352409\H ,
0.6126474186, 1.5276926225, 4.2263863562\O, 0.4528468812, 1.9969841027, 1.
7028307261\Si, 0.9114897339, 3.5159242193, 1.0996491587\H, -0.2641128074, 4
.4166232393, 1.2047165936\H, 2.0458020881, 4.0075147234, 1.919679532\O, 1.3
648529504, 3.3491410476, -0.4721732999\O, 1.6154188476, 1.4602143236, -2.43
65996623\Si, 1.7630693201, 3.0953929846, -2.0912209826\H, 3.150130314, 3.57
927042, -2.2812958538\H, 0.7806831534, 3.8742801218, -2.8807455635\Al, 2.80
88418739, 0.0580153762, -2.7129511639\Ag, 0.8893809851, 0.2699132202, -0.11
73612418\H, 1.9776123425, -2.0463526295, 4.2478056782\H, 4.2482925193, 0.67
32971312, -3.131671139\H, 2.0714995419, -0.9813517658, -3.714270755\H, 3.73
18828898, 1.2841018665, 2.4138359361\C, -1.252413192, 1.2158560356, -4.4956
016463\N, -2.5470319396, 0.8009037316, -4.8548635514\C, -3.3680661466, 0.05
75880816, -4.0220840544\C, -2.9730431771, -0.3284885926, -2.7717037507\C, -
1.6304512681, 0.0698410516, -2.3282547794\N, -0.8566828883, 0.8025957607, -
3.22296271\H, -4.3446566356, -0.1969678626, -4.4207512921\O, -0.5462370595 ,
1.9006095267, -5.2647623495\O, -1.1857758342, -0.234183862, -1.1719965647 \H, -
2.8504450768, 1.0873513994, -5.7785194449\H, 0.1406219203, 1.056246946 5, -
2.9395994899\C, -3.836995909, -1.1352160103, -1.8367145917\H, -4.829683 0081, -
1.3092668215, -2.2692621997\H, -3.3724441378, -2.109044484, -1.62833 37726\H, -
```

3.9566802899, -0.6276663695, -0.8724971682\C, -3.1454293507, -2.2 736357613,
1.7229451395\N, -3.6522380728, -3.5487768932, 1.4131997063\C, -2 .8894112898, -
4.7031735628, 1.416159035\C, -1.553246865, -4.6952479095, 1.7 287706884\C, -
0.9770069546, -3.4041111493, 2.0525814972\N, -1.7824710693, - 2.2876098047,
2.0273269358\H, -3.4097274413, -5.6186438886, 1.1559294016\O , -3.8562913081, -
1.2515975823, 1.7264234427\O, 0.2660049229, -3.2715152341 , 2.3658590489\H, -
4.6413895782, -3.5761122103, 1.1887960213\H, -1.27862728 35, -1.3881580814,
2.2507551047\C, -0.6765135387, -5.9208798381, 1.74176354 24\H, -1.2473374509, -
6.8183921085, 1.4794189436\H, 0.1516782208, -5.813257 3565, 1.0312935872\H, -
0.2267388531, -6.0687131545, 2.7307384552\\Version= ES64L-G09RevD.01\State=2-
A\HF=-1532.4706505\S2=0.750107\S2-1=0.\S2A=0. 75\RMSD=4.591e-
09\RMSF=2.908e-06\ZeroPoint=0.3556197\Thermal=0.3960934 \Dipole=-5.053232, -
2.5952138, 1.5852684

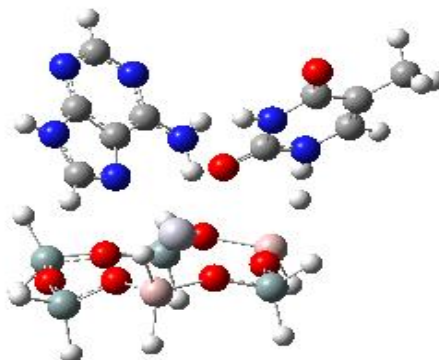
EK 18 KM2-Ag-A-A kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINCLEVREK113\Freq\UB3LYP\LANL2DZ\C10H22Ag1Al2N10O6Si4(2)\ROOT\2
6-Oct-2016\0\#N Geom=AllCheck Guess=TCheck SCRF=Check GenChk UB3LYP/LA
NL2DZ Freq\KM2-AG-A-A-250.chk\1, 1\O, -1.7085022054, 2.1964073317, -0.11
21039948\Si, -0.8496503738, 2.7879936735, -1.4357536668\H, -0.4863346861, 4
.2176515851, -1.2818665955\H, -1.6126388319, 2.5496496148, -2.684373226\O,
0.5806889024, 1.8438365259, -1.4383642586\Al, 2.1706031264, 1.4428912845, -
2.2938893552\O, 2.94666815, 0.3314642873, -1.038151669\Si, 4.4722443921, 0.
3621573315, -0.3053367842\H, 5.3382629814, -0.676964925, -0.9198900396\H, 5
.0779836246, 1.7112785689, -0.4225011295\O, 4.3395211205, -0.0300826197, 1.
3120132118\Si, 3.8233903139, -0.1157315601, 2.8878346092\H, 3.3509224932, -
1.4905991211, 3.1768377281\H, 4.9296647138, 0.2860773887, 3.7869639604\O, 2
.5410344263, 0.928897723, 3.0956962742\O, 0.2090448069, 1.7102459015, 1.815
2099975\Si, 1.5161457141, 2.2041579973, 2.7814404669\H, 2.2864649485, 3.259
5678729, 2.0767282944\H, 0.9749636121, 2.6824462879, 4.0757173844\Al, -1.53
31305119, 2.3820192817, 1.6920137812\H, 1.844406827, 0.530059898, -3.595379
9197\C, 0.3732477267, -3.4712219333, 2.3702425957\C, 0.8901676885, -2.63768 4359,
1.3507028698\C, 1.9307640436, -3.1805165819, 0.5398337847\C, 1.701363 8218, -
5.1826033181, 1.7715549478\C, -0.6330295236, -1.4656513565, 2.432399 0769\H,
2.0373375632, -6.2055089296, 1.9023114503\H, -1.1356237205, -3.0120 553259,
3.8258282955\H, -1.2960804947, -0.6655183113, 2.730537434\N, 0.2336 197674, -
1.3965458522, 1.4168876939\N, -0.5808532654, -2.7010445148, 3.0380 095123\N,
0.7410618967, -4.7455291609, 2.6265383621\N, 2.295936787, -4.4802 893404,
0.7753308662\N, 2.5849143376, -2.5086632925, -0.4456612972\H, 2.518 3678731, -
1.4951118296, -0.6085480098\H, 3.339007503, -3.0135160763, -0.898 4492396\H, -
1.5272075412, 3.9076293025, 2.2140315107\H, -2.5035221722, 1.29 34379302,
```

2.407612519\H, 3.0328455787, 2.7929310713, -2.4998677076\C, -1.94 52789968, -
2.5332844072, -2.6638874527\C, -1.9346755564, -1.4709948541, -1. 7281886553\C, -
3.2055785626, -1.0730419882, -1.2052635973\C, -4.1447986579 , -2.8952758252, -
2.3830019286\C, 0.1300516342, -1.7128214599, -2.456049360 7\H, -5.0381644503, -
3.4753790193, -2.5884523291\H, -0.3093249536, -3.30709 56235, -3.8154838358\H,
1.1821212524, -1.5712318871, -2.6308568773\N, -0.61 00843096, -0.9970277435, -
1.6021006081\N, -0.6310956661, -2.6474477295, -3. 118486947\N, -3.0121662621, -
3.2771341587, -3.0300409112\N, -4.2883615826, -1.8577200328, -1.5262966166\N, -
3.4197014653, 0.0234331418, -0.4424616614 \H, -2.7412905314, 0.7989846437, -
0.3293488309\H, -4.3733119965, 0.17182911 32, -0.1318288531\Ag, 0.2981635607,
0.2769772005, 0.0483979011\\Version=ES 64L-G09RevD.01\State=2-A\HF=-
1558.7669476\S2=0.75309\S2-1=0.\S2A=0.750 009\RMSD=2.352e-09\RMSF=5.348e-
06\ZeroPoint=0.3585411\Thermal=0.394817 1\Dipole=0.1528107, -1.5700209, 0.5466509

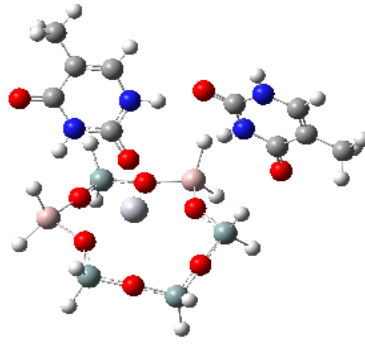
EK 19 KM2-Hg-A-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINC-LEVREK11\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H23Al2Hg1N7O8Si4\ROOT\25-  
Oct- 2016\0\#\#N   Geom=AllCheck   Guess=TCheck   SCRF=Check   GenChk  
RB3LYP/LANL2DZFreq\KM2-HG-A-T-250\2, 1\O, -0.1562507789, 1.2626518291, -  
1.8849160806\Si, 0.8114852419, 1.3248925934, 3.2574892207\H, 1.0797967223,  
2.7224495795, -3.6836710155\H, 0.2239587059, 0.5420315744, -4.3761294898\O,  
2.210166068 2, 0.5778693986, -2.6919945594\Al, 3.8763953087, -0.0099078869, -  
2.44370749 \O, 3.7781824945, -0.1800201569, -0.5839180717\Si, 4.8217052695,  
0.38649993 18, 0.638672885\H, 5.8547977701, -0.6413940955, 0.913996075\H,  
5.4264199933 , 1.672711623, 0.2155573979\O, 3.9447114805, 0.630661337,  
2.0281054988\Si, 3 .0519508191, 1.0072758155, 3.3802578966\H, 2.7599582085, -  
0.2461548398, 4.1 160244706\H, 3.8237641553, 1.9659911349, 4.2062189748\O,  
1.6189417333, 1.70 79809768, 2.9291955567\O, -0.0682350866, 1.6030597077,  
0.7798291979\Si, 0.3 135990985, 2.4419995777, 2.19386653\H, 0.6763257909,  
3.8493368612, 1.892355 3084\H, -0.8213617544, 2.3691307812, 3.1512037058\Al, -  
1.2839574003, 1.9078 716437, -0.6175861014\H, 3.9379766606, -1.5461863256, -  
3.0271207004\C, 0.77 20796695, -3.4498663246, 2.6289569871\C, 1.5637783727, -  
2.791492223, 1.6597 566436\C, 2.7101405592, -3.4954712166, 1.1843370422\C,  
2.0945783538, -5.266 2977149, 2.6188929391\C, -0.099992782, -1.4429038888,  
2.1424942814\H, 2.333 0110036, -6.2615187318, 2.9785839851\H, -1.0201136013, -  
2.7449119931, 3.576 0980114\H, -0.7754741112, -0.6017992791, 2.1390822949\N,  
0.9932439102, -1.5 365702518, 1.3777867517\N, -0.2721249765, -2.5693630019,  
2.9173501627\N, 0. 9898362952, -4.6797121998, 3.1474517718\N, 2.9375406565, -  
4.7489785508, 1.6 907960329\N, 3.5877822033, -3.0123994958, 0.26754017\H,  
3.544724675, -2.064 769804, -0.1142393356\H, 4.3587137789, -3.6161234068,  
0.0096840312\H, -1.56 5404758, 3.495120011, -0.7438214002\H, -2.5317520273,
```

0.9012607031, -0.3923 656897\H, 5.0978176055, 0.9499851588, -2.8554739808\C,
0.6116089775, -2.813 2282835, -2.6271493582\N, 1.6731121915, -2.913585993, -
3.4963784872\C, 1.64 14529197, -3.7188718653, -4.6328916538\C, 0.5559806641, -
4.4743438126, -4.9 75270572\C, -0.6274244708, -4.4245674416, -4.1019936501\N, -
0.4953430741, - 3.5692452274, -2.9711612603\H, 2.5465820241, -3.7034871345, -
5.229998191\O , 0.6283001518, -2.0986780277, -1.5807034833\O, -1.6933134749, -
5.056884817 , -4.2824250927\H, 2.5175175798, -2.3575106603, -3.2829533714\H, -
1.3020420 268, -3.5025804292, -2.3546881048\C, 0.4949048681, -5.3556733012, -
6.196010 0013\H, 1.4267951483, -5.3063386389, -6.7701119598\H, 0.3109307468, -
6.3992 129511, -5.9120030715\H, -0.3360985141, -5.0583841792, -6.847423069\Hg, 1.3
004213812, -0.0179661879, -0.4090077202\\Version=ES64L-G09RevD.01\State= 1-
A\HF=-1442.6331821\RMSD=3.356e-09\RMSF=1.299e-05\ZeroPoint=0.3594938
\Thermal=0.3977509\Dipole=1.1754634, -0.7931502, 0.6547762

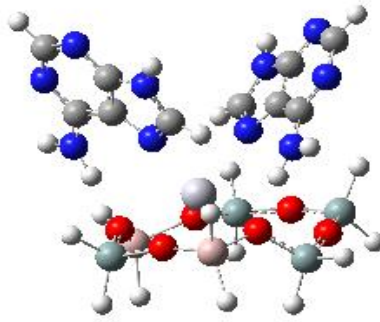
EK 20 KM2-Hg-T-T kompleksinin log dosyaları



```
1\1\GINC-UB15\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H24Al2Hg1N4O10Si4\FSGROUP\25-
May- 2016\0\#N  Geom=AllCheck  Guess=TCheck  SCRF=Check  GenChk
RB3LYP/LANL2DZ  Freq\KM2-HG-T-T-400\2, 1\O, 2.2323407444, -1.8543596128,
0.0867444342\Si, 2.7125624541, -2.431477037, 1.5936883703\H, 4.1855029907, -
2.3361255476, 1.762279779\H, 2.2507141654, -3.8283478951, 1.8026366935\O,
1.908173009, -1.3646843203, 2.6145152682\Al, 1.3196835884, -0.3491817736,
3.978766924\O, 0.8484475728, 1.0988930098, 2.8760443798\Si, 0.5891303213,
2.7658084152, 2.9955198763\H, -0.7489724212, 3.0484938575, 3.5700999844\H,
1.6699180341, 3.3979040685, 3.7902733058\O, 0.6278248797, 3.3676387102,
1.4405985278\Si, 0.7519611014, 3.9875525639, -0.0979546765\H, -0.436213223,
4.8329130448, -0.3691166722\H, 2.0137790614, 4.7586115875, -0.2081515759\O,
0.7817933271, 2.7258598261, -1.1760942644\O, 1.1194172824, 0.077939112, -
1.4229535007\Si, 0.762787045, 1.4829954714, -2.300015018\H, 1.7919220997,
1.7435590016, -3.327708355\H, -0.6133993333, 1.4402191261, -2.8442525806\Al,
1.9579129394, -1.5805021574, -1.6732647872\H, -0.0979909297, -0.9714504286,
4.4886600567\H, 3.2829476784, -1.464653228, -2.5733377698\H, 0.7673028293, -
2.5820517513, -2.1771623679\H, 2.4006128914, 0.1139248778, 5.0765219885\C, -
2.7187868772, -2.2675941163, -3.1067209514\N, -3.6806918444, -2.0541845092, -
4.0867752714\C, -3.4153866242, -1.3909842548, -5.2863225213\C, -2.184033177, -
0.8789541626, -5.573966738\C, -1.1149109994, -1.0432044293, -4.5723764054\N, -
1.4650791643, -1.7876157242, -3.418677172\H, -4.2541013884, -1.3033532509, -5.9682
792551\O, -3.0057860629, -2.851497585, -2.0242802714\O, 0.041374823, -0.565
6479895, -4.6822006529\H, -4.6096406722, -2.3996072792, -3.8749056685\H, -0
.6841923276, -2.0138883595, -2.7741028845\C, -1.8552855275, -0.14214647, -6
.8464130943\H, -2.7248390665, -0.0834233211, -7.5106656649\H, -1.5110120586,
0.8756998327, -6.6260664498\H, -1.0365405295, -0.6391539353, -7.3808421385\C, -
```


1.8725185854, -2.1442179924, 1.4805221795\N, -2.6127483734, -2.98495 65115,
0.6878992739\C, -3.3048752282, -4.0779938864, 1.2008472507\C, -3.299 3968802, -
4.3948666071, 2.5290217902\C, -2.5185680873, -3.5447014264, 3.443 397092\N, -
1.8405726671, -2.4543408489, 2.821711694\H, -3.8467665683, -4.66 01226875,
0.4642512787\O, -1.2659055087, -1.1357245692, 0.9825409072\O, -2. 4229888329, -
3.7220496094, 4.679075765\H, -2.6394229113, -2.8099232095, -0. 330989398\H, -
1.2569015967, -1.8678136657, 3.4389537948\C, -4.0383554096, - 5.56804253,
3.1184261212\H, -4.5721278926, -6.1323663491, 2.345310189\H, -3 .3437270274, -
6.2435916574, 3.6327380524\H, -4.7608278094, -5.2321396407, 3 .8727505407\Hg,
0.7998920467, 0.0034958744, 0.854063428\\Version=ES64L-G0 9RevD.01\State=1-
A\HF=-1429.4734878\RMSD=1.969e-09\RMSF=4.856e-06\Zero
Point=0.3617935\Thermal=0.4007231\Dipole=-3.4378023, 0.4802575, -3.55468 83\

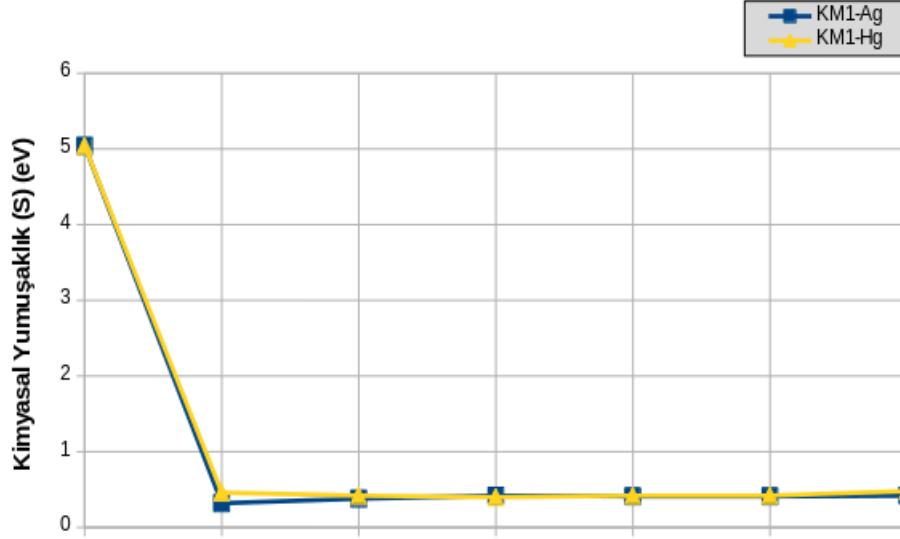
EK 21 KM2-Hg-A-A kompleksinin log dosyaları



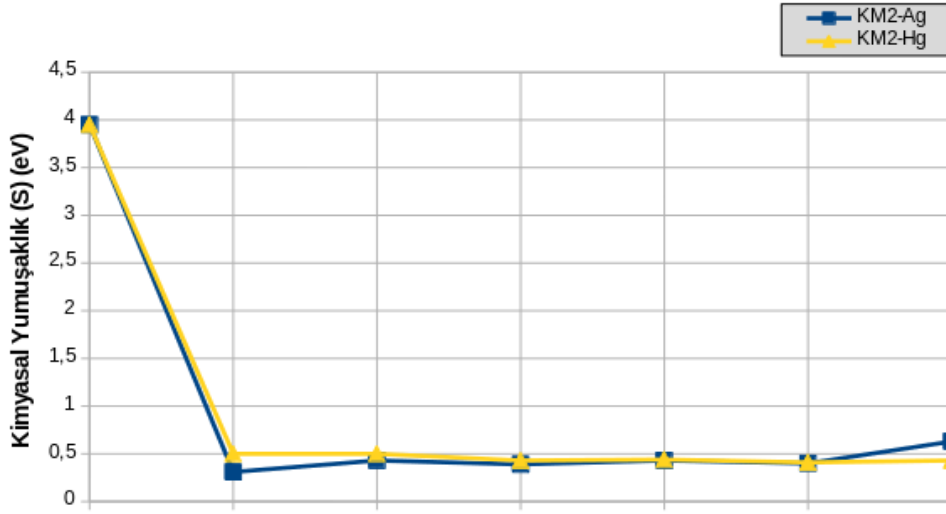
```
1\1\GINC-LEVREK16\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C10H22Al2Hg1N10O6Si4\ROOT\25-
Oct -2016\0\#\#N  Geom=AllCheck  Guess=TCheck  SCRF=Check  GenChk
RB3LYP/LANL2D Z Freq\KM2-HG-A-A-250.chk\2, 1\O, -1.1562581447, 2.264673396,
-0.5309919 37\Si, -0.5501067095, 2.600268035, -2.0881940334\H, -0.2396614652,
4.043491 0565, -2.2353098389\H, -1.5378768803, 2.1586369021, -3.1029721023\O,
0.8355 647908, 1.6555605993, -2.1228681182\Al, 2.4406200222, 0.9803036272, -2.5688
25458\O, 2.8616928992, 0.400375949, -0.8146569716\Si, 4.2037820604, 0.88502 13363,
0.1223630382\H, 5.4163447105, 0.1890696392, -0.3715221157\H, 4.34713 67019,
2.3595373509, 0.0685402685\O, 3.9598138831, 0.4260418898, 1.70267057 17\Si,
3.5182178865, 0.2281841618, 3.2906084423\H, 3.4570899219, -1.2223931 898,
3.5899708302\H, 4.4930128594, 0.9319289401, 4.1565929695\O, 2.00881023 42,
0.8781919469, 3.5377058824\O, -0.0312263169, 1.7740491425, 1.9089602671 \Si,
0.5411697506, 1.6574143594, 3.4981982836\H, 0.6861415463, 3.0133062041 ,
4.0812504386\H, -0.3998900363, 0.8286346708, 4.3004317188\Al, -1.17447745 49,
3.0407442965, 1.1311590026\H, 2.2792724812, -0.3885220733, -3.426281166 1\C,
0.9781447957, -3.7951571926, 2.0243454026\C, 1.4249449511, -2.82205136 32,
1.0992940751\C, 2.4072580339, -3.2454098821, 0.153187326\C, 2.290118895 , -
5.3889219378, 1.1379368784\C, -0.0692685259, -1.8465107766, 2.373532396\ H,
2.651933151, -6.4114009226, 1.1207369342\H, -0.4737406775, -3.5686292333 ,
3.5869137927\H, -0.7419397204, -1.1254037376, 2.8102650936\N, 0.748235170 1, -
1.6082050326, 1.3415897853\N, 0.0367413902, -3.1453174416, 2.8221819009 \N,
1.3767123774, -5.0850815975, 2.095646654\N, 2.8059417134, -4.5567605298 ,
0.1994790991\N, 2.9534865041, -2.4460246169, -0.8000174805\H, 2.853410992 5, -
1.4197368804, -0.8114122229\H, 3.6477462021, -2.8729822329, -1.40294344 22\H, -
0.4628652475, 4.4886888093, 1.1191056159\H, -2.6404567268, 2.8791455 231,
```

1.7947815546\H, 3.5471586177, 2.0621097435, -3.0237665387\C, -2.471238 9006, -
2.5341630255, -2.2642054098\C, -2.256280057, -1.3546799079, -1.51498 93672\C, -
3.4204607878, -0.6853405015, -1.028421259\C, -4.6919552921, -2.45 97585436, -
1.9254301687\C, -0.283255849, -2.0557007988, -2.1596921411\H, -5 .6790182981, -
2.8940503162, -2.0448458767\H, -1.0076531591, -3.759256264, - 3.2447171054\H,
0.7789090308, -2.1389896571, -2.3322727236\N, -0.872244322 1, -1.0878984887, -
1.4456897156\N, -1.2036627297, -2.9477329661, -2.6728666 19\N, -3.6622751163, -
3.1310490699, -2.5040944134\N, -4.6319575877, -1.2989 827214, -1.2265226684\N, -
3.3912870984, 0.5143872602, -0.3983343219\H, -2.5 652974802, 1.1304624711, -
0.4184205272\H, -4.2747115363, 0.8908980285, -0.0 758114258\Hg, 0.5102294173,
0.4137173821, 0.0074161165\\Version=ES64L-G09 RevD.01\State=1-A\HF=-
1455.7887985\RMSD=2.458e-09\RMSF=6.241e-06\ZeroP
oint=0.3580607\Thermal=0.3949172\Dipole=0.3791687, -1.690731, 1.1564618\

EK 22 Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin kimyasal yumuşaklık (S) değerleri (eV)

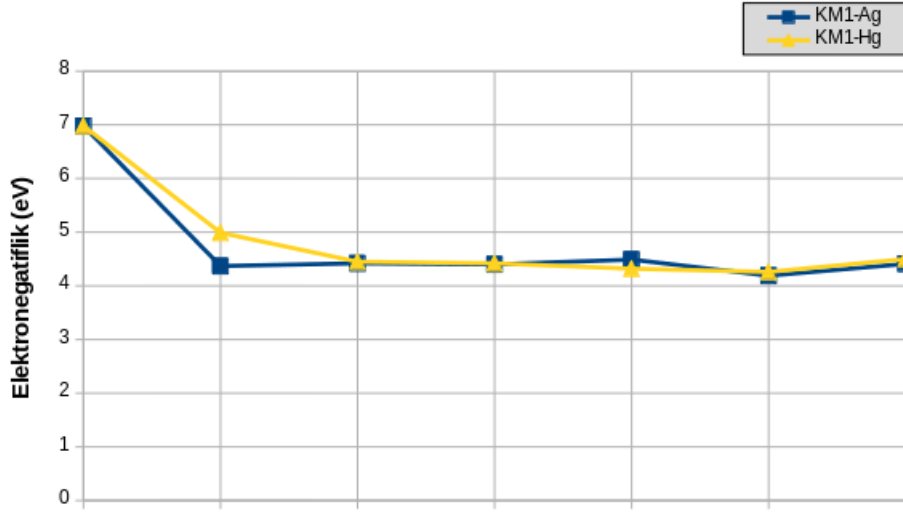


KM-1	KM1-Ag	KM1-Ag-T	KM1-Ag-A	KM1-Ag-A-A	KM1-Ag-A-T	KM1-Ag-T-T
5,04	0,32	0,38	0,42	0,41	0,41	0,42
KM-1	KM1-Hg	KM1-Hg-T	KM1-Hg-A	KM1-Hg-A-A	KM1-Hg-A-T	KM1-Hg-T-T
5,04	0,46	0,42	0,4	0,42	0,42	0,48

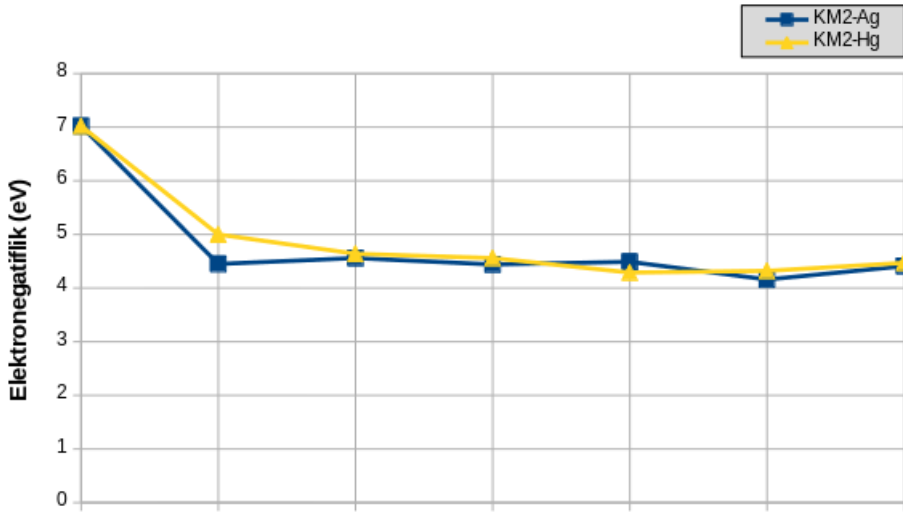


KM-2	KM2-Ag	KM2-Ag-T	KM2-Ag-A	KM2-Ag-A-A	KM2-Ag-A-T	KM2-Ag-T-T
3,95	0,31	0,43	0,39	0,43	0,4	0,63
KM-2	KM2-Hg	KM2-Hg-T	KM2-Hg-A	KM2-Hg-A-A	KM2-Hg-A-T	KM2-Hg-T-T
3,95	0,5	0,5	0,43	0,44	0,41	0,43

EK 23 Hg²⁺ ve Ag⁺ içeren KM1 ve KM2 moleküllerinin elektronegatiflik değerleri (eV)



KM-1	KM1-Ag	KM1-Ag-T	KM1-Ag-A	KM1-Ag-A-A	KM1-Ag-A-T	KM1-Ag-T-T
6,98	4,37	4,42	4,4	4,49	4,19	4,41
KM-1	KM1-Hg	KM1-Hg-T	KM1-Hg-A	KM1-Hg-A-A	KM1-Hg-A-T	KM1-Hg-T-T
6,98	4,99	4,45	4,42	4,32	4,26	4,5



KM-2	KM2-Ag	KM2-Ag-T	KM2-Ag-A	KM2-Ag-A-A	KM2-Ag-A-T	KM2-Ag-T-T
7,02	4,45	4,56	4,44	4,49	4,16	4,41
KM-2	KM2-Hg	KM2-Hg-T	KM2-Hg-A	KM2-Hg-A-A	KM2-Hg-A-T	KM2-Hg-T-T
7,02	5	4,64	4,56	4,29	4,32	4,47

ÖZGEÇMİŞ

Kimlik Bilgileri

Adı Soyadı : Özlem KINIK
Doğum Yeri : Malatya
Medeni Hali : Bekar
e-mail : ozlemkinik85@gmail.com
Adres : Yukarı Yurtçu Mah. Fuzuli Cad. Yapracık Toki Konutları 7. Etap
B1 27/51 Etimesgut/ Ankara

Eğitim

Lise : 2000-2004 Malatya Yabancı Dil Ağırlıklı Süper Lisesi
Lisans : 2006-2010 Hacettepe Üniversitesi Kimya Bölümü(İngilizce)
Yüksek Lisans : 2011-2018 Hacettepe Üniversitesi Kimya Bölümü

Yabancı Dil ve Düzeyi

İngilizce (Intermediate)

İş Tecrübesi

2018... : Satış Application Sorumlusu, İno Endüstri Bilimsel Teknik Cihazlar,
2016-2018 : Satış Application Sorumlusu, Art Labortechnik Ltd. Şti.
2013-2016 : Satış Application Sorumlusu, Tetra Teknolojik Sistemler A.Ş.
2012-2013 : Kalite Kontrol Sorumlusu, Bastak Gıda

Deneyim Alanları

Hesaplamalı Kimya, Organik Kimya, Anorganik Kimya, FTIR, UV-Vis

Tezden Üretilmiş Projeler ve Bütçesi:

Tezden Üretilmiş Yayınlar:

Tezden Üretilmiş Tebliğ ve/veya Poster Sunumu ile Katıldığı Toplantılar



HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS/ DOKTORA TEZ ÇALIŞMASI ORJİNALLİK RAPORU

HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLER ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI BAŞKANLIĞI'NA

Tarih:06/09/2018

Tez Başlığı / Konusu: HgY ve AgY Zeolitlerine Adenin ve Timin Bazlarının Adsorpsiyonunun Teorik Çalışması

Yukarıda başlığı/konusu gösterilen tez çalışmamın a) Kapak sayfası, b) Giriş, c) Ana bölümler d) Sonuç kısımlarından oluşan toplam 94 sayfalık kısmına ilişkin 06/09/2018 tarihinde şahsım/tez danışmanım tarafından Turnitin adlı intihal tespit programından aşağıda belirtilen filtrelemeler uygulanarak alınmış olan orijinallik raporuna göre, tezimin benzerlik oranı % 7 ' dir .

Uygulanan filtrelemeler:

- 1- Kaynakça hariç
- 2- Alıntılar hariç/dâhil
- 3- 5 kelimedenden daha az örtüşme içeren metin kısımları hariç

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Çalışması Orjinallik Raporu Alınması ve Kullanılması Uygulama Esasları'nı inceledim ve bu Uygulama Esasları'nda belirtilen azami benzerlik oranlarına göre tez çalışmamın herhangi bir intihal içermediğini; aksinin tespit edileceği muhtemel durumda doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi ve yukarıda vermiş olduğum bilgilerin doğru olduğunu beyan ederim.

Gereğini saygılarımla arz ederim.


06.09.2018

Adı Soyadı: Özlem KINIK
Öğrenci No: N10228796
Anabilim Dalı: Kimya
Programı: Yüksek Lisans
Statüsü: X Y.Lisans Doktora Bütünleşik Dr.

DANIŞMAN ONAYI

UYGUNDUR.


Prof.Dr.Fatma Sevin DÜZ



HACETTEPE UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE AND ENGINEERING
THESIS/DISSERTATION ORIGINALITY REPORT

HACETTEPE UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE AND ENGINEERING
TO THE DEPARTMENT OF CHEMISTRY

Date:06/09/2018

Thesis Title / Topic: Theoretical Study of Adsorption of Adenine and Thymine Bases on HgY and AgY Zeolites

According to the originality report obtained by myself/my thesis advisor by using the *Turnitin* plagiarism detection software and by applying the filtering options stated below on 06/09/2018 for the total of 94 pages including the a) Title Page, b) Introduction, c) Main Chapters, d) Conclusion sections of my thesis entitled as above, the similarity index of my thesis is 7 %.

Filtering options applied:

1. Bibliography/Works Cited excluded
2. Quotes excluded / included
3. Match size up to 5 words excluded

I declare that I have carefully read Hacettepe University Graduate School of Science and Engineering Guidelines for Obtaining and Using Thesis Originality Reports; that according to the maximum similarity index values specified in the Guidelines, my thesis does not include any form of plagiarism; that in any future detection of possible infringement of the regulations I accept all legal responsibility; and that all the information I have provided is correct to the best of my knowledge.

I respectfully submit this for approval.

06.09.2018

Name Surname: Özlem KINIK

Student No: N10228796

Department: Chemistry

Program: Masters

Status: X Masters Ph.D. Integrated Ph.D.

ADVISOR APPROVAL

APPROVED.

Prof. Dr. Fatma Sevin DÜZ