

## Bazı Organik ve İnorganik Bileşiklerin Entos-Envision Yazılımıyla Kuantum Kimyasal Özelliklerinin İncelenmesi

Özlem İŞCAN<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Bartın Üniversitesi Rektörlük, Proje ve Teknoloji Ofisi Genel Koordinatörlüğü, Bartın-Türkiye

<sup>1</sup><https://orcid.org/0000-0003-3282-1121>

\*Sorumlu yazar: oiscan@bartin.edu.tr

### Araştırma Makalesi

#### Makale Tarihiçesi:

Geliş tarihi: 18.12.2024

Kabul tarihi: 16.03.2025

Online Yayınlanma: 16.06.2025

#### Anahtar Kelimeler:

Entos-Envision

HOMO-LUMO

Kloroform

Cis-2-penten

Moleküler dinamik

### ÖZ

Bu çalışmada, hesaplamalı kimya yazılımlarından Entos-Envision kullanılarak çeşitli moleküler yapıların ve kimyasal reaksiyonların kuantum kimyasal analizleri gerçekleştirilmiştir. Entos-Envision, çevrimiçi bir platform olarak geometri optimizasyonu, bağ derecesi, HOMO-LUMO enerji seviyeleri, moleküler elektrostatik potansiyel (MEP), IR spektrumları, moleküler dinamik ve izomer dönüşümleri gibi kapsamlı analiz imkanları sunmaktadır. Araştırmada kloroform, aspirin, cis-2-penten, ftalosiyanın, penisilin ve fosfazen bileşiklerinin geometrik optimizasyonları yapılmış; cis- ve trans- 2-penten izomerlerinin birbirine dönüşümü gözlemlenmiştir. Kloroform molekülünde hidrojen atomunun ayrılması sırasında meydana gelen değişiklikler izlenmiş, HOMO-LUMO enerji farkları hesaplanmış ve elektrostatik potansiyel yüzeyleri belirlenmiştir. Elde edilen HOMO ve LUMO enerjileri ile bazı kuantum kimyasal parametreler hesaplanmıştır. Ayrıca, kullanıcı dostu arayüzü sayesinde Entos-Envision, kimya alanında uzman olmayan kullanıcılar için de kolay erişilebilir bir yazılım olarak öne çıkmaktadır.

## Quantum Chemical Investigation of Selected Organic and Inorganic Compounds via Entos-Envision Software

### Research Article

#### Article History:

Received: 18.12.2024

Accepted: 16.03.2025

Published online: 16.06.2025

#### Keywords:

Entos-Envision

HOMO-LUMO

Chloroform

Cis-2-pentene

Molecular dynamics

### ABSTRACT

In this study, quantum chemical analyses of various molecular structures and chemical reactions were conducted using the computational chemistry software Entos-Envision. Entos-Envision, an online platform, provides comprehensive analysis tools such as geometry optimization, bond order, HOMO-LUMO energy levels, molecular electrostatic potential (MEP), IR spectra, molecular dynamics, and isomer transformations. In this research, the geometric optimizations of compounds such as chloroform, aspirin, cis-2-pentene, phthalocyanine, penicillin, and phosphazene were performed, and the isomerization between cis- and trans-2-pentene was observed. Changes occurring during the removal of the hydrogen atom in the chloroform molecule were monitored, HOMO-LUMO energy gaps were calculated, and electrostatic potential surfaces were determined. Quantum chemical parameters were calculated based on the obtained HOMO and LUMO energies. Additionally, due to its user-friendly interface, Entos-Envision is highlighted as a software that is easily accessible even to users who are not experts in the field of chemistry.

**To Cite:** İşcan Ö. Bazı Organik ve İnorganik Bileşiklerin Entos-Envision Yazılımıyla Kuantum Kimyasal Özelliklerinin İncelenmesi. Osmaniye Korkut Ata Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi 2025; 8(3): 1210-1226.

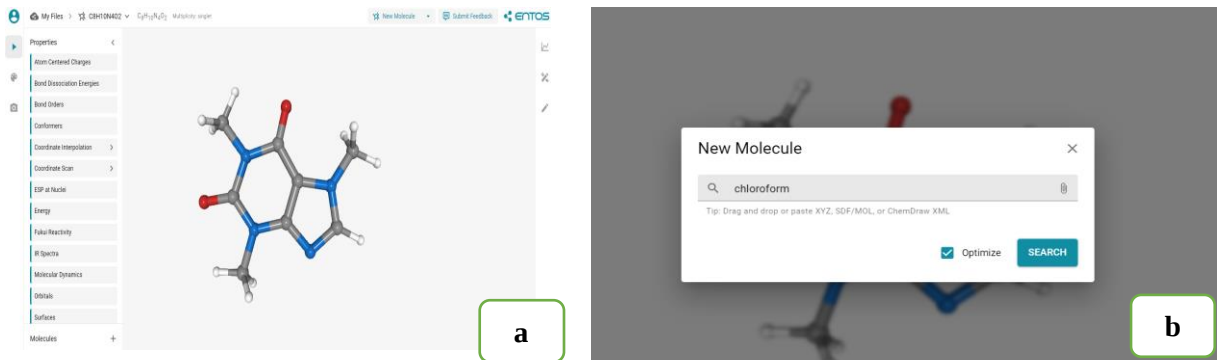
## 1. Giriş

Günümüzde kimya alanındaki araştırmaların ve keşiflerin hızla artmasıyla birlikte, veri analizi ve hesaplamalı modelleme gibi ileri tekniklere olan ihtiyaç da giderek önem kazanmıştır. Kimyasal reaksiyonların ve moleküler yapıların incelenmesinde temel araçlardan biri haline gelen hesaplamalı kimya yazılımları, deneysel çalışmaların maliyet ve zaman yükünü azaltarak bilim insanlarının daha hızlı ve verimli sonuçlara ulaşmasını sağlamaktadır. Bu yazılımlar, laboratuvar ortamında uzun sürebilecek analizlerin dijital ortamda daha pratik bir şekilde yapılmasına olanak tanıyarak modern kimya araştırmalarında vazgeçilmez bir rol oynamaktadır (Demircioğlu ve ark., 2019; Uzun ve ark., 2019; Tarı ve ark., 2024; Yazgı ve ark., 2024).

Entos-Envision (<https://www.entos.ai/envision>) online platformu kullanılarak, moleküllerin geometri optimizasyonu, enerjisi, moleküllerin bağ açıları, bağ uzunlukları, teorik IR, moleküler dinamik, koordinasyon taraması, konformerleri, HOMO-LUMO enerji, orbitallerinin şekli ve moleküler elektrostatik potansiyel enerji hesabı (MEP) gibi birçok özellik yarı deneysel GFN1-XTB yöntemiyle hesaplanmaktadır. Entos-Envision’da çok basit yapıli moleküllerden çok karmaşık yapıli moleküllere kadar quantum hesaplama işlemleri yapılabilmektedir.

Entos Envision (Şekil 1), kimya alanında yapılan hesaplamalı çalışmaları desteklemek için birçok özellik ve avantaja sahiptir. Bu özellikler arasında şunlar bulunmaktadır:

1. Moleküler Modelleme: Entos Envision, moleküler yapıların modellemesi ve analizi için gelişmiş araçlar sunar. Bu sayede, kullanıcılar moleküler düzeyde kimyasal reaksiyonları inceleyebilir ve analiz edebilir.
2. Kimyasal Reaksiyonlar: Entos Envision, çeşitli kimyasal reaksiyonları simüle etme ve sonuçlarını hesaplamaya olanak sağlar. Bu sayede, kullanıcılar istedikleri reaksiyonların sonuçlarını önceden görebilir ve analiz edebilir.
3. Veri Analizi: Entos Envision, kimyasal verilerin analizi için gelişmiş araçlar sunar. Bu sayede, kullanıcılar elde ettikleri verileri kolayca analiz edebilir ve yorumlayabilir.

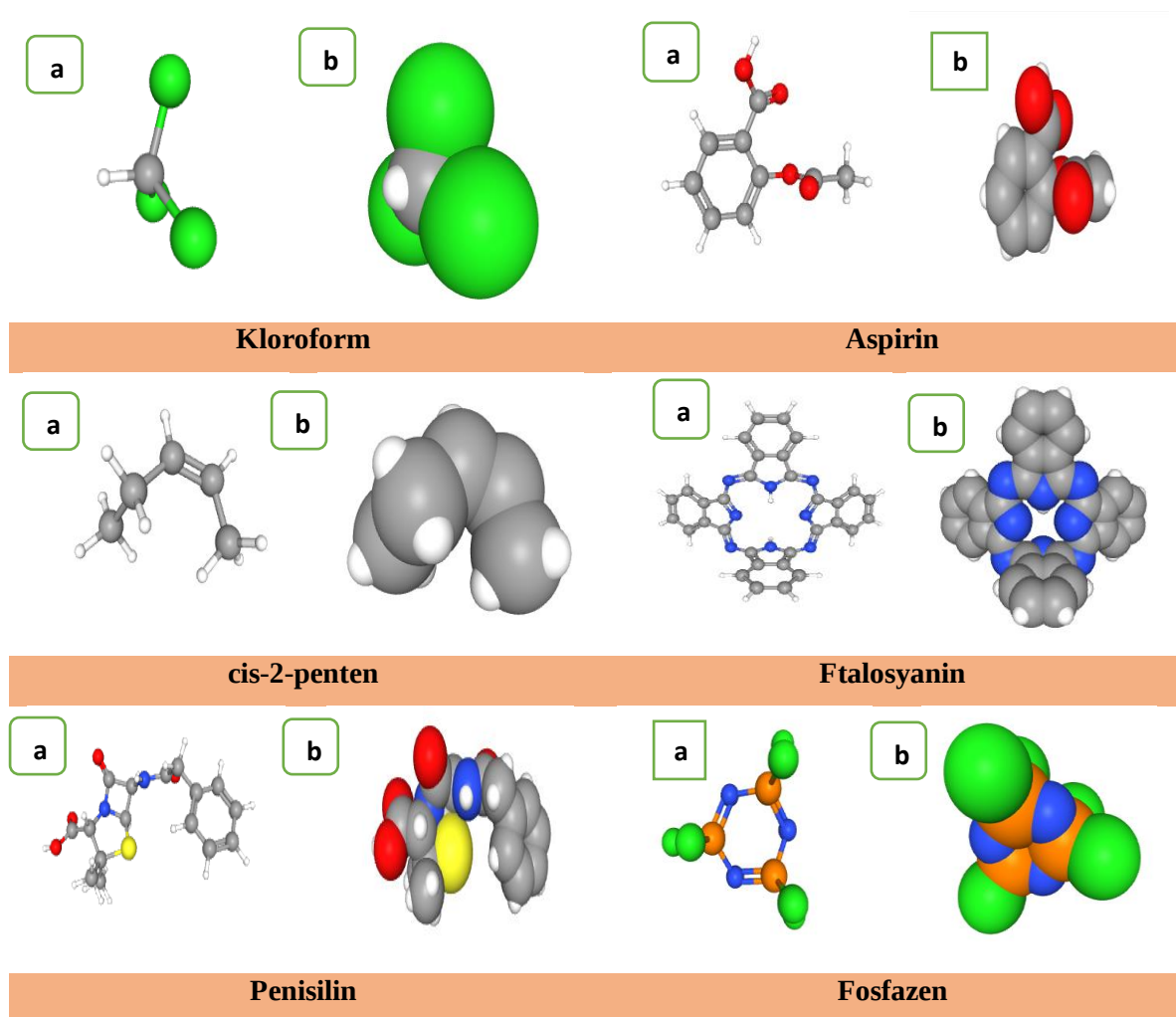


Şekil 1. Entos-envision yazılımında a) giriş sayfası b) molekülün ekrana çağırışımı

Kloroform (Entosai172506), Aspirin(entosai173493), cis-2-penten (entosai173675), ftalosyanin (entosai172513), penisilin (entosai173462) ve fosfazen (entosai130064) bileşiklerinin entos envision yazılımına yüklemek için pubchemden (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) sayfasından alınan smiles kodları kullanılmıştır.

## 2. Materyal ve Metot

Bu çalışmamızdaki seçilen kloroform, aspirin, cis-2-penten, ftalosiyanın, penisilin ve fosfazen bileşiklerinin çizgi-top ve uzay dolgu görünümüleri (Şekil 2) ve Entos envisiona molekülleri yüklemek için smiles kodları pubchem (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) sitesinden alınmıştır.

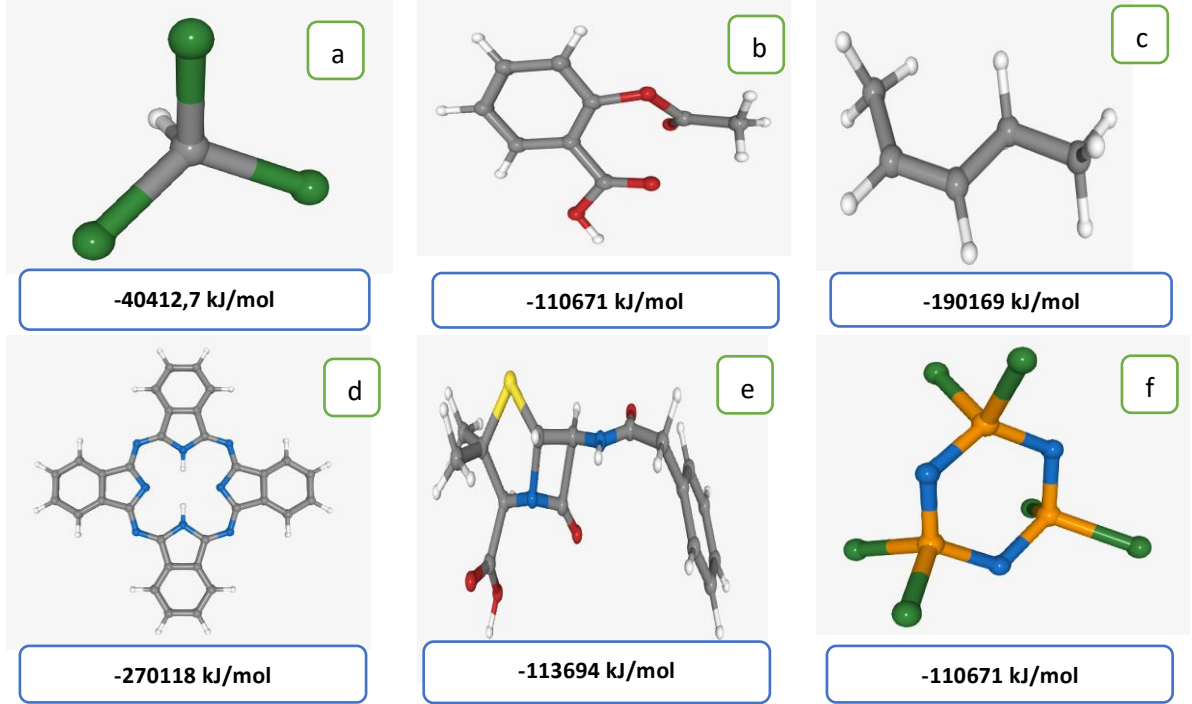


**Şekil 2.** Kloroform, Aspirin, cis-2-penten, ftalosyanin, penisilin ve fosfazen bileşiklerinin a) çizgi top görünümü b) Uzay dolgu görünümü

### 2.1. Geometri Optimizasyonu

Bileşiklerin geometrisinin optimize edilmesi, moleküler yapının en düşük enerjili konuma getirilmesi ve en kararlı yapının belirlenmesi için hesaplamalı kimya çalışmaları öncesinde yapılan bir ön hesaplama basamağıdır. Bu basamakta, moleküler modelleme ve hesaplama yöntemleri kullanılarak gerçekleştirilmektedir (Irak ve ark., 2019). Geometri optimizasyonu, genellikle bir bilgisayar programı

yardımıyla gerçekleştirilir ve moleküler dinamik simülasyonları, yarı deneysel yöntemi, yoğunluk fonksiyonu teorisi ve kuantum kimyası gibi yöntemler kullanılarak yapılmaktadır. Bu sayede bir bileşiğin atomların konumlarını ve bağ açılarını en uygun şekilde ayarlayarak moleküler yapıyı stabilize etmektedir (Reveles ve ark., 2004; İşcan, 2023) Bileşiklerin optimize edilmiş yapıları Şekil 3'te gösterilmiştir. Bileşiklerin daha kuantum fiziksel ve kimyasal özellikleri hesaplanmıştır.



Şekil 3. a) Kloroform, b) Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin optimize yapısının görüntüsü

### 3. Bulgular ve Tartışma

#### 3.1. Konformer Yapıları

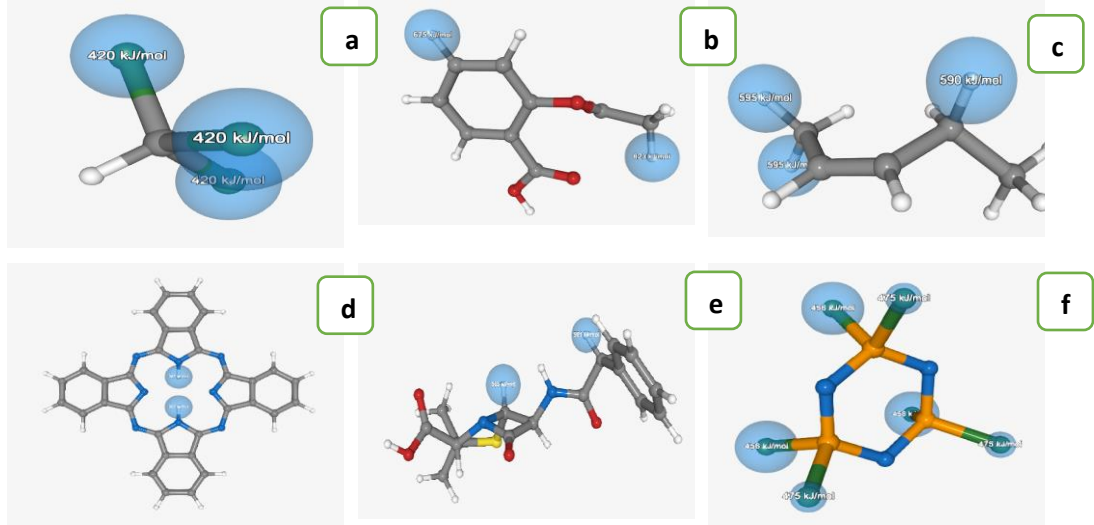
Konformasyon izomerleri veya konformerler, bir molekülün sahip olabileceği kararlı konformasyonlardır. Moleküldeki dönebilen bağların sayısına bağlı olarak çok sayıda konfigürasyon oluşabilir ve bu durum, molekülün özellikleri üzerinde önemli etkiler yaratabilir. Envision yazılımı, konformer yapılarının kolay ve hızlı bir şekilde elde edilmesini sağlar; bu çalışmada hesaplanan konformer yapıları ise Şekil 4'te sunulmuştur.





### 3.3. Baę Ayırırma Enerjisi

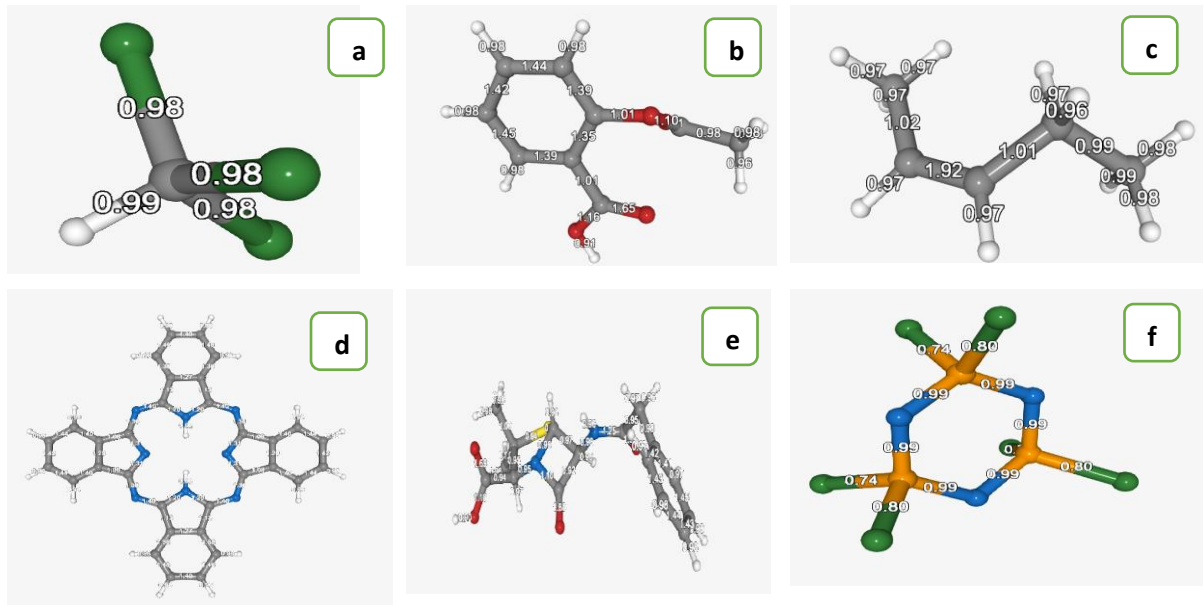
Bileřiklerin baę ayırırma enerjileri řekil 6'da gsterilmiřtir. En yksek baę ayırırma enerjisi, aspirin moleklndeki C-H baęı arasında gzlemlenmiřtir. En dřk baę ayırırma enerjisi ise radikalik tepkimeye girebilen kloroform moleklndeki C-Cl baęı arasında tespit edilmiřtir.



řekil 6. a) Kloroform, b)Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileřiklerinin hesaplanan baę ayırırma enerjisi

### 3.4. Baę Derecesi

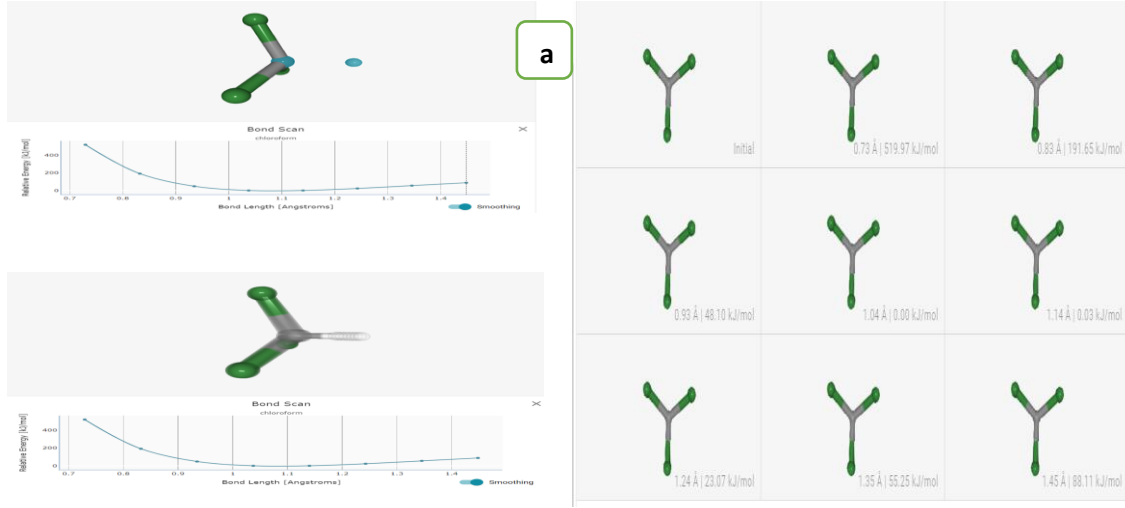
Hesaplanan baę dereceleri řekil 7'de sunulmuřtur. Kloroform molekl incelendięinde, C-H baę derecesinin 0,99, C-Cl baę derecesinin ise 0,98 olduęu grlmektedir. Beklendięi zere, klor atomu hidrojene gre daha elektronegatif olduęundan, karbon zerinde bulunan elektron yoęunluęunu azaltmakta ve bu durum daha dřk bir baę derecesine yol amaktadır.



řekil 7. a) Kloroform, b)Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileřiklerinin baę derecesi

### 3.5. Koordinasyon Taraması

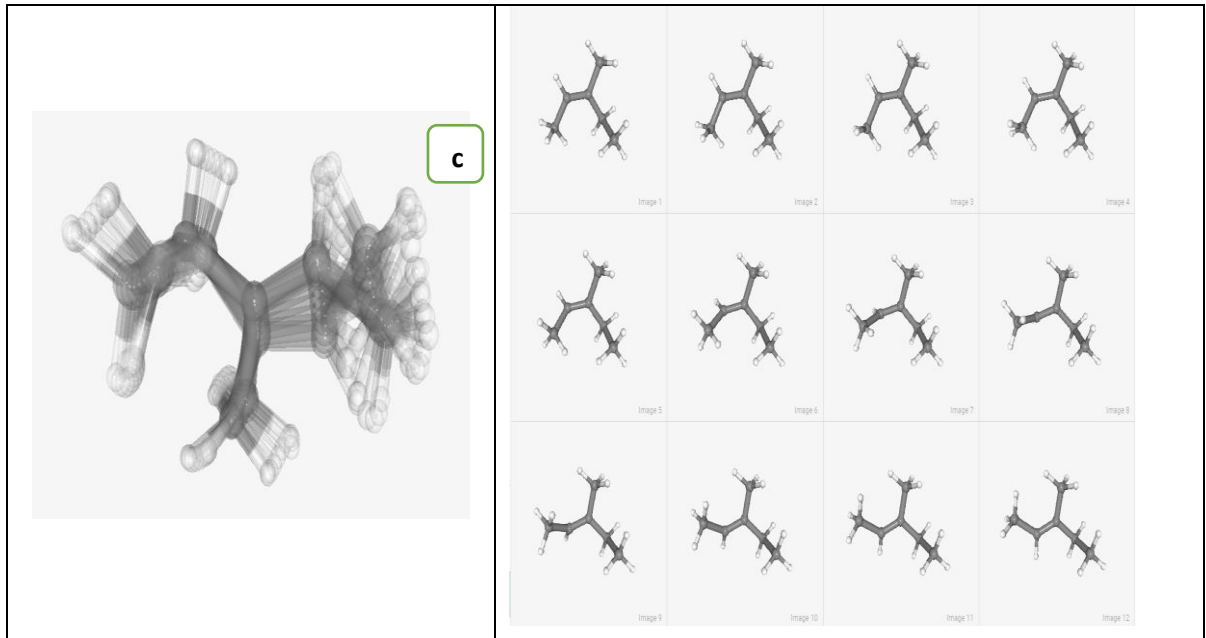
Koordinat taramaları, moleküler sistemlerdeki dinamik süreçleri incelemek için yararlı hesaplamalardır. Bağ ayrışması, ters çevrilmeler ve dönmeler gibi süreçler, ilgilendiğiniz koordinatı değiştirerek ve enerjinin koordinata göre nasıl değiştiği incelenebilmektedir. Bu çalışmada kloroform bileşiğindeki C-H bağı araştırılmış olup, C-H arasındaki bağ kopmasına ait simülasyonunun görüntüsü Şekil 8’de verilmiştir.



Şekil 8. Kloroform molekülünden bir Hidrojen atomunun ayrılmasının simülasyonu

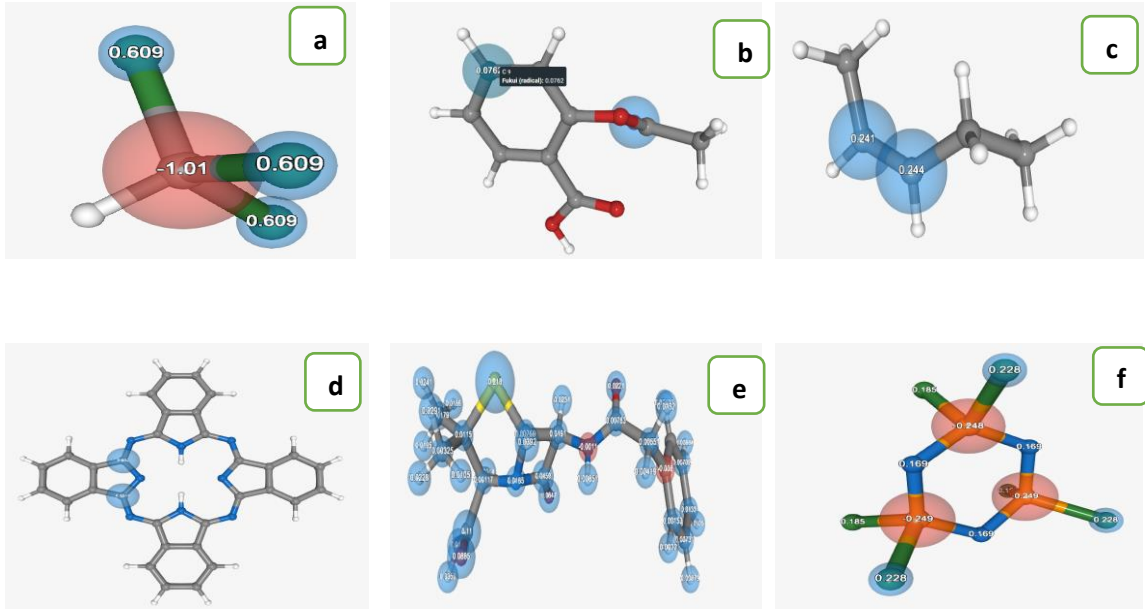
### 3.6. Koordinat Dönüşümleri

Trans-2-penten ve cis-2-penten bileşiklerinin birbirlerine dönüşümü sırasında gerçekleşen olayların görsel bir simülasyonu Entos Envision aracıyla hazırlanmıştır (Şekil 9). Bu dönüşüm süreci, video veya görüntü olarak kayıt altına alınabilmektedir.



Şekil 9. Trans- ve cis-2-penten geometrik izomerlerinin birbirine dönüşümü





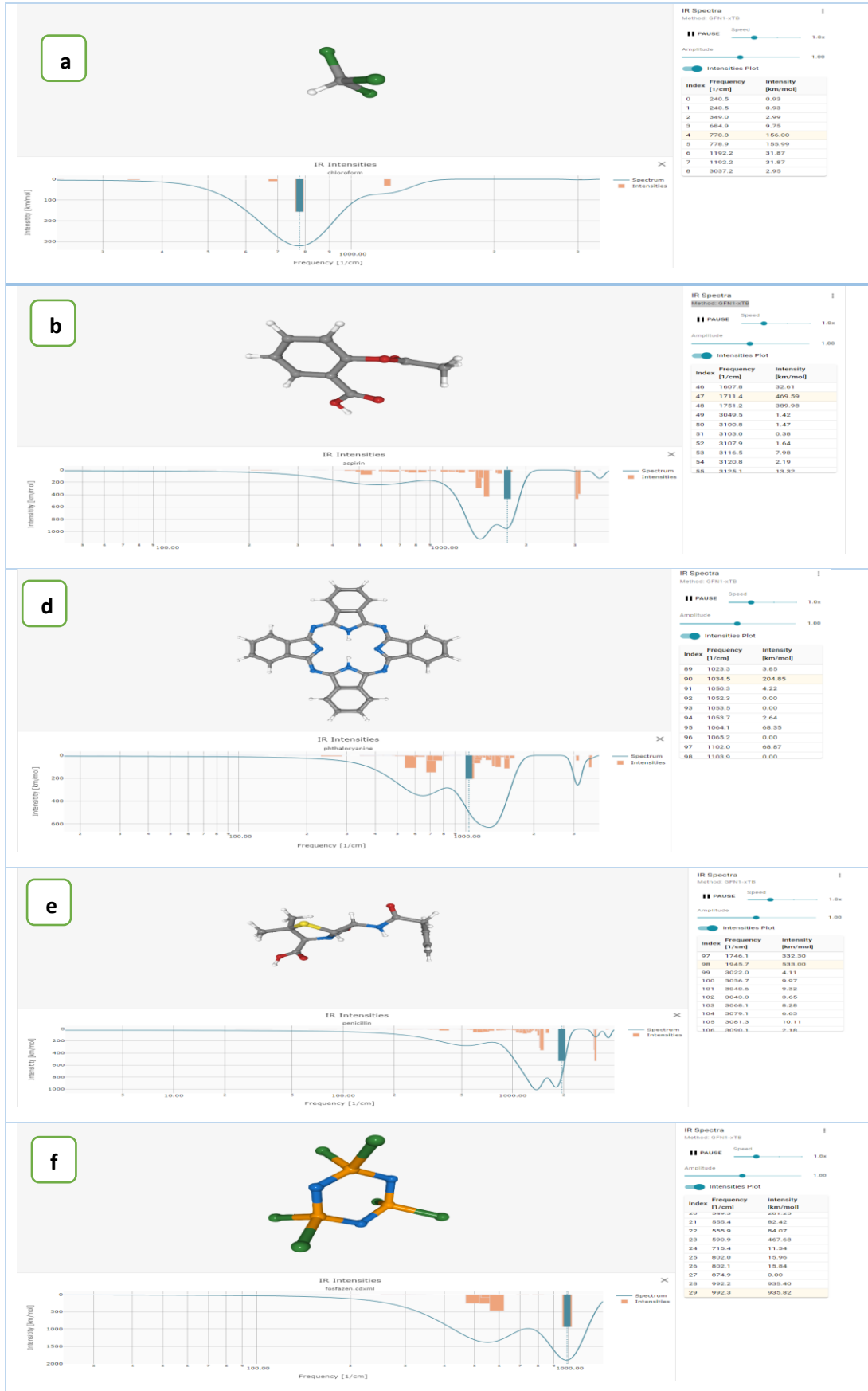
**Şekil 11.** a) Kloroform, b)Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin fukui reaktifliklerinin gösterimi

### 3.9. Titreşim Spektrumu (IR)

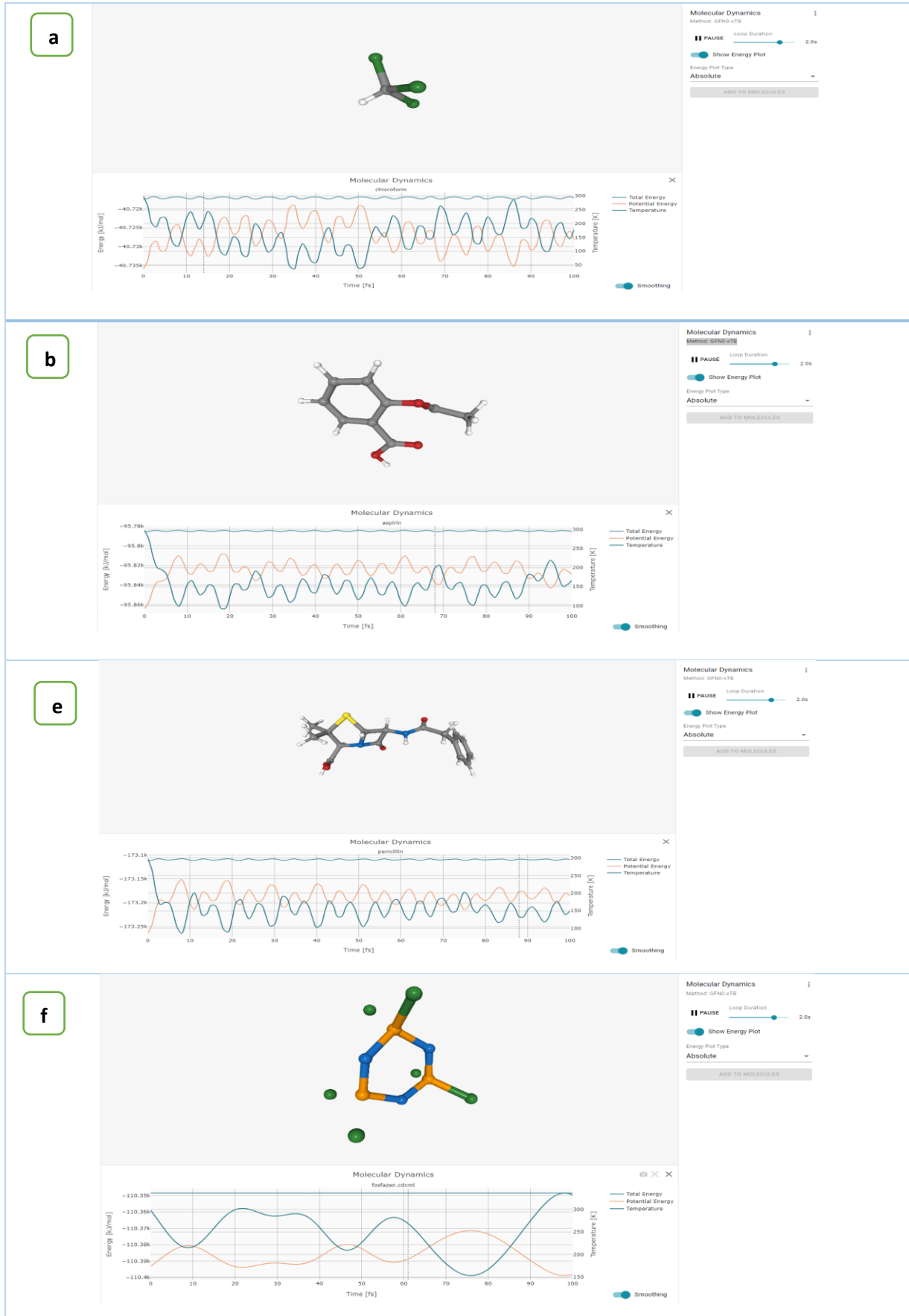
Bileşiklere ait titreşim spektrumu ve frekans değerleri Şekil 12’de gösterilmiştir. C-Cl bağına ait gerime  $780\text{ cm}^{-1}$  civarında görülmüştür. Aspirin ve penisilin molekülünde sırasıyla;  $1711,4\text{ cm}^{-1}$  civarında (asit),  $1751,2\text{ cm}^{-1}$  (ester) ve  $1745,7\text{ cm}^{-1}$ ’de C=O bağ gerilmeleri gözlenmiştir. Cis 2-pentenin IR spektrumu hesaplanamamıştır. Bunun sebebi olarak GFN1-xTB’nin IR spektrumlarını hesaplamada yetersiz kalması ve düşük simetrikli moleküllerde IR spektrumu hesaplamalarında zorlukların olmasıdır (Prancht ve ark., 2020) Ftalosiyanın bileşiğindeki C=N bağına ait gerilme  $1034,5\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlenmiştir. Son olarak fosfazen bileşiğindeki P=N bağına ait gerilmede  $992,3\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlenmiştir.

### 3.10. Moleküler Dinamik

Moleküler dinamik (MD), atomların ve moleküllerin fiziksel hareketlerini incelemek için bir bilgisayar simülasyon yöntemidir. Atomların ve moleküllerin sabit bir süre boyunca etkileşime girmesine izin verilir ve bu da sistemin dinamik evrimi hakkında bilgi verir. Bileşiklerin hesaplanan moleküler dinamikleri Şekil 13’te sunulmuştur. Ftalosiyanın ve cis 2-pentene ait bir moleküler dinamik verisi elde edilememiştir (Plimpton, 1995). Cis-2-penten bileşiğinde bulunan çift bağından kaynaklanan dönme izomerisine sahip olmaktadır. Başka bir deyişle molekül, ısıtma veya dış etkileşimler sonucunda izomerleşerek trans-2-penten formuna geçebilmektedir. Bu tür yapısal değişimler, MD simülasyonlarında cis trans konformasyonlarından hangisini tercih ettiğini belirlemeyi zorlaştırabilmektedir (Rapoport, 2004).



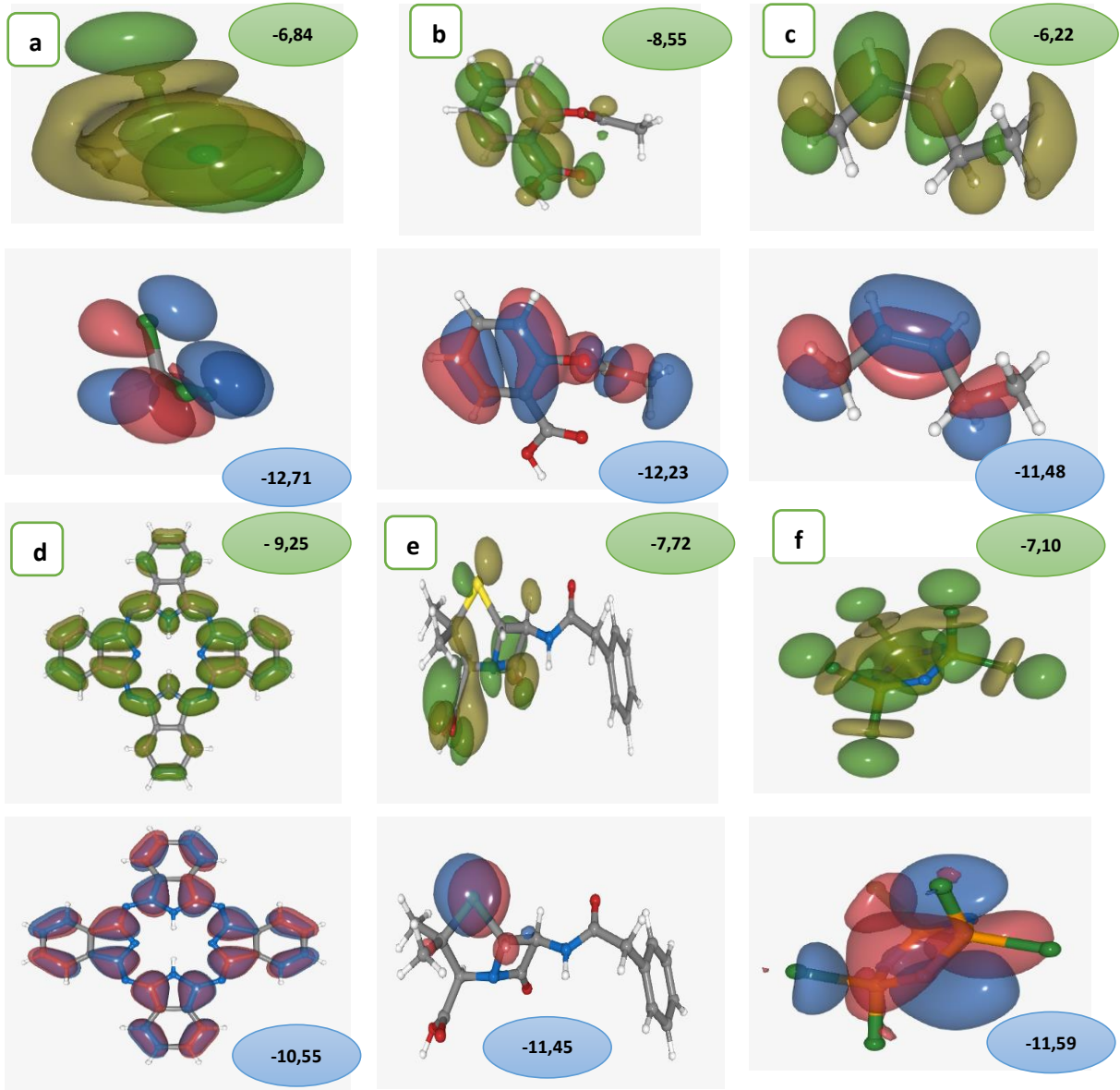
Şekil 12. a) Kloroform, b) Aspirin, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin IR gösterimleri



Şekil 13. a) Kloroform, b)Aspirin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin moleküler dinamik simülasyonları

### 3.11. HOMO-LUMO Orbitaler

Moleküler orbital teorisine göre; tüm moleküller HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital; En yüksek dolu moleküler orbital) ve LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital; En düşük boş moleküler orbital) orbitallerine sahiptir. Kimyasal reaksiyonlarda elektron alış-verişi HOMO ve LUMO orbitalleri üzerinden gerçekleştiği için bu orbitaller öncü orbitaller olarak da adlandırılmıştır. HOMO ve LUMO enerji değerleri arasındaki farkın değerine göre molekülün kimyasal kararlılığı olarak ne kadar kararlı olduğu tanımlanabilmektedir. Eğer reaktif moleküler orbitallerin enerji seviyeleri ne kadar birbirine yakınsa yani  $\Delta E$  enerji farkı ne kadar küçükse reaktiflerin etkileşimi artacak ve reaksiyon o kadar kolay olacaktır (Salem, 1966; Karplus ve ark., 1970; Saraç, 2018; Karabulut, 2020).



**Şekil 14.** a) Kloroform, b)Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin HOMO (mavi)-LUMO (Yeşil) Orbitalleri gösterilmiştir. Enerji değerleri eV cinsinden verilmiştir.

Popüler Koopmans teoremine göre, Homo-Lumo değerlerini kullanarak moleküllerin kimyasal ve spektroskopik özellikleri hesaplanabilmektedir (Öztürk ve Aycan, 2023); İyonlaşma potansiyeli (I), elektron ilgisi (Y), mutlak elektronegatiflik ( $\Phi$ ) (Parr ve ark., 1978), kimyasal sertlik ( $\Psi$ ) (Parr ve ark., 1983), mutlak yumuşaklık (S) (Srivastava ve ark., 2005), elektrofilik indeks ( $\omega$ ) (Parr ve ark., 1999), nükleofilik indeks ( $\varepsilon$ ) (Chattaraj ve ark.), elektron kabul etme gücü ( $\omega^+$ ), elektron verme gücü ( $\omega^-$ ) ve net elektrofiliklik ( $\Delta\omega^\pm$ ) (Çakmak ve ark., 2023). Tüm bileşikler için HOMO-LUMO enerjileri, HOMO-LUMO mutlak enerji farkı, HOMO-LUMO enerjileri kullanılarak hesaplanan iyonizasyon potansiyeli, elektron ilgisi, elektronegatifliği, kimyasal sertliği ve kimyasal yumuşaklığı Tablo 1’de gösterilmiştir.

**Tablo 1.** Entos envision yardımıyla hesaplanan kuantum kimyasal hesaplamaları

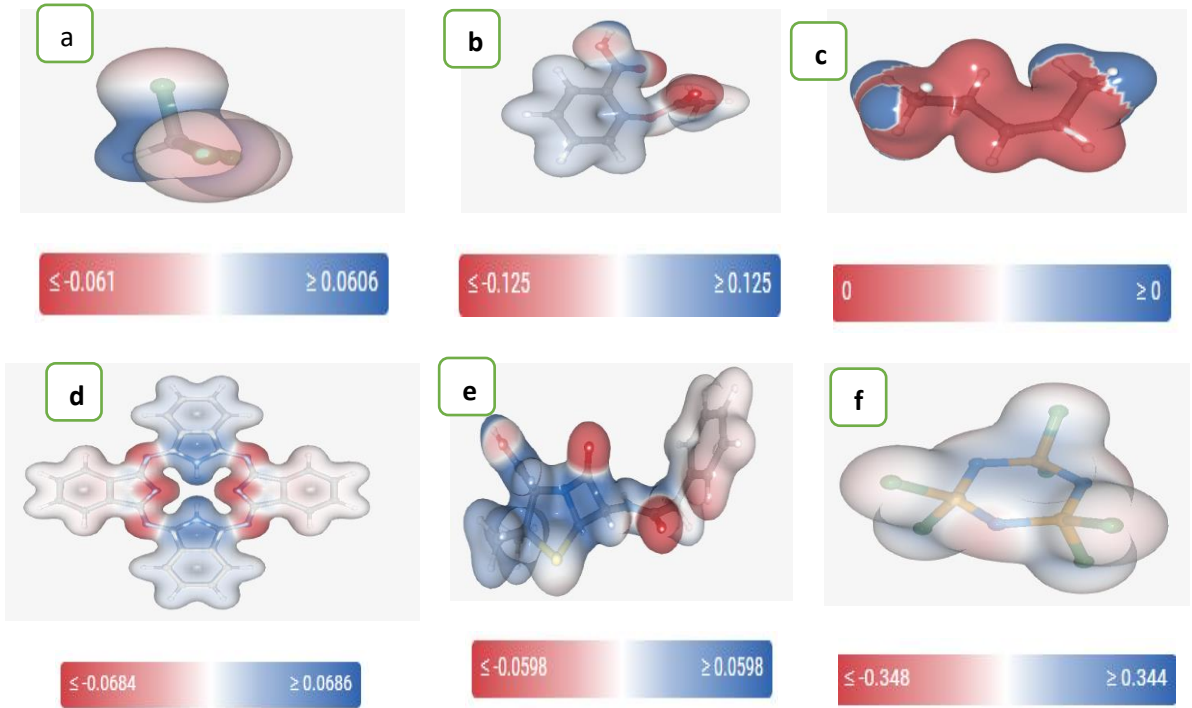
|                                                                     | a      | b      | c      | d      | e      | f      |
|---------------------------------------------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| <b>Kuantum kimyasal parametreler</b>                                |        |        |        |        |        |        |
| $E_{\text{HOMO}}$ (eV)                                              | -12,71 | -12,23 | -11,48 | -10,55 | -11,45 | -11,59 |
| $E_{\text{LUMO}}$ (eV)                                              | -6,84  | -8,55  | -6,22  | -9,25  | -7,72  | -7,10  |
| $\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ (eV)                 | 5,87   | 3,68   | 5,26   | 1,30   | 3,73   | 4,49   |
| $Y = -E_{\text{LUMO}}$ (elektron ilgisi) (eV)                       | 6,84   | 8,55   | 6,22   | 9,25   | 7,72   | 7,10   |
| $I = -E_{\text{HOMO}}$ (İyonlaşma potansiyeli) (eV)                 | 12,71  | 12,23  | 11,48  | 10,55  | 11,45  | 11,59  |
| $\phi = \frac{Y+I}{2}$ (Mutlak elektronegatiflik)(eV)               | 9,78   | 10,39  | 8,85   | 9,90   | 9,59   | 9,35   |
| $\psi = \frac{I-Y}{2}$ (Kimyasal Sertlik) (eV)                      | 2,94   | 1,84   | 2,63   | 0,65   | 1,87   | 2,25   |
| $S = \frac{1}{\psi}$ (Mutlak yumuşaklık) (1/eV)                     | 0,34   | 0,54   | 0,38   | 1,54   | 0,53   | 0,44   |
| $\omega = \frac{\phi^2}{2\psi}$ (Elektrofilik indeks) (1/eV)        | 16,27  | 29,33  | 14,89  | 75,39  | 24,59  | 19,43  |
| $\varepsilon = \frac{1}{\omega}$ (Nükleofilik indeks) (1/eV)        | 0,06   | 0,03   | 0,07   | 0,01   | 0,04   | 0,05   |
| $\omega^+ = \frac{(I+3Y)^2}{16(I-Y)}$ Elektron Kabul Etme Gücü (eV) | 11,76  | 24,37  | 10,79  | 70,15  | 20,07  | 15,05  |
| $\omega^- = \frac{(3I+Y)^2}{16(I-Y)}$ Elektron Verme Gücü(eV)       | 21,53  | 34,76  | 19,64  | 80,42  | 29,65  | 24,40  |
| $\Delta\omega^+ = \omega^+ + \omega^-$ Net elektrofilik(eV)         | 33,29  | 59,13  | 30,43  | 150,57 | 49,72  | 39,45  |

### 3.12. Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP)

Moleküler Elektrostatik Potansiyel haritası, Bazı hesaplamalar yaparak elektrostatik potansiyel bölgelerini, nükleofilik veya elektrofilik olarak aktif olan alanlarının farklı renklerle derecelendirilmesidir. MEP haritasında, molekülün yüzeyinde farklı bölgeler elektrostatik potansiyellerine göre renklendirilmiştir. Bu harita sayesinde molekülün yüzeyinde nasıl bir yük dağılımına sahip olduğu ve hangi bölgelerin negatif veya pozitif potansiyel bölgeler olduğu görsel olarak tanımlanabilmektedir.

- **Kırmızı bölgeler:** En negatif elektrostatik potansiyele sahip bölgelerdir. Genellikle elektronegatif atomlar, yani elektronları kendine daha fazla çeken atomlar, bu bölgelerde bulunur.
- **Mavi bölgeler:** En pozitif elektrostatik potansiyele sahip bölgelerdir. Genellikle elektropozitif atomlar, yani elektronları daha az çeken atomlar, bu bölgelerde yer alır.
- **Yeşil bölgeler:** Nötr veya orta dereceli elektrostatik potansiyele sahip bölgelerdir.

Bu renk skalası, molekülün farklı bölgelerindeki elektrostatik potansiyel değerlerini ayırt etmeyi kolaylaştırmaktadır ve molekülün reaktivitesini, polaritesini ve etkileşim potansiyelini anlamak için kullanılabilir. Kısacası, kırmızı bölgeler elektron bakımından zengin, mavi bölgeler ise elektron bakımından fakirdir (Demircioğlu ve ark., 2015). Cl atomlarının etrafı Şekil 15.a'da görüldüğü gibi kırmızı renk ile gösterilmektedir yani negatif potansiyel bölgeleridir. Pozitif potansiyel bölgesi ise hidrojen atomudur. Klorlama reaksiyonunda bu bölge aktiftir. En yoğun çizgilerin yer aldığı klor atomlarının bulunduğu bölgeler elektronca zengindir ve molekülün potansiyel aktif bölgesi olduğu söylenebilmektedir.



Şekil 15. a) Kloroform, b)Aspirin, c) cis-2-penten, d) ftalosyanin, e) penisilin ve f) fosfazen bileşiklerinin moleküler elektrostatik potansiyel haritaları

#### 4. Sonuç

Sonuç olarak, Entos Envision bir kamu e-posta adresi sayesinde ücretsiz kullanılabilen bir yazılımdır. Öğrenci, öğretmen ve akademisyenlerin ders anlatırken veya araştırma yaparken uzun uğraş isteyen programlama dillerini kullanmalarına gerek duymadan saniyeler içinde hesaplanan sonuçları görselleştirerek sunan bir araçtır. Entos Envision derslerde moleküllerin görselleştirilmesi ve soyut olan

kuantum kavramlarının somutlaştırılmasının sağlayabilen bir araçtır. Entos Envision, karmaşık veri analizi ve görselleştirme gereksinimlerini karşılayan güçlü bir araç olarak öne çıkıyor. Bu yazılım, kullanıcıların büyük veri kümelerini hızlı ve etkili bir şekilde işlemelerine ve bu verilerden anlamlı içgörüler elde etmelerine olanak tanımaktadır. Entos Envision'ın esnek ve özelleştirilebilir arayüzü, kullanıcıların ihtiyaçlarına uygun çözümler oluşturmalarına izin verirken, derinlemesine analiz ve raporlama özellikleri, işletmelerin stratejik kararlar almasına yardımcı olacak veri odaklı bir yaklaşım sunmaktadır. Ayrıca, Entos Envision'ın kullanıcı dostu ve sezgisel arayüzü, hem deneyimli veri analistleri hem de yeni başlayanlar için erişilebilir bir platform sağlamaktadır. Bu, şirketlerin ve araştırmacıların veri analizi süreçlerini optimize etmelerini ve verilerden daha hızlı bir şekilde değer elde etmelerini sağlar. Ancak, Entos Envision'ın bazı zorlukları da göz ardı edilmemelidir. Örneğin, Entos Envisiondaki hesaplamaların 60 saniye ile sınırlı olmasından dolayı bazı hesaplama araçlarının bazı moleküllerde uygulanamamış olması bir dezavantaj olarak görülebilmektedir. Büyük veri kümeleriyle çalışırken performansın düşebileceği ve karmaşık analizlerin uzun sürebileceği görülebilir. Bu durum, özellikle çok büyük veri setlerine sahip kuruluşlar için dikkate alınması gereken bir husustur. Genel olarak, Entos Envision, veri analizi ve görselleştirmenin önemli bir aracı olarak öne çıkıyor ve işletmelere stratejik kararlar almaları için gerekli içgörülerini sunma potansiyeline sahip olmaktadır. Sürekli olarak gelişen ve iyileştirilen bu yazılım, gelecekte veri odaklı karar alma süreçlerinde önemli bir rol oynamaya devam etmesi beklenmektedir.

### **Teşekkür**

Entos envision yazılımına teşekkür ederim.

### **Çıkar Çatışması Beyanı**

Makale yazarı herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan eder.

### **Araştırmacıların Katkı Oranı Beyan Özeti**

Yazar makaleye %100 oranında katkı sağlamış olduğunu beyan eder.

### **Kaynakça**

- Cakmak S., Aycan T., Yakan H., Veyisoglu A., Tanak H., Evecen M. Preparation, spectroscopic, X-ray crystallographic, DFT, antimicrobial and ADMET studies of N-[(4-fluorophenyl)sulfanyl]phthalimide. Acta Crystallographica Section C 2023; 79(6): 249-256.
- Chattaraj P.K., Maiti B., Sarkar U. Philicity: a unified treatment of chemical reactivity and selectivity. The Journal of Physical Chemistry A 2003; 107(25): 4973-4975.
- Demircioğlu Z., Kaştaş Ç.A., Büyükgüngör O. (E)-2-((4-hidroksi-2-metilfenilimino) metil)-3-metoksifenolün teorik analizi (NBO, NPA, Mulliken popülasyon yöntemi) ve moleküler yörünge

- çalışmaları (sertlik, kimyasal potansiyel, elektrofiliklik ve Fukui fonksiyon analizi). Moleküler Yapı Dergisi 2015; 1091, 183-195.
- Demircioğlu Z., Ersanlı CC., Alpaslan G. (Z)-Etil 4-kloro-2-[2-(2-metiloksifenil) hidrazon]-3-okso-butanoat kristalinin hesaplamalı kimya yöntemiyle lokal ve global kimyasal aktivite hesaplamaları ve DNA bazları ile yük transferinin tayini. Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi 2019; 4(2): 93-108.
- Entos Envision, <https://www.entos.ai/envision> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/172506> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/173493> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/173675> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/172513> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/173462> (Erişim 25.07.2024).
- Entos Envision, <https://envision.entos.ai/edit/molecule/130064> (Erişim 25.07.2024).
- Irak ZT., Poyraz M. [Ni(2-Benzimidazol-İl-Üre)2(Etanol)2][NO3]2 bileşiğinin yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak yapılan bazı kuantum kimyasal hesaplamaları. Süleyman Demirel University Faculty of Arts And Science Journal of Science 2019; 14(2): 203-212.
- İşcan Ö. A insilico study on structural aspects of caffeine by arguslab 4 software. Journal of Physical Chemistry and Functional Materials 2023; 6(2): 138-144.
- Karabulut B. 7-Etil-6-klor-2-metilkromon ve 7-Etil-6klorflavonun Sentezi ve Teorik Hesaplamaları. BEÜ Fen Bilimleri Dergisi 2020; 9(1): 26-35.
- Karplus M., Porter RN. Atoms and molecules: an introduction for students of physical chemistry. Publisher: W.A. Benjamin, New York 1970.
- Kenichi F. Theory of orientation and stereoselection. Orientation and Stereoselection. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg 2006; 1-85.
- Öztürk F., Aycan T. Bakır(II)-Sulfametazin-2,2'-bipiridin kompleksinin hesaplamalı kimya yöntemi ile spektroskopik özelliklerinin incelenmesi: Moleküler modelleme çalışması. ADME/T. Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi 2023; 8(1): 39-64.
- Parr RG., Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules. Oxford University Press 1989.
- Parr RG., Donnelly RA., Levy M., Palke WE. Electronegativity: the density functional viewpoint. The Journal of Chemical Physics, 1978; 68(8): 3801-3807.
- Parr RG., Szentpály LV., Liu S. Electrophilicity index. Journal of the American Chemical Society 1999; 121(9): 1922-1924.
- Parr RG., Pearson RG. Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity. Journal of the American Chemical Society 1983; 105(26): 7512-7516.
- Pracht P., Grant DF., Grimme S. Comprehensive assessment of GFN tight-binding and composite density functional theory methods for calculating gas-phase infrared spectra. Journal of Chemical Theory and Computation 2020; 16(11): 7044-7060.

- Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics* 1995; 117(1): 1-19.
- Pubchem. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> (Eriřim 25.07.2024).
- Rapaport DC. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge University press; 2004.
- Reveles JU., Köster AM. Geometry optimization in density functional methods. *Journal of Computational Chemistry* 2004; 25(9): 1109-1116.
- Serway RA., Jewett JW. *Physics for scientists and engineers with modern physics*. Cengage Learning; 2018.
- Saraç K. 4-Klorometil-6,8-dimetilkumarin bileřiğinin sentezi ve teorik kimyasal hesaplamaları. *BEÜ Fen Bilimleri Dergisi* 2018; 7(2): 311-319.
- Salem L. *The molecular orbital theory of conjugated systems*, Publisher: W.A. Benjamin, New York 1966; 576.
- Srivastava H., Pasha F., Singh P. Atomic softness-based QSAR study of testosterone. *International Journal of Quantum Chemistry* 2005; 103(3): 237-245.
- Tarı Ö., Arpacı N. İlaç tasarımında yapay zekâ uygulamaları. *Journal of Faculty of Pharmacy of Ankara University* 2024; 48(1): 327-365.
- Uzun S., Demircioğlu Z. 4-Etoksi-3-Metoksibenzaldehit molekülünün hesaplamalı kimya yöntemiyle kimyasal aktivite tayini. *Karadeniz Fen Bilimleri Dergisi* 2019; 9(2): 275-288.
- Yang W., Mortier WJ. The use of global and local molecular parameters for the analysis of the gas-phase basicity of amines. *Journal of the American Chemical Society*, 1986; 108(19): 5708-5711.
- Yazgı M., Topal H. Akışkan yataklı bir gazlařtırıcının hesaplamalı akışkanlar dinamiğı (HAD) ve termodinamik denge yaklaşımı ile modellenmesi ve deneysel verilerle karřılařtırmalı olarak incelenmesi. *Gazi Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi* 2024; 39(1): 125-138.