

2-(2- İyodofenil)isoindolin-1,3-dion) Molekülünün Hesaplamalı Kimya Yöntemiyle Yapısal Analizi

Gonca Özdemir Tarı^{1*} ve Güneş Demirtaş²

^{1*}Vezirköprü Meslek Yüksekokulu, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun, Türkiye, (gozdemir@omu.edu.tr)(ORCID:0000-0001-5919-1778)

²Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun, Türkiye (gunesd@ou.edu.tr)(ORCID:0000-0001-9953-4026)

Özet– Bu çalışmanın amacı daha önce yapı çözümü x-ışını kırınımı ile gerçekleştirilmiş olan 2-(2-iyodofenil)isoindolin-1,3-dion, C₁₄H₈INO₂ [1], molekülünün hesaplamalı kimya yöntemiyle yeniden incelenmesini kapsamaktadır. Molekülün teorik hesaplamaları Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı (YFK) ve Lee-Yang-Par, korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma modeli olan B3LYP yöntemi ve 6-311++G(d,p) temel baz seti kullanılarak yapılmıştır. Molekülün sınır orbitalleri ve bunlardan türetilmiş parametreler, Mulliken ve doğal yük analizleri (NPA), Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) haritaları belirlenmiştir. İlave olarak moleküle ait Hirsfeld Yüzey analizi yapılarak molekülün elektrofilik ve nükleofilik bölgeleri belirlenmiştir.

Keywords – Hirsfeld Yüzey Analizi, Hesaplamalı Kimya, Yoğunluk Fonksiyonel Kuramı,

Atf: Özdemir Tarı, Gonca, Demirtaş, Güneş. (2022). 2-(2- İyodofenil)isoindolin-1,3-dion) Molekülünün Hesaplamalı Kimya Yöntemiyle Yapısal Analizi. International Journal of Multidisciplinary Studies and Innovative Technologies, 6(1): 91-96.

Structural Analysis Computational Chemistry Method of 2-(2-Iodophenyl)isoindoline-1,3-dione

ABSTRACT: The aim of this study includes the re-examination of the molecule of 2-(2-iodophenyl)isoindolin-1,3-dione, C₁₄H₈INO₂ [1], whose structure solution was carried out by x-ray diffraction, by computational chemistry method. Theoretical calculations of the molecule were made using Density Functional Theory (DFT) and Lee-Yang-Par, the B3LYP method, which is a 3-parameter Becke mixed model with correlation energy, and the 6-311++G(d,p) fundamental basis set. The boundary orbitals of the molecule and their derived parameters, Mulliken and Natural Charge Analysis (NPA), Molecular Electrostatic Potential (MEP) maps were determined. In addition, the electrophilic and nucleophilic regions of the molecule were determined by performing Hirsfeld Surface analysis of the molecule.

Keywords: Hirsfeld Surface Analysis, Computational Chemistry, Density Functional Theory.

I. GİRİŞ

Ftalimid türevi moleküller özellikle biyolojik aktivitelerinden dolayı, antikolülsan, antiinflamatuvar, antimikrobiyal, antitümör gibi geniş bir medikal uygulama ağına sahip olduğu için araştırmalarda öncelikli ve önemli bir role sahiptir [2-7]. Yapısal analizi x-ışınları tarafından aydınlatılmış olan 2-(2-iyodofenil)isoindolin-1,3-dion, $C_{14}H_8INO_2$ [1], molekülünün teorik hesaplamaları için Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı (YFK)/B3LYP yöntemi ve 6-311++(d,p) temel baz seti olarak kullanılmıştır. Hesaplama sürecinde kullanılan yöntemler belirlenirken benzer moleküllere uygulanan seviyelere bakılarak bir literatür araştırması yapılmıştır. Bu molekül gruplarında çok yaygın şekilde kullanılan YFK/B3LYP/6-311++G(d,p) yönteminden elde edilen verilerin deneysel verilerle [1] oldukça uyumlu olduğu gözlenmiştir. Hesaplamalı kimya yöntemi bu şekildeki organik bileşiklerin yapısal ve elektronik özelliklerinin belirlenmesinde son yıllarda yaygın şekilde kullanılmaktadır.

Böylelikle hem deneysel verileri desteklemek hem de deneysel yöntemlerle elde edilemeyen ilave bilgilerle ulaşmak için araştırmacıların tercih ettiği yöntemler arasında yerini almaktadır. Bu yöntemler sayesinde moleküllerin geometrik parametreleri, sınır orbitalleri ve sahip oldukları enerji düzeyleri ve bunlardan türetilen kimyasal parametreler hesaplanabilmektedir.

II. MATERYAL VE METOT

Çok elektronlu sistemlerin dalga fonksiyonlarının matematiksel olarak çözülebilmesi ve bunun yorumlanabilmesi ilkesine dayalı olarak çalışan hesaplamalı kimya sayesinde deneysel olarak ulaşılması mümkün olmayan kimyasal özelliklere ulaşılabilir.

Daha önce sentezi gerçekleştirilmiş ve yapısı x-ışınları kırınımı yöntemiyle aydınlatılan [1] molekülün teorik hesaplamaları için işlemcisi yüksek yeni nesil kişisel bilgisayarlar kullanılmıştır. Tüm hesaplamalar Gaussian 03W [8] programı kullanılarak YFK'nın Lee-Yang-Par korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma modeli olan B3LYP yöntemi ile 6-311++G(d,p) temel baz seti kullanılarak yapılmıştır. Elde edilen geometrik parametrelerin deneysel değerlerle uyumlu olduğu görüldükten sonra diğer hesaplamalar tamamlanmıştır.

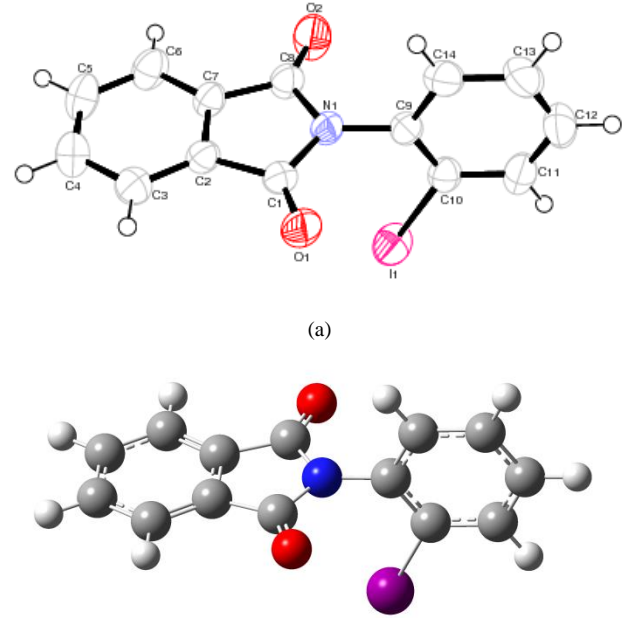
III. BULGULAR VE TARTIŞMA

A. Optimize Yapı

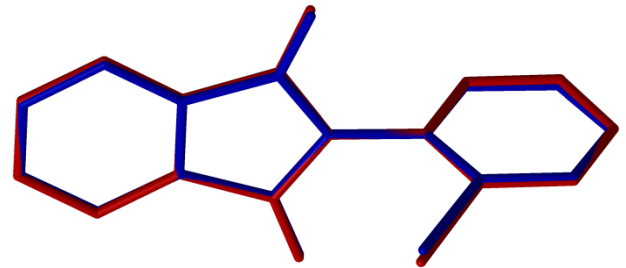
YFK yöntemiyle elde edilen geometrik parametrelerle, x-ışını kırınımından elde edilen geometrik parametrelerin [1] birbirleri ile oldukça uyumlu ve yakın değerler verdiği tespit edilmiştir ve sonuçlar Tablo 1'de karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Şekil 1.(a)'da deneysel verilerden elde edilen Ortep şekli [1] ve (b)'de ise teorik hesaplamalardan elde edilen optimize şekil verilmektedir. Teorik yöntemlerden elde edilen geometrik parametrelerle deneysel parametrelerin uyumunu göstermek için optimize yapı ve deneysel yapı üst üste örtüştürülerek hata değerleri belirlenmektedir. Bağ uzunlukları ile bağ açlarına ait bu örtüşmelere ait hata değeri 0.075 olup molekülün örtüşme şekli ise Şekil 2'de verilmiştir.

Geometrik parametrelerin teorik ve deneysel sonuçları arasındaki kabul edilebilir farklılıklar ise teorik hesaplamaların gaz fazdaki izole molekül üzerinden

yürütülmüş olması ile, deneysel verilerin ise katı fazdaki moleküle ait olması ile açıklanabilmektedir. Kabul edilebilir deneysel hatalarla birlikte molekülün düzlemsel bir yapıya sahip olmadığı gözlenmiş olup iki moleküler halka arasındaki dihedral açı $84.78^{\circ}(0.10)$ 'dir. Halkalar arasındaki hata değerleri ise C1-N1 için 0.0088 ve C9-C14 için ise 0.0020'dir.



Şekil 1. a) 2-(2-iyodofenil)isoindolin-1,3-dion, $C_{14}H_8INO_2$ molekülüne ait x-ışını kırınımından [1] ve b) Optimize yapıdan elde edilen molekül şekilleri.



Şekil 2. Moleküle ait x-ışını kırınımından elde edilen optimize geometrisi (mavi) ve YFK yöntemlerinden elde edilen optimize geometrilerin (kırmızı) üst üste örtüşmesi.

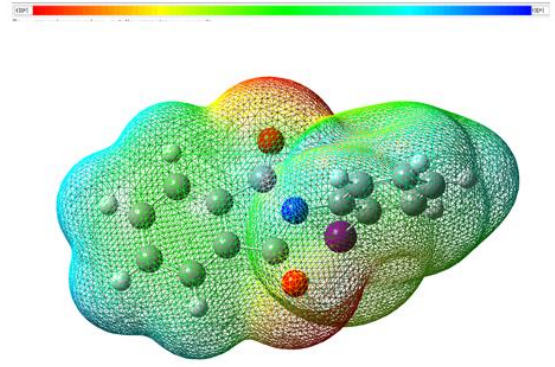
Tablo 1. Bileşiğine ait bazı deneysel ve kuantum mekaniksel hesaplamalara ait geometrik parametreler.

Bağ uzunluğu	X-ışını [1]	B3LYP 6-311++G(d,p)
C1-O1	1.204(3)	1.20518
C1-N1	1.399(4)	1.41477
C1-C2	1.485(4)	1.49138
C2-C3	1.374(4)	1.38586
C7-C8	1.481(4)	1.49138
C8-O2	1.196(4)	1.20518
C9-C14	1.382(4)	1.39381
C9-N1	1.432(4)	1.42571
C12-C13	1.369(6)	1.39238
C10-I1	2.094(3)	2.10278

Maks. Fark		0.02338
KOK		0.0119
Bağ açısı		
O1-C1-N1	124.8(3)	125.53999
O1-C1-C2	129.2(3)	129.15350
N1-C1-C2	106.0(2)	105.30208
C3-C2-C1	130.5(3)	129.81815
N1-C8-C7	105.8(2)	105.30218
C14-C9-N1	118.2(3)	119.01836
C10-C9-N1	121.4(3)	121.12721
C9-C10-I1	121.2(2)	120.67457
C9-C14-C13	119.2(3)	120.53874
C1-N1-C9	124.7(2)	123.95799
Maks. Fark		1.33874
KOK		0.715
Burulma açısı		
O1-C1-C2-C3	1.0(6)	0.7190500
N1-C1-C2-C3	-178.1(3)	179.97648
O1-C1-C2-C7	180.0(3)	-178.67995
N1-C1-C2-C7	0.9(3)	0.57748
C14-C9-C10-I1	179.0(2)	179.99800
C1-C2-C3-C4	-179.7(3)	-179.48784
C2-C7-C8-O2	-179.4(4)	178.67868
C14-C9-N1-C8	85.6(4)	-89.61406
C6-C7-C8-N1	178.0(3)	-178.97801
C7-C8-N1-C9	179.4(3)	-179.6986
C10-C9-N1-C1	84.2(4)	-90.37463

B. Moleküler Elektrostatik Potansiyel

Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) haritaları bir moleküler sistemdeki elektron yoğunluklarını hayali bir birim pozitif yük yardımıyla yüzey taraması yaparak bulmayı hedeflemektedir. Tarama sonucu kırmızıdan maviye doğru, görece en zengin elektron yoğunluğunun olduğu bölgelerden en zayıf elektron yoğunluğunun bulunduğu bölgelere doğru renk kodları ile verilmektedir. MEP haritalarında ortaya çıkan bu yüzey, molekülün büyüklüğünü, şeklini, dipol momentini, yük dağılımını ve elektrostatik potansiyel değeri $V(r)$ 'yi göstermektedir. MEP haritaları moleküldeki elektrofilik ve nükleofilik tepkimelerin olabileceği muhtemel bölgelerin belirlenmesinde çok önemli bilgileri barındırmaktadır ki böylelikle yeni sentezi yapılacak moleküller içinde araştırmacılar için rehber niteliği taşımaktadır. Bu çalışmada MEP haritası ve molekülün elektrofilik ve nükleofilik reaktif bölgeleri YFK/B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemi ile hesaplanılmış olup 3-boyutlu yüzey haritası Şekil 3'de verilmiştir. Haritaya bakıldığında en negatif bölgelerin O1 ve O2 atomları üzerinde konumlandığı ($V(r)$ değerleri sırasıyla -0.0484503 ve -0.0490046) en pozitif bölgelerin ise hidrojen atomları üzerinde konumlandığı görülmektedir.



Şekil 3. Moleküle ait MEP haritası.

C. Mulliken ve Doğal Yük Analizi (NPA)

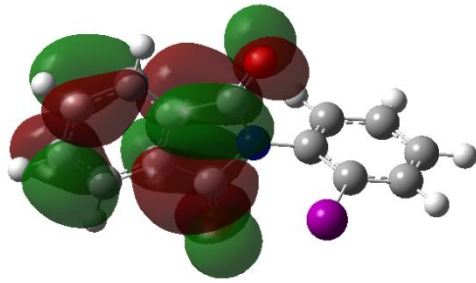
Mulliken yüklerinin [8] hesaplanması, molekülün reaktif bölgelerinin öngörülmesini sağlamaktadır ki böylelikle elde edilen verilerin MEP haritalarından elde edilen verileri destekler olması beklenilmektedir. Yük analiz metodları moleküle ait elektron yoğunluğunu moleküldeki atomlar üzerine dağıtan ve atomların sahip oldukları yük miktarlarını belirlemeye çalışan yöntemlerdir. Moleküle ait net yükler Mulliken ve NPA analizi ile YFK/B3LYP/6-311++G(d,p) yöntemleriyle hesaplanmış ve sonuçlar hem Tablo 2'de yük miktarları paylaşılmıştır. Bu sonuçlara göre, negatif yükler molekülün elektronegativitesi en yüksek olan O ve C atomları üzerinde, pozitif yükler ise elektronegativitesi daha düşük olan hidrojenler üzerinde yoğunlaşmış şekildedir.

Tablo 2. Atomlar üzerindeki Doğal ve Mulliken yük miktarları.

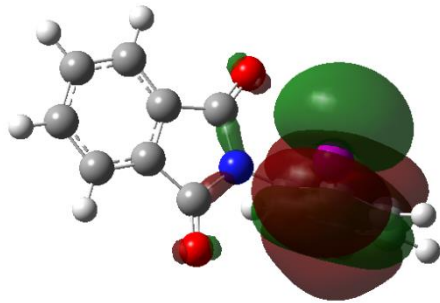
	<i>NPA</i>	<i>6-311++(d,p)</i>	<i>Mulliken</i>	<i>6-311++(d,p)</i>
C1	0.70379	C1	-0.380000	
C2	-0.11103	C2	0.890314	
C3	-0.16060	C3	-0.609031	
C4	-0.18155	C4	-0.231074	
C5	-0.18155	C5	-0.231065	
C6	-0.16060	C6	-0.609110	
C7	-0.11103	C7	0.890285	
C8	0.70379	C8	-0.380056	
C9	0.11520	C9	-2.664776	
C10	-0.20387	C10	-0.006911	
C11	-0.21870	C11	0.478542	
C12	-0.17956	C12	0.475304	
C13	-0.19517	C13	-0.455105	
C14	-0.16617	C14	1.294956	
O1	-0.54102	O1	-0.208211	
O2	-0.54103	O2	-0.208200	
N1	-0.55015	N1	0.643330	
I1	0.22386	S1	0.188687	

D. HOMO-LUMO Enerjileri ve Bunlardan türetilen Kuantum Kimyasal Nicelikler

Moleküler sistemlerin tanımlanmasında ve moleküllerin diğer moleküllerle etkileşimini açıklamak için sınır molekül orbitalleri (FMOs) oldukça sık şekilde kullanılmaktadır. HOMO terimi ‘en yüksek işgal edilmiş moleküler orbital’ anlamına gelirken, LUMO terimi ‘en düşük boş moleküler orbital’ anlamına gelir. HOMO orbitalleri nükleofilik moleküller için, LUMO orbitalleri ise elektrofilik moleküller için karakteristiktir. HOMO-LUMO sınır orbital enerjilerinden faydalanılarak iyonlaşma enerjisi (I), elektron ilgisi (A), elektronegatiflik (χ), kimyasal sertlik (η) ve yumuşaklık (S), elektrofilisite indeksi (ω) gibi kuantum kimyasal nicelikler hesaplanıp, yorumlanabilmektedir. Şekil 4’te YFK/B3LYP/6-311++G(d,p) baz seti ile hesaplanmış sınır orbitalleri ve Tablo 3’de ise bu orbitallerin sahip olduğu enerjiler ve bunlardan türetilmiş kuantum kimyasal nicelikler verilmektedir.



LUMO (-2.5837 eV)



HOMO (-6.7003 eV)

Şekil 4. Moleküle ait HOMO ve LUMO şekillenimleri.

Tablo 3. Moleküle ait hesaplanmış kuantum kimyasal parametreler.

<i>B3LYP/6-311G++(d,p)</i>	
İyonizasyon enerjisi, I	6.7003
Elektron ilgisi, A	2.5837
Enerji aralığı, ΔE	4.1166
Elektronegatiflik, χ	4.6420
Kimyasal sertlik, η	2.0583
Kimyasal yumuşaklık, S	0.2429
Elektrofilisite indeksi, ω	-5.2344

E. Doğrusal Olmayan Optik Özellikler (NLO)

Son yıllarda doğrusal olmayan optik özellikler taşıyan materyaller bilgi teknolojilerinde, optik sinyal işleme ve

veri kaydetme, optik bağlantı materyallerinin tasarımında, lazer ve hologramlarda, endüstriyel uygulamalarda ve moleküler sistemlerin özellikleri belirlenirken oldukça sık şekilde kullanılmaktadır [19-21]. Moleküle ait dipol moment (μ), doğrusal kutuplanabilirlik (α), yönelime bağlı kutuplanabilirlik (β) değerleri hesaplanmış ve Tablo 4’de verilmiştir.

Tablo 4. Moleküle ait optik özellik hesaplamaları ve bileşenleri.

	Dipol Moment (Debye)	Doğrusal kutuplanabilirlik, Yönelime bağlı kutuplanabilirlik (esu)	1. mertebede n kutuplanabilirlik (esu)
<i>B3LYP</i>	μ_x 0.7723762	α_{xx} 260.9057544	β_{xxx} -202.2595433
	μ_y 0.1267074	α_{xy} -29.4025142	β_{xxy} 66.6878137
	μ_z 0.0000283	α_{xz} 180.8100248	β_{xyy} -52.0517076
	μ 0.7827	α_{yy} -0.0028552	β_{yyy} 280.2180035
		α_{yz} -0.0037941	β_{xxz} -0.0944106
		α_{zz} 168.1501446	β_{xyz} -0.0531844
		α 30.0940	β_{yyz} -0.0096249
		$\Delta\alpha$ 109.4145	β_{xzz} 125.5242199
			β_{yzz} 5.6188463
			β_{zzz} -0.0505083
<i>gaz</i>			β 3.24244x10⁻³⁰
	μ_x 1.1219591	α_{xx} 346.1672794	β_{xxx} -711.7886438
	μ_y 0.180912	α_{xy} -40.5313849	β_{xxy} 211.6823461
	μ_z -0.000002	α_{xz} 259.5879915	β_{xyy} -122.1153091
	μ 1.1364	α_{yy} 0.0011398	β_{yyy} 707.1357378
		α_{yz} -0.0126374	β_{xxz} -0.1487687
		α_{zz} 253.8046509	β_{xyz} -0.0245621
		α 42.4152	β_{yyz} -0.0150011
		$\Delta\alpha$ 110.9606	β_{xzz} 311.7702144
			β_{yzz} 10.337739
<i>Etanol</i>			β_{zzz} 0.1994119
			β 9.20787x10⁻³⁰
	μ_x 1.1393109	α_{xx} 349.1851352	β_{xxx} -742.7445914
	μ_y 0.182711	α_{xy} -40.8954129	β_{xxy} 219.7299807
	μ_z -0.0005068	α_{xz} 263.079875	β_{xyy} -122.6770221
	μ 1.1538	α_{yy} -0.0007798	β_{yyy} 729.3653373
		α_{yz} -0.0087439	β_{xxz} 0.0867978
		α_{zz} 258.106652	β_{xyz} -0.0403237
		α 42.9487	β_{yyz} 0.1038941
<i>dmsO</i>			

		$\Delta\alpha$	109.6680	β_{zzz}	320.4004892
				β_{yzz}	9.5016726
				β_{zzz}	0.7361613
				β	9.52659×10^{-30}
μ_x	1.1420238	α_{xx}	351.3397932	β_{xxx}	-758.3387975
μ_y	0.1808352	α_{xy}	-40.9525889	β_{xyy}	219.766505
μ_z	0.0011768	α_{xz}	266.0257721	β_{xyy}	-128.6958367
μ	1.1562	α_{yy}	0.0017889	β_{yyy}	757.6804467
		α_{yz}	-0.0327237	β_{xxz}	-0.6383873
		α_{zz}	262.9710128	β_{xyz}	-0.0440086
		α	43.4404	β_{yyz}	-0.1122887
		$\Delta\alpha$	107.040	β_{zzz}	331.8692689
				β_{yzz}	11.3476561
				β_{zzz}	-0.6396047
				β	9.79685×10^{-30}

<i>Toplam</i>	53.946
<i>Entropi, S (cal/mol K)</i>	
<i>Elektronik</i>	0.000
<i>Öteleme</i>	43.443
<i>Dönme</i>	34.013
<i>Titreşim</i>	47.053
<i>Toplam</i>	124.509
<i>Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)</i>	
<i>A</i>	0.02369
<i>B</i>	0.01071
<i>C</i>	0.00896
<i>Dönme sabitleri (GHz)</i>	
<i>A</i>	0.49358
<i>B</i>	0.22324
<i>C</i>	0.18666
Sıfır-nokta titreşim enerjisi (kcal/mol)	116.46665
Sıfır-nokta düzeltmesi*	0.185601
Enerjide termal düzeltme*	0.1999776
Entalpide termal düzeltme*	0.200720
Gibbs serbest enerjisine termal düzeltme*	0.141562
Elektronik ve sıfır nokta enerjisinin toplamı *	-7633.694607
Elektronik ve termal enerjilerin toplamı *	-7633.680432
Elektronik ve termal entalpi toplamı *	-7633.679488
Elektronik ve termal serbest enerjilerin toplamı *	-7633.738646
Toplam enerji (Hartree)	-7633.8802082

F. Termodinamik Özellikler

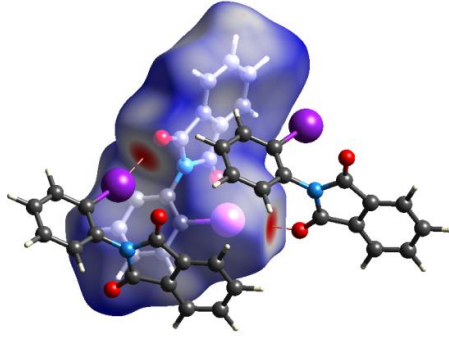
Termodinamik fonksiyonlar entalpi, entropi ve ısı kapasitesi gibi değişkenler olup termodinamiğin çoğu uygulamasında bir ya da daha çok değişken sabit tutulurken diğer değişkenlerin bunlara göre nasıl değiştiği incelenir. Bir moleküler sistemin toplam enerjisi öteleme, elektronik, dönme ve titreşim enerjilerinin toplamıdır. Molekülün toplam enerjisini elde etmek için; ısı sığası, entropi, sıfır nokta enerjisi, elektronik ve termal serbest enerjiler toplamı, sıfır nokta titreşim enerjisi ve düzeltmesi, enerjide, entalpide ve Gibbs serbest enerjisi için termal düzeltme, dönme sabitleri ve dönme sıcaklıkları gibi enerji değerlerinin katkısı termodinamik fonksiyonlardan elde edilmiştir. Moleküle ait bu fonksiyonlar 298.15 K sıcaklıkta, 1 atm basınç ve gaz fazında belirlenerek Tablo 5’de tüm bileşenleri ile birlikte verilmiştir.

Tablo 5. Moleküle ait hesaplanan termodinamik değişkenler ve bileşenleri.

<i>B3LYP</i>	<i>6-311G(d,p)</i>
<i>Termal, E (cal/mol K)</i>	
<i>Elektronik</i>	0.000
<i>Öteleme</i>	0.889
<i>Dönme</i>	0.889
<i>Titreşim</i>	123.584
<i>Toplam</i>	125.361
<i>Isı kapasitesi, Cv (cal/mol K)</i>	
<i>Elektronik</i>	0.000
<i>Öteleme</i>	2.981
<i>Dönme</i>	2.981
<i>Titreşim</i>	47.984

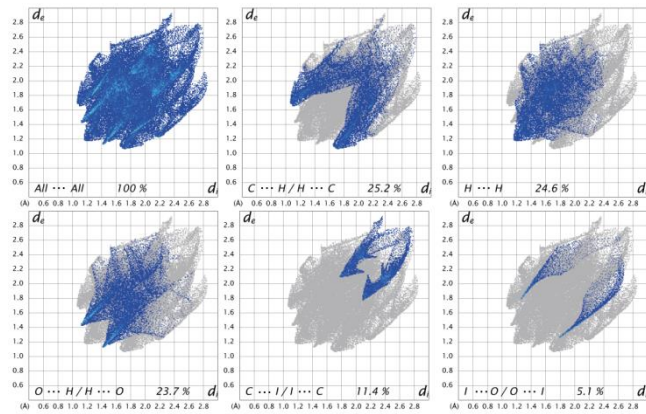
G. Hirshfeld Yüzey Analizi

Molekülün Hirshfeld Yüzey Analizi ve iki boyutlu parmak izi haritası Crystal Explorer 3.0 programı ile gerçekleştirildi [22]. Hirshfeld yüzey analizi moleküller arası etkileşimleri araştırmak için sık şekilde kullanılmaktadır [23,24] ve bunu Van der Waals mesafelerini görselleştirerek yapar. Diğer taraftan molekülde bulunan atomların birbirleri ile olan etkileşimlerini de 2D parmak izi analizi ile belirlemektedir. Hirshfeld yüzey analizi mavi ve kırmızı alanlar içermektedir ve bu alanların mavi ile gösterilenleri van der Waals yarıçapından daha büyük, kırmızı ile gösterilenleri ise van der Waals yarıçapına yakın olan kısımları ifade etmektedir. Molekül için d_{norm} -0.257 ile 1.258 aralığındadır. Hirshfeld yüzey analizinde molekülün O2 atomunun çevresinin moleküller arası hidrojen bağı için aktif bir bölge olduğu görülebilmektedir. X-ışını kırınımı verilerinden bu bölgede moleküller arası $H \cdots O_2$ bağı olduğu rapor edilmiştir [1]. Molekülün Hirshfeld Yüzey analizi ve molekülün komşu moleküller ile moleküller arası $H \cdots O_2$ etkileşimleri ile Şekil 5’de verilmiştir.



Şekil 5. Molekülün Hirshfeld Yüzeyi

Hirshfeld yüzeyine en fazla katkıyı sunan bazı etkileşimlere ait 2D parmak izi haritaları Şekil 6'da görülmektedir. O...H / H...O etkileşimleri iki sivri uç şeklinde kendini göstermektedir. Bu etkileşim Hirshfeld yüzeyine % 23.7 katkı sunarken, kristalin sahip olduğu moleküller arası I...O etkileşiminin Hirshfeld yüzeyine katkısı % 5.1 dir. 2D parmak izi haritasının sol üst kısmında ve sağ alt kısmında bulunan karakteristik kanatlar C—H... π etkileşimlerini temsil eder [25,26]. C...H / H...C etkileşimlerinin Hirshfeld Yüzeyine katkısı % 25.2 dir. Ayrıca molekülde Hirshfeld yüzeyine katkı sunan tüm etkileşimler ve oranları Tablo 6'da listelenmiştir.



Şekil 6. Molekülün bazı moleküller arası etkileşimlerine ait iki boyutlu parmak izi haritaları.

Tablo 6. Hirshfeld yüzeyine katkısı olan etkileşimler

C...C	C...H	C...I	C...O	H...H	I...H	N...H	O...H	I...I	I...O
2.0	25.2	11.4	1.1	26.4	6.4	0.2	23.7	0.2	5.1

IV. SONUÇ VE YORUM

Bu çalışmada 2-(2-iyodofenil)isoindolin-1,3-dion, C₁₄H₈INO₂ bileşiğinin kuantum kimyasal hesaplamalar ile YFK yöntemiyle hesaplanmış ve elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Optimize moleküle ait elde edilen geometrik parametrelerin x-ışını verilerinden [1] elde edilen verileri desteklediği gözlenmiştir. Elektron yoğunluğunun HOMO'da fenil halkası üzerinde dağıldığı gözlenirken, LUMO'da ise diğer ikili halka üzerine dağıldığı gözlenmektedir. Ek olarak sınır orbitallerinden HOMO ve LUMO enerjileri ve bunlardan türetilen diğer kimyasal nicelikler belirlenerek sonuçlar rapor edilmiştir. Elde edilen

α ve β değerleri molekülün iyi bir optik materyal adayı olduğunu göstermektedir.

Böylelikle moleküle ait yapısal ve elektronik yeni bilgilere ulaşılmış ve gelecekte kullanım alanlarının artırılmasına yönelik olan hedeflerin gerçekleşmesine katkıda bulunulmuştur.

REFERENCES

- [1] G. Demirtaş, N. Dege, A. Alaman Ağar and Orhan Büyükgüngör, 2-(2-Iodophenyl)isoindoline-1,3-dione, Acta Cryst. (2011), E67, o857.
- [2] H. Jelali, L. Monsour, E. Deniau, M. Sauthier and N. Hamdi, An Efficient Synthesis of Phthalimides and Their Biological Activities, Polycyclic Aromatic Compounds, 2020, 1-8.
- [3] Y. Nozawa, M. Ito, K. Sugawara, K. Hanada, and K. Mizoue, "Stachybotrin C and Parvisporin, Novel Neurotogenic Compounds. II. Structure Determination," The Journal of Antibiotics 50, no. 8 (1997): 641-5.
- [4] L. A. Sorbera, P. A. Leeson, J. Silvestre, and J. Castaner, "Drugs Future," Journals on the Web 26 (2001): 651.
- [5] C. Maugeri, M. A. Alisi, C. Apicella, L. Cellai, P. Dragone, E. Fioravanzo, S. Florio, G. Furlotti, G. Mangano, R. Ombrato, et al. "New anti-Viral Drugs for the Treatment of the Common Cold," Bioorganic & Medicinal Chemistry 16, no. 6 (2008): 3091-107.
- [6] X. Z. Zhao, K. Maddali, C. Marchand, Y. Pommier, and T. R. Burke, "Diketoacid-Genre HIV-1 Integrase Inhibitors Containing Enantiomeric Arylamide Functionality," Bioorganic & Medicinal Chemistry 17no. 14 (2009): 5318-24.
- [7] Guertin K. R. (2002) US Patent 6482951 (B2)
- [8] Frisch M. J. et al., Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
- [9] Mulliken, R. S., Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. I. J. Chem. Phys., 23, 1833-1840, 1955.
- [10] Laudise R. A., Ueda R. and Millin J.B. 1975. Crystal Growth and Characterization, North-Holland Publishing Co.
- [11] Brice J. C., Crystal Growth Processes, Halsted Press, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [12] Nalwa H. S. and Miyata S. 1996. Nonlinear Optics of Organic Molecules and Polymers, CRC Press Inc., New York.
- [13] Leite, R. C. C., Porto, S. P. S., and Damen, P. C., 1967. The thermal lens effect as a power-limiting device. Appl. Phys. Lett., 10-100.
- [14] Gambino, R. J., 1990. Bull. Mater. Res. Soc. 15-20.
- [15] Belt, R. F., Gashurov, G. and Liu, Y.S., 1985. Laser Focus 10-110.
- [16] Clark, R. S., 1988. Photonics Spectra 22.
- [17] Zyss, J., 1994. Molecular Non-linear Optics, Academic Press, Boston.
- [18] D. Dajan, J. Huert, V.S. Jayakumar, J. Zaleski, J. Mol. Struct. 785:43, 2006.
- [19] S.Uzun, Z. Demircioğlu, Karadeniz Fen Bilimleri Dergisi, 9(2), 275-288, 2019.
- [20] F. Tekin, Ö. Kalfa, B. Koşar, C. Cüneyt Ersanlı, Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enst. Dergisi, Özel Sayı, 1302-3055.
- [21] G. Özdemir Tari, G. Demirtaş, European Journal of Science and Technology Special Issue 32, pp. 761-769, December 2021.
- [22] D. S. K. Wolff, D. J. Grimwood, J. J. McKinnon, M. J. Turner, J. and M.A. Spackman, CrystalExplorer (Version 3.1), Univ. West. Aust. (2012). <https://doi.org/10.1039/b704980c>.
- [23] Z. Gültekin, Z. Demircioğlu, W. Frey, O. Büyükgüngör, XRD, Spectroscopic characterization (FT-IR, UV-Vis), Hirshfeld surface analysis and chemical activity of (E)-benzyl 2-((2S,3S,4R)-2,3,4-tris(benzyloxy)hex-5-enylidene)hydrazinecarboxylate, J. Mol. Struct. (2018). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.05.076>.
- [24] S. Wu, L. Qi, Y. Ren, H. Ma, 1,2,4-triazole-3-thione Schiff bases compounds: Crystal structure, hirshfeld surface analysis, DFT studies and biological evaluation, J. Mol. Struct. 1219 (2020) 128591. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128591>.
- [25] S.K. Seth, G.C. Maity, T. Kar, Structural elucidation, Hirshfeld surface analysis and quantum mechanical study of para-nitro benzylidene methyl arjunolate, J. Mol. Struct. (2011). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2011.06.003>.
- [26] Y.-H. Luo, B.-W. Sun, Pharmaceutical Co-Crystals of Pyrazinecarboxamide (PZA) with Various Carboxylic Acids: Crystallography, Hirshfeld Surfaces, and Dissolution Study, Cryst. Growth Des. 13 (2013) 2098-2106. <https://doi.org/10.1021/cg400167w>.