

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ
KOORDİNASYON BİRİMİ KOORDİNATÖRLÜĞÜNE

Proje Türü : Bağımsız Araştırma Projesi
Proje No :12B4240003
Proje Yöneticisi :Prof. Dr. Orhan Atakol
Proje Konusu : Azotça Zengin Yeni Enerjik maddelerin Tasarımı, Sentezi ve Termal Analiz Yöntemleriyle İncelenmesi

Yukarıda bilgileri yazılı olan projemin sonuç raporunun e-kütüphanede yayınlanmasını;

İSTİYORUM

İSTEMİYORUM

GEREKÇESİ:

.../.../20..

Proje Yöneticisi
İmza

1946

ANKARA ÜNİVERSİTESİ

**BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJESİ
SONUÇ RAPORU**

**Azotça Zengin Yeni Enerjik maddelerin Tasarımı, Sentezi ve Termal Analiz
Yöntemleriyle İncelenmesi**

Proje Yürütücüsünün İsmi

Prof. Dr. Orhan Atakol

Yardımcı Araştırmacıların İsmi

Prof. Dr. M. Abdülkadir Akay

Yard. Doç. Dr. Hasan Nazır

Doç. Dr. Hakan Dal

Yard. Doç. Dr. Sevi Öz

Elif Gökçinar

Melike Kunduracı

Nurdane Yılmaz

Yard. Doç. Dr. Ümit Ergun

Proje Numarası

12B4240003

Başlama Tarihi

02.01.2012

Bitiş Tarihi

02.07.2014

Rapor Tarihi

12.11.2014

Ankara Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri
Ankara - " 2014"



RAPOR FORMATI**I. Projenin Türkçe ve İngilizce Adı ve Özetleri**

Proje Çalışmasının Adı: Azotça Zengin Yeni Enerjik Maddelerin Tasarımı, Sentezi ve Termal Analiz Yöntemleriyle İncelenmesi

Proje Çalışmasının İngilizce adı: The design, synthesis and the thermal investigation of novel nitrogen rich energetic materials

Proje Çalışmasının Özeti: Planlanan çalışma azotça zengin , nitro, siyano gibi gruplarla donatılmış pirazolil piridin, triazolil piridin gibi organik maddelerin hazırlanması ve daha sonra bu maddelerin azido gruplarının da içeren komplekslerinin hazırlanıp termal analiz yöntemleriyle incelenmesi amacıyla tasarlanmıştır. Azotça zengin enerjik moleküller termal parçalanmaları sırasında N_2 gazı verdiklerinden çevre dostu maddeler veya çevre dostu patlayıcı , çevre dostu propellant (sevk maddesi) olarak bilinmektedirler. Azit iyonunda patlayıcı özellikte olmasına karşın koordinasyon bileşikleri açısından oldukça iyi bir ligand olduğundan azot içeriği fazla olan pirazolil piridin , triazolil piridin gibi ligandlar ile hazırlanacak koordinasyon bileşiklerine azido gruplarının koordinasyonu da sağlanırsa elde edilecek bileşiklerin alternatif enerjik madde olabileceği düşünülerek çalışma planlanmıştır. Bu amaçla nitro pirazol, nitro triazol, nitro piridinler kullanılarak NNN tipinde ligand olan pirazolil piridinler , triazolil piridinler ve 3,5-dinitro salisilaldehitin verdiği Schiff bazları hazırlanması, daha sonra bu maddeler ile azit içeren ortamlarda Mn(II), Ni(II), Cu(II) , Cd(II) gibi geçiş elementleri ile tek çekirdekli ve çok çekirdekli koordinasyon bileşikleri hazırlanması ve bunların alternatif enerjik madde olup olmadıklarının termal analiz yöntemleri olan termogravimetri (TG), Diferensiyel Termal Analiz (DTA) ve Diferensiyel Taramalı Kalorimetri ile incelenmesine yönelik bir çalışma planı başlangıçta önerilmiştir. Daha önce verilen ara raporlarda da belirtildiği gibi başlangıçta öngörülen hedeflerden farklı yönlere kaymalar olmaktadır çünkü deneysel çalışmalarda rastlanan bir zorluk veya açıklanamayan durumlar çalışmayı farklı bir tarafa götürebilmektedir. Bu bağlamda söylenebilir ki bu çalışmada ağırlıklı olarak terazol bileşiklerinin sentezine yönelik bir çalışma ortaya çıkmıştır.

Proje çalışmasının İngilizce özeti: This project has been designed with the aim of determining the energetic properties of some nitro, cyano substituted pyrazolyls, piridines, triazolyl compounds and their azido containing metal complexes using thermal analysis methods. Nitrogen rich energetic materials are known to be environmentally friendly compounds, explosives or propellants due to excretion of N_2 during thermal degradation. As azide compounds are excellent ligands for coordination compounds, although they have explosive characteristics, the materials which are going to be prepared with the aforesaid nitrogen rich ligands should have the tendency to be used as alternative explosives. In doing so nitro pyrazol, nitro triazol and nitro piridines have been used with pyrazolyl piridines , triazolyl pyridines and 3,5-dinitro salicylaldehydes preparation of some Schiff base compounds and their mono-, polynuclear complexes, with the aim of understanding their alternative energetic capability using TG, DTA and DSC as their analysis method. Due to difficulties and unexplainable mishaps during experimental studies deviation from the preliminary aim has been reported in the intermediary report. As a result we can report a

study well defining tetrazole synthesis and its use as alternative energetic materials.

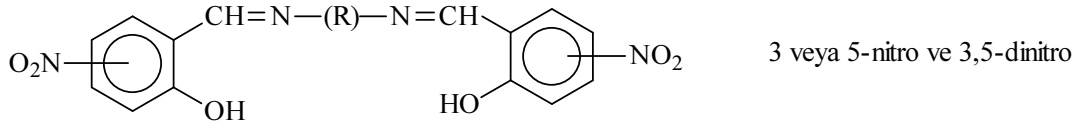
II. Amaç ve Kapsam

Proje metni ilk oluşturulduğu zaman çalışmanın özünde NNN tipinde pirazolil tipi ligandlaral geçiş metallere verdiği azotça zengin komplekslerin hazırlanması temel amaç olarak seçilmişti. Projenin amacı olarak belirtilen metin aşağıdaki gibi verilmişti: Bu çalışma, bu konu nüzlerinde iki amaçla hazırlanmıştır. Birincil olarak nitro, siyano ve azido gruplarını içeren pirazolil tipinde veya Schiff bazı yapısında organik ligandların ve bu ligandların geçiş metallere komplekslerinin hazırlanması ve termal Analiz yöntemleri ile incelenmesi amacı ile tasarlanmıştır. Daha önce sadece nitro veya azido grubu içeren bazı Cu(II) ve Ni(II) kompleksleri çalışma grubumuz tarafından hazırlanmış ve termal özellikleri incelenmiş, bu konuda bazı çalışmalar literatürde rapor edilmiştir [3-6]. Tasarlanan bu çalışmada bir arada hem nitro hem azido grupları içeren Cu(II), Ni(II), Mn(II), Co(II), Zn(II), Cd(II) ve Ag(I) komplekslerinin hazırlanması planlanmıştır. Bunun yanı sıra azot bakımından zengin ve ligand olarak tasarlanmış olan organik maddelerin komplekslerinin yanında HNO₃ ve HClO₄ ile tuzlarının hazırlanması ve bu tuzlarında termal analiz yöntemleriyle incelenmesi tasarlanan çalışmanın ikinci amacıdır. Termal Analiz yöntemlerinden termogravimetri (TG), Diferensiyel Termal Analiz (DTA) ve Diferensiyel taramalı kalorimetri (DSC) kullanılması planlanmıştır. Daha önceki çalışmalarımızda hazırlanan Cu(II) ve Ni(II) kompleksleri kristalin olarak elde edilebilmiş ve TG analizlerinde çok dar bir sıcaklık aralığında moleküllerin tamamen parçalandığı ve aniden % 90'ın üzerinde kütle kaybı olduğu gözlenmiştir[3-6]. Bu çalışmada da benzer sonuçlar beklenmektedir, TG ile termal kütle kayıpları, DSC ile parçalanma tepkimesi sırasında açığa çıkan ısı ölçülecektir. Aynı molekülde hem azido, hem nitro grubunun bulunmasının parçalanma tepkimesindeki ısıyı artıracakını düşünüyoruz. Beklenen durum gerçekleşirse yeni alternatif enerjik maddeler, bir başka deyişle yeni patlayıcılar ortaya çıkabilecektir. Projenin oluşturulmasında da proje hipotezi olarak patlayıcı maddelerin patlama tepkimeleri esnasında azot atomlarından N₂ molekülleri açığa çıktığı varsayılarak bu molekülünde aşırı kararlı olmasından dolayı patlama tepkimesinin entalpisinin dolayısıyla patlama ısısının yükseltileceği düşünülmüştü. Bunun yanı sıra N₂ molekülü çevre dostu bir molekül olduğundan azotça zengin enerjik maddelerin daha çevre dostu daha çok yeşil kimya alanına girdiği düşünülerek bazı enerjik maddeler tasarlanmıştır. Belki çalışmada tam olarak başlangıçta tasarlanan moleküllerin bir kısmı hazırlanmasada bir kısmı hazırlandı ve yine çalışmanın hipotezi doğrultusunda çalışmaların yönü aşağıdaki üç başlıkta verilen tarafa doğru kaymıştır.

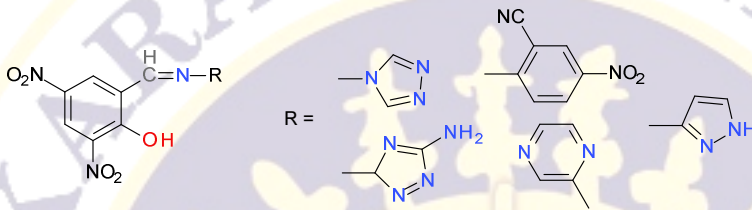
- Nitrolanmış benzaldoksimler hazırlanması ve karakterizasyonu
- Azotça zengin çok halkalı bileşiklerin enerjik tuzlarının hazırlanması
- Substitue tetrazol bileşiklerinin hazırlanması.

III. Materyal ve Yöntem

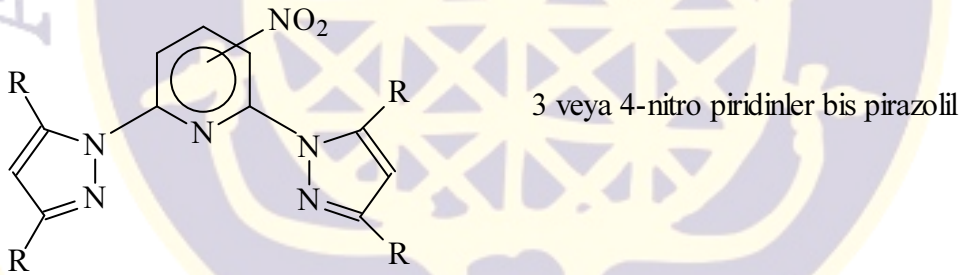
Bu çalışma ilk tasarlandığında aşağıda verilen madde gruplarının sentezi düşünülmüştü.



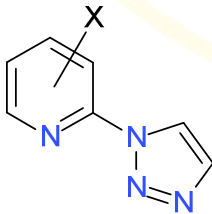
Nitrolanmış salisilaldehit yardımıyla nitrolanmış simetrik Schiff bazları,



Yine nitrolanmış Schiff bazları ile amino htereohalkalı bileşiklerin kondensasyonundan elde edilen Schiff bazları.



Nitrolanmış pirazolil piridinler ve bunların geçiş metali iyonları ile verdikleri kompleksler.



Monopirazolil piridinler.

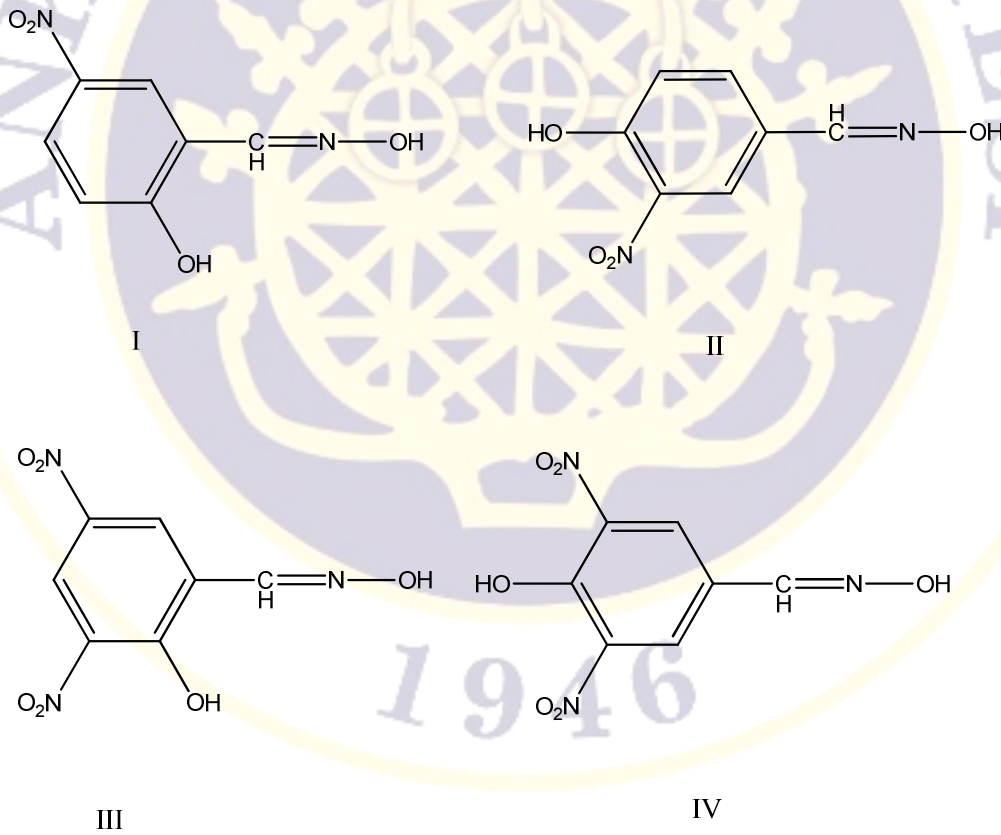
Çalışmada ilk belirtilen nitrolanmış Schiff bazları haricindeki öneriler tamamen olmamakla birlikte gerçekleştirilmiştir. Monopirazolil piridinlerin eldesi ile ilgili çalışmalar halen sürmektedir. Ama bunun yanında amaç kısmında belirtildiği gibi başka

madde grupları hazırlanmış, incelenmiş ve yayınlanmıştır. Bu madde grupları yukarıda belirtildiği gibi , nitrolanmış salisilaldoksimler, tetrazoller ve NNN tipindeki pirazolil piridinlerin pikrat ve perklorat tuzlarının hazırlanmasıdır. Çalışmada yer alan doktora öğrencisinin tez konusunda bu çalışmanın bir parçası içinde yer almaktadır. Hazırlanan maddeler aşağıda bulgular ve sonuçlar kısmında verilmiştir. Tetrazoller tehlikeli madde sınıfına girdiklerinden (5-aminotetrazol monohidrat hariç) ticari alanda yer almamaktadırlar bu sebepten dolayı çalışmanın büyük bir bölümü tetrazollerin sentezi ile geçmiştir.

IV. Analiz ve Bulgular

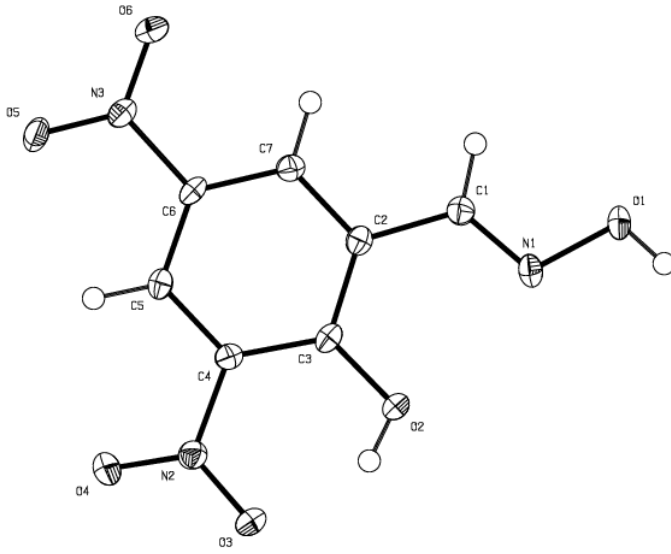
Materyal ve yöntem kısmında anlatıldığı gibi bu çalışma sonucunda hazırlanan ve karakterize edilen enerjik malzemeler aşağıda sırasıyla verilmiştir.

1- Enerjik benzaldoksimler. Bu madde grubunda dört madde sentezlenmiş bunlardan bazıları uygun kristal olarak elde edildiklerinden X-ışınları difraksiyonu çalışmaları ile moleküler modelleri elde edilmiş ve termal analiz yöntemleriyle karakterize edilmişlerdir. Bu maddeler üzerinde kuramsal hesaplamalarda yapılmış ve bulunan sonuçlar deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış ve uyum içinde oldukları gözlenmiştir.

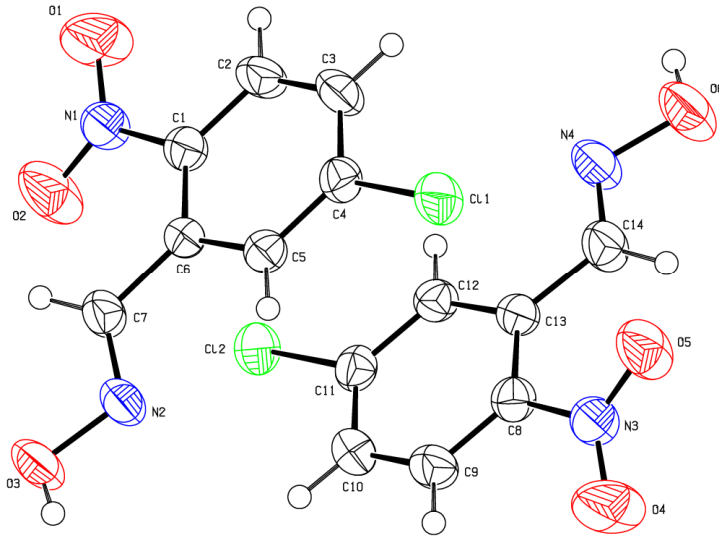


Şekil 1. Hazırlanan nitrolanmış benzaldoksimlerin açık formülleri.

Bu maddelerden X-ışını difraksiyonu ile moleküler yapıları aydınlatılanlarda aşağıda verilmiştir.



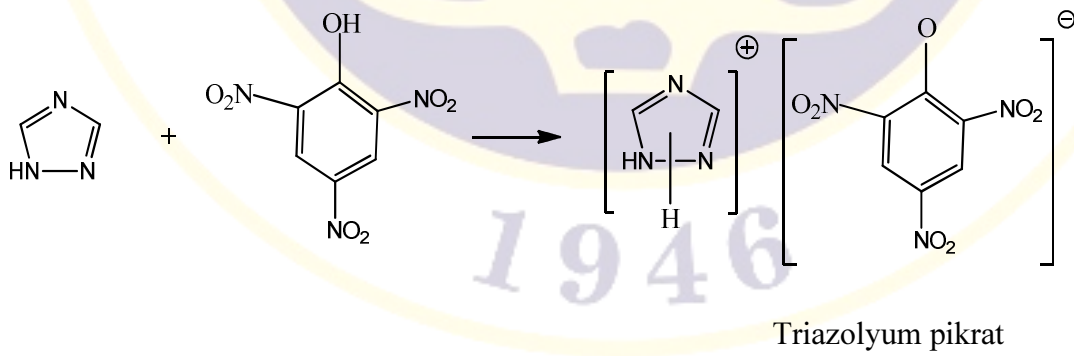
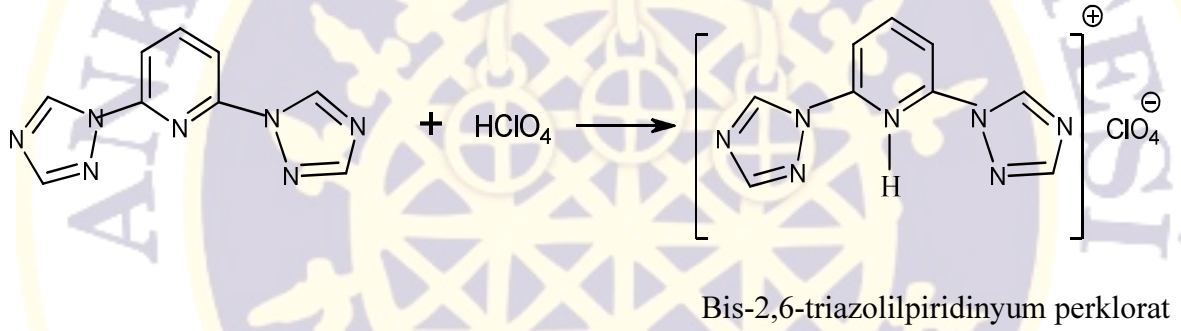
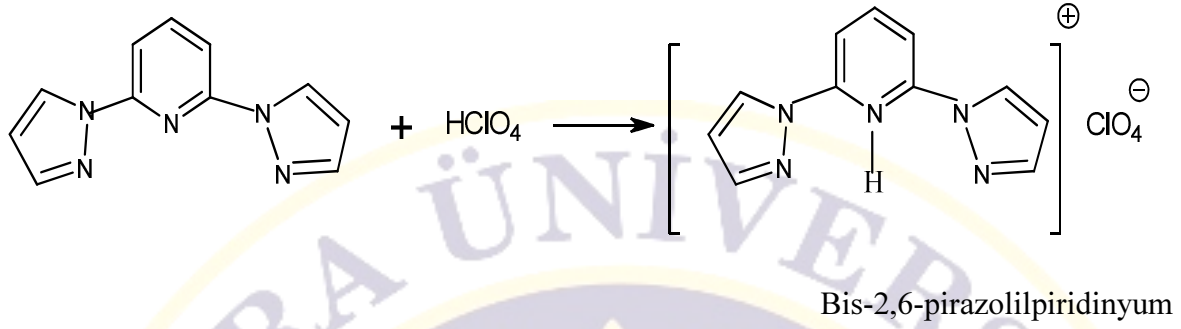
Şekil 2. 3,5-dinitrosalicylaldehyde'in ortep programı ile çizilmiş moleküler modeli.

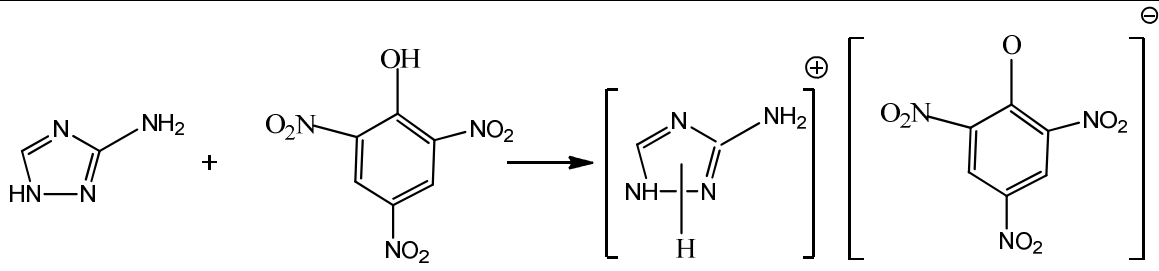


Şekil 3. 2-nitro-4-klorobenzaldehyde'in ortep programı ile çizilmiş moleküler modeli. Bu madde hedef ürün olmamakla birlikte ara ürün olarak hedeflenmiştir.

Bu maddelerin termal yöntemlerle (TG ve DTA) ile incelenmeleri 1. Gelişme raporunda verilmiş olup bu çalışmalar 2013 yılında yayınlanmıştır.

2- Yine 1. Gelişme raporunda verilen ve özellikle NNN tipindeki pirazolilpiridinlerin perklorat ve pikrat tuzları bu çalışma kapsamı içinde çalışılmıştır. Bu çalışmayı yapan araştırmacı aynı zamanda bu proje kapsamındaki bursiyer öğrenci olup doktorasını 2013 Kasımında tamamlamıştır. Hazırlanan ve karakterize edilen azotça zengin enerjik tuzların formülleri aşağıda belirtilmiştir.





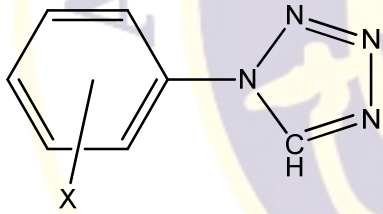
5-aminotriazolium pikrat

Şekil 4. Bu proje kapsamında sentezi başarılabilen tuz yapısındaki enerjik maddelerin formülleri.

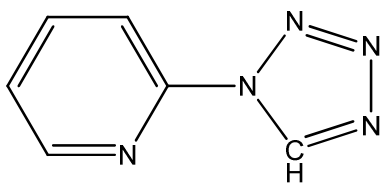
Bu tuzlar FTIR, ¹H-NMR, TG ve DTA ile karakterize edilmişlerdir. Termal karakterizasyonları

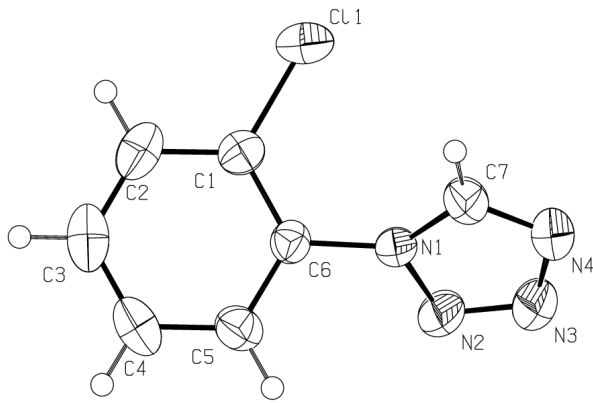
1. Gelişme raporunda verildiğinden bu sonuç raporuna eklenmemişlerdir. Maalesef henüz bu bulgular yayınlanmamış durumdadır.

3. Bu proje kapsamında son olarak çalışılan konu tetrazol bileşiklerinin sentezi olup, çalışmada en çok vakit bu maddeler için harcanmıştır. Hazırlanan tetrazollerin adları ve bazılarının moleküler modelleri aşağıda verilmiştir. Çalışmada çok sayıda literatürden yola çıkılarak 5 tanesi orijinal 8 adet tetrazol bileşiği sentezlenmiş ve karakterize edilmiştir. Hazırlanan tetrazol bileşiklerinin formülleri aşağıda verilmiştir.

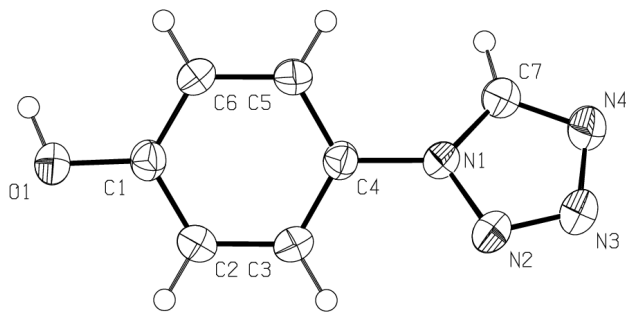


- | | |
|-----------------------|------------|
| X: H | I |
| X: 2-Cl | II |
| X: 4-Cl | III |
| X: 4-OH | IV |
| X: 4-OCH ₃ | V |
| X: 4-NO ₂ | VI |

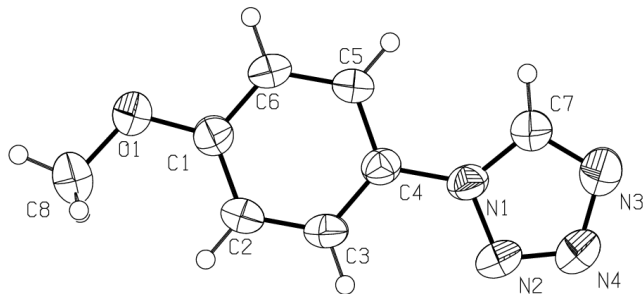




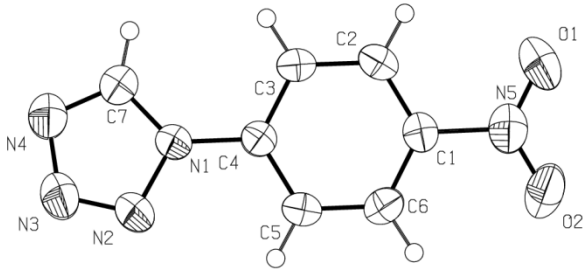
2-klorofenil-1Htetrazol



4-Hidroksifenil-1H tetrazol



4-metoksifenil-1H tetrazol



4-nitrofenil-1H tetrazol

Şekil 6. Hazırlanan tetrazol bileşiklerinden I,II,IV,V ve VI numaralı olan tetrazollerin moleküler modelleri.

Tetrazollerle ilgili çalışmada yine Gaussian 09 programı yardımıyla teorik hesaplamalar yapılmış olup özellikle bu moleküllerin oluşum entalpileri hesaplanmış daha sonra olası termal bozunma (patlama) tepkimeleri göz önüne alınarak teorik patlama entalpisi Hess yasası uyarınca hesaplanmıştır. Daha sonra DSC cihazı yardımıyla bu cihazın sonuçları teorik verilerle karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak tetrazol bileşiklerinde rezonans kararlılığı varsa teorik patlama enerjisi ile deneysel bulunan enerji değerlerinin uyduğu ancak rezonans kararlılığı yoksa patlamanın gelişigüzel olduğu sonucuna varılmıştır.

Bu Çalışmadan destek alarak projeye atıf yapan SCI ve SCI-EXP. Kapsamındaki bilimsel süreli yayınlarda basılan ve kabul edilen makale sayısı 7' dir. Bu yayınların listesi aşağıda verilmiştir.

1- Melike Kunduracı , Elif Özkaramete , Nurdane Yılmaz , Sevi Öz, Ingrid Svoboda ,E. Kübra İnal, Orhan Atakol,
Some energetic Benzaldoximes, **J. Therm. Anal. Cal.**,112 (2013) 1587-1599.

Bu makale çalışmanın ilk dönemine aittir, herhangi bir öğrencinin tez konusunu kapsamamaktadır, enerjik benzaldoksimlerle yapılan çalışmanın sonuçlarını içermektedir.

2- Sevi Öz, Ján Titiš, Hasan Nazır, Orhan Atakol, Roman Boča, Ingrid Svoboda , Hartmut Fuess, Synthesis, Structure and magnetic properties of Ni(II)-Co(II) heterodinuclear Complexes with ONNO type schiff Bases as Ligands, **Polyhedron**, 59 (2013) 1-7.

Bu makale projeye atıf yapmaktadır ancak proje konusu ile tam ilgili değildir fakat bu makalenin oluşturulmasında proje desteği alınmıştır.

3- Elif Özkaramete, Nilgün Şenocak, Kübra E. Inal, Sevi Öz, Ingrid Svoboda, and Orhan Atakol, Experimental and Computational Studies on the Thermal Degradation of Nitroazidobenzenes, **Propellants, Explosives and Pyrotechnics**, 38 (2013) 113-119.

Bu çalışma çalışmanın teorik kısmı ile deneysel kısmının karşılaştırmalarını ortaya koymaktadır.

4- S. Öz, Ü. Ergun, M. Yakut, I. Svoboda, A. Atakol, E. Kübra İnal, N. Yılmaz, and O. Atakol, Synthesis, Crystal Structure, Chromatographic Separation, and Thermogravimetric Investigation of a ONNO Type Asymmetric Schiff base and its Trinuclear Complexes, **Russ. J. Coord. Chem.**, 40 (2014) 571-582.

Bu makalede tam olarak proje konusu ile ilintili olmamakla birlikte proje desteğinden yararlandığı için projeye atıf yapılmıştır.

5- N. Şen, E. Özkaramete, N. Yılmaz, S. Öz, I. Svoboda, M.A.Akay, O. Atakol, Thermal decomposition of dinitro-chloro-azidobenzenes, **J. Energetic Materials**, 32 (2014) 1-15.

Bu makalede proje konusu ile tamamen ilintili bir çalışmayı içermektedir.

6- S. Öz, N. Acar, I. Svoboda, J. Titis, R. Boca, O. Atakol, Synthesis, Structure, magnetic properties of homotrimeric Ni(II) complexes with asymmetric Schiff base ligands, **Inorg. Chim. Acta**, 421 (2014) 531-537.

Bu makalede tam olarak proje konusu ile ilintili olmamakla birlikte proje desteğinden yararlandığı için projeye atıf yapılmıştır.

7- N. Yılmaz, S. Öz, A. Atakol, I. Svoboda, B. Aydın, M.A. Akay, O. Atakol, Synthesis, Structure and Thermal decomposition of some phenyltetrazoles, **J. Therm. Anal. Cal.**, kabul edildi basım yılı 2015. JTAC-D-14-00613R2

V. Sonuç ve Öneriler

Gelişme raporlarında ve yukarıdaki metinlerde anlatıldığı gibi çalışma başlangıçta tasarlananlar dışında da çalışmaları içine almıştır. Başlangıçta tasarlanan nitrolanmış simetrik Schiff bazları bu proje kapsamında çalışılmamıştır, çünkü bu Schiff bazları hazırlanmış ancak ilk termal karakterizasyonlarında bu maddelerin enerjik maddeler sınıfına girmediği görülmüş ve tasarlanan bu kısım çalışmadan düşünce olarak çıkarılmıştır. Ama çalışmada yine eksik kalan kısımlar vardır, bu kısımlar nitrolanmış piridin ve pirazolillerle hazırlanacak NNN tipindeki enerjik maddeler ve sadece NN tipinde pirazolil piridinlerin hazırlanmasıdır. Onun dışındaki çalışmalarda görüldüğü gibi toplam bu projeye atıf yapan 7 adet makale yayınlanmıştır. Çalışma kapsamında iki öğrenci doktora çalışması yapmaktadır, bir tanesi doktorasını tamamlamış (Nurdane Yılmaz) diğerinin doktorası ise yaklaşık 6 ay içinde sonlanacak durumdadır (Melike Kunduracı). Bu çalışmada elde edilen en önemli sonuç teorik ve deneysel patlama enerjilerinin ayrı ayrı hesaplanarak karşılaştırılmasıdır. Bu konuda Gaussian 09 paket programı içindeki algoritmaların son derece başarılı olduklarını belirtmeye gerek yoktur ama teorik ve deneysel patlama enerjilerinin yaklaşık aynı çıkması şaşırtıcıdır ve böyle bir karşılaştırma literatürde yoktur. Çalışmadan elde edilen ikinci önemli sonuç ise enerjik madde sentezinde patlama şiddetini artırması beklenen grupların molekül yapısına göre tam ters etki yapmasıdır. Azit grupları patlama şiddetini artırıcı gruplar olarak bilinmesine rağmen zaten patlama özelliği olan bir moleküle eklendiğinde patlamanın enerjisini düşürdüğü ve patlama şiddetini azalttığı hem teorik hem deneysel olarak bu çalışmada kanıtlanmıştır.

VI. Geleceğe İlişkin Öngörülen Katkıları

Yukarıdaki metinlerde belirtildiği gibi , çalışmanın eksik kalan kısımları vardır. Bu kısımların gerçekleştirilmesi hedeflerden bir tanesidir. Özellikle nitrolanmış piridin ve pirazol bileşiklerini birbirine bağlayarak yeni enerjik maddelerin hazırlanması son derece uygun , laboratuarda çalışılabilecek bir lisansüstü tez konusudur. Proje kapsamında çalışan öğrencilerden iki tanesi doktorasını tamamlamış (Elif Gökçınar ve Nurdane Yılmaz), diğeri ise iş bulduğundan İstanbul'a yerleşmiş durumdadır. Bu sebepten dolayı bu konuda çalışmaya istekli lisansüstü öğrenciler olursa belirtilen konunun tez konusu olarak verilmesi proje yöneticisi tarafından planlanmıştır. Bu proje kapsamında temin edilen kimyasal maddeler bu konuyu çalışmak için yeterlidir.

VII. Sağlanan Altyapı Olanakları ile Varsa Gerçekleştirilen Projeler

Bu proje kapsamında herhangi bir büyük cihaz, ekipman satın alınmamıştır, sadece mevcut altyapı cihazlarının bakımı yapılmış ve gerekli kimyasal maddeler temin edilmiştir. Belirtildiği gibi temin edilen kimyasal maddeler ile önümüzdeki günlerde bir lisansüstü tez konusunun daha çalışılması mümkün olacaktır.

VIII. Sağlanan Altyapı Olanaklarının Varsa Bilim/Hizmet ve Eğitim Alanlarındaki Katkıları

Bulgular kısmında belirtildiği gibi çalışmadan SCI kapsamında yayınlanan dergilerde 7 adet bilimsel makale üretilmiştir. Makalelerin hepsi Ankara Üniversitesi adreslidir. Bunun yanı sıra iki lisansüstü öğrenci doktorasını tamamlamış, bir tanesinde tamamlamak üzeredir. Zaten bu proje tasarlandığında hemen hemen hedeflenen sonuçlarda bu düzeydeydi. Herhangi bir öğrencinin tezine yönelik olarak çalışma tasarlanmamış, genel olarak mevcut tüm öğrencilere yarar sağlayacak ve Ankara Üniversitesinin adını duyurmaya yönelik bir çalışma olarak planlanmış olan bu projenin başarılı olarak sonlandığını zannediyoruz.

IX. Kaynaklar

X. Ekler

a. Mali Bilanço ve Açıklamaları

Proje başlangıcında verilen bütçe 90000.00 TL olarak verilmişti. Bu bütçe içinde yaklaşık 18 aylık doktora öğrencisi desteği bulunmakta olup, bütçe tutarının yaklaşık 40000.00 TL kadar kısmını bu destek oluşturmaktaydı. Geri kalan kısım kimyasal madde satın alınması, kromatografi cihazlarına sarf malzemesi temini, termal analiz cihazlarının yıpranan parçalarının yenilenmesi ve bakımı ve bu cihazlara Helyum, azot ,oksijen gazlarının temini ile ilgili olarak harcanması düşünülmüştü. Ancak zaman içinde mevcut ödeneğin bir kısmı 10000.00 TL kadar , harcanmamış ve BAP yönetimi tarafından değerlendirilmiştir. Bütçenin detayları faturalar tarafımıza iletilmediği için elimizde mevcut değildir ama BAP yönetiminde detaylar mevcuttur.

b. Makine ve Teçhizatın Konumu ve İlerideki Kullanımına Dair Açıklamalar

Belirtildiği gibi bu proje kapsamında bir demirbaş satın alınmamış sadece mevcut cihazlara sarf malzemesi temin edilmiştir. Mevcut makine ve ekipman ile önümüzdeki zamanda benzer çalışmaların sürdürülmesi planlanmaktadır.

c. Teknik ve Bilimsel Ayrıntılar

d. Sunumlar (bildiriler ve teknik raporlar)

Proje kapsamındaki çalışmalar 3 uluslar arası kongrede sunulmuştur. Bu kongrelerin dökümü aşağıdadır.

4th EuChemMS Chemistry Congress, 26-30.08.2012 , Prague, Çek. Cumh.

. A.Atakol, M. Kunduracı, E. Özkaramete, N. Yılmaz, O. Atakol, M.A. Akay, The Investigations of energetic benzaldoximes with thermoanalytic and computational methods, o-264, A.Atakol tarafından sözel olarak sunulmuştur.

. E.K. İnal, G. Denizli, Ü. Ergun, M.A.Akay, O.Atakol, E. Ergun, The Effect of o-substituenton Mass Spectrum of Schiff bases prepared from salicylaldehyde, p-0539, E.K. İnal tarafından poster olarak sunuldu.

. S.Öz, E. Özkaramete, E.K. İnal, I. Svoboda, O.Atakol, M.A. Akay, Experimental and Computational studies on the thermal decomposition of nitroazidobenzaldoximes., p-0561, S.Öz tarafından poster olarak sunuldu.

. N.Şenocak, S. Öz, N. Yılmaz, I.Svoboda, O.Atakol, The Investigation of thermal decomposition of nitro-chloro-azidobenzenes with thermoanalytical and computational methods, p-0575, N.Şenocak tarafından poster olarak sunuldu.

6th Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry, 10-14.09.2013 , Trabzon, Türkiye

. N.Yılmaz, A.Atakol, M. Kunduracı, M.A. Akay, O. Atakol, Thermoanalytical Investigation of new phenyl tetrazoles, p-257, N. Yılmaz tarafından poster olarak sunuldu.

9th Aegean Analytical Vhemistry Days, 29.09-03.10.2014, Chios, Yunanistan.

. M.Kunduracı Atakol, A. Atakol, A.Özler Yiğiter, H. Nazır, E. Özkaramete, O.Atakol, The Investigations of Energetic Materials prepared from diamines and picrylchkoride by liquid chromatography and thermal methods, P4-01, M.Kunduracı tarafından poster olarak sunuldu.

. E.K. İnal, O.Atakol, N. Yılmaz, M. Yazıcıoğlu, M.A. Akay, The Investigations of mass fragments formed via electron impact ionizationfrom polynuclear Ni(II) and Cu(II) complexes, P02-38, M.A. Akay tarafından poster olarak sunuldu.

. A.Özler Yiğiter, M.Kunduracı Atakol, A. Atakol, M.A.Akay, E.K. İnal ,O. Atakol, The Investigations of nitrogen rich hetero ringedenergetic materials having picryl group by liquid chromatography and thermal methods, P04-03

e. Yayınlar (hakemli bilimsel dergiler) ve tezler

Bu proje çalışması kapsamında üretilmiş olan SCI kapsamındaki dergilerde yayınlanan uluslar arası 7 bilimsel makale yukarıda verilmiştir. Bunun dışında proje personeli arasında bulunan iki doktora öğrencisi (Nurdane Yılmaz ve Elif Gökçınar) bu proje desteğinden yararlanarak doktoralarını tamamlamış, proje personeli arasından bir öğrenci halen doktorasına devam etmektedir (Melike Kunduracı). Ayrıca proje personeli arasında olmayan bir doktora öğrenciside (Aynur Özler Yiğiter) bu proje olanaklarından yararlanarak doktorasını sürdürmektedir.

NOT: Verilen sonuç raporu bir (1) nüsha olarak ciltsiz şekilde verilecek, sonuç raporu Komisyon onayından sonra ciltlenerek bir kopyasının yer aldığı CD ile birlikte sunulacaktır. Sonuç raporunda proje sonuçlarını içeren, ISI' nın SCI veya SSCI veya AHCI dizinleri kapsamında ve diğer uluslararası dizinlerce taranan hakemli dergilerde yayınlanmış makaleler, III. Materyal ve Yöntem ve IV. Analiz ve Bulgular bölümleri yerine kabul edilir.





