

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TOPOLOJİK İNDİSLERLE POLİMETAKRİLAT VE POLİAKRİLATLARIN
CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRLERİNİN HESAPLANMASI



YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYAGER MELİKE TAGUDAR

İSTANBUL-1993

TOPOLOJİK İNDİSLERLE POLİMETAKRİLAT VE POLİAKRİLATLARIN
CAMSİ-GEÇİŞ TEMPERATÜRLERİNİN HESAPLANMASI



.....

.....

.....

JÜRİ ÜYELERİ

İÇİNDEKİLER

Sayfa

TEŞEKKÜR

ÖZET

ABSTRACT

I. BÖLÜM: GİRİŞ	1
II. BÖLÜM : GRAFİK TEORİSİ	4
2.1. GRAFİK TEORİSİNİN TEMELİ	4
2.2. TOPOLOJİK İNDİSLERİN KİMYADAKİ YERİ	4
2.3. GRAFİK TEORİSİNİN TEMEL TERİM VE KAVRAMLARI	5
2.3.1. Grafik	5
2.3.2. Grafik Çeşitleri	6
2.3.2.1. Zincir Grafik	6
2.3.2.2. Dallanmış (ağaç) Grafik	6
2.3.2.3. Çevrimsel Grafik	7
2.3.2.4. Tam Grafik	7
2.3.2.5. Yıldız Grafik	8
2.3.2.6. Bağlı Olmayan Grafik	8
2.3.2.7. Hidrojensiz Grafik	8
2.3.3. Valens	9
2.3.4. Kenar Sırası	9
2.4. TOPOLOJİK MATRİS	10
2.5. KARAKTERİSTİK POLİNOM	11
2.6. ÖZDEĞER SPEKTRUMU	11
2.7. TOPOLOJİK İNDİSLER	12
2.7.1. Wiener İndisi	12
2.7.2. Altenburg Polinomu	13
2.7.3. Gordon İndisi	13
2.7.4. Hosoya İndisi	14
2.7.5. Smolenski İndisi	14
2.7.6. CR-İndisi	16
2.7.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	16
2.7.8. Randic (X^1) İndisi	16

III. BÖLÜM: POLİMERLERİN CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRÜNÜN	
TANIMI	18
3.1. VOLUMETRİK ÖZELLİKLER	19
3.2. TERMODİNAMİK ÖZELLİKLER	20
3.2.1. Spesifik Isı Kapasitesi	20
3.2.2. Entalpi	21
3.2.3. Entropi	22
3.2.4. İç Basınç	22
3.3. MEKANİK ÖZELLİKLER	23
3.4. ELEKTROMAGNETİK ÖZELLİKLER	25
3.5. GAMSİ-GEÇİŞ TEMPERATÜRÜNE ETKİYEN	
PARAMETRELER	26
3.5.1. Zincir Sertliği	27
3.5.2. İç Seyreltici	27
3.5.3. Moleküller Arası Kuvvetler	28
3.5.4. Basıncın Etkisi	29
3.5.5. Seyreltici Konsantrasyonu	31
3.5.6. Moleküler Ağırlık	31
3.5.7. Kopolimer Bileşimi	32
3.5.8. Çapraz Bağlanma	33
3.5.9. Hız veya Frekans Etkileri	33
3.5.10. Baskının Etkisi	34
IV. BÖLÜM : İNDİS HESAPLARI	36
4.1. CR-İNDİSİNİN HESAPLANMASI	36
4.2. KİMYASAL GRAFİKLERİN ÇİZİLMESİ	36
4.3. TOPOLOJİK MATRİSLERİN ELDE EDİLMESİ	38
4.4. KARAKTERİSTİK POLİNOMUN ELDE EDİLiŞİ	38
4.4.1. Bocher Formülü	39
4.5. CR-İNDİSİNİN BULUNMASI	40
4.6. ÖRNEK HESAPLAMA	40
4.6.1. Kimyasal Grafiğin Çizilmesi	40
4.6.2. Topolojik Matris	41
4.6.3. Karakteristik Polinomun Elde edilişi	45
4.6.4. CR-İndisinin Hesaplanması	46

4.7. 0'NCI (X^0) MERTEBE İNDİSİNİN HESABI	47
4.8. ÖRNEK HESAPLAMA	47
4.8.1. Kimyasal Grafiğin Çizilmesi	47
4.8.2. 0'nci (X^0) Mertebe İndisinin Matematiksel Hesabı	48
4.9. RANDİC (X^1) İNDİSİNİN HESABI	49
4.10.ÖRNEK HESAPLAMA	49
4.10.1. Kimyasal Grafiğin Çizilmesi	49
4.10.2. Randic (X^1) İndisinin Matematiksel Hesabı	50

V. BÖLÜM : POLİMETAKRİLAT VE POLİAKRİLATLARIN

CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRLERİNİN HESAPLANMASI	51
5.1. POLİMETİL METAKRİLAT	51
5.1.1. Yapısal Formül	51
5.1.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	52
5.1.3. Topolojik Matris	52
5.1.4. Karakteristik Polinom	52
5.1.5. Polinomun Kökleri	53
5.1.6. CR-İndisi	53
5.1.7. 0'nci (X^0) Mertebe İndisi	53
5.1.8. Randic (X^1) İndisi	53
5.2. POLİETİL METAKRİLAT	54
5.2.1. Yapısal Formül	54
5.2.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	54
5.2.3. Topolojik Matris	54
5.2.4. Karakteristik Polinom	55
5.2.5. Polinomun Kökleri	55
5.2.6. CR-İndisi	55
5.2.7. 0'nci (X^0) Mertebe İndisi	55
5.2.8. Randic (X^1) İndisi	56
5.3. POLİ N-PROPİL METAKRİLAT	56
5.3.1. Yapısal Formül	56
5.3.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	56
5.3.3. Topolojik Matris	57

	<u>Sayfa</u>
5.3.4. Karakteristik Polinom	57
5.3.5. Polinomun Kökleri	57
5.3.6. CR-İndisi	58
5.3.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	58
5.3.8. Randic (X^1) İndisi	58
5.4. POLİ 2-PROPİL METAKRİLAT	58
5.4.1. Yapısal Formül	58
5.4.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	59
5.4.3. Topolojik Matris	59
5.4.4. Karakteristik Polinom	60
5.4.5. Polinomun Kökleri	60
5.4.6. CR-İndisi	60
5.4.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	60
5.4.8. Randic (X^1) İndisi	61
5.5. POLİ N-BUTİL METAKRİLAT	61
5.5.1. Yapısal Formül	61
5.5.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	61
5.5.3. Topolojik Matris	62
5.5.4. Karakteristik Polinom	62
5.5.5. Polinomun Kökleri	62
5.5.6. CR-İndisi	63
5.5.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	63
5.5.8. Randic (X^1) İndisi	63
5.6. POLİ SEKONDER-BUTİL METAKRİLAT	64
5.6.1. Yapısal Formül	64
5.6.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	64
5.6.3. Topolojik Matris	64
5.6.4. Karakteristik Polinom	65
5.6.5. Polinomun Kökleri	65
5.6.6. CR-İndisi	65
5.6.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	65
5.6.8. Randic (X^1) İndisi	66
5.7. POLİ İZO-BUTİL METAKRİLAT	66
5.7.1. Yapısal Formül	66
5.7.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	66
5.7.3. Topolojik Matris	67

5.7.4. Karakteristik Polinom	67
5.7.5. Polinomun Kökleri	68
5.7.6. CR-İndisi	68
5.7.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	68
5.7.8. Randic (X^1) İndisi	69
5.8. POLİ TERSİYER-BUTİL METAKRİLAT	69
5.8.1. Yapısal Formül	69
5.8.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	69
5.8.3. Topolojik Matris	70
5.8.4. Karakteristik Polinom	70
5.8.5. Polinomun Kökleri	70
5.8.6. CR-İndisi	71
5.8.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	71
5.8.8. Randic (X^1) İndisi	71
5.9. POLİ 2-ETİL-BUTİL METAKRİLAT	72
5.9.1. Yapısal Formül	72
5.9.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	72
5.9.3. Topolojik Matris	73
5.9.4. Karakteristik Polinom	73
5.9.5. Polinomun Kökleri	74
5.9.6. CR-İndisi	74
5.9.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	74
5.9.8. Randic (X^1) İndisi	75
5.10. POLİ 3,3-DİMETİL-BUTİL METAKRİLAT	75
5.10.1. Yapısal Formül	75
5.10.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	75
5.10.3. Topolojik Matris	76
5.10.4. Karakteristik Polinom	76
5.10.5. Polinomun Kökleri	77
5.10.6. CR-İndisi	77
5.10.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	77
5.10.8. Randic (X^1) İndisi	78
5.11. POLİ 3,3-DİMETİL-2-BUTİL METAKRİLAT	78
5.11.1. Yapısal Formül	78
5.11.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	79

5.11.3. Topolojik Matris	79
5.11.4. Karakteristik Polinom	80
5.11.5. Polinomun Kökleri	80
5.11.6. CR-İndisi	80
5.11.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	81
5.11.8. Randic (X^1) İndisi	81
5.12. POLİ N-PENTİL METAKRİLAT	81
5.12.1 Yapısal Formül	81
5.12.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	82
5.12.3. Topolojik Matris	82
5.12.4. Karakteristik Polinom	83
5.12.5. Polinomun Kökleri	83
5.12.6. CR-İndisi	83
5.12.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	84
5.12.8. Randic (X^1) İndisi	84
5.13. POLİ N-HEKZİL METAKRİLAT	84
5.13.1. Yapısal Formül	84
5.13.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	85
5.13.3. Topolojik Matris	85
5.13.4. Karakteristik Polinom	86
5.13.5. Polinomun Kökleri	86
5.13.6. CR-İndisi	86
5.13.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	87
5.13.8. Randic (X^1) İndisi	87
5.14. POLİ 2-ETİL-HEKZİL METAKRİLAT	87
5.14.1. Yapısal Formül	87
5.14.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	88
5.14.3. Topolojik Matris	88
5.14.4. Karakteristik Polinom	89
5.14.5. Polinomun Kökleri	89
5.14.6. CR-İndisi	89
5.14.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	90
5.14.8. Randic (X^1) İndisi	90
5.15. POLİ N-OKTİL METAKRİLAT	91
5.15.1 Yapısal Formül	91

5.15.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	91
5.15.3. Topolojik Matris	92
5.15.4. Karakteristik Polinom	93
5.15.5. Polinomun Kökleri	93
5.15.6. CR-İndisi	93
5.15.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	94
5.15.8. Randic (X^1) İndisi	94
5.16. POLİ DESİL METAKRİLAT	95
5.16.1 Yapısal Formül	95
5.16.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	95
5.16.3. Topolojik Matris	96
5.16.4. Karakteristik Polinom	97
5.16.5. Polinomun Kökleri	97
5.16.6. CR-İndisi	98
5.16.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	98
5.16.8. Randic (X^1) İndisi	98
5.17. POLİMETİL AKRİLAT	99
5.17.1 Yapısal Formül	99
5.17.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	99
5.17.3. Topolojik Matris	99
5.17.4. Karakteristik Polinom	100
5.17.5. Polinomun Kökleri	100
5.17.6. CR-İndisi	100
5.17.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	100
5.17.8. Randic (X^1) İndisi	100
5.18. POLİETİL AKRİLAT	101
5.18.1 Yapısal Formül	101
5.18.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	101
5.18.3. Topolojik Matris	101
5.18.4. Karakteristik Polinom	102
5.18.5. Polinomun Kökleri	102
5.18.6. CR-İndisi	102
5.18.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	102
5.18.8. Randic (X^1) İndisi	103
5.19. POLİ N-PROPİL AKRİLAT	103

5.19.1. Yapısal Formül	103
5.19.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	103
5.19.3. Topolojik Matris	104
5.19.4. Karakteristik Polinom	104
5.19.5. Polinomun Kökleri	104
5.19.6. CR-İndisi	105
5.19.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	105
5.19.8. Randic (X^1) İndisi	105
5.20. POLİ İZO-PROPİL AKRİLAT	105
5.20.1. Yapısal Formül	105
5.20.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	106
5.20.3. Topolojik Matris	106
5.20.4. Karakteristik Polinom	106
5.20.5. Polinomun Kökleri	107
5.20.6. CR-İndisi	107
5.20.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	107
5.20.8. Randic (X^1) İndisi	107
5.21. POLİ N-BUTİL AKRİLAT	108
5.21. 1. Yapısal Formül	108
5.21.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	108
5.21.3. Topolojik Matris	108
5.21.4. Karakteristik Polinom	109
5.21.5. Polinomun Kökleri	109
5.21.6. CR-İndisi	109
5.21.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	109
5.21.8. Randic (X^1) İndisi	110
5.22. POLİ SEKONDER-BUTİL AKRİLAT	110
5.22.1. Yapısal Formül	110
5.22.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	110
5.22.3. Topolojik Matris	111
5.22.4. Karakteristik Polinom	111
5.22.5. Polinomun Kökleri	111
5.22.6. CR-İndisi	112
5.22.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	112
5.22.8. Randic (X^1) İndisi	112

5.23. POLİ İZO-BUTİL AKRİLAT	113
5.23.1. Yapısal Formül	113
5.23.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	113
5.23.3. Topolojik Matris	113
5.23.4. Karakteristik Polinom	113
5.23.5. Polinomun Kökleri	114
5.23.6. CR-İndisi	114
5.23.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	114
5.23.8. Randic (X^1) İndisi	115
5.24. POLİ TERSİYER-BUTİL AKRİLAT	115
5.24.1. Yapısal Formül	115
5.24.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	115
5.24.3. Topolojik Matris	116
5.24.4. Karakteristik Polinom	116
5.24.5. Polinomun Kökleri	116
5.24.6. CR-İndisi	117
5.24.7.0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	117
5.24.8. Randic (X^1) İndisi	117
5.25. POLİ 2-METİL-BUTİL AKRİLAT	118
5.25.1. Yapısal Formül	118
5.25.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	118
5.25.3. Topolojik Matris	118
5.25.4. Karakteristik Polinom	119
5.25.5. Polinomun Kökleri	119
5.25.6. CR-İndisi	119
5.25.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	119
5.25.8. Randic (X^1) İndisi	120
5.26. POLİ 3-METİL-BUTİL AKRİLAT	120
5.26.1. Yapısal Formül	120
5.26.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	120
5.26.3. Topolojik Matris	121
5.26.4. Karakteristik Polinom	121
5.26.5. Polinomun Kökleri	121
5.26.6. CR-İndisi	122
5.26.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	122

5.26.8. Randic (X^1) İndisi	122
5.27. POLİ 2-ETİL-BUTİL AKRİLAT	123
5.27.1. Yapısal Formül	123
5.27.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	123
5.27.3. Topolojik Matris	124
5.27.4. Karakteristik Polinom	124
5.27.5. Polinomun Kökleri	124
5.27.6. CR-İndisi	125
5.27.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	125
5.27.8. Randic (X^1) İndisi	125
5.28. POLİ 3-PENTİL AKRİLAT	126
5.28.1. Yapısal Formül	126
5.28.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	126
5.28.3. Topolojik Matris	127
5.28.4. Karakteristik Polinom	127
5.28.5. Polinomun Kökleri	127
5.28.6. CR-İndisi	128
5.28.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	128
5.28.8. Randic (X^1) İndisi	128
5.29. POLİ 2-METİL-PENTİL AKRİLAT	129
5.29.1. Yapısal Formül	129
5.29.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	129
5.29.3. Topolojik Matris	129
5.29.4. Karakteristik Polinom	130
5.29.5. Polinomun Kökleri	130
5.29.6. CR-İndisi	130
5.29.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	131
5.29.8. Randic (X^1) İndisi	131
5.30 POLİ 4-METİL-2 PENTİL AKRİLAT	131
5.30.1. Yapısal Formül	131
5.30.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik	132
5.30.3. Topolojik Matris	132
5.30.4. Karakteristik Polinom	133
5.30.5. Polinomun Kökleri	133
5.30.6. CR-İndisi	133

5.30.7.	0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	134
5.30.8.	Randic (X^1) İndisi	134
5.31.	POLİ N-HEKZİL AKRİLAT	134
5.31.1.	Yapısal Formül	134
5.31.2.	Hidrojeniz Yapısal Grafik	135
5.31.3.	Topolojik Matris	135
5.31.4.	Karakteristik Polinom	136
5.31.5.	Polinomun Kökleri	136
5.31.6.	CR-İndisi	136
5.31.7.	0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	137
5.31.8.	Randic (X^1) İndisi	137
5.32.	POLİ 2-ETİL-HEKZİL AKRİLAT	138
5.32.1.	Yapısal Formül	138
5.32.2.	Hidrojeniz Yapısal Grafik	138
5.32.3.	Topolojik Matris	139
5.32.4.	Karakteristik Polinom	140
5.32.5.	Polinomun Kökleri	140
5.32.6.	CR-İndisi	140
5.32.7.	0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	141
5.32.8.	Randic İndisi	141
5.33.	POLİ N-HEPTİL AKRİLAT	142
5.33.1.	Yapısal Formül	142
5.33.2.	Hidrojeniz Yapısal Grafik	142
5.33.3.	Topolojik Matris	143
5.33.4.	Karakteristik Polinom	144
5.33.5.	Polinomun Kökleri	144
5.33.6.	CR-İndisi	144
5.33.7.	0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	145
5.33.8.	Randic (X^1) İndisi	145
5.34.	POLİ 2-HEPTİL AKRİLAT	146
5.34.1.	Yapısal Formül	146
5.34.2.	Hidrojeniz Yapısal Grafik	146
5.34.3.	Topolojik Matris	147
5.34.4.	Karakteristik Polinom	148

5.34.5. Polinomun Kökleri	148
5.34.6. CR-İndisi	148
5.34.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	149
5.34.8. Randic (X^1) İndisi	149
5.35. POLİ N-OKTİL AKRİLAT	150
5.35.1. Yapısal Formül	150
5.35.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik.	150
5.35.3. Topolojik Matris	151
5.35.4. Karakteristik Polinom	152
5.35.5. Polinomun Kökleri	152
5.35.6. CR-İndisi	152
5.35.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi	153
5.35. 8. Randic (X^1) İndisi	153
VI.BÖLÜM: SONUÇLAR VE TARTIŞMA	154
6.1. DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR	154
6.1.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar	154
6.1.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar	155
6.1.3. Üçüncü Mertebeden Bağıntılar	169
6.1.4. Önerilen Bağıntı	170
6.1.5. Hata Hesapları	180
6.2. DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLAR	180
6.2.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar	180
6.2.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar	181
6.2.3. Üçüncü Mertebeden Bağıntılar	194
6.2.4. Önerilen Bağıntı	195
6.2.5. Hata Hesapları	195
6.3. DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR	204
6.3.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar	204
6.3.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar	213
6.3.3. Üçüncü Mertebeden Bağıntılar	218
6.3.4. Önerilen Bağıntı	225
6.3.5. Hata Hesapları	225
6.4. DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR	229
6.4.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar	229

	<u>Sayfa</u>
6.4.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar	237
6.4.3. Üçüncü Mertebeden Bağıntılar	237
6.4.4. Önerilen Bağıntı	243
6.4.5. Hata Hesapları	244

KAYNAKLAR

ÖZGEÇMİŞ



ŞEKİL LİSTESİ

- Şekil 2.1. Bir grafikteki uç ve kenarlar
- Şekil 2.2. Zincir grafikler
- Şekil 2.3. Dallanmış grafik
- Şekil 2.4. Çevrimsel grafik
- Şekil 2.5. Tam grafik
- Şekil 2.6. Yıldız grafikler
- Şekil 2.7. Bağlı olmayan grafik
- Şekil 2.8. Neopentan'ın hidrojenli grafiği
- Şekil 2.9. Neopentan'ın hidrojeniz grafiği
- Şekil 2.10. İzobütan için Smolenski İndisi
- Şekil 3.1. Amorf Polimerlerde Spesifik hacim-sıcaklık eğrisi
- Şekil 3.2. Polivinil asetat'ın hacim-sıcaklık eğrileri
- Şekil 3.3. Polimerlerin ısı kapasitesinin sıcaklıkla değişimi
- Şekil 3.4. Yüksek molekül ağırlıklı polimerin gerilme-gevşeme modülünün sıcaklıkla değişimi.
- Şekil 3.5. Dielektrik kaybının sıcaklıkla değişimi
- Şekil 3.6. Camsı-Geçiş Prosesinde basıncın bir fonksiyonu olarak selenyumun hacmi
- Şekil 3.7. Bazı maddeler için basınç ile sıcaklık arasındaki ilişki
- Şekil 3.8. Seyrelticilerin Camsı-Geçiş Temperaturüne etkileri
- Şekil 4.1. Yapısal grafik

Şekil 4.2. Kimyasal grafik

Şekil 4.3. Hidrojensiz yapısal grafik

Şekil 4.4. Hidrojensiz yapısal grafik

Şekil 4.5. Hidrojensiz yapısal grafik

Şekil 6.1. $T_g = A(CR)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.2. $\frac{1}{T_g} = A(CR)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.3. $\ln T_g = A(CR)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.4. $T_g = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.5. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.6. $\ln T_g = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.7. $T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.8. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.9. $\ln T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.10. $T_g = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.11. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.12. $\ln T_g = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.13. $T_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.14. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.15. $\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.16. $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.17. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.18 $\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.19. $T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.20. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.21. $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.22. $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.23. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.24. $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.25. $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.26. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.27. $\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.28. $T_g = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.29. $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.30. $\text{Ln}T_g = A(\text{CR})+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.31. $T_g = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.32. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.33. $\text{Ln}T_g = A(X^0)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.34. $T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.35. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.36. $\text{Ln}T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.37. $T_g = A(\text{CR})^2+B(\text{CR})+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.38. $\frac{1}{T_g} = A(\text{CR})^2+B(\text{CR})+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.39. $\text{Ln}T_g = A(\text{CR})^2+B(\text{CR})+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.40. $T_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.41. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.42. $\text{Ln}T_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.43. $T_g = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.44. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.45. $\text{Ln}T_g = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.46. $T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.47. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.48 $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.49. $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.50. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.51. $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.52. $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.53. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.54. $\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.55. $T_g = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.56. $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.57. $\ln T_g = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.58. $T_g = -A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.59. $\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.60 $\ln T_g = A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.61. $T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.62. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.63. $\ln T_g = A(X^1)+B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.64. $T_g = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.65. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.66. $\ln T_g = A(CR)^2+B(CR)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.67. $T_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.68. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.69. $\ln T_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.70. $T_g = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.71. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.72. $\ln T_g = A(X^1)^2+B(X^1)+C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.73. $T_g = A(CR)^3+B(CR)^2+C(CR)+D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.74. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3+B(CR)^2+C(CR)+D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.75. $\ln T_g = A(CR)^3+B(CR)^2+C(CR)+D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.76. $T_g = A(X^0)^3+B(X^0)^2+C(X^0)+D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.77. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.78. $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.79. $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.80. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.81. $\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.82. $T_g = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.83. $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.84. $\ln T_g = A(CR) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.85. $T_g = A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.86. $\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.87. $\ln T_g = A(X^0) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.88. $T_g = A(X^1) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.89. $\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.90. $\ln T_g = A(X^1) + B$ bağıntısının şekli

Şekil 6.91. $T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.92. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.93. $\ln T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.94. $T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.95. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.96. $\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.97. $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.98. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.99. $\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$ bağıntısının şekli

Şekil 6.100. $T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.101. $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.102. $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.103. $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.104. $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.105. $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.106. $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.107. $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli

Şekil 6.108. $\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$ bağıntısının şekli



TABLO LİSTESİ

Tablo 4.1. Heteroatomların Valens Değerleri.

Tablo 6.1. Düz Zincirli Polimetakrilatlar İçin Regresyon

Tablo 6.2. Düz Zincirli Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g$)

Tablo 6.3. Düz Zincirli Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-\frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g}$)

Tablo 6.4. Düz Zincirli Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-LnT_g, X^0-LnT_g, X^1-LnT_g$)

Tablo 6.5. Düz Zincirli Polimetakrilatların CR-İndisine göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri.

Tablo 6.6. Düz Zincirli Polimetakrilatların X^0 İndisine Göre Olan T_g Değerleri

Tablo 6.7. Düz Zincirli Polimetakrilatların X^1 İndisine Göre Olan T_g Değerleri

Tablo 6.8. Dallanmış Polimetakrilatlar İçin Regresyon

Tablo 6.9. Dallanmış Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g$)

Tablo 6.10. Dallanmış Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-\frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g}$)

Tablo 6.11. Dallanmış Polimetakrilatlar İçin Regresyon
($CR-LnT_g, X^0-LnT_g, X^1-LnT_g$)

Tablo 6.12. Dallanmış Polimetakrilatların CR-İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.13. Dallanmış Polimetakrilatların X^0 İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.14. Dallanmış Polimetakrilatların X^1 İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.15. Düz Zincirli Poliakrilatlar İçin Regresyon

Tablo 6.16. Düz Zincirli Poliakrilatlar İçin Regresyon
($CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g$)

Tablo 6.17. Düz Zincirli Poliakrilatlar İçin Regresyon

$$(CR - \frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g})$$

Tablo 6.18. Düz Zincirli Poliakrilatlar İçin Regresyon
($CR-LnT_g, X^0-LnT_g, X^1-LnT_g$)

Tablo 6.19. Düz Zincirli Poliakrilatların CR-İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.20. Düz Zincirli Poliakrilatların X^0 İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.21. Düz Zincirli Poliakrilatların X^1 İndisine Göre Hesaplanmış Olan T_g Değerleri

Tablo 6.22. Dallanmış Poliakrilatlar İçin Regresyon

Tablo 6.23. Dallanmış Poliakrilatlar İçin Regresyon
($CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g$)

Tablo 6.24. Dallanmış Poliakrilatlar için Regresyon

$$(CR - \frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g})$$

Tablo 6.25. Dallanmış Poliakrilatlar için Regresyon

$$(CR - \ln T_g, X^0 - \ln T_g, X^1 - \ln T_g)$$

Tablo 6.26. Dallanmış Poliakrilatların CR-İndisine Göre Hesaplanmış T_g Değerleri

Tablo 6.27. Dallanmış Poliakrilatların X^0 İndisine Göre Hesaplanmış T_g Değerleri

Tablo 6.28. Dallanmış Poliakrilatların X^1 İndisine Göre Hesaplanmış T_g Değerleri

SEMBOL LİSTESİ

- G : Grafik
- n : Grafikteki uçların sayısı, matrisin mertebesi,
karbon atomlarının sayısı.
- m : Grafikteki kenarların sayısı
- G_n : Tam grafik
- $G_{1,n}$: Yıldız grafik
- $d(V_i)$: Valens
- d_i : Valens
- E : A ile aynı boyutlara sahip birim matris.
- X : Değişken
- k_i : Karakteristik polinomun i'nci katsayısı
- w : Wiener indisi
- n_i : d_i bağları ile bağlanmış olan atom çiftlerinin sayısı
- B_2 : Gordon İndisi
- N_2 : Grafiğin iki tane üç atomlu grup içermesinin mümkün
olabilen sayısı
- Z : Hosoya İndisi
- $P(k)$: Ardışık olmama sayısı
- $f(G)$: Smolenski İndisi
- a_0, a_k : Deneysel olarak belirlenmiş sabitler
- X_k : Grafiğin k tane kenar içeren herhangi bir bölgesi
- CR : Karakteristik kök İndisi
- X^0 : Sıfırıncı Mertebe İndisi
- X^1 : Randic İndisi
- T_g : Camsı-Geçiş Temperatürü

V_t : Spesifik hacim
 V_α : Denge deęeri
 ϵ^* : Karmaşık di elektrik sabiti
 $\tan\delta$: Kayıp tanjantı
 S_o^g : Artık entropi
 S^g : Camın entropisi
 S^c : Kristalin entropisi
 P_i : İç basınç
 P : Atmosfer basıncı
 α : Isıl genleşme katsayısı
 β : Sıkıştırılabilme katsayısı
 M : Molekül ağırlığı
 $E_r(t,T)$: Gerilme-Gevşeme modülü
 $f(t,T)$: Gerilim (Stress)
 $S(0)$: Gevşeme (Strain)
 C_1, C_2 : Soğutma hızları
 a_T : Sabit
 V : Relatif hacim büyümesi
 α_r : Kauçuk
 α_g : Cam
 δ^* : Heteroatomun valens deęeri
 $T_r(a_{ij})$: A matrisinin trası

TEŐEKKÜR

Yaptığım bu tez çalışmasının hazırlanmasında her aşamada bilgi ve önerileri ile bana her bakımdan katkıda bulunan, çalışmalarımı büyük bir dikkat ve titizlikle yürüten Sayın Hocam Prof.Dr.Zekiye ÇINAR'a sonsuz saygı ve Őukranlarımı sunarım.

Melike TAGUDAR

ÖZET

Bu çalışmanın amacı "Grafik Teorisi"nden yararlanılarak, bazı polimer moleküllerinin Camısı-Geçiş Temperatürlerinin belirlenmesidir. Polimer molekülleri olarak Polimetakrilat ve Poliakrilatlar seçilmiş, moleküllerin Düz Zincirli ve Dallanmış yapıda olmaları göz önünde bulundurularak, 4 ayrı grup üzerinde çalışma yapılmış, incelenen 35 ayrı polimer molekülün CR, Sıfırncı Mertebe (X^0) ve Randic (X^1) İndisleri hesaplanarak, bulunan indislerle deneysel Camısı-Geçiş Temperatürleri arasında; bir regresyon yapılarak I., II. ve III.Mertebeden bağıntılar elde edilmiştir.

Sonuç olarak en iyi bağıntısının her grup için III.Mertebeden olduğu saptanmıştır.

İncelenen gruptardan, sadece Dallanmış yapıdaki Polimetakrilatlar için $\ln T_g$ ile indis arasında, diğer üç grup için ise $1/T_g$ ile indis arasında birer bağıntı elde edilmiştir. Dallanmış yapıdaki polimer molekülleri için en uygun indisin Randic , Düz Zincirli Polimetakrilatlar için Sıfırncı Mertebe, Poliakrilatlar için ise CR-İndisinin olduğu sonucuna varılmış ve bu indislerin hesaplamalarda kullanılması önerilmiştir.

ABSTRACT

The aim of this work is to determine the glass-transition temperatures of various polymer molecules by means of Graph Theory. Polymethacrylates and Polyacrylates have been chosen as polymer molecules and the investigations have been carried out for 4 different groups according to the whether their structure is branched or not. CR, Zeroth Order and Randic Indices for 35 different Polymer molecules have been calculated and relationships of the first, second and third order between the indices and experimental values have been obtained.

As a result; it has been found out that the third order relationships are the best ones for the four groups investigated. For branched polymethacrylates a relationship between $\ln T_g$ and indice where as for the other three groups relationships between $1/T_g$ and indice have been obtained. It may be concluded that for the two branched groups Randic Indice, for straight chain polymethacrylates the Zeroth Order Indice and lastly for polyacrylates CR-Indice are the best indices that are suggested to be used in the calculations.

I- GİRİŞ

Maddelerin bileşim ve yapılarında meydana gelebilecek olan değişimlerin özellikleri ve hatta fonksiyonları değiştirdiği tüm bilim dallarında kabul edilen bir gerçektir. Kimyada da yapısal değişimlerin fiziksel, kimyasal ve biyolojik özellikleri değiştirdiği bilinmektedir. Bundan dolayı kimyanın büyük bir bölümü madde yapısının tanımına ayrılmıştır. Moleküler yapıyı belirleyebilmenin bir yolu maddedeki atomların bağlantılarını, bağların dallanmasını, şekil ve büyüklüğünü belirtmektedir ki bu "topoloji" adıyla bilinir.

Moleküllerin ölçülebilen deneysel özelliklerinin belirlenmesinde kimyasal yapının çok büyük etkisi vardır. Molekül ağırlığı, bir moleküldeki atomların çeşit ve sayılarına göre toplanabilir niteliktedir. Organik kimyada ki homolog seriler için toplanabilirlik en temel özelliktir. Hidrokarbon serileri için, molar hacimler ve oluşum ısıları gibi özellikler toplanabilir özelliklerdir. Bu özelliklerle karbon atomlarının sayısı arasında doğrusal bir bağıntının olduğu bilinmektedir.

Dallanmış yapıdaki moleküllerde, moleküler yapı ve özellikler arasındaki bağıntılar açıkça görülememektedir. İzomerik yapıda olan maddelerde de hiç bir özellik birbirinin aynı değildir. Bundan dolayı moleküldeki atomların sayısı, yapıyı ve özellikleri açıklamaya yetmez. Atomlar arasındaki bağlantıların, sayı ve özelliklerinin belirtilmesi ile moleküler yapı aydınlatılabilir, yapı ve özellikler arasındaki bağıntılar kurulabilir.

Kuantum mekaniği ile ya da topoloji ile belirlenebilen moleküler yapının kimyasal açıdan en büyük önemi; bu yolla fizikokimyasal özelliklerin açıklanabilmesi ve tahminen de olsa değerlerinin belirlenebilmesidir. Bu konuda yapılan çalışmaların tümü QSAR çalışmaları olarak isimlendirilir. (Kantitatif Yapı Aktivite Bağıntıları).

Moleküler yapı, biyolojik aktivite ve toksisite ile kimyasal maddelerin kaderleri arasında kesinlikle bir bağıntı vardır. Kimyasal reaktivite ve biyolojik aktivite, maddenin moleküler yapısına ve fizikokimyasal özelliklerine bağlıdır. QSAR çalışmaları, ilk olarak çevre kimyasında kullanılmıştır(1).

QSAR çalışmaları çevreye atılan kimyasal maddelerin kaderini belirlemede ve toksisitelerini tayin etmekte kullanılır. Bu yöntemin kullanılmasının en büyük nedeni, endüstrileşme nedeniyle son yıllarda çok sayıda sentetik kimyasal maddenin çevreye atılmış olmasıdır. Kimyasal maddelerin çevre açısından önemli özelliklerinin belirlenmesinde maliyetin çok yüksek olması ve yapılması gerekli olan deneylerin çok vakit alması nedeniyle QSAR tekniklerinden faydalanılmaktadır.

QSAR çalışmaları, çevreden başka farmasötik ve tıbbi kimya alanlarında da kullanılmaktadır. Bu çalışmalara giderek artan ihtiyacın çeşitli nedenleri vardır. Mesela benzen halkasına bağlı üçlü yer değiştirme ürünleri için 90 substituentin olduğu düşünüldüğünde benzenden türetilmiş 729.000 çeşit madde bulunmaktadır. Bunların detaylı olarak özelliklerinin incelenmesi ise mümkün değildir. Bu maddelerden yalnızca birinin özelliklerinin incelenmesi ile tümünün özellikleri hakkında bir fikir elde edilebilir.

Farmasötik kimya alanında bir ilacın vücutta absorplanmasına ilişkin çok karmaşık mekanizmalar ve aşamalar vardır. Ayrıca bu mekanizmalar hakkında detaylı bilgilerde bulunmamaktadır.

Bu çalışmada; polimerlerin önemli bir özelliği olan Cam-sı-Geçiş Temperatürü ile polimerin tekrarlanan biriminin moleküler yapısı arasında uygun bağıntılar bulunmaya çalışılmıştır.

Polimerik maddeler çok geniş alanlarda kullanılmakta ve günden güne değişik sanayi ürünleri elde edilmektedir. Bu nedenle polimerlerin fiziksel ve kimyasal özellikleri üzerinde yoğun çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmaların bir kısmı da polimerlerin Cam-sı-Geçiş Temperatürleri üzerinde olmaktadır.

Camsı-Geçiş Temperaturü, polimerlerin çok önemli bir özelliğidir. Esnek ve bükülgen yapıda olan polimer, bu karakteristik temperaturün altında cam gibi kırılğan bir hale dönüşür. Bu da, polimerin belirli sıcaklık aralıklarında kullanılmasını gerektirir.

Polimerler soğutuldukları zaman başlıca mekanizma ile karşılaşırlar. Bunlardan biri "kristallenme" diğeri ise "camlaşma" dır.

Bir polimerin hangi tür uygulamaya elverişli olduğu ergime noktası "T_e" ve Camsı-Geçiş Temperaturü olan "T_g" 'ye bağlıdır. Ergimiş halde bulunan sıcak bir polimer soğutulursa, ergime sıcaklığının biraz altındaki sıcaklıklarda kristallenme başlar ve genellikle bir miktar amorf madde içeren polikristal bir kütle elde edilir. Hızla soğutulacak olunursa kristallenmeksizin ergime sıcaklığının altına inerek termodinamik bakımdan yarı kararlı halde olan aşırı soğumuş, amorf bir madde elde edilir. Bu esnada moleküllerin dönme ve bükülme hareketleri sürdürüldüğü için polimer sert yapıda değildir. Sıcaklık daha çok düşürülürse, moleküler hareket yavaşlayıp Camsı-Geçiş Temperaturünün altında durur ve polimer sert, kırılğan cam gibi katı hale geçer.

İşte moleküler hareketin durduğu sıcaklık "Camsı-Geçiş sıcaklığı" dır. Camsı-Geçiş Temperaturünün altında, polikristal kütle, camsı amorf bir ortamda dağılmış küçük kristallerden ibarettir. Camsı-Geçiş Temperaturü ile ergime sıcaklığı arasında ise, kristaller yumuşak amorf bir ortam içinde bulunurlar. Tamamıyla amorf yapıdaki polimerlerde ise, zincirler düzensiz yapıdadırlar. Böyle polimerlerde kristallenme oluşmaz, yalnız Camsı-Geçiş Prosési gerçekleşir.

Camsı-Geçiş temperaturünden daha düşük sıcaklıklarda, moleküllerin hareketleri oldukça yavaştır. Polimer zincirleri hemen hemen sabit durumdadır, zincirler bu sabit yerlerde titreşim hareketi yapabilirler, ancak yerlerini değiştiremezler. Sıcaklık arttığında titreşim hareketinin genliği büyür. Bu çalışmada "metakrilat" ve "akrilat" grubuna giren polimerlerin Camsı-Geçiş Temperaturleri ile moleküler yapıları arasında bağlantılar, Grafik Teorisi'ni kullanarak geliştirilmiştir.

II- GRAFİK TEORİSİ

2.1. GRAFİK TEORİSİNİN TEMELİ

Grafik Teorisi, topoloji ile yakından ilgili olan bir matematik dalıdır. Bu teorinin ortaya çıkışı günümüzden yaklaşık 200 yıl öncelere dayanmaktadır. Euler (2) Königsberg Köprüsü probleminin çözümü nedeniyle bu teorinin babası olarak kabul edilir. Fizik ve kimyadan başka grafik teorisi, antropoloji, genetik, coğrafya, mimarlık, inşaat mühendisliği, psikoloji, sosyoloji, endüstriyel yönetim gibi alanlarda da kullanılmaktadır. Kimyada da bu teori çok değişik araştırma alanlarında kullanılır. Sentetik kimya, polimer kimyası, kuantum kimyası, petrokimya, faz dengesi, kimyasal kinetik, istatistik mekanik, spektroskopik analiz bu alanlara örnek olarak gösterilebilir.

2.2. TOPOLOJİK İNDİSLERİN KİMYADAKİ YERİ

Günümüzde, kimyasal alanda moleküllerin hem açık formülleri hem de kapalı formülleri yaygınlıkla kullanılmaktadır.

Açık formüller, moleküldeki atomların birbirlerine ne şekilde bağlandığını ve molekülde hangi tür atomların bulunduğunu açıkça gösterdiğinden molekül hakkında kimyasal formülden daha fazla bilgi verirler. Aynı zamanda molekülün topolojisi hakkında bilgi verdiklerinden, moleküldeki atomların uzayda ne şekilde yerleşmiş olduklarını da gösterirler.

Aslında bu bilgiyi gösteren sadece moleküllerin açık formülleri değildir. Son yıllarda kimyasal maddelerin gösterilebilmeleri için yapılan yeni gelişmeler, kimyasal yapıların temsil edilebilmesi için pek çok yeni yöntem oluşturmuştur. Bunların arasında en kullanışlı olanı "Topolojik İndisler" adı verilen matematiksel formüllerdir. Bu formüller kimyasal maddelerin topolojik yapılarını basit bir matematiksel bağıntı ile gösterirler. Bu tür indislerin çok ilginç özellikleri

vardır ve kimyasal maddeler hakkında gerekli olan bilgileri fazlasıyla verirler.

Moleküler yapı en detaylı biçimde topolojik indislerle gösterilebildiğinden, moleküler özelliklerin topolojik indislerle bağlı olduğunu söylemek pek de yanlış olmaz.

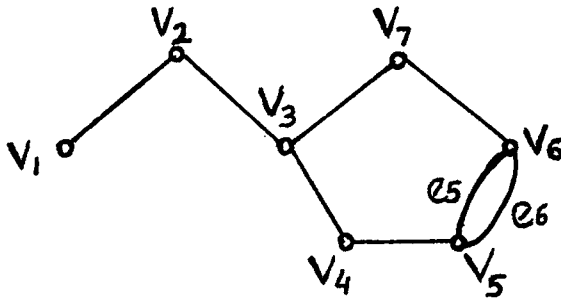
2.3. GRAFİK TEORİSİNİN TEMEL TERİM VE KAVRAMLARI

Daha önceki bölümlerde amacı, önemi ve kullanılış yerleri açıklanmış olan grafik teorisinin bazı özel terim ve kavramları vardır. Bu terim ve kavramlar aşağıda sırası ile özetlenmiştir.

2.3.1. Grafik

Grafik; verilen bir sistemin topolojini belirlemek için kullanılan matematiksel bir yapıdır. Bir grafik "uç" adı verilen bir seri nokta ve bu noktaları birleştiren "kenar" adı verilen bir seri doğrudan oluşur. Her kenar iki ucu birleştirir. Aynı uçta başlayıp aynı uçta son bulan hiç bir kenar grafikte yer almaz. Grafikler genellikle "G" ile sembollendirilir. Bir grafiğin 1'nci ucu V_1 ile gösterilir. Kenarlar ise uçlarına göre sembollendirilir.

Genellikle bir grafik için uçların sayısı "n" harfi ile, kenarların sayısı ise "m" harfi ile sembolize edilirler.



Şekil 2.1. Bir grafikteki uç ve kenarlar.

2.3.2. Grafik Çeşitleri

Yapılarına göre grafikler bazı özel isimlere sahiptirler. En çok karşılaşılan grafik türleri aşağıda sıralanmıştır.

2.3.2.1. Zincir Grafik

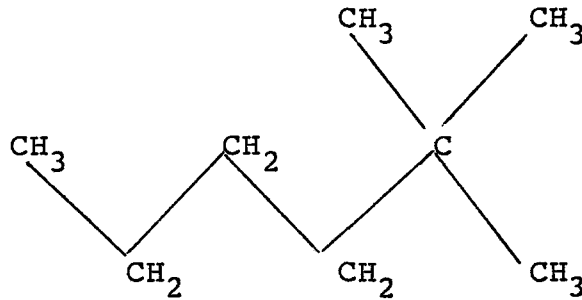
Zincir grafikler isimlerinden de anlaşıldığı gibi zincirin başında ve sonunda olmak üzere iki özel uca sahiptirler. Bu uçlardan çıkan veya bu uçlarda biten sadece birer kenar bulunur. Ara uçlar ise daima iki kenar için ortak olan uçlardır. Bu uçlardan her zaman iki kenar çıkar veya iki kenar bu uçlarda biter.



Şekil 2.2. "Zincir Grafikler".

2.3.2.2. Dallanmış (Ağaç) Grafikler

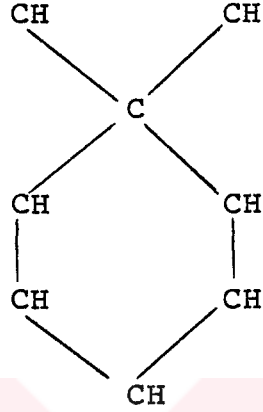
Bu tür grafiklerde ara uçların bazıları üç veya dört kenara sahiptir. Grafiğin genel görünümü aynen dallanmış bir ağaca benzer. Bunlar daha çok doymuş hidrokarbonların grafiklerinde görülür.



Şekil 2.3. "Dallanmış Grafik".

2.3.2.3. Çevrimsel Grafik

Çiklik yapıda olan kimyasal maddelerin topolojilerini göstermekte kullanılır. Bu grafiklerde aynı uçta başlayan ve biten en az üç veya daha fazla kenar bulunur.

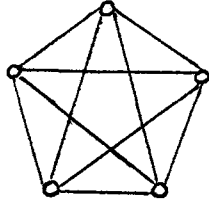


Şekil 2.4. "Çevrimsel Grafik".

2.3.2.4. Tam Grafik

Bu grafiklere "bağlı grafikler" adı da verilebilir. Bir tam grafikte her uç çifti bir kenarla birleştirilmiştir. Tam grafikler G_n ile gösterilir. G_n açıkça görüldüğü gibi

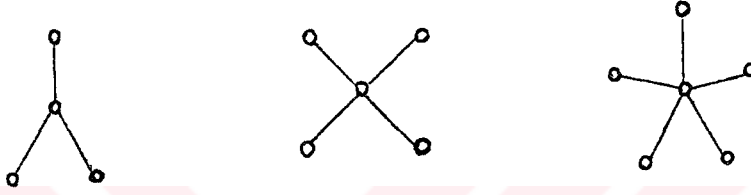
$\frac{1}{2} n(n-1)$ tane kenara sahiptir.



Şekil 2.5. "Tam Grafik".

2.3.2.5. Yıldız Grafik

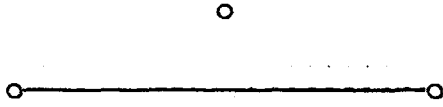
Yıldız grafiklerde grafiğin merkezinde özel bir uç bulunur. Bu uç, etrafında bulunan üç veya daha fazla uca bağlanmıştır. Dıştaki uçların kendileri ise sadece merkezi uca bağlıdır. Yıldız grafikler tam grafiklerden farklı olarak iki altlıkla gösterilirler, $G_{1,n}$. Bu sembolde n, merkezdeki uca bağlı olan dış uçların sayısını göstermektedir. Aşağıdaki şekilde gösterilen grafikler sırasıyla $G_{1,3}$, $G_{1,4}$, $G_{1,5}$ şeklindedir.



Şekil 2.6. "Yıldız Grafikler".

2.2.3.6. Bağlı Olmayan Grafikler

Bu özel grafiklerde en az bir uç kendisinde başlayan veya biten hiç bir kenara sahip değildir.

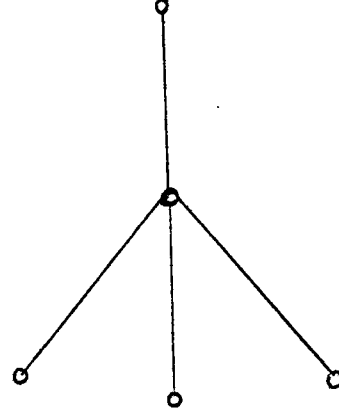
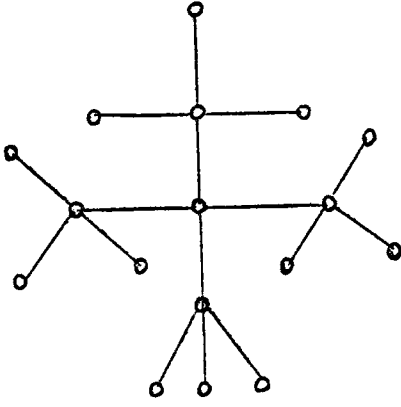


Şekil 2.7. "Bağlı Olmayan Grafik".

2.3.2.7. Hidrojeniz Grafikler

Kimyada genel olarak açık formüller yazılırken sadece karbon atomları kullanılır. Hidrojen atomları formülü basitleştirmek amacıyla yazılmazlar. Bu geleneğe uygun olarak hidrokarbonlarla ilgili yapısal grafikler çizilirken sadece kar-

bon atomları uç olarak gösterilir. Aşağıdaki şekillerde de görüldüğü gibi hidrojen atomlarının gösterilmemesi grafiği oldukça basit ve anlaşılır bir hale dönüştürür.



Şekil 2.8. Neopentan'ın hidrojenli grafiği.

Şekil 2.9. Neopentan'ın hidrojenli olmayan grafiği.

2.3.3. Valens

Valens, herhangi bir V_i ucunun V_i yi uç kabul eden kenarların sayısı olarak tanımlanır. Valens $d(V_i)$ veya sadece d_i ile gösterilir. V_i yi uç kabul eden kenarların sayısı j ye eşitse $d_i = j$ dir.

2.3.4. Kenar Sırası

Bir grafikteki kenar sırası birbirine bağlanmış olan kenarların serisi olarak tanımlanır. Herhangi bir G grafiği için kenar sırası $(V_i, V_j), (V_j, V_k), (V_k, V_l), \dots, (V_{m-1}, V_m)$ şeklinde gösterilir. "Sıranın uzunluğu", sırada yer alan kenarların sayısına eşittir. "Yol" ise her kenar ve ucun sadece bir kez yer aldığı bir kenar sırasıdır.

2.4. TOPOLOJİK MATRİS

1874 yılında Sylvester (3,4) isminde bir matematikçi kimyasal bir grafiğin matris şeklinde yazılabileceğini göstermiştir. Daha sonraları bu matrise "topolojik matris" adı verilmiştir. Grafikteki uç noktalar matristeki satır ve sütunlara karşılık gelir. Matrisin her a_{ij} elemanı, i ve j atomları birbirine bağlı olduğunda bire, bağlı olmadığına ise sıfıra eşittir. Belirli bir grafiğe ait olan topolojik matrisin şekli doğrudan doğruya atomların, yani grafikteki uçların numaralanmasına bağlıdır. Aynı zamanda her ucun valensi o uca karşı gelen satır veya sütundaki elemanlarının değerlerinin toplamına eşittir.

Bir molekülün özelliklerini mükemmel derecede gösterebilen topolojik matrislerin bilgisayarda toplanması mümkündür. Karakteristik matrisin numaralandırılması kimyasal grafikteki atomların numaralandırılmasına bağlı olarak değişir.

Topolojik matrislerin çözümleri, bazı karmaşık hesaplamaları içerir. Ancak bu çözümler kantitatif bir hassasiyete sahip değildir.

Kimyasal bir grafikte bir ucun valensinin hesaplanabilmesi için topolojik matrise dayanılarak cebirsel eşitlikler yazılabilir.

$$\Delta_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \quad (2-1)$$

Bu eşitlikte n_1 , uçların sayısıdır ve aynı zamanda A matrisinin mertebesini göstermektedir. Farklı bir şekilde de aynı valens değeri gösterilebilir. Bu ikinci gösteriliş şeklinde topolojik matrisin karesinde bulunan köşegen üzerindeki terimler valense eşittir.

$$\Delta_i = \sum_{m=1}^n a_{im} \cdot a_{mi} \quad (2-2)$$

2.5. KARAKTERİSTİK POLİNOM

Topolojik matrisin karakteristik bir polinoma dönüştürülmesi yönteminde topolojik matris bir determinant şeklinde açılır ve matrisin asal köşegeni üzerindeki bütün terimler yerine X konulur. Determinantın cebirsel tekniklerle açılması sonucunda karakteristik polinom elde edilir. A topolojik matrisinden başlayarak P(X) karakteristik polinomun elde edilmiş aşamaları eşitlikte olduğu gibidir.

$$A \rightarrow \det|A + XE| \rightarrow \sum_{i=1}^n k_i X^{n-i} \rightarrow P(X) \quad (2-3)$$

Bu eşitlikteki E, A ile aynı boyutlara sahip olan birim matrisi, X bir değişkeni, n grafikteki uçların sayısını ve k_i de karakteristik polinomun i inci katsayısını göstermektedir.

Kimyasal bir maddenin karakteristik polinomu bu madde ile ilgili pek çok bilgiyi içerir. Karakteristik polinom sıfıra eşitlenip çözümlerse bir seri karakteristik kök veya özdeğer elde edilir. Bunların sayıları daima moleküldeki atom sayısına eşittir. Özdeğerlere "Polinomun Spektrumu" veya "Grafiğin Spektrumu" adı verilir.

2.6. ÖZDEĞER SPEKTRUMU

Topolojik olarak birbirinden çok farklı olan 2 kimyasal grafik bazı durumlarda aynı karakteristik polinomu yani aynı özdeğer spektrumunu verebilmektedir. Bu durum karakteristik polinomların, kimyasal maddelerin özelliklerini belirlemede nasıl kullanılacaklarını tekrar düşünmek gerektiğini ortaya koymuştur. Bütün bu sebeplerden dolayı son yıllarda karakteristik polinomdan başka polinomların arayışı içine girilmiştir. Bu amaçla yeni bir matris geliştirilmiş ve bu matrise ait polinom tanımlanmıştır. Matrise "atom bağlantı matrisi", polinoma ise "atom bağlantı matrisi karakteristik polinomu"

adı verilmiştir. Kısaca ACMAP harfleri ile sembolize edilen bu polinom, gerçekten de ait olduğu kimyasal maddeye özgü ve tekdir. Farklı maddeler için aynı matrisin, polinomun ve aynı özdeğer spektrumunun elde edilmesi mümkün değildir(5).

Atom bağlantı matrisi yazılırken ilk olarak kimyasal maddedeki her atomun sembolü belirli bir sıra ile asal köşegenin elemanları olarak yerleştirilir. Daha sonra moleküldeki bütün bağlar için bağlantı değerleri belirlenir ve matrise yerleştirilir. Tek bağlar için bir değeri, çifte bağlar için iki değeri kullanılarak atomlar arasındaki bağlantılar matrisin uygun elemanları olarak yazılır.

2.7. TOPOLOJİK İNDİSLER

Topolojik indisler, karakteristik polinomlardan elde edilen ve her kimyasal madde için özel olan sayılardır. Bu sayılar, yapı-aktivite çalışmalarında değişik maddelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini belirlemeye yardımcı olduğundan ve birbirleriyle kıyaslama olanağı sağlandığından önemlidirler. Topolojik indislerin geliştirilmesi çalışmalarında kullanılan yöntemler genellikle topolojik özelliklerin sayılmasına dayanır.

2.7.1. Wiener İndisi

Bu indise (2,3) "Wiener sayısı" dendiği gibi "Yol sayısı" adı da verilir. Kimyasal maddelerin hidrojeniz grafiğinde bulunan bütün atom çiftleri arasındaki bağların toplam sayısı olarak tanımlanabilir. Wiener İndisi;

$$W = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n d_{ij} \quad (2.4)$$

formülü ile gösterilir. D matrisinin elemanı olan d_{ij} , i ucundan j ucuna kadar olan en kısa yolda bulunan bağ sayısı olarak

tanımlanır. W, Wiener indisini göstermektedir. Sadece zincir şeklindeki hidrokarbonlar için W ve karbon atomlarının sayısı n arasında aşağıdaki şekilde bir bağıntı yazılabilir.

$$W = (n^3 - n)/6 \quad (2-5)$$

2.7.2. Altenburg Polinomu

Altenburg (2,3), kimyasal bir grafiğin karakteristik polinomu olarak aşağıdaki ifadeyi önermiştir.

$$y = \sum_{i=1}^n n_i d_i \quad (2-6)$$

Bu ifade de n_i ; d_i bağları ile bağlanmış olan atom çiftlerinin sayısını göstermektedir.

2.7.3. Gordon Indisi

Gordon (3,6), hidrokarbonlardaki moleküler dallanmayı gösterebilmek için üç atomlu grupları saymaya dayanan bir yöntem geliştirmiştir. Gordon Indisi , B_2 ;

$$B_2 = N_2/(n-1) \quad (2-7)$$

şeklinde tanımlanır. Bu eşitlikte n; karbon atomlarının sayısıdır. N_2 ise grafiğin iki tane üç atomlu grup içermesinin mümkün olabilen sayısıdır.

2.7.4. Hosoya İndisi

Hosoya (2,3) topolojik matrisin karakteristik polinomu-
na baęlı olan bir indis tanımlamıştır. Z harfi ile gösterilen
bu indis ardışık olmama sayısı P(k) ların toplamına eşittir.

$$Z = \sum_{k=0}^m P(k) \quad (2-8)$$

Ardışık olmama sayısı P(k), birbirine hiçbir zaman baęlı
olmayan k baęlarını seçebilme sayısıdır. Herhangi bir kimya-
sal grafik için;

$$P(0) = 1$$

$$P(1) = \text{Grafikteki kenar sayısı}$$

olarak alınır.

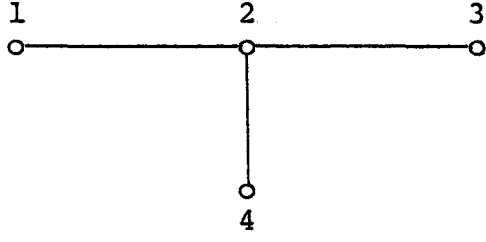
2.7.5. Smolenski İndisi

Smolenski İndisi ařaęıdaki formülle tanımlanır (2,6).

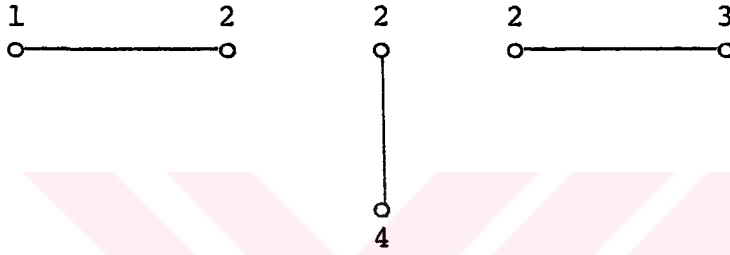
$$f(G) = a_0 + \sum_{k=1}^m a_k |X_k| \quad (2-9)$$

Bu formülde f(G), bir G kimyasal grafięinin smolenski in-
disidir. m, grafikteki kenar sayısı, a₀ ve a_k ise fiziko kim-
yasal özellikler için deneysel olarak belirlenmiş sabitler-
dir. Eşitlikteki X_k, grafięin k tane kenar içeren herhangi bir
bölgesini ifade eder. Smolenski indisi bu formüle göre, müm-
kün olan kenar sıralarının toplanması ve herbirinin uygun bir
sabitle çarpılmasından elde edilir.

İzobütanın Kimyasal Grafiği ;

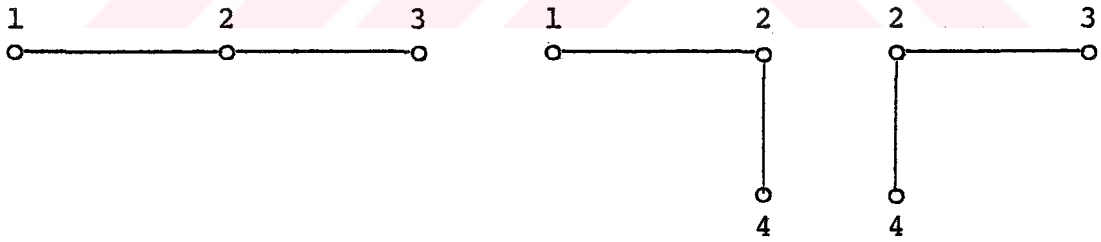


Uzunluğu 1 olan yolların sayısı ;



$$|X_1| = 3$$

Uzunluğu 2 olan yolların sayısı ;



$$|X_2| = 3$$

Smolenski Fonksiyonu

$$f(G) = a + 3a_1 + 3a_2$$

Şekil 2.10. İzobütan için Smolenski İndisi.

Smolenski indisi, özellikle moleküllerin toplanabilir özelliklerinin bulunmasında çok iyi sonuç verir. Bu indisin kimyasal maddelerin yapısına doğrudan doğruya bağlı olduğu çok açıktır.

Küçük sayıda örnek moleküller üzerinde yapılan deneysel çalışmalar sonucunda a_0 'dan a_m 'e kadar fizikokimyasal sabitler belirlenebilirse diğer moleküllerin özellikleri de bu indisler yardımıyla bulunabilir.

2.7.6. CR-İndisi

CR-İndisi (2,6) son yıllarda geliştirilen topolojik indislerden biridir. Bu indis, kimyasal grafiklerde uçlar arasındaki topolojik uzaklıkların kullanılması ile yazılan topolojik matrislerden elde edilir. İndisi bulmak için elde edilecek matris önce polinoma dönüştürülüp daha sonra polinomun pozitif kökleri toplanarak CR-indisi elde edilir.

2.7.7. 0'ncı Mertebe (X^0) İndisi

$$X^0 = \sum_{i=1}^n \delta_i^{-1/2} \quad (2-10) \text{ bağıntısı sıfırcı mertebe in-}$$

disi ile tanımlanır (2,6).

Herbir karbon atomu üzerindeki valenslerin kareköklerinin tersinin toplamı sıfırcı mertebe indisini vermektedir.

2.7.8. Randic (X^1) İndisi

$$X^1 = \sum_{s=1} (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2} \quad (2-11) \text{ bağıntısı Randic indisi}$$

ile tanımlanır (2,6).

Herbir karbon atomu üzerindeki birbirine baęlı olan karbon atomlarının valenslerinin arpımının karekknn tersinin toplamı, Randic İndisini vermektedir.



III. POLİMERLERİN CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRÜNÜN TANIMI

Polimerlerdeki Camsı-Geçiş Temperaturü, dengede olmayan bir termodinamik olaydır; Isıl genleşme ve ısı kapasitesi gibi II.mertebeden özelliklerde bir süreksizliğin bulunduğu II. mertebeden bir termodinamik geçiş olarak tanımlanabilir. Fakat cam hali, iç düzenleme hızını kısıtlayan kinetik etkilerden dolayı dengede olmayan bir haldir.

Polimerler için ergime noktası, son kristalin ergidiği temperatur olarak tanımlanır. Diğer bir farklılık, gerçek ergime noktası sıcaklığının, polimerin nasıl ergidiğine bağlı oluşudur. Diğer farklılık ise, düşük molekül ağırlıklı maddelerin ergime sonucu, sıvı hale geçmeleri yanında, polimerlerin viskozitesi yüksek akışkanlar haline geçmeleridir.

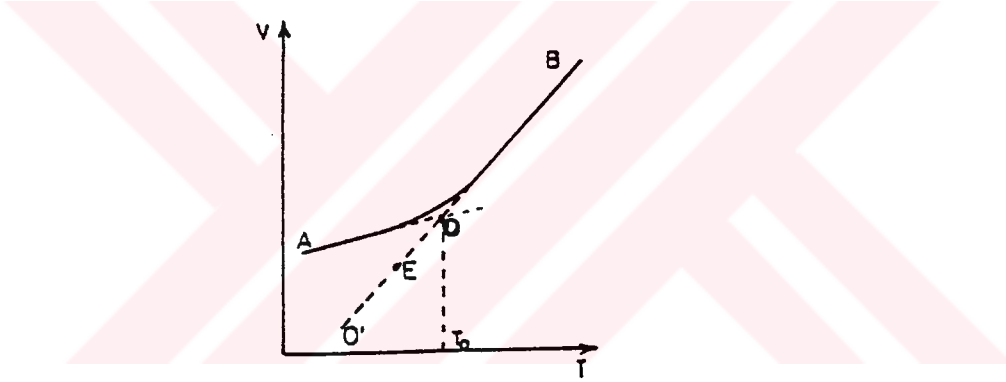
Amorf yapıdaki polimerlerin meydana getirdikleri geçiş ise çok farklıdır. Amorf yapıdaki bir polimer, belirli bir karakteristik temperaturden daha düşük sıcaklıklardan itibaren ısıtılmaya başlanırsa, spesifik hacimde sabit bir hızla artar ve sıcaklıkla hacim değişimini gösteren eğride bir süreksizlik oluşur. Amorf polimerler, karakteristik temperaturün altındaki sıcaklıklarda cam halindeyken, bu sıcaklığın üzerindeki sıcaklıklarda yumuşak ve bükülebilir bir hale gelirler. Bu geçiş, Camsı-Geçiş Prosesidir. Camsı-Geçiş'in gerçekleştiği karakteristik temperatur de, "Camsı-Geçiş Temperaturü" olarak isimlendirilir.

Camsı-Geçiş Temperaturünden daha düşük sıcaklıklarda, moleküllerin hareketleri çok yavaştır. Polimer zincirleri, düzensiz bir şebekenin belirli yerlerinde hemen hemen sabit durumdadırlar. Zincirler bu sabit yerlerde titreşim hareketi yapabilirler; fakat yerlerini değiştirmelerine olanak yoktur.

Camsı-Geçiş Temperaturünde polimerlerin bazı özellikleri değişmektedir. Bu özellikler sırası ile aşağıda açıklanmıştır.

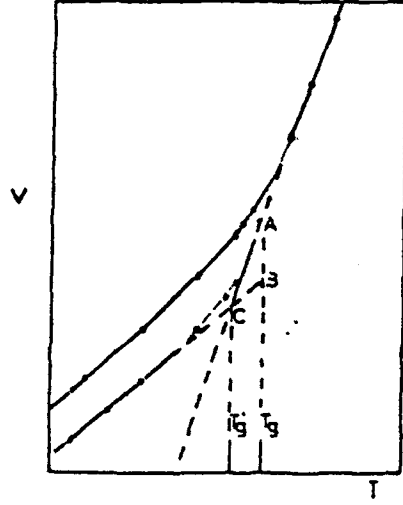
3.1. VOLUMETRİK ÖZELLİKLER

Amorf yapıdaki polimerlerin volumetrik özellikleri, Cam-sı-Geçiş Temperaturünde ani bir değişiklik gösterir. Bir polimerin spesifik hacmi, sıcaklığa karşı çizilecek olursa, Şekil 3.1 de gösterilen eğri elde edilir. Bu eğrinin eğimi, polimerin ısıl genişleme katsayısını verir. Cam-sı-Geçiş Temperaturüne erişildiğinde, katsayıda önemli bir değişim meydana gelir ve sonuçta belirli bir noktada kesişen iki doğru elde edilir. OB, polimerin elastik halini, AO ise cam halini göstermektedir. Doğrular birbirini Cam-sı-Geçiş Temperaturü denilen ve T_g ile gösterilen bir noktada keserler.



Şekil 3.1. Amorf polimerlerde spesifik hacim-sıcaklık eğrisi.

Cam-sı-Geçiş Temperaturünün değeri, polimerlerin soğutulma hızına bağlıdır. Bu nedenle hızlı soğutma ile elde edilen T_g , yavaş soğutma ile elde edilenden daha yüksek olur. Bunun nedeni, hızlı soğutma sırasındaki ölçümlerde elde edilen T_g değerlerinin, dengede olmayan değerler oluşudur. Hızlı soğutma işlemlerinde, gerçek değere erişmek için gereken süre bulunmamaktadır. Şekil 3.2 de, iki ayrı hızda gerçekleştirilen, soğutma ile yapılan ölçümlerin sonucuna göre çizilmiş olan polivinil asetat'ın spesifik hacim-sıcaklık eğrisi görülmektedir.



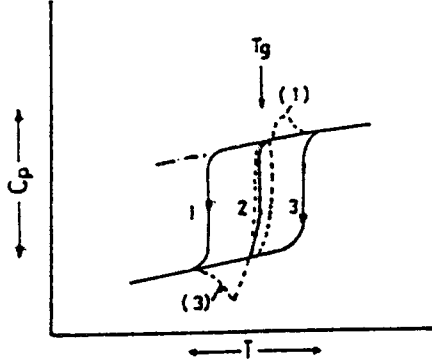
Şekil 3.2. Polivinil asetat'ın hacim-sıcaklık eğrileri.

Kısa zaman aralıklarında $V(t)$, spesifik hacim, düzenli bir şekilde azalır ve sonuçta $V(\infty)$ gibi bir denge değerine ulaşır. Sıcaklık, Camısı-Geçiş Temperaturü T_g 'ye yaklaştıkça, $V(\infty)$ a ulaşmak için daha uzun bir zaman gereklidir. Aslında denge değerlerini elde etmek için ∞ süre beklenmelidir. Fakat, kolaylık sağlaması amacıyla, Camısı-Geçiş Temperaturü ölçümlerinde belirli bir süre seçilebilir. Kovacs (7), bu süreyi üç dakika olarak önermiştir.

3.2. TERMODİNAMİK ÖZELLİKLER

3.2.1. Spesifik Isı Kapasitesi

Amorf yapıdaki bir polimerin ısı kapasitesi, C_p , azalan sıcaklıkla birlikte azalır. Isı kapasitesinde ani bir değişimin görüldüğü temperatur, polimerin Camısı-Geçiş Temperaturüdür. Şekil 3.3. den görüldüğü gibi, Camısı-Geçiş Temperaturünün altındaki temperaturlerde bulunan ısı kapasitesi değerleri, Camısı-Geçiş Temperaturünden daha yüksek sıcaklıklardaki ısı kapasitelerinden, daha küçüktür. Bu gerçek, Camısı-Geçiş Prosesi ile gerçek bir ikinci mertebeden termodinamik geçiş arasındaki en önemli farklardan biridir. İkinci mertebeden termodinamik geçişlerde ise bunun tam tersi gözlenir.



----- NORMAL ISITMA
—— DENGE EĞRİSİ

Şekil 3.3. Polimerlerin ısı kapasitesinin sıcaklıkla değişimi.

- (1) Yavaş soğutma,
- (2) Normal soğutma,
- (3) Hızlı soğutma.

Camsı-Geçiş Temperaturünün soğutma hızına bağımlılığı, Şekil 3.3. de görülmektedir. Değişik soğutma hızları ile değişik eğriler ve buna bağlı olarak da değişik Camsı-Geçiş Temperaturleri elde edilir. Camsı-Geçiş Temperaturünde, ısı kapasitesinde meydana gelen değişim, büyüklük olarak her polimer için farklıdır (8).

3.2.2. Entalpi

Camsı-Geçiş Prosesi sırasında değişen özelliklerden biri de entalpi'dir. Entalpi, sıcaklıkla artar ve aynı zamanda Camsı-Geçiş Temperaturünde ani bir değişim gösterir. Volumetrik özelliklerde olduğu gibi entalpi değeri de, aynı şekilde, soğutma veya ısıtma hızlarına bağlıdır.

Cam halindeki polimer denge, haline kıyasla, aşırı miktarda entalpi ve hacme sahiptir. Bu nedenle, bu özelliklerin de-

ğerini azaltmaya eğilimi vardır. Camsı-Geçiş Temperaturünün altındaki sıcaklıklarda, tavlama işlemi bu büyüklükleri azaltmak için kullanılan en iyi yöntemdir. Yapılan tavlama işlemi, camı daha yoğun bir hale getirir; entalpisini ve maddenin mekanik olarak sertliğini azaltır. Bu işlem, aynı zamanda, cam halindeki polimerlerde gazların çözünürlüğünü azaltır (9).

3.2.3. Entropi

Polimerlerin cam hali, termodinamiğin üçüncü kanununa uymaz. Diğer bir deyişle, camın entropisi mutlak sıfır noktasında sıfıra eşit değildir. Camın mutlak sıfırda sahip olduğu entropiye, "artık entropi" (S_O^g) denir ve aşağıdaki eşitlikle gösterilir.

$$S_O^g = S^g - S^c \quad (3-1)$$

Yukarıdaki eşitlikte; S^g camın entropisini, S^c ise kristalin entropisini göstermektedir. Posoğlia ve Kevorkian (10) polipropilenin artık entropisini 0.62 ± 0.2 e.v olarak bulmuşlardır.

3.2.4. İç Basınç

Polimerlerin Camsı-Geçiş Temperaturünde değişiklik gösteren diğer bir özelliği, iç basınç, P_i dir. İç basınç;

$$P_i = (\partial E / \partial V)_T = T(\partial S / \partial V)_{T-P} \quad (3-2)$$

eşitliği ile tanımlanır. Bu eşitlikte; P , atmosfer basıncını göstermektedir. P_i , Camsı-Geçiş Temperaturünde ani bir artış gösterir. İç basınç, deneysel olarak sabit hacimde, basınç ve sıcaklık arasındaki bağıntı yardımı ile bulunabilir. Bu bağıntı, aşağıdaki eşitlik ile gösterilmektedir.

$$P_i = T(\partial P/\partial T)_{V-P} \quad (3-3)$$

Atmosfer basıncı, P, iç basınç yanında ihmal edilir ise, eşitlik;

$$P_i = \frac{T \alpha}{\beta} \quad (3-4)$$

şekline indirgenmiş olur. Bu eşitlikte α , ısı genleşme katsayısı, β ise sıkıştırılabilirlik katsayısıdır. Eşitlik (3-4)ün kullanımı ile poliizobütilenin iç basıncının camı halden kauçuksu hale geçerken 3490 atm. den 5910 atm.e arttığı hesaplanmıştır (7).

3.3. MEKANİK ÖZELLİKLER

Mekanik özelliklerden dolayı doğal ürünler yerine polimerik maddelerin kullanılması hızlanmıştır. Polimer örneği belirli bir doğrultuda gerilir ve kopma noktasına gelinceye kadar ki uzaması sırasında davranışı gözlenir. Bir polimerin mekaniksel davranışları, gerilme-gevşeme (stress-strain) özelliklerinden yararlanılarak incelenir. Gerilme, polimer örneğinin birim alanına uygulanan kuvveti, gevşeme ise, polimer örneğinin bu kuvvetin etkisi ile uzamasını belirtir.

Sentetik polimerlerden, sert camı reçineler, yumuşak yapıştırıcılar, kuvvetli fiberler, kauçuk davranışı gösteren elastomerler, dayanıklı kaplayıcılar gibi çok değişik amaçlar için kullanılan maddeler yapılabilir. Sentetik polimerlere kazandırılan bu üstün özellikler, bu tür maddelerin mekanik özelliklerine dayanır.

Sentetik plastiklerin mekanik davranışları, elastomerler ile fiberler arasında yer alır. Sentetik liflerin mekanik davranışları elastomerlerden farklıdır.

Genel olarak polimerlerin mekanik davranışları, kristallilik derecesine ve polimer zincirleri arasındaki çekim kuvvet-

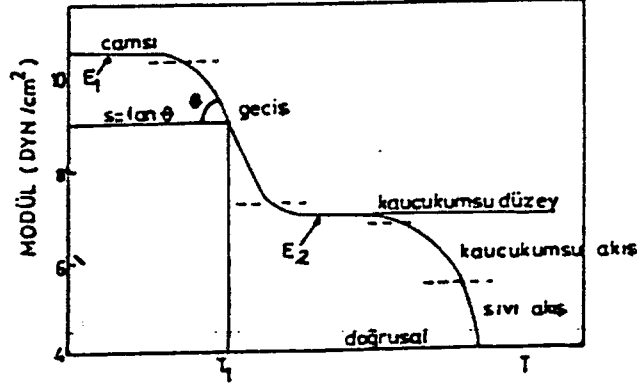
lerinin büyüklüğüne bağlıdır. Düşük gerilimler altında bulunan bir polimerin mekanik özellikleri, zamana ve sıcaklığa bağlı olarak değişir. Polimerik bir maddeye önce ani bir kuvvet uygulanır ve sabit sıcaklıkta tutulur ise; bu gerilimin oluşturduğu gerilme de zamana bağlı olarak azalır.

Dinamik ölçümlerde polimerik maddeye bir başlangıç gerilimi uygulanır. Gerilim kaldırıldığında madde titreşmeye başlar ve titreşimlerin genliği ölçülür. Yapılan denemelerde titreşim genliğinin zamanla azaldığı saptanmıştır (11).

Düşük gerilimler altında bulunan viskoelastik maddeler için bu özellik, gerilme-gevşeme modülü, $E_r(t, T)$ ile tanımlanmıştır. Bu modül;

$$E_r(t, T) = \frac{f(t, T)}{S(0)} \quad (3-5)$$

eşitliği ile gösterilir. Bu eşitlikte, $f(t, T)$, zaman ve sıcaklığın bir fonksiyonu olan gerilim (stress)i, $S(0)$ ise başlangıç anında maddeye uygulanan gevşeme (strain) i göstermektedir. Gerilme-gevşeme modülü zaman veya sıcaklık sabit tutularak, sıcaklığın veya zamanın bir fonksiyonu olarak ölçülebilir. Bu konuda yapılan çalışmalarda, genellikle deneyler sabit sıcaklıkta gerçekleştirilir. İlk olarak, değişik sıcaklıklarda bir seri deneme yapılarak, gerilme-gevşeme modülünün sıcaklıkla, nasıl değiştiği saptanır. Daha sonra, belirli bir zaman aralığı seçilir ve seçilen bu zaman skalası için modül, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak çizilir. Bu tür denemelerde zaman aralığı, yaklaşık olarak 10s. alınmaktadır. Şekil 3.4 de yüksek molekül ağırlığı fazla olan bir polimerin, gerilme-gevşeme modülünün sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir.



Şekil 3.4. Yüksek Molekül Ağırlıklı Polimerin Gerilme-Gevşeme Modülünün Sıcaklıkla Değişimi.

Doğrusal yapıdaki polimerlerin, modül-zaman ve modül-sıcaklık eğrileri birbirinin aynıdır. Viskoelastik davranışlara göre bu eğri beş ayrı bölgeye ayrılmaktadır.

Eğrilerin şekillerinin aynı oluşu, zaman ve sıcaklığın gerilme-gevşeme modülü üzerinde aynı etkiye sahip olduklarını göstermektedir.

3.4. ELEKTROMAGNETİK ÖZELLİKLER

Camsı-Geçiş Temperatüründe polimerlerin elektromagnetik özellikleri de bir değişim gösterir. Polimere etkiyen elektriksel kuvvetler değiştirilecek olursa, polimer bu değişime belirli bir süre sonra karşılık gösterir. Polimer molékülleri, yeni oluşan dielektrik polarizasyon ile dinamik dengeye ulaşabilmek için dönme hareketleri yaparlar. Polimerik maddenin içinde bu polarizasyonun gerçekleşmesi için belli bir süreye ihtiyaç vardır. Bu süreye "dielektrik gevşeme süresi" adı verilir. Camsı-Geçiş Temperatürü civarında "dielektrik gevşeme süresi" nde ani değişimler olur.

Polimerler için karmaşık dielektrik sabiti, (ϵ^x) tanımlanmıştır. Bu sabit; (11)

$$\epsilon^x = \epsilon' - i\epsilon''$$

(3-6)

eşitliği ile gösterilir. Kayıp tanjantı

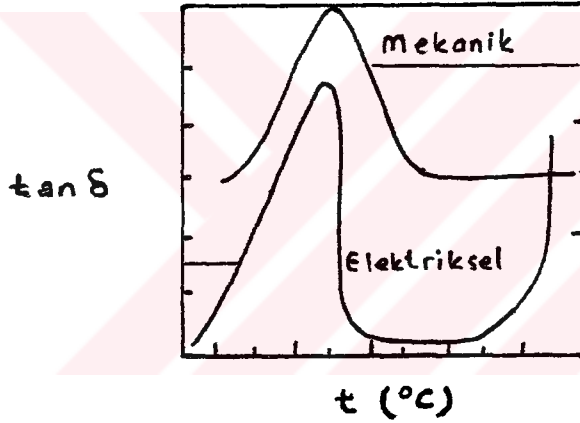
Kayıp tanjantı: $\tan \delta = \epsilon''/\epsilon'$ dır.

Bu eşitlikte;

ϵ' = 1.ci dielektrik sabiti

ϵ'' = 2.ci dielektrik sabitidir.

Dielektrik kaybının sıcaklıkla değişimi Şekil 3.5.de gösterilmiştir. Genellikle bu tip grafiklerde iki veya üç pik bulunmaktadır. En büyük pik Camısı-Geçiş Temperaturünde oluşur.



Şekil 3.5. Dielektrik kaybının sıcaklıkla değişimi.

Gupta ve Chand (12) poliakrilonitril örneklerinde 30-150°C aralığında dielektrik gevşemeyi ölçmüşler ve yapılan çalışmalar sonunda dielektrik sabiti ϵ' nün 90°C ta kadar sıcaklıkla değişmediğini, daha sonra ise sıcaklıkla birlikte arttığını söylemişlerdir.

3.5. CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRÜNE ETKİYEN PARAMETRELER

Camsı-Geçiş Temperaturüne etkileyen pek çok parametre bulunmaktadır. Bu parametreler aslında iki kısımda incelenebilir; moleküler parametreler ve kontrol edilebilen parametre-

ler . Bu kısımda moleküler parametrelerden zincir sertliđi, iç seyreltici ve moleküller arası kuvvetler; kontrol edilebi- len parametrelerden ise, basınç, seyreltici konsantrasyonu, moleköl ađırlılıđı, çapraz bađ oluşumu, hız, frekans, kopolimer oluşumu ve baskı incelenecektir.

3.5.1. Zincir Sertliđi

Camsı-Geçiş Prosesinde, polimer zincirleri ile komşu atomlar devamlı olarak etkileşim içerisinde. Polimer zin- ciri boyunca yer alan komşu atomlar polimer molekölünün dönme- sine engel olan bir enerji oluştururlar. Camsı-Geçiş Tempera- türüne gelindiđinde, molekölün bu engeli aşması için yeterli ısı enerjisinin olması gerekir.

Polimerik yapıdaki bir maddenin zincir sertliđine etki edebilen iki önemli faktör vardır. Bunların birincisi "iç ha- reketlilik" tir. İç hareketlilik ana zincirin kolayca dönüp dönmediđini gösterir.

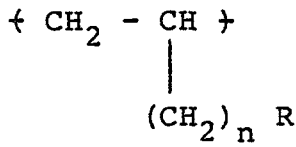
Polimer zincirlerine yan grupların katılması sonucu zin- cirdeki sertlik artar. Zincirdeki bu sertlik geometrik sert- lik olarak bilinir. Yan grup katılmadan önceki bükülebilme enerjisi ile yan grup katıldıktan sonraki bükülebilme enerji- si arasındaki fark düşürölmektedir. Aromatik grupların (polis- tirende olduđu gibi) hidrojenlerle yer deđiştirmesi sonucu mo- lekölde bükülmezlik meydana gelir. Bu olay moleköl çevresinde bulunan komşu atomların etkisi ve moleküllerin kendi iç hare- ketlerinin azalmasından kaynaklanmaktadır.

3.5.2. İç Seyreltici

Yan zincirlerin varlıđı her zaman Camsı-Geçiş Temperatü- rünü arttırmaz. Yan zincirlerin etkisi aynı zamanda bađlanan grubun veya bađlanılan grubun bükülebilirliđine de bađlıdır. Örneđin; tersiyer butil gruplarının Camsı-Geçiş Temperatürünü

arttırmasına karşın, sekonder butil grupları Camsı-Geçiş Temperatürünü düşürmektedir.

Sert yan grupların sebep olduğu geometrik sertliğin giderilmesi için, bu gruplar ile zincir arasına bükülebilen zincir sokulur. Dunhom ve arkadaşları (7), bir seri poliolefin üzerinde çalışmışlar ve,



formülünde görüldüğü gibi zincire takılı bulunan metilen grupları sayısı n' in artması ile Camsı-Geçiş Temperatürünün düşüğünü görmüşlerdir. Burada R, sekonder butil, tersiyer butil, çikloheksil ve fenil grubu olabilir.

Uzun ve bükülebilen zincirler "iç seyreltici" olarak tanımlanır. Bu seyrelticiler zincirler arasındaki sürtünmeyi azaltarak Camsı-Geçiş Temperatürünü düşürürler. Belirli bir zincir uzunluğuna gelindiğinde zincir kristalizasyonu başlar. Bu da zincirin sertleşmesine neden olur. Zincir kristalizasyonu başlamadan önce Camsı-Geçiş Temperatüründe bir artış gözlenir. Zincir kristalizasyonu başladığında ise Camsı-Geçiş Temperatüründe görülen bir artış belli bir değerden sonra yavaşlar ve durur.

3.5.3. Moleküller Arası Kuvvetler

Moleküller arasındaki kuvvetlerin Camsı-Geçiş Temperatürü üzerindeki etkisi, değişik bilim adamları tarafından incelenmiş ve incelemeler sonunda birbirini tamamlayıcı bilgiler elde edilmiştir.

Tobolsky ve Shen (13), 2-hidrosetilmetakrilat (HEMA) ile etilmetakrilat, n-propilmetakrilat ve metaksietil metak-

rilat arasında kopolimerler oluşturarak, bu kopolimerlerin aynı özellikleri gösterdiğini saptamışlardır. Aralarındaki tek fark, 2-hidroksietilmetakrilat'ın hidrojen bağları yapabilmesidir. Zincirdeki HEMA miktarının artışı dönme için gerekli ısıyı yükseltmektedir.

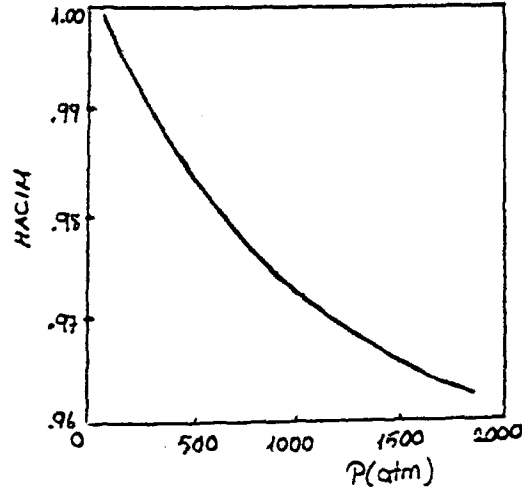
Moleküller arası kuvvetler içerişindeki iyonik etkileşimler, hidrojen bağlarından daha güçlüdür. Fitzgerald ve Nielsen (14) tarafından, bazı polimer asitlerinin oluşturduğu tuzlarda, viskoelastik özellikler incelenirken, metalik iyonların katılması sonucu, Camısı-Geçiş Temperaturünün arttığı gözlenmiştir. Ayrıca iyon yüklerinin artışı da Camısı-Geçiş Temperaturü, T_g 'yi arttıran bir faktördür.

Gibbs-Di Marzio Teorisi (14), moleküller arası kuvvetlerin Camısı-Geçiş Temperaturü, T_g üzerinde önemli bir etkisi olmadığını belirtir. Oysa, burada moleküller arası kuvvetlerin büyük önemi vardır. Bu da polimer zincirlerinin, komşu moleküller ve zincirler ile etkileşimi sonucu ortaya çıkan, moleküller arası kuvvetlerin büyük rol oynadığını gösterir.

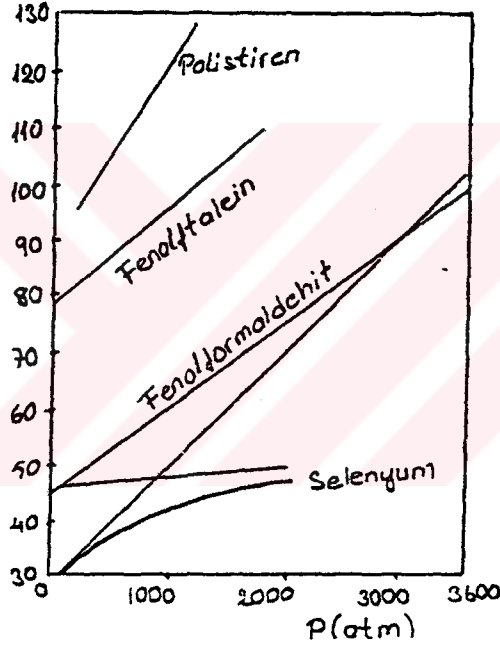
3.5.4. Basıncın Etkisi

Camısı-Geçiş Proseslerinde, polimer örneklerine basınç uygulanarak bir takım çalışmalar yapılmıştır. Basıncıdaki artış, hacmin daralmasına sebep olmakta, dolayısıyla moleküler etkileşimler artmaktadır. Diğer yönden basınçtaki artış Camısı-Geçiş Temperaturünün yüksek değerlere kaymasına neden olmaktadır.

Sıcaklığın düşürülmesi ve basıncın arttırılması amorf polimer örneğini etkiler. Basıncın artışı zincir parçalarındaki hareketliliği azaltarak, serbest hacmin düşmesine sebep olur (15). Hacim-basınç arasındaki ilişki Şekil 3.6 da, basınç-sıcaklık arasındaki ilişki ise Şekil 3.7 de gösterilmiştir.



Şekil 3.6. Camsı-Geçiş Prosesinde basıncın bir fonksiyonu olarak selenyumun hacmi (7).



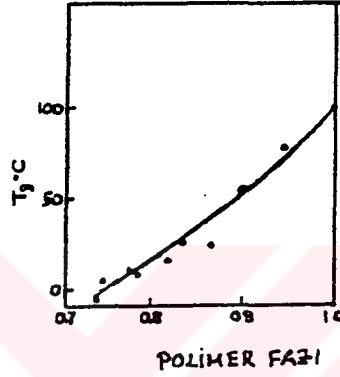
Şekil 3.7. Bazı maddeler için basınç ile sıcaklık arasındaki ilişki (7).

Şekil 3.6 da yüksek basınç ve düşük basınçlarda eğimleri farklı olan iki doğrunun kesişimi şeklinde kırık bir doğru elde edilmektedir. Bu durum basınç arttırıldıkça, hacmin azaldığını gösterir. P-V arasında, doğrusal bir bağıntı vardır.

Şekil 3.7 de P-T alanındaki gösterim Camsı-Geçiş Temperaturünün basınç ve sıcaklık ile değişimini göstermektedir.

3.5.5. Seyreltici Konsantrasyonu

Seyrelticilerin polimerler üzerindeki etkisinin açıklanması için geçmişte geniş çalışmalar yapılmıştır. Düşük molekül ağırlıklı bir madde yüksek bir polimere katıldığında polimerin Camısı-Geçiş Temperaturü düşer. Kelly ve Buechel (16) nin polimetil-metakrilat-dimetil ftalat sistemi üzerindeki çalışmalarından elde ettikleri eğri Şekil 3.8 de görülmektedir.



Şekil 3.8. Seyrelticilerin Camısı-Geçiş Temperaturüne etkileri.

Seyrelticiler Camısı-Geçiş Temperaturünü, $T_g(\text{Polimer}) - T_g(\text{Çözücü})$ farkı ile orantılı olarak düşürür ve T_g üzerindeki serbest hacmi arttırır. Camısı halde ise Camısı-Geçiş Temperaturünü düşürmeye meyillidirler. Modül ve sertliği arttırırlar. Genelde, uygun seçilen seyrelticiler, moleküller arasındaki titreşimi azaltarak veya yok ederek molekül içi etkileşimlerinin incelenmesine olanak sağlarlar.

3.5.6. Moleküler Ağırlık

Polimerlerde molekül ağırlığının etkisi konusunda ilk geniş çaplı araştırma 1950 yılında polistiren üzerinde yapılmıştır. 1950 yıllarından sonra değişik sistemler üzerindeki çalışmalar sürdürülmüştür (Polimetil metakrilat, poliakrilonitril, polipropilen, vs.).

Molekül ağırlığından kaynaklanan etkilerin kinetik yönden açıklanması kolaydır. İçinde fazla miktarda zincir uçları bulunan belli bir polimer örneğindeki gevşeme süresinin, zincir ucu bulundurmayan bir polimer örneğinin gevşeme süresi ile aynı noktaya ulaşması için ilk örneğin daha fazla soğutulması gerekir. Diğer bir anlatımla Camsı-Geçiş Temperaturü moleküler ağırlık ile doğru orantılıdır.

Polimerlerde molekül ağırlığının artması sonucu Camsı-Geçiş Temperaturü önce çok hızlı bir artış gösterir. Daha sonra yavaşlar ve en sonunda sabit bir değere ulaşır (17).

Bir polimerin Camsı-Geçiş Temperaturünün sabit kaldığı moleküler kütle, polimerin kinetik zincir esnekliğine bağlıdır. Çok esnek zincir yapısına sahip polimerlerde (poliizobutilen gibi) $M = 1,000$ dan itibaren Camsı-Geçiş Temperaturü sabit kalır. Esnekliği az olan zincirler bulunan polimerlerin Camsı-Geçiş Temperaturleri yüksektir. Bu polimerler yüksek sıcaklıklarda daha yüksek-esneklik özelliklerine sahip olmazlar. Bu durumda polimerin yumuşaması közkonusudur. Yani polimer camsı durumdan viskoz-sıvı hale doğrudan geçiş gösterir.

3.5.7. Kopolimer Bileşimi

Kopolimerlerin endüstriyel önemi arttıkça kopolimerlerin Camsı-Geçiş Temperaturleri üzerindeki çalışmalarda artmıştır. Bu çalışmalarda Camsı-Geçiş Temperaturü bileşimin bir fonksiyonu olarak incelenmiştir. Bazı kopolimer bileşimlerinden önce Camsı-Geçiş Temperaturü azalmakta daha sonra yeniden bir artış göstermektedir; bazılarında ise, çok düşük oranlarda bir azalma olmaktadır (7).

Ticari kopolimerler, çok seyrek olarak Camsı-Geçiş Temperaturüne bakılır ve öyle seçilir. Yine ticari amaçlar için, vinilidin klorür-vinil klorür kopolimerleri sıcaklığa karşı hassas olan homopolimerlerin erime noktasını düşürmek için kullanılır. Stiren-akrilonitril'deki akrilonitril, çözücü da-

yanıklılığını ve direncini artırır. Ayrıca Camsı-Geçiş Temperatüründe çok az bir artışa neden olur.

3.5.8. Çapraz Bağlanma

Çapraz bağlamanın yapılan çalışmalar sonucunda Camsı-Geçiş Temperatürünü artırdığı gözlenmiştir. Kinetik açıdan bir çapraz bağın oluşması ile polimer parçasının hareketliliği azalır ve Camsı-Geçiş Prosesine doğru gidiş gözlenir.

Pratik açıdan önemli olan elastomerik maddelerin hemen hemen tamamında, kullanıldıkları sıcaklık aralığının büyütülmesi için belli derecelerde çapraz bağ oluşturulur. Çapraz bağlanan polimerlerde akış sıcaklığının üzerinde çapraz bağlanmalar oluşuyorsa polimer visko-sıvı hale geçer, çapraz bağlanma arttığında polimerde akış gözlenmez ve polimer visko-sıvı halden esnek hale, daha sonra da camsı hale geçer. Eğer, çapraz bağlanmalar akış sıcaklığının altında oluşuyorsa (yani esnek halde iken), polimer visko-sıvı hale geçemez. Daha fazla ısıtma ile çapraz bağ yoğunluğunun artması sebebiyle esnek gerilme azalır ve polimer camsı hale geçer. Böylece çapraz bağlanan bir polimer iki fiziksel halde bulunabilir; Birincisi çok yüksek bir esnek hal, ikincisi de camsı haldir.

Genelde poli(glikoldimetakrilat)lar gibi çapraz bağlayıcılar kopolimer etkisi ile Camsı-Geçiş Temperatürünü düşürmek istese bile, çapraz bağların oluşumu Camsı-Geçiş Temperatürünü yükseltir (18).

3.5.9. Hız veya Frekans Etkileri

Hızın Camsı-Geçiş Temperatürü üzerindeki etkileri Tool (7) tarafından geniş bir şekilde incelenmiştir. Tool (7), Camsı-Geçiş Temperatürünün soğutma hızının bir fonksiyonu olduğunu göstermiştir. Ferry (7), tarafından Camsı-Geçiş Temperatü-

ründeki değişimi;

$$d\Delta T_g/d \log a_T \approx C_2/C_1 \approx 3^0 \quad (3-7)$$

eşitlikle gösterebiliriz. Bu değişimdeki eşitlikte C_2 ve C_1 soğutma hızları, a_T , sabittir.

A.F.Lewis ve O.G.Lewis (7), Dinamik Camsı-Geçiş Prosesi- ni açıklarken bazı korelasyonlar kurmuştur. Kurulan korelas- yonların birleştirilmesi sonucunda Dinamik Camsı-Geçiş Prose- si ile Statik Camsı-Geçiş Prosesi arasında;

$$\Delta H_a = \frac{46,4 T_g - 955}{1,048 - 2,35 \cdot 10^{-3} T_g} \quad (3-8)$$

ve

$$\Delta H_a = \frac{77,6 T_g - 3030}{0,94 - 1,55 \cdot 10^{-3} T_g} \quad (3-9)$$

eşitlikleri bulunmuştur.

3.5.10. Baskının Etkisi

Baskının etkisini araştırmak için, çeşitli deneysel tek- nikler kullanılmış; ancak, değişik sonuçlar elde edilmiştir. Örneğin kauçukları Camsı-Geçiş Temperatürlerinin baskı ile ba- zen arttığı, bazen azaldığı, bazen de değişmediği gözlenmiş- tir. Yapılan hesaplamalarda hacimde değişiklik olmadığı ka- bul edilerek yapılmış, hacimdeki değişiklikler serbest hacim olarak düşünülüp baskının etkisiyle Camsı-Geçiş Temperatürün- de bir düşüş görülmüştür. Simha-Boyer (9) denklemine göre T_g deki bu düşüş,

$$\Delta T = -\Delta V(\alpha_r - \alpha_g) \quad (3-10)$$

şeklinde ifade edilmektedir.

Bu eşitlikte;

α_r , kauçuk; α_g , cam; V , relatif hacim büyümesi; α , genişleme katsayısıdır.

Termodinamik ve serbest hacim teorilerinin (7) değerleri arasında çelişki bulunmaktadır. Bu çelişki, gerilmiş kauçuklardaki Camsı-Geçiş Prosesinin, azalan yapısal entropi ve artan serbest hacim kesri arasındaki çekişme ile gerçekleştiği düşüncesini getirir. Oysa tek bir iç parametre Camsı-Geçiş Prosesini açıklamak için yeterli olmayabilir.

IV. İNDİS HESAPLARI

4.1. CR-İNDİSİNİN HESAPLANMASI

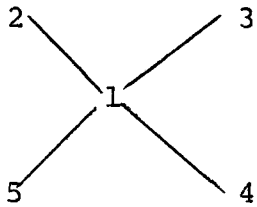
CR-İndisi son yıllarda geliştirilen topolojik indislerden biridir. Bu indis, kimyasal grafiklerde uçlar arasındaki topolojik uzaklıkların kullanılması ile yazılan topolojik matrislerden elde edilir. İndisin bulunması için matris önce polinoma dönüştürülür ve daha sonra polinomun pozitif kökleri toplanarak indis elde edilir.

CR-İndisinin hesaplama yöntemi bu bölümde ayrıntılı olarak açıklanacak ve hesaplamanın ayrıntıları örnek bir molekül üzerinde gösterilecektir.

4.2. KİMYASAL GRAFİKLERİN ÇİZİLMESİ

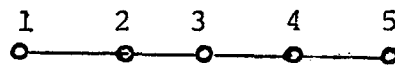
Moleküle ait hidrojeniz yapısal grafik çizildikten sonra, kimyasal grafik üzerindeki her noktaya ait valens değerleri hesaplanır. Valens; grafik üzerindeki herhangi bir V_i yi uç kabul eden kenarların sayısına eşittir. Ancak heteroatomlar için Tablo (4.1) de belirtilen değerlerden faydalanılır.

Şekil 4.1 de gösterilen grafikteki birinci uç için valens 4; 2. 3.4. ve 5 uçlar için valens 1'dir.



Şekil 4.1.

Yapısal Grafik



Şekil 4.2 Kimyasal Grafik

Şekil 4.2 de 1. ve 5.uçlar için valens 1; 2.3. ve 4.cü uçlar için valens 2'dir.

Tablo 4.1. Heteroatomların Valens Değerleri.

Grup	$d^{(*)}$
NH_4^+	1
$-\text{NH}_2$	3
$-\text{NH}-$	4
$-\text{N} = (\text{nitro})$	6
H_3O^+	3
$-\text{OH}$	5
$-\text{O}-$	6
$=\text{O}$	6
$-\text{F}$	-20
$-\text{Cl}$	0,69
$-\text{Br}$	0,254
$-\text{I}$	0,085

(*) : Heteroatomun valens değerini gösterir.

4.3. TOPOLOJİK MATRİSLERİN ELDE EDİLMESİ

Bu çalışma sırasında kullanılan topolojik matris $n \times n$ boyutundaki kare matrisdir. Matrisin elemanları i ve j uçları arasındaki topolojik uzaklıklardır. Bu uzaklıklar i ve j uçları arasındaki yol üzerinde bulunan bütün uçların valenslerinin çarpımının kare kökünün tersine eşittir.

$$a_{ij} = \sum_i^j (m.n.p.....z)^{-1/2} \quad (4-1)$$

Bu şekilde oluşturulan topolojik matrisin asal köşegeni üzerinde bulunan a_{ii} ve a_{jj} gibi elemanlar sifıra eşittir. Bunun sebebi aynı atomu birbirine bağlayan bir bağın olmayışdır.

Matrisin genel şekli,

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1} & \dots & \dots & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (4-2)$$

dir. Bu şekilde elde edilen topolojik matris bilgisayarlarda saklanır.

4.4. KARAKTERİSTİK POLİNOMUN ELDE EDİLİŞİ

Hesaplamanın diğer aşamasında topolojik matris karakteristik polinoma dönüştürülür. Polinoma dönüştürme işleminde uygulanan esas yöntem, matrisin bir determinant olarak düşü-

nülmesi, asal köşegen üzerindeki bütün terimler yerine X konulması ve daha sonra determinantın cebirsel yöntemlerle açılarak polinoma ulaşılmasıdır.

Bir A topolojik matrisinden P(X) polinomunun elde edilişi II. bölümde gösterilmiştir:

$$A \rightarrow \det|A+XE| = \sum_{i=1}^n k_i X^{n-i} \rightarrow P(X) \quad (2-3)$$

Determinantların açılmalarıyla ilgili olarak pek çok yöntem bulunmaktadır. Bu yöntemlerden bir tanesi de "Bocher Formülü" dür.

4.4.1. Bocher Formülü

Bocher formülüne göre matrisin trasaları kullanılarak polinomun katsayıları bulunur. Bir matrisin diagonal elemanlarının toplamına o matrisin trasası denir. Boyutları n x n ve elemanları a_{ij} olan bir A matrisinin trasası, $T_r(a_{ij})$ aşağıdaki eşitlikte gösterilmiştir (19).

$$T_r(a_{ij}) = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn} \quad (4-3)$$

A matrisinin kendisi ile k kare çarpımı A^k matrisi, bu matrisin trasası da T_k ise aşağıdaki eşitlikler yardımıyla polinomun katsayıları hesaplanabilir.

$$a_1 = -T_1$$

$$a_2 = -1/2(a_1 T_1 + T_2)$$

$$a_3 = -1/3 (a_2 T_1 + a_1 T_2 + T_3)$$

$$a_n = -1/n (a_{n-1} T_1 + a_{n-2} T_2 + \dots + a_1 T_{n-1} + T_n) \quad (4-4)$$

4.5. CR-İNDİSİNİN BULUNMASI

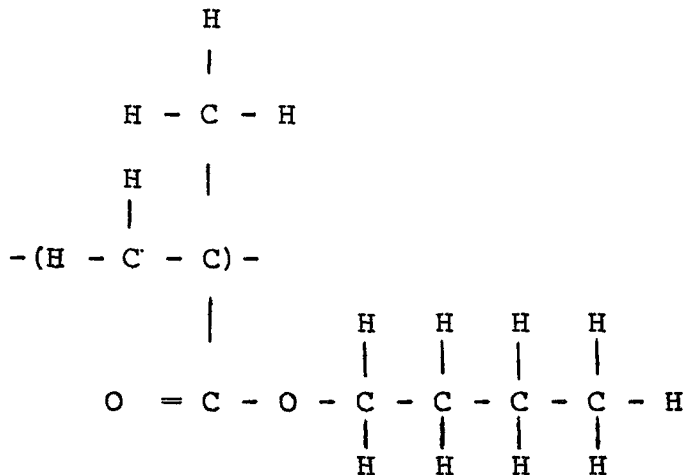
CR-İndisi her molekülü ayrı ayrı gösteren ve sadece o moleküle ait olan bir sayıdır. Bu indisin, bulunabilmesi için elde edilen karakteristik polinom çözülür. Daha sonra bu polinomun, asal kısmında yer alan pozitif köklerin toplanması sonucu, o moleküle ait olan CR-İndisinin değerini verir.

4.6. ÖRNEK HESAPLAMA

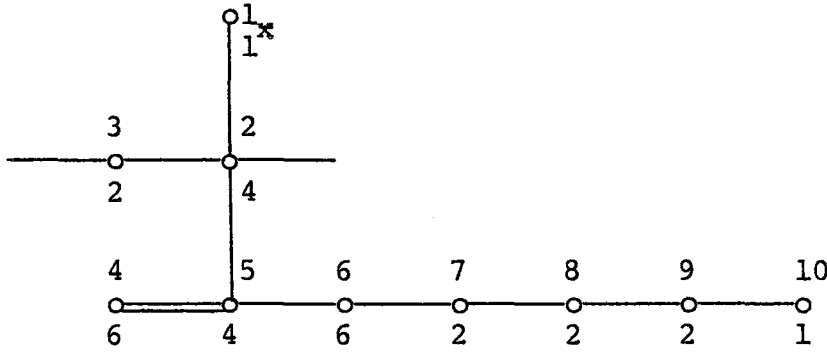
Bu bölümde (polin-butil metakrilat) molekülü için örnek bir hesaplama yapılmış ve her aşama ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

4.6.1. Kimyasal Grafiğin Çizilmesi

Poli n-butil metakrilat'ın yapısını gösteren açık formül;



Bu açık formüle göre molekülün hidrojeniz grafiği aşağıda olduğu gibidir.



Şekil 4.3 Hidrojeniz Yapısal Grafik

* Valens değerlerini göstermektedir.

Grafik çizildikten sonra grafikte yer alan atomlar numaralandırılır. Valens değerleri yani o karbon atomunu uç kabul eden kenarların toplam sayısı karbon atomlarının altına yazılarak gösterilmiştir.

4.6.2. Topolojik Matris

Poli n-butil metakrilat'a eşit olan topolojik matrisi yazmak için önce matrisin elemanları eşitlik (4-1) in kullanılmasıyla ayrı ayrı hesaplanır.

$$\begin{aligned} a_{11} &= 0 & a_{21} &= (4.1)^{-1/2} = 0,5 \\ a_{12} &= (1.4)^{-1/2} = 0,5 & a_{22} &= 0 \\ a_{13} &= (1.4.2)^{-1/2} = 0,354 & a_{23} &= (4.2)^{-1/2} = 0,354 \\ a_{14} &= (1.4.4.6)^{-1/2} = 0,102 & a_{24} &= (4.4.6)^{-1/2} = 0,102 \\ a_{15} &= (1.4.4)^{-1/2} = 0,25 & a_{25} &= (4.4)^{-1/2} = 0,25 \end{aligned}$$

$a_{16} = (1.4.4.6)^{-1/2} = 0,102$	$a_{26} = (4.4.6)^{-1/2} = 0,102$
$a_{17} = (1.4.4.6.2)^{-1/2} = 0,072$	$a_{27} = (4.4.6.2)^{-1/2} = 0,072$
$a_{18} = (1.4.4.6.2.2)^{-1/2} = 0,051$	$a_{28} = (4.4.6.2.2)^{-1/2} = 0,051$
$a_{19} = (1.4.4.6.2.2.2)^{-1/2} = 0,036$	$a_{29} = (4.4.6.2.2.2)^{-1/2} = 0,036$
$a_{110} = (1.4.4.6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,036$	$a_{210} = (4.4.6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,036$
$a_{31} = (2.4.1)^{-1/2} = 0,354$	$a_{51} = (4.4.1)^{-1/2} = 0,25$
$a_{32} = (2.4)^{-1/2} = 0,354$	$a_{52} = (4.4)^{-1/2} = 0,25$
$a_{33} = 0$	$a_{53} = (4.4.2)^{-1/2} = 0,177$
$a_{34} = (2.4.4.6)^{-1/2} = 0,072$	$a_{54} = (4.6)^{-1/2} = 0,204$
$a_{35} = (2.4.4)^{-1/2} = 0,177$	$a_{55} = 0$
$a_{36} = (2.4.4.6)^{-1/2} = 0,072$	$a_{56} = (4.6)^{-1/2} = 0,204$
$a_{37} = (2.4.4.6.2)^{-1/2} = 0,051$	$a_{57} = (4.6.2)^{-1/2} = 0,144$
$a_{38} = (2.4.4.6.2.2)^{-1/2} = 0,036$	$a_{58} = (4.6.2.2)^{-1/2} = 0,102$
$a_{39} = (2.4.4.6.2.2.2)^{-1/2} = 0,026$	$a_{59} = (4.6.2.2.2)^{-1/2} = 0,072$
$a_{310} = (2.4.4.6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,026$	$a_{510} = (4.6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,072$
$a_{41} = (6.4.4.1)^{-1/2} = 0,102$	$a_{61} = (6.4.4.1)^{-1/2} = 0,102$
$a_{42} = (6.4.4)^{-1/2} = 0,102$	$a_{62} = (6.4.4)^{-1/2} = 0,102$
$a_{43} = (6.4.4.2)^{-1/2} = 0,072$	$a_{63} = (6.4.4.2)^{-1/2} = 0,072$

$$a_{44} = 0$$

$$a_{45} = (6.4)^{-1/2} = 0,204$$

$$a_{46} = (6.4.6)^{-1/2} = 0,083$$

$$a_{47} = (6.4.6.2)^{-1/2} = 0,059$$

$$a_{48} = (6.4.6.2.2)^{-1/2} = 0,042$$

$$a_{49} = (6.4.6.2.2.2)^{-1/2} = 0,029$$

$$a_{410} = (6.4.6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,029$$

$$a_{71} = (2.6.4.4.1)^{-1/2} = 0,072$$

$$a_{72} = (2.6.4.4)^{-1/2} = 0,072$$

$$a_{73} = (2.6.4.4.2)^{-1/2} = 0,051$$

$$a_{74} = (2.6.4.6)^{-1/2} = 0,059$$

$$a_{75} = (2.6.4)^{-1/2} = 0,144$$

$$a_{76} = (2.6)^{-1/2} = 0,288$$

$$a_{77} = 0$$

$$a_{78} = (2.2)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{79} = (2.2.2)^{-1/2} = 0,354$$

$$a_{710} = (2.2.2.1)^{-1/2} = 0,354$$

$$a_{81} = (2.2.6.4.4.1)^{-1/2} = 0,051$$

$$a_{64} = (6.4.6)^{-1/2} = 0,083$$

$$a_{65} = (6.4)^{-1/2} = 0,204$$

$$a_{66} = 0$$

$$a_{67} = (6.2)^{-1/2} = 0,288$$

$$a_{68} = (6.2.2)^{-1/2} = 0,204$$

$$a_{69} = (6.2.2.2)^{-1/2} = 0,144$$

$$a_{610} = (6.2.2.2.1)^{-1/2} = 0,144$$

$$a_{91} = (2.2.2.6.4.4.1)^{-1/2} = 0,036$$

$$a_{92} = (2.2.2.6.4.4)^{-1/2} = 0,036$$

$$a_{93} = (2.2.2.6.4.4.2)^{-1/2} = 0,026$$

$$a_{94} = (2.2.2.6.4.6)^{-1/2} = 0,029$$

$$a_{95} = (2.2.2.6.4)^{-1/2} = 0,072$$

$$a_{96} = (2.2.2.6)^{-1/2} = 0,144$$

$$a_{97} = (2.2.2)^{-1/2} = 0,354$$

$$a_{98} = (2.2)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{99} = 0$$

$$a_{910} = (2.1.)^{-1/2} = 0,707$$

$$a_{101} = (1.2.2.2.6.4.4.1)^{-1/2} = 0,036$$

$$a_{82} = (2.2.6.4.4)^{-1/2} = 0,051$$

$$a_{102} = (1.2.2.2.6.4.4)^{-1/2} = 0,036$$

$$a_{83} = (2.2.6.4.4.2)^{-1/2} = 0,036$$

$$a_{103} = (1.2.2.2.6.4.4.2)^{-1/2} = 0,026$$

$$a_{84} = (2.2.6.4.6)^{-1/2} = 0,042$$

$$a_{104} = (1.2.2.2.6.4.6)^{-1/2} = 0,029$$

$$a_{85} = (2.2.6.4)^{-1/2} = 0,102$$

$$a_{105} = (1.2.2.2.6.4)^{-1/2} = 0,072$$

$$a_{86} = (2.2.6)^{-1/2} = 0,204$$

$$a_{106} = (1.2.2.2.6)^{-1/2} = 0,144$$

$$a_{87} = (2.2)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{107} = (1.2.2.2)^{-1/2} = 0,354$$

$$a_{88} = 0$$

$$a_{108} = (1.2.2)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{89} = (2.2)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{109} = (1.2)^{-1/2} = 0,707$$

$$a_{810} = (2.2.1)^{-1/2} = 0,5$$

$$a_{1010} = 0$$

(4-5)

Bu elemanların satır ve sütunlara uygun bir biçimde yazılması ile poli n-butil metakrilat'ın topolojik matrisi yazılabilir.

Matrisin her a_{ii} , a_{jj} ... gibi elemanları aynı atomu birbirine bağlayan bir başın olmayışı nedeniyle sıfıra eşittir.

$$a_{11} = 0$$

$$a_{22} = 0$$

.

.

.

$$a_{ii} = 0$$

A =

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,036	0,026	0,026
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,029
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,072
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,144
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,354
0,051	0,051	0,036	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,5
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,707
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0,707	0

4.6.3. Karakteristik Polinomun Elde Edilişi

Polinomun elde edilmesi için Bocher formülü kullanılarak tüm hesaplamalar bir bilgisayar programı yardımıyla yapılmış ve polinomun katsayıları doğrudan doğruya elde edilmiştir.

Elde edilen sonuçlara göre poli n-butil metakrilat'a ait karakteristik polinom,

$$P(X) = X^{10} - 2,54002 X^8 - 1,65645 X^7 - 5,58409 X^6 - 7,08842 X^5 -$$

$$14,16887 X^4 - 22,35294 X^3 - 39,27618 X^2 - 65,52968 X -$$

$$111,82900$$

$$(4-6)$$

4.6.4. CR-İndisinin Hesaplanması

Eşitlik (4-6) ile gösterilen karakteristik polinom Bairstow yöntemine göre hazırlanmış olan bir paket programla çözülmüştür.

Polinomun kökleri;

$$X(1) = 0,34717835 - 1,462768 i$$

$$X(2) = 0,34717835 + 1,462768 i$$

$$X(3) = -1,8227731$$

$$X(4) = -0,56114943 - 1,350144 i$$

$$X(5) = -0,56114943 + 1,350144 i$$

$$X(6) = -1,2744596 - 0,7086911 i$$

$$X(7) = -1,2744596 + 0,7086911 i$$

$$X(8) = 1,1937337 - 1,024866 i$$

$$X(9) = 1,1937337 + 1,024866 i$$

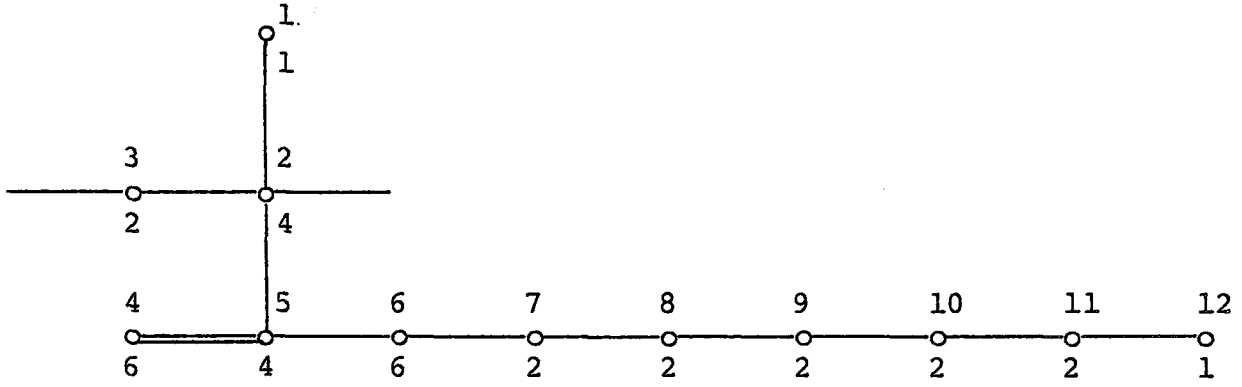
$$X(10) = 2,4121672$$

olarak elde edilmiştir. Molekülün CR-İndisi asal kısımda yer alan pozitif köklerin toplamı olup;

$$CR = 0,34717835 + 0,34717835 + 1,1937337 + 1,1937337 + 2,4121672$$

$$CR = 5,4939913$$

olarak bulunmuştur.



Şekil 4.4 Hidrojensiz Yapısal Grafik

CR-İndisi'nde olduğu gibi grafikte yer alan atomlar numaralandırılarak valens değerleri atomların altına yazılarak gösterilmiştir.

4.8.2. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisinin Matematiksel Hesabı

$$X^0 = \sum_{i=1}^n \delta_i^{-1/2} \quad (2-10) \text{ bağıntısından;}$$

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 8,058$$

olarak bulunur.

4.9. RANDİC (X^1) İNDİSİNİN HESABI

X^1 indisi hesabı için CR-İndisi ve X^0 indisi hesabında olduğu gibi molekülün yapısını gösteren açık formül yazılarak o moleküle ait olan hidrojeniz kimyasal grafik çizilir.

$$X^1 = \sum_{s=1}^{Ne} (\delta_i \cdot \delta_j)_s^{-1/2} \quad (2-11) \quad \text{bağıntısı'ndan gidile-}$$

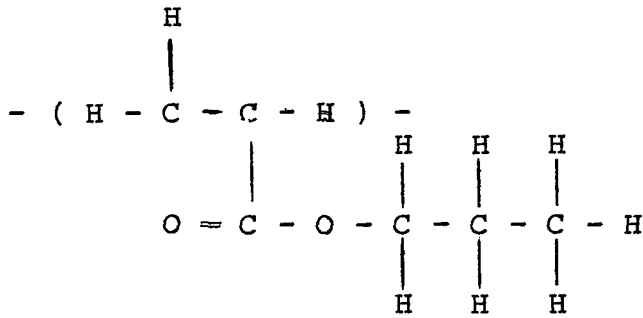
rek, herbir atom üzerindeki birbirine bağlı olan atomların valenslerinin çarpımının karekökünün tersinin toplamı'ndan indis hesabı yapılır.

4.10. ÖRNEK HESAPLAMA

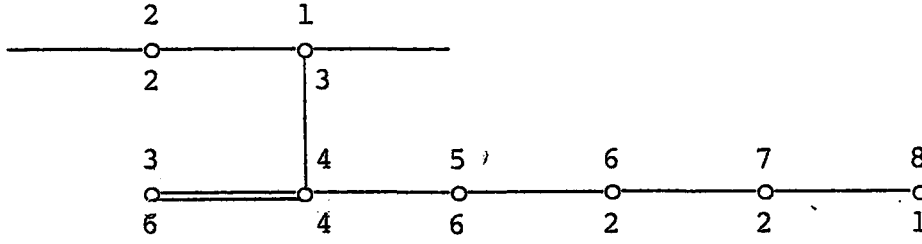
Bu bölümde poli n-propil akrilat molekülü için örnek bir hesaplama yapılmış ve her aşama ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

4.10.1. Kimyasal Grafiğin Çizilmesi

Poli n-propil akrilat molekülünün yapısını gösteren açık formül;



Bu açık formüle göre molekülün hidrojeniz grafiği;



Şekil 4.5 Hidrojeniz Yapısal Grafik

Grafikte yer alan atomlar aynen CR-İndisi ve X^0 İndisi'nde olduğu gibi numaralandırılarak valens değerleri atomların altına yazılarak gösterilmiştir.

4.10.2. Randic (X^1) İndisinin Matematiksel Hesabı

$$X^1 = \sum_{s=1}^{Ne} (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2} \quad (2-11) \text{ bağıntısından;}$$

$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,707$$

$$X^1 = 2,599$$

olarak bulunur.

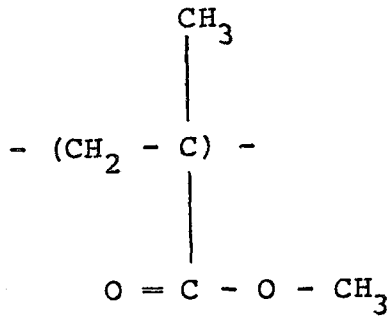
V. POLİ METAKRİLAT VE POLİ AKRİLATLARIN CAMSI-GEÇİŞ TEMPERATÜRLERİNİN HESAPLANMASI

Bu çalışmada bir seri poli metakrilat ve poli akrilat için Camsi-Geçiş Temperatürlerinin bulunabilmesi amacı ile öncelikle her moleküle ait CR, 0'ncı Mertebe ve Randic indisleri hesaplanmıştır.

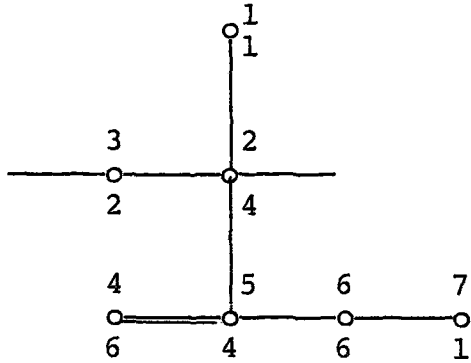
Hesaplama yöntemleri Bölüm IV de açıklandığı gibidir.

5.1. POLİMETİL METAKRİLAT

5.1.1. Yapısal Formül



5.1.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.1.3. Topolojik Matris

A =

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,102
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,102
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,072
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,083
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,204
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,408
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0,408	0

5.1.4. Karakteristik Polinom

$$E(X) = X^7 - 1,04003 X^5 - 0,47414 X^4 - 1,05005 X^3 - 0,93649 X^2 - 1,2765 X - 1,40503$$

5.1.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = -0,30724300 - 0,8819495 i$$

$$X(2) = -0,30724300 + 0,8819495 i$$

$$X(3) = 0,53014907 - 0,8448024 i$$

$$X(4) = 0,53014907 + 0,8448024 i$$

$$X(5) = -0,99884846 - 0,2139431 i$$

$$X(6) = -0,99884846 + 0,2139431 i$$

$$X(7) = 1,5518848$$

5.1.6. CR-İndisi

$$2,6121829$$

5.1.7. 0'ncı (X^0) Merteye İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 1$$

$$X^0 = 4,523$$

5.1.8. Randic (X^1) İndisi

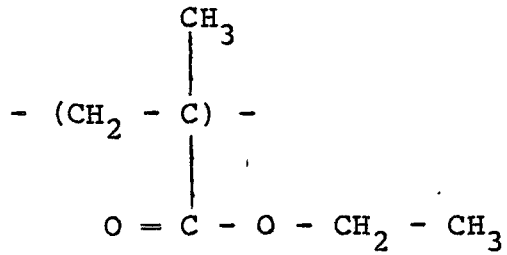
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,408$$

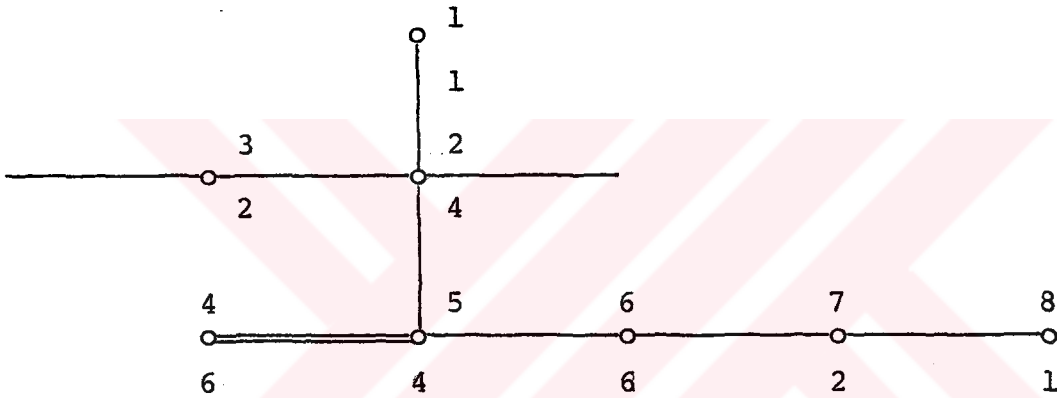
$$X^1 = 1,92$$

5.2. POLİETİL METAKRİLAT

5.2.1. Yapısal Formül



5.2.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.2.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix}
 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,072 \\
 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,072 \\
 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,051 & 0,051 \\
 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,059 \\
 0,25 & 0,25 & 0,177 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,144 \\
 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,288 \\
 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,707 \\
 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0,707 & 0
 \end{pmatrix}$$

5.2.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = x^8 - 1,53918 x^6 - 0,64378 x^5 - 2,02220 x^4 - 1,70806 x^3 - 2,93613 x^2 - 3,29312 x - 4,65365$$

5.2.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = -0,99962679 - 1,087495 i$$

$$X(2) = -0,99962679 + 1,087495 i$$

$$X(3) = 0,73423829 - 0,8952585 i$$

$$X(4) = 0,73423829 + 0,8952585 i$$

$$X(5) = -1,4596373$$

$$X(6) = -0,81713464 - 0,6517085 i$$

$$X(7) = -0,81713464 + 0,6517085 i$$

$$X(8) = 1,8253554$$

5.2.6. CR- Indisi

$$3,2938320$$

5.2.7. 0'ncı (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,707 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 1$$

$$X^0 = 5,230$$

5.2.8. Randic (X^1) İndisi

$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (2.4)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (2.6)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,707$$

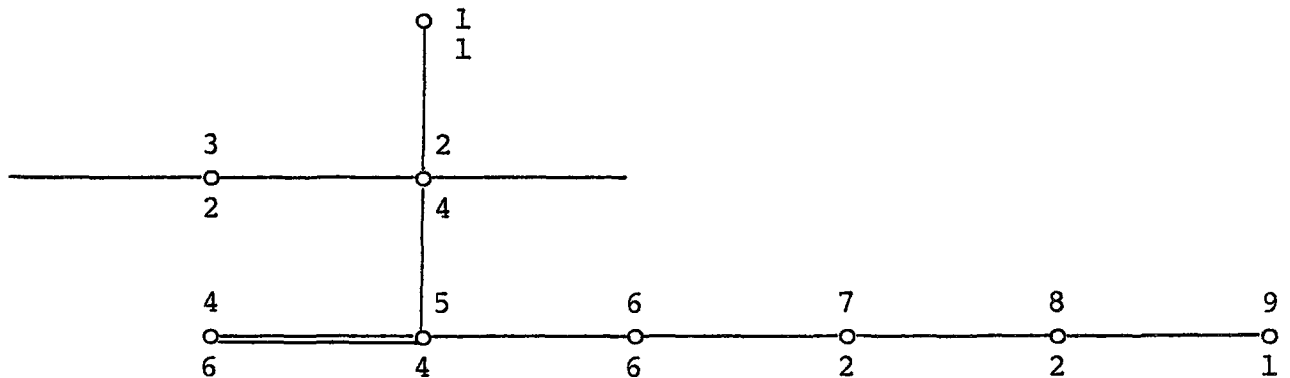
$$X^1 = 2,507$$

5.3. POLİ N-PROPİL METAKRİLAT

5.3.1. Yapısal Formül



5.3.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.3.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,051 \\ 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,051 \\ 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,036 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,042 \\ 0,25 & 0,25 & 0,177 & 0,004 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,102 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,204 \\ 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,707 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,707 & 0 \end{pmatrix}$$

5.3.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,03961 X^7 - 1,08307 X^6 - 3,51600 X^5 - 3,69040 X^4 - 6,79803 X^3 - 9,12592 X^2 - 14,33502 X - 20,73300$$

5.3.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,11138945 - 1,289239 i \\ X(2) &= 0,11138945 + 1,289239 i \\ X(3) &= 0,95905060 - 0,9658429 i \\ X(4) &= 0,95905060 + 0,9658429 i \\ X(5) &= -1,4079107 - 0,1349401 i \\ X(6) &= -1,4079107 + 0,1349401 i \\ X(7) &= -0,72519392 - 1,022744 i \\ X(8) &= -0,72519392 + 1,022744 i \\ X(9) &= 2,1253292 \end{aligned}$$

5.3.6. CR-Indisi

4,2662093

5.3.7. 0'nci (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (5)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 5,937$$

5.3.8. Randic (X^1) Indisi

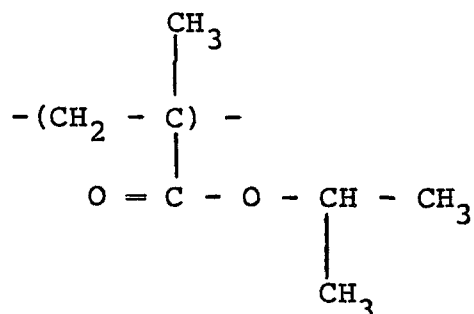
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,707$$

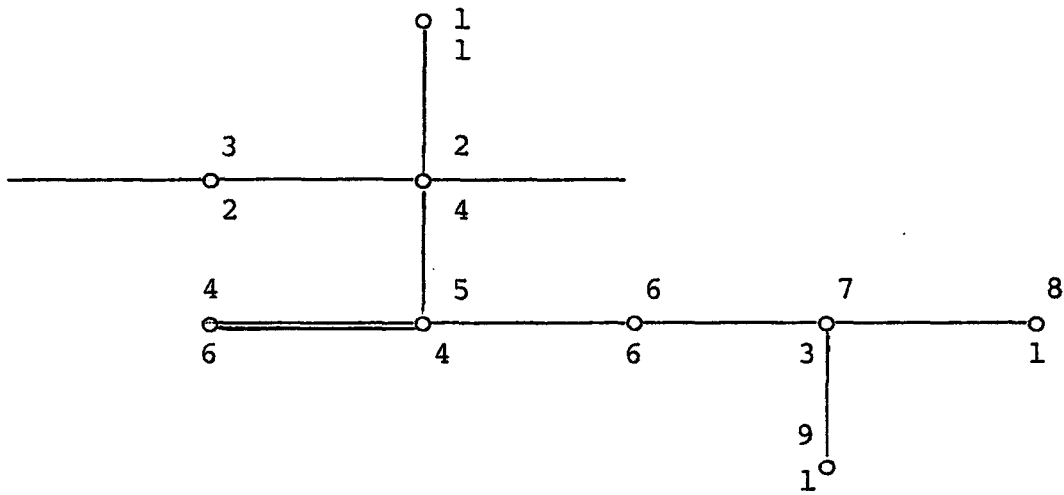
$$X^1 = 3,007$$

5.4. POLİ 2-PROPİL METAKRİLAT

5.4.1. Yapısal Formül



5.4.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.4.3. Topolojik Matris

A=

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,059	0,059	0,059
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,059	0,059	0,059
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,042	0,042	0,042
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,048	0,048	0,048
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,118	0,118	0,118
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,236	0,236	0,236
0,059	0,059	0,048	0,118	0,236	0,236	0	0,577	0,577
0,059	0,059	0,042	0,048	0,118	0,236	0,577	0	0,577
0,059	0,059	0,042	0,048	0,118	0,236	0,577	0,577	0

5.4.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,03980 X^7 - 1,13817 X^6 - 3,54936 X^5 - 3,89485 X^4 - \\ 7,03462 X^3 - 9,72891 X^2 - 15,24225 X - 22,45788$$

5.4.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,11240379 + 1,300774 i$$

$$X(2) = 0,11240379 - 1,300774 i$$

$$X(3) = 0,96790618 + 0,9745482 i$$

$$X(4) = 0,96790618 - 0,9745492 i$$

$$X(5) = - 0,38369923$$

$$X(6) = - 0,11212965$$

$$X(7) = - 0,72514734 - 1,039139 i$$

$$X(8) = - 0,72514734 + 1,039139 i$$

$$X(9) = 2,1379525$$

5.4.6. CR-İndisi

$$4,2985724$$

5.4.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} +$$

$$(1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 1 + 1$$

$$X^0 = 6,1$$

5.4.8. Randic (X^1) Indisi

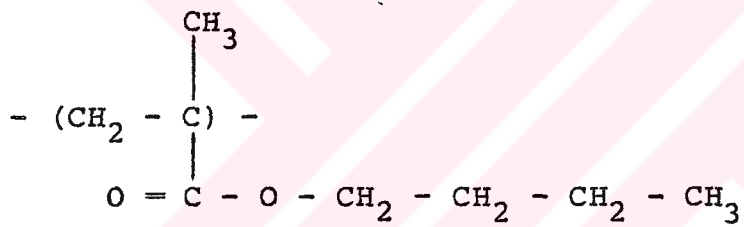
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,577$$

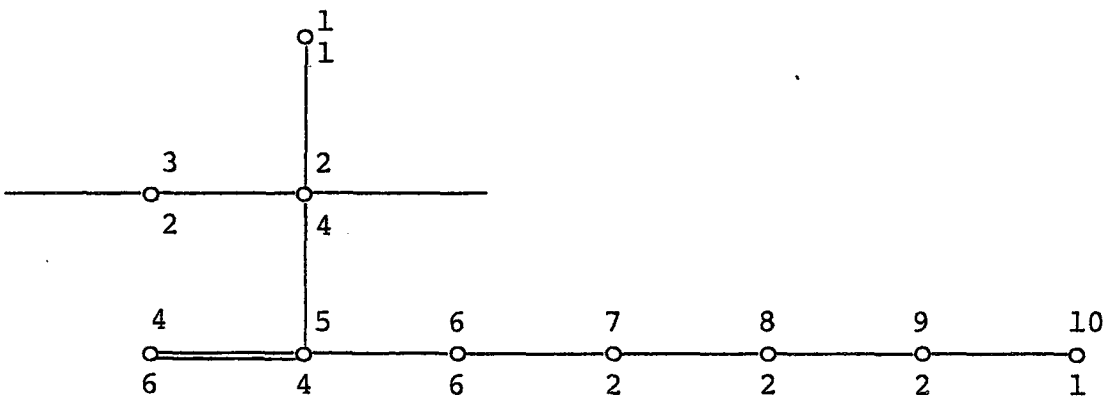
$$X^1 = 2,902$$

5.5. POLİ N-BUTİL METAKRİLAT

5.5.1. Yapısal Formül



5.5.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.5.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,036 \\ 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,036 \\ 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,026 & 0,026 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,029 \\ 0,25 & 0,25 & 0,188 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,072 & 0,072 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,144 \\ 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,354 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,036 & 0,036 & 0,026 & 0,029 & 0,072 & 0,144 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,707 \\ 0,026 & 0,036 & 0,026 & 0,029 & 0,072 & 0,144 & 0,354 & 0,5 & 0,707 & 0 \end{pmatrix}$$

5.5.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,4002 X^8 - 1,65645 X^7 - 5,58409 X^6 - 7,08842 X^5 - 14,16887 X^4 - 22,35394 X^3 - 39,27618 X^2 - 65,52968 X - 111,82900$$

5.5.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,34717835 - 1,462768 i$$

$$X(2) = 0,34717835 + 1,462768 i$$

$$X(3) = -1,8227731$$

$$X(4) = -0,56114943 - 1,350144 i$$

$$X(5) = -0,56114943 + 1,350144 i$$

$$X(6) = -1,2744596 - 0,7086911 i$$

$$X(7) = -1,2744596 + 0,7086911 i$$

$$X(8) = 1,1937337 - 1,024866 i$$

$$X(9) = 1,1937337 + 1,024866 i$$

$$X(10) = 2,4121672$$

5.5.6. CR- Indisi

$$5,4939913$$

5.5.7. Orncı (X⁰) Mertebe Indisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 6,644$$

5.5.8. Randic (X¹) Indisi

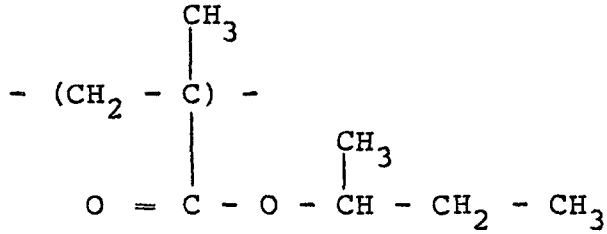
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

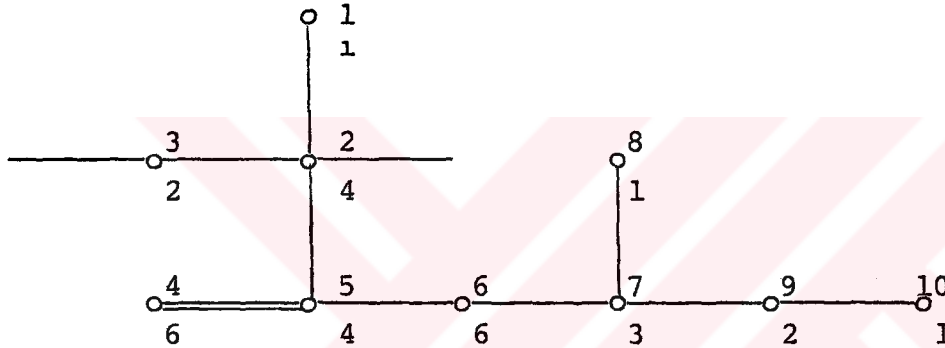
$$X^1 = 3,507$$

5.6. POLİ SEKONDER BUTİL METAKRİLAT

5.6.1. Yapısal Formül



5.6.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik



5.6.3. Topolojik Matris

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,059	0,059	0,042	0,042
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,059	0,059	0,042	0,042
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,042	0,042	0,029	0,029
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,048	0,048	0,034	0,034
A= 0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,118	0,118	0,083	0,083
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,236	0,236	0,166	0,166
0,059	0,059	0,042	0,048	0,118	0,236	0	0,577	0,408	0,408
0,059	0,059	0,042	0,048	0,118	0,236	0,577	0	0,408	0,408
0,042	0,042	0,029	0,034	0,083	0,166	0,408	0,408	0	0,707
0,042	0,042	0,029	0,0034	0,083	0,166	0,408	0,408	0,707	0

5.6.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,53894 X^8 - 1,66441 X^7 - 5,61882 X^6 - 7,16981 X^5 - \\ 14,39418 X^4 - 22,82540 X^3 - 40,31713 X^2 - 67,62439 X - 116,03360$$

5.6.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,34869390 - 1,468592 i \\ X(2) &= 0,34869390 + 1,468592 i \\ X(3) &= -0,56333845 - 1,355732 i \\ X(4) &= -0,56333845 + 1,355732 i \\ X(5) &= -1,1989140 - 1,028955 i \\ X(6) &= 1,1989140 + 1,028955 i \\ X(7) &= -1,8257667 \\ X(8) &= -1,2796625 - 0,7127278 i \\ X(9) &= -1,2796625 + 0,7127278 i \\ X(10) &= 2,4165527 \end{aligned}$$

5.6.6. CR-İndisi

$$5,5117685$$

5.6.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + \\ (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 1 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 6,807$$

5.6.8. Randic (X^1) İndisi

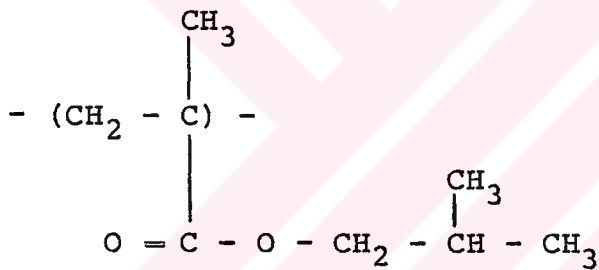
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,408 + 0,707$$

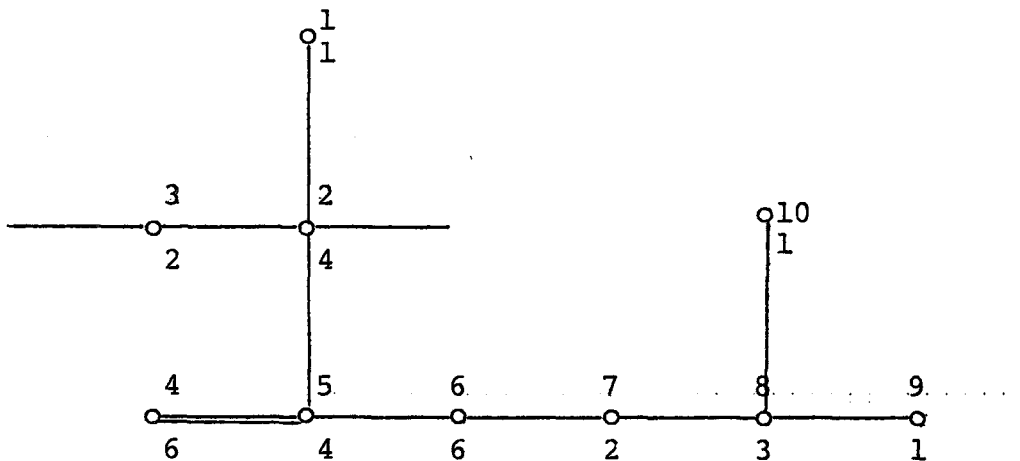
$$X^1 = 3.44$$

5.7. POLİ İZO BUTİL METAKRİLAT

5.7.1. Yapısal Formül



5.7.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.7.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,042 & 0,042 & 0,042 \\ 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,042 & 0,042 & 0,042 \\ 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,051 & 0,029 & 0,029 & 0,029 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,24 & 0,25 & 0,177 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,083 & 0,083 & 0,083 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,166 & 0,166 & 0,166 \\ 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,408 & 0,408 & 0,408 \\ 0,042 & 0,042 & 0,029 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0 & 0,577 & 0,577 \\ 0,042 & 0,042 & 0,029 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,577 & 0 & 0,577 \\ 0,042 & 0,042 & 0,029 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,577 & 0,577 & 0 \end{pmatrix}$$

5.7.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{10} - 2,53729 x^8 - 1,74252 x^7 - 5,64403 x^6 - 7,47695 x^5 - \\ 14,72479 x^4 - 23,83756 x^3 - 41,95484 x^2 - 71,11671 x - \\ 122,37440$$

5.7.5. Polinomun Kökleri

- X(1) = 0,35010018 - 1,476778 i
- X(2) = 0,35010018 + 1,476778 i
- X(3) = -0,56768109 - 1,363146 i
- X(4) = -0,56768109 + 1,363146 i
- X(5) = -1,8163367
- X(6) = -1,2931235 - 0,7195547 i
- X(7) = -1,2931235 + 0,7195547 i
- X(8) = 1,2051571 - 1,034921 i
- X(9) = 1,2051571 + 1,034921 i
- X(10) = 2,4274313

5.7.6. CR-İndisi

5,5379459

5.7.7. 0'nci (X⁰) Mertebe İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 1 + 1$$

$$X^0 = 6,807$$

5.7.8. Randic (X^1) İndisi

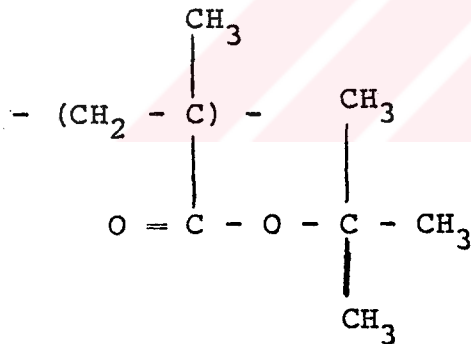
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,577 + 0,577$$

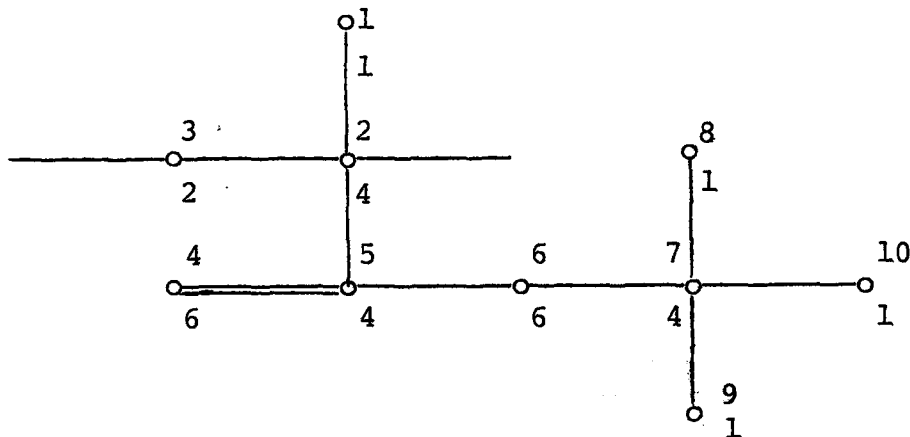
$$X^1 = 3,362$$

5.8. POLİ TERSİYER BUTİL METAKRİLAT

5.8.1. Yapısal Formül



5.8.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.8.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,051 & 0,051 & 0,051 & 0,051 \\ 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,051 & 0,051 & 0,051 & 0,051 \\ 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,036 & 0,036 & 0,036 & 0,036 \\ 0,120 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,042 & 0,042 & 0,042 & 0,042 \\ 0,25 & 0,25 & 0,177 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,102 & 0,102 & 0,102 & 0,102 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,204 & 0,204 & 0,204 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,5 & 0 & 0,5 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0 \end{pmatrix}$$

5.8.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,54019 X^8 - 1,83604 X^7 - 5,76930 X^6 - 7,96622 X^5 - \\ 15,62247 X^4 - 25,96637 X^3 - 46,15822 X^2 - 79,74005 X - \\ 139,24390$$

5.8.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,35465504 - 1,497023 i \\ X(2) = 0,35465504 + 1,497023 i \\ X(3) = -0,57644076 - 1,382194 i$$

$$X(4) = -0,57644076 + 1,382194 i$$

$$X(5) = 2,24487998$$

$$X(6) = -1,3157717 - 0,7349571 i$$

$$X(7) = -1,3157717 + 0,7349571 i$$

$$X(8) = 1,2220188 - 1,049345 i$$

$$X(9) = 1,2220188 + 1,049345 i$$

$$X(10) = -1,8177224$$

5.8.6. CR-Indisi

$$5,6021475$$

5.8.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,5 + 1 + 1 + 1$$

$$X^0 = 7,023$$

5.8.8. Randic (X^1) İndisi

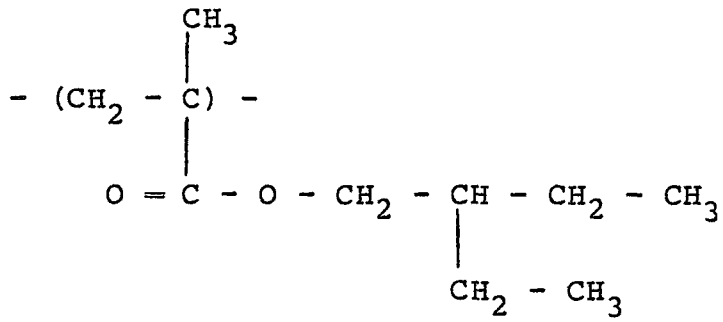
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.4)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,204 + 0,5 + 0,5 + 0,5$$

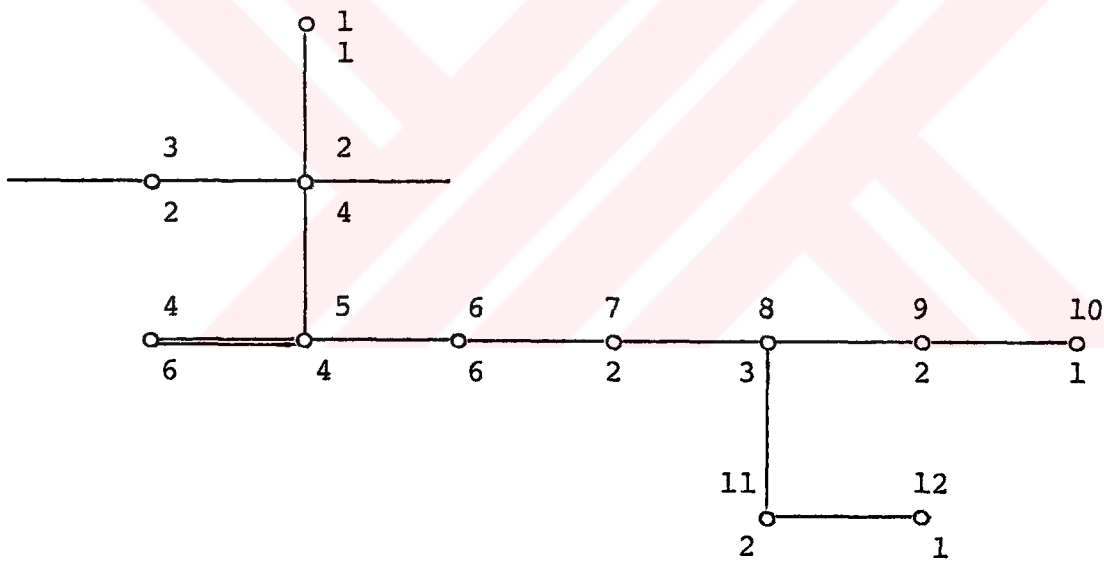
$$X^1 = 3,216$$

5.9. POLİ 2-ETİL-BUTİL METAKRİLAT

5.9.1. Yapısal Formül



5.9.2. Hidrojensiz Yapısal Grafik



5.9.3. Topolojik Matris

A=

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,042	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,042	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,029	0,021	0,021	0,021	0,021	0,021
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,024	0,024	0,024	0,024
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,083	0,059	0,059	0,059	0,059	0,059
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,166	0,118	0,118	0,118	0,118	0,118
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,408	0,288	0,288	0,288	0,288	0,288
0,042	0,042	0,029	0,034	0,083	0,166	0,408	0	0,408	0,408	0,408	0,408	0,408
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0	0,707	0,288	0,288	0,288
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,707	0	0,288	0,288	0,288
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,288	0,288	0	0,707	0,707
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,288	0,288	0,707	0	0

5.9.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{12} - 3,53515 X^{10} - 2,97191 X^9 - 11,27833 X^8 - 18,28410 X^7 - \\ 43,00236 X^6 - 84,63197 X^5 - 179,59760 X^4 - 368,89880 X^3 - \\ 767,71770 X^2 - 1589,12700 X - 3296,18800$$

5.9.5. Polinomun Kökleri

- X(1) = -0,12330981 - 1,837908 i
- X(2) = -0,12330981 + 1,837908 i
- X(3) = 0,82686709 - 1,695102 i
- X(4) = 0,82686709 + 1,695102 i
- X(5) = 1,6291014 - 1,089004 i
- X(6) = 1,6291014 + 1,089004 i
- X(7) = 2,9102741
- X(8) = -1,0179701 - 1,505543 i
- X(9) = -1,0179701 + 1,505543 i
- X(10) = -1,6944706 - 0,7543114 i
- X(11) = -1,6944706 + 0,7543114 i
- X(12) = -2,1507101

5.9.6. CR-İndisi

7,8222111

5.9.7. 0'nci (X⁰) Mertebe İndisi

$$x^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + 1 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 8,221$$

5.9.8. Randic (X^1) Indisi

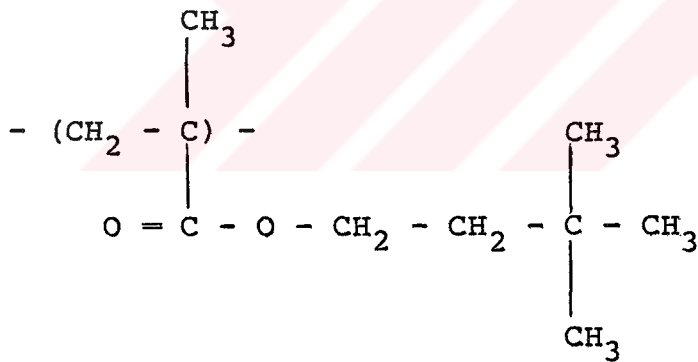
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + 0,707 + 0,408 + 0,707$$

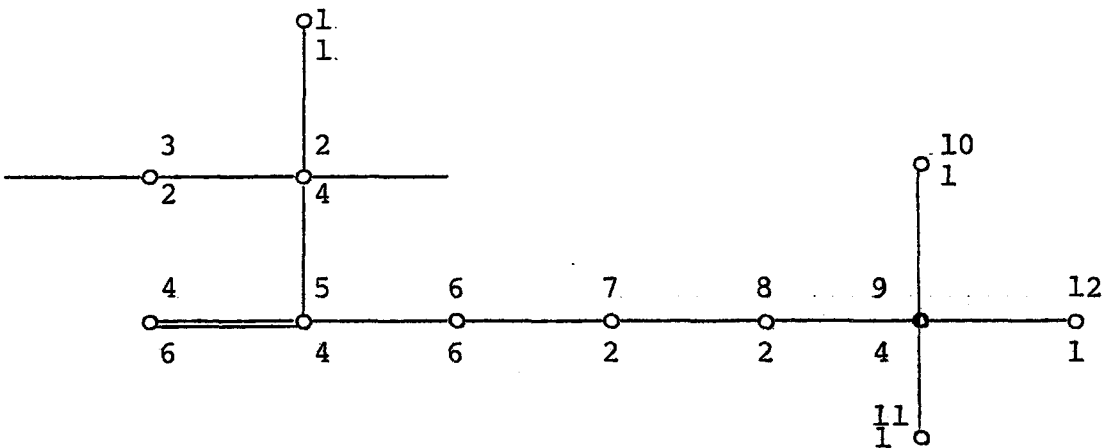
$$X^1 = 4,438$$

5.10. POLI 3,3-DİMETİL BUTİL METAKRİLAT

5.10.1. Yapısal Formül



5.10.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.10.3. Topolojik Matris

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,26	0,026	0,026	0,026	0,026
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,026	0,026	0,026	0,026	0,026
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,036	0,018	0,018	0,018	0,018	0,018
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,021	0,021	0,021	0,021	0,021
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
A= 0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,102	0,102	0,102	0,102	0,102
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
0,051	0,051	0,036	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,354	0,354	0,354	0,354	0,354
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0	0,5	0,5	0,5	0,5
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5	0,5
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0,5	0	0,5	0,5
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0,5	0,5	0	0

5.10.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{12} - 3,54123 X^{10} - 3,30196 X^9 - 11,68045 X^8 - 20,44455 X^7 - 47,33654 X^6 - 97,18745 X^5 - 208,67230 X^4 - 440,46640 X^3 - 935,16390 X^2 - 1981,30500 X - 4200,46800$$

5.10.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned}x(1) &= -0,12727137 - 1,876787 i \\x(2) &= -0,12727137 + 1,876787 i \\x(3) &= 0,84340527 - 1,731004 i \\x(4) &= 0,84340527 + 1,731004 i \\x(5) &= 1,6630225 - 1,112842 i \\x(6) &= 1,6630225 + 1,112842 i \\x(7) &= 2,9554223 \\x(8) &= -1,0428579 - 1,538836 i \\x(9) &= -1,0429579 + 1,538836 i \\x(10) &= -1,7384430 - 0,7858016 i \\x(11) &= -1,7384430 + 0,7858016 i \\x(12) &= -2,511333\end{aligned}$$

5.10.6. CR-İndisi

$$7,9682778$$

5.10.7. 0'ncı (x^0) Mertebe İndisi

$$\begin{aligned}x^0 &= (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + \\ &\quad (2)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}\end{aligned}$$

$$x^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,5 + 1 + 1 + 1$$

$$x^0 = 8,437$$

5.10.8. Randic (X^1) Indisi

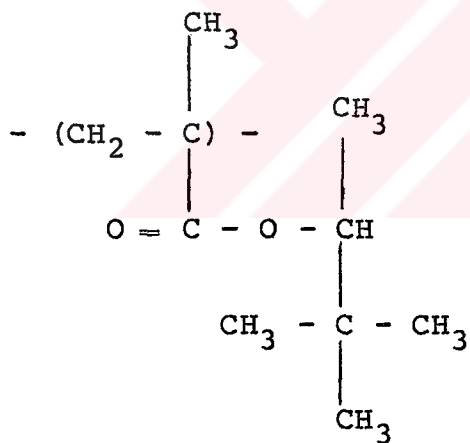
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.4)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,354 + 0,5 + 0,5 + 0,5$$

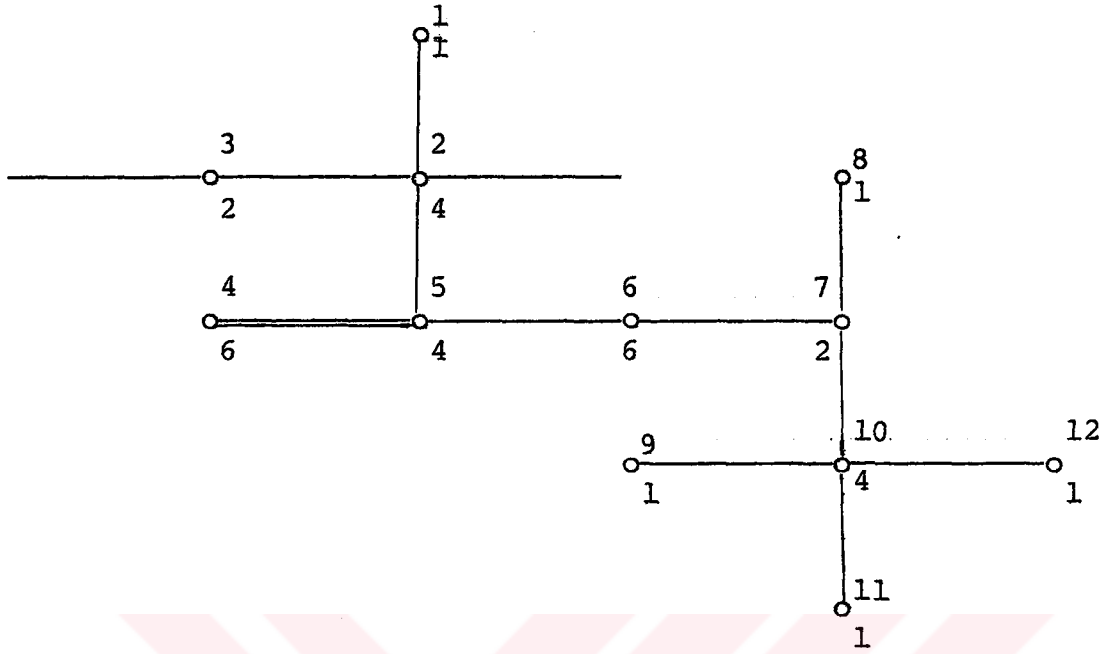
$$X^1 = 4,154$$

5.11. POLİ 3,3-DİMETİL-2-BUTİL METAKRİLAT

5.11.1. Yapısal Formül



5.11.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.11.3. Topolojik Matris

A=

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,072	0,036	0,036	0,036	0,036
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,072	0,036	0,036	0,036	0,036
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,051	0,026	0,026	0,026	0,026
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,059	0,029	0,029	0,029	0,029
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,144	0,072	0,072	0,072	0,072
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,288	0,144	0,144	0,144	0,144
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,707	0,354	0,354	0,354	0,354
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0,707	0	0,354	0,354	0,354	0,354
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,354	0	0,5	0,5	0,5
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,354	0,5	0,5	0	0,5
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,354	0,5	0,5	0,5	0

5.11.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{12} - 4,16182 X^{10} - 4,43608 X^9 - 16,87172 X^8 - 33,43993 X^7 - \\ 85,50449 X^6 - 196,71180 X^5 - 470,56770 X^4 - 1109,62900 X^3 - \\ 2629,58000 X^2 - 6220,87800 X - 14725,16000$$

5.11.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= -0,14146586 - 2,086477 i \\ X(2) &= -0,14146586 + 2,086477 i \\ X(3) &= 0,93767127 - 1,924198 i \\ X(4) &= 0,93767127 + 1,924198 i \\ X(5) &= -1,1595891 - 1,712923 i \\ X(6) &= -1,1595891 + 1,712923 i \\ X(7) &= 1,8501049 - 1,238323 i \\ X(8) &= 1,8501049 + 1,238323 i \\ X(9) &= -2,3608837 \\ X(10) &= -1,9316849 - 0,8852414 i \\ X(11) &= -1,9316849 + 0,8852414 i \\ X(12) &= 3,2508111 \end{aligned}$$

5.11.6. CR-İndisi

$$8,8263634$$

5.11.7. 0'ncı (X⁰) Mertebe Indisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,5 + 0,408 + 0,408 + 0,707 + 1 + 0,5 + 1 + 1 + 1$$

$$X^0 = 8,73$$

5.11.8. Randic (X¹) Indisi

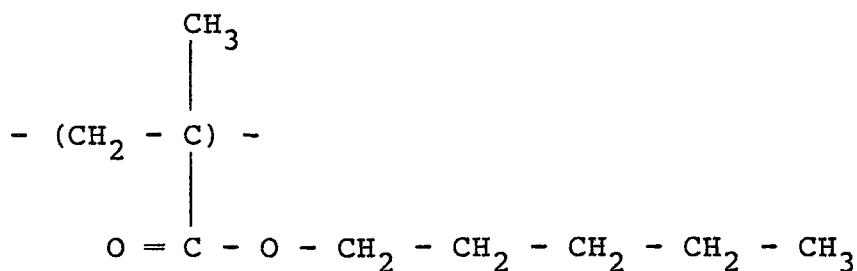
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (2.4)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,707 + 0,354 + 0,5 + 0,5 + 0,5$$

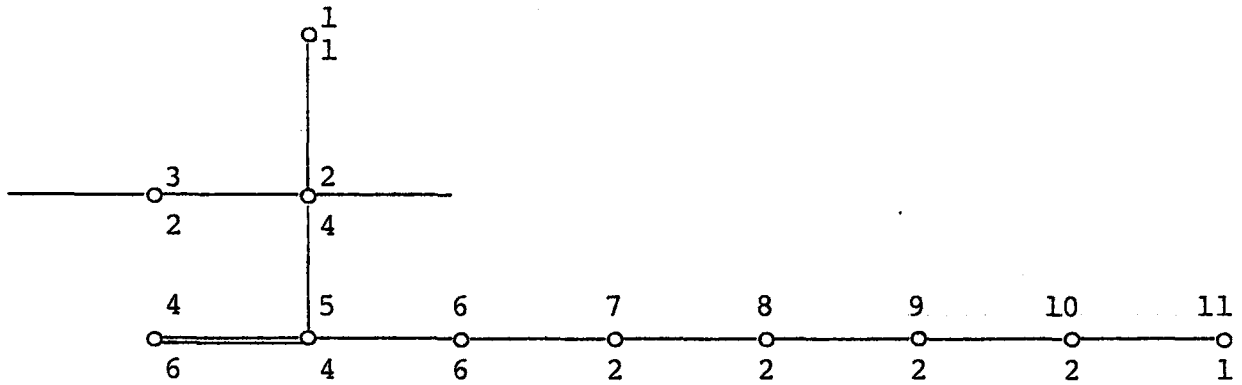
$$X^1 = 4,361$$

5.12. POLİ N-PENTİL METAKRİLAT

5.12.1. Yapısal Formül



5.12.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.12.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0,5 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,026 & 0,026 \\ 0,5 & 0 & 0,354 & 0,102 & 0,25 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,026 & 0,026 \\ 0,354 & 0,354 & 0 & 0,072 & 0,177 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,026 & 0,018 & 0,018 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,021 & 0,021 \\ 0,25 & 0,25 & 0,177 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,051 \\ 0,102 & 0,102 & 0,072 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,102 \\ 0,072 & 0,072 & 0,051 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,25 & 0,25 \\ 0,051 & 0,051 & 0,036 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,354 \\ 0,036 & 0,036 & 0,026 & 0,029 & 0,072 & 0,144 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,026 & 0,026 & 0,018 & 0,021 & 0,051 & 0,102 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,707 \\ 0,026 & 0,026 & 0,018 & 0,021 & 0,051 & 0,102 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0,707 & 0 \end{bmatrix}$$

5.12.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{11} - 3,04055 X^9 - 2,29788 X^8 - 8,16228 X^7 - 11,92002 X^6 - \\ 25,82829 X^5 - 46,09231 X^4 - 89,39913 X^3 - 167,05500 X^2 - \\ 316,92750 X - 597,36820$$

5.12.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,58771539 - 1,594492 i \\ X(2) &= 0,58771539 + 1,594492 i \\ X(3) &= 1,4163720 - 1,063532 i \\ X(4) &= 1,4163720 + 1,063532 i \\ X(5) &= -1,1750507 - 1,141067 i \\ X(6) &= -1,1750507 + 1,141067 i \\ X(7) &= -1,8110073 - 0,2671262 i \\ X(8) &= -1,8110073 + 0,2671262 i \\ X(9) &= -0,35400997 - 1,618509 i \\ X(10) &= -0,35400997 + 1,618509 i \\ X(11) &= 2,6719612 \end{aligned}$$

5.12.6. CR-İndisi

$$6,6801360$$

5.12.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 7,351$$

5.12.8. Randic (X^1) İndisi

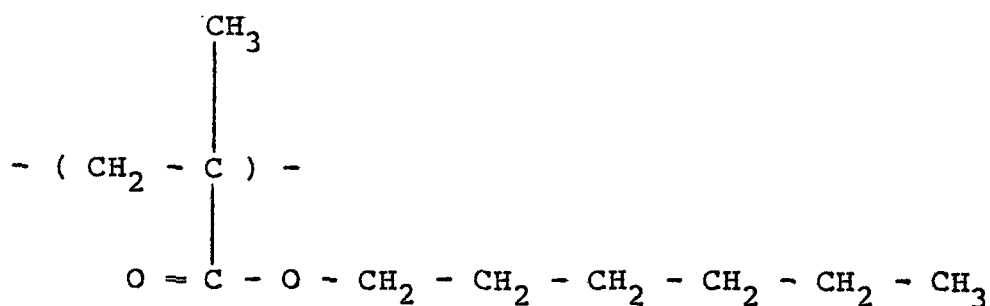
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

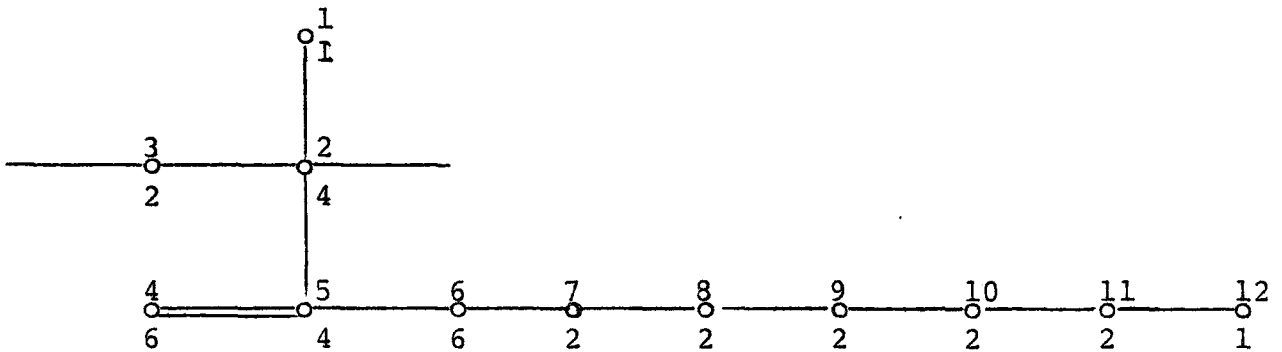
$$X^1 = 4,007$$

5.13. POLİ N- HEKZİL METAKRİLAT

5.13.1. Yapısal Formül



5.13.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.13.3. Topolojik Matris

A =

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,018
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,018
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,012
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,015
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,102	0,072	0,072
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,177
0,051	0,051	0,036	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,354
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,018	0,018	0,012	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,707
0,018	0,018	0,012	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0,707	0

5.13.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = x^{12} - 3,54089 x^{10} - 2,97200 x^9 - 11,16412 x^8 - 18,06046 x^7 - \\ 42,01001 x^6 - 82,28806 x^5 - 173,03370 x^4 - 353,03460 x^3 - \\ 728,75960 x^2 - 1497,26100 x - 3081,48000$$

5.13.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= -0,12281031 - 1,826748 i \\ X(2) &= -0,12281031 + 1,826748 i \\ X(3) &= -1,0123139 - 1,495835 i \\ X(4) &= -1,0123139 + 1,495835 i \\ X(5) &= 1,6186104 - 1,082132 i \\ X(6) &= 1,6186104 + 1,082132 i \\ X(7) &= -1,6858017 - 0,7481361 i \\ X(8) &= -1,6858017 + 0,7481361 i \\ X(9) &= -2,1419176 \\ X(10) &= 0,82167110 - 1,684903 i \\ X(11) &= 0,82167110 + 1,684903 i \\ X(12) &= 2,9032065 \end{aligned}$$

5.13.6. CR-İndisi

$$7,7837695$$

5.13.7. 0'ncı (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 8,058$$

5.13.8. Randic (X^1) Indisi

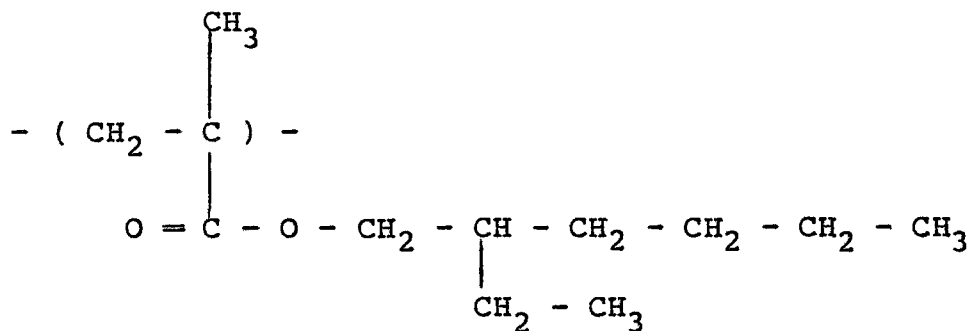
$$X^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

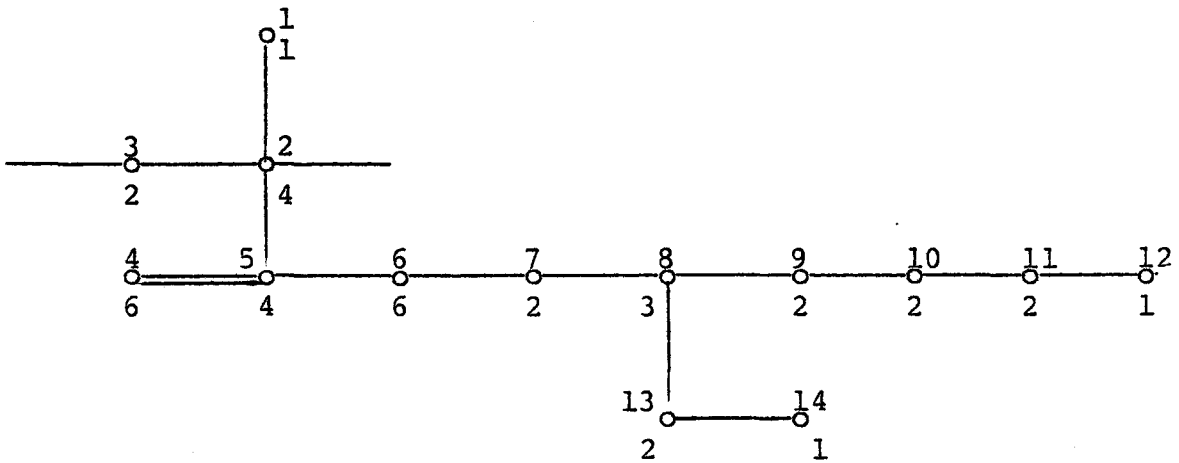
$$X^1 = 4,507$$

5.14. POLİ 2-ETİL-HEKZİL METAKRİLAT

5.14.1 Yapısal Formül



5.14.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.14.3. Topolojik Matris

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,042	0,029	0,021	0,015	0,015	0,029	0,029
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,042	0,029	0,021	0,15	0,015	0,029	0,029
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,029	0,021	0,015	0,011	0,011	0,021	0,021
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,017	0,013	0,013	0,024	0,024
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,083	0,059	0,042	0,029	0,029	0,059	0,059
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,166	0,118	0,083	0,059	0,059	0,118	0,288
0,072	0,072	0,051	0,159	0,144	0,288	0	0,408	0,288	0,204	0,144	0,144	0,288	0,288
0,042	0,042	0,029	0,034	0,083	0,166	0,408	0	0,408	0,288	0,204	0,204	0,408	0,408
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0	0,5	0,354	0,354	0,288	0,288
0,021	0,021	0,015	0,017	0,042	0,083	0,204	0,288	0,5	0	0,5	0,5	0,204	0,204
0,015	0,015	0,011	0,013	0,029	0,059	0,144	0,204	0,354	0,5	0	0,707	0,144	0,144
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,288	0,204	0,144	0,144	0	0,707
0,029	0,029	0,021	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,288	0,204	0,144	0,144	0,807	0

5.14.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{14} - 4,53600 X^{12} - 4,31998 X^{11} - 18,26624 X^{10} - 33,70978 X^9 - \\ 88,49115 X^8 - 197,44500 X^7 - 470,49520 X^6 - 1091,39000 X^5 - \\ 2557,59900 X^4 - 5970,20800 X^3 - 13955,75000 X^2 - \\ 32605,66000 X - 76191,93000$$

5.14.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,35045191 - 2,099540 i \\ X(2) &= 0,35045191 + 2,099540 i \\ X(3) &= 1,2494909 - 1,777819 i \\ X(4) &= 1,2494909 + 1,777819 i \\ X(5) &= 1,9660903 - 1,081131 i \\ X(6) &= 1,9660903 + 1,081131 i \\ X(7) &= 3,2964677 \\ X(8) &= -0,58499748 - 2,016312 i \\ X(9) &= -0,58499748 + 2,016312 i \\ X(10) &= -1,4057038 - 1,543870 i \\ X(11) &= -1,4057038 + 1,543870 i \\ X(12) &= -2,0150243 - 0,7483223 i \\ X(13) &= -2,0150243 + 0,7483223 i \\ X(14) &= -2,4170828 \end{aligned}$$

5.14.6. CR-İndisi

$$10,4285339$$

5.14.7. 0'ncı (x^0) Mertebe İndisi

$$x^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2}$$

$$x^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + 1 + 0,707 + 1 + 0,707 + 0,707$$

$$x^0 = 9,635$$

5.14.8. Randic (x^1) İndisi

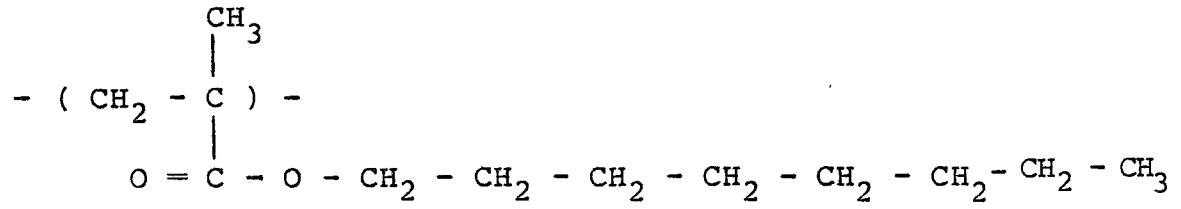
$$x^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + 0,5 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,707$$

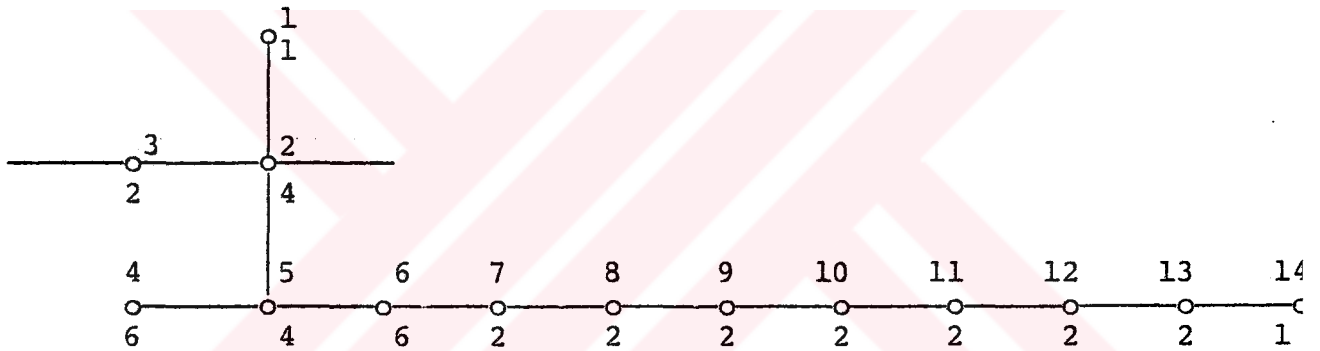
$$x^1 = 5,438$$

5.15. POLİ N-OKTİL METAKRİLAT

5.15.1. Yapısal Formül



5.15.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.15.3. Topologjik Matris

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,009
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,009
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,006	0,006
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,011	0,007	0,007
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,018
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,088	0,088
0,051	0,051	0,036	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,125
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,177
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25
0,018	0,018	0,012	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,354
0,012	0,012	0,009	0,011	0,026	0,051	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,009	0,009	0,006	0,007	0,018	0,036	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,707
0,009	0,009	0,006	0,007	0,018	0,036	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0,707	0

A=

5.15.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{14} - 4,99294 X^{12} - 10,03182 X^{11} - 20,91861 X^{10} - 42,08067 X^9 - \\ 85,05009 X^8 - 171,30720 X^7 - 345,44340 X^6 - 696,64010 X^5 - \\ 1405,36300 X^4 - 2835,42200 X^3 - 5721,09800 X^2 - 11543,87000 X - \\ 2392,11000$$

5.15.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,27615764 - 1,906208 i \\ X(2) &= 0,27615764 + 1,906208 i \\ X(3) &= -1,3399156 - 1,432960 i \\ X(4) &= -1,3399156 + 1,432960 i \\ X(5) &= -2,0843802 \\ X(6) &= -1,8755999 - 0,7667657 i \\ X(7) &= -1,8755999 + 0,7667657 i \\ X(8) &= 1,7346704 - 0,9496074 i \\ X(9) &= 1,7346704 + 0,9496074 i \\ X(10) &= -0,58322185 - 1,841927 i \\ X(11) &= -0,58322185 + 1,841927 i \\ X(12) &= 1,0960914 - 1,601160 i \\ X(13) &= 1,0960914 + 1,601160 i \\ X(14) &= 3,4680161 \end{aligned}$$

5.15.6. CR-İndisi

$$9,6818550$$

5.15.7. 0'ncı (X⁰) Mertebe İndisi

$$x^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 9,472$$

5.15.8. Randic (X¹) İndisi

$$x^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,288 + 0,707$$

$$x^1 = 5,507$$

5.16.3. Topologjik Matris

0	0,5	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,006	0,005	0,005
0,5	0	0,354	0,102	0,25	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,006	0,005	0,005
0,354	0,354	0	0,072	0,177	0,072	0,051	0,026	0,026	0,018	0,012	0,009	0,006	0,005	0,003	0,003
0,102	0,102	0,072	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,0015	0,011	0,007	0,005	0,004	0,004
0,25	0,25	0,177	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,012	0,009	0,009
0,102	0,102	0,072	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,018
0,072	0,072	0,051	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,088	0,063	0,044	0,044
0,051	0,051	0,036	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,088	0,063	0,063
0,036	0,036	0,026	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,088	0,088
0,026	0,026	0,018	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,125
0,018	0,018	0,012	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,177
0,012	0,012	0,009	0,015	0,026	0,051	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25
0,009	0,009	0,006	0,007	0,018	0,036	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,354
0,006	0,006	0,005	0,005	0,010	0,026	0,063	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,005	0,005	0,003	0,004	0,009	0,018	0,044	0,063	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,707
0,005	0,005	0,003	0,004	0,009	0,018	0,044	0,063	0,088	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0,707	0

A =

5.16.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{16} - 5,54244 x^{14} - 5,77265 x^{13} - 26,43382 x^{12} - 53,13757 x^{11} - \\ 150,41020 x^{10} - 364,16730 x^9 - 936,88310 x^8 - 2352,18400 x^7 - \\ 5956,81500 x^6 - 15036,11000 x^5 - 37993,83000 x^4 - \\ 95966,29000 x^3 - 242422,30000 x^2 - 612359,60000 x - \\ 1546838,00000$$

5.16.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= -0,11912092 - 2,317520 i \\ X(2) &= -0,11912092 + 2,317520 i \\ X(3) &= 1,5992658 - 1,779551 i \\ X(4) &= 1,5992658 + 1,779551 i \\ X(5) &= 0,78309436 - 2,215984 i \\ X(6) &= 0,78309436 + 2,215984 i \\ X(7) &= 2,2244113 - 1,041013 i \\ X(8) &= 2,2244113 + 1,041013 i \\ X(9) &= -1,7238888 - 1,522799 i \\ X(10) &= -1,7238888 + 1,522799 i \\ X(11) &= -2,2648235 - 0,7181840 i \\ X(12) &= -2,2648235 + 0,7181840 i \\ X(13) &= -0,99060553 - 2,076883 i \\ X(14) &= -0,99060553 + 2,076883 i \\ X(15) &= -2,6332737 \\ X(16) &= 3,6166084 \end{aligned}$$

5.16.6. CR-İndisi

12,8301513

5.16.7. 0'ncı (X⁰) Mertebe İndisi

$$x^0 = (1)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 1 + 0,5 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 10,886$$

5.16.8. Randic (X¹) İndisi

$$x^1 = (1.4)^{-1/2} + (4.2)^{-1/2} + (4.4)^{-1/2} + (6.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + ((2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,5 + 0,354 + 0,25 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

$$x^1 = 6,507$$

5.17.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^6 - 0,65855 X^4 - 0,21153 X^3 - 0,41550 X^2 - 0,26865 X - 0,30609$$

5.17.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,29402733 - 0,6880848 i$$

$$X(2) = 0,29402733 + 0,6880848 i$$

$$X(3) = -0,40847663 - 0,5525460 i$$

$$X(4) = -0,40847663 + 0,5525460 i$$

$$X(5) = -0,96763848$$

$$X(6) = 1,1965371$$

5.17.6. CR-İndisi

$$1,7845918$$

5.17.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 1$$

$$X^0 = 3,6$$

5.17.8. Randic (X^1) İndisi

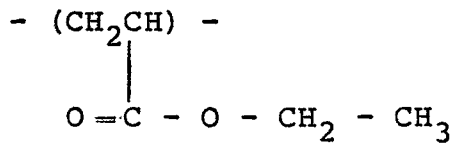
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,408$$

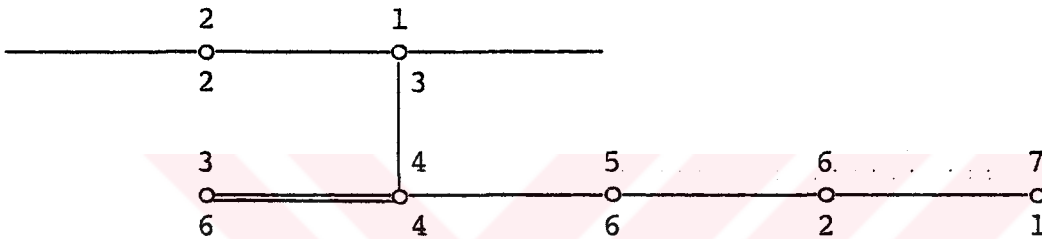
$$X^1 = 1,512$$

5.18. POLİETİL AKRİLAT

5.18.1. Yapısal Formül



5.18.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.18.3. Topolojik Matris

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,083
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,059
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,059
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,144
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,288	0,288
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0	0,707
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0,707	0

5.18.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^7 - 1,15768 X^5 - 0,37752 X^4 - 1,17837 X^3 - 0,79008 X^2 - 1,30969 X - 1,20100$$

5.18.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = -0,30727481 - 0,8638426 i$$

$$X(2) = -0,30727481 + 0,8638426 i$$

$$X(3) = 0,51790505 - 0,8312823 i$$

$$X(4) = 0,51790505 + 0,8312823 i$$

$$X(5) = -1,1633798$$

$$X(6) = -0,81968786$$

$$X(7) = 1,5618071$$

5.18.6. CR-İndisi

$$2,5976172$$

5.18.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 4,307$$

5.18.8. Randic (X^1) Indisi

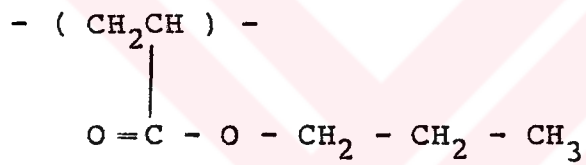
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,707$$

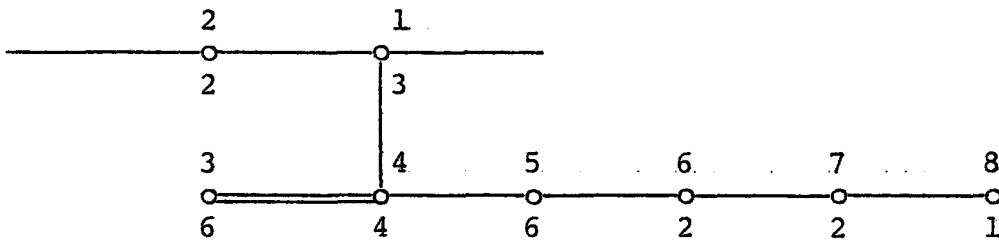
$$X^1 = 2,099$$

5.19. POLİ N- PROPİL AKRİLAT

5.19.1. Yapısal Formül



5.19.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.19.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,059 & 0,059 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,042 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,042 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,102 \\ 0,288 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,204 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,707 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,707 & 0 \end{pmatrix}$$

5.19.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^8 - 1,67827 X^6 - 0,84078 X^5 - 2,53654 X^4 - 2,53372 X^3 - 4,42505 X^2 - 5,65997 X - 8,48827$$

5.19.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = -0,11030101 - 1,177185 i$$

$$X(2) = -0,11030101 + 1,177185 i$$

$$X(3) = 0,79517837 - 0,969684 i$$

$$X(4) = 0,79517837 + 0,969684 i$$

$$X(5) = -0,89719796 - 0,7058245 i$$

$$X(6) = -0,89719796 + 0,7058245 i$$

$$X(7) = -1,5220372$$

$$X(8) = 1,9466784$$

5.19.6. CR-İndisi

$$3,5370351$$

5.19.7. 0'nci (X⁰) Mertebe İndisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 5,014$$

5.19.8. Randic (X¹) İndisi

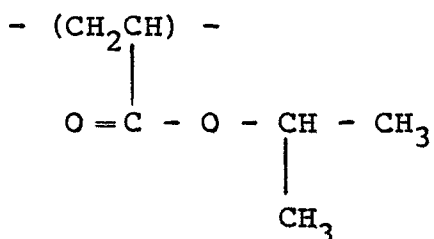
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,707$$

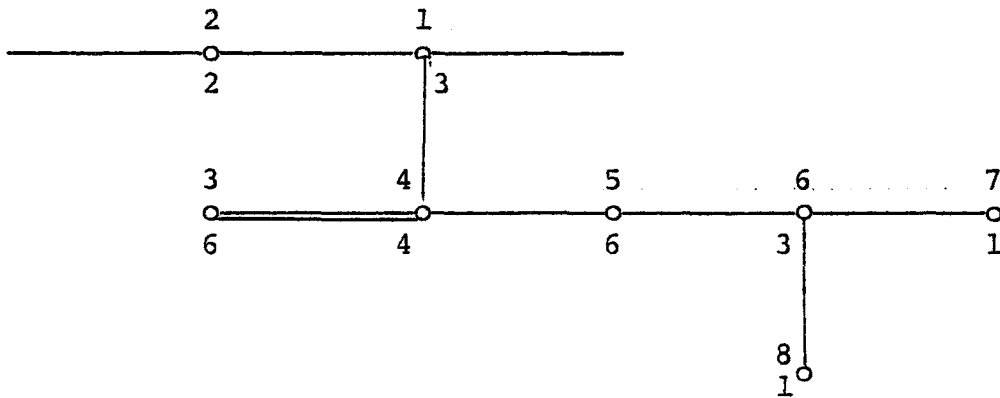
$$X^1 = 2,599$$

5.20. POLİ İZO-PROPİL AKRİLAT

5.20.1. Yapısal Formül



5.20.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.20.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,068 & 0,068 & 0,068 \\ 0,408 & 0 & 0,082 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,048 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,048 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,118 & 0,118 & 0,118 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,236 & 0,236 & 0,236 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0 & 0,577 & 0,577 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0,577 & 0 & 0,577 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0,577 & 0,577 & 0 \end{bmatrix}$$

5.20.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = x^8 - 1,65811 x^6 - 0,86893 x^5 - 2,49818 x^4 - 2,59858 x^3 - 4,41207 x^2 - 5,78665 x - 8,58625$$

5.20.5. Polinomun Kökleri

$$x(1) = -0,11171333 - 1,180090 i$$

$$x(2) = -0,11171333 + 1,180090 i$$

$$x(3) = 0,79685589 - 0,9724562 i$$

$$x(4) = 0,79685589 + 0,9724562 i$$

$$x(5) = -0,90532112 - 0,7065131 i$$

$$x(6) = -0,90532112 + 0,7065131 i$$

$$x(7) = -1,5060921$$

$$x(8) = 1,9464493$$

5.20.6. CR-İndisi

$$3,5401611$$

5.20.7. 0'ncı (x^0) Mertebe İndisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,5 + 0,408 + 0,408 + 0,577 + 1 + 1$$

$$x^0 = 5,177$$

5.20.8. Randic (x^1) İndisi

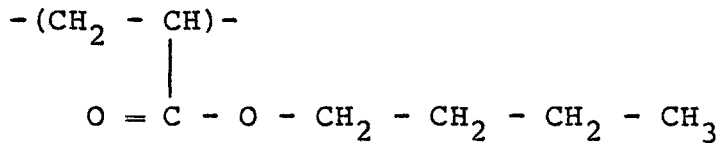
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,577$$

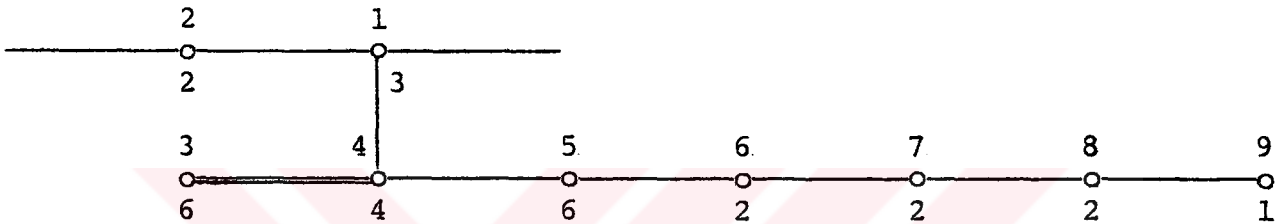
$$x^1 = 2,494$$

5.21. POLİ N-BUTİL AKRİLAT

5.21.1. Yapısal Formül



5.21.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.21.3. Topolojik Matris

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,059	0,042	0,042
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,029
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,029
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,072
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,144
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,354
0,059	0,042	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,5
0,042	0,029	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,707
0,042	0,029	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0,707	0

5.21.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,15854 X^7 - 1,38741 X^6 - 4,33892 X^5 - 5,43933 X^4 - 10,41527 X^3 - 16,10597 X^2 - 27,47744 X - 44,78156$$

5.21.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,12269882 - 1,409502 i \\ X(2) &= 0,12269882 + 1,409502 i \\ X(3) &= -0,79567257 - 1,122476 i \\ X(4) &= -0,79567257 + 1,122476 i \\ X(5) &= -1,5098998 - 0,2668973 i \\ X(6) &= -1,5090990 + 0,2668973 i \\ X(7) &= 1,0521119 - 0,056265 i \\ X(8) &= 1,0521119 + 1,056265 i \\ X(9) &= 2,2615212 \end{aligned}$$

5.21.6. CR-İndisi

$$4,3667450$$

5.21.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 5,721$$

5.21.8. Randic (x^1) Indisi

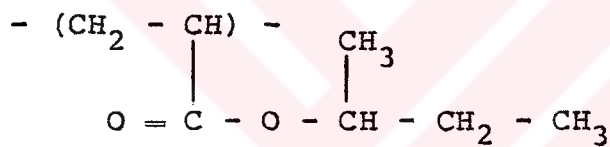
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

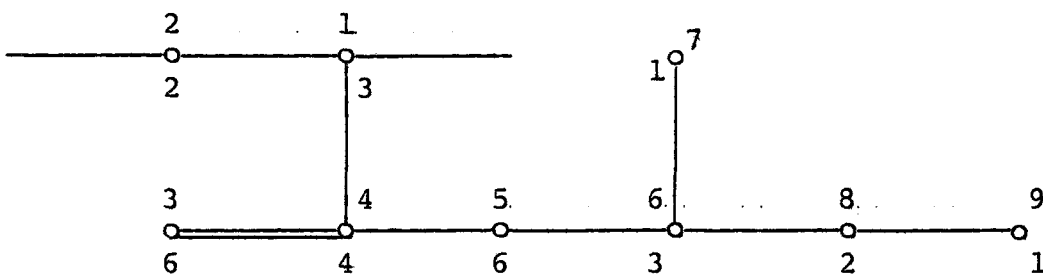
$$x^1 = 3,099$$

5.22. POLİ SEKONDER-BUTİL AKRİLAT

5.22.1. Yapısal Formül



5.22.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.22.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,068 & 0,068 & 0,048 & 0,048 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,034 & 0,034 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,034 & 0,034 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,118 & 0,118 & 0,083 & 0,083 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,236 & 0,236 & 0,166 & 0,166 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0 & 0,577 & 0,408 & 0,408 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0,577 & 0 & 0,408 & 0,408 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,408 & 0 & 0,707 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,408 & 0,707 & 0 \end{pmatrix}$$

5.22.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,15723 X^7 - 1,39387 X^6 - 4,36773 X^5 - 5,49871 X^4 - 10,57518 X^3 - 16,41750 X^2 - 28,13638 X - 46,04424$$

5.22.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,12316401 - 1,414310 i \\ X(2) &= 0,12316401 + 1,414310 i \\ X(3) &= 1,0558019 - 1,059941 i \\ X(4) &= 1,0558019 + 1,059941 i \\ X(5) &= -1,5133347 - 0,2701471 i \\ X(6) &= -1,5133347 + 0,2701471 i \\ X(7) &= -0,79831497 - 1,126659 i \\ X(8) &= -0,79831497 + 1,126659 i \\ X(9) &= 2,2653674 \end{aligned}$$

5.22.6. CR-İndisi

4,6232992

5.22.7. 0'ncı (Mertebe) İndisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 1 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 5,884$$

5.22.8. Randic (x^1) İndisi

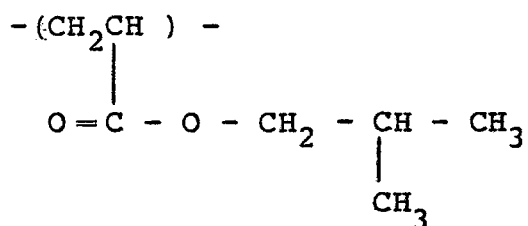
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,408 + 0,707$$

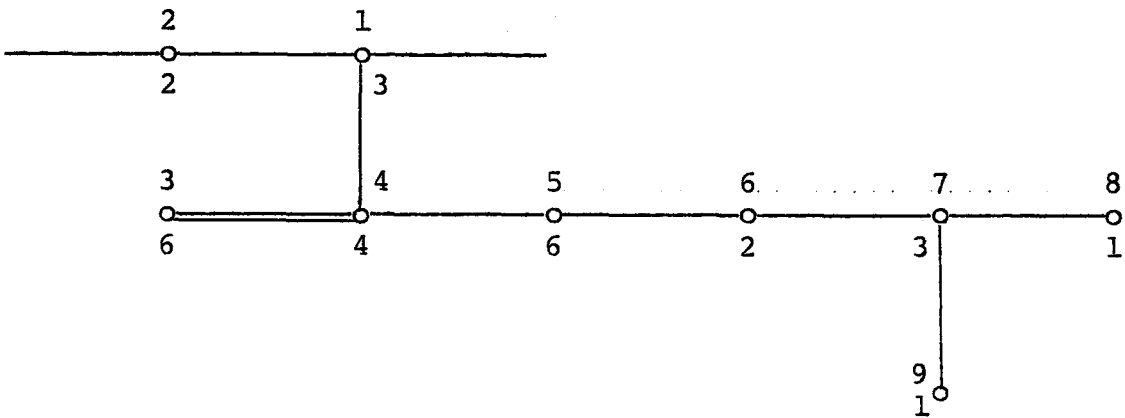
$$x^1 = 3,032$$

5.23. POLİ İZO-BUTİL AKRİLAT

5.23.1. Yapısal Formül



5.23.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.23.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,048 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,083 & 0,083 & 0,083 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,166 & 0,166 & 0,166 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,408 & 0,408 & 0,408 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0 & 0,577 & 0,577 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,577 & 0 & 0,577 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,577 & 0,577 & 0 \end{pmatrix}$$

5.23.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,15566 X^7 - 1,47283 X^6 - 4,39721 X^5 - 5,78704 X^4 - 10,90134 X^3 - 17,34051 X^2 - 29,64530 X - 49,14510$$

5.23.5. Polinomun Kökleri

$$x(1) = 0,12360200 - 1,424514 i$$

$$x(2) = 0,12360200 + 1,424514 i$$

$$x(3) = 1,0631166 - 1,067748 i$$

$$x(4) = 1,0631166 + 1,067748 i$$

$$x(5) = -1,5199096 - 0,2961799 i$$

$$x(6) = -1,5199096 + 0,2961799 i$$

$$x(7) = -0,80603389 - 1,135018 i$$

$$x(8) = -0,80603389 + 1,135018 i$$

$$x(9) = 2,2784498$$

5.23.6. CR-İndisi

$$4,6518870$$

5.23.7. 0'ncı (x^0) Mertebe İndisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 1 + 1$$

$$x^0 = 5,884$$

5.23.8. Randic (X^1) İndisi

$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} +$$

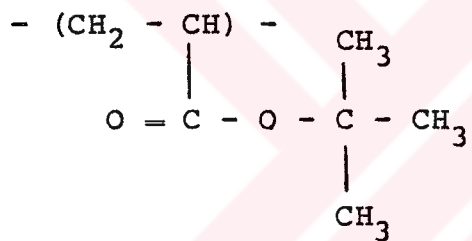
$$(2.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,577 + 0,577$$

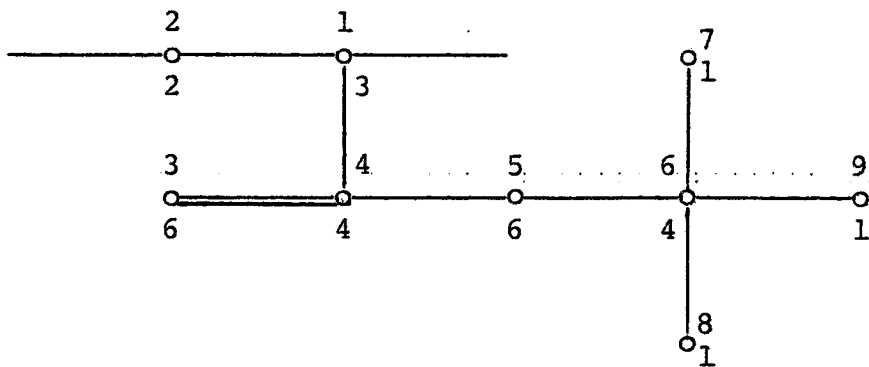
$$X^1 = 2,954$$

5.24. POLİ TERSİYER-BUTİL AKRİLAT

5.24.1 Yapısal Formül



5.24.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.24.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,042 & 0,042 & 0,042 & 0,042 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,042 & 0,042 & 0,042 & 0,042 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,102 & 0,102 & 0,102 & 0,102 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,204 & 0,204 & 0,204 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,5 & 0 & 0,5 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0 \end{pmatrix}$$

5.24.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^9 - 2,18389 X^7 - 1,59411 X^6 - 4,62586 X^5 - 6,41175 X^4 - 12,10182 X^3 - 19,90660 X^2 - 34,60704 X - 58,84956$$

5.24.5. Polinomun Kökleri

- $X(1) = 0,12575150 - 1,4554289 i$
- $X(2) = 0,12575150 + 1,4554289 i$
- $X(3) = 1,0851471 - 1,090358 i$
- $X(4) = 1,0851471 + 1,090358 i$
- $X(5) = -1,5439744 - 0,3238985 i$
- $X(6) = -1,5439744 + 0,3238985 i$

$$X(7) = -0,82464908 - 1,159859 i$$

$$X(8) = -0,82464908 + 1,159859 i$$

$$X(9) = 2,3154498$$

5.24.6. CR-Indisi

$$4,7372470$$

5.24.7. 0'ncı (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,5 + 1 + 1 + 1$$

$$X^0 = 6,1$$

5.24.8. Randic (X^1) Indisi

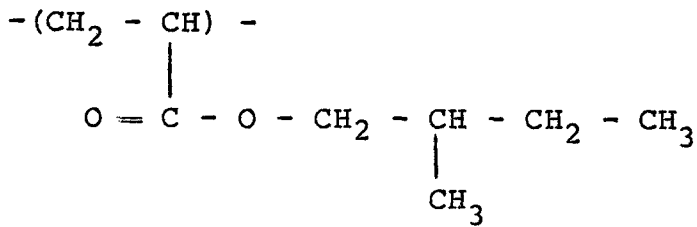
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.4)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2} + (4.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,204 + 0,5 + 0,5 + 0,5$$

$$X^1 = 2,808$$

5.25. POLİ 2-METİL-BUTİL AKRİLAT

5.25.1. Yapısal Formül



5.2.5.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.25.3. Topolojik Matris

A =

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,048	0,034	0,034	0,048
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,024	0,034
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,024	0,034
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,083	0,059	0,059	0,083
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,288	0,166	0,118	0,118	0,166
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288		0,408	0,288	0,288	0,408
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0	0,408	0,408	0,577
0,034	0,024	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0	0,707	0,408
0,034	0,024	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0,707	0	0,408
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,577	0,408	0,408	0

5.25.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,65530 X^8 - 2,08876 X^7 - 6,81676 X^6 - 10,22930 X^5 - \\ 21,46192 X^4 - 38,55288 X^3 - 73,94139 X^2 - 137,94780 X - 260,26930$$

5.25.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,37974606 - 1,598244 i \\ X(2) &= 0,37974606 + 1,598244 i \\ X(3) &= -0,61468688 - 1,47774 i \\ X(4) &= -0,61468688 + 1,47774 i \\ X(5) &= -1,4040017 - 0,7978572 i \\ X(6) &= -1,4040017 + 0,7878572 i \\ X(7) &= -1,8992005 \\ X(8) &= 1,3078905 - 1,121333 i \\ X(9) &= 1,3078905 + 1,121333 i \\ X(10) &= 2,5613044 \end{aligned}$$

5.25.6. CR-İndisi

$$5,9365775$$

5.25.7. 0'ncı (X^0) Mertebe İndisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + \\ (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + 1 + 1$$

$$x^0 = 6,591$$

5.25.8. Randic (X^1) İndisi

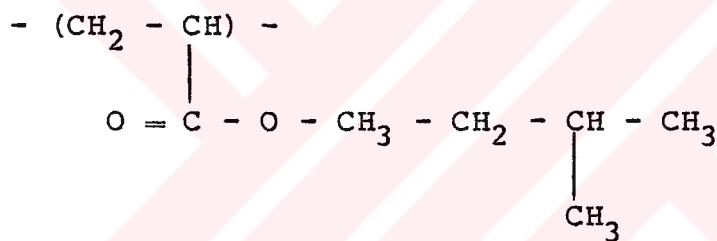
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + \\ (2.3)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + 0,707 + 0,577 - 0,204$$

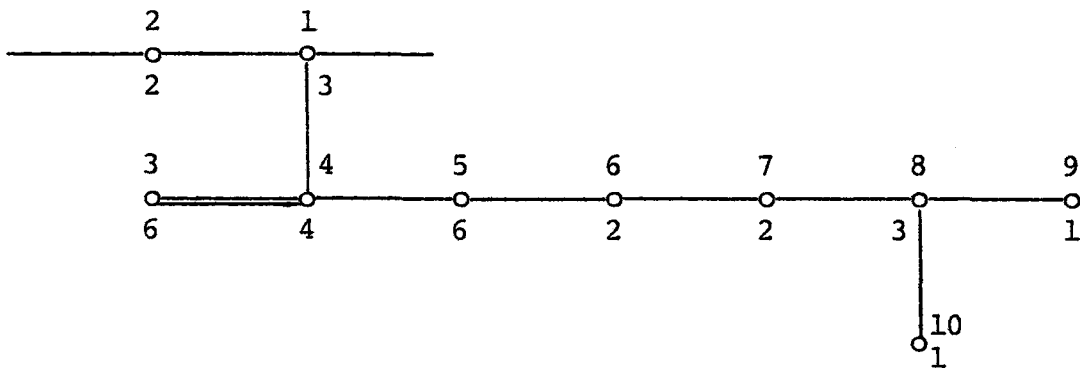
$$X^1 = 3,492$$

5.26. POLİ 3-METİL-BUTİL AKRİLAT

5.26.1. Yapısal Formül



5.26.2 Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.26.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,059 & 0,059 & 0,059 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,118 & 0,118 & 0,118 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,288 & 0,288 & 0,288 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,408 & 0,408 & 0,408 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0 & 0,577 & 0,577 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,577 & 0 & 0,577 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,577 & 0,577 & 0 \end{pmatrix}$$

5.26.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,65548 X^8 - 2,12998 X^7 - 6,81928 X^6 - 10,39556 X^5 - 21,61512 X^4 - 39,13073 X^3 - 74,90469 X^2 - 140,21800 X - 264,73140$$

5.26.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,38014147 - 1,600971 i$$

$$X(2) = 0,38014147 + 1,600971 i$$

$$X(3) = -0,61636361 - 1,480207 i$$

$$X(4) = -0,61636361 + 1,480207 i$$

$$X(5) = -1,4091785 - 0,8008363 i$$

$$X(6) = -1,4091785 + 0,8008363 i$$

$$X(7) = -1,8947899$$

$$X(8) = 1,3099366 - 1,123278 i$$

$$X(9) = 1,3099366 + 1,123278 i$$

$$X(10) = 2,5657181$$

5.26.6. CR-Indisi

$$5,9458742$$

5.26.7. Ornci (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,577 + 1 + 1$$

$$X^0 = 6,591$$

5.26.8. Randic (X^1) Indisi

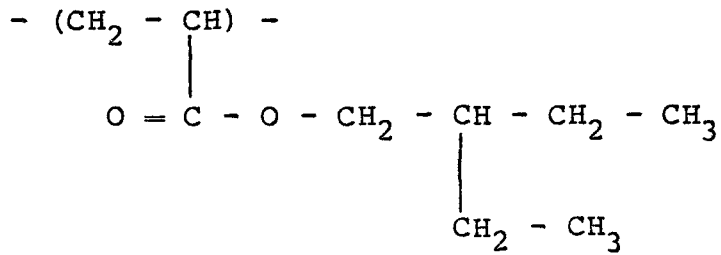
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + 2.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 0,577$$

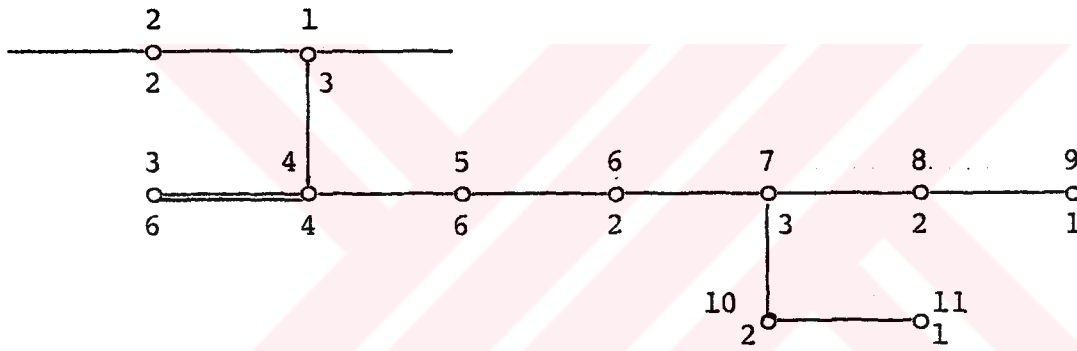
$$X^1 = 3,454$$

5.27. POLİ 2-ETİL-BUTİL AKRİLAT

5.27.1. Yapısal Formül



5.27.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.27.3. Topolojik Matris

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,166 & 0,118 & 0,118 & 0,118 & 0,118 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,408 & 0,288 & 0,288 & 0,288 & 0,288 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0 & 0,408 & 0,408 & 0,408 & 0,408 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0 & 0,707 & 0,288 & 0,288 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,707 & 0 & 0,288 & 0,288 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,288 & 0,288 & 0 & 0,707 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,288 & 0,288 & 0,707 & 0 \end{bmatrix}$$

5.27.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{11} - 3,15378 X^9 - 2,70199 X^8 - 9,64308 X^7 - 15,80967 X^6 - \\ 36,22646 X^5 - 71,14227 X^4 - 149,04720 X^3 - 303,92970 X^2 - \\ 626,54240 X - 1286,02400$$

5.27.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,63288965 - 1,714827 i \\ X(2) = 0,63288965 + 1,714827 i \\ X(3) = 1,526885 - 1,145913 i$$

$$\begin{aligned} X(4) &= 1,526885 + 1,145913 i \\ X(5) &= -1,2656169 - 1,235264 i \\ X(6) &= -1,2656169 + 1,235264 i \\ X(7) &= -0,38043459 - 1,741808 i \\ X(8) &= -0,38043459 + 1,741808 i \\ X(9) &= -1,9161130 - 0,3406092 i \\ X(10) &= -1,9161130 + 0,3406092 i \\ X(11) &= 2,8047726 \end{aligned}$$

5.27.6. CR-Indisi

$$7,1243219$$

5.27.7. Ornci (X⁰) Mertebe Indisi

$$\begin{aligned} X^0 &= (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + \\ & (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} \end{aligned}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + 1 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 7,298$$

5.27.8. Randic (X¹) Indisi

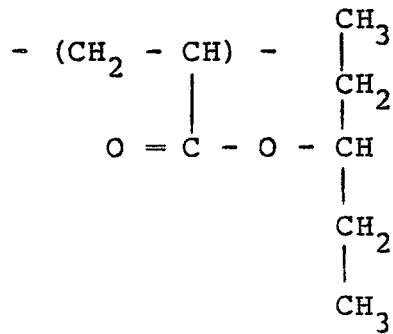
$$\begin{aligned} X^1 &= (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + \\ & (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} \end{aligned}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + 0,707 + 0,408 + 0,707$$

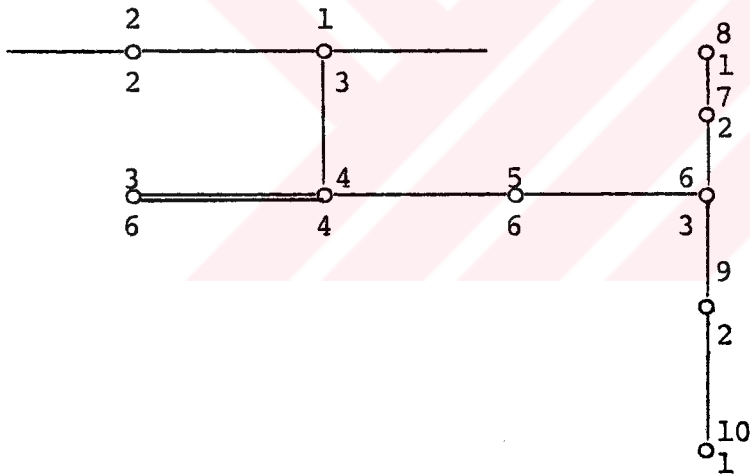
$$X^1 = 4,03$$

5.28. POLİ 3-PENTİL AKRİLAT

5.28.1. Yapısal Formül



5.28.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.28.3. Topolojik Matris

A=

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,068	0,048	0,048	0,048	0,048
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,048	0,034	0,034	0,034	0,034
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,048	0,034	0,034	0,034	0,034
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,118	0,083	0,083	0,083	0,083
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,236	0,166	0,166	0,166	0,166
0,068	0,048	0,048	0,118	0,236	0	0,408	0,408	0,408	0,408
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0	0,707	0,288	0,288
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,707	0	0,288	0,288
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,288	0,288	0	0,707
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,288	0,288	0,707	0

5.28.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{10} - 2,65520 X^8 - 1,91637 X^7 - 6,64470 X^6 - 9,37660 X^5 - 19,98842 X^4 - 34,71611 X^3 - 66,15430 X^2 - 120,85120 X - 224,89790$$

5.28.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = 0,37499172 - 1,573956 i$$

$$X(2) = 0,37499172 + 1,573956 i$$

$$X(3) = -0,60335883 - 1,454919 i$$

$$X(4) = -0,60335883 + 1,454919 i$$

$$X(5) = -1,3751916 - 0,7777127 i$$

$$X(6) = -1,3751916 + 0,7777127 i$$

$$X(7) = -1,9026677$$

$$X(8) = 1,2888743 - 1,103865 i$$

$$X(9) = 1,2888743 + 1,103865 i$$

$$X(10) = 2,5320365$$

5.28.6. CR-Indisi

$$5,8597685$$

5.28.7. 0'nci (X⁰)Mertebe Indisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 0,707 + 1 + 0,707 + 1$$

$$X^0 = 6,591$$

5.28.8. Randic (X¹) Indisi

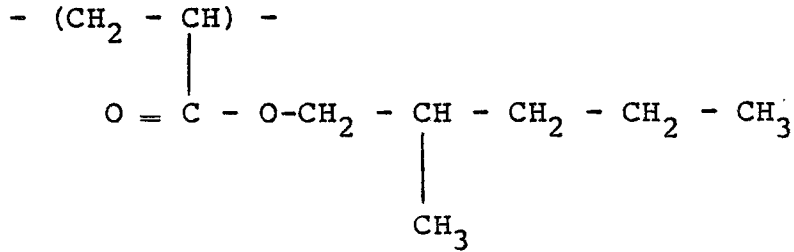
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,408 + 0,707 + 0,408 + 0,707$$

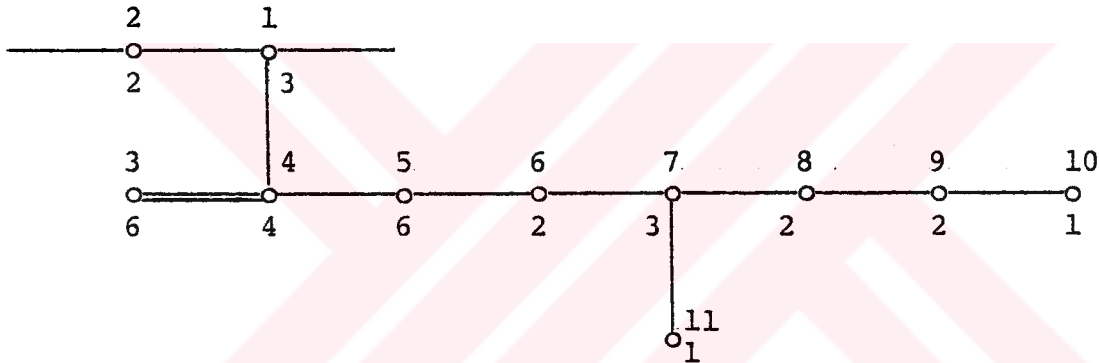
$$X^1 = 3,57$$

5.29. POLİ 2-METİL-PENTİL AKRİLAT

5.29.1. Yapısal Formül



5.29.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.29.3. Topolojik Matris

A=

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,048	0,034	0,024	0,024	0,048
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,017	0,017	0,034
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,034	0,024	0,017	0,017	0,034
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,083	0,059	0,042	0,042	0,083
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,288	0,166	0,118	0,083	0,083	0,166
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0	0,408	0,288	0,204	0,204	0,408
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0	0,408	0,288	0,288	0,577
0,034	0,024	0,024	0,059	0,118	0,288	0,408	0	0,5	0,5	0,408
0,024	0,017	0,017	0,042	0,083	0,204	0,288	0,5	0	0,707	0,288
0,024	0,017	0,017	0,042	0,083	0,204	0,288	0,5	0,707	0	0,288
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,577	0,408	0,288	0,288	0

5.29.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{11} - 3,15434 X^9 - 2,74808 X^8 - 9,61893 X^7 - 15,96610 X^6 - \\ 36,23296 X^5 - 71,49702 X^4 - 149,29410 X^3 - 304,73240 X^2 - \\ 627,48530 X - 1287,77700$$

5.29.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,63265162 - 1,714798 i \\ X(2) &= 0,63265162 + 1,714798 i \\ X(3) &= 1,5266303 - 1,145813 i \\ X(4) &= 1,5266303 + 1,145813 i \\ X(5) &= -1,2670667 - 1,235348 i \\ X(6) &= -1,2670667 + 1,235348 i \\ X(7) &= -1,9148092 - 0,3464446 i \\ X(8) &= -1,9148092 + 0,3464446 i \\ X(9) &= -0,38089062 - 1,741707 i \\ X(10) &= -0,38089062 + 1,741707 i \\ X(11) &= 2,8069693 \end{aligned}$$

5.29.6. CR-İndisi

$$7,1255331$$

5.29.7. 0'nci (X^0) Mertebe Indisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + 0,707 + 1 + 1$$

$$X^0 = 7,298$$

5.29.8. Randic (X^1) Indisi

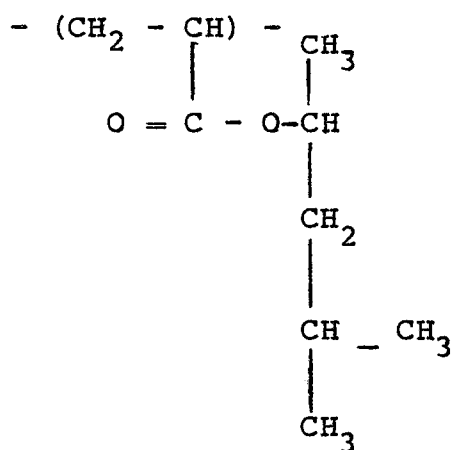
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + 0,5 + 0,707 + 0,577$$

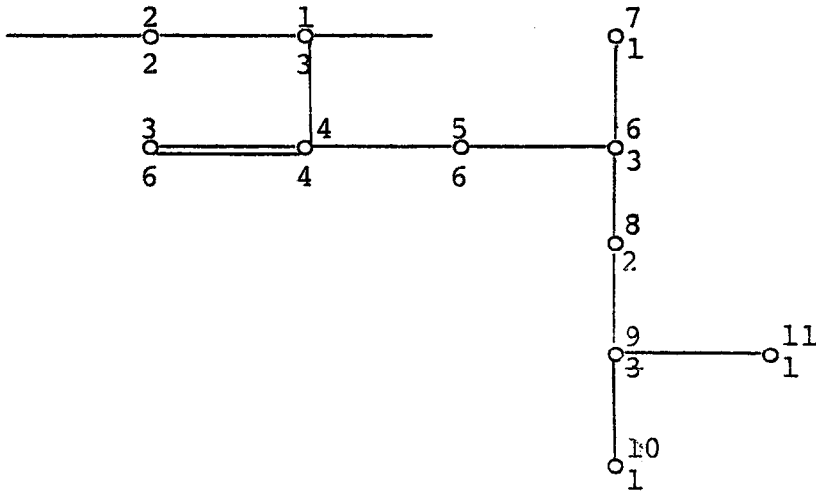
$$X^1 = 3,992$$

5.30. POLİ 4-METİL-2 PENTİL AKRİLAT

5.30.1. Yapısal Formül



5.30.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.30.3. Topolojik Matris

A =

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,068	0,068	0,048	0,028	0,028	0,028
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,048	0,048	0,034	0,019	0,019	0,019
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,048	0,048	0,034	0,019	0,019	0,019
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,118	0,118	0,083	0,048	0,048	0,048
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,204	0,236	0,166	0,096	0,096	0,096
0,068	0,048	0,048	0,118	0,236	0	0,577	0,408	0,236	0,236	0,236
0,068	0,048	0,048	0,118	0,236	0,577	0	0,408	0,236	0,236	0,236
0,048	0,034	0,034	0,083	0,166	0,408	0,408	0	0,408	0,408	0,408
0,028	0,019	0,019	0,048	0,096	0,236	0,236	0,408	0	0,577	0,577
0,028	0,019	0,019	0,048	0,096	0,236	0,236	0,408	0,577	0	0,577
0,028	0,019	0,019	0,048	0,096	0,236	0,236	0,408	0,577	0,577	0

5.30.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{11} - 2,77669 x^9 - 9,59623 x^8 - 16,07937 x^7 - 36,27848 x^6 - \\ 71,89205 x^5 - 149,91290 x^4 - 306,48790 x^3 - 631,19520 x^2 - \\ 1296,46600$$

5.30.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,63292093 - 1,715847 i \\ X(2) &= 0,63292093 + 1,715847 i \\ X(3) &= -1,9143997 - 0,3513478 i \\ X(4) &= -1,9143997 + 0,3513478 i \\ X(5) &= 1,5274847 - 1,146541 i \\ X(6) &= 1,5274847 + 1,146541 i \\ X(7) &= -0,38137894 - 1,742746 i \\ X(8) &= -0,38137894 + 1,742746 i \\ X(9) &= -1,2687660 - 1,236347 i \\ X(10) &= -1,2687660 + 1,236347 i \\ X(11) &= 2,8082779 \end{aligned}$$

5.30.6. CR-Indisi

$$7,1290892$$

5.30.7. 0'ncı (X⁰)Mertebe Indisi

$$X^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$X^0 = 0,577 - 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 1 + 0,707 + 0,577 + 1 + 1$$

$$X^0 = 7,461$$

5.30.8. Randic (X¹) Indisi

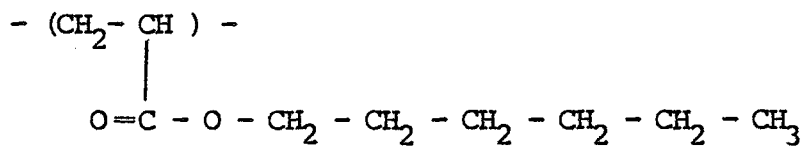
$$X^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2}$$

$$X^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,408 + 0,408 + 0,577 + 0,577$$

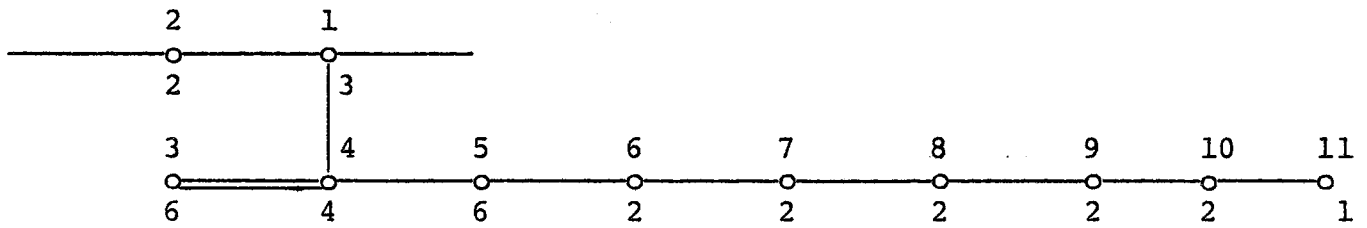
$$X^1 = 3,887$$

5.31. POLİ N-HEKZİL AKRİLAT

5.31.1. Yapısal Formül



5.31.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.31.3. Topolojik Matris

A =

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,021
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,015
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,015
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036
0,118	0,083	0,083	0,204	0	0,288	0,204	0,144	0,102	0,072	0,072
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,177
0,059	0,042	0,042	0,102	0,204	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25
0,042	0,029	0,029	0,072	0,144	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,354
0,029	0,021	0,021	0,051	0,102	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,021	0,015	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,707
0,021	0,015	0,015	0,036	0,072	0,177	0,25	0,354	0,5	0,707	0

5.31.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = X^{11} - 3,15944 X^9 - 2,70242 X^8 - 9,53087 X^7 - 15,60454 X^6 - \\ 35,34802 X^5 - 69,13407 X^4 - 143,57530 X^3 - 290,98350 X^2 - \\ 595,36440 X - 1213,70200$$

5.31.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 1,5178878 - 1,138977 i \\ X(2) &= 1,5178878 + 1,138977 i \\ X(3) &= -0,3785824 - 1,731636 i \\ X(4) &= -0,3785824 + 1,731636 i \\ X(5) &= -1,2593622 - 1,227224 i \\ X(6) &= -1,2593622 + 1,227224 i \\ X(7) &= -1,9079074 - 0,3380432 i \\ X(8) &= -1,9079074 + 0,3380432 i \\ X(9) &= 0,62914153 - 1,704996 i \\ X(10) &= 0,62914153 + 1,704996 i \\ X(11) &= 2,7976454 \end{aligned}$$

5.31.6. CR-İndisi

$$7,0917041$$

5.31.7. 0'ncı (X⁰) Mertebe Indisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 7,135$$

5.31.8. Randic (X¹) Indisi

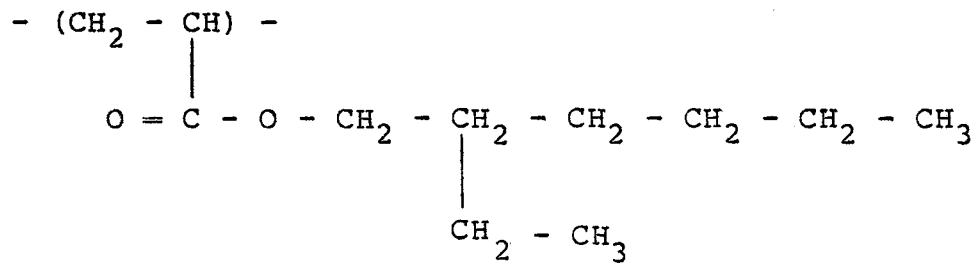
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

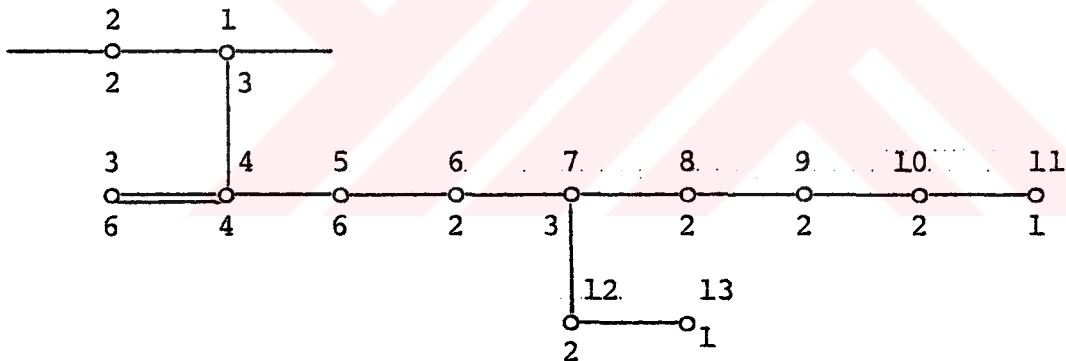
$$x^1 = 4,099$$

5.32 POLİ 2-ETİL-HEKZİL AKRİLAT

5.32.1. Yapısal Formül



5.32.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.32.3. Topologjik Matris

$$A = \begin{matrix} \begin{matrix} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,048 & 0,034 & 0,024 & 0,017 & 0,017 & 0,034 & 0,034 & 0,034 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,024 & 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,034 & 0,024 & 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,024 & 0,024 & 0,024 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,983 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,029 & 0,059 & 0,059 & 0,059 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,166 & 0,118 & 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,118 & 0,118 & 0,118 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,408 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,144 & 0,288 & 0,288 & 0,288 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0 & 0,408 & 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0,408 & 0,408 & 0,408 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,354 & 0,288 & 0,288 & 0,288 \\ 0,024 & 0,017 & 0,017 & 0,042 & 0,083 & 0,204 & 0,288 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 & 0,204 & 0,204 & 0,204 \\ 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,029 & 0,059 & 0,144 & 0,204 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,707 & 0,144 & 0,144 & 0,144 \\ 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,029 & 0,059 & 0,144 & 0,204 & 0,364 & 0,5 & 0,707 & 0 & 0,144 & 0,144 & 0,144 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,144 & 0 & 0,707 & 0,707 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,408 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,144 & 0,707 & 0,707 & 0 \end{matrix} \end{matrix}$$

5.32.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{13} - 4,15455 x^{11} - 4,04922 x^{10} - 16,24290 x^9 - 30,41604 x^8 - \\ 78,24370 x^7 - 174,81300 x^6 - 413,15110 x^5 - 955,01000 x^4 - \\ 2226,04900 x^3 - 5172,73600 x^2 - 12033,40000 x - \\ 27982,42000$$

5.32.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= 0,12117262 - 2,079900 i \\ X(2) &= 0,12117262 + 2,079900 i \\ X(3) &= -0,28099932 \\ X(4) &= -3,3168023 \\ X(5) &= -2,0635304 - 1,481601 i \\ X(6) &= -2,0635304 + 1,481601 i \\ X(7) &= -0,82757842 - 1,928180 i \\ X(8) &= -0,82757842 + 1,928180 i \\ X(9) &= 1,8599743 - 1,150902 i \\ X(10) &= 1,8599743 + 1,150902 i \\ X(11) &= 1,0919014 - 1,805650 i \\ X(12) &= 1,0919014 + 1,805650 i \\ X(13) &= 3,2116449 \end{aligned}$$

5.32.6. CR-İndisi

$$9,3575102$$

5.32.7. 0^{nc1} (X⁰) Mertebe Indisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + \\ (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,577 + 0,707 + \\ 0,707 + 0,707 + 1 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 8,712$$

5.32.8. Randic (X¹) Indisi

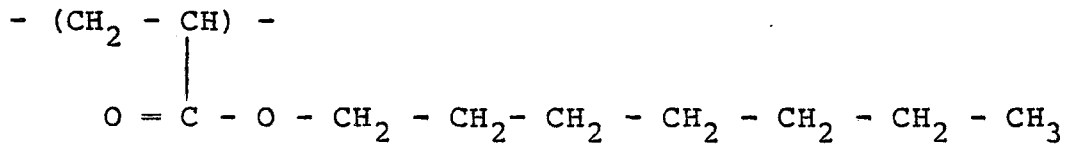
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.3)^{-1/2} + \\ (3.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2} + (3.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,408 + 0,408 + \\ 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

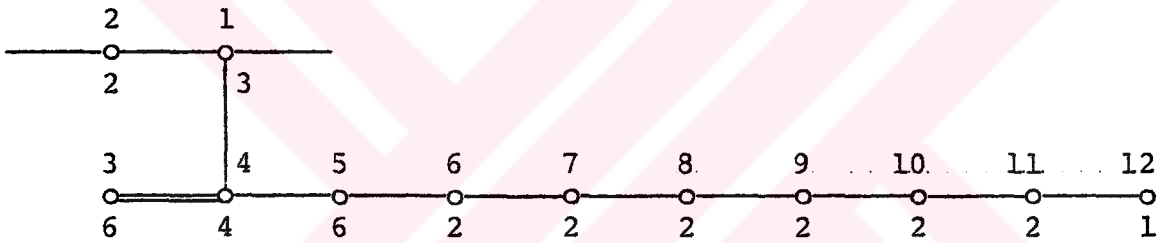
$$x^1 = 5,03$$

5.33. POLİ N-HEPTİL AKRİLAT

5.33.1. Yapısal Formül



5.33.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.33.3. Topologjik Matris

$$A = \begin{array}{cccccccccccccccc} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,021 & 0,015 & 0,015 & 0,015 & 0,015 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,021 & 0,015 & 0,011 & 0,011 & 0,011 & 0,011 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,059 & 0,042 & 0,029 & 0,021 & 0,015 & 0,011 & 0,011 & 0,011 & 0,011 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,036 & 0,026 & 0,026 & 0,026 & 0,026 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,288 & 0,204 & 0,144 & 0,102 & 0,072 & 0,051 & 0,051 & 0,051 & 0,051 \\ 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,144 & 0,288 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,25 & 0,177 & 0,125 & 0,125 & 0,125 & 0,125 \\ 0,059 & 0,042 & 0,042 & 0,102 & 0,204 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,25 & 0,177 & 0,177 & 0,177 & 0,177 \\ 0,042 & 0,029 & 0,029 & 0,072 & 0,204 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,25 & 0,25 & 0,25 & 0,25 \\ 0,029 & 0,021 & 0,021 & 0,051 & 0,102 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,354 & 0,354 & 0,354 & 0,354 \\ 0,021 & 0,015 & 0,015 & 0,036 & 0,072 & 0,177 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,015 & 0,011 & 0,011 & 0,026 & 0,051 & 0,125 & 0,177 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0 & 0 & 0,007 \\ 0,015 & 0,011 & 0,011 & 0,026 & 0,051 & 0,125 & 0,177 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0 \end{array}$$

5.33.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{12} - 3,66859 x^{10} - 3,41400 x^9 - 12,77806 x^8 - 22,70942 x^7 - \\ 54,93948 x^6 - 116,00440 x^5 - 258,50820 x^4 - 563,99630 x^3 - \\ 1240,28100 x^2 - 2719,54100 x - 5969,32000$$

5.33.5. Polinomun Kökleri

$$X(1) = -0,12996080 - 1,934302 i$$

$$X(2) = -0,12996080 + 1,934302 i$$

$$X(3) = -1,0727976 - 1,586729 i$$

$$X(4) = -1,0727976 + 1,586729 i$$

$$X(5) = -2,2146813$$

$$X(6) = -1,7875009 - 0,8104089 i$$

$$X(7) = -1,7875009 + 0,8104089 i$$

$$X(8) = 0,87040890 - 1,783879 i$$

$$X(9) = 0,87040890 + 1,783879 i$$

$$X(10) = 1,7164810 - 1,147582 i$$

$$X(11) = 1,7164810 + 1,147582 i$$

$$X(12) = 3,0214202$$

5.33.6. CR-İndisi

$$8,1952000$$

5.33.7. 0{nc1 (x⁰) Mertebe Indisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 7,842$$

5.33.8. Randic (x¹) Indisi

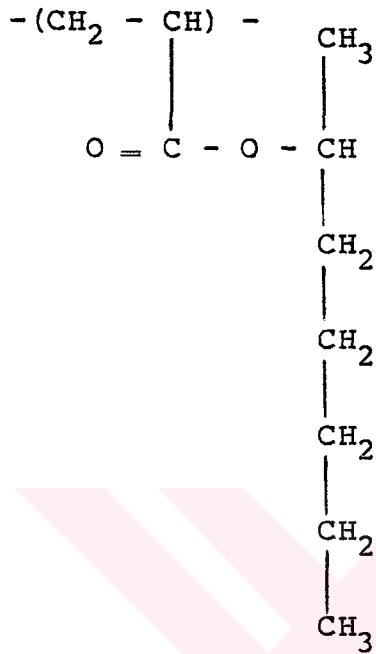
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

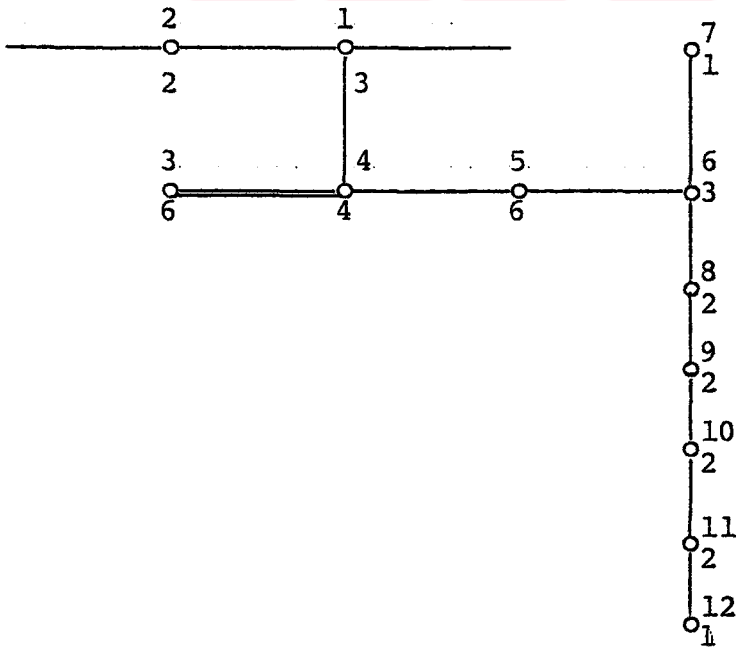
$$x^1 = 4.599$$

5.34. POLİ 2-HEPTİL AKRİLAT

5.34.1. Yapısal Formül



5.34.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.34.3. Topologjik Matris

$$A = \begin{array}{cccccccccccccccc} 0 & 0,408 & 0,118 & 0,288 & 0,118 & 0,068 & 0,068 & 0,048 & 0,034 & 0,024 & 0,017 & 0,017 & 0,017 & 0,017 & 0,017 & 0,017 & 0,017 \\ 0,408 & 0 & 0,083 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,048 & 0,034 & 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 \\ 0,118 & 0,083 & 0 & 0,204 & 0,083 & 0,048 & 0,048 & 0,048 & 0,034 & 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 & 0,013 \\ 0,288 & 0,204 & 0,204 & 0 & 0,204 & 0,118 & 0,118 & 0,118 & 0,083 & 0,042 & 0,029 & 0,029 & 0,029 & 0,029 & 0,029 & 0,029 & 0,029 \\ 0,118 & 0,083 & 0,083 & 0,204 & 0 & 0,236 & 0,236 & 0,236 & 0,166 & 0,083 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 & 0,059 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0 & 0,577 & 0,577 & 0,408 & 0,204 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 \\ 0,068 & 0,048 & 0,048 & 0,118 & 0,236 & 0,577 & 0 & 0,577 & 0,408 & 0,204 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,144 \\ 0,048 & 0,034 & 0,034 & 0,083 & 0,166 & 0,408 & 0,408 & 0,408 & 0 & 0,354 & 0,25 & 0,25 & 0,25 & 0,25 & 0,25 & 0,25 & 0,25 \\ 0,034 & 0,024 & 0,024 & 0,059 & 0,118 & 0,288 & 0,288 & 0,288 & 0,5 & 0 & 0,354 & 0,354 & 0,354 & 0,354 & 0,354 & 0,354 & 0,354 \\ 0,024 & 0,017 & 0,017 & 0,042 & 0,083 & 0,204 & 0,204 & 0,204 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,029 & 0,059 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0,707 \\ 0,017 & 0,013 & 0,013 & 0,029 & 0,059 & 0,144 & 0,144 & 0,144 & 0,25 & 0,354 & 0,5 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0,707 & 0,707 \end{array}$$

5.34.4. Karakteristik Polinom

$$P(X) = x^{12} - 3,65767 x^{10} - 3,35773 x^9 - 12,63796 x^8 - 22,24039 x^7 - \\ 53,76181 x^6 - 112,82410 x^5 - 250,54890 x^4 - 544,04580 x^3 - \\ 1191,41900 x^2 - 2600,88600 x - 5684,26500$$

5.34.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} X(1) &= -0,12926312 - 1,926202 i \\ X(2) &= -0,12926312 + 1,926202 i \\ X(3) &= 0,86690791 - 1,776412 i \\ X(4) &= 0,86690791 + 1,776412 i \\ X(5) &= -1,0679892 - 1,579857 i \\ X(6) &= -1,0679892 + 1,579857 i \\ X(7) &= 1,7094218 - 1,142663 i \\ X(8) &= 1,7094218 + 1,142663 i \\ X(9) &= -1,7794555 - 0,8051914 i \\ X(10) &= -1,7794555 + 0,8051914 i \\ X(11) &= -2,2103317 \\ X(12) &= 3,0110879 \end{aligned}$$

5.34.6. CR-Indisi

$$8,1637473$$

5.34.7. 0'ncı (X⁰) Mertebe Indisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (3)^{-1/2} + (1)^{-1/2} + \\ (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,577 + 1 + 0,707 + \\ 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 8,005$$

5.34.8. Randic (X¹) Indisi

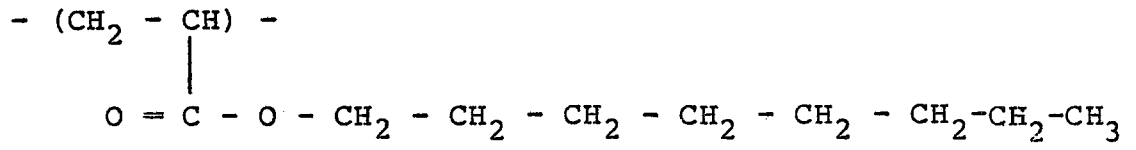
$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.3)^{-1/2} + (3.1)^{-1/2} + \\ (3.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,236 + 0,577 + 0,408 + \\ 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

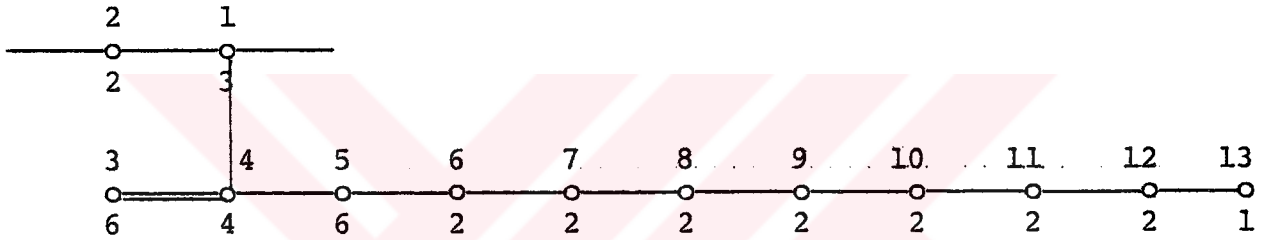
$$x^1 = 4,532$$

5.35. POLİ N-OKTİL AKRİLAT

5.35.1. Yapısal Formül



5.35.2. Hidrojeniz Yapısal Grafik



5.35.3. Topologjik Matris

0	0,408	0,118	0,288	0,118	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,011	0,011	0,011
0,408	0	0,083	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,011	0,007	0,007	0,007
0,118	0,083	0	0,204	0,083	0,059	0,042	0,029	0,021	0,015	0,011	0,007	0,007	0,007
0,288	0,204	0,204	0	0,204	0,144	0,102	0,072	0,051	0,036	0,026	0,018	0,018	0,018
0,118	0,083	0,083	0	0,288	0,204	0,144	0,102	0,102	0,072	0,051	0,036	0,036	0,036
0,083	0,059	0,059	0,144	0,288	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,088	0,088	0,088
0,059	0,042	0,042	0,102	0,204	0,204	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,125	0,125	0,125
0,042	0,029	0,029	0,072	0,144	0,144	0,354	0	0,5	0,354	0,25	0,177	0,177	0,177
0,029	0,021	0,021	0,051	0,102	0,102	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25	0,25
0,021	0,015	0,015	0,036	0,072	0,072	0,354	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,25	0,25
0,015	0,011	0,011	0,026	0,051	0,051	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,354	0,354
0,011	0,007	0,007	0,018	0,036	0,036	0,125	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,5	0,5
0,011	0,007	0,007	0,018	0,036	0,036	0,088	0,177	0,25	0,354	0,5	0	0,707	0,707
0,011	0,007	0,007	0,018	0,036	0,036	0,088	0,177	0,25	0,354	0,5	0,808	0,808	0

A=

5.35.4. Karakteristik Polinom

$$P(x) = x^{13} - 4,16014 x^{11} - 4,09283 x^{10} - 16,19475 x^9 - 30,45231 x^8 - \\ 77,70287 x^7 - 173,48810 x^6 - 408,04530 x^5 - 940,59800 x^4 - \\ 2184,22200 x^3 - 5058,66500 x^2 - 11726,70000 x - 27175,47000$$

5.35.5. Polinomun Kökleri

$$\begin{aligned} x(1) &= 0,12054703 - 2,074771 i \\ x(2) &= 0,12054703 + 2,074771 i \\ x(3) &= 1,0910218 - 1,823332 i \\ x(4) &= 1,0910218 + 1,823332 i \\ x(5) &= -1,6405176 - 1,240586 i \\ x(6) &= -1,6405176 + 1,240586 i \\ x(7) &= -2,2153330 - 0,3473480 i \\ x(8) &= -2,2153330 + 0,3473480 i \\ x(9) &= -0,84697283 - 1,867700 i \\ x(10) &= -0,84697283 + 1,867700 i \\ x(11) &= 1,8857771 - 1,138034 i \\ x(12) &= 1,8857771 + 1,138034 i \\ x(13) &= 3,2109550 \end{aligned}$$

5.35.6. CR-İndisi

$$9,4056347$$

5.35.7. 0'ncı (x⁰) Mertebe Indisi

$$x^0 = (3)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (4)^{-1/2} + (6)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (2)^{-1/2} + (1)^{-1/2}$$

$$x^0 = 0,577 + 0,707 + 0,408 + 0,5 + 0,408 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 0,707 + 1$$

$$x^0 = 8,549$$

5.35.8. Randic (x¹) Indisi

$$x^1 = (3.2)^{-1/2} + (3.4)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (4.6)^{-1/2} + (6.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.2)^{-1/2} + (2.1)^{-1/2}$$

$$x^1 = 0,408 + 0,288 + 0,204 + 0,204 + 0,288 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,5 + 0,707$$

$$x^1 = 5,099$$

VI. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

İncelenen polimerlerin Camsı-Geçiş Temperetürlerini en doğru biçimde gösteren bağıntının bulunabilmesi için, Bölüm V'de hesaplanmış olan CR, Sıfırncı Mertebe ve Randic İndisleri ile literatürden (19) temin edilen deneysel T_g değerleri arasında regresyon yapılmıştır. Regresyon yapılırken polimerlerin düz zincir şeklinde ve dallanmış yapıda olanları ayrı gruplandırılmıştır.

6.1. DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR

Düz zincirli polimetakrilatlar için T_g ve indis (I) arasında üç ayrı grup bağıntı türetilmiştir.

6.1.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar

Düz zincirli polimetakrilatlar için birinci mertebeden aşağıda sıralanmış olan üç ayrı eşitlik regresyon yöntemi ile bulunmuştur.

$$T_g = AI+B \quad (6-1)$$

$$\frac{1}{T_g} = AI+B \quad (6-2)$$

$$\ln T_g = AI+B \quad (6-3)$$

Bu eşitliklerde I, indisi; T_g , Camsı-Geçiş Temperatürünü; A ve B ise sabit katsayıları göstermektedir.

Regresyon N-FIT paket programı yardımı ile bilgisayarda yapılmıştır. Yukarıdaki eşitliklerle gösterilen bağıntılar, her indis için ayrı ayrı bulunmuş ve Tablo 6.2,3,4 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve regresyon doğruları da Şekil 6.1,2,3,4,5,6,7,8,9 da gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre;

CR-İndisi için en iyi doğrusal bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = 1,814 \times 10^{-4} (CR) + 2,356 \times 10^{-3} \quad (6-4)$$

Sıfıncı Mertebe Indisi için en iyi doğrusal bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = 2,911 \times 10^{-4} (X^0) + 1,436 \times 10^{-3} \quad (6-5)$$

Randic Indisi için en iyi doğrusal bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = 4,080 \times 10^{-4} (X^1) + 1,945 \times 10^{-3} \quad (6-6)$$

olduğu saptanmıştır.

6.1.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar

Düz zincirli polimetakrilatlar için ikinci mertebeden aşağıda sıralanmış olan üç ayrı eşitlik regresyon yöntemi ile bulunmuştur.

Tablo 6.2 DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON $(CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g)$

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$T_g = A(CR) + B$	0,9970	345,9237	-14,0814	382,2848	-	-
$T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9985	201,5712	1,1369	-31,2852	434,4358	-
$T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9997	43,7829	-0,4185	10,7724	-96,3056	558,6017
$T_g = A(X^0) + B$	0,9977	267,3134	-22,8788	455,7854	-	-
$T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9989	148,3659	2,6943	-64,2857	603,4721	-
$T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9999	23,6314	-1,4449	35,9176	-307,5229	1168,9933
$T_g = A(X^1) + B$	0,9979	244,2433	-32,1435	416,0654	-	-
$T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9991	130,7065	5,0323	-74,5241	494,4900	-
$T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9989	30,9453	-3,4566	48,4336	-242,0560	690,8837

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ

* R² : KORELASYON KATSAYISI

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON $(CR - \frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g})$

Tablo 6.3

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$	0,9988	$2,019 \times 10^{-8}$	$1,814 \times 10^{-4}$	$2,356 \times 10^{-3}$	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9989	$2,246 \times 10^{-8}$	$-3,281 \times 10^{-6}$	$2,310 \times 10^{-4}$	$2,206 \times 10^{-3}$	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9997	$7,162 \times 10^{-9}$	$4,194 \times 10^{-6}$	$-9,984 \times 10^{-5}$	$8,826 \times 10^{-4}$	$9,615 \times 10^{-4}$
$\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$	0,9989	$1,881 \times 10^{-8}$	$2,911 \times 10^{-4}$	$1,436 \times 10^{-3}$	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9989	$2,220 \times 10^{-8}$	$-3,908 \times 10^{-6}$	$3,511 \times 10^{-4}$	$1,222 \times 10^{-4}$	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9998	$3,908 \times 10^{-9}$	$1,754 \times 10^{-5}$	$-4,072 \times 10^{-4}$	$3,304 \times 10^{-3}$	$-5,643 \times 10^{-3}$
$\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$	0,9990	$1,714 \times 10^{-8}$	$4,080 \times 10^{-4}$	$1,945 \times 10^{-3}$	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9990	$2,036 \times 10^{-8}$	$-5,637 \times 10^{-6}$	$4,555 \times 10^{-4}$	$1,857 \times 10^{-3}$	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9998	$4,457 \times 10^{-9}$	$4,352 \times 10^{-5}$	$-5,521 \times 10^{-4}$	$2,565 \times 10^{-8}$	$-6,154 \times 10^{-4}$

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R² : KORELASYON KATSAYISI

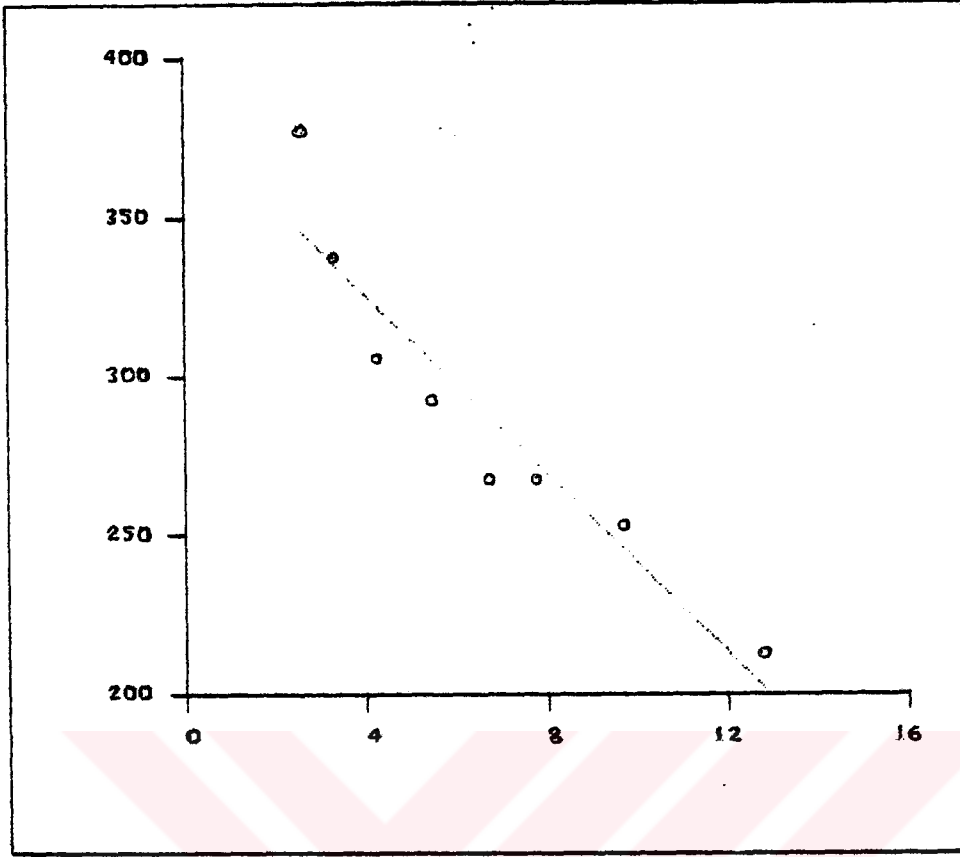
DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON (CR-LnT_g⁰, X⁰-LnT_g¹, X¹-LnT_g)

Tablo 6.4

BAGINTI	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\text{LnT}_g = A(\text{CR})+B$	0,9999	$2,441 \times 10^{-3}$	-0,0499	5,9828	-	-
$\text{LnT}_g = A(\text{CR})^2+B(\text{CR})+C$	1,0000	$1,889 \times 10^{-3}$	$2,509 \times 10^{-3}$	-0,0878	6,0979	-
$\text{LnT}_g = A(\text{CR})^3+B(\text{CR})^2+C(\text{CR})+D$	1,0000	$3,641 \times 10^{-4}$	$-1,296 \times 10^{-3}$	0,0324	-0,2892	6,4825
$\text{LnT}_g = A(X^0)+B$	1,0000	$1,992 \times 10^{-3}$	-0,0804	6,2386	-	-
$\text{LnT}_g = A(X^0)^2+B(X^0)+C$	1,0000	$1,710 \times 10^{-3}$	$5,352 \times 10^{-3}$	-0,1626	6,5319	-
$\text{LnT}_g = A(X^0)^3+B(X^0)^2+C(X^0)+D$	1,0000	$4,121 \times 10^{-4}$	$-4,718 \times 10^{-3}$	0,1138	-0,8569	8,3787
$\text{LnT}_g = A(X^1)+B$	1,0000	$1,806 \times 10^{-3}$	-0,1128	6,0984	-	-
$\text{LnT}_g = A(X^1)^2+B(X^1)+C$	1,0000	$1,566 \times 10^{-3}$	$9,689 \times 10^{-3}$	-0,1944	6,2494	-
$\text{LnT}_g = A(X^1)^3+B(X^1)^2+C(X^1)+D$	1,0000	$5,319 \times 10^{-4}$	-0,0113	0,1521	-0,7439	6,8936

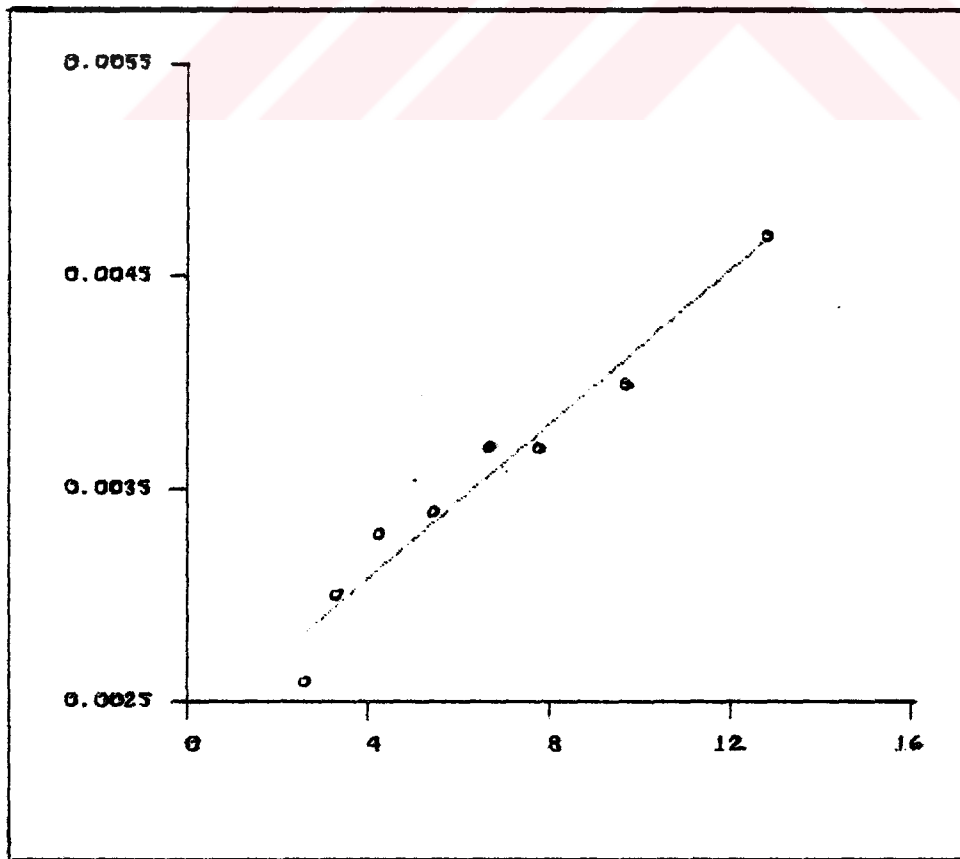
* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R² : KORELASYON KATSAYISI

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON ŞEKİLLERİ



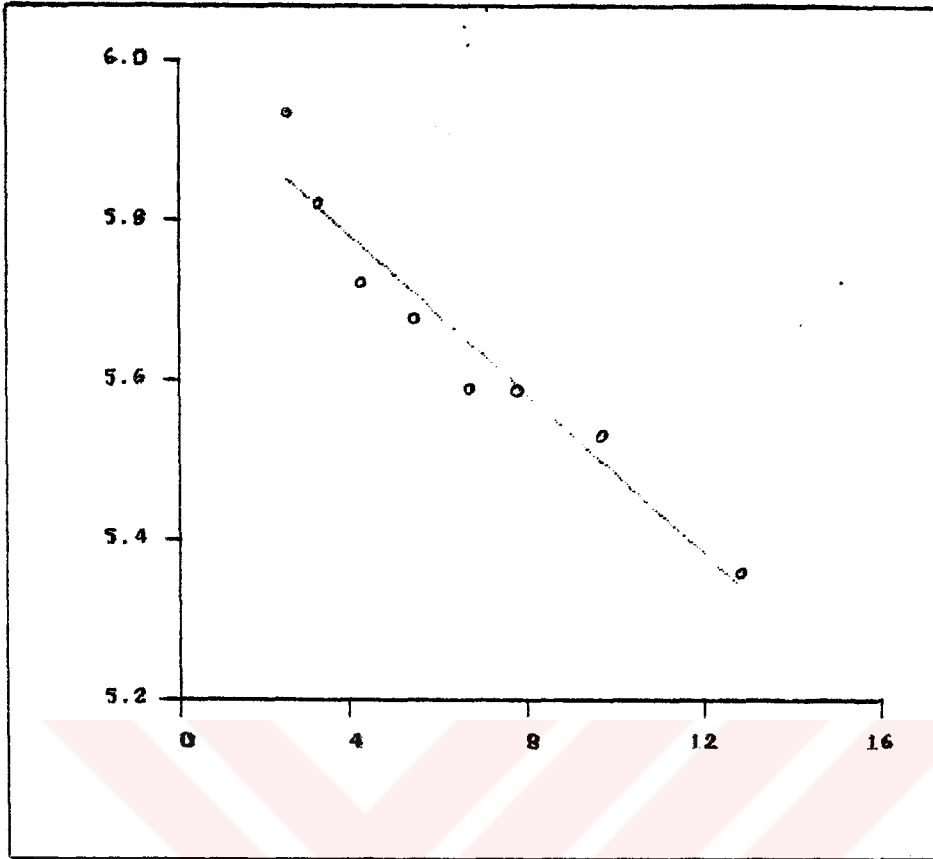
Şekil 6.1

$$T_g = A(CR) + B$$

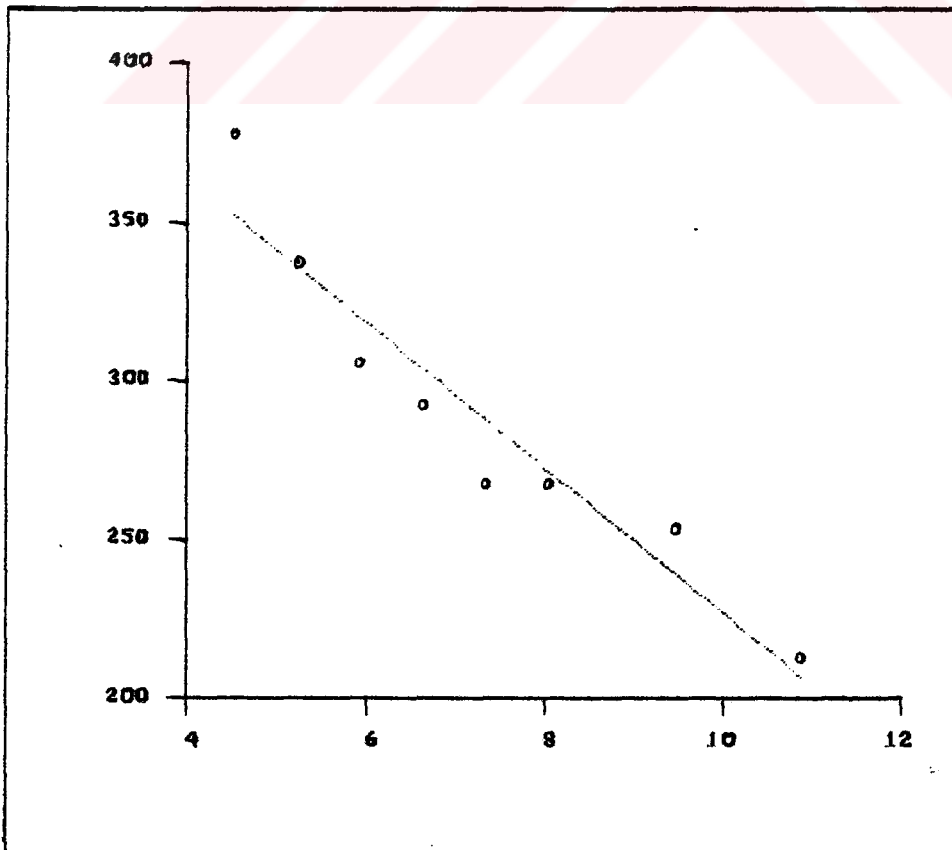


Şekil 6.2

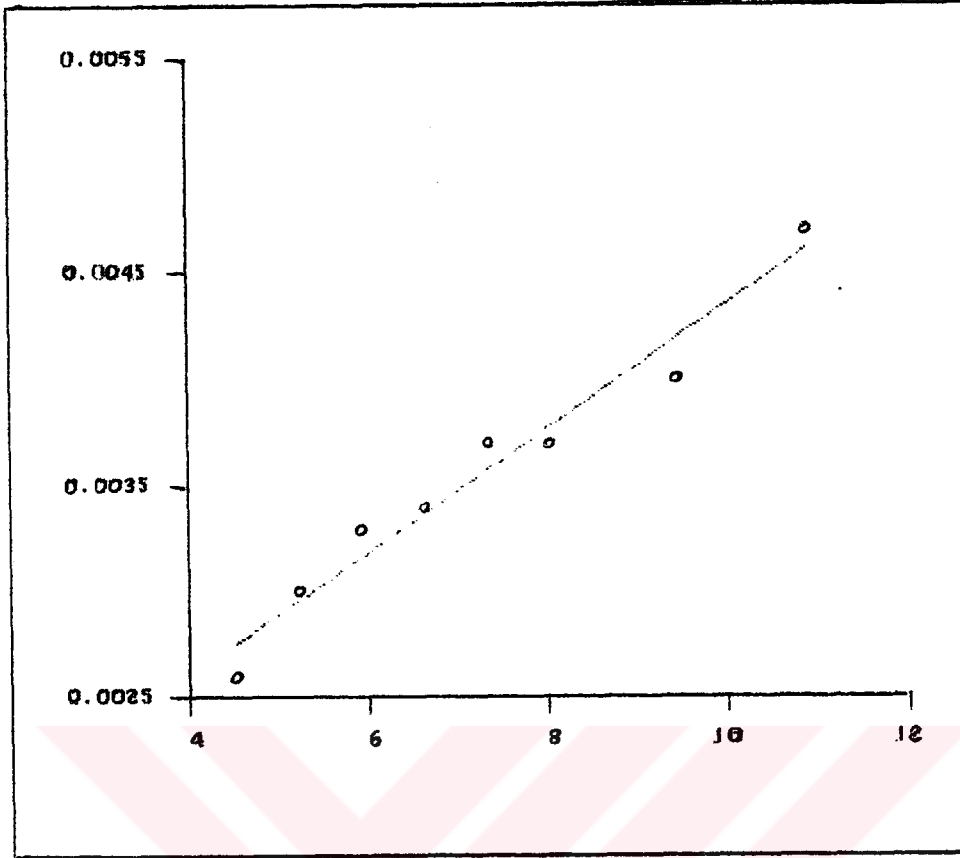
$$\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$$



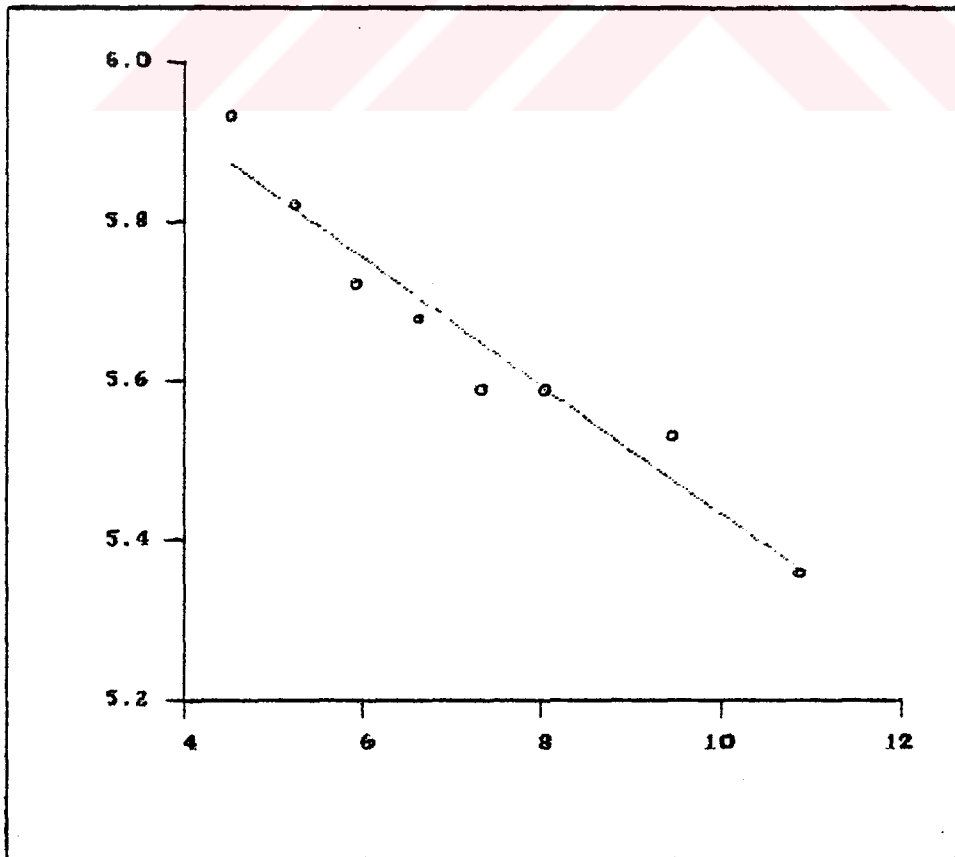
Şekil 6.3 $\text{Ln}T_g = A(\text{CR})+B$



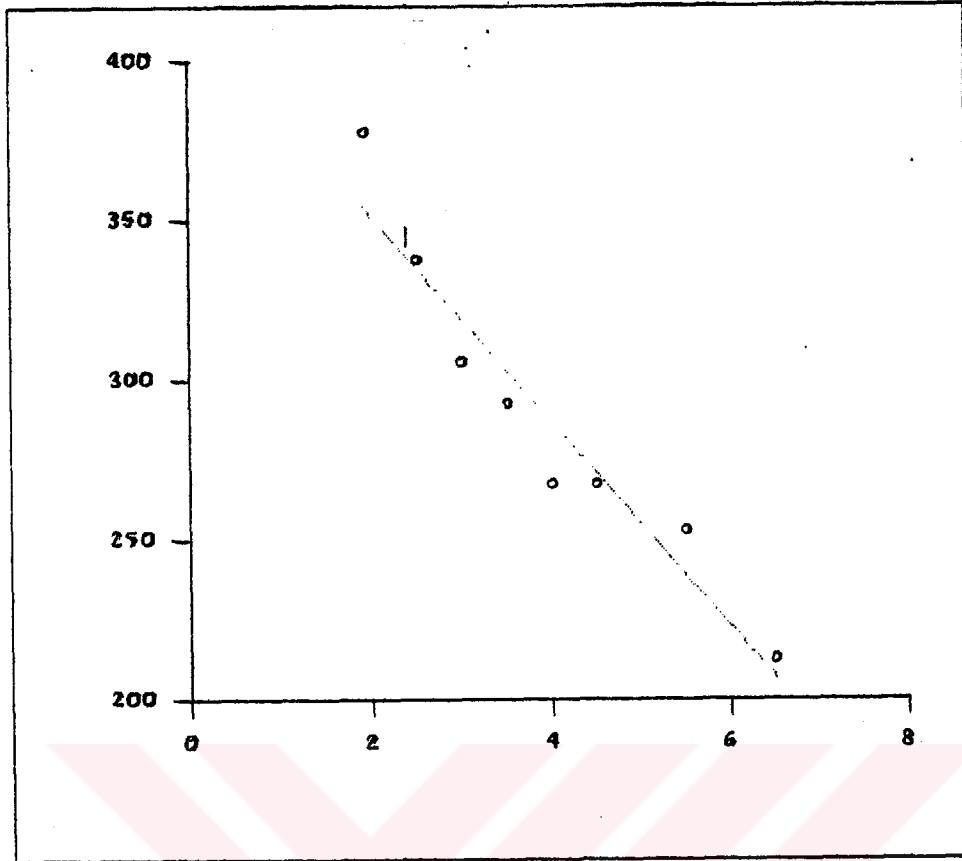
Şekil 6.4 $T_g = A(X^0)+B$



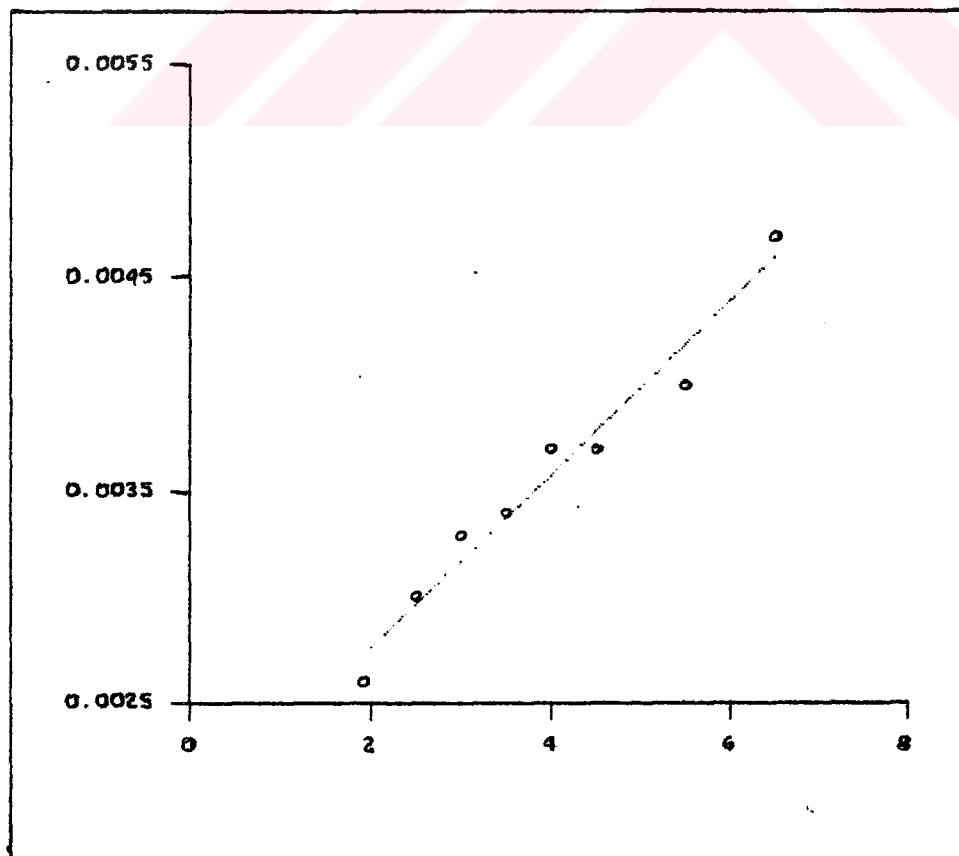
Şekil 6.5 $\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$



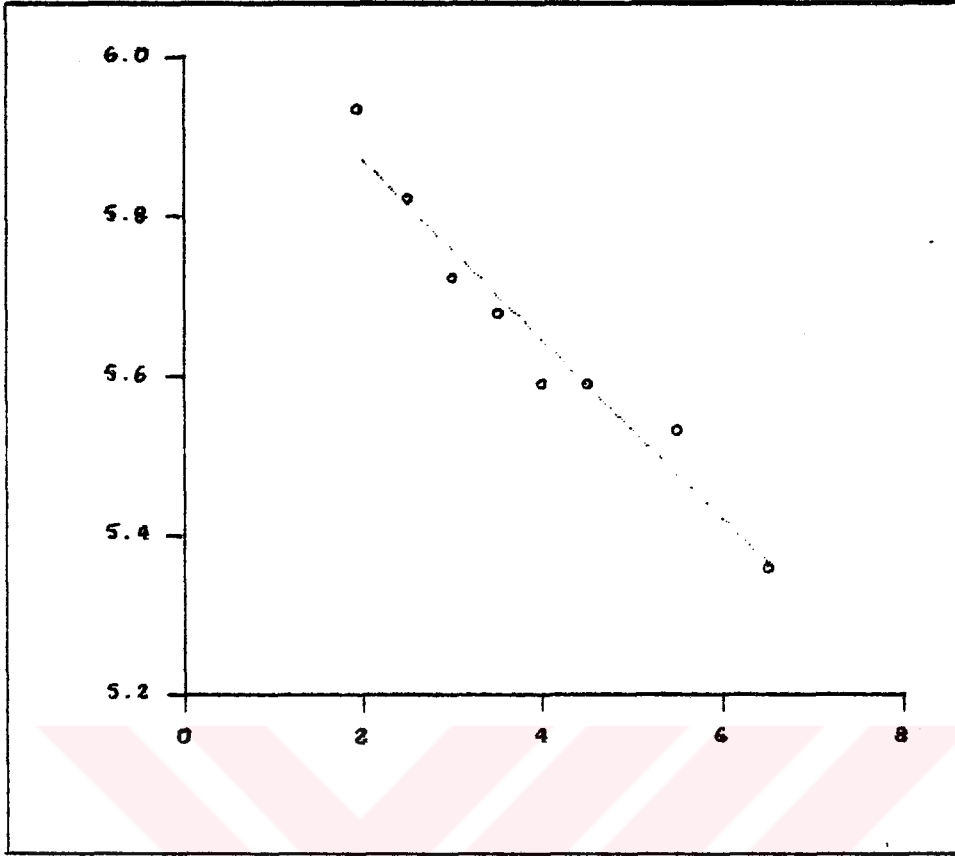
Şekil 6.6 $\text{Ln}T_g = A(X^0) + B$



Şekil 6.7 $T_g = A(X^1)+B$

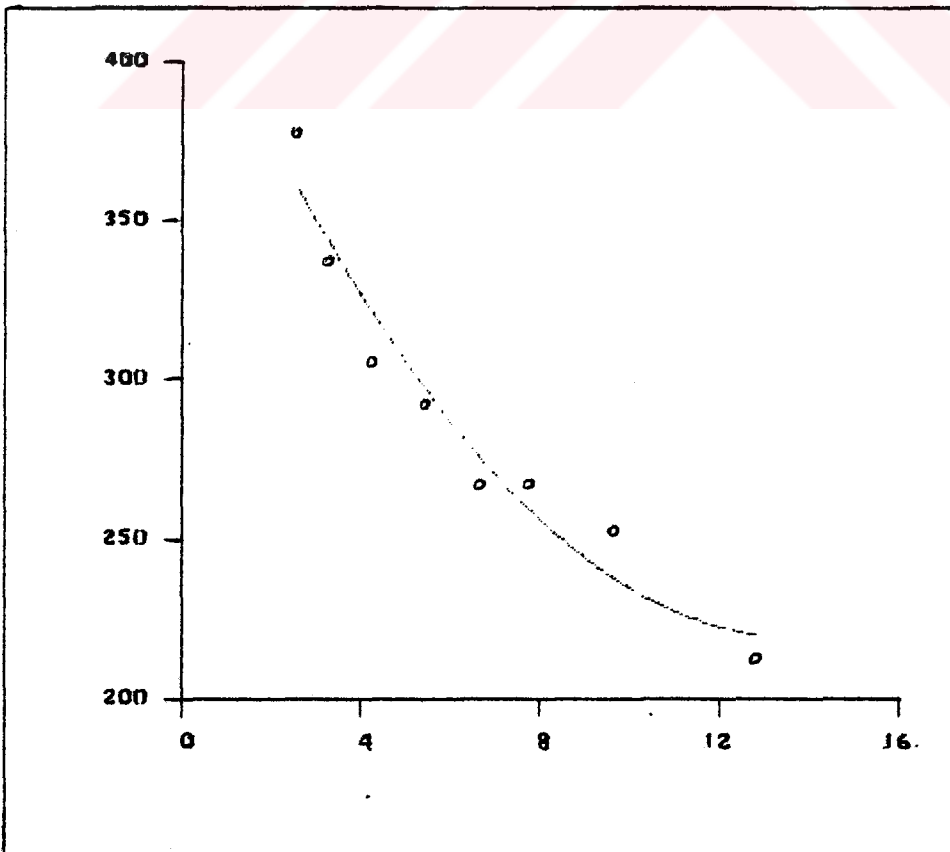


Şekil 6.8 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)+B$



Şekil 6.9

$$\text{Ln}T_g = A(X^1) + B$$



Şekil 6.10

$$T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$$

$$T_g = AI^2 + BI + C \quad (6-7)$$

$$\frac{1}{T_g} = AI^2 + BI + C \quad (6-8)$$

$$\ln T_g = AI^2 + BI + C \quad (6-9)$$

Regresyon N-FIT paket programı yardımı ile bir bilgisayarda yapılmıştır. Yukarıdaki eşitliklerle gösterilen bağıntılar, her indis için ayrı olarak bulunarak Tablo 6.2,3,4 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve regresyonun II.Mertebeden eğrileri de Şekil 6.10,11,12,13,14,15,16,17,18 de gösterilmiştir.

Deneysel T_g değerlerine daha iyi yaklaşım getirebilmek amacıyla elde edilen regresyon sonuçlarına göre;

CR-İndisi için en iyi II.Mertebeden bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = -3,281 \times 10^{-6} (CR)^2 + 2,310 \times 10^{-4} (CR) + 2,206 \times 10^{-3} \quad (6-10)$$

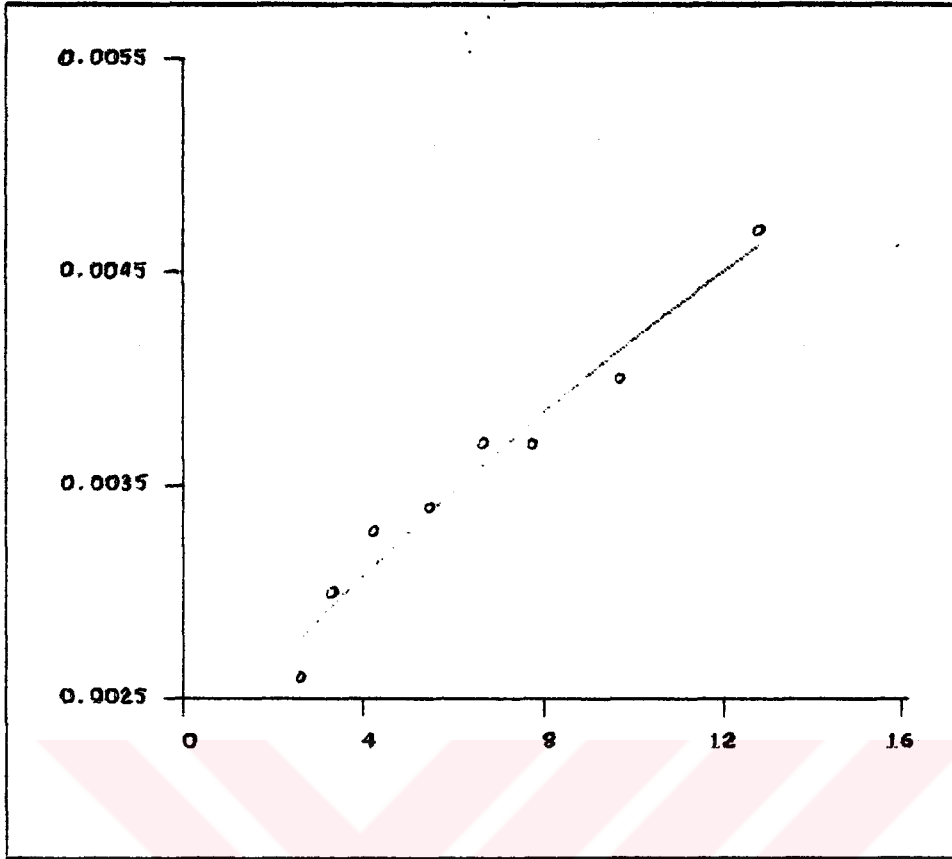
Sıfırıncı Mertebe Indisi için en iyi II.Mertebeden bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = -3,908 \times 10^{-6} (X^0)^2 + 3,511 \times 10^{-4} (X^0) + 1,222 \times 10^{-4} \quad (6-11)$$

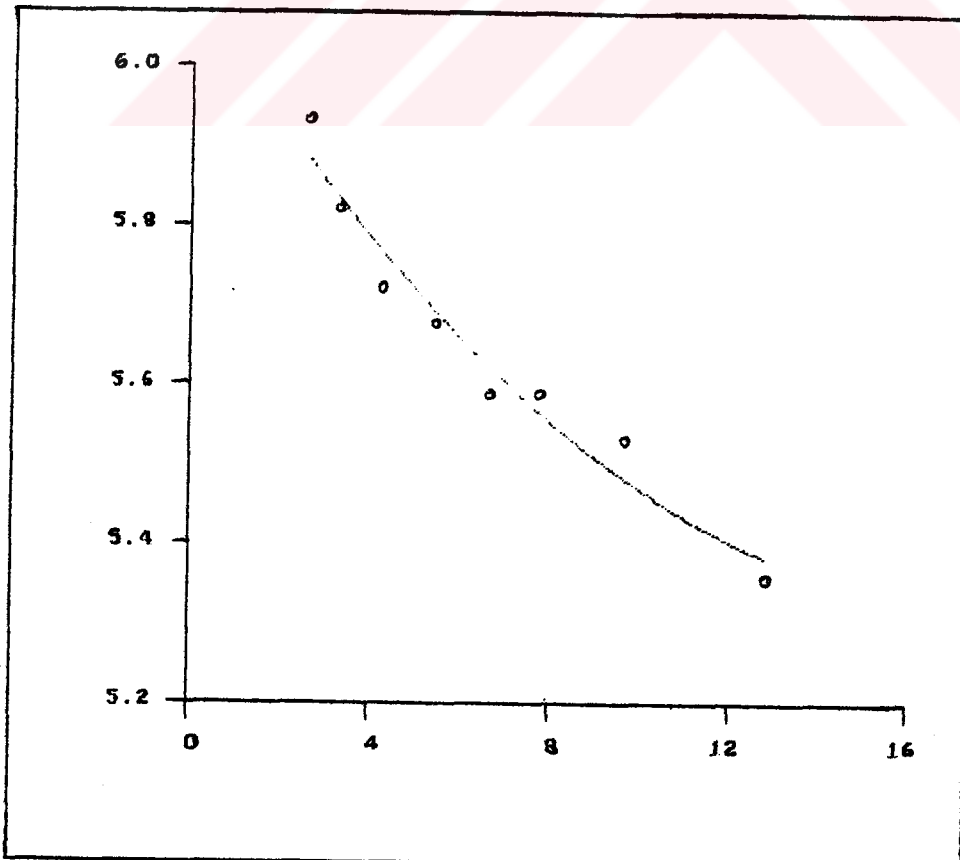
Randic İndisi için en iyi II.Mertebeden bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = -5,637 \times 10^{-6} (X^1)^2 + 4,555 \times 10^{-4} (X^1) + 1,857 \times 10^{-3} \quad (6-12)$$

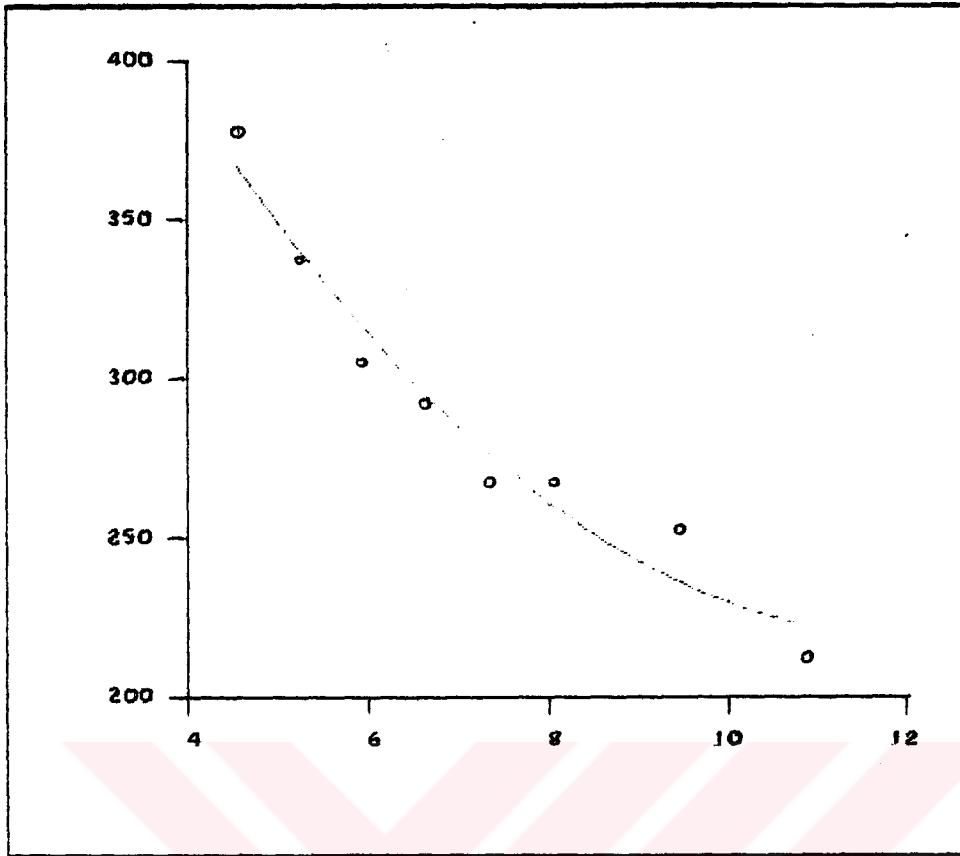
olduğu saptanmıştır.



Şekil 6.11 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$

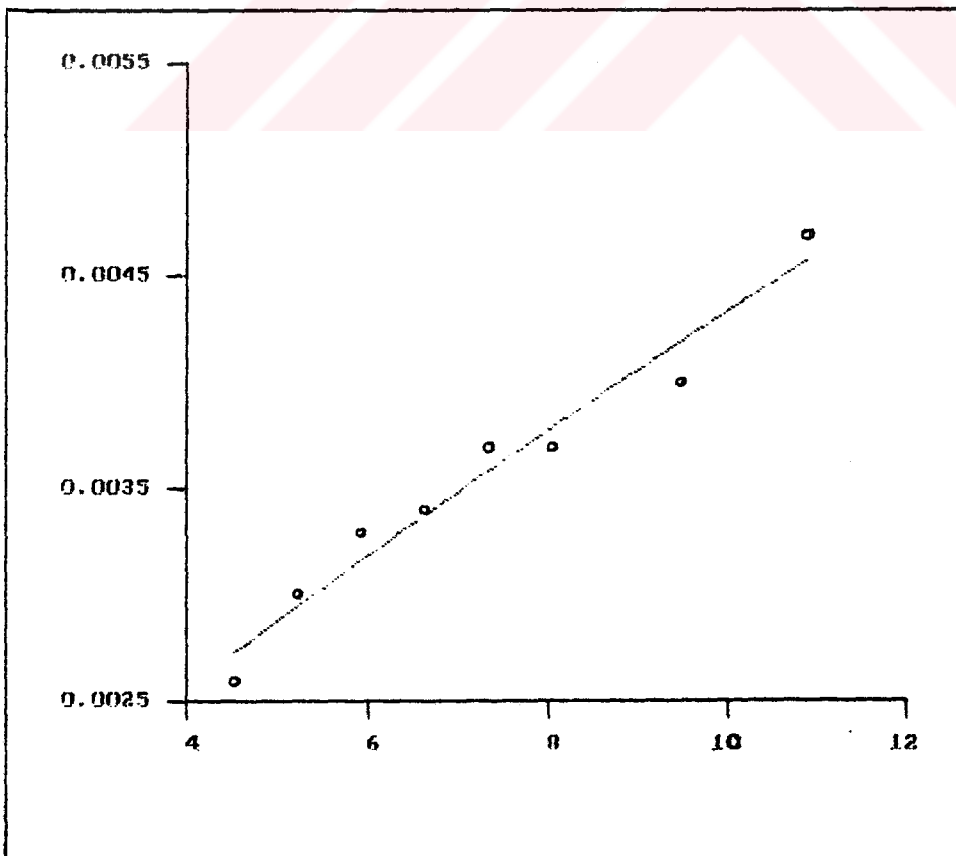


Şekil 6.12 $\text{Ln}T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



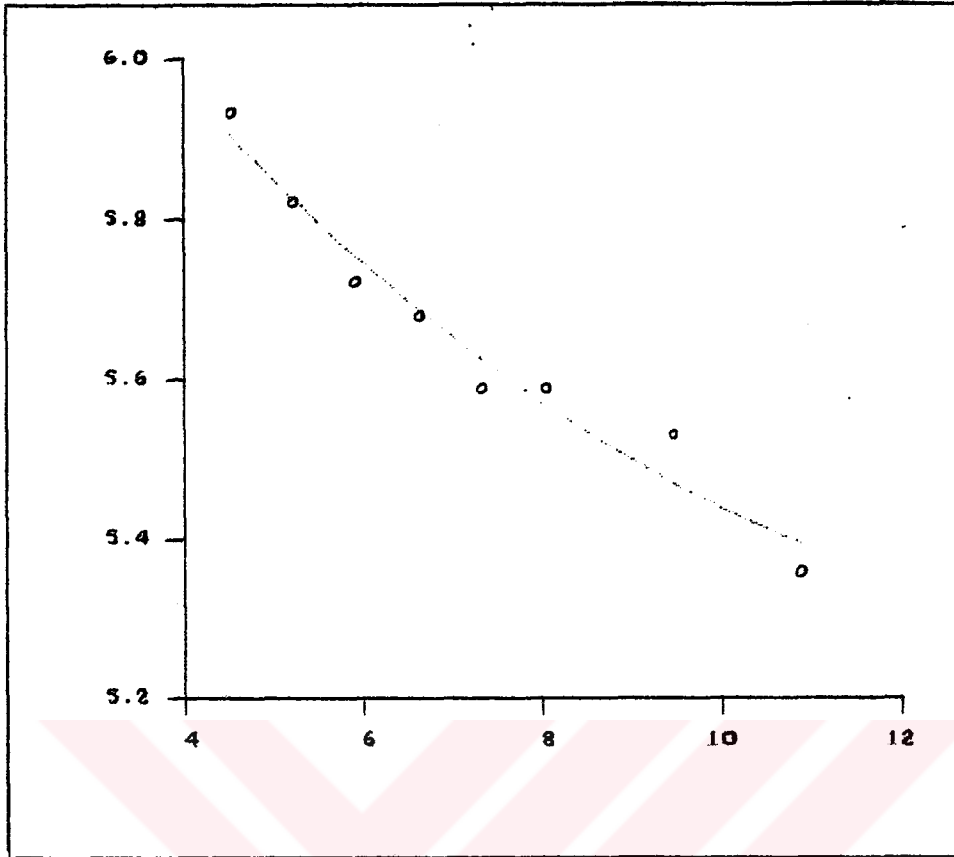
Şekil 6.13

$$T_g = A(X^O)^2 + B(X^O) + C$$

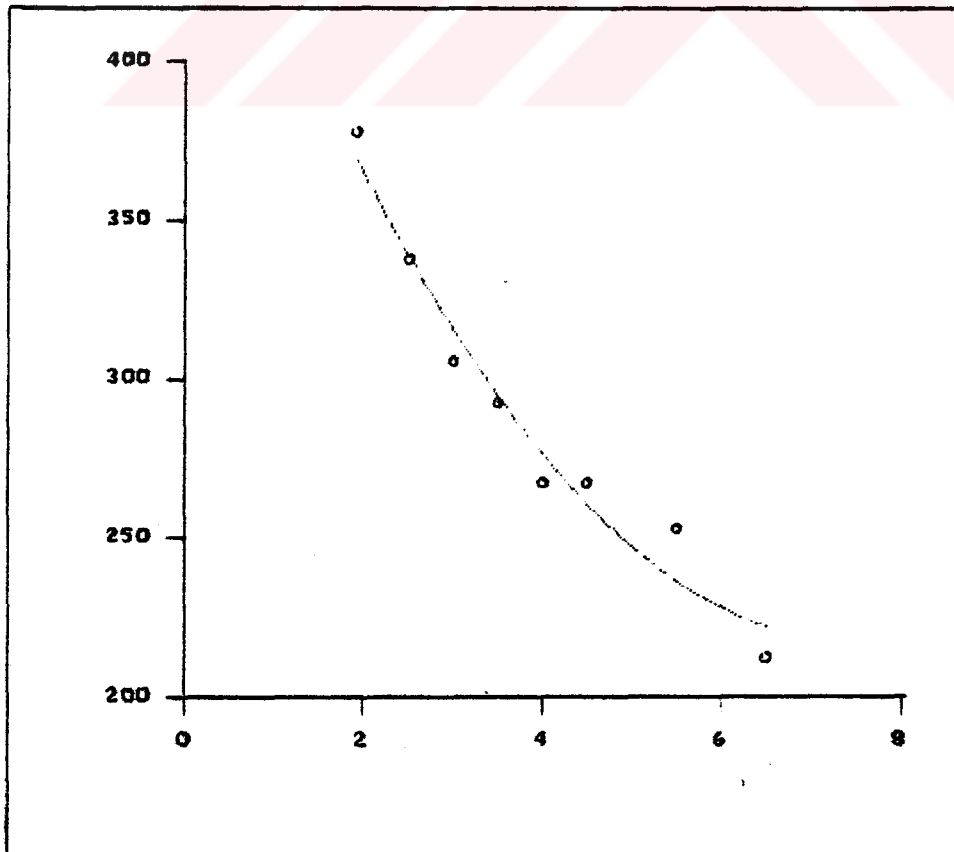


Şekil 6.14

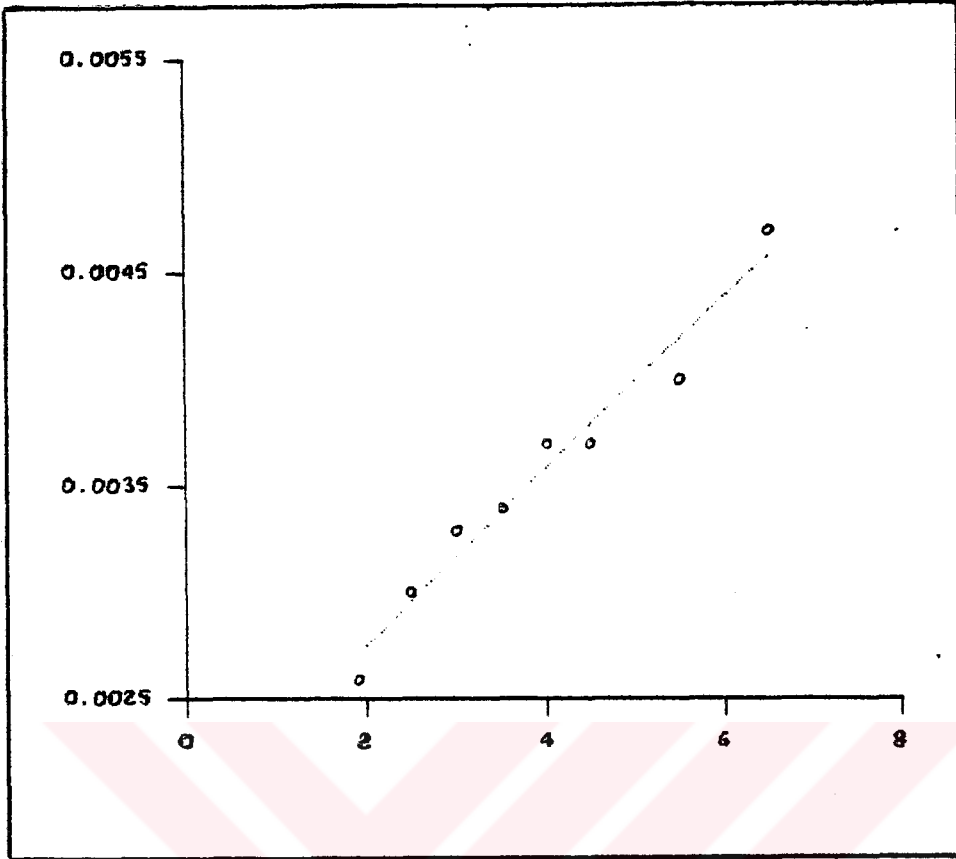
$$\frac{1}{T_g} = A(X^O)^2 + B(X^O) + C$$



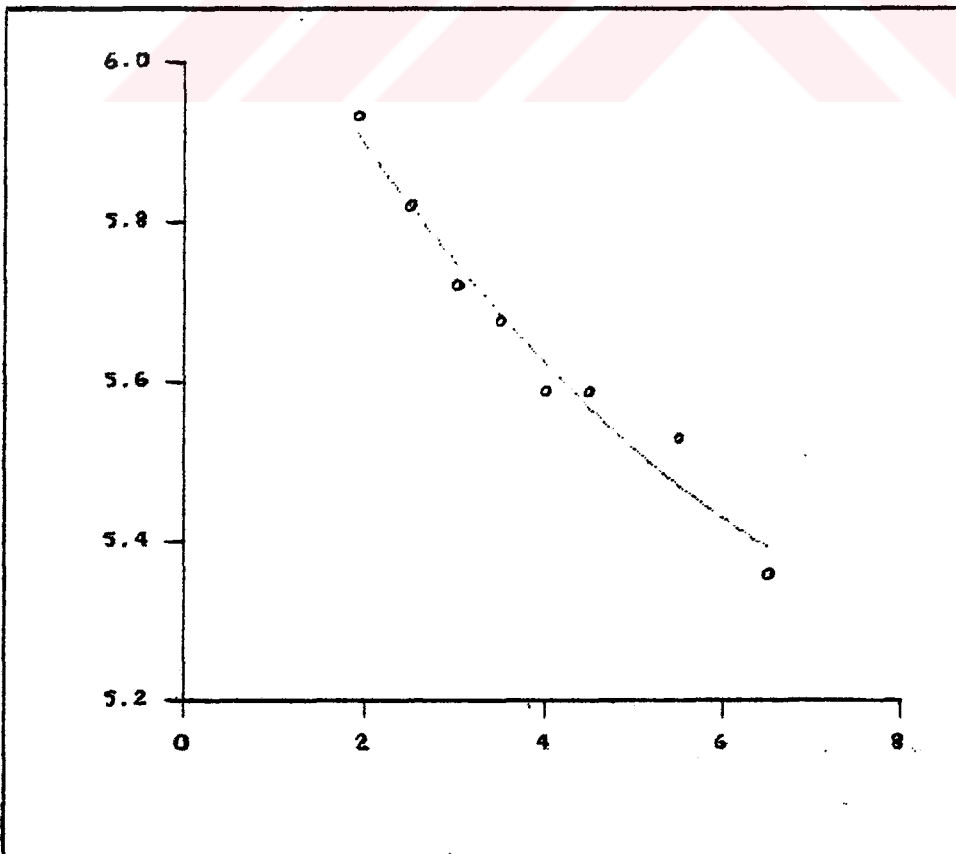
Şekil 6.15 $\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



Şekil 6.16 $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.17 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.18 $\text{Ln}T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$

6.1.3. Üçüncü Mertebeden Bağlıntılar

Düz zincirli polimetakrilatlar için, en yakın deneysel T_g değerlerini elde etmek amacıyla üçüncü mertebeden aşağıda sıralanmış olan üç ayrı eşitlik regresyon yöntemi ile bulunmuştur.

$$T_g = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-13)$$

$$\frac{1}{T_g} = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-14)$$

$$\ln T_g = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-15)$$

Regresyon I. ve II. Mertebeden bağlantıların bulunmasında olduğu gibi N-FIT paket programı yardımı ile bilgisayarda yapılmıştır. Yukarıdaki eşitliklerle gösterilen bağlantılar, her indis için ayrı ayrı bulunarak Tablo 6.2,3,4 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve regresyon III. Mertebeden eğrileri de Şekil 6.19,20,21,22,23,24,25,26,27 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre;

CR-İndisi için en iyi III. Mertebeden bağlantının:

$$\frac{1}{T_g} = 4,194 \times 10^{-6} (CR)^3 + (-9,984 \times 10^{-5}) (CR)^2 + 8,826 \times 10^{-4} (CR) + 9,615 \times 10^{-4} \quad (6-16)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için en iyi III. Mertebeden bağlantının:

$$\frac{1}{T_g} = 1,754 \times 10^{-5} (X^0)^3 + (-4,072 \times 10^{-4}) (X^0)^2 + 3,304 \times 10^{-3} (X^0) + (-5,643 \times 10^{-3}) \quad (6-17)$$

Randic İndisi için en iyi III.Mertebeden bağıntının:

$$\frac{1}{T_g} = 4,352 \times 10^{-5} (X^1)^3 + (-5,521 \times 10^{-4}) (X^1)^2 + 2,565 \times 10^{-8} (X^1) + (-6,154 \times 10^{-4}) \quad (6-18)$$

olduğu saptanmıştır.

6.1.4. Önerilen Bağıntı

R^2 ve Chi Sq değerlerine bakılarak (Tablo 6.1) Düz Zincirli Polimetakrilatlar için en iyi regresyon sonucunu veren bağıntı CR-İndisi, X^0 İndisi ve X^1 İndisi için;

$$\frac{1}{T_g} = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-14)$$

olup, III.Mertebeden bu bağıntının regresyon eğrileri Şekil 6.19-27 de gösterilmiştir.

Önerilen bağıntı için en yakın deneysel T_g değerlerini veren indis (Tablo 6.1)'de bakılan R^2 ve Chi Sq değerlerine göre X^0 İndisi olup;

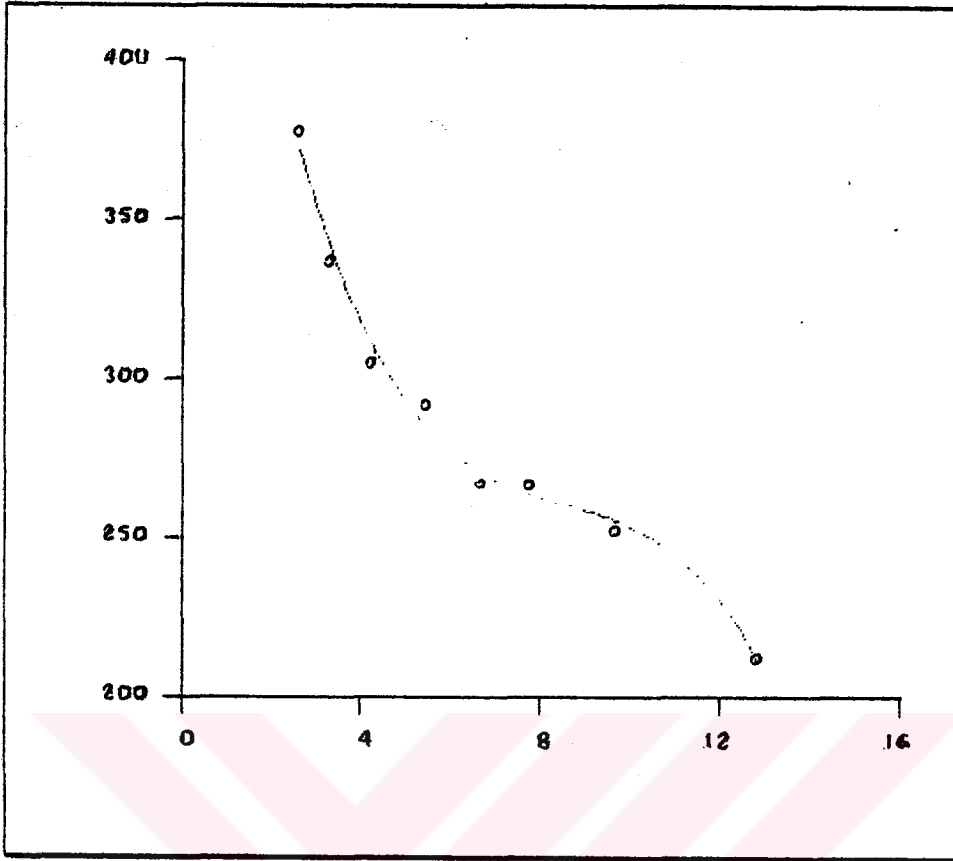
$$\frac{1}{T_g} = 1,754 \times 10^{-5} (X^0)^3 + (-4,072 \times 10^{-4}) (X^0)^2 + 3,304 \times 10^{-3} (X^0) + (-5,643 \times 10^{-3}) \quad (6-17)$$

bağıntısı düz zincirli polimetakrilatlar için en iyi bağıntı olarak önerilmektedir.

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON

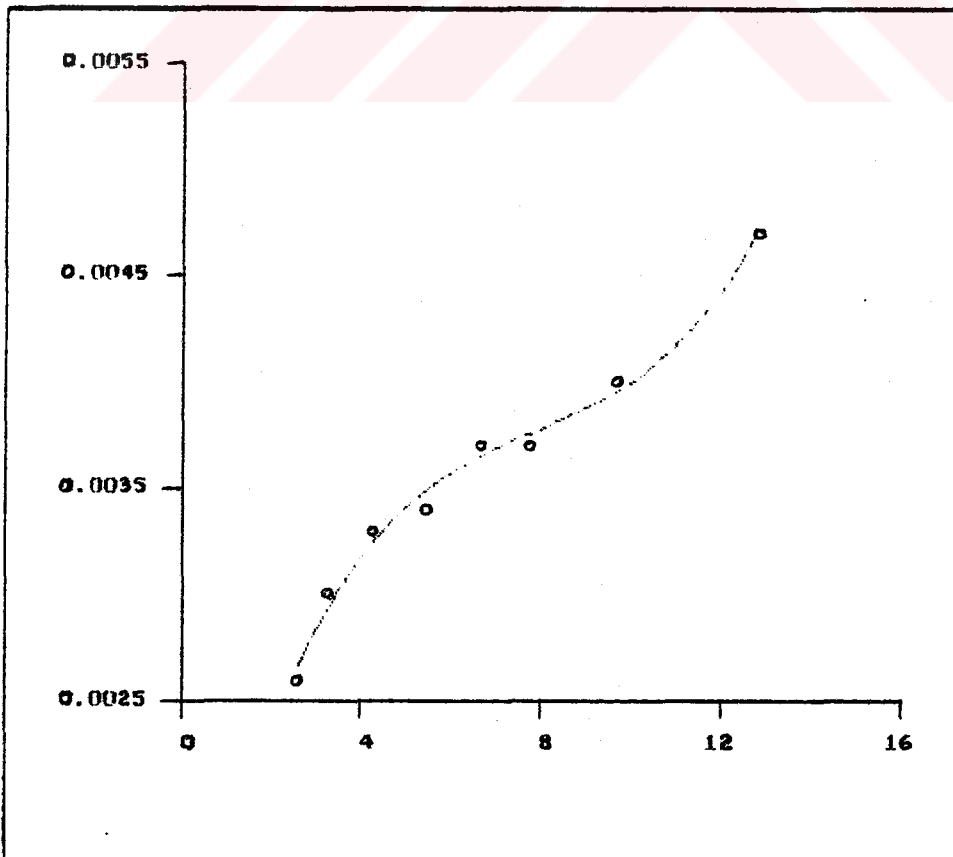
Tablo 6. 1

BAĞINTILAR	CR		x ⁰		x ¹	
	R ²	Chi-Sq	R ²	Chi-Sq	R ²	Chi-Sq
$T_g = AI+B$	0,9970	345,9237	0,9977	267,3134	0,9979	244,2433
$\frac{1}{T_g} = AI+B$	0,9988	$2,019 \times 10^{-8}$	0,9989	$1,881 \times 10^{-8}$	0,9990	$1,714 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI + B$	0,9999	$2,441 \times 10^{-3}$	1,0000	$1,992 \times 10^{-3}$	1,0000	$1,806 \times 10^{-3}$
$T_g = AI^2+BI+C$	0,9985	201,5712	0,9989	148,3659	0,9991	130,7065
$\frac{1}{T_g} = AI^2+BI+C$	0,9989	$2,246 \times 10^{-8}$	0,9989	$2,220 \times 10^{-8}$	0,9990	$2,036 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI^2+BI+C$	1,0000	$1,889 \times 10^{-3}$	1,0000	$1,710 \times 10^{-3}$	1,0000	$1,566 \times 10^{-3}$
$T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9997	43,7829	0,9999	23,6314	0,9998	30,9453
$\frac{1}{T_g} = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9997	$7,162 \times 10^{-9}$	0,9998	$3,908 \times 10^{-9}$	0,9998	$4,457 \times 10^{-9}$
$\ln T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	1,0000	$3,641 \times 10^{-4}$	1,0000	$4,121 \times 10^{-4}$	1,0000	$5,319 \times 10^{-4}$



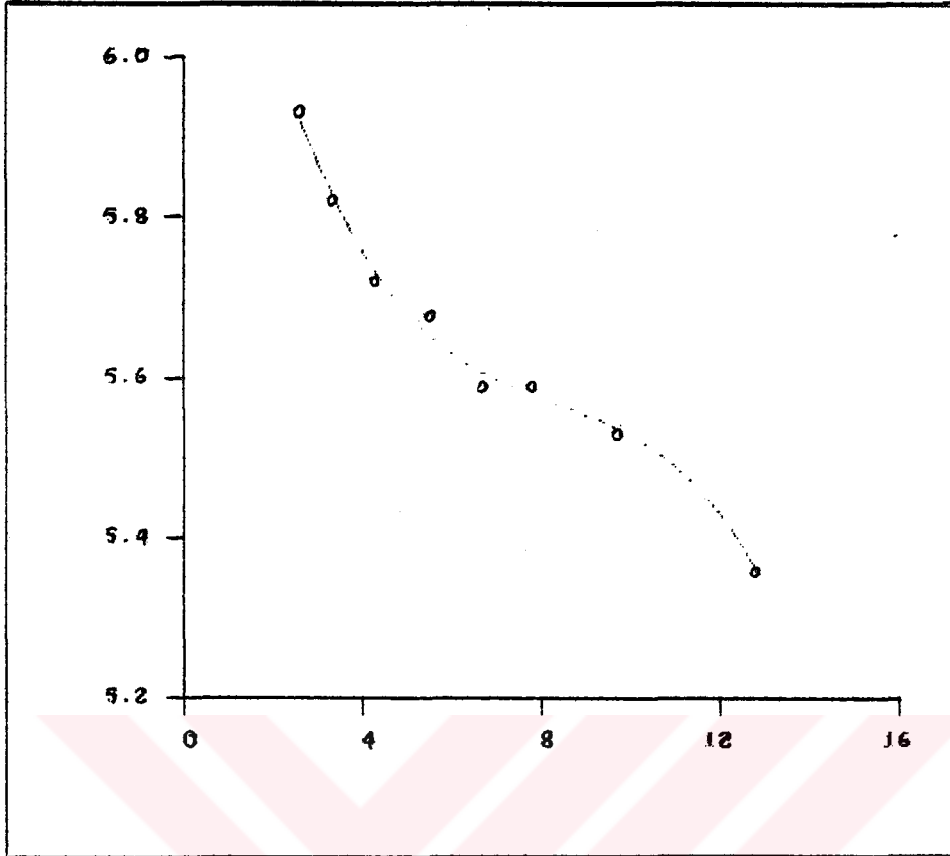
Şekil 6.19

$$T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$$

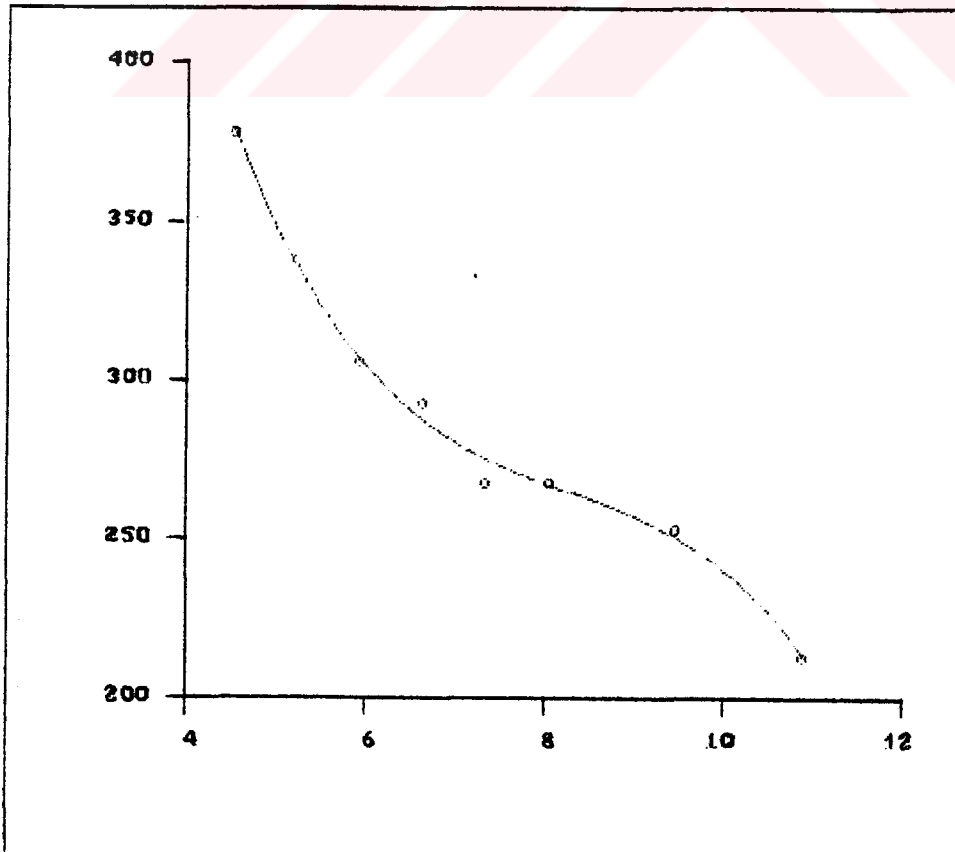


Şekil 6.20

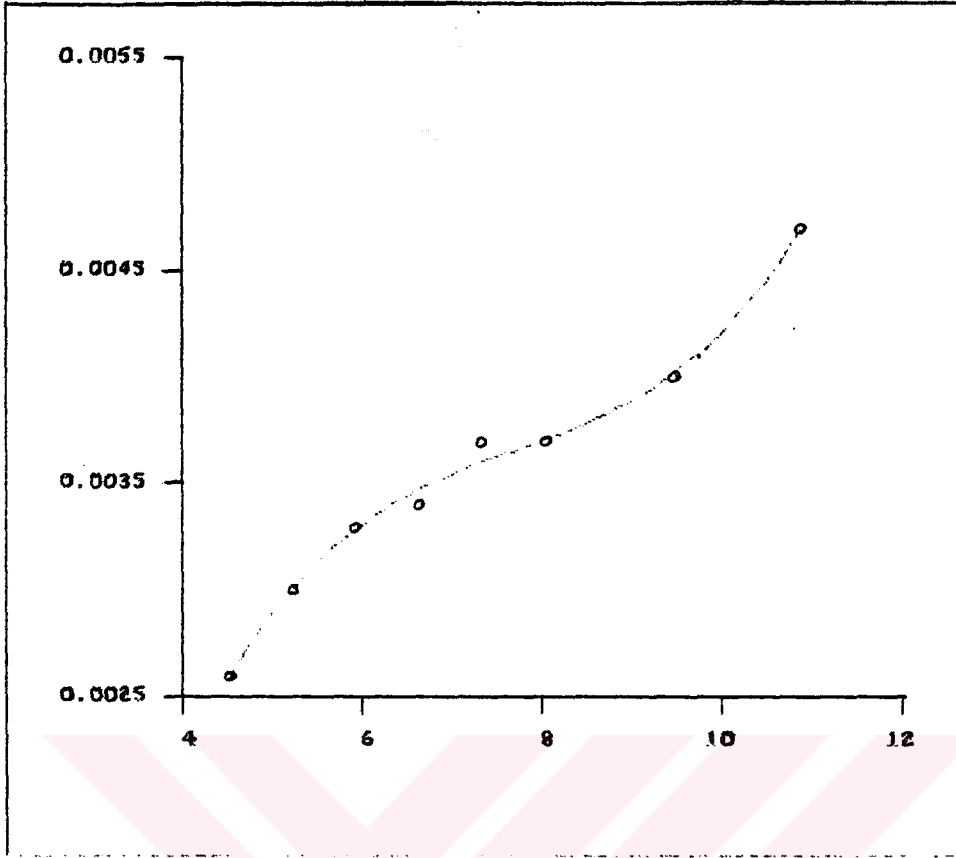
$$\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$$



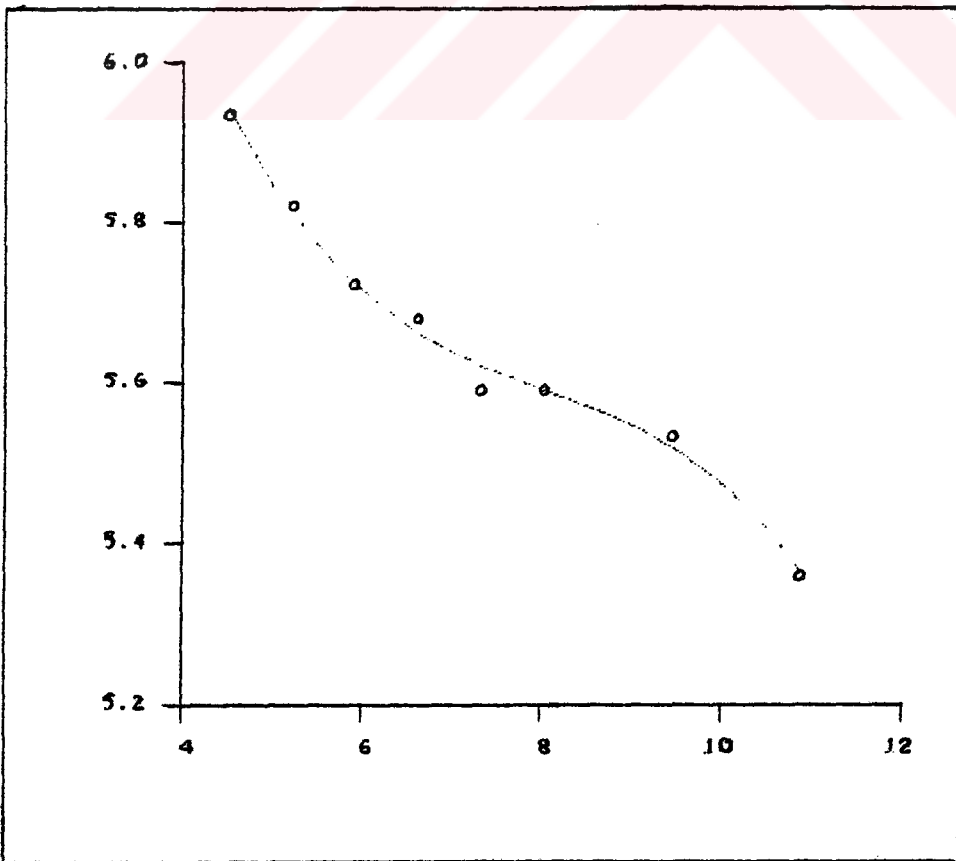
Şekil 6.21 $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



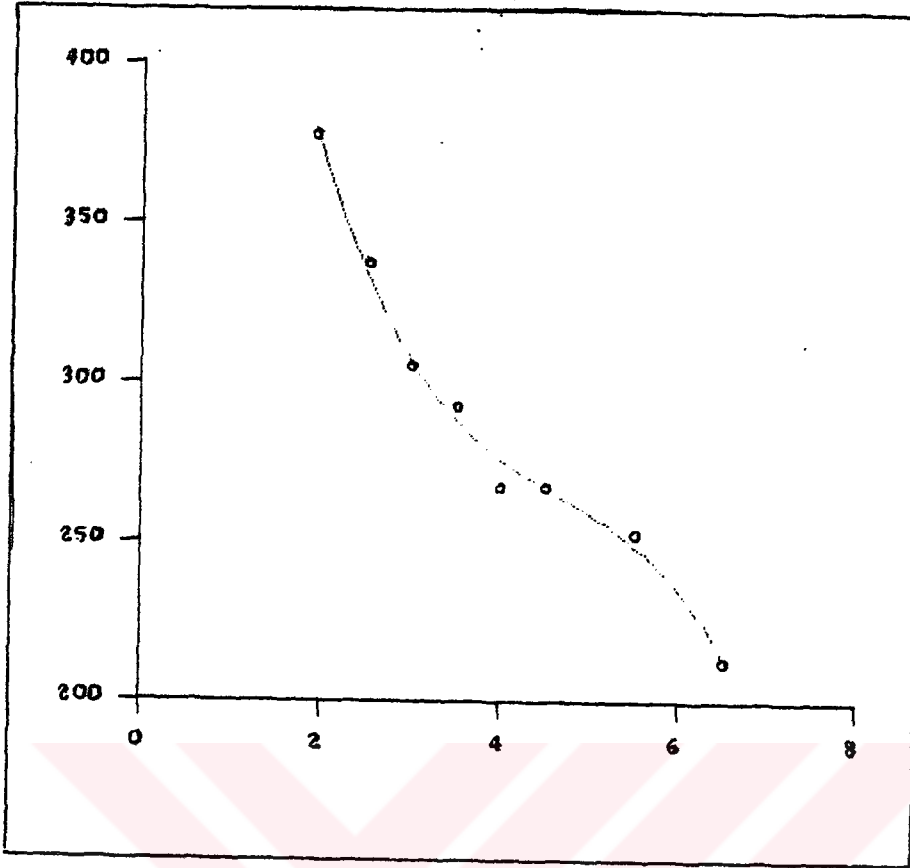
Şekil 6.22 $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



Şekil 6. 23 $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$

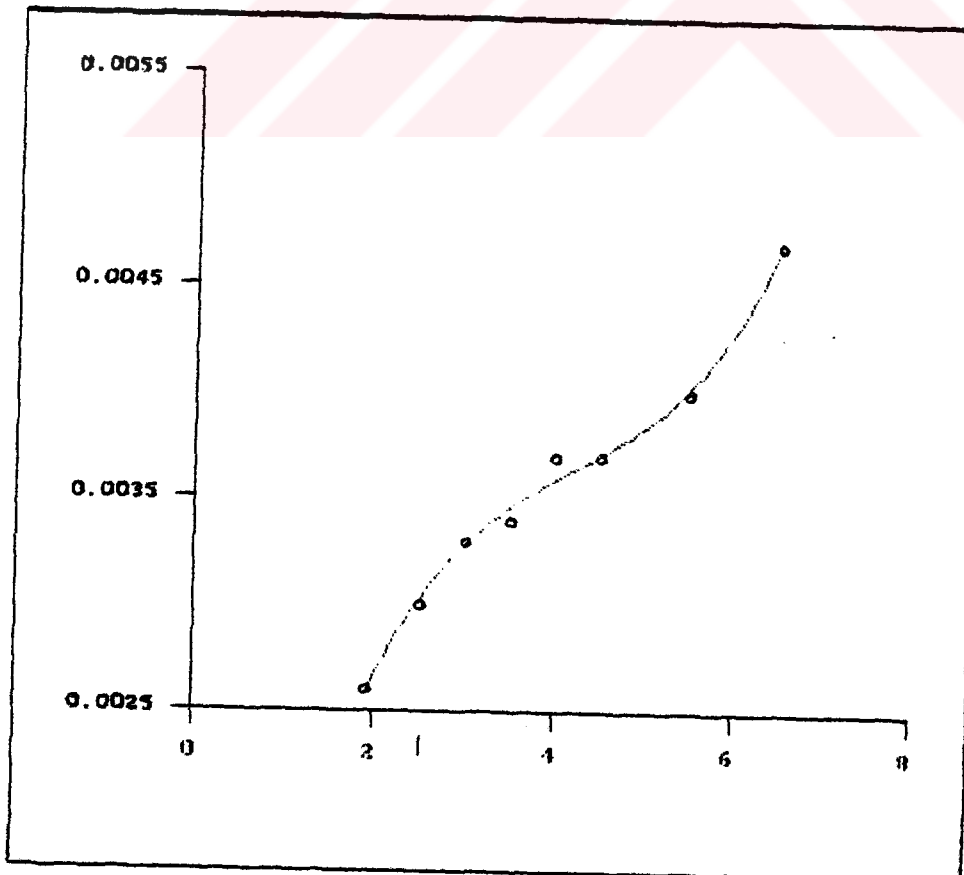


Şekil 6.24 $\text{Ln}T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



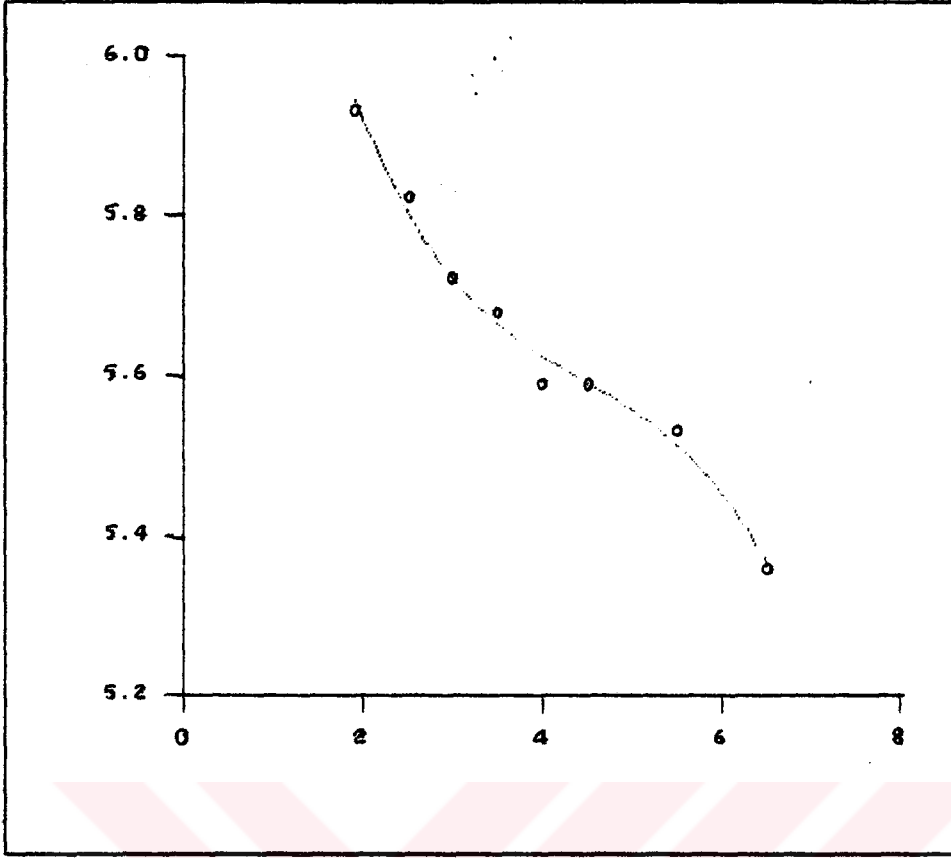
Şekil 6. 25

$$T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$$



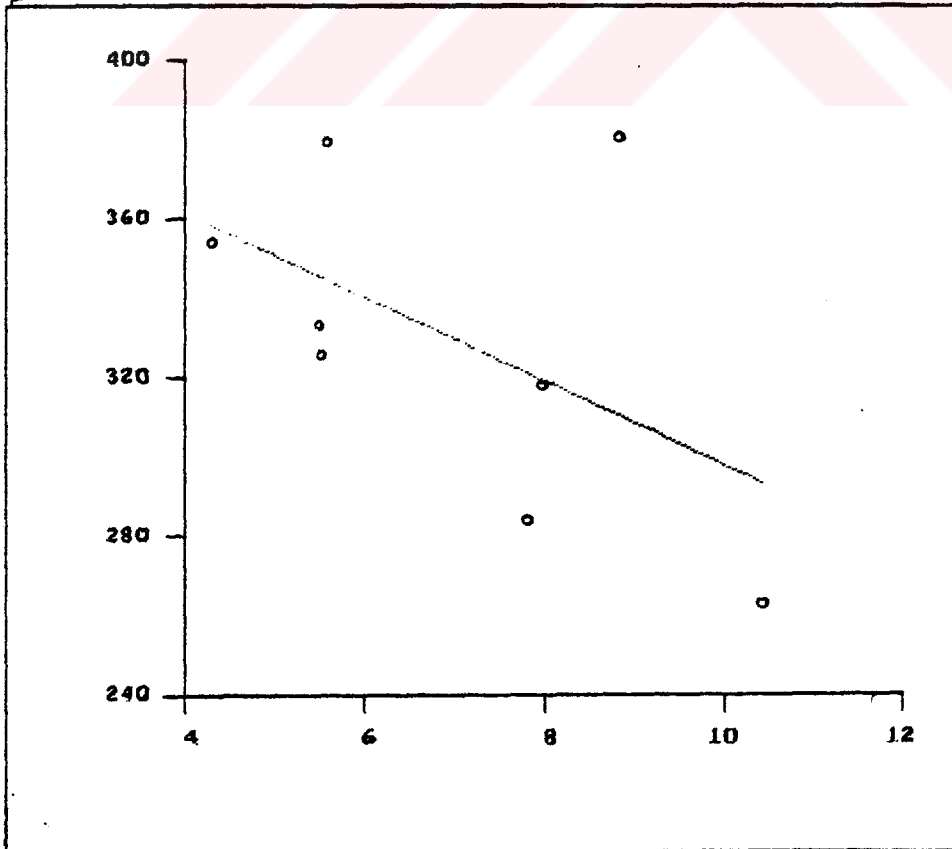
Şekil 6. 26

$$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$$



Şekil 6.27 $\text{Ln}T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$

DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON ŞEKİLLERİ



Şekil 6.28 $T_g = A(CR) + B$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLARIN CR İNDİSİNE GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.5

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
Metil Metakrilat	378 °K	380 °K	-2 °K	$\frac{ 378 - 380 }{378} \times 100 = \% 0,5$
Etil Metakrilat	338 °K	340 °K	-2 °K	$\frac{ 338 - 340 }{338} \times 100 = \% 0,6$
n-propil Metakrilat	306 °K	308 °K	-2 °K	$\frac{ 306 - 308 }{306} \times 100 = \% 0,7$
n-butil Metakrilat	293 °K	291 °K	2 °K	$\frac{ 293 - 291 }{293} \times 100 = \% 0,7$
n-pentil Metakrilat	268 °K	273 °K	-5 °K	$\frac{ 268 - 273 }{268} \times 100 = \% 1,8$
n-hekzil Metakrilat	268 °K	269 °K	-1 °K	$\frac{ 268 - 269 }{268} \times 100 = \% 0,4$
n-oktil Metakrilat	253 °K	252 °K	1 °K	$\frac{ 253 - 252 }{253} \times 100 = \% 0,4$
n-desil Metakrilat	213 °K	212 °K	1 °K	$\frac{ 213 - 212 }{213} \times 100 = \% 0,5$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLARIN \bar{x}^0 (0'ncı Meritebe İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.6

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
Metil Metakrilat	378 °K	377 °K	1 °K	$\frac{ 378 - 377 }{378} \times 100 = \% 0,3$
Etil Metakrilat	338 °K	337 °K	1 °K	$\frac{ 338 - 337 }{338} \times 100 = \% 0,3$
n-propil Metakrilat	306 °K	305 °K	1 °K	$\frac{ 306 - 305 }{306} \times 100 = \% 0,3$
n-butil Metakrilat	293 °K	293 °K	0 °K	$\frac{ 293 - 293 }{293} \times 100 = \% 0$
n-pentil Metakrilat	268 °K	272 °K	-4 °K	$\frac{ 268 - 272 }{268} \times 100 = \% 1,5$
n-hekzil Metakrilat	268 °K	267 °K	1 °K	$\frac{ 268 - 267 }{268} \times 100 = \% 0,4$
n-oktil Metakrilat	253 °K	251 °K	2 °K	$\frac{ 253 - 251 }{253} \times 100 = \% 0,7$
n-desil Metakrilat	213 °K	215 °K	-2 °K	$\frac{ 213 - 215 }{213} \times 100 = \% 0,9$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİMETAKRİLATLARIN χ^1 (Randic İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.7

POLİMER	T_g (Gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
Metil Metakrilat	378 °K	380 °K	-2 °K	$\frac{ 378 - 380 }{378} \times 100 = \% 0,5$
Etil Metakrilat	338 °K	333 °K	5 °K	$\frac{ 338 - 333 }{338} \times 100 = \% 1,5$
n-propil Metakrilat	306 °K	306 °K	0 °K	$\frac{ 306 - 306 }{306} \times 100 = \% 0$
n-butil Metakrilat	293 °K	290 °K	3 °K	$\frac{ 293 - 290 }{293} \times 100 = \% 1$
n-pentil Metakrilat	268 °K	277 °K	-9 °K	$\frac{ 268 - 277 }{268} \times 100 = \% 3$
n-hekzil Metakrilat	268 °K	269 °K	-1 °K	$\frac{ 268 - 269 }{268} \times 100 = \% 0,4$
n-oktil Metakrilat	253 °K	248 °K	-5 °K	$\frac{ 253 - 248 }{253} \times 100 = \% 2$
n-desil Metakrilat	213 °K	214 °K	-1 °K	$\frac{ 213 - 214 }{213} \times 100 = \% 0,5$

6.1.5. Hata Hesapları

Önerilen bağıntı ile hesaplanacak olan T_g değerlerindeki hatanın ne kadar olduğunun belirlenmesi için literatürden (19) elde edilen deneysel T_g değerlerine göre bağıl hata hesapları yapılmıştır. Bu değerler (Tablo 6.5), (Tablo 6.6), (Tablo 6.7) de gösterilmiştir.

CR İndisi için maksimum bağıl hata değeri "Poli n-pentil Metakrilat molekülünde % 1,8", minimum bağıl hata değeri; "Poli n-hekzil Metakrilat ve Poli n-oktil Metakrilat molekülleri'nde % 0,4" olarak bulunmuştur.

x^0 İndisi için maksimum bağıl hata değeri "Poli n-pentil Metakrilat molekülünde % 1,5", Poli n-butil Metakrilat molekülünde ise önerilen bağıntının kullanılması ile gerçek değer tam olarak hesaplanabilmektedir.

x^1 İndisi için maksimum bağıl hata değeri "Poli n-pentil Metakrilat Molekülünde % 3", Poli n-propil Metakrilat molekülünde ise önerilen bağıntının kullanılması ile gerçek değer tam olarak hesaplanabilmektedir.

6.2. DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLAR

Dallanmış Polimetakrilatlar için T_g ve İndis (I) arasında üç ayrı grup bağıntı türetilmiştir. (I.Mertebe, II.Mertebe, III. Mertebe Bağıntıları).

6.2.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar

Dallanmış Polimetakrilatlar için I.Mertebeden gösterilmiş olan üç ayrı eşitliğin sonucuna göre yapılan regresyon N-FIT paket programı yardımıyla bulunmuştur. Gösterilen bağıntılar, Tablo 6.9,10,11 de özetlenmiş olup deneysel veriler ve regresyon doğruları Şekil 6.28,29,30,31,32,33,34,35,

36 da gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR İndisi için en iyi doğrusal bağıntının;

$$\text{LnT}_g = -0,0349 (\text{CR})+6,0352 \quad (6-19)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\text{LnT}_g = -0,0586 (x^0)+6,2440 \quad (6-20)$$

Randic İndisi için;

$$\text{LnT}_g = -0,1095 (x^1)+6,2198 \quad (6-21)$$

olduğu saptanmıştır.

6.2.2. İkinci Mertebeden Bağıntılar

Dallanmış Polimetakrilatlar için ikinci mertebeden gösterilmiş olan üç ayrı eşitliğin sonucuna göre yapılan regresyonda , bağıntılar Tablo 6.9,10,11 de özetlenerek deneysel veriler ve regresyon eğrileri Şekil 6.37,38,39,40,41,42,43, 44,45 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR İndisi için en iyi bağıntının;

$$\text{LnT}_g = -7,143 \times 10^{-8} (\text{CR})^2 + 0,0696 (\text{CR}) + 5,6810 \quad (6-22)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\text{LnT}_g = -0,0280 (x^0)^2 + 0,3799 (x^0) + 4,5613 \quad (6-23)$$

Tablo 6.9

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$T_g = A(CR) + B$	0,9897	1514,3191	-10,5368	403,6273	-	-
$T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9901	1741,6550	-2,0434	19,3516	302,2751	-
$T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9910	1982,9416	-1,5884	33,4898	-234,6004	879,1630
$T_g = A(X^0) + B$	0,9895	1539,8464	-17,7191	466,6663	-	-
$T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9903	1713,6922	-8,3282	112,8501	-34,3337	-
$T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9909	1998,6536	-6,7771	152,6715	-1146,7829	3209,7349
$T_g = A(X^1) + B$	0,9922	1151,6340	-33,6440	461,5534	-	-
$T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9927	1286,8163	-12,1662	70,1662	255,3574	-
$T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9929	1562,9392	-13,1300	153,1116	-906,6834	1162,0302

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R^2 : KORELASYON KATSAYISI

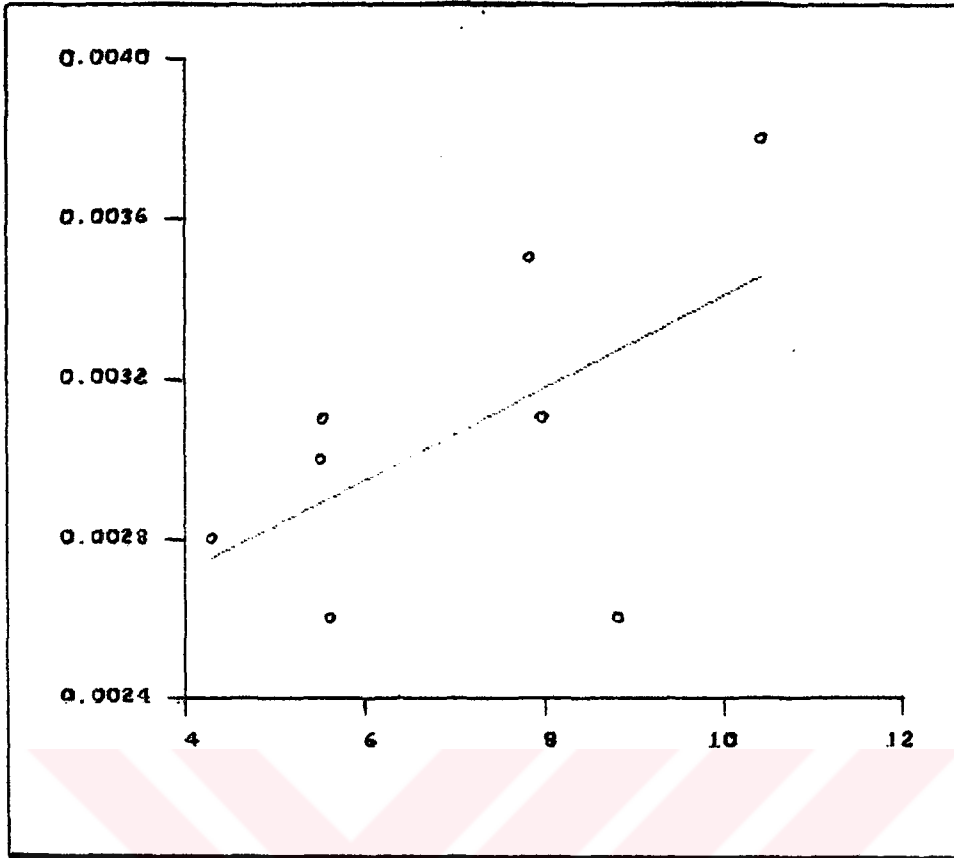
DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON (CR-InT_g⁰, X⁰-InT_g¹, X¹-InT_g¹)

Tablo 6.11

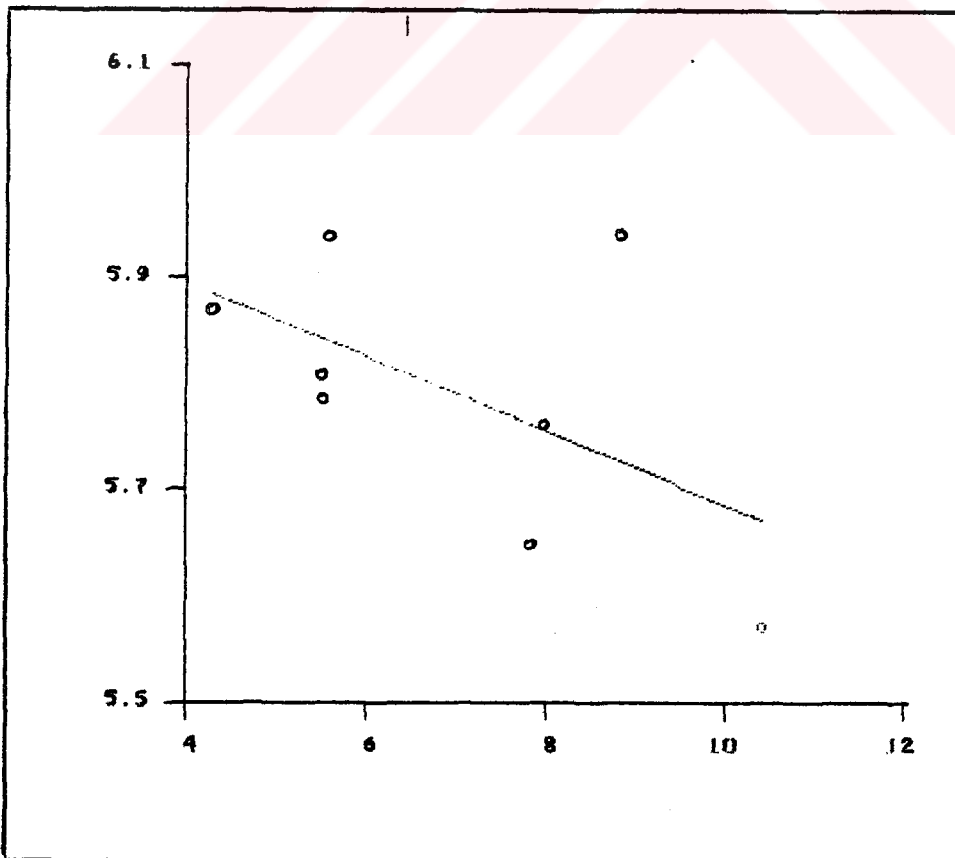
BAGINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\ln T_g = A(CR) + B$	0,9997	0,0140	-0,0349	6,0352	-	-
$\ln T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9997	0,0158	-7,143E-08	0,0696	5,6810	-
$\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9997	0,0179	-5,009E-03	0,1049	-0,7313	7,5003
$\ln T_g = A(X^0) + B$	0,9997	0,0142	-0,0586	6,2440	-	-
$\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9997	0,0156	-0,0280	0,3799	4,5613	-
$\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9977	0,018	-0,0219	0,4913	-3,6828	15,0243
$\ln T_g = A(X^1) + B$	0,9998	0,0103	-0,1095	6,2198	-	-
$\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9998	0,0113	-0,0435	0,2502	5,5054	-
$\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9998	0,0137	-0,0383	0,4402	-1,7350	8,1529

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ

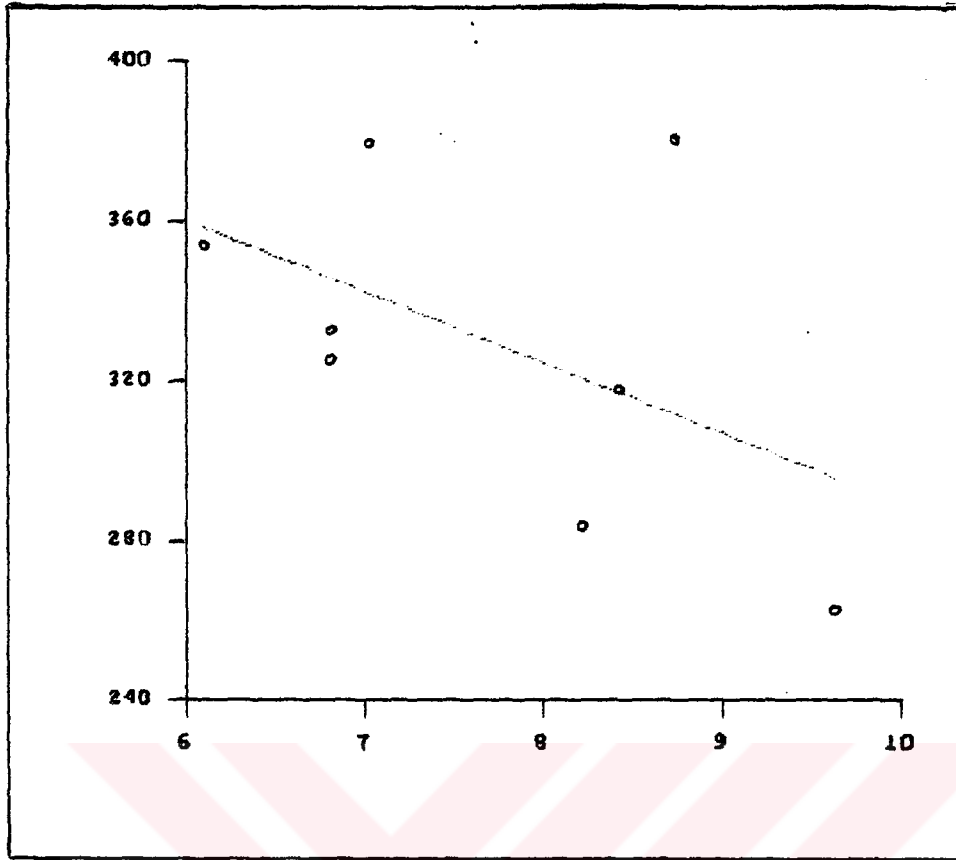
* R² : KORELASYON KATSAYISI



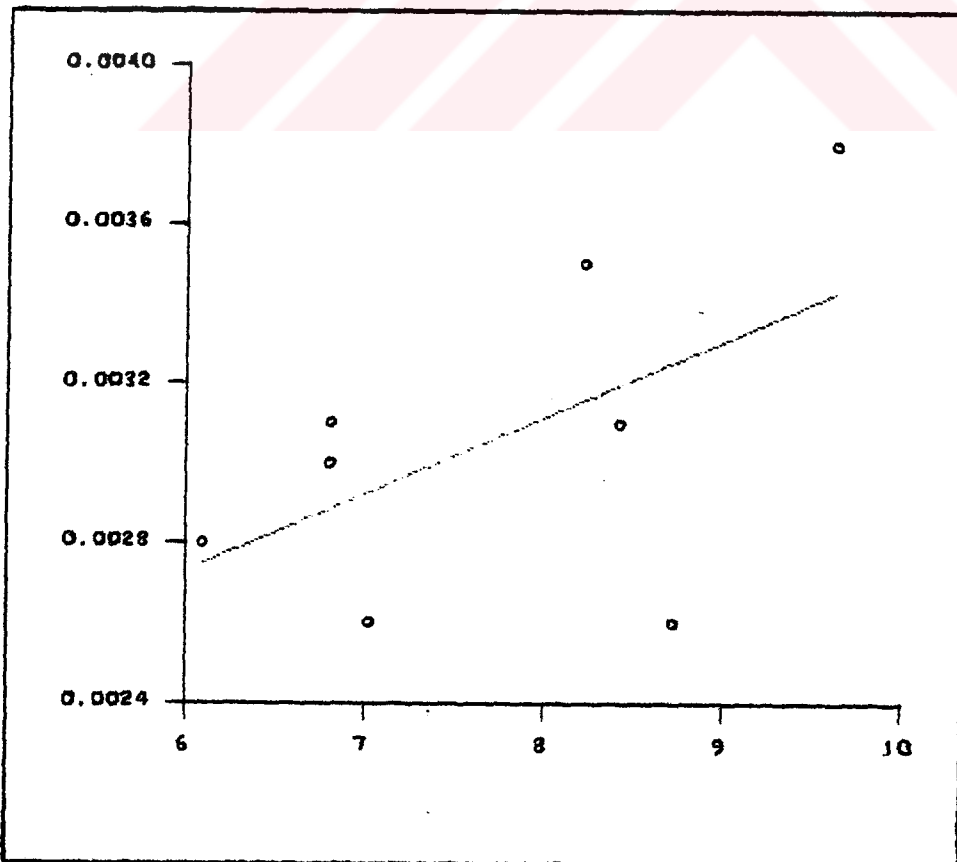
Şekil 6. 29 $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$



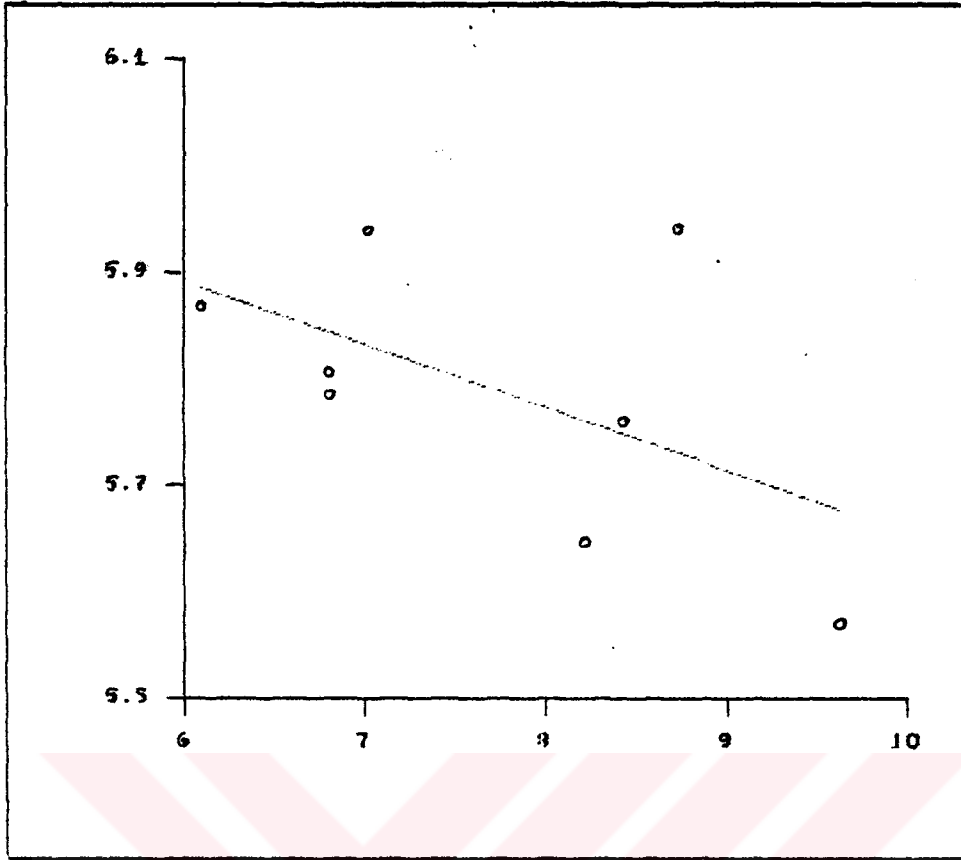
Şekil 6.30 $\text{Ln}T_g = A(CR) + B$



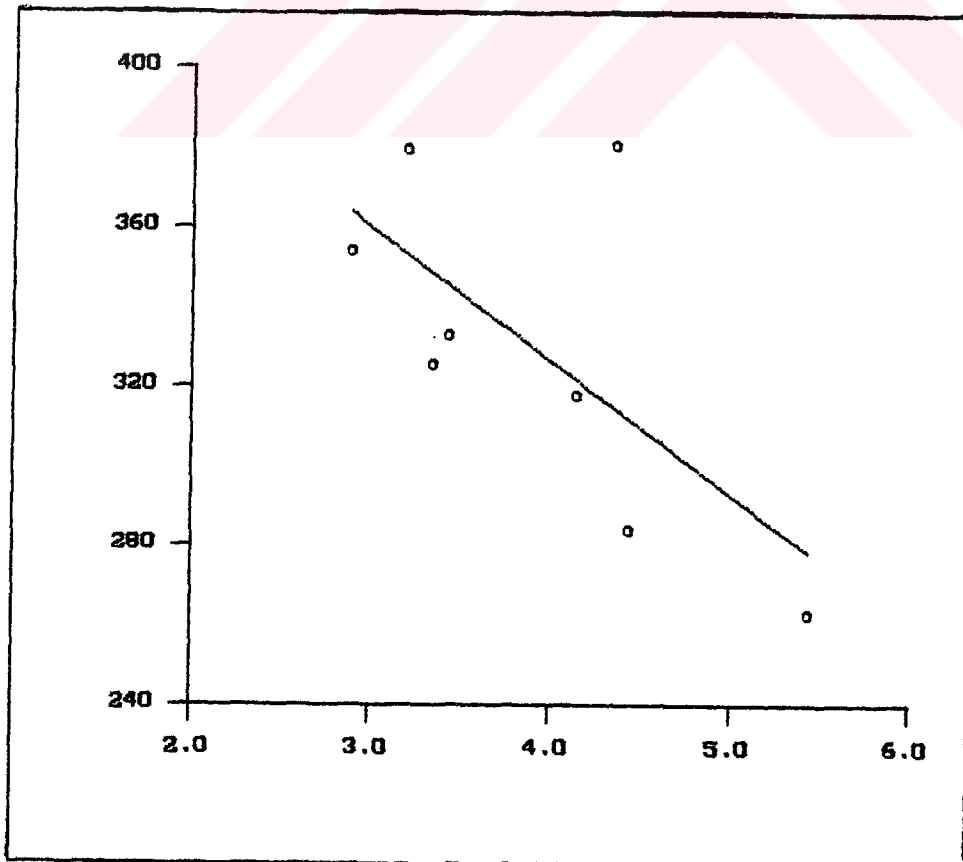
Şekil 6.31 $T_g = A(X^0) + B$



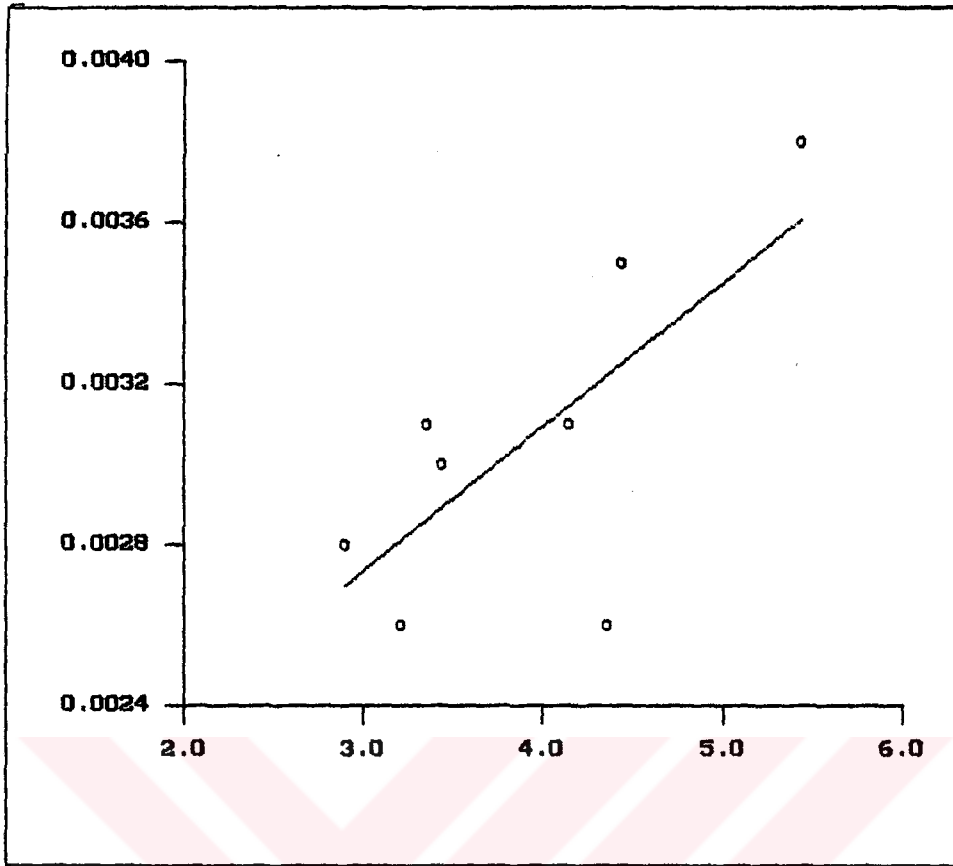
Şekil 6.32 $\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$



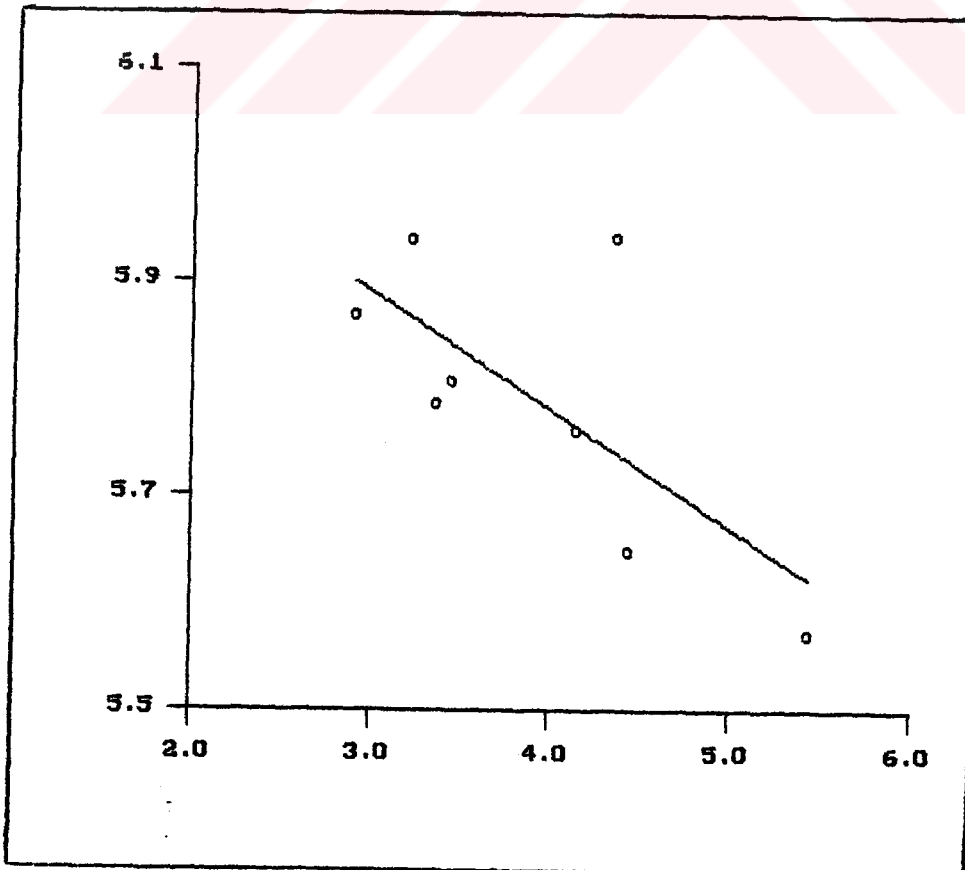
Şekil 6.33 $\text{Ln}T_g = A(X^0) + B$



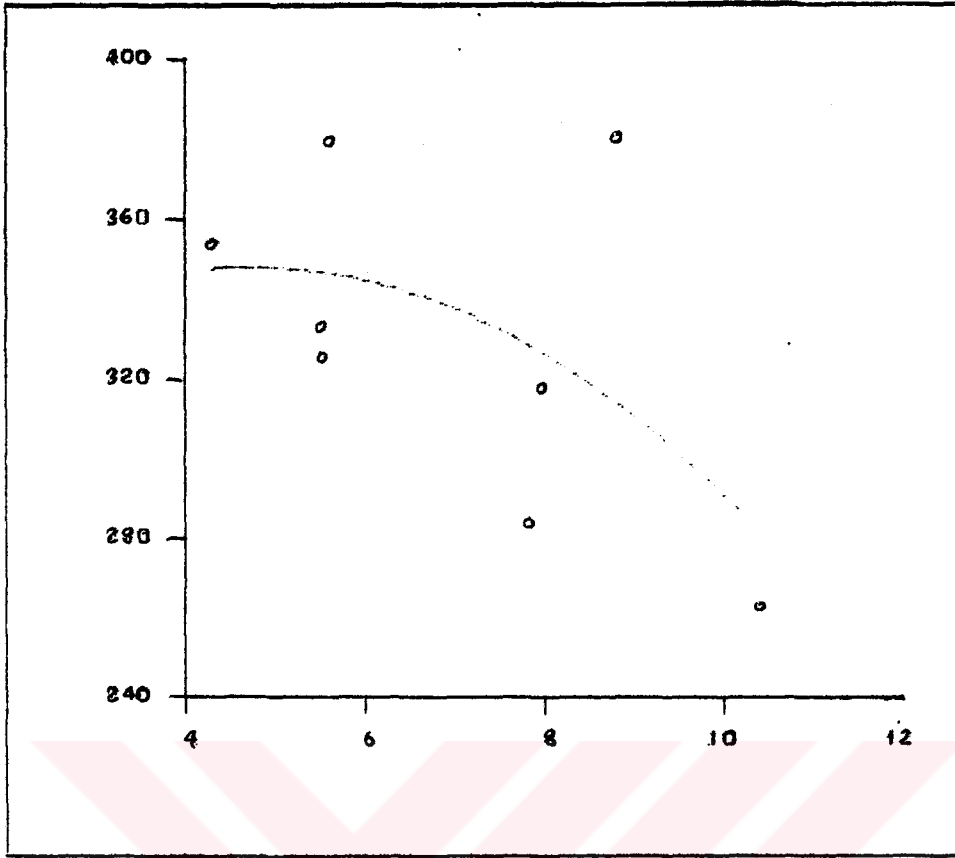
Şekil 6.34 $T_g = A(X^1) + B$



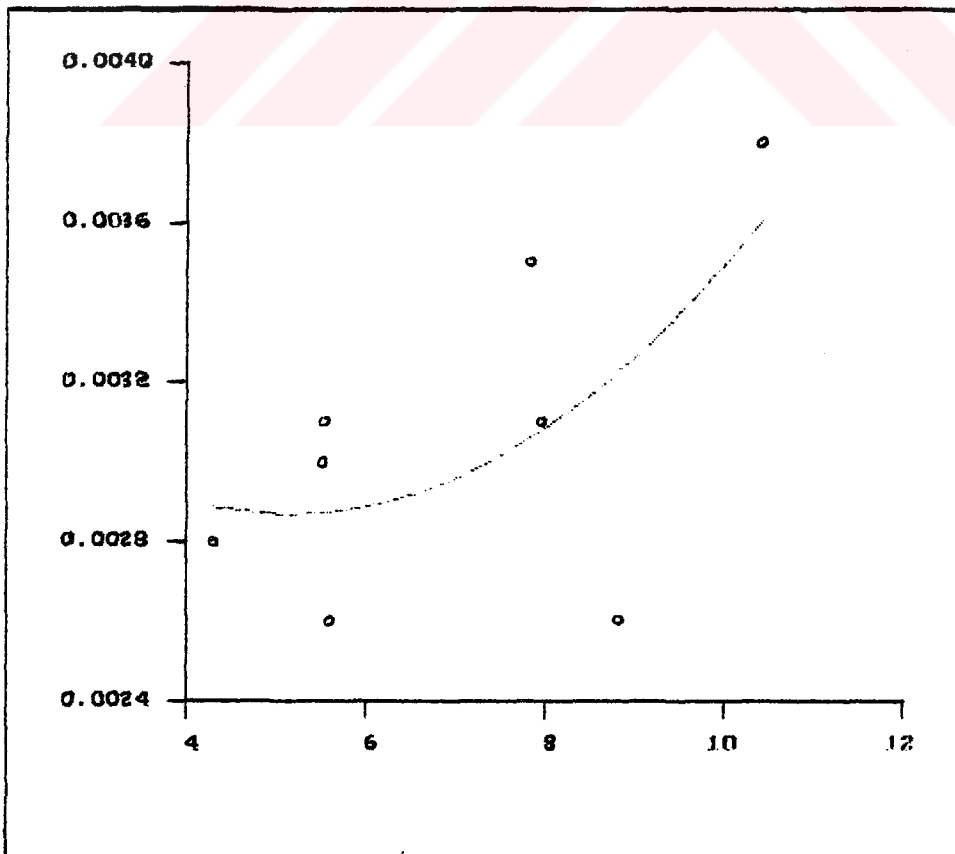
Şekil 6.35 $\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$



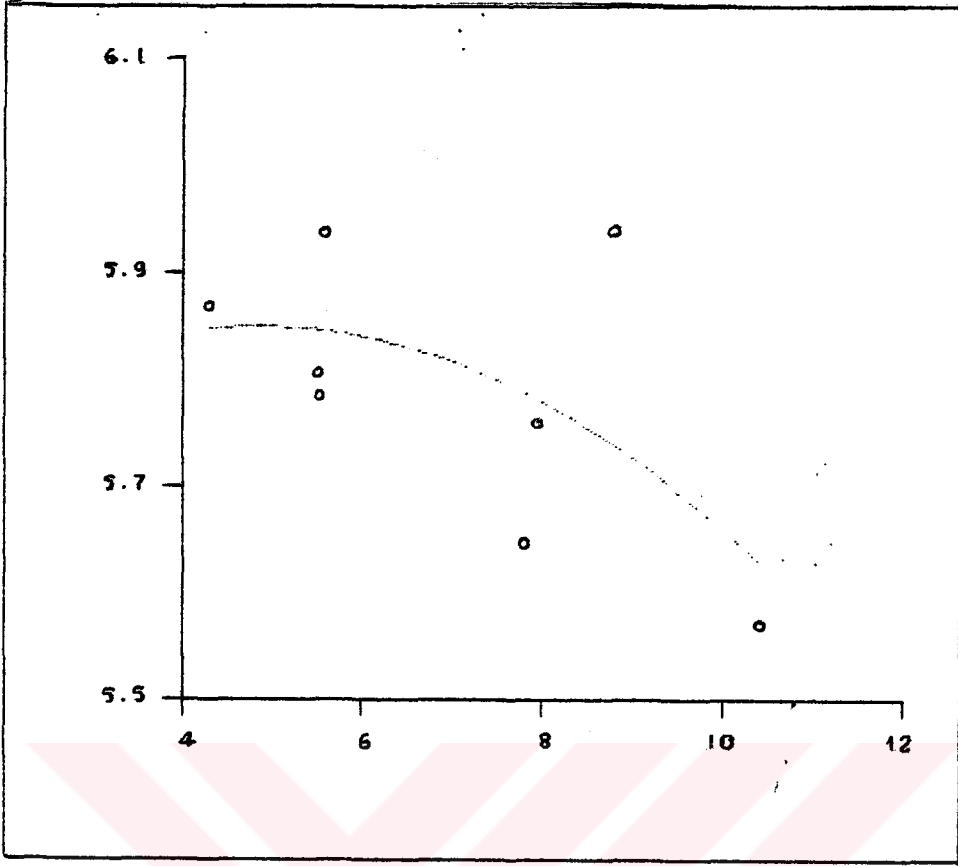
Şekil 6.36 $\text{Ln}T_g = A(X^1) + B$



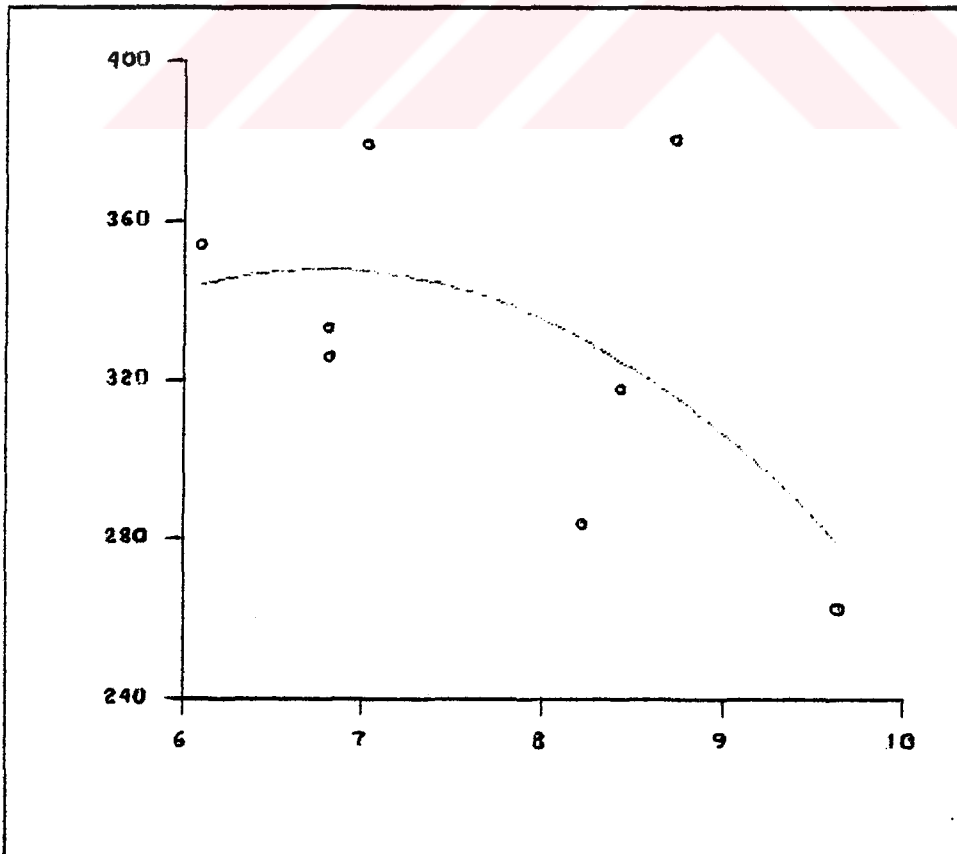
Şekil 6.37 $T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



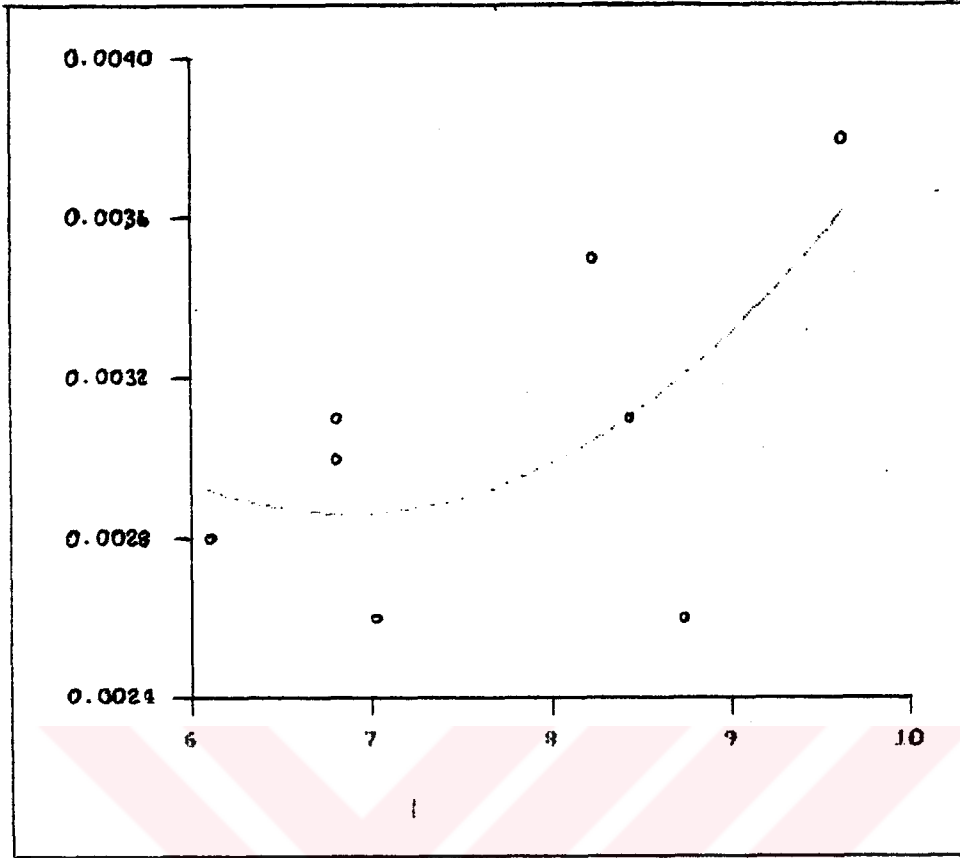
Şekil 6.38 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$



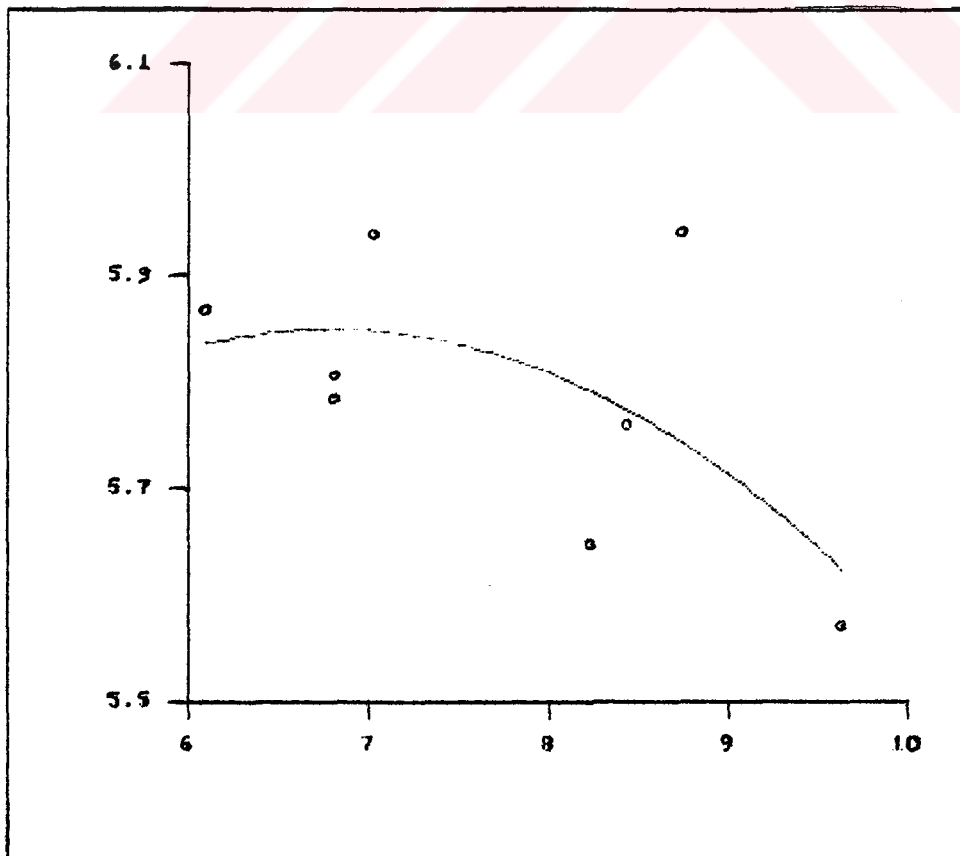
Şekil 6.39 $\ln T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



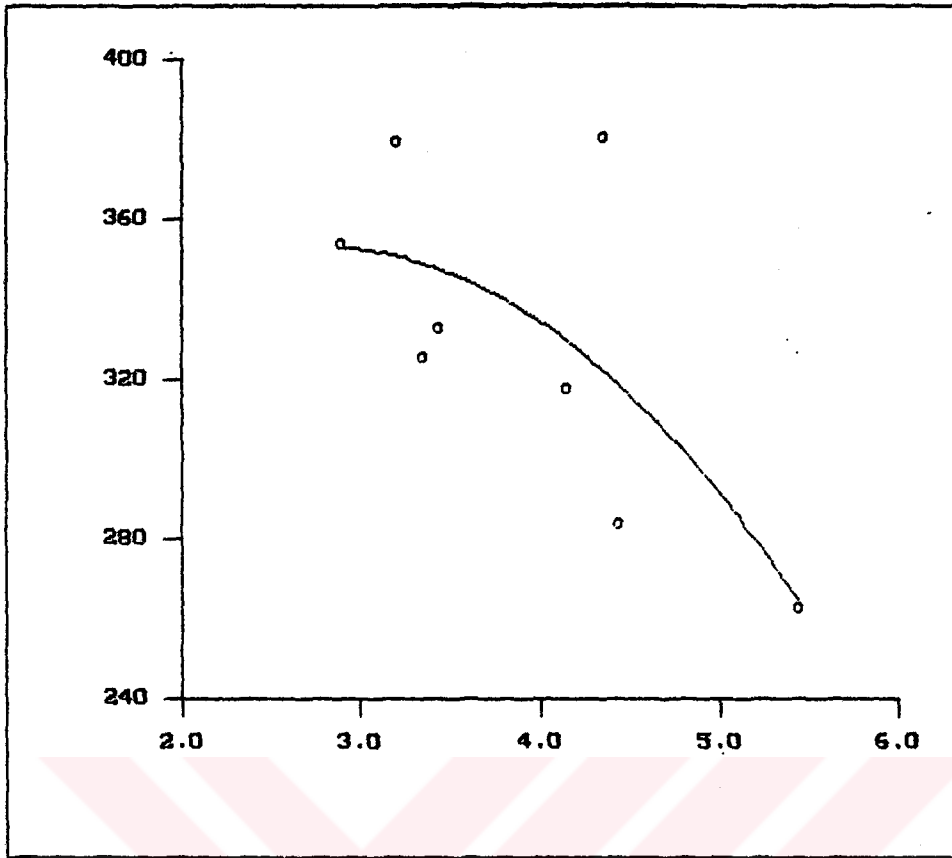
Şekil 6.40 $T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



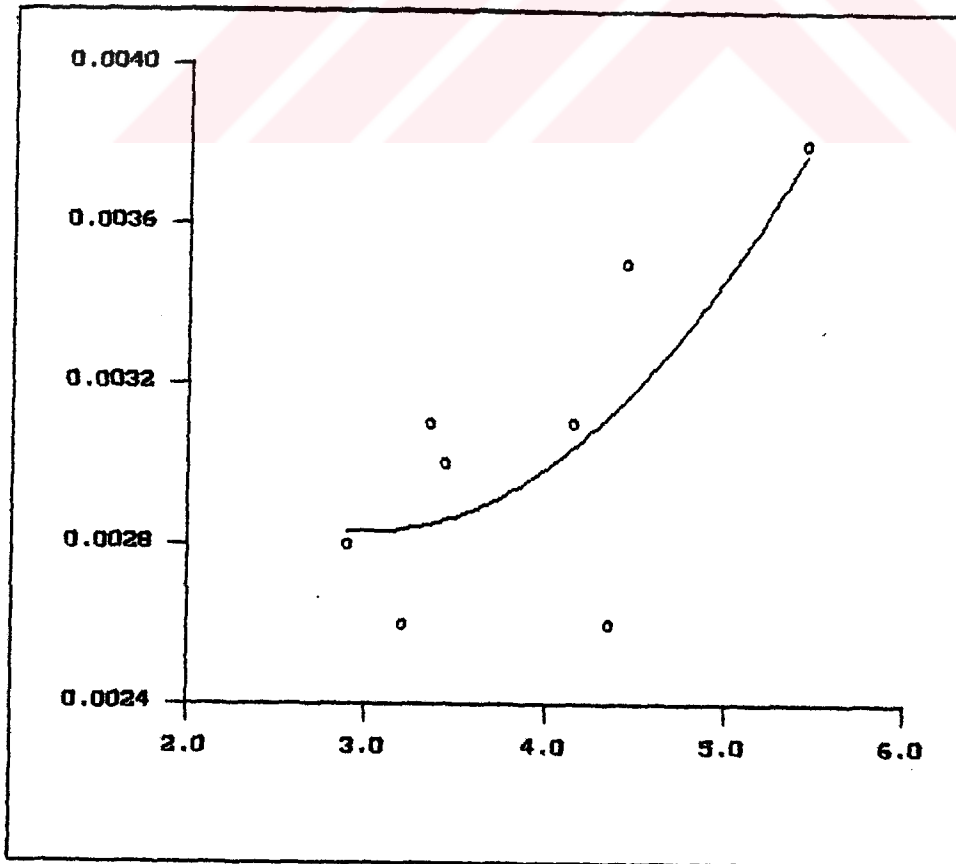
Şekil 6.41 $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



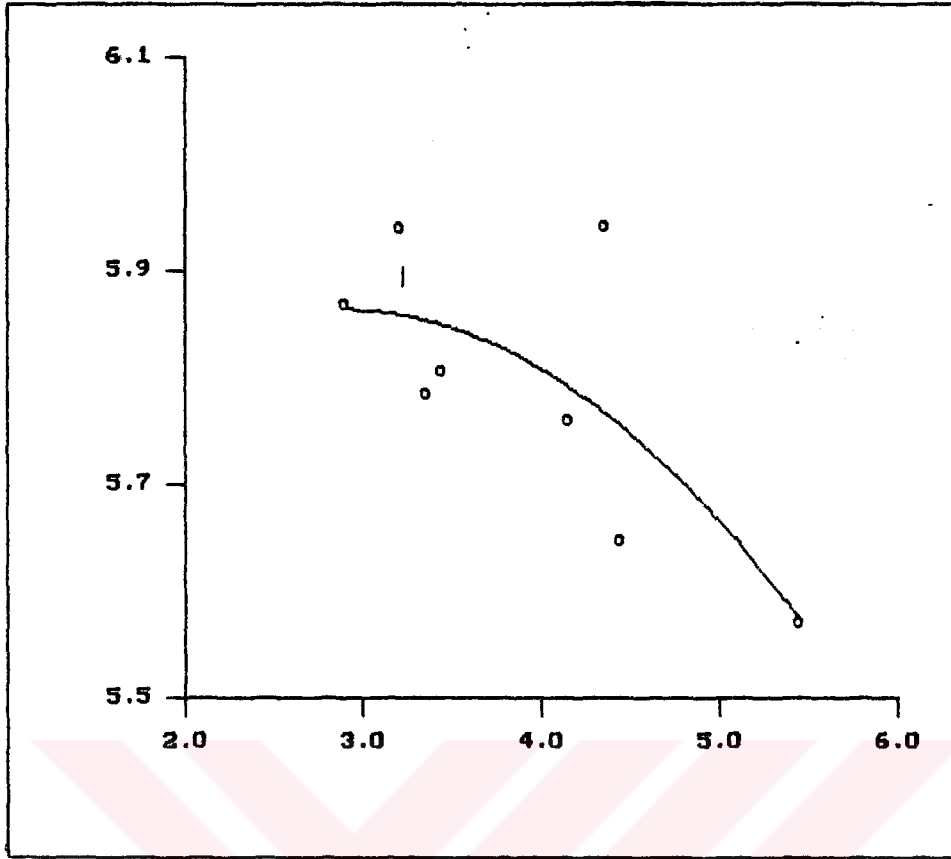
Şekil 6.42 $\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



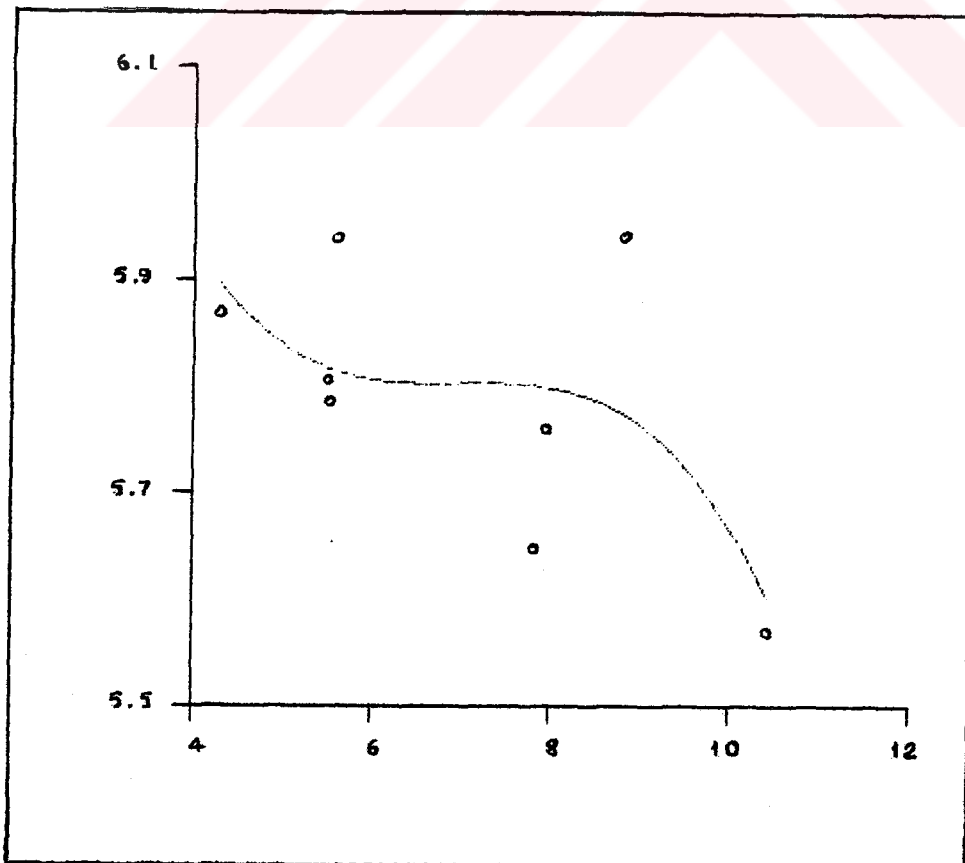
Şekil 6.43 $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.44 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.45 $\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.46 $T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$

Randic İndisi için;

$$\text{Ln}T_g = -0,0435 (x^1)^2 + 0,2502 (x^1) + 5,5054 \quad (6-24)$$

olduğu saptanmıştır.

6.2.3. Üçüncü Mertebeden Bağlıntılar

Dallanmış Polimetakrilatların için, en yakın deneysel T_g değerlerini elde etmek amacıyla 6.1.3 de gösterilen bağli-ntılar, her indis için ayrı ayrı bulunarak Tablo 6.9,10,11 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve III.Mertebeden regresyon eğrileri de Şekil 6.46,47,48,49,50,51,52,53,54 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR indisi için en iyi bağli-ntının,

$$\text{Ln}T_g = -5,009 \times 10^{-3} (\text{CR})^3 + (0,1049) (\text{CR})^2 + (-0,7313) (\text{CR}) + 7,5003 \quad (6.25)$$

Sıfırdncı Mertebe İndisi için;

$$\text{Ln}T_g = -0,0219 (x^0)^3 + (0,4913) (x^0)^2 + (-3,6828) (x^0) + 15,0243 \quad (6-26)$$

Randic İndisi için;

$$\text{Ln}T_g = -0,0383 (x^1)^3 + 0,4402 (x^1)^2 + (-1,7350) (x^1) + 8,1529 \quad (6-27)$$

olduğu saptanmıştır.

6.2.4. Önerilen Bağntı

R^2 ve Chi Sq değerlerine bakılarak (Tablo 6.8) Dallonmuş Polimetakrilatlar için en iyi regresyon sonucunu veren bağntı CR-İndisi, X^0 İndisi ve X^1 İndisi için;

$\text{Ln}T_g = AI^3 + BI^2 + CI + D$ (6-15) olup, III.Mertebeden olan bu bağntının regresyon eğrileri Şekil 6.46-54 de gösterilmiştir.

Önerilen bağntı için en yakın deneysel Camsı-Geçiş Temperaturlerini veren indis (Tablo 6.8) de bakılan R^2 ve Chi Sq değerlerine göre X^1 İndisi olup;

$$\text{Ln}T_g = -0,0383 (X^1)^3 + 0,4402 (X^1)^2 + (-1,7350) (X^1) + 8,1529 \quad (6-27)$$

bağntısı dallanmış polimetakrilatlar için en iyi bağntı olarak önerilmektedir.

6.2.5. Hata Hesapları

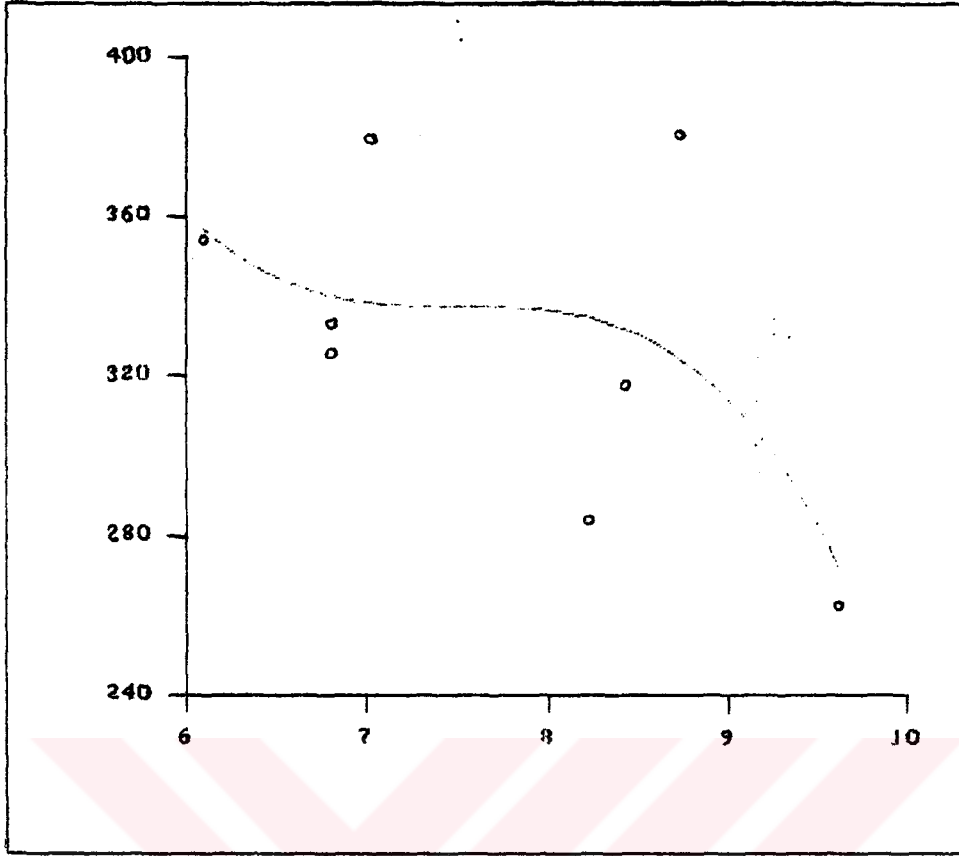
Önerilen bağntı ile hesaplanacak olan T_g değerlerindeki hatanın ne kadar olduğunun belirlenmesi için literatürden(19) elde edilen deneysel T_g değerlerine göre bağıl hata hesapları yapılmıştır. Bu değerler (Tablo 6.12), (Tablo 6.13), (Tablo 6.14) de gösterilmiştir.

CR-İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli 2-etil-butil Metakrilat molekülü için % 17", minumum bağıl hata değeri: "Poli sekonder-butil Metakrilat molekülü için %1" olarak bulunmuştur.

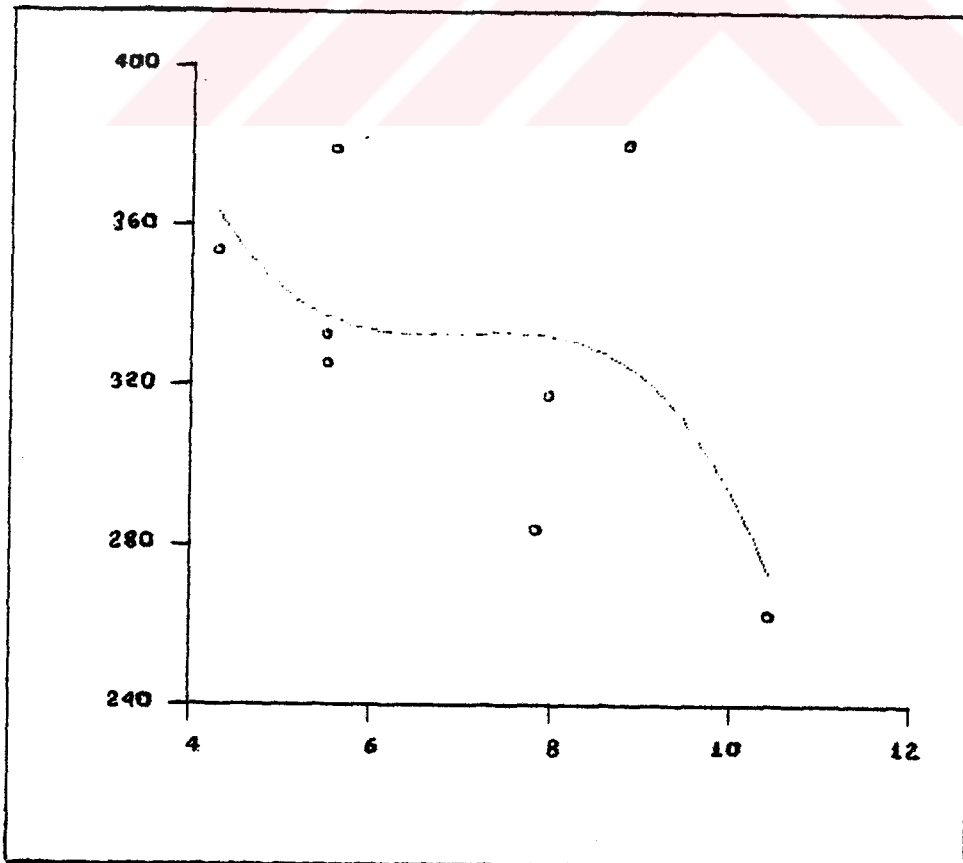
DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON

Tablo 6.8

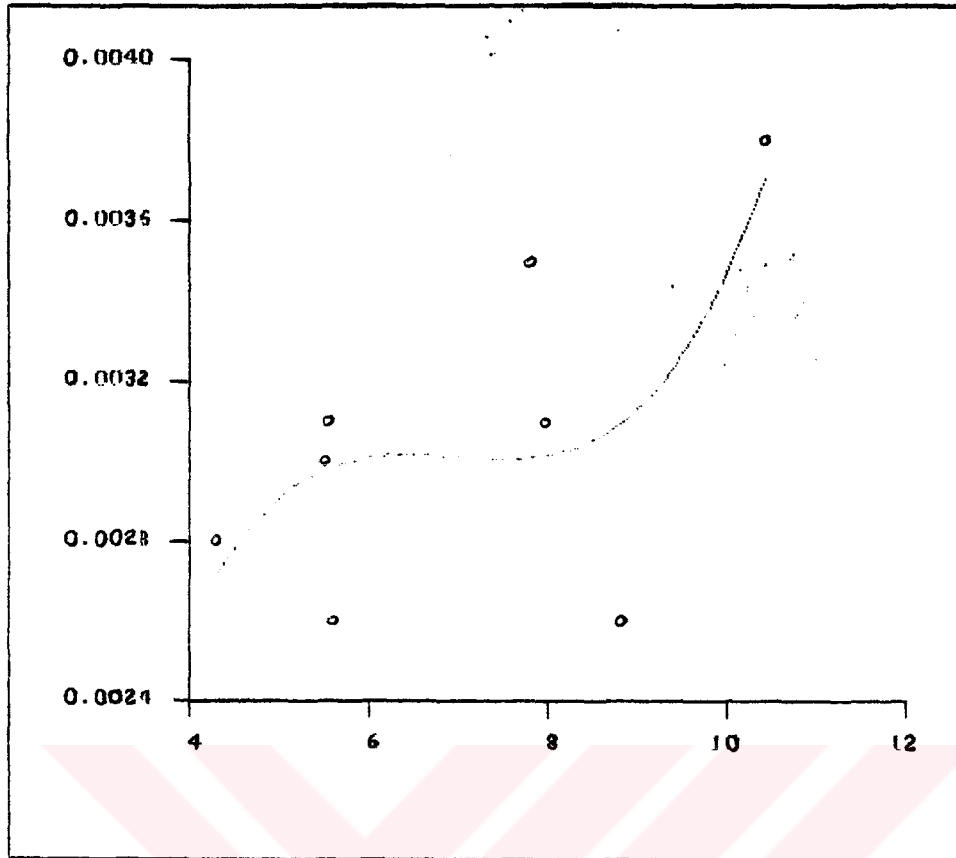
BAĞINTILAR	CR		X ⁰		X ¹	
	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq
$T_g = AI+B$	0,9897	1514,3191	0,9895	1539,8464	0,9922	1151,6340
$\frac{1}{T_g} = AI+B$	0,9890	1,401x10 ⁻⁷	0,9887	1,438x10 ⁻⁷	0,9920	1,019x10 ⁻⁷
$\ln T_g = AI+B$	0,9997	0,0140	0,9997	0,0142	0,9998	0,0103
$T_g = AI^2+BI+C$	0,9901	1741,6550	0,9903	1713,6922	0,9927	1286,8163
$\frac{1}{T_g} = AI^2+BI+C$	0,9898	1,554x10 ⁻⁷	0,9899	1,534x10 ⁻⁷	0,9930	1,069x10 ⁻⁷
$\ln T_g = AI^2+BI+C$	0,9997	0,0158	0,9997	0,0156	0,9998	0,0113
$T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9910	1982,9416	0,9909	1998,6536	0,9929	1562,9392
$\frac{1}{T_g} = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9911	1,694x10 ⁻⁷	0,9910	1,711x10 ⁻⁷	0,9933	1,279x10 ⁻⁷
$\ln T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9997	0,0179	0,9997	0,0180	0,9998	0,0137



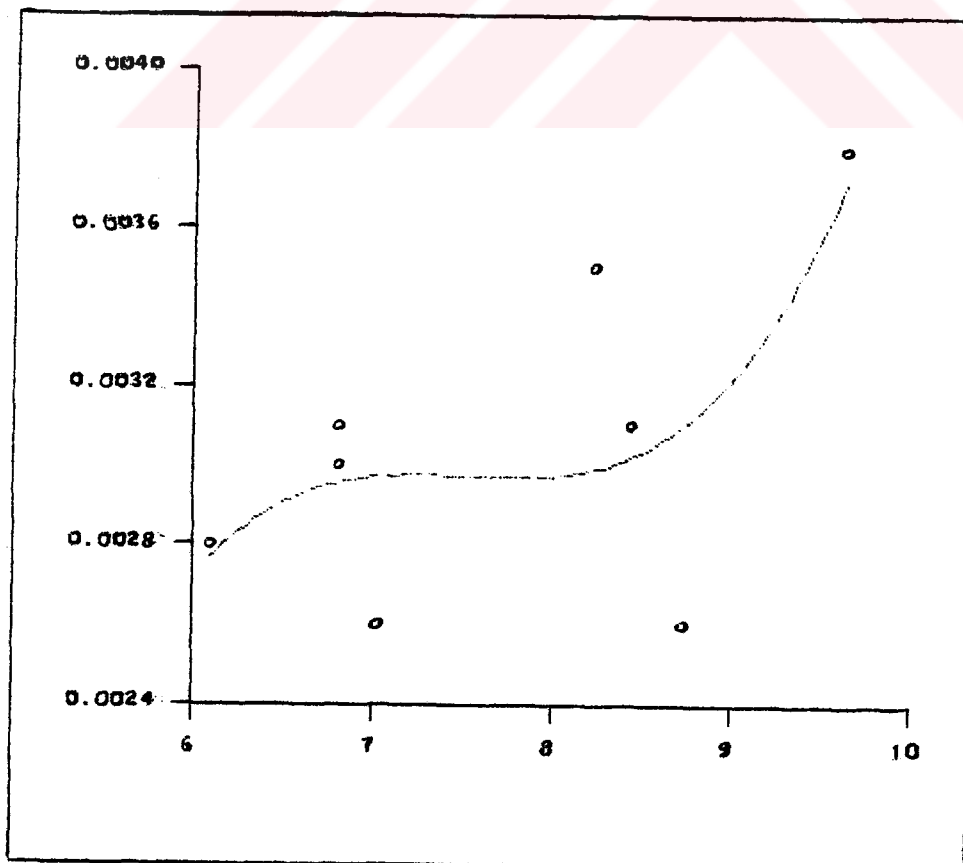
Şekil 6. 47 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



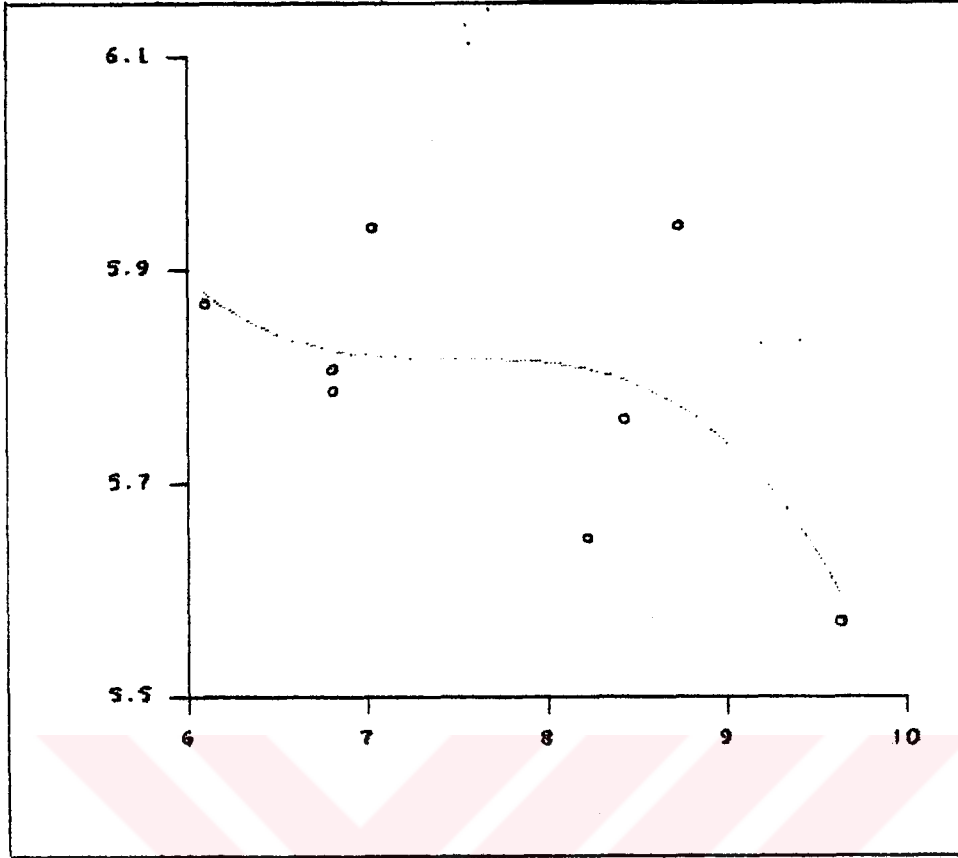
Şekil 6. 48 $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



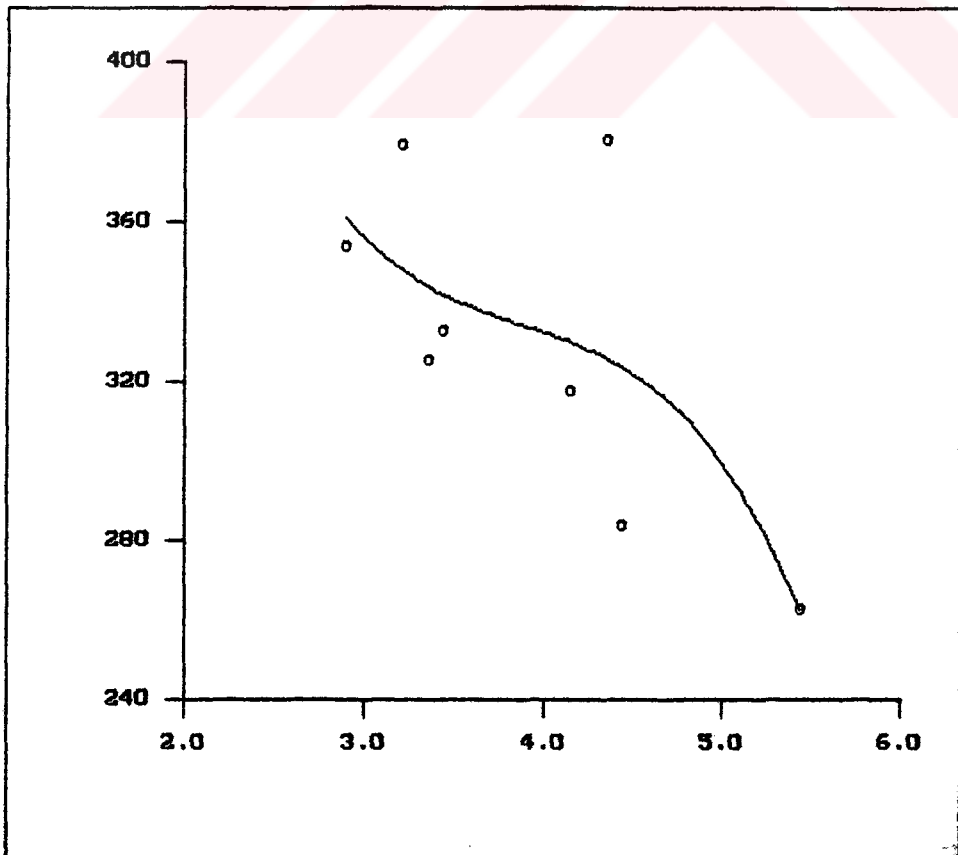
Şekil 6.49 $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



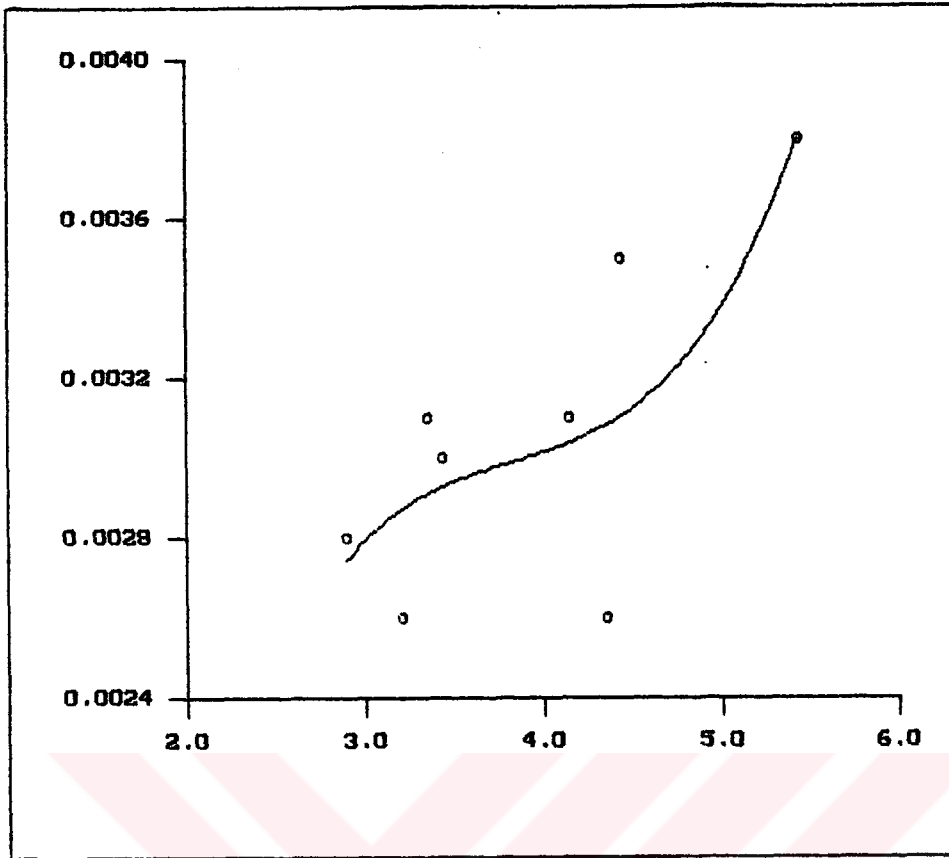
Şekil 6.50 $\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



Şekil 6.51 $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$

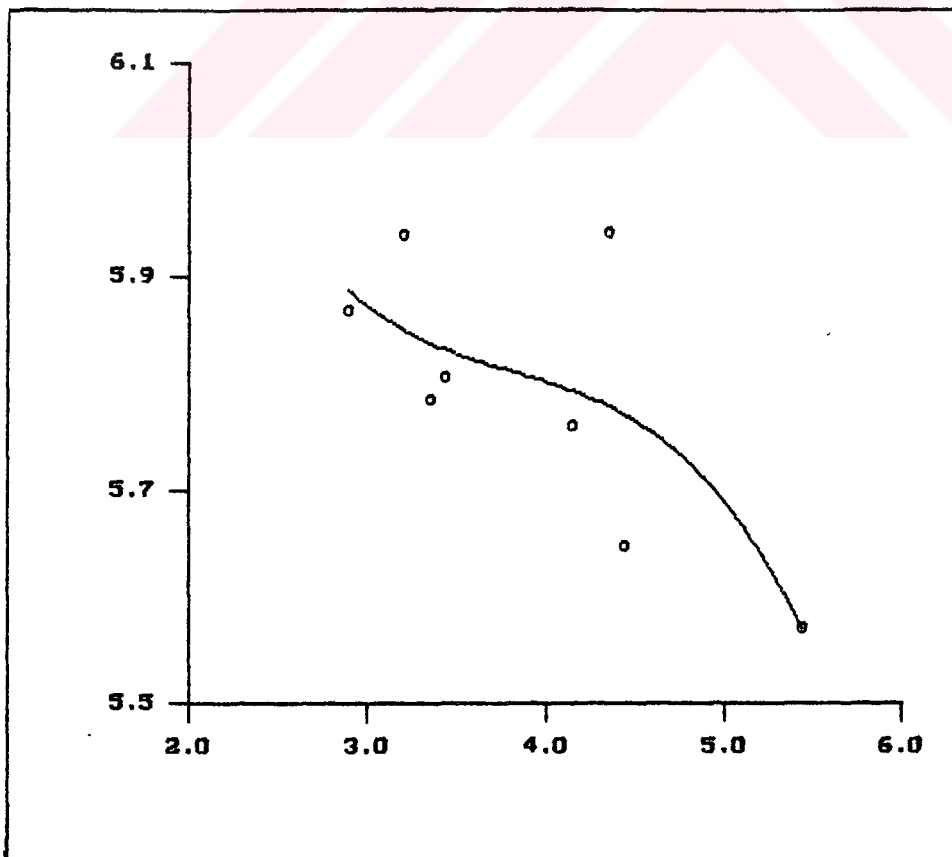


Şekil 6.52 $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$



Şekil 6.53

$$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$$



Şekil 6.54

$$\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$$

DALLANMIŞ POLİMETAKRİLİTLERİN CR-İNDİSİ'NE GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6. 12

POLİMER	T _g (gerçek)	T _g (hesaplanan)	Fark	% Hata
2-propil Metakrilat	354 °K	323 °K	31 °K	$\frac{ 354 - 323 }{354} \times 100 = \% 9$
sek-butil Metakrilat	333 °K	337 °K	-4 °K	$\frac{ 333 - 337 }{333} \times 100 = \% 1$
izo-butil Metakrilat	326 °K	336 °K	-10 °K	$\frac{ 326 - 336 }{326} \times 100 = \% 3$
ters-butil Metakrilat	380 °K	336 °K	44 °K	$\frac{ 380 - 336 }{380} \times 100 = \% 12$
2 etil-butil Metakrilat	284 °K	335 °K	-51 °K	$\frac{ 284 - 335 }{284} \times 100 = \% 17$
3,3-dimetil butil Metakrilat	318 °K	334 °K	-16 °K	$\frac{ 318 - 334 }{318} \times 100 = \% 5$
3,3-dimetil 2-butil Metakrilat	381 °K	327 °K	54 °K	$\frac{ 381 - 327 }{381} \times 100 = \% 14$
2 etil-heksil Metakrilat	263 °K	274 °K	-11 °K	$\frac{ 263 - 274 }{263} \times 100 = \% 4$

DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLARIN χ^0 (0'ncı Mertebe İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.13

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
2-propil Metakrilat	354 °K	358 °K	-4 °K	$\frac{ 354 - 358 }{354} \times 100 = \% 1$
sek-butil Metakrilat	333 °K	313 °K	-20 °K	$\frac{ 323 - 313 }{323} \times 100 = \% 6$
izo-butil Metakrilat	326 °K	323 °K	3 °K	$\frac{ 326 - 323 }{326} \times 100 = \% 0,9$
ters-butil Metakrilat	380 °K	313 °K	67 °K	$\frac{ 380 - 313 }{380} \times 100 = \% 17$
2 etil-butil Metakrilat	284 °K	312 °K	-28 °K	$\frac{ 284 - 312 }{284} \times 100 = \% 10$
3,3-di metil butil Metakrilat	318 °K	322 °K	-4 °K	$\frac{ 318 - 322 }{318} \times 100 = \% 1$
3,3-dimetil 2-butil Metakrilat	381 °K	314 °K	67 °K	$\frac{ 318 - 314 }{381} \times 100 = \% 17$
2 etil-hekzil Metakrilat	263 °K	249 °K	14 °K	$\frac{ 263 - 249 }{263} \times 100 = \% 5$

DALLANMIŞ POLİMETAKRİLATLARIN χ^1 (Randic İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.14

POLİMER	T_g (Gerçek)	T_g (Hesaplanan)	Fark	% Hata
2-Propil Metakrilat	354 °K	363 °K	-9 °K	$\frac{ 354 - 363 }{354} \times 100 = \% 2,5$
sek-butül Metakrilat	333 °K	344 °K	-11 °K	$\frac{ 333 - 344 }{333} \times 100 = \% 3$
izo-butül Metakrilat	326 °K	343 °K	-17 °K	$\frac{ 326 - 343 }{326} \times 100 = \% 5$
ters-butül Metakrilat	380 °K	384 °K	-4 °K	$\frac{ 380 - 384 }{380} \times 100 = \% 1$
2 etil-butül Metakrilat	284 °K	311 °K	-27 °K	$\frac{ 284 - 311 }{284} \times 100 = \% 9,5$
3,3-dimetil butil Metakrilat	318 °K	328 °K	-10 °K	$\frac{ 318 - 328 }{318} \times 100 = \% 3$
3,3-dimetil 2-butül Metakrilat	381 °K	324 °K	57 °K	$\frac{ 381 - 324 }{381} \times 100 = \% 15$
2 etil-hekzil Metakrilat	263 °K	262 °K	1 °K	$\frac{ 263 - 262 }{263} \times 100 = \% 0,4$

x^0 İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli tersiyer-butil Metakrilat ve Poli 3,3-di metil-2 butil Metakrilat moleküllerinde % 17", minimum bağıl hata değeri: "Poli 2-propil Metakrilat ve Poli 3,3-di metil-butil Metakrilat molekülleri'nde % 1" olarak bulunmuştur.

x^1 İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli 3,3-di metil-2 butil Metakrilat molekülü için % 15", minimum bağıl hata değeri "Poli 2 etil-heksil Metakrilat molekülü için %0,4" olarak bulunmuştur.

6.3. DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR

T_g ve İndis (I) arasında düz zincirli poliakrilatlar için I.Mertebe, II. Mertebe, III.Mertebe olmak üzere üç ayrı grup bağıntı türetilmiştir.

6.3.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar

Düz zincirli poliakrilatlar için T_g ve İndis (I) arasında yazılan eşitlikler ve N-FIT paket programı yardımıyla yapılan regresyon sonucunda, bağıntılar Tablo 6.16,17,18 de özetlenerek deneysel veriler ve regresyon doğruları Şekil 6.55, 56,57,58,59,60,61,62,63 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR İndisi için en iyi doğrusal bağıntının;

$$\ln T_g = 0,0307 (CR) + 5,6005 \quad (6-28)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\ln T_g = -0,0504 (CR) + 5,7420 \quad (6-29)$$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON (CR-T_g, X⁰-T_g, X¹-T_g)

Tablo 6. 16

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
T _g = A(CR) + B	0,9972	213,5191	-7,4438	270,7515	-	-
T _g = A(CR) ² + B(CR) + C	0,9991	86,1771	2,0294	-30,1499	318,9663	-
T _g = A(CR) ³ + B(CR) ² + C(CR) + D	0,9999	9,5541	-0,5605	11,3432	-75,6211	381,2778
T _g = A(X ⁰) + B	0,9978	164,9267	-12,2503	305,2244	-	-
T _g = A(X ⁰) ² + B(X ⁰) + C	0,9995	47,1310	4,2762	-64,4087	451,5127	-
T _g = A(X ⁰) ³ + B(X ⁰) ² + C(X ⁰) + D	1,0000	4,0889	-1,5793	32,8481	-229,3468	754,1040
T _g = A(X ¹) + B	0,9980	153,3169	-17,2319	288,3085	-	-
T _g = A(X ¹) ² + B(X ¹) + C	0,9996	36,4798	7,9713	-70,3726	364,6435	-
T _g = A(X ¹) ³ + B(X ¹) ² + C(X ¹) + D	1,0000	3,2628	-3,6381	43,6415	-178,0108	463,0440

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ

* R² : KORELASYON KATSAYISI

DÜZ ZİNCİRLİ POLIAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON (CR- $\frac{1}{T_g}$, $X^0-\frac{1}{T_g}$, $X^1-\frac{1}{T_g}$)

Tablo 6. 17

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$	0,9981	5,141x10 ⁻⁸	1,224x10 ⁻⁴	3,711x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9992	2,606x10 ⁻³	-2,951x10 ⁻⁵	4,525x10 ⁻⁴	3,010x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	1,0000	1,231x10 ⁻⁹	9,997x10 ⁻⁶	-1,956x10 ⁻⁴	1,264x10 ⁻³	1,898x10 ⁻³
$\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$	0,9985	3,891x10 ⁻³	2,010x10 ⁻⁴	3,146x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9995	1,557x10 ⁻⁸	-6,167x10 ⁻⁵	9,532x10 ⁻⁴	1,037x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9999	3,069x10 ⁻⁹	2,740x10 ⁻⁵	-5,574x10 ⁻⁴	3,815x10 ⁻³	-4,213x10 ⁻³
$\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$	0,9986	3,634x10 ⁻⁸	2,823x10 ⁻⁴	3,425x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9996	1,376x10 ⁻⁸	-1,139x10 ⁻⁴	1,041x10 ⁻³	2,335x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9999	4,976x10 ⁻⁹	6,244x10 ⁻³	-7,260x10 ⁻⁴	2,889x10 ⁻³	6,461x10 ⁻⁴

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ

* R² : KORELASYON KATSAYISI

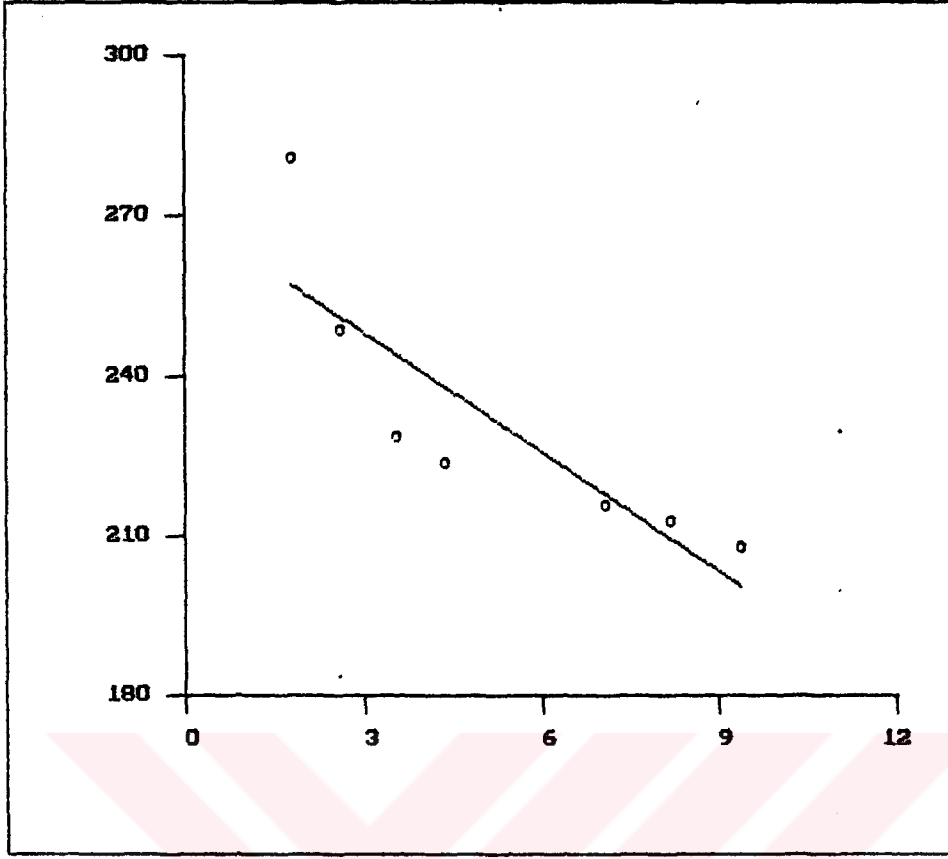
DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON (CR-LnT_g, X⁰-LnT_g, X¹-LnT_g)

Tablo 6. 18

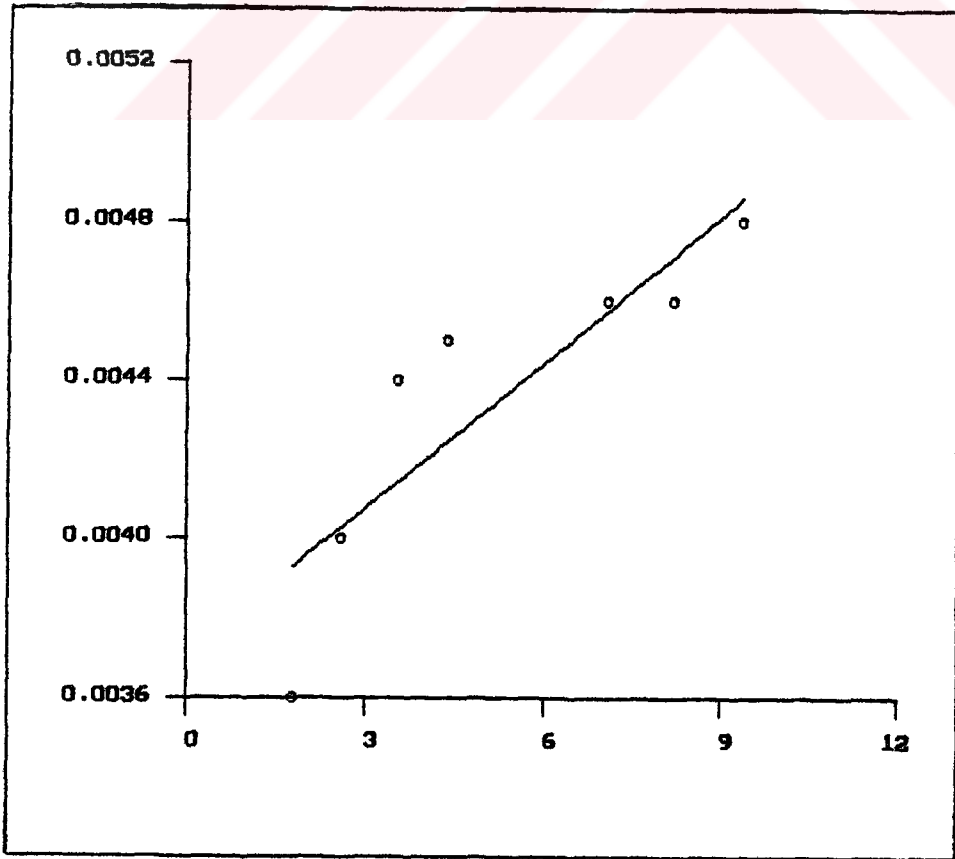
BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\text{LnT}_g = A(\text{CR}) + B$	0,9999	$3,391 \times 10^{-3}$	-0,0307	5,6005	-	-
$\text{LnT}_g = A(\text{CR})^2 + B(\text{CR}) + C$	1,0000	$1,483 \times 10^{-3}$	$7,924 \times 10^{-3}$	-0,1193	5,7888	-
$\text{LnT}_g = A(\text{CR})^3 + B(\text{CR})^2 + C(\text{CR}) + D$	1,0000	$1,871 \times 10^{-4}$	$-2,310 \times 10^{-3}$	-0,0463	0,3067	6,0456
$\text{LnT}_g = A(X^0) + B$	0,9999	$2,594 \times 10^{-3}$	-0,0504	5,7420	-	-
$\text{LnT}_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	1,0000	$8,309 \times 10^{-4}$	0,0167	-0,2535	6,3117	-
$\text{LnT}_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	1,0000	$7,924 \times 10^{-5}$	$-6,608 \times 10^{-3}$	0,1362	-0,9436	7,5778
$\text{LnT}_g = A(X^1) + B$	0,9999	$2,404 \times 10^{-3}$	-0,0708	5,6724	-	-
$\text{LnT}_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	1,0000	$6,515 \times 10^{-4}$	0,0310	-0,2778	5,9697	-
$\text{LnT}_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	1,0000	$6,153 \times 10^{-5}$	-0,0153	0,1815	-0,7317	6,3847

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R² : KORELASYON KATSAYISI

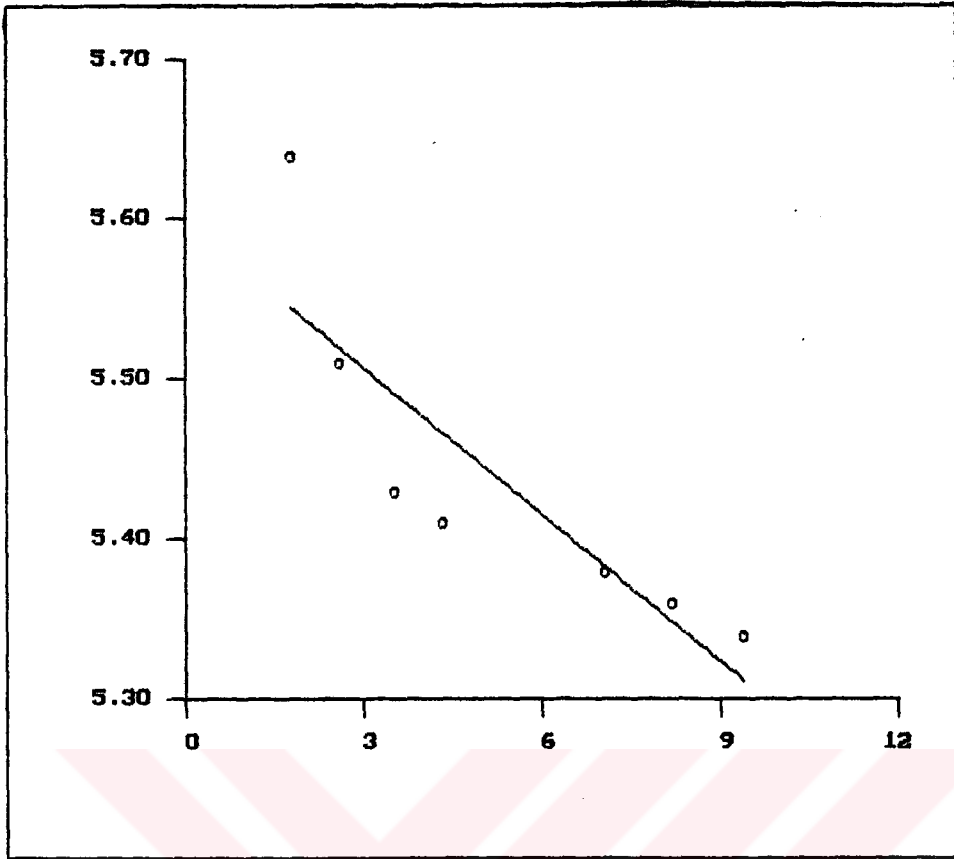
DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON ŞEKİLLERİ



Şekil 6.55 $T_g = A(CR) + B$

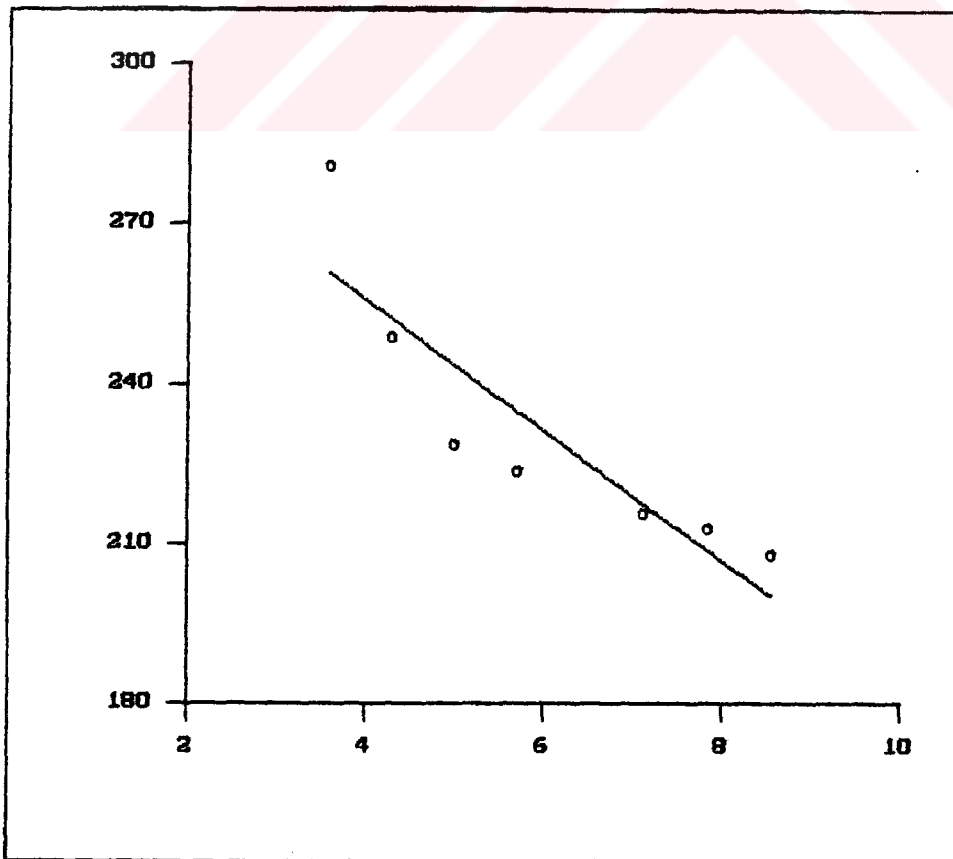


Şekil 6.56 $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$



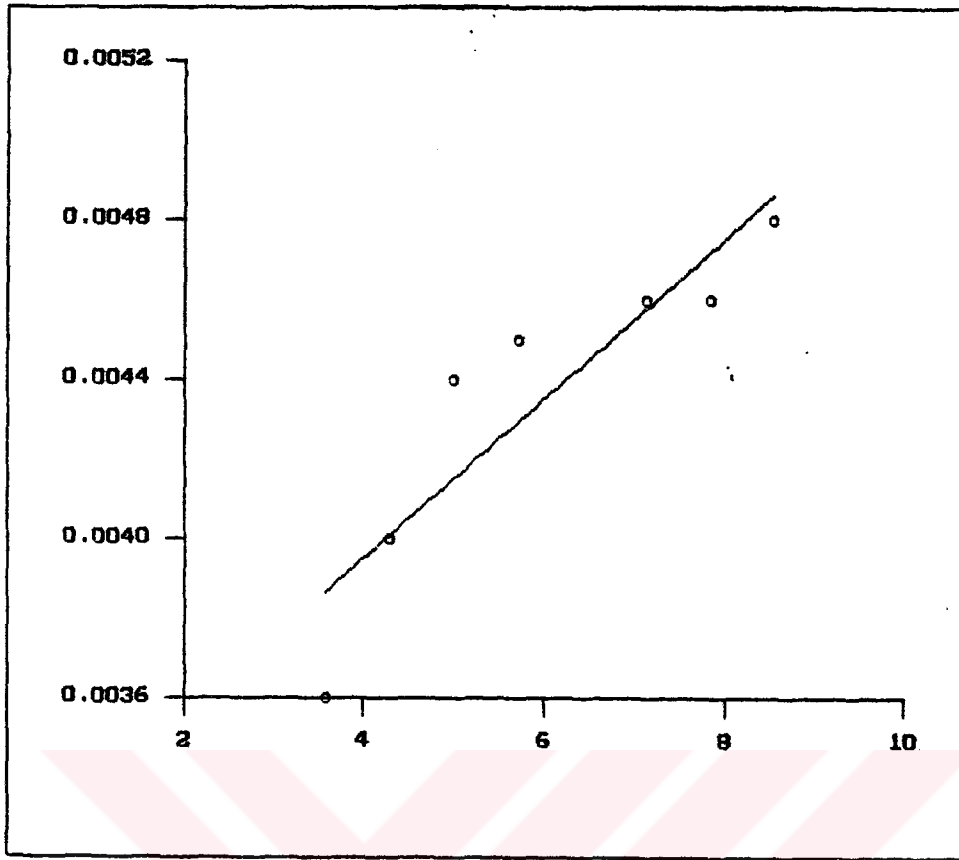
Şekil 6.57

$$\text{Ln}T_g = A(\text{CR}) + B$$

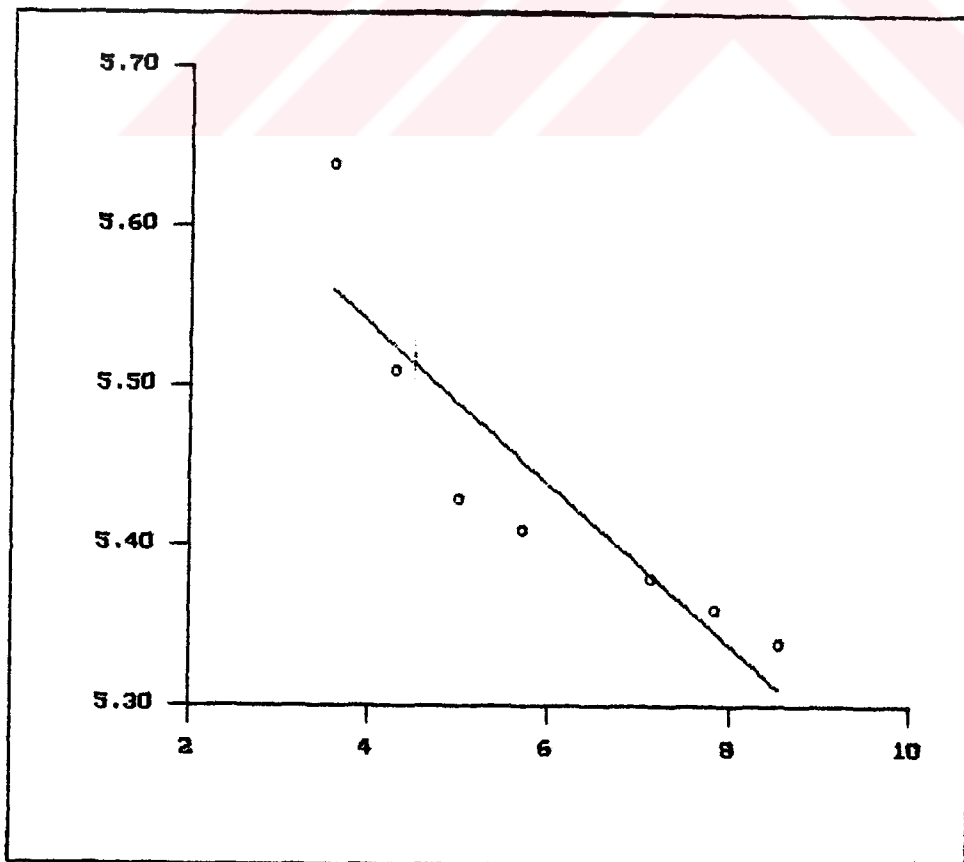


Şekil 6.58

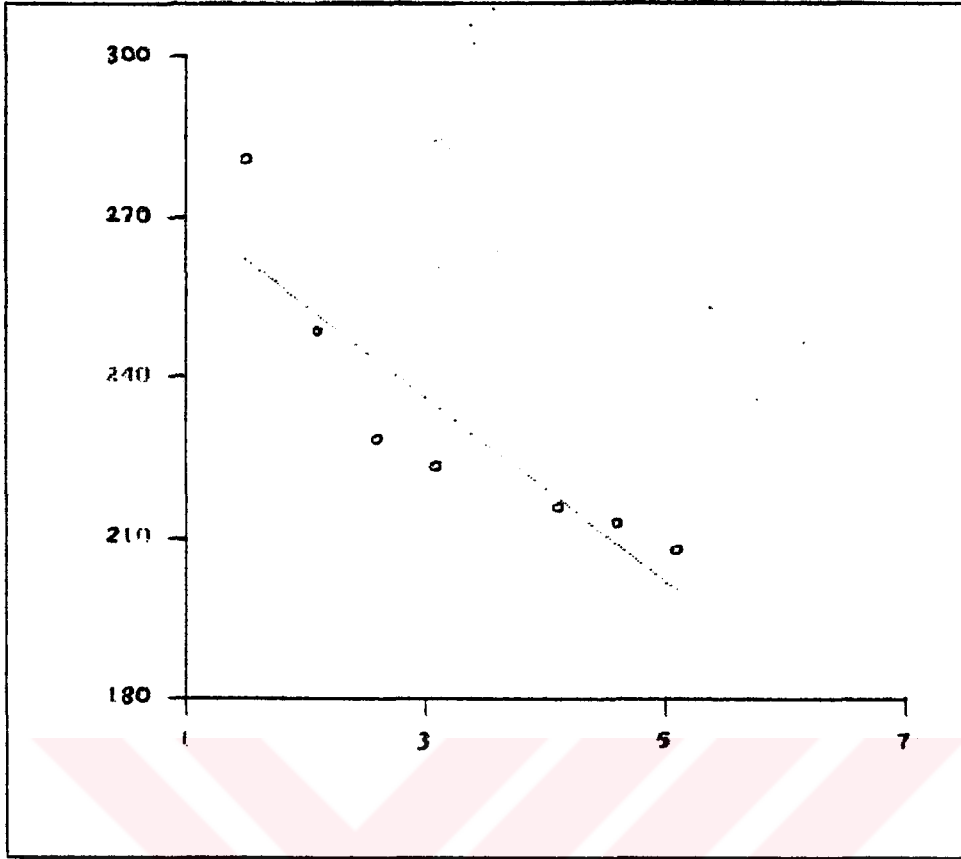
$$T_g = A(X^0) + B$$



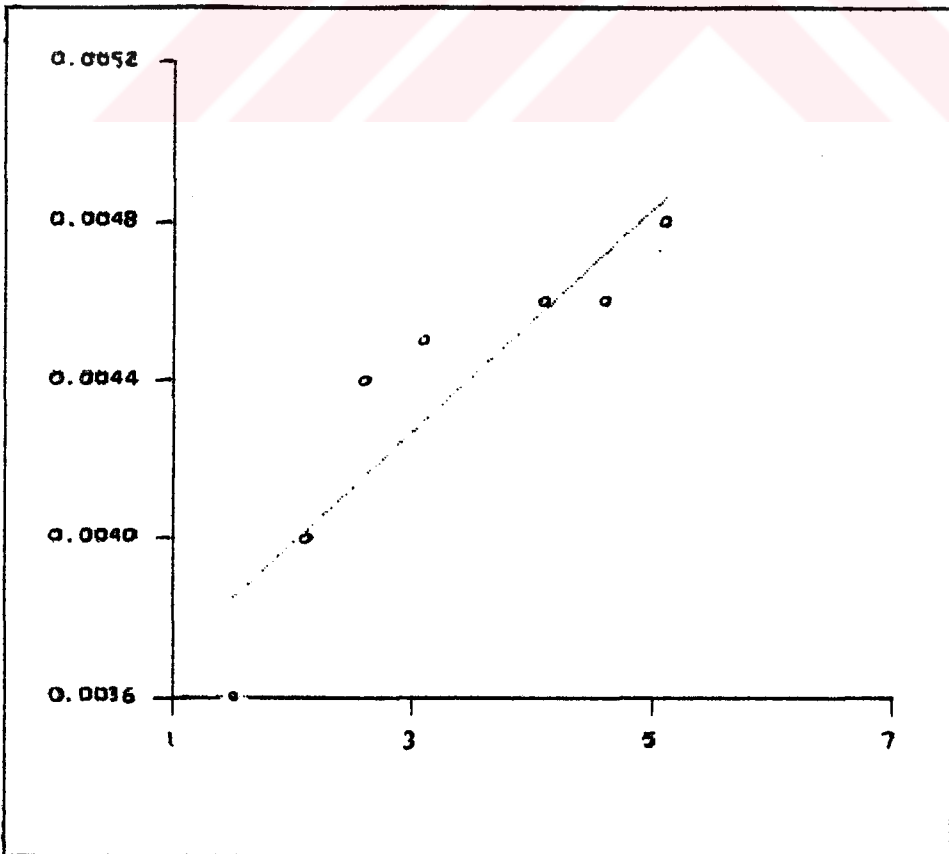
Şekil 6.59 $\frac{1}{T_g} = A(X^O) + B$



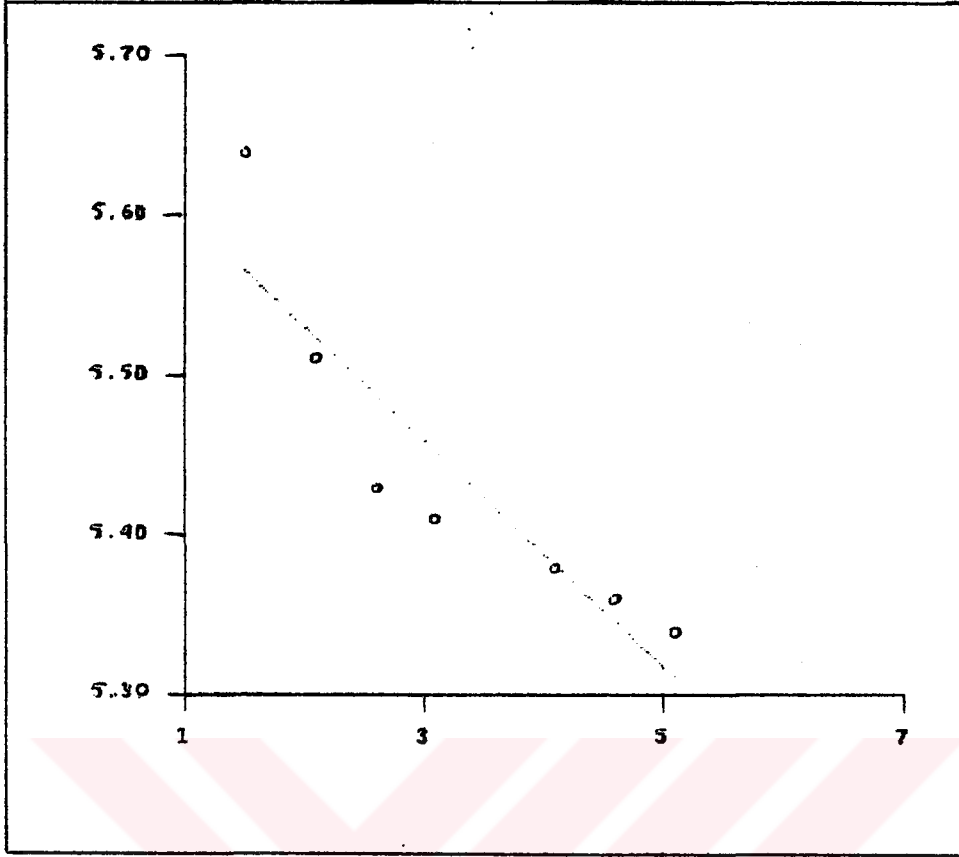
Şekil 6.60 $\ln T_g = A(X^O) + B$



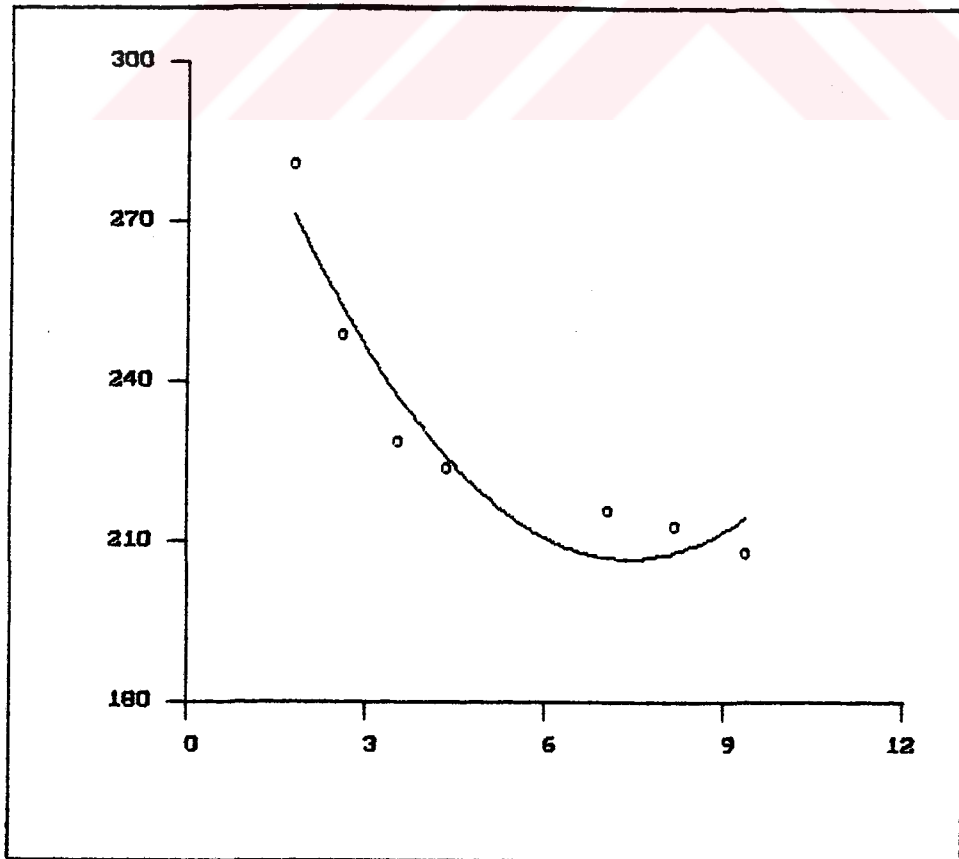
Şekil 6. 61 $T_g = A(X^1)+B$



Şekil 6. 62 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)+B$



Şekil 6.63 $\ln T_g = A(X^1) + B$



Şekil 6.64 $T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$

Randic İndisi için;

$$\text{LnT}_g = -0,0708 (\text{CR}) + 5,6724 \quad (6-30)$$

olduğu saptanmıştır.

6.3.2. İkinci Mertebeden Bağlıntılar

Düz Zincirli Poliakrilatlar için ikinci mertebeden 6.1.2 de gösterilen üç ayrı eşitliğin sonucuna göre yapılan regresyonda, bağlantılar Tablo 6.16,17,18 de özetlenerek deneysel veriler ve regresyon eğrileri Şekil 6.64,65,66,67,68,69,70, 71,72 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR İndisi için en iyi bağlantının;

$$\text{LnT}_g = 7,924 \times 10^{-3} (\text{CR})^2 + (-0,1193) (\text{CR}) + 5,7888 \quad (6-31)$$

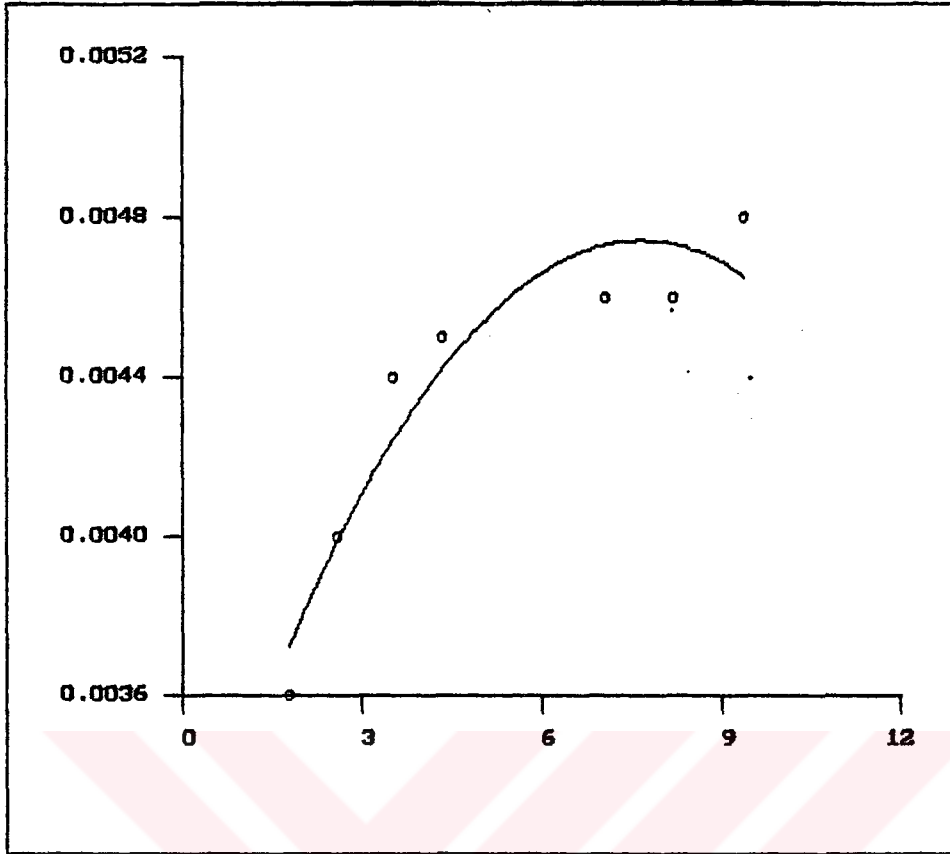
Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\text{LnT}_g = 0,0167 (x^0)^2 + (-0,2535) (x^0) + 6,3117 \quad (6-32)$$

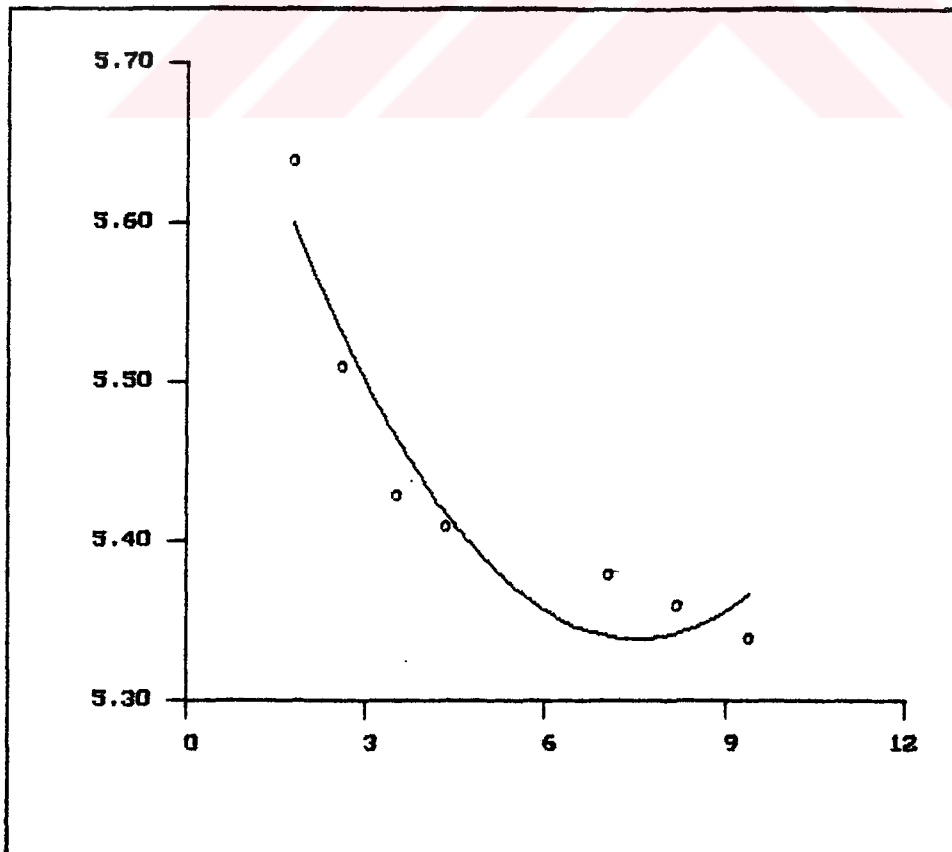
Randic İndisi için;

$$\text{LnT}_g = 0,0310 (x^1)^2 + (-0,2778) (x^1) + 5,9697 \quad (6-33)$$

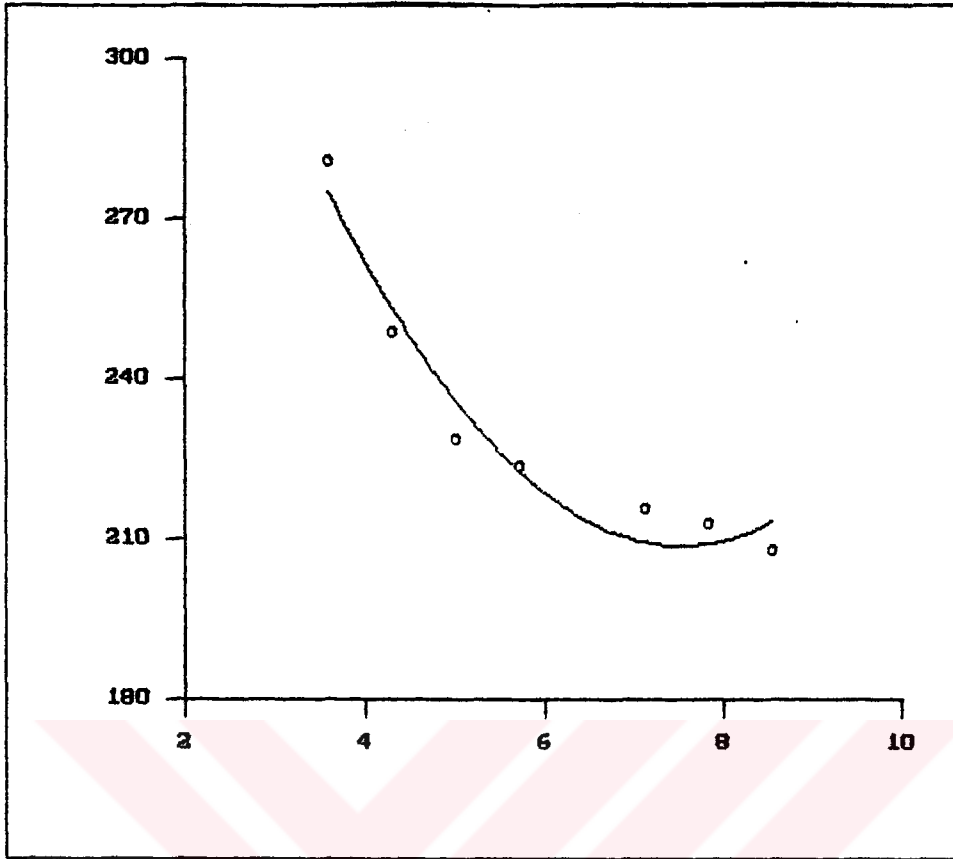
olduğu saptanmıştır.



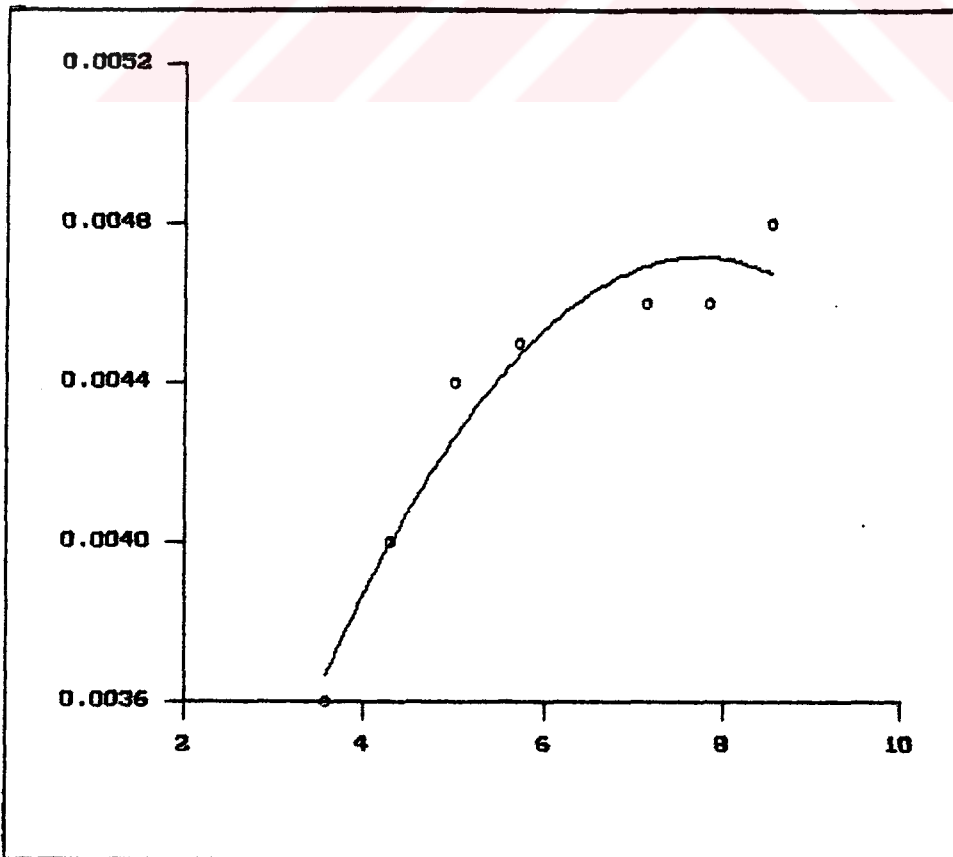
Şekil 6.65 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$



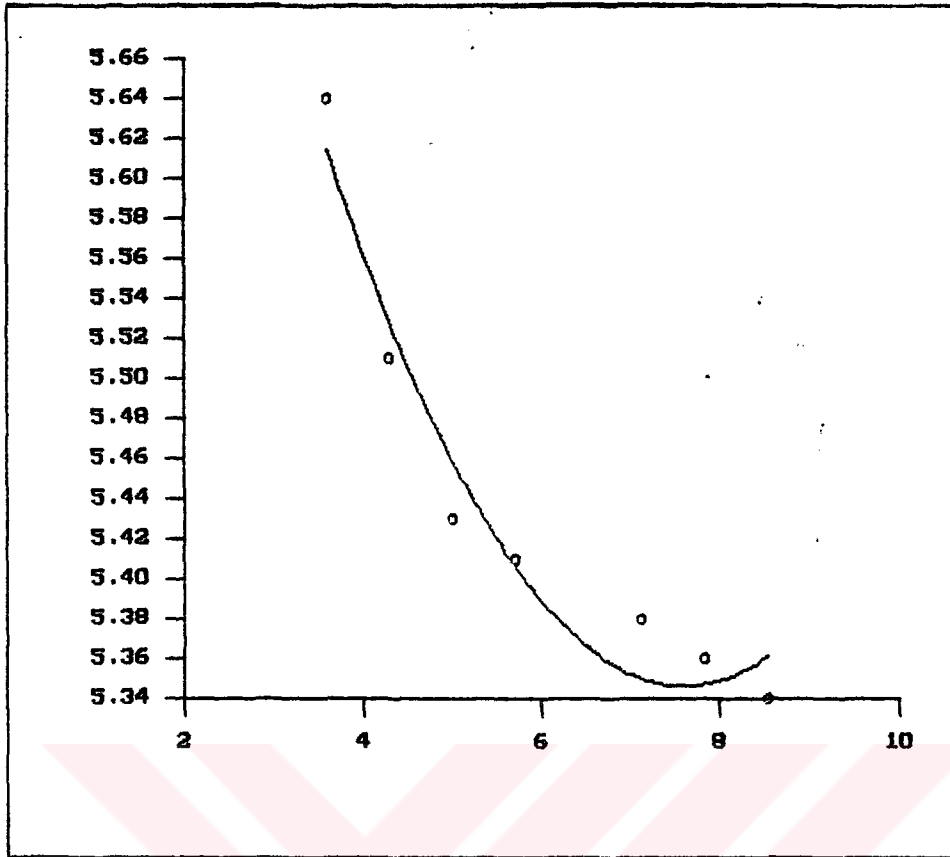
Şekil 6.66 $\text{Ln}T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



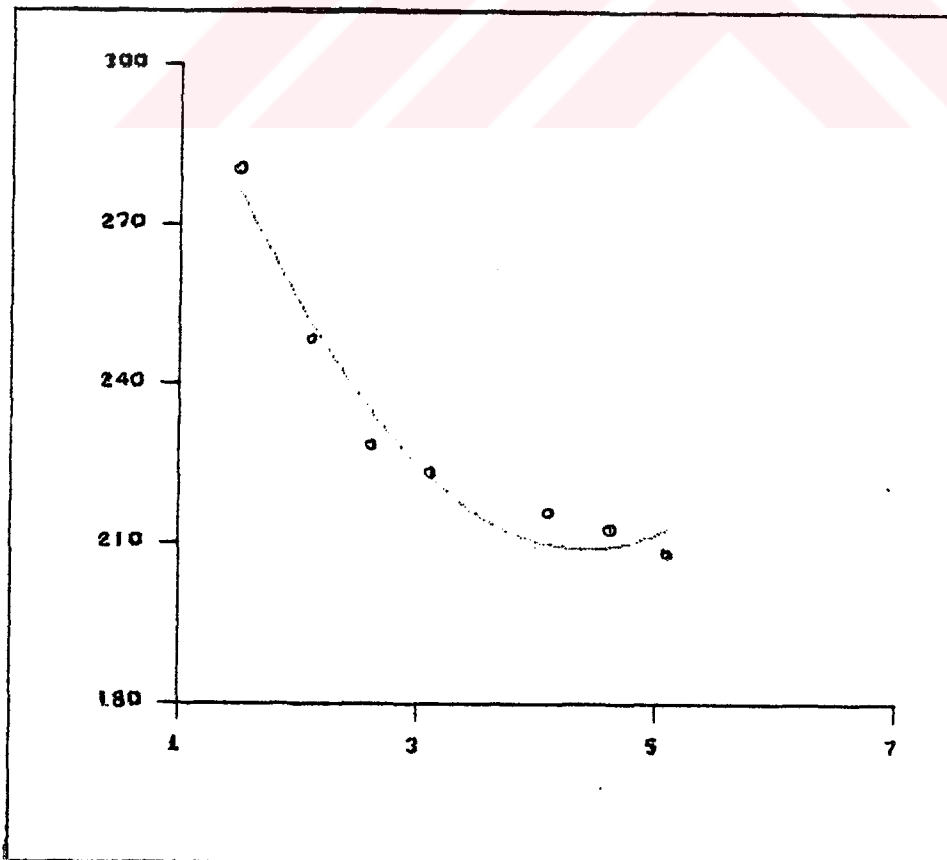
Şekil 6.67 $T_g = A(X^o)^2 + B(X^o) + C$



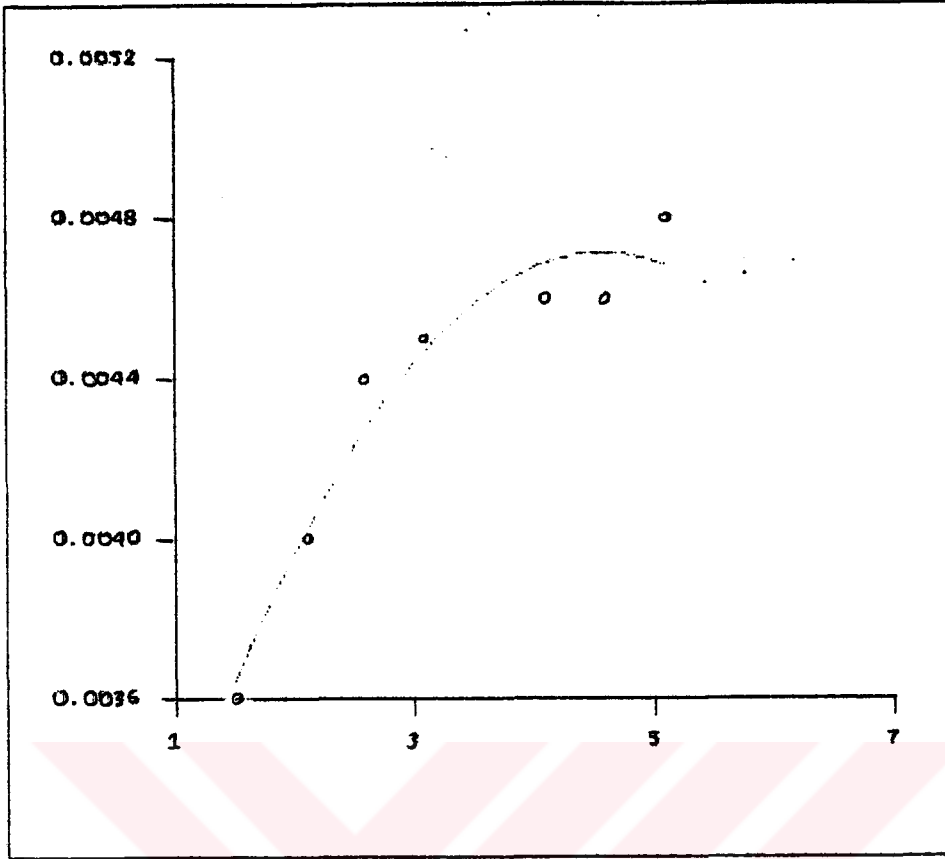
Şekil 6.68 $\frac{1}{T_g} = A(X^o)^2 + B(X^o) + C$



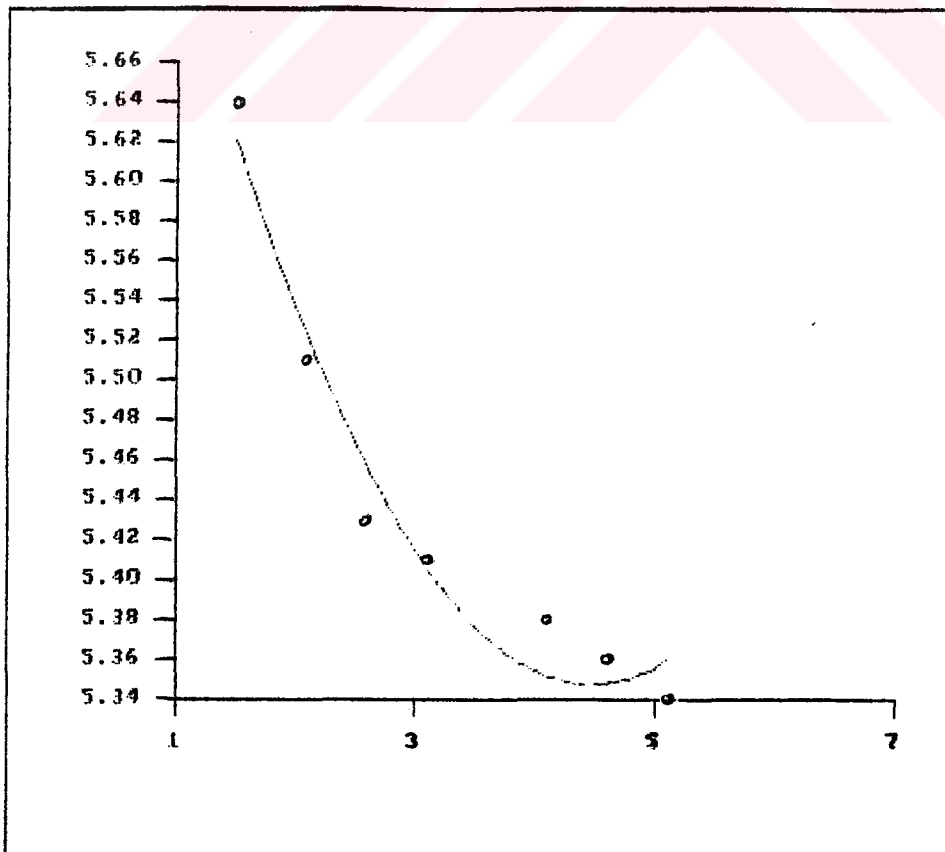
Şekil 6.69 $\text{Ln}T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



Şekil 6.70 $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.71 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.72 $\text{Ln}T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$

6.3.3. Üçüncü Mertebeden Bağıntılar

Düz Zincirli Poliakrilatlar için, en yakın deneysel T_g değerlerini elde etmek amacıyla 6.1.3 de gösterilen bağıntılar, her indis için ayrı ayrı bulunarak Tablo 6.16,17,18 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve III.Mertebeden regresyon eğrileride Şekil 6.73,74,75,76,77,78,79,80,81 de gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre; CR Indisi için en iyi bağıntının;

$$\frac{1}{T_g} = 9,997 \times 10^{-6} (CR)^3 + (-1,956 \times 10^{-4}) (CR)^2 + (1,264 \times 10^{-3}) (CR) + 1,898 \times 10^{-3} \quad (6.34)$$

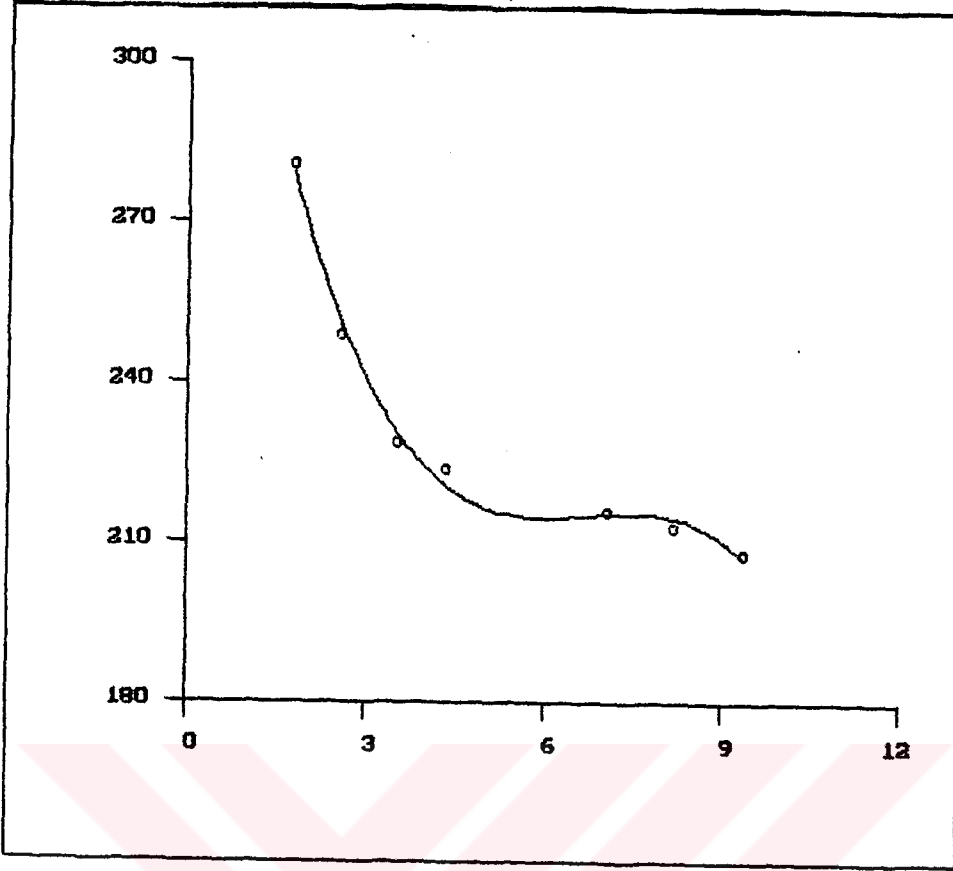
Sıfırıncı Mertebe Indisi için;

$$\frac{1}{T_g} = 2,740 \times 10^{-5} (X^0)^3 + (-5,574 \times 10^{-4}) (X^0)^2 + (3,815 \times 10^{-3}) (X^0) + (-4,213 \times 10^{-3}) \quad (6-35)$$

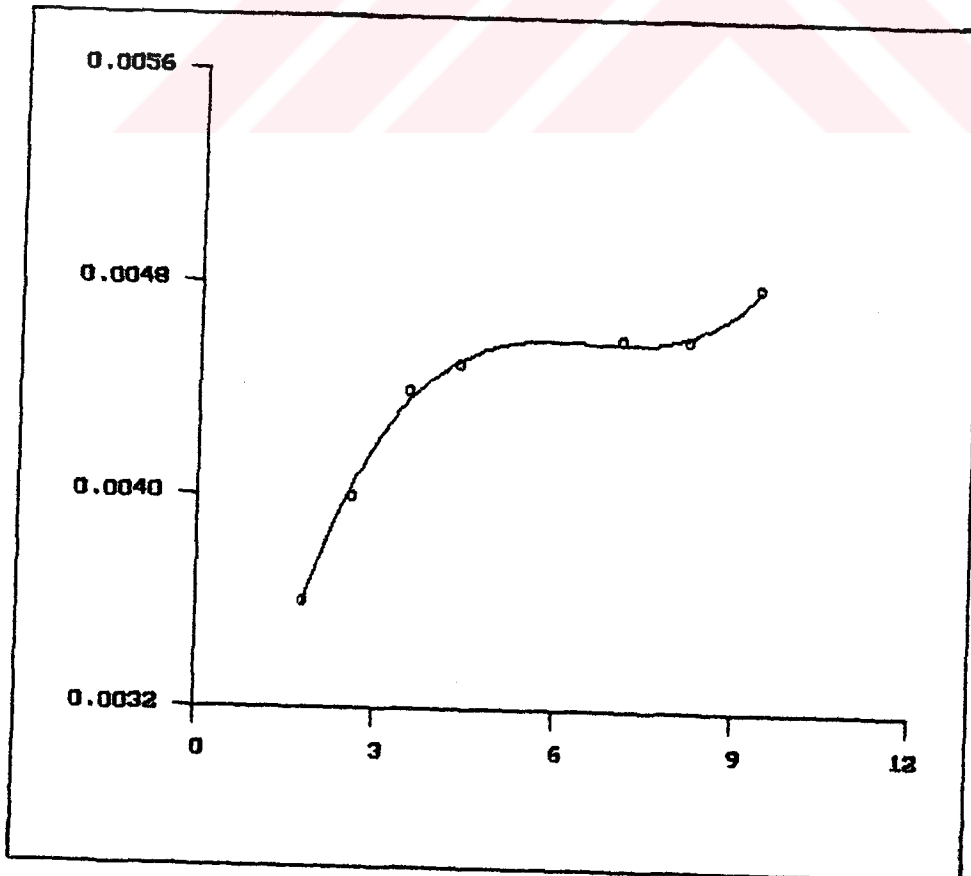
Randic Indisi için;

$$\frac{1}{T_g} = 6,244 \times 10^{-5} (X^1)^3 + (-7,260 \times 10^{-4}) (X^1)^2 + (2,889 \times 10^{-3}) + 6,461 \times 10^{-4} \quad (6-36)$$

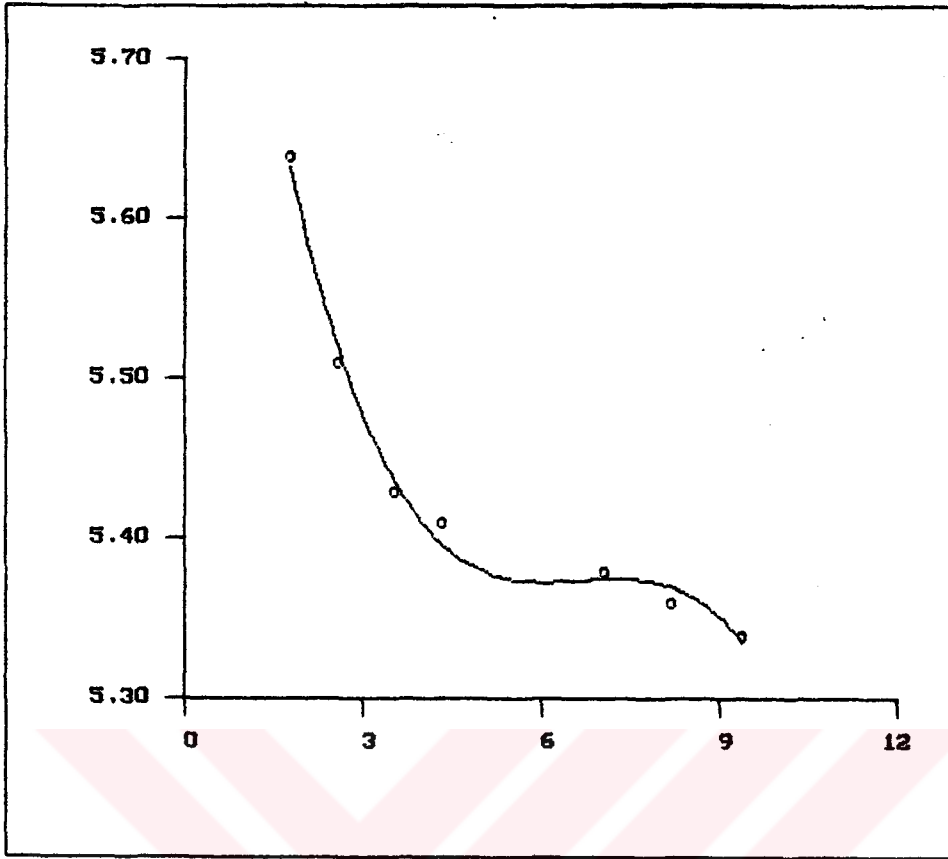
olduğu saptanmıştır.



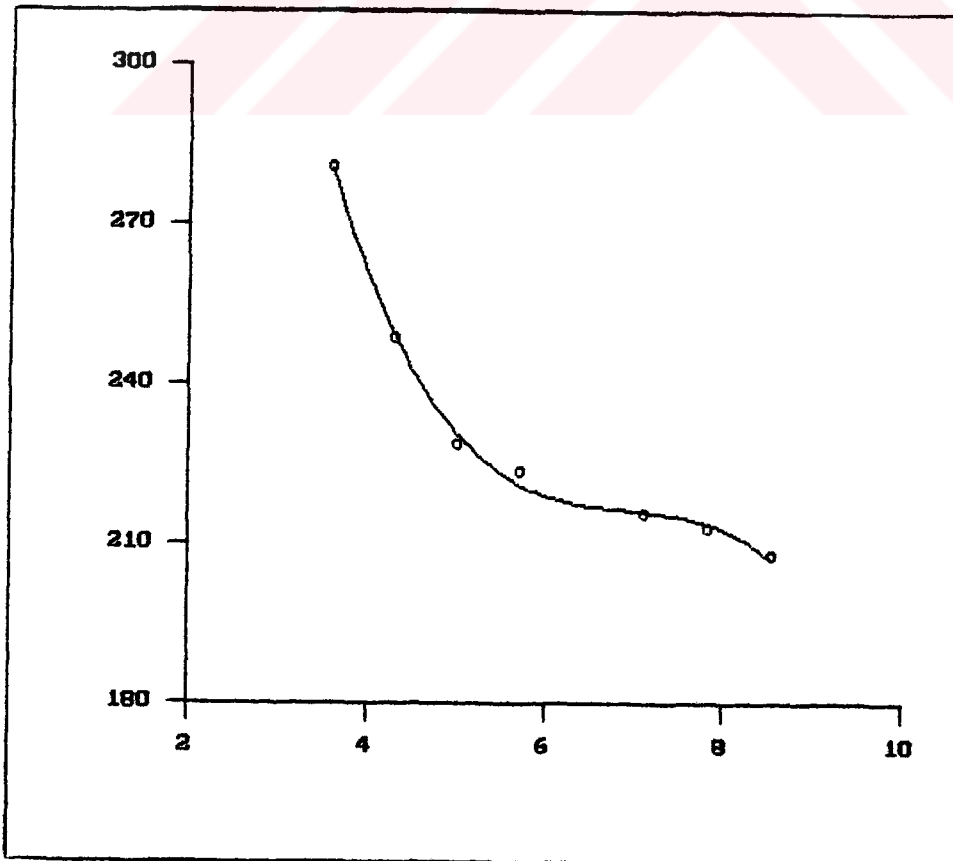
Şekil 6.73 $-T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



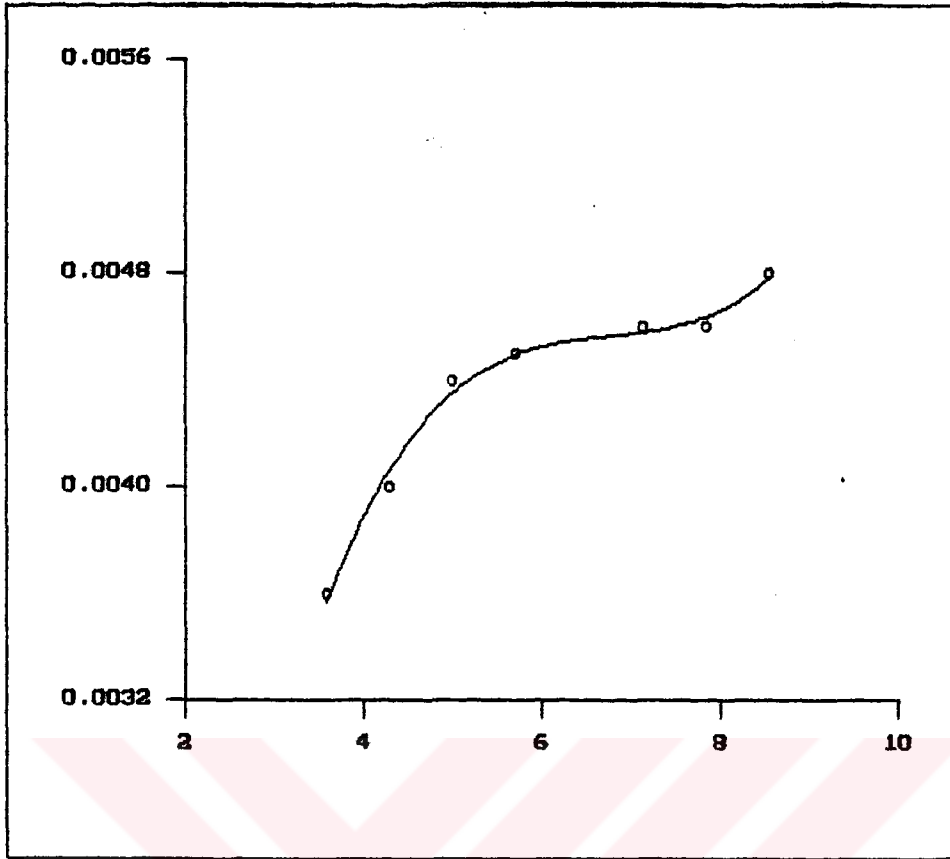
Şekil 6.74 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



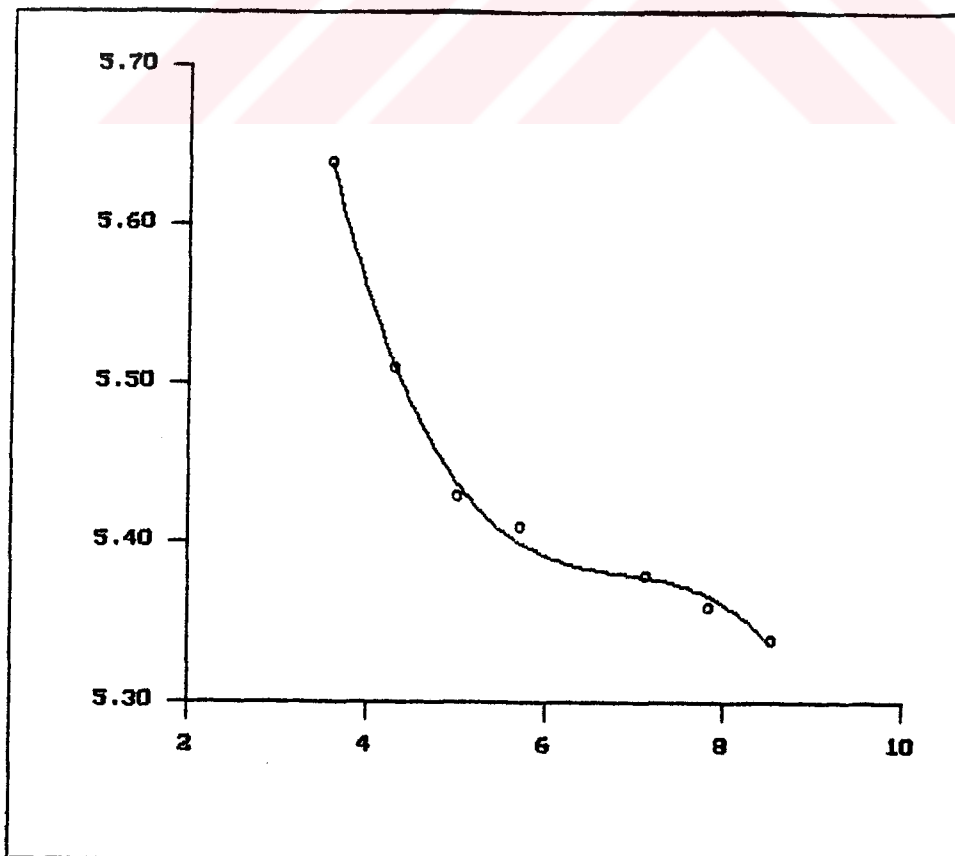
Şekil 6.75 $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



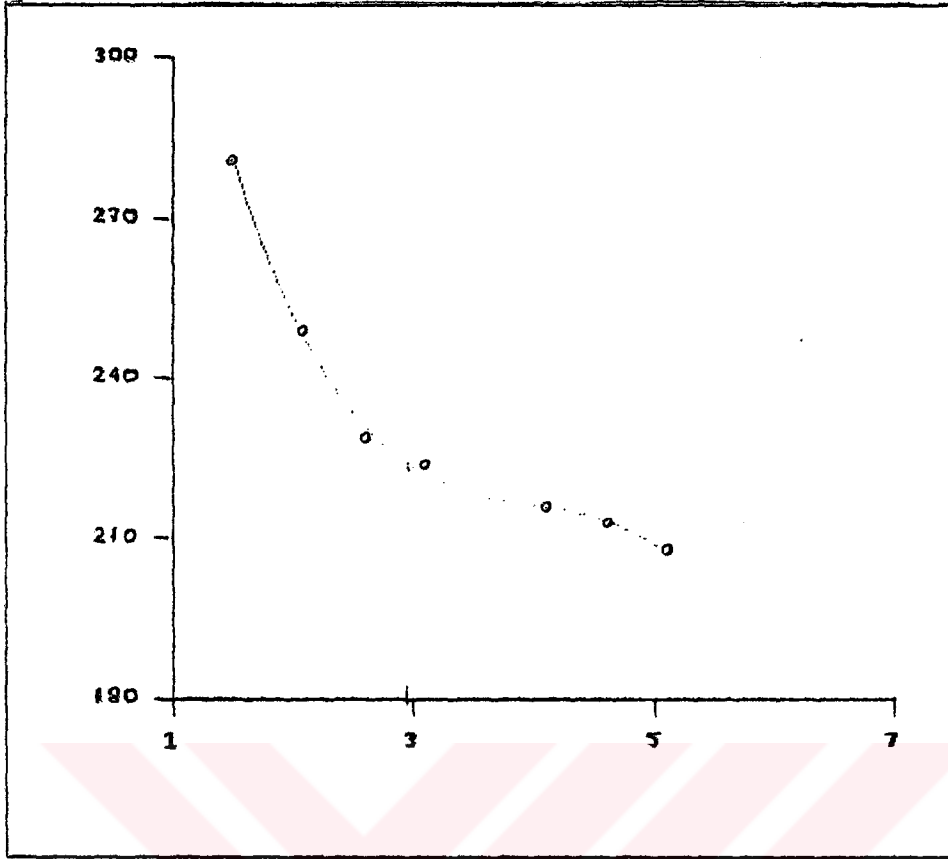
Şekil 6.76 $T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



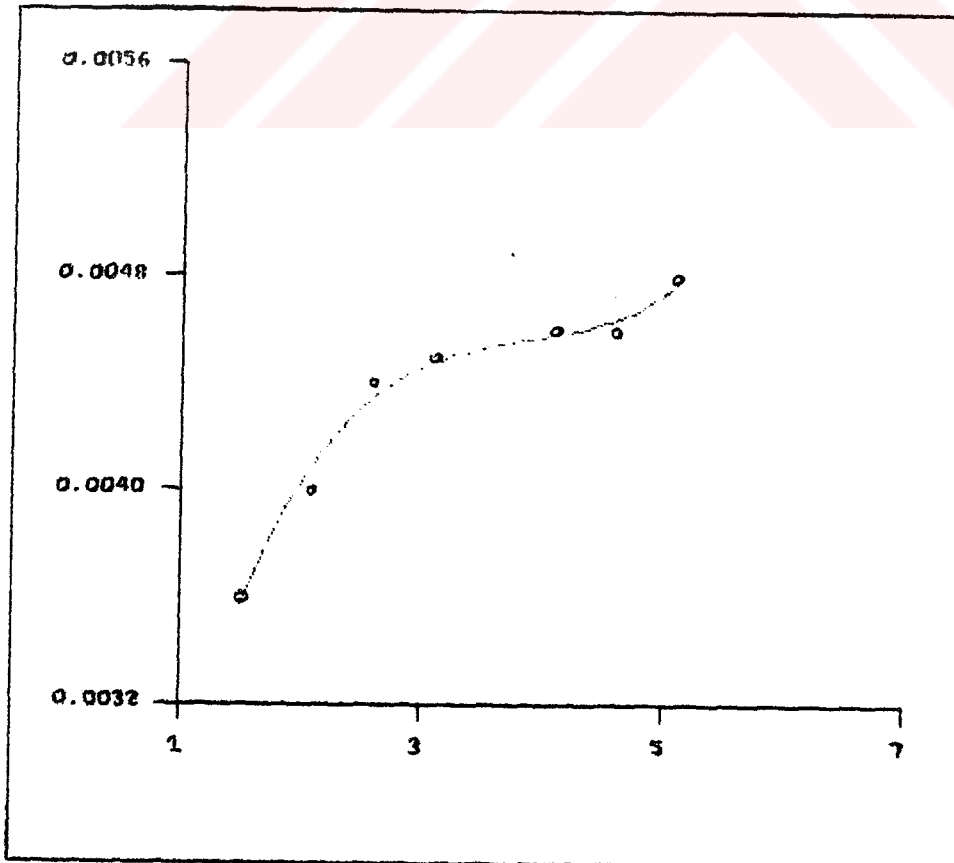
Şekil 6.77 $\frac{1}{T_g} = A(X^O)^3 + B(X^O)^2 + C(X^O) + D$



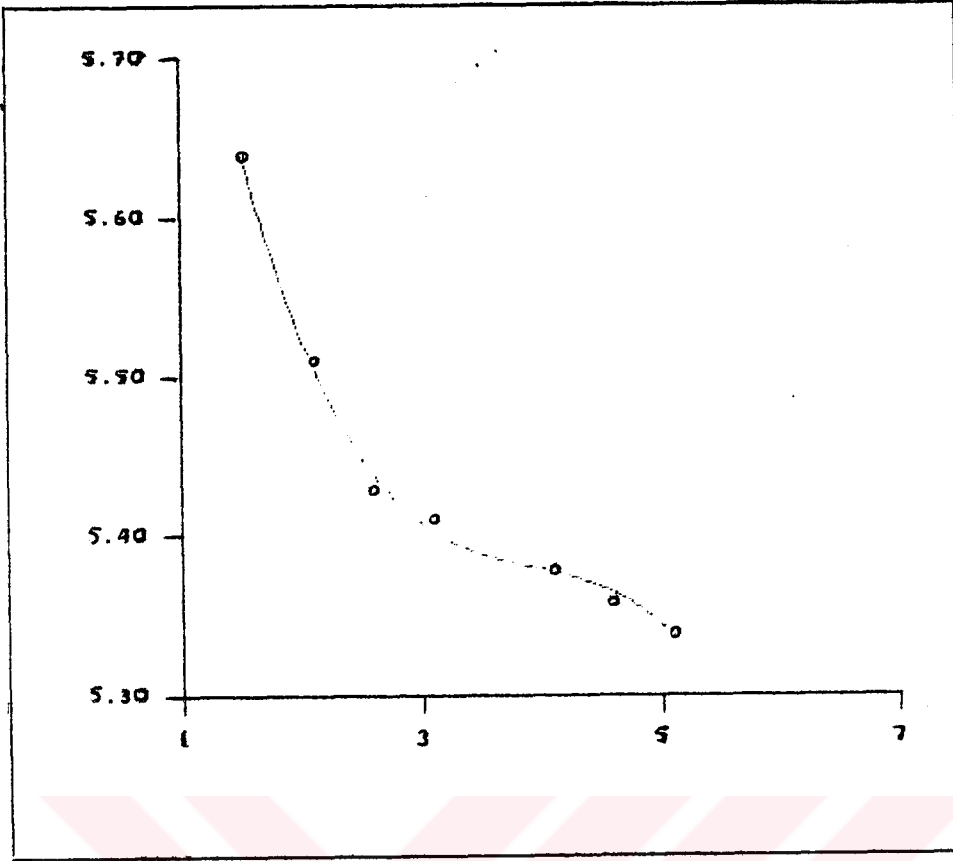
Şekil 6.78 $\ln T_g = A(X^O)^3 + B(X^O)^2 + C(X^O) + D$



Şekil 6.79 $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$

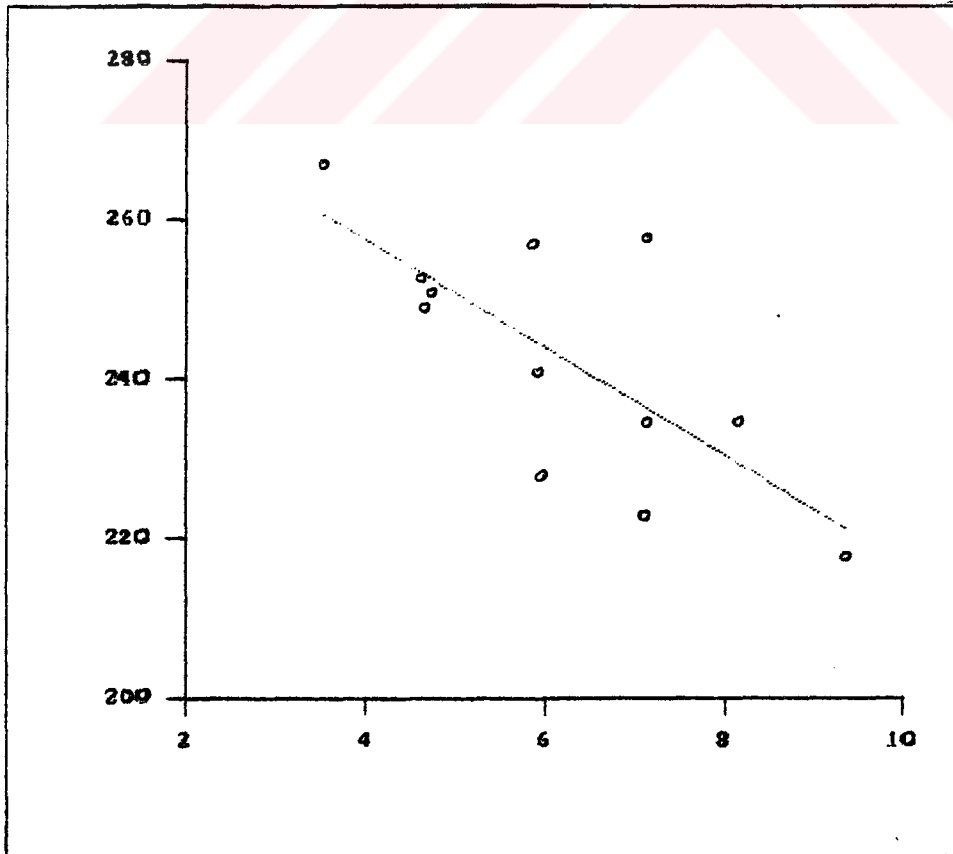


Şekil 6.80 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$



Şekil 6.81 $\text{Ln}T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON ŞEKİLLERİ



Şekil 6.82 $T_g = A(CR) + B$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON

Tablo 6.15

BAĞINTILAR	CR		x ⁰		x ¹	
	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq
$T_g = AI+B$	0,9972	213,5191	0,9978	164,9267	0,9980	153,3169
$\frac{1}{T_g} = AI+B$	0,9981	$5,141 \times 10^{-3}$	0,9985	$3,891 \times 10^{-3}$	0,9986	$3,634 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI+B$	0,9999	$3,391 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,594 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,404 \times 10^{-3}$
$T_g = AI^2+BI+C$	0,9991	86,1771	0,9995	47,1310	0,9996	36,4798
$\frac{1}{T_g} = AI^2+BI+C$	0,9992	$2,606 \times 10^{-3}$	0,9995	$1,557 \times 10^{-3}$	0,9996	$1,376 \times 10^{-3}$
$\ln T_g = AI^2+BI+C$	1,0000	$1,483 \times 10^{-3}$	1,0000	$8,309 \times 10^{-4}$	1,0000	$6,515 \times 10^{-4}$
$T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9999	9,5541	1,0000	4,0889	1,0000	3,2628
$\frac{1}{T_g} = AI^3+BI^2+CI+D$	1,0000	$1,231 \times 10^{-9}$	0,9999	$3,069 \times 10^{-9}$	0,9999	$4,976 \times 10^{-9}$
$\ln T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	1,0000	$1,871 \times 10^{-4}$	1,0000	$7,924 \times 10^{-5}$	1,0000	$6,153 \times 10^{-5}$

6.3.4. Önerilen Bağıntı

Düz Zincirli Poliakrilatlar için en iyi regresyon sonucunu veren bağıntı CR-İndisi, x^0 İndisi ve x^1 İndisi için;

$$\frac{1}{T_g} = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-14) \text{ olup, III. Mertebeden olan}$$

bu bağıntının regresyon eğrileri Şekil 6.73-81 de gösterilmiştir.

Önerilen bağıntı için en yakın T_g değerlerini veren indis (Tablo 6.15) de bakılan R^2 ve Chi Sq değerlerine göre CR-İndisi olup;

$$\frac{1}{T_g} = 0,997 \times 10^{-6} (CR)^3 + (-1,956 \times 10^{-4}) (CR)^2 - (1,264 \times 10^{-3}) (CR) + 1,898 \times 10^{-3} \quad (6-34)$$

bağıntısı Düz Zincirli Poliakrilatlar için en iyi bağıntı olarak önerilmektedir.

6.3.5. Hata Hesapları

Önerilen bağıntı ile hesaplanacak olan T_g değerlerindeki hatanın belirlenmesi için bağıl hata hesapları yapılarak, bu değerler (Tablo 6.19), (Tablo 6.20), (Tablo 6.21) de gösterilmiştir.

CR-İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli n-heptil Akrilat molekülü için % 2,3", Poli n-propil Akrilat molekülü için ise önerilen bağıntının kullanılması ile gerçek değer hesaplanmıştır.

x^0 İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli n-heptil Akrilat için % 1,4", minimum bağıl hata değeri: "Poli Me-

DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLARIN CR-İNDİSİNE GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.119

POLİMER	T _g (gerçek)	T _g (hesaplanan)	Fark	% Hata
Metil Akriolat	281 °K	279 °K	2 °K	$\frac{ 281 - 279 }{281} \times 100 = \% 0,7$
Etil Akriolat	249 °K	248 °K	1 °K	$\frac{ 249 - 248 }{249} \times 100 = \% 0,4$
n-propil Akriolat	229 °K	229 °K	0 °K	$\frac{ 229 - 229 }{229} \times 100 = \% 0$
n-butil Akriolat	224 °K	222 °K	2 °K	$\frac{ 224 - 222 }{224} \times 100 = \% 0,9$
n-heksil Akriolat	216 °K	219 °K	-3 °K	$\frac{ 216 - 219 }{216} \times 100 = \% 1,3$
n-heptil Akriolat	213 °K	218 °K	-5 °K	$\frac{ 213 - 218 }{213} \times 100 = \% 2,3$
n-oktil Akriolat	208 °K	212 °K	-4 °K	$\frac{ 208 - 212 }{208} \times 100 = \% 1,9$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLARIN X° (0'ncı Mertebe İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.20

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% hata
Metil Akrilat	281 °K	280 °K	1 °K	$\frac{ 281 - 280 }{281} \times 100 = \% 0,4$
Etil Akrilat	249 °K	246 °K	3 °K	$\frac{ 249 - 246 }{249} \times 100 = \% 1,2$
n-propil Akrilat	229 °K	230 °K	-1 °K	$\frac{ 229 - 230 }{229} \times 100 = \% 0,4$
n-butil Akrilat	224 °K	222 °K	2 °K	$\frac{ 224 - 222 }{224} \times 100 = \% 0,9$
n-hekzil Akrilat	216 °K	218 °K	-2 °K	$\frac{ 216 - 218 }{216} \times 100 = \% 0,9$
n-heptil Akrilat	213 °K	216 °K	-3 °K	$\frac{ 213 - 216 }{213} \times 100 = \% 1,4$
n-oktil Akrilat	208 °K	209 °K	-1 °K	$\frac{ 208 - 209 }{208} \times 100 = \% 0,5$

DÜZ ZİNCİRLİ POLİAKRİLATLARIN χ^1 (Randic İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.21

POLİMER	T_g		Fark	% Hata
	(gerçek)	(hesaplanan)		
Metil Akriolat	281 °K	280 °K	1 °K	$\frac{ 281 - 280 }{281} \times 100 = \% 0,4$
Etil Akriolat	249 °K	245 °K	4 °K	$\frac{ 249 - 245 }{249} \times 100 = \% 1,6$
n-propil Akriolat	229 °K	230 °K	-1 °K	$\frac{ 229 - 230 }{229} \times 100 = \% 0,4$
n-butil Akriolat	224 °K	223 °K	1 °K	$\frac{ 224 - 223 }{224} \times 100 = \% 0,4$
n-hékzıl Akriolat	216 °K	218 °K	-2 °K	$\frac{ 216 - 218 }{216} \times 100 = \% 0,9$
n-heptil Akriolat	213 °K	218 °K	-5 °K	$\frac{ 213 - 218 }{213} \times 100 = \% 2,3$
n-oktil Akriolat	208 °K	210 °K	-2 °K	$\frac{ 208 - 210 }{208} \times 100 = \% 0,9$

til Akrilat" ve Poli n-Propil Akrilat molekülleri için %0,4" olarak bulunmuştur. X^1 indisi için maksimum bağıl hata değeri "Poli n-heptil Akrilat için % 2,3", minimum bağıl hata değeri: "Poli Metil Akrilat , Poli n-Propil Akrilat ve Poli n-butil Akrilat molekülleri için % 0,4" olarak bulunmuştur.

6.4. DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR

Dallanmış Poliakrilatlar için T_g ve indis (I) arasında üç ayrı grup bağıntı yazılmıştır. Bu bağıntılar I.Mertebeden, II.Mertebeden ve III.Mertebeden bağıntılardır.

6.4.1. Birinci Mertebeden Bağıntılar

Dallanmış Poliakrilatlar için T_g ve indis (I) arasında yazılan eşitlikler ve N-FIT paket programı yardımıyla yapılan regresyon neticesinde, bağıntılar Tablo 6.23,24,25 de özetlenerek deneysel veriler ve regresyon doğruları Şekil 6.82,83,84,85,86,87,88,89,90 da gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre, CR indisi için en iyi doğrusal bağıntının;

$$\ln T_g = 0,0281(CR)+5,6646 \quad (6-37)$$

Sıfıncı Mertebe Indisi için;

$$\ln T_g = -0,0454(X^0)+5,7995 \quad (6-38)$$

Randic Indisi için;

$$\ln T_g = -0,0640(X^1)+5,7216 \quad (6-39)$$

olduğu saptanmıştır.

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON $(CR-T_g, X^0-T_g, X^1-T_g)$

Tablo 6. 23

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$T_g = A(CR) + B$	0,9983	117,6566	-6,7538	284,6751	-	-
$T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9984	130,2229	0,2142	-9,4963	292,89	-
$T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9985	132,2847	-0,6492	12,8314	-87,43	445,1340
$T_g = A(X^0) + B$	0,9982	126,5613	-10,9396	317,2985	-	-
$T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9982	139,4635	0,8805	-23,163	358,89	-
$T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9984	140,0092	-3,0947	65,3555	-464,23	1349,4779
$T_g = A(X^1) + B$	0,9983	118,6625	-15,2863	298,043	-	-
$T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9983	131,6997	0,5907	-19,693	305,96	-
$T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9985	135,7391	-7,8241	89,0282	-343,86	690,9047

* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R^2 : KORELASYON KATSAYISI

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON

$$\left(CR - \frac{1}{T_g}, X^0 - \frac{1}{T_g}, X^1 - \frac{1}{T_g} \right)$$

Tablo 6.24

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$	0,9982	3,793x10 ⁻⁸	1,239x10 ⁻⁴	3,359x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9982	4,102x10 ⁻⁸	-3,355x10 ⁻⁶	1,669x10 ⁻⁴	3,230x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9984	4,197x10 ⁻⁸	1,113x10 ⁻⁵	-2,196x10 ⁻⁴	1,503x10 ⁻³	6,204x10 ⁻⁴
$\frac{1}{T_g} = A(X^0) + B$	0,9980	4,035x10 ⁻⁸	2,000x10 ⁻⁴	2,765x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9980	4,459x10 ⁻⁸	-1,299x10 ⁻⁵	3,803x10 ⁻⁴	2,151x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9982	4,531x10 ⁻⁸	5,246x10 ⁻⁵	-1,106x10 ⁻³	7,857x10 ⁻³	-0,0146
$\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$	0,9982	3,667x10 ⁻⁸	2,826x10 ⁻⁴	3,106x10 ⁻³	-	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9982	4,059x10 ⁻⁸	-1,913x10 ⁻⁵	4,253x10 ⁻⁴	2,849x10 ⁻³	-
$\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9984	4,12Cx10 ⁻⁸	1,483x10 ⁻⁴	-1,696x10 ⁻³	6,571x10 ⁻³	-4,448x10 ⁻³

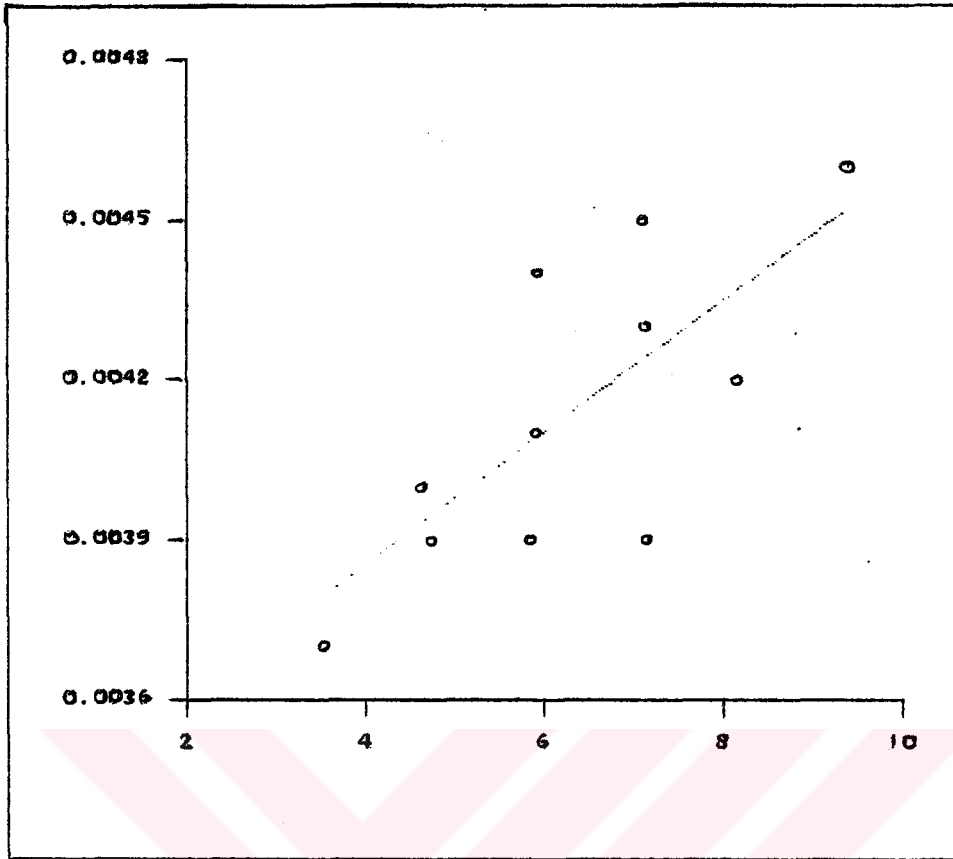
* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R² : KORELASYON KATSAYISI

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON $(CR - \ln T_g, X^0 - \ln T_g, X^1 - \ln T_g)$

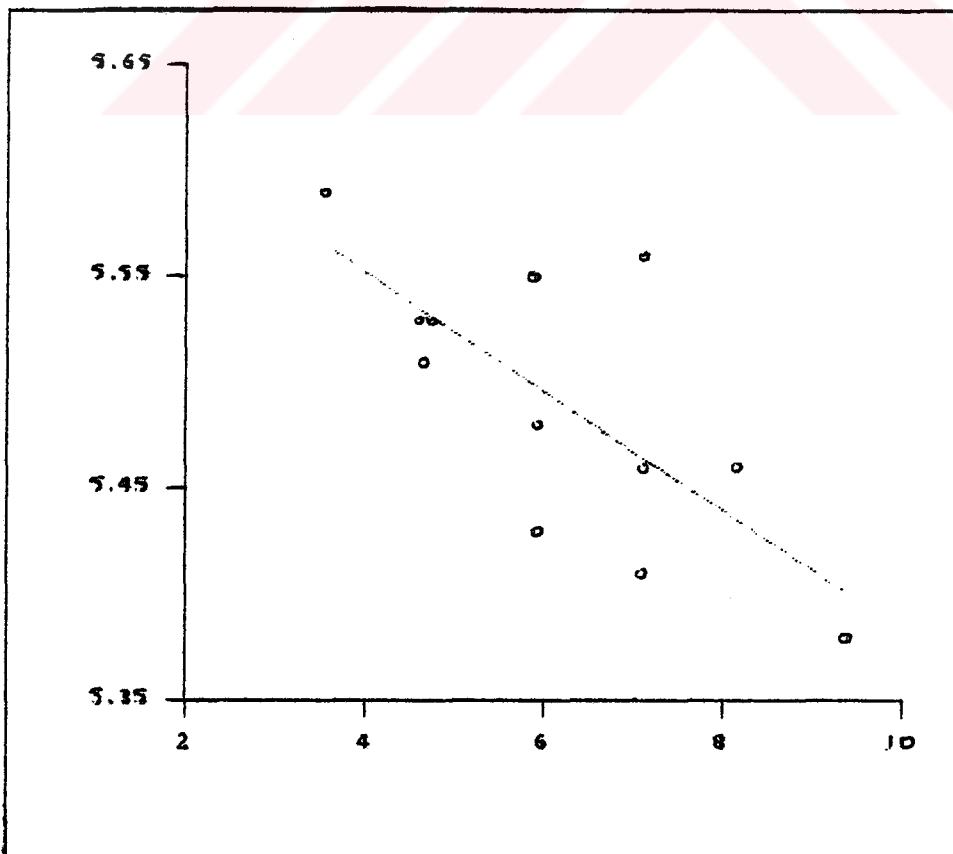
Tablo 6.25

BAĞINTILAR	R ²	Chi Sq	A	B	C	D
$\ln T_g = A(CR) + B$	0,9999	$2,182 \times 10^{-3}$	0,0281	5,6646	-	-
$\ln T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$	0,9999	$2,424 \times 10^{-3}$	$1,720 \times 10^{-4}$	-0,0303	5,6712	-
$\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$	0,9999	$2,404 \times 10^{-3}$	$-3,094 \times 10^{-3}$	0,0603	-0,4018	6,3968
$\ln T_g = A(X^0) + B$	0,9999	$2,348 \times 10^{-3}$	-0,0454	5,7995	-	-
$\ln T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$	0,9999	$2,605 \times 10^{-3}$	$1,641 \times 10^{-3}$	-0,0682	5,8770	-
$\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$	0,9999	$2,549 \times 10^{-3}$	-0,0147	0,3080	-2,1639	10,5837
$\ln T_g = A(X^1) + B$	0,9999	$2,169 \times 10^{-3}$	-0,0640	5,7216	-	-
$\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$	0,9999	$2,410 \times 10^{-3}$	$-7,622 \times 10^{-4}$	0,0583	5,7114	-
$\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$	0,9999	$2,417 \times 10^{-3}$	-0,0381	0,4301	-1,6377	7,5868

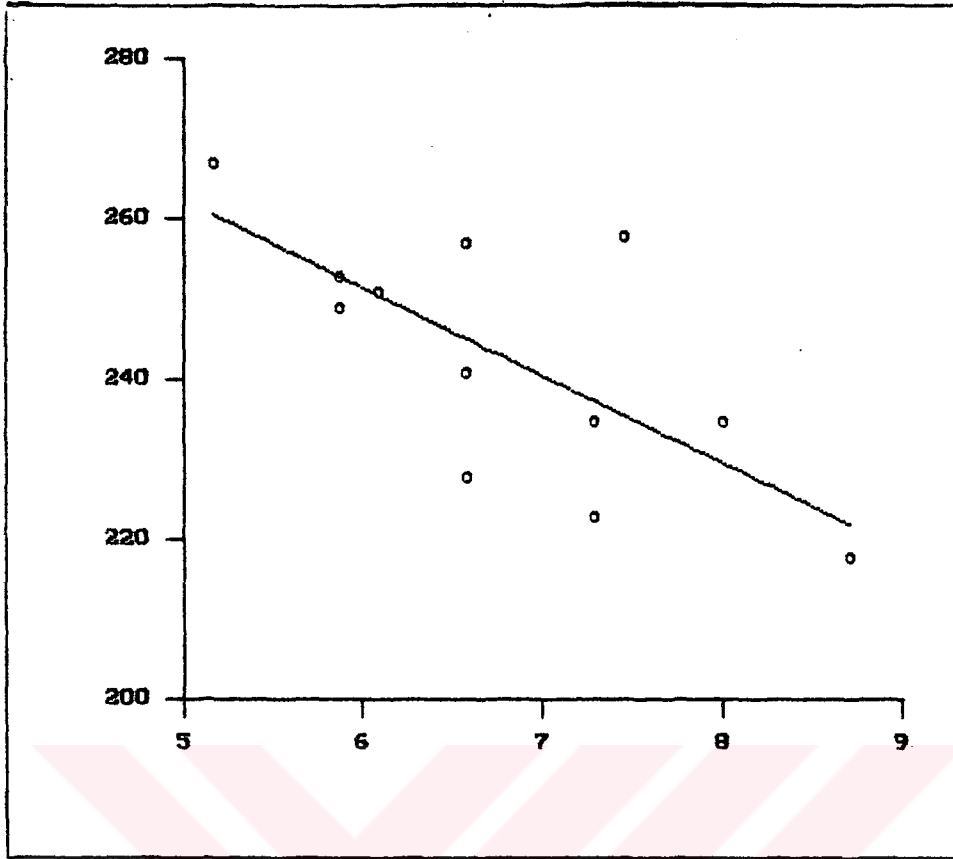
* T_g : CAMSI GEÇİŞ TEMPERATÜRÜ* R² : KORELASYON KATSAYISI



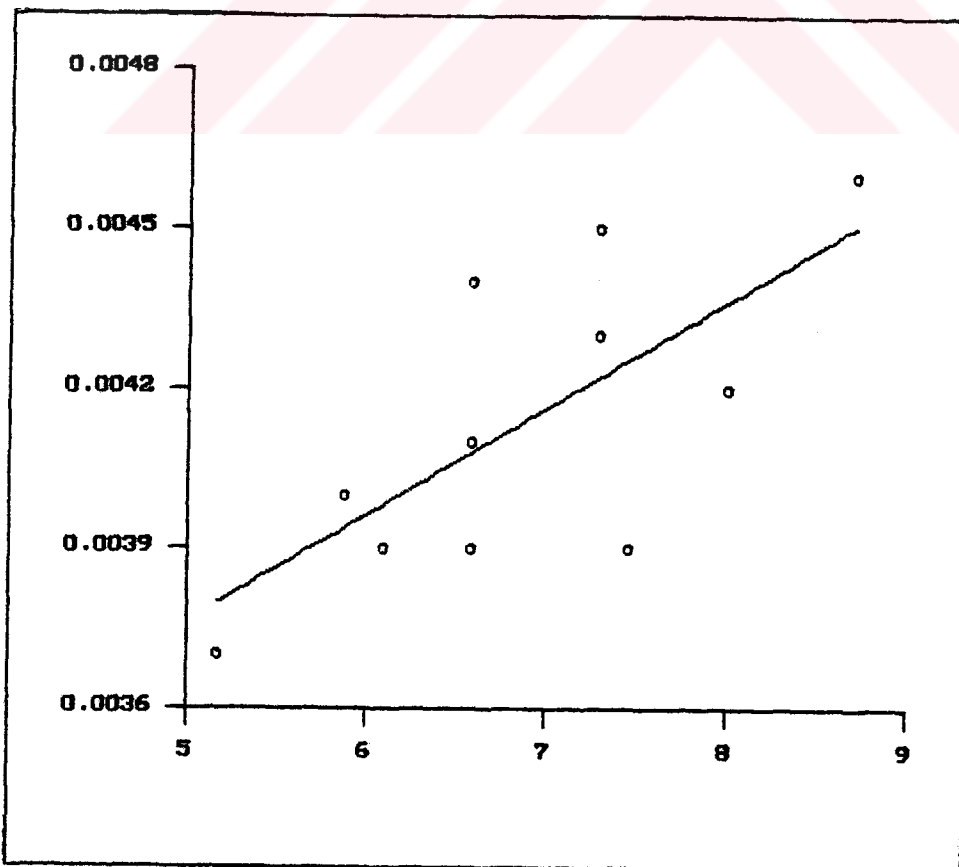
Şekil 6.83 $\frac{1}{T_g} = A(CR) + B$



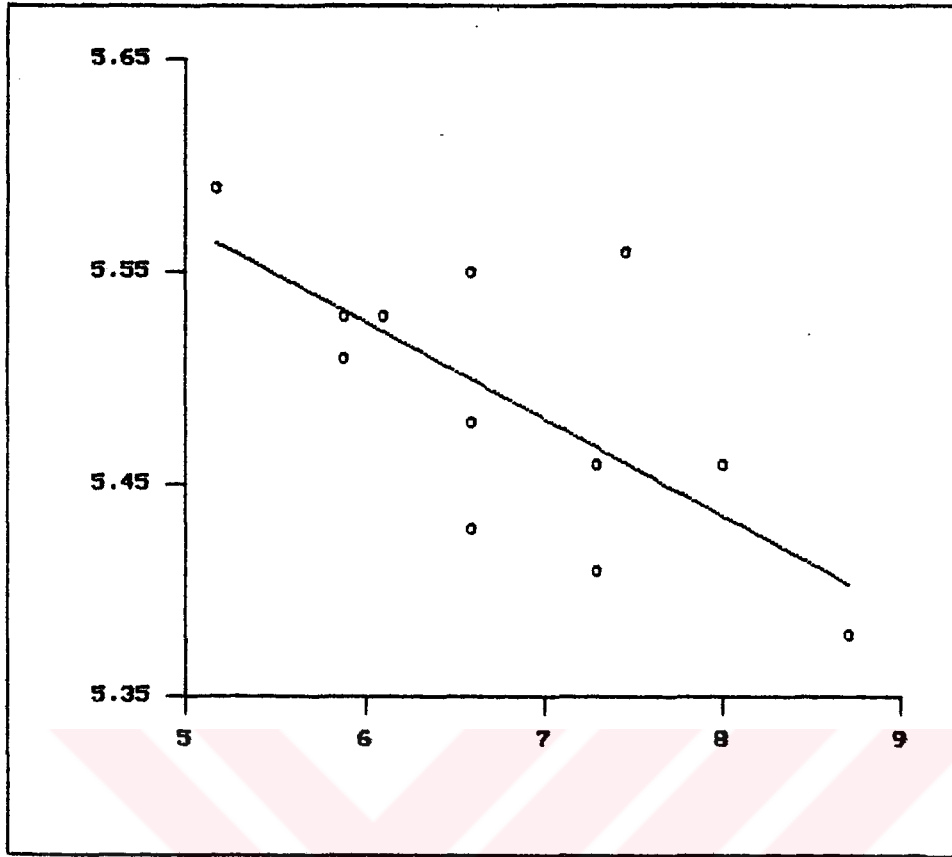
Şekil 6.84 $\ln T_g = A(CR) + B$



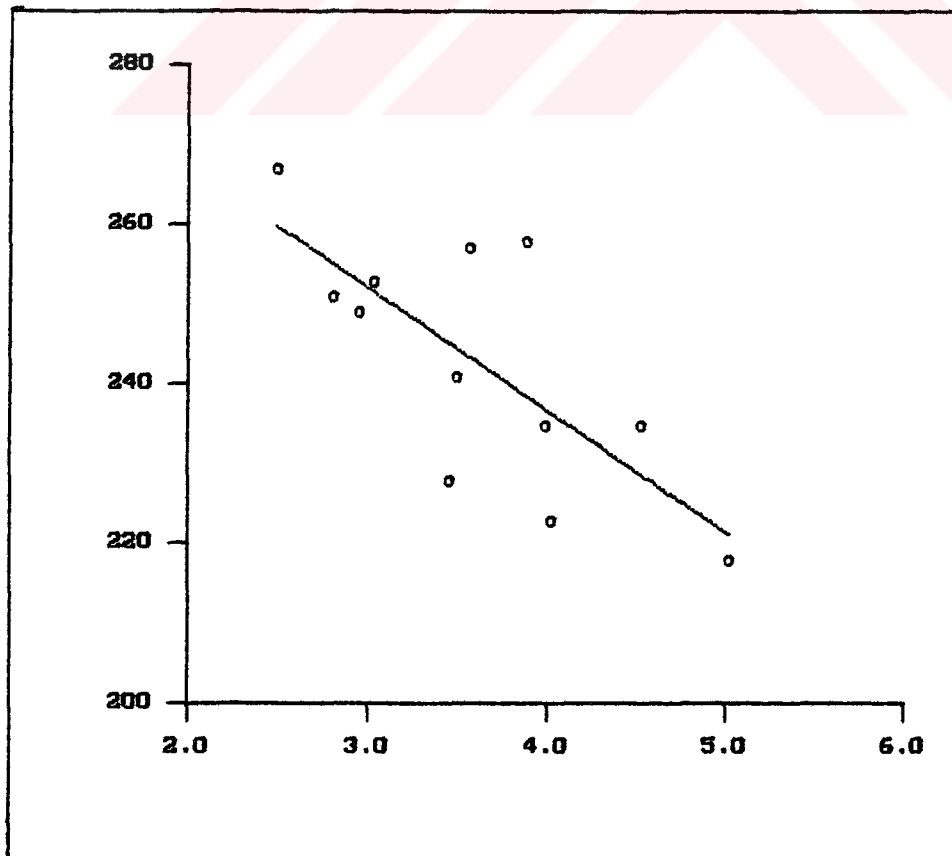
Şekil 6.85 $T_g = A(X^O) + B$



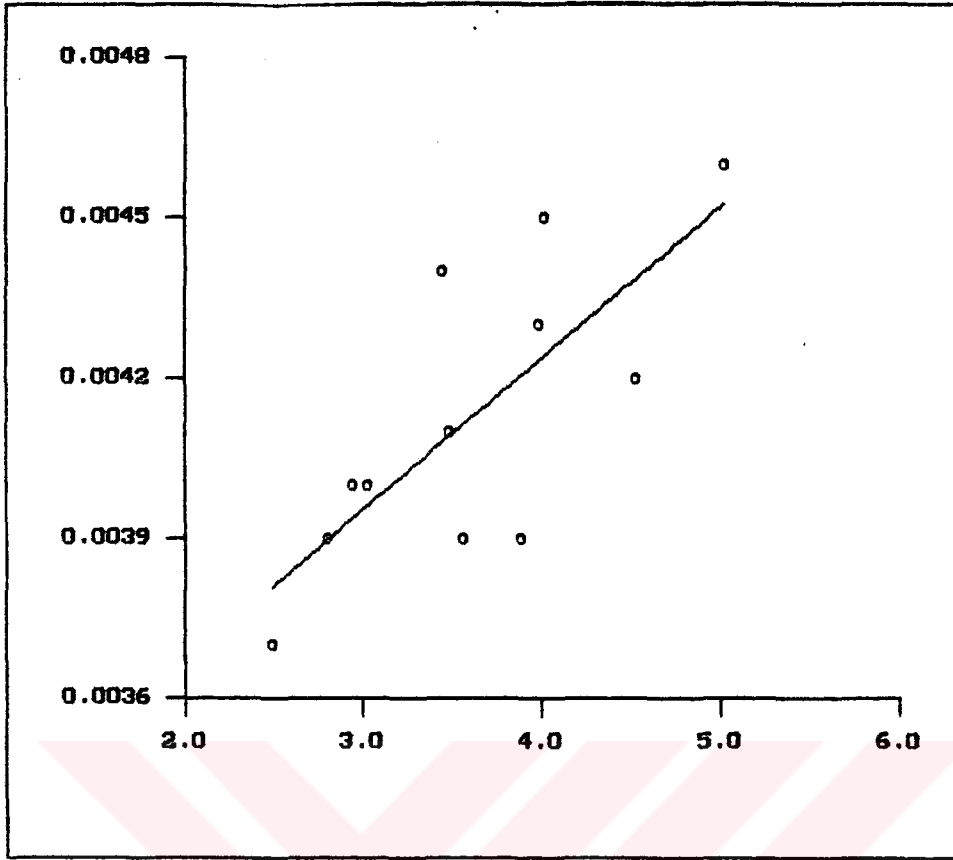
Şekil 6.86 $\frac{1}{T_g} = A(X^O) + B$



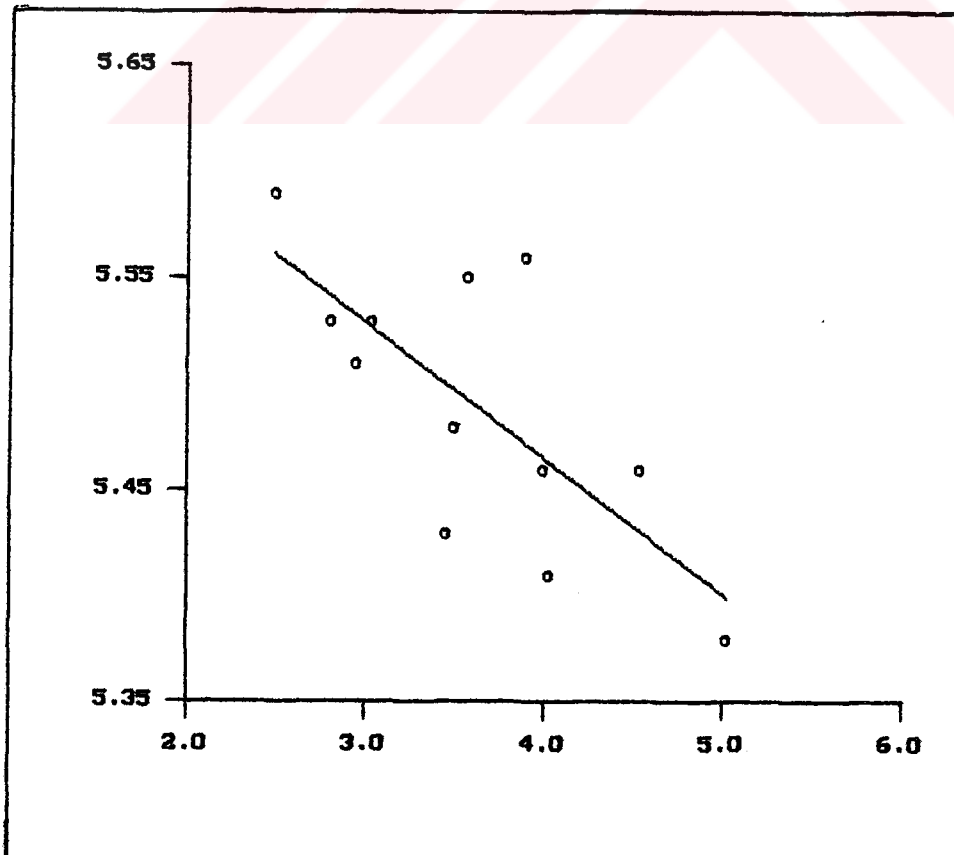
Şekil 6.87 $\ln T_g = A(X^0) + B$



Şekil 6.88 $T_g = A(X^1) + B$



Şekil 6.89 $\frac{1}{T_g} = A(X^1) + B$



Şekil 6.90 $\text{Ln}T_g = A(X^1) + B$

6.4.2. İkinci Mertebeden Bağlantılar

Dallanmış Poliakrilatlar için ikinci mertebeden 6.1.2 de gösterilen üç ayrı eşitliğin sonucuna göre yapılan regresyonda , bağlantılar Tablo 6.23,24, 25 de özetlenerek deneysel veriler ve regresyon eğrileri Şekil 6.91,92,93,94,95,96,97, 98,99 da gösterilmiştir.

Regresyon sonuçlarına göre, CR İndisi için en iyi bağlantının;

$$\text{Ln}T_g = 1,720 \times 10^{-4} (\text{CR})^2 + (-0,0303) (\text{CR}) + 5,6712 \quad (6-40)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\text{Ln}T_g = 1,641 \times 10^{-3} (X^0)^2 + (-0,0682) (X^0) + 5,8770 \quad (6-41)$$

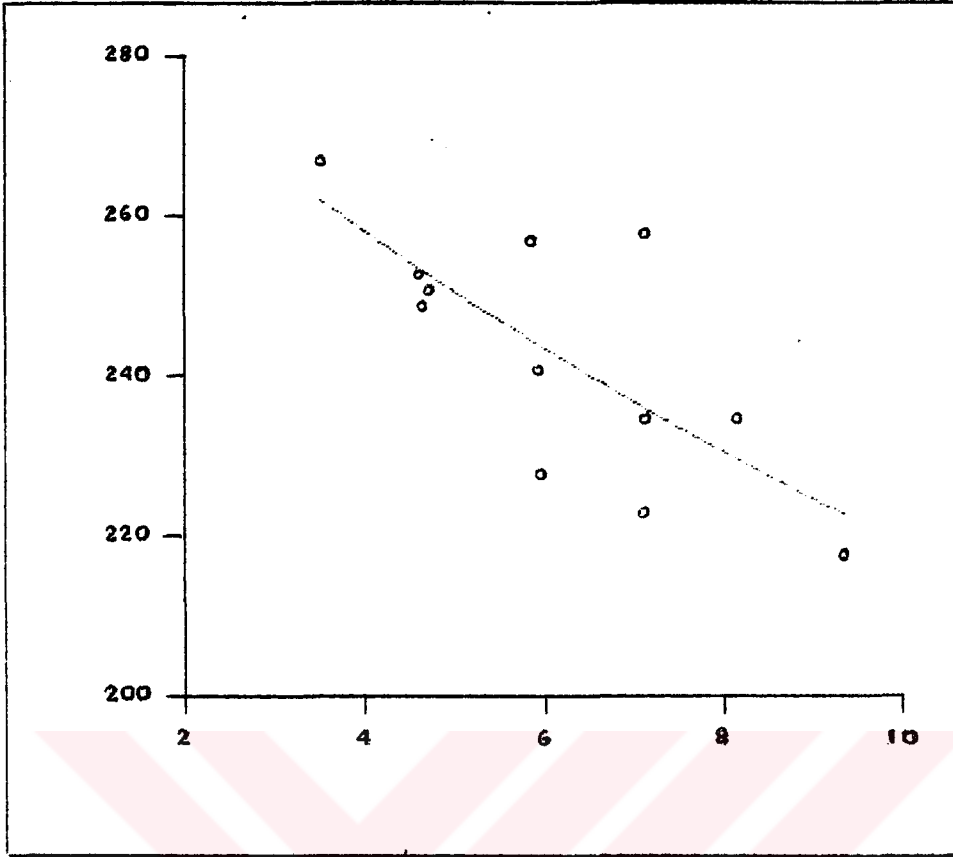
Randic İndisi için;

$$\text{Ln}T_g = -7,622 \times 10^{-4} (X^1)^2 + (0,0583) (X^1) + 5,7114 \quad (6-42)$$

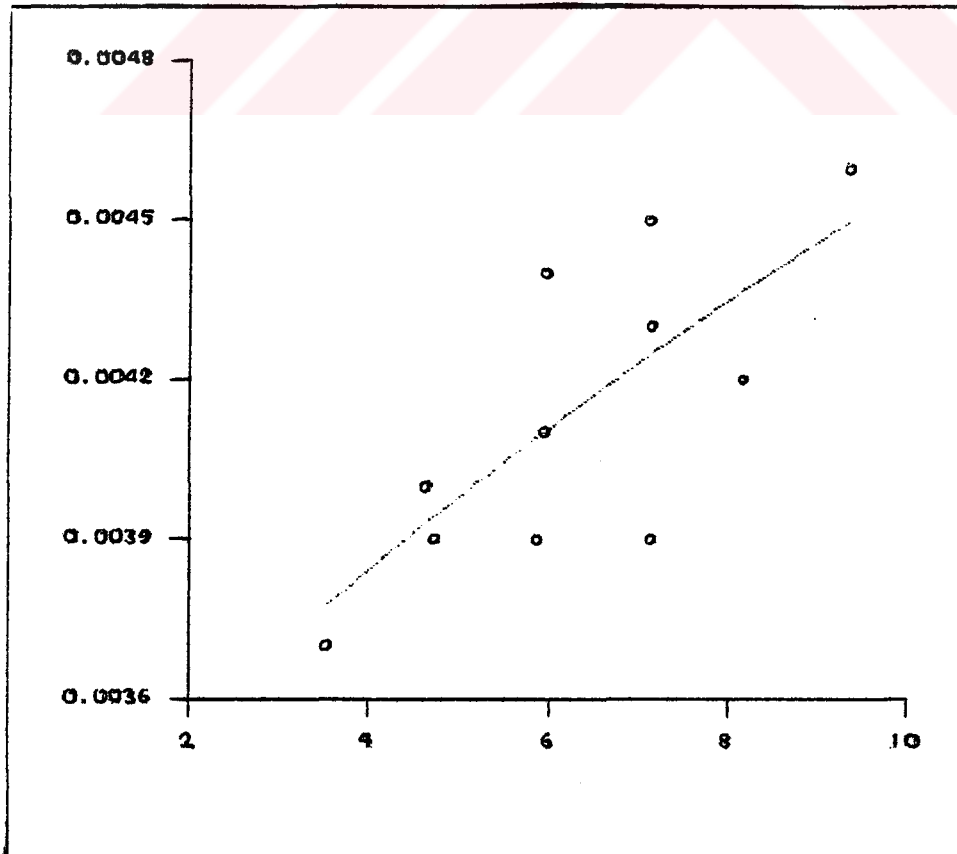
olduğu saptanmıştır.

6.4.3. Üçüncü Mertebeden Bağlantılar

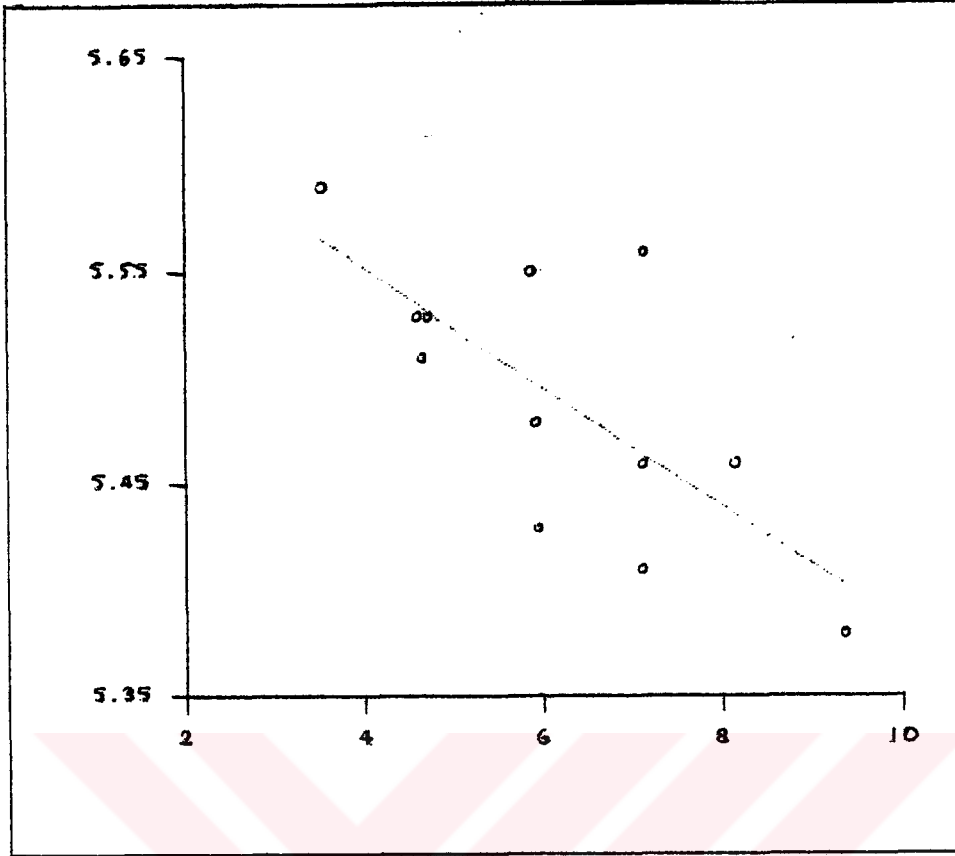
Dallanmış Poliakrilatlar için, en yakın deneysel T_g değerlerini elde etmek amacıyla 6.1.3 de gösterilen bağlantılar, her indis için ayrı ayrı bulunarak Tablo 6.23,24,25 de özetlenmiştir. Deneysel veriler ve III.Mertebeden regresyon eğrileride Şekil 6.100,101,102,103,104,105,106,107,108 de gösterilmiştir.



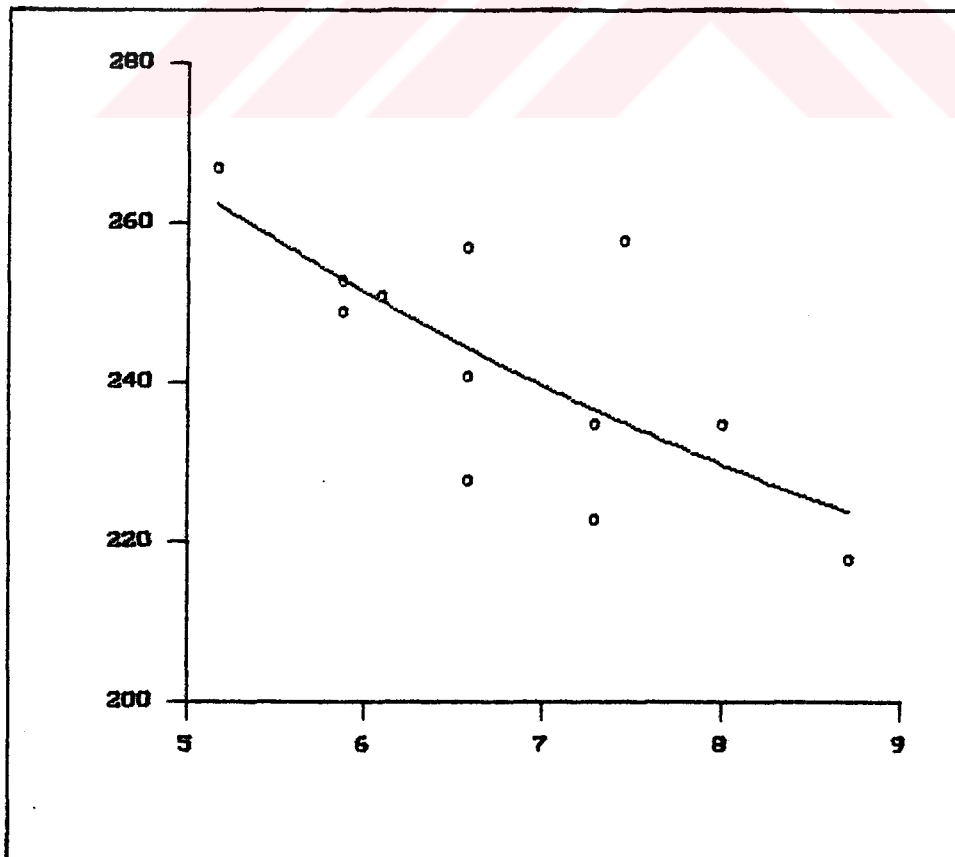
Şekil 6.91 $T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



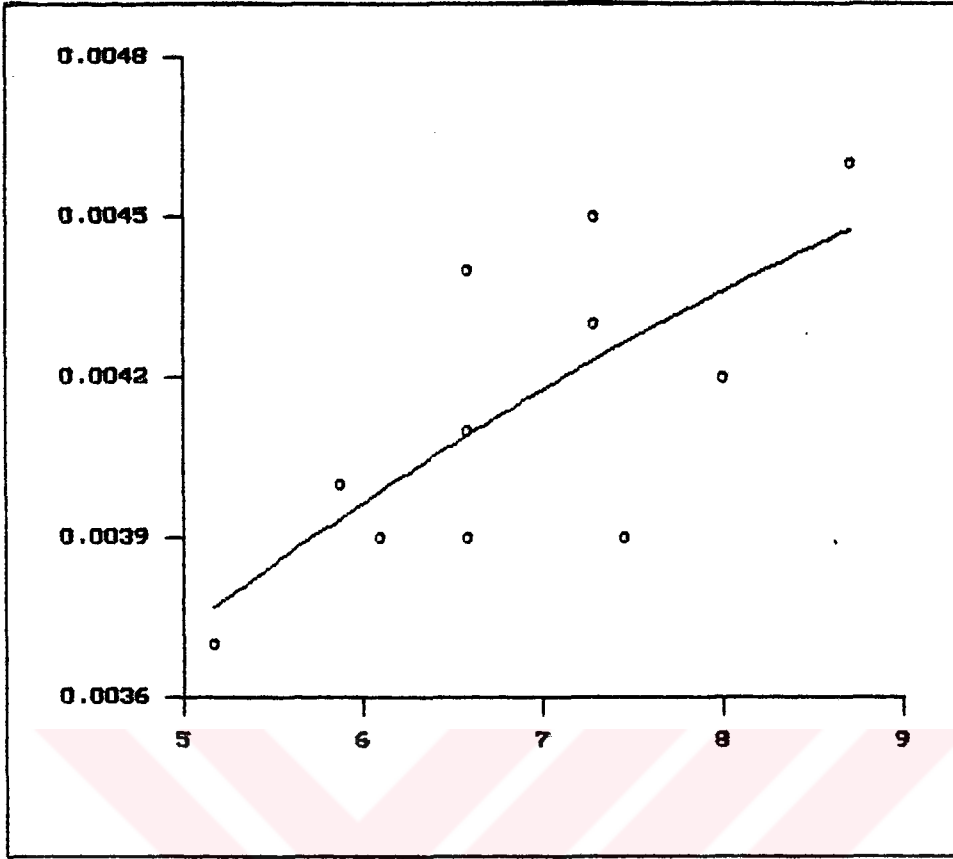
Şekil 6.92 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^2 + B(CR) + C$



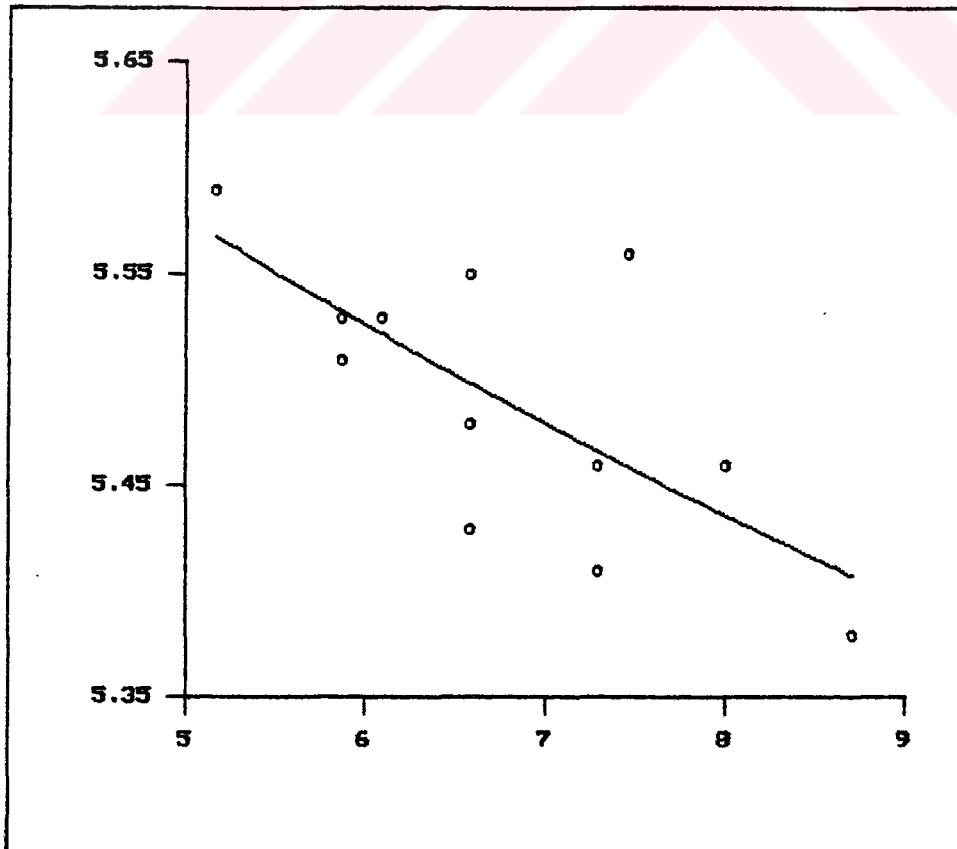
Şekil 6.93 $\ln T_g = A(CR)^2 + B(CR) + C$



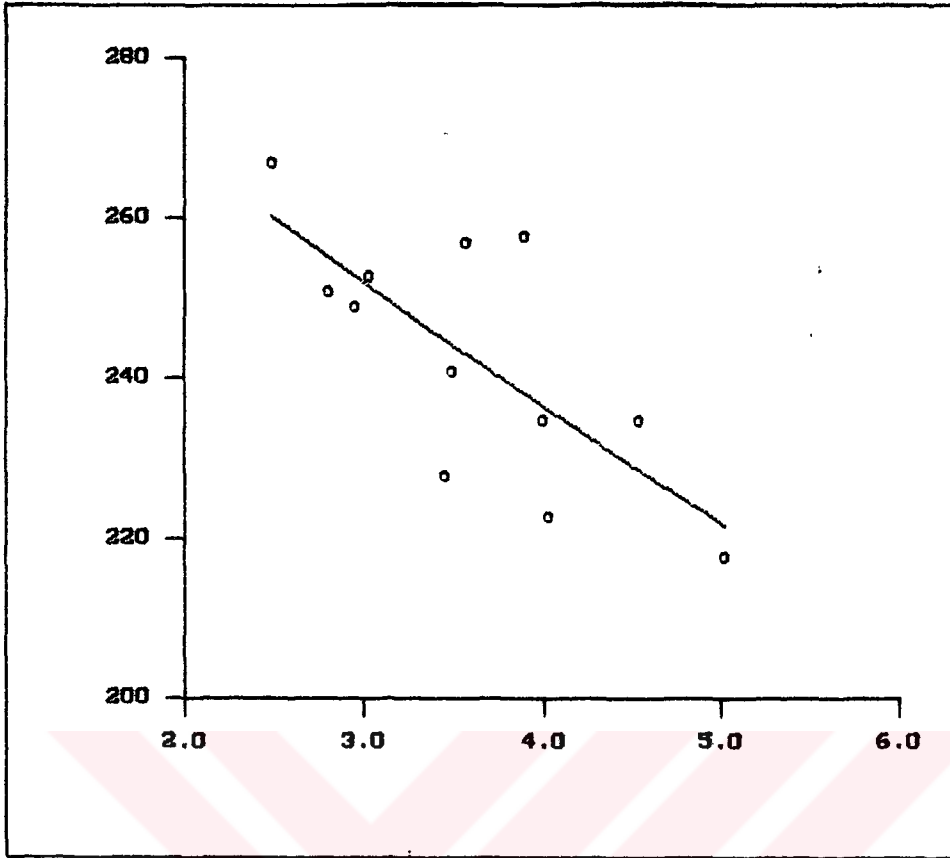
Şekil 6.94 $T_g = A(X^0)^2 + B(X^0) + C$



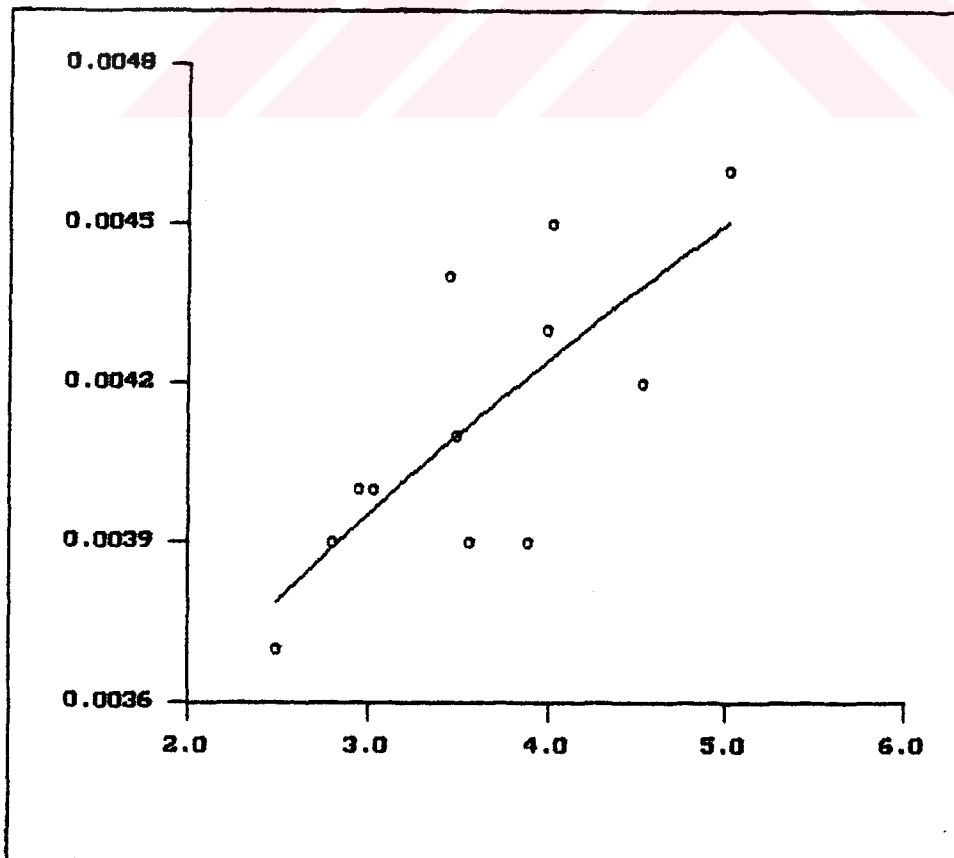
Şekil 6.95 $\frac{1}{T_g} = A(X^O)^2 + B(X^O) + C$



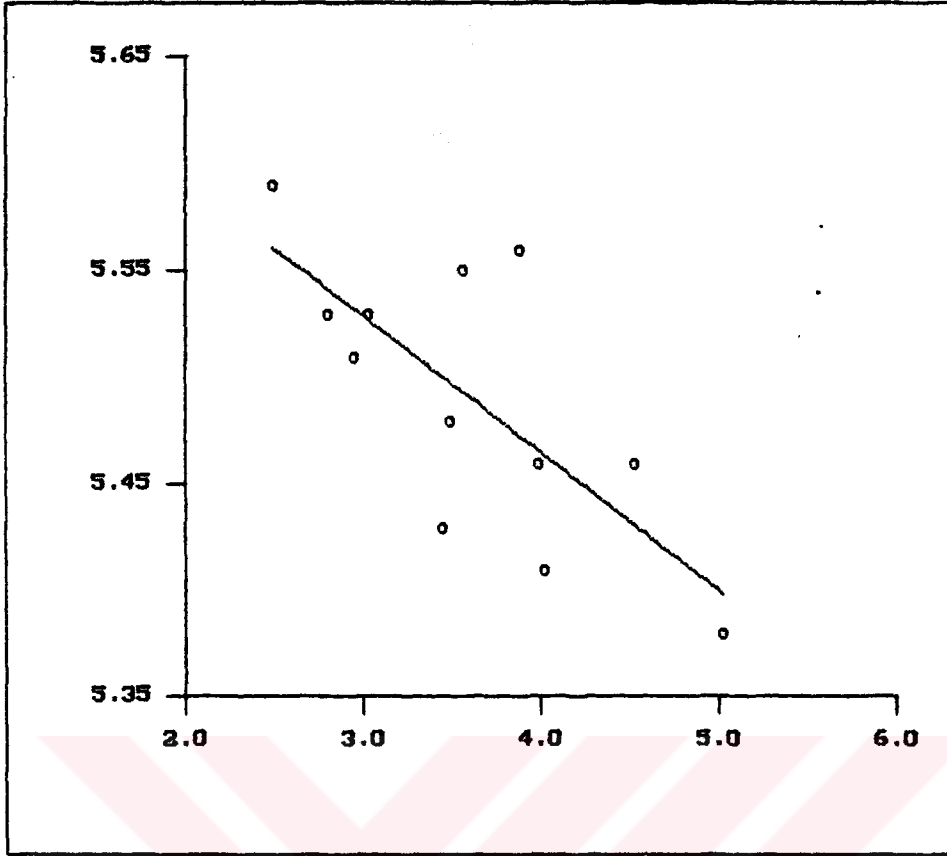
Şekil 6.96 $\ln T_g = A(X^O)^2 + B(X^O) + C$



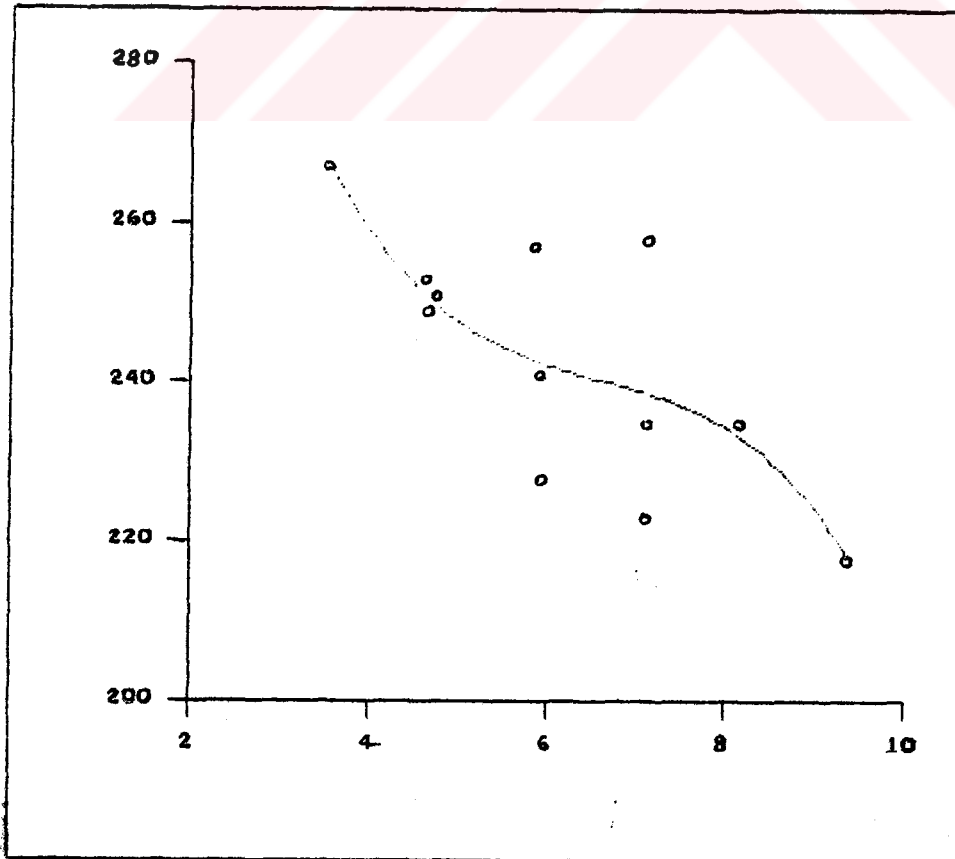
Şekil 6.97. $T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.98 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.99 $\ln T_g = A(X^1)^2 + B(X^1) + C$



Şekil 6.100 $T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$

Regresyon sonuçlarına göre; CR İndisi için en iyi bağıntının;

$$\frac{1}{T_g} = 1,113 \times 10^{-5} (CR)^3 + (-2,196 \times 10^{-4}) (CR)^2 + (1,503 \times 10^{-3}) (CR) + 6,204 \times 10^{-4} \quad (6-43)$$

Sıfırıncı Mertebe İndisi için;

$$\frac{1}{T_g} = 5,246 \times 10^{-5} (x^0)^3 + (-1,106 \times 10^{-3}) (x^0)^2 + (7,857 \times 10^{-3}) (x^0) + (-0,0146) \quad (6-44)$$

Randic İndisi için;

$$\frac{1}{T_g} = 1,483 \times 10^{-4} (x^1)^3 + (-1,696 \times 10^{-3}) (x^1)^2 + (6,571 \times 10^{-3}) (x^1) + (-4,448 \times 10^{-3}) \quad (4-45)$$

olduğu saptanmıştır.

6.4.4. Önerilen Bağıntılar

Dallanmış Poliakrilatlar için en iyi regresyon sonucunu veren bağıntı CR-İndisi, x^0 İndisi ve x^1 İndisi için;

$$\frac{1}{T_g} = AI^3 + BI^2 + CI + D \quad (6-14) \text{ olup, III. Mertebeden olan bu}$$

bağıntının regresyon eğrileri Şekil 6.100-108 de gösterilmiştir.

Önerilen bağıntı için en yakın T_g değerlerini veren indis (Tablo 6.22) de bakılan R^2 ve Chi Sq değerlerine göre X^1 indisi olup;

$$\frac{1}{T_g} = 1,483 \times 10^{-4} (X^1)^3 + (-1,696 \times 10^{-3}) (X^1) + 6,571 \times 10^{-3} (X^1) + (-4,448 \times 10^{-3}) \quad (6-45)$$

bağıntısı Dallanmış Poliakrilatlar için en iyi bağıntı olarak önerilmektedir.

6.4.5. Hata Hesapları

Önerilen bağıntı ile hesaplanacak olan T_g değerlerindeki hatanın belirlenmesi için bağıl hata hesapları yapılarak, bu değerler (Tablo 6.26), (Tablo 6.27), (Tablo 6.28) de gösterilmiştir.

CR-İndisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli 4 metil-2 pentil Akrilat molekülü için % 7,7", minimum bağıl hata değeri "Poli sekonder.butil Akrilat, Poli tersiyer-butil Akrilat, Poli 2 metil-butil Akrilat molekülleri için % 0,4" olarak bulunmuştur.

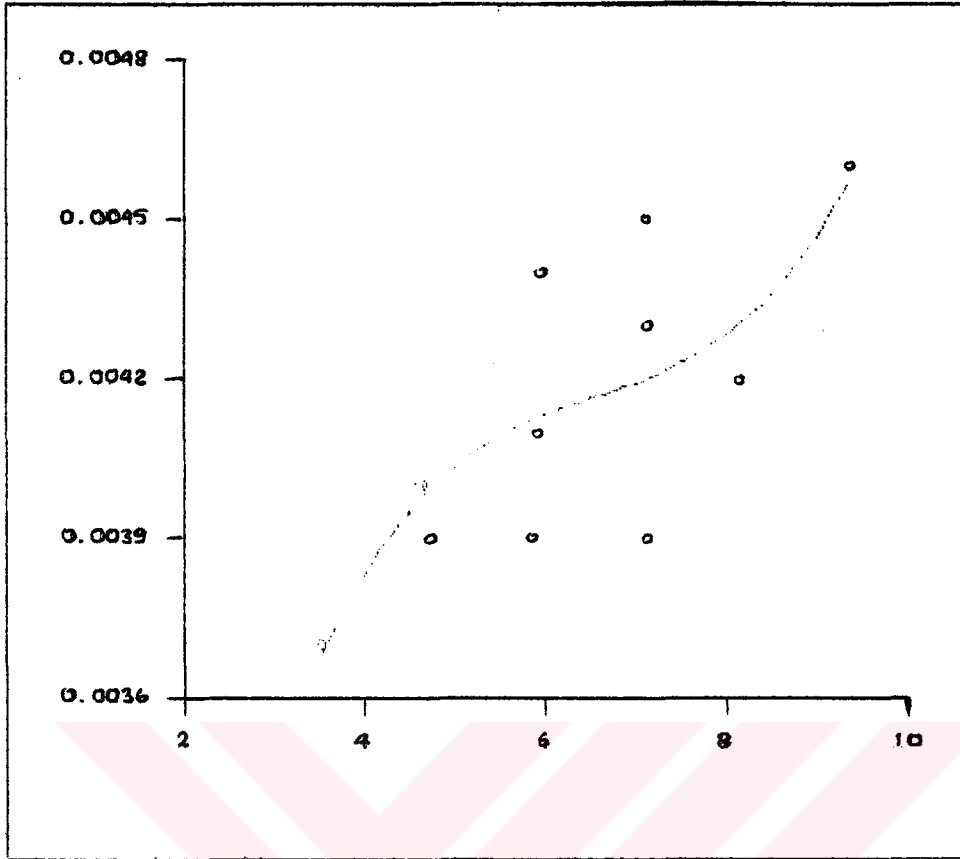
X^0 Indisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli 4-metil-2-pentil Akrilat molekülü için % 8", minimum bağıl hata değeri: "Poli izo-butil Akrilat ve tersiyer-butil Akrilat molekülleri için % 0,4" olarak bulunmuştur.

X^1 Indisi için maksimum bağıl hata değeri: "Poli 4 metil-2 pentil Akrilat molekülü için % 6,9", minimum bağıl hata değeri: "Poli 2 metil-butil Akrilat ve 2 etil-hekzil Akrilat molekülleri için % 0,4" olarak bulunmuştur.

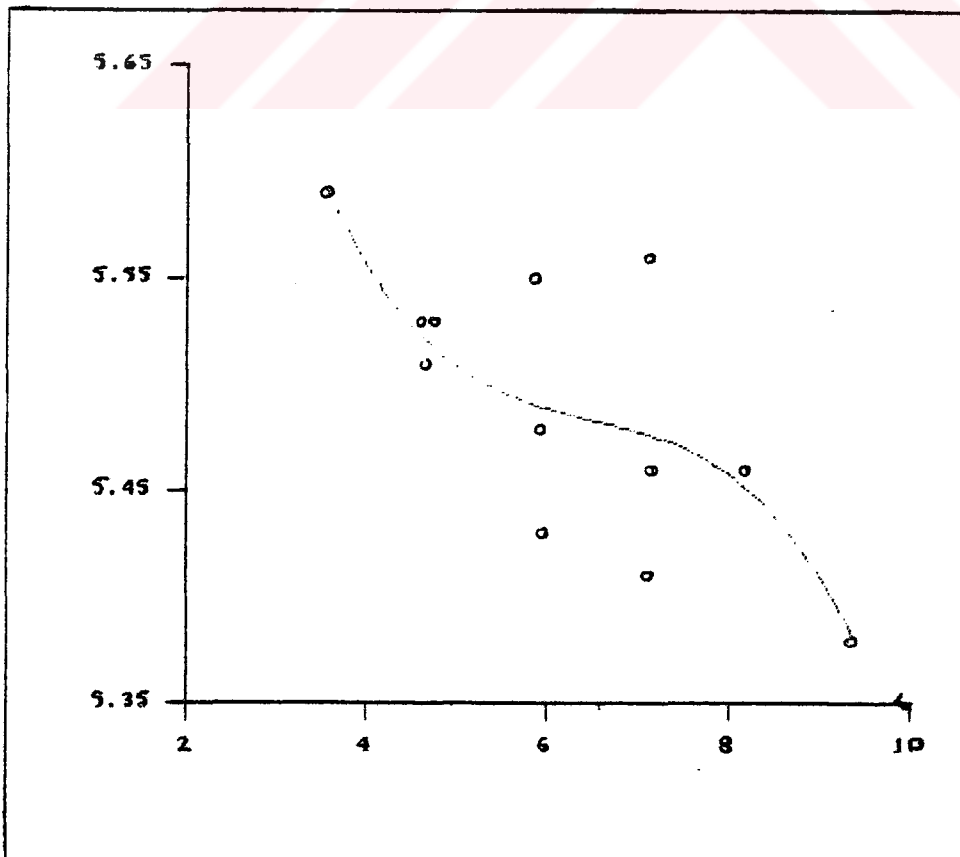
DALLANMIŞ POLİAKRİLATLAR İÇİN REGRESYON

Tablo 6.22

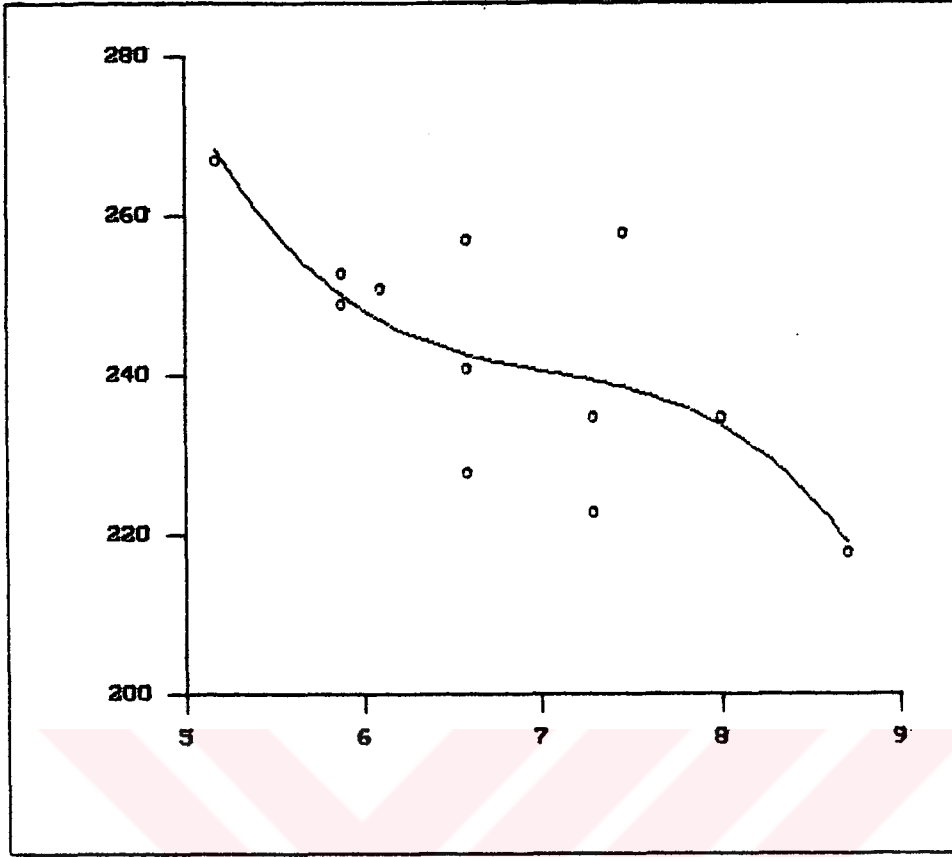
BAĞINTILAR	CR		x ⁰		x ¹	
	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq	R ²	Chi Sq
$T_g = AI+B$	0,9983	117,6566	0,9982	126,5613	0,9983	118,6625
$\frac{1}{T_g} = AI+B$	0,9982	$3,703 \times 10^{-8}$	0,9980	$4,035 \times 10^{-3}$	0,9982	$3,667 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI+B$	0,9999	$2,182 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,348 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,169 \times 10^{-3}$
$T_g = AI^2+BI+C$	0,9984	130,2229	0,9982	139,4635	0,9983	131,6997
$\frac{1}{T_g} = AI^2+BI+C$	0,9982	$4,102 \times 10^{-8}$	0,9980	$4,459 \times 10^{-3}$	0,9982	$4,059 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI^2+BI+C$	0,9999	$2,424 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,605 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,410 \times 10^{-3}$
$T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9985	132,2847	0,9984	140,0092	0,9985	135,7391
$\frac{1}{T_g} = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9984	$4,197 \times 10^{-8}$	0,9982	$4,531 \times 10^{-3}$	0,9984	$4,120 \times 10^{-8}$
$\ln T_g = AI^3+BI^2+CI+D$	0,9999	$2,404 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,417 \times 10^{-3}$	0,9999	$2,417 \times 10^{-3}$



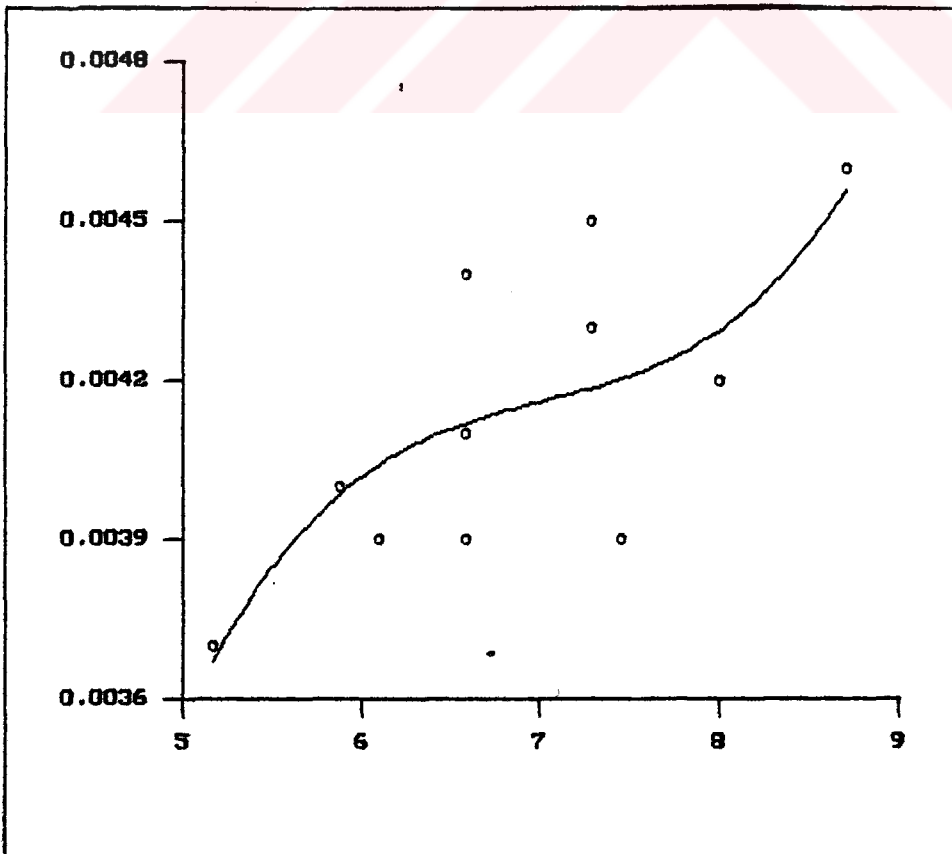
Şekil 6.101 $\frac{1}{T_g} = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



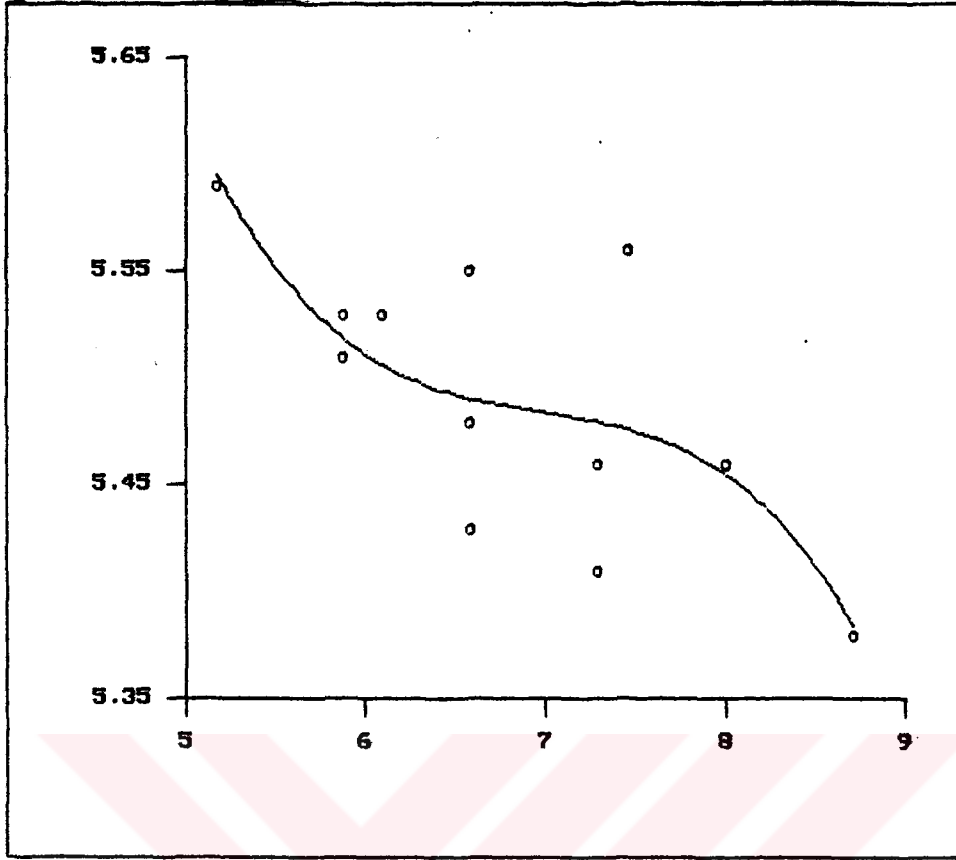
Şekil 6.102 $\ln T_g = A(CR)^3 + B(CR)^2 + C(CR) + D$



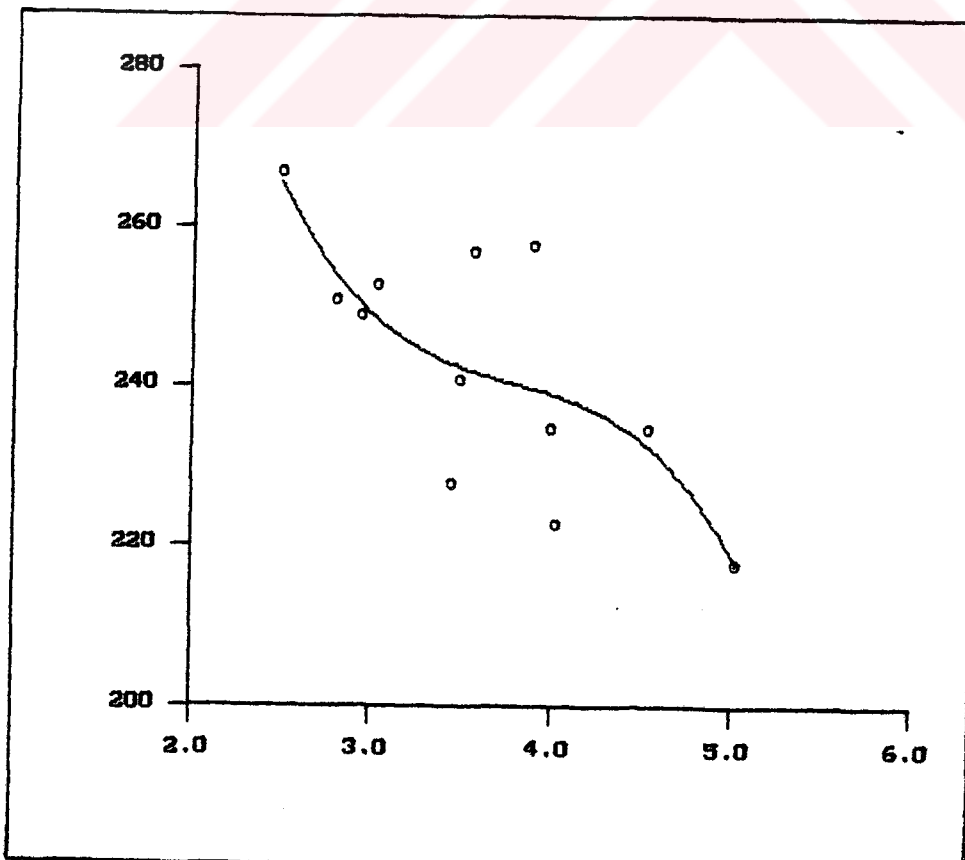
Şekil 6. 103 $T_g = A(X^O)^3 + B(X^O)^2 + C(X^O) + D$



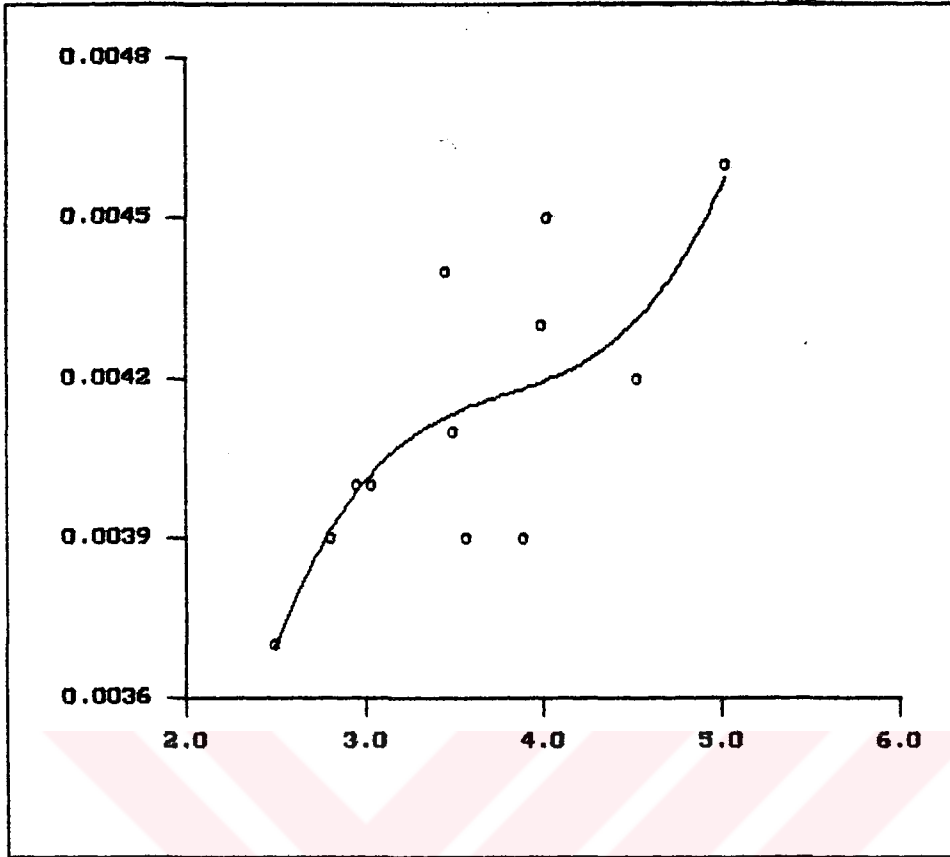
Şekil 6. 104 $\frac{1}{T_g} = A(X^O)^3 + B(X^O)^2 + C(X^O) + D$



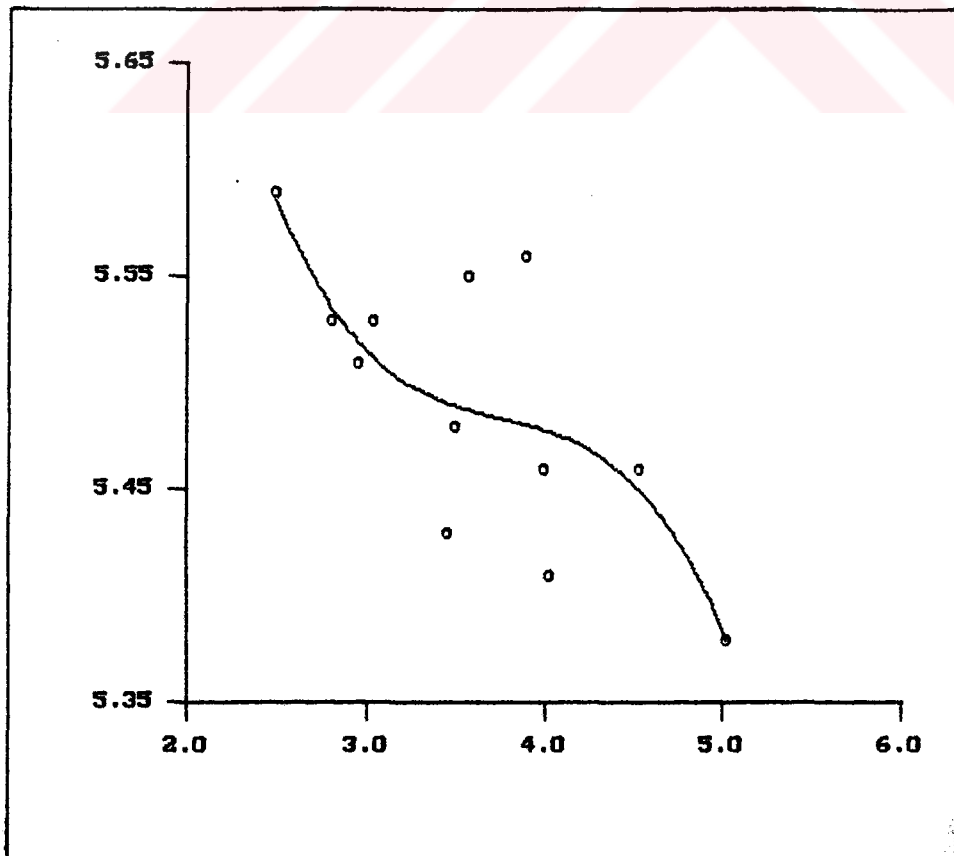
Şekil 6.105 $\ln T_g = A(X^0)^3 + B(X^0)^2 + C(X^0) + D$



Şekil 6.106 $T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$



Şekil 6.107 $\frac{1}{T_g} = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$



Şekil 6.108 $\ln T_g = A(X^1)^3 + B(X^1)^2 + C(X^1) + D$

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLARIN CR-İNDİSİNE GÖRE HESAPLANMIŞ T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.26

POLİMER	T _g (gerçek)	T _g (hesaplanan)	Fark	% Hata
izo-propil Akirilat	267 °K	272 °K	-5 °K	$\frac{267 - 272}{267} \times 100 = \% 1,8$
sek-butil Akirilat	253 °K	252 °K	1 °K	$\frac{253 - 252}{253} \times 100 = \% 0,4$
izo-butil Akirilat	249 °K	251 °K	-2 °K	$\frac{249 - 251}{249} \times 100 = \% 0,8$
ters-butil Akirilat	251 °K	250 °K	1 °K	$\frac{251 - 250}{251} \times 100 = \% 0,4$
2 metil-butil Akirilat	241 °K	242 °K	-1 °K	$\frac{241 - 242}{241} \times 100 = \% 0,4$
3 metil-butil Akirilat	228 °K	241 °K	-13 °K	$\frac{228 - 241}{228} \times 100 = \% 5,7$
2 etil-butil Akirilat	223 °K	238 °K	-15 °K	$\frac{223 - 238}{223} \times 100 = \% 6,7$
3 pentil Akirilat	257 °K	242 °K	15 °K	$\frac{257 - 242}{257} \times 100 = \% 5,8$
2 metil-pentil Akirilat	235 °K	238 °K	-3 °K	$\frac{235 - 238}{235} \times 100 = \% 1,2$
4 metil 2-pentil Akirilat	258 °K	238 °K	20 °K	$\frac{258 - 238}{258} \times 100 = \% 7,7$
2 etil-hekzil Akirilat	218 °K	220 °K	-2 °K	$\frac{218 - 220}{218} \times 100 = \% 0,9$
2 heptil Akirilat	235 °K	233 °K	2 °K	$\frac{235 - 233}{235} \times 100 = \% 0,9$

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLARIN T_g (0'ncı Mertebe İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6. 27

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
izo propil Akriolat	267 °K	270 °K	-3 °K	$\frac{267 - 270}{267} \times 100 = \% 1,1$
sek-butil Akriolat	253 °K	250 °K	3 °K	$\frac{253 - 250}{253} \times 100 = \% 1,2$
izo-butil Akriolat	249 °K	250 °K	-1 °K	$\frac{249 - 250}{249} \times 100 = \% 0,4$
ters-butil Akriolat	251 °K	250 °K	1 °K	$\frac{251 - 250}{251} \times 100 = \% 0,4$
2 metil-butil Akriolat	241 °K	244 °K	-3 °K	$\frac{241 - 244}{241} \times 100 = \% 1,2$
3 metil-butil Akriolat	228 °K	244 °K	-16 °K	$\frac{228 - 244}{228} \times 100 = \% 7$
2 etil-butil Akriolat	223 °K	238 °K	15 °K	$\frac{223 - 238}{223} \times 100 = \% 6,7$
3 pentil Akriolat	257 °K	242 °K	15 °K	$\frac{257 - 242}{257} \times 100 = \% 5,8$
2 metil-pentil Akriolat	235 °K	238 °K	-3 °K	$\frac{235 - 238}{235} \times 100 = \% 1,2$
4 metil-2 pentil Akriolat	258 °K	237 °K	21 °K	$\frac{258 - 237}{258} \times 100 = \% 8$
2 etil-hekzil Akriolat	218 °K	220 °K	-2 °K	$\frac{218 - 220}{218} \times 100 = \% 0,9$
2 heptil Akriolat	235 °K	232 °K	3 °K	$\frac{235 - 232}{235} \times 100 = \% 1,3$

DALLANMIŞ POLİAKRİLATLARIN \bar{X}^1 (Randic İndisi)'ne GÖRE HESAPLANMIŞ OLAN T_g DEĞERLERİ

Tablo 6.. 28

POLİMER	T_g (gerçek)	T_g (hesaplanan)	Fark	% Hata
izo-propil Akriolat	267 °K	271 °K	-4 °K	$\frac{ 267 - 271 }{267} \times 100 = \% 1,4$
sek-butil Akriolat	253 °K	249 °K	4 °K	$\frac{ 253 - 249 }{253} \times 100 = \% 1,5$
izo-butil Akriolat	249 °K	251 °K	-2 °K	$\frac{ 249 - 251 }{249} \times 100 = \% 0,8$
ters-butil Akriolat	251 °K	255 °K	-4 °K	$\frac{ 251 - 255 }{251} \times 100 = \% 1,5$
2 metil-butil Akriolat	241 °K	242 °K	-1 °K	$\frac{ 241 - 242 }{241} \times 100 = \% 0,4$
3 metil-butil Akriolat	228 °K	242 °K	-14 °K	$\frac{ 228 - 242 }{228} \times 100 = \% 6$
2 etil-butil Akriolat	223 °K	238 °K	15 °K	$\frac{ 223 - 238 }{223} \times 100 = \% 6$
3 pentil Akriolat	257 °K	242 °K	15 °K	$\frac{ 257 - 242 }{257} \times 100 = \% 5,8$
2 metil-pentil Akriolat	235 °K	237 °K	-2 °K	$\frac{ 235 - 237 }{235} \times 100 = \% 0,8$
4 metil-2 pentil Akriolat	258 °K	240 °K	18 °K	$\frac{ 258 - 240 }{258} \times 100 = \% 6,9$
2 etil-hekzil Akriolat	218 °K	219 °K	-1 °K	$\frac{ 218 - 219 }{218} \times 100 = \% 0,4$
2 heptil Akriolat	235 °K	233 °K	2 °K	$\frac{ 235 - 233 }{235} \times 100 = \% 0,8$

KAYNAKLAR

1. HOWARD E. Simmons; Tetrahedron Letters Vol.22,pp 287-290
2. ROHVRAY, D. H. American Scientist, Vol.61. Number:6, pp.729-735, 1973.
3. READ, C.R; J.Chem.Ing.Comp.Sci., Vol 23,p.135-149, 1983
4. KIER, L.B; Hall.L.H., "Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Design", Academic. N.Y. pp.16-195, 1976.
5. J.Chem. Inf.Comput. Sci., 16,33-35, 1976.
6. RANDIC, M.J. Chem Ing.Comp.Sci., Vol 24,pp.164-175, 1984.
7. SHAN,M.C., Eiserberg,A., J.Rubber Chem and Tech. 43-95, 1970/43, 156, 1970
8. KAPLAN, D.S., J.Of Appl, Polym. Sci., 20,2615,1976.
9. ENCYCLOPEDIA Of Polym. Sci and Tech. Vol.2 and 4, 1967.
- 10.A.TAGER, Physical Chemistry Of Polymers, Mr. Publishers. Moscow, 104, 1972.
- 11.WILLIAMS, D.J. Polym. Sci and Eng., Prentice-Hall, Inc, N.J. 1971.
- 12.GUPTA, A.K. Chand, N., J.Polym. Sci. Phys, Ed. 18,1125,1980.
- 13.TOBOLSKY, A.V. Mark, A.F. Polym. Sci. and Materials,Wiley Inter-Science, N.1, 1971.
- 14.The Science and Technology Of Polym Fils, Vol.1, 724,1968.

15. CHAN, A.H, Paul, D.R., J.Appl. Poly.Sci. 24,1539,1979.
16. SACHER, E., J.Polym.Sci.Chem.Ed., 15,395, 1977.
17. REIMSCHUESSEL, H.K., J.Polym.Sci.Ed., 17,2447, 1979.
18. E.F. Jordon, J.Polym.Sci. A-1,9, 3367, 1971.
19. W.A.Lee and G.J. Knight, "The Glass Transition Temperatures Of Polymers" Royal Aircraft Establishment Farnborough, Hants, England, pp.66-70.
20. L.S. LUSKIN, Encyclopedia Of Industrial Chemical Analysis, Vol.4, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1967,p.181.
21. M.Salkind, E.H. Riddle, and R.W.Keefer, Ind. Eng.Chem. 51, 1232 (1959).
22. G.Natta, J.Polymer Sci. 16,143 (1975).
23. H.D.Noether, J.Polymer Sci. 25,217 (1977).
24. J.Rubber Chem and Tech. 43, 95 (1970).
25. Polymer Handbook, Interscience, New York, 1966.
26. Acrylic and Methacrylic Polimers, Bulletin CM-16, Rohm and Haas Company, Philadelphia, Pa., 1978.
27. Hydrocarbon Process. 57, 108 (Nov.1978).
28. L.E.Nielsen, Mechanical Properties Of Polymers, Reinhold, 1962.
29. H.Eyring and N.Hirai, J.Polymer Sci. 37,51 (1979).

30. F.S. Conant and J.W.Liska, J.Appl. Phys., 15,767 (1984).
31. J.Lal and G.S. Trick, J.Polym. Sci. A, 4559 (1964).
32. R.H. Wiley and G.M.Brauer, J.Polym. Sci., 3,647 (1978).



ÖZGEÇMİŞ

1968 yılı İstanbul doğumluyum. İlk ve orta öğrenimimi Özel Kadıköy Kız Koleji'nde tamamladım. 1985 yılında mezun olarak aynı yıl Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya Lisans Bölümünü kazandım. 1989 yılında üniversiteyi bitirdim. 1990 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Fizikokimya Bölümü'nde Yüksek Lisans eğitimine başladım. Halen aynı bölümde öğrenimimi sürdürmekteyim.