



# 2. ULUSAL HESAPLAMALI KİMYA KONGRESİ

02 - 05 HAZİRAN 2015 - KARS

PROGRAM



KARŞI VE LABORATUVAR ÇIKARILAN  
**AFKAS**  
ÇEVRESEL ÇÖZÜMLERİ

**DBK** İNŞAAT ELEKTRİK  
ve SAN. TİC. LTD. ŞTİ.

**ANADOLUJET**



SALI (02 HAZİRAN 2015)			
10.00-17.00	Kayıt		
	SEMİNER-1		
10.00-12.00	Doç. Dr. Uğur BOZKAYA	Atatürk Üniversitesi	Elektronik Yapı Teorilerine Genel Bakış
12.00-14.00	Öğle Yemeği		
	SEMİNER-2		
14.00-16.00	Prof. Dr. Safiye SAĞ ERDEM	Marmara Üniversitesi	Hesaplamalı Kimya Uygulamaları
19.30-	Akşam Yemeği(Sarıkamış Çamkar Otel)		

ÇARŞAMBA (03 HAZİRAN 2015)		
08.30-09.30	Kayıt	
09.30-10.00	Açılış	
<b>Oturum Başkanları</b>		
Prof.Dr. Viktorya AVİYENTE		Prof.Dr. Nihat ÇELEBİ
Boğaziçi Üniversitesi		Abant İzzet Baysal Üniversitesi
<b>ÇAĞRILI KONUŞMA</b>		
10.00-11.00	Prof. Dr. Metin BALCI (Orta Doğu Teknik Üniversitesi)	Gerilimli Halkalı Allenler: Sentez, Mekanizma ve Hesap
11.00-11.20-	<b>ÇAY- KAHVE ARASI</b>	
<b>ÇAĞRILI KONUŞMA</b>		
11.20-11.50	Prof. Dr. Vildan GÜRSOY Hacettepe Üniversitesi	Kan Pıhtılaşma Faktörü Trombinin Moleküler Modelleme Çalışmaları
<b>SÖZLÜ SUNUM</b>		
11.50-12.10	Yrd.Doç.Dr. Ahmet KUNDURACIOĞLU Pamukkale Üniversitesi	Oksijen Fonksiyonlu NHC Tuzu: Sentezi, Yapısal ve Hesapsal İncelemesi
12.10-14.00	<b>Öğle Yemeği</b>	
<b>Oturum Başkanları</b>		
Prof.Dr. Metin BALCI		Prof.Dr. Salih İLHAN
Orta Doğu Teknik Üniversitesi		Siirt Üniversitesi
<b>ÇAĞRILI KONUŞMA</b>		
14.00-14.30	Prof.Dr. Viktorya AVİYENTE Boğaziçi Üniversitesi	Serbest Radikal Polimerizasyon Tepkimelerinde Modellemenin Rolü



ÇAĞRILI KONUŞMA		
14.30-15.00	<b>Doç. Dr.Uğur BOZKAYA</b> Atatürk Üniversitesi	Yoğunluk Fit Edilmiş Coupled Cluster Singles And Doubles (CCSD) Yönteminin Analitik Enerji Gradianti
SÖZLÜ SUNUM		
15.00-15.20	<b>Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU</b> Kafkas Üniversitesi	İzonikotinic Asit Hidrazid Molekülünün Titreşim Frekansları, Konformasyon Analizi, Yapısal ve Elektronik Özelliklerinin Teorik Hesaplanması
15.20-15.40	<b>ÇAY- KAHVE ARASI</b>	
15.40-17.30	<b>POSTER SUNUMU</b>	
19.30	<b>Akşam Yemeği (Kafkas Üniversitesi Konukevi)</b>	

PERŞEMBE (04 HAZİRAN 2015)		
Oturum Başkanları	<b>Prof.Dr. Osman Yavuz ATAMAN</b> Orta Doğu Teknik Üniversitesi	<b>Prof.Dr. M. Salih AĞIRTAŞ</b> Yüzüncü Yıl Üniversitesi
ÇAĞRILI KONUŞMA		
09.00-09.30	<b>Prof. Dr. Safiye SAĞ ERDEM</b> Marmara Üniversitesi	MonoaminOksidaz Enzimleri Nörotransmitter Aminlerin Yükseltgenmesini Nasıl Katalizler?
09.30-10.00	<b>Prof. Dr. Ali GÜNER</b> Hacettepe Üniversitesi	Kimyasal İlgil Algoritması
SÖZLÜ SUNUM		
10.00-10.20	<b>Doç. Dr.Yusuf ATALAY</b> Sakarya Üniversitesi	L-Metioniyum Nitrat (LMN) Bileşiğinin, Geometrik, Optik ve Spektroskopik Özelliklerinin Teorik İncelenmesi

10.20-10.40-	<b>ÇAY- KAHVE ARASI</b>	
SÖZLÜ SUNUM		
10.40-11.00	<b>Hilal TANKAL</b> Amasya Üniversitesi	DBN ile TBD Organik Çözücülerinin 1-Butanol ve 1-Propanol İçerisindeki CO2 Tutma Eğilimlerinin DFT Yöntemleriyle İncelenmesi
SÖZLÜ SUNUM		
11.00-11.20	<b>Yasemin KEŞKEK</b> Hacettepe Üniversitesi	Kantaron Flavonoidlerinin MAO-A Enzimine Bağlanma Modlarının Teorik Olarak İncelenmesi
11.20-11.40	<b>DEĞERLENDİRME VE KAPANIŞ</b>	
12.10-13.30	<b>Öğle Yemeği</b>	
13.30	Gezi (Ani Antik Kenti, Kars Merkezde Bulunan Tarihi Yapılar ve Kars Kalesi)	
19.30	Akşam Yemeği (Büyük Kale Otel)	

<b>CUMA (05 HAZİRAN 2015)</b>		
00.00-	Gezi [Batum (GÜRCİSTAN) ve Ayder Yaylası (RİZE)]	



**POSTER SUNUMLARI**

**03 Haziran 2015 / 15.40-17.30**

<b>P01</b>	<b>Abdurrahman GÜRBÜZ</b>	Kafkas Üniversitesi	B3LYP ve HF Metodları Kullanılarak 3- <i>n</i> -Propil-4-(2-asetoksi-3-metoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
<b>P2</b>	<b>Ahmet KUNDURACIOĞLU</b>	Pamukkale Üniversitesi	Vanilin Türevi Yeni Schiff Bazı Sentezi, Hesapsal ve Spektroskopik İncelemesi
<b>P3</b>	<b>Ahmet KUNDURACIOĞLU</b>	Pamukkale Üniversitesi	Amonyum Fonksiyonlu NHC Tuzu: Sentezi, Yapısal ve Hesapsal İncelemesi
<b>P4</b>	<b>Ahmet KUNDURACIOĞLU</b>	Pamukkale Üniversitesi	Phthalimid Fonksiyonlu NHC Tuzu: Sentezi, Yapısal ve Hesapsal İncelemesi
<b>P5</b>	<b>Ahmet KUNDURACIOĞLU</b>	Pamukkale Üniversitesi	Di-Oktil Pirazolyum Bromür Tuzu: Sentezi, TGA/FT-IR, FT-IR ve Hesapsal İncelemesi
<b>P6</b>	<b>Bahar BANKOĞLU</b>	Kafkas Üniversitesi	3-Metil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Molekülünün Teorik Spektral Değerleri ile Deneysel Değerlerinin Karşılaştırılması
<b>P7</b>	<b>Buket GÖKSU</b>	Kafkas Üniversitesi	GIAO Teorik Yöntemi ile 3-Etil-4-[2-(2-metilbenzoksi)]-benzilidenamino-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Bazı Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
<b>P8</b>	<b>Dilan YILDIZ</b>	Atatürk Üniversitesi	Geçiş Metali-II Etkileşimlerinin Yüksek Düzeyli Kuantum Mekaniksel Yöntemlerle Araştırılması
<b>P9</b>	<b>Duran KARAKAŞ</b>	Cumhuriyet Üniversitesi	Alkin Birimli Pridil Ligantlarıyla Köprülenmiş İki Çekirdekli Metal Karboniller Üzerine Kuantum Kimyasal Çalışmalar
<b>P10</b>	<b>Dursun Ali KÖSE</b>	Hitit Üniversitesi	Kristal Yapısı Bilinen Bileşikler Yardımıyla Benzer Toz Bileşiklerin Kristal Yapısının Aydınlatılması
<b>P11</b>	<b>Dursun Ali KÖSE</b>	Hitit Üniversitesi	Deneysel Olarak Elde Edilmiş Metal-Organik Yapılı Cu(II) Bileşiği Teorik Hidrojen Depolama Özellikleri
<b>P12</b>	<b>Ebru AKKEMİK</b>	Siirt Üniversitesi	Bazı Optikçe Aktif İmin Bileşiklerinin hCA-I ve hCA-II Enzim Aktiviteleri üzerine <i>in vitro</i> Etkilerinin Araştırılması ve Gaussian Programıyla Teorik Hesaplamaları
<b>P13</b>	<b>Ekrem KÖKSAL</b>	Erzincan Üniversitesi	The Investigation of BHA and BHT in Blood by Using DensityFunctionalTheory (DFT)
<b>P14</b>	<b>Emine SOYDAŞ</b>	Atatürk Üniversitesi	Optimize Orbitali MP2.5 Yönteminin Termokimya ve Kinetiğe Uygulamaları: Standart Pertürbasyon Yöntemlerinin Aromatik Bağ Ayrışma Enerjileri ve Radikalik Reaksiyon Bariyer Yükseklikleri için Dramatik Başarısızlıkları

P15	Engin ATEŞER	Aksaray Üniversitesi	Crystal Structure Prediction of Cerium Mononitride (CeN) via Well Known Prototypes
P16	Ercan ŞAHİN	Amasya Üniversitesi	Bessel Tipli Orbitaler ve Hiperbolik Kosinüs Fonksiyonları Kullanılarak Bazı Atomların Roothaan-Hartree-Fock Hesaplamaları
P17	Faruk KARDAŞ	Erzincan Üniversitesi	B3LYP ve HF metodları ile 3-Etil-4-(2-benzoksi-3-etoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin teorik GIAO hesaplamaları
P18	Fatih İSLAMOĞLU	Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi	Mopac Bilgisayar Programı ile Bazı Benzimidazol Türevi Bileşiklerin pKa Değerlerinin Hesaplanması
P19	Fevzi AYTEMİZ	Kafkas Üniversitesi	3-Etil-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Deneysel ve Teorik Olarak Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
P20	Feyzi Sinan TOKALI	Kafkas Üniversitesi	Gaussian 09W Programı Kullanılarak 3-n-Propil-4-(3-sinnamiloksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Bazı Spektroskopik Özelliklerinin B3LYP ve HF Metodlarına Göre Hesaplanması
P21	Gühergül ULUÇAM	Trakya Üniversitesi	Bir Tiazol Türevli Ligantın Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi
P22	Gül KOTAN	Kafkas Üniversitesi	Heterosiklik Yeni Bir Mannich Bazı Üzerine Teorik Çalışma: 1-(Morfolin-4-il-metil)-3-metil-4-(4-izopropilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on
P23	Gül ÖZDEMİR	Kafkas Üniversitesi	3-Etil-4-(3-etoksi-4-benzensulfoniloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin spektroskopik özelliklerinin İncelenmesi
P24	Habibe DÜLGER	Marmara Üniversitesi	Monoamin Oksidaz Enzimi Tarafından Katalizlenen Dopamin Oksidasyon Mekanizmasının Modellenmesi
P25	Habip ÇELİK	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Asetilkolin Esteraz Enzimi Üzerinde Bazı Hidroksilli Moleküllerin <i>in vitro</i> Etkilerinin Belirlenmesi
P26	Habip ÇELİK	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Bazı Sülfonamidlerin Sığır Böbrek Karbonik Anhidraz ve İnsan Karbonik Anhidraz I ve II Enzimleri Üzerinde <i>in vitro</i> Etkilerinin İncelenmesi
P27	Hacı BAYKARA	Siirt Üniversitesi	An Experimental and Theoretical Study of a New di-Functional Ligand and Its Complexes
P28	Hakan KOLANCILAR	Trakya Üniversitesi	Triflil Klorür Neden Klorlama Reaktif?

<b>P29</b>	<b>Hilal Çelik KAZICI</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	Kurutulmuş Havuç Biyokatalizörünün (S)-1-Feniletanol Üretimine Etkisi
<b>P30</b>	<b>Hilal MEDETALİBEYOĞLU</b>	Kafkas Üniversitesi	3-Benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektrel Deneysel ve Teorik Verilerinin İncelenmesi
<b>P31</b>	<b>Hilal YENİCE</b>	Ayçare Akşam Lisesi	4-Piridinboronik Asit ve 3,5-Disubstituentli Türevlerinin Konformasyon Analizi, Yapısal ve Elektronik Özelliklerinin Teorik İncelenmesi
<b>P32</b>	<b>Işıl YENİCE</b>	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	Pirolooksazinon Hidrazon Türevlerinin Sentezi ve Reaksiyon Mekanizması Üzerine Teorik Çalışmalar
<b>P33</b>	<b>Kadir KARAKAŞ</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	A Computational Study of Metallophthalocyanines with 5-Methyl-[1,2,4] triazolo [1,5-a] pyrimidin-7-oxy Substituents
<b>P34</b>	<b>Kenan OLĞUN</b>	MEB	Siklik Alken Türevlerinin Karbenler ile Siklopropanasyon Tepkimelerinin Teorik Olarak İncelenmesi
<b>P35</b>	<b>Koray SAYIN</b>	Cumhuriyet Üniversitesi	Makrosiklik Schiff-Baz Ligandlı Çinko (II) Kompleksleri Üzerine Hesaplamalı Kimya Çalışmaları
<b>P36</b>	<b>Kübra AYDIN</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	1,10-Fenantrolin Tabanlı Organik Elektrolüminesant Moleküllerin Elektronik Özelliklerinin Belirlenmesi
<b>P37</b>	<b>Kübra ÇAKIR</b>	Marmara Üniversitesi	Monoamine Oksidaz Enzimidaki Flavin -N5 Araürün Oluşumu: Kataliz mi, İnhibisyon mu?
<b>P38</b>	<b>Laleh TALAVAT</b>	Hacettepe Üniversitesi	Etkin Kullanılan İki Anti-kanser İlacı, Doxorubicin ve 5-Fluorouracilin, Moleküler Baskılama (MIP) ve Kontrollü İlaç Salım Sistemlerindeki (CDR) Kimyasal İlgili Profilleri
<b>P39</b>	<b>M.Salih AĞIRTAŞ</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	A Computational Study of Metallophthalocyanines with 2-Isopropyl-5-methylphenoxy Substituents
<b>P40</b>	<b>M.Salih AĞIRTAŞ</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	A Computational Study and Synthesis of 4,4'-(Methylenebis(2-(2 <i>H</i> -benzo[d][1,2,3]triazol-2-il)-4-(2,4,4-trimethylpentan-2-il)-6,1-phenylene))bis(oxy))diphthalonitrile
<b>P41</b>	<b>Mehmet TUNÇ</b>	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	5-Benzoil-1-(E)-(2-hidroksi-5-(e)-fenildiazenil)benzilidenamino)-4-fenilpirimidin-2(1 <i>H</i> )-on Schiff Baz Bileşiğinin Deneysel ve Teorik Verilerinin Karşılaştırılması
<b>P42</b>	<b>Memet KARADAĞ</b>	Kafkas Üniversitesi	Gaussian 09W Programı ile 1-Asetil-3-metil-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
<b>P43</b>	<b>Miray KOÇ</b>	Hacettepe Üniversitesi	Polivinilpirolidon (PVP) ve Polietilenoksit (PEO) Karışımlarının Kimyasal İlgili Profilleri



P44	Murat BEYTUR	Kafkas Üniversitesi	Yeni 1-(4-Metilpiperazin-1-il-metil)-3-metil-4-(3-sinnoiloksi-benzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Sentezi ve Gaussian Programı ile Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
P45	Murat BEYTUR	Kafkas Üniversitesi	3-(4-Metoksibenzil)-4-(3-sinnoiloksi-benzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin DFT ve HF Metodlarına Göre Hesaplanmış Teorik Değerleri ile Deneysel Değerlerinin Karşılaştırılması
P46	Murat Tolga KAYALAR	Erzincan Üniversitesi	1-Asetil-3-metil(Aril)-4-(4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Deneysel ve Teorik Olarak Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
P47	Murat ŞENTÜRK	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Karbonik Anhidraz I ve II İzoenzimleri Üzerinde Bazı Aminoasit Türevi Sülfonamidlerin <i>in vitro</i> ve <i>in silico</i> Etkilerinin İncelenmesi
P48	Murat ŞENTÜRK	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Bazı Pirazol Türevlerinin İnsan Karbonik Anhidraz I ve II İzoenzimleri Üzerinde <i>in vitro</i> ve <i>in silico</i> Etkilerinin İncelenmesi
P49	Mustafa EMİRİK	Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi	Bis(piridin-3-karboksamit)bis(babital) nikel(II) Kompleksinin Geometrik ve Spektroskopik Verilerinin Hesaplamalı Kimya Yöntemiyle Belirlenmesi
P50	Mustafa EMİRİK	Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi	Benzer Yapıdaki İki Benzimidazol Türevinin Spektroskopik ve Geometrik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi ve Bazı Kuantum Kimyasal Tanımlayıcıların Hesaplanması
P51	Mustafa ORHAN	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Safranin Maddesinin Asetilkolin Esteraz Enzimi Üzerinde İnhibisyon Etkisinin İncelenmesi
P52	Mustafa ORHAN	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	Asetilkolin Esteraz ve Butirilkolin Esteraz Enzimleri Üzerinde Anisol Türevlerinin <i>in vitro</i> ve <i>in silico</i> Etkilerinin İncelenmesi
P53	Muzaffer ALKAN	Kafkas Üniversitesi	3-( <i>p</i> -Metilbenzil)-4-(2-asetoksi-3-metoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Molekülünün Deneysel ve Teorik Özelliklerinin İncelenmesi
P54	Muzaffer POLAT	Kafkas Üniversitesi	1-Asetil-3-benzil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Deneysel ve Teorik Olarak Spektroskopik Özellikleri Üzerine Bir Çalışma
P55	Nihat ÇELEBİ	Abant İzzet Baysal Üniversitesi	Tek Katmanlı Karbon Nanotüpler Üzerine Pridinyum İlidlerin 1,3-Dipolar Siklokatılma Çalışmaları
P56	Onur AKYILDIRIM	Kafkas Üniversitesi	3- <i>p</i> -Klorobenzil-4-(4-karboksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Molekülünün Deneysel ve Kuramsal Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
P57	Önder ALBAYRAK	Kafkas Üniversitesi	Deneysel ve Teorik olarak Yeni 3-fenil-4-(2-metilbenzoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Molekülünün İncelenmesi

P58	Özlem AKTAŞ YOKUŞ	Kafkas Üniversitesi	3-Metil-4-(3-benzensulfoniloksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin B3LYP ve HF Metodları Kullanılarak Spektroskopik Özelliklerinin İncelenmesi
P59	Özlem GÜRSOY KOL	Kafkas Üniversitesi	3-Metil-4-(3-asetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektroskopik Özelliklerinin Teorik İncelenmesi
P60	Özlem SARI	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	Pirolö-Pirazin, İndolizin Türevlerinin Sentezi ve Oluşum Mekanizmalarının Hesapsal Olarak Modellenmesi
P61	Rıdvan UYGUR	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	DHT Bileşiğinin Dekompozisyon Mekanizmasının Teorik Olarak İncelenmesi
P62	Salih CINAĞLI	Bozok Üniversitesi	Su Topraklarında Kobalt Katkısının Etkisi:Co(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> ,n=1-10,Topraklarının HF ve DFT ile Analizi
P63	Salih İLHAN	Siirt Üniversitesi	Synthesis Characterization and Applications of Some New Metal Complexes of 1,4-bis(2-(5-Bromo-2-hydroxybenzilidenamino)-4-chlorophenoxy)butane
P64	Savaş KARA	Kafkas Üniversitesi	B3LYP ve HF Metodları Kullanılarak 3-Fenil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektral Özelliklerinin İncelenmesi
P65	Selbi KESKİN	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	Benzopirazolokzazepin ve Benzopirazolokzazosin Türevlerinin Sentezi ve Reaksiyon Mekanizması Üzerine Teorik Çalışmalar
P66	Selçuk GÜMÜŞ	Yüzüncü Yıl Üniversitesi	1,3,5-Triazin Tabanlı Organik Elektrolüminesant Moleküllerin Elektronik Özelliklerinin Belirlenmesi
P67	Serkan DOĞAN	Kars Fen Lisesi	FenilBoronik Asit ve 2,6-Disubstituenli Türevlerinin Konformasyon Analizi, Yapısal ve Elektronik Özelliklerinin Teorik İncelenmesi
P68	Sevda MANAP	Kafkas Üniversitesi	3-( <i>p</i> -Metilbenzil)-4-(3-metoksi-4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Molekülünün DFT ve HF Metodlarına göre Hesaplanmış Teorik ile Deneysel Değerlerinin Mukayese Edilmesi
P69	Songül ULUFER	Kafkas Üniversitesi	Gaussian 09W Programı Kullanarak 3-Etil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Spektroskopik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi
P70	Şaban AKTAŞ	Trakya Üniversitesi	Yeni 1,10-Fenantrolin Türevli Ligantın Sentezi ve Simülasyonu
P71	Şule Bahçeci	Karadeniz Teknik Üniversitesi	3-Siklopropil-4-(3-hidroksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Bileşiği Üzerine Teorik Bir Çalışma
P72	Uyan YÜKSEL	Siirt Üniversitesi	Bor'un Sıvı-Sıvı Ekstraksiyonu için 1,3 Diol Dizaynını Bilgisayarlı Modelleme

<b>P73</b>	<b>Yasemin KEŞKEK</b>	Hacettepe Üniversitesi	Karabaş Otundaki Kamforun, Sigara Bıraktıracı İlaç Tasarımı İçin Hedef Yapı Olan Nikotik Asetilkolin esteraz Reseptörüne Bağlanma Modlarının İncelenmesi
<b>P74</b>	<b>Yasemin KEŞKEK</b>	Hacettepe Üniversitesi	Çörek Otunda Bulunan Timokinon ile $\mu$ -Opioid Reseptörünün Etkileşiminin İncelenmesi
<b>P75</b>	<b>Yeliz ULAŞ</b>	Uludağ Üniversitesi	2-( <i>m</i> -Toli(4-vinilfenilamino)metil) Fenol Bileşiğinin Sentezi ve Uygulama Alanları
<b>P76</b>	<b>Yusuf ATALAY</b>	Sakarya Üniversitesi	Cis-2,6-bis(2-chlorophenyl)-3,3-dimethylpiperidin-4-one molekülünün yapısal, spektroskopik ve doğrusal olmayan optik özellikleri
<b>P77</b>	<b>Yusuf TAZEGÜL</b>	Kafkas Üniversitesi	N'-[E-(4-Bromo-2-tienil)metilen]-isonikotik Hidrazide Molekülünün Konformasyon Analizi, Yapısal ve Elektronik Özelliklerinin Teorik Hesaplanması
<b>P78</b>	<b>Zeynep TURHAN IRAK</b>	Iğdır Üniversitesi	Click Tepkimesi Mekanizmasının Teorik Olarak İncelenmesi
<b>P79</b>	<b>Kezban YILDIZ DALGINLI</b>	Kafkas Üniversitesi	<i>Nigella Sativa</i> Yağının Dietilnitrozamin Toksisitesinde Koruyucu Etkisinin İncelenmesi