

**T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI**

BAZI 1,2,4-TRIAZOL TÜREVLERİ ÜZERİNE TEORİK BİR ÇALIŞMA

**Sevecan KARAKOYUN
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Haydar YÜKSEK**

**TEMMUZ-2019
KARS**



T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI



BAZI 1,2,4-TRİAZOL TÜREVLERİ ÜZERİNE TEORİK BİR ÇALIŞMA


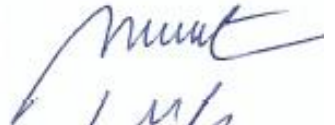

Sevecan KARAKOYUN
YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN
Prof. Dr. Haydar YÜKSEK

TEMMUZ-2019
KARS

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Sevecan KARAKOYUN'un Prof.Dr. Haydar YÜKSEK'in danışmanlığında Yüksek Lisans tezi olarak hazırladığı “**Bazı 1,2,4-Triazol Türevleri Üzerine Teorik Bir Çalışma**” adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy birliği ile kabul edilmiştir.

31 / 07 / 2019

	Adı ve Soyadı	İmza
Başkan	: Prof. Dr. Haydar YÜKSEK (Danışman)	
Üye	: Dr. Öğr. Üyesi Murat Tolga KAYALAR	
Üye	: Dr. Öğr. Üyesi Gül KOTAN	

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun . . / . . / 20. . gün ve / sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Fikret AKDENİZ

Enstitü Müdür V.

ETİK BEYAN

Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.



İmza

Sevecan KARAKOYUN

Tarih

ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

BAZI 1,2,4-TRIAZOL TÜREVLERİ ÜZERİNE TEORİK BİR ÇALIŞMA

Sevecan KARAKOYUN

Kafkas Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Kimya Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Haydar YÜKSEK

Çalışmada, 9 literatürde kayıtlı heterosiklik 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin teorik olarak spektral verileri hesaplanmış ve deneysel veriler ile mukayeseleri yapılarak elde edilen sonuçlar yorumlanmıştır.

Bu amaçla, öncelikle 9 adet literatürde kayıtlı bulunan bileşikler "B3LYP/ HF 6311G(d,p)" metodları kullanılarak optimize edilmiştir. Bu optimize yapıdan yola çıkılarak ¹³C/¹H NMR değerleri "GIAO" metoduna göre "Gaussian G09W" paket programı kullanılarak gaz fazında hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlara göre teorik verilerin deneysel verilerle uyumlu oldukları görülmüştür. Çalışmanın başka bir kısmında ayrıca, incelenen 9 bileşiğin IR frekans değerleri gaz fazında hesaplanmış, elde edilen değerler uygun scala faktörleri ile çarpılmıştır. Hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında veda4f programından yararlanılmıştır. İlaveten, 9 bileşiğin bağ açıları, bağ uzunlukları, formal yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri aynı metodlar ve set kullanılarak hesaplanmıştır.

Anahtar Kelimeler: 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, GIAO, Gaussian 09W, B3LYP, HF.

2019, 102 Sayfa

ABSTRAT

(M. Sc. Thesis)

THEORETICAL A STUDY ON SOME 1,2,4-TRIAZOLE DERIVATIVES

Sevecan KARAKOYUN

Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of Chemistry

Supervisor: Prof. Dr. Haydar YÜKSEK

In the study, theoretically spectral datas of nine compounds heterocyclic 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivative registered in the literatüre were calculated and these datas were compared with experimental datas, obtained conclusions were evaluated.

For this purpose, firstly, 9 compounds registered in the literatüre have been optimized using "B3LYP/ HF6311G(d,p)" methods. Starting from this optimized structure with ¹³C/¹H-NMR spectral data values according to "GIAO method" was calculated using the methods of "Gaussian G09W package program" in gas phase. According to obtained conclusions, theoretical and experimental values were seen to be compatible. Another part of study, also, IR frequency datas of investigated nine compounds were calculated in gas phases and are multiplied with appropriate scala factors The identification of the calculated IR data was performed in the veda4f program. Additionally, bond angles, bond lengths, dipole moments, the HOMO-LUMO energy and total energy, mulliken charges, surface maps of nine compounds were calculated using same methods and set.

Key Words: 4,5-Dihyro-1*H*-1,2,4-triazole-5-one, GIAO, Gaussian 09W, B3LYP, HF.

2019, 102 pages

ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim dalında Yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır. Çalışmada, literatürde kayıtlı 9 adet 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevi heterosiklik bileşiğin teorik çalışması yapılmıştır.

Literatürde kayıtlı 9 adet molekülün teorik çalışmalarını başlatmak için öncelikle, Gaussian 09W programının B3LYP ve HF metotları ile bu metodlara uygun temel setlerden 6-311G(d,p) seti seçilerek molekül optimize edilmiştir. Optimize olarak elde edilen en kararlı form bizim hesaplamalarımızda temel yapıdır. Bu yapıdan yola çıkarak 9 adet molekülün farklı hesapsal parametrelerine bakılmıştır. 1-9 moleküllerinin ¹³C/¹H-NMR spektral kayma değerleri GIAO metoduna göre hesaplanarak deneysel NMR verileri de kullanılarak fark değerleri hesaplanmıştır. Bu işlemlerden sonra R² ve standart hata sayısal verileri ile katsayılar elde edilmiştir ve bunlar kullanılarak moleküllerin ¹³C/¹H-NMR deneysel değerlerin teorik değerlere karşı kimyasal kayma değerlerinin korelasyon grafikleri çizilmiştir. Başka bir spektral analiz de IR verilerinin teorik olarak incelenmesidir. Bunun için Veda4f programı kullanılmıştır ve hesaplamalar sonucunda elde edilen frekans değerleri uygun uyum faktörleri ile çarpılarak bulunan skalalı frekans değerleri ile bunlara karşılık gelen titreşim atomları tabloya geçirilmiştir. Son olarak moleküllerin bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken atom yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, termodinamik ve elektroniközellikleri, dipol moment değerleri, toplam enerjileri ve yüzey haritaları teorik olarak incelenerek şekiller ve tablolar halinde verilmiştir.

Tez çalışmamı planlayan, yöneten ve her aşamasını titizlikle takip ederek büyük emeği geçen, yoğun çalışmalarından bana zaman ayırarak derin bilgilerinden faydalanma fırsatı veren, öğrencisi olmaktan her zaman gurur duyduğum, değerli bilim adamı, Sayın Prof. Dr. Haydar YÜKSEK'e saygı ve teşekkürlerimi sunmayı bir borç bilirim.

Çalışmalarımın her aşamasında ve tezin hazırlanması sürecinde katkılarını esirgemeyen Sayın Hocam Dr.Öğr.Üyesi Gül KOTAN'a saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca her türlü bilgi ve birikimlerinden yararlandığım, desteklerini esirgemeyen, Fen-Edebiyat Fakültesi Dekan Yardımcısı Dr.Öğr.Üyesi Murat BEYTUR'a saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Benden maddi ve manevi desteğini esirgemeyen, hayatımın her aşamasında yanımda olan ve bugünlere gelmemde büyük pay sahibi olan sevgili anneme, babama, kardeşlerime ve değerli eşime sonsuz teşekkürlerimi sunarım.



İmza
Sevecan KARAKOYUN

İÇİNDEKİLER

ÖZET	I
SUMMARY	II
ÖNSÖZ	III
İÇİNDEKİLER	V
ŞEKİLLER DİZİNİ	VII
TABLolar DİZİNİ	X
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XIV
1. GENEL BİLGİLER	1
1.1. Giriş	1
1.2. Hesapsal Kimya Metotları	2
1.2.1. Kuantum Mekaniği	2
1.2.2. Ab-initio yöntemleri	3
1.2.3. Hartree Fock "Öz Uyumlu Alan Teorisi" (HF-SCF)	4
1.2.4. Density Functional Theory "Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi" (DFT)	4
1.2.5. Yarı-deneysel (semi-emprical) Moleküler Yöntemler	5
1.2.6. Temel Setlerin Seçimi ve Adlandırılması	5
1.3. NMR Spektroskopide Kuramsal Hesaplamalar	6
1.4. GIAO Yöntemi	7
1.5. Gaussian 09W Programı	8
1.6. GaussView	8
1.7. Moleküler Orbital Teorisi ve HOMO-LUMO Enerjileri	8
1.8. 4,5-Dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Türevleri Üzerine Yapılan Teorik Çalışmalar	9
2. MATERYAL, YÖNTEM VE HESAPLAMA METOTLARI	16
2.1. Gaussian 09W Hesaplama yöntemleri	16
2.1.1. Molekülün Üç Boyutlu Çizimi	16
2.1.2. Molekülün Element Sembol ve Numaralarının Gösterimi	17
2.1.3. Geometri Optimizasyonu	17
2.1.4. Bağ Açısı ve Bağ Uzunluğu	18
2.1.5. Mulliken Yük	18
2.1.6. HOMO-LUMO	19

2.1.7.	IR Titreşimlerinin Hesaplanması	20
2.1.8.	^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerlerinin Hesaplanması	20
3.	BULGULAR	21
4.	SONUÇLAR VE TARTIŞMA	83
5.	KAYNAKLAR	92
6.	EKLER	98
	ÖZGEÇMİŞ	112



ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1.	Gauss-view Görüntüsü	16
Şekil 2.2.	Numara ve Sembol Eklenmiş Gauss-view Görüntüsü	17
Şekil 2.3.	Gaussian Hesaplama Penceresi	17
Şekil 2.4.	Gaussian Optimize Özet Penceresi	18
Şekil 2.5.	Atomların Mulliken Yük Gösterimi	18
Şekil 2.6.	Molekül Orbital Diyagramı	19
Şekil 2.7.	Frekans Değerleri Penceresi	20
Şekil 2.8.	Gaussian NMR Spektrumu	20
Şekil 3.1.	26 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli	21
Şekil 3.2.	26 Bileşiğinin IR spektrumları	24
Şekil 3.3.	26 Bileşiğinin Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	25
Şekil 3.4.	26 Bileşiğinin yüzey haritaları	27
Şekil 3.5.	27 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	27
Şekil 3.6.	27 Bileşiğinin IR spektrumları	30
Şekil 3.7.	27 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	31
Şekil 3.8.	27 Bileşiğinin yüzey haritaları	33
Şekil 3.9.	28 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	34
Şekil 3.10.	28 Bileşiğinin IR spektrumları	36
Şekil 3.11.	28 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	38
Şekil 3.12.	28 Bileşiğinin yüzey haritaları	40
Şekil 3.13.	29 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	40
Şekil 3.14.	29 Bileşiğinin IR spektrumları	43
Şekil 3.15.	29 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	45
Şekil 3.16.	29 Bileşiğinin yüzey haritaları	47
Şekil 3.17.	30 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	47
Şekil 3.18.	30 Bileşiğinin IR spektrumları	51
Şekil 3.19.	30 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	52
Şekil 3.20.	30 Bileşiğinin yüzey haritaları	54
Şekil 3.21.	31 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	54
Şekil 3.22.	31 Bileşiğinin IR spektrumları	57

Şekil 3.23.	31 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	59
Şekil 3.24.	31 Bileşiğinin yüzey haritaları	61
Şekil 3.25.	32 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	61
Şekil 3.26.	32 Bileşiğinin IR spektrumları	64
Şekil 3.27.	32 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	66
Şekil 3.28.	32 Bileşiğinin yüzey haritaları	68
Şekil 3.29.	33 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	68
Şekil 3.30.	33 Bileşiğinin IR spektrumları	71
Şekil 3.31.	33 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	73
Şekil 3.32.	33 Bileşiğinin yüzey haritaları	75
Şekil 3.33.	34 Bileşiğinin (6-311G (d,p)) optimize şekli	75
Şekil 3.34.	34 Bileşiğinin IR spektrumları	78
Şekil 3.35.	34 Molekülünün Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	80
Şekil 3.36.	34 Bileşiğinin yüzey haritaları	81
Şekil 4.1.	26-34 Bileşiklerinin ¹³ C ve ¹ H NMR Kimyasal Kayma Değerleri	84
Şekil 4.2.	26-34 Bileşiklerinin B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ¹³ C ve ¹ H NMR Kimyasal Kayma Değerleri	85
Şekil 4.3.	26-34 Bileşiklerinin Hesaplanan ΔEg (E _{LUMO} -E _{HOMO}) Değerleri	88
Ek Şekil 1.	26 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	99
Ek Şekil 2.	27 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	99
Ek Şekil 3.	28 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	99
Ek Şekil 4.	29 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	100
Ek Şekil 5.	30 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	100
Ek Şekil 6.	31 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	100
Ek Şekil 7.	32 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma Değerleri	101

- Ek Şekil 8. 33 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma Değerleri 101
- Ek Şekil 9. 34 Bileşiklerinin B3LYP/ HF ve B3LYP/ HF(DMSO) yöntemleriyle ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma Değerleri 101



TABLULAR DİZİNİ

Tablo 3.1.	26 Bileşiğinin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	21
Tablo 3.2.	26 Bileşiğinin IR Değerleri (cm^{-1})	22
Tablo 3.3.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Bağ Açılı (A ⁰)	24
Tablo 3.4.	26 Bileşiğinin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A ⁰)	24
Tablo 3.5.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	25
Tablo 3.6.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	25
Tablo 3.7.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Toplam Enerjileri	25
Tablo 3.8.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	26
Tablo 3.9.	26 Bileşiğinin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	26
Tablo 3.10.	27 Bileşiğinin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	28
Tablo 3.11.	27 Bileşiğinin IR Değerleri (cm^{-1})	28
Tablo 3.12.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Bağ Açılı (A ⁰)	30
Tablo 3.13.	27 Bileşiğinin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A ⁰)	31
Tablo 3.14.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	31
Tablo 3.15.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	32
Tablo 3.16.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Toplam Enerjileri	32
Tablo 3.17.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	32
Tablo 3.18.	27 Bileşiğinin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	32
Tablo 3.19.	28 Bileşiğinin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	34
Tablo 3.20.	28 Bileşiğinin IR Değerleri (cm^{-1})	34
Tablo 3.21.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Bağ Açılı (A ⁰)	37
Tablo 3.22.	28 Bileşiğinin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A ⁰)	37
Tablo 3.23.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	38
Tablo 3.24.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	38
Tablo 3.25.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Toplam Enerjileri	39
Tablo 3.26.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	39
Tablo 3.27.	28 Bileşiğinin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	39

Tablo 3.28.	29 Bileşiminin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	41
Tablo 3.29.	29 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	41
Tablo 3.30.	29 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	44
Tablo 3.31.	29 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	44
Tablo 3.32.	29 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	45
Tablo 3.33.	29 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	45
Tablo 3.34.	29 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	46
Tablo 3.35.	29 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	46
Tablo 3.36.	29 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	46
Tablo 3.37.	30 Bileşiminin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	48
Tablo 3.38.	30 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	48
Tablo 3.39.	30 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	51
Tablo 3.40.	30 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	51
Tablo 3.41.	30 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	52
Tablo 3.42.	30 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	53
Tablo 3.43.	30 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	53
Tablo 3.44.	30 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	53
Tablo 3.45.	30 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	53
Tablo 3.46.	31 Bileşiminin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	55
Tablo 3.47.	31 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	55
Tablo 3.48.	31 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	58
Tablo 3.49.	31 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	58
Tablo 3.50.	31 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	59
Tablo 3.51.	31 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	60
Tablo 3.52.	31 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	60
Tablo 3.53.	31 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	60
Tablo 3.54.	31 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	60
Tablo 3.55.	32 Bileşiminin ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	62
Tablo 3.56.	32 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	62

Tablo 3.57.	32 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	65
Tablo 3.58.	32 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	65
Tablo 3.59.	32 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	66
Tablo 3.60.	32 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	66
Tablo 3.61.	32 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	67
Tablo 3.62.	32 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	67
Tablo 3.63.	32 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	67
Tablo 3.64.	33 Bileşiminin ^{13}C ve 1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	68
Tablo 3.65.	33 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	69
Tablo 3.66.	33 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	72
Tablo 3.67.	33 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	72
Tablo 3.68.	33 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	72
Tablo 3.69.	33 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	73
Tablo 3.70.	33 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	73
Tablo 3.71.	33 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	73
Tablo 3.72.	33 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	74
Tablo 3.73.	34 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C ve 1H -NMR Kimyasal Kayma Değerleri (δ/ppm)	76
Tablo 3.74.	34 Bileşiminin IR Değerleri (cm^{-1})	76
Tablo 3.75.	34 Bileşiminin Hesaplanan Bağ Açılırları (A^0)	79
Tablo 3.76.	34 Bileşiminin DFT ve HF Yöntemlerine Göre Hesaplanan Bağ Uzunlukları (A^0)	79
Tablo 3.77.	34 Bileşiminin Hesaplanan Mulliken Yük Değerleri	79
Tablo 3.78.	34 Bileşiminin Hesaplanan Dipol Moment Değerleri	80
Tablo 3.79.	34 Bileşiminin Hesaplanan Toplam Enerjileri	80
Tablo 3.80.	34 Bileşiminin Hesaplanan Elektronik Özellikleri	80
Tablo 3.81.	34 Bileşiminin Hesaplanan Termodinamik Özellikleri	81
Tablo 4.1.	26-34 Bileşiklerinin ^{13}C - ve 1H -NMR için Bulunan R^2 , Standart Hata, a ve b Değerleri	83

Tablo 4.2.	26-34 Bileşiklerinin ^{13}C - ve ^1H -NMR(DMSO) için Bulunan R^2 , Standart Hata, a ve b Değerleri	84
Tablo 4.3.	26-34 Bileşiklerinin Toplam Molekül Enerjileri (a.u.)	87



SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

δ	: Bağlı kimyasal kayma, açılı bükülme titreşimi
ψ	: Dalga fonksiyonu
e	: Elektron yükü ($1e=1.6.10^{-19}C$)
α	: Alfa
β	: Beta
Hatree	: Hartree birimi (27.192 eV)
H	: Hamiltoniyen operatörü
V	: Potansiyel enerji operatörü
h	: Planck sabiti
λ	: Dalgaboyu
σ	: Kimyasal yumuşaklık
A	: Elektron ilgisi
δ	: Delta ölçüğü
$\langle\alpha\rangle$: polarite
$\langle\beta\rangle$: Hiper polarite
χ	: Elektronegativite
η	: Sertlik
AO	: Atomik Orbitaller
DFT	: Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory)
GIAO	: Ayar içeren atomik orbital (Gauge Including Atomic Orbital)
HF	: Hatree-Fock
B3LYP	: Becke tipi 3-parametrelili Yoğunluk Fonksiyon Teorisi
HF-SCF	: Hatree-Fock özuyumlu alan teorisi (Hatree-Fock Self Consistent Field)
STO	: Slater Tipi Orbital
GTO	: Gaussian Tipi Orbital
MO	: Moleküler Orbital
NMR	: Nükleer Magnetik Rezonans (Nucleae Magnetic Resonance)
IR	: Infrared
MEP	: Moleküler elektron potansiyel haritası
ppm	: Milyonda bir kısım (parts per million)
TMS	: Tetrametilsilan ($Si(CH_3)_4$)
E_{HOMO}	: En yüksek dolu moleküler orbital enerjisi
E_{LUMO}	: En düşük boş moleküler orbital enerjisi
ΔE_g	: $E_{LUMO} - E_{HOMO}$ enerji farkı
DMSO	: Dimetilsülfoksit
THF	: Tetrahidrofur
CCl_4	: Karbontetraklorür

1. GENEL BİLGİLER

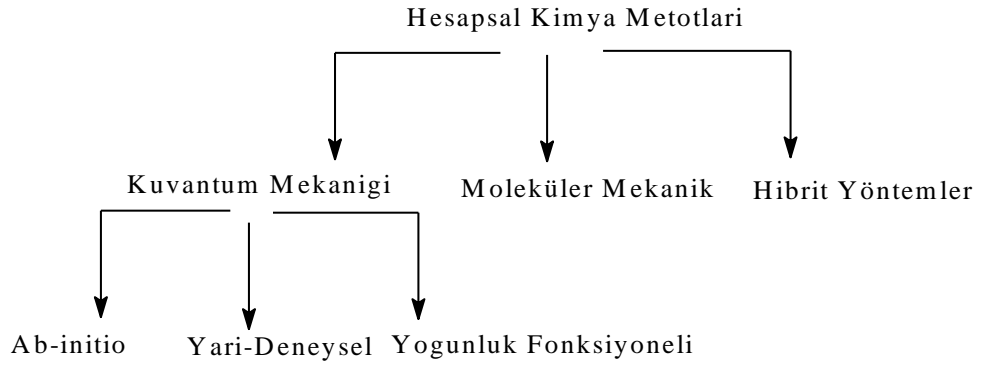
1.1. Giriş

“Bazi 1,2,4-Triazol Türevleri Üzerine Teorik Bir Çalışma” başlıklı bu tezde, 9 adet literatürde kayıtlı 3-alkil(aril)-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin teorik parametreleri incelenmiştir. Bunun için ilk olarak bu heterosiklik bileşikler Gaussian 09W programında DFT (B3LYP) ve HF metodları ve 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak optimize edilmiştir. Optimize edilmiş kararlı yapıdan yola çıkarak moleküllerin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR ile infrared spektral verileri teorik olarak GIAO metoduna göre hesaplanmıştır. Literatürden alınan deneysel veriler ile karşılaştırılarak grafik üzerinde gösterilmiştir. "a ve b", R² ve standart değerleri "Sigmaplot" programı kullanılarak hesaplanmıştır. IR spektral teorik değerleri Veda4f programı ile hesaplanmış ve bu değerler belirli skala faktörleri ile çarpılarak skalalı değerleri alınmıştır ve farklı iki metod için IR spektrumları elde edilmiştir. Deneysel veriler literatürden elde edilmiştir. Deneysel IR verileri ile kıyaslanarak hangi metodun daha yakın değerler hesapladığı bilgisine ulaşılmıştır.

Ayrıca, termodinamik özellikleri, mulliken atomik yükleri, geometrik özellikleri (bağ uzunluğu, bağ açısı), dipol moment, toplam enerji, HOMO-LUMO enerjileri, molekülün elektron spin potansiyeli (ESP), moleküler elektrostatik potansiyeli (MEP), toplam yoğunluk, elektron yoğunluğu, elektrostatik potansiyeli gibi moleküler yüzeyleri, kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), elektron ilgisi (A), iyonizasyon potansiyeli (I) gibi elektronik özellikleri belirlenmiştir.

Günümüzde teorik çalışmaların önemi giderek artmıştır ve deneysel çalışmalarını destekler niteliktedir. Teorik kimya, geliştirilen yöntemler ile molekülün tüm parametreleri incelenmekte ve elde edilen hesapsal veriler ile deneysel veriler karşılaştırılarak mukayese imkanı sunmaktadır.

1.2. Hesapsal Kimya Metotları



Hesapsal Kimya metotları yukarıdaki şekilde alt gruplara ayrılır. Bu metotlardan Kuvantum Mekanigi, bir molekülün enerjisini, molekülün atomları ile çekirdeği arasındaki etkileşimini açıklayan Schrödinger denklemi ile ifade eder.

1.2.1. Kuvantum Mekanigi

Schrödinger denkleminin en genel formu;

$$H\psi = E\psi \quad (1)$$

şeklindedir. Burada ψ dalga fonksiyonu, E sistemin enerjisi ve H Hamiltoniyen operatörüdür. Hamiltoniyen elektronların ve çekirdeklerin kinetik enerjisi, elektron çekirdek arası çekici etkileşme, elektronlar arası itici etkileşme ve çekirdekler arası itici etkileşme durumları göz önüne alınır.

∇^2 Laplace operatörü, V potansiyel enerji operatörü ve \hbar , h Planck sabitinin 2π 'ye bölümü ($\hbar = h / 2\pi$) olmak üzere Hamiltoniyen operatörü,

$$H = -\underbrace{\frac{\eta^2}{2} \sum_a \frac{1}{m_a} \nabla_a^2}_{1.\text{terim}} - \underbrace{\frac{\eta^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2}_{2.\text{terim}} + \underbrace{\sum_a \sum_{b>a} \frac{Z_a Z_b e^2}{r_{ab}}}_{3.\text{terim}} - \underbrace{\sum_a \sum_i \frac{Z_a e^2}{r_{ia}}}_{4.\text{terim}} + \underbrace{\sum_j \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}}_{5.\text{terim}} \quad (2)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{Laplace operatörü})$$

$$a, b \text{ çekirdekler} \quad Z_a, Z_b \text{ atom numaraları} \quad i, j \text{ elektronlar} \quad \eta = \frac{h}{2\pi}$$

1.terim: Çekirdeklerin kinetik enerjilerine ait kısım.

2.terim: Elektronların kinetik enerjilerine ait kısım.

3.terim: Çekirdekler arası itme enerjisine ait kısım.

4.terim: Elektronlar ve çekirdeklerin çekimlerinin potansiyel enerjisine ait kısım.

5.terim: Elektronlar arası itmenin potansiyel enerjisine ait kısım.

Yukarıda verilen denklem bir parçacık için geçerlidir. Molekülün tam hamiltoniyen işlemcisi, iyonlar arasındaki etkileşimleri ve çekirdeklerle elektronların spinlerine bağlı tüm magnetik moment etkileşimlerini içerir. Bu yüzden Schrödinger denkleminin tam çözümü sadece bir elektronlu atomlar için mümkündür. Schrödinger denkleminin birden fazla elektron içeren bir sistem için çözülebilir kılınabilmesi için bazı yaklaşımların yapılması gerekir. Ab-initio metotları ve Semi-empirik (yarı-deneysel) metotlar farklı tür yaklaşımlar ile denklemi çözer [1].

1.2.2. Ab-initio Yöntemleri

Bu tür yöntemler moleküler orbital teorisinin baştan sona kadar doğrudan uygulanması demektir. Bu yöntem en hassas hesaplamaların yapıldığı güvenilir bir yöntemdir ve küçük molekülerde doğruluk derecesi artmaktadır. Bu metotda atom sayısı fazla olan molekülleri çalışmak zordur. Hesaplama süresi molekülün atom sayısına bağlıdır. Bu teori de, farklı birçok seviyeye ayrılmıştır. Büyük moleküller sadece düşük seviyeli yöntemlerle çalışılabilir.

1.2.3. Hartree Fock "Öz Uyumlu Alan Teorisi" (HF-SCF)

Kuantum mekaniği hesapsal yöntemler HF-SCF teorisinin prensiplerini kullanarak Schrödinger dalga denklemi çözer ve enerji özdeğerini bulurlar. Schrödinger denklemini çözenin en büyük zorluğu elektron-elektron etkileşimlerinin var olmasıdır. Katı bir sistemin çok elektronlu dalga fonksiyonunu çözmek için yaklaşık 10^{23} tane differansiyel denklemin çözülmesi gerekir ki bu da oldukça zordur. Bu denklemleri çözmek için ilk yaklaşım Hartree tarafından ileri sürülmüştür. Hartree-Fock hesaplamalarında merkezi alan yaklaşıklığı kullanılır. Ayrıca HF yaklaşımı tek atomlara kullanıldığı gibi çoklu atom sistemlerinde de kullanılır [2]. $H\psi=E\psi$ denklemindeki dalga fonksiyonları ve enerjilerin değerleri bulunabilmektedir.

Bu metodun varsayımı şudur: "herhangi bir elektronun, kendisinin dışındaki tüm elektronların ve çekirdeğin oluşturacağı ortalama küresel potansiyel alanı içinde hareket edeceği" kabul edilir [3, 4].

1.2.4. Density Functional Theory "Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi" (DFT)

Ab-initio yöntemindeki enerji ifadesinde az değişiklik yaparak HF yönteminin eksik olan hesaplamalarını tamamlar. Toplam elektron yoğunluğunu (ρ) simgeleyen iki yeni fonksiyon kullanılır. Bu fonksiyonlara "density functionals" yoğunluk fonksiyonelleri denir. DFT, 1964 de Hohenberg ve WalterKohn tarafından ileri sürülen teori ile ortaya çıkmıştır. Bu teoriye göre temel haldeki elektronik enerji, tamamen elektron yoğunluğu ile belirlenebilir. Enerjiyi hesaplamak için orbitallerde bulunan elektronların yoğunluğu önemlidir. Kısacası, bir sistemi enerjisi ile elektron yoğunluğu arasında doğrudan bir ilişki söz konusudur [3, 5, 6].

Ab- initio yöntemine nazaran daha büyük moleküllere de uygulanabildiğinden ve daha az bilgisayar zamanı kullandığından son yıllarda çok popüler olmuştur. DFT yönteminin en cazip ve en önemli özelliği, elektron korelasyonunu hesaplamalarına dahil etmiş olmasıdır. Bir moleküler sistemde, elektron korelasyonu, elektronların birbirlerinin hareketinden etkilenerek birbirlerinden uzak durmalarıdır. Ab initio yöntemleri ile bu olayı hesaplamak çok zordur. Ayrıca DFT ucuz bir yöntemdir. DFT yöntemleri daha

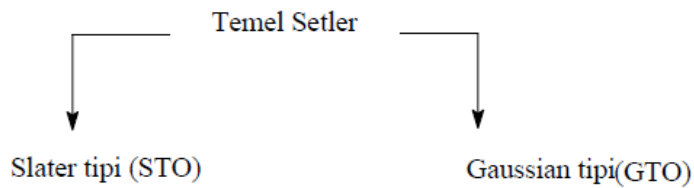
kesin sonuçlar vermesi sebebiyle de geleneksel ab initio yöntemlerinden daha üstündür [7].

1.2.5. Yarı-Deneysel (Semi-Emprical) Moleküler Yöntemler [8]

Ab-initio metotları gelişmiş bilgisayar sistemlerine ve zamana ihtiyaç duyar. Bu sebeple hem daha çabuk hem de güvenilir hesapların yapılabilmesi için bazı yarı-deneysel yöntemler geliştirilmiştir. Bunlarda ab initio metodu gibi kuvantum mekaniği prensiplerini kullanır ancak Schrödinger denklemini çözerken çok fazla miktarda yaklaşımlar yapar. Schrödinger dalga denklemini deney verilerinden türetilen parametreleri içeren ve çözümü daha kolay olan bir forma dönüştürerek çözerler. Etkileşim integralleri için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi oldukça kısalmıştır.

Yarı-deneysel yöntemlerde esas olarak Hückel yöntemi ve PMO vardır. Hückel metodu yalnızca konjuge, düzlemsel π -sistemlerinde kullanılır. Bu teori daha sonraları düzlemsel olmayan moleküller içinde geliştirilmiştir (Extended Hückel).

1.2.6. Temel Setlerin Seçimi ve Adlandırılması [9]



GTO ile integraller daha hızlı hesaplanabildiği için bu tip fonksiyonlar daha popüler olarak kullanılmaktadır. Molekül hesaplamalarında bu AO temel kümeleri optimize edilmelidirler. Elektronik enerjinin varyasyon yöntemine göre minimize edilmesi ile sağlanır. MO'ler bu AO'lerin yani temel fonksiyonların lineer kombinasyonlarından elde edilir. Esas itibarıyla, temel fonksiyonların bir tam seti, tamamen spin orbitallerin temsil edilmesi için kullanılmalıdır ve fonksiyonların sonsuz sayıda kullanımı varyasyonel ifadesinde verilen bir "Hartree-Fock" enerjisi ile sonuçlanır.

Temel setler atomik orbitallerin matematiksel tanımudur. Temel setler şu gruplara ayrılır:

- 1- "Minimal Basis Set" (STO-nG) : STO-3G, STO-4G gibi.
- 2- "Split-Valence Basis Set" : 4-21G, 6-31G gibi.
- 3- "Polarization Basis Set" : 6-31G*, 6-31G** gibi.
- 4- Difüzyon Fonksiyonları : 6-31+G*, 6-31+G** gibi.

1.3. NMR Spektroskopide Kuramsal Hesaplamalar

Bir molekülün magnetik özellikleri arasında, molekülün NMR spektrumunu karakterize eden parametreler özellikle fizik ve kimya alanında çalışanlar için ilgi çekicidir. NMR organik bileşiklerin spektral yapı analizlerinde kullanılan önemlidir. Farklı atom çekirdekleri için çalışabilir: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . NMR kimyasal kaymalar ve aynı zamanda dolaylı spin-spin çiftlenim sabitlerinin kuantum kimyasal hesaplamaları çok önemlidir, çünkü deneysel NMR spektrumun işaretlenmesi açık değildir.

Soğurma yerinin referans protonundan uzaklığına kimyasal kayma denir. Kimyasal kayma etkisi çok küçüktür. Birimi yoktur ve ppm (partspermillion) ile ifade edilir. Kimyasal kayma değeri bir referansa göre bildirilir. En çok kullanılan referans tetrametilsilan ($\text{Si}(\text{CH}_3)_4$) (TMS)'dir. Spektrumdaki diğer protonların kaymaları buna göre değerlendirilir. TMS'nin avantajları şunlardır: i) Kimyasal olarak inerttir, madde ile reaksiyona girmez. ii) Magnetik olarak izotropiktir (Bütün protonların gölgelenmesi eşittir.). iii) Organik çözücülerde çözünür ve uçucudur. iv) Tek ve keskin bir soğurma piki verir. v) Bütün organik protonlardan daha yüksek sahada soğurma yapar (daha fazla gölgelenir). (Silisyum karbondan daha az elektronegatifdir.)

Kimyasal kayma, delta (δ) ölçeği olarak adlandırılır. İzotropik perdeleme

$$\sigma_K = \frac{1}{3} \text{Tr}(\sigma_K) \quad (3)$$

ile verilir. Aynı zamanda bağlı kaymalar da

$$\delta = \sigma_{ref} - \sigma_K \quad (4)$$

olur. Bağlı kaymalar δ bir referans bileşiğin a_{ref} perdelemesine (örneğin, ^1H ve ^{13}C durumunda TMS'ye göre) göre verilir.

Daha elektronegatif atomların varlığı perdelenmeyi azaltarak daha yüksek kayma değerlerine sebep olurlar. Bu etki protona olan mesafe arttıkça azalır. Elektronegatif atomların sayısı arttıkça kayma miktarı da artar. Bu hesaplamalarda Gaussian birim sistemi kullanılır [1, 10].

1.4. GIAO Yöntemi

GIAO yaklaşımı [11], atomik orbitaller $|\chi_\mu\rangle$ için yerel ayar orijinlerinin seçimini içerir. Özellikle bunun anlamı atomik orbitallerde merkezlenmiş karşılığı olan çekirdekte “doğal” ayar orijini olarak seçilir.

Manyetik özelliklerin hesaplanması, genellikle alan-bağımsız $|\chi_\mu(0)\rangle$ fonksiyonlar yerine pertürbasyon-bağımlı temel fonksiyonlarda

$$\chi_\mu(\vec{\mathbf{B}}) = \exp\left[-\frac{i}{2c}\left(\vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{R}}_\mu\right) \cdot \vec{\mathbf{r}}\right] \chi_\mu(\vec{\mathbf{O}}) \quad (5)$$

ile gerçekleştirilir. Burada $\vec{\mathbf{R}}_\mu$, χ_μ temel fonksiyonunun durum vektörüdür ve $\chi_\mu(\vec{\mathbf{O}})$

ise alan bağımsız temel fonksiyonları ifade eder.

Eşitlik (162)'nin alan-bağımlı temel fonksiyonları literatürde ayar-içeren atomik orbitaller (Gauge Including Atomic Orbital) (GIAO'lar orijinal olarak ayar-değişmezliği veya ayar-bağımsız atomik orbitaller diye biraz yanıltıcı olarak isimlendirildi. Bouman ve Hansen [1, 12] tarafından önerilen isim, ayar-içeren atomik orbitaller 90'lı yılların başlarından beri standart olmuştur.) veya London orbitalleri olarak tanımlanır.

1.5. Gaussian 09W Programı

Bu çalışmada, "moleküler mekanik", "*ab-initio* yöntemleri" ve "yarı-deneysel metodları" bünyesinde bulunduran farklı temel setleri içeren Gaussian 09W [13] paket programı kullanılmıştır.

Program kullanılırken öncelikle bir teori düzeyi belirlemek gerekmektedir. Gaussian 09W [13] programında en çok kullanılan metodlar: "HF" Hartree-Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi, "B3LYP" Becke tipi 3-parametrelili Yoğunluk Fonksiyon Teorisi, "MP2", "MP4", "QCISD(T)" olarak bilinmektedir. Bir sonraki adım ise bir temel set kümesi belirlemektir. Temel set fonksiyonları ve teori düzeyleri ile ilgili bilgiler önceki kısımlarda geniş olarak ele alınmıştır.

Gaussian 09W [13] programı ile moleküllerin birçok hesapsal özelliklerine bakılabilir. İlk olarak molekülün en kararlı yapısı elde edilir. Sonra, $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ -NMR spektral verileri, IR titreşim değerleri, moleküler geometrik, termodinamik, geometrik özellikleri, LUMO-HOMO enerjileri ve enerji farkları, yüzey haritaları, dipol moment değerleri, toplam enerjileri hesaplanabilir. Bu hesaplamalar için uyarılmış ya da temel haldeki atomlar kullanılır.

1.6. GaussView

GaussView programı, bileşikler için üç boyutlu tasarımını görsel tasarımını yaparak oluşturan, "input" datalarını meydana getiren ve hesaplamaların geliştirilmesinde başlatıcı olan Gaussian programlarının grafik ara yüzüdür [14]. Bu program moleküllerin şekillerini uygun halde çizerek, istenilen yönlerde atom hareketleri ile farklı bileşikler çizmeye imkan sağlar.

1.7. Moleküler Orbital Teorisi ve HOMO-LUMO Enerjileri

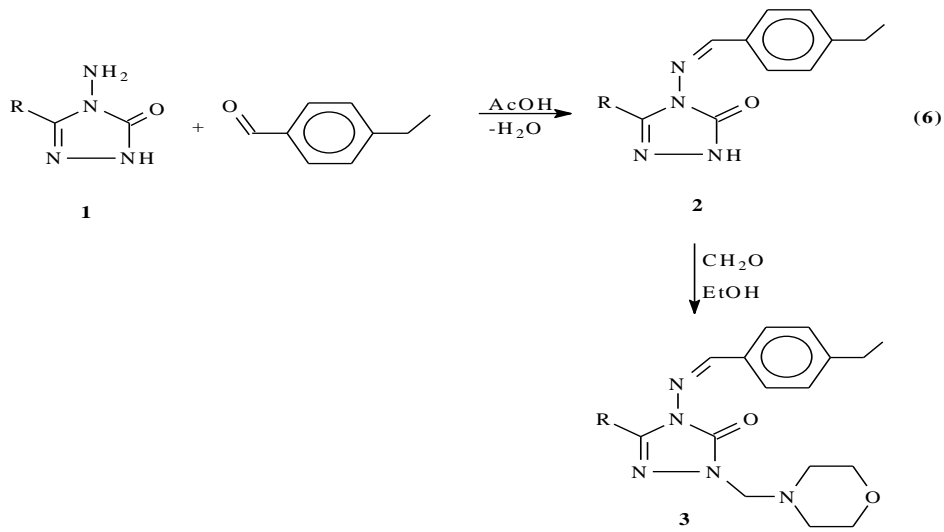
Moleküler orbital teorisinde, birbiri ile aynı olmayan türlerdeki atomik orbitallerin birleşerek yeni tür yani moleküle özgü orbital oluşması esas alınır. Yeni meydana gelen

orbitaller doğrusal olarak uç uca gelerek oluştururlar ve bir dalga fonksiyonu gibi düşünülmüşlerdir.

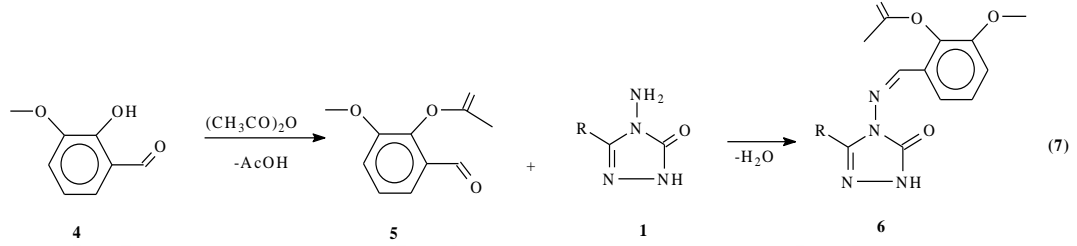
LUMO "Düşük enerjili boş molekül orbital" / HOMO "Yüksek enerjili dolu molekül orbital" ifadeleri kimyasal reaksiyonlar için çok önemlidir. HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE_g) molekülün reaksiyona girme aktifliği bakımından kararlılığının göstergesidir, bu fark ne kadar küçükse moleküllerin reaksiyona girmesi o kadar kolaydır. Kimyasal tepkimelerin çoğu reaksiyona girenler arasında elektron alışverişi ile gerçekleşmektedir. Bu enerji hesaplamaları ile kimyasal bir reaksiyonun gerçekleşip gerçekleşmeyeceği hakkında yorum yapmak mümkündür [15].

1.8. 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevleri Üzerine Yapılan Teorik Çalışmalar

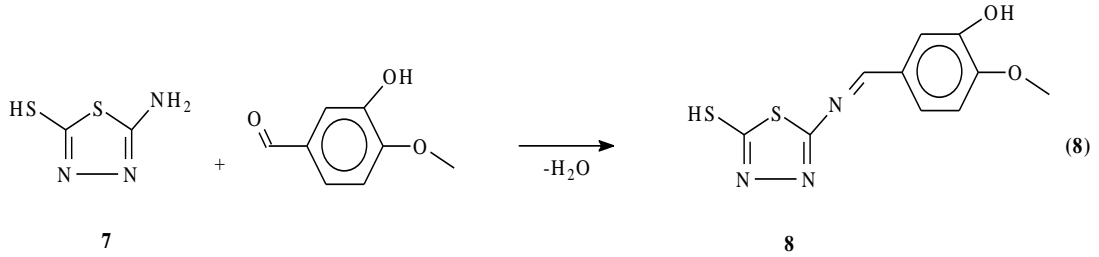
3-Alkil(Aril)-4-amino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (1) bileşiklerinin 4-etilbenzaldehyd ile reaksiyonundan 3-alkil(aril)-4-(4-etilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşikleri sentezlenmiş [16, 17] ve 2 tipi bileşiklerin formaldehit varlığında morfolin ile tepkimesinden Mannich bazı olan yeni 1-morfolin-3-alkil(aril)-4-(4-etilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (3) bileşikleri sentezlenmiştir ve teorik özellikleri incelenmiştir (Denklem 6) [18,19].



2-Asetoksi-3-metoksibenzaldehid (5) 2-hidroksi-3-metoksibenzaldehid (4) ile asetikanhidrid muamelesinden elde edilmiş ve 1 tipi bileşikler ile reaksiyonundan yeni 3-metil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (6) bileşiklerinin sentezi gerçekleştirilmiştir [20] ve teorik özellikleri çalışılmıştır (Denklem 7) [21].

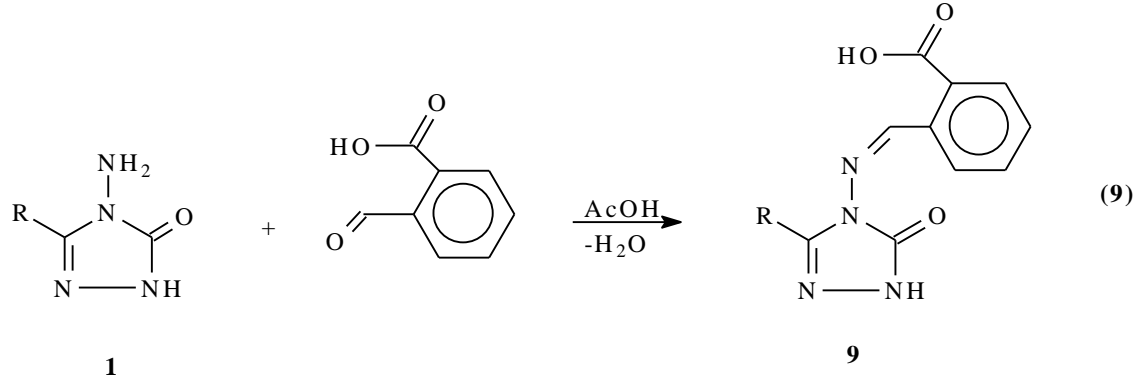


Son yıllarda yapılan başka bir çalışmada, 2-(3-hidroksi-4-metoksibenzilidenamino)-5-merkaptotriazol (8), 3-hidroksi-4-metoksibenzaldehid ile 2-amino-5-merkaptotriazol (7) reaksiyonundan elde edilmiştir (Denklem 8) ve molekülün yapısı, titreşim frekansları, ^1H - ve ^{13}C -NMR kimyasal kaymalarını, dipol momentleri, HOMO-LUMO enerjilerini, iyonlaşma potansiyeli, moleküler yumuşaklık, elektron ilgisi, moleküler sertlik, toplam enerjileri, elektronegatiflik, polarizabiliteleri ve hiperpolarizabilite gibi teorik özellikleri incelenmiştir [22].

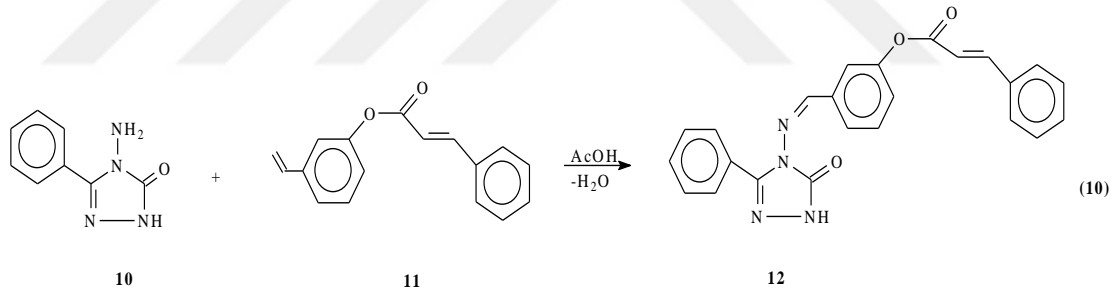


Bir çalışmada 1 tipi bileşiklerin 2-karboksibenzaldehid ile muamelesinden 2-(3-alkil(aril)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometin) benzoik asid (9) Schiff Bazları sentezlenmiş (Denklem 9) ve yapıları IR, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR ve Kütle spektroskopisi teknikleri kullanılarak spektral analizleri yapılmıştır [23]. Ayrıca, 2-(3-metil-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometin)-benzoik asid molekülünün teorik özellikleri (^1H - ve ^{13}C -NMR kimyasal kaymalarını, IR titreşim frekansları, dipol momentleri, HOMO-LUMO enerjilerini, toplam enerjileri, iyonlaşma potansiyeli,

moleküler yumuşaklık, elektron ilgisi, elektronegatiflik, MEP, toplam yoğunluk, elektron yoğunluğu ve elektrostatik potansiyel haritaları) incelenmiştir [24].

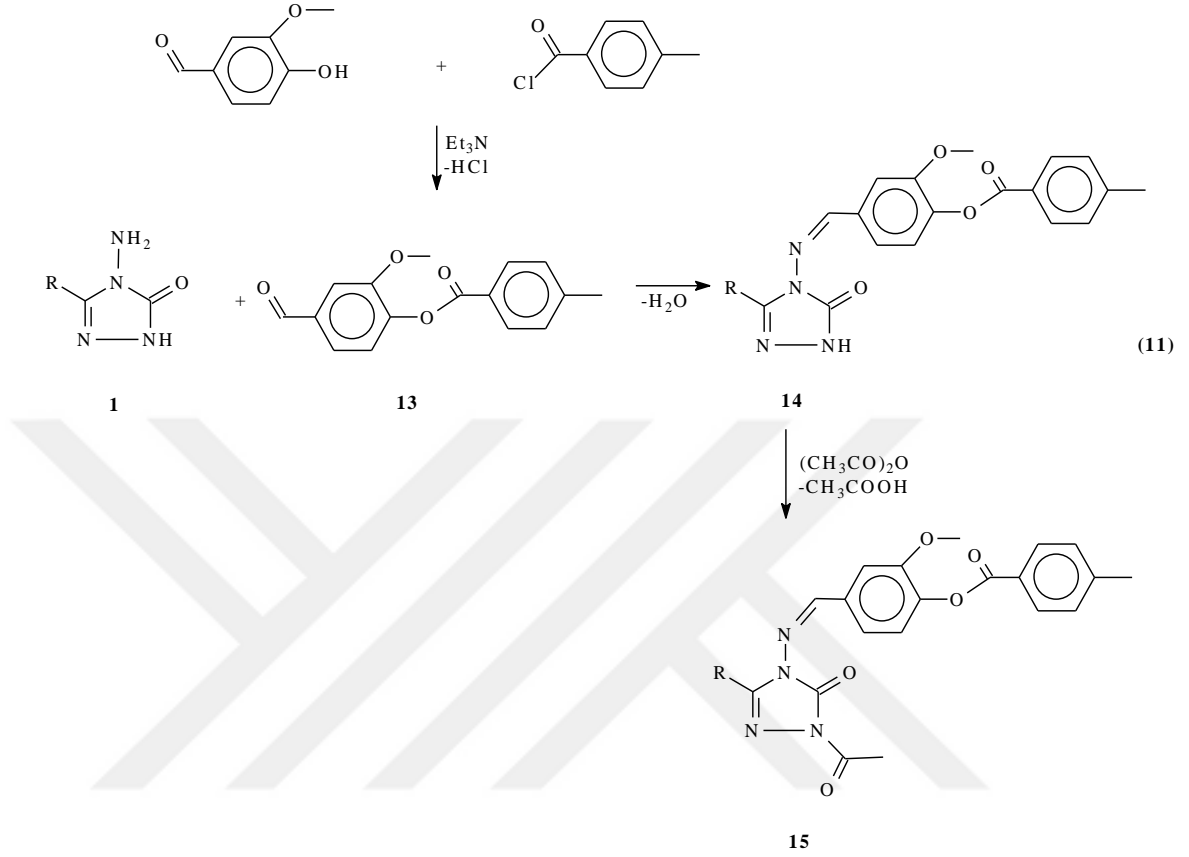


3-Fenil-4-(3-sinamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülü (12), 3-fenil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (10) bileşiğinin 3-sinamoiloksibenzaldehidin (11) reaksiyonundan sentezlenmiştir (Denklem 10) [25]. 12 Bileşiğinin Gaussian 09W programıyla tüm parametreleri hesaplanmıştır [26].

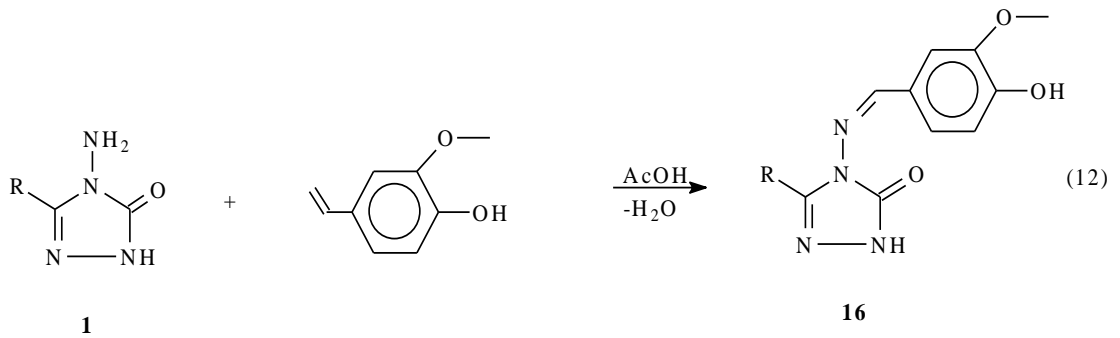


Başka bir çalışmada, Yüksek ve çalışma arkadaşları tarafından 4-metilbenzoil klorürün trietilamin varlığında 3-metoksi-4-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden elde edilen 13 tipi 3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzaldehydin 1 tipi bileşiklerle reaksiyonu sonucu 14 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve bu bileşiklerin asetik anhidrid ile muamelesinden *N*-asetillendirme reaksiyonları incelenerek 15 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikler sentezlenmiştir. Sentezlenen bileşiklerin yapıları IR, Mikro-Raman, NMR ve UV-vis gibi spektroskopik yöntemler ile aydınlatılmıştır. Bu bileşiklerden bazılarının teorik olarak DFT/B3LYP temel set ile titreşim frekansları, HOMO-LUMO, moleküler

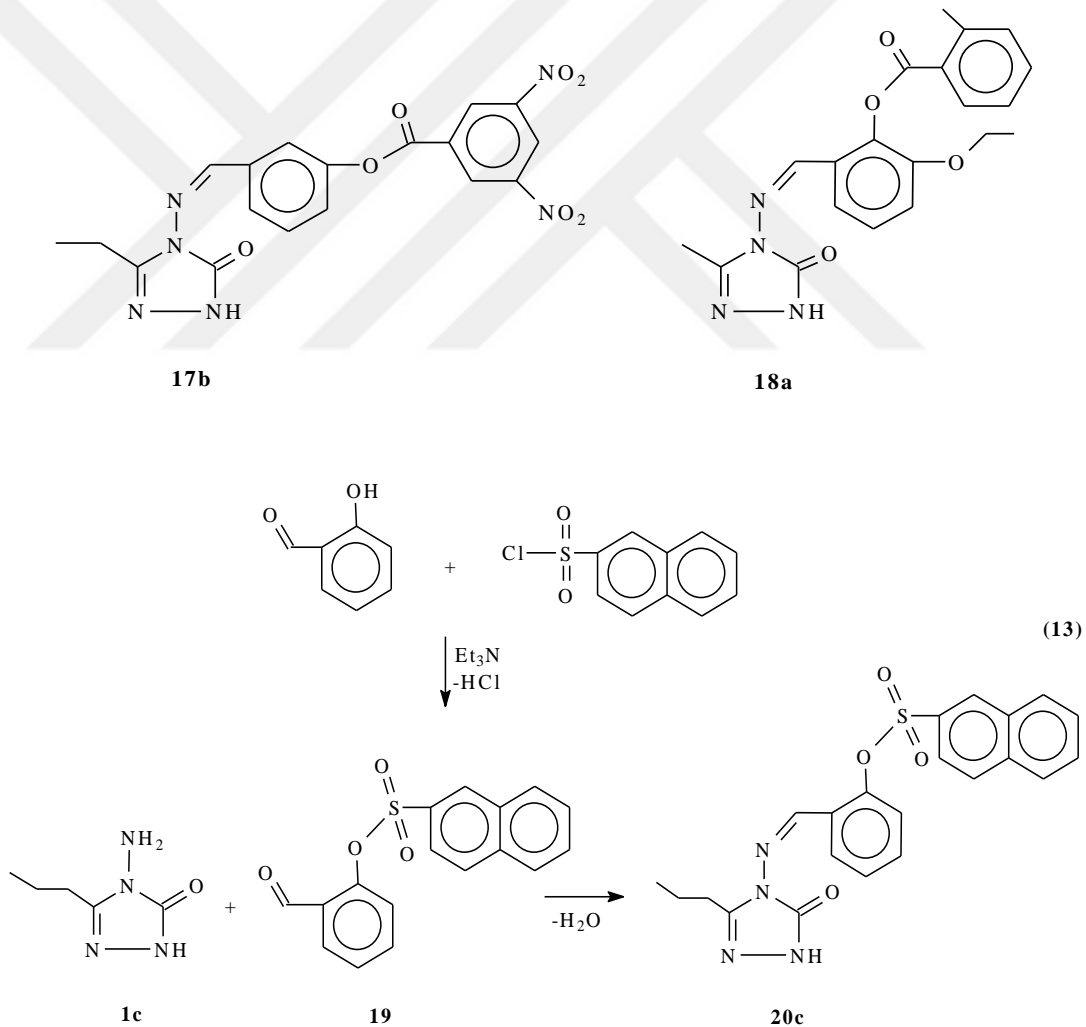
elektrostatik potansiyeli ve doğal bağ orbital (NBO) hesaplamaları yapılmıştır (Denklem 11) [27-29].

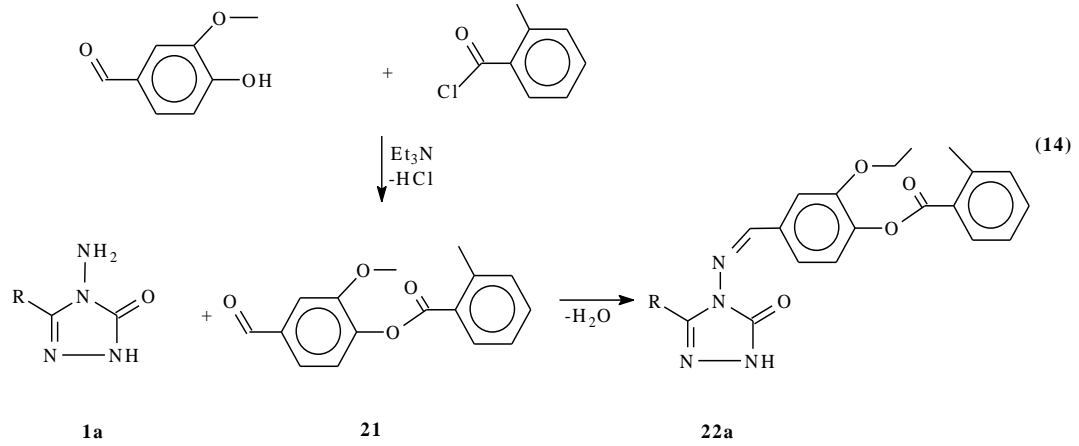


3-Alkil(Aril)-4-(3-metoksi-4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (30) bileşikleri 1 tipi bileşikler ile 3-metoksi-4-hidroksibenzaldehidin reaksiyonundan sentezlenmiştir [30]. Daha sonra 3-metil/n-propil-(3-metoksi-4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin DFT VE HF metotlarının 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak bazı teorik parametreleri incelenmiştir (Denklem 12) [31].



3-Etil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (17b), 3-metil-4-(2-benzoksi-3-etoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (18a) bileşikleri ve 2-naftilsülfonil klorür'ün salisilaldehid ile trietilamin varlığında muamelesinden elde edilen 19 tipi 2-naftilsülfoniloksibenzaldehid ve 1c bileşiğinin reaksiyonundan sentezlenen 3-*n*-propil-4-[2-(2-naftilsülfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (20c) ve trietilaminli ortamda 2-metilbenzoil klorür ve 3-metoksi-4-hidroksibenzaldehidin reaksiyonundan elde edilen 3-metoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzaldehyd (21) ile 3-metil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'un (1a) muamelesinden sentezlenen 22a tipi bileşiklerinin teorik çalışmaları yapılmıştır (Denklem 13 ve 14) [32, 33, 34-37].



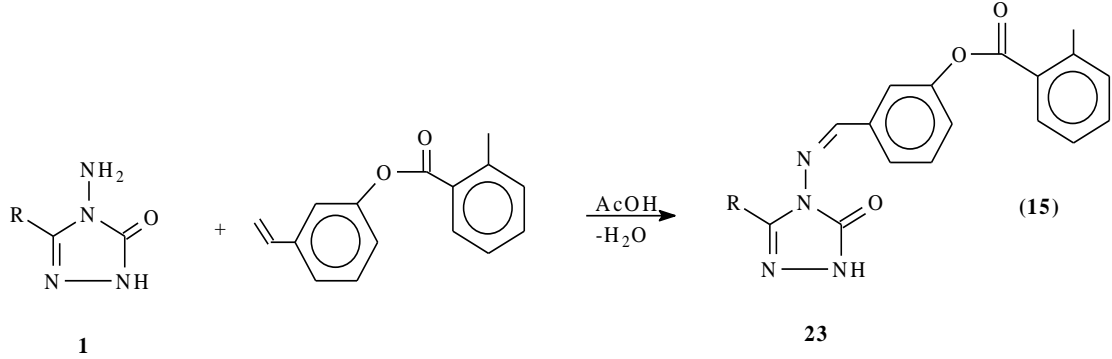


1-Asetil-3-metil-4-(3-benzensulfoniloksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülü, 3-metil-4-(3-benzensulfoniloksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ile asetik anhidridin muamelesiyle sentezlenmiştir [38]. Gaussian 09W programının DFT/HF 6-31G(d,p) temel setleri kullanılarak teorik çalışmaları yapılmıştır. IR, ¹H-NMR ve ¹³C-NMR verileri deneysel ve teorik olarak karşılaştırılmıştır. Ayrıca, her iki metoda göre bağ açıları, bağ uzunlukları, dipol momentleri, HOMO-LUMO enerjileri ve molekülün toplam enerjileri, termodinamik ve elektronik parametreleri, mulliken yükleri hesaplanmış ve moleküler elektron potansiyeli, toplam yoğunluk, elektron potansiyeli, elektrostatik potansiyel haritaları çizilmiştir [39].

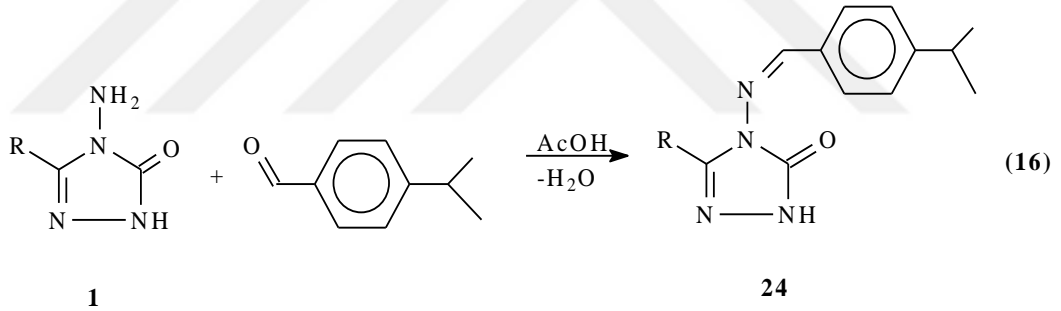
Başka bir çalışma da 1-asetil-3-metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-4-metoksi]-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin teorik çalışması yapılmıştır. Gaussian 09W programda DFT/HF 6-31G(d,p) temel setleri ile molekülün HOMO-LUMO enerjileri, elektronik transisyonu, NBO analizi, toplam statik dipole moment (μ), polarite ($\langle\alpha\rangle$), the anizotropik polarite ($\Delta\alpha$), hiperpolarite ($\langle\beta\rangle$), electronegativite(χ), sertlik(η), moleküler elektron potansiyel haritası (MEP) and Mulliken atom yükleri hesaplanmıştır [40] .

3-*m*-Klorobenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (1) bileşiği ile 3-(2-metilbenzoksi)-benzaldehydin reaksiyonundan 3-(*m*-klorobenzil)-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on elde edilmiştir (Denklem 15) [41]. Bu molekülün B3LYP/631G (d,p) ve HF/631G (d,p) temel setlerine göre teorik hesaplamaları yapılmıştır. Ayrıca, dipole moment (μ), Enerji, HOMO-LUMO,

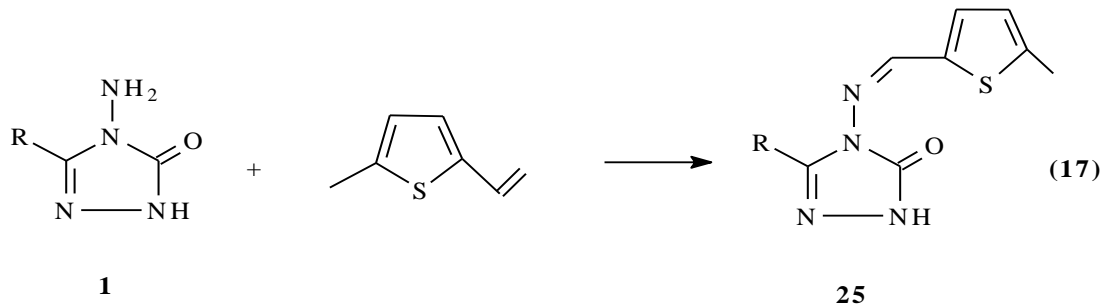
bağ açıları, mulliken atomik yükleri, bağ uzunlukları, termodinamik ve elektronik parametreleri hesaplanarak sonuçlar verilmiştir [42].



3-Alkil(Aril)-4-(4-izopropilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (24) bileşikleri, 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (1) bileşikleri ile 4-izopropilbenzaldehydin reaksiyonundan sentezlenmiştir (Denklem 16) ve dokuz adet yeni bileşiğin teorik çalışması yapılmıştır [43].



3-Alkil(Aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-onlar (1) ile 5-metil-tiyofen-2-karboksialdehyd reaksiyonundan 9 adet 3-alkil(aril)-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (25) bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 17). Bu bileşiklerin antioksidan özelliklerine bakılmıştır [44].



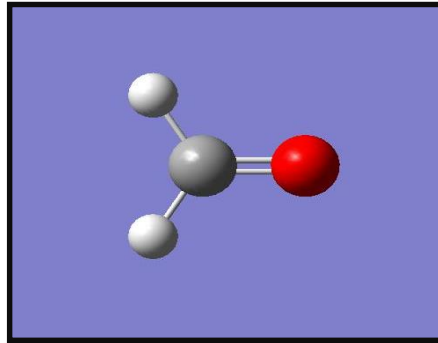
2. MATERYAL, YÖNTEM VE HESAPLAMA METOTLARI

Bu tezde, 9 adet molekülün Gaussian 09W paket programında HF/ DFT(B3LYP) metodları ve 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır. Moleküllerin HOMO-LUMO enerjileri, $E_{LUMO}-E_{HOMO}$ enerji farkı (ΔE_g), mulliken yükleri, dipol momentleri, iyonizasyon potansiyeli (I), kimyasal yumuşaklık (σ), elektronegativite (χ), kimyasal sertlik (η), toplam enerjisi, elektron ilgileri (A), bağ açıları ve bağ uzunlukları hesaplanmıştır. Ayrıca, IR değerlerini belirlemek için veda4f programı kullanılmıştır. DFT-HF metodlarına göre elde edilen teorik IR verileri uygun skala faktörleri ile çarpılmış ve teorik infrared spektrumları çizilmiştir. Bundan başka, $^1\text{H-NMR}$ ve $^{13}\text{C-NMR}$ isotropik kayma değerleri Gaussian 09W programı ile GIAO metodları kullanılarak hesaplanmıştır. Bu hesaplanan spektral veriler ile literatürden elde edilen deneysel değerler [44] ile karşılaştırılmış ve regrasyon analizi yapılmıştır. Son olarak, moleküllerin yüzey haritaları (MEP, Yoğunluk, Elektron yoğunluğu, Elektrostatik potansiyel) belirlenmiştir.

2.1. Gaussian 09W Hesaplama yöntemleri

2.1.1. Molekülün Üç Boyutlu Çizimi

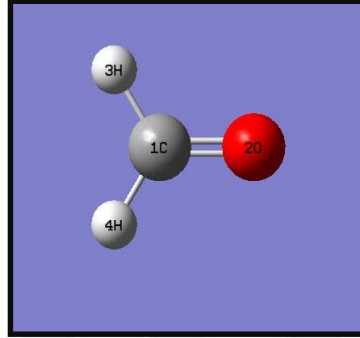
Moleküldeki atomların bağ sayılarına ve konumlarına göre Gaussian 09W programını kolaylaştırmak için **Guass-view** grafiksel arayüz programı kullanılır. Gauss-view programı ile formül grupları, atomların sembolleri ve bağlanma şekilleri mevcuttur buradan çizilmek istenilen moleküle uygun olan formül ve semboller, bağlar kullanılarak üç boyutlu Gauss-view görüntüsü elde edilir.



Şekil 2.1. Gauss-view Görüntüsü

2.1.2. Molekülün Element Sembol ve Numaralarının Gösterimi

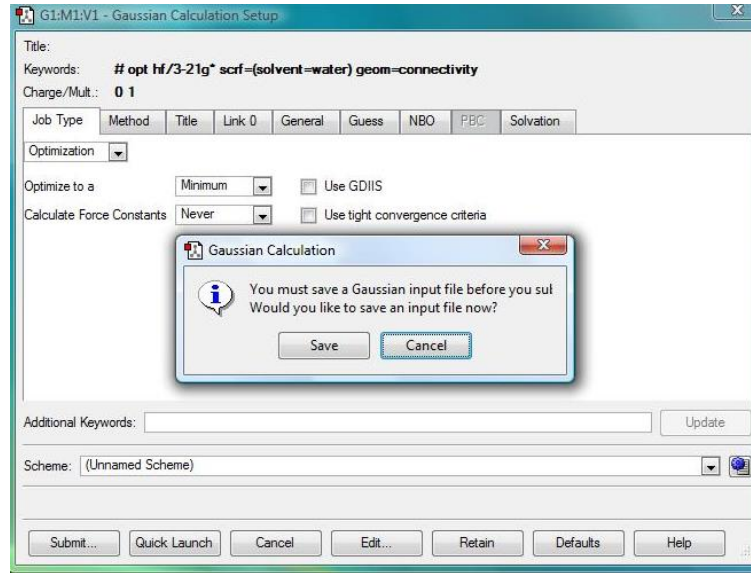
Molekülün Gauss-view görüntüsünün üzerinde sağ tıklanarak view sekmesinden her bir atoma sembol ve numara eklenir.



Şekil 2.2. Numara ve sembol eklenmiş Gauss-view Görüntüsü

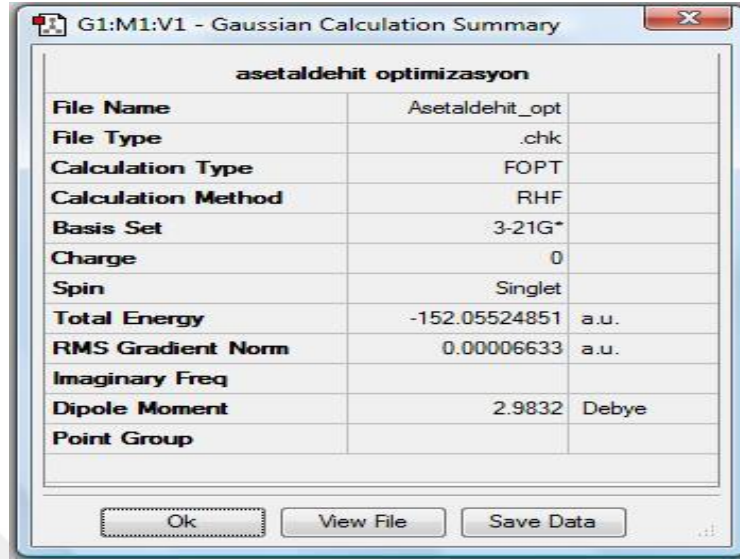
2.1.3. Geometri Optimizasyonu

Moleküllerin üç boyutlu görüntüleri çizildikten sonra Gaussian 09W programında uygun metodlar ve temel set ile moleküllerin en kararlı formlarını elde etmek için optimizasyon işlemi yapılır.



Şekil 2.3. Gaussian Hesaplama Penceresi

Optimizasyon özet verileri optimize olmuş molekülün OPT.LOG dosyası açılarak elde edilebilir.



The screenshot shows a window titled 'G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary' with a sub-header 'asetaldehit optimizasyon'. It contains a table with the following data:

Property	Value	Unit
File Name	Asetaldehit_opt	
File Type	.chk	
Calculation Type	FOPT	
Calculation Method	RHF	
Basis Set	3-21G*	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Total Energy	-152.05524851	a.u.
RMS Gradient Norm	0.00006633	a.u.
Imaginary Freq		
Dipole Moment	2.9832	Debye
Point Group		

At the bottom of the window, there are three buttons: 'Ok', 'View File', and 'Save Data'.

Şekil 2.4. Gaussian Optimize Özet Penceresi

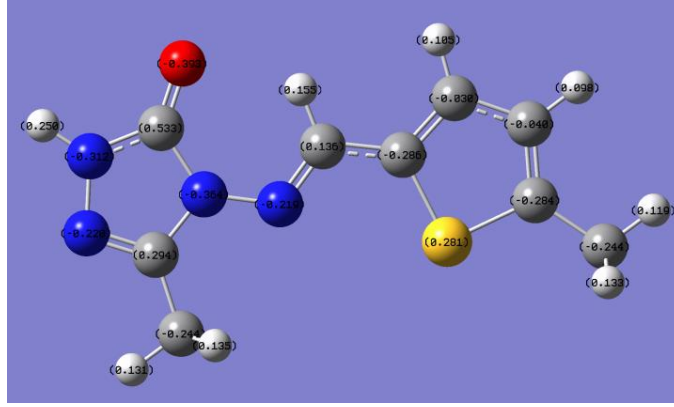
Tüm moleküler hesaplamalar elde edilen optimize yapıdan yola çıkılarak yapılır. Bu pencerede molekülün toplam enerji değerinde elde edilir. Ayrıca dipol moment değeri de yine OPT.LOG dosyası açılarak view file dosyası ile elde edilir.

2.1.4. Bağ Açısı ve Bağ Uzunluğu

Geometrik yapı parametreleri olan bağ açısı ve bağ uzunluğu hesapsal değerleri için OPT.LOG dosyası kullanılır atomlar arasındaki bağ açısını ve uzunluğu belirlemek için istenilen atomlar tıklanır ve sayısal açı ve uzunluk değerlerine ulaşılır.

2.1.5. Mulliken Yük

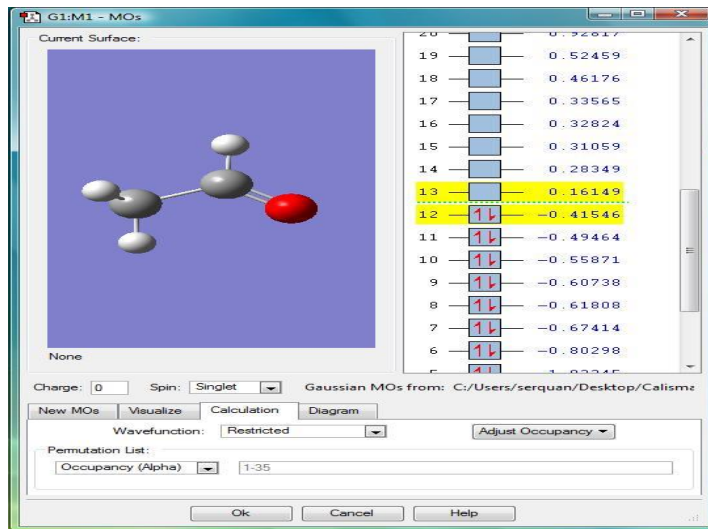
Atomların sahip oldukları mulliken yük değerlerini teorik olarak hesaplamak için OPT.LOG dosyası kullanılır çıkan optimize görüntü üzerinde sağ tıklanarak Result →Charge Distribution tıklanır ve her bir atomun üzerinde yük değerleri çıkar.



Şekil 2.5. Atomların Mulliken Yük Gösterimi

2.1.6. HOMO-LUMO

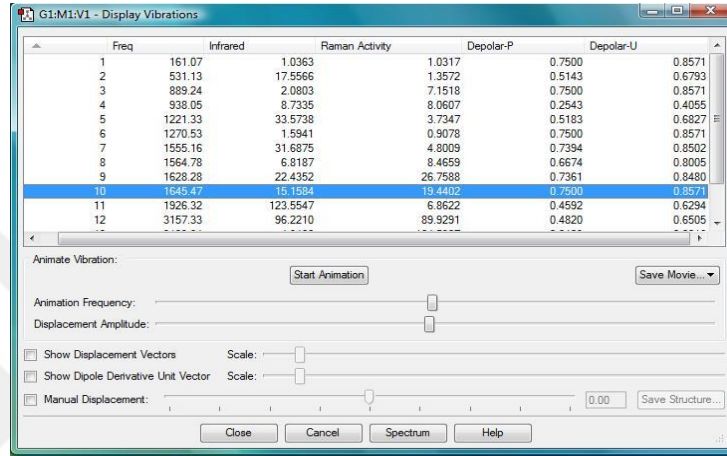
HOMO ile LUMO molekül orbitallerinin şekillerini, molekül orbital diyagramını ve enerji değerlerini hesaplamak Gaussian 09W programı ile mümkündür. Bunun için opt.log dosyası açılır Edit→MOS→New MOS→Update tıklanarak orbital diyagramını elde edilir ve homo lumo enerjileri ait oldukları orbitallerin yanında bulunur. Bu enerji değerleri Hartree cinsinden elde edilir eV cinsinden karşılığı hesaplanarak ΔE_g değerine ulaşılır. Ayrıca bu enerji değerlerini kullanarak molekülün elektronik özellikleri de hesaplanır. Yüksek enerjili dolu moleküler orbital HOMO, düşük enerjili boş moleküler orbital LUMO aşağıda Orbital diyagramında gösterilmiştir.



Şekil 2.6. Molekül orbital diyagramı

2.1.7. IR Titreşimlerinin Hesaplanması

Molekülün IR titreşim frekans değerlerini teorik olarak hesaplamak için Gauss-view görüntüsü kullanılır ve Gaussian 09w' da Job type kısmında Frequency sekmesi seçilir. Sonra veda4f programı kullanılarak verilere ulaşılır. Hesaplama bitince sayısal titreşim değerleri ve spektrumlar elde edilir. IR frekans değerleri her bir yöntemin temel setine göre farklılık gösteren skala faktörleri ile çarpılır.

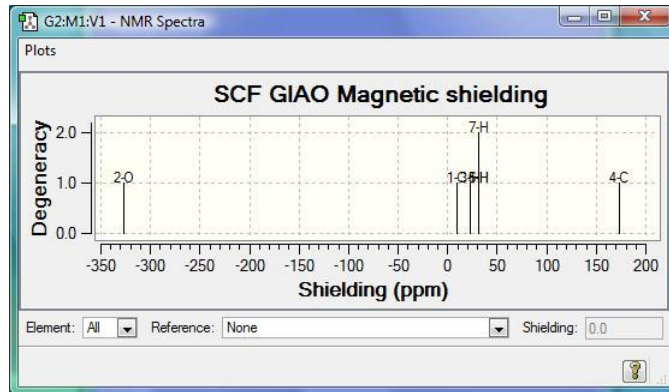


Freq	Infrared	Raman Activity	Depolar-P	Depolar-U
1	161.07	1.0363	1.0317	0.7500
2	531.13	17.5566	1.3572	0.5143
3	889.24	2.0803	7.1518	0.7500
4	938.05	8.7335	8.0607	0.2543
5	1221.33	33.5738	3.7347	0.5183
6	1270.53	1.5941	0.9078	0.7500
7	1555.16	31.6875	4.8009	0.7394
8	1564.78	6.8187	8.4659	0.6674
9	1628.28	22.4352	26.7588	0.7361
10	1645.47	15.1584	19.4402	0.7500
11	1926.32	123.5547	6.8622	0.4592
12	3157.33	96.2210	89.9291	0.4820

Şekil 2.7. Frekans değerleri penceresi

2.1.8. ^{13}C ve ^1H -NMR Kimyasal Kayma Değerlerinin Hesaplanması

Gauss-view görüntüsü kullanılır ve Gaussian 09W ile hesaplamaya başlarken Job type kısmında NMR sekmesi seçilir, eğer çözücü (DMSO, Su, THF, CCl_4 gibi) kullanılmışsa solvation sekmesinden uygun çözücü seçilir ve hesaplama yapılır. NMR.OPT.LOG dosyası açılarak element ve referans kısmı hangi NMR değerine bakılacaksa yazılır ve değerler elde edilir.



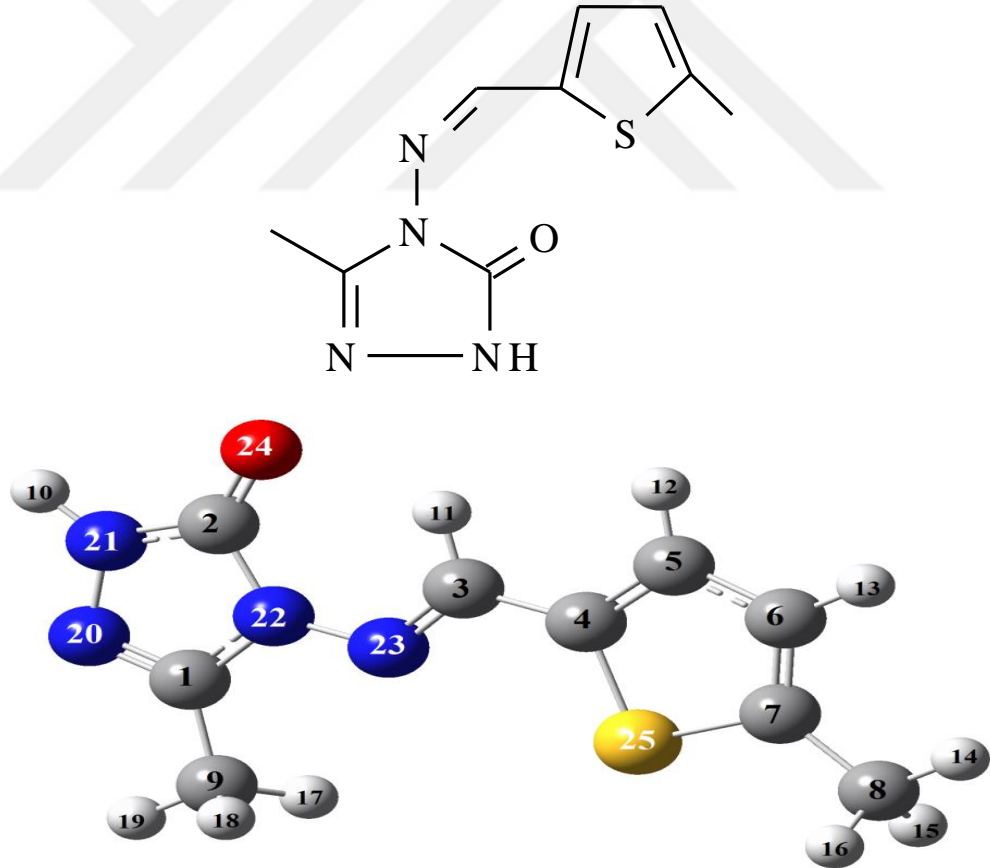
Şekil 2.8. Gaussian NMR Spektrumu

3. BULGULAR

3.1. Bileşiklerin Teorik Verileri

9 adet bileşiğin $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ -NMR ve IR spektral teorik verileri DFT(B3LYP)/HF metodlarına göre 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak hesaplanmıştır ve deneysel değerler ile mukayese edilmiştir. Ayrıca, 26-34 moleküllerinin dipol momentleri, geometrik özellikleri, mulliken yükleri, moleküllerin toplam enerjileri, LUMO-HOMO enerjileri, termodinamik, elektronik özellikleri, yüzey haritaları aşağıda şekiller ve tablolar halinde verilmiştir:

3.1.1. 3-Metil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (26)



Şekil 3.1. 26 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

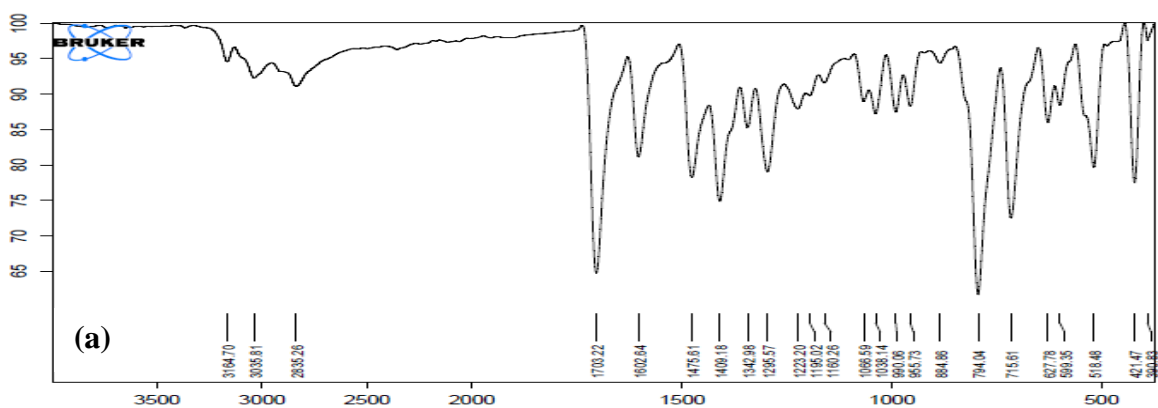
Tablo 3.1. 26 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	145.68	142.4	3.28	145.99	-0.31	156.64	-10.96	157.39	-11.71
C2	151.99	146.67	5.32	147.54	4.45	159.33	-7.34	159.39	-7.40
C3	149.67	142.43	7.24	143.21	6.46	156.92	-7.25	157.31	-7.64
C4	136.53	146.38	-9.85	144.49	-7.96	148.38	-11.85	144.62	-8.09
C5	134.83	132.82	2.01	135.06	-0.23	142.98	-8.15	145.35	-10.52
C6	127.45	125.9	1.55	126.93	0.52	130.21	-2.76	130.21	-2.76
C7	144.54	149.92	-5.38	152.32	-7.78	160.29	-15.75	161.11	-16.57
C8	16.08	15.37	0.71	15.26	0.82	21.3	-5.22	20.24	-4.16
C9	11.66	11.15	0.51	11.14	0.52	18.19	-6.53	17.37	-5.71
H10	11.74	6.13	5.61	6.59	5.15	6.73	5.01	6.44	5.30
H11	9.71	9.74	-0.03	9.69	0.02	10.05	-0.34	9.32	0.39
H12	7.44	6.61	0.83	6.81	0.63	7.24	0.2	6.82	0.62
H13	6.86	6.38	0.48	6.50	0.36	6.73	0.13	6.25	0.61
H14	2.47	1.99	0.48	2.23	0.24	2.57	-0.1	2.04	0.43
H15	2.47	2.17	0.3	2.23	0.24	2.59	-0.12	1.94	0.53
H16	2.47	2.17	0.3	2.23	0.24	2.59	-0.12	1.94	0.53
H17	2.17	1.93	0.24	2.00	0.17	2.49	-0.32	1.88	0.29
H18	2.17	1.93	0.24	2.00	0.17	2.49	-0.32	1.89	0.28
H19	2.17	1.59	0.58	1.66	0.51	2.32	-0.15	1.67	0.50

Tablo 3.2. 26 Bileşiğinin eşğin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ CNNC(55), τ CCCN(26)	28	24
τ CCNN(15), τ CCCN(15), τ NCCN(17), δ CCN(13)	44	48
τ CCCN(16), τ CCNN(15), τ NCCN(11), δ CNN(12), δ CCN(20)	57	56
τ CCCN(38), τ CNNC(10), δ CCN(10)	76	80
τ HCCC(78)	95	100
τ CNNC(46)	99	104
δ CCC(10), τ CCCN(28), τ CNNC(19), τ NCCN(21)	129	129
δ CNN(13), δ CCC(20), δ NNC(16)	158	158
δ CNN(11), δ CCN(21)	194	185
τ CNNC(11), τ CCCN(28), τ SCCC(12), τ CCSC(18)	199	195
τ CNNC(32), δ CCC(15)	222	214
δ CCS(10), τ HCCN(20)	244	243
τ CCCN(25), τ CCNN(12), τ CCSC(13), τ NCCN(24)	276	264
δ CCS(56)	296	296
τ HNNC(11), τ NNCN(18)	342	340
δ CCC(24)	363	368
δ CCC(10), τ CCNN(17), τ CCSC(12)	386	391
δ OCN(12), δ CCC(17)	410	412
τ HNNC(56), τ ONNC(11)	464	460
τ SCCC(38), τ CCSC(17)	510	521
ν CC(13), δ SCC(38)	537	538
δ OCN(25), δ CNN(11), δ NNC(10)	564	566
τ CCCN(42), τ SCCC(16)	566	571
δ CCN(10), ν CC(18)	599	602
ν SC(70)	649	655
δ SCC(24), δ CCC(50)	674	683
τ HCCN(11), τ NNCN(29), τ ONNC(11), τ CNNC(16)	689	714
τ ONNC(28), δ CCC(22)	724	727
τ ONNC(40), δ CCC(14)	726	769
τ HCCN(21)	764	782
τ HCCC(88)	785	797
δ CNN(13), δ NNC(12), τ HCCN(10), ν NC(10)	788	822
ν NN(21), δ CNN(30)	806	829
τ HCCC(81)	867	912
δ NNC(14), τ HCCN(10), ν CC(48)	929	934

τ HCCC(38), δ HCH(14)	959	970
τ HCNN(91)	969	1020
δ NNC(23), ν CC(37)	1003	1024
δ HCH(19), τ HCCC(63)	1024	1031
ν NN(25), δ HCC(25)	1036	1048
ν NN(10), δ HCC(31)	1042	1063
τ HCCC(20), δ HCH(11), τ HCCN(12)	1060	1083
τ HCCN(21), τ CCCN(10) ν NN(11)	1091	1118
ν CC(55)	1138	1134
ν NC(22), ν NN(17), δ CNN(13)	1170	1194
δ HCC(54), ν CC(13)	1204	1225
δ CCC(11), ν CC(31)	1214	1233
δ HCC(43)	1242	1258
ν NN(13), δ CNN(13), δ HCC(10), τ HCCN(14)	1256	1304
δ HCC(10), δ HCN(23), ν CC(22)	1301	1326
τ HCCN(41), ν CC(10)	1313	1346
δ HCN(21), ν NC(10), δ HNN(15)	1342	1370
δ HNN(51)	1355	1390
δ HCH(62)	1364	1394
δ HCH(95)	1374	1402
ν NC(32)	1409	1439
δ HCH(87)	1428	1447
δ HCH(80)	1434	1449
δ HCH(61)	1443	1457
δ HCH(72), τ HCCN(14)	1452	1463
δ HCH(69), δ HCCC(15)	1465	1474
δ HCH(11), ν CC(56)	1475	1508
ν CC(55), δ HCC(20)	1539	1593
ν NC(65)	1587	1684
ν NC(71)	1598	1705
ν OC(72), ν NC(13)	1746	1771
ν CH(93)	2932	2874
ν CH(100)	2942	2875
ν CH(89)	2957	2907
ν CH(100)	2979	2924
ν CH(89)	2997	2931
ν CH(89)	3006	2942
ν CH(92)	3011	2946
ν CH(89)	3022	2959
ν CH(96)	3051	3031
ν CH(94)	3092	3036
ν CH(96)	3106	3045
ν NH(100)	3566	3560





Şekil 3.2. 26 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)) (b) ve HF 6-311G(d,p) (c)) IR spektrumları

Tablo 3.3. 26 Bileşiğinin hesaplanan bağ açıları (A^0)

Bağ Açılıarı	B3LYP	HF	Bağ Açılıarı	B3LYP	HF
N(20)-C(1)-N(22)	111.375	111.245	N(22)-N(23)-C(3)	118.949	119.976
N(20)-N(21)-C(2)	114.387	113.693	N(23)-C(3)-H(11)	122.550	123.137
N(20)-N(21)-H(10)	120.444	120.977	H(11)-C(3)-C(4)	117.227	116.844
H(10)-N(21)-C(2)	125.169	125.330	C(3)-C(4)-C(5)	126.262	125.372
N(21)-C(2)-O(24)	130.120	129.640	C(3)-C(4)-S(27)	123.093	123.527
O(24)-C(2)-N(22)	128.676	128.479	C(4)-C(5)-C(6)	113.320	113.085
N(20)-C(1)-C(9)	125.199	125.507	C(4)-C(5)-H(12)	122.531	123.092
N(22)-C(1)-C(9)	123.426	123.248	H(12)-C(5)-C(6)	124.149	123.823
C(1)-C(9)-H(17)	110.923	110.438	C(5)-C(6)-H(13)	123.841	123.637
C(1)-C(9)-H(18)	110.923	110.435	H(13)-C(6)-C(7)	122.713	123.339
C(1)-C(9)-H(19)	108.561	108.446	C(6)-C(7)-C(8)	128.083	127.877
H(17)-C(9)-H(18)	107.298	107.851	C(7)-C(8)-H(14)	109.865	109.846
H(18)-C(9)-H(19)	109.559	109.834	C(7)-C(8)-H(15)	111.719	111.186
H(17)-C(9)-H(19)	109.560	109.834	C(7)-C(8)-H(16)	111.727	111.184
N(21)-C(2)-N(22)	101.204	101.881	H(14)-C(8)-H(15)	107.950	108.293
N(21)-N(20)-C(1)	104.726	105.041	H(14)-C(8)-H(16)	107.951	108.293
C(2)-N(22)-N(23)	130.341	130.735	H(15)-C(8)-H(16)	107.470	107.937

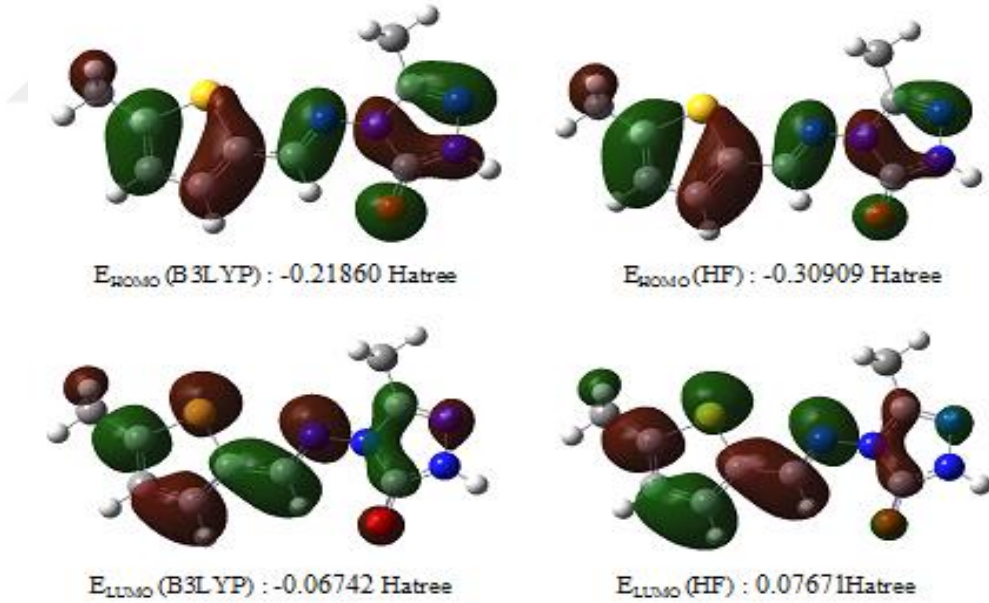
Tablo 3.4. 26 Bileşiğinin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.485	1.487	14 C(3)-H(11)	1.087	1.075
2 C(1)-N(20)	1.296	1.266	15 C(3)-C(4)	1.441	1.457
3 C(1)-N(22)	1.388	1.379	16 C(4)-C(5)	1.374	1.348
4 N(20)-N(21)	1.380	1.370	17 C(4)-S(25)	1.751	1.736
5 N(21)-C(2)	1.368	1.345	18 C(5)-C(6)	1.418	1.431
6 C(2)-N(22)	1.418	1.487	19 C(5)-H(12)	1.082	1.074

7	C(2)-O(24)	1.216	1.196	20	C(6)-H(13)	1.082	1.073
8	N(22)-N(23)	1.369	1.362	21	C(6)-C(7)	1.370	1.347
9	N(21)-H(10)	1.005	0.990	22	C(7)-S(25)	1.746	1.734
10	C(9)-H(17)	1.092	1.083	23	C(7)-C(8)	1.497	1.500
11	C(9)-H(18)	1.092	1.083	24	C(8)-H(14)	1.091	1.083
12	C(9)-H(19)	1.089	1.080	25	C(8)-H(15)	1.094	1.085
13	N(23)-C(3)	1.288	1.258	26	C(8)-H(16)	1.094	1.085

Tablo 3.5. 26 Bileşiğinin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.294	0.396	H14	0.119	0.106
C2	0.533	0.729	H15	0.133	0.118
C3	0.136	0.212	H16	0.133	0.118
C4	-0.286	-0.296	H17	0.135	0.125
C5	-0.030	-0.034	H18	0.135	0.125
C6	-0.040	-0.066	H19	0.131	0.126
C7	-0.284	-0.288	N20	-0.220	-0.285
C8	-0.244	-0.178	N21	-0.312	-0.380
C9	-0.244	-0.181	N22	-0.364	-0.468
H10	0.250	0.260	N23	-0.219	-0.266
H11	0.155	0.177	O24	-0.393	-0.531
H12	0.105	0.111	S25	0.281	0.267
H13	0.098	0.102			



Şekil 3.3. 26 Bileşiğinin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.6. 26 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-0.4517	-0.2890
μ_y	-0.5713	-1.2570
μ_z	-0.0427	0.2985
μ_{Toplam}	0.7296	1.3239

Tablo 3.7. 26 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan enerji değerleri

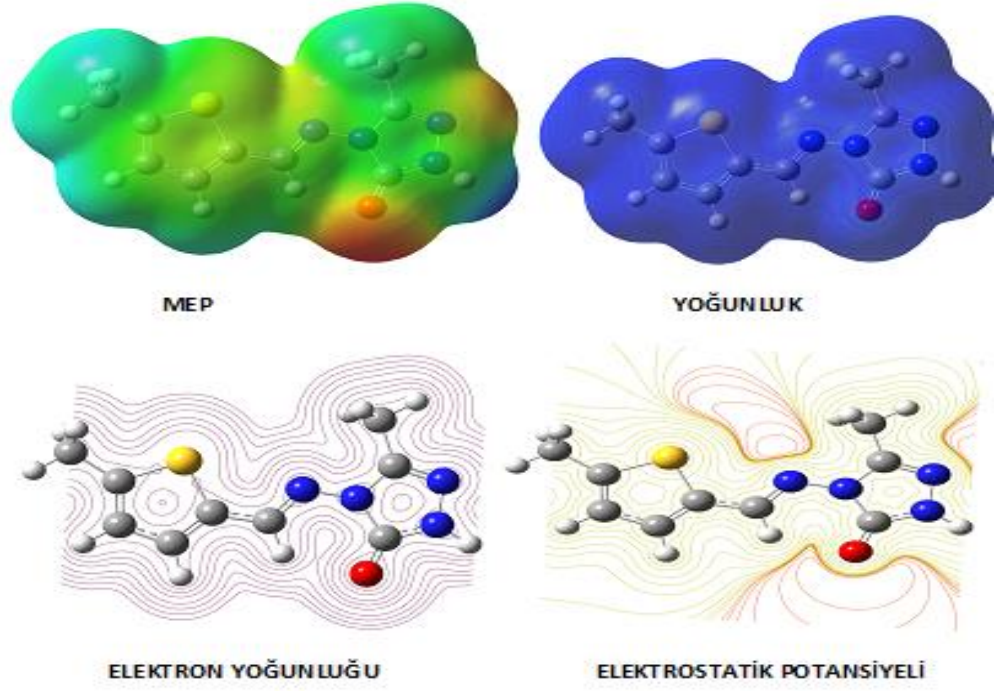
Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1041.556811	-1036.934049

Tablo 3.8. 26 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan elektronik özellikleri

	Hatree	eV	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.06742	-1.83455	-42.3063	-177.011
HOMO	-0.2186	-5.94826	-137.172	-573.934
A elektron ilgisi	0.06742	1.83455	42.3063	177.011
I İyonlaşma potansiyeli	0.2186	5.94826	137.172	573.934
ΔE Enerji Farkı	0.15118	4.11371	94.8659	396.923
X electronegativite	0.14301	3.8914	89.7392	375.473
Pi Kimyasal Potansiyel	-0.14301	-3.8914	-89.7392	-375.473
Ω Elektrofilik İndex	0.000772978	0.02103	0.48505	2.02945
IP Nucleofilik index	-0.01081013	-0.29415	-6.78339	-28.382
S Moleculer Yumuşaklık	13.2293	359.978	8301.4	34733.4
η Moleculer Sertlik	0.07559	2.05686	47.433	198.462

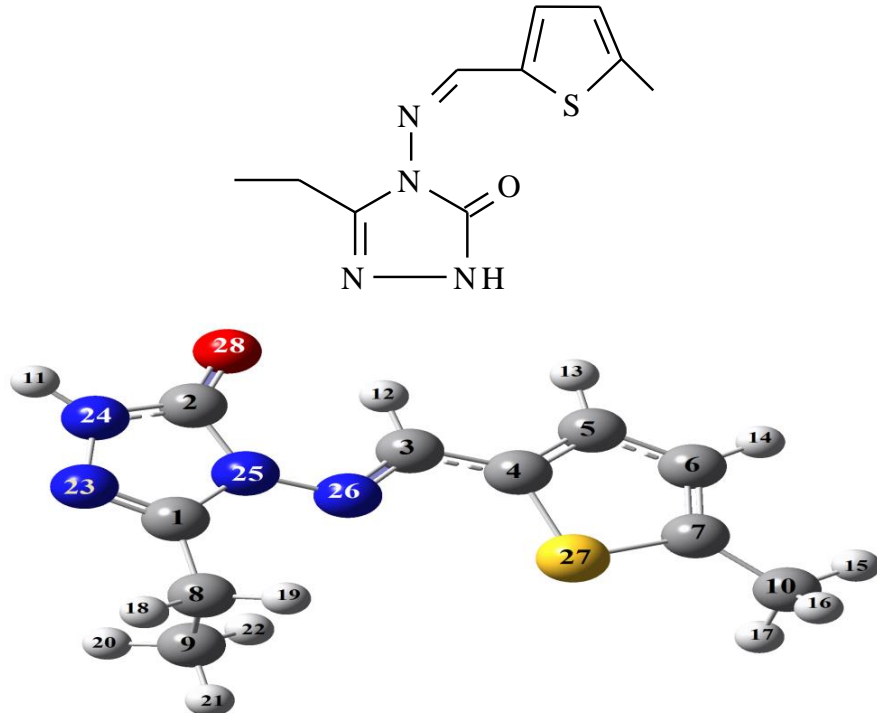
Tablo 3.9. 26 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.06750	0.06895
B	0.01210	0.01223
C	0.01029	0.01042
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	1.40645	1.43669
B	0.25221	0.25489
C	0.21442	0.21706
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	124.921	133.524
Total	126.698	135.301
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	46.678	43.202
Total	52.639	49.164
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.096	42.096
Dönel	32.713	32.669
Titreşim	47.114	43.778
Total	121.924	118.544
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.187550	0.202068
Enerjide Termal Düzeltme	0.201906	0.215617
Entalpide Termal Düzeltme	0.202850	0.216561
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.144920	0.160237
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1041.369262	-1036.731981
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1041.354906	-1036.718433
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1041.353962	-1036.717488
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1041.411891	-1036.773812
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	117.68958	126.79967



Şekil 3.4. 26 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.2. 3-Etil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (27)



Şekil 3.5. 27 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

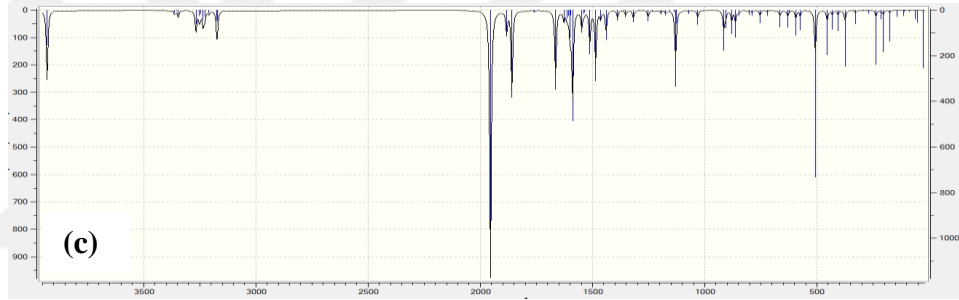
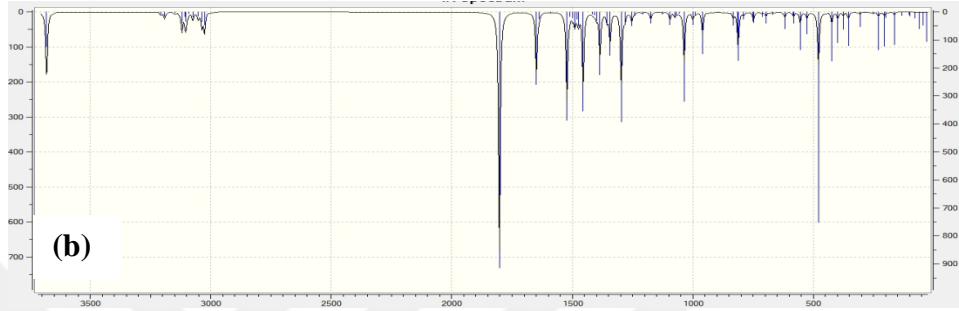
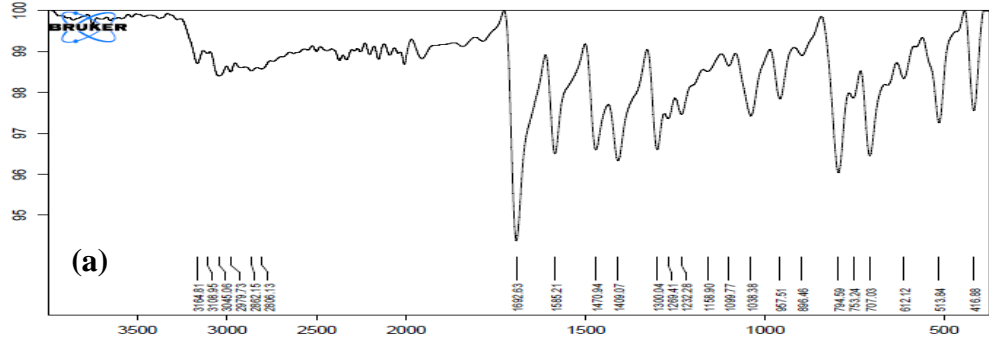
Tablo 3.10. 27 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	148.33	170.5	-22.17	171.89	-23.56	162.41	-14.08	162.41	-14.08
C2	152.92	170.39	-17.47	171.35	-18.43	160.43	-7.51	160.43	-7.51
C3	149.50	164.96	-15.46	165.77	-16.27	158.20	-8.7	158.20	-8.70
C4	136.65	167.50	-30.85	165.28	-28.63	145.60	-8.95	145.60	-8.95
C5	134.78	153.09	-18.31	155.57	-20.79	146.17	-11.39	146.17	-11.39
C6	127.45	145.94	-18.49	147.01	-19.56	131.08	-3.63	131.08	-3.63
C7	145.55	173.86	-28.31	176.93	-31.38	162.05	-16.5	162.05	-16.50
C8	19.22	34.51	-15.29	34.44	-15.22	21.14	-1.92	21.14	-1.92
C9	10.67	40.74	-30.07	40.85	-30.18	25.84	-15.17	25.84	-15.17
C10	16.08	30.58	-14.5	30.43	-14.35	17.43	-1.35	17.43	-1.35
C11	11.77	7.50	4.27	7.98	3.79	7.15	4.62	7.15	4.62
C12	9.70	11.01	-1.31	10.95	-1.25	10.06	-0.36	10.06	-0.36
C13	7.44	7.60	-0.16	7.82	-0.38	7.54	-0.1	7.54	-0.10
H14	6.86	7.30	-0.44	7.51	-0.65	6.98	-0.12	6.98	-0.12
H15	2.46	3.01	-0.55	3.19	-0.73	2.76	-0.3	2.76	-0.30
H16	2.46	3.19	-0.73	3.27	-0.81	2.67	-0.21	2.67	-0.21
H17	2.46	3.20	-0.74	3.27	-0.81	2.67	-0.21	2.67	-0.21
H18	2.56	3.03	-0.47	3.09	-0.53	2.55	0.01	2.55	0.01
H19	2.56	3.52	-0.96	3.57	-1.01	2.91	-0.35	2.91	-0.35
H20	1.16	2.29	-1.13	2.2	-1.04	1.74	-0.58	1.74	-0.58
H21	1.16	1.81	-0.65	1.95	-0.79	1.54	-0.38	1.54	-0.38
H22	1.16	1.62	-0.46	1.65	-0.49	1.24	-0.08	1.24	-0.08

Tablo 3.11. 27 Bileşiğinin teorik IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ CNNC(55), τ CCCN(26)	28	24
τ CCNN(15), τ CCCN(15), τ NCCN(17), δ CCN(13)	44	48
τ CCCN(16), τ CCNN(15), τ NCCN(11), δ CNN(12), δ CCN(20)	57	56
τ CCCN(38), τ CNNC(10), δ CCN(10)	76	80
τ HCCC(78)	95	100
τ CNNC(46)	99	104
δ CCC(10), τ CCCN(28), τ CNNC(19), τ NCCN(21)	129	129
δ CNN(13), δ CCC(20), δ NNC(16)	158	158
δ CNN(11), δ CCN(21)	194	185
τ CNNC(11), τ CCCN(28), τ SCCC(12), τ CCSC(18)	199	195
τ CNNC(32), δ CCC(15)	222	214
δ CCS(10), τ HCCN(20)	244	243
τ CCCN(25), τ CCNN(12), τ CCSC(13), τ NCCN(24)	276	264
δ CCS(56)	296	296
τ HNNC(11), τ NNCN(18)	342	340
δ CCC(24)	363	368
δ CCC(10), τ CCNN(17), τ CCSC(12)	386	391
δ OCN(12), δ CCC(17)	410	412
τ HNNC(56), τ ONNC(11)	464	460
τ SCCC(38), τ CCSC(17)	510	521
ν CC(13), δ SCC(38)	537	538
δ OCN(25), δ CNN(11), δ NNC(10)	564	566
τ CCCN(42), τ SCCC(16)	566	571
δ CCN(10), ν CC(18)	599	602
ν SC(70)	649	655
δ SCC(24), δ CCC(50)	674	683
τ HCCN(11), τ NNCN(29), τ ONNC(11), τ CNNC(16)	689	714
τ ONNC(28), δ CCC(22)	724	727
τ ONNC(40), δ CCC(14)	726	769

τ HCCN(21)	764	782
τ HCCC(88)	785	797
δ CNN(13), δ NNC(12), τ HCCN(10), ν NC(10)	788	822
ν NN(21), δ CNN(30)	806	829
τ HCCC(81)	867	912
δ NNC(14), τ HCCN(10), ν CC(48)	929	934
τ HCCC(38), δ HCH(14)	959	970
τ HCNN(91)	969	1020
δ NNC(23), ν CC(37)	1003	1024
δ HCH(19), τ HCCC(63)	1024	1031
ν NN(25), δ HCC(25)	1036	1048
ν NN(10), δ HCC(31)	1042	1063
τ HCCC(20), δ HCH(11), τ HCCN(12)	1060	1083
τ HCCN(21), τ CCCN(10) ν NN(11)	1091	1118
ν CC(55)	1138	1134
ν NC(22), ν NN(17), δ CNN(13)	1170	1194
δ HCC(54), ν CC(13)	1204	1225
δ CCC(11), ν CC(31)	1214	1233
δ HCC(43)	1242	1258
ν NN(13), δ CNN(13), δ HCC(10), τ HCCN(14)	1256	1304
δ HCC(10), δ HCN(23), ν CC(22)	1301	1326
τ HCCN(41), ν CC(10)	1313	1346
δ HCN(21), ν NC(10), δ HNN(15)	1342	1370
δ HNN(51)	1355	1390
δ HCH(62)	1364	1394
δ HCH(95)	1374	1402
ν NC(32)	1409	1439
δ HCH(87)	1428	1447
δ HCH(80)	1434	1449
δ HCH(61)	1443	1457
δ HCH(72), τ HCCN(14)	1452	1463
δ HCH(69), δ HCCC(15)	1465	1474
δ HCH(11), ν CC(56)	1475	1508
ν CC(55), δ HCC(20)	1539	1593
ν NC(65)	1587	1684
ν NC(71)	1598	1705
ν OC(72), ν NC(13)	1746	1771
ν CH(93)	2932	2874
ν CH(100)	2942	2875
ν CH(89)	2957	2907
ν CH(100)	2979	2924
ν CH(89)	2997	2931
ν CH(89)	3006	2942
ν CH(92)	3011	2946
ν CH(89)	3022	2959
ν CH(96)	3051	3031
ν CH(94)	3092	3036
ν CH(96)	3106	3045
ν NH(100)	3566	3560



Şekil 3.6. 27 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)) (b) ve HF 6-311G(d,p) (c) IR spektrumları

Tablo 3.12. 27 Bileşiğinin hesaplanan bağ açıları (A^0)

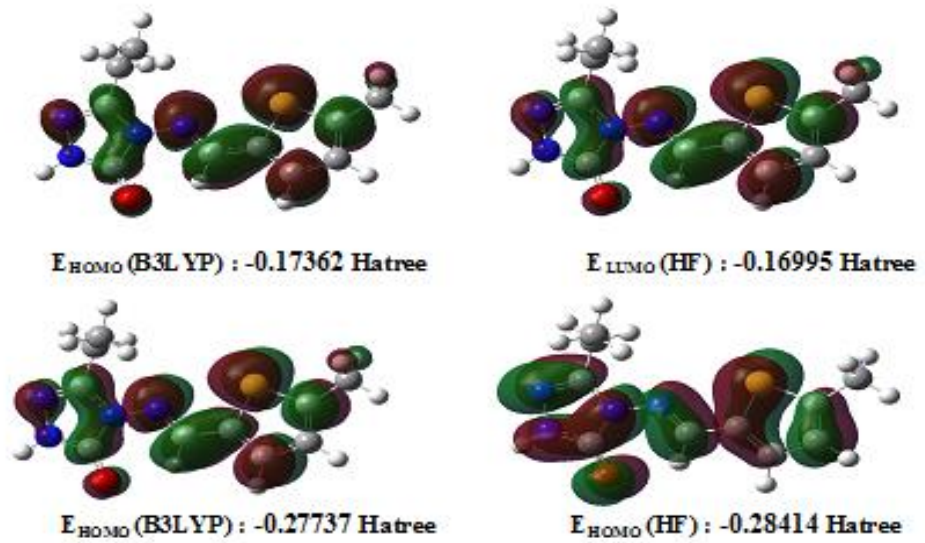
Bağ Açıları	B3LYP	HF	Bağ Açıları	B3LYP	HF
N(23)-C(1)-N(25)	111.225	111.082	N(24)-N(23)-C(1)	104.832	105.166
N(23)-N(24)-C(2)	114.371	113.672	C(2)-N(25)-N(26)	130.103	130.443
N(23)-N(24)-H(11)	120.481	121.004	N(25)-N(26)-C(3)	118.926	120.013
H(11)-N(24)-C(2)	125.141	125.305	N(26)-C(3)-H(12)	122.477	123.155
N(24)-C(2)-O(28)	130.069	129.586	H(12)-C(3)-C(4)	117.215	116.830
O(28)-C(2)-N(25)	128.699	128.491	C(3)-C(4)-C(5)	126.212	125.374
N(23)-C(1)-C(8)	124.868	125.011	C(3)-C(4)-S(27)	123.157	123.537
N(25)-C(1)-C(8)	123.890	123.901	C(4)-C(5)-C(6)	113.325	113.093
C(1)-C(8)-H(18)	106.492	106.340	C(4)-C(5)-H(13)	122.517	123.087
C(1)-C(8)-H(19)	108.809	108.791	H(13)-C(5)-C(6)	124.158	123.820
H(18)-C(8)-H(19)	107.956	108.208	C(5)-C(6)-H(14)	123.846	123.632
H(18)-C(8)-C(9)	110.336	110.310	H(14)-C(6)-C(7)	122.703	123.336
H(19)-C(8)-C(9)	109.656	110.008	C(6)-C(7)-C(10)	128.084	127.883
C(8)-C(9)-H(20)	110.789	110.697	C(7)-C(10)-H(15)	109.855	109.842
C(8)-C(9)-H(21)	110.121	109.843	C(7)-C(10)-H(16)	111.728	111.185
C(8)-C(9)-H(22)	110.995	111.259	C(7)-C(10)-H(17)	111.724	111.189
H(20)-C(9)-H(21)	108.132	108.153	H(15)-C(10)-H(16)	107.953	108.292
H(20)-C(9)-H(22)	108.595	108.666	H(15)-C(10)-H(17)	107.948	108.293
H(21)-C(9)-H(22)	108.117	108.131	H(16)-C(10)-H(17)	107.474	107.939
N(24)-C(2)-N(25)	101.231	101.923			

Tablo 3.13. 27 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları		B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları		B3LYP	HF
1	C(1)-C(8)	1.490	1.493	16	N(26)-C(3)	1.288	1.258
2	C(1)-N(23)	1.296	1.267	17	C(3)-H(12)	1.087	1.075
3	C(1)-N(25)	1.389	1.380	18	C(3)-C(4)	1.441	1.457
4	N(23)-N(24)	1.380	1.369	19	C(4)-C(5)	1.375	1.348
5	N(24)-C(2)	1.368	1.345	20	C(4)-S(27)	1.751	1.736
6	C(2)-N(25)	1.418	1.387	21	C(5)-C(6)	1.418	1.431
7	C(2)-O(28)	1.217	1.196	22	C(5)-H(13)	1.082	1.074
8	N(25)-N(26)	1.370	1.363	23	C(6)-H(14)	1.082	1.073
9	N(24)-H(11)	1.005	0.990	24	C(6)-C(7)	1.369	1.347
10	C(8)-H(18)	1.091	1.082	25	C(7)-S(27)	1.746	1.734
11	C(8)-H(19)	1.093	1.083	26	C(7)-C(10)	1.497	1.500
12	C(8)-C(9)	1.538	1.532	27	C(10)-H(15)	1.091	1.083
13	C(9)-H(20)	1.092	1.083	28	C(10)-H(16)	1.094	1.085
14	C(9)-H(21)	1.092	1.085	29	C(10)-H(17)	1.094	1.085
15	C(9)-H(22)	1.091	1.085				

Tablo 3.14. 27 Bileşiminin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.335	0.447	H15	0.120	0.106
C2	0.533	0.726	H16	0.133	0.118
C3	0.138	0.213	H17	0.133	0.118
C4	-0.291	-0.300	H18	0.132	0.127
C5	-0.028	-0.031	H19	0.138	0.131
C6	-0.043	-0.069	H20	0.113	0.099
C7	-0.284	-0.288	H21	0.111	0.098
C8	-0.245	-0.170	H22	0.131	0.120
C9	-0.204	-0.178	N23	-0.220	-0.283
C10	-0.300	-0.244	N24	-0.312	-0.379
H11	0.249	0.259	N25	-0.317	-0.478
H12	0.156	0.178	N26	-0.218	-0.266
H13	0.105	0.111	S27	0.286	0.272
H14	0.098	0.102	O28	-0.394	-0.532

**Şekil 3.7.** 27 Bileşiminin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.15. 27 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	0.0547	-0.0985
μ_y	0.0439	-0.6383
μ_z	1.5857	1.8644
μ_{Toplam}	1.5873	1.9731

Tablo 3.16. 27 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

Enerji	B3LYP	HF
(a.u.)	-1080.88039	-1075.97731

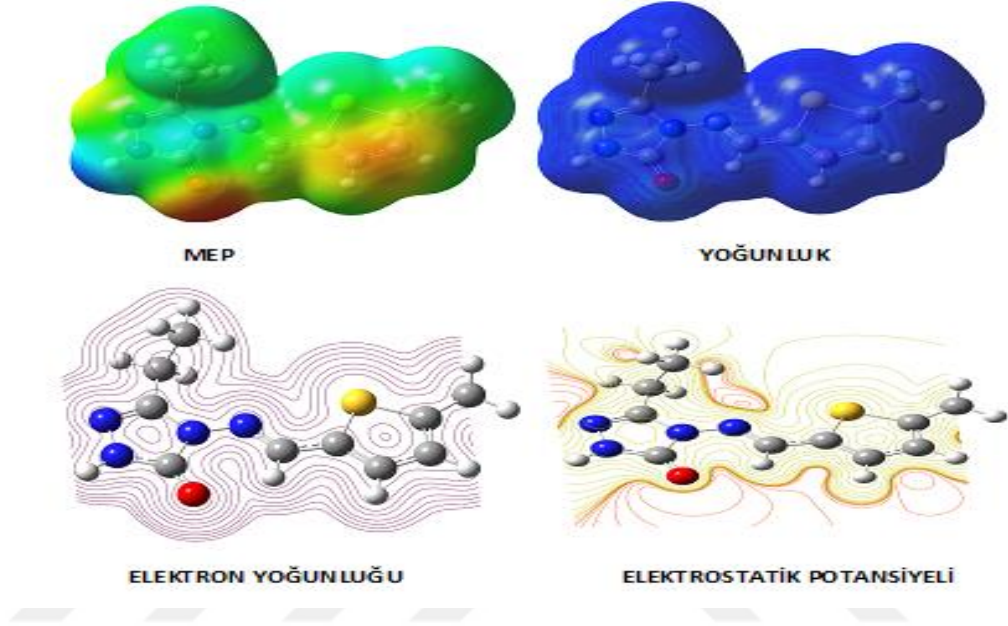
Tablo 3.17. 27 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hatree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

Tablo 3.18. 27 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

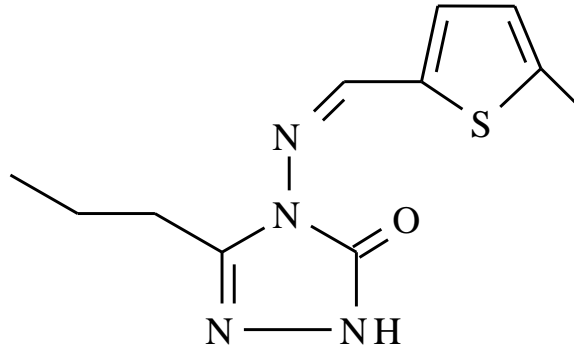
Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.04729	0.04819
B	0.01165	0.01179
C	0.00953	0.00966
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.98546	1.00418
B	0.24266	0.24556
C	0.19860	0.20136
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	143.728	153.398
Total	145.505	155.175
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	51.456	47.686
Total	57.418	53.648
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.403	42.278
Dönel	33.812	33.137
Titreşim	57.517	49.700
Total	133.731	125.116
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.216229	0.232476

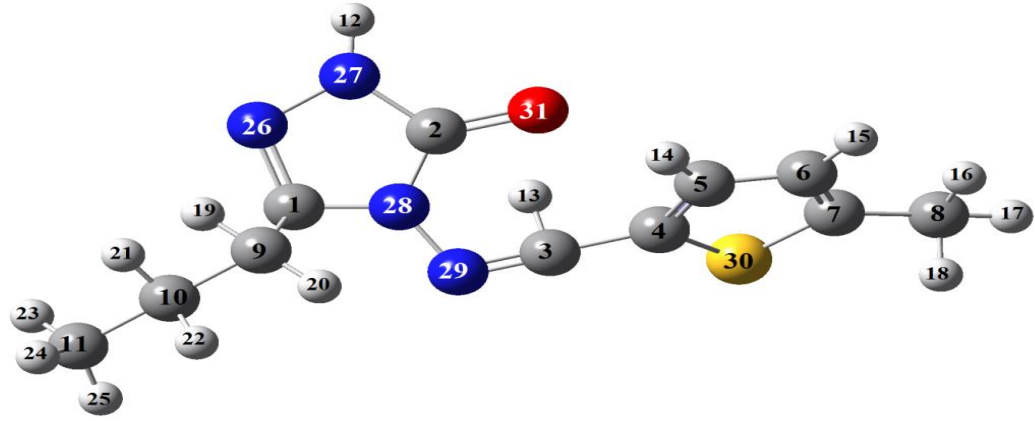
Enerjide Termal Düzeltme	0.231878	0.247287
Entalpide Termal Düzeltme	0.232822	0.248232
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.171709	0.188785
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1080.664164	-1075.744840
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1080.648515	-1075.730029
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1080.647571	-1075.729085
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1080.708684	-1075.788531
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	135.68576	145.88084



Şekil 3.8. 27 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.3. 3-*n*-Propil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (28)





Şekil 3.9. 28 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) gausview görünümü

Tablo 3.19. 28 Bileşiğinin eşğin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

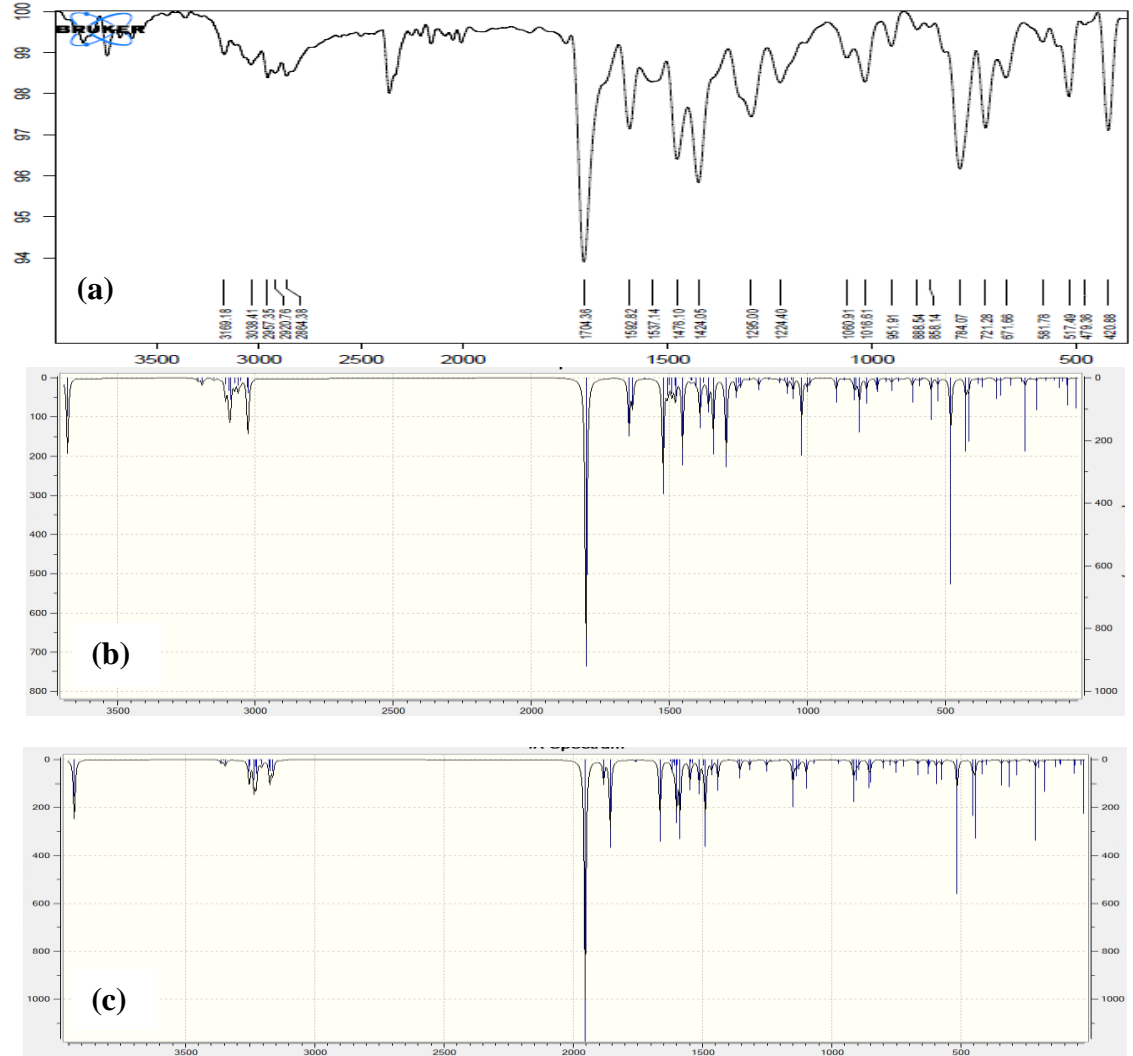
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146.51	170.7	-24.19	172.08	-25.57	159.07	-12.56	160.93	-14.42
C2	151.34	170.07	-18.73	171.07	-19.73	159.61	-8.27	160.55	-9.21
C3	148.80	164.76	-15.96	155.57	-6.77	156.90	-8.1	158.11	-9.31
C4	135.84	167.36	-31.52	165.12	-29.28	148.46	-12.62	145.62	-9.78
C5	134.11	152.91	-18.8	155.39	-21.28	142.95	-8.84	146.14	-12.03
C6	126.77	145.88	-19.11	146.97	-20.2	130.24	-3.47	131.09	-4.32
C7	144.96	173.85	-28.89	176.95	-31.99	160.29	-15.33	162.02	-17.06
C8	15.39	34.46	-19.07	34.4	-19.01	21.31	-5.92	21.13	-5.74
C9	26.72	44.41	-17.69	44.59	-17.87	31.78	-5.06	31.92	-5.20
C10	18.85	45.21	-26.36	45.19	-26.34	23.96	-5.11	23.75	-4.90
C11	13.45	30.39	-16.94	30.12	-16.67	17.74	-4.29	17.39	-3.94
H12	11.82	6.89	4.93	8.09	3.73	6.74	5.08	7.18	4.64
H13	9.73	10.33	-0.6	10.99	-1.26	10.08	-0.35	10.06	-0.33
H14	6.91	6.88	0.03	7.81	-0.9	7.25	-0.34	7.54	-0.63
H15	7.48	6.58	0.9	7.51	-0.03	6.74	0.74	6.98	0.50
H16	2.50	2.30	0.2	3.19	-0.69	2.58	-0.08	2.76	-0.26
H17	2.50	2.48	0.02	3.27	-0.77	2.59	-0.09	2.66	-0.16
H18	2.50	2.48	0.02	3.27	-0.77	2.59	-0.09	2.66	-0.16
H19	2.56	2.42	0.14	3.23	-0.67	2.31	0.25	2.67	-0.11
H20	2.56	2.94	-0.38	3.66	-1.1	3.00	-0.44	3.08	-0.52
H21	1.66	1.66	0	2.32	-0.66	2.00	-0.34	1.92	-0.26
H22	1.66	1.68	-0.02	2.54	-0.88	1.59	0.07	1.74	-0.08
H23	0.94	0.65	0.29	1.34	-0.4	1.03	-0.09	0.95	-0.01
H24	0.94	0.97	-0.03	1.62	-0.68	1.00	-0.06	1.02	-0.08
H25	0.96	0.87	0.09	1.66	-0.7	1.16	-0.2	1.23	-0.27

Tablo 3.20. 28 Bileşiğinin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ CCCN(62)	24	23
τ CNNC(54), τ CCCN(23)	25	33
τ NCCN(21), τ CCCN(26), τ CCNN(23)	55	55
δ CNN(18), δ CCC(13), δ CCN(28), τ CCCN(10)	58	56
τ CCCN(22), τ CNNC(21)	71	76
τ HCCC(72)	83	104
τ CCCN(17), τ CNNC(18), τ NCCN(12)	101	108
τ CCCN(13), τ CNNC(16), τ NCCN(16)	130	122
δ CNN(19), δ CCC(21), δ NNC(20)	164	161

δ CCC(18), τ CNNC(23), τ CCSC(10)	187	180
τ CNNC(18), τ CCCN(33), τ CCSC(13)	203	192
δ CCN(22), τ HCCC(15)	216	213
τ HCCC(38)	253	256
τ CCCN(23), τ CCNN(12), τ CCSC(12), τ NCCN(22)	274	264
δ CCS(41), δ CCC(11)	289	286
δ CCS(21), δ CCC(18), τ HCCN(10)	306	312
δ OCN(14), δ NNC(13), δ CCN(15)	353	364
τ CCNN(18), τ CCSC(16), τ CCCN(10)	370	379
δ CCC(19), τ HNNC(11), τ NCNN(12)	403	404
δ OCN(11), δ CCC(12)	412	412
τ HNNC(51), τ ONNC(10)	464	467
τ SCCC(38), τ CCSC(17)	510	521
ν CC(12), δ SCC(39)	534	540
τ CCCN(46), τ SCCC(16)	565	565
δ OCN(35)	576	567
δ CNN(13), ν CC(21)	599	603
ν SC(70)	649	654
δ SCC(23), δ CCC(45)	672	682
τ CNNC(11), τ HCCN(10), τ NCNN(19)	692	702
δ CCC(16), τ ONNC(45)	722	726
τ ONNC(25), δ CCC(16)	724	770
τ HCCN(14), ν NC(12), ν CNN(12)	760	775
τ HCCC(88)	785	812
δ NNC(10), τ HCCN(14), τ HCCC(10)	798	821
δ CNN(21), δ CCN(19), ν NN(18)	804	829
ν CC(68)	838	836
τ HCCN(21), τ HCCC(21)	867	881
τ HCCC(75)	867	912
τ HCCC(38), δ HCH(14)	959	970
τ HCNN(90)	969	995
δ NNC(29), ν CC(11)	988	1020
ν CC(47)	1018	1030
δ HCH(19), τ HCCC(74)	1024	1042
δ HCC(47), ν CC(11)	1038	1048
ν NC(12), ν NN(29), ν CC(15)	1048	1066
δ CCC(12), τ HCCN(10), τ HCCC(27)	1067	1088
τ HCCC(10), τ CCCN(18), ν NN(14)	1103	1119
ν CC(56)	1138	1134
ν NC(23), ν NN(16), δ CNN(14)	1170	1194
δ HCC(42), ν CC(11)	1202	1222
δ HCC(24), ν NC(10), ν CC(14)	1210	1227
δ HCC(11), ν CC(14)	1217	1234
ν NN(13), δ CNN(15), τ HCCN(11)	1253	1268
δ HCC(39), τ HCCC(12)	1255	1304
δ HCN(27), ν CC(17)	1299	1327
ν CC(15), δ HCC(21), τ HCCN(21)	1316	1349
δ HCH(15), τ HCCN(37)	1334	1356
δ HNN(31), δ HCN(14)	1345	1371
δ HNN(36), δ HCN(16)	1358	1394
δ HCH(94)	1374	1400
δ HCH(85)	1377	1403
ν NC(17)	1406	1438
δ HCH(74)	1431	1447
δ HCH(80), τ HCCC(10)	1434	1450
ν CC(10), δ HCH(61)	1443	1457
δ HCH(63)	1446	1460
τ HCCC(19), δ HCH(84)	1454	1464

δ HCH(76), τ HCCC(15)	1460	1472
δ HCH(11), ν CC(57)	1475	1508
ν CC(55), δ HCC(18)	1539	1593
ν NC(58)	1582	1682
ν NC(64)	1594	1705
ν OC(73), ν NC(12)	1745	1770
ν CH(94)	2931	2864
ν CH(94)	2931	2874
ν CH(98)	2934	2876
ν CH(96)	2958	2903
ν CH(86)	2967	2909
ν CH(99)	2978	2923
ν CH(96)	2994	2923
ν CH(100)	2999	2931
ν CH(93)	3010	2946
ν CH(91)	3011	2947
ν CH(97)	3051	3031
ν CH(99)	3092	3036
ν CH(95)	3106	3045
ν NH(100)	3565	3560



Şekil 3.10. 28 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)(b) ve HF 6-311G(d,p) (c)) IR spektrumları

Tablo 3.21. 28 Bileşiminin hesaplanan bağ açıları (A^0)

Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Açılı	B3LYP	HF
N(26)-C(1)-N(28)	111.113	111.021	H(23)-C(11)-H(25)	107.504	107.568
N(26)-N(27)-C(2)	114.370	113.667	H(24)-C(11)-H(25)	108.008	107.920
N(26)-N(27)-H(12)	120.497	121.002	N(27)-C(2)-N(28)	101.280	101.931
H(12)-N(27)-C(2)	125.111	125.304	N(27)-N(26)-C(1)	104.370	105.206
N(27)-C(2)-O(31)	130.034	129.575	C(2)-N(28)-N(29)	129.783	130.350
O(31)-C(2)-N(28)	128.686	128.495	N(28)-N(29)-C(3)	119.018	120.028
N(26)-C(1)-C(9)	124.514	125.133	N(29)-C(3)-H(13)	122.534	123.170
N(28)-C(1)-C(9)	124.368	123.845	H(13)-C(3)-C(4)	117.182	116.819
C(1)-C(9)-H(19)	107.104	106.353	C(3)-C(4)-C(5)	126.184	125.371
C(1)-C(9)-H(20)	108.567	108.351	C(3)-C(4)-S(30)	123.192	123.538
H(19)-C(9)-H(20)	107.999	108.120	C(4)-C(5)-C(6)	113.334	113.092
H(19)-C(9)-C(10)	109.016	110.187	C(4)-C(5)-H(14)	122.512	123.088
H(20)-C(9)-C(10)	110.190	109.425	H(14)-C(5)-C(6)	124.154	123.820
C(9)-C(10)-H(21)	108.436	109.371	C(5)-C(6)-H(15)	123.847	123.633
C(9)-C(10)-H(22)	107.606	107.305	H(15)-C(6)-C(7)	122.696	123.336
C(9)-C(10)-C(11)	114.455	113.941	C(6)-C(7)-C(8)	128.097	127.884
H(21)-C(10)-H(22)	106.577	106.462	C(7)-C(8)-H(16)	109.861	109.842
H(21)-C(10)-C(11)	109.923	110.157	C(7)-C(8)-H(17)	111.715	111.183
H(22)-C(10)-C(11)	109.528	109.300	C(7)-C(8)-H(18)	111.734	111.195
C(10)-C(11)-H(23)	111.594	111.756	H(16)-C(8)-H(17)	107.952	108.290
C(10)-C(11)-H(24)	111.388	111.172	H(16)-C(8)-H(18)	107.948	108.291
C(10)-C(11)-H(25)	110.682	110.462	H(17)-C(8)-H(18)	107.473	107.937
H(23)-C(11)-H(24)	107.486	107.801			

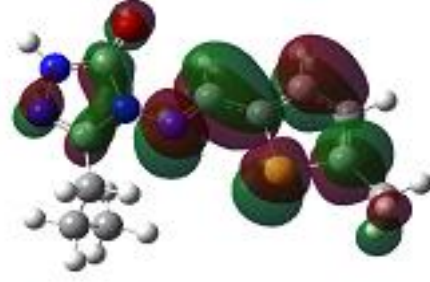
Tablo 3.22. 28 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.494	1.494	17 C(3)-H(13)	1.086	1.075
2 C(1)-N(26)	1.297	1.267	18 C(3)-C(4)	1.441	1.457
3 C(1)-N(28)	1.391	1.381	19 C(4)-C(5)	1.374	1.348
4 N(26)-N(27)	1.379	1.369	20 C(4)-S(30)	1.751	1.736
5 N(27)-C(2)	1.367	1.345	21 C(5)-H(14)	1.082	1.074
6 C(2)-N(28)	1.419	1.387	22 C(5)-C(6)	1.418	1.431
7 C(2)-O(31)	1.217	1.196	23 C(6)-H(15)	1.082	1.073
8 N(28)-N(29)	1.370	1.363	24 C(6)-C(7)	1.369	1.347
9 N(27)-H(12)	1.005	0.099	25 C(7)-S(30)	1.746	1.734
10 C(7)-H(19)	1.092	1.083	26 C(7)-C(8)	1.497	1.500
11 C(7)-H(20)	1.091	1.084	27 C(8)-H(16)	1.091	1.083
12 C(9)-C(10)	1.544	1.537	28 C(8)-H(17)	1.094	1.085
13 C(10)-H(21)	1.094	1.084	29 C(8)-H(18)	1.094	1.085
14 C(10)-H(22)	1.095	1.086	30 C(3)-H(13)	1.086	1.075
15 C(10)-C(11)	1.530	1.527	31 C(3)-C(4)	1.441	1.457
16 C(11)-H(23)	1.093	1.085	32 C(4)-C(5)	1.374	1.348

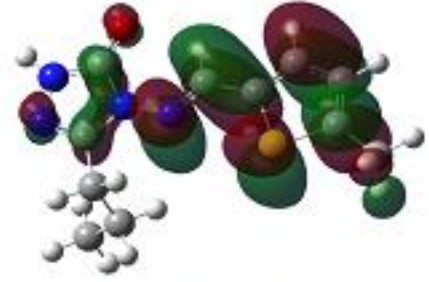
Tablo 3.23. 28 Bileşiminin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.343	0.458	H17	0.118	0.132
C2	0.532	0.726	H18	0.118	0.132
C3	0.136	0.214	H19	0.129	0.135
C4	-0.290	-0.300	H20	0.137	0.147
C5	-0.029	-0.031	H21	0.123	0.121
C6	-0.043	-0.070	H22	0.096	0.110
C7	-0.286	-0.288	H23	0.097	0.108

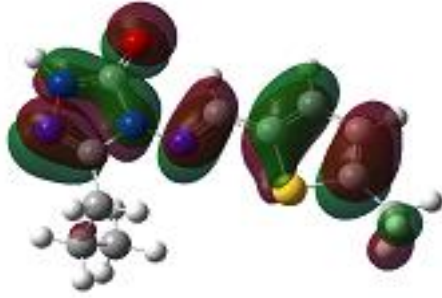
C8	-0.245	-0.179	H24	0.088	0.118
C9	-0.202	-0.180	H25	0.093	0.107
C10	-0.231	-0.212	N26	-0.280	-0.225
C11	-0.293	-0.227	N27	-0.381	-0.311
H12	0.249	0.259	N28	-0.481	-0.373
H13	0.155	0.178	N29	-0.265	-0.214
H14	0.105	0.111	S30	-0.272	0.288
H15	0.097	0.102	O31	-0.532	0.394
H16	0.106	0.119			



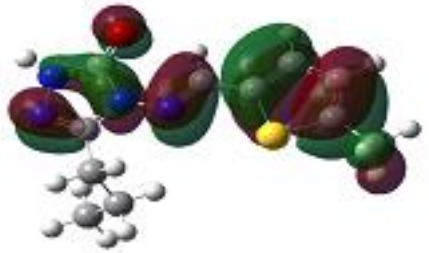
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -0.06687 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF}) : 0.07697 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -0.21804 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{HF}) : -0.30892 \text{ Hatree}$

Şekil 3.11. 28 Bileşiğinin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.24. 28 Bileşiğinin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-0.2664	-0.5256
μ_y	-0.1214	-0.8255
μ_z	1.4660	1.7416
μ_{Toplam}	1.4950	1.9977

Tablo 3.25. 28 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

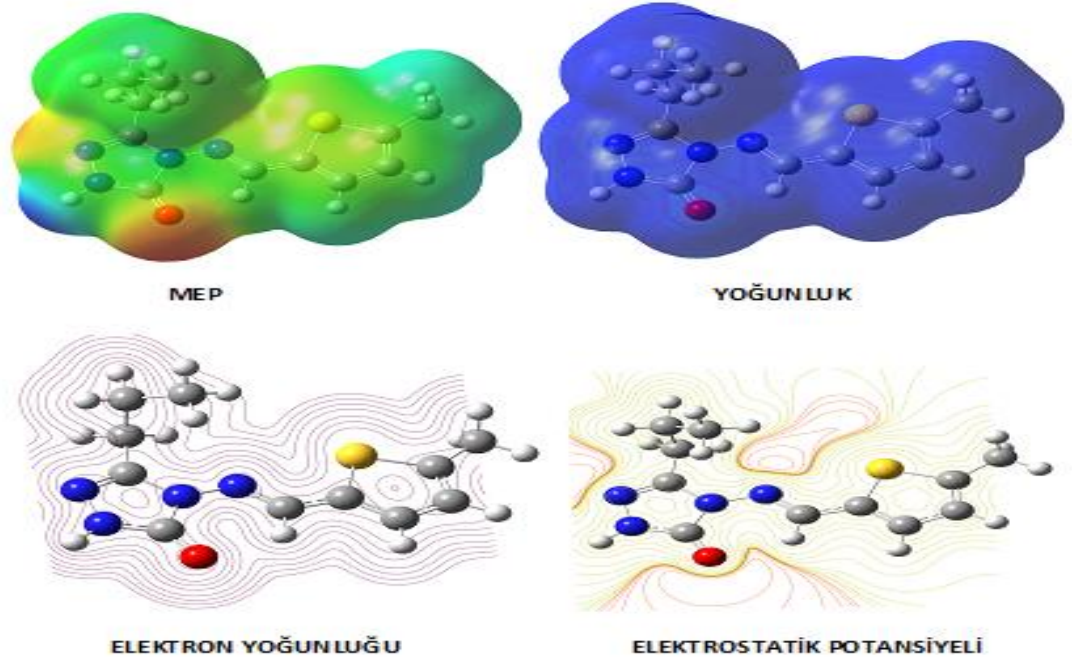
Enerji	B3LYP	HF
(a.u.)	-1120.20283	-1115.02076

Tablo 3.26. 28 Bileşiminin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hatree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

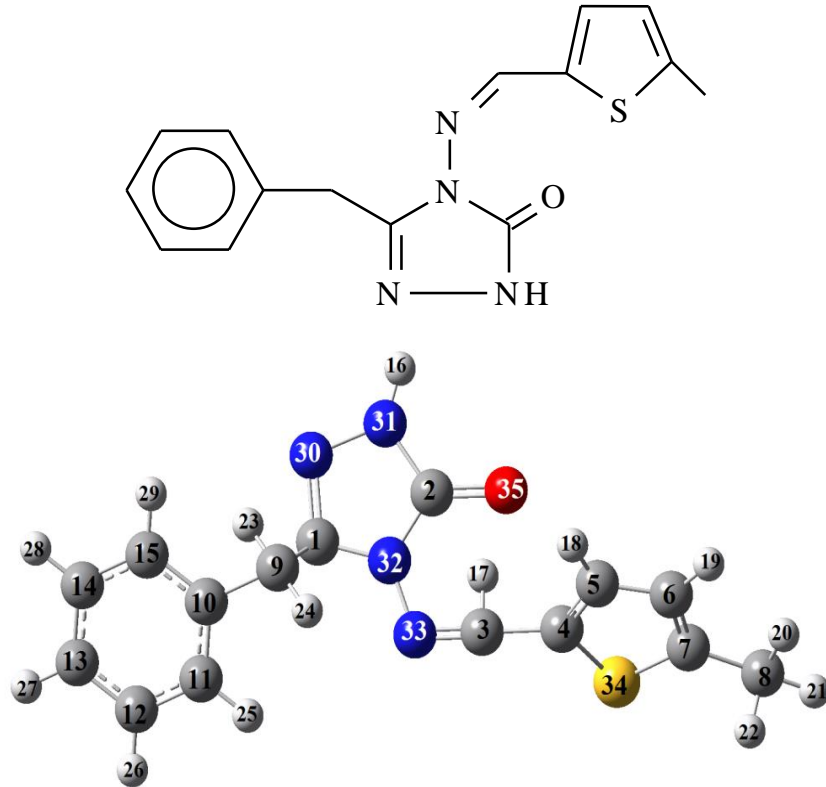
Tablo 3.27. 28 Bileşiminin hesaplanan termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.03597	0.03608
B	0.01094	0.01084
C	0.00884	0.00875
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.74953	0.75178
B	0.22793	0.22594
C	0.18424	0.18228
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	162.381	173.131
Total	164.159	174.908
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	56.298	52.185
Total	62.260	58.147
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.450	42.450
Dönel	33.590	33.606
Titreşim	60.965	56.312
Total	137.005	132.369
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.244569	0.262647
Enerjide Termal Düzeltme	0.261603	0.278734
Entalpide Termal Düzeltme	0.262548	0.279678
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.197452	0.216785
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1119.958263	-1114.758121
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1119.941229	-1114.742034
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1119.940285	-1114.741090
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1120.005381	-1114.803982
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	153.46964	164.81358



Şekil 3.12. 28 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.4. 3-Benzil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (29)



Şekil 3.13. 29 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) gausview görünümü

Tablo 3.28. 29 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

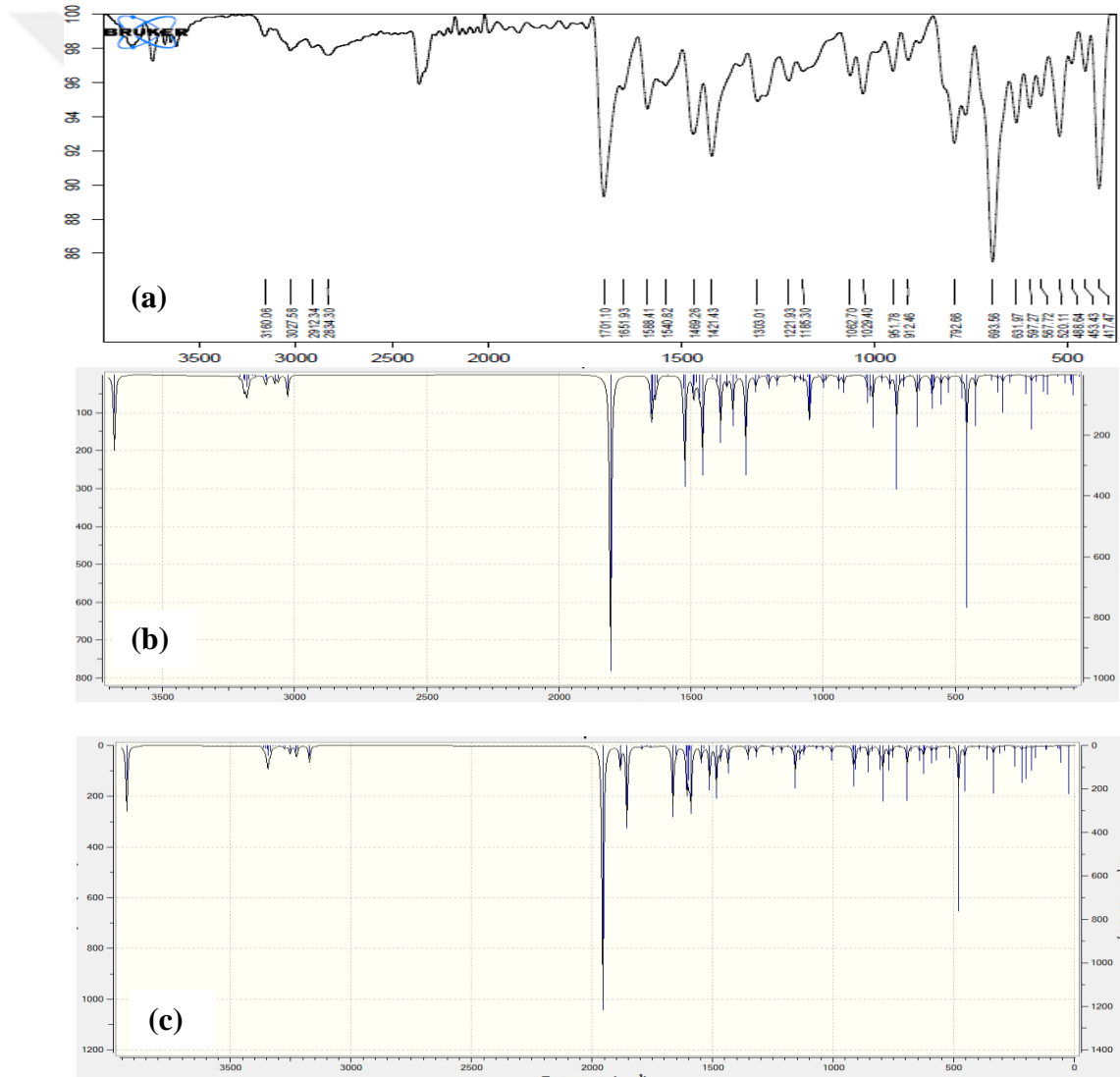
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146.56	169.75	-23.19	170.55	-23.99	160.13	-13.57	161.36	-14.80
C2	151.96	170.09	-18.13	171.05	-19.09	159.30	-7.34	160.24	-8.28
C3	149.38	164.82	-15.44	165.75	-16.37	157.31	-7.93	158.73	-9.35
C4	136.85	167.21	-30.36	164.86	-28.01	148.29	-11.44	145.25	-8.40
C5	134.95	153.01	-18.06	155.59	-20.64	143.10	-8.15	146.42	-11.47
C6	127.42	145.92	-18.50	146.99	-19.57	130.32	-2.90	131.04	-3.62
C7	145.88	173.65	-27.77	177.07	-31.19	160.13	-14.25	162.32	-16.44
C8	16.15	34.53	-18.38	34.45	-18.30	21.36	-5.21	21.18	-5.03
C9	31.8	62.15	-30.35	52.02	-20.22	35.36	-3.56	35.26	-3.46
C10	136.58	159.19	-22.61	159.78	-23.20	145.84	-9.26	146.41	-9.83
C11	129.56	151.84	-22.28	151.66	-22.10	141.02	-11.46	140.72	-11.16
C12	129.11	149.34	-20.23	149.82	-20.71	138.59	-9.48	138.96	-9.85
C13	127.5	147.95	-20.45	148.37	-20.87	137.32	-9.82	137.59	-10.09
C14	129.11	149.45	-20.34	149.93	-20.82	138.65	-9.54	139.13	-10.02
C15	127.5	150.49	-22.99	150.53	-23.03	139.82	-12.32	139.78	-12.28
H16	11.87	7.56	4.31	8.08	3.79	6.77	5.10	7.25	4.62
H17	9.67	10.86	-1.19	10.81	-1.14	9.91	-0.24	9.90	-0.23
H18	7.42	7.55	-0.13	7.77	-0.35	7.21	0.21	7.50	-0.08
H19	6.86	7.29	-0.43	7.51	-0.65	6.75	0.11	6.98	-0.12
H20	2.48	3.04	-0.56	3.21	-0.73	2.62	-0.14	2.79	-0.31
H21	2.48	3.25	-0.77	3.32	-0.84	2.66	-0.18	2.73	-0.25
H22	2.48	3.24	-0.76	3.32	-0.84	2.65	-0.17	2.74	-0.26
H23	3.93	4.39	-0.46	4.73	-0.80	3.85	0.08	3.96	-0.03
H24	3.93	4.62	-0.69	4.49	-0.56	4.00	-0.07	4.16	-0.23
H25	7.48	8.39	-0.91	8.48	-1.00	8.18	-0.70	8.27	-0.79
H26	7.24	8.05	-0.81	8.22	-0.98	7.74	-0.50	7.92	-0.68
H27	7.22	7.95	-0.73	8.12	-0.90	7.63	-0.41	7.82	-0.60
H28	7.24	8.07	-0.83	8.23	-0.99	7.74	-0.50	7.92	-0.68
H29	7.28	8.30	-1.02	8.34	-1.06	7.97	-0.69	8.03	-0.75

Tablo 3.29. 29 Bileşiğinin teorik IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ NCCC(23), τ CCCC(10), τ NCCN(14)	18	17
τ NCCC(52), τ CCCN(19)	22	20
τ CCCC(51)	28	31
δ CCC(17), τ NCCC(10), τ NNCC(20), τ CCCC(10)	51	51
δ CNN(14), δ CCC(13), δ CCN(25)	57	58
τ NCCC(11), τ CCCN(18), τ CCNN(11)	61	62
τ HCCC(83)	83	104
τ NCCC(21), τ CCCN(16), τ CNNC(19)	109	108
τ CCCC(11)	147	146
τ CNNC(17), τ NNCC(12)	161	160
δ CNN(15), δ NCC(15)	188	182
τ CCCN(29), τ SCCC(10), τ CCSC(16)	204	198
δ CCC(11), τ CCCC(10), τ CNNC(14)	224	224
τ CCCN(21), τ CCNN(11), τ CCSC(11), τ NCCN(33)	277	263
δ CCS(45)	283	281
δ CCS(17), τ HNNC(12), τ NNCC(17)	309	304
δ CCC(43)	328	329
δ OCN(12), δ NCC(18), δ NNC(11), τ HCCC(11)	352	358
τ CCCN(21), τ CCNN(25), τ CCSC(19)	375	385
τ CCCC(78)	401	411
δ ONN(14), δ CCC(18)	409	412
τ ONNC(11), τ HNNC(54)	442	435
τ CCCC(48), τ HCCC(14)	460	467

τ SCCC(38), τ CCSC(17)	509	520
ν CC(12), δ SCC(39)	536	536
τ CCCN(25), δ CCC(12)	564	564
δ CCC(17), τ CCCN(21)	567	568
δ OCN(34)	572	581
δ CCC(69)	614	613
δ CCC(16), δ CNN(16)	625	628
ν SC(67)	650	656
δ SCC(23), δ CCC(50)	674	683
τ CCCC(45)	688	697
τ HCCC(44)	699	720
δ CCC(13), τ ONNC(46)	723	730
τ ONNC(22), δ CCC(17)	725	760
τ HCCC(12)	752	775
τ HCCC(95)	786	804
δ NNC(11), δ NC(11), ν CC(21), δ CNN(14)	798	822
ν NN(16), δ CNN(11), δ CCC(10), δ CCN(20)	805	830
δ HCC(11), δ CCC(11)	810	833
τ HCCC(70)	830	862
τ HCCC(79)	867	911
δ HCC(13), τ HCCC(30)	892	912
τ HCCC(49)	910	944
τ HCCC(50), τ CCCC(12)	951	970
τ HCCC(38), δ HCH(14)	959	982
HCNN(91)	968	997
τ HCCC(40), τ CCCC(27)	972	1011
ν CC(41), δ CCC(55)	987	1015
δ NNC(18)	1018	1018
δ NNC(19)	1020	1030
δ HCH(19), τ HCCC(74)	1024	1048
δ HCC(51), ν CC(24)	1040	1049
ν NC(12), ν NN(49)	1050	1058
ν CC(29), δ HCC(24)	1072	1076
ν CC(55)	1138	1099
δ HCC(73)	1145	1134
δ HCC(33), ν CC(19)	1167	1168
ν NC(10), δ HCC(15)	1167	1173
δ HCC(20), ν NC(11), ν NN(14)	1171	1178
ν CC(49)	1174	1194
δ HCC(53), δ CC(12)	1204	1220
δ CCC(11), ν CC(29)	1215	1227
ν NN(18), δ CNN(23)	1252	1234
ν CC(31), δ HCC(18), τ HCCC(17)	1285	1301
ν CC(31), δ HCN(20), τ HCCC(12)	1299	1323
ν CC(37), δ HCC(10), τ HCCC(12)	1306	1330
δ HCC(57), τ HCCC(12)	1321	1345
δ HCN(23), ν NC(10), δ HNN(18)	1344	1371
δ HNN(54)	1356	1394
δ HCH(95)	1374	1403
ν NC(33)	1410	1440
τ HCCC(10), δ HCH(80)	1422	1447
δ HCH(80), HCCC(10)	1433	1448
δ HCC(37), ν CC(25)	1442	1456
δ HCH(57)	1443	1457
ν CC(67)	1475	1497
δ HCC(34), δ CCC(ν 12), ν CC(12)	1481	1508
ν CC(54), δ HCC(19)	1539	1593
ν CC(54), δ CCC(10)	1577	1604

v NC(46)	1584	1626
v NC(44), v CC(18)	1594	1681
v NC(31), v CC(30)	1598	1706
v OC (73), v NC (10)	1748	1772
v CH(93)	2931	2919
v CH(97)	2966	2923
v CH(100)	2978	2947
v CH(92)	3011	2965
v CH(97)	3014	3003
v CH(95)	3060	3011
v CH(82)	3066	3021
v CH(67)	3074	3030
v CH(96)	3081	3031
v CH(78)	3090	3037
v CH(98)	3092	3037
v CH(97)	3106	3046
v NH(100)	3566	3560



Şekil 3.14. 29 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)(b) ve HF 6-311G(d,p) (c)) IR spektrumları

Tablo 3.30. 29 Bileşiğinin hesaplanan bağ açıları (A^0)

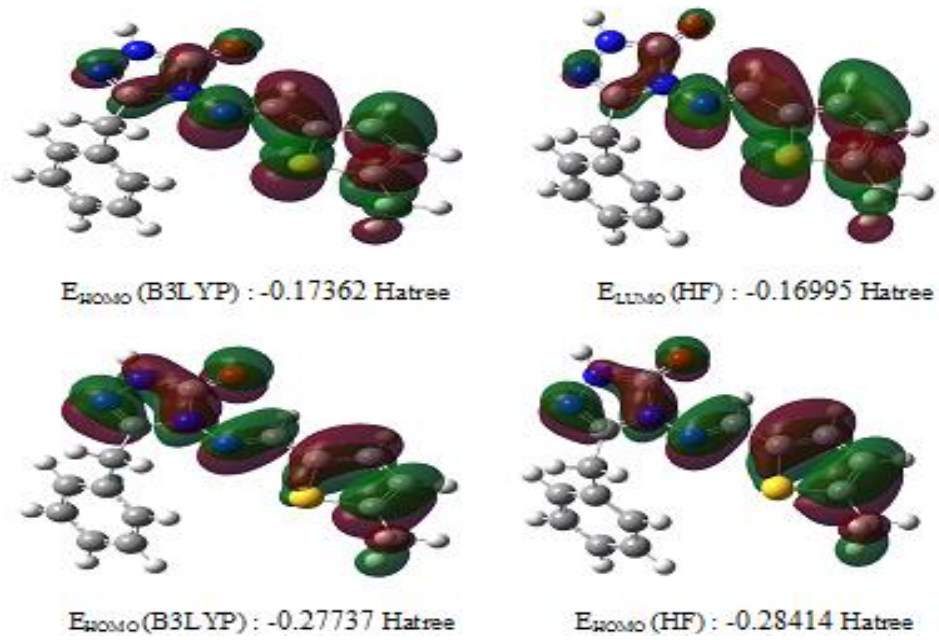
Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Açılı	B3LYP	HF
N(30)-C(1)-N(32)	111.412	111.267	C(14)-C(15)-H(29)	120.025	119.830
N(30)-N(31)-C(2)	114.357	113.636	H(29)-C(15)-C(10)	119.381	119.556
N(30)-N(31)-H(16)	120.496	121.021	N(31)-C(2)-N(32)	101.249	101.954
H(16)-N(31)-C(2)	125.139	125.310	N(31)-N(30)-C(1)	104.739	105.086
N(31)-C(2)-O(35)	130.047	129.546	C(2)-N(32)-N(33)	130.093	130.226
O(35)-C(2)-N(32)	128.703	128.499	N(32)-N(33)-C(3)	118.820	119.678
N(30)-C(1)-C(9)	124.733	124.717	N(33)-C(3)-H(17)	122.500	123.120
N(32)-C(1)-C(9)	123.824	123.999	H(17)-C(3)-C(4)	117.153	116.669
C(1)-C(9)-H(23)	106.560	106.340	C(3)-C(4)-C(5)	126.218	125.301
C(1)-C(9)-H(24)	109.042	109.021	C(3)-C(4)-S(34)	123.183	126.652
H(23)-C(9)-H(24)	108.168	108.243	C(4)-C(5)-C(6)	113.339	113.118
H(23)-C(9)-C(10)	108.897	109.977	C(4)-C(5)-H(18)	122.514	123.072
H(24)-C(9)-C(10)	109.760	110.073	H(18)-C(5)-C(6)	124.147	123.810
C(9)-C(10)-C(11)	120.555	121.047	C(5)-C(6)-H(19)	123.837	123.626
C(9)-C(10)-C(15)	120.073	120.046	H(19)-C(6)-C(7)	122.696	123.325
C(10)-C(11)-H(25)	119.546	119.755	C(6)-C(7)-C(8)	128.091	127.912
H(25)-C(11)-C(12)	119.898	119.681	C(7)-C(8)-H(20)	109.839	109.834
C(11)-C(12)-H(26)	119.718	119.658	C(7)-C(8)-H(21)	111.741	111.189
H(26)-C(12)-C(13)	120.106	120.143	C(7)-C(8)-H(22)	111.724	111.198
C(12)-C(13)-H(27)	120.206	120.241	H(20)-C(8)-H(21)	107.951	108.290
H(27)-C(13)-C(14)	120.176	120.175	H(21)-C(8)-H(22)	107.487	107.946
C(13)-C(14)-H(28)	120.085	120.092	H(20)-C(8)-H(22)	107.939	108.282
H(28)-C(14)-C(15)	119.779	119.769			

Tablo 3.31. 29 Bileşiğinin eşğin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.493	1.496	20 C(13)-C(14)	1.394	1.386
2 C(1)-N(30)	1.297	1.267	21 C(14)-H(28)	1.084	1.075
3 C(1)-N(32)	1.387	1.378	22 C(14)-C(15)	1.391	1.382
4 N(30)-N(31)	1.379	1.369	23 C(15)-H(29)	1.085	1.076
5 N(31)-C(2)	1.368	1.345	24 N(33)-C(3)	1.288	1.258
6 C(2)-N(32)	1.418	1.387	25 C(3)-H(17)	1.087	1.075
7 C(2)-O(35)	1.216	1.196	26 C(3)-C(4)	1.441	1.457
8 N(32)-N(33)	1.370	1.363	27 C(4)-C(5)	1.374	1.348
9 N(31)-H(16)	1.005	0.990	28 C(4)-S(34)	1.751	1.736
10 C(9)-H(23)	1.092	1.082	29 C(5)-C(6)	1.418	1.431
11 C(9)-H(24)	1.091	1.081	30 C(5)-H(18)	1.082	1.074
12 C(9)-C(10)	1.523	1.520	31 C(6)-H(19)	1.082	1.073
13 C(10)-C(11)	1.395	1.385	32 C(6)-C(7)	1.369	1.347
14 C(10)-C(15)	1.398	1.390	33 C(7)-S(34)	1.745	1.734
15 C(11)-H(25)	1.084	1.074	34 C(7)-C(8)	1.497	1.500
16 C(11)-C(12)	1.394	1.386	35 C(8)-H(20)	1.091	1.083
17 C(12)-H(26)	1.084	1.075	36 C(8)-H(21)	1.094	1.085
18 C(12)-C(13)	1.392	1.382	37 C(8)-H(22)	1.094	1.085
19 C(13)-H(27)	1.084	1.075			

Tablo 3.32. 29 Bileşiğinin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.376	0.498	H19	0.098	0.102
C2	0.532	0.723	H20	0.120	0.107
C3	0.141	0.222	H21	0.132	0.118
C4	-0.292	-0.303	H22	0.132	0.118
C5	-0.020	-0.032	H23	0.150	0.150
C6	-0.041	-0.069	H24	0.145	0.146
C7	-0.291	-0.295	H25	0.101	0.111
C8	-0.245	-0.179	H26	0.092	0.098
C9	-0.188	-0.140	H27	0.094	0.098
C10	-0.122	-0.140	H28	0.094	0.099
C11	-0.056	-0.080	H29	0.097	0.103
C12	-0.101	-0.088	N30	-0.221	-0.282
C13	-0.087	-0.101	N31	-0.311	-0.379
C14	-0.093	-0.081	N32	-0.382	-0.492
C15	-0.039	-0.060	N33	-0.217	-0.265
H16	0.250	0.260	S34	0.293	0.279
H17	0.155	0.176	O35	-0.392	-0.530
H18	0.105	0.112			

**Şekil 3.15.** 29 Bileşiğinin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri**Tablo 3.33.** 29 Bileşiğinin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	0.4357	-0.1346
μ_y	0.0981	-0.5878
μ_z	0.4220	0.8320
μ_{Toplam}	0.6144	1.0275

Tablo 3.34. 29 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

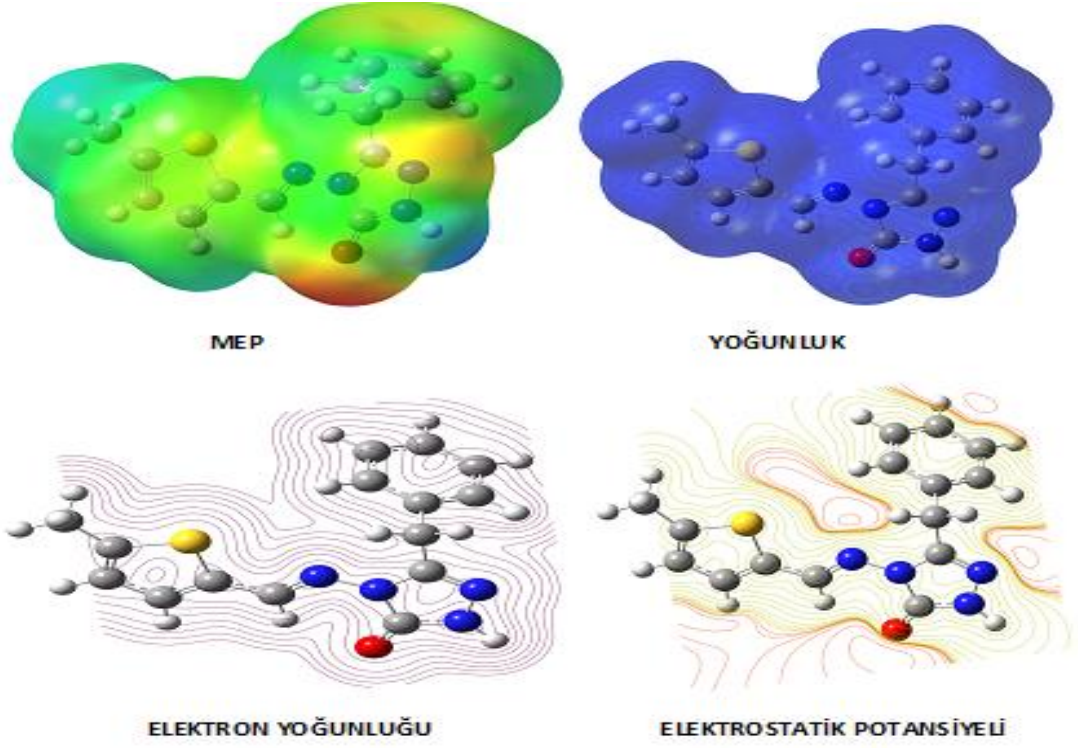
Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1272.65846	-1266.52359

Tablo 3.35. 29 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hatree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

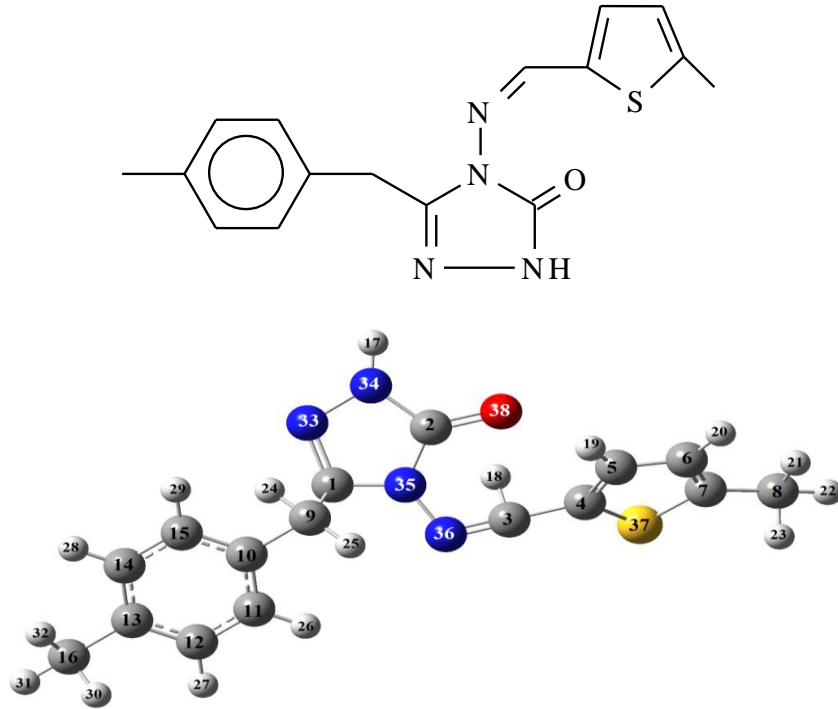
Tablo 3.36. 29 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.01738	0.01756
B	0.00916	0.00935
C	0.00651	0.00665
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.36224	0.36580
B	0.19085	0.19480
C	0.13569	0.13855
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	178.775	190.660
Total	180.553	192.438
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	64.660	59.611
Total	70.621	65.573
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.974	42.974
Dönel	34.793	34.742
Titreşim	69.794	65.091
Total	147.561	142.807
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.269006	0.289049
Enerjide Termal Düzeltme	0.287729	0.306669
Entalpide Termal Düzeltme	0.288673	0.307613
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.218562	0.239761
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1272.389460	-1266.234542
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1272.370737	-1266.216921
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1272.369793	-1266.215977
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1272.439904	-1266.283829
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	168.80355	181.38084



Şekil 3.16. 29 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.5. 3-*p*-Metilbenzil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (30)



Şekil 3.17. 30 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

Tablo 3.37. 30 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

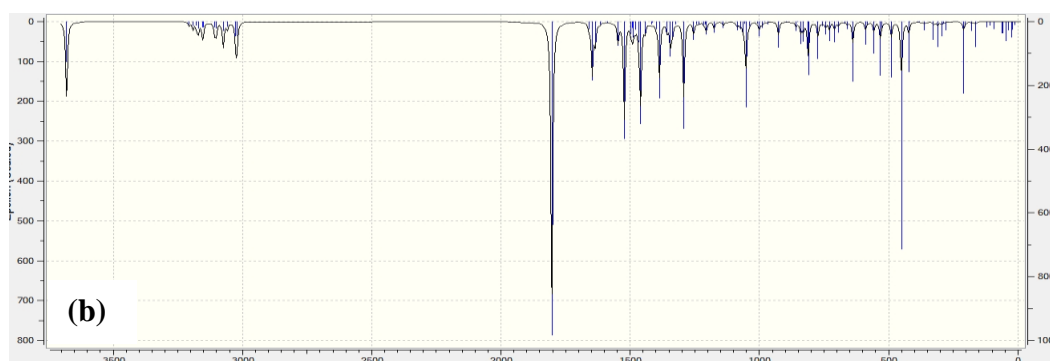
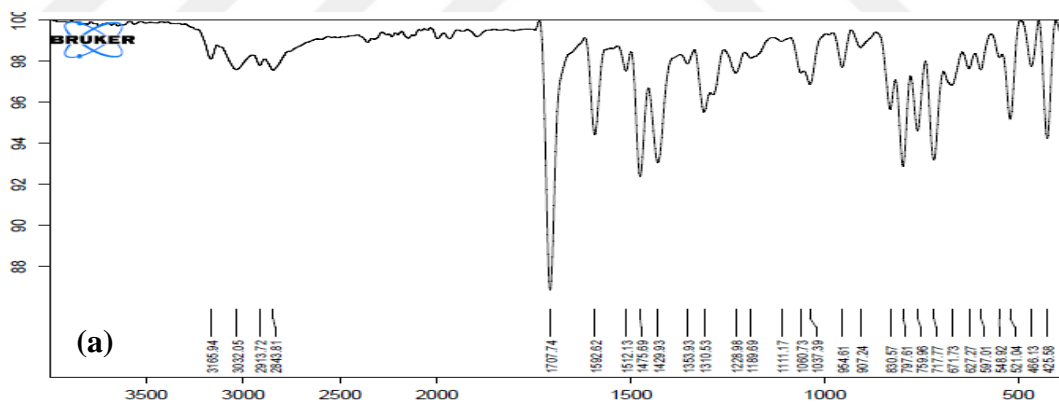
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146	169.84	-23.84	170.63	-24.63	160.21	-14.21	161.62	-15.62
C2	151.23	170.18	-18.95	171.12	-19.89	159.09	-7.86	160.11	-8.88
C3	148.59	164.18	-15.59	165.73	-17.14	155.79	-7.20	156.91	-8.32
C4	135.89	167.36	-31.47	164.95	-29.06	146.70	-10.81	144.08	-8.19
C5	134.26	152.85	-18.59	155.51	-21.25	135.05	-0.79	137.23	-2.97
C6	126.8	145.81	-19.01	146.92	-20.12	131.48	-4.68	131.99	-5.19
C7	145.15	173.61	-28.46	177.05	-31.90	159.80	-14.65	162.26	-17.11
C8	15.45	34.60	-19.15	34.55	-19.10	21.17	-5.72	20.97	-5.52
C9	30.69	51.90	-21.21	51.77	-21.08	35.14	-4.45	34.95	-4.26
C10	132.52	156.10	-23.58	156.31	-23.79	142.12	-9.60	142.29	-9.77
C11	128.96	151.76	-22.80	151.38	-22.42	141.05	-12.09	140.94	-11.98
C12	128.73	149.58	-20.85	149.88	-21.15	137.51	-8.78	137.67	-8.94
C13	135.78	159.11	-23.33	160.53	-24.75	147.91	-12.13	148.91	-13.13
C14	128.73	149.89	-21.16	150.35	-21.62	138.84	-10.11	139.11	-10.38
C15	128.96	150.17	-21.21	150.05	-21.09	140.66	-11.70	140.45	-11.49
C16	20.57	38.97	-18.40	38.57	-18.00	25.11	-4.54	24.72	-4.15
H17	11.92	7.56	4.36	8.08	3.84	6.75	5.17	7.23	4.69
H18	9.69	10.87	-1.18	10.81	-1.12	9.50	0.19	9.46	0.23
H19	7.47	7.54	-0.07	7.76	-0.29	8.00	-0.53	8.22	-0.75
H20	6.9	7.27	-0.37	7.49	-0.59	6.95	-0.05	7.18	-0.28
H21	2.51	3.24	-0.73	3.32	-0.81	2.61	-0.10	2.68	-0.17
H22	2.51	3.03	-0.52	3.21	-0.70	2.59	-0.08	2.66	-0.15
H23	2.51	3.23	-0.72	3.31	-0.80	2.61	-0.10	2.79	-0.28
H24	3.9	4.36	-0.46	4.45	-0.55	3.80	0.10	3.89	0.01
H25	3.9	4.55	-0.65	4.66	-0.76	3.94	-0.04	4.14	-0.24
H26	7.19	8.24	-1.05	8.33	-1.14	7.82	-0.63	7.98	-0.79
H28	7.11	7.92	-0.81	8.08	-0.97	7.64	-0.53	7.81	-0.70
H29	7.19	8.20	-1.01	8.23	-1.04	7.92	-0.73	7.96	-0.77
H30	2.55	3.14	-0.59	3.17	-0.62	2.59	-0.04	2.63	-0.08
H31	2.55	2.65	-0.10	2.76	-0.21	2.61	-0.06	2.67	-0.12
H32	2.55	2.90	-0.35	2.98	-0.43	2.07	0.48	2.19	0.36

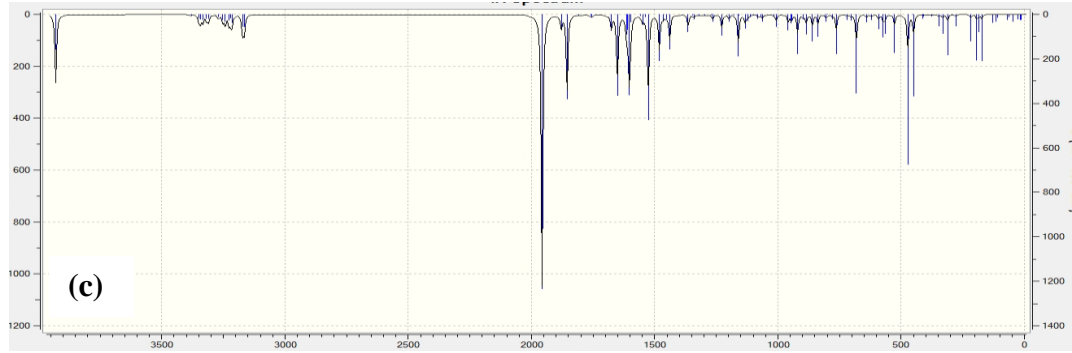
Tablo 3.38. 30 Bileşiğinin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ CNNC(30), τ CCCN(36)	12	13
τ CCCC(21), τ NCCN(14)	19	14
τ CNNC(13), τ HCCC(59)	22	22
τ NCCN(11), τ CCCC(25)	34	29
τ CCCC(16), δ CCC(30)	45	43
τ CCCC(32)	56	56
τ NCCN(14), δ CNN(17), δ CNN(24)	60	62
τ HCCC(26), τ CNNC(31)	89	99
τ CNNC(16)	104	104
τ CCCC(31)	118	115
δ CCN(11), τ CNNC(27)	157	157
τ SCCC(14), τ CCSC(10), τ NCNN(16), τ CCCC(25)	174	168
τ CCCC(24)	197	175
ν CC(12), δ CNN(14), τ NCCN(12)	204	198
τ CCSC(13), τ NCCN(12)	269	250
τ CCSC(10), δ CCC(13)	278	265
τ NCNN(10), τ CNNC(13), δ CCS(14)	285	282
δ CCS(25), δ CCC(15)	300	300
δ CCS(18), τ CCCC(11)	317	315
δ CCN(19)	350	342
τ CCC(38), τ HCCN(10)	370	371

τ CCNN(22), τ CCSC(12)	374	374
δ ONN(14), δ CNN(12)	403	407
τ CCCC(53)	409	413
τ HNNC(16)	436	429
τ CNNC(20), τ CCCC(18), τ HNNC(10)	474	477
τ SCCC(36), τ CCSC(18)	509	512
ν CC(13)	516	519
ν CC(14), δ SCC(39)	540	536
τ HCCC(11), τ CCCC(38), τ SCCC(14)	565	562
ν NC(13), δ OCN(32)	571	579
δ CNN(19), τ NCNN(13)	619	617
δ CCC(41)	638	637
ν CC(14), ν SC(66)	650	651
ν CC(23), δ CNN(12), τ NCNN(12)	673	691
τ CCCC(29), τ CNNC(18)	687	706
ν SC(11), δ CCC(43)	706	724
ν NN(17), ν CC(16)	720	729
τ ONNC(23)	732	759
τ ONNC(57)	749	779
δ CNN(11), τ HCCC(24)	785	802
ν CC(31)	787	814
τ HCCC(79)	804	834
τ HCCC(55)	814	855
τ HCCC(53)	825	858
δ CNN(14), δ CCN(27)	831	869
τ HCCN(35)	867	912
τ HCCC(71)	897	920
τ HCCC(35)	936	963
τ HCCC(50), τ CCCC(12)	949	969
τ HCCC(45), δ HCH(16)	959	979
τ HCCC(77)	969	995
δ CCC(49), δ HCC(14)	976	1007
τ HCNN(87)	1007	1017
ν CC(15), δ HCC(44), τ HCCC(10)	1019	1026
δ HCC(66), δ HCH(22)	1024	1048
δ NNC(27), δ CNN(10)	1029	1051
δ HCH(15), τ HCCC(60)	1040	1053
δ HCC(17), ν CC(51)	1052	1067
ν NC(11), ν NN(52)	1104	1086
ν CC(39)	1138	1112
ν CC(22)	1167	1146
δ HCC(13)	1169	1152
ν CC(25), δ HCC(11)	1172	1174
ν CC(38), δ HCC(12)	1176	1176
δ HCC(18), ν CC(20)	1194	1197
δ HCC(21)	1203	1215
δ CNN(11), ν NC(26), ν NN(15)	1215	1219
δ HCC(68)	1252	1236
τ HCCN(36), δ CNN(17)	1282	1304
δ HCC(52)	1294	1317
δ HCC(27), ν CC(20)	1302	1328
τ HCCN(26), ν NN(11), δ CNN(13)	1314	1342
ν NC(14), δ HCN(45)	1344	1382
δ HCH(90)	1356	1393
δ HCH(87)	1371	1394
δ HNN(66), ν OC(11)	1374	1403
δ HCC(25), ν CC(16)	1397	1412
δ HCH(86)	1414	1446

δ HCH(75), τ HCCC(24)	1420	1447
ν NC(17), δ HCN(16)	1434	1452
τ HCH(80), δ HCCC(19)	1443	1454
τ HCCC(18), δ HCH(62)	1444	1458
δ HCH(66), τ HCCC(18)	1450	1463
ν CC(66)	1475	1496
δ HCC(43)	1499	1518
ν CC(70)	1539	1592
ν CC(27), δ CCC(13)	1566	1594
ν CC(57)	1584	1639
ν NC(68)	1595	1681
ν NC(79)	1606	1702
ν OC(67), ν NC(12)	1747	1773
ν CH(91)	2927	2867
ν CH(93)	2931	2874
ν CH(98)	2963	2913
ν CH(98)	2978	2919
ν CH(99)	2978	2924
ν CH(91)	3005	2937
ν CH(93)	3010	2946
ν CH(98)	301	2963
ν CH(88)	3052	2999
ν CH(78)	3054	3006
ν CH(87)	3057	3019
ν CH(93)	3072	3028
ν CH(99)	3078	3034
ν CH(72)	3092	3035
ν CH(98)	3106	3061
ν NH(100)	3566	3560





Şekil 3.18. 30 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)) (b) ve HF 6-311G(d,p) (c) IR spektrumları

Tablo 3.39. 30 Bileşiğinin hesaplanan bağ açıları (A^0)

Bağ Açıları	B3LYP	HF	Bağ Açıları	B3LYP	HF
N(33)-C(1)-N(35)	111.387	111.294	H(30)-C(16)-H(32)	107.260	107.942
N(33)-N(34)-C(2)	114.348	113.644	H(31)-C(16)-H(32)	108.022	107.943
N(33)-N(34)-H(17)	120.501	121.027	C(13)-C(14)-H(28)	119.467	119.565
H(17)-N(34)-C(2)	125.139	125.298	H(28)-C(14)-C(15)	119.362	119.318
N(34)-C(2)-O(38)	130.023	129.557	C(14)-C(15)-H(29)	119.827	119.631
O(38)-C(2)-N(35)	128.716	128.499	H(29)-C(15)-C(10)	119.445	119.564
N(33)-C(1)-C(9)	124.685	124.690	N(34)-C(2)-N(35)	101.260	101.943
N(35)-C(1)-C(9)	123.901	123.993	N(34)-N(33)-C(1)	104.751	105.077
C(1)-C(9)-H(24)	106.455	106.330	C(2)-N(35)-N(36)	130.089	130.156
C(1)-C(9)-H(25)	109.031	109.003	N(35)-N(36)-C(3)	118.796	119.358
H(24)-C(9)-H(25)	108.090	108.184	N(36)-C(3)-H(18)	122.510	122.561
H(24)-C(9)-C(10)	110.018	110.077	H(18)-C(3)-C(4)	117.124	117.839
H(25)-C(9)-C(10)	109.664	110.080	C(3)-C(4)-C(5)	126.164	126.207
C(9)-C(10)-C(11)	121.163	121.474	C(3)-C(4)-S(37)	123.223	123.568
C(9)-C(10)-C(15)	120.466	120.253	C(4)-C(5)-C(6)	113.339	112.979
C(10)-C(11)-H(26)	119.610	119.793	C(4)-C(5)-H(19)	122.508	122.870
H(26)-C(11)-C(12)	119.635	119.374	H(19)-C(5)-C(6)	124.152	124.148
C(11)-C(12)-H(27)	119.325	119.156	C(5)-C(6)-H(20)	123.844	123.489
H(27)-C(12)-C(13)	119.508	119.730	H(20)-C(6)-C(7)	122.699	123.026
C(12)-C(13)-C(14)	117.815	117.868	C(6)-C(7)-C(8)	128.089	128.063
C(12)-C(13)-C(16)	121.289	121.594	C(7)-C(8)-H(21)	109.852	109.737
C(13)-C(16)-H(30)	111.061	110.986	C(7)-C(8)-H(22)	111.741	111.259
C(13)-C(16)-H(31)	111.416	110.997	C(7)-C(8)-H(23)	111.723	111.263
C(13)-C(16)-H(32)	111.405	111.221	H(21)-C(8)-H(22)	107.942	108.249
H(30)-C(16)-H(31)	107.479	107.599	H(22)-C(8)-H(23)	107.484	107.974

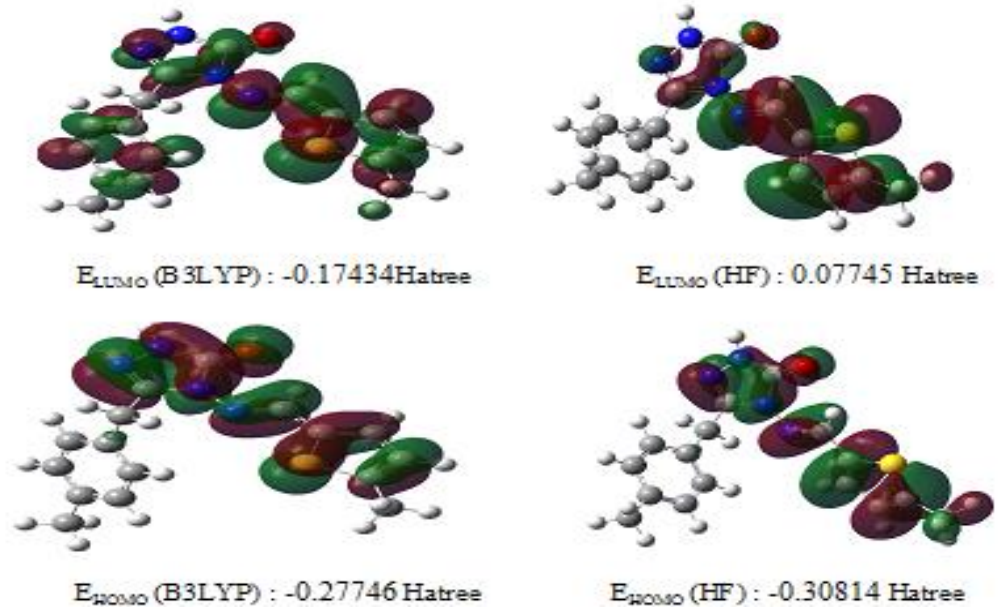
Tablo 3.40. 30 Bileşiğinin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.493	1.496	21 C(16)-H(31)	1.093	1.086
2 C(1)-N(33)	1.297	1.267	22 C(16)-H(32)	1.092	1.083
3 C(1)-N(35)	1.387	1.378	23 C(13)-C(14)	1.400	1.393
4 N(33)-N(34)	1.379	1.369	24 C(14)-H(28)	1.085	1.076
5 N(34)-C(2)	1.368	1.346	25 C(14)-C(15)	1.390	1.379
6 C(2)-N(35)	1.418	1.388	26 C(15)-H(29)	1.085	1.076
7 C(2)-O(38)	1.216	1.195	27 N(36)-C(3)	1.288	1.258
8 N(35)-N(36)	1.370	1.364	28 C(3)-H(18)	1.086	1.075
9 N(34)-H(17)	1.005	0.990	29 C(3)-C(4)	1.441	1.465
10 C(9)-H(24)	1.092	1.082	30 C(4)-C(5)	1.374	1.348

11	C(9)-H(25)	1.091	1.081	31	C(4)-S(37)	1.751	1.737
12	C(9)-C(10)	1.522	1.519	32	C(5)-C(6)	1.418	1.429
13	C(10)-C(11)	1.394	1.382	33	C(5)-H(19)	1.082	1.072
14	C(10)-C(15)	1.398	1.391	34	C(6)-H(20)	1.082	1.074
15	C(11)-H(26)	1.084	1.075	35	C(6)-C(7)	1.369	1.349
16	C(11)-C(12)	1.393	1.388	36	C(7)-S(37)	1.746	1.729
17	C(12)-H(27)	1.085	1.076	37	C(7)-C(8)	1.497	1.500
18	C(12)-C(13)	1.396	1.383	38	C(8)-H(21)	1.091	1.085
19	C(13)-C(16)	1.509	1.510	39	C(8)-H(22)	1.094	1.083
20	C(16)-H(30)	1.095	1.086	40	C(8)-H(23)	1.094	1.085

Tablo 3.41. 30 Bileşiminin atomlarının hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.372	0.499	H21	0.132	0.119
C2	0.532	0.721	H22	0.120	0.118
C3	0.140	0.214	H23	0.132	0.106
C4	-0.291	-0.338	H24	0.149	0.149
C5	-0.029	0.017	H25	0.142	0.141
C6	-0.041	-0.074	H26	0.095	0.095
C7	-0.291	-0.287	H27	0.081	0.085
C8	-0.245	-0.187	H28	0.083	0.088
C9	-0.181	-0.141	H29	0.095	0.101
C10	-0.119	-0.150	H30	0.126	0.108
C11	-0.055	-0.056	H31	0.108	0.108
C12	-0.079	-0.085	H32	0.115	0.092
C13	-0.095	-0.121	N33	-0.221	-0.282
C14	-0.076	-0.093	N34	-0.312	-0.379
C15	-0.038	-0.039	N35	-0.383	-0.493
C16	-0.257	-0.173	N36	-0.216	-0.252
H17	0.250	0.260	S37	0.293	0.263
H18	0.154	0.169	O38	-0.392	-0.527
H19	0.105	0.115			
H20	0.097	0.101			



Şekil 3.19. 30 Bileşiminin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.42. 30 Bileşiminin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-1.0414	1.0731
μ_y	-0.4530	-0.4049
μ_z	1.3003	2.6117
μ_{Toplam}	1.7264	2.8524

Tablo 3.43. 30 Bileşiminin hesaplanan enerji değerleri

Enerji	B3LYP	HF
(a.u.)	-1311.98598	-1305.56519

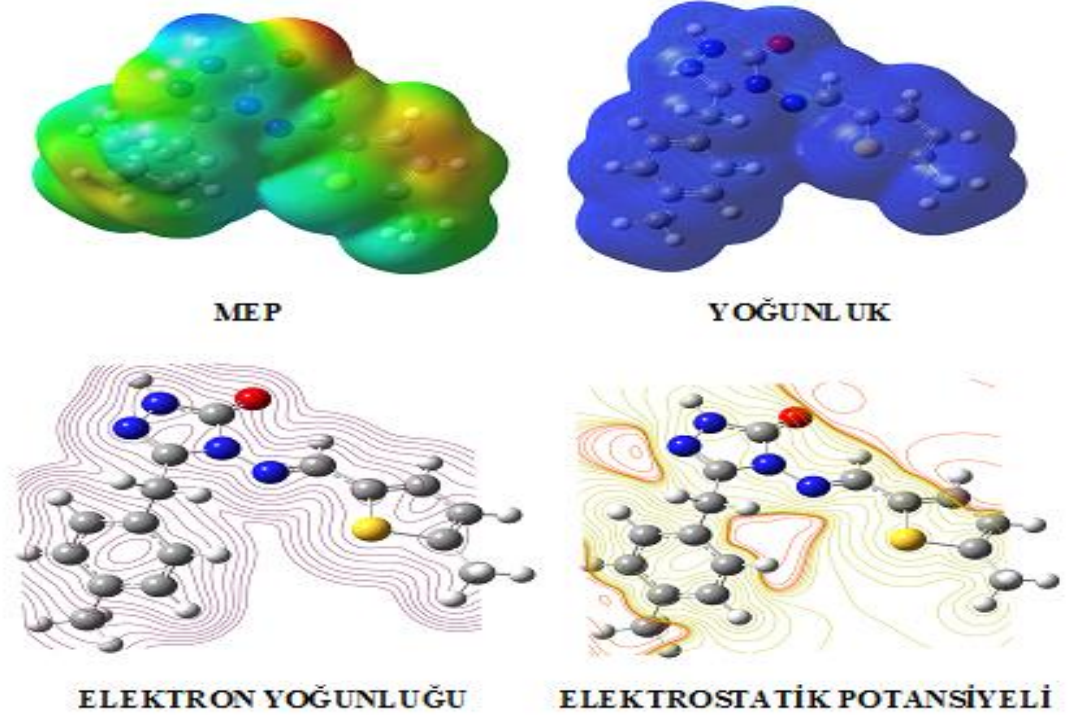
Tablo 3.44. 30 Bileşiminin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hartree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

Tablo 3.45. 30 Bileşiminin hesaplanan termodinamik özellikleri

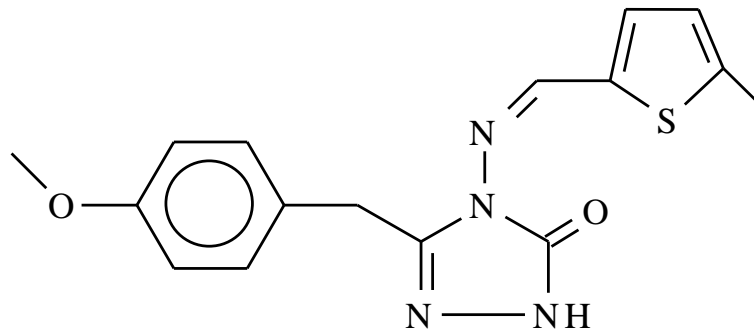
Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.01385	0.01492
B	0.00860	0.00766
C	0.00584	0.00557
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.28863	0.31080
B	0.17911	0.15961
C	0.12166	0.11605
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	196.993	209.853
Total	198.771	211.631
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	70.752	65.612
Total	76.713	71.573
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	43.111	43.111
Dönel	35.190	35.278
Titreşim	80.851	77.200
Total	159.152	155.588
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.296119	0.317636

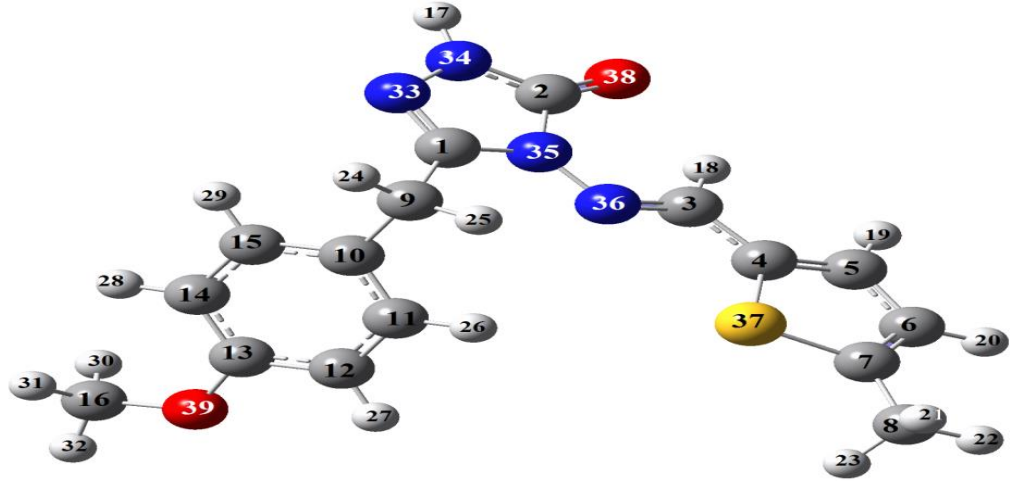
Enerjide Termal Düzeltme	0.316761	0.337255
Entalpide Termal Düzeltme	0.317705	0.338199
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.242087	0.264274
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1311.689868	-1305.247561
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1311.669226	-1305.227943
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1311.668282	-1305.226999
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1311.743900	-1305.300924
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	185.81770	199.31988



Şekil 3.20. 30 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.6. 3-*p*-Metoksibenzil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (31)





Şekil 3.21. 31 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

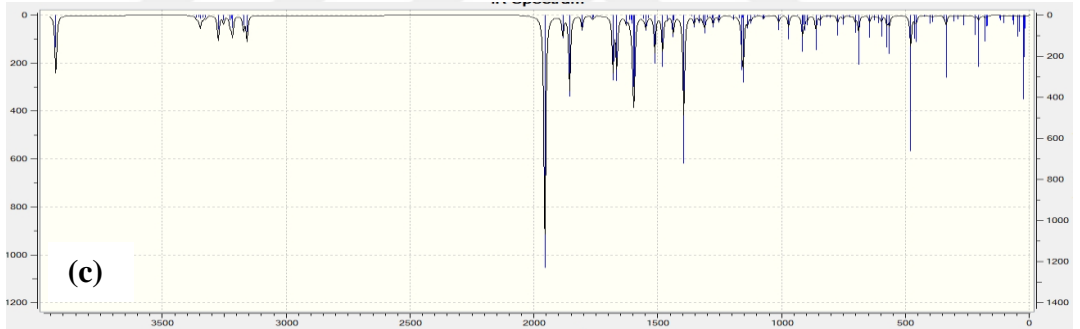
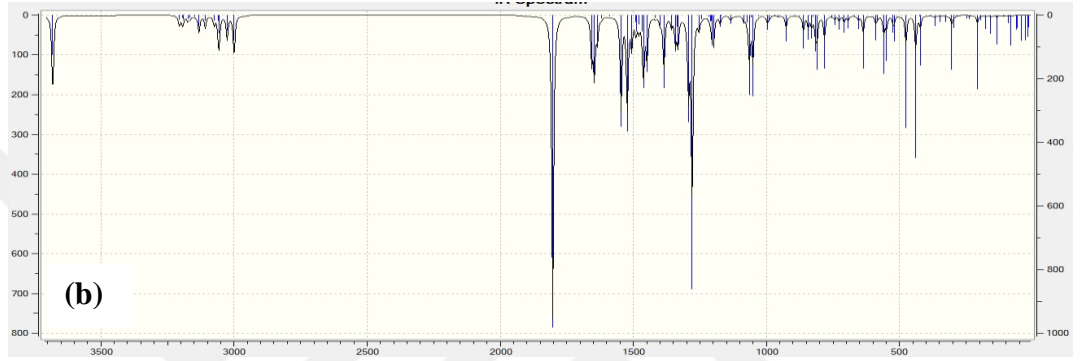
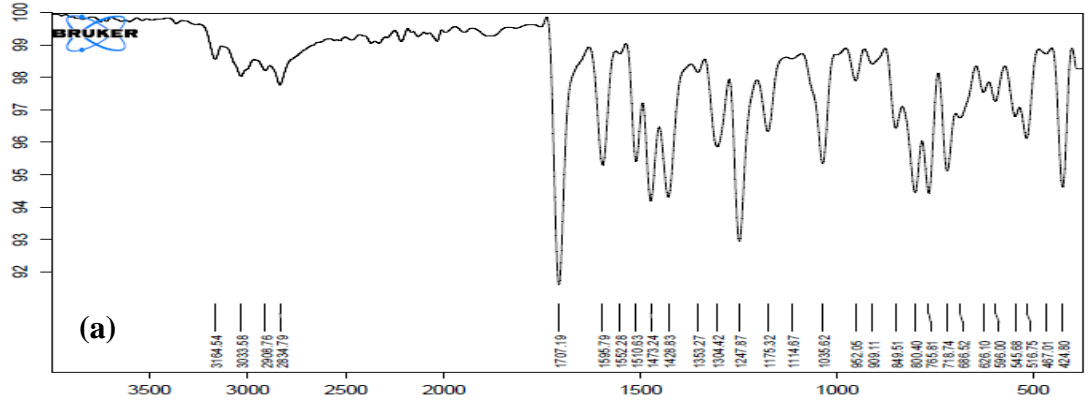
Tablo 3.46. 31 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146.66	170.22	-23.56	170.97	-24.41	160.20	-13.54	161.44	-14.78
C2	151.74	170.12	-18.38	171.07	-13.94	159.27	-7.53	160.22	-8.48
C3	149.1	164.74	-15.64	165.68	-16.08	157.42	-8.32	158.78	-9.68
C4	136.4	167.57	-31.17	165.18	-19.21	148.26	-11.86	145.24	-8.84
C5	134.78	152.96	-18.18	155.61	-12.42	143.16	-8.38	146.42	-11.64
C6	127.32	146.08	-18.76	147.20	-49.90	130.36	-3.04	131.04	-3.72
C7	145.65	173.82	-28.17	177.22	111.20	160.09	-14.44	162.33	-16.68
C8	15.96	34.51	-18.55	34.45	-35.23	21.36	-5.40	21.18	-5.22
C9	30.72	51.35	-20.63	51.19	-119.70	34.79	-4.07	34.66	-3.94
C10	127.91	150.04	-22.13	150.42	-24.94	139.91	-12.00	140.79	-12.88
C11	130.42	153.33	-22.91	152.85	-7.14	143.42	-13.00	143.22	-12.80
C12	114.32	138.27	-23.95	137.56	-67.87	131.01	-16.69	131.20	-16.88
C13	158.56	182.07	-23.51	182.19	29.31	169.09	-10.53	168.60	-10.04
C14	114.32	127.82	-13.50	129.25	-37.50	131.62	-17.30	131.96	-17.64
C15	130.42	151.38	-20.96	151.82	58.40	142.31	-11.89	142.44	-12.02
C16	55.48	71.46	-15.98	72.02	47.44	62.61	-7.13	62.94	-7.46
H17	11.91	7.52	4.39	8.04	1.12	6.75	5.16	7.23	4.68
H18	9.7	10.84	-1.14	10.79	1.92	9.91	-0.21	9.89	-0.19
H19	7.47	7.55	-0.08	7.78	-0.05	7.21	0.26	7.50	-0.03
H20	6.88	7.29	-0.41	7.52	3.56	6.75	0.13	6.98	-0.10
H21	2.5	3.25	-0.75	3.32	-0.72	2.66	-0.16	2.73	-0.23
H22	2.5	3.04	-0.54	3.22	-0.82	2.62	-0.12	2.80	-0.30
H23	2.5	3.25	-0.75	3.32	-1.91	2.66	-0.16	2.74	-0.24
H24	3.88	4.32	-0.44	4.41	-0.77	3.77	0.11	3.90	-0.02
H25	3.88	4.54	-0.66	4.65	-4.48	3.96	-0.08	4.12	-0.24
H26	7.22	8.29	-1.07	8.36	-0.46	8.16	-0.94	8.27	-1.05
H28	6.87	7.20	-0.33	7.48	-1.39	7.46	-0.59	7.62	-0.75
H29	7.22	8.18	-0.96	8.26	2.55	7.94	-0.72	8.02	-0.80
H30	3.71	4.56	-0.85	4.67	-0.59	3.32	0.39	3.47	0.24
H31	3.71	4.15	-0.44	4.30	-0.56	3.96	-0.25	4.06	-0.35
H32	3.71	4.12	-0.41	4.27	3.71	3.30	0.41	3.48	0.23

Tablo 3.47. 31 Bileşiminin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm⁻¹)

Titrişim	skalalı dft	skalalı hf
τ NCCC(47), τ NCCN(12)	14	16
τ NCCC(44), τ CCCN(17)	19	20
τ CCCC(80)	26	23
δ CCC(16), τ NNCC(13), τ CCCC(19)	40	39
δ CNN(20), δ CCC(15), δ CCN(34)	55	45
τ NCCN(10), τ CCCN(31), τ CCNN(22)	60	59
τ NNCC(12), τ COCC(47)	80	64
τ HCCC(82)	89	98
τ CNNC(19), τ NCCN(16), τ NCCC(10), τ CCCN(15)	107	109
τ COCC(28), τ CCCC(16)	129	113
τ NNCC(12)	153	161
δ CNN(15), δ NNC(12)	171	164
τ CNNC(10), δ NCC(11), δ CCC(13)	188	171
τ NCCC(11), τ CCCN(34), τ SCCC(11), τ CCSC(18)	201	194
δ OCC(11), τ HCOC(39)	231	208
δ OCC(16), δ COC(16), τ HCOC(11)	239	250
τ CCCN(25), τ CCNN(12), τ CCSC(13), τ NCCN(23)	276	275
δ CCS(52)	286	290
τ HNNC(14), τ CNNC(15), τ NNCC(19)	294	319
δ CCC(30), δ COC(11)	316	326
τ CCCC(11), δ CCS(11)	338	372
δ NCC(14), τ HCCN(11)	355	381
τ CCCN(21), τ CCNN(23), τ CCSC(18)	373	403
δ OCN(14), δ CCC(18)	408	432
τ HCCC(16), τ CCCC(77)	412	438
δ CCC(11), τ HNNC(33)	425	442
δ OCC(13), δ COC(12) τ HNNC(27)	460	454
τ OCCC(29), τ HCCC(20)	504	536
τ SCCC(38)	508	546
δ COC(12), δ SCC(18)	532	566
δ SCC(23)	541	578
τ CCCN(42), τ SCCC(15)	564	592
δ OCN(31)	570	612
δ CNN(14), δ CCC(10)	616	654
δ CCC(46)	633	667
ν SC(66)	648	687
δ SCC(23), δ CCC(45)	671	713
τ NCNC(11), τ CCCC(24)	685	734
τ CCCC(21)	704	762
τ ONNC(72)	720	774
δ CCC(29)	730	801
ν HCCC(88)	784	850
ν NC(10), δ NNC(14), τ HCCC(15)	790	860
τ HCCC(93)	798	867
ν NN(16), δ CNN(21), δ CCN(20)	803	869
ν CC(30), τ HCCC(10)	816	889
τ HCCC(31), τ OCCC(10)	833	922
τ HCCC(80)	865	955
δ HCC(10), τ HCCN(35)	896	960
τ HCCC(65), τ CCCC(14)	925	1016
τ CCCC(13), τ HCCC(82)	936	1019
τ HCCC(38), δ HCH(14)	957	1042
τ HCNN(90)	964	1050
δ HCC(17), δ CCC(59)	995	1066
δ NNC(31)	1017	1079
δ HCH(18), τ HCCC74)	1022	1095

v OC(73)	1030	1098
δ HCC(54), v CC(23)	1039	1100
v NC(12), v NN(54)	1050	1110
v CC(13), δ HCC(56)	1096	1134
δ HCH(23), τ HCOC(75)	1134	1186
v CC(55)	1136	1189
v CC(11), δ HCC(61)	1159	1210
δ HCC(11), τ HCOC(28)	1164	1214
δ CNN(11), τ HCOC(12), v NC(15)	1167	1234
v NN(10), δ HCC(24)	1170	1243
δ HCC(16), v CC(47)	1177	1250
δ HCC(55), v CC(11)	1202	1266
δ CCC(11) v CC(29)	1213	1284
v CC(22), v OC(42)	1238	1292
v NN(18), δ CNN(23)	1251	1323
τ HCCN(47), v CC(17)	1289	1361
δ HCC(62), v CC(10)	1291	1364
v CC(23), δ HCN(25)	1298	1388
δ HCC(15), δ HCCN(11), v CC(25)	1313	1405
δ HCN(24), δ HNN(13)	1340	1434
δ HNN(59)	1353	1460
δ HCH(95)	1371	1469
δ HCC(18), v CC(16), v NC(11)	1402	1479
δ HCC(14), v CC(13), v NC(12)	1414	1513
δ HCH(88)	1418	1516
δ HCH(63)	1441	1526
τ HCOC(22), δ HCH(76)	1444	1530
δ HCH(76), τ HCOC(19)	1457	1544
v CC(57), δ HCH(11)	1473	1580
δ HCC(49), δ CCC(13), v CC(13)	1496	1595
δ HCC(20), v CC(54)	1538	1669
v CC(50), δ CCC(24)	1566	1672
v NC(58)	1582	1713
v NC(62)	1593	1761
δ HCC(17), v CC(52),	1603	1787
v OC(73), v NC(10)	1744	1856
v CH(99)	2902	2997
v CH(92)	2928	3010
v CH(99)	2957	3052
v CH(97)	2960	3057
v CH(99)	2975	3062
v CH(99)	3030	3107
v CH(97)	3047	3155
v CH(99)	3063	3165
v CH(88)	3071	3175
v CH(99)	3088	3176
v CH(88)	3090	3181
v CH(99)	3100	3182
v CH(95)	3102	3190
v NH(100)	3561	3729



Şekil 3.22. 31 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)(b) ve HF 6-311G(d,p) (c)) IR spektrumları

Tablo 3.48. 31 Bileşiğinin bağ açıları (A^0)

Bağ Açıları	B3LYP	HF	Bağ Açıları	B3LYP	HF
N(33)-C(1)-N(35)	111.382	111.271	H(30)-C(16)-H(32)	109.236	108.993
N(33)-N(34)-C(2)	114.352	113.634	H(31)-C(16)-H(32)	109.215	109.337
N(33)-N(34)-H(17)	120.511	121.028	C(13)-C(14)-H(28)	121.104	119.326
H(17)-N(34)-C(2)	125.124	125.307	H(28)-C(14)-C(15)	119.264	120.812
N(34)-C(2)-O(38)	130.042	129.553	C(14)-C(15)-H(29)	119.032	119.450
O(38)-C(2)-N(35)	128.707	128.495	H(29)-C(15)-C(10)	119.456	119.577
N(33)-C(1)-C(9)	124.734	124.703	N(34)-C(2)-N(35)	101.250	101.952
N(35)-C(1)-C(9)	109.718	124.007	N(34)-N(33)-C(1)	104.739	105.081
C(1)-C(9)-H(24)	106.489	106.317	C(2)-N(35)-N(36)	130.052	130.210
C(1)-C(9)-H(25)	108.935	109.001	N(35)-N(36)-C(3)	118.867	119.659
H(24)-C(9)-H(25)	108.043	108.179	N(36)-C(3)-H(18)	122.532	123.119
H(24)-C(9)-C(10)	110.179	110.084	H(18)-C(3)-C(4)	117.150	116.674
H(25)-C(9)-C(10)	109.718	110.057	C(3)-C(4)-C(5)	126.237	125.316
C(9)-C(10)-C(11)	121.318	121.271	C(3)-C(4)-S(37)	123.158	123.640

C(9)-C(10)-C(15)	120.538	120.232	C(4)-C(5)-C(6)	113.339	113.119
C(10)-C(11)-H(26)	119.614	119.774	C(4)-C(5)-H(19)	122.498	123.073
H(26)-C(11)-C(12)	119.281	119.304	H(19)-C(5)-C(6)	124.163	123.809
C(11)-C(12)-H(27)	121.313	120.725	C(5)-C(6)-H(20)	123.859	123.622
H(27)-C(12)-C(13)	118.456	119.346	H(20)-C(6)-C(7)	122.668	123.324
C(12)-C(13)-C(14)	119.380	119.834	C(6)-C(7)-C(8)	128.098	127.916
C(12)-C(13)-O(39)	115.897	120.111	C(7)-C(8)-H(21)	109.834	109.832
C(13)-O(39)-C(16)	118.429	115.657	C(7)-C(8)-H(22)	111.730	111.192
O(39)-C(16)-H(30)	111.565	111.155	C(7)-C(8)-H(23)	111.740	111.193
O(39)-C(16)-H(31)	105.854	106.897	H(21)-C(8)-H(22)	107.952	108.291
O(39)-C(16)-H(32)	111.577	111.105	H(22)-C(8)-H(23)	107.482	107.954
H(30)-C(16)-H(31)	109.302	109.310	H(21)-C(8)-H(23)	107.945	108.278

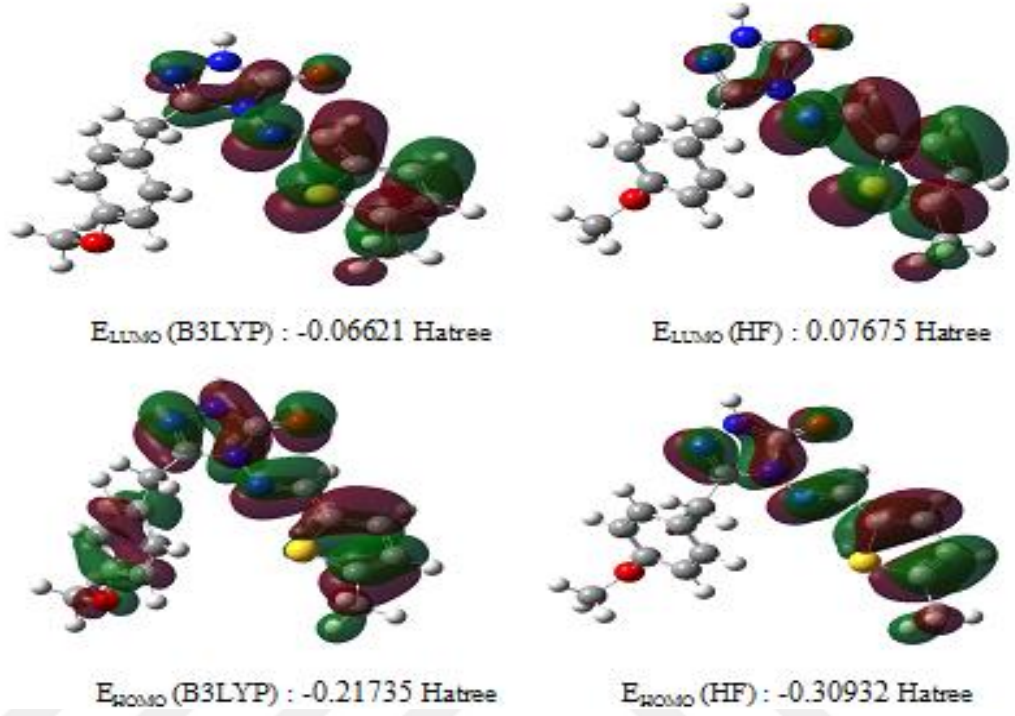
Tablo 3.49. 31 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları		B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları		B3LYP	HF
1	C(1)-C(9)	1.494	1.496	22	C(16)-H(31)	1.095	1.081
2	C(1)-N(33)	1.297	1.267	23	C(16)-H(32)	1.088	1.086
3	C(1)-N(35)	1.387	1.378	24	C(13)-C(14)	1.397	1.385
4	N(33)-N(34)	1.380	1.369	25	C(14)-H(28)	1.081	1.075
5	N(34)-C(2)	1.368	1.346	26	C(14)-C(15)	1.394	1.381
6	C(2)-N(35)	1.418	1.387	27	C(15)-H(29)	1.085	1.076
7	C(2)-O(38)	1.216	1.196	28	N(36)-C(3)	1.288	1.258
8	N(35)-N(36)	1.370	1.363	29	C(3)-H(18)	1.087	1.075
9	N(34)-H(17)	1.005	0.990	30	C(3)-C(4)	1.441	1.457
10	C(9)-H(24)	1.092	1.082	31	C(4)-C(5)	1.374	1.348
11	C(9)-H(25)	1.091	1.081	32	C(4)-S(37)	1.751	1.736
12	C(9)-C(10)	1.522	1.520	33	C(5)-C(6)	1.418	1.431
13	C(10)-C(11)	1.399	1.385	34	C(5)-H(19)	1.082	1.074
14	C(10)-C(15)	1.394	1.390	35	C(6)-H(20)	1.082	1.074
15	C(11)-H(26)	1.084	1.074	36	C(6)-C(7)	1.369	1.347
16	C(11)-C(12)	1.387	1.385	37	C(7)-S(37)	1.746	1.734
17	C(12)-H(27)	1.083	1.074	38	C(7)-C(8)	1.497	1.500
18	C(12)-C(13)	1.399	1.381	39	C(8)-H(21)	1.091	1.083
19	C(13)-O(39)	1.364	1.360	40	C(8)-H(22)	1.094	1.085
20	O(39)-C(16)	1.419	1.405	41	C(8)-H(23)	1.094	1.085
21	C(16)-H(30)	1.095	1.086				

Tablo 3.50. 31 Bileşiminin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.380	0.500	H21	0.132	0.118
C2	0.531	0.723	H22	0.119	0.118
C3	0.141	0.223	H23	0.133	0.107
C4	-0.292	-0.303	H24	0.147	0.148
C5	-0.029	0.031	H25	0.145	0.146
C6	-0.042	-0.069	H26	0.102	0.114
C7	-0.292	-0.295	H27	0.100	0.103
C8	-0.245	-0.179	H28	0.104	0.104
C9	-0.192	-0.140	H29	0.095	0.104
C10	-0.131	-0.152	H30	0.111	0.077
C11	-0.053	-0.064	H31	0.110	0.076
C12	-0.098	-0.094	H32	0.128	0.096
C13	-0.176	-0.210	N33	-0.222	-0.283
C14	-0.134	-0.085	N34	-0.312	-0.379
C15	-0.036	-0.042	N35	-0.382	-0.492
C16	-0.132	-0.004	N36	-0.217	-0.267

H17	0.249	0.259	S37	0.294	0.278
H18	0.154	0.176	O38	-0.393	-0.530
H19	0.105	0.112	O39	-0.349	-0.493
H20	0.097	0.102			



Şekil 3.23. 31 Bileşiğinin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.51. 31 Bileşiğinin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-0.1285	-0.6168
μ_y	-0.0006	-0.6279
μ_z	2.3243	2.8982
μ_{Toplam}	2.3279	3.0289

Tablo 3.52. 31 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1387.21167	-1380.43045

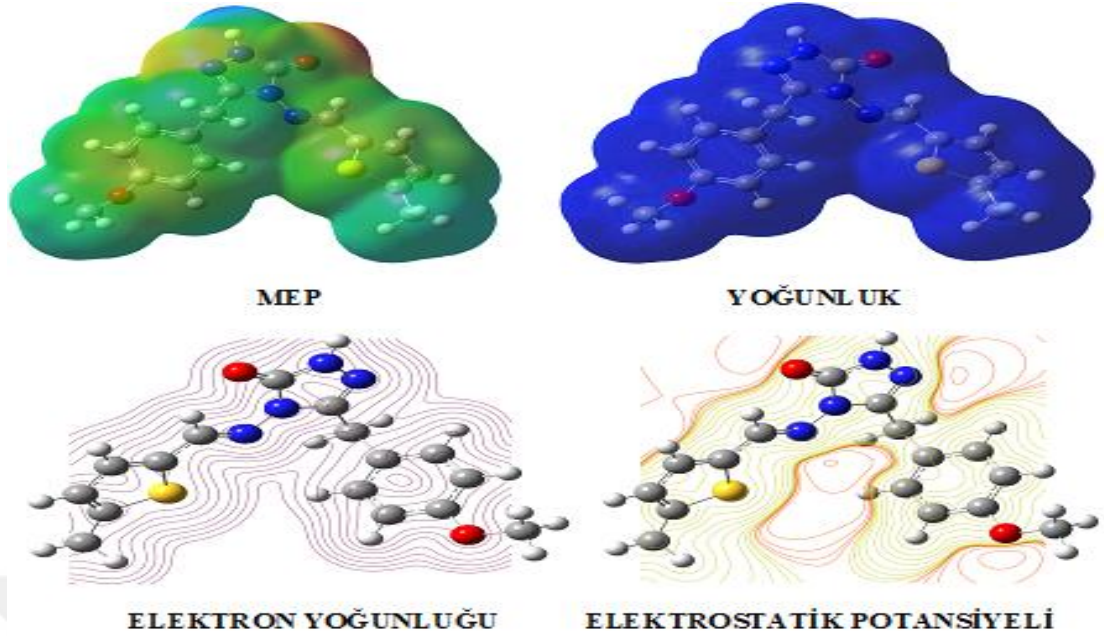
Tablo 3.53. 31 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hartree	ev	kcal/mol	KJ/mol	
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012	
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3	
A	elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I	İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE	Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ	Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi	Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656

ω	Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP	Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S	Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η	Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

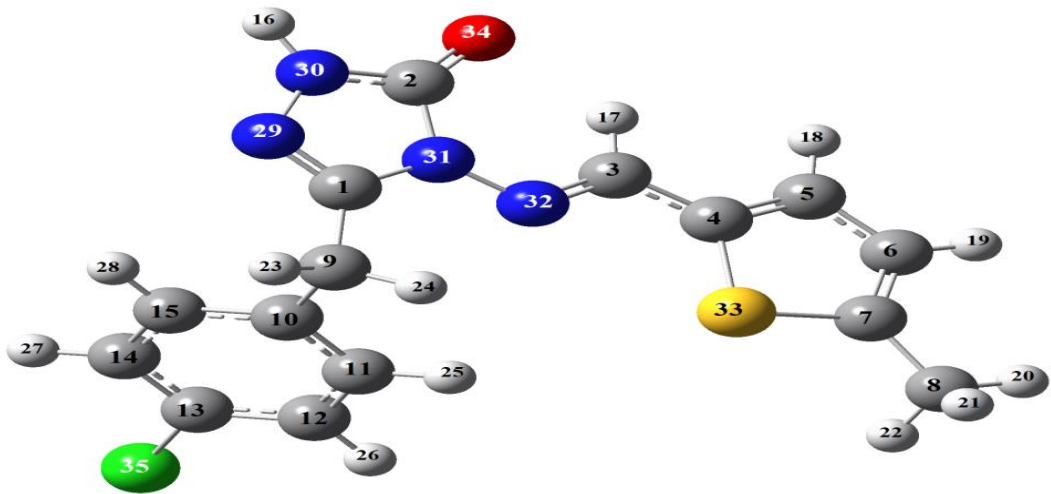
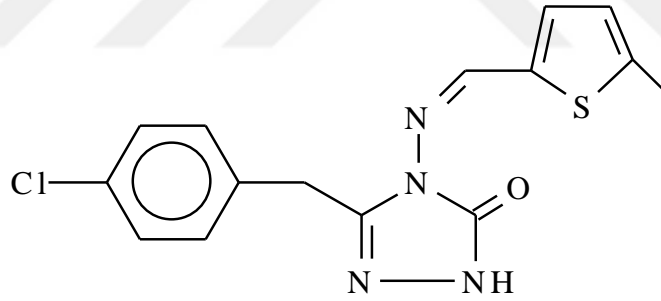
Tablo 3.54. 31 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.01239	0.01216
B	0.00735	0.00771
C	0.00511	0.00516
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.25823	0.25333
B	0.15316	0.16072
C	0.10657	0.10745
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	200.647	180.716
Total	202.425	182.494
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	73.933	68.509
Total	79.895	74.471
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.403	43.260
Dönel	33.812	35.551
Titreşim	57.517	79.072
Total	133.731	157.882
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.301239	0.323313
Enerjide Termal Düzeltme	0.322584	0.343701
Entalpide Termal Düzeltme	0.323528	0.344645
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.247302	0.269630
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1386.910437	-1380.107138
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1386.889093	-1380.086750
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1386.888148	-1380.085806
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1386.964375	-1380.160821
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	189.03057	172.57234



Şekil 3.24. 31 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.7. 3-*p*-Klorobenzil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (32)



Şekil 3.25. 32 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

Tablo 3.55. 32 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

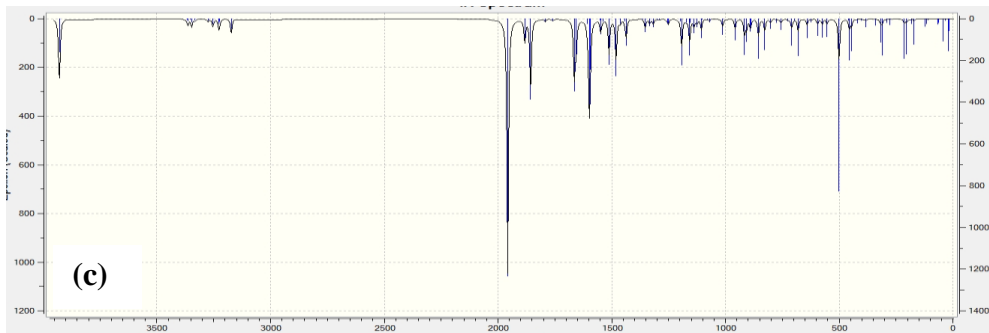
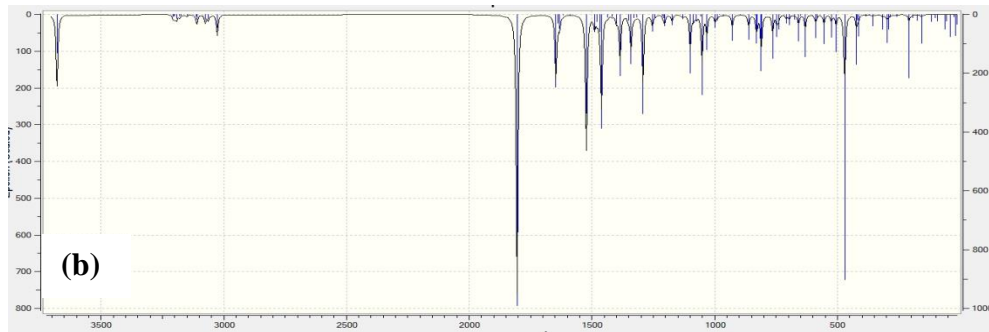
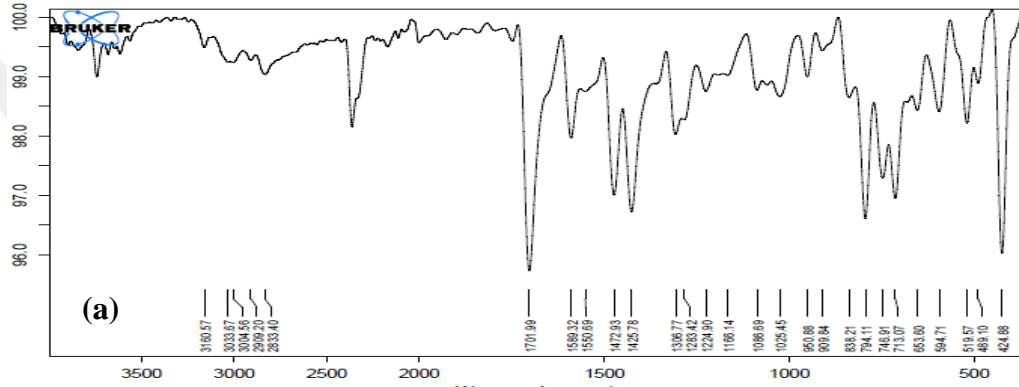
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146.19	169.10	-22.91	169.98	-23.79	159.53	-13.34	160.80	-14.61
C2	151.95	169.97	-18.02	170.97	-19.02	159.15	-7.20	160.14	-8.19
C3	149.11	165.08	-15.97	165.86	-16.75	157.68	-8.57	158.87	-9.76
C4	136.53	167.02	-30.49	164.94	-28.41	147.77	-11.24	145.10	-8.57
C5	134.98	153.56	-18.58	155.84	-20.86	143.61	-8.63	146.56	-11.58
C6	127.51	146.31	-18.80	147.22	-19.71	130.43	-2.92	131.03	-3.52
C7	145.93	174.28	-28.35	177.47	-31.54	160.41	-14.48	162.43	-16.50
C8	16.14	34.50	-18.36	34.43	-18.29	21.35	-5.21	21.16	-5.02
C9	31.16	51.54	-20.38	51.39	-20.23	34.77	-3.61	34.67	-3.51
C10	132.15	157.52	-25.37	158.98	-26.83	144.63	-12.48	146.21	-14.06
C11	131.46	153.13	-21.67	153.49	-22.03	142.03	-10.57	142.09	-10.63
C12	129.03	149.86	-20.83	150.11	-21.08	138.99	-9.96	139.27	-10.24
C13	135.3	163.66	-28.36	162.16	-26.86	146.79	-11.49	145.08	-9.78
C14	129.03	149.96	-20.93	150.21	-21.18	139.23	-10.20	139.56	-10.53
C15	131.46	151.54	-20.08	152.28	-20.82	140.93	-9.47	141.35	-9.89
H16	11.85	7.56	4.29	8.07	3.78	6.78	5.07	7.25	4.60
H17	9.67	10.84	-1.17	10.78	-1.11	9.91	-0.24	9.89	-0.22
H18	7.42	7.57	-0.15	7.78	-0.36	7.23	0.19	7.50	-0.08
H19	6.86	7.31	-0.45	7.51	-0.65	6.76	0.10	6.97	-0.11
H20	2.48	3.24	-0.76	3.21	-0.73	2.65	-0.17	2.72	-0.24
H21	2.48	3.05	-0.57	3.31	-0.83	2.63	-0.15	2.79	-0.31
H22	2.48	3.23	-0.75	3.31	-0.83	2.65	-0.17	2.73	-0.25
H23	3.94	4.29	-0.35	4.41	-0.47	3.76	0.18	3.90	0.04
H24	3.94	4.56	-0.62	4.70	-0.76	3.95	-0.01	4.13	-0.19
H25	7.34	8.29	-0.95	8.44	-1.10	8.11	-0.77	8.25	-0.91
H26	7.3	7.92	-0.62	8.06	-0.76	7.65	-0.35	7.81	-0.51
H27	7.3	7.92	-0.62	8.05	-0.75	7.65	-0.35	7.80	-0.50
H28	7.34	8.15	-0.81	8.26	-0.92	7.87	-0.53	7.99	-0.65

Tablo 3.56. 32 Bileşiminin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm⁻¹)

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ NCCC(54), τ NCCN(14)	13	14
τ CCCC(58)	26	29
δ CCC(19), τ NNCC(15), τ CCCC(18)	40	40
δ CCN(35), δ CNN(20), δ CCC(15)	55	56
τ NCCC(18), τ CCCN(30), τ CCNN(21)	59	60
τ HCCC(92)	88	98
τ CCCC(17), τ CNNC(14), τ NNCC(19), τ NCNC(11)	97	104
τ NCCC(13), τ CCCN(14)	112	112
δ CCC(14)	153	155
τ CNNC(15)	169	166
δ CNN(14), δ NCC(16), δ CCC(12)	187	185
τ NCCC(11), τ CCCN(44), τ SCCC(12), τ CCSC(18)	201	193
δ CICC(36)	250	251
τ CCCN(23), τ CCNN(12), τ CCSC(12), τ NCCN(31)	276	263
τ CCCCC(17), τ CCCC(13), δ CCS(23)	282	282
δ CICC(11), τ CNNC(13), δ CCS(21)	290	289
δ CCS(15), τ CCCCC(15), τ SCCC(49), ν CC(10)	307	309
δ NNC(10)	344	346
δ CCC(29), δ CICC(16), τ HCCC(14)	359	366
τ CCCN(21), τ CCNN(21), τ CCSC(18)	371	380
ν CICS(18), τ HNNC(10)	402	404
τ CCCC(72)	407	413
δ OCN(10), δ CCC(15)	410	415

τ ONNC(11), τ NCNC(10), τ HNNC(50)	456	454
τ CCCC(27), τ HCCC(17), τ C1CCC(19)	490	501
τ SCCC(39), τ CCSC(17)	509	520
ν CC(12), δ SCC(40)	538	539
τ CCCN(40), τ SCCC(14)	564	565
δ OCN(32)	571	581
ν CC(11)	611	617
δ CCC(62)	628	630
ν CIC(12), δ CNN(14), ν SC(18)	638	642
ν SC(54)	652	657
δ CCC(52), δ SCC(21)	674	685
τ NCNC(12), τ CCCC(50)	685	703
τ CCCC(12), τ ONNC(41)	717	726
τ ONNC(28), δ CCC(21)	724	749
τ HCCC(27)	784	805
τ HCCC(82)	786	808
ν CC(14), δ CCC(13), δ CNN(13)	801	822
ν NN(13), δ CCN(16)	805	830
τ HCCC(91)	811	850
τ HCCC(32), τ CCCC(11)	835	868
τ HCCC(80)	867	913
τ CCCC(10), δ HCC(47)	899	917
τ HCCC(65), τ CCCC(18)	935	970
τ HCCC(74), τ CCCC(11)	949	977
τ HCCC(38), δ HCH(14)	958	997
τ HCNN(91)	967	1002
δ HCC(11), δ CCC(68)	1000	1019
δ NNC(33)	1019	1031
δ HCH(18), τ HCCC(74)	1024	1048
δ HCC(52), ν CC(24)	1041	1048
ν NC(12), ν NN(54)	1052	1062
δ HCC(11), ν CC(50), ν CIC(18)	1066	1080
δ HCC(44), ν CC(28)	1095	1085
ν CC(55)	1137	1133
δ HCC(34), ν CC(18)	1165	1136
ν NC(10), δ HCC(21)	1166	1170
ν NC(10), ν NN(14), δ HCC(17), τ HCCC(10)	1171	1179
ν CC(54)	1174	1194
δ HCC(52), ν CC(11)	1204	1207
δ CCC(12), ν CC(29)	1215	1225
τ HCCC(10), ν NN(18), δ CNN(22)	1252	1234
ν CC(47), δ HCC(12)	1277	1301
δ HCC(36), τ HCCC(31)	1288	1307
δ HCN(24), ν CC(17)	1299	1325
δ HCC(23), τ HCCC(20), δ HCC(10), ν CC(14)	1310	1342
δ HCN(26), ν NC(10), δ HNN(12)	1342	1370
δ HNN(61)	1356	1394
δ HCH(95)	1373	1403
ν CC(19)	1393	1407
ν NC(32)	1415	1445
δ HCH(92)	1421	1447
δ HCH(80), τ HCCC(10)	1433	1449
δ HCH(63)	1443	1457
δ HCC(21), ν CC(18)	1474	1501
δ HCC(32), ν CC(17)	1476	1508
δ HCC(19), ν CC(54)	1540	1593
ν CC(51), δ CCC(16)	1567	1594
ν NC(28), ν CC(27)	1581	1623

v CC(26), v NC(33)	1589	1682
v NC(64)	1596	1705
v OC(73)	1749	1773
v CH(92)	2932	2874
v CH(98)	2967	2921
v CH(100)	2979	2924
v CH(92)	3012	2947
v CH(98)	3015	2967
v CH(100)	3051	3019
v CH(94)	3073	3032
v CH(88)	3081	3032
v CH(99)	3093	3037
v CH(89)	3101	3046
v CH(99)	3103	3047
v NH(100)	3107	3050



Şekil 3.26. 32 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)) (b) ve HF 6-311G(d,p) (c) IR spektrumları

Tablo 3.57. 32 Bileşiminin hesaplanan bağ açıları (A^0)

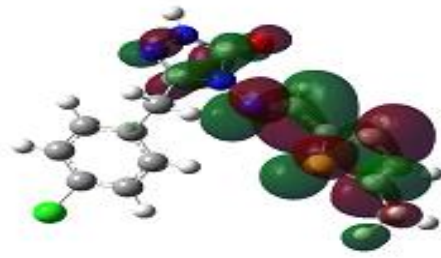
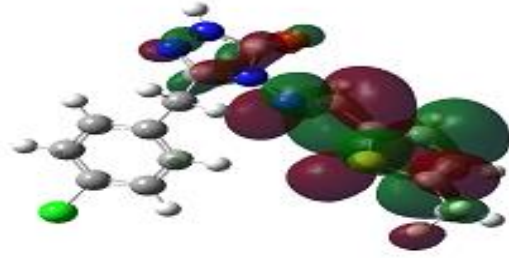
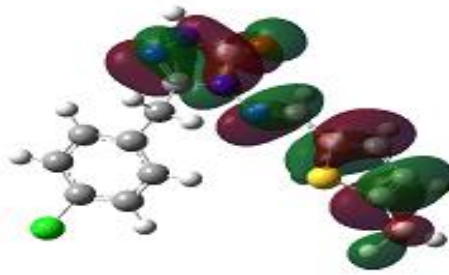
Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Açılı	B3LYP	HF
N(33)-C(1)-N(35)	111.387	111.294	H(31)-C(16)-H(32)	108.022	107.943
N(33)-N(34)-C(2)	114.348	113.644	C(13)-C(14)-H(28)	119.467	119.565
N(33)-N(34)-H(17)	120.501	121.027	H(28)-C(14)-C(15)	119.362	119.318
H(17)-N(34)-C(2)	125.139	125.298	C(14)-C(15)-H(29)	119.827	119.631
N(34)-C(2)-O(38)	130.023	129.557	H(29)-C(15)-C(10)	119.445	119.564
O(38)-C(2)-N(35)	128.716	128.499	N(34)-C(2)-N(35)	101.260	101.943
N(33)-C(1)-C(9)	124.685	124.690	N(34)-N(33)-C(1)	104.751	105.077
N(35)-C(1)-C(9)	123.901	123.993	C(2)-N(35)-N(36)	130.089	130.156
C(1)-C(9)-H(24)	106.455	106.330	N(35)-N(36)-C(3)	118.796	119.358
C(1)-C(9)-H(25)	109.031	109.003	N(36)-C(3)-H(18)	122.510	122.561
H(24)-C(9)-H(25)	108.090	108.184	H(18)-C(3)-C(4)	117.124	117.839
H(24)-C(9)-C(10)	110.018	110.077	C(3)-C(4)-C(5)	126.164	126.207
H(25)-C(9)-C(10)	109.664	110.080	C(3)-C(4)-S(37)	123.223	123.568
C(9)-C(10)-C(11)	121.163	121.474	C(4)-C(5)-C(6)	113.339	112.979
C(9)-C(10)-C(15)	120.466	120.253	C(4)-C(5)-H(19)	122.508	122.870
C(10)-C(11)-H(26)	119.610	119.793	H(19)-C(5)-C(6)	124.152	124.148
H(26)-C(11)-C(12)	119.635	119.374	C(5)-C(6)-H(20)	123.844	123.489
C(11)-C(12)-H(27)	119.325	119.156	H(20)-C(6)-C(7)	122.699	123.026
H(27)-C(12)-C(13)	119.508	119.730	C(6)-C(7)-C(8)	128.089	128.063
C(12)-C(13)-C(14)	117.815	117.868	C(7)-C(8)-H(21)	109.852	109.737
C(12)-C(13)-C(16)	121.289	121.594	C(7)-C(8)-H(22)	111.741	111.259
C(13)-C(16)-H(30)	111.061	110.986	C(7)-C(8)-H(23)	111.723	111.263
C(13)-C(16)-H(31)	111.416	110.997	H(21)-C(8)-H(22)	107.942	108.249
C(13)-C(16)-H(32)	111.405	111.221	H(22)-C(8)-H(23)	107.484	107.974
H(30)-C(16)-H(31)	107.479	107.599	H(21)-C(8)-H(23)	107.939	108.254
H(30)-C(16)-H(32)	107.260	107.942	N(34)-C(2)-N(35)	101.260	101.943

Tablo 3.58. 32 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.493	1.496	21 C(16)-H(31)	1.093	1.086
2 C(1)-N(33)	1.297	1.267	22 C(16)-H(32)	1.092	1.083
3 C(1)-N(35)	1.387	1.378	23 C(13)-C(14)	1.400	1.393
4 N(33)-N(34)	1.379	1.369	24 C(14)-H(28)	1.085	1.076
5 N(34)-C(2)	1.368	1.346	25 C(14)-C(15)	1.390	1.379
6 C(2)-N(35)	1.418	1.388	26 C(15)-H(29)	1.085	1.076
7 C(2)-O(38)	1.216	1.195	27 N(36)-C(3)	1.288	1.258
8 N(35)-N(36)	1.370	1.364	28 C(3)-H(18)	1.086	1.075
9 N(34)-H(17)	1.005	0.990	29 C(3)-C(4)	1.441	1.465
10 C(9)-H(24)	1.092	1.082	30 C(4)-C(5)	1.374	1.348
11 C(9)-H(25)	1.091	1.081	31 C(4)-S(37)	1.751	1.737
12 C(9)-C(10)	1.522	1.519	32 C(5)-C(6)	1.418	1.429
13 C(10)-C(11)	1.394	1.382	33 C(5)-H(19)	1.082	1.072
14 C(10)-C(15)	1.398	1.391	34 C(6)-H(20)	1.082	1.074
15 C(11)-H(26)	1.084	1.075	35 C(6)-C(7)	1.369	1.349
16 C(11)-C(12)	1.393	1.388	36 C(7)-S(37)	1.746	1.729
17 C(12)-H(27)	1.085	1.076	37 C(7)-C(8)	1.497	1.500
18 C(12)-C(13)	1.396	1.383	38 C(8)-H(21)	1.091	1.085
19 C(13)-C(16)	1.509	1.510	39 C(8)-H(22)	1.094	1.083
20 C(16)-H(30)	1.095	1.086	40 C(8)-H(23)	1.094	1.085

Tablo 3.59. 32 Bileşiğinin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.372	0.499	H21	0.132	0.119
C2	0.532	0.721	H22	0.120	0.118
C3	0.140	0.214	H23	0.132	0.106
C4	-0.291	-0.338	H24	0.149	0.149
C5	-0.029	0.017	H25	0.142	0.141
C6	-0.041	-0.074	H26	0.095	0.095
C7	-0.291	-0.287	H27	0.081	0.085
C8	-0.245	-0.187	H28	0.083	0.088
C9	-0.181	-0.141	H29	0.095	0.101
C10	-0.119	-0.150	H30	0.126	0.108
C11	-0.055	-0.056	H31	0.108	0.108
C12	-0.079	-0.085	H32	0.115	0.092
C13	-0.095	-0.121	N33	-0.221	-0.282
C14	-0.076	-0.093	N34	-0.312	-0.379
C15	-0.038	-0.039	N35	-0.383	-0.493
C16	-0.257	-0.173	N36	-0.216	-0.252
H17	0.250	0.260	S37	0.293	0.263
H18	0.154	0.169	O38	-0.392	-0.527
H19	0.105	0.115			
H20	0.097	0.101			

 $E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -0.07161 \text{ Hartree}$  $E_{\text{LUMO}}(\text{HF}) : 0.07253 \text{ Hartree}$  $E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -0.22417 \text{ Hartree}$  $E_{\text{LUMO}}(\text{HF}) : -0.31332 \text{ Hartree}$ **Şekil 3.27.** 32 Bileşiğinin hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri**Tablo 3.60.** 7 Tipi bileşiğin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-1.0414	1.0731
μ_y	-0.4530	-0.4049
μ_z	1.3003	2.6117
μ_{Toplam}	1.7264	2.8524

Tablo 3.61. 32 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

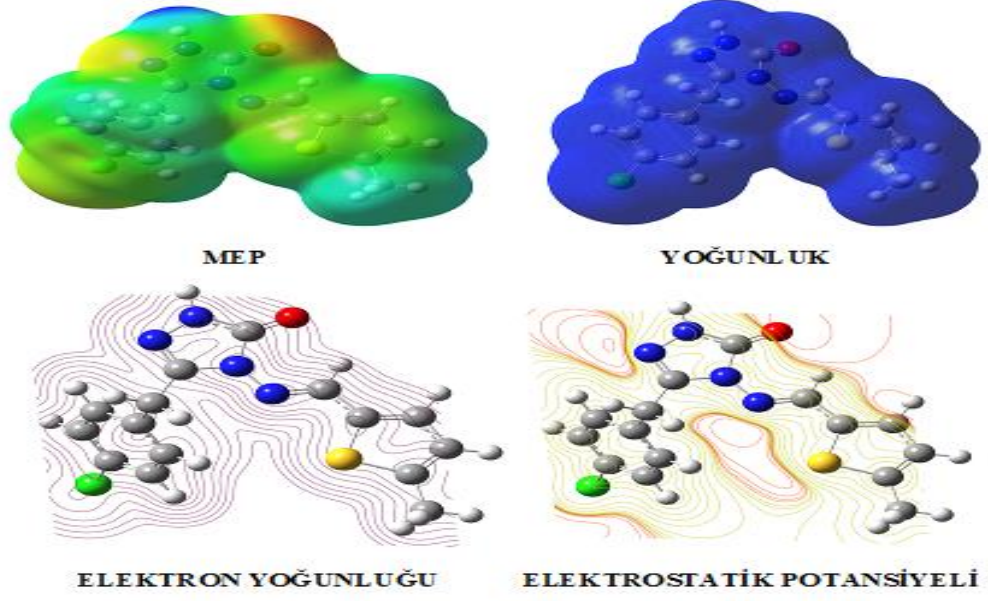
Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1311.98598	-1305.56519

Tablo 3.62. 32 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hatree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Toplam Enerji	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ Elektronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik indeks	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nükleofilik indeks	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleküler yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleküler sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

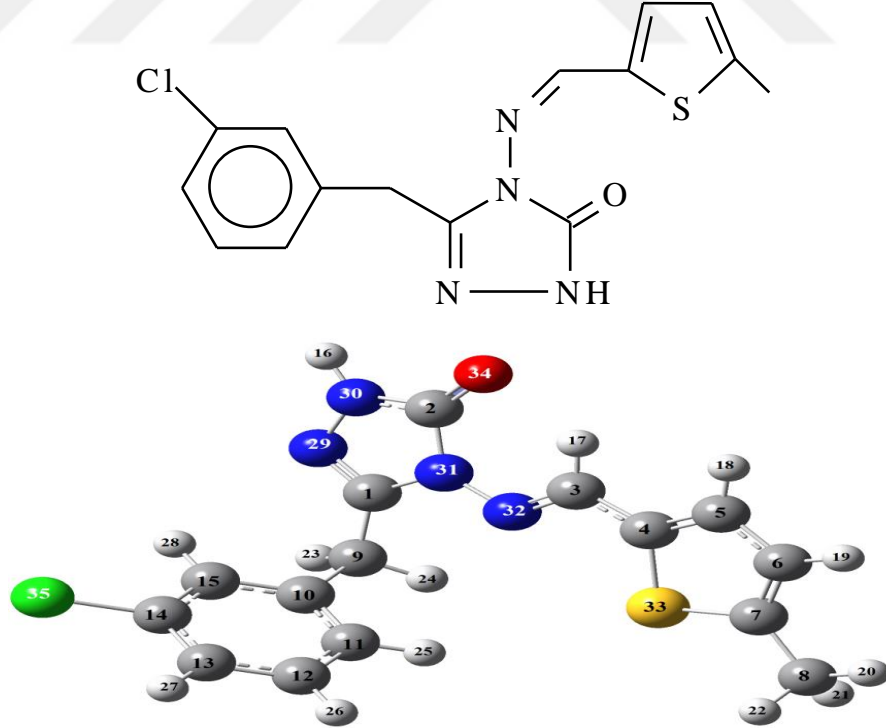
Tablo 3.63. 32 Bileşiğinin termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.01187	0.03257
B	0.00749	0.01010
C	0.00506	0.00786
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.24737	0.67856
B	0.15601	0.21055
C	0.10544	0.16379
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	173.497	180.716
Total	175.275	182.494
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	68.568	52.672
Total	74.530	58.634
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	43.295	42.403
Dönel	35.623	33.885
Titreşim	76.501	54.347
Total	155.419	130.635
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.259343	0.275012
Enerjide Termal Düzeltme	0.279318	0.290822
Entalpide Termal Düzeltme	0.280262	0.291767
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.206418	0.229698
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1732.021114	-829.816937
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1732.001139	-829.801126
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1732.000195	-829.800182
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1732.074039	-829.862251
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	162.74000	172.57234



Şekil 3.28. 32 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.8. 3-*m*-Klorobenzil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (33)



Şekil 3.29. 33 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

Tablo 3.64. 33 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

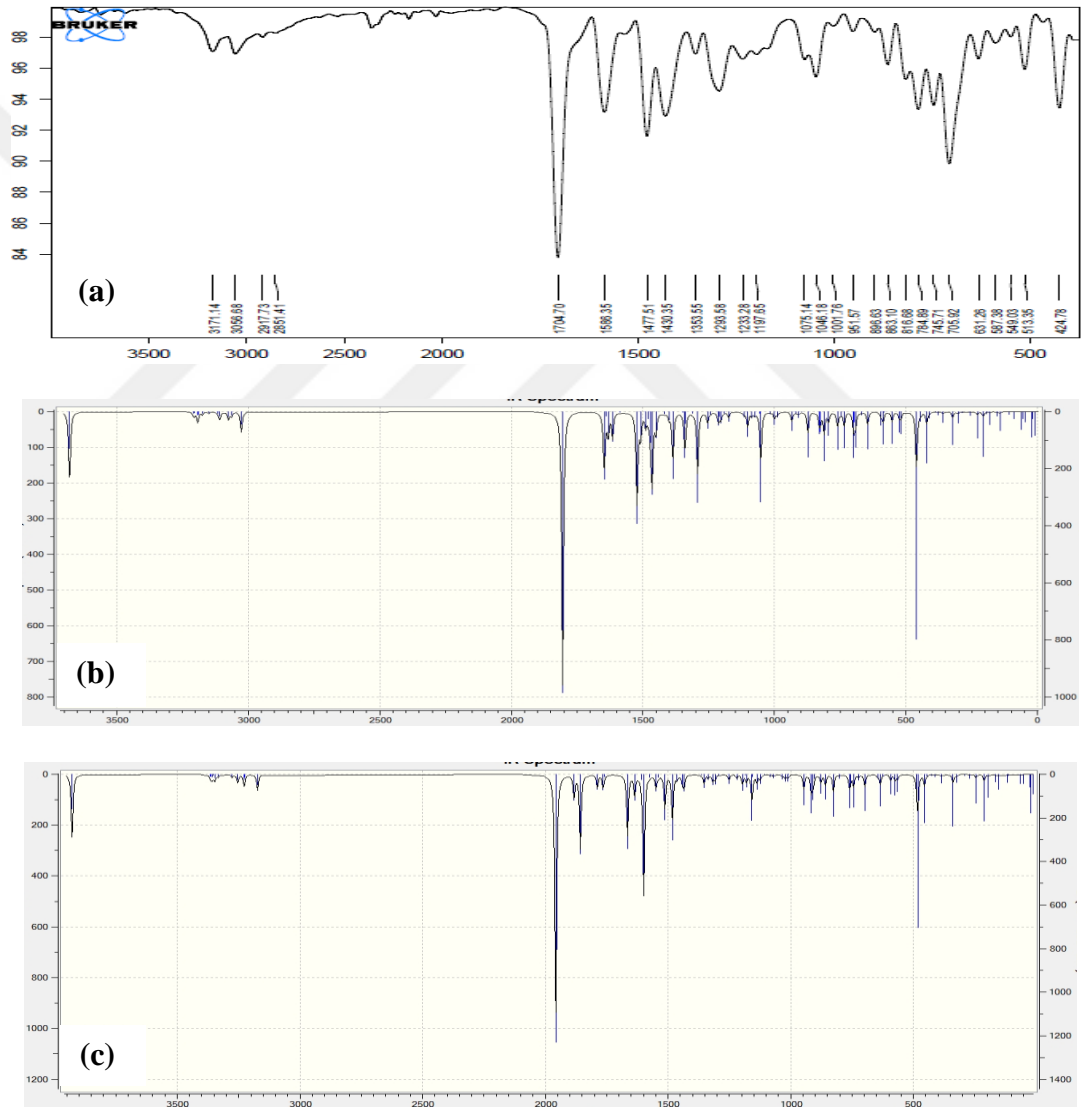
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	145.82	168.91	-23.09	169.85	-24.03	159.25	-13.43	160.64	-8.94
C2	151.7	170.08	-18.38	170.99	-19.29	159.13	-7.43	160.13	-10.98
C3	149.15	165.12	-15.97	165.96	-16.81	157.59	-8.44	158.87	-22.54
C4	136.33	166.83	-30.50	164.65	-28.32	147.87	-11.54	145.08	-10.24
C5	134.84	153.33	-18.49	155.70	-20.86	143.53	-8.69	146.58	-19.30
C6	127.28	145.96	-18.68	146.88	-19.60	130.43	-3.15	131.03	14.67
C7	145.7	173.94	-28.24	177.28	-31.58	160.28	-14.58	162.43	-146.50
C8	15.93	34.57	-18.64	34.5	-18.57	21.34	-5.41	21.16	10.09
C9	31.25	51.80	-20.55	51.69	-20.44	32.02	-0.77	34.92	98.49
C10	133.41	161.29	-27.88	162.19	-28.78	147.71	-14.30	148.37	-18.88
C11	129.49	149.53	-20.04	150.41	-20.92	139.29	-9.80	140.21	-9.50
C12	130.71	150.10	-19.39	151.28	-20.57	139.49	-8.78	140.37	-13.06
C13	127.31	148.67	-21.36	148.92	-21.61	137.96	-10.65	138.17	0.33
C14	138.5	165.09	-26.59	163.55	-25.05	148.23	-9.73	146.58	-18.47
C15	128.11	150.95	-22.84	150.72	-22.61	140.34	-12.23	140.19	-128.22
H16	11.97	7.61	4.36	8.10	3.87	6.82	5.15	7.27	2.43
H17	9.7	10.86	-1.16	10.88	-1.18	9.92	-0.22	9.89	-2.43
H18	7.46	7.56	-0.10	7.77	-0.31	7.22	0.24	7.50	-0.60
H19	6.9	7.28	-0.38	7.49	-0.59	6.75	0.15	6.97	-4.40
H20	2.57	3.04	-0.47	3.20	-0.63	2.62	-0.05	2.78	-0.21
H21	2.57	3.23	-0.66	3.31	-0.74	2.65	-0.08	2.72	-0.15
H22	2.57	3.22	-0.65	3.30	-0.73	2.63	-0.06	2.72	1.27
H23	3.99	4.31	-0.32	4.42	-0.43	3.76	0.23	3.89	0.10
H24	3.99	4.57	-0.58	4.72	-0.73	3.96	0.03	4.15	3.29
H25	7.44	8.19	-0.75	8.37	-0.93	8.03	-0.59	8.21	-0.83
H26	7.38	7.91	-0.53	8.15	-0.77	7.64	-0.26	7.89	-0.59
H27	7.3	7.81	-0.51	7.96	-0.66	7.55	-0.25	7.71	-0.27
H28	7.44	8.19	-0.75	8.19	-0.75	7.88	-0.44	7.91	-7.91

Tablo 3.65. 33 Bileşiminin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm⁻¹)

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τ NCCC(46), τ CCCC(31)	11	11
τ NCCC(26), τ CCCC(34)	18	20
τ NCCC(37), τ CCCN(24), τ NCCN(10)	22	23
δ CCC(25), τ NNCC(16), τ CCCC(14)	45	45
δ CNN(17), δ CCC(16), δ CCN(32)	56	58
τ NCCC(15), τ CCCN(30), τ CCNN(22)	59	59
τ HCCC(73)	87	102
τ NCCC(17), τ CCCN(14), τ CNNC(20), τ NCCN(10)	105	105
τ CCCC(11), δ NCC(15), δ CCC(14)	139	140
τ NNCC(15)	150	150
δ CCN(18), δ NNC(11), τ CCCCC(14)	176	176
τ CCCC(22), τ CCCCC(22)	187	191
τ CCNN(19), τ SCCC(14), τ CCSC(20)	201	192
τ CCCC(11), τ CNNC(17), τ CCC(10)	222	222
δ CICC(27)	247	247
τ CCCN(23), τ CCNN(11), τ CCSC(12), τ NCCN(33)	278	264
δ NCC(12), δ CCS(52)	293	293
τ HNNC(15), τ NNCC(21), ν CC(11)	313	307
δ NNC(11), δ OCN(11), δ NCC(13)	348	350
δ CCC(34), δ CICC(26)	368	374
τ CCCN(21), τ CCNN(24), τ CCSC(19)	375	385
ν C1C(45), δ CCC(29)	400	404
δ OCN(14), δ CCC(18)	409	412
τ C1CCC(11), τ HCCC(11), τ CCCC(55)	431	437
τ ONNC(10), τ NCNC(10), τ HNNC(56)	446	440

τ CCCC(12), τ C1CCC(24)	504	512
τ SCCC(39), τ CCSC(17)	509	520
ν CC(12), δ SCC(39)	536	537
τ CCCN(42), τ SCCC(15)	565	565
δ OCN(20), δ CCC(19)	569	575
δ OCN(15), δ CCC(13)	577	585
δ CNN(17), τ NCNC(10)	626	632
ν SC(66)	649	655
δ SCC(14)	670	673
τ HCCC(10), τ CCCC(28)	676	686
τ CCCC(18)	677	689
τ CNNC(10), τ ONNC(43)	712	727
δ CCC(22), τ ONNC(24)	725	748
τ ONNC(14), τ NCNC(14)	737	778
τ HCCC(38)	770	794
τ HCCC(85)	786	820
δ NNC(14), τ HCCC(14), ν NC(10)	800	823
δ CNN(11), δ CCC(10), δ CCN(20), ν NN(17)	804	830
ν CC(14), δ CCIC(11), δ CCC(14)	846	857
τ HCCC(80)	868	913
τ HCCC(58)	882	916
τ HCCC(60)	889	926
δ HCC(11), τ HCCC(36)	905	936
τ HCCC(57), τ CCCC(20)	957	970
τ HCCC(38), δ HCH(13)	958	981
τ HCNN(91)	969	1004
ν CC(34), δ CCC(58)	984	1019
δ NNC(32)	1019	1031
δ HCH(18), τ HCCC(74)	1024	1048
δ HCC(53), ν CC(23)	1041	1049
ν NC(11), ν NN(53)	1053	1069
ν CC(33), δ HCC(18)	1068	1074
ν CC(30), δ HCC(29)	1081	1084
ν CC(55)	1138	1104
δ HCC(53)	1154	1134
ν CNN(10), ν NC(26), δ HCC(15)	1166	1172
δ HCC(23), ν NC(10), ν NN(14)	1171	1185
ν CC(45)	1176	1194
δ HCC(52), ν CC(11)	1204	1210
δ CCC(11), ν CC(28),	1215	1226
τ HCCC(10), ν NN(18), δ CNN(22)	1252	1234
ν HCCC(17), ν CC(35), δ HCC(16)	1270	1299
δ HCC(30), ν CC(36)	1296	1305
δ HCN(18), τ HCCC(21), ν CC(11)	1299	1326
τ HCCC(18), ν CC(12)	1307	1343
δ HCN(27), ν NC(10), HNN(12)	1343	1370
δ HNN(60)	1357	1394
δ HCH(95)	1373	1403
δ CCC(10), ν NC(11)	1405	1426
δ HCH(53)	1419	1447
δ HCC(13), δ HHC(27)	1424	1447
δ HCH(79), τ HCCC(10)	1434	1449
δ HCH(62)	1443	1457
ν CC(50), δ HCC(41)	1462	1482
ν CC(55), δ HCH(11)	1475	1508
δ HCC(19), ν CC(54)	1539	1593
ν CC(47), δ CCC(25)	1565	1598
ν NC(31), ν CC(23)	1581	1620

v CC (32), v NC(30)	1589	1682
v NC(64)	1596	1705
v OC(73), v NC(10)	1749	1773
v CH(92)	2932	2874
v CH(97)	2968	2922
v CH(100)	2979	2924
v CH (93)	3011	2947
v CH (97)	3017	2968
v CH (100)	3052	3020
v CH (73)	3075	3032
v CH (97)	3091	3037
v CH (93)	3105	3046
v CH(99)	3107	3050
v NH (100)	3564	3559



Şekil 3.30. 33 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)(b) ve HF 6-311G(d,p) (c)) IR spektrumları

Tablo 3.66. 33 Bileşiminin hesaplanan bağ açıları (A^0)

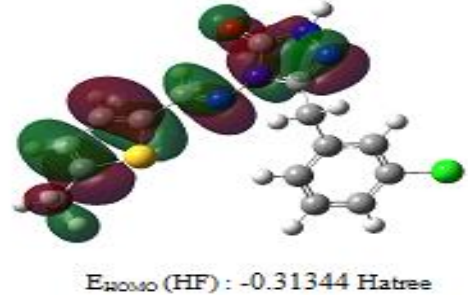
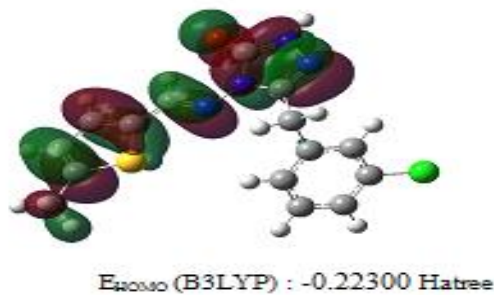
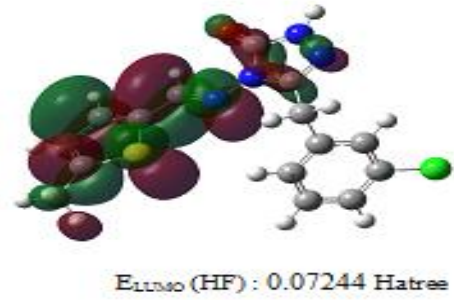
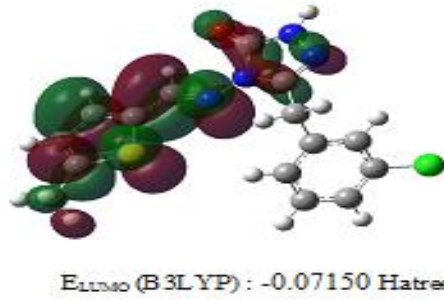
Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Açılı	B3LYP	HF
N(29)-C(1)-N(31)	111.478	111.338	C(14)-C(15)-H(28)	120.134	119.903
N(29)-N(30)-C(2)	114.355	113.638	H(28)-C(15)-C(10)	120.292	120.406
N(29)-N(30)-H(16)	120.476	121.001	N(30)-C(2)-N(31)	101.238	101.938
H(16)-N(30)-C(2)	125.165	125.345	N(30)-N(29)-C(1)	104.731	105.077
N(30)-C(2)-O(34)	130.088	129.590	C(2)-N(31)-N(32)	130.167	130.335
O(34)-C(2)-N(31)	128.673	128.471	N(31)-N(32)-C(3)	118.780	119.665
N(29)-C(1)-C(9)	124.633	124.645	N(32)-C(3)-H(17)	122.487	123.093
N(31)-C(1)-C(9)	123.862	124.001	H(17)-C(3)-C(4)	117.139	116.686
C(1)-C(9)-H(23)	106.632	106.437	C(3)-C(4)-C(5)	126.164	125.300
C(1)-C(9)-H(24)	109.137	109.128	C(3)-C(4)-S(33)	123.231	123.661
H(23)-C(9)-H(24)	108.220	108.304	C(4)-C(5)-C(6)	113.343	113.122
H(23)-C(9)-C(10)	109.797	109.899	C(4)-C(5)-H(18)	122.507	123.076
H(24)-C(9)-C(10)	109.646	109.955	H(18)-C(5)-C(6)	124.149	123.802
C(9)-C(10)-C(11)	121.176	121.184	C(5)-C(6)-H(19)	123.837	123.618
C(9)-C(10)-C(15)	119.528	119.571	H(19)-C(6)-C(7)	122.686	123.320
C(10)-C(11)-H(25)	119.655	119.858	C(6)-C(7)-C(8)	128.124	127.922
H(25)-C(11)-C(12)	119.983	119.788	C(7)-C(8)-H(20)	109.856	109.828
C(11)-C(12)-H(26)	119.926	119.829	C(7)-C(8)-H(21)	111.730	111.180
H(26)-C(12)-C(13)	119.436	119.552	C(7)-C(8)-H(22)	111.713	111.200
C(12)-C(13)-H(27)	121.231	121.161	H(20)-C(8)-H(21)	107.945	108.293
H(27)-C(13)-C(14)	120.236	120.234	H(21)-C(8)-H(22)	107.496	107.957
C(13)-C(14)-Cl(35)	119.226	119.275	H(20)-C(8)-H(22)	107.942	108.281
Cl(35)-C(14)-C(15)	119.172	119.231	N(30)-C(2)-N(31)	101.238	101.938

Tablo 3.67. 33 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.493	1.495	20 C(13)-C(14)	1.391	1.382
2 C(1)-N(29)	1.296	1.266	21 C(14)-Cl(35)	1.762	1.746
3 C(1)-N(31)	1.386	1.378	22 C(14)-C(15)	1.388	1.378
4 N(29)-N(30)	1.378	1.368	23 C(15)-H(28)	1.083	1.074
5 N(30)-C(2)	1.369	1.346	24 N(32)-C(3)	1.288	1.258
6 C(2)-N(31)	1.419	1.388	25 C(3)-H(17)	1.086	1.075
7 C(2)-O(34)	1.216	1.195	26 C(3)-C(4)	1.440	1.457
8 N(31)-N(32)	1.370	1.364	27 C(4)-C(5)	1.374	1.348
9 N(30)-H(16)	1.005	0.990	28 C(4)-S(33)	1.751	1.736
10 C(9)-H(23)	1.092	1.082	29 C(5)-C(6)	1.418	1.431
11 C(9)-H(24)	1.090	1.081	30 C(5)-H(18)	1.082	1.074
12 C(9)-C(10)	1.523	1.520	31 C(6)-H(19)	1.082	1.073
13 C(10)-C(11)	1.395	1.384	32 C(6)-C(7)	1.369	1.347
14 C(10)-C(15)	1.398	1.390	33 C(7)-S(33)	1.746	1.735
15 C(11)-H(25)	1.083	1.074	34 C(7)-C(8)	1.497	1.500
16 C(11)-C(12)	1.393	1.385	35 C(8)-H(20)	1.091	1.083
17 C(12)-H(26)	1.083	1.075	36 C(8)-H(21)	1.094	1.085
18 C(12)-C(13)	1.391	1.381	37 C(8)-H(22)	1.094	1.085
19 C(13)-H(27)	1.082	1.073			

Tablo 3.68. 33 Bileşiğinin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.395	0.498	H18	0.106	0.113
C2	0.533	0.724	H19	0.099	0.103
C3	0.142	0.223	H20	0.121	0.108
C4	-0.293	-0.304	H21	0.133	0.119
C5	-0.028	-0.030	H22	0.133	0.118
C6	-0.040	-0.068	H23	0.155	0.155
C7	-0.291	-0.295	H24	0.148	0.150
C8	-0.245	-0.179	H25	0.106	0.116
C9	-0.191	-0.145	H26	0.101	0.107
C10	-0.128	-0.132	H27	0.117	0.124
C11	-0.045	-0.077	H28	0.121	0.129
C12	-0.102	-0.076	N29	-0.218	-0.278
C13	-0.027	-0.001	N30	-0.311	-0.378
C14	-0.241	-0.192	N31	-0.382	-0.492
C15	-0.082	-0.048	N32	-0.220	-0.269
H16	0.252	0.261	S33	0.291	0.276
H17	0.156	0.177	O34	-0.389	-0.528

**Şekil 3.31.** 33 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri**Tablo 3.69.** 33 Bileşiğinin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	0.2552	-0.0200
μ_y	-0.5748	0.1518
μ_z	1.5949	1.4603
μ_{Toplam}	1.7145	1.4683

Tablo 3.70. 33 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan enerji değerleri

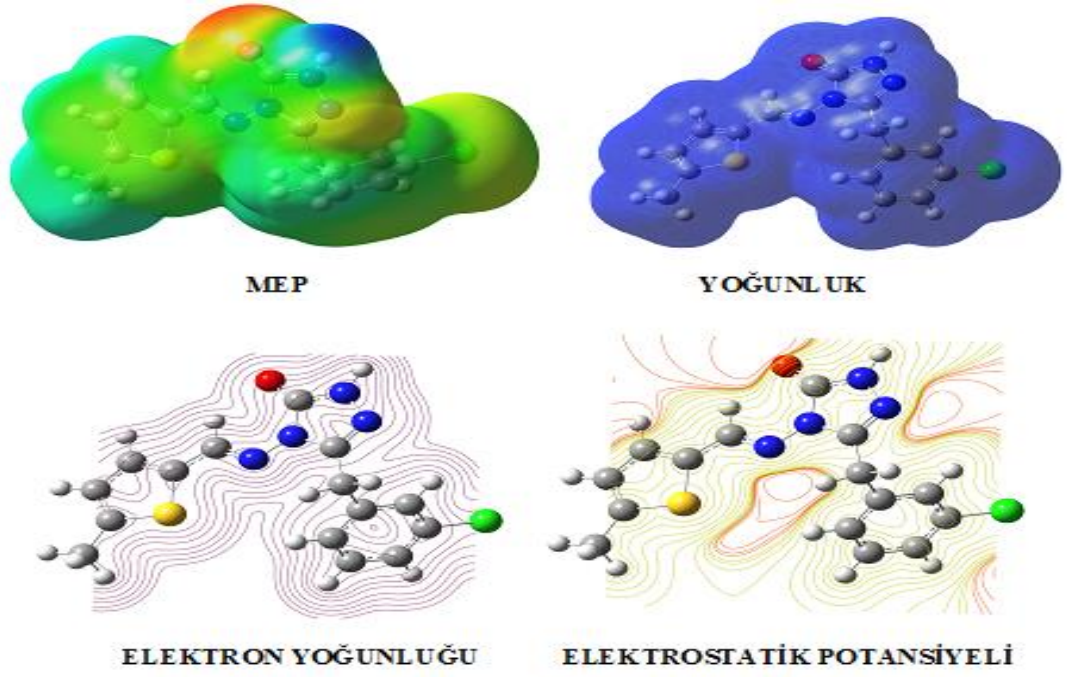
Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1725.44560	-1732.28040

Tablo 3.71. 33 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

	Hartree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0.0499	-1.35781	-31.3124	-131.012
HOMO	-0.21036	-5.72404	-132.002	-552.3
A elektron ilgisi	0.0499	1.35781	31.3124	131.012
I İyonlaşma potansiyeli	0.21036	5.72404	132.002	552.3
ΔE Enerji Farkı	0.16046	4.36623	100.689	421.288
χ electronegativite	0.13013	3.54093	81.657	341.656
Pi Kimyasal Potansiyel	-0.13013	-3.54093	-81.657	-341.656
ω Elektrofilik İndex	0.0006793	0.01848	0.42626	1.7835
IP Nucleofilik index	-0.01044033	-0.28409	-6.55134	-27.4111
S Moleculer Yumuşaklık	12.4642	339.159	7821.3	32724.7
η Moleculer Sertlik	0.08023	2.18311	50.3446	210.644

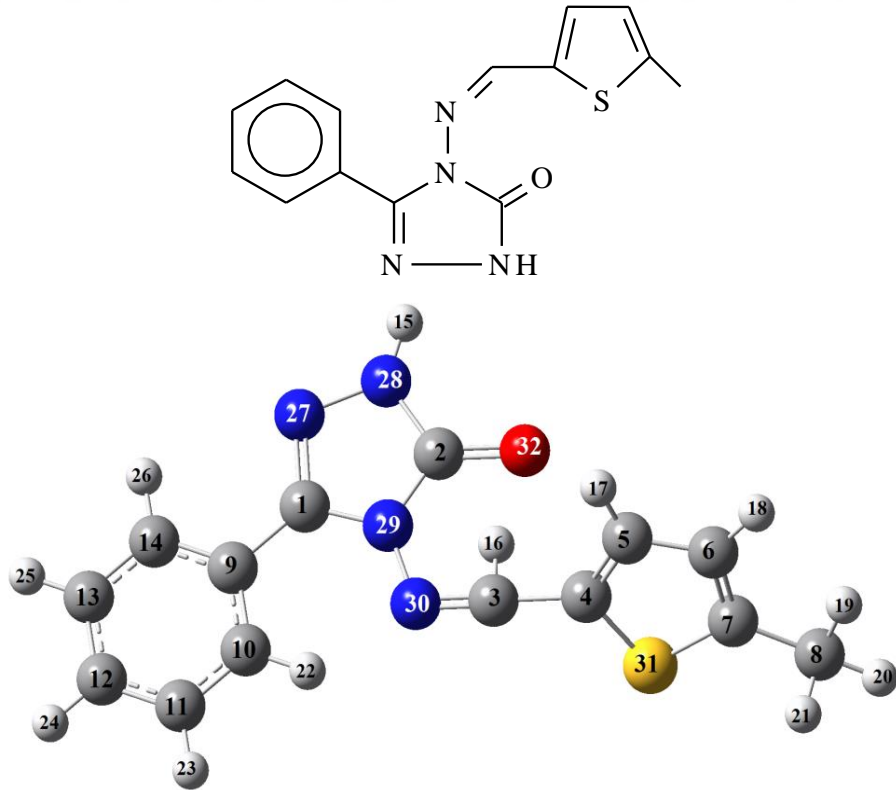
Tablo 3.72. 33 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.01519	0.01521
B	0.00654	0.00670
C	0.00500	0.00510
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.31644	0.31702
B	0.13629	0.13952
C	0.10427	0.10618
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	173.512	185.131
Total	175.290	186.909
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	68.547	63.407
Total	74.508	69.369
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	43.295	43.295
Dönel	35.523	35.480
Titreşim	76.468	70.864
Total	155.286	149.640
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.259394	0.279089
Enerjide Termal Düzeltme	0.279342	0.297858
Entalpide Termal Düzeltme	0.280286	0.298802
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.206504	0.227703
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1732.021007	-1725.166515
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1732.001060	-1725.147747
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1732.000115	-1725.146802
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1732.073897	-1725.217901
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	162.77225	175.13092



Şekil 3.32. 33 Bileşiğinin yüzey haritaları

3.1.9. 3-Fenil-4-(5-metil-2-tienilmetilenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (34)



Şekil 3.33. 34 Bileşiğinin (6-311G(d,p)) optimize şekli

Tablo 3.73. 34 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP, HF, B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

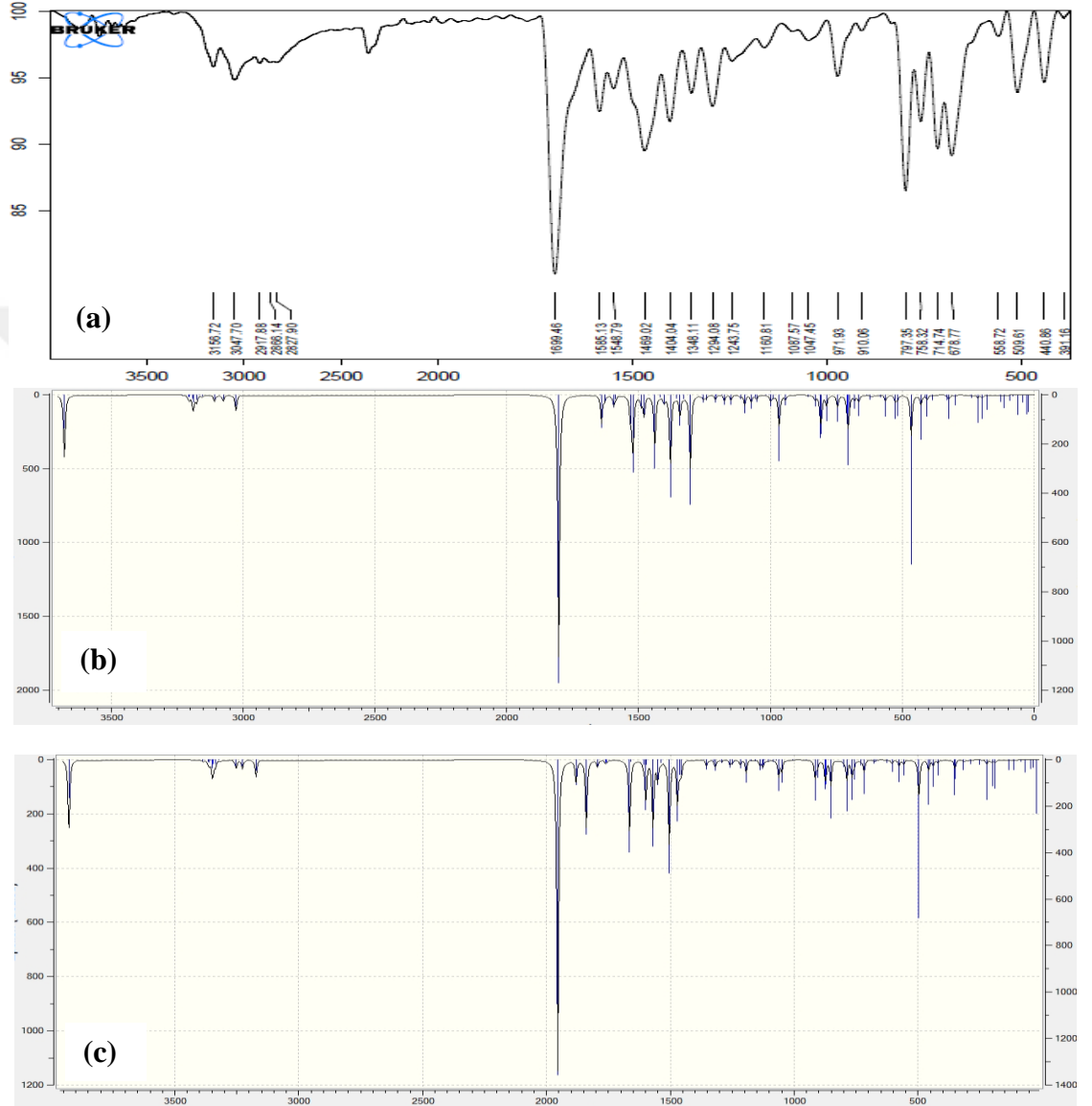
No	Deney.	DFT	Fark	DFT/ DMSO	Fark/ DMSO	HF	Fark	HF/ DMSO	Fark/ DMSO
C1	146.27	167.47	-21.20	167.65	-21.38	158.27	-12.00	159.03	-12.76
C2	152.13	170.76	-18.63	171.67	-19.54	159.84	-7.71	160.72	-8.59
C3	152.04	165.25	-13.21	166.14	-14.10	157.17	-5.13	158.54	-6.50
C4	135.35	167.56	-32.21	165.29	-29.94	148.54	-13.19	145.49	-10.14
C5	134.2	153.27	-19.07	155.85	-21.65	143.11	-8.91	146.45	-12.25
C6	127.32	145.97	-18.65	147.18	-19.86	130.16	-2.84	131.07	-3.75
C7	145	174.29	-29.29	177.30	-32.30	160.62	-15.62	162.32	-17.32
C8	16.15	34.50	-18.35	34.44	-18.29	21.38	-5.23	21.12	-4.97
C9	127.65	149.49	-21.84	149.06	-21.41	136.16	-8.51	135.44	-7.79
C10	129.14	151.38	-22.24	151.08	-21.94	142.99	-13.85	142.68	-13.54
C11	128.44	148.48	-20.04	149.36	-20.92	136.41	-7.97	137.18	-8.74
C12	130.74	150.79	-20.05	151.99	-21.25	141.80	-11.06	143.10	-12.36
C13	128.44	149.09	-20.65	150.06	-21.62	137.11	-8.67	138.00	-9.56
C14	129.14	149.84	-20.70	149.29	-20.15	141.39	-12.25	140.92	-11.78
H15	12.32	7.80	4.52	8.34	3.98	7.02	5.30	7.52	4.80
H16	9.66	11.19	-1.53	11.14	-1.48	10.23	-0.57	10.22	-0.56
H17	7.49	7.64	-0.15	7.87	-0.38	7.26	0.23	7.58	-0.09
H18	6.89	7.31	-0.42	7.54	-0.65	6.74	0.15	6.98	-0.09
H19	2.47	3.02	-0.55	3.20	-0.73	2.56	-0.09	2.74	-0.27
H20	2.47	3.20	-0.73	3.26	-0.79	2.58	-0.11	2.66	-0.19
H21	2.47	3.20	-0.73	3.26	-0.79	2.55	-0.08	2.61	-0.14
H22	7.86	9.12	-1.26	9.17	-1.31	8.49	-0.63	8.59	-0.73
H23	7.5	8.25	-0.75	8.45	-0.95	7.93	-0.43	8.16	-0.66
H24	7.48	8.18	-0.70	8.41	-0.93	8.00	-0.52	8.27	-0.79
H25	7.5	8.20	-0.70	8.41	-0.91	7.87	-0.37	8.11	-0.61
H26	7.86	8.86	-1.00	8.08	-0.22	8.49	-0.63	8.53	-0.67

Tablo 3.74. 34 Bileşiğinin teorik (B3LYP ve HF) IR değerleri (cm^{-1})

Titreşim	skalalı dft	skalalı hf
τNCCC (56) τCCCN (19), τCCNN (10), τNCCN (15)	22	20
τNCCC (51)	26	31
δCCN (25), δCNN (17)	41	41
δNCCC (15), δCCCN (27), δCCNN (17), NCCN (11)	61	61
τCNNC (14), τNCNC (31), τCCCC (19)	77	77
τHCCC (72)	89	103
τNCC (26), τCCC (31)	110	104
τCCCN (12), τNCCN (24)	123	121
δCNN (21), δCCC (14), δNNC (20)	175	171
δCNNC (10), τCCCN (14), τSCCC (15), τCCSC (18)	191	182
τNCCC (12), τCNNC (20), τCCCN (16)	207	202
δCCC (19)	229	227
τCCCN (20), τCCNN (12), τCCSC (14), τNCCN (29)	273	262
δCCS (46)	290	286
τCCCC (12), τCNNC (10), τNNCN (14), τNCNC (11)	313	316
νCC (23), δCCC (19), δCNN (11), δCCS (16)	321	319
τCCCN (20), τCCCN (10), τCCNN (21), τCCSC (16)	373	379
δOCN (22), δCCC (10)	393	397
τCCCC (69)	401	409
δCCC (14)	416	415
τHNNC (43)	452	449
τCCCC (33), τHNNC (23)	502	505
τSCCC (38), τCCSC (16)	510	522
νCC (15), δSCC (35)	546	547
τCCCN (43), τSCCC (15)	565	566

δ OCN(32), δ NCC(14)	602	609
δ CCC(68)	614	615
ν SC(49)	644	650
δ CCC(26), ν SC(22)	659	661
δCCC(71), δ SCC(13), τ CCCC(10)	678	687
τ NNCN(26), τ NCNC(18), τ HCCC(25)	683	695
τ HCCC(14), τ CCCC(36)	686	713
τ ONNC(73)	722	726
δ CCC(33)	723	772
τ HCCC(32), τ CCCC(36)	763	790
ν NC(15), δ CNN(28), δ NNC(12)	782	793
τ HCCC(85)	785	821
ν NN(18), δ CNN(31)	805	829
τ HCCC(78)	832	861
τ HCCC(79)	866	912
τ HCCC(97)	914	951
δ CNN(15) δ NNC(37)	937	962
τ HCCC(46)	959	970
τ HCCC(35)	960	984
τ HCNN(90)	968	1001
τ HCCC(58), τCCCC(27)	975	1015
ν CC(48), δ CCC(39)	986	1018
ν CC(18), δ HCC(18), δ CCC(17)	1019	1021
δ HCH(18), τ HCCC(73)	1024	1031
ν CC(25), δ HCC(57)	1039	1048
ν CC(20), ν NN(34)	1063	1062
ν CC(20), ν NN(25)	1079	1081
ν NC(13), δ CNN(12), δNNC(10)	1114	1103
ν CC(55)	1138	1132
ν CC(16), δ HCC(71)	1147	1141
δ HCC(21), νCC(12), ν NC(13)	1168	1171
ν NC(10), ν CC(11), δHCC(22)	1171	1194
ν CC(14), δHCC(51)	1205	1201
δ CCC(10), ν CC(32)	1214	1226
δCNN(14), ν NN(20), ν NC(10)	1263	1234
ν CC(61)	1286	1318
ν CC(29), τ HCN(23)	1301	1323
ν CC(22), δ HCC(66)	1314	1333
ν CC(11), ν NC(13), δ HCN(19)	1336	1363
δ HNN(53)	1359	1394
δ HCH(95)	1374	1405
ν NC(23), δ HCC(22), HCN(12)	1393	1422
δ HCC(37), CCC(10)	1433	1447
τ HCCC(10), HCH(80)	1434	1448
δ HCH(61)	1443	1457
ν CC(58), δ HCH(12)	1474	1503
δ HCH(23)	1483	1508
ν CC(43), ν NC(16), δ HCC(14)	1537	1592
δ CC(23), τ NC(32)	1544	1596
ν CC(30), ν NC(10), δ CCC(10)	1578	1625
ν NC(70)	1589	1666
ν CCC(16), ν CC(47), δ HCC(10)	1596	1704
ν OC(73)	1747	1770
ν CH(93)	2932	2874
ν CH(100)	2979	2924
ν CH(92)	3011	2946
ν CH(100)	3055	3009
ν CH(82)	3066	3023

v CH(98)	3077	3031
v CH(17)	3088	3034
v CH(98)	3091	3040
v CH(50)	3103	3045
v CH(50)	3105	3050
v CH(24)	3129	3068
v NH(100)	3562	3558



Şekil 3.34. 34 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (B3LYP 6-311G(d,p)) (b) ve HF 6-311G(d,p) (c) IR spektrumları

Tablo 3.75. 34 Bileşiminin hesaplanan bağ açıları (A^0)

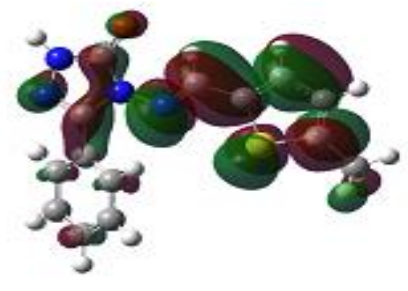
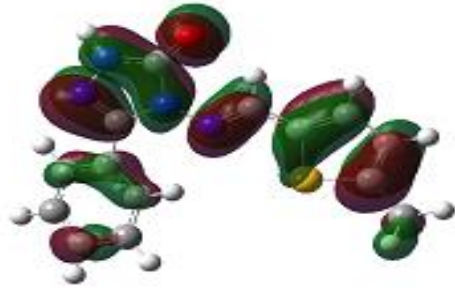
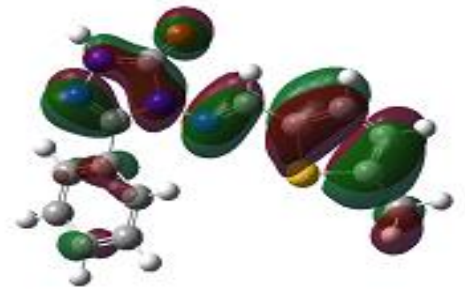
Bağ Açılı	B3LYP	HF	Bağ Açılı	B3LYP	HF
N(27)-C(1)-N(28)	110.647	110.817	H(26)-C(14)-C(9)	118.933	119.346
N(27)-N(28)-C(2)	114.373	113.636	C(13)-C(14)-C(9)	120.460	120.285
N(27)-N(28)-H(15)	120.445	120.939	N(28)-C(2)-N(29)	101.488	102.154
H(15)-N(28)-C(2)	125.084	125.344	N(28)-N(27)-C(1)	105.322	105.484
N(28)-C(2)-O(32)	129.757	129.378	C(2)-N(29)-N(30)	128.704	129.327
O(32)-C(2)-N(29)	128.754	128.467	N(29)-N(30)-C(3)	119.250	120.120
N(27)-C(1)-C(9)	122.336	122.998	N(30)-C(3)-H(16)	122.793	123.373
N(29)-C(1)-C(9)	127.018	126.185	H(16)-C(3)-C(4)	117.152	116.739
C(1)-C(9)-C(10)	123.060	122.387	C(3)-C(4)-C(5)	126.255	125.305
C(1)-C(9)-C(14)	117.789	118.033	C(3)-C(4)-S(31)	123.133	123.586
C(9)-C(10)-H(22)	119.877	120.275	C(4)-C(5)-C(6)	126.255	113.086
C(9)-C(10)-C(11)	120.074	119.991	C(4)-C(5)-H(17)	122.535	123.093
H(22)-C(10)-C(11)	120.048	119.734	H(17)-C(5)-C(6)	124.146	123.821
C(10)-C(11)-H(23)	119.384	119.526	C(5)-C(6)-H(18)	123.845	123.640
C(10)-C(11)-C(12)	120.532	120.313	H(18)-C(6)-C(7)	122.706	123.350
H(23)-C(11)-C(12)	120.084	120.161	C(6)-C(7)-C(8)	128.076	127.858
C(11)-C(12)-C(13)	119.641	119.852	C(7)-C(8)-H(19)	111.708	111.200
C(11)-C(12)-H(24)	120.187	120.057	C(7)-C(8)-H(20)	109.863	109.848
H(24)-C(12)-C(13)	120.173	120.091	C(7)-C(8)-H(21)	111.734	111.466
C(12)-C(13)-H(25)	120.153	120.229	H(19)-C(8)-H(20)	107.956	108.299
C(12)-C(13)-C(14)	120.194	120.045	H(20)-C(8)-H(21)	107.958	108.295
H(25)-C(13)-C(14)	119.652	119.727	H(19)-C(8)-H(21)	107.464	107.931
C(13)-C(14)-H(26)	120.606	120.370			

Tablo 3.76. 34 Bileşiminin hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF	Bağ Uzunlukları	B3LYP	HF
1 C(1)-C(9)	1.469	1.477	18 C(13)-H(25)	1.084	1.075
2 C(1)-N(27)	1.302	1.269	19 C(13)-C(14)	1.388	1.382
3 C(1)-N(29)	1.396	1.385	20 C(14)-H(26)	1.082	1.073
4 N(27)-N(28)	1.371	1.364	21 N(30)-C(3)	1.288	1.258
5 N(28)-C(2)	1.367	1.344	22 C(3)-H(16)	1.086	1.074
6 C(2)-N(29)	1.418	1.388	23 C(3)-C(4)	1.441	1.457
7 C(2)-O(32)	1.216	1.196	24 C(4)-C(5)	1.375	1.348
8 N(29)-N(30)	1.371	1.364	25 C(4)-S(31)	1.751	1.736
9 N(28)-H(15)	1.006	0.990	26 C(5)-C(6)	1.418	1.431
10 C(9)-C(10)	1.401	1.389	27 C(5)-H(17)	1.082	1.074
11 C(9)-C(14)	1.403	1.390	28 C(6)-H(18)	1.082	1.073
12 C(10)-H(22)	1.079	1.071	29 C(6)-C(7)	1.370	1.347
13 C(10)-C(11)	1.392	1.383	30 C(7)-S(31)	1.745	1.734
14 C(11)-H(23)	1.084	1.075	31 C(7)-C(8)	1.497	1.500
15 C(11)-C(12)	1.392	1.384	32 C(8)-H(19)	1.091	1.083
16 C(12)-H(24)	1.084	1.075	33 C(8)-H(20)	1.094	1.085
17 C(12)-C(13)	1.394	1.384	34 C(8)-H(21)	1.094	1.085

Tablo 3.77. 34 Bileşiğinin hesaplanan mulliken yük değerleri

	DFT	HF		DFT	HF
C1	0.409	0.542	H17	0.105	0.111
C2	0.531	0.722	H18	0.098	0.102
C3	0.136	0.210	H19	0.120	0.106
C4	-0.291	-0.299	H20	0.133	0.119
C5	-0.027	-0.031	H21	0.132	0.117
C6	-0.044	-0.070	H22	0.117	0.115
C7	-0.285	-0.288	H23	0.097	0.102
C8	-0.245	-0.179	H24	0.097	0.102
C9	-0.109	-0.089	H25	0.097	0.102
C10	-0.017	-0.039	H26	0.103	0.111
C11	-0.110	-0.096	N27	-0.226	-0.281
C12	-0.078	-0.086	N28	-0.303	-0.376
C13	-0.098	-0.088	N29	-0.399	-0.501
C14	-0.029	-0.057	N30	-0.221	-0.265
H15	0.251	0.260	S31	-0.293	0.276
H16	0.157	0.178	O32	-0.391	-0.530

 $E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -0.06916 \text{ Hartree}$  $E_{\text{HOMO}}(\text{HF}) : 0.07692 \text{ Hartree}$  $E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP}) : -0.21878 \text{ Hartree}$  $E_{\text{LUMO}}(\text{HF}) : -0.30841 \text{ Hartree}$ **Şekil 3.35.** 34 Bileşiğinin B3LYP 6-311G(d,p) ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri**Tablo 3.78.** 34 Bileşiğinin hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP	HF
μ_x	-0.0545	0.0152
μ_y	-0.6659	-1.7139
μ_z	0.5487	2.8659
μ_{Toplam}	0.8645	3.3393

Tablo 3.79. 34 Bileşiğinin hesaplanan enerji değerleri

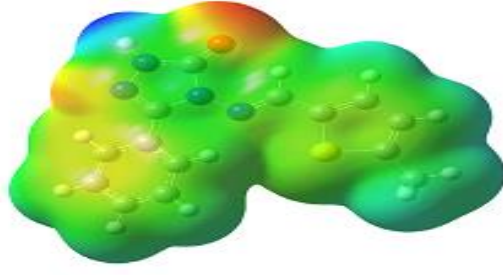
Enerji (a.u.)	B3LYP	HF
	-1233.33335	-1227.47612

Tablo 3.80. 34 Bileşiğinin hesaplanan elektronik özellikleri

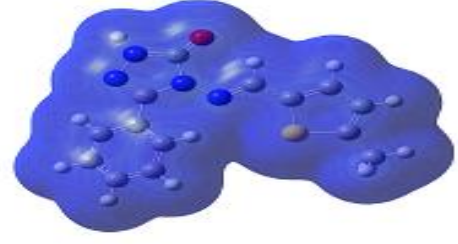
	Hatree	ev	kcal/mol	KJ/mol
LUMO	-0,0499	-1,35781	-31,3124	-131,012
HOMO	-0,21036	-5,72404	-132,002	-552,3
A elektron ilgisi	0,0499	1,35781	31,3124	131,012
I İyonlaşma potansiyeli	0,21036	5,72404	132,002	552,3
ΔE Toplam Enerji	0,16046	4,36623	100,689	421,288
χ Elektronegativite	0,13013	3,54093	81,657	341,656
Pi Kimyasal potansiyel	-0,13013	-3,54093	-81,657	-341,656
ω Elektrofilik indeks	0,0006793	0,01848	0,42626	1,7835
IP Nükleofilik indeks	-0,01044033	-0,28409	-6,55134	-27,4111
S Moleküler yumuşaklık	12,4642	339,159	7821,3	32724,7
η Moleküler sertlik	0,08023	2,18311	50,3446	210,644

Tablo 3.81. 34 Bileşiğinin hesaplanan termodinamik özellikleri

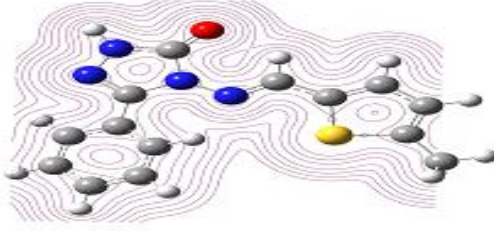
Dönme Sıcaklıkları (Kelvin)	DFT	HF
A	0.02110	0.02101
B	0.00953	0.00982
C	0.00666	0.00683
Dönme Sabitleri (GHZ)		
A	0.43964	0.43775
B	0.19865	0.20457
C	0.13875	0.14237
Isı Enerjisi (kcal/mol)		
Translational	0.889	0.889
Dönel	0.889	0.889
Titreşim	160.095	170.819
Total	161.872	172.597
Isı Kapasitesi CV (cal/mol-K)		
Translational	2.981	2.981
Dönel	2.981	2.981
Titreşim	59.891	55.219
Total	65.852	61.181
Entropi S (cal/mol-K)		
Translational	42.830	42.830
Dönel	34.538	34.488
Titreşim	61.757	57.493
Total	139.126	134.811
Sıfır Nokta Düzeltmesi(Hartree/Particle)	0.240587	0.258684
Enerjide Termal Düzeltme	0.257960	0.275051
Entalpide Termal Düzeltme	0.258904	0.275995
Serbest Gibbs Enerjisinde Termal Düzeltme	0.192800	0.211941
Elektronik ve sıfır nokta enerjilerinin toplamı	-1233.092769	-1227.217436
Elektronik ve Termal Enerjinin toplamı	-1233.075396	-1227.201070
Elektronik ve Termal Entalpinin toplamı	-1233.074452	-1227.200125
Elektronik ve Termal Serbest Enerjinin toplamı	-1233.140556	-1227.264179
Sıfır noktası titreşim enerjisi (Kcal/mol)	150.97063	162.32648



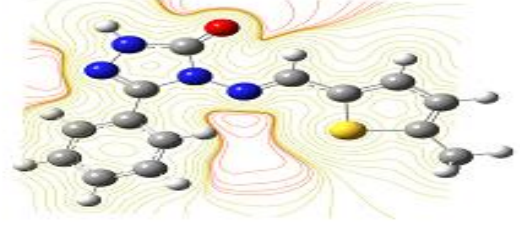
MEP



YOĞUNLUK



ELEKTRON YOĞUNLUĞU



ELEKTROSTATİK POTANSİYELİ

Şekil 3.36. 34 Bileşiğinin yüzey haritaları

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

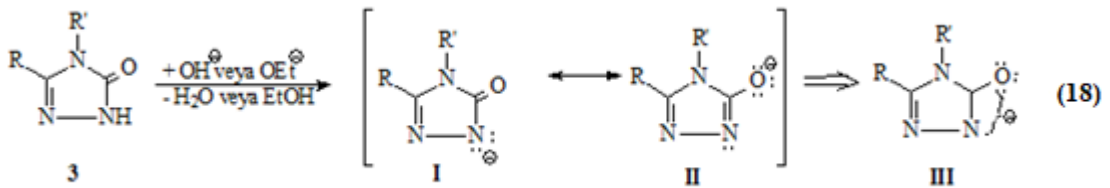
4.1. Bileşiklerin Teorik Verilerinin Yorumlanması

4.1.1. Teorik NMR Verilerinin Yorumlanması

Tezde incelenen 9 adet literatürde kayıtlı bileşiğin titreşim frekansları, teorik-deneysel $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ -NMR ve $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ -NMR(DMSO) değerleri, mulliken yükleri, bağ açıları, bağ uzunlukları, dipol momentleri, elektronik özellikleri (kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), elektron ilgisi (A), iyonizasyon potansiyeli (I)), termodinamik parametreleri (termal enerji (E), termal kapasite (CV), entropi (S)) ve moleküllerin toplam enerjileri "DFT(B3LYP)-HF metodu ile 6-311G(d,p)" temel seti kullanılarak optimize edilmiştir. Böylece bileşiklerin en kararlı formları elde edilmiştir ve bu optimize yapılardan yola çıkarak her bir molekülün teorik parametreleri çalışılmıştır. Elde edilen veriler "materyal, yöntem ve hesaplama metodları" bölümünde tablolar ve grafikler halinde verilmiştir. Tüm hesaplama basamakları "Gaussian 09W" programı kullanılarak yapılmıştır. Deneysel ve teorik $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -NMR değerleri en "küçük kareler" yöntemine göre bulunan " R^2 " verileri tartışılmıştır.

B3LYP/6-311G(d,p) için; ^{13}C : 0.991, ^1H : 0.802, HF/6-311G(d,p) için; ^{13}C : 0.996, ^1H : 0.816, B3LYP/6-311G(d,p) (DMSO) için; ^{13}C : 0.992, ^1H : 0.835 ve HF/6-311G(d,p) için; ^{13}C : 0.996, ^1H : 0.841 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür.

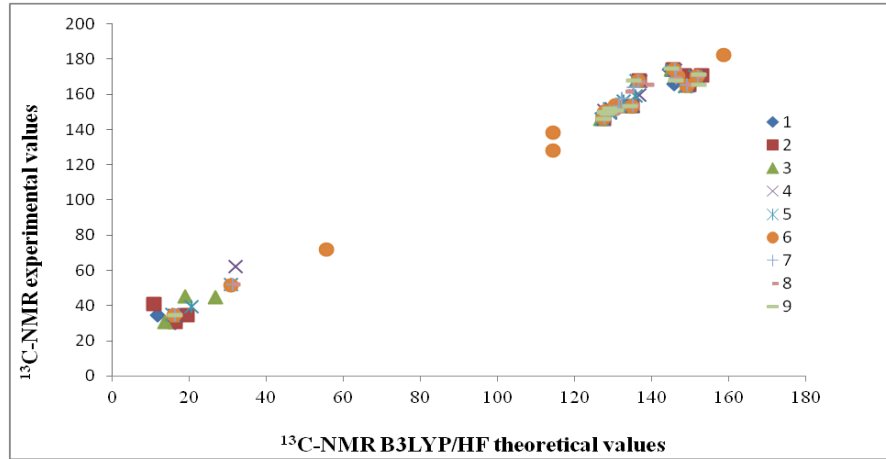
N-H değeri dışında tüm spektral değerlerde uyum varken; N-H protonları için değerler farkı fazladır. "N-H" protonunun asidik özellik taşıması buna sebep olarak gösterilebilir. H yapıdan ayrılınca, N atomunun elektronları "C=O" ile rezonansdan kaynaklı dağıtılır. Bu durumda oluşan anyonun kararlılığını artırır ve N-H protonunun asidik özellik taşımasını sağlar.

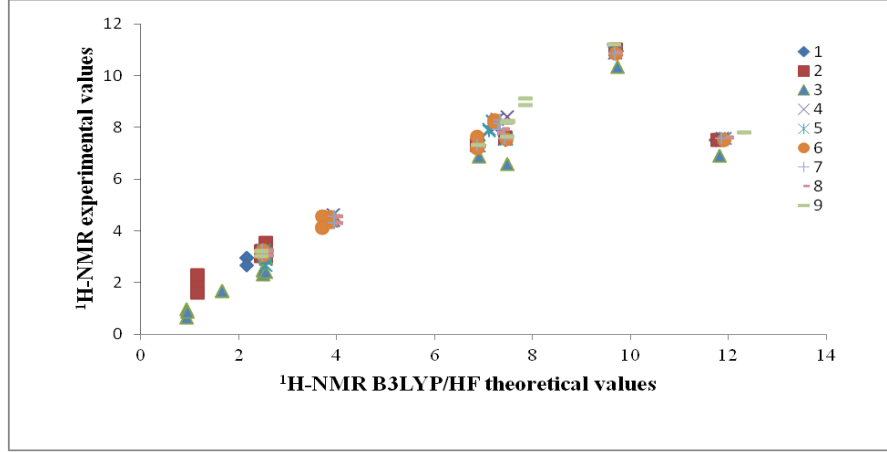


Halkadaki H' nun asidik özellikte olduğu baz ile koparılmasından da anlaşılır. Nitekim, Bu heterosiklik bileşiklerin eldesi tuz oluşumu üzerinden gerçekleşmektedir [45, 46].

Tablo 4.1. 26-34 Bileşiklerinin B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

		^{13}C				^1H			
		R	S.hata	a	b	R	S. hata	a	b
26	DFT	0.991	5.619	0.996	4.360	0.802	1.723	1.133	0.974
	HF	0.996	3.671	0.969	2.961	0.816	1.658	1.167	1.037
27	DFT	0.989	6.635	0.980	-18.664	0.850	1.483	1.130	-0.877
	HF	0.993	5.188	0.963	-4.745	0.867	1.398	1.159	-0.499
28	DFT	0.993	0.992	0.975	-18.617	0.867	1.345	1.127	-0.046
	HF	0.997	2.989	0.958	-3.825	0.715	2.827	1.625	3.437
29	DFT	0.987	4.652	1.007	-23.082	0.766	1.423	1.019	-0.482
	HF	0.995	2.722	0.950	-2.629	0.734	1.516	0.992	0.181
30	DFT	0.993	3.837	0.971	-17.855	0.814	1.328	1.021	-0.435
	HF	0.995	3.384	0.955	-3.196	0.789	1.417	1.007	0.131
31	DFT	0.990	4.392	0.960	-15.562	0.786	1.328	1.054	-0.651
	HF	0.993	3.767	0.951	-4.090	0.750	1.435	0.993	0.200
32	DFT	0.989	4.237	0.966	-17.101	0.773	1.453	1.038	-0.522
	HF	0.996	2.663	0.948	-2.558	0.742	1.549	1.012	0.142
33	DFT	0.989	4.282	0.966	-17.235	0.754	1.448	1.041	-0.458
	HF	0.995	2.980	0.938	-1.147	0.744	1.544	1.015	2.202
34	DFT	0.981	4.665	0.963	-15.796	0.726	0.699	0.976	1.438
	HF	0.990	3.291	0.948	3.694	0.703	1.713	0.962	1.403

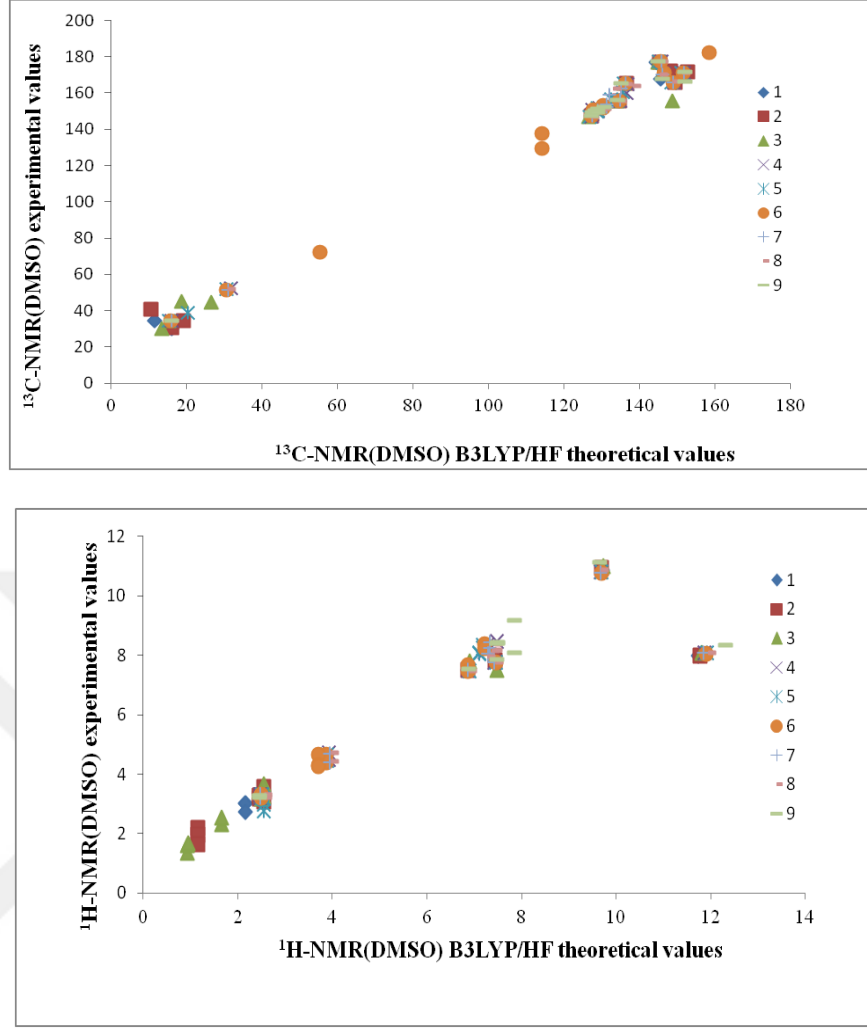




Şekil 4.1. 26-34 Bileşiklerinin B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma Değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.2. 26-34 Bileşiklerinin B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR(DMSO) için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

		$^{13}\text{C}/\text{DMSO}$				$^1\text{H}/\text{DMSO}$			
		R	S.hata	a	b	R	S. hata	a	b
26	DFT	0.992	5.082	0.986	3.939	0.835	1.574	1.151	0.907
	HF	0.996	3.757	0.961	3.007	0.841	1.542	1.169	0.870
27	DFT	0.991	3.985	0.960	-16.938	0.808	1.335	1.057	-0.730
	HF	0.994	3.063	0.941	-2.233	0.773	1.452	1.031	-0.066
28	DFT	0.988	7.048	0.973	-18.253	0.891	1.220	1.120	-0.934
	HF	0.997	3.069	0.949	-3.438	0.876	1.298	1.142	-0.370
29	DFT	0.992	3.590	0.965	-17.001	0.804	1.300	1.042	-0.793
	HF	0.995	2.776	0.942	-2.092	0.767	1.418	1.011	-0.098
30	DFT	0.994	3.548	0.963	-17.285	0.834	1.213	1.034	-0.647
	HF	0.995	3.325	0.947	-2.627	0.813	1.334	1.013	-0.043
31	DFT	0.991	3.982	0.956	-15.474	0.823	1.205	1.077	-0.945
	HF	0.992	3.738	0.945	-3.796	0.781	1.343	1.011	-0.057
32	DFT	0.991	3.941	0.960	-16.754	0.811	1.327	1.062	-0.834
	HF	0.995	2.865	0.941	-2.029	0.774	1.450	1.030	-0.1357
33	DFT	0.991	3.985	0.960	-16.938	0.808	1.335	1.057	-0.730
	HF	0.994	3.063	0.941	-2.233	0.773	1.452	1.031	-0.066
34	DFT	0.983	4.420	0.958	-15.540	0.772	1.499	1.020	-0.578
	HF	0.990	3.291	0.948	-2.873	0.738	1.608	0.981	0.125



Şekil 4.2. 26-34 Bileşiklerinin B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma Değerlerinin karşılaştırılması

4.1.2. Teorik IR (Infrared) Verilerinin Yorumlanması

Tez kapsamında teorik titreşim frekansları hesaplanmıştır. Bu IR frekans değerleri seçilen temel sete göre belirlenen skala faktörleri [47] ile çarpılarak skalalı değerler elde edilmiştir. Yapılan hesaplama sonucunda tüm frekans değerleri pozitif bulunmuştur. Bu sonuç molekülün kararlı bir yapıda olduğunu bize söyler. Her iki metoda göre alınan değerler ile IR spektrumlarının teorik çizimi yapılmıştır. Teorik IR spektrumları, deneysel IR spektrumları ile karşılaştırılmıştır. Bunun sonucu bu karşılaştırılan değerlerin uyumlu oluşudur [48, 25, 49-53]. Veda4f titreşim yerlerini belirlemek için kullanılır. 1-9 heterosiklik bileşiklerde $3166\text{-}3184\text{ cm}^{-1}$ aralıklarında bir adet -NH piki görülürken teorik olarak DFT(B3LYP) metodunda $3107\text{-}3566$ ve HF metodunda $3050\text{-}3560\text{ cm}^{-1}$

aralıklarında, deneysel olarak 1698-1714 cm^{-1} de bir adet "C=O" piki görülürken teorik olarak frekanslar 26-34 bileşiklerinde metod sırasına göre 1742-1749 ve 1770-1773 cm^{-1} de, deneysel olarak 1594-1612 cm^{-1} de bir adet "C=N" piki varken, teorik olarak 26-34 bileşiklerinde B3LYP metodunda 1587-1606 ve HF metodunda 1666-1713 cm^{-1} aralıklarındadır. Deneysel verilere en yakın değerler DFT(B3LYP) metodunda görülmüştür.

4.1.3. Teorik Bağ Açısı ve Bağ Uzunluklarının Yorumlanması

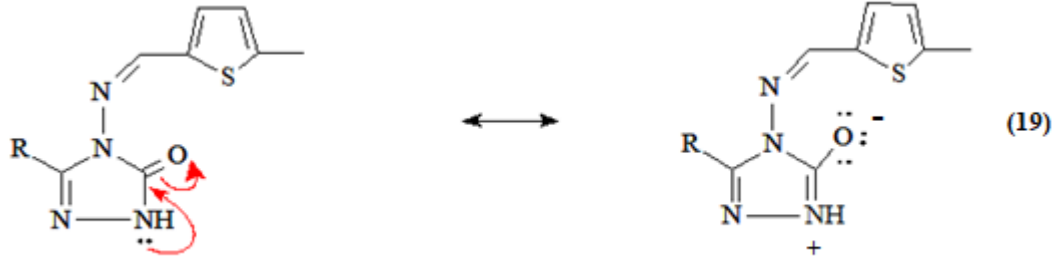
Toplam 9 heterosiklik bileşiğin bağ uzunlukları teorik olarak hesaplanmış, deneysel verilerle uyumunu incelemek için bileşiklerdeki tienil halkasında ki C-H ve C-C bağ uzunlukları incelenmiştir. Halkadaki tüm C-C bağ uzunlukları birbirine eşit ve 1.397 Å , "C-H" bağ uzunlukları ise 1.084 Å olarak ölçülmüştür [53].

26-34 Bileşiklerinin tüm tienil grubu "C-C bağ uzunluğu" 1.389 Å ve 1.378 Å olarak bulunmuştur. B3LYP değerinin deneysel değere yakın olduğu ve literatürle uyumlu olduğu görülmüştür [25]. Aynı bileşiklerde aril C-H bağ uzunlukları ortalamaları sırasıyla 1.472 Å ve 1.476 Å olarak bulunmuştur. Her iki yöntemle bulunan C-H bağ uzunluğu deneysel veriler yakın, ancak biraz yüksek olduğu sonucuna varılmıştır.

26-34 Bileşikleri için teorik "C-N" ve "C=N" bağ uzunlukları tüm maddelerde 1.329/1.306 Å ve 1.288 /1.258 Å olmak üzere aynı değere sahip olduğu görülmektedir. Literatürde [54] "C=N" çift bağ ve "C-N" tek bağlarının uzunluğu sırasıyla 1.28 ve 1.49 Å olarak verilmiştir.

Teorik bağ uzunluklarının incelenmesi ile ortaya çıkan başka bir sonuçta 26-34 bileşikleri için C(2)-NH bağ uzunlukları tüm bileşiklerde için birbirine eşit B3LYP/HF 6-311(d,p) için sırasıyla 1.368; 1.345 Å olarak hesaplanmıştır.

Dolayısıyla triazol halkasında "C(2)-NH" bağının kısmen (=) bağa sahip olduğu söylenebilir. Bunun nedeni, örnek olarak 26-34 bileşiklerinin aşağıdaki rezonans yapıları ile açıklanabilir.



4.1.4. Teorik Mulliken Yüklerinin Yorumlanması

Moleküllerin mulliken yükleri incelendiğinde, tüm moleküllerde elektronegatif Azot (N) ve Oksijen (O) atomları negatif yüklüdür. Ayrıca C1, C2 ve C3 atomlarının etrafında elektronegatif atomların (N, O) varlığı nedeniyle sadece karbon atomlarının içerisinde bu üç karbon atomu pozitif mulliken yüküne sahiptir. Diğer Karbon (C) atomları negatif yüklüdür. H atomlarının tümü pozitif yüke sahiptir.

4.1.5. Teorik Yüzey Haritalarının Yorumlanması

Ayrıca 26-34 moleküllerinin Moleküler Elektrostatik Potansiyeli (MEP), toplam yoğunluk, elektron yoğunluğu, elektrostatik potansiyeli gibi yüzey haritaları oluşturulmuştur. MEP haritası incelendiğinde N,O ve S gibi elektronegatif atomların çevresi elektronca yoğun olduğu için kırmızı renkli, H atomlarından özellikle N-H protonunun çevresi elektronca fakir olduğu için mavi renklidir.

4.1.6. Teorik Toplam Enerji Değerlerinin Yorumlanması

Tüm moleküllerin toplam enerjileri Tablo 4.3.' de verilmiştir.

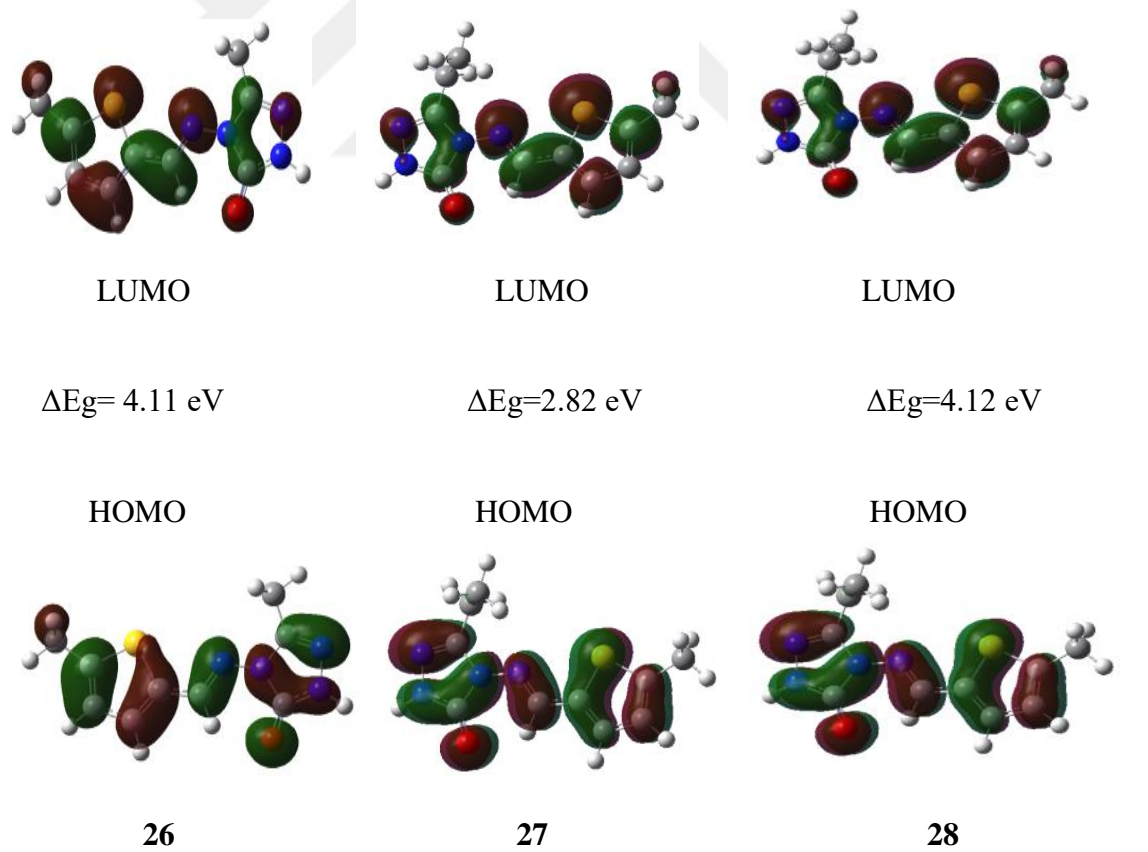
Tablo 4.3. 26-34 Bileşiklerinin Toplam Molekül Enerjileri (a.u.)

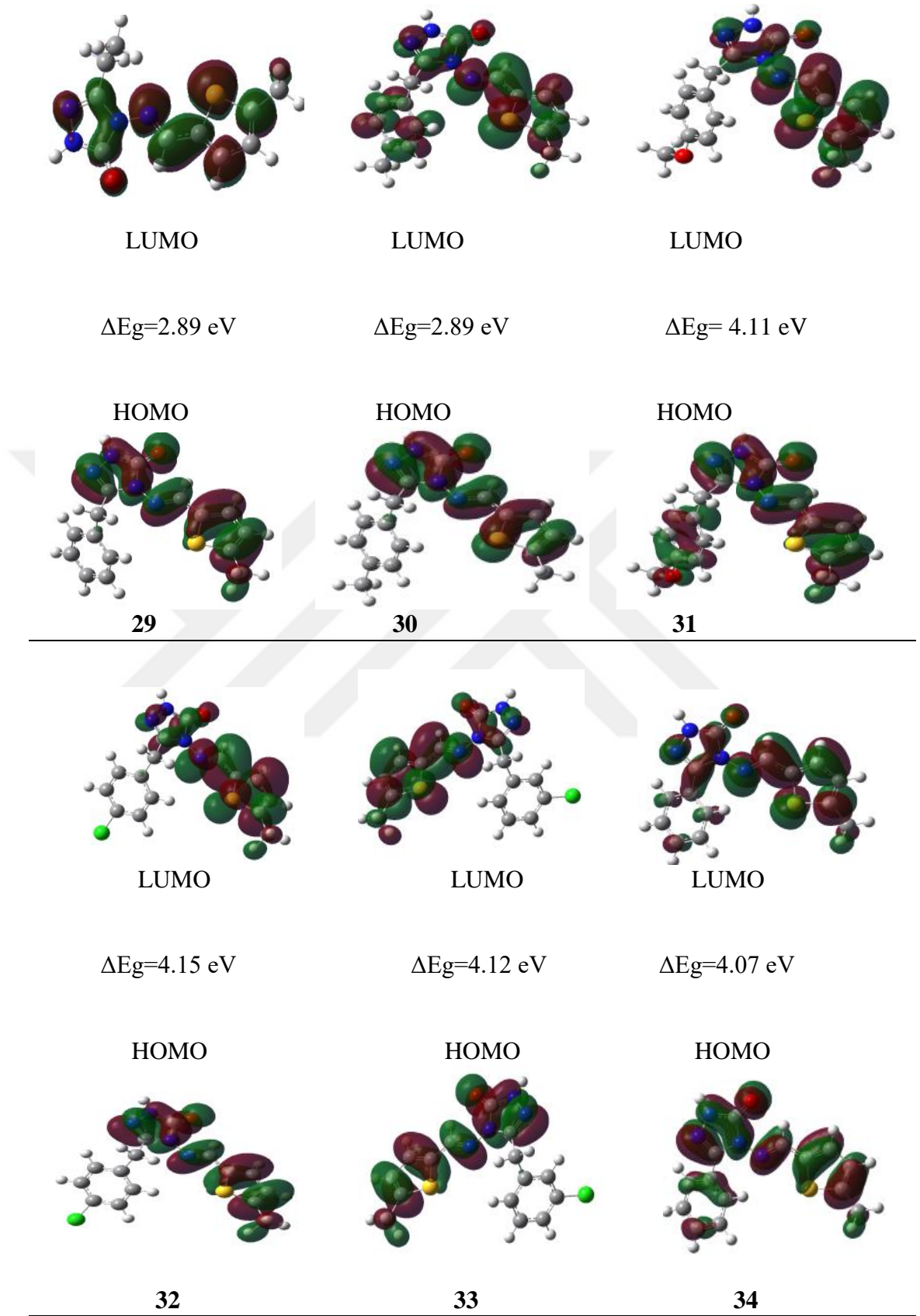
Bileşik No:	Substituent (R)	B3LYP	HF
26	-CH ₃	-1041.55681	-1036.93404
27	-CH ₂ CH ₃	-1080.88039	-1075.97731
28	-CH ₂ CH ₂ CH ₃	-1120.20283	-1115.02076
29	-CH ₂ C ₆ H ₅	-1272.65846	-1266.52359
30	-CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ (-p)	-1311.98598	-1305.56519
31	-CH ₂ C ₆ H ₄ OCH ₃ (-p)	-1387.21167	-1380.43045
32	-CH ₂ C ₆ H ₄ Cl(-p)	-1311.98598	-1305.56519
33	-CH ₂ C ₆ H ₄ Cl(-m)	-1725.44560	-1732.28040
34	-C ₆ H ₅	-1233.33335	-1227.47612

Tablo 4.3.'de görüldüğü üzere 26-34 bileşiklerinin toplam enerjileri hesaplanmıştır. Tüm bileşiklerin toplam enerjileri göz önüne alındığında DFT ve HF'ye göre bulunan değerlerin birbirine yakın olduğu, ancak DFT'ye göre hesaplanan değerlerin daha uyumlu olduğu görülmüştür.

4.1.7. Teorik " ΔE_g " Değerlerinin Yorumlanması

Yukarıdaki şekilde görüldüğü üzere her bir molekülün $\Delta E_g = (E_{LUMO} - E_{HOMO})$ değerleri hesaplanmıştır. " ΔE_g " molekülün kimyasal kararlılığını gösterir. Enerji seviyeleri farkı az olan orbitallerin reaksiyonu daha kolay olur. Elde edilen verilere göre 27, 29 ve 30 moleküllerinin ΔE_g değerleri sırasıyla 2.82, 2.89 ve 2.89 eV'dur. Bu değerlerden anlıyoruz ki, 27, 29 ve 30 bileşiklerinin reaksiyona girme yatkınlıkları oldukça iyidir.





Şekil 4.3. 26-34 Bileşiklerinin ΔE_g ($E_{LUMO}-E_{HOMO}$) Değerleri

5. KAYNAKLAR

- [1] Parr, R. G., Yang, W. (1989). Density Functional Theory. Oxford University Pres. England, 105–136.
- [2] Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation energy Formula into a functional of the electron density. Physical Rev. B. 1133-1139.
- [3] Apaydın, F., Magnetik Rezonans. Hacettepe Üniversitesi. 3, 6-8, (1991).
- [4] Haken, H. And Wolf, H. C. (2000). Atom ve Kuantum Fiziği, çeviri: Okur, İ. Değişim yayınları. 345-350.
- [5] Hohenberg, P., Kohn, W., (1964). Inhomogeneous Electron Gas, Phys. Rev. B, 136, 864.
- [6] Bartolotti, L. J., Flurchick, K. (1996). An Introduction to Density Functional Theory. Rev. Comp. Chem.,7, 187-216.
- [7] Jensen, F. (1999), Introduction to Computational Chemistry John Wiley & Sons, New York.
- [8] Cramer, J. C. (2004). Essential of computational chemistry: theories and models, Second edition, John Wiley & Sons, Ltd., 266-267.
- [9] Sağ-Erdem, S. (2016). Hesapsal Organik Kimya-I ders kitabı, sayfa 11-14.
- [10] Mills, I., Cvitas, T., Homann, K., Kallay, N. And Kuchitsu, K. (1993). Quantities, units and symbols in physical chemistry. Blackwell, 119.
- [11] Wolinski, K., Hilton, J.F. and Pulay, P.J. (1990). Am. Chem. Soc. 112, 512.
- [12] Hansen, A. E. And Bouman, T. D. (1985). Localized orbital/local origin method for calculation and analysis of NMR shieldings. Applications to ¹³C shielding tensors, J. Chem. Phys. 82, 5035-5047.
- [13] Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X.; Hratchian, H.P., Izmaylov, A.F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J.L., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T., Montgomery, J.A.; Jr.Vreven, T., Peralta, J.E., Ogliaro, F., Bearpark, M., Heyd, J.J., Brothers, E., Kudin, N., Staroverov, V.N., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A., Burant, J.C., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Cossi, M., Rega, N., Millam, J.M., Klene, M., Knox, J.E., Cross J.B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A.J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski,

- J.W., Martin, L.R., Morokuma, K.,Zakrzewski, V.G.,Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Dapprich, S., Daniels A.D., Farkas, O., Foresman, J.B., Ortiz, J.V., Cioslowski, J., and Fox, D.J. Gaussian Inc. Wallingford, CT. (2009).
- [14] Dennington, R., Keith, T. And Millam, J. (2009).GaussView, Version 5, Semichem Inc. Shawnee Mission KS.
- [15] Fukui. K., Yonezawa, T., Shingu, H. J, (1952). A molecular orbital theory of reactivity in aromatic hydrocarbons. The Journal of Chemical Physics. 20, 722-725.
- [16] Kemer, G. (2007). Bazı yeni 1,2,4-triazol türevlerinin sentezi, antioksidan ve asitlik özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [17] Yüksek, H., Gürsoy Kol, Ö., Kemer, G., Ocak, Z., Anıl, B. (2011). Synthesis and *in-vitro* antioxidant evaluation of some novel 4-(4-substituted)benzylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones, Indian J. Heterocy. Ch., 20, 325-330.
- [18] Kemer, G., Yüksek, H., Kayalar, M.T. (2011). B3LYP density functional calculations of ¹H and ¹³C nuclear shielding constants of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, 2-nd International Conference on Organic Chemistry: Advances in Heterocyclic Chemistry. GeoHet-2011. Tbilisi, Georgia, PP 65.
- [19] Yüksek, H., Kotan, G. (2016). Experimental and theoretical values of novel 1-(morpholine-4-yl-methyl)-3-methyl-4-(4-ethylbenzylidenamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one molecule, International Journal of Thales Natural Sciences (IJTNS), ISSN(online): 2528-9446, 1(2), 33-47.
- [20] Alkan, M., Gürbüz, A. (2009). Bazı Yeni 1,2,4-Triazol Türevlerinin Sentezi ve Biyolojik Aktivitelerinin İncelenmesi, TÜBİTAK Proje (107T633).
- [21] Alkan, M., Gürbüz, A., Yüksek, H., Kotan, G., Albayrak, Ö. (2014). 3-metil-4-(2-asetoksi-3-metoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Molekülünün Sentezi, Gaussian 09W Programıyla Deneysel ve Teorik Özelliklerinin İncelenmesi, Caucasian Journal of Science, Sayfa 129-137.
- [22] Beytur, M., Akyıldırım, O., Manap, S., Yüksek, H. (2018). 2-(3-Hidroksi-4-metoksibenzilidenamino)-5-merkaptio-1,3,4-tiyadiazol Bileşiğinin Sentezi, Moleküler Yapısı, Spektral ve Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Journal of the Institute of Science and Technology 8(4): 229-238.
- [23] Yüksek, H., Akdeniz, F., Bahçeci, Ş. (2009). Synthesis of Some Potentially Biologically active 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives and

investigation of their structure, Chemistry 2006, XX, National Chemistry Congress, Kayseri, Abstract book, 167,

- [24] Kotan, G., Özdemir G., Yüksek, H. (2018). Investigation of Spectroscopic, Electronic and Geometric Properties of 2-(3-Methyl-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-yl)-azomethine)-benzoic acid Using B3lyp and Hf Basis Sets. Der Pharma Chemica, 10(10): 66-72.
- [25] Beytur, M. (2014). Bazı yeni beş üyeli heterosiklik bileşiklerin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Doktora Tezi, 709.
- [26] Beytur, M., Yüksek, H. (2018). 3-fenil-4-(3-sinamoiloksibenzilidenamino)-4,5- dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülünün spektroskopik özellikleri. Caucasian Journal of Science. Sayfa 65-80.
- [27] Akyıldırım, O. (2011). Bazı potansiyel biyolojik aktif heterosiklik bileşiklerin sentezi, Yapılarının Aydınlatılması ve Bazı Özelliklerinin İncelenmesi. Doktora Tezi. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [28] Gökçe, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gürsoy Kol, Ö. (2013). The syntheses, molecular structures, spectroscopic properties (ir, micro-raman, nmr and uv-vis) and dft calculations of antioxidant 3-alkyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one molecules, Lett. Org. Chem., 10, 395-441.
- [29] Gokce H., Akyildirim O., Bahceli S., Yuksek H., Gursoy Kol O. (2014). The 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one molecule investigated by a joint spectroscopic and quantum chemical calculations, J. Mol. Struct. 1056-1057, 273-284.
- [30] Manap, S. (2009). Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(3,4-disubstiebenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması, antioksidan ve asitlik özelliklerinin incelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [31] Manap, S., Yuksek H., Medetalibeyoğlu H. (2016). Experimental and Theoretical Properties of 3-methyl/N-propyl-4-(3,4-disubstiebenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, International Physics Conference at the Anatolian Peak Bildiri Özetler Kitabı. (12 PP10), Sayfa 318.
- [32] Kara, S. (2013). Bazı yeni 4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.

- [33] Kardaş, F. (2012). Bazı yeni heterohalkalı 1,2,4-triazol bileşiklerinin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [34] Kara, S., Gürsoy Kol, Ö., Yüksek, H., Beytur, M. (2014). 3-etil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin bazı spektroskopik özelliklerinin incelenmesi, I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı. Özet Kitapçığı. Van. Sayfa 61.
- [35] Bankoğlu, B., Yüksek, H. (2014). 3-Benzil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülünün teorik spektral değerleri ile deneysel değerlerinin karşılaştırılması, I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı. Özet Kitapçığı, Van. Sayfa 17.
- [36] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Beytur, M., (2014). Yeni 3-*n*-propil-4-[2-(2-naftilsulfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin bazı spektroskopik özelliklerinin incelenmesi, I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı. Özet Kitapçığı, Van. Sayfa 54.
- [37] Manap, S., Yüksek, H., (2014). Yeni 3-metil-4-[3-metoksi-4-(2-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülünün teorik spektral değerlerinin deneysel değerlerle karşılaştırılması, I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı. Özet Kitapçığı, Van. Sayfa 64.
- [38] Aktaş-Yokuş, Ö., Yüksek, H., Gürsoy-Kol, Ö., Alpay-Karaoğlu, Ş. (2018). In Vitro Antioxidant and Antimicrobial Properties of Some New 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazole-5-ones. Indian Journal of Heterocyclic Chemistry. Vol. 28 03: 389-396.
- [39] Aytemiz, F., Kotan, G., Aktaş-Yokuş, Ö., Yüksek, H. (2018). Gaussian calculations of 1-Acetyl-3-methyl-4-(3-benzenesulfonyloxy-4-methoxybenzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one. IV. Uluslararası Mesleki Ve Teknik Bilimler Kongresi. Erzurum, Tam Metin Kitabı. Sayfa 2125-2136.
- [40] Manap, S., Medetalibeyoğlu, H. (2018). Investigation of Theoretical/Experimental Spectroscopic and Electronic Properties of 1-Acetyl-3-Methyl-4-[3-(2-Methylbenzoxy)-4-Methoxy]-Benzylidenamino-4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-Triazol-5-One By Using 6-31G(d,p) Method. IV. Uluslararası Mesleki ve Teknik Bilimler Kongresi. Erzurum, Tam Metin Kitabı. Sayfa 1436-1458.
- [41] Ulufer, S. (2014). Bazı yeni 4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.

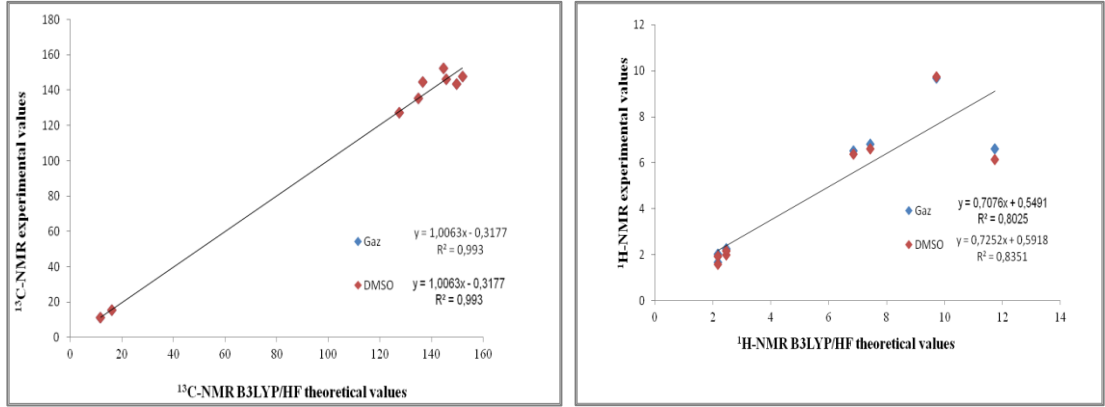
- [42] Ulufer, S., Yüksek, H., Kotan, G. (2018). Investigation of Theoretical Properties of 3-(M-chlorobenzyl)-4-[3-(2-methylbenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Using B3LYP and HF Basis Sets”, International Conference on Research in Education and Science (ICRES). Sayfa 138, April 28 – May 1, Marmaris, Turkey.
- [43] Kotan, G. (2015). Bazı Yeni Heterosiklik Bileşiklerin Sentezi ve Bazı Özelliklerinin İncelenmesi Üzerine Bir Çalışma, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [44] Gürsoy Kol, Ö., Yüksek, H., İslamoğlu, F. (2012). *In vitro* Antioxidant and Acidic Properties of Novel 4-(5-Methyl-2-thienylmethyleamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives. Synthesis and Characterization, Rev. Chim. (Bucharest) , 63 , No. 11.
- [45] Yüksek, H., “3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1,2,4-triazol-5-on’ların bazı reaksiyonlarının incelenmesi”, Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon (1992).
- [46] Bahçeci, Ş., Yüksek, H., Ocağ, Z., Köksal, C., Özdemir, M., (2002). Synthesis and non-aqueous medium titrations of some new 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, Acta Chim. Slov., 49: 783-794.
- [47] Merrick, J. P, Moran, D., Radom, L. (2007). An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. Journal of Physical Chemistry. 111(45), 11683-11700.
- [48] Kayalar, M. T. (2012). Bazı 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin spektroskopik özelliklerinin deneysel ve bilgisayar destekli teorik incelenmesi, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [49] Lee, S.Y. (1998). Molecular Structure and Vibrational Spectra of Biphenyl in the Ground and the lowest Triplet States. Density Functional Theory Study, Bull.Korean chem. Soc., 19(1), 93-98.
- [50] Gökce, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H. (2012). 3-Benzil-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Molekül Yapısı, Spektroskopik Özellikleri ve Kuantum Kimyasal Hesaplamaları, Adım Fizik Günleri – 2012. Pamukkale Üniversitesi. Denizli.
- [51] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gökce, H., Bahçeli, S. (2012). 1-Asetil-3-benzil-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Molekül Yapısı, Spektroskopik Özellikleri ve Kuantum Kimyasal Hesaplamaları”, Fizik Günleri-2012, Pamukkale Üniversitesi. Denizli.

- [52] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gökçe, H., Bahçeli, S. (2012).The molecular structure,spectroscopic properties and quantum chemical calculations of 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computationfor Science and Technology. Niğde, Turkey, PP-17.
- [53] Gökçe, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H., (2012). The molecular structure,spectroscopic properties and quantum chemical calculations of 3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, Niğde, Turkey, PP-18.
- [54] İkizler, A. A. (1996). Organik Kimyaya Giriş, Dördüncü Baskı, KTÜ Basımevi, Trabzon.

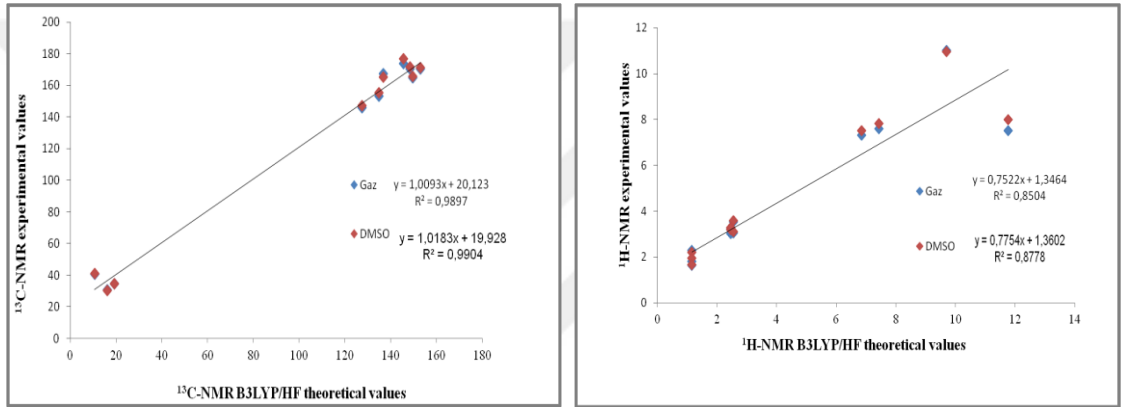




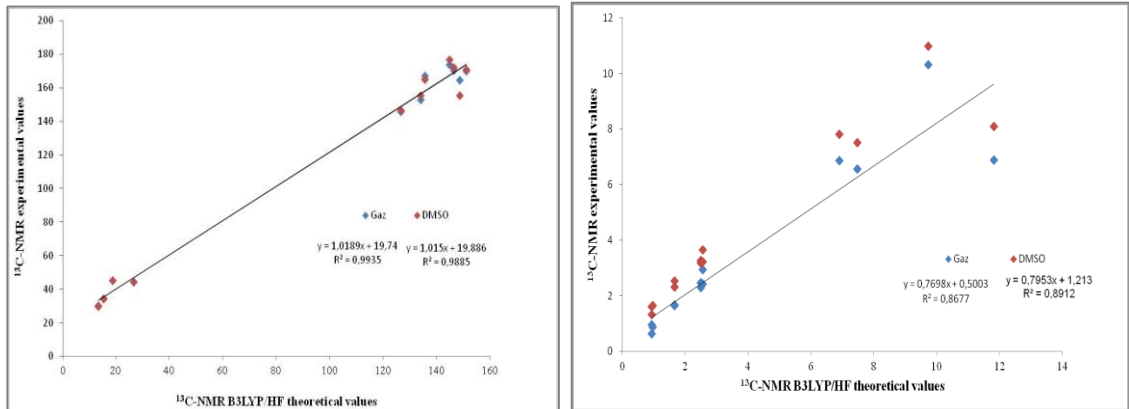
EKLER



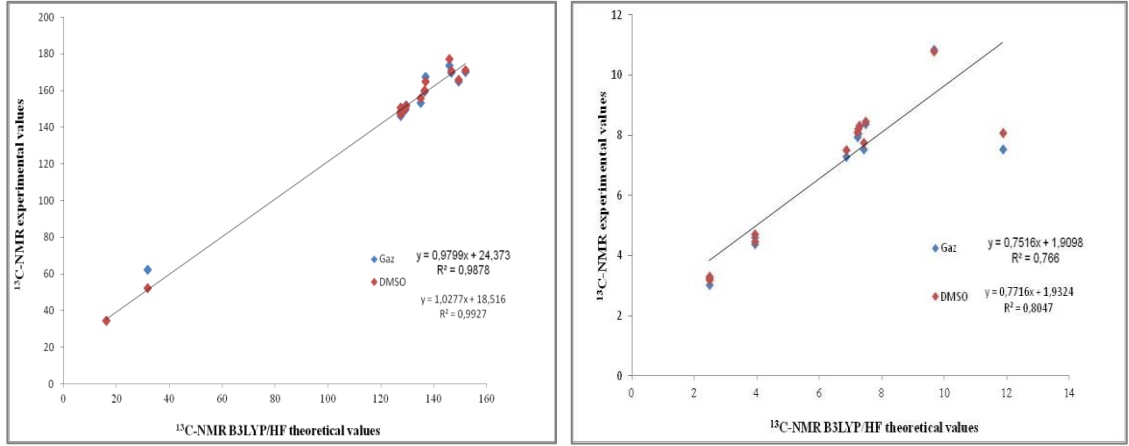
Ek Şekil 1. 26 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



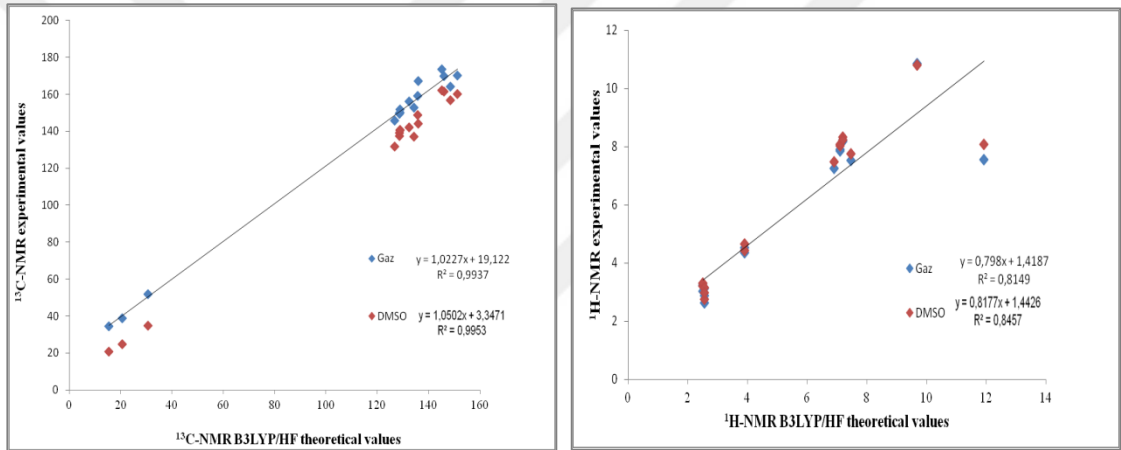
Ek Şekil 2. 27 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



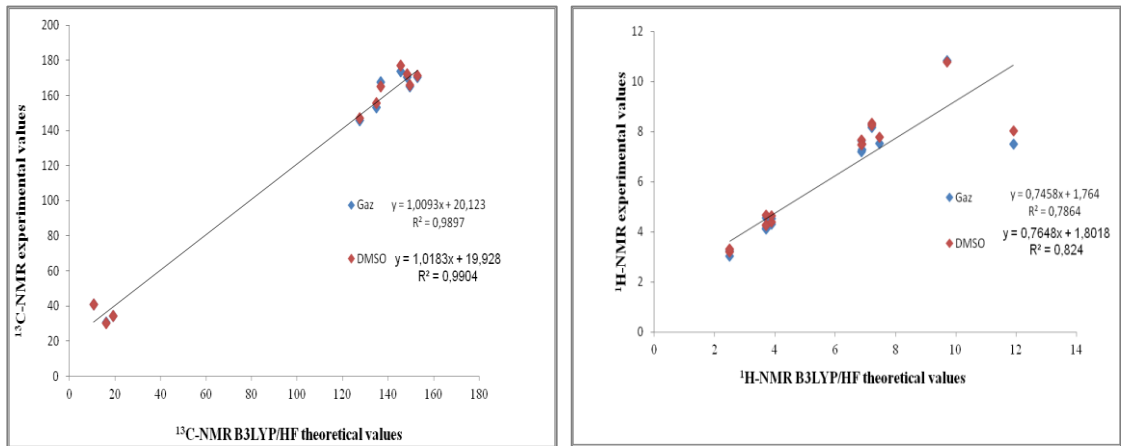
Ek Şekil 3. 28 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



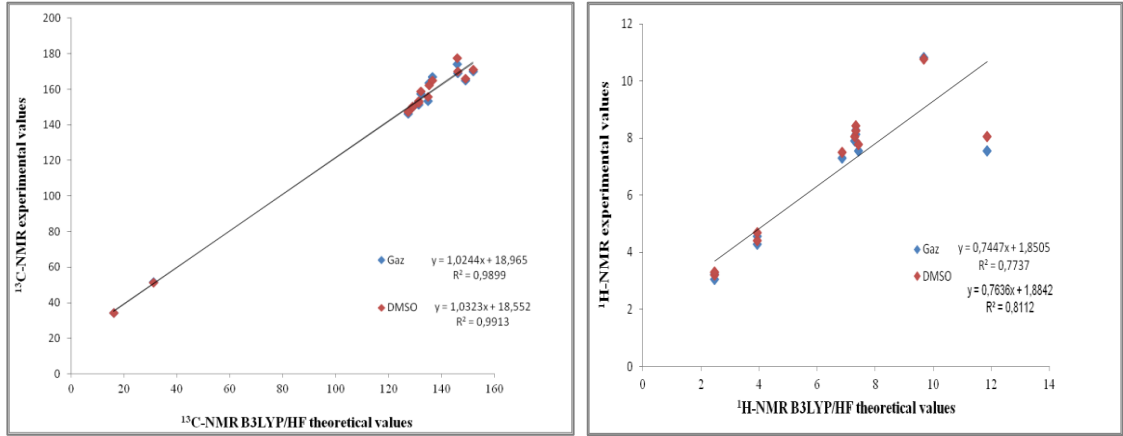
Ek Şekil 4. 29 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik 13C ve 1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



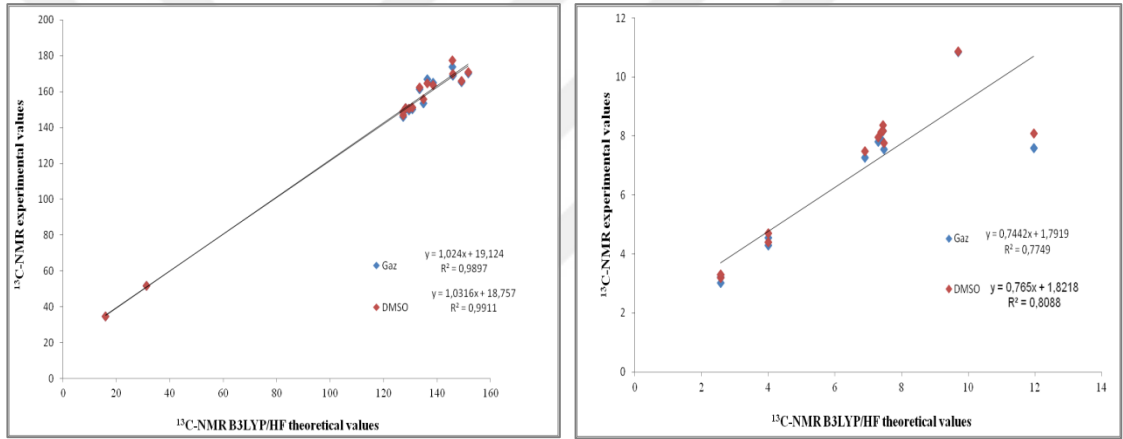
Ek Şekil 5. 30 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik 13C ve 1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



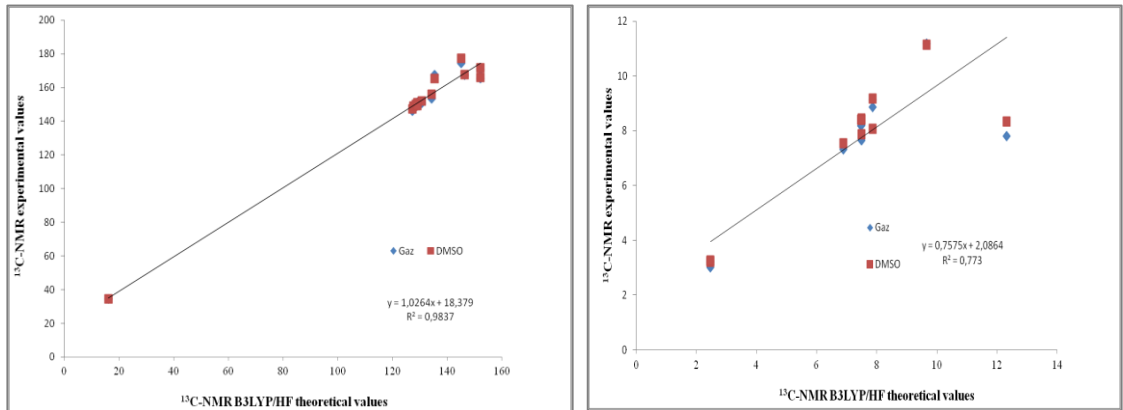
Ek Şekil 6. 31 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik 13C ve 1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 7. 32 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 8. 33 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 9. 34 Bileşiğinin B3LYP / HF ve B3LYP / HF (dms0) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Sevecan KARAKOYUN
Adres : Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi
E-posta : sevecan_akaras_@hotmail.com

Eğitim Bilgileri

Lise : Iğdır Lisesi (2002-2004)
Lisans : Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü (2006-2010)
Yüksek Lisans : Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı, Organik Kimya Bilim Dalı (2014-2019)
Tez Konusu : Bazı 1,2,4-Triazol Türevleri Üzerine Teorik Bir Çalışma

Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitabında (*Proceedings*) basılan bildiriler :

1. Beytur, M., Yüksek, H., **Karakoyun, S.**, Turhan İrak, Z., (2018). Spectroscopic, Electronic and Non-Linear Properties of 3-methyl-4-(5-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one, *4th International Turkic World Conference on Chemical Sciences and Technologies, ITWCCST, Kyiv, Ukraine, Abstract Book, S: 116, 7-10 September, 2018. (Özet Bildiri/Poster).*