

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

**BAZI 4,5-DİHİDRO-1H-1,2,4-TRİAZOL-5-ON TÜREVLERİNİN GAUSSİAN 09W
PROGRAMI İLE BAZI ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

**İhsan AVINCA
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**DANIŞMAN
Dr. Öğr. Üyesi Murat BEYTUR**

**Temmuz-2019
KARS**



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



**BAZI 4,5-DİHİDRO-1H-1,2,4-TRİAZOL-5-ON TÜREVLERİNİN GAUSSİAN 09W
PROGRAMI İLE BAZI ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**


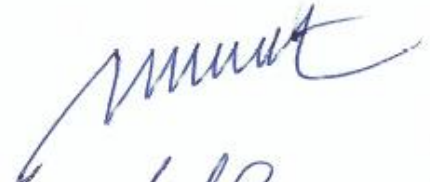

**İhsan AVINCA
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**DANIŞMAN
Dr. Öğr. Üyesi Murat BEYTUR**

**Temmuz-2019
KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi İhsan AVINCA'nın Dr. Öğr. Üyesi Murat BEYTUR danışmanlığında Yüksek Lisans tezi olarak hazırladığı "**Bazı 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Gaussian 09W Programı ile Bazı Özelliklerinin İncelenmesi**" adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy ... bir (1) ... ile kabul edilmiştir.

31/07/2019

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

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
İhsan AVINCA
31.07.2019

ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

BAZI 4,5-DİHİDRO-1H-1,2,4-TRİAZOL-5-ON TÜREVLERİNİN GAUSSIAN 09W PROGRAMI İLE BAZI ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

İhsan AVINCA

Kafkas Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Anabilim Dalı

Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Murat BEYTUR

Tez kapsamında, literatürde kayıtlı 6 adet 3-aryl-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (1) moleküllerinin geometrik (Bağ uzunluğu, Bağ açısı), spektroskopik (IR, NMR ve UV), elektronik (HOMO-LUMO enerji farkları, iyonlaşma potansiyeli, elektron ilgisi, moleküler sertlik, moleküler yumuşaklık, elektronegatiflik ve Mulliken atomik yük değerleri) ve lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemleri ve polarize setleri kullanılarak incelenmiştir. İlk önce, Sentezlenmiş moleküllerin minimum enerjili ve en kararlı yapısı bulabilmek için, DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleri kullanılarak optimize edilmiştir. Bulunan minimum enerjili optimize edilmiş geometrik yapıdan ilgili bileşiklerin bağ uzunlukları ile bağ açıları belirlenmiştir. Moleküllerin optimize yapısından titreşim frekansları hesaplanmıştır. Bilgisayar destekli Gaussian 09W paket programı kullanılarak hesaplanan IR frekanslarının titreşim türlerinin belirlenmesinde Veda4f programından faydalanılmıştır. Teorik hesaplanan titreşim frekansı değerleri uygun skala faktörleriyle çarpılmış ve deneysel değerlerle mukayese edilmiştir. DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemlerine göre teorik IR spektrumları çizilmiştir. ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri optimize yapı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmış ve teorik olarak elde edilen kimyasal kayma değerleri deneysel değerler

ile karşılaştırılmış ve uyumlu oldukları gözlemlenmiştir. İlâveten, 6 adet 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on'ların (1) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri, enerji farkları ve HOMO-LUMO enerjilerinden elde edilen elektronik parametreler (**I**; İyonlaşma potansiyeli, **A**; elektron ilgisi, ΔE ; Enerji Boşluğu, χ ; elektronegatiflik, **S**; moleküler yumuşaklık, ω ; Elektrofilik İndeks, **IP**; Nükleofilik İndeks, **Pi**, Kimyasal Potansiyel, Toplam Enerji) ve Mulliken atomik yük değerleri belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: B3LYP, B3PW91, GIAO, 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on, Teorik.

2019, 110 Sayfa

ABSTRAT

(M. Sc. Thesis)

INVESTIGATION OF SOME PROPERTIES OF SOME 4,5-DİHİDRO-1H-1,2,4- TRIAZOL-5-ON DERIVATIVES WITH GAUSSIAN 09W PROGRAM

İhsan AVINCA

Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of Chemistry


Supervisor: Assist. Prof. Dr. Murat BEYTUR

In the scope of the thesis, the geometric (Bond angle and Bond Lengths of 6 different 3-aryl-4-(3-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one, spectroscopic (IR, NMR and UV), electronics (HOMO-LUMO energy differences, ionization potential, electron affinity, molecular hardness, molecular softness, electronegativity and Mulliken atomic charge values) and nonlinear optical properties theoretically DFT / B3LYP / 6-311G (d, p) and DFT / B3PW91 / 6-311G (d, p) methods and polarized sets. First, it was optimized using the DFT / B3LYP and DFT / B3PW91 methods to find the most energetic and minimum energy structure of the synthesized molecules. The bond lengths and bond angles of the related compounds were determined from the optimized geometric structure with the minimum energy found. Vibration frequencies were calculated from the optimized structure of the molecules. Veda4f program was used to determine the vibration frequencies of the IR frequencies calculated using the computer aided Gaussian 09W package program. The calculated vibration frequency values were multiplied by appropriate scale factors and compared with the experimental values. Theoretical IR spectra were drawn according to DFT/B3LYP and DFT/B3PW91 methods. ¹H-NMR and ¹³C-NMR chemical shift markers were calculated according to the GIAO method using optimized structure and the theoretical shift

markers obtained were compared with experimental values and found to be compatible. In addition, the calculated HOMO-LUMO energies of 6 3-aryl-4-(3-methyl-2-thienylmethyleneamino) -4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones, energy differences and electronic parameters obtained from HOMO-LUMO energies (I; ionization potential, A; electron affinity, ΔE ; Energy Gap, χ ; electronegativity, S; molecular softness, ω ; Electrophilic Index, IP; Nucleophilic Index, Pi, Chemical Potential, Total Energy) and Mulliken atomic charge values were determined.

Key Words: B3LYP, B3PW91, GIAO, 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one, Theoretical

2019, 110 Pages



ÖNSÖZ

Bu tez çalışması, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programında yapılmıştır.

Bu çalışmanın başlangıcından sonlandırıldığı ana kadar karşılaştığım hertürlü sorunun aşılmasında bilgilerini bizlerle paylaşan desteğini esirgemeyen kullandığı her kelimenin hayatıma kattığı önemi asla unutmayacağım kendisini fazlasıyla yordüğüm esprili güler yüzlü saygı değer hocam Dr. Öğr. Üyesi Murat BEYTUR'a saygı ve teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Tez çalışmamın her aşamasında, yardımlarıyla beni onurlandıran kıymetli hocam, Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölüm Başkanı, Prof. Dr. Haydar YÜKSEK'e saygı ve teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Tecrübe bilgi birikimleriyle her zaman kendilerinden çok şey öğrendiğim sayın hocam Dr. Öğr. Üyesi Hilal MEDETALİBEYOĞLU'na sonsuz teşekkür ederim. Bu çalışmanın hazırlanışında bilgi ve tecrübelerini benden esirgemeyen sayın hocam Dr. Öğr. Üyesi Sevda MANAP 'a sonsuz teşekkür ederim. Tez çalışmamın her aşamasında bana yardımcı olan hoşgörüsü desteği bilgisiyle bana yardımcı olan sayın hocam Öğr.Görevlisi Fevzi AYTEMİZ 'e sonsuz teşekkür ederim.

Bütün eğitim hayatım boyunca maddi manevi desteklerini esirgemeyen aileme sonsuz teşekkür ederim.

İhsan AVINCA

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	IV
ABSTRAT.....	VI
ÖNSÖZ.....	VIII
İÇİNDEKİLER	IX
ŞEKİLLER DİZİNİ	XI
TABLolar DİZİNİ	XIV
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XIX
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1 Giriş.....	1
1.1. 3-Alkil(Aril)-4-amino-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on'ların Sentezi ve İncelenen Bazı Reaksiyonları	3
2. MATERYAL VE YÖNTEM.....	18
2.1. Deneysel Veriler.....	18
2.2. Hesaplama Metodları	19
3. BULGULAR.....	21
3.1. Deneysel Veriler.....	21
3.1.1. 3-Benzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (45) [71]	21
3.1.2. 3-p-Metilbenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (46) [71]	22
3.1.3. 3-p-Metoksibenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (47) [71]	22
3.1.4. 3-p-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (48) [71]	23
3.1.5. 3-m-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (49) [71]	24
3.1.6. 3-Fenil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (50) [71]	24

3.2. Teorik Veriler	25
3.2.1. Geometrik Optimizasyon	25
3.2.2. İnfrared Spektrum Verileri.....	35
3.2.3. NMR Spektral Verileri.....	58
3.2.4. UV Spektral Verileri	63
3.2.5. Elektronik Özellikler.....	68
3.2.6. Mulliken Yükleri.....	72
3.2.7. Lineer Olmayan Optik Özellikleri (NLO)	74
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	79
4.1. Moleküler Özellikler	79
4.2. İnfrared Spektrum Analizi	82
4.3. NMR Spektral Analiz	84
4.4. UV-vis Spektral Analiz	88
4.5. HOMO and LUMO analizi.....	88
4.6. Mulliken popülasyon analizi	91
4.7. Doğrusal olmayan optik özellikler	91
4.8. MEP Analizi	93
5. KAYNAKLAR	97
ÖZGEÇMİŞ.....	110

ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 3.1. 3-Benzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (45) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	25
Şekil 3.2. 3-p-Metilbenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (46) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	26
Şekil 3.3. 3-p-Metoksibenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (47) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	26
Şekil 3.4. 3-p-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (48) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	27
Şekil 3.5. 3-m-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (49) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	27
Şekil 3.6. 3-Fenil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (50) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı	28
Şekil 3.7. 45 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	54
Şekil 3.8. 46 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	54
Şekil 3.9. 47 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	55
Şekil 3.10. 48 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	56
Şekil 3.11. 49 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	57

Şekil 3.12.	50 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları	57
Şekil 3.13.	45 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	64
Şekil 3.14.	46 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	64
Şekil 3.15.	47 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	65
Şekil 3.16.	48 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	65
Şekil 3.17.	49 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	66
Şekil 3.18.	50 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları	66
Şekil 3.19.	45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	69
Şekil 3.20.	46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	69
Şekil 3.21.	47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	70
Şekil 3.22.	48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	70
Şekil 3.23.	49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	71
Şekil 3.24.	50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri	72

Şekil 4.1.	45 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	85
Şekil 4.2.	46 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	85
Şekil 4.3.	47 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	85
Şekil 4.4.	48 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	86
Şekil 4.5.	49 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	86
Şekil 4.6.	50 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	86
Şekil 4.7.	45 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	94
Şekil 4.8.	46 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	94
Şekil 4.9.	47 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	95
Şekil 4.10.	48 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	95
Şekil 4.11.	49 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	95
Şekil 4.12.	50 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri	96

TABLolar DİZİNİ

Tablo 3.1.	45 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	28
1Tablo 3.2.	46 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	29
Tablo 3.3.	47 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	29
Tablo 3.4.	48 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	30
Tablo 3.5.	49 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	30
Tablo 3.6.	50 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (A^0)	31
Tablo 3.7.	45 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	31
Tablo 3.8.	46 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	32
Tablo 3.9.	47 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	32
Tablo 3.10.	48 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	33
Tablo 3.11.	49 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	34
Tablo 3.12.	50 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)	34
Tablo 3.13	45 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	36
Tablo 3.14.	46 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	39
Tablo 3.15.	47 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	42

Tablo 3.16.	48 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	45
Tablo 3.17.	49 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	48
Tablo 3.18.	50 Bileşiminin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri	51
Tablo 3.19.	45 Bileşiminin ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerlerinin deneysel ve teorik verilerinin karşılaştırılması (□/ppm)	58
Tablo 3.20.	46 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (□/ppm)	59
Tablo 3.21.	47 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (□/ppm)	60
Tablo 3.22.	48 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (□/ppm)	61
Tablo 3.23.	49 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (□/ppm)	62
Tablo 3.24.	50 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ¹³ C ve ¹ H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (□/ppm)	63
Tablo 3.25.	45 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	667
Tablo 3.26.	46 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	67
Tablo 3.27.	47 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	67
Tablo 3.28.	48 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	67

Tablo 3.29.	49 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	68
Tablo 3.30.	50 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri	68
Tablo 3.31.	45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	72
Tablo 3.32.	46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	73
Tablo 3.33.	47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	73
Tablo 3.34.	48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	73
Tablo 3.35.	49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	74
Tablo 3.36.	50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri	74
Tablo 3.37.	45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	75
Tablo 3.38.	46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	75
Tablo 3.39.	47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle	

	oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	76
Tablo 3.40.	48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	76
Tablo 3.41.	49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	77
Tablo 3.42.	50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	78
Tablo 4.1.	44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-S bağ uzunlukları	80
Tablo 4.2.	44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-S bağ uzunlukları	80
Tablo 4.3.	44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan triazol C3'e bağlı benzen halkasının DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-H bağ uzunlukları	81
Tablo 4.4.	44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan triazol C3'e bağlı benzen halkasının DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-H bağ uzunlukları	81
Tablo 4.5.	44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik N2-C bağ uzunlukları	82
Tablo 4.6.	44 Tipi moleküllerin seçilmiş titreşim türlerinin deneysel ve teorik (DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p)) verileri	83

Tablo 4.7.	44 Tipi Moleküllerin regresyon analizi sonucu oluşturulan R ² değerleri ve bu değerlerin ortalaması	87
Tablo 4.8.	45 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	89
Tablo 4.9.	46 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	89
Tablo 4.10.	47 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	90
Tablo 4.11.	48 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	90
Tablo 4.12.	49 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	90
Tablo 4.13.	50 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler	91
Tablo 4.14.	44 Tipi moleküllerin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre hesaplanan ilk hiperpolarize edilebilirlik değerleri	93

SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

DNA	: Deoksiribo Nükleik asit
RNA	: Ribonükleik Asit
IR	: Infrared
NMR	: Nükleer Manyetik Rezonans
UV-Vis	: Ultraviolet-visible
B3LYP	: Becke, 3-parameter, Lee-Yang-Parr
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi
HOMO	: En Yüksek Dolu Moleküler Orbital
LUMO	: En Düşük Dolu Olmayan Moleküler
HF	: Hatree-Fock
GIAO	: Gauge-Independent Atomic Orbital
HAT	: Hidrojen Atom Transferi
SEP-TP	: Tek elektron transfer-proton transferi
SPLET	: Ardışık Proton Kaybı Elektron Transferi
MEP	: Moleküler Enerji Potansiyeli
NLO	: Lineer Olmayan Optik
DMSO	: Dimetil Sulfoksit

1. GENEL BİLGİLER

1.1 Giriş

Kimya, yani madde bilimi, evrende ve tüm canlılardaki atomlar ve bunları birbirine bağlayan bağlarda süregelen karmaşık dönüşümleri inceler. Klasik tanımı ile kimya bir laboratuvar bilimidir ve laboratuvarsız kimya düşünülemez. Hesaplmalı kimya ise, fizik prensiplerinden (kuantum mekanik, moleküler mekanik, moleküler dinamik) türetilmiş matematiksel denklemleri (teorik kimya yöntemleri) kullanarak kimyanın bilgisayar ortamında atomik ve moleküler boyutta modellenmesidir. Bilgisayar teknolojisindeki ve algoritmalarındaki hızlı gelişmeler hesaplmalı kimya alanının da çok hızlı bir şekilde ilerlemesini sağlamıştır ve laboratuvar deneyleri yapmadan da kimya araştırmaları mümkün hale gelmiştir. Hesaplmalı kimya yöntemlerinin kurucuları olan John Pople ve Walter Khan'ın 1998 yılında Nobel ödülüne layık görülmelerinin sebebi bu alanda bilime ve insanlığa açtıkları yeni ufuklardan dolayıdır [1].

Kimyasal değişimler olurken moleküllerdeki bazı bağlar kırılır yerine yeni bağlar oluşur. Bağ kırılmaları ve oluşmaları femto saniye (saniyenin 10^{-15} katı) mertebesinde gerçekleşen çok çok hızlı olaylardır. Bu kadar hızlı değişimleri izleyebilecek deneysel yöntemler ve cihazlar henüz kullanımda değildir ve bilim dünyasının yoğun bir şekilde üzerinde çalıştığı zor ve önemli problemlerden biridir. Bunun göstergesi olarak, 1999 yılı Nobel ödülü femtokimya alanındaki çalışmalarından dolayı Mısırlı bilim adamı Ahmed H. Zewail'e verilmiştir [2].

İşte hesaplmalı kimya bilgisayar teknolojisini ve teorik kimya prensiplerini kullanarak bu önemli ihtiyacı karşılar. Şöyle ki, hesaplmalı kimyayı bir kimyasal değişimin hızını 10^{15} kat yavaşlatarak izleyebilmemizi sağlayan bir video kamera; aynı zamanda da atom ve molekülleri 10^9 kat büyüterek görmemizi sağlayan bir ultramikroskop olarak düşünebiliriz.

Hesaplmalı kimya yöntemleri ile uzayda yıldızlararası boşlukta küçük moleküller arasında gerçekleşen tepkimeleri bilgisayar ortamında kolaylıkla taklit edebilir ve

izleyebiliriz. Laboratuvarında deneysel tekniklerle yakalanması ve izlenmesi imkansız olan geiş konumlarını (aktifleşmiş kompleks) bilgisayar ekranında görebilir hareketlerini izleyip tepkimenin nasıl gerçekleştiğini tüm detayları ile anlayabiliriz.

Canlılardaki tepkimeler ise çok büyük dev moleküller (proteinler, enzimler, DNA, RNA vs.) üzerinden gerçekleştiğinden bunları modellemek çok daha karmaşık ve zordur. Çok zor olmasına rağmen bu kadar büyük moleküllerin değişimleri de modellenenilmekte ve bilim dünyasına (tıp, eczacılık, genetik, biyoteknoloji, biyoinformatik vs.) çok önemli yeni bilgiler kazandırmaktadır. Bu nedenle, çok büyük moleküllerin modellenenibilmesini sağlayan teorik yöntemleri geliştiren Martin Karplus, Michael Levitt ve Arieh Warshel 2013 yılı Nobel ödülüne layık görüldüler [3].

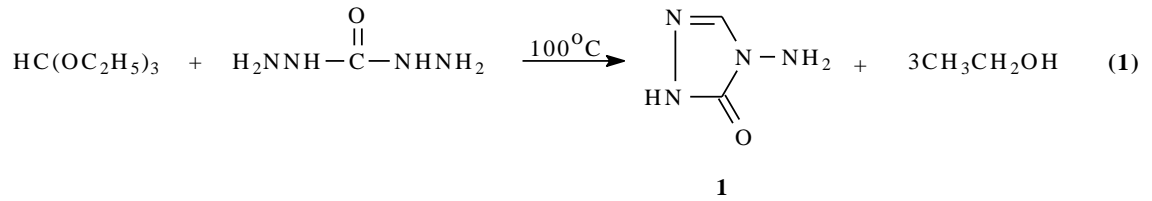
Hesaplamalı kimya günümüzde hızla gelişen ve insanlığın merak ettiği birçok soruya cevap arayan önemli ve vazgeçilmez bir araç haline gelmiştir. İlk zamanlarda sadece deney sonuçlarını desteklemek ve açıklamak amacıyla kullanılan hesaplamalı kimya artık başlı başına yeni bilimsel bilgiler üretebilen, deneylere yol gösterebilen, maddenin yapısını ve etkileşimlerini anlayabilmemizi sağlayan ve keşfedebilen konuma ulaşmıştır. Günümüzde özellikle bazı alanlarda, hesaplamalı kimya ve modelleme olmaksızın yalnızca laboratuvar deneyleri ile hedeflenen sonuçlara ulaşmak imkânsız gibidir. Örneğin, yalnızca belirli bir hedef enzime seçici olarak bağlanan, bu nedenle yan etkileri olmayan, etkinliği çok yüksek modern ilaçların keşfedilmesi moleküler modelleme ve bilgisayar-destekli mantıksal tasarım yöntemleri sayesinde mümkün hale gelmiştir.

Bilimsel literatürde hesaplamalı kimya ve molekül modelleme uygulamalarının geldiği noktaları gösteren birçok örnek bulmak mümkündür. Örneğin Stanford Üniversitesinden V. Pande ve T. Martinez'in grubu kuantum dinamik simülasyonları ile yaşamın başlangıcının ön safhalarını taklit eden "ab initio nanoreaktör" yapmayı başardılar [4] Aşağıda "Urey-Miller Nanoreactor Simulation" bağlantısındaki videoda yeryüzünün ilk zamanlarını temsil eden CH₄, H₂, H₂O, CO, NH₃ gibi çok sayıda küçük bileşiğin bulunduğu bir ortamda sıcaklık ve basınç etkisi ile canlıların yapı taşlarından biri olan alanin aminoasitinin nasıl oluştuğunu izlemek mümkündür.

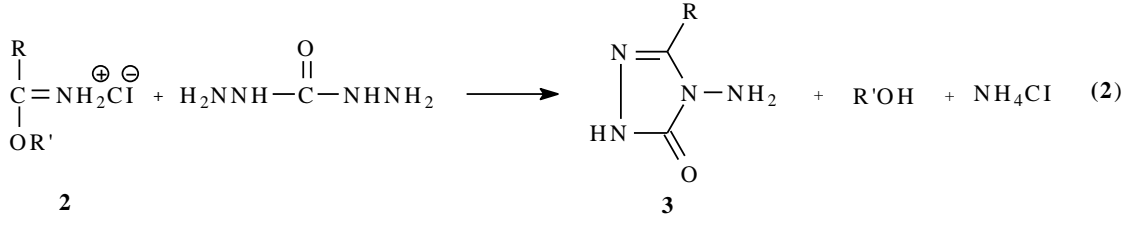
Deneysel çalışmaları desteklemek veya çalışma yapmadan önce moleküllerin analiz sonuçlarını tahmin edebilmek için kuantum kimyasal hesaplamaları, moleküler modelleme gibi bilgisayar programları kullanılarak yapılmaktadır. Bu tür hesaplamaların temelini kuantum mekaniği oluşturur. Bu programlar moleküllerin moleküler yapısı, uzaydaki en kararlı durumu olan optimize edilmiş geometrisi, toplam enerji, dipol moment, spektroskopik parametreler (IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR, UV ve IR titreşim frekansları) gibi özelliklerinin hesaplanacağı verimli programların oluşturulmasını sağlamaktır. Nitekim, 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin spektroskopik (IR, NMR ve UV-vis) ve elektronik özellikleri density functional theory (B3LYP) yöntemleri kullanılarak araştırılmıştır [5-8].

1.1. 3-Alkil(Aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların Sentezi ve İncelenen Bazı Reaksiyonları

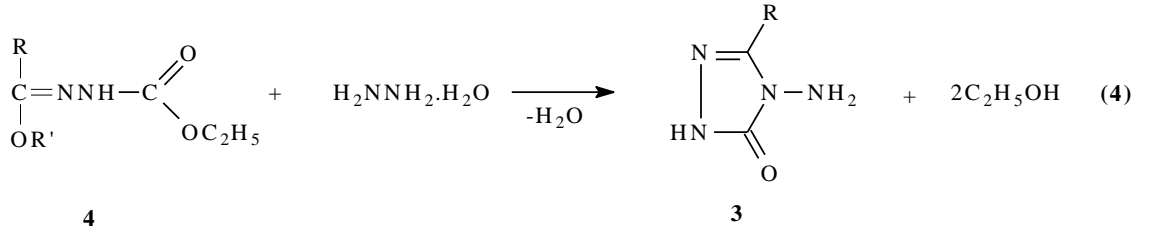
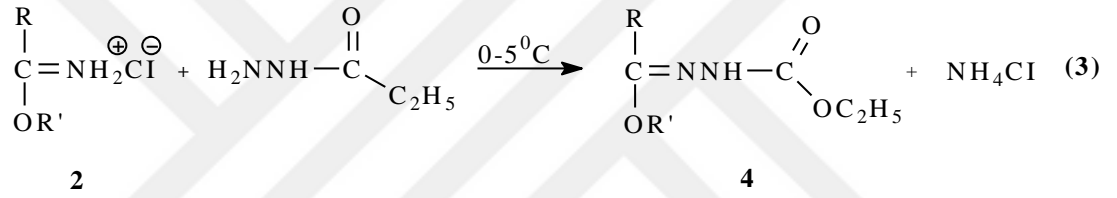
Literatürde 1,2,4-Triazol türevlerinin sentezlenmesi ile ilgili birçok yöntem vardır. 4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (1) bileşikler 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin en basit üyesidir ve ilk önce etil ortoformatın karbohidrazid ile muamelesinden elde edilmiştir (Denklem 1) [9].



Tezde 3 tipi bileşikler olan 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların sentezlenmesi için literatürde kayıtlı birçok yöntem geliştirilmiştir. Bu çalışmalardan en yaygın olarak kullanılan çalışmalar arasında bulunun nitrillerden oluşturulan iminoester hidroklorürler ile (2) karbohidrazidin reaksiyonu sonucu muamelesi rapor edilmiştir (Denklem 2) [10].



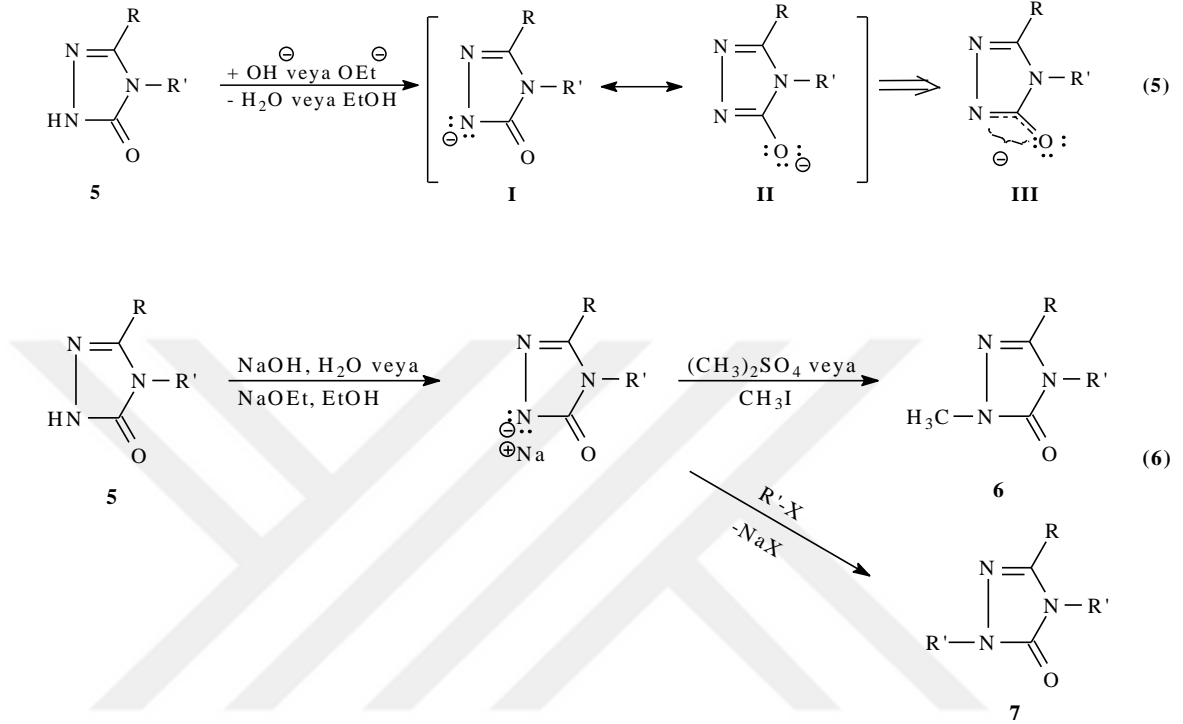
3 Tipi moleküllerin eldesi için en uygun yöntemlerden biri olan ve tez çalışmasında da uygulanan metotta ise 2 tipi alkil imidat hidroklorürler ile soğukta mutlak etanolde etil karbazatın reaksiyonundan oluşturulan [11-17] ester etoksikarbonilhidrazon bileşiklerinin (4) hidrazin hidrat (kaynar sulu ortamda) ile reaksiyonundan oluşturulmuştur (Denklem 3 ve Denklem 4) [13-19].



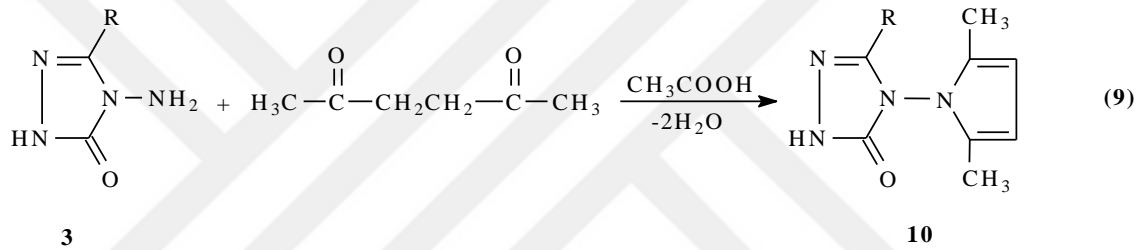
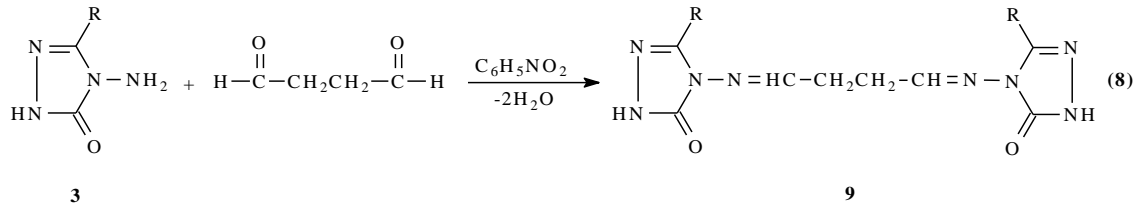
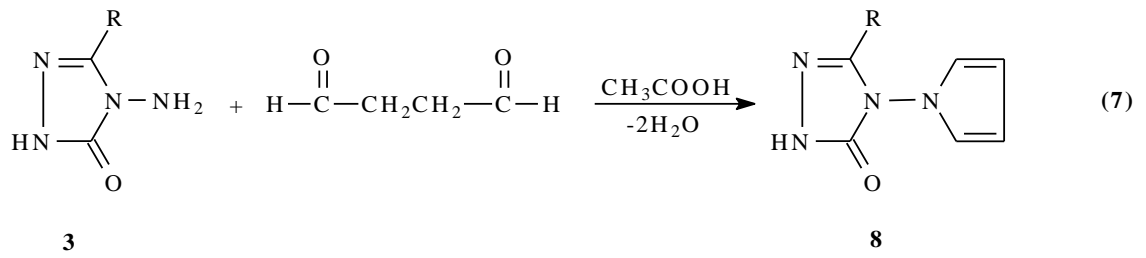
	R
2a	CH ₃
2b	CH ₂ CH ₃
2c	CH ₂ CH ₂ CH ₃
2d	CH ₂ C ₆ H ₅
2e	CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ (<i>p</i> -)
2f	CH ₂ C ₆ H ₄ OCH ₃ (<i>p</i> -)
2g	CH ₂ C ₆ H ₄ Cl (<i>p</i> -)
2h	CH ₂ C ₆ H ₄ Cl (<i>m</i> -)
2i	C ₆ H ₅

4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on yapısında bulunan N-H protonundan kaynaklanan zayıf asidik bileşikler olmasından dolayı (Denklem 5) 5 tipi moleküllerin protonun

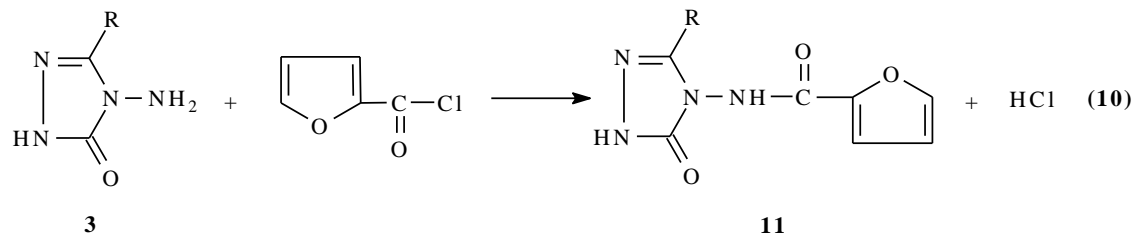
bulunduğu azottan alkilenebildiği ve bu bileşiklere karşılık gelen *N*-metil (6) veya *N*-alkil (7) türevlerinin sentezlendiği çok sayıda çalışma bildirilmiştir (Denklem 6) [13, 15, 16, 20-27].



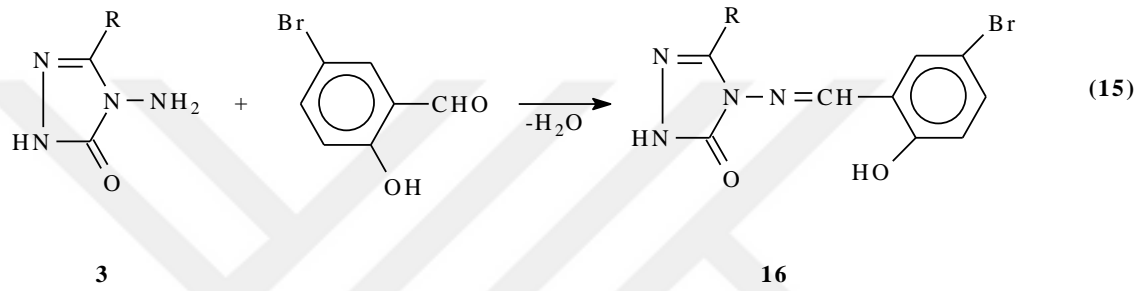
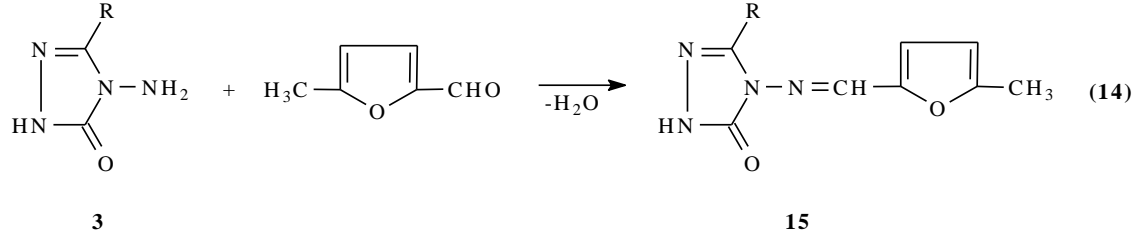
3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (3) moleküllerinin elde edilmişlerinin araştırıldığı iki farklı çalışmadan ilkinde suksindialdehid türevi olan 2,5-dimetoksitetrahidrofuran molekülünün uygun reaksiyon şartlarında asetik asit varlığında elde edilen *N,N'*-bağlı biheterosiklik moleküller olarak belirtilen 3-alkil(aril)-4-(pirrol-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (8) ve nitrobenzen kullanarak nötr ortam kuşullarında *N,N'*-bis-(3-alkil-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-1,4-butandiimin (9) moleküllerini, İkincisinde de asetonil asetonle reaksiyon sonucu *N,N'*-bağlı biheterosiklik molekül olarak belirtilen 3-alkil(aril)-4-(2,5-dimetilpirrol-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (10) moleküllerinin sentezlendiği bildirilmiştir (Denklem 7-9) [13, 15, 16, 28, 29].



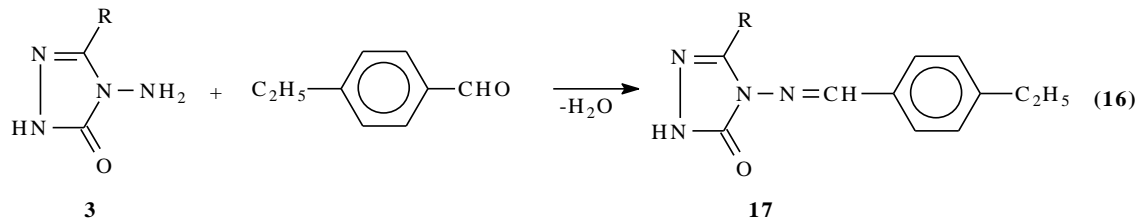
3 tipi bileşiklerin 2-furoil klorür ve tiyofen-2-karbonil klorür ile reaksiyonları da incelenmiş ve karşın olan 11 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-furoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 12 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-tiyenilkarbonilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerini elde edildiği bildirilmiştir (Denklem 10 ve Denklem 11) [25, 30].



^1H - ve ^{13}C -NMR incelemeleri deneysel ve teorik olarak yapılmıştır (Denklem 14 ve Denklem 15) [36, 37].

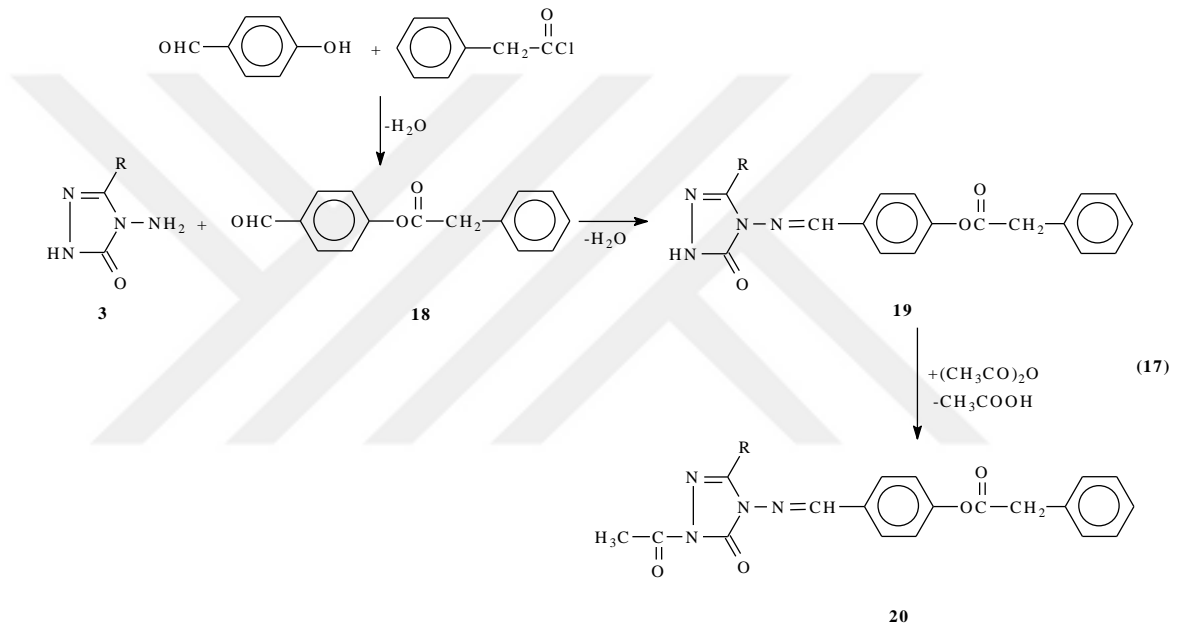


4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (3) bileşiklerinin 4-etilbenzaldehyd ile 3-alkil(aril)-4-(4-etilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (17) bileşiklerinin oluştuğu bir çalışma ile ortaya konmuştur (Denklem 16) [38, 39]. Bu çalışmada 17 tipi bileşiklerin asitlik ve antioksidan özellikleri incelenmiştir. Ayrıca, ^1H -NMR ve ^{13}C -NMR ile infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı set kullanılarak incelenmiştir [40, 41].



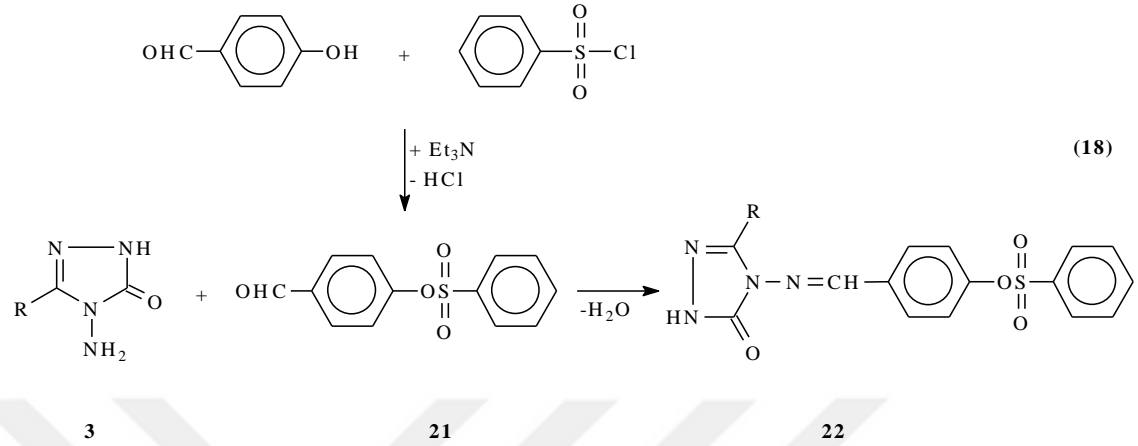
Literatürde kayıtlı başka bir araştırmada ise, trietilaminli ortamda 4-hidroksibenzenaldehydün fenilasetil klorür ile muamelesinden elde edilen 18 tipi benzenaldehyd türevinin 3 tipi bileşiklerle reaksiyonundan elde edilen 19 tipi bileşiklerin

asetik anhidrid ile muamelesinden 20 tipi *N*-asetil türevleri sentezlenmiş, yapıları aydınlatılmış ve *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenmiştir. 19 ve 20 tipi bileşiklerin *in-vitro* antioksidan özellikleri yanında 19 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları yapılarak asitlik sabitleri tayin edilmiştir (Denklem 17) [42-45]. Bunlardan başka, 19 tipi bileşiklerin ¹³C-NMR ve ¹H-NMR'le infrared spektral verileri teorik olarak ve deneysel, bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı set kullanılarak son yıllarda incelenmiştir [40, 46].

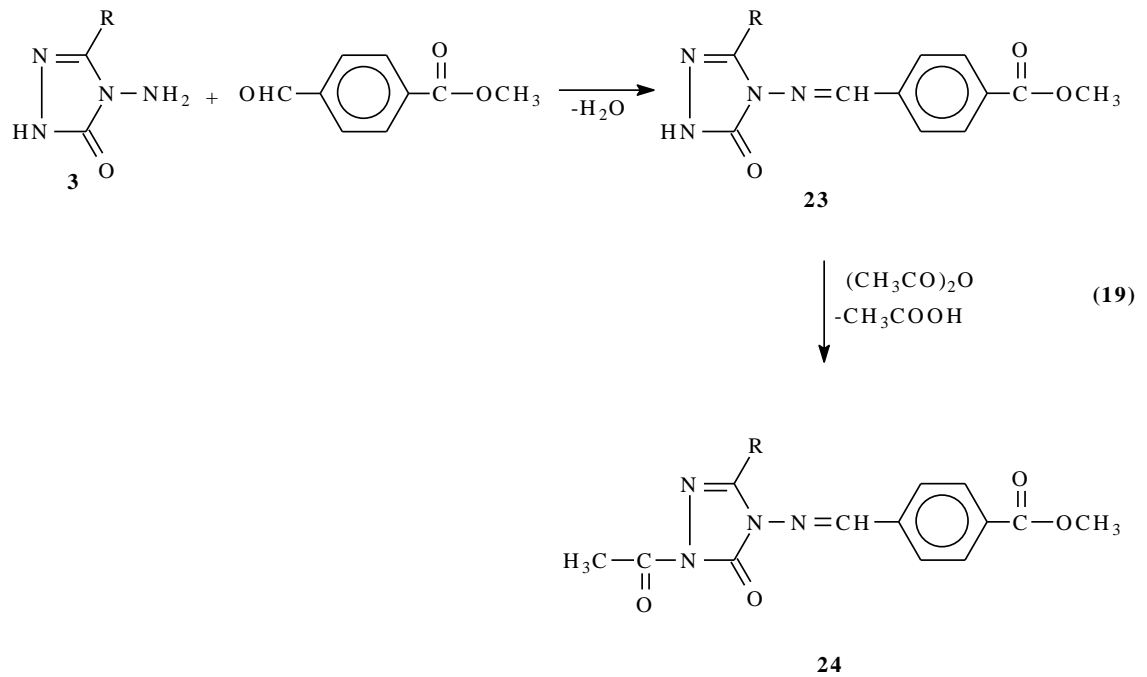


Benzensülfonil klorürün trietilamin varlığında 4-hidroksibenzaldehid ile buz banyosunda muamelesinden elde edilen 21 tipi benzaldehid türevinin 3 tipi bileşiklerle reaksiyonu da son yıllarda incelenmiş ve 22 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-benzensülfoniloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol 5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 18). Çalışmada ayrıca 22 tipi bileşiklerin farklı susuz çözücülerde potansiyometrik yöntemle p*K*_a değerlerinin tayini yanında 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özellikleri ve DNA ile eşleşme özellikleri incelenmiş olup, bu bileşiklerin yakın bir zamanda *in-vitro* biyolojik aktivite incelemeleri de yapılmıştır [47-50]. Bunlardan başka, 22 tipi bileşiklerin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR ile infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ açıları, bağ

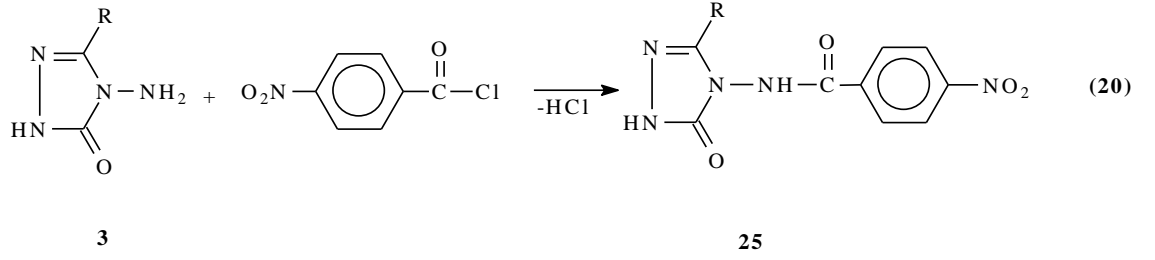
uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı set kullanılarak incelenmiştir [40].



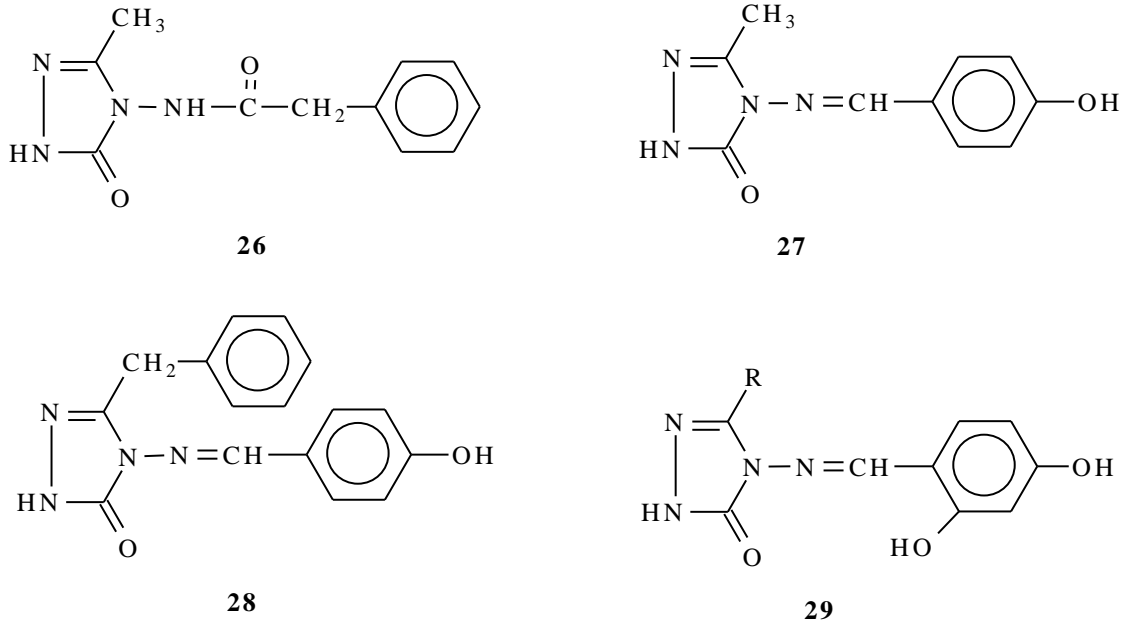
Son yıllarda yapılan bir çalışmada 3 tipi bileşiklerin metil 4-formil benzoat ile reaksiyonundan sentezlenen 23 tipi bileşikleri ve bunların asetik anhidrid ile muamelesinden *N*-asetil türevleri olan 24 tipi bileşikler sentezlenmiştir. Yapıları aydınlatılmış ve ¹H-NMR ¹³C-NMR spektral verileri yeni B3LYP metoduna göre hazırlanarak deneysel verilerle mukayesesi yapılmış ve moleküller 6-311G temel seri kullanılarak optimize edilmiştir (Denklem 19) [51-53].



4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin teorik olarak incelenen ¹H-NMR ve ¹³C-NMR verileri 25 tipi bileşikler üzerinde çalışılmış olup ayrıca bu bileşiklerin in-vitro antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında susuz ortamda p*K*_a değerleri de tayin edilmiştir (Denklem 20) [54].

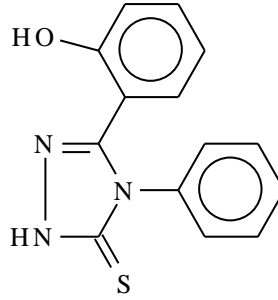


1,2,4-Triazol-5-on türevlerinin teorik hesaplanan IR frekans değerlerinin deneysel verilerle uyumu üzerinde az sayıda çalışma yapılmıştır. Bu çalışmalardan birinde 26 tipi bileşiklerin diğerlerinde ise 27, 28 ve 29 bileşiklerinin DFT ve HF yöntemleri ile titreşim frekansları hesaplanmış ve elde edilen veriler deneysel verilerle mukayese edilmiştir [55-57].



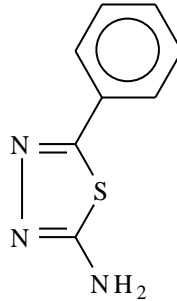
3-(2-Hidroksifenil)-4-fenil-1*H*-1,2,4-triazol (30) bileşiğinin farklı HF, BLYP ve B3LYP teori düzeylerini 6-31G (d) temel set ile belirlenmiştir, geometrik parametreler, titreşim

frekansları ve başlıktaki bileşiğin kimyasal kaymaları hesaplanmış ve deneysel olarak karşılaştırılmıştır. Ayrıca, teorik frekans sonuçlarının HF, BLYP ve B3LYP yöntemleri için deneysel sonuçlara mukayese edilmiştir [58].



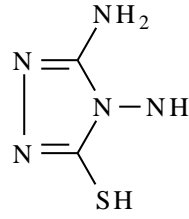
30

Atalay ve arkadaşları tarafından yapılan başka bir çalışmada, 2-amino-5-fenil-1,3,4-thiadiazol (31) molekülünün geometrik ve titreşim parametreleri 6-31G (d) temel seti ile B3LYP ve HF yöntemi kullanarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlardan B3LYP yönteminin sonuçları, titreşim frekanslarının değerlendirilmesinde deneysel olanlara HF'den daha iyi uyduğunu gözlemlenmiştir [59].



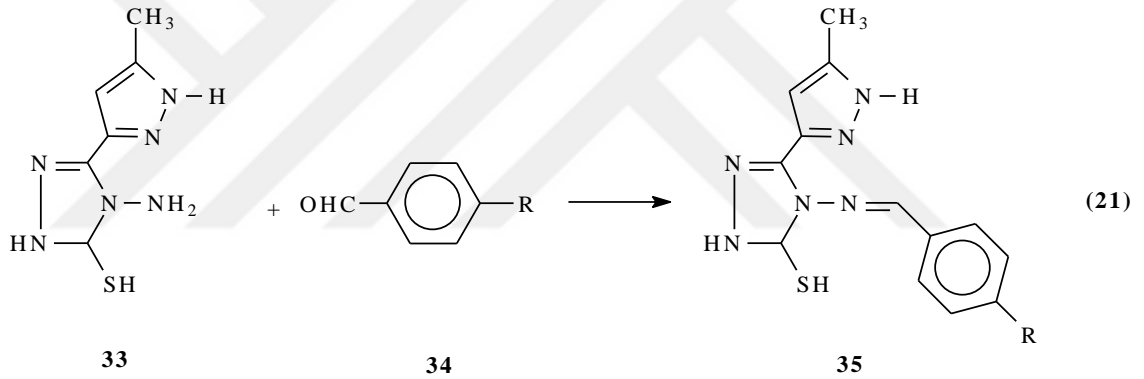
31

3-Amino-5-merkpto-1,2,4-triazolün (32) moleküler titreşimlerin FT-IR ve FT-Raman spektroskopileri ile incelenmiştir. Ayrıntılı bir titreşim spektral analizi gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, atomik yükler, HOMO-LUMO enerjileri ve çeşitli termodinamik özellikleri ab initio Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, (B3LYP) ile 6-311G (d,p) ve 6-311++G(d,p) temel setleri kullanılarak hesaplanmıştır. İlaveten, 3-Amino-5-merkpto-1,2,4-triazolün (32) bileşiğinin Doğal Bağ Orbital (NBO) çalışması yapılmıştır [60].

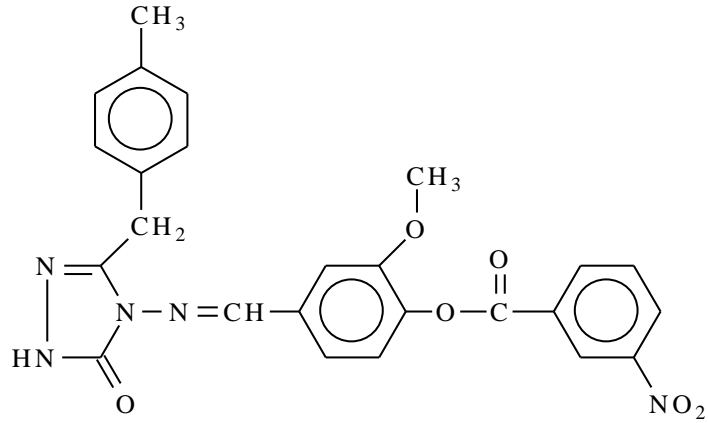


32

4-Amino-5-(5-metil-1H-pirazol-3-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tyol (33) ile 34 tipi aldehid türevlerinin reaksiyonundan 35 tipi bileşikler sentezlenmiştir. Bu 35 tipi bileşiklerin yapıları spektroskopik veriler kullanılarak aydınlatılmıştır. Sentezlenen bileşiklerin DFT hesaplamaları yardımıyla reaktif özellikleri ve moleküler dinamik simülasyonları incelenmiştir [61].

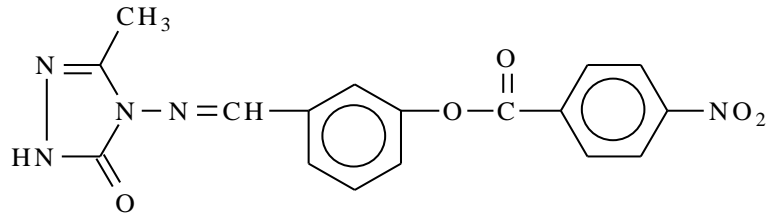


3-Benzil-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (36) molekülü B3LYP/631G(d,p) ve HF/631G(d,p) yöntemleri ve temel seti kullanılarak optimize edilmiştir. Bu optimize edilmiş yapıdan başlayarak ¹H-NMR ve ¹³C-NMR ve GIAO yöntemine göre, IR spektral veri değerleri Gaussian G09W program paketi yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Etanol çözülü ortamda Deneysel ve teorik olarak UV-vis değerleri hesaplanmış ve mukayese edilmiştir. İlâveten, her iki yöntemden elde edilen HOMO-LUMO enerjisi belirlenmiştir [62].



36

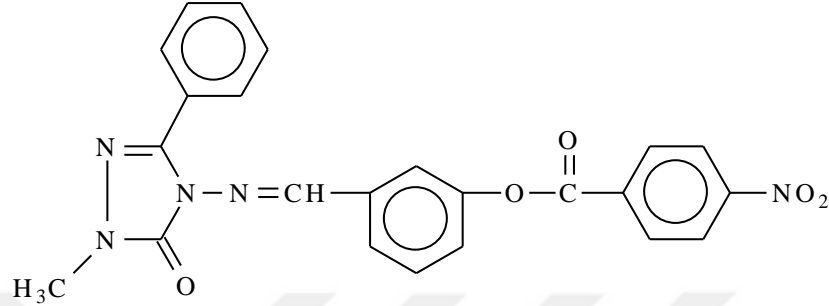
Bu çalışmada, 3-metil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (37) bileşiğinin teorik spektroskopik özellikleri incelenerek bazı deneysel verilerle mukayese edilmiştir. Molekül B3LYP, HF yöntemleri ve 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak optimize edilmiştir. Optimize yapıdan GIAO metoduna göre ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri Gaussian G09W bilgisayar programı vasıtasıyla gaz fazında hesaplanmıştır. Çalışmanın teorik kısmında ayrıca, bileşiğin IR frekans değerleri hesaplanmış ve bulunan değerler belirli uyum faktörleri ile çarpılmıştır. UV-vis değerleri de etanollü ortamda teorik olarak hesaplanmıştır. İlâveten, molekülün bağ uzunlukları, bağ açıları, Mulliken atomik yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri, toplam enerjileri, iyonlaşma potansiyeli, elektron ilgisi, molekül yumuşaklık, molekül sertlik ve elektronegatifliği aynı metodlar ve aynı set kullanılarak hesaplanmıştır [63].



37

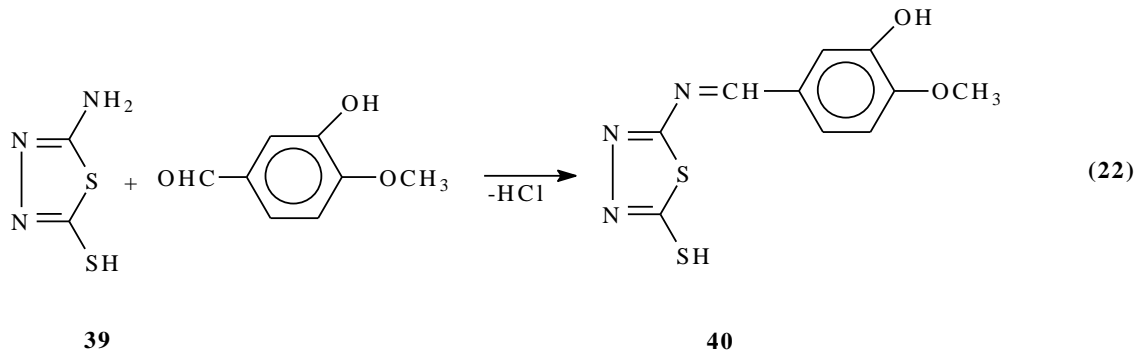
1-Metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (38) bileşiğinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri GIAO metoduyla ve

IR titreşim frekansları Gaussian G09W paket programı kullanılarak hesaplanmıştır. İlâveten, 1-metil-3-fenil-4-[3-(*p*-nitrobenzoksi) benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin bağ açıları, bağ uzunlukları, Mulliken atomik yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri, toplam enerjileri incelenmiştir [64].



38

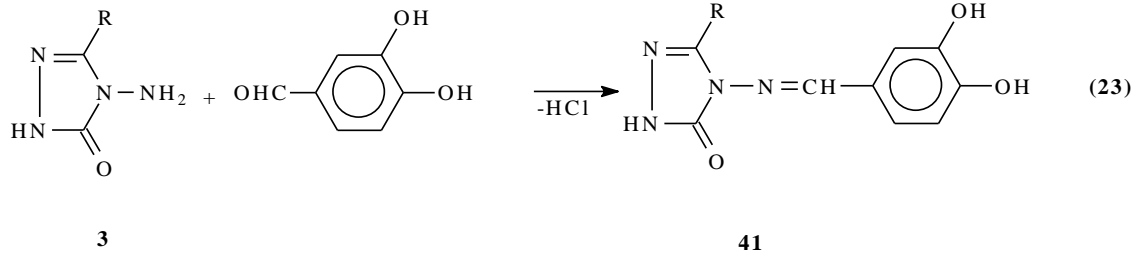
Yapılan farklı bir çalışmada ise, 2-(3-hidroksi-4-metoksibenzilidenamino)-5-merkaptotriazol (40) molekülünün geometrik parametreleri (bağ uzunlukları ve bağ açıları), titreşim frekansları, NMR spektral değerleri ve doğrusal olmayan optik (NLO) özellikleri üzerine teorik ve deneysel bir çalışma gerçekleştirilmiştir. Ek olarak, sentezlenmiş yeni bileşiğin HOMO ve LUMO enerjileri, moleküler elektrostatik potansiyeli, elektron ilgisi, iyonlaşma potansiyeli, moleküler yumuşaklık, moleküler sertlik, elektronegatiflik, dipol momentleri ve toplam enerjileri gibi elektronik özellikleri aynı set ve yöntemler kullanılarak hesaplanmıştır [65].



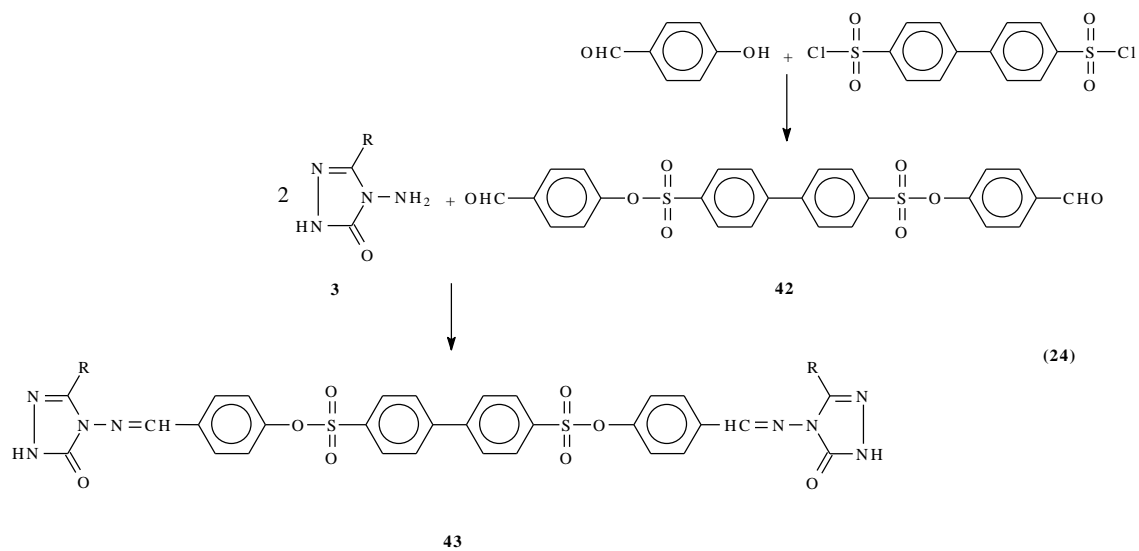
39

40

Son yıllarda 3 tipi bileşiklerle ilgili yapılan çalışmada 3 bileşiklerinin 3,4-dihidroksibenzaldehid ile muamelesinden Schiff bazları olan 41 tipi 3-alkil(aril)-4-(3,4-dihidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve bu bileşiklerin susuz ortamda potansiyometrik olarak titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon yöntemi ile pK_a değerleri bulunmuş ve antioksidan özellikleri incelenmiştir [21, 66-68]. Ayrıca Antioksidan özellikleri deneysel olarak belirlenmiş bazı 4-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin (41) Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi yöntemiyle antioksidan etkinliklerinin karşılaştırılması yapılmıştır. Antioksidan aktivitesi üzerindeki solvasyon etkileri, farklı dielektrik sabitleri ($\epsilon = 2.25$, C_6H_6 ; $\epsilon = 78.39$, H_2O) ile iletken benzeri polarize süreklilik modeli kullanılarak dikkate alınmıştır. Üç antioksidan reaksiyon mekanizması, hidrojen atom transferi (HAT), tek elektron transfer-proton transferi (SET-PT) ve ardışık proton kaybı elektron transferi (SPLET) açıklanmıştır. Bu mekanizmalardaki adımlarla ilgili reaksiyon entalpileri gaz fazında ve çözücülerde hesaplanmış, hesaplanan sonuçların deneysel değerlerle uyumluluğu tartışılmıştır. Hesaplamalar, DFT yöntemiyle nötral moleküller ve anyonlar için rB3LYP/ 6-311++G (2d,2p), radikaller ve kanyonlar için uB3LYP/ 6-311++G (2d,2p) temel setleri kullanılarak yapılmıştır [69].



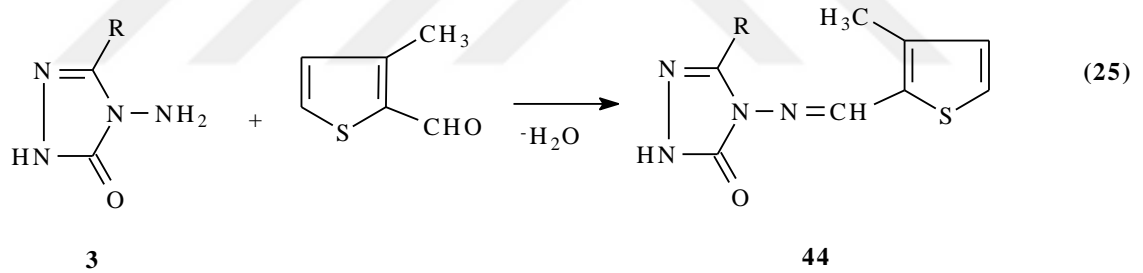
Farklı bir çalışmada ise, {bis-4-[(3-alkil-5-okso-1*H*-1,2,4-triazol-4 (5*H*)-il)-iminometil]-fenil}[1,1'-bifenil]-4,4'-disülfonat (43) bileşikleri sentezlenmiş ve yapıları spektral yöntemlerle belirlenmiştir. Bu bileşiklerinin korozyon önleyici aktiviteleri, kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak araştırılmıştır [70].



2. MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Deneysel Veriler

Çalışmada ilk olarak 3-metiltiyofen-2-karboksialdehid ile 3 tipi bileşiklerin ayrı ayrı muamelesinden 6 farklı 44 tipi 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri olan 3-benzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (45), 3-*p*-metilbenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (46), 3-*p*-Metoksibenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (47), 3-*p*-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (48), 3-*m*-Kolorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (49) ve 3-Fenil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (50) molekülleri elde edilmiştir (Denklem 25) [71].



Literatürde kayıtlı 6 farklı 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (44) [71] moleküllerinin geometrik (Bağ uzunluğu, Bağ açısı), spektroskopik (IR, NMR ve UV), elektronik (HOMO-LUMO enerji farkları, iyonlaşma potansiyeli, elektron ilgisi, moleküler sertlik, moleküler yumuşaklık, elektronegatiflik ve Mulliken atomik yük değerleri) ve lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/HF/6-311G(d,p) yöntemleri ve polarize setleri kullanılarak incelenmiştir.

2.2. Hesaplama Metodları

Literatürde kayıtlı gaz fazındaki ve temel durumdaki moleküllerin üç boyutta yaklaşık geometrisi GaussView5.0 moleküler görüntüleme yazılımında çizilmiştir [72]. moleküllerin başlangıç geometrileri GaussView 5.0 paket yazılımında elde edilerek Gaussian09W yazılımına giriş verisi olarak aktarılmıştır [73, 74]. Gaussian09W paket programı yardımıyla molekülleri minimum enerjili en kararlı yapısını bulabilmek için optimize işlemi yapılabilir. Optimize yapıdan incelenmek istenilen moleküllerin geometrik, spektroskopik, elektronik ve termodinamik özellikler gibi birçok parametre analiz edilebilir. Yapılan teorik hesaplama proseslerinde bileşiklerin veya atomların temel ya da uyarılmış durumları kullanılabilir [73, 76, 77].

Ab-initio yöntemi, Schrödinger dalga denkleminin deneysel değerler olmadan analizine dayanır [78, 79]. Schrödinger dalga denkleminin çözümü tek elektronlu hidrojen atomuyla mümkün olduğu görülmektedir. Buna karşın, çok elektronlu yapılarda analizi çok zor olduğu sebebiyle HF-SCF (Hartree-Fock öz uyumlu alan teorisi) ve DFT (yoğunluk fonksiyonu teorisi) gibi matematiksel yaklaşımlar kullanılmaktadır. Yapıların elektronik özelliklerinin daha iyi belirlenmesi için, elektron yoğunluğunu hesaba katan ve bu elektron yoğunluğu üzerinde istenen verileri üreten DFT yöntemi kullanılmıştır. Ek olarak, Gaussian 09W yazılımındaki B3LYP hibrit fonksiyonu, workstation kapasitesine uygun ve temel set olarak polarize 6-311G(d,p) temel seti uygulanmıştır [75]. Yapılan tüm hesaplamalar Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü'nde bulunan bilgisayarlarda yapılmıştır.

Bu tez çalışmasında, sentezlenmiş moleküllerin minimum enerjili ve en kararlı yapısı bulabilmek için, DFT/B3LYP ve DFT/ B3PW91 yöntemleri kullanılarak optimize edilmiştir. Bulunan minimum enerjili optimize edilmiş geometrik yapıdan ilgili bileşiklerin bağ uzunlukları ile bağ açıları belirlenmiştir. Moleküllerin optimize yapısından titreşim frekansları hesaplanmıştır. Bilgisayar destekli Gaussian 09W paket programı kullanılarak hesaplanan IR frekanslarının titreşim türlerinin belirlenmesinde Veda4f programından faydalanılmıştır. Teorik hesaplanan titreşim frekansı değerleri uygun skala faktörleriyle çarpılmış ve deneysel değerlerle mukayese edilmiştir.

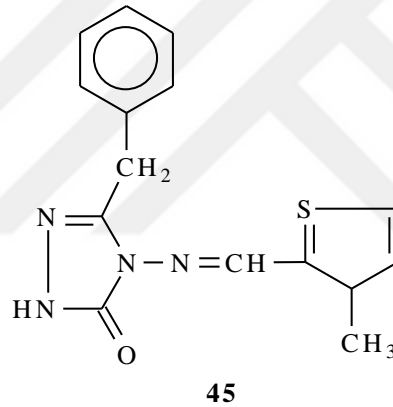
DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemlerine göre teorik IR spektrumları çizilmiştir. ^1H -NMR ve ^{13}C -NMR kimyasal kayma değerleri optimize yapı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmış ve teorik olarak elde edilen kimyasal kayma değerleri deneysel değerler ile karşılaştırılmış ve uyumlu oldukları gözlemlenmiştir. İlâveten, 6 adet 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların (1) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri, enerji farkları ve HOMO-LUMO enerjilerinden elde edilen elektronik parametreler (**I**; İyonlaşma potansiyeli, **A**; elektron ilgisi, ΔE ; Enerji Boşluğu, χ ; elektronegatiflik, **S**; moleküler yumuşaklık, ω ; Elektrofilik İndeks, **IP**; Nükleofilik İndeks, **Pi**, Kimyasal Potansiyel, Toplam Enerji) ve Mulliken atomik yük değerleri belirlenmiştir.

3. BULGULAR

3.1. Deneysel Veriler

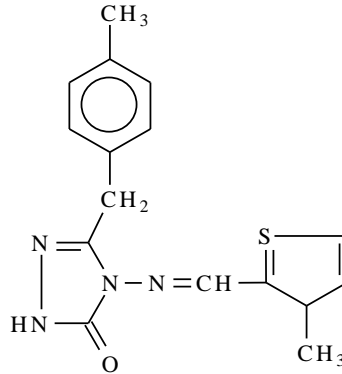
Çalışmada ilk olarak 3-metiltiyofen-2-karboksialdehid ile 3 tipi bileşiklerin ayrı ayrı muamelesinden 6 farklı 44 tipi 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir [71]. Sentezlenen bu bileşiklerin yapıları IR, NMR ve UV spektroskopik metodlar yardımıyla aydınlatılmıştır [71].

3.1.1. 3-Benzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (45) [71]



Verim 97.3%, Erime Noktası 196 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3169 (NH), 1706 (C=O), 1590 (C=N), 770 ve 699 (monosubstituted benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.29 (s, 3H, CH_3), 3.94 (s, 2H, CH_2), 7.00 (d, 1H, arH, $J=5.12$ Hz), 7.20-7.29 (m, 5H, arH), 7.68 (d, 1H, arH, $J=5.12$ Hz), 9.81 (s, 1H, N=CH), 11.96 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.43 (CH_3), 31.83 (CH_2), ar-C: [127.43, 129.11 (2C), 129.57 (2C), 130.75, 131.93, 132.41, 136.33, 143.64], 146.55 (triazol-C3), 148.04 (N=CH), 152.06 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 316 (19329), 280 (12385), 220 (10994) nm.

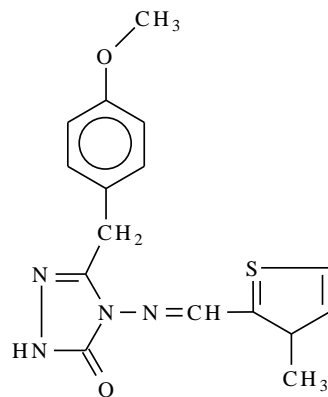
3.1.2. 3-p-Metilbenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (46) [71]



46

Verim 96.2%, Erime Noktası. 189 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3167 (NH), 1707 (C=O), 1592 (C=N), 831 (1,4-disubstitute benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.25 (s, 3H, CH_3), 2.32 (s, 3H, CH_3), 3.91 (s, 2H, CH_2), 7.03 (d, 1H, arH), 7.11 (d, 2H, arH), 7.42 (d, 2H, arH), 7.72 (d, 1H, arH), 9.83 (s, 1H, N=CH), 11.96 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.22 (CH_3), 21.07 (CH_3), 31.23 (CH_2), ar-C: [129.23 (2C), 129.45 (2C), 130.53, 131.71, 132.21, 133.01, 136.27, 143.40], 146.50 (triazol-C3), 147.80 (N=CH), 151.85 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 314 (17627), 272 (12887), 216 (14785) nm.

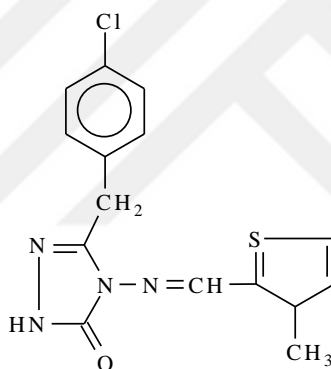
3.1.3. 3-p-Metoksibenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (47) [71]



46

Verim 94.0%; Erime Noktası 207 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3166 (NH), 1707 (C=O), 1612, 1593 (C=N), 833 (1,4-disubstitute benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.29 (s, 3H, CH_3), 3.77 (s, 3H, OCH_3), 3.96 (s, 2H, CH_2), 6.92 (d, 2H, arH), 7.09 (d, 1H, arH), 7.29 (d, 2H, arH), 7.78 (d, 1H, arH), 9.90 (s, 1H, N=CH), 12.01 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.22 (CH_3), 30.76 (CH_2), 55.48 (OCH_3), ar-C: [114.30 (2C), 127.90, 130.42 (2C), 130.50, 131.72, 132.24, 143.40, 158.56], 146.35 (triazol-C3), 147.78 (N=CH), 151.86 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 314 (21222), 284 (18687), 272 (16259), 226 (19262), 212 (16858) nm.

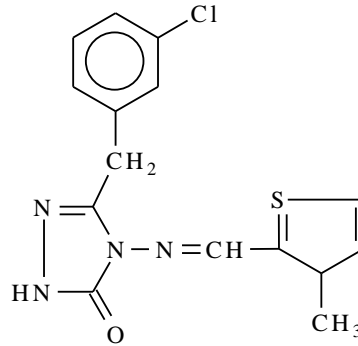
3.1.4. 3-*p*-Klorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (48) [71]



48

Verim 99.3%, Erime Noktası. 244 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3165 (NH), 1705 (C=O), 1589 (C=N), 833 (1,4-disubstitute benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.29 (s, 3H, CH_3), 3.95 (s, 2H, CH_2), 7.00 (d, 1H, arH, $J=4.67$ Hz), 7.29-7.35 (m, 4H, arH), 7.68 (d, 1H, arH, $J=4.76$ Hz), 9.81 (s, 1H, N=CH), 11.96 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.43 (CH_3), 31.20 (CH_2), ar-C: [129.03 (2C), 130.78, 131.48 (2C), 131.93, 132.11, 132.35, 135.30, 143.70], 146.19 (triazol-C3), 148.11 (N=CH), 152.05 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 316 (19057), 282 (12505), 224 (15823) nm.

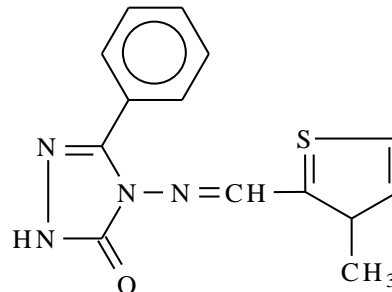
3.1.5. 3-*m*-Klorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (49) [71]



49

Verim 74.3%, Erime Noktası. 165 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3184 (NH), 1703 (C=O), 1584 (C=N), 787 ve 689 (1,3-disubstitute benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.32 (s, 3H, CH_3), 4.01 (s, 2H, CH_2), 7.03 (d, 1H, arH), 7.26-7.37 (m, 3H, arH), 7.41 (s, 1H, arH), 7.73 (d, 1H, arH), 9.48 (s, 1H, N=CH), 12.01 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.22 (CH_3), 31.26 (CH_2), ar-C: [127.27, 128.12, 129.43, 130.68, 130.71, 131.73, 132.11, 133.41, 138.50, 143.53], 145.81 (triazol-C3), 147.96 (N=CH), 151.82 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 314 (15246), 274 (11610), 214 (16190) nm.

3.1.6. 3-Fenil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (50) [71]



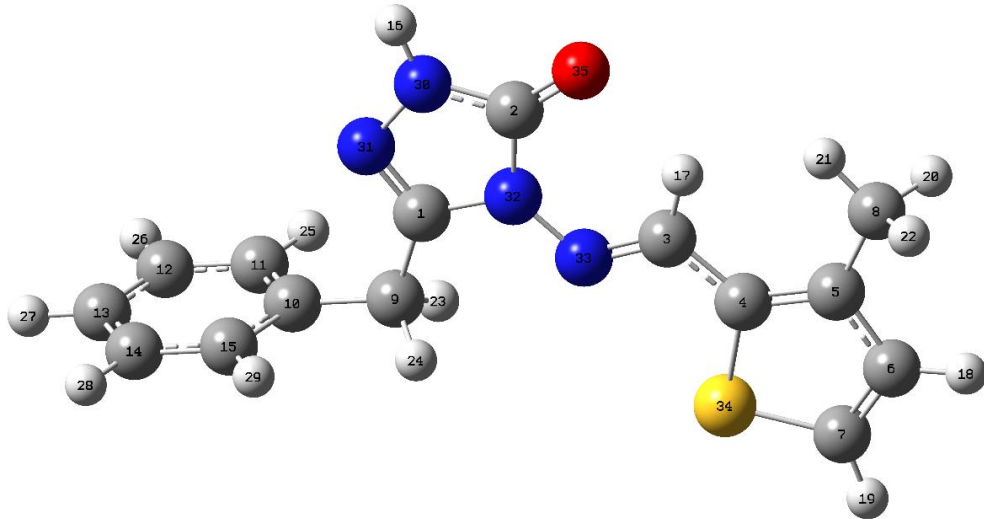
50

Verim 96.8%, Erime Noktası. 202 °C; IR (KBr) (ν , cm^{-1}): 3166 (NH), 1700 (C=O), 1578 (C=N), 769 ve 691 (monosubstitute benzenoid halka); $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 2.35 (s, 3H, CH_3), 7.02 (d, 1H, arH, $J=4.76$ Hz), 7.48-7.49 (m, 3H, arH), 7.69 (d, 1H, arH, $J=4.76$ Hz), 7.86-7.89 (m, 2H, arH), 9.76 (s, 1H, N=CH), 12.35 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6 , δ ppm): 14.48 (CH_3), ar-C: [127.32, 128.43 (2C), 129.13 (2C), 130.76, 131.07, 132.02, 132.24, 144.12], 144.79 (triazol-C3), 151.11 (N=CH), 152.21 (triazol-C5); UV λ_{max} (ϵ): 318 (18224), 276 (20016), 226 (15201) nm.

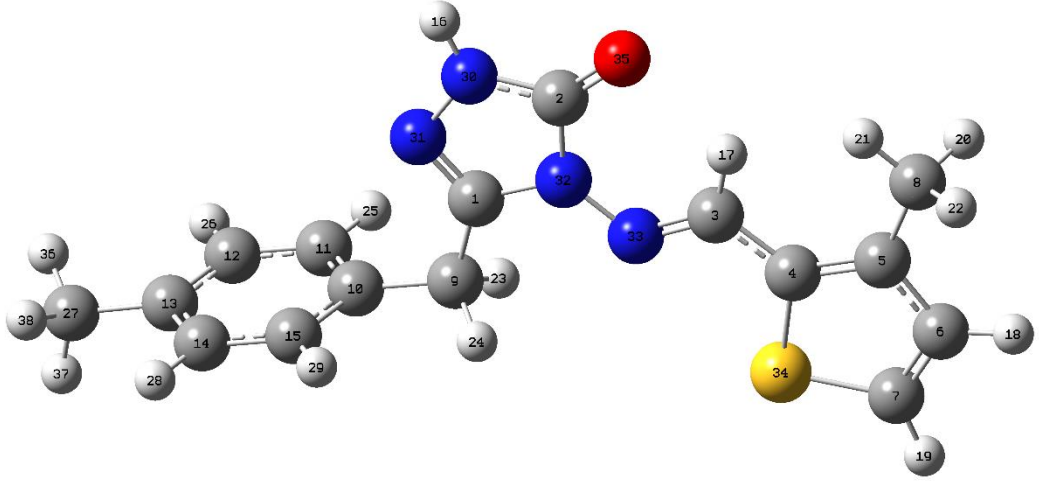
3.2. Teorik Veriler

3.2.1. Geometrik Optimizasyon

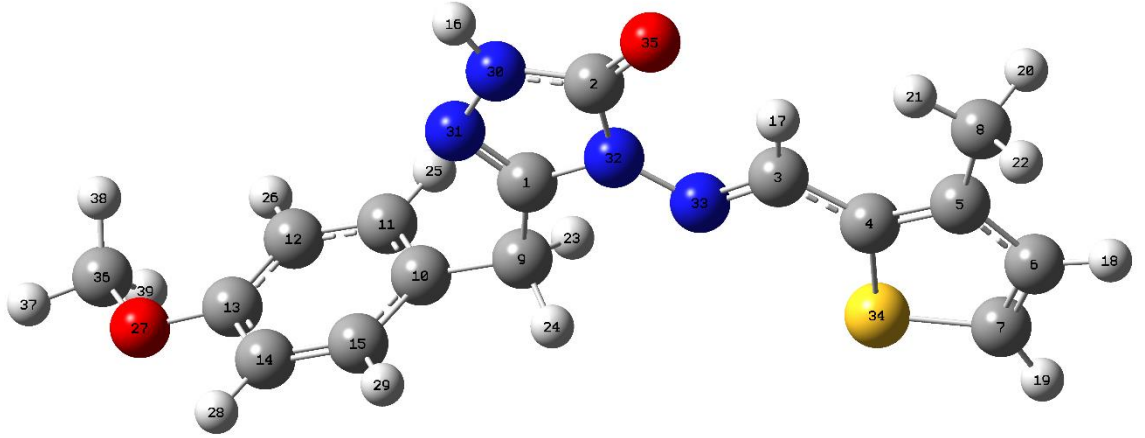
Sentezlenmiş bileşiklerin üç boyutlu yaklaşık geometrisi GaussView 5.0 paket programında [72] çizilmiştir. Bu geometrik yapılardan faydalanarak Gaussian 09W programı kullanılarak Yoğunluk Fonksiyonu Teorisinin (DFT) B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle polarize fonksiyonlar üzerinden 6-311G(d,p) temel seti ile en optimize edilmiş bileşiklerin herbir atomun uzaydaki en kararlı yerleşimleri, minimum enerjili uzay yapısı belirlenmiştir (Şekil 2.1-6) [76].



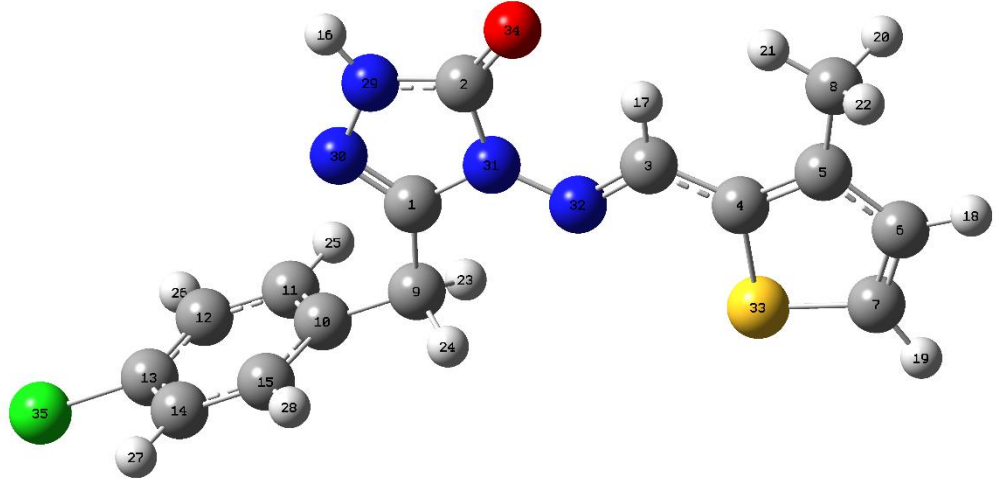
Şekil 3.1. 3-Benzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (45) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı



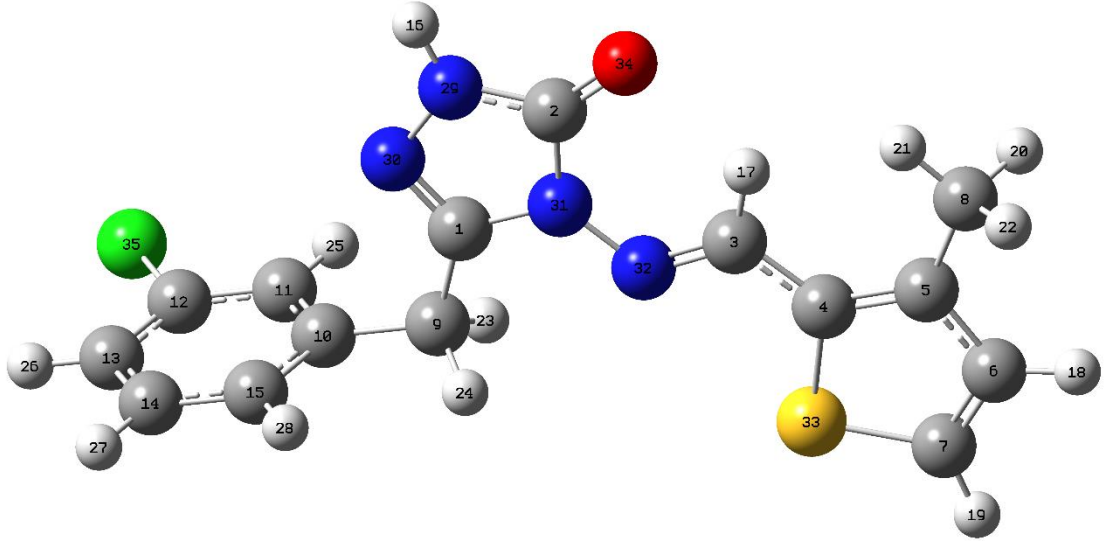
Şekil 3.2. 3-*p*-Metilbenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (46) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı



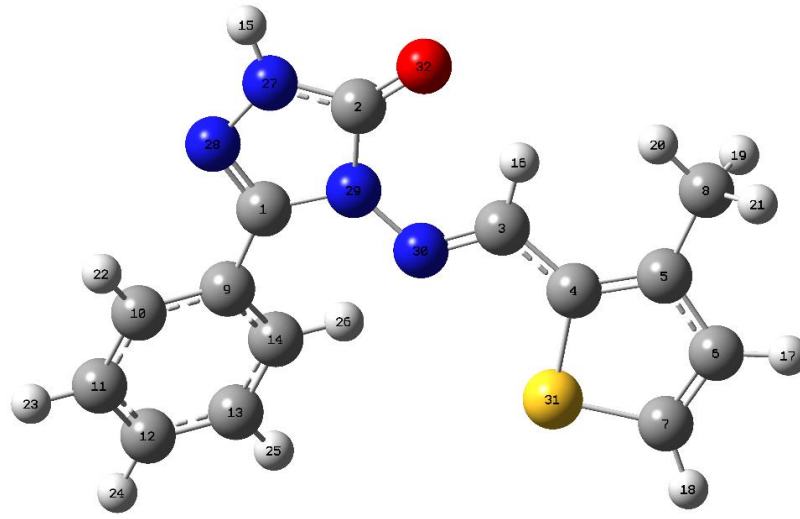
Şekil 3.3. 3-*p*-Metoksibenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (47) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı



Şekil 3.4. 3-p-Klorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (48) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı



Şekil 3.5. 3-m-Klorobenzil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (49) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı



Şekil 3.6. 3-Fenil-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (50) molekülünün DFT/6-311G (d,p) yöntemiyle optimize edilmiş yapısı

Optimize edilen bileşiklerin yapıları Şekil 2.1-6’da verilmiştir. Bu bileşiklerin bağ uzunlukları (Tablo 2.1-6), ve bağ açıları (Tablo 2.7-12) Yoğunluk Fonksiyonu Teorisinin (DFT) B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak teorik olarak hesaplanmıştır.

Tablo 3.1. 45 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91
1 C1-C9	1.498	1.492	20 C8-H22	1.094	1.095
2 C1-N31	1.295	1.294	21 C9-H10	1.513	1.508
3 C1-N32	1.390	1.385	22 C9-H23	1.095	1.095
4 C2-N30	1.368	1.365	23 C9-H24	1.095	1.095
5 C2-N32	1.418	1.412	24 C10-C11	1.397	1.395
6 C2-O35	1.218	1.216	25 C10C-15	1.397	1.395
7 C3-C4	1.442	1.439	26 C11-C12	1.393	1.390
8 C3-H17	1.085	1.087	27 C11-H25	1.085	1.086
9 C3-N33	1.289	1.288	28 C12-C13	1.393	1.391
10 C4-C5	1.384	1.384	29 C12-H26	1.084	1.085
11 C4-S34	1.754	1.742	30 C13-C14	1.393	1.391
12 C5-C6	1.427	1.423	31 C13-H27	1.084	1.085
13 C5-C8	1.504	1.499	32 C14-C15	1.393	1.390
14 C6-C7	1.364	1.364	33 C14-H28	1.084	1.085
15 C6-H18	1.083	1.083	34 C15-H29	1.085	1.086
16 C7-H19	1.080	1.081	35 C16-H30	1.006	1.005
17 C7-S34	1.728	1.718	36 N30-N31	1.380	1.370
18 C8-H20	1.094	1.095	37 N32-N33	1.371	1.362
19 C8-H21	1.089	1.090			

Tablo 3.2. 46 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91
1	C1-C9	1.498	1.492	21	C9-C10	1.512	1.507
2	C1-N31	1.295	1.294	22	C9-H23	1.095	1.095
3	C1-N32	1.390	1.385	23	C9-H24	1.095	1.095
4	C2-N30	1.368	1.365	24	C10-C11	1.396	1.394
5	C2-N32	1.418	1.412	25	C10-C15	1.396	1.394
6	C2-O35	1.218	1.216	26	C11-C12	1.392	1.389
7	C3-C4	1.442	1.439	27	C11-H25	1.085	1.086
8	C3-H17	1.085	1.087	28	C12-C13	1.398	1.396
9	C3-H33	1.289	1.288	29	C12-H26	1.086	1.086
10	C4-H5	1.384	1.384	30	C13-H14	1.398	1.396
11	C4-S34	1.754	1.742	31	C13-C27	1.510	1.504
12	C5-C6	1.427	1.423	32	C14-C15	1.392	1.390
13	C5-C8	1.504	1.499	33	C14-H28	1.086	1.086
14	C6-C7	1.364	1.364	34	C15-H29	1.085	1.086
15	C6-H18	1.083	1.083	35	C16-N30	1.006	1.005
16	C7-H19	1.080	1.081	36	C27-H36	1.093	1.093
17	C7-S34	1.728	1.718	37	C27-H37	1.096	1.096
18	C8-H20	1.095	1.095	38	C27-H38	1.093	1.093
19	C8-H21	1.089	1.090	39	N30-N31	1.380	1.370
20	C8-H22	1.094	1.094	40	N32-N33	1.371	1.362

Tablo 3.3. 47 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91
1	C1-C9	1.499	1.493	22	C9-H23	1.095	1.096
2	C1-N31	1.296	1.294	23	C9-H24	1.095	1.095
3	C1-N32	1.390	1.385	24	C10-C11	1.392	1.390
4	C2-N30	1.368	1.365	25	C10-C15	1.400	1.398
5	C2-N32	1.418	1.412	26	C11-C12	1.396	1.393
6	C2-O35	1.218	1.216	27	C11-H25	1.085	1.086
7	C3-C4	1.443	1.439	28	C12-C13	1.396	1.394
8	C3-H17	1.085	1.087	29	C12-H26	1.082	1.083
9	C3-N33	1.289	1.288	30	C13-H14	1.400	1.398
10	C4-N5	1.384	1.383	31	C13-O27	1.364	1.359
11	C4-S34	1.754	1.742	32	C14-C15	1.386	1.383
12	C5-C6	1.427	1.423	33	C14-H28	1.083	1.084
13	C5-C8	1.505	1.499	34	C15-H29	1.085	1.086
14	C6-C7	1.364	1.364	35	H16-N30	1.006	1.005
15	C6-H18	1.083	1.084	36	O27-C36	1.420	1.413
16	C7-H19	1.080	1.081	37	N30-N31	1.380	1.371
17	C7-S34	1.728	1.718	38	N32-N33	1.371	1.362
18	C8-H20	1.095	1.095	39	C36-H37	1.089	1.090
19	C8-H21	1.090	1.090	40	C36-H38	1.096	1.097
20	C8-H22	1.094	1.094	41	C36-H39	1.096	1.097
21	C9-C10	1.512	1.506				

Tablo 3.4. 48 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91
1 C1-C9	1.498	1.492	20 C8-H22	1.094	1.095
2 C1-N30	1.296	1.294	21 C9-C10	1.512	1.507
3 C1-N31	1.388	1.384	22 C9-H23	1.094	1.095
4 C2-N29	1.369	1.365	23 C9-H24	1.094	1.095
5 C2-N31	1.418	1.413	24 C10-C11	1.396	1.394
6 C2-O34	1.217	1.216	25 C10-C15	1.396	1.394
7 C3-C4	1.442	1.439	26 C11-C12	1.392	1.389
8 C3-H17	1.085	1.087	27 C11-H25	1.085	1.086
9 C3-N32	1.289	1.288	28 C12-C13	1.390	1.389
10 C4-S5	1.384	1.384	29 C12-H26	1.082	1.083
11 C4-N33	1.754	1.742	30 C13-C14	1.390	1.389
12 C5-C6	1.427	1.423	31 C13-H35	1.761	1.747
13 C5-C8	1.504	1.499	32 C14-C15	1.392	1.389
14 C6-C7	1.364	1.364	33 C14-H27	1.082	1.083
15 C6-H18	1.083	1.083	34 C15-H28	1.085	1.086
16 C7-H19	1.080	1.081	35 H16-N29	1.006	1.005
17 C7-S33	1.728	1.718	36 N29-N30	1.379	1.370
18 C8-H20	1.094	1.095	37 N31-N32	1.371	1.363
19 C8-H21	1.089	1.090			

Tablo 3.5. 49 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları	B3LYP	B3PW91
1 C1-C9	1.498	1.492	20 C8-H22	1.094	1.095
2 C1-N30	1.295	1.294	21 C9-C10	1.513	1.508
3 C1-N31	1.388	1.383	22 C9-H23	1.095	1.095
4 C2-N29	1.369	1.365	23 C9-H24	1.094	1.095
5 C2-N31	1.418	1.413	24 C10-C11	1.396	1.394
6 C2-O34	1.217	1.216	25 C10-C15	1.396	1.394
7 C3-C4	1.442	1.439	26 C11-C12	1.389	1.388
8 C3-H17	1.085	1.087	27 C11-H25	1.083	1.084
9 C3-N32	1.289	1.288	28 C12-C13	1.390	1.389
10 C4-S5	1.384	1.384	29 C12-C135	1.762	1.748
11 C4-N33	1.754	1.742	30 C13-C14	1.392	1.390
12 C5-C6	1.427	1.423	31 C13-H26	1.082	1.083
13 C5-C8	1.504	1.499	32 C14-C15	1.392	1.390
14 C6-C7	1.364	1.364	33 C14-H27	1.084	1.085
15 C6-H18	1.083	1.083	34 C15-H28	1.084	1.085
16 C7-H19	1.080	1.081	35 H16-N29	1.006	1.005
17 C7-S33	1.728	1.718	36 N29-N30	1.379	1.370
18 C8-H20	1.095	1.095	37 N31-N32	1.371	1.362
19 C8-H21	1.089	1.090			

Tablo 3.6. 50 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91	Bağ Uzunlukları		B3LYP	B3PW91
1	C1-C9	1.470	1.466	18	C8-H19	1.095	1.095
2	C1-N28	1.303	1.302	19	C8-H20	1.090	1.090
3	C1-N29	1.397	1.391	20	C8-H21	1.093	1.094
4	C2-N27	1.367	1.364	21	C9-C10	1.404	1.401
5	C2-N29	1.418	1.413	22	C9-C14	1.401	1.399
6	C2-O32	1.217	1.216	23	C10-C11	1.389	1.387
7	C3-C4	1.443	1.439	24	C10-H22	1.082	1.084
8	C3-H16	1.085	1.086	25	C11-C12	1.395	1.393
9	C3-N30	1.289	1.288	26	C11-H23	1.084	1.085
10	C4-C5	1.384	1.384	27	C12-C13	1.392	1.390
11	C4-S31	1.754	1.742	28	C12-H24	1.084	1.085
12	C5-C6	1.427	1.423	29	C13-C14	1.392	1.390
13	C5-C8	1.505	1.499	30	C13-C25	1.084	1.085
14	C6-C7	1.364	1.364	31	C14-H26	1.080	1.081
15	C6-H17	1.083	1.083	32	C15-N27	1.006	1.006
16	C7-H18	1.080	1.081	33	N27-N28	1.371	1.362
17	C7-S31	1.728	1.718	34	N29-N30	1.372	1.363

Tablo 3.7. 45 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları (0)

Bağ Açılı		B3LYP	B3PW91	Bağ Açılı		B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N31	126.359	126.418	31	C10-C9-H23	110.579	110.672
2	C9-C1-N32	122.273	122.266	32	C10-C9-H24	110.578	110.671
3	N31-C1-N32	111.368	111.317	33	H23-C9-H24	105.337	105.322
4	N30-C2-N32	101.200	101.140	34	C9-C10-C11	120.630	120.615
5	N30-C2-O35	130.114	130.130	35	C9-C10-C15	120.630	120.615
6	N32-C2-O35	128.687	128.731	36	C11-C10-C15	118.740	118.771
7	C4-C3-H17	118.152	118.285	37	C10-C11-C12	120.727	120.707
8	C4-C3-N33	120.083	119.946	38	C10-C11-H25	119.505	119.489
9	H17-C3-N33	121.766	121.769	39	C12-C11-H25	119.767	119.804
10	C3-C4-C5	127.303	127.261	40	C11-C12-C13	120.092	120.094
11	C3-C4-S34	121.127	121.076	41	C11-C12-H26	119.806	119.802
12	C5-C4-S34	111.570	111.663	42	C13-C12-H26	120.102	120.104
13	C4-C5-C6	111.789	111.615	43	C12-C13-C14	119.621	119.627
14	C4-C5-C8	125.922	125.872	44	C12-C13-H27	120.190	120.186
15	C6-C5-C8	122.290	122.513	45	C14-C13-H27	120.189	120.186
16	C5-C6-C7	113.380	113.236	46	C13-C14-C15	120.092	120.094
17	C5-C6-H18	123.261	123.405	47	C13-C14-H28	120.102	120.104
18	C7-C6-H18	123.359	123.359	48	C15-C14-H28	119.806	119.802
19	C6-C7-H19	127.987	127.970	49	C10-C15-C14	120.727	120.707
20	C6-C7-S34	112.316	112.333	50	C10-C15-H29	119.505	119.489
21	H19-C7-S34	119.697	119.697	51	C14-C15-H29	119.768	119.804
22	C5-C8-H20	110.575	110.566	52	C2-N30-H16	125.236	125.125
23	C5-C8-H21	112.826	112.813	53	C2-N30-N31	114.442	114.599
24	5-8-22	110.575	110.566	54	H16-N30-N31	120.322	120.277
25	H20-C8-H21	107.712	107.707	55	C1-N31-N30	104.727	104.692
26	H20-C8-H22	107.218	107.262	56	C1-N32-C2	108.263	108.252
27	H21-C8-H22	107.712	107.707	57	C1-N32-N33	121.468	121.482
28	C1-C9-C10	113.698	113.466	58	C2-N32-N33	130.269	130.266

29	C1-C9-H23	108.134	108.171	59	C3-N33-C32	118.773	118.720
30	C1-C9-H24	108.133	108.172	60	C4- S34- C7	90.945	91.153

Tablo 3.8. 46 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları ($^{\circ}$)

	Bağ Açılıarı	B3LYP	B3PW91		Bağ Açılıarı	B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N31	126.415	126.450	34	C9-C10-C11	120.892	120.881
2	C9-C1-N32	122.255	122.272	35	C9-C10-C15	120.897	120.890
3	N31-C1-N32	111.330	111.278	36	C11-C10-C15	118.211	118.229
4	N30-C2-N32	101.199	101.139	37	C10-C11-C12	120.875	120.862
5	N30-C2-O35	130.105	130.118	38	C10-C11-H25	119.568	119.554
6	N32-C2-O35	128.696	128.743	39	C12-C11-H25	119.556	119.584
7	C4-C3-H17	118.163	118.291	40	C11-C12-C13	121.097	121.112
8	C4-C3-N33	120.052	119.925	41	C11-C12-H26	119.431	119.441
9	H17-C3-N33	121.785	121.784	42	C13-C12-H26	119.472	119.448
10	C3-C4-C5	127.306	127.258	43	C12-C13-C14	117.843	117.823
11	C3-C4-S34	121.130	121.088	44	C12-C13-C27	121.057	121.067
12	C5-C4-S34	111.564	111.655	45	C14-C13-C27	121.088	121.097
13	C4-C5-C6	111.793	111.619	46	C13-C14-C15	121.098	121.114
14	C4-C5-C8	125.891	125.844	47	C13-C14-H28	119.470	119.444
15	C6-C5-C8	122.315	122.536	48	C15-C14-H28	119.432	119.442
16	C5-C6-C7	113.383	113.239	49	C10-C15-C14	120.875	120.860
17	C5-C6-H18	123.267	123.411	50	C10-C15-H29	119.571	119.557
18	C7-C6-H18	123.350	123.349	51	C14-C15-H29	119.554	119.583
19	C6-C7-H19	127.977	127.960	52	C13-C27-H36	111.381	111.403
20	C6-C7-S34	112.309	112.328	53	C13-C27-H37	111.118	111.034
21	H19-C7-S34	119.713	119.713	54	C13-C27-H38	111.378	111.400
22	C5-C8-H20	110.651	110.625	55	H36-C27-H37	107.354	107.368
23	C5-C8-H21	112.816	112.808	56	H36-C27-H38	108.037	108.053
24	C5-C8-H22	110.506	110.514	57	H37-C27-H38	107.377	107.390
25	H20-C8-H21	107.684	107.681	58	C2-N30-H16	125.225	125.113
26	H20-C8-H22	107.221	107.260	59	C2-N30-N31	114.436	114.594
27	H21-C8-H22	107.741	107.734	60	H16-N30-N31	120.339	120.293
28	C1-C9-C10	113.832	113.585	61	C1-N31-N30	104.751	104.718
29	C1-C9-H23	108.076	108.117	62	C1-N32-C2	108.284	108.272
30	C1-C9-H24	108.075	108.117	63	C1-N32-N33	121.469	121.485
31	C10-C9-H23	110.583	110.680	64	C2-N32-N33	130.247	130.243
32	C10-C9-H24	110.581	110.679	65	C3-N33-N32	118.804	118.742
33	H23-C9-H24	105.297	105.282	66	C4-S34-7	90.951	91.159

Tablo 3.9. 47 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları ($^{\circ}$)

	Bağ Açılıarı	B3LYP	B3PW91		Bağ Açılıarı	B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N31	126.405	126.457	35	C9-C10-C15	120.923	120.900
2	C9-C1-N32	122.272	122.284	36	C11-C10-C15	117.981	117.982
3	N31-C1-N32	111.323	111.259	37	C10-C11-C12	121.654	121.645
4	N30-C2-N32	101.192	101.134	38	C10-C11-H25	119.544	119.532
5	N30-C2-O35	130.114	130.121	39	C12-C11-H25	118.802	118.823
6	N32-C2-O35	128.694	128.746	40	C11-C12-C13	119.560	119.581
7	C4-C3-H17	118.176	118.313	41	C11-C12-H26	119.327	119.329
8	C4-C3-N33	120.033	119.891	42	C13-C12-H26	121.114	121.090

9	H17-C3-N33	121.791	121.797	43	C12-C13-C14	119.408	119.388
10	C3-C4-C5	127.328	127.286	44	C12-C13-O27	124.780	124.705
11	C3-C4-S34	121.108	121.061	45	C14-C13-O27	115.812	115.907
12	C5-C4-S34	111.564	111.654	46	C13-C14-C15	120.152	120.152
13	C4-C5-C6	111.794	111.620	47	C13-C14-C28	118.427	118.444
14	C4-C5-C8	125.895	125.842	48	C15-C14-H28	121.421	121.404
15	C6-C5-C8	122.309	122.536	49	C10-C15-C14	121.245	121.252
16	C5-C6-C7	113.381	113.240	50	C10-C15-H29	119.587	119.581
17	C5-C6-H18	123.260	123.414	51	C14-C15-H29	119.168	119.167
18	C7-C6-H18	123.359	123.345	52	C13-O27-C36	118.415	118.066
19	C6-C7-H19	127.990	127.959	53	C2-N30-H16	125.225	125.105
20	C6-C7-S34	112.312	112.326	54	C2-N30-N31	114.449	114.598
21	H19-C7-S34	119.698	119.715	55	H16-N30-N31	120.326	120.297
22	C5-C8-H20	110.657	110.631	56	C1-N31-N30	104.737	104.722
23	C5-C8-H21	112.828	112.819	57	C1-N32-C2	108.299	108.288
24	C5-C8-H22	110.507	110.509	58	C1-N32-N33	121.471	121.481
25	H20-C8-H21	107.672	107.674	59	C2-N32-N33	130.229	130.231
26	H20-C8-H22	107.221	107.261	60	C3-N33-N32	118.826	118.770
27	H21-C8-H22	107.735	107.728	61	C4-S34-C7	90.949	91.160
28	C1-C9-C10	113.951	113.716	62	O27-C36-H37	105.861	105.975
29	C1-C9-H23	108.024	108.080	63	O27-C36-H38	111.555	111.593
30	C1-C9-H24	108.006	108.036	64	O27-C36-H39	111.572	111.613
31	C10-C9-H23	110.622	110.708	65	H37-C36-H38	109.244	109.153
32	C10-C9-H24	110.644	110.740	66	H37-C36-H39	109.215	109.124
33	H23-C9-H24	105.174	105.155	67	H38-C36-H39	109.302	109.288
34	C9-C10-C11	121.095	121.118				

Tablo 3.10. 48 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları ($^{\circ}$)

	Bağ Açılı	B3LYP	B3PW91		Bağ Açılı	B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N30	126.245	126.281	31	C10-C9-H23	110.599	110.699
2	C9-C1-N31	122.306	122.326	32	C10-C9-H24	110.599	110.699
3	N30-C1-N31	111.449	111.393	33	H23-C9-H24	105.326	105.311
4	N29-C2-N31	101.194	101.134	34	C9-C10-C11	120.757	120.750
5	N29-C2-O34	130.128	130.143	35	C9-C10-C15	120.757	120.750
6	N31-C2-O34	128.678	128.723	36	C11-C10-C15	118.486	118.501
7	C4-C3-H17	118.169	118.301	37	C10-C11-C12	121.193	121.179
8	C4-C3-N32	120.086	119.949	38	C10-C11-H25	119.716	119.696
9	H17-C3-N32	121.745	121.750	39	C12-C11-H25	119.091	119.125
10	C3-C4-C5	127.316	127.273	40	C11-C12-C13	119.017	119.079
11	C3-C4-S33	121.112	121.063	41	C11-C12-H26	120.832	120.844
12	C5-C4-S33	111.572	111.663	42	C13-H12-H26	120.151	120.077
13	C4-C5-C6	111.780	111.606	43	C12-C13-C14	121.094	120.982
14	C4-C5-C8	125.956	125.905	44	C12-C13-C135	119.453	119.509
15	C6-C5-C8	122.264	122.488	45	C14-C13-C135	119.453	119.509
16	C5-C6-C7	113.383	113.239	46	C13-C14-C15	119.017	119.079
17	C5-C6-H18	123.268	123.413	47	C13-C14-H27	120.151	120.077
18	C7-C6-H18	123.350	123.348	48	C15-C14-H27	120.832	120.844
19	C6-C7-H19	127.984	127.964	49	C10-C15-C14	121.193	121.179
20	C6-C7-S33	112.328	112.345	50	C10-C15-H28	119.716	119.696
21	H19-C7-S33	119.688	119.691	51	C14-C15-H28	119.091	119.125
22	C5-C8-H20	110.558	110.549	52	C2-N29-H16	125.245	125.129
23	C5-C8-H21	112.873	112.862	53	C2-N29-N30	114.428	114.588

24	C5-C8-H22	110.558	110.549	54	H16-N29-N30	120.327	120.283
25	H20-C8-H21	107.707	107.701	55	C1-N30-N29	104.697	104.666
26	H20-C8-H22	107.216	107.258	56	C1-N31-C2	108.233	108.219
27	H21-C8-H22	107.707	107.701	57	C1-N31-N32	121.425	121.442
28	C1-C9-C10	113.515	113.268	58	C2-N31-N32	130.343	130.339
29	C1-C9-H23	108.218	108.256	59	C3-N32-N31	118.739	118.689
30	C1-C9-H24	108.218	108.256	60	C4-S33-C7	90.938	91.146

Tablo 3.11. 49 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları ($^{\circ}$)

Bağ Açılıarı		B3LYP	B3PW91	Bağ Açılıarı		B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N30	126.301	126.363	31	C10-C9-H23	110.639	110.736
2	C9-C1-N31	122.232	122.235	32	C10-C9-H24	110.448	110.549
3	N30-C1-N31	111.468	111.402	33	H23-C9-H24	105.389	105.375
4	N29-C2-N31	101.191	101.135	34	C9-C10-C11	120.150	120.073
5	N29-C2-O34	130.145	130.152	35	C9-C10-C15	120.748	120.770
6	N31-C2-O34	128.665	128.714	36	C11-C10-C15	119.102	119.156
7	C4-C3-H17	118.175	118.311	37	C10-C11-C12	119.697	119.741
8	C4-C3-N32	120.049	119.908	38	C10-C11-H25	120.535	120.544
9	H17-C3-N32	121.776	121.781	39	C12-C11-H25	119.768	119.715
10	C3-C4-C5	127.322	127.285	40	C11-C12-C13	121.579	121.447
11	C3-C4-S33	121.110	121.057	41	C11-C12-Cl35	119.126	119.178
12	C5-C4-S33	111.568	111.658	42	C13-H12-Cl35	119.295	119.375
13	C4-C5-C6	111.783	111.610	43	C12-C13-C14	118.521	118.584
14	C4-C5-C8	125.922	125.883	44	C12-C13-H26	120.263	120.175
15	C6-C5-C8	122.294	122.507	45	C14-C13-H26	121.217	121.241
16	C5-C6-C7	113.381	113.239	46	C13-C14-C15	120.557	120.592
17	C5-C6-H18	123.267	123.424	47	C13-C14-H27	119.436	119.412
18	C7-C6-H18	123.352	123.337	48	C15-C14-H27	120.007	119.996
19	C6-C7-H19	127.981	127.950	49	C10-C15-C14	120.544	120.480
20	C6-C7-S33	112.331	112.348	50	C10-C15-H28	119.619	119.616
21	H19-C7-S33	119.688	119.702	51	C14-C15-H28	119.837	119.904
22	C5-C8-H20	110.613	110.547	52	C2-N29-H16	125.249	125.129
23	C5-C8-H21	112.843	112.841	53	C2-N29-N30	114.432	114.581
24	C5-C8-H22	110.519	110.558	54	H16-N29-N30	120.319	120.291
25	H20-C8-H21	107.694	107.710	55	C1-N30-N29	104.687	104.670
26	H20-C8-H22	107.216	107.259	56	C1-N31-C2	108.223	108.213
27	H21-C8-H22	107.735	107.707	57	C1-N31-N32	121.399	121.411
28	C1-C9-C10	113.486	113.240	58	C2-N31-N32	130.378	130.377
29	C1-C9-H23	108.265	108.293	59	C3-N32-N31	118.777	118.725
30	C1-C9-H24	108.258	108.307	60	C4-S33-C7	90.937	91.145

Tablo 3.12. 50 Bileşiminin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleriyle optimize yapıdan oluşturulan teorik bağ açıları ($^{\circ}$)

Bağ Açılıarı		B3LYP	B3PW91	Bağ Açılıarı		B3LYP	B3PW91
1	C9-C1-N28	122.308	122.284	28	C1-C9-C10	117.762	117.663
2	C9-C1-N29	127.059	127.120	29	C1-C9-C14	123.096	123.112
3	N28-C1-N29	110.633	110.597	30	C10-C9-C14	119.089	119.170
4	N27-C2-N29	101.518	101.462	31	C9-C10-C11	120.465	120.429
5	N27-C2-O32	129.704	129.696	32	C9-C10-H22	118.924	118.876
6	N29-C2-O32	128.776	128.841	33	C11-C10-H22	120.611	120.695

7	C4-C3-H16	117.976	118.076	34	C10-C11-C12	120.196	120.185
8	C4-C3-N30	119.938	119.843	35	C10-C11-H23	119.649	119.650
9	H16-C3-N30	122.085	122.080	36	C12-C11-H23	120.154	120.165
10	C3-C4-C5	127.143	127.076	37	C11-C12-C13	119.636	119.647
11	C3-C4-S31	121.288	121.271	38	C11-C12-H24	120.172	120.168
12	C5-C4-S31	111.569	111.653	39	C13-C12-H24	120.192	120.185
13	C4-C5-C6	111.785	111.613	40	C12-C13-C14	120.536	120.540
14	C4-C5-C8	125.777	125.731	41	C12-C13-H25	120.091	120.089
15	C6-C5-C8	122.432	122.649	42	C14-C13-H25	119.373	119.371
16	C5-C6-C7	113.383	113.243	43	C9-C14-C13	120.078	120.029
17	C5-C6-H17	123.261	123.415	44	C9-C14-H26	119.894	119.857
18	C7-C6-H17	123.356	123.342	45	C13-C14-H26	120.028	120.113
19	C6-C7-H18	127.975	127.943	46	C2-H27-H15	125.090	124.986
20	C6-C7-S31	112.313	112.326	47	C2-N27-N28	114.361	114.488
21	H18-C7-S31	119.710	119.728	48	H15-N27-N28	120.451	120.438
22	C5-C8-H19	110.773	110.731	49	C1-N28-N27	105.322	105.299
23	C5-C8-H20	112.735	112.734	50	C1-N29-C2	108.155	108.144
24	C5-C8-H21	110.455	110.467	51	C1-N29-N30	122.866	122.912
25	H19-C8-H20	107.653	107.657	52	C2-N29-N30	128.659	128.654
26	H19-C8-H21	107.258	107.295	53	C3-N30-N29	119.027	118.958
27	H20-C8-H21	107.749	107.741	54	C4-S31-C7	90.950	91.164

3.2.2. İnfared Spektrum Verileri

3-Aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların (44) Yoğunluk Fonksiyonu Teorisinin B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle 6-311G(d,p) temel setine göre bilgisayar ortamında titreşim frekansları gaz fazında hesaplanmıştır. İlgili bileşiklerin teorik IR değerlerinde yapılan analizler sonucunda elde edilen frekanslar içerisinde negatif frekansa rastlanmamıştır. Teorik titreşim frekanslarında negatif değerlerin olmaması sentezlenmiş bileşiklerin optimize hallerinin kararlı bir yapı olduğunu göstermektedir. B3LYP ve B3PW91'ye göre titreşim frekansı değerleri kullanılarak her iki yöntemle göre teorik IR spektrumları çizilmiştir (Şekil 3) ve titreşim frekansları B3LYP/6-311G(d,p) için 0.9516 ve B3PW91/6-311G(d,p) metodu için 0,9905 uyum faktörleri ile çarpılmıştır [80]. 44 Tipi bileşiklerin skalalı titreşim değerleri Tablo 3.13-18 ve teorik olarak çizilmiş IR spektrumları ise Şekil 3.7-12'de verilmiştir.

Tablo 3.13. 45 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

Titreşim Türleri	Den.	B3LY B3PW91
$\tau C_3N_{33}N_{32}C_1, \tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (75)	13	0
$\tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (23), $\delta \tau C_1C_9C_{10}C_{11}$ (50)	19	19
$\tau C_3N_{33}N_{32}C_1, \tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (23), $\delta \tau C_1C_9C_{10}C_{11}$ (50)	30	27
$\delta C_4C_3N_{33}$ (20), $\delta C_3N_{33}N_{32}$ (18), $\delta N_{31}C_1C_9$ (18), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (10)	37	35
$\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (70)	42	42
$\tau C_3N_{33}N_{32}C_1, \tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (15), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (16), $\tau C_4C_3N_{33}N_{32}$ (29), $\tau N_{33}C_1C_2N_{32}$ (23)	66	64
$\tau C_7C_6C_5C_4$ (42), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (29)	77	73
$\tau C_3N_{33}N_{32}C_1, \tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (15), $\delta N_{31}C_1C_9$ (23), $\delta C_5C_4C_3$, $\delta C_7C_6C_5$ (13)	116	113
$\delta N_{31}C_1C_9$ (23), $\delta C_5C_4C_3$, $\delta C_7C_6C_5$ (13)	135	130
$\tau C_3N_{33}N_{32}C_1, \tau N_{31}C_1C_9C_{10}$ (11), $\tau C_5C_4C_3N_{33}$, $\tau C_7C_6C_5C_4$ (19), $\tau C_2N_{30}N_{31}C_1$ (11), $\tau N_{30}N_{31}C_1C_9$ (25)	161	155
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (10), $\delta C_3N_{33}N_{32}$ (21), $\delta C_6C_5C_4$ (11), $\delta N_{30}N_{31}C_1$, $\delta N_{33}N_{32}C_2$ (15)	189	182
$\tau C_5C_4C_3N_{33}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (42), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (29)	190	184
$\delta C_1C_9C_{10}, \delta C_9C_{10}C_{15}$ (10), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (40)	230	220
$\tau C_5C_4C_3N_{33}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (12), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (17), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (16), $\tau N_{33}C_1C_2N_{32}$ (27)	261	255
$\tau H_{16}N_{30}N_{31}C_1$ (21), $\tau C_2N_{30}N_{31}C_1$ (36), $\tau N_{30}N_{31}C_1C_9$ (20)	286	277
$\delta N_{31}C_1C_9$ (10), $\delta C_8C_5C_6$ (36)	289	286
$\delta C_1C_9C_{10}$ (60), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$ (13)	328	312
$\tau C_6C_5C_4C_3$ (10), $\tau C_4C_3N_{33}N_{32}$ (29), $\tau S_{34}C_7C_6C_5$ (21), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (13)	369	358
$\delta O_{35}C_2N_{30}$ (14), $\delta C_3N_{33}N_{32}$ (10), $\delta N_{30}N_{31}C_1$, $\delta N_{33}N_{32}C_2$ (13), $\delta C_8C_5C_6$ (21)	392	377
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{13}C_{14}C_{15}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}$, (14), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (71)	411	392
$\delta O_{35}C_2N_{30}$ (12), $\delta C_5C_4C_3$, $\delta C_7C_6C_5$, (35), $\delta C_8C_5C_6$ (13)	420	405
$\tau H_{16}N_{30}N_{31}C_1$ (57), $\tau O_{35}N_{30}N_{32}C_2$ (11), $\tau N_{32}C_9N_{31}C_1$ (11)	454	448
$\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (33), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (21)	478	458
$\tau C_6C_5C_4C_3$ (17), $\tau C_4C_3N_{33}N_{32}$ (11), $\tau S_{34}C_7C_6C_5$ (48)	508	490
νC_8C_5 (19), $\delta C_5C_4C_3$, $\delta C_7C_6C_5$, (10), $\delta S_{34}C_7C_6$ (28)	532	515
$\delta O_{35}C_2N_{30}$ (18), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (23)	559	537
$\delta O_{35}C_2N_{30}$ (15), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (16), $\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}$ (13)	609	587
$\tau H_{18}C_6C_7S_{34}, \tau H_{19}C_7S_{34}C_4$ (15), $\tau C_5C_4C_3N_{33}, C_7C_6C_5C_4$ (33), $\tau S_{34}C_7C_6C_5$ (11), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (20)	620	594
$\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (85)	631	601
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (14), $\nu S_{34}C_7$ (10), $\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$ (20)	649	629
$\tau H_{16}N_{30}N_{31}C_1$ (16), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (10), $\tau N_{32}C_9N_{31}C_1$ (44)	653	631
$\nu S_{34}C_7$ (19), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$, (21)	694	670
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{13}C_{14}C_{15}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}$, (35), $\tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}$ (13), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (28)	706	679

τ H ₁₈ C ₆ C ₇ S ₃₄ , τ H ₁₉ C ₇ C ₃₄ S ₄ , (79)	723	695
δ C ₆ C ₅ C ₄ (18), τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (18)	699	729 706
τ O ₃₅ N ₃₀ N ₃₂ C ₂ (82)	736	712
δ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ , δ N ₃₂ C ₁ N ₃₁ (12), τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (10)	776	750
ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (17), ν N ₃₀ N ₃₁ , ν N ₃₃ N ₃₂ (12), δ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ , δ N ₃₂ C ₁ N ₃₁ (23)	795	770
ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ (14), ν N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (11)	802	781
ν S ₃₄ C ₇ (40), δ S ₃₄ C ₇ C ₆ (22)	826	806
	840	813
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (53), τ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (27)	760	845 813
τ H ₁₈ C ₆ C ₇ S ₃₄ , τ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ C ₄ (81), τ S ₃₄ C ₇ C ₆ C ₅ (10)	885	849
δ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ (32), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (30), τ C ₁ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (10)	921	880
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (53), τ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (28)	922	887
ν C ₈ C ₅ (12), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ (10), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (19), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (17)	953	918
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (42), τ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (18), τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (13)	966	931
τ H ₁₇ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (93)	984	944
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (60), τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (17)	991	954
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₄ (27), ν C ₁₄ C ₁₃ (14), δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (51),	1009	969
δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (19), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (19)	1018	983
δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (15), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (18)	1030	995
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (11), ν C ₁₄ C ₁₃ (18), δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (22), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (12)	1042	996
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (72)	1044	1005
ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (13), ν N ₃₀ N ₃₁ , ν N ₃₃ N ₃₂ (60)	1083	1052
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (20), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (27), δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (13)	1093	1060
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (16), δ H ₁₈ C ₆ C ₇ (30), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ (34)	1107	1072
δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (66)	1171	1122
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (18), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (27), δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (42), δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (18)	1192	1143
ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (11), ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (20), ν N ₃₀ N ₃₁ , ν N ₃₃ N ₃₂ (16), δ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ , δ N ₃₂ C ₁ N ₃₁ (15)	1197	1146
δ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ (43), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (29)	1198	1164
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (14), ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ (32), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (14)	1211	1167
ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (30), δ H ₁₈ C ₆ C ₇ (16)	1226	1185
δ H ₁₈ C ₆ C ₇ (14), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ (13), δ C ₆ C ₅ C ₄ (15)	1252	1208
ν N ₃₀ N ₃₁ , ν N ₃₃ N ₃₂ (14), δ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ , δ N ₃₂ C ₁ N ₃₁ (20), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (14)	1270	1234
ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (15), δ H ₁₇ C ₃ N ₃₃ (15), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (25)	1310	1269

ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (56), ν C ₁₄ C ₁₃ (19), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (11), δ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ (10)	1327	1286	
δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (55), δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (26)	1347	1297	
δ H ₁₇ C ₃ N ₃₃ (38), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (16)	1368	1314	
δ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ (63)	1383	1335	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (12), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ (16), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (17)	1393	1339	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (57),	1411	1359	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (22), ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (15), ν C ₁ C ₉ ν C ₉ C ₁₀	1430	1387	
δ H ₂₄ C ₉ H ₂₃ (79)	1459	1394	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (17), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (20)	1463	1407	
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (20), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ (50)	1472	1409	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (78), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (21)	1473	1414	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (48), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (15)	1485	1431	
δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ , (36) δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (13), δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃	1516	1458	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (52)	1568	1517	
ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (44), δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (24)	1614	1564	
ν N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ C ₃ (60)	1590	1621	1574
ν N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ C ₃ (51), ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (14)	1612	1631	1582
ν N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ C ₃ (13), ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (42)	1636	1586	
ν O ₃₅ C ₂ (73), ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (10)	1706	1783	1734
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (100)	3000	2893	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (100)	3011	2903	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (100)	3038	2934	
C ₈ H ₂₀ , C ₈ H ₂₁ , C ₈ H ₂₂ (100)	3045	2946	
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (97)	3095	2990	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₃ H ₂₇ , ν C ₁₄ H ₂₈ (75), ν C ₁₅ H ₂₉ (24)	3126	3014	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₃ H ₂₇ , ν C ₁₄ H ₂₈ (61), ν C ₁₅ H ₂₉ (39)	3129	3015	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (98)	3134	3018	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₃ H ₂₇ , ν C ₁₄ H ₂₈ (75), ν C ₁₅ H ₂₉ (22)	3139	3028	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₃ H ₂₇ , ν C ₁₄ H ₂₈ (84), ν C ₁₅ H ₂₉ (10)	3148	3036	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₃ H ₂₇ , ν C ₁₄ H ₂₈ (85)	3159	3047	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (100)	3164	3053	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (94)	3209	3093	
ν N ₃₀ H ₁₆ (100)	3169	3645	3519

Tablo 3.14. 46 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

Titreşim Türleri	Den.	B3LYP	B3PW91
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ , H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (13)	19		17
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (20), τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (23), τ N ₃₃ C ₁ C ₂ N ₃₂ (13)	27		25
δ C ₄ C ₃ N ₃₃ (13), δ C ₃ C ₃₃ C ₃₂ (13), δ N ₃₁ C ₁ C ₉ (17), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ (13)	32		30
τ H ₃₆ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₇ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₈ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (23), τ C ₁ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (49)	36		34
δ C ₄ C ₃ N ₃₃ (21), δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (13), τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (10), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ , τ C ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (19)	65		62
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (13), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (16), τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (30), τ N ₃₃ C ₁ C ₂ N ₃₂ (24)	67		65
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (10), τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (22), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (12), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₉ (25), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (12)	116		113
δ N ₃₁ C ₁ C ₉ (30), δ C ₅ C ₄ C ₃ (13)	128		122
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (23), τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (28), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ , τ C ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (12)	156		149
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (11), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (20), τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (11), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₈ (23)	160		155
δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (18), δ C ₆ C ₅ C ₄ (10), δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (12)	191		183
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (41), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (21)	192		186
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (12), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (16), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (10), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (27)	261		254
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (46), τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (18)	276		267
δ N ₃₁ C ₁ C ₉ (12), δ C ₈ C ₅ C ₆ (37)	284		272
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (23), τ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (13), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (14), τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (15), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₉ (23)	291		288
τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (16), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ , τ C ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (46)	320		309
τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (28), τ S ₃₄ C ₇ C ₆ C ₅ (24)	369		357
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (70)	376		359
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (13), δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (11), δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ (12), δ C ₈ C ₅ C ₆ (23)	391		376
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₂₇ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ , τ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (10), τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (74)	412		394
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (14), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (33), δ C ₈ C ₅ C ₆ (12)	420		405
τ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (58), τ O ₃₅ N ₃₀ N ₃₂ C ₂ (11), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (12)	453		447
δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (15), τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (15), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ , τ C ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (24)	481		461
τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (15), τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (10), τ S ₃₄ C ₇ C ₆ C ₅ (57)	508		491
δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (14), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ , τ C ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (22)	522		501
ν C ₈ C ₅ (20), δ S ₃₄ C ₇ C ₆ (26)	533		516
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (29)	594		574
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (28), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (31)	620		594
τ C ₄ C ₃ C ₆ C ₅ (14), S ₃₄ C ₇ (10), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (19)	647		620
δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (41), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (19)	648		628
δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (23), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (23)	657		633
ν S ₃₄ C ₇ (20), τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (18)	692		669
τ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , τ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , τ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ (26)	718		693
τ H ₁₈ C ₆ C ₅ C ₈ , τ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ C ₄ (80)	723		695
τ O ₃₅ N ₃₀ N ₃₂ C ₂ (82)	736		712
ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ , C ₂₇ C ₁₃ (18), δ C ₆ C ₅ C ₄ (14)	739		716
ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ , ν C ₂₇ C ₁₃ (14), τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ C ₂₇ , τ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ , τ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (26)	768		740

$\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{31}C_1N_{31}(13), \delta N_{30}N_{31}C_1, \delta N_{33}N_{32}C_2(17)$	791	767
$v N_{30}C_2, v N_{32}C_1(15), v N_{30}N_{31}, v N_{33}N_{32}(14), \delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}(21)$	801	778
$v S_{34}C_7(31), \delta S_{34}C_7C_6(16)$	827	800
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(18), v S_{34}C_7(10)$	830	806
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{27}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}(100)$	838	810
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(17), \tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{27}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}(23)$	859	828
$\tau H_{18}C_6C_5C_8, \tau H_{19}C_7S_{34}C_4(85)$	885	849
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(11), \delta H_{23}C_9C_{10}, \delta H_{24}C_9H_{23}(32), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(30)$	921	880
$v C_8C_5(12), \delta H_{19}C_7S_{34}(10), \delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5(18), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(14), \tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{27}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}(56), \tau C_{11}C_{10}C_{15}C_{14}, \tau C_{12}C_{11}C_{10}C_{15}, \tau C_{13}C_{14}C_{15}C_{10}(25)$	953	916
$v C_8C_5(12), \delta H_{19}C_7S_{34}(10), \delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5(18), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(14), \tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{27}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}(56), \tau C_{11}C_{10}C_{15}C_{14}, \tau C_{12}C_{11}C_{10}C_{15}, \tau C_{13}C_{14}C_{15}C_{10}(25)$	953	918
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{27}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}(83), \tau C_{11}C_{10}C_{15}C_{14}, \tau C_{12}C_{11}C_{10}C_{15}, \tau C_{13}C_{14}C_{15}C_{10}(14)$	960	926
$\tau H_{17}C_3N_{33}N_{32}(93)$	986	946
$v C_{13}C_{14}(11), \delta H_{36}C_{27}H_{38}, \delta H_{37}C_{27}H_{36}, \delta H_{38}C_{27}H_{37}(21), \tau H_{36}C_{27}C_{13}C_{12}, \tau H_{37}C_{27}C_{13}C_{12}, \tau H_{38}C_{27}C_{13}C_{12}(48)$	999	956
$\delta N_{30}N_{31}C_1, \delta N_{33}N_{32}C_1(22), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(16)$	1018	983
$\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(10)$	1029	988
$\delta C_{10}C_{15}C_{14}, \delta C_{11}C_{10}C_{15}, \delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{14}C_{15}(16), \delta N_{30}N_{31}C_1(12), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(10)$	1031	996
$\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}(11), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(71)$	1044	996
$\tau H_{36}C_{27}C_{13}C_{12}, \tau H_{37}C_{27}C_{13}C_{12}, \tau H_{38}C_{27}C_{13}C_{12}(70)$	1052	1005
$v N_{30}C_2, v N_{31}C_1(13), v N_{30}N_{31}, v N_{33}N_{32}(60)$	1082	1060
$v C_5C_4, v C_7C_6(16), \delta H_{18}C_6C_7(30), \delta H_{19}C_7S_{34}(34)$	1106	1071
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(24), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}(51)$	1128	1081
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(19), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}(72)$	1196	1146
$v C_4C_3, v C_6C_5(11), v N_{30}C_2, v N_{32}C_1(19), v N_{30}N_{31}, v N_{33}N_{32}(16), \delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}(15)$	1197	1146
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(12), \delta H_{23}C_9C_{10}(43), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(29)$	1198	1165
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(39), v C_1C_9, v C_9C_{10}, v C_{27}C_{13}(31), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(10)$	1211	1169
$v C_1C_9, v C_9C_{10}, v C_{27}C_{13}(28), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}(11), \delta C_{10}C_{15}C_{14}, \delta C_{11}C_{10}C_{15}, \delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{14}C_{15}(10), v C_4C_3, v C_6C_5(29), \delta H_{18}C_6C_7(16)$	1222	1180
$\delta H_{18}C_6C_7(14), \delta H_{19}C_7S_{34}(13), \delta C_6C_5C_4(15)$	1226	1185
$\delta H_{18}C_6C_7(14), \delta H_{19}C_7S_{34}(13), \delta C_6C_5C_4(15)$	1253	1209
$v N_{30}N_{31}, v N_{33}N_{32}(14), \delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}(21), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(14)$	1270	1234
$v N_{30}C_2, v N_{32}C_1(15), \delta H_{17}C_3N_{33}(15), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(25)$	1311	1270
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(38), v C_{13}C_{14}(28)$	1319	1271
$v C_{10}C_{15}, v C_{11}C_{10}, v C_{12}C_{11}, v C_{15}C_{14}(13), \delta H_{23}C_9C_{10}(10), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}(70)$	1335	1292
$\delta H_{17}C_3N_{33}(37), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(17)$	1369	1315
$\delta H_{16}N_{30}N_{31}(52)$	1382	1335

ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (12), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₄ (16), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (18)	1393	1338	
δ H ₃₆ C ₂₇ H ₃₈ , δ H ₃₇ C ₂₇ H ₃₆ , δ H ₃₈ C ₂₇ H ₃₇ (91)	1402	1339	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (58)	1410	1358	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (22), ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₁ C ₁ (15), ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ , ν C ₂₇ C ₁₃ (11)	1429	1374	
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₅ C ₁₄ (23), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ , δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (12)	1430	1386	
δ H ₂₄ C ₉ H ₂₃ (83)	1459	1393	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (18), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (20)	1463	1407	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (78), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (20)	1473	1409	
δ H ₃₆ C ₂₇ H ₃₈ , δ H ₃₇ C ₂₇ H ₃₆ , δ H ₃₈ C ₂₇ H ₃₇ (71), τ H ₃₆ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₇ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₈ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (22)	1477	1412	
δ H ₃₆ C ₂₇ H ₃₈ , δ H ₃₇ C ₂₇ H ₃₆ , δ H ₃₈ C ₂₇ H ₃₇ (73), τ H ₃₆ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₇ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ , τ H ₃₈ C ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (16)	1482	1418	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (38), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (15)	1485	1430	
δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (13), δ H ₂₄ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₈ C ₁₄ C ₁₅ , δ H ₂₉ C ₁₅ C ₁₄ (61)	1536	1479	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (52)	1568	1517	
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₅ C ₁₄ (34), ν C ₁₃ C ₁₄ (24), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₀ C ₁₅ , δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ (22)	1603	1553	
ν N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ C ₃₈ (61)	1593	1622	1575
ν N ₃₁ C ₁ , ν N ₃₃ C ₃ (65)	1612	1632	1584
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₀ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₅ C ₁₄ (59)	1645	1594	
ν O ₃₅ C ₂ (73), ν N ₃₀ C ₂ , ν N ₃₂ C ₁ (10)	1707	1783	1734
ν C ₂₇ H ₃₆ , ν C ₂₇ H ₃₇ , ν C ₂₇ H ₃₈ (99)	2991	2885	
ν C ₈ H ₂₀ , C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (96)	2999	2893	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (100)	3010	2902	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (100)	3037	2933	
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (92)	3045	2945	
ν C ₂₇ H ₃₆ , ν C ₂₇ H ₃₇ , ν C ₂₇ H ₃₈ (98)	3045	2946	
ν C ₂₇ H ₃₆ , ν C ₂₇ H ₃₇ , ν C ₂₇ H ₃₈ (98)	3072	2971	
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (94)	3095	2991	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₈ , ν C ₁₅ H ₂₉ (198)	3122	3011	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₈ , ν C ₁₅ H ₂₉ (198)	3122	3011	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H(98)	3135	3014	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₈ , ν C ₁₅ H ₂₉ (99)	3138	3026	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₂ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₈ , ν C ₁₅ H ₂₉ (99)	3141	3029	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (50)	3164	3053	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (94)	3209	3093	
ν N ₃₀ H ₁₆ (100)	3167	3646	3520

Tablo 3.15. 47 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

Titreşim Türleri	Den.	B3LYP	B3PW91
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (80)	14	14	
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (21), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (13), τ C ₉ C ₁ C ₁₀ C ₁₁ (33), τ N ₃₃ C ₁ C ₂ N ₃₂ (11)	18	18	
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (22), τ C ₁ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (12)	26	24	
δ N ₃₁ C ₁ C ₉ (11), δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (10), τ C ₁ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (16), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ (14)	30	28	
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (69)	39	37	
δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (14), δ C ₄ C ₃ N ₃₃ (21), τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (10), τ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (11), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ (12)	58	55	
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (13), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (18), τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (30), τ N ₃₃ C ₁ C ₂ N ₃₂ (24)	67	65	
τ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (55)	93	90	
τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (21), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (12), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₉ (25), τ N ₃₂ C ₉ N ₃₁ C ₁ (12)	116	112	
δ N ₃₁ C ₁ C ₉ (24), δ C ₅ C ₄ C ₃ (13)	128	122	
τ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ C ₁ , τ N ₃₁ C ₁ C ₉ C ₁₀ (11), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (20), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₉ (20)	158	153	
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (10), τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (30), τ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ C ₁₂ (16)	163	158	
δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (19), δ C ₆ C ₅ C ₄ (11), δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (13), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (42), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ , τ O ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (23)	191	183	
δ O ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (33), δ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ (24)	192	186	
τ H ₃₇ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ , τ H ₃₈ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ , τ H ₃₉ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ (62)	226	218	
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (12), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (19), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (11), τ N ₃₃ C ₁ C ₂ N ₃₂ (29)	244	238	
δ C ₈ C ₅ C ₆ (30)	263	256	
τ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (17), τ C ₂ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (27), τ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ C ₉ (21)	283	272	
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (43), δ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ (18)	287	287	
τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (13), τ O ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (16), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ (19)	332	317	
τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (10), τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (28), τ S ₃₄ C ₇ C ₆ C ₅ (24)	350	338	
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (12), δ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (10), δ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ , δ N ₃₃ N ₃₂ C ₂ (11), δ C ₈ C ₅ C ₆ (24)	369	359	
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (14), δ C ₅ C ₄ C ₃ (18)	390	375	
τ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (67)	420	403	
δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (10), δ O ₂₇ C ₁₃ C ₁₄ (13), τ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (20)	422	405	
τ H ₁₆ N ₃₀ N ₃₁ C ₁ (42)	450	433	
τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (16), τ C ₄ C ₃ N ₃₃ N ₃₂ (10), τ S ₃₄ C ₇ C ₆ C ₅ (56)	454	447	
τ O ₂₇ C ₁₂ C ₁₄ C ₁₃ (26)	508	491	
ν C ₈ C ₅ (17), δ S ₃₄ C ₇ C ₆ (24)	518	497	
δ C ₃₆ O ₂₇ C ₁₃ (19)	533	516	
δ O ₃₅ C ₂ N ₃₀ (27)	544	523	
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₃ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (28), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (32)	595	574	
δ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (43)	619	594	
ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (14), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (18)	644	616	
	647	628	

$\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (14), $\tau H_{16}N_{30}N_{31}C_1$ (10), $\tau N_{32}C_9N_{31}C_1$ (31)	656	633
$\nu S_{34}C_7$ (17), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$	690	667
$\delta C_6C_5C_4$ (11), $\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (20)	719	695
$\tau H_{18}C_6C_5C_8$ (80)	723	695
$\tau C_2N_{30}N_{31}C_1$ (10), $\tau O_{35}N_{32}N_{30}C_2$ (81)	736	712
$\nu O_{27}C_{13}$ (11), $\nu C_1C_9, \nu C_9C_{10}$ (12), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta$ $C_{15}C_{14}C_{13}$ (10), $\delta C_6C_5C_4$ (11)	741	718
	774	747
$\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}$ (15), $\delta N_{30}N_{31}C_1, \delta N_{33}N_{32}C_2$ (19)	793	768
$\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (11), $\nu N_{30}N_{31}, \nu N_{33}N_{32}$ (16), $\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}$ (17)	802	779
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{28}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{29}C_{15}C_{14}C_{13}$ (82)	813	783
$\nu S_{34}C_7$ (41), $\delta S_{34}C_7C_6$ (23)	828	806
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (15), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta$ $H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (11)	832	836
$\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (17)	858	827
$\tau H_{18}C_6C_5C_8, \tau H_{19}C_7S_{34}C_4$ (85)	884	848
$\tau C_{13}C_{12}C_{11}C_{10}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (12)	923	881
$\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (71),	938	901
νC_8C_5 (12), $\delta H_{19}C_7S_{34}$ (11), $\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$ (19), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau$ $H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (14)	953	919
$\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (70), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta$ $C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (20)	955	919
$\tau H_{17}C_3N_{33}N_{32}$ (93)	986	946
$\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (16), $\delta N_{30}N_{31}C_1, \delta$ $N_{33}N_{32}C_2$ (18), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (10)	1017	978
$\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (41)	1020	983
$\delta N_{30}N_{31}C_1, \delta N_{33}N_{32}C_2$ (14), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (17)	1030	995
$\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (11), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau$ $H_{22}C_8C_5C_6$ (71)	1044	996
$\nu O_{27}C_{36}$ (73)	1055	1032
$\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (13), $\nu N_{30}N_{31}, \nu N_{33}N_{32}$ (60)	1082	1060
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (16), $\delta H_{18}C_6C_7$ (30), $\delta H_{19}C_7S_{34}$ (34)	1106	1071
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (88)	1122	1076
$\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (98)	1160	1114
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (10), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta$ $H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (75)	1187	1137
$\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (68)	1193	1146
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (11), $\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (20), $\nu N_{30}N_{31}$ (16), $\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta$ $N_{32}C_1N_{31}$ (15)	1198	1149
$\delta H_{24}C_9C_{10}$ (35), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (22)	1201	1165
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (14), $\nu C_1C_9, \nu C_9C_{10}$ (28), τ $H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (16)	1215	1170
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (30), $\delta H_{18}C_6C_7$ (17)	1226	1186
$\delta H_{18}C_7C_6$ (14), $\delta H_{19}C_7S_{34}$ (13), $\delta C_6C_5C_4$ (15)	1253	1209
$\nu O_{27}C_3$ (33)	1266	1233
$\nu N_{30}N_{31}, \nu N_{33}N_{32}$ (11), $\delta C_2N_{30}N_{31}, \delta N_{32}C_1N_{31}$ (17), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau$ $H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (11)	1271	1234
$\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (15), $\delta H_{17}C_3N_{33}$ (15), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (23)	1312	1266

$\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (60)	1322	1270	
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (34), $\nu C_{14}C_{13}$ (11), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (11), $\delta H_{24}C_9C_{10}$ (13)	1341	1306	
$\delta H_{17}C_3N_{33}$ (36), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (17)	1370	1315	
$\delta H_{16}N_{30}N_{31}$ (61)	1382	1335	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (10), $\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (13), $\delta H_{19}C_7S_{34}$ (17), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (18)	1393	1338	
$\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (58)	1410	1358	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (22), $\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (15), $\nu C_1C_9, \nu C_9C_{10}$ (12)	1429	1386	
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (24), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (11)	1440	1387	
$\delta H_{23}C_9H_{24}$ (84)	1458	1392	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (18), $\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (20), $\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (73)	1463	1402	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (18), $\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (20), $\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (73)	1464	1408	
$\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (77), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (20)	1473	1409	
$\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (71), $\tau H_{37}C_{36}O_{27}C_{13}, \tau H_{38}C_{36}O_{27}C_{13}, \tau H_{39}C_{36}O_{27}C_{13}$ (22)	1478	1415	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (10), $\delta H_{20}C_8H_{22}, \delta H_{21}C_8H_{20}, \delta H_{22}C_8H_{21}$ (39), $\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6$ (15)	1485	1429	
$\delta H_{37}C_{36}H_{39}, \delta H_{38}C_{36}H_{37}, \delta H_{39}C_{36}H_{38}$ (94)	1492	1430	
$\delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{28}C_{14}C_{15}, \delta H_{29}C_{15}C_{14}$ (47), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (11)	1535	1480	
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6$ (52)	1568	1517	
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (49), $\delta C_{12}C_{11}C_{10}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (25)	1606	1556	
$\nu N_{31}C_1, \nu N_{33}C_3$ (62)	1593	1622	1575
$\nu N_{31}C_1, \nu N_{33}C_3$ (66)	1612	1632	1584
$\nu C_{11}C_{10}, \nu C_{12}C_{11}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{15}C_{14}$ (53)	1644	1594	
$\nu O_{35}C_2$ (73), $\nu N_{30}C_2, \nu N_{32}C_1$ (10)	1707	1782	1733
$\nu C_{36}H_{37}, \nu C_{36}H_{38}, \nu C_{36}H_{39}$ (91)	2971	2862	
$\nu C_8H_{20}, \nu C_8H_{21}, \nu C_8H_{22}$ (95)	2999	2893	
$\nu C_9H_{23}, \nu C_9H_{24}$ (100)	3009	2901	
$\nu C_{36}H_{37}, \nu C_{36}H_{38}, \nu C_{36}H_{39}$ (99)	3027	2923	
$\nu C_9H_{23}, \nu C_9H_{24}$ (100)	3035	2932	
$\nu C_8H_{20}, \nu C_8H_{21}, \nu C_8H_{22}$ (91)	3045	2946	
$\nu C_8H_{20}, \nu C_8H_{21}, \nu C_8H_{22}$ (95)	3096	2991	
$\nu C_{36}H_{37}, \nu C_{36}H_{38}, \nu C_{36}H_{39}$ (91)	3102	2994	
$\nu C_{11}H_{25}, \nu C_{12}H_{26}, \nu C_{14}H_{28}, \nu C_{15}H_{29}$ (91)	3131	3015	
$\nu C_{11}H_{25}, \nu C_{12}H_{26}, \nu C_{14}H_{28}, \nu C_{15}H_{29}$ (93)	3133	3020	
$\nu C_3H_{17}, \nu C_6H_{18}, \nu C_7H_{19}$ (98)	3136	3021	
$\nu C_{11}H_{25}, \nu C_{12}H_{26}, \nu C_{14}H_{28}, \nu C_{15}H_{29}$ (99)	3163	3050	
$\nu C_3H_{17}, \nu C_6H_{18}, \nu C_7H_{19}$ (100)	3164	3052	
$\nu C_{11}H_{25}, \nu C_{12}H_{26}, \nu C_{14}H_{28}, \nu C_{15}H_{29}$ (100)	3173	3058	
$\nu C_3H_{17}, \nu C_6H_{18}, \nu C_7H_{19}$ (94)	3209	3093	
$\nu N_{30}H_{16}$ (100)	3166	3646	3520

Tablo 3.16. 48 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

Titreşim Türleri	Den. B3LY	B3PW91
τ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ C ₁ , τ N ₃₀ C ₁ C ₉ C ₁₀ (44), τ C ₁ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (39)	7	6
	15	15
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (32), τ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ C ₁ , τ N ₃₀ C ₁ C ₉ C ₁₀ (21)	22	25
τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (33), τ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ C ₁ , τ N ₃₀ C ₁ C ₉ C ₁₀ (20), τ N ₃₂ C ₁ C ₂ N ₃₁ (11)	29	33
δ C ₄ C ₃ N ₃₂ (17), δ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (16), δ N ₃₀ C ₁ C ₉ (18), τ C ₉ C ₁₁ C ₁₅ C ₁₀ (13)	35	43
τ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ C ₁ , τ N ₃₀ C ₁ C ₉ C ₁₀ (13), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (16), τ C ₄ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (30), τ N ₃₂ C ₁ C ₂ N ₃₁ (24)	67	65
	72	69
τ C ₂ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ (20), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (10), τ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ C ₉ (27), τ N ₃₁ C ₉ N ₃₀ C ₁ (12)	113	110
δ N ₃₀ C ₁ C ₉ (21), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (12)	130	124
τ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ C ₁ , τ N ₃₀ C ₁ C ₉ C ₁₀ (11), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₂ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (31), τ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ C ₉ (20)	157	152
τ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ , τ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (28), τ C ₃₅ C ₁₁ C ₁₃ C ₁₂ (39)	182	175
δ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (18), δ C ₆ C ₅ C ₄ (10), δ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ , δ N ₃₂ N ₃₁ C ₂ (14)	189	182
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₂ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (42), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (28)	190	184
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (15), δ C ₃₅ C ₁₂ C ₁₃ (20), τ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ , τ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (14)	222	213
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (20), δ C ₃₅ C ₁₂ C ₁₃ (22)	240	230
τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₂ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (12), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (17), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (15), τ N ₃₂ C ₁ C ₂ N ₃₁ (28)	261	255
δ C ₈ C ₅ C ₆ (15), τ H ₁₆ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ (12), τ C ₂ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ (20), τ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ C ₉ (13)	288	278
δ C ₈ C ₅ C ₆ (21)	290	289
τ C ₄ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (28), τ S ₃₃ C ₇ C ₆ C ₅ (20), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (12)	369	358
δ C ₁ C ₉ C ₁₀ , δ C ₉ C ₁₀ C ₁₅ (42), δ C ₃₅ C ₁₂ C ₁₃ (33)	378	363
δ O ₃₄ C ₂ N ₂₉ (14), δ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (10), δ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ , δ N ₃₂ N ₃₁ C ₂ (13), δ C ₈ C ₅ C ₆ (20)	391	376
ν C ₃₅ C ₁₂ (41), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (28)	410	398
δ O ₃₄ C ₂ N ₂₉ (11), δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ (33), δ C ₈ C ₅ C ₆ (12)	421	406
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ , τ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (10), τ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ , τ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (41), τ C ₃₅ C ₁₁ C ₁₃ C ₁₂ (12)	442	423
τ H ₁₆ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ (59), τ O ₃₄ N ₂₉ N ₃₁ C ₂ (11), τ N ₃₁ C ₉ N ₃₀ C ₁ (11)	454	448
τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ (17), τ C ₄ C ₃ N ₃₂ N ₃₁ (12), τ S ₃₃ C ₇ C ₆ C ₅ (48)	508	490
δ S ₃₃ C ₇ C ₆ (10), τ C ₃₅ C ₁₁ C ₁₃ C ₁₂ (16)	518	499
ν C ₈ C ₅ (17), δ S ₃₃ C ₇ C ₆ (18)	537	519
δ O ₃₄ C ₂ N ₂₉ (18), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (18)	565	544
δ O ₃₄ C ₂ N ₂₉ (13), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (21), δ C ₂ N ₂₉ N ₃₀ , δ N ₃₁ C ₁ N ₃₀ (13)	611	588
τ H ₁₈ C ₆ C ₇ S ₃₃ , τ H ₁₉ C ₇ S ₃₃ C ₄ (15), τ C ₅ C ₄ C ₃ N ₃₂ , τ C ₇ C ₆ C ₅ C ₄ (32), τ S ₃₃ C ₇ C ₆ C ₅ (12), τ C ₈ C ₆ C ₄ C ₅ (19)	620	594
ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (13), ν S ₃₃ C ₇ (11)	651	630
τ H ₁₆ N ₂₉ N ₃₀ C ₁ (16), τ N ₃₁ C ₉ N ₃₀ C ₁ (43)	653	631
τ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ , τ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ C ₁₀ , τ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (18), τ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ , τ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (45)	687	662
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (12), ν C ₃₅ C ₁₂ (17), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (32)	691	667

$\nu S_{33}C_7$ (15), $\delta C_6C_5C_4$ (16), $\delta S_{33}C_7C_6$ (12)	713	690
$\tau H_{18}C_6C_7S_{33}$, $\tau H_{19}C_7S_{33}C_4$ (79)	724	696
$\tau O_{34}N_{29}N_{31}C_2$ (81)	736	712
$\delta C_6C_5C_4$ (10), $\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (17)	752	726
$\delta C_2N_{29}N_{30}$, $\delta N_{31}C_1N_{30}$ (11), $\delta N_{29}N_{30}C_1$, $\delta N_{32}N_{31}C_2$ (12), $\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (18)	786	761
$\nu N_{29}C_2$, $\nu N_{31}C_1$ (18), $\delta C_2N_{29}N_{30}$, $\delta N_{31}C_1N_{30}$ (24), $\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (10)	798	771
$\nu N_{29}N_{30}$, $\nu N_{32}N_{31}$ (11), $\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (25)	809	787
$\nu S_{33}C_7$ (39), $\delta S_{33}C_7C_6$ (23)	829	810
νC_1C_9 , νC_9C_{10} (10), $\nu C_{35}C_{12}$ (10), $\delta C_{10}C_{15}C_{14}$, $\delta C_{11}C_{12}C_{13}$, $\delta C_{14}C_{13}C_{12}$, $\delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (13)	833	868
$\tau H_{18}C_6C_7S_{33}$, $\tau H_{19}C_7S_{33}C_4$ (82), $\tau S_{33}C_7C_6C_5$ (10)	885	849
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (67)	892	856
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (77)	910	875
$\delta H_{23}C_9C_{10}$ (58)	931	891
νC_8C_5 (12), $\delta H_{19}C_7S_{33}$ (10), $\delta C_5C_4C_3$, $\delta C_7C_6C_5$ (18), $\tau H_{20}C_8C_5C_6$, $\tau H_{21}C_8C_5C_6$, $\tau H_{22}C_8C_5C_6$ (15)	953	919
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}$, $\tau H_{26}C_{13}C_{14}C_{15}$, $\tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}$, $\tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (74), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}$, $\tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}$, $\tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (20)	977	940
$\tau H_{17}C_3N_{32}N_{31}$ (93)	984	944
$\nu C_{10}C_{15}$, $\nu C_{11}C_{12}$, $\nu C_{13}C_{12}$, $\nu C_{15}C_{14}$ (23), $\nu C_{14}C_{13}$ (10), $\delta C_{10}C_{15}C_{14}$, $\delta C_{11}C_{12}C_{13}$, $\delta C_{14}C_{13}C_{12}$, $\delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (57)	1007	966
$\delta N_{29}N_{30}C_1$, $\delta N_{32}N_{31}C_2$ (20), $\tau H_{20}C_8C_5C_6$, $\tau H_{21}C_8C_5C_6$, $\tau H_{22}C_8C_5C_6$, (20)	1019	983
$\delta N_{29}N_{30}C_1$, $\delta N_{32}N_{31}C_2$ (19), $\tau H_{20}C_8C_5C_6$, $\tau H_{21}C_8C_5C_6$, $\tau H_{22}C_8C_5C_6$ (14)	1031	996
$\delta H_{20}C_8H_{22}$, $\delta H_{21}C_8H_{20}$, $\delta H_{22}C_8H_{21}$ (10), $\tau H_{20}C_8C_5C_6$, $\tau H_{21}C_8C_5C_6$, $\tau H_{22}C_8C_5C_6$ (70)	1044	997
$\nu N_{29}C_2$, $\nu N_{31}C_1$ (13), $\nu N_{29}N_{30}$, $\nu N_{32}N_{31}$ (58)	1084	1053
$\nu C_{10}C_{15}$, $\nu C_{11}C_{12}$, $\nu C_{13}C_{12}$, $\nu C_{15}C_{14}$ (12), $\nu C_{14}C_{13}$ (21), $\delta C_{10}C_{15}C_{14}$, $\delta C_{11}C_{12}C_{13}$, $\delta C_{14}C_{13}C_{12}$, $\delta C_{15}C_{14}C_{13}$ (20), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}$, $\delta H_{26}C_{13}C_{14}$, $\delta H_{27}C_{14}C_{15}$, $\delta H_{28}C_{15}C_{14}$ (10)	1090	1060
$\nu C_{10}C_{15}$, $\nu C_{11}C_{12}$, $\nu C_{13}C_{12}$, $\nu C_{15}C_{14}$ (33), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}$, $\delta H_{26}C_{13}C_{14}$, $\delta H_{27}C_{14}C_{15}$, $\delta H_{28}C_{15}C_{14}$ (41)	1106	1065
$\delta H_{25}C_{11}C_{12}$, $\delta H_{26}C_{13}C_{14}$, $\delta H_{27}C_{14}C_{15}$, $\delta H_{28}C_{15}C_{14}$ (73)	1180	1131
$\nu N_{29}C_2$, $\nu N_{31}C_1$ (17), $\nu N_{29}N_{30}$, $\nu N_{32}N_{31}$ (15), $\delta H_{23}C_9C_{10}$ (32), $\delta C_2N_{29}N_{30}$, $\delta N_{31}C_1N_{30}$ (13), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$, $\tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (22)	1196	1144
$\nu N_{29}C_2$, $\nu N_{31}C_1$ (17), $\nu N_{29}N_{30}$, $\nu N_{32}N_{31}$ (15), $\delta H_{23}C_9C_{10}$ (32), $\delta C_2N_{29}N_{30}$, $\delta N_{31}C_1N_{30}$ (13), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$, $\tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (22)	1196	1164
$\nu C_{10}C_{15}$, $\nu C_{11}C_{12}$, $\nu C_{13}C_{12}$, $\nu C_{15}C_{14}$ (13), νC_1C_9 , νC_9C_{10} (29), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}$, $\delta H_{26}C_{13}C_{14}$, $\delta H_{27}C_{14}C_{15}$, $\delta H_{28}C_{15}C_{14}$ (24), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$, $\tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (12)	1213	1169
νC_4C_3 , νC_6C_5 (31), $\delta H_{18}C_6C_7$ (17)	1226	1185
$\delta H_{18}C_6C_7$ (14), $\delta H_{19}C_7S_{33}$ (13), $\delta C_6C_5C_4$ (14)	1253	1209
$\nu N_{29}N_{30}$, $\nu N_{32}N_{31}$ (13), $\delta C_2N_{29}N_{30}$, $\delta N_{31}C_1N_{30}$ (21), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$, $\tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (13)	1269	1231
$\nu C_{10}C_{15}$, $\nu C_{11}C_{12}$, $\nu C_{13}C_{12}$, $\nu C_{15}C_{14}$ (24), $\delta H_{25}C_{11}C_{12}$, $\delta H_{26}C_{13}C_{14}$, $\delta H_{27}C_{14}C_{15}$, $\delta H_{28}C_{15}C_{14}$ (26), $\delta H_{23}C_9C_{10}$ (14)	1304	1252
$\nu N_{29}C_2$, $\nu N_{31}C_1$ (12), $\delta H_{17}C_3N_{32}$ (12), $\tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}$, $\tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}$ (23)	1312	1269

ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (39), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ δ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ δ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ (31)	1325	1292	
δ H ₁₇ C ₃ N ₃₂ (39), τ H ₂₃ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ , τ H ₂₄ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ (15)	1369	1314	
δ H ₁₆ N ₂₉ N ₃₀ (64)	1383	1335	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), ν C ₄ C ₃ , ν C ₆ C ₅ (13), δ H ₁₉ C ₇ S ₃₃ (17), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (18)	1394	1339	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (58)	1411	1359	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (24), ν N ₂₉ C ₂ , ν N ₃₁ C ₁ (16), ν C ₁ C ₉ , ν C ₉ C ₁₀ (10)	1432	1389	
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (16), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ δ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ δ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ (30), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (16)	1446	1393	
δ H ₂₄ C ₉ H ₂₃ (78)	1461	1395	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (16), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (10)	1464	1407	
δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (78), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (20)	1472	1410	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ ((10), δ H ₂₀ C ₈ H ₂₂ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , δ H ₂₂ C ₈ H ₂₁ (39), τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₆ , τ H ₂₂ C ₈ C ₅ C ₆ (15)	1485	1431	
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (27), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ δ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ δ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ (51)	1497	1442	
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (52)	1568	1517	
ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (26), ν C ₁₄ C ₁₃ (30), δ H ₂₅ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₆ C ₁₃ C ₁₄ δ H ₂₇ C ₁₄ C ₁₅ δ H ₂₈ C ₁₅ C ₁₄ (14), δ C ₁₀ C ₁₅ C ₁₄ , δ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , δ C ₁₅ C ₁₄ C ₁₃ (24)	1601	1553	
ν N ₃₀ C ₁ , ν N ₃₂ C ₃ (55)	1589	1621	1574
ν N ₃₀ C ₁ , ν N ₃₂ C ₃ (12), ν C ₁₀ C ₁₅ , ν C ₁₁ C ₁₂ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₅ C ₁₄ (43)	1626	1577	
ν N ₃₀ C ₁ , ν N ₃₂ C ₃ (54)	1613	1633	1585
ν O ₃₄ C ₂ (73), ν N ₂₉ C ₂ , ν N ₃₁ C ₁ (10)	1705	1784	1735
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (97)	3000	2893	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (99)	3014	2906	
ν C ₉ H ₂₃ , ν C ₉ H ₂₄ (99)	3041	2937	
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (95)	3045	2946	
ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ , ν C ₈ H ₂₂ (96)	3096	2992	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (98)	3136	3014	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₃ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₇ , ν C ₁₅ H ₂₈ (97)	3138	3027	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₃ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₇ , ν C ₁₅ H ₂₈ (97)	3154	3042	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₃ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₇ , ν C ₁₅ H ₂₈ (99)	3161	3047	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (100)	3164	3053	
ν C ₁₁ H ₂₅ , ν C ₁₃ H ₂₆ , ν C ₁₄ H ₂₇ , ν C ₁₅ H ₂₈ (92)	3174	3060	
ν C ₃ H ₁₇ , ν C ₆ H ₁₈ , ν C ₇ H ₁₉ (95)	3210	3094	
ν N ₂₉ H ₁₆ (100)	3165	3644	3518

Tablo 3.17. 49 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

Titreşim Türleri	Den.	B3LY	B3PW91
$\tau C_3N_{32}N_{31}C_1, \tau N_{30}C_1C_9C_{10}$ (84)	13		11
$\tau C_3N_{32}N_{31}C_1, \tau N_{30}C_1C_9C_{10}$ (22), $\tau C_5C_4C_3N_{32}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (16), $\tau C_1C_9C_{10}C_{11}$ (19), $\tau N_{32}C_1C_2N_{31}$ (15)	22		21
$\delta C_4C_3N_{32}$ (10), $\delta C_3N_{32}N_{31}$ (10), $\delta N_{30}C_1C_9$ (16), $\delta C_1C_9C_{10}$ (11), $\delta C_1C_9C_{10}$ (11), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (23)	28		26
	31		29
$\delta C_4C_3N_{32}$ (24), $\delta C_3N_{32}N_{31}$ (16), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (11), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (16)	59		56
$\tau C_3N_{32}N_{31}C_1, \tau N_{30}C_1C_9C_{10}$ (13), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (18), $\tau C_4C_3N_{32}N_{31}$ (30), $\tau N_{32}C_1C_2N_{31}$ (24)	67		65
$\tau C_2N_{29}N_{30}C_1$ (21), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (12), $\tau N_{29}N_{23}C_1C_9$ (26), $\tau N_{31}C_9N_{30}C_1$ (12)	116		112
$\delta N_{30}C_1C_9$ (32), $\tau C_5C_4C_3N_{32}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (13), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (10)	123		117
$\delta C_1C_9C_{10}, \delta C_9C_{10}C_{15}$ (27), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (20), $\tau C_{35}C_{12}C_{14}C_{13}$ (16)	142		136
$\tau C_3N_{32}N_{31}C_1, \tau N_{30}C_1C_9C_{10}$ (11), $\tau C_5C_4C_3N_{32}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (20), $\tau N_{29}N_{30}C_1C_9$ (22)	159		154
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (10), $\delta C_3N_{32}N_{31}$ (21), $\delta C_6C_5C_4$ (12), $\delta N_{29}N_{30}C_1, \delta N_{32}N_{31}C_2$ (15)	190		183
$\tau C_5C_4C_3N_{32}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (44), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (28)	192		185
$\delta C_1C_9C_{10}, \delta C_9C_{10}C_{15}$ (20), $\delta C_{35}C_{13}C_{14}$ (49)	247		238
$\tau C_5C_4C_3N_{32}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (11), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (17), $\tau C_8C_6C_4C_5$ (13), $\tau N_{32}C_1C_2N_{31}$ (28)	263		257
$\delta C_8C_5C_6$ (35)	280		269
$\tau H_{16}N_{29}N_{30}C_1$ (20), $\tau C_2N_{29}N_{30}C_1$ (30), $\tau N_{29}N_{30}C_1C_9$ (24)	289		288
$\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (18), $\tau C_{35}C_{12}C_{14}C_{13}$ (34), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (19)	310		299
$\delta C_1C_9C_{10}, \delta C_9C_{10}C_{15}$ (41), $\delta C_{35}C_{13}C_{14}$ (29)	364		347
$\tau C_6C_5C_4C_3$ (10), $\tau C_4C_3N_{32}N_{31}$ (29)	369		359
$\delta C_3N_{32}N_{31}$ (10), $\delta C_8C_5C_6$ (28)	387		372
$\nu C_{35}C_{13}$ (13), $\delta O_{34}C_2N_{29}$ (21)	410		396
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}$ (10), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (74)	415		396
$\nu C_{35}C_{13}$ (15), $\delta C_5C_4C_3$ (29), $\delta C_8C_5C_6$ (10)	431		416
$\tau H_{16}N_{29}N_{30}C_1$ (58), $\tau O_{34}N_{29}N_{31}C_2$ (10), $\tau N_{31}C_9N_{30}C_1$ (12)	455		448
$\tau C_{35}C_{12}C_{14}C_{13}$ (20), $\tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}$ (13)	502		483
$\tau C_6C_5C_4C_3$ (18), $\tau C_4C_3N_{32}N_{31}$ (12), $\tau S_{33}C_7C_6C_5$ (47)	508		490
νC_8C_5 (20), $\delta S_{33}C_7C_6$ (28)	532		516
$N_{29}C_2, N_{31}C_1$ (10), $\delta C_4C_3N_{32}$ (10), $\delta O_{34}C_2N_{29}$ (32)	585		566
	620		594
$\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (70)	641		612
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5$ (13), $\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$ (16), $\delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}$ (14)	643		623
$\tau H_{16}N_{29}N_{30}C_1$ (14), $\tau N_{31}C_9N_{30}C_1$ (39)	655		632
$C_{35}C_{13}$ (20), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (17)	667		646
$\nu S_{33}C_7$ (14), $\tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}$ (33)	689		665

$S_{33}C_7(11), \delta C_6C_5C_4(16), \delta S_{33}C_7C_6(10), \tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}(20)$	720	696
$\tau H_{18}C_6C_7S_{33}, \tau H_{19}C_7S_{33}C_4(79)$	724	697
$\tau O_{34}N_{29}N_{31}C_2(82)$	736	712
	759	733
$\delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}(17), \delta N_{29}N_{30}C_1, \delta N_{32}N_{31}C_2(16)$	789	764
$\nu N_{29}C_2, \nu N_{31}C_1(10), \nu N_{29}N_{30}, \nu N_{32}N_{31}(19), \delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}(18)$	798	778
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(10), \nu C_1C_9, \nu C_9C_{10}(15)$	821	792
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}(98)$	826	793
$\nu S_{33}C_7(43), \delta S_{33}C_7C_6(24)$	828	809
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}(28), \tau C_9C_{11}C_{15}C_{10}(13)$	860	828
$\tau H_{18}C_6C_7S_{33}, \tau H_{19}C_7S_{33}C_4(82), \tau S_{33}C_7C_6C_5(10)$	886	850
$\delta H_{23}C_9C_{10}(33), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(31), \tau C_1C_9C_{10}C_{11}(10)$	925	884
$\nu C_8C_5(12), \delta H_{19}C_7S_{33}(10), \delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5(18), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(17)$	953	916
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}(76), \tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}(10)$	954	919
$\tau H_{25}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{26}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{27}C_{14}C_{15}C_{10}, \tau H_{28}C_{15}C_{14}C_{13}(76), \tau C_{10}C_{15}C_{14}C_{13}, \tau C_{11}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau C_{15}C_{14}C_{13}C_{12}(22)$	962	927
$\tau H_{17}C_3N_{32}N_{31}(93)$	986	947
$\delta N_{29}N_{30}C_1, \delta N_{32}N_{31}C_2(22), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(19)$	1018	981
$\delta C_{10}C_{15}C_{14}, \delta C_{11}C_{12}C_{13}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}, \delta C_{15}C_{14}C_{13}(73)$	1023	983
$\delta N_{29}N_{30}C_1, \delta N_{32}N_{31}C_2(17), \tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(18)$	1031	996
$\tau H_{20}C_8C_5C_6, \tau H_{21}C_8C_5C_6, \tau H_{22}C_8C_5C_6(62)$	1044	996
$\nu N_{29}C_2, \nu N_{31}C_1(13), \nu N_{29}N_{30}, \nu N_{32}N_{31}(58)$	1084	1059
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(53), \nu C_{35}C_{13}(18)$	1090	1061
$\nu C_5C_4, \nu C_7C_6(16), \delta H_{18}C_6C_7(30), \delta H_{19}C_7S_{33}(34)$	1107	1073
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(31), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{28}C_{15}C_{14}(59)$	1120	1074
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(21), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{28}C_{15}C_{14}(74)$	1192	1142
$\nu C_{10}C_{15}(10), \nu C_4C_3, \nu C_6C_5(10), \nu N_{29}C_2, \nu N_{31}C_1(20), \nu N_{29}N_{30}, \nu N_{32}N_{31}(17), \delta H_{23}C_9C_{10}, \delta H_{24}C_9C_{23}(42), \delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}(15), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(28)$	1196	1145
$\nu C_{10}C_{15}(10), \nu C_4C_3, \nu C_6C_5(10), \nu N_{29}C_2, \nu N_{31}C_1(20), \nu N_{29}N_{30}, \nu N_{32}N_{31}(17), \delta H_{23}C_9C_{10}, \delta H_{24}C_9C_{23}(42), \delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}(15), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(28)$	1197	1164
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(11), \nu C_1C_9, \nu C_9C_{10}(32), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(14)$	1212	1168
$\nu C_4C_3, \nu C_6C_5(31), \delta H_{18}C_6C_7(17)$	1226	1185
$\delta H_{18}C_6C_7(14), \delta H_{19}C_7S_{33}(13), \delta C_6C_5C_4(14)$	1253	1209
$\nu N_{29}N_{30}, \nu N_{32}N_{31}(14), \delta C_2N_{29}N_{30}, \delta N_{31}C_1N_{30}(24), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(12)$	1270	1235
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(49), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{28}C_{15}C_{14}(24)$	1307	1258
$\nu N_{29}C_2, \nu N_{31}C_1(15), \delta H_{17}C_3N_{32}(15), \tau H_{23}C_9C_{10}C_{11}, \tau H_{24}C_9C_{10}C_{11}(26)$	1312	1270
$\nu C_{11}C_{12}, \nu C_{13}C_{12}, \nu C_{14}C_{13}, \nu C_{15}C_{14}(15), \nu C_{10}C_{15}(14), \delta H_{25}C_{11}C_{12}, \delta H_{26}C_{12}C_{13}, \delta H_{27}C_{14}C_{15}, \delta H_{28}C_{15}C_{14}(37), \delta H_{23}C_9C_{10}(12)$	1328	1289

$\delta \text{H}_{17}\text{C}_3\text{N}_{32}$ (38), $\delta \text{H}_{23}\text{C}_9\text{C}_{10}\text{C}_{11}$, $\delta \text{H}_{24}\text{C}_9\text{C}_{10}\text{C}_{11}$ (16)	1370	1316
$\delta \text{H}_{16}\text{N}_{29}\text{N}_{30}$ (63)	1383	1335
$\nu \text{C}_5\text{C}_4$, $\nu \text{C}_7\text{C}_6$ (11), $\nu \text{C}_4\text{C}_3$, $\nu \text{C}_6\text{C}_5$ (12), $\delta \text{H}_{19}\text{C}_7\text{S}_{33}$ (17), $\delta \text{H}_{20}\text{C}_8\text{H}_{22}$, $\delta \text{H}_{21}\text{C}_8\text{H}_{20}$, $\delta \text{H}_{22}\text{C}_8\text{H}_{21}$ (17)	1393	1339
$\delta \text{H}_{20}\text{C}_8\text{H}_{22}$, $\delta \text{H}_{21}\text{C}_8\text{H}_{20}$, $\delta \text{H}_{22}\text{C}_8\text{H}_{21}$ (57)	1411	1359
	1425	1372
$\nu \text{C}_5\text{C}_4$, $\nu \text{C}_7\text{C}_6$ (25), $\nu \text{N}_{29}\text{C}_2$, $\nu \text{N}_{31}\text{C}_1$ (15), $\nu \text{C}_1\text{C}_9$, $\nu \text{C}_9\text{C}_{10}$ (11)	1432	1389
$\delta \text{H}_{24}\text{C}_9\text{H}_{23}$ (80)	1460	1395
$\nu \text{C}_5\text{C}_4$, $\nu \text{C}_7\text{C}_6$ (15), $\delta \text{H}_{20}\text{C}_8\text{H}_{22}$, $\delta \text{H}_{21}\text{C}_8\text{H}_{20}$, $\delta \text{H}_{22}\text{C}_8\text{H}_{21}$ (20)	1464	1407
$\delta \text{H}_{20}\text{C}_8\text{H}_{22}$, $\delta \text{H}_{21}\text{C}_8\text{H}_{20}$, $\delta \text{H}_{22}\text{C}_8\text{H}_{21}$ (39)	1472	1410
$\delta \text{H}_{25}\text{C}_{11}\text{C}_{12}$, $\delta \text{H}_{26}\text{C}_{12}\text{C}_{13}$, $\delta \text{H}_{27}\text{C}_{14}\text{C}_{15}$, $\delta \text{H}_{28}\text{C}_{15}\text{C}_{14}$ (64)	1485	1431
$\nu \text{C}_{11}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{13}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{14}\text{C}_{13}$, $\nu \text{C}_{15}\text{C}_{14}$ (12),	1511	1455
$\nu \text{C}_5\text{C}_4$, $\nu \text{C}_7\text{C}_6$ (52)	1568	1517
$\nu \text{C}_{11}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{13}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{14}\text{C}_{13}$, $\nu \text{C}_{15}\text{C}_{14}$ (39), $\nu \text{C}_{10}\text{C}_{15}$ (24), $\delta \text{C}_{10}\text{C}_{15}\text{C}_{14}$, $\delta \text{C}_{11}\text{C}_{12}\text{C}_{13}$, $\delta \text{C}_{14}\text{C}_{13}\text{C}_{12}$, $\delta \text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{C}_{13}$ (13)	1604	1554
$\nu \text{N}_{30}\text{C}_1$, $\nu \text{N}_{32}\text{C}_3$ (55)	1584	1621
$\nu \text{N}_{30}\text{C}_1$, $\nu \text{N}_{32}\text{C}_3$ (10), $\nu \text{C}_{11}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{13}\text{C}_{12}$, $\nu \text{C}_{14}\text{C}_{13}$, $\nu \text{C}_{15}\text{C}_{14}$ (37)	1626	1577
$\nu \text{N}_{30}\text{C}_1$, $\nu \text{N}_{32}\text{C}_3$ (58)	1632	1585
$\nu \text{O}_{34}\text{C}_2$ (73)	1703	1785
	1785	1735
$\nu \text{C}_8\text{H}_{20}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{21}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{22}$ (99)	3000	2893
$\nu \text{C}_9\text{H}_{23}$, $\nu \text{C}_9\text{H}_{24}$ (100)	3013	2905
$\nu \text{C}_9\text{H}_{23}$, $\nu \text{C}_9\text{H}_{24}$ (100)	3040	2936
$\nu \text{C}_8\text{H}_{20}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{21}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{22}$ (100)	3045	2946
$\nu \text{C}_8\text{H}_{20}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{21}$, $\nu \text{C}_8\text{H}_{22}$ (98)	3096	2992
$\nu \text{C}_3\text{H}_{17}$, $\nu \text{C}_6\text{H}_{18}$, $\nu \text{C}_7\text{H}_{19}$ (98)	3137	3016
$\nu \text{C}_{11}\text{H}_{25}$, $\nu \text{C}_{12}\text{H}_{26}$, $\nu \text{C}_{14}\text{H}_{27}$, $\nu \text{C}_{15}\text{H}_{28}$ (199)	3139	3027
$\nu \text{C}_{11}\text{H}_{25}$, $\nu \text{C}_{12}\text{H}_{26}$, $\nu \text{C}_{14}\text{H}_{27}$, $\nu \text{C}_{15}\text{H}_{28}$ (199)	3139	3027
$\nu \text{C}_3\text{H}_{17}$, $\nu \text{C}_6\text{H}_{18}$, $\nu \text{C}_7\text{H}_{19}$ (100)	3164	3053
$\nu \text{C}_{11}\text{H}_{25}$, $\nu \text{C}_{12}\text{H}_{26}$, $\nu \text{C}_{14}\text{H}_{27}$, $\nu \text{C}_{15}\text{H}_{28}$ (99)	3171	3058
$\nu \text{C}_{11}\text{H}_{25}$, $\nu \text{C}_{12}\text{H}_{26}$, $\nu \text{C}_{14}\text{H}_{27}$, $\nu \text{C}_{15}\text{H}_{28}$ (99)	3172	3058
$\nu \text{C}_3\text{H}_{17}$, $\nu \text{C}_6\text{H}_{18}$, $\nu \text{C}_7\text{H}_{19}$ (94)	3209	3093
$\nu \text{N}_{29}\text{H}_{16}$ (100)	3184	3645
	3645	3519

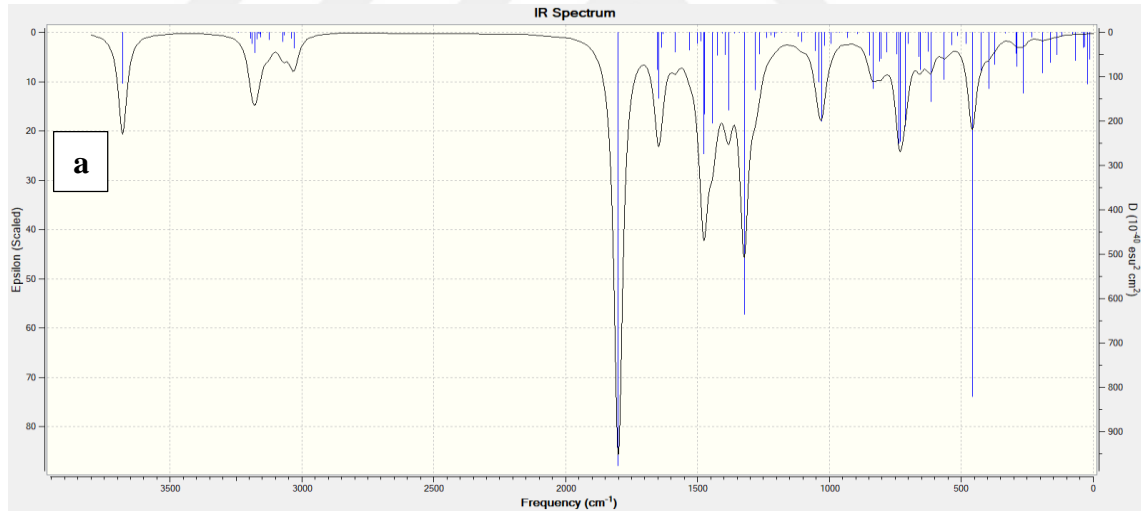
Tablo 3.18. 50 Bileşiğinin deneysel ve skalalı teorik frekans değerleri ile Veda4f yardımıyla oluşturulan titreşim türleri

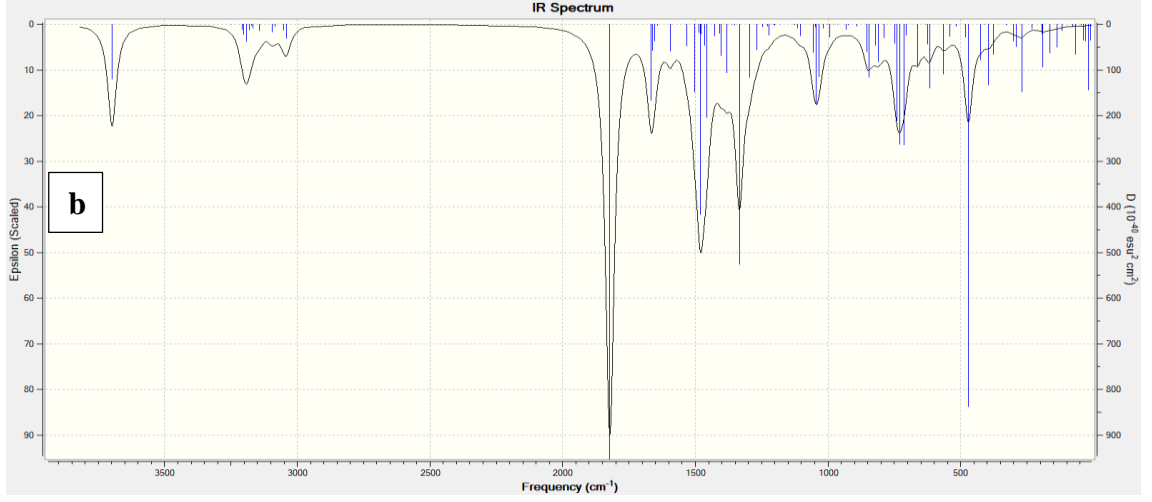
Titreşim Türleri	Den.	B3LY B3PW91
$\tau C_3N_{30}N_{29}C_1, \tau N_{28}C_1C_9C_{10}$ (46), $\tau C_5C_4C_3N_{30}, C_7C_6C_5C_4$ (18), $\tau N_{30}C_1C_2N_{29}$ (17)	19	18
$\tau C_3N_{30}N_{29}C_1, \tau N_{28}C_1C_9C_{10}$ (49), $\tau N_{30}C_1C_2N_{29}$ (11)	31	28
$\tau H_{19}C_8C_5C_4, \tau H_{20}C_8C_5C_4, \tau H_{21}C_8C_5C_4$ (50), $\tau C_3N_{30}N_{29}C_1, \tau N_{28}C_1C_9C_{10}$ (17)	37	34
$\delta C_4C_3N_{30}$ (16), $\delta C_3N_{30}N_{29}$ (15)	47	45
$\tau C_3N_{30}N_{29}C_1, \tau N_{28}C_1C_9C_{10}$ (26), $\tau C_4C_3N_{30}N_{29}$ (12), $\tau N_{30}C_1C_2N_{29}$ (10)	70	68
$\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ τ (15), $\tau N_{27}N_{28}C_1C_9$ (27), $\tau N_{29}C_9N_{28}C_1$ (10), $\tau C_1C_{10}C_{14}C_9$ (15)	83	80
$\delta N_{28}C_1C_9$ (28), $\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$, (10), $\delta C_1C_9C_{14}$ (15)	113	108
$\tau C_3N_{30}N_{29}C_1, \tau N_{28}C_1C_9C_{10}$ (13), $\tau C_5C_4C_3N_{30}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (25), $\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ (14)	135	129
$\tau C_5C_4C_3N_{30}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (24), $\tau C_8C_4C_6C_5$ (18)	182	176
$\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ (12), $\tau C_8C_4C_6C_5$ (12)	193	186
201,47	200	192
$\delta C_1C_9C_{14}$ (22), $\tau C_2N_{27}N_{28}C_1$ (19)	216	209
$\tau C_5C_4C_3N_{30}, C_7C_6C_5C_4$ (12), $\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ (11), $\tau C_8C_4C_6C_5$ (18), $\tau N_{30}C_1C_2N_{29}$ (29)	263	258
$\delta C_8C_5C_6$ (11), $\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ (10), $\tau N_{27}N_{28}C_1C_9$ (10)	305	296
νC_1C_9 (21), $\delta C_6C_5C_4, \delta C_9C_{14}C_{13}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}$ (15)	323	313
$\delta C_1C_9C_{14}$ (11), $\delta C_8C_5C_6$ (33)	352	340
$\tau C_4C_3N_{30}N_{29}$ (26), $\tau S_{31}C_7C_6C_5$ (18)	374	362
$\delta O_{32}C_2N_{27}$ (18), $\tau C_6C_5C_4C_3, \tau C_9C_{14}C_{13}C_{12}, \tau C_{14}C_{13}C_{12}C_{11}$ (14)	406	389
$\delta O_{32}C_2N_{27}$ (11), $\tau C_{10}C_{11}C_{12}C_{13}$ (11), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (24)	411	394
$\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$ (17), $\tau H_{15}N_{27}N_{28}C_1$ (10)	437	422
$\tau H_{15}N_{27}N_{28}C_1$ (38)	466	454
$\tau C_4C_3N_{30}N_{29}$ (12), $\tau S_{31}C_7C_6C_5$ (47)	508	491
$\tau H_{15}N_{27}N_{28}C_1$ (22), $\tau C_1C_{10}C_{14}C_9$ (22)	515	497
νC_8C_5 (22), $\delta S_{31}C_7C_6$ (22)	539	522
$\delta O_{32}C_2N_{27}$ (31), $\delta N_{28}C_1C_9$ (14)	616	593
$\tau C_5C_4C_3N_{30}, \tau C_7C_6C_5C_4$ (31), $\tau S_{31}C_7C_6C_5$ (10), $\tau C_8C_4C_6C_5$ (16)	621	595
$\delta C_{10}C_{11}C_{12}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}$ (32), $\delta C_6C_5C_4, \delta C_9C_{14}C_{13}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}$ (35)	628	600
$\nu S_{31}C_7$ (10), $\delta C_5C_4C_3, \delta C_7C_6C_5$,(16), $\delta C_2N_{27}N_{28}, \delta N_{29}C_1N_{28}$ (11)	648	627
$\nu S_{31}C_7$ (13), $\delta C_{10}C_{11}C_{12}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}$ (27), $\delta C_{10}C_{11}C_{12}, \delta C_{13}C_{12}C_{11}, \delta C_6C_5C_4, \delta C_9C_{14}C_{13}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}$ (13)	680	655
$\tau H_{22}C_{10}C_{11}C_{12}, \tau H_{23}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{24}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{25}C_{13}C_{14}C_9$ (24), $\tau N_{29}C_9N_{28}C_1$ (34)	698	672
$\tau H_{22}C_{10}C_{11}C_{12}, \tau H_{23}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{24}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{25}C_{13}C_{14}C_9$ (29), $\tau C_{10}C_{11}C_{12}C_{13}$ (33), $\tau C_6C_5C_4C_3$ (10)	701	674
$\nu S_{31}C_7$ (14), $\delta C_6C_5C_4, \delta C_9C_{14}C_{13}, \delta C_{14}C_{13}C_{12}$ (15), $\delta S_{31}C_7C_6$ (14)	722	695
$\tau H_{17}C_6C_7S_{31}, \tau H_{18}C_7S_{31}C_4, \tau H_{26}C_{14}C_{13}C_{12}$ (71)	724	701
$\tau O_{32}N_{27}N_{29}C_2$ (73),	738	714
$\tau H_{22}C_{10}C_{11}C_{12}, \tau H_{23}C_{11}C_{12}C_{13}, \tau H_{24}C_{12}C_{13}C_{14}, \tau H_{25}C_{13}C_{14}C_9$ (36), $\tau N_{29}C_9N_{28}C_1$ (11), $\tau C_1C_{10}C_{14}C_9$ (20)	780	749
$\delta C_3N_{30}N_{29}$ (12), $\delta C_2N_{27}N_{28}, N_{29}C_1N_{28}$ (15), $\delta N_{27}N_{28}C_1, \delta N_{30}N_{29}C_2$ (14)	786	763
$\nu N_{27}C_2, \nu N_{29}C_1$ (18), $\nu N_{27}N_{28}, \nu N_{30}N_{29}$ (14), $\delta C_2N_7N_{28}, \delta N_{29}C_1N_{28}$ (23)	804	781

ν S ₃₁ C ₇ (42), δ S ₃₁ C ₇ C ₆ (25)	828	810
τ H ₁₇ C ₆ C ₇ S ₃₁ (14), τ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , τ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ C ₉ (54), τ H ₁₇ C ₆ C ₇ S ₃₁ , τ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ C ₄ , τ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (12)	849	816
τ H ₁₇ C ₆ C ₇ S ₃₁ , τ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ C ₄ , τ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (76)	885	849
τ H ₁₇ C ₆ C ₇ S ₃₁ , τ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ C ₄ , τ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (28), τ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , τ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ C ₉ (55)	934	896
δ C ₅ C ₄ C ₃ , δ C ₇ C ₆ C ₅ , (15), δ N ₂₇ N ₂₈ C ₁ , δ N ₃₀ N ₂₉ C ₂ (11)	951	917
δ C ₂ N ₂₇ N ₂₈ , δ N ₂₉ C ₁ N ₂₈ (10), δ N ₂₇ N ₂₈ C ₁ , δ N ₃₀ N ₂₉ C ₂ (26)	961	928
τ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , τ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ C ₉ (45)	980	942
τ H ₁₆ C ₃ N ₃₀ N ₂₉ (86)	984	944
τ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , τ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ C ₁₃ , τ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ C ₁₄ , τ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ C ₉ (67), τ C ₆ C ₅ C ₄ C ₃ , τ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , τ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ (18)	997	958
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (48), δ C ₆ C ₅ C ₄ , δ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (38)	1008	968
ν C ₈ C ₅ (11), τ H ₁₉ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₄ (33)	1026	986
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (31), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (13), δ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₆ C ₅ C ₄ , δ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (18), δ C ₆ C ₅ C ₄ , δ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (10)	1042	997
δ H ₁₉ C ₈ H ₂₁ , δ H ₂₀ C ₈ H ₁₉ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ (14), τ H ₁₉ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₄ (57)	1044	1005
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (21), ν N ₂₇ N ₂₈ , ν N ₃₀ N ₂₉ (34)	1087	1053
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (13), ν N ₂₇ N ₂₈ , ν N ₃₀ N ₂₉ (10), δ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ (11), δ H ₁₇ C ₆ C ₇ , δ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ (16)	1104	1060
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), δ H ₁₇ C ₆ C ₇ , H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ (17), δ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ (24)	1105	1079
ν N ₂₇ C ₂ , N ₂₉ C ₁ , (14), δ C ₂ N ₂₇ N ₂₈ , δ N ₂₉ C ₁ N ₂₈ (10)	1142	1110
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (17), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (70)	1173	1124
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (13), ν N ₂₇ C ₂ , ν N ₂₉ C ₁ (10), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (26)	1194	1146
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (10), ν N ₂₇ C ₂ , ν N ₂₉ C ₁ (10), ν N ₂₇ N ₂₈ , ν N ₃₀ N ₂₉ (10), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (19)	1198	1165
ν C ₆ C ₅ (18)	1227	1186
ν C ₄ C ₃ , ν C ₉ C ₁₄ (10), δ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ (13)	1253	1210
ν N ₂₇ N ₂₈ , ν N ₃₀ N ₂₉ (21), δ C ₂ N ₂₇ N ₂₈ , δ N ₂₉ C ₁ N ₂₈ (13)	1291	1259
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (29), ν C ₄ C ₃ , ν C ₉ C ₁₄ (33)	1315	1275
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (23), δ H ₁₇ C ₆ C ₇ , δ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ (15), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (34), δ H ₁₇ C ₆ C ₇ , δ H ₂₆ C ₁₄ C ₁₃ (14)	1343	1299
ν N ₂₇ C ₂ , ν N ₂₉ C ₁ (10), δ H ₁₆ C ₃ N ₃₀ (42)	1356	1304
δ H ₁₅ N ₂₇ N ₂₈ (46)	1386	1335
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (11), ν C ₆ C ₅ (16), δ H ₁₅ N ₂₇ N ₂₈ (10), δ H ₁₈ C ₇ S ₃₁ (15), δ H ₁₉ C ₈ H ₂₁ , δ H ₂₀ C ₈ H ₁₉ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ (16)	1394	1343
δ H ₁₉ C ₈ H ₂₁ , δ H ₂₀ C ₈ H ₂₉ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ (57)	1409	1358
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (17), ν N ₂₇ C ₂ , ν N ₂₉ C ₁ (11), ν C ₁ C ₉ (10), δ H ₁₅ N ₂₇ N ₂₈ (10)	1419	1376
ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (24), ν C ₄ C ₃ , ν C ₉ C ₁₄ (10), δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (10)	1457	1402
δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (26)	1467	1410
δ H ₁₉ C ₈ H ₂₁ , δ H ₂₀ C ₈ H ₁₉ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ (72), τ H ₁₉ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₄ (22)	1475	1411
δ H ₁₉ C ₈ H ₂₁ , δ H ₂₀ C ₈ H ₁₉ , δ H ₂₁ C ₈ H ₂₀ , (43), τ H ₁₉ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₀ C ₈ C ₅ C ₄ , τ H ₂₁ C ₈ C ₅ C ₄ , (14)	1484	1428
δ H ₂₂ C ₁₀ C ₁₁ , δ H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂ , δ H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃ , δ H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄ (28), δ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₆ C ₅ C ₄ , δ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ (10)	1515	1460

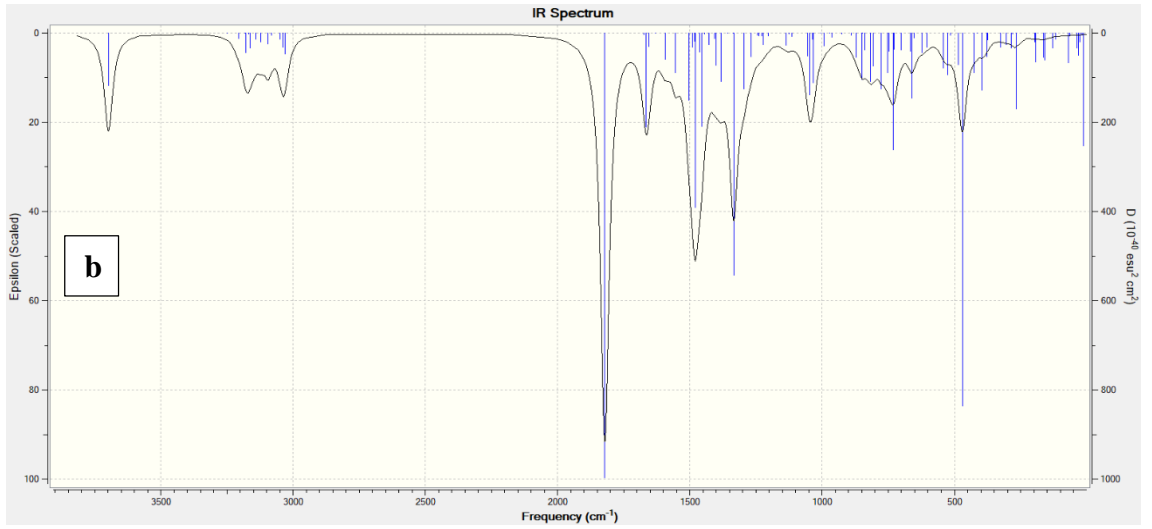
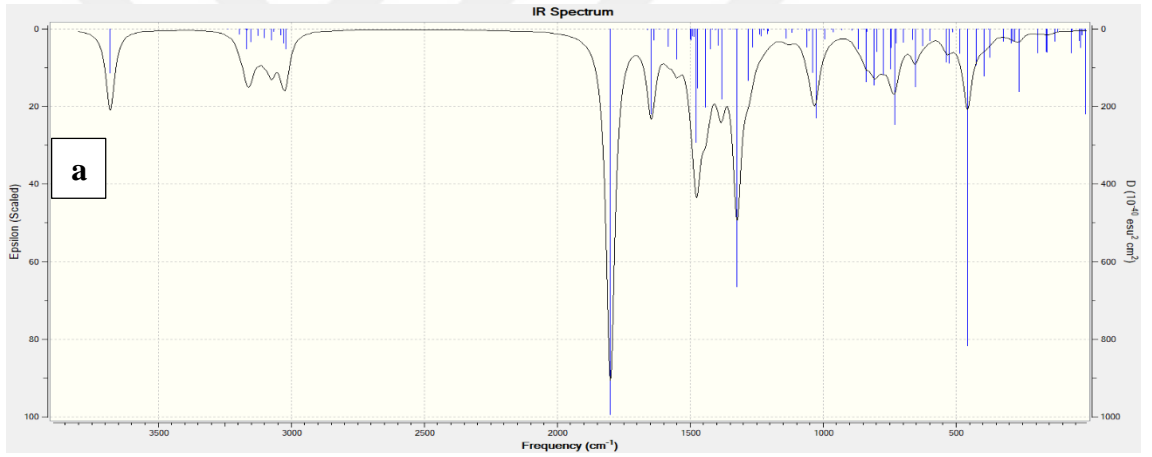
ν N ₂₈ C ₁ , ν N ₃₀ C ₃ (14), ν C ₅ C ₄ , ν C ₇ C ₆ (46)	1565	1514	
ν N ₂₈ C ₁ , ν N ₃₀ C ₃ (37), ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ , (13)	1578	1531	
ν N ₂₈ C ₁ , ν N ₃₀ C ₃ (11), ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (18), ν C ₄ C ₃ , ν C ₉ C ₁₄ (12), δ C ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ , δ C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , δ C ₆ C ₅ C ₄ , δ C ₉ C ₁₄ C ₁₃ , δ C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂ , (10)	1613	1564	
ν N ₂₈ C ₁ , ν N ₃₀ C ₃ (69)	1578	1622	1575
ν C ₁₀ C ₁₁ , ν C ₁₂ C ₁₁ , ν C ₁₃ C ₁₂ , ν C ₁₄ C ₁₃ (48)	1632	1581	
ν O ₃₂ C ₂ (73)	1700	1783	1734
ν C ₈ H ₁₉ , ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ (91)	2999	2892	
ν C ₈ H ₁₉ , ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ (99)	3048	2949	
ν C ₈ H ₁₉ , ν C ₈ H ₂₀ , ν C ₈ H ₂₁ (90)	3092	2988	
ν C ₁₀ H ₂₂ , ν C ₁₁ H ₂₃ , ν C ₁₂ H ₂₄ , ν C ₁₃ H ₂₅ (93)	3135	3019	
ν C ₃ H ₁₆ , ν C ₆ H ₁₇ , ν C ₇ H ₁₈ , ν C ₁₄ H ₂₆ (99)	3140	3023	
ν C ₁₀ H ₂₂ , ν C ₁₁ H ₂₃ , ν C ₁₂ H ₂₄ , ν C ₁₃ H ₂₅ (98)	3146	3034	
ν C ₁₀ H ₂₂ , ν C ₁₁ H ₂₃ , ν C ₁₂ H ₂₄ , ν C ₁₃ H ₂₅ (63)	3157	3045	
ν C ₃ H ₁₆ , ν C ₆ H ₁₇ , ν C ₇ H ₁₈ , ν C ₁₄ H ₂₆ (64)	3164	3053	
ν C ₁₀ H ₂₂ , ν C ₁₁ H ₂₃ , ν C ₁₂ H ₂₄ , ν C ₁₃ H ₂₅ (92)	3173	3057	
ν C ₃ H ₁₆ , ν C ₆ H ₁₇ , ν C ₇ H ₁₈ , ν C ₁₄ H ₂₆ (97)	3199	3081	
ν C ₃ H ₁₆ , ν C ₆ H ₁₇ , ν C ₇ H ₁₈ , ν C ₁₄ H ₂₆ (100)	3210	3094	
ν N ₂₇ H ₁₅ (100)	3166	3641	3515

ν , gerilme; δ , bükülme; δ_s , makaslama; ρ , sallanma; γ , düzlem dışı bükülme τ , dönme

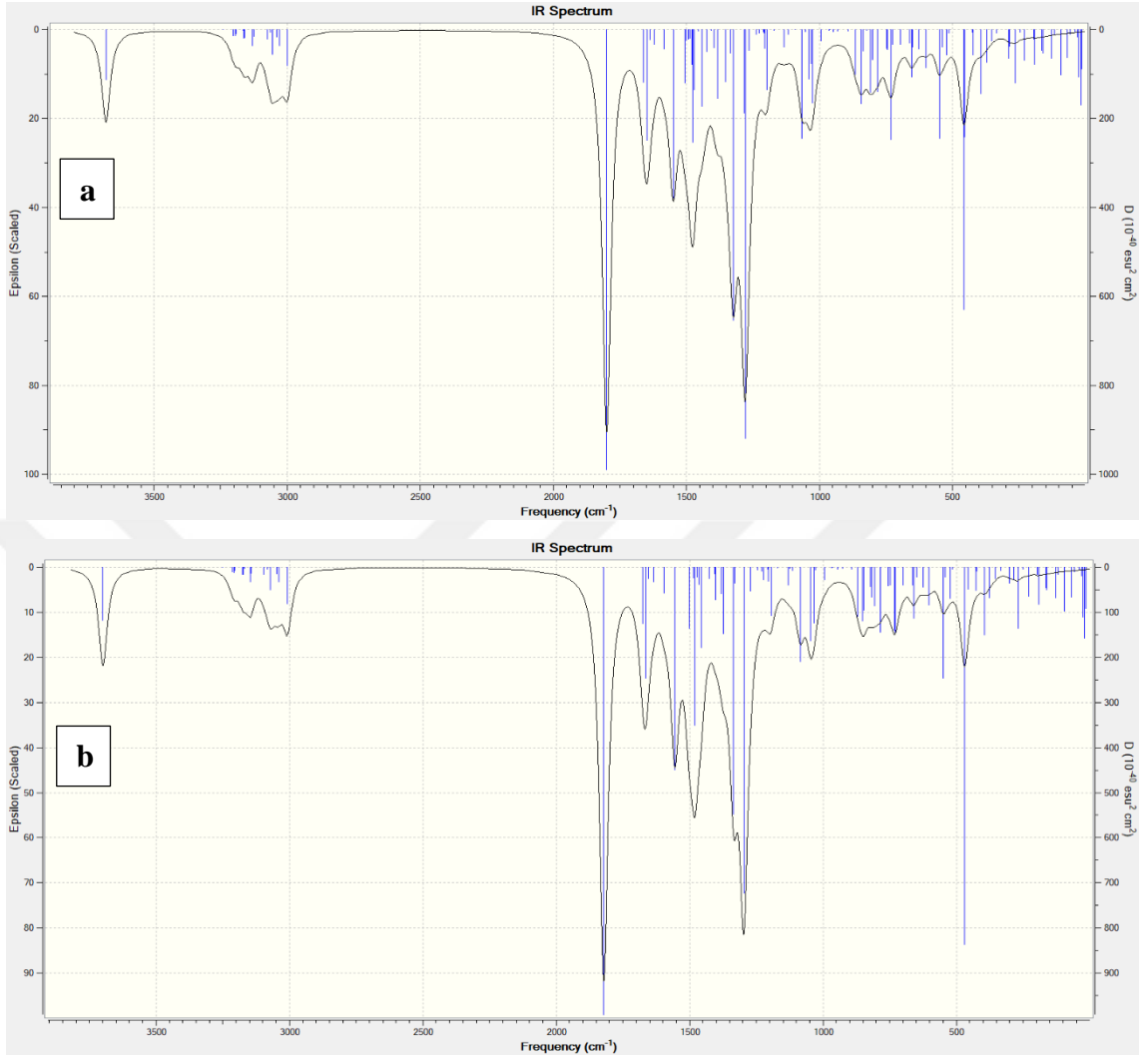




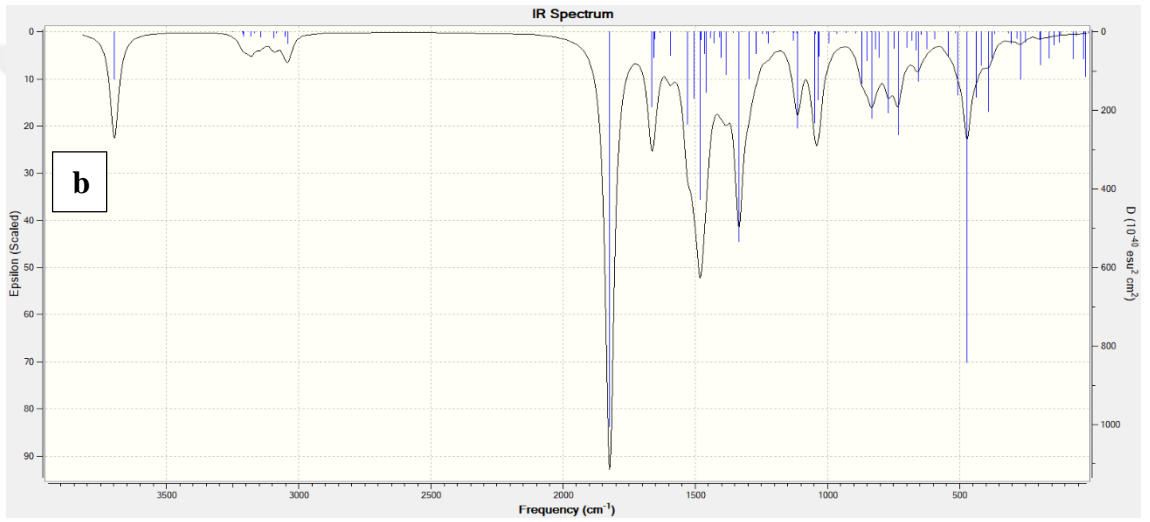
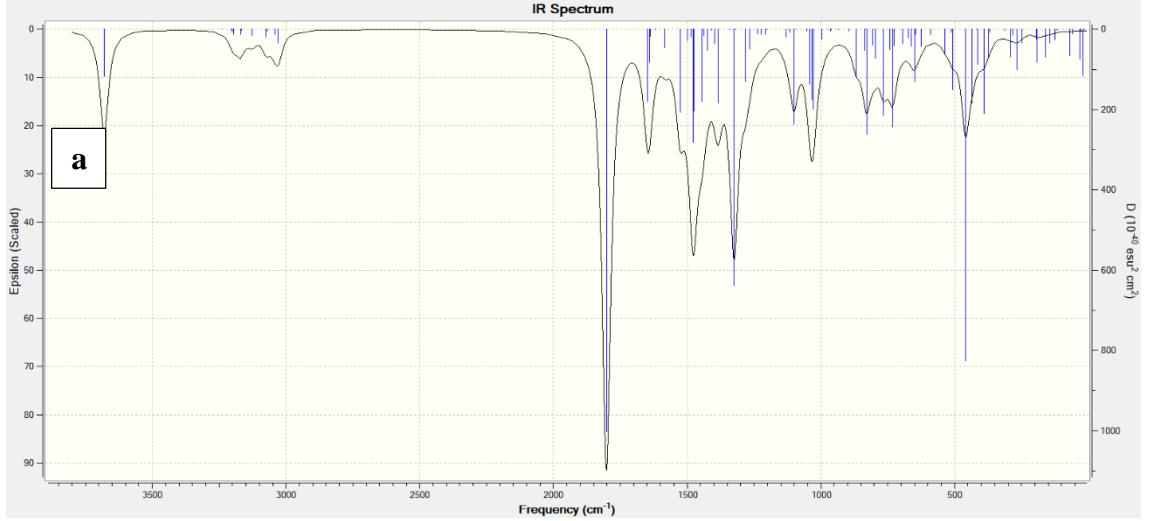
Şekil 3.7. 45 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları



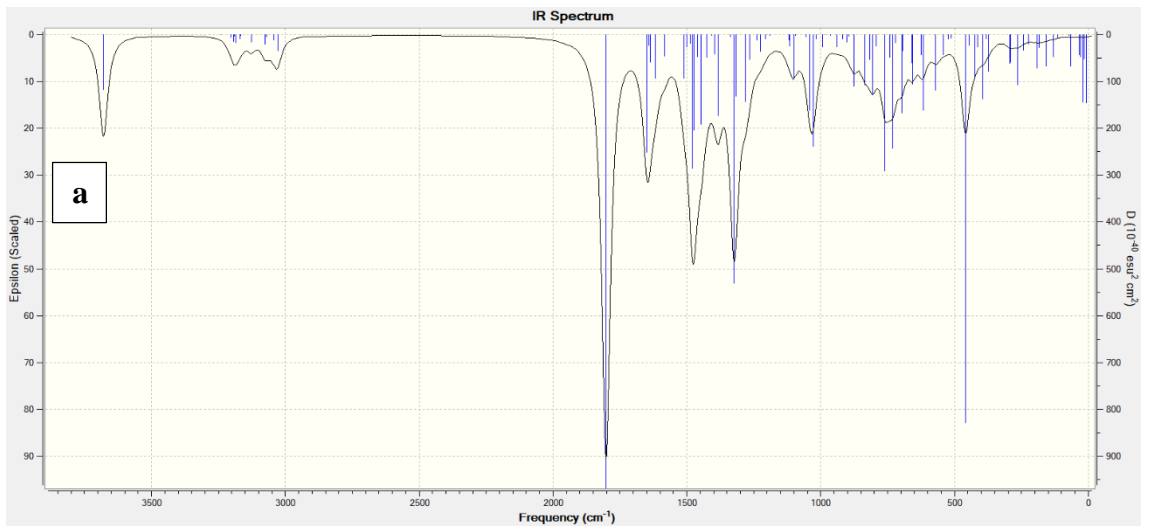
Şekil 3.8. 46 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları

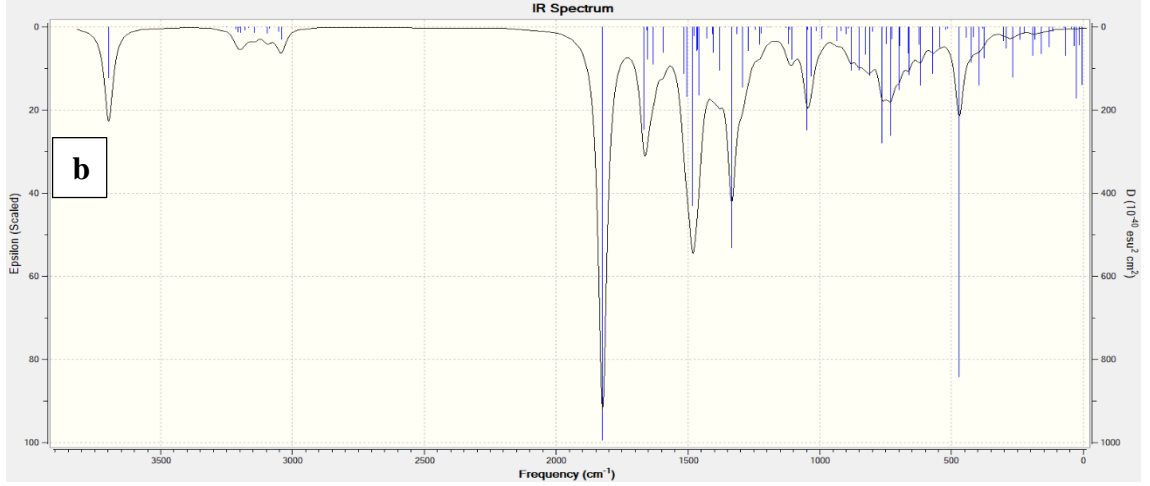


Şekil 3.9.47 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları

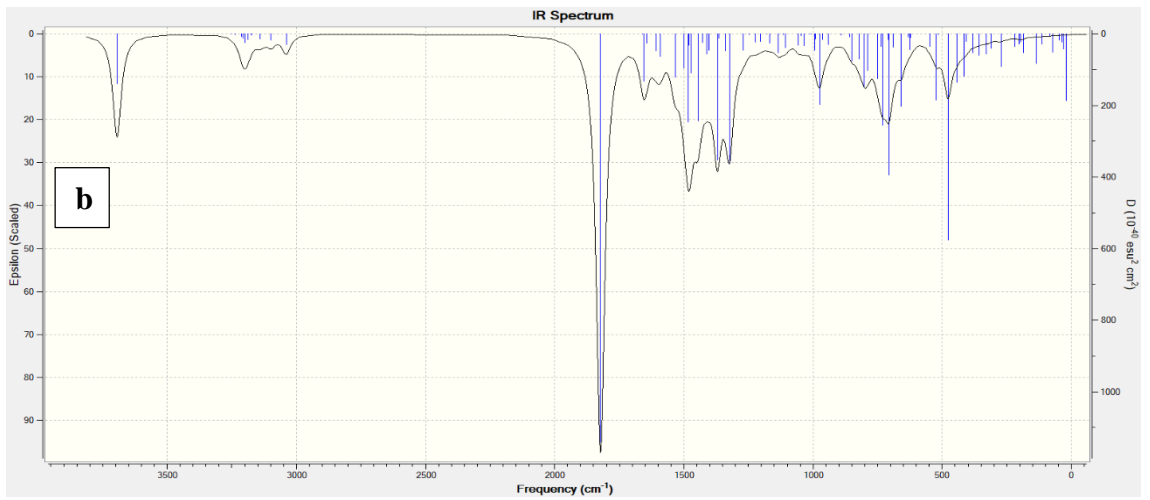
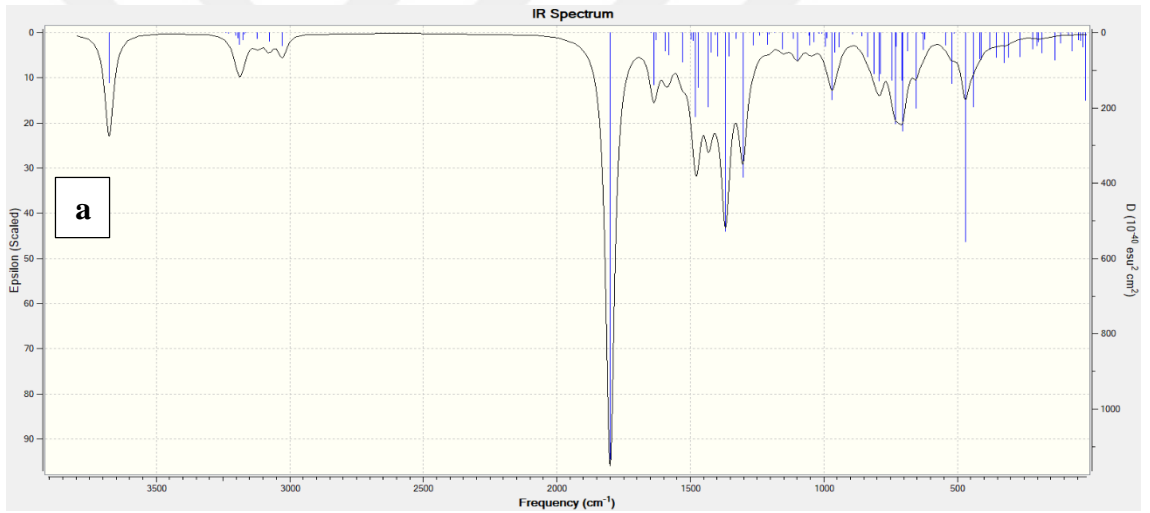


Şekil 3.10. 48 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları





Şekil 3.11. 49 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları



Şekil 3.12. 6 Bileşiğinin teorik olarak oluşturulan (DFT/B3LYP (a) ve DFT/B3PW91 (b)) IR spektrumları

3.2.3. NMR Spektral Verileri

Bu tez çalışmasında, 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (**44**) bileşiklerinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR, kimyasal kayma değerleri en minimum enerjili optimize edilmiş yapılardan yola çıkılmıştır. Bileşiklerin elde edilen optimize yapıları yardımıyla kimyasal kayma değerleri, B3LYP ve B3PW91 metotlarında Gauge-Independent Atomic Orbital (GIAO) NMR yaklaşımı [81-84] ile 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak DMSO çözücü fazında oluşturulmuştur (Tablo 3.19-24).

Tablo 3.19. 45 Bileşiğinin ¹³C ve ¹H-NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerlerinin deneysel ve teorik verilerinin karşılaştırılması (δ/ppm)

No	Deneysel	B3LYP /6311(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	146,55	153,37	-6,82	147,70	-1,15
2C	152,06	153,83	-1,77	148,72	3,34
3C	148,04	146,68	1,36	142,50	5,54
4C	132,41	141,96	-9,55	135,88	-3,47
5C	143,64	150,82	-7,18	145,71	-2,07
6C	130,75	134,07	-3,32	130,29	0,46
7C	131,93	138,58	-6,65	133,50	-1,57
8C	14,43	13,73	0,70	10,76	3,67
9C	31,83	35,53	-3,70	31,44	0,39
10C	136,33	140,01	-3,68	134,90	1,43
11C	129,57	134,62	-5,05	130,68	-1,11
12C	129,11	132,28	-3,17	128,35	0,76
13C	127,43	131,09	-3,66	127,16	0,27
14C	129,11	132,28	-3,17	128,35	0,76
15C	129,57	134,62	-5,05	130,68	-1,11
16H	11,96	7,24	4,72	7,32	4,64
17H	9,81	10,46	-0,65	10,68	-0,87
18H	7,00	6,98	0,02	7,17	-0,17
19H	7,68	7,49	0,19	7,64	0,04
20H	2,29	2,27	0,02	2,40	-0,11
21H	2,29	2,27	0,02	2,40	-0,11
22H	2,29	2,35	-0,06	2,49	-0,20
23H	3,94	3,95	-0,01	4,09	-0,15
24H	3,94	3,95	-0,01	4,09	-0,15
25H	7,23	7,52	-0,29	7,70	-0,47
26H	7,29	7,57	-0,28	7,75	-0,46
27H	7,2	7,5	-0,30	7,69	-0,49
28H	7,29	7,57	-0,28	7,75	-0,46
29H	7,23	7,52	-0,29	7,7	-0,47

Tablo 3.20. 46 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ^{13}C ve ^1H -NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	DFT/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	146,50	153,44	-6,94	147,77	-1,27
2C	151,85	153,85	-2,00	148,75	3,10
3C	147,80	146,61	1,19	142,44	5,36
4C	133,01	142,10	-9,09	136,00	-2,99
5C	143,40	150,71	-7,31	145,60	-2,20
6C	130,53	134,12	-3,59	130,35	0,18
7C	132,21	138,59	-6,38	133,50	-1,29
8C	14,22	13,70	0,52	10,72	3,50
9C	31,23	35,08	-3,85	30,98	0,25
10C	131,71	136,53	-4,82	131,40	0,31
11C	129,45	134,45	-5,00	130,50	-1,05
12C	129,23	132,66	-3,43	128,82	0,41
13C	136,27	143,22	-6,95	138,29	-2,02
14C	129,23	132,65	-3,42	128,82	0,41
15C	129,45	134,45	-5,00	130,50	-1,05
27C	21,07	21,12	-0,05	17,97	3,10
16H	11,96	7,23	4,73	7,31	4,65
17H	9,83	10,45	-0,62	10,66	-0,83
18H	7,03	6,97	0,06	7,16	-0,13
19H	7,72	7,49	0,23	7,64	0,08
20H	2,32	2,25	0,07	2,37	-0,05
21H	2,32	2,29	0,03	2,42	-0,10
22H	2,32	2,35	-0,03	2,48	-0,16
23H	3,91	3,90	0,01	4,04	-0,13
24H	3,91	3,90	0,01	4,04	-0,13
25H	7,11	7,40	-0,29	7,58	-0,47
26H	7,42	7,41	0,01	7,59	-0,17
28H	7,42	7,41	0,01	7,58	-0,16
29H	7,11	7,4	-0,29	7,58	-0,47
36H	2,25	2,21	0,04	2,33	-0,08
37H	2,25	2,24	0,01	2,36	-0,11
38H	2,25	2,54	-0,29	2,64	-0,39

Tablo 3.21. 47 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ^{13}C ve ^1H -NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	DFT/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	146,35	153,61	-7,26	147,92	-1,57
2C	151,86	153,89	-2,03	148,79	3,07
3C	147,78	146,60	1,18	142,41	5,37
4C	132,24	142,18	-9,94	136,07	-3,83
5C	143,40	150,71	-7,31	145,57	-2,17
6C	130,50	134,16	-3,66	130,38	0,12
7C	131,72	138,57	-6,85	133,48	-1,76
8C	14,22	13,73	0,49	10,74	3,48
9C	30,76	34,61	-3,85	30,48	0,28
10C	127,90	130,43	-2,53	125,16	2,74
11C	130,42	135,84	-5,42	131,93	-1,51
12C	114,30	111,41	2,89	107,63	6,67
13C	158,56	165,06	-6,50	159,42	-0,86
14C	114,30	120,40	-6,10	116,44	-2,14
15C	130,42	135,55	-5,13	131,58	-1,16
36C	55,48	54,55	0,93	50,65	4,83
16H	12,01	7,23	4,78	7,32	4,69
17H	9,90	10,44	-0,54	10,66	-0,76
18H	7,09	6,97	0,12	7,15	-0,06
19H	7,78	7,49	0,29	7,63	0,15
20H	2,29	2,25	0,04	2,37	-0,08
21H	2,29	2,29	0,00	2,42	-0,13
22H	2,29	2,34	-0,05	2,48	-0,19
23H	3,96	3,86	0,10	3,98	-0,02
24H	3,96	3,89	0,07	4,04	-0,08
25H	7,29	7,43	-0,14	7,61	-0,32
26H	6,92	6,82	0,10	7,01	-0,09
28H	9,92	7,03	2,89	7,2	2,72
29H	7,29	7,38	-0,09	7,55	-0,26
H37	3,77	3,64	0,13	3,71	0,06
H38	3,77	3,64	0,13	3,71	0,06
H39	3,77	4,02	-0,25	4,11	-0,34

Tablo 3.22. 48 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ^{13}C ve ^1H -NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	DFT/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	146,19	152,89	-6,70	147,25	-1,06
2C	152,05	153,76	-1,71	148,67	3,38
3C	148,11	146,81	1,30	142,62	5,49
4C	132,35	141,96	-9,61	135,87	-3,52
5C	143,70	150,94	-7,24	145,81	-2,11
6C	130,78	134,15	-3,37	130,37	0,41
7C	131,93	138,74	-6,81	133,65	-1,72
8C	14,43	13,79	0,64	10,80	3,63
9C	31,20	34,75	-3,55	30,68	0,52
10C	132,11	139,28	-7,17	133,95	-1,84
11C	131,48	136,26	-4,78	132,31	-0,83
12C	129,03	132,68	-3,65	128,72	0,31
13C	135,30	144,98	-9,68	138,93	-3,63
14C	129,03	132,68	-3,65	128,72	0,31
15C	131,48	136,26	-4,78	132,31	-0,83
16H	11,96	7,24	4,72	7,32	4,64
17H	9,81	10,43	-0,62	10,64	-0,83
18H	7,00	6,97	0,03	7,16	-0,16
19H	7,68	7,49	0,19	7,64	0,04
20H	2,29	2,26	0,03	2,39	-0,10
21H	2,29	2,26	0,03	2,39	-0,10
22H	2,29	2,34	-0,05	2,48	-0,19
23H	3,95	3,90	0,05	4,04	-0,09
24H	3,95	3,90	0,05	4,04	-0,09
25H	7,35	7,44	-0,09	7,62	-0,27
26H	7,29	7,40	-0,11	7,58	-0,29
27H	7,29	7,4	-0,11	7,58	-0,29
28H	7,35	7,44	-0,09	7,62	-0,27

Tablo 3.23. 49 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ^{13}C ve ^1H -NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

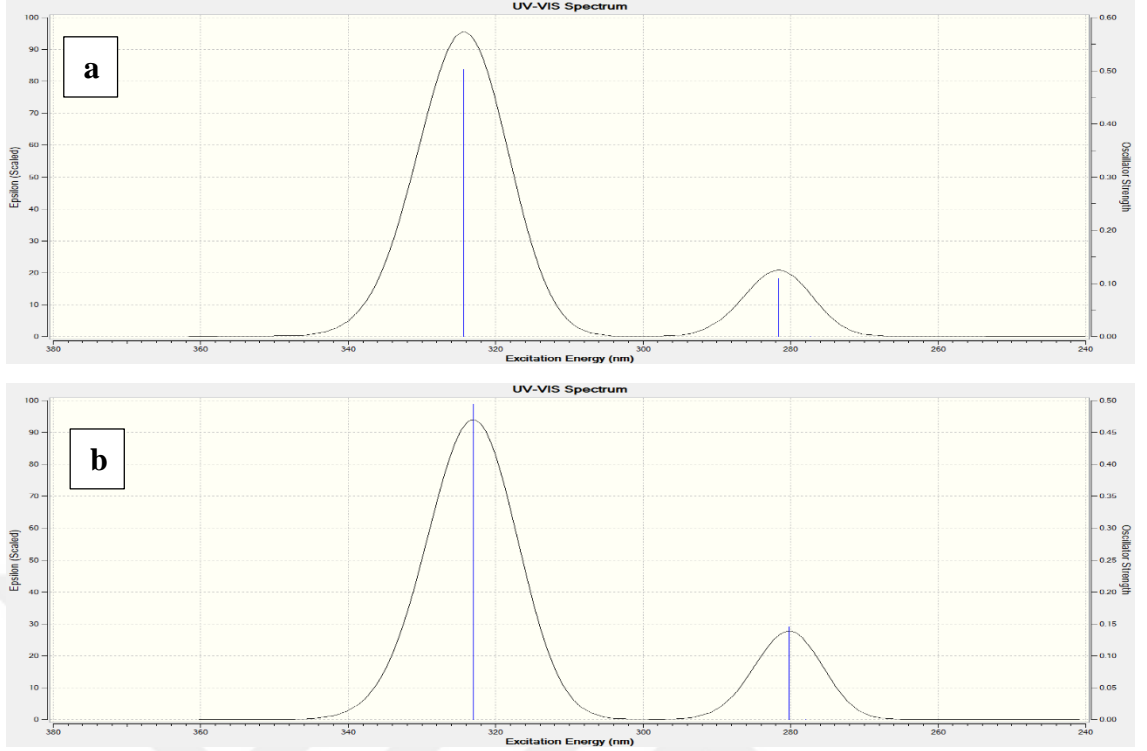
No	Deneysel	DFT/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	145,81	152,66	-6,85	147,00	-1,19
2C	151,82	153,74	-1,92	148,65	3,17
3C	147,96	148,85	-0,89	142,65	5,31
4C	132,11	142,03	-9,92	135,94	-3,83
5C	143,53	150,99	-7,46	145,84	-2,31
6C	130,68	134,16	-3,48	130,39	0,29
7C	131,73	138,72	-6,99	133,63	-1,90
8C	14,22	13,75	0,47	10,78	3,44
9C	31,26	35,11	-3,85	31,07	0,19
10C	133,41	142,52	-9,11	137,36	-3,95
11C	130,71	134,72	-4,01	130,72	-0,01
12C	138,50	145,85	-7,35	139,79	-1,29
13C	127,27	131,44	-4,17	127,49	-0,22
14C	129,43	133,76	-4,33	129,77	-0,34
15C	128,12	133,37	-5,25	129,25	-1,13
16H	12,01	7,25	4,76	7,33	4,68
17H	9,48	10,42	-0,94	10,63	-1,15
18H	7,03	6,97	0,06	7,16	-0,13
19H	7,73	7,49	0,24	7,64	0,09
20H	2,32	2,25	0,07	2,39	-0,07
21H	2,32	2,28	0,04	2,39	-0,07
22H	2,32	2,34	-0,02	2,48	-0,16
23H	4,01	3,88	0,13	4,03	-0,02
24H	4,01	3,94	0,07	4,07	-0,06
25H	7,26	7,35	-0,09	7,52	-0,26
26H	7,32	7,36	-0,04	7,54	-0,22
27H	7,41	7,49	-0,08	7,67	-0,26
28H	7,37	7,37	0	7,54	-0,17

Tablo 3.24. 50 Molekülünün TMS'ye göre deneysel ve teorik olarak ^{13}C ve ^1H -NMR (B3LYP/(DMSO) ve B3PW91/(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

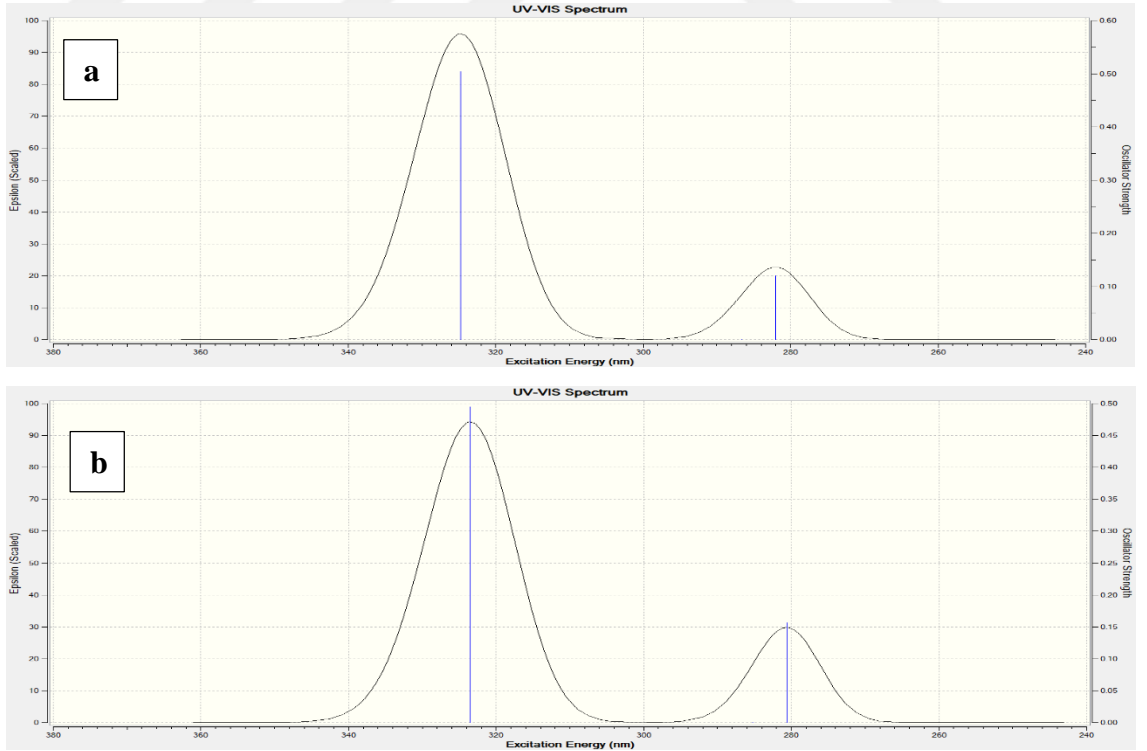
No	Deneysel	DFT/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO	B3PW91/6311+(d,p) DMSO	Fark/DMSO
1C	144,47	150,07	-5,60	144,20	0,27
2C	152,21	154,30	-2,09	149,21	3,00
3C	151,11	147,21	3,90	143,07	8,04
4C	132,24	142,17	-9,93	136,01	-3,77
5C	144,12	150,97	-6,85	145,94	-1,82
6C	131,07	134,20	-3,13	130,44	0,63
7C	132,02	138,88	-6,86	133,82	-1,80
8C	14,48	13,76	0,72	10,77	3,71
9C	127,32	131,72	-4,40	126,67	0,65
10C	129,13	131,71	-2,58	127,68	1,45
11C	128,43	132,46	-4,03	128,56	-0,13
12C	130,76	134,40	-3,64	130,42	0,34
13C	128,43	132,02	-3,59	128,12	0,31
14C	129,13	133,59	-4,46	129,24	-0,11
15H	12,35	7,66	4,69	7,77	4,58
16H	9,76	10,67	-0,91	10,89	-1,13
17H	7,02	6,98	0,04	7,17	-0,15
18H	7,69	7,50	0,19	7,65	0,04
19H	2,35	2,26	0,09	2,38	-0,03
20H	2,35	2,32	0,03	2,45	-0,10
21H	2,35	2,39	-0,04	2,53	-0,18
22H	7,86	8,17	-0,31	8,37	-0,51
23H	7,48	7,69	-0,21	7,87	-0,39
24H	7,49	7,70	-0,21	7,88	-0,39
25H	7,49	7,73	-0,24	7,91	-0,42
26H	7,89	8,48	-0,59	8,80	-0,91

3.2.4. UV Spektral Verileri

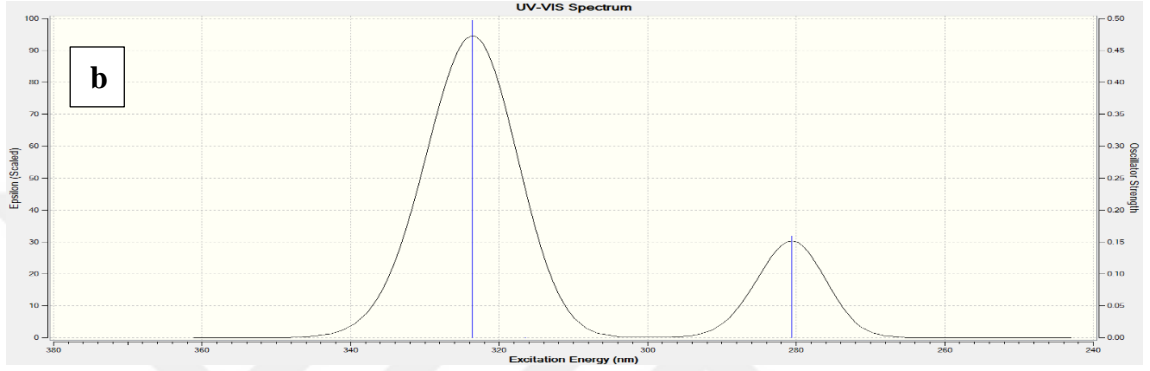
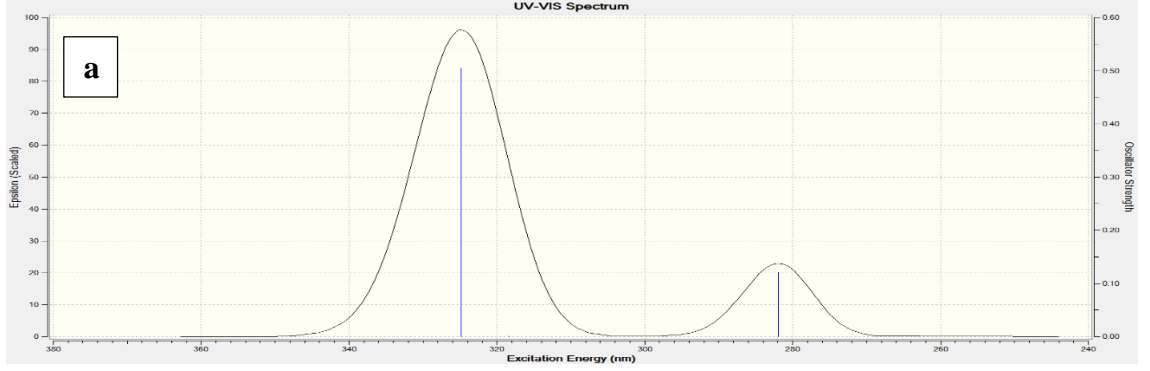
Sentezlenmiş 44 tipi bileşiklerin ultraviyole spektral analizi etanolde TD-DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve TD-DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemleri ile araştırılmıştır. Ultraviyole spektral grafikleri Şekil 3.13-18'de gösterilmiştir.



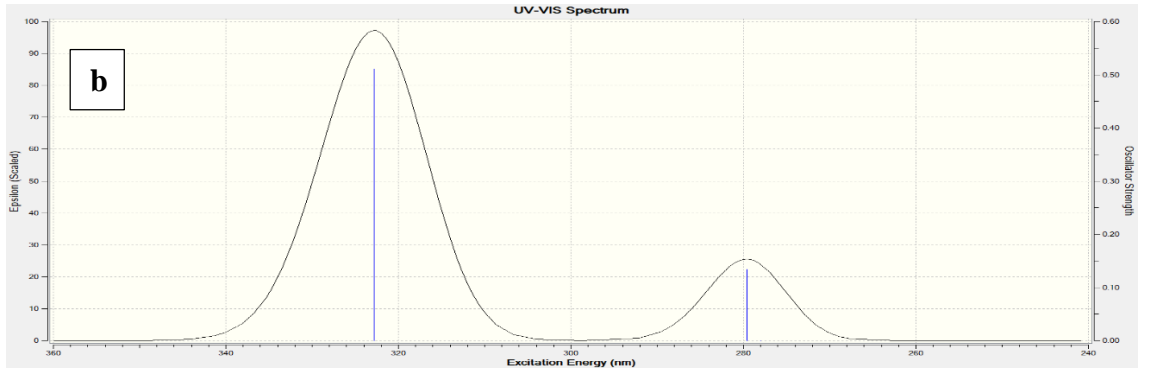
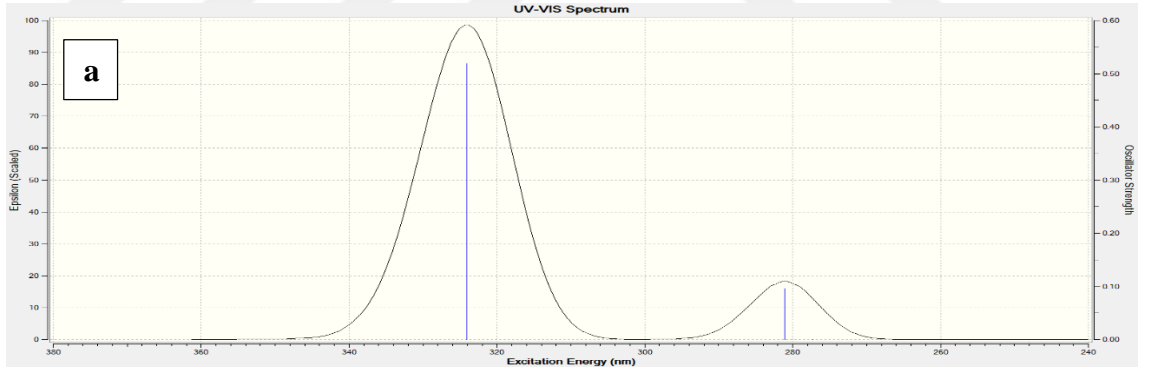
Şekil 3.13. 45 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları



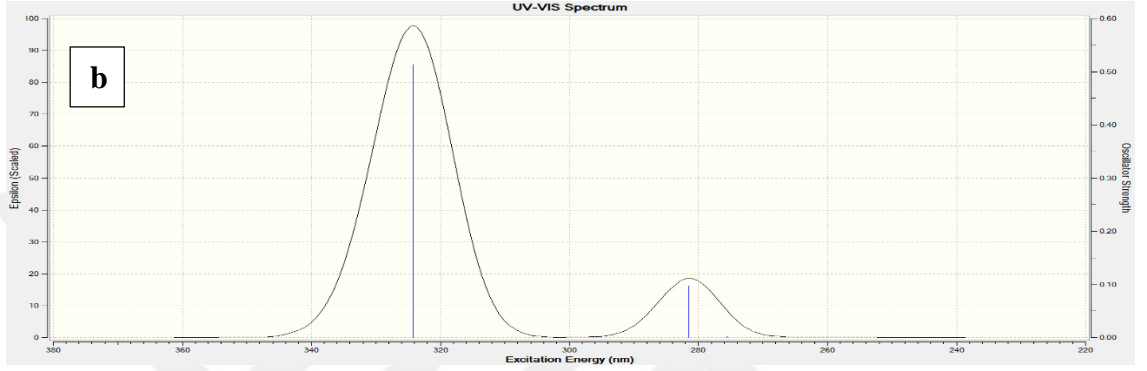
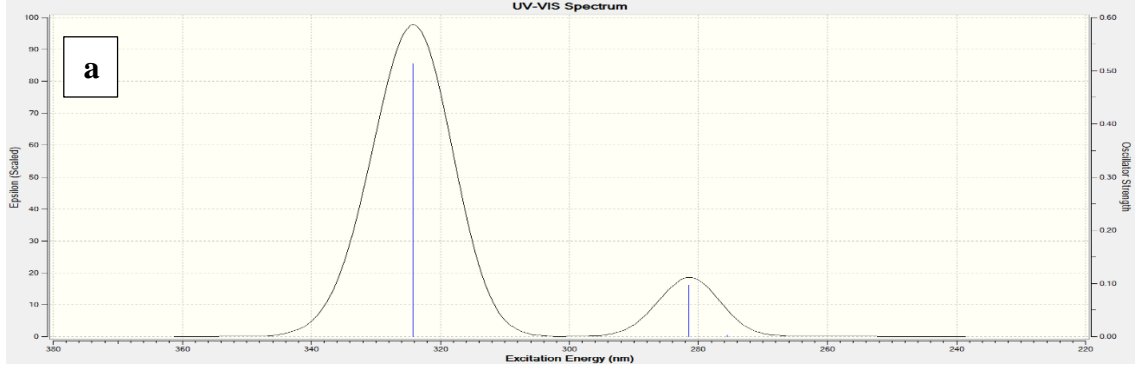
Şekil 3.14. 46 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları



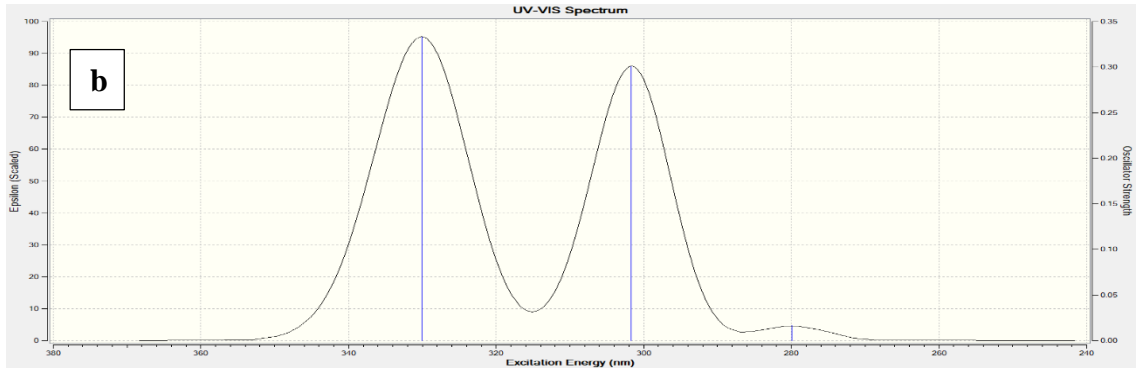
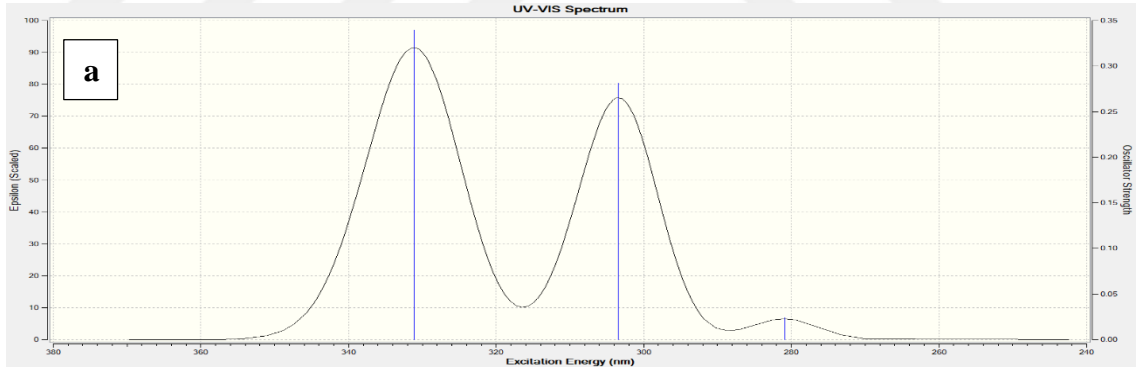
Şekil 3.15. 47 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları



Şekil 3.16. 48 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları



Şekil 3.17. 49 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları



Şekil 3.18. 50 Molekülünün teorik olarak oluşturulan (B3LYP (a) ve B3PW91 (b)) UV-vis spektrumları

Elektron kullanılabilirliğinin bir fonksiyonu olan deneysel ve bilgisayar ortamında etanol çözücüsü fazında teorik olarak hesaplanan görünür bölge absorpsiyon maksimum değerleri (λ_{\max}) Tablo 3.25-30'da bildirilmiştir.

Tablo 3.25. 45 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91
316.00/324.32/323.04	3.8229/3.3880	0.5021/0.4940
280.00/281.62/280.19	4.4026/4.4250	0.1094/0.1456
220.00/277.36/277.99	4.4701/4.4559	0.0001/0.0001

Tablo 3.26. 46 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91
314.00/324.76/323.49	3.8177/3.8327	0.5036/0.4952
272.00/286.69/285.21	4.3246/4.3471	0.0001/0.0001
216.00/282.05/280.63	4.3958/4.4181	0.1195/0.1567

Tablo 3.27. 47 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91
314.00/324.82/323.58	3.8170/3.8317	0.5047/0.4970
284.00/318.39/316.43	3.8941/3.9182	0.0011/0.0001
226.00/281.96/280.58	4.3972/4.4188	0.1208/0.1590

Tablo 3.28. 48 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/HF
316.00/324.08/322.79	3.8257/3.8410	0.5187/0.5108
282.00/281.05/279.62	4.4114/4.4340	0.0957/0.1340
224.00/277.27/278.05	4.4717/4.4590	0.0001/0.0001

Tablo 3.29. 49 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

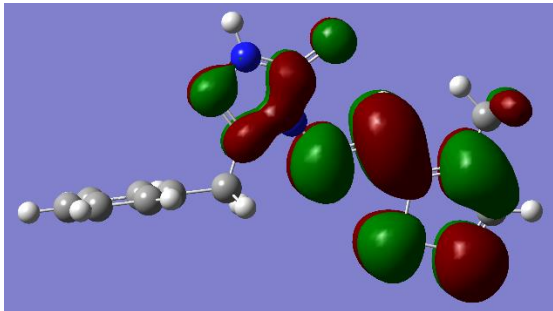
λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91
314.00/324.21/322.80	3.8242/3.8408	0.5136/0.5060
274.00/281.47/279.99	4.4049/4.4281	0.0966/0.1317
214.00/275.58/276.47	4.4991/4.4845	0.0029/0.0007

Tablo 3.30. 50 Molekülünün deneysel ve teorik (DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91) UV-vis değerleri

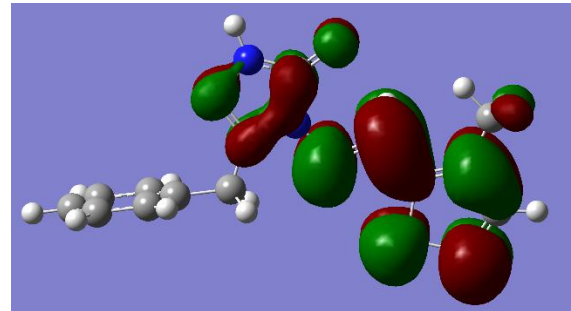
λ (nm)	uyarılma enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)
Den./B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91	B3LYP(DFT)/B3PW91
318.00/331.14/330.09	3.7442/3.7561	0.3395/0.3337
276.00/303.43/301.66	4.0861/4.1101	0.2813/0.3013
226.00/280.90/279.88	4.4139/4.4299	0.0240/0.0163

3.2.5. Elektronik Özellikler

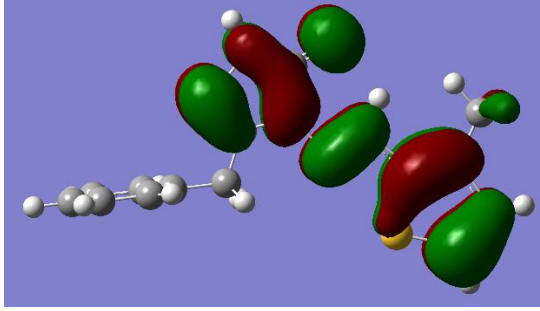
Moleküllerin reaksiyonlarının mekanizmasını oluşturan temel orbitaller dolu olan en yüksek enerjili orbitaller (E_{HOMO}) ve boş olan en düşük enerjili moleküler orbitallerdir (E_{LUMO}). Kimyasal reaksiyonlarda elektron verme eğilimi olan orbital enerjisine (π -donor) HOMO enerjisi, elektron alma eğilimi olan orbital enerjisine ise LUMO enerjisi (π -acceptor) olarak adlandırılır [85]. Tez kapsamında teorik olarak yapıları incelenen bileşikler 6-311G(d,p) polarize temel seti B3LYP ve B3PW91 metodlarıyla çizilen HOMO ve LUMO gösterimleri Şekil 3.13-18'de verilmiştir.



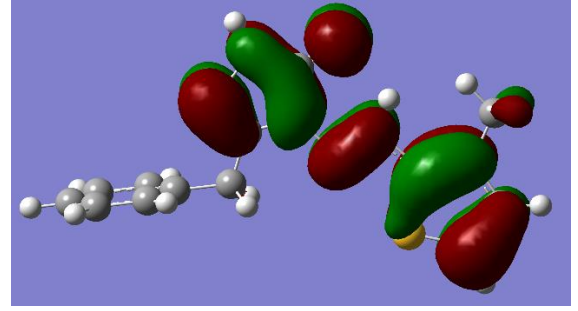
E_{LUMO} (B3LYP) : -42.287 kcal.mol⁻¹



E_{LUMO} (B3PW91) : -46.066 kcal.mol⁻¹

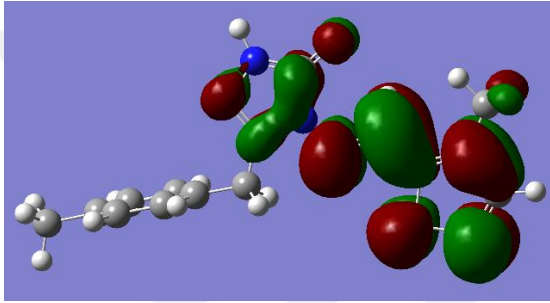


$E_{\text{HOMO}} (\text{B3LYP}) : -138.534 \text{ kcal.mol}^{-1}$

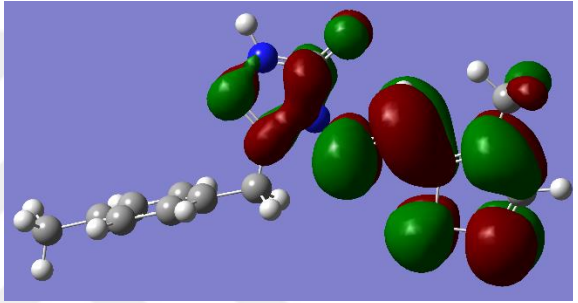


$E_{\text{HOMO}} (\text{B3PW91}) : -139.613 \text{ kcal.mol}^{-1}$

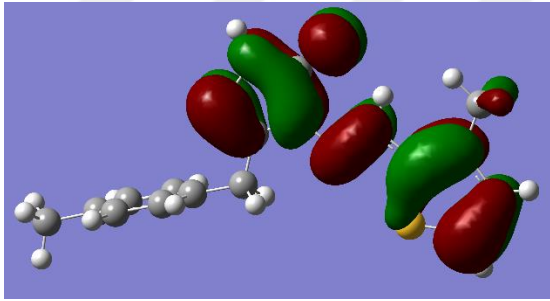
Şekil 3.19. 45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri



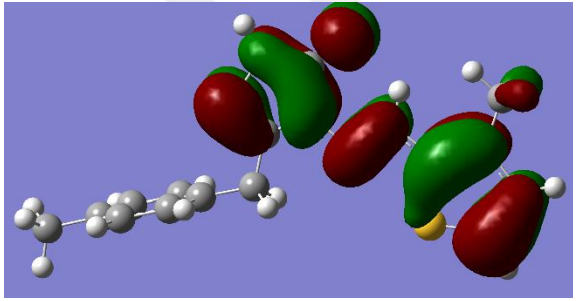
$E_{\text{LUMO}} (\text{B3LYP}) : -41.861 \text{ kcal.mol}^{-1}$



$E_{\text{LUMO}} (\text{B3PW91}) : -45.513 \text{ kcal.mol}^{-1}$

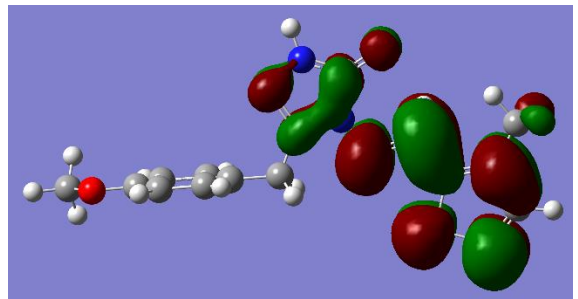
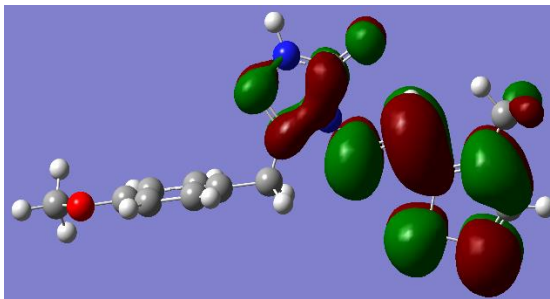


$E_{\text{HOMO}} (\text{B3LYP}) : -137.969 \text{ kcal.mol}^{-1}$

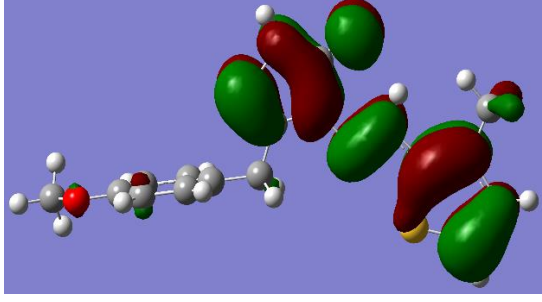


$E_{\text{HOMO}} (\text{B3PW91}) : -143.046 \text{ kcal.mol}^{-1}$

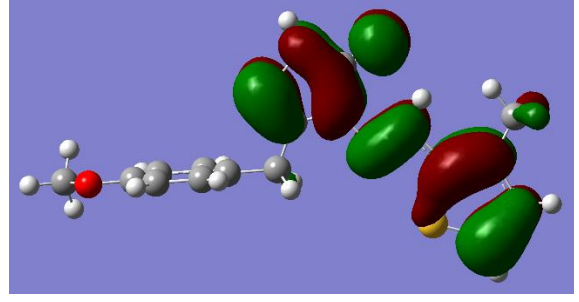
Şekil 3.20. 46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri



E_{LUMO} (B3LYP) : -41.566 kcal.mol⁻¹



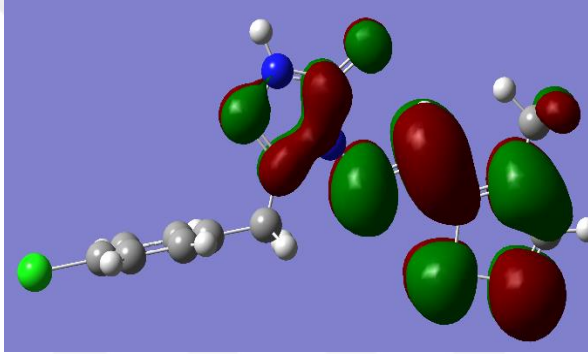
E_{LUMO} (B3PW91) : -42.306 kcal.mol⁻¹



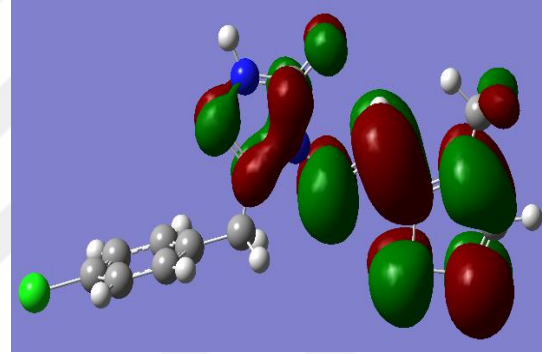
E_{HOMO} (B3LYP) : -137.630 kcal.mol⁻¹

E_{HOMO} (B3PW91) : -138.659 kcal.mol⁻¹

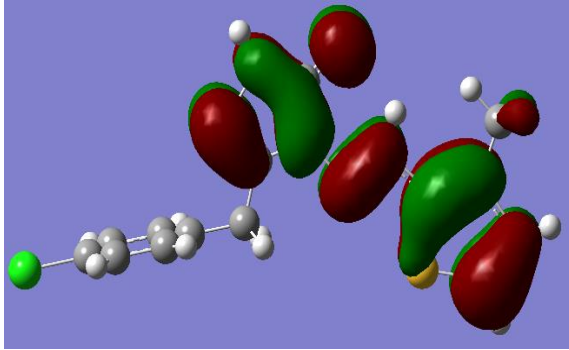
Şekil 3.21. 47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri



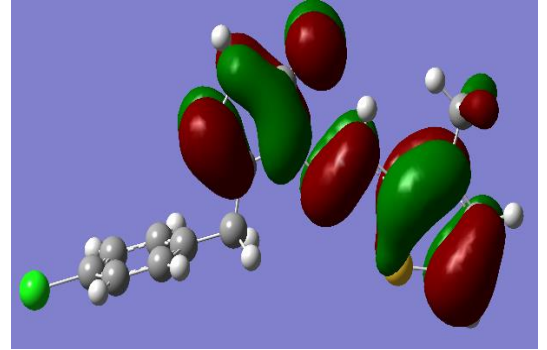
E_{LUMO} (B3LYP) : -44.333 kcal.mol⁻¹



E_{LUMO} (B3PW91) : -45.042 kcal.mol⁻¹

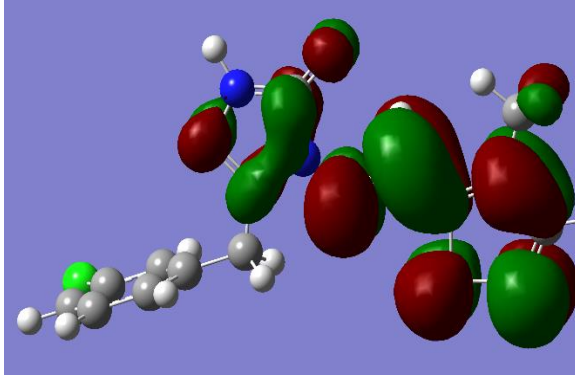


E_{HOMO} (B3LYP) : -140.780 kcal.mol⁻¹

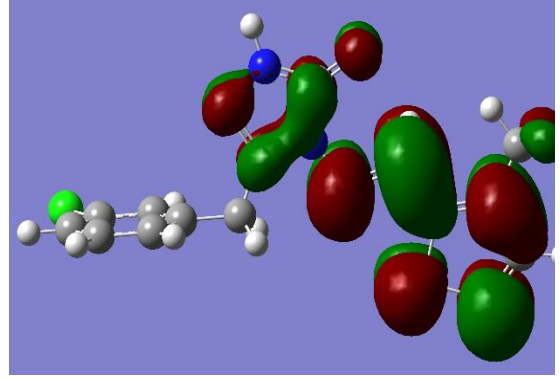


E_{HOMO} (B3PW91) : -141.791 kcal.mol⁻¹

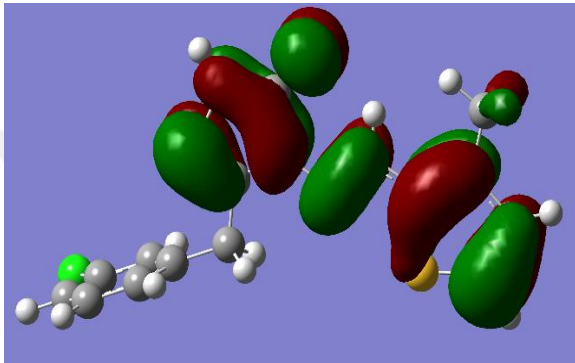
Şekil 3.22. 48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri



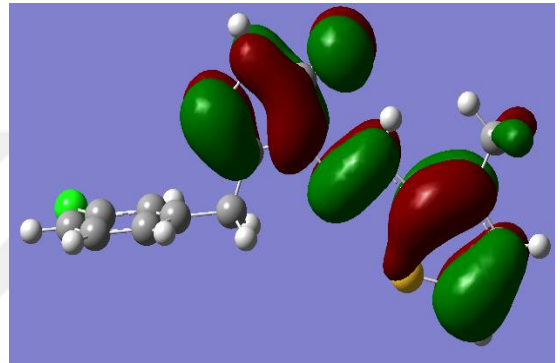
E_{LUMO} (B3LYP) : -44.201 kcal.mol⁻¹



E_{LUMO} (B3PW91) : -44.885 kcal.mol⁻¹

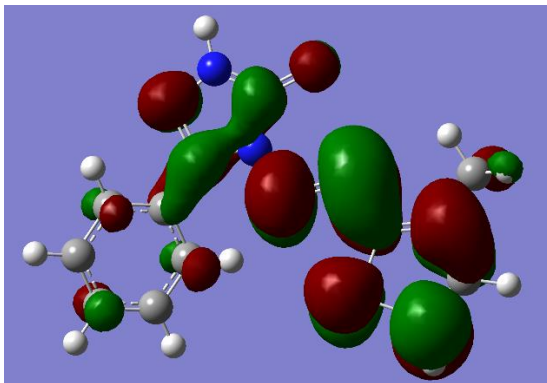


E_{HOMO} (B3LYP) :-140.579 kcal.mol⁻¹

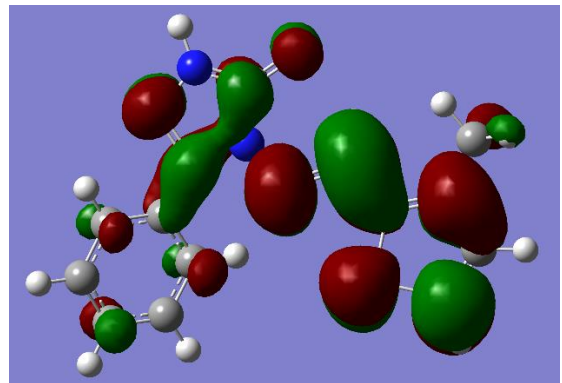


E_{HOMO} (B3PW91) : -141.590 kcal.mol⁻¹

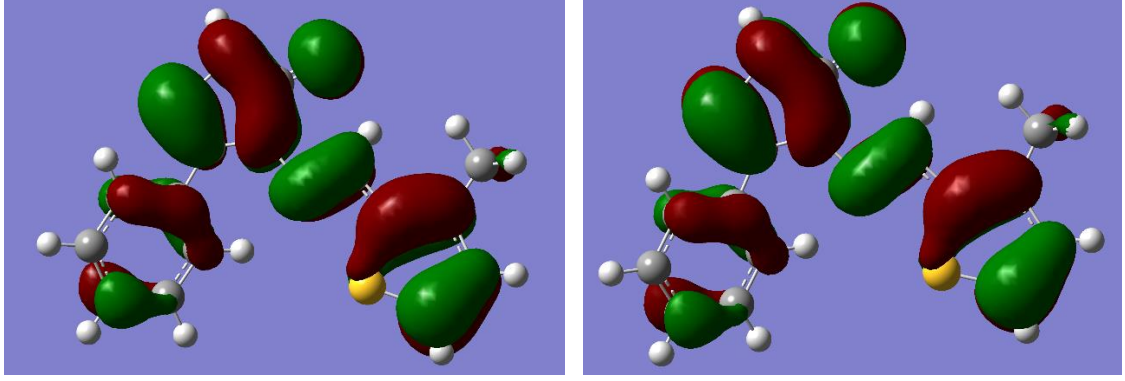
Şekil 3.23. 49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri



E_{LUMO} (B3LYP) : -43.260 kcal.mol⁻¹



E_{LUMO} (B3PW91) : -44.208 kcal.mol⁻¹



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP}) : -138.239 \text{ kcal.mol}^{-1}$

$E_{\text{HOMO}}(\text{B3PW91}) : -139.437 \text{ kcal.mol}^{-1}$

Şekil 3.24. 50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle elde edilen HOMO-LUMO enerjileri

3.2.6. Mulliken Yükleri

Mulliken yükleri Mulliken popülasyon analizinden [86, 87] ortaya çıkar ve kısmi atomik yükleri hesaplamak için kullanılan hesaplamalardan, özellikle de atom orbitallerinin moleküler orbital yönteminin doğrusal kombinasyonuna dayanan hesaplamalar yoluyla tahmin etmek için bir araç sağlar ve rutin olarak lineer regresyon (QSAR [88]) prosedürlerinde değişkenler olarak kullanılır [89]. Bu yöntem Robert S. Mulliken tarafından geliştirilmiştir ve daha sonra bu yöntemin ismini almıştır. Bileşiklerin elde edilen optimize yapıları B3LYP ve B3PW91 metodları ile 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak Mulliken atomik yükleri hesaplanmış ve elde edilen değerler Tablo 3.31-36'de verilmiştir.

Tablo 3.31. 45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3550	0.4036	C13	-0.0892	-0.0985	H25	0.0834	0.0938
C2	0.5332	0.5759	C14	-0.0920	-0.1029	H26	0.0932	0.1037
C3	0.1348	0.1522	C15	-0.0503	-0.0511	H27	0.0935	0.1040
C4	-0.2954	-0.3265	H16	0.2505	0.2586	H28	0.0932	0.1037
C5	-0.0361	-0.0548	H17	0.1645	0.1848	H29	0.0834	0.0938
C6	-0.0562	-0.0638	H18	0.0952	0.1049	N30	-0.3119	-0.3318
C7	-0.2768	-0.2954	H19	0.1350	0.1473	N31	-0.2076	-0.2271
C8	-0.2458	-0.2772	H20	0.1278	0.1430	N32	-0.3737	-0.4099
C9	-0.1837	-0.2239	H21	0.1199	0.1346	N33	-0.2204	-0.2419
C10	-0.0967	-0.1233	H22	0.1277	0.1430	S34	0.2852	0.3102

C11	-0.0503	-0.0511	H23	0.1489	0.1684	O35	-0.3952	-0.4121
C12	-0.0920	-0.1029	H24	0.1489	0.1684			

Tablo 3.32. 46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3520	0.4033	C14	-0.0737	-0.0802	C27	-0.2575	-0.2892
C2	0.5292	0.5757	C15	-0.0501	-0.0525	H28	0.0816	0.0926
C3	0.1345	0.1526	H16	0.2494	0.2582	H29	0.0801	0.0911
C4	-0.2974	-0.3271	H17	0.1642	0.1839	N30	-0.3070	-0.3318
C5	-0.0375	-0.0545	H18	0.0942	0.1047	N31	-0.2071	-0.2271
C6	-0.0567	-0.0638	H19	0.1338	0.1471	N32	-0.3685	-0.4099
C7	-0.2789	-0.2959	H20	0.1295	0.1452	N33	-0.2213	-0.2413
C8	-0.2447	-0.2777	H21	0.1201	0.1353	S34	0.2917	0.3102
C9	-0.1825	-0.2241	H22	0.1247	0.1402	O35	-0.3962	-0.4125
C10	-0.0928	-0.1161	H23	0.1477	0.1676	H36	0.1125	0.1275
C11	-0.0501	-0.0524	H24	0.1477	0.1676	H37	0.1253	0.1415
C12	-0.0742	-0.0808	H25	0.0801	0.0911	H38	0.1117	0.1267
C13	-0.0956	-0.1177	H26	0.0816	0.0926			

Tablo 3.33. 47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3084	0.4051	C14	-0.0713	-0.1016	O27	-0.3873	-0.3588
C2	0.5306	0.5791	C15	-0.0307	-0.0499	H28	0.1005	0.1135
C3	0.1509	0.1529	H16	0.2702	0.2588	H29	0.0898	0.0939
C4	-0.2981	-0.3257	H17	0.1724	0.1831	N30	-0.2040	-0.3370
C5	-0.0486	-0.0527	H18	0.0946	0.1055	N31	-0.2532	-0.2276
C6	-0.0460	-0.0633	H19	0.1343	0.1478	N32	-0.3261	-0.4148
C7	-0.2801	-0.2943	H20	0.1407	0.1455	N33	-0.2304	-0.2394
C8	-0.2549	-0.2793	H21	0.1395	0.1358	S34	0.2791	0.3037
C9	-0.1612	-0.2259	H22	0.1101	0.1403	O35	-0.5293	-0.4122
C10	-0.1128	-0.1281	H23	0.1527	0.1662	C36	-0.1053	-0.1696
C11	-0.0452	-0.0520	H24	0.1637	0.1683	H37	0.1159	0.1401
C12	-0.0709	-0.1483	H25	0.0884	0.0928	H38	0.0987	0.1250
C13	0.1176	0.1806	H26	0.1007	0.1185	H39	0.0967	0.1236

Tablo 3.34. 48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3547	0.4030	C13	-0.2371	-0.2580	H25	0.0920	0.1017
C2	0.5336	0.5763	C14	0.0243	0.0202	H26	0.1176	0.1280
C3	0.1363	0.1536	C15	-0.0479	-0.0492	H27	0.1176	0.1280
C4	-0.2963	-0.3273	H16	0.2519	0.2599	H28	0.0920	0.1017
C5	-0.0356	-0.0543	H17	0.1650	0.1852	N29	-0.3117	-0.3316
C6	-0.0559	-0.0635	H18	0.0961	0.1057	N30	-0.2084	-0.2277
C7	-0.2759	-0.2945	H19	0.1358	0.1481	N31	-0.3735	-0.4098
C8	-0.2457	-0.2771	H20	0.1285	0.1436	N32	-0.2222	-0.2436
C9	-0.1810	-0.2204	H21	0.1199	0.1345	S33	0.2848	0.3098
C10	-0.0963	-0.1225	H22	0.1284	0.1436	O34	-0.3931	-0.4100

C11	-0.0479	-0.0492	H23	0.1510	0.1703	C135	-0.0764	-0.0650
C12	0.0243	0.0202	H24	0.1510	0.1703			

Tablo 3.35. 49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3530	0.4041	C13	0.0150	0.0112	H25	0.1053	0.1173
C2	0.5301	0.5766	C14	-0.0789	-0.0897	H26	0.1151	0.1268
C3	0.1358	0.1539	C15	-0.0507	-0.0522	H27	0.1015	0.1114
C4	-0.2980	-0.3276	H16	0.2512	0.2600	H28	0.0869	0.0979
C5	-0.0370	-0.0541	H17	0.1656	0.1854	N29	-0.3066	-0.3314
C6	-0.0565	-0.0636	H18	0.0953	0.1057	N30	-0.2076	-0.2274
C7	-0.2776	-0.2944	H19	0.1349	0.1481	N31	-0.3683	-0.4098
C8	-0.2442	-0.2771	H20	0.1282	0.1438	N32	-0.2239	-0.2440
C9	-0.1789	-0.2199	H21	0.1194	0.1345	S33	0.2916	0.3101
C10	-0.0953	-0.1209	H22	0.1280	0.1435	O34	-0.3936	-0.4099
C11	0.0596	0.0645	H23	0.1519	0.1716	C135	-0.0725	-0.0652
C12	-0.2305	-0.2505	H24	0.1516	0.1714			

Tablo 3.36. 50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setiyle oluşturulan mulliken atomik yük verileri

	B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91		B3LYP	B3PW91
C1	0.3857	0.4632	C12	-0.0693	-0.0858	H23	0.1010	0.1075
C2	0.5273	0.5720	C13	-0.1172	-0.1234	H24	0.0984	0.1067
C3	0.1702	0.1504	C14	-0.0346	-0.0197	H25	0.0986	0.1073
C4	-0.3162	-0.3344	H15	0.2701	0.2586	H26	0.1805	0.1327
C5	-0.0398	-0.0491	H16	0.1727	0.1854	N27	-0.1972	-0.3225
C6	-0.0520	-0.0673	H17	0.0959	0.1052	N28	-0.2834	-0.2505
C7	-0.2934	-0.2975	H18	0.1339	0.1470	N29	-0.3443	-0.4397
C8	-0.2541	-0.2792	H19	0.1415	0.1472	N30	-0.2548	-0.2435
C9	-0.1542	-0.1319	H20	0.1404	0.1375	S31	0.3125	0.3214
C10	-0.0064	-0.0309	H21	0.1107	0.1380	O32	-0.5281	-0.4103
C11	-0.1012	-0.1096	H22	0.1068	0.1152			

3.2.7. Lineer Olmayan Optik Özellikleri (NLO)

Sentezlenmiş bileşiklerin lineer olmayan optik özelliklerini belirlemek için, toplam statik dipol momenti (μ), ortalama polarize edilebilirlik (α) ve x, y, z bileşenlerini kullanan birinci dereceden hiperpolarize edilebilirlik (β) değerleri DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) seviyelerinde hesaplanmıştır. Bu değerler Tablo 3.37-42'de verilmiştir.

Tablo 3.37. 45 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	1.2832	Debye	1.2750	Debye
μ_y	-1.1061	Debye	-1.0940	Debye
μ_z	0.0004	Debye	0.0001	Debye
μ_{Toplam}	1.6942	Debye	1.6801	Debye
α_{xx}	49,628	a.u.	49,354	a.u.
α_{yy}	29,256	a.u.	29,067	a.u.
α_{zz}	20,138	a.u.	20,065	a.u.
A	33,007	$\times 10^{-24}$ esu	32,829	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	26,152	$\times 10^{-24}$ esu	25,985	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	-581,290	a.u.	-726,164	a.u.
β_y	-3494,350	a.u.	-3542,856	a.u.
β_z	58,622	a.u.	0,307	a.u.
β_{xxx}	-860,361	a.u.	-1020,272	a.u.
β_{xyy}	-1950,216	a.u.	-1954,601	a.u.
β_{xyy}	78,569	a.u.	92,627	a.u.
β_{yyy}	-1289,104	a.u.	-1337,254	a.u.
β_{xxxz}	-0,008	a.u.	0,195	a.u.
β_{xyz}	-0,129	a.u.	-0,031	a.u.
β_{yyz}	58,465	a.u.	0,083	a.u.
β_{zzz}	200,502	a.u.	201,482	a.u.
β_{yzz}	-255,031	a.u.	-251,002	a.u.
β_{zzz}	0,165	a.u.	0,029	a.u.
B	3,543	$\times 10^{-30}$ esu	3,617	$\times 10^{-30}$ esu

Tablo 3.38. 46 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	-0.7803	Debye	-0.7654	Debye
μ_y	-1.2193	Debye	-1.2255	Debye
μ_z	0.0304	Debye	0.0321	Debye
μ_{Toplam}	1.4479	Debye	1.4452	Debye
α_{xx}	53,500	a.u.	66,439	a.u.
α_{yy}	30,903	a.u.	41,874	a.u.
α_{zz}	21,351	a.u.	29,549	a.u.
A	35,251	$\times 10^{-24}$ esu	45,954	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	28,596	$\times 10^{-24}$ esu	32,529	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	262,537	a.u.	2992,260	a.u.
β_y	-3475,676	a.u.	-5084,198	a.u.
β_z	18,065	a.u.	-7,482	a.u.
β_{xxx}	282,952	a.u.	1996,021	a.u.
β_{xyy}	-1811,063	a.u.	-2206,522	a.u.
β_{xyy}	-23,773	a.u.	1181,505	a.u.
β_{yyy}	-1523,769	a.u.	-2504,880	a.u.
β_{xxxz}	-35,610	a.u.	-84,110	a.u.

β_{xyz}	-2,833	a.u.	8,251	a.u.
β_{yyz}	-2,379	a.u.	-15,841	a.u.
β_{xzz}	3,358	a.u.	-185,267	a.u.
β_{yzz}	-140,845	a.u.	-372,795	a.u.
β_{zzz}	56,054	a.u.	92,468	a.u.
B	3,486	$\times 10^{-30}$ esu	3,899	$\times 10^{-30}$ esu

Tablo 3.39. 47 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	0.2104	Debye	0.2104	Debye
μ_y	-3.2757	Debye	-3.2757	Debye
μ_z	0.2652	Debye	0.2652	Debye
μ_{Toplam}	3.2932	Debye	3.2932	Debye
α_{xx}	55,075	a.u.	54,763	a.u.
α_{yy}	31,360	a.u.	31,150	a.u.
α_{zz}	21,722	a.u.	21,611	a.u.
A	36,052	$\times 10^{-24}$ esu	35,842	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	29,730	$\times 10^{-24}$ esu	29,560	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	-1966,378	a.u.	1909,348	a.u.
β_y	-3380,453	a.u.	-3411,620	a.u.
β_z	722,926	a.u.	-705,287	a.u.
β_{xxx}	-1997,249	a.u.	1895,671	a.u.
β_{xxy}	-1691,758	a.u.	-1687,491	a.u.
β_{xyy}	-103,176	a.u.	126,120	a.u.
β_{yyy}	-1404,530	a.u.	-1441,298	a.u.
β_{xxz}	172,429	a.u.	-163,323	a.u.
β_{xyz}	13,502	a.u.	10,896	a.u.
β_{yyz}	330,232	a.u.	-322,245	a.u.
β_{xzz}	134,047	a.u.	-112,444	a.u.
β_{yzz}	-284,165	a.u.	-282,831	a.u.
β_{zzz}	220,266	a.u.	-219,719	a.u.
B	3,977	$\times 10^{-30}$ esu	3,973	$\times 10^{-30}$ esu

Tablo 3.40. 48 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	3.4193	Debye	-3.4790	Debye
μ_y	-1.0304	Debye	-1.0269	Debye
μ_z	0.0006	Debye	-0.0003	Debye
μ_{Toplam}	3.5712	Debye	3.6272	Debye
α_{xx}	54,860	a.u.	54,531	a.u.
α_{yy}	29,994	a.u.	29,797	a.u.
α_{zz}	20,574	a.u.	20,492	a.u.

A	35,143	$\times 10^{-24}$ esu	34,940	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	30,681	$\times 10^{-24}$ esu	30,471	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	1096,629	a.u.	-1005,756	a.u.
β_y	-3255,900	a.u.	-3308,450	a.u.
β_z	0,417	a.u.	-0,303	a.u.
β_{xxx}	600,189	a.u.	-510,968	a.u.
β_{xxy}	-1747,556	a.u.	-1749,169	a.u.
β_{xyy}	169,393	a.u.	-185,821	a.u.
β_{yyy}	-1253,151	a.u.	-1306,490	a.u.
β_{xxz}	0,295	a.u.	-0,223	a.u.
β_{xyz}	-0,038	a.u.	-0,008	a.u.
β_{yyz}	0,078	a.u.	-0,083	a.u.
β_{xzz}	327,047	a.u.	-308,967	a.u.
β_{yzz}	-255,193	a.u.	-252,791	a.u.
β_{zzz}	0,044	a.u.	0,003	a.u.
B	3,436	$\times 10^{-30}$ esu	3,458	$\times 10^{-30}$ esu

Tablo 3.41. 49 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	2.6327	Debye	2.6410	Debye
μ_y	-0.8705	Debye	-0.8729	Debye
μ_z	1.5044	Debye	1.4898	Debye
μ_{Toplam}	3.1547	Debye	3.1553	Debye
α_{xx}	51,663	a.u.	51,276	a.u.
α_{yy}	29,893	a.u.	29,754	a.u.
α_{zz}	23,220	a.u.	23,128	a.u.
A	34,925	$\times 10^{-24}$ esu	34,719	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	25,764	$\times 10^{-24}$ esu	25,489	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	-507,524	a.u.	-643,629	a.u.
β_y	-3236,769	a.u.	-3205,343	a.u.
β_z	1927,783	a.u.	2030,639	a.u.
β_{xxx}	-1362,145	a.u.	-1551,717	a.u.
β_{xxy}	-1830,014	a.u.	-1792,587	a.u.
β_{xyy}	105,660	a.u.	138,893	a.u.
β_{yyy}	-1229,999	a.u.	-1268,297	a.u.
β_{xxz}	932,103	a.u.	956,996	a.u.
β_{xyz}	223,862	a.u.	245,795	a.u.
β_{yyz}	158,672	a.u.	177,435	a.u.
β_{xzz}	748,961	a.u.	769,195	a.u.
β_{yzz}	-176,756	a.u.	-144,458	a.u.
β_{zzz}	837,008	a.u.	896,208	a.u.
B	3,801	$\times 10^{-30}$ esu	3,849	$\times 10^{-30}$ esu

Tablo 3.42. 50 Molekülünün DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metod ve temel setleriyle oluşturulan dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

	B3LYP		B3PW91	
μ_x	-0.0528	Debye	-1.2607	Debye
μ_y	-2.3138	Debye	-1.2222	Debye
μ_z	0.0204	Debye	0.1637	Debye
μ_{Toplam}	2.3145	Debye	1.7635	Debye
α_{xx}	44,389	a.u.	44,187	a.u.
α_{yy}	36,370	a.u.	36,148	a.u.
α_{zz}	14,105	a.u.	14,061	a.u.
A	31,621	$\times 10^{-24}$ esu	31,465	$\times 10^{-24}$ esu
$\Delta\alpha$	27,177	$\times 10^{-24}$ esu	27,019	$\times 10^{-24}$ esu
β_x	-2294,653	a.u.	2567,096	a.u.
β_y	-3887,853	a.u.	-4024,102	a.u.
β_z	-86,438	a.u.	95,285	a.u.
β_{xxx}	-1718,904	a.u.	1952,730	a.u.
β_{xxy}	-778,769	a.u.	-774,516	a.u.
β_{xyy}	-780,306	a.u.	816,367	a.u.
β_{yyy}	-2942,510	a.u.	-3084,902	a.u.
β_{xxz}	164,798	a.u.	-149,013	a.u.
β_{xyz}	4,264	a.u.	9,589	a.u.
β_{yyz}	-57,801	a.u.	58,465	a.u.
β_{xzz}	204,557	a.u.	-202,002	a.u.
β_{yzz}	-166,574	a.u.	-164,684	a.u.
β_{zzz}	-193,435	a.u.	185,834	a.u.
B	4,515	$\times 10^{-30}$ esu	4,774	$\times 10^{-30}$ esu

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Tez kapsamında, literatürde kayıtlı 6 farklı 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (44) moleküllerinin geometrik (Bağ uzunluğu, Bağ açısı), spektroskopik (IR, NMR ve UV), elektronik (HOMO-LUMO enerji farkları, iyonlaşma potansiyeli, elektron ilgisi, moleküler sertlik, moleküler yumuşaklık, elektronegatiflik ve Mulliken atomik yük değerleri) ve lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemleri ve polarize setleri kullanılarak incelenmiştir. İlk önce, Sentezlenmiş moleküllerin minimum enerjili ve en kararlı yapısı bulabilmek için, DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemleri kullanılarak optimize edilmiştir. Bulunan minimum enerjili optimize edilmiş geometrik yapıdan ilgili bileşiklerin bağ uzunlukları ile bağ açıları belirlenmiştir. Moleküllerin optimize yapısından titreşim frekansları hesaplanmıştır. Bilgisayar destekli Gaussian 09W paket programı kullanılarak hesaplanan IR frekanslarının titreşim türlerinin belirlenmesinde Veda4f programından faydalanılmıştır. Teorik hesaplanan titreşim frekansı değerleri uygun skala faktörleriyle çarpılmış ve deneysel değerlerle mukayese edilmiştir. DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 yöntemlerine göre teorik IR spektrumları çizilmiştir. ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri optimize yapı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmış ve teorik olarak elde edilen kimyasal kayma değerleri deneysel değerler ile karşılaştırılmış ve uyumlu oldukları gözlemlenmiştir. İlâveten, 6 adet 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların (44) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri, enerji farkları ve HOMO-LUMO enerjilerinden elde edilen elektronik parametreler (**I**; İyonlaşma potansiyeli, **A**; elektron ilgisi, **ΔE**; Enerji Boşluğu, **χ**; elektronegatiflik, **S**; moleküler yumuşaklık, **ω**; Elektrofilik İndeks, **IP**; Nükleofilik İndeks, **Pi**, Kimyasal Potansiyel, Toplam Enerji) ve Mulliken atomik yük değerleri belirlenmiştir.

4.1. Moleküler Özellikler

Optimize yapılardan yola çıkarak **44 tipi** bileşiklerin C-3'e bağlı aril gruplarındaki C-C bağ uzunlukları ile C-H bağ uzunluklarının literatürdeki verilerle mukayese edilmiştir. Literatüre göre benzen halkasında bulunan karbon-karbon bağ uzunlukları 1.397 Å⁰,

karbon-hidrojen bağ uzunlukları ise 1.084 \AA olarak gözlemlenmiştir [90]). 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen halkasındaki C-C bağ uzunlukları ortalamaları DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre 1.392 \AA ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemine göre 1.395 \AA olduğu belirlenmiştir. Bulunan teorik değerler literatür ile karşılaştırıldığında DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setiyle elde edilen değerler literatüre daha yakın olduğu gözlemlenmiştir. Sentezlenmiş bileşiklerdeki C-S bağ uzunlukları ortalamaları DFT/B3LYP/6-311G(d,p) metoduna göre 1.741 \AA ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) metoduna göre 1.730 \AA olduğu bulunmuştur Tablo 4.1 ve Tablo 4.2).

Tablo 4.1. 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-S bağ uzunlukları

Bağ Türü	45	46	47	48	49	50	Ort
C4-C5	1.384	1.384	1.384	1.384	1.384	1.384	1.384
C5-C6	1.423	1.427	1.427	1.427	1.427	1.427	1.426
C6-C7	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364
C4-S34	1.742	1.754	1.754	1.754	1.754	1.754	1.752
C7-S34	1.718	1.728	1.728	1.728	1.728	1.728	1.726

Tablo 4.2. 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-S bağ uzunlukları

Bağ Türü	45	46	47	48	49	50	Ort.
C4-C5	1.384	1.384	1.383	1.384	1.384	1.384	1.384
C5-C6	1.423	1.423	1.423	1.423	1.423	1.423	1.423
C6-C7	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364	1.364
C4-S34	1.742	1.742	1.742	1.742	1.742	1.742	1.742
C7-S34	1.718	1.718	1.718	1.718	1.718	1.718	1.718

44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan triazol halkasındaki C3'e bağlı benzen halkasının DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemlerine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-H bağ uzunlukları Tablo 4.3 ve Tablo 4.4 verilmiştir. Elde edilen C-C bağ uzunluğu değerlerinin ortalaması her iki yönteme göre de 1.393 \AA olduğu bulunmuştur. Her iki yöntemle elde edilen C-C bağ uzunluğu değerlerinin literatürdeki değere çok yakın ve uyumlu olduğu belirlenmiştir. Benzen halkasındaki C-H bağ uzunlukları incelendiğinde, DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 1.084 \AA ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemine göre 1.085 \AA olduğu gözlemlenmiştir.

DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntemine göre elde edilen değer literatürle aynı olduğu belirlenmiş ve elde edilen teorik verileri literatürdeki değerleri doğrular niteliktedir.

Tablo 4.3. 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan triazol C3'e bağlı benzen halkasının DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-H bağ uzunlukları

Bağ Türleri	45	46	47	48	49	50	Ort.
C10-C11	1.395	1.396	1.392	1.396	1.396	1.401	1.396
C10-C15	1.395	1.396	1.400	1.396	1.396	1.399	1.397
C11-C12	1.390	1.392	1.396	1.392	1.389	1.387	1.391
C12-C13	1.391	1.398	1.396	1.390	1.390	1.393	1.393
C13-C14	1.391	1.398	1.400	1.390	1.392	1.390	1.394
C14-C15	1.390	1.392	1.386	1.392	1.392	1.390	1.390
C11-H25	1.086	1.085	1.085	1.085	1.083	1.084	1.085
C12-H26	1.085	1.086	1.082	1.082	-	1.085	1.084
C13-H27	1.085	-	-	-	1.082	1.085	1.084
C14-H28	1.085	1.086	1.083	1.082	1.084	1.085	1.084
C15-H29	1.086	1.085	1.085	1.085	1.084	1.081	1.084

Tablo 4.4. 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan triazol C3'e bağlı benzen halkasının DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik C-C ve C-H bağ uzunlukları

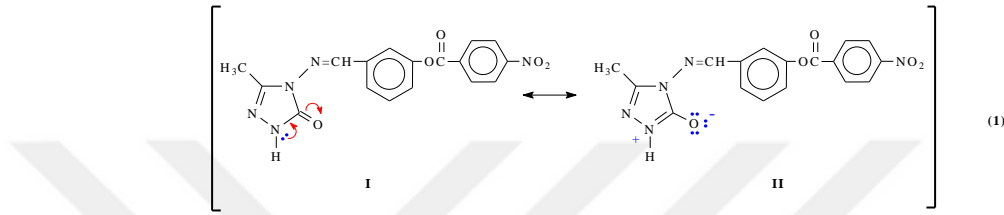
Bağ Türleri	45	46	47	48	49	50	Ort.
C10-C11	1.395	1.394	1.390	1.394	1.394	1.401	1.395
C10-C15	1.395	1.394	1.398	1.394	1.394	1.399	1.396
C11-C12	1.390	1.389	1.393	1.389	1.388	1.387	1.389
C12-C13	1.391	1.396	1.394	1.389	1.389	1.393	1.392
C13-C14	1.391	1.396	1.398	1.389	1.390	1.390	1.392
C14-C15	1.390	1.390	1.398	1.389	1.390	1.390	1.391
C11-H25	1.086	1.086	1.086	1.086	1.084	1.084	1.085
C12-H26	1.085	1.086	1.083	1.083	-	1.085	1.084
C13-H27	1.085	-	-	-	1.083	1.085	1.084
C14-H28	1.085	1.086	1.084	1.083	1.085	1.085	1.085
C15-H29	1.086	1.086	1.086	1.086	1.085	1.081	1.085

Literatürde deneysel olarak C-N tekli bağ uzunluğu 1.49 \AA ve C=N çift bağ uzunluğu 1.27 \AA olarak elde edilmiştir [91]. DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 1.368 \AA ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemine göre 1.365 \AA olduğu ve DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntemleriyle gözlemlenen ortalama bağ uzunlukları deneysel olarak C-N tek bağ ve C=N çift bağ uzunluğu arasındaki bir değerde olduğu belirlenmiştir. Bu yüzden 1,2,4-triazol-5-on halkasında C-NH bağının kısmi çifte bağ özelliğine sahip olduğu gözlemlenmiştir.

Tablo 4.5. 44 tipi bileşiklerin yapısında bulunan tiyofen grubunun DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yöntem ve temel setine göre elde edilmiş teorik N2-C bağ uzunlukları

	Bağ Türü	45	46	47	48	49	50	Ort.
B3LYP	C2-N30	1.368	1.368	1.368	1.369	1.369	1.367	1.368
B3PW91	C2-N30	1.365	1.365	1.365	1.365	1.365	1.364	1.365

1,2,4-triazol-5-on halkasında C-NH bağının kısmı çift bağ özelliği göstermesinin nedeni aşağıda da belirtildiği üzere rezonans yapılarından kaynaklanmaktadır (Denklem 1).



4.2. İnfrared Spektrum Analizi

Frekans değerleri incelenen 44 tipi bileşiklerin B3LYP ve B3PW91 metodları ve 6-311G(d,p) polarize setinde gaz fazında titreşim frekansları hesaplanmıştır. Optimize yapıdan yola çıkarak elde edilen verilerde negatif frekansa rastlanmamıştır. Dolayısıyla bu durum optimize yapının en kararlı yapı olduğunu belirtmektedir. DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91'ye göre teorik olarak İnfrared spektrumları oluşturulmuştur (Şekil 3.7-12). Bilgisayar ortamında Gaussian 09W paket programı kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen titreşim frekansları DFT/B3LYP/6-311G(d,p) metodu için 0.9516 ve DFT/B3LYP/6-311G(d,p) metodu için 0,9905 skala faktörleri ile çarpılarak deneysel verilerle uyumlu hale getirilmiştir [80]. Deneysel IR spektral değerleri [71] ile teorik IR spektral değerleri mukayese edilmiş ve bazı fonksiyonel grup bölgeleri deneysel ve teorik olarak analiz edilmiştir. Yapılan analiz sonucu deneysel verilerle teorik verilerin literatürde yapılan benzer çalışmalarla son derece uyumlu olduğu görülmüştür [90, 92-95]. Her iki yöntem ve temel setle elde edilen titreşim değerlerinin titreşim türlerinin belirlenmesinde veda4f programı kullanılmıştır [96]. Sentezlenmiş bileşikler düzlemsel ve lineer olmayan yapıda olduğu 3N-6 adet serbest titreşimi hareketleri bulunmaktadır [97].

44 Tipi heterosiklik 1,2,4-triazol bileşiklerinde N-H gerilme titreşimleri gözlenmektedir. N-H gerilme titreşimleri deneysel verilerde 3184-3165 cm⁻¹ aralıklarında görülürken teorik olarak DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 3646-3641 cm⁻¹ aralıklarında, DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminde 3520-3515 cm⁻¹ aralıklarında elde edilmiştir. 1,2,4-Triazol-5-on halkasında bulunan karbonil pikleri deneysel 1707-1700 cm⁻¹ aralıklarında gözlemlenirken DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 1785-1783 cm⁻¹ aralıklarında, DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminde 1735-1733 cm⁻¹ aralıklarında bulunmuştur. Tablo 4.5’de görüldüğü gibi, Schiff Bazı halkasında bulunan imin grubuna ait pikler deneysel 1613-1612 cm⁻¹ ve 1594-1574 cm⁻¹ aralıklarında görülürken DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 1633-1631 cm⁻¹ ve 1622-1621 cm⁻¹ aralıklarında, DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminde 1585-1582 cm⁻¹ ve 1575-11574 cm⁻¹ aralıklarında belirlenmiştir. Tablo 4.5’de görüldüğü üzere, deneysel verilerin [71] her iki yöntemle elde edilen titreşim frekanslarının mukayesesinde B3PW91’e göre elde edilen verilerle daha uyumlu olduğu görülmüştür.

Tablo 4.6. **44** Tipi moleküllerin seçilmiş titreşim türlerinin deneysel ve teorik (DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p)) verileri

		NH	C=O	N=C	CH	C-C
	Deneysel	3169	1706	1612,1590		
45	B3LYP	3645	1783	1631,1621	3209-3000	1636-1631,1568-1516, 1327
	B3PV91	3519	1734	1582,1574	3093-2893	1586-1582,1517-1458, 1286
	Deneysel	3167	1707	1612,1593		
46	B3LYP	3646	1783	1632,1622	3209-2991	1645, 1568-1485, 1335-1319
	B3PV91	3520	1734	1584,1575	3093-2885	1594, 1517-1430, 1292-1271
	Deneysel	3166	1707	1612,1593		
47	B3LYP	3646	1782	1632,1622	3209-2971	1644, 1606-1485, 1440-1341
	B3PV91	3520	1733	1584,1575	3093-2862	1594, 1556-1429, 1387-1306
	Deneysel	3165	1705	1613,1589,		
48	B3LYP	3644	1784	1633,1621	3210-3000	1633, 1601-1485, 1446-1432, 1325
	B3PV91	3518	1735	1585,1574	3094-2893	1585, 1553-1431, 1393-1389, 1294
	Deneysel	3184	1703	1584		
49	B3LYP	3645	1785	1621	3209-3000	1626-1604, 1511-1432 1328 1307
	B3PV91	3519	1735	1574	3093-2893	1577-1554, 1455-1389 1287,1258
	Deneysel	3166	1700	1578		
50	B3LYP	3641	1783	1622	3210-2999	1613-1515, 1419-1394, 1315
	B3PV91	3515	1734	1575	3090-2892	1564-1460, 1376-1343, 1275

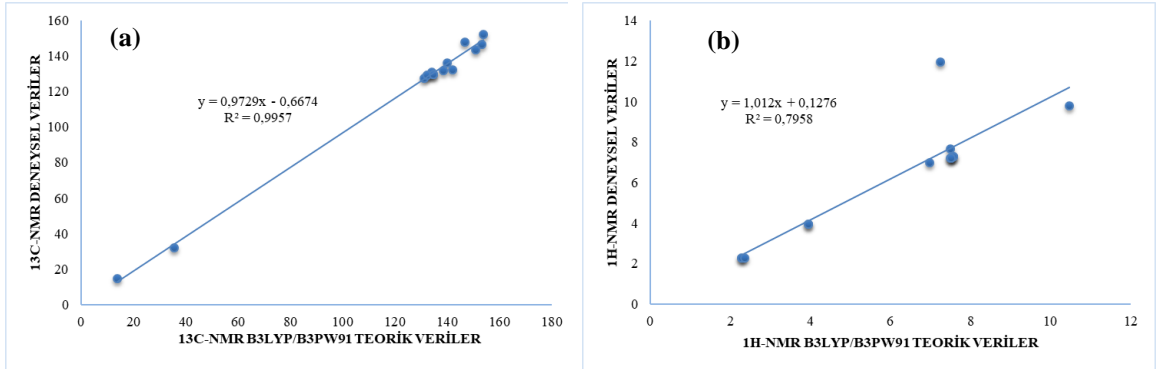
Heteroaromatik yapılarda, 3200–2900 cm^{-1} bölgesinde C-H gerilme titreşimi görülmektedir. Bu bölge C-H gerilme titreşiminin tanımlanması için karakteristik bölgedir. Mevcut çalışmada, C-H gerilme titreşimine ait IR bantları DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 3210-2999 cm^{-1} aralıklarında, DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminde 3094-2885 cm^{-1} aralıklarında gözlenmiştir.

Fenil halkasının titreşim analizi, bağlı olan substituentlerden dolayı beklendiği gibi farklıdır. Aromatik yapılardaki karbon-karbon gerilme titreşimleri, 1625-1430 cm^{-1} 'deki karakteristik bölgede gözlemlenir. Aromatik altı üyeli halkalar için (benzen) iskelet titreşimlerinden dolayı yaklaşık 1500 cm^{-1} 'de güçlü iki veya üç bant görülür. Genel olarak, bantlar değişken yoğunluktadır ve 1625-1590, 1590-1575, 1525-1470 ve 1465-1430 ve 1380-1280 cm^{-1} bölgelerinde gözlenir.

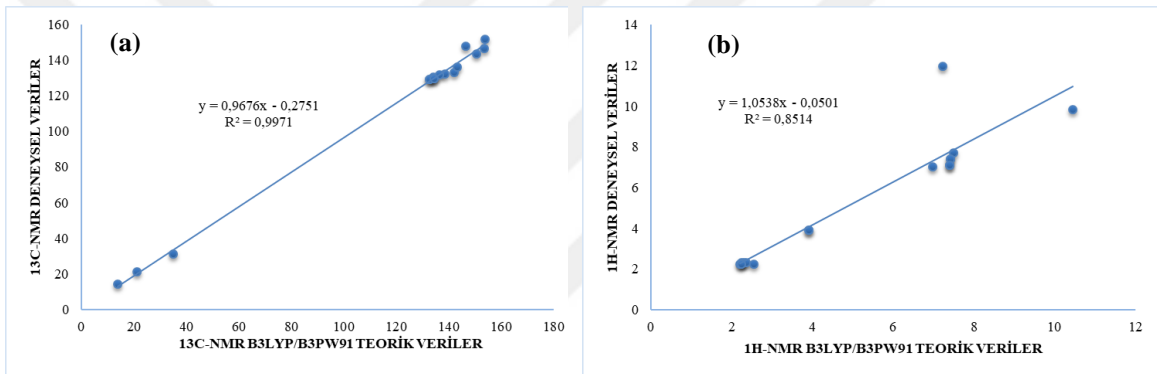
Bu faktörlere dayanarak, bu çalışmada DFT/B3LYP/6-311G(d,p) yönteminde 1626-1636, 1568-1485, 1335-1315, 1307-1292 cm^{-1} aralıklarında FT-IR bantları C-C gerilme titreşimleri ve DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminde 1594-1577, 1556-1389, 1292-1289, 1275-1258 cm^{-1} aralıklarında FT-IR bantları C-C gerilme titreşimleri olarak değerlendirilmiştir. Yapılan değerlendirme sonucu literatürdeki verilere DFT/B3PW91/6-311G(d,p) yönteminin daha yakın olduğu gözlemlenmiştir (Tablo 5).

4.3. NMR Spektral Analiz

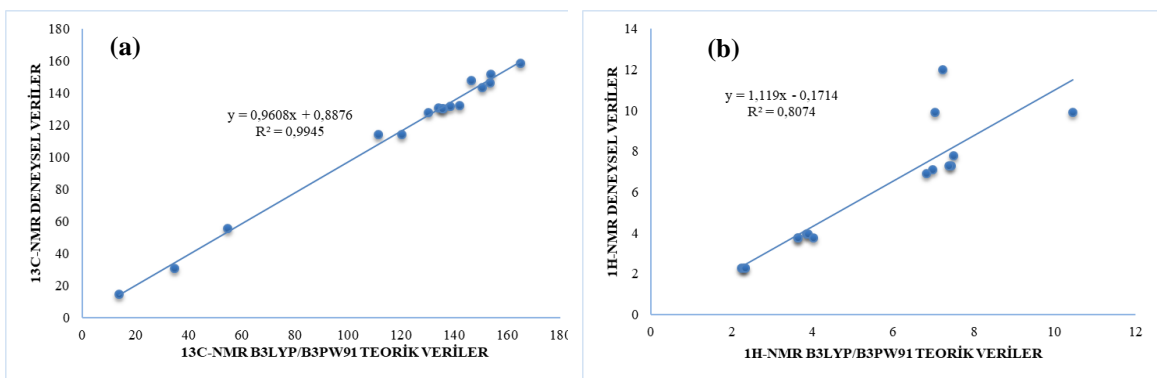
Çalışmada, 3-aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (**44**) bileşiklerinin ^1H -NMR ve ^{13}C -NMR, kimyasal kayma değerleri en minimum enerjili optimize edilmiş yapılardan yola çıkılmıştır. Bileşiklerin elde edilen optimize yapıları yardımıyla kimyasal kayma değerleri, B3LYP ve B3PW91 metotlarında Gauge-Independent Atomic Orbital (GIAO) NMR yaklaşımı [81-84] ile 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak DMSO çözücü fazında oluşturulmuştur (Tablo 4.19-24). Hesapsal olarak elde edilen ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerleri deneysel veriler ile [71] en küçük kareler metoduna kullanılarak regresyon analizi yapılmış elde edilen R^2 değerlerinin özellikle ^{13}C -NMR verilerinde neredeyse 1'e yakın olduğu görülmüştür (Şekil 4.1-6).



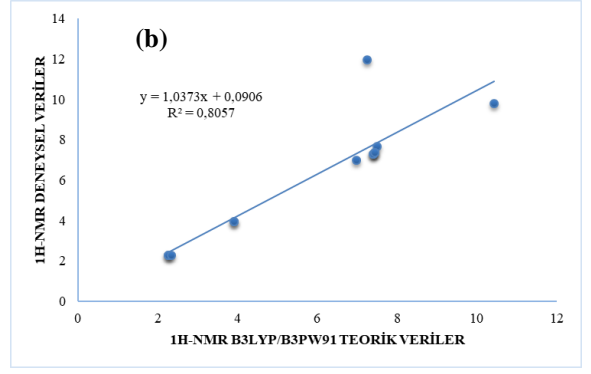
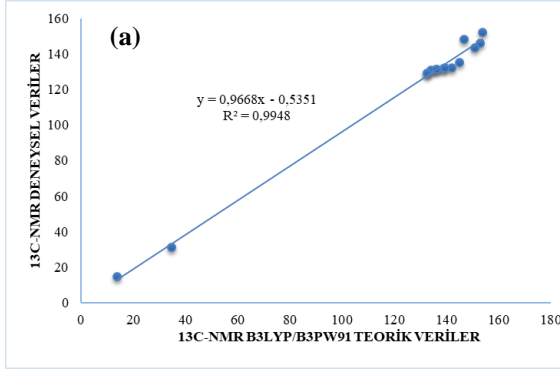
Şekil 4.1. 45 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



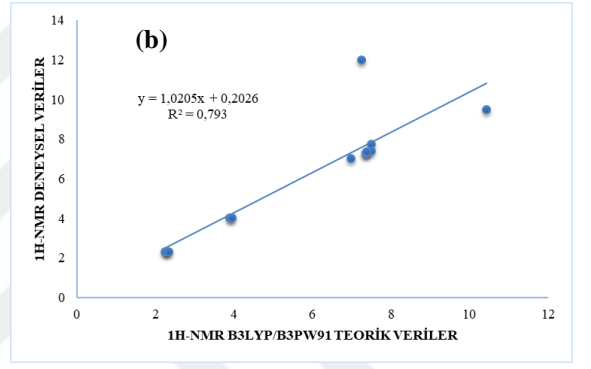
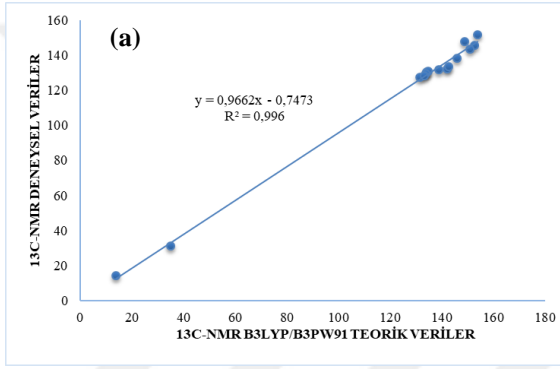
Şekil 4.2. 46 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



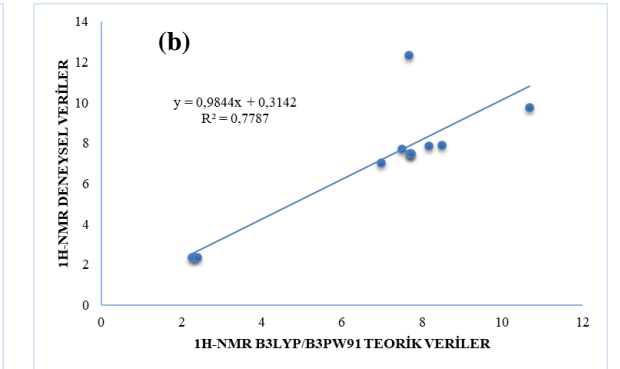
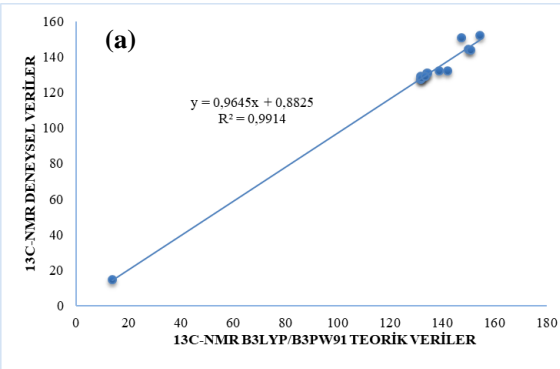
Şekil 4.3. 47 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4.4. 48 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 4.5. 49 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



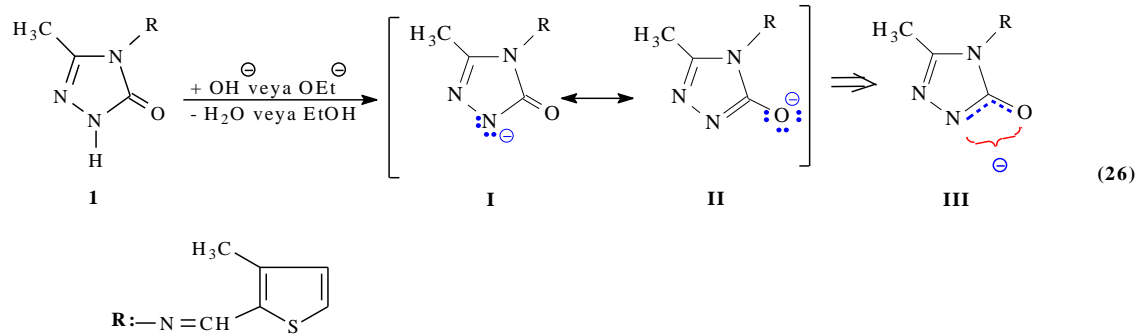
Şekil 4.6. 50 Molekülün B3LYP(DMSO) ve B3PW91(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Moleküllerin regresyon analizi sonucu ilgili tüm bileşiklerin oluşturulan R² değerleri ortalaması ¹³C-NMR DFT/6-311G(d,p) (DMSO) için 0.995 ve ¹H-NMR DFT/6-311G(d,p) (DMSO) için 0.815 olarak hesaplanmıştır. $\delta_{\text{calc}}=a \delta_{\text{exp}}+b$ Formülasyonu ile ¹³C-NMR ve ¹H-NMR değerlerinin standart hata oranları tez kapsamında çalışılan iki yöntemle göre de belirlenmiştir.

Tablo 4.7. 44 Tipi Moleküllerin regresyon analizi sonucu oluşturulan R² değerleri ve bu değerlerin ortalaması

	45	46	47	48	49	50	Ort.
¹³ C-NMR	0,996	0,997	0,994	0,995	0,996	0,991	0,995
¹ H-NMR	0,796	0,851	0,867	0,806	0,793	0,779	0,815

Deneysel ve teorik olarak oluşturulan ¹³C-NMR ve ¹H-NMR izotropik kayma değerleri karşılaştırılmış **a**, **b** ve **R** değerine göre doğrusal bir korelasyon görülmüştür (Şekil 4.1-6). 3-Aril-4-(3-metil-2-tiyenilmetileneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (**44**) bileşiklerinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kimyasal kayma değerleri B3LYP ve B3PW91 metotlarıyla 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak en kararlı yapıya optimize edilmiş ve bu optimize yapıları GIAO NMR yaklaşımı ile DMSO çözücülü ortamda teorik hesaplama sonucu elde edilen verilerle deneysel veriler [71] arasında özellikle ¹³C-NMR kimyasal kayma değerlerinin son derece uyumlu olduğu görülmüştür. ¹H-NMR kimyasal kayma değerlerinde ise R² değerinin beklenende düşük olduğu belirlenmiştir. R² değerinin düşük olmasının sebebi 1,2,4-triazol-5-on halkasında bulunan N-H protonu asidik değer taşıdığından kaynaklanmaktadır [13, 98]. Dolayısıyla, deneysel olarak gözlemlenen N-H protonu değeri, teorik olarak elde edilen verilerden düşük alanda görülmüştür (Denklem 26).



4.4. UV-vis Spektral Analiz

Tez kağısınınmda çalışılan bileşiklerin UV-visible absorpsiyon spektrumları etanol çözücüsünde alınmıştır. Hesaplamalar optimize yapıdan yola çıkarak TD-DFT/B3LYP ve TD-DFT/B3PW91 metodları ve 6311G(d,p) polarize setiyle yapılmıştır. Hesaplanmış absorpsiyon dalga boyları (λ), osilator gücü (f) ve uyarma enerjileri etanol çözücü fazında Tablo 3.25-30'da gösterilmiştir. Moleküllerdeki substitusyonun donör karakteri ne kadar güçlü olursa moleküle itilen daha fazla elektron bulunur ve λ_{\max} daha büyük olur. Bu değerler solvent etkisiyle hafifçe kaydırılabilir. Substituent ve çözücü etkisinin rolü UV spektrumuna etkiş eder. Moleküllerin UV-vis spektrumları Şekil 3.13-18'de verilmiştir.

4.5. HOMO and LUMO analizi

Frontier moleküler orbital, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) ve en düşük boş moleküler orbital (LUMO), uyarma özelliklerinin ve elektron taşıma kabiliyetinin uygun bir kalitatif tahminini sunabilir [99, 100]. Teorik olarak incelenen moleküllerin HOMO ve LUMO enerjileri, DFT/B3LYP/6311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6311G(d,p) yöntemleri kullanılarak hesaplanmış ve Şekil 3.19-24'te gösterilmiştir. Moleküllerin E_{HOMO} ve E_{LUMO} değerleri, iyonlaşma enerjisi ve elektron afinite değerleri ile ilişkilidir [101, 102]. ΔE [103], η [104], σ [105], χ ve P_i [106] şu şekilde hesaplanabilir.

$$I = -E_{\text{HOMO}} \quad [101, 102]$$

$$A = -E_{\text{LUMO}} \quad [101, 102]$$

$$\Delta E = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) \quad [103]$$

$$\eta = (I - A) / 2 \quad [104]$$

$$\sigma = 1/\eta \quad [105]$$

$$\chi = (I + A) / 2 \quad [106]$$

$$P_i = -\chi \quad [106]$$

Elektrofiliklik (ω) endeksi, verici ile alıcı arasındaki maksimum elektron akışına bağlı olarak enerji tükenmesinin bir ölçüsüdür [107]. Nükleofiliklik (ϵ) endeksi yeni bir moleküler yapı tanımlayıcısıdır [108].

$$\omega = P_i^2/2\eta \quad [107]$$

$$\varepsilon = P_i \cdot \eta \quad [108]$$

Moleküllerin İyonlaşma Potansiyeli (I), Elektron İlgisi (A), Enerji Boşluğu (ΔE), elektronegatiflik (χ), Moleküler Yumuşaklık (η), Elektrofilik İndeks(ω), Nükleofilik İndeks (IP), Kimyasal Potansiyel (Pi) değerleri Tablo 4.7-12’de verilmiştir.

Tablo 4.8. 45 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	138.534	46.066
A ; Elektron İlgisi	42.287	139.613
ΔE ; Enerji Boşluğu	96.246	96.548
χ ; elektronegatiflik	90.411	91.339
η ; Moleküler Yumuşaklık	48.123	48.274
ω ; Elektrofilik İndeks	0.999	1.023
IP ; Nükleofilik İndeks	-13.867	-14.054
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-90.411	-91.339
Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.

Tablo 4.9. 46 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	137.969	146.046
A ; Elektron İlgisi	41.861	45.513
ΔE ; Enerji Boşluğu	96.108	97.533
χ ; elektronegatiflik	89.915	94.279
η ; Moleküler Yumuşaklık	48.054	48.766
ω ; Elektrofilik İndeks	0.987	1.101
IP ; Nükleofilik İndeks	-13.771	-14.654
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-89.915	-94.279
Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.

Tablo 4.10. 47 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	137.630	138.659
A ; Elektron İlgisi	41.566	42.306
ΔE ; Enerji Boşluğu	96.064	96.353
χ ; elektronegatiflik	89.598	90.482
η ; Moleküler Yumuşaklık	48.032	48.176
ω ; Elektrofilik İndeks	0.979	1.002
IP ; Nükleofilik İndeks	-13.717	-13.394
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-89.598	-90.482
Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.

Tablo 4.11. 48 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	140.780	141.791
A ; Elektron İlgisi	44.333	45.042
ΔE ; Enerji Boşluğu	96.447	96.748
χ ; elektronegatiflik	92.557	93.416
η ; Moleküler Yumuşaklık	48.224	48.374
ω ; Elektrofilik İndeks	1.049	1.072
IP ; Nükleofilik İndeks	-14.226	-14.403
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-92.557	-93.416
Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.

Tablo 4.12. 49 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	140.579	141.590
A ; Elektron İlgisi	44.201	44.885
ΔE ; Enerji Boşluğu	96.378	96.704
χ ; elektronegatiflik	92.390	93.238
η ; Moleküler Yumuşaklık	48.189	48.352
ω ; Elektrofilik İndeks	1.045	1.068
IP ; Nükleofilik İndeks	-14.190	-14.369
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-92.390	-93.238

Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.
---------------	-----------------	-----------------

Tablo 4.13. 50 Molekülünün DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre elde edilen toplam enerji ve elektronik özellikler

	DFT/B3LYP (kcalxmol ⁻¹)	DFT/B3PW91 (kcalxmol ⁻¹)
I ; İyonlaşma Potansiyeli	138.239	139.437
A ; Elektron İlgisi	43.260	44.208
ΔE ; Enerji Boşluğu	94.979	95.230
χ ; elektronegatiflik	90.750	91.823
η ; Moleküler Yumuşaklık	47.489	47.615
ω ; Elektrofilik İndeks	0.993	1.020
IP ; Nükleofilik İndeks	-13.736	-13.935
Pi ; Kimyasal Potansiyel	-90.750	-91.823
Toplam Enerji	-1233.3314 a.u.	-1232.9533 a.u.

4.6. Mulliken popülasyon analizi

Atom yüklerinin, atomların nasıl tanımlandığına çok bağlı olduğunu kanıttır. Mulliken atomik yük hesaplaması, moleküler sistemin kuantum kimyasal hesaplamasının uygulanmasında önemli bir role sahiptir. Tez kapsamında incelenen moleküllerin doğal popülasyon analizi DFT/B3LYP/6311G(d,p) ve DFT/B3PW91/6311G(d,p) metodları kullanılarak Mulliken popülasyon analizi [86] ile elde edilir. Moleküllerin atom yükleri Tablo 3.31-36’da verilmiştir. Hidrojen atomları ile bazı karbon atomları yüklerinin pozitif olduğunu ve tüm azot ve oksijen atomlarının her iki temel sette daha negatif yüklere sahip olduğunu açıkça göstermektedir.

4.7. Doğrusal olmayan optik özellikler

Doğrusal olmayan optik (NLO) etkiler, faz, frekans, genlik veya diğer yayılma özelliklerinde değiştirilen yeni alanlar üretmek için farklı ortamlardaki elektromanyetik alanların etkileşimlerinden kaynaklanmaktadır [109].

Doğrusal olmayan optik aktivite, iletişim, sinyal işleme ve optik ara bağlantı gibi alanlarda gelişen teknolojiler için frekans değiştirme, optik modülasyon, optik anahtarlama ve optik mantık için yararlı bilgiler sağlar [110, 111]. İncelenen Schiff Bazlarının moleküler sisteminin ilk hiperpolarize edilebilirliği (β_0), sonlu alan yaklaşımına dayanarak DFT yöntemi kullanılarak hesaplanır. İlk hiperpolarize edilebilirlik, $3 \times 3 \times 3$ matris ile tanımlanabilen üçüncü dereceli bir tensördür. 3D matrisin 27 bileşeni, Kleinman simetrisi nedeniyle 10 bileşene düşürülebilir [112]. β 'ın bileşenleri, Taylor serisi enerjide harici elektrik alanındaki enerjinin genişlemesinde katsayılar olarak tanımlanmaktadır. Elektrik alanı zayıf ve homojen olduğunda, bu genişleme olur;

$$E = E_0 - \sum \mu_i F^i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \alpha_{ij} F^i F^j - \frac{1}{6} \sum_{ijk} \beta_{ijk} F^i F^j F^k - \frac{1}{24} \sum_{ijkl} \gamma_{ijkl} F^i F^j F^k F^l + \dots$$

Burada E_0 , gerilmemiş molekülün enerjisidir, F_i orijindeki alandır; μ_i , α_{ij} , β_{ijk} ve γ_{ijkl} , dipol momentinin, polarize edilebilirliğin, ilk hiperpolarizasyonun ve ikinci hiperpolarize edilebilirliğin bileşenleridir.

X, Y ve Z bileşenleri kullanılarak Toplam statik dipol momentleri (μ), ortalama polarize edilebilirlik (α_0), polarize edilebilirliklerin anizotropisi (α) ve ortalama birinci hiperpolarize edilebilirlik (β) kaynak [113] ve [114]'deki gibi belirlenmiştir.

Toplam statik dipol momentini

$$\mu = (\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)^{\frac{1}{2}}$$

İzotropik polarizasyon

$$\alpha_0 = \frac{(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz})}{3}$$

$$\Delta\alpha = 2^{\frac{1}{2}} [(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2 + 6\alpha_{xx}^2]^{\frac{1}{2}}$$

ortalama hiperpolarize edilebilirlik

$$\beta_0 = (\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\beta_x = \beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{xzz}$$

$$\beta_y = \beta_{yyy} + \beta_{xxy} + \beta_{yzz}$$

$$\beta_z = \beta_{zzz} + \beta_{xxz} + \beta_{yyz}$$

$$\beta = [(\beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{xzz})^2 + (\beta_{yyy} + \beta_{yzz} + \beta_{yxx})^2 + (\beta_{zzz} + \beta_{zxx} + \beta_{zyy})^2]^{\frac{1}{2}}$$

Şeklinde. Moleküllerin toplam statik dipol momenti, polarize edilebilirlikler ve ilk hiperpolarize edilebilirlikleri hesaplanmıştır ve Tablo 3.37-42’de verilmiştir. İlgili moleküllerin hesaplanan ilk hiperpolarize edilebilirlik Tablo 4.14’te verilmiştir ve literatürde benzer türevlerin bildirilen değerleriyle mukayese edilmiştir [115]. Moleküllerin hesaplanan hiperpolarize edilebilirliği, NLO materyali olarak referans gösterilen üre değerinden oldukça yüksek olduğu görülmektedir[116]. Dolayısıyla tez kapsamında teorik olarak çalışılan moleküllerin, doğrusal olmayan optik özellikleri gelecekteki çalışmaları için çekici olduğu sonucuna varabiliriz.

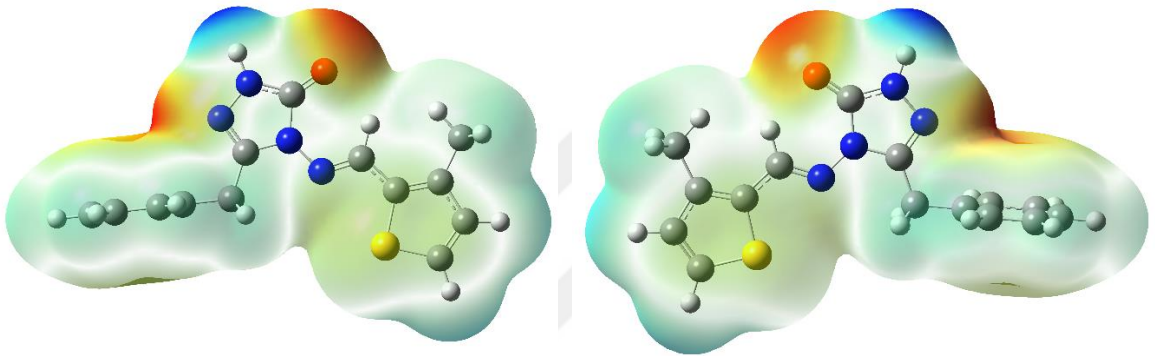
Tablo 4.14. 44 Tipi moleküllerin DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91’ye göre hesaplanan ilk hiperpolarize edilebilirlik değerleri

	Üre	45	46	47	48	49	50
B3LYP (x10⁻³⁰ esu)	0.3728	3.543	3.486	3.977	3.436	3.801	4.515
B3PW91(x10⁻³⁰ esu)		3.617	3.899	3.973	3.458	8.849	4.774

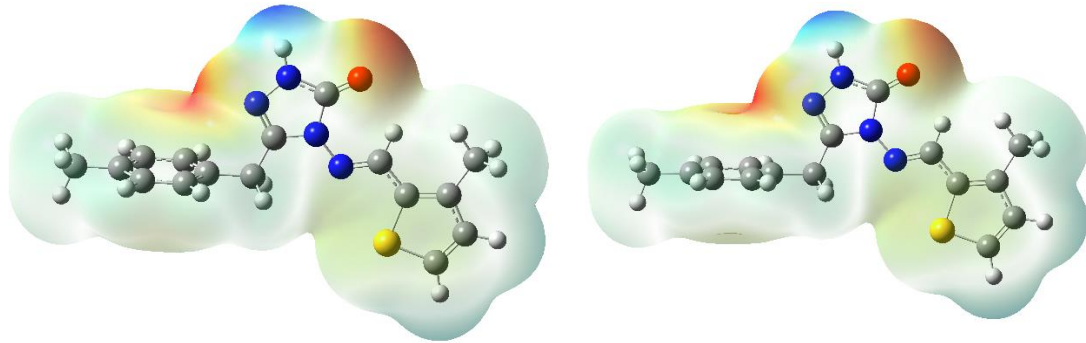
4.8. MEP Analizi

MEP, elektron yoğunluğu ile ilgilidir. Elektrofilik ve nükleofilik reaksiyonların bölgelerinin anlamada çok kullanışlıdır [117, 118]. Elektrostatik potansiyel V (r), İlaç-reseptör ve enzim-substrat etkileşimlerindeki gibi bir molekülün diğeri tarafından “tanınmasına” dayanan süreçleri analiz etmek için de çok uygundur [119, 120]. İncelenen moleküller için elektrofilik ve nükleofilik atakların reaktif bölgelerini tahmin etmek için DFT/B3LYP ve DFT/B3PW91 metodları ve 6311G(d,p) temel setiyle optimize edilmiş geometride moleküller enerji potansiyelleri hesaplanmıştır. Yüzeydeki elektrostatik

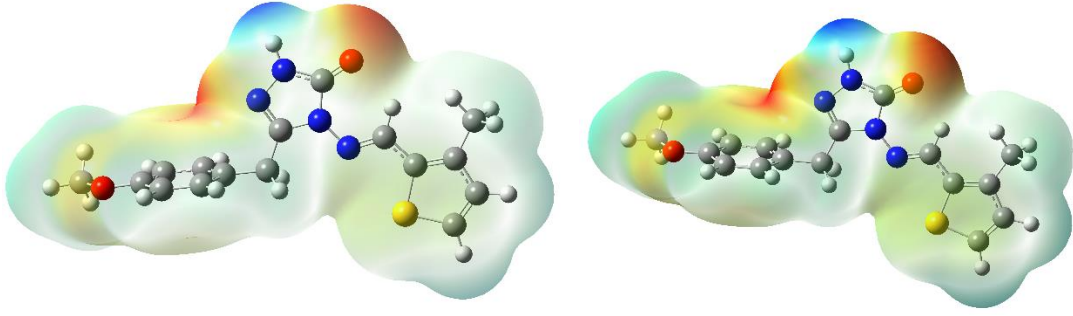
potansiyelin farklı deęerleri farklı renklerle belirtilir. Potansiyel artıřlar Kırmızı < turuncu < sarı < yeřil < mavi řeklinde sıralanır. Mavi blgeler en gçl ekmeyi ve kırmızı ise en gçl itmeyi gsterir [121, 122]. MEP'deki negatif blgeler (kırmızı ve sarı) elektrofilik reaktivite ve pozitif blgeler (mavi) ise nkleofilik reaktivite ile iliřkilidir (řekil 4.7-15). MEP'ten negatif ykn karbonil grubunu kapsadıęı ve pozitif blgenin kalan grupların zerinde olduęu grlmektedir. Karbonil grubundaki elektronegativite ne kadar fazlaysa o blge molekldeki en reaktif kısımdır.



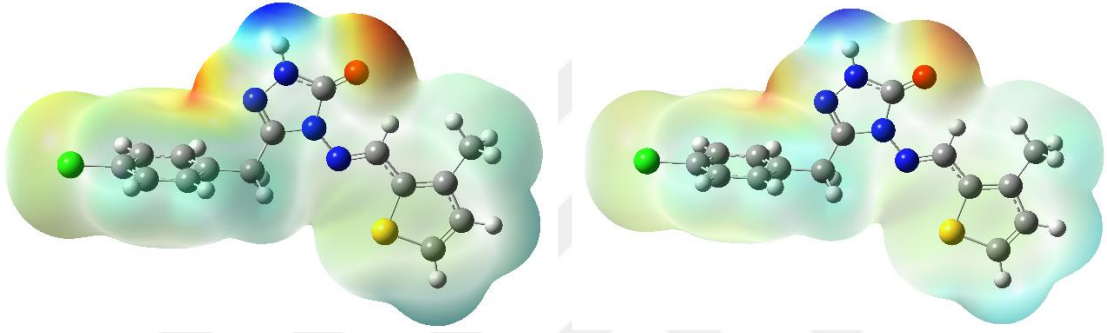
řekil 4.7. 45 Molekln B3LYP ve B3PW91 yntemleriyle elde edilen molekler enerji potansiyelleri



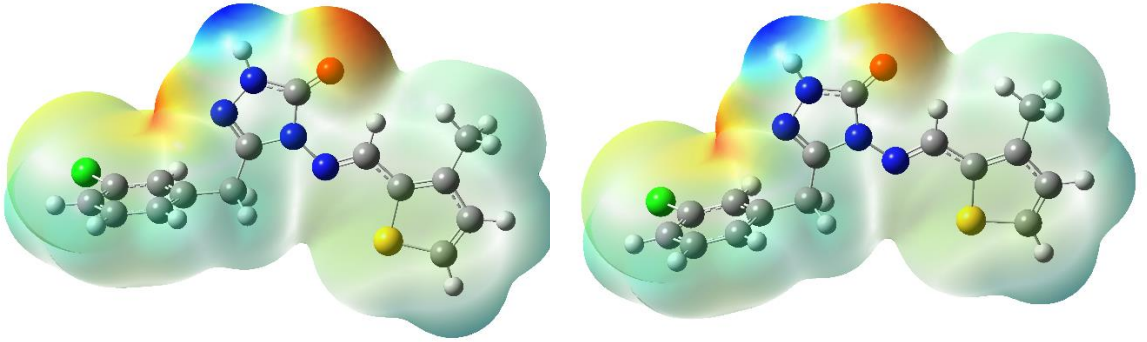
řekil 4.8. 46 Molekln B3LYP ve B3PW91 yntemleriyle elde edilen molekler enerji potansiyelleri



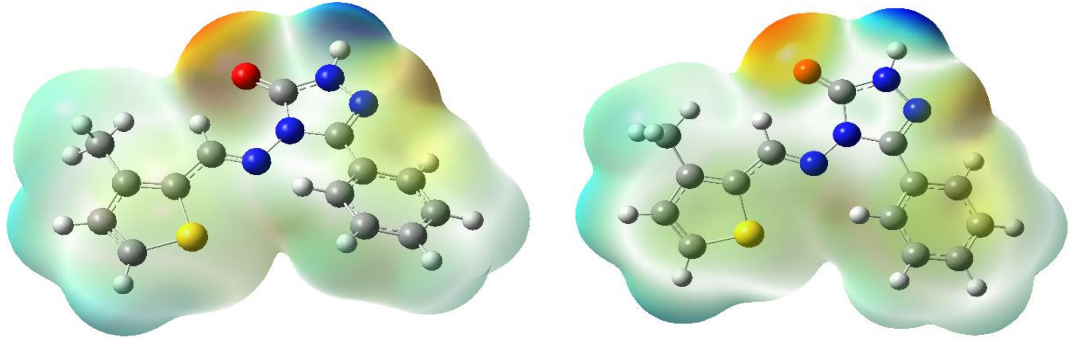
Şekil 4.9. 47 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri



Şekil 4.10. 48 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri



Şekil 4.11. 49 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri



Şekil 4.12. 50 Molekülün B3LYP ve B3PW91 yöntemleriyle elde edilen moleküler enerji potansiyelleri



5. KAYNAKLAR

- [1] http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/
(13.07.2019)
- [2] http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1999/illpres/
(13.07.2019).
- [3] http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/popular-chemistryprize2013 (13.07.2019).
- [4] Wang, L. P., Titov, A., McGibbon, R., Liu, F., Pande, V. S., Martínez, T, J. (2014). Discovering chemistry with an ab initio nanoreactor, *Nature Chemistry*, 6, 1044-1048.
- [5] Yüksek, H., Gürsoy, Ö., Çakmak, İ., Alkan, M. (2005). Synthesis and GIAO NMR Calculation for Some New 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 43, 585-587.
- [6] Yüksek, H., Çakmak, İ., Sadi, S., Alkan, M., (2005). Synthesis and GIAO NMR Calculations for Some Novel 4-Heteroarylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. *International Journal of Molecular Sciences*, 6, 219-229.
- [7] 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. *Letters in Organic Chemistry*, 10, 395-441.
- [8] Gökçe, H., Akyıldırım, O., Bahçeli, S., Yüksek, H., Gürsoy 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 *Journal of Molecular Structure*, 1056, 1057, 273-284.
- [9] Stollé, R. (1907). Über Führung von hydrazinabkömmlingen, *Journal für Praktische Chemie*, 75 (2), 416-432.

- [10] Milcent, R., Redeuilh, C. (1979). Synthesis of 4-amino-3-aryl-1,2,4-triazol-5(4H)-ones, *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 16 (2), 403-407.
- [11] Pesson, M., Dupin, S., Antoine, M., (1962). Emploi de l'hydrazinocarbonate d'ethyle pour la synthèse des hydroxy-3 triazoles-1,2,4,, *Bull. Soc. Chim. France*, 1364-1371
- [12] Ün, R., İkizler, A., (1975). Preparations of aliphatic amide carbethoxyhydrazones, aliphatic amide carbamylhydrazones, aliphatic ester carbethoxyhydrazones and the corresponding 3-alkyl- and 3,4-dialkyl- Δ^2 -1,2,4-triazolin-5-ones, *Chim. Acta Turc.*, 3, 113-132
- [13] Yüksek, H. (1992). 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
- [14] İkizler, A. A., Yüksek, H., (1993). Acetylation of 4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones, *Org. Prep. Proced. Int.*, 25, 99-105
- [15] Karabacak, E. (1998). 3-m-Klorobenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve bazı türevlerinin sentezi, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon
- [16] Karabacak, M. (1998).3-p-metoksibenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on üzerine bir çalışma, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon
- [17] Kara, E. (2000).3-Siklopropil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin sentezi ve bazı reaksiyonlarının incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon
- [18] İkizler, A. A. (1975). 3-Substitue-4-amino- Δ^2 -1,2,4-triazolin-5-on'ların ester kabetoksi-hidrazon'lardan elde edilmeleri ve reaksiyonlarının incelenmesi, Doçentlik Tezi, İstanbul Üniversitesi Kimya Fakültesi, İstanbul
- [19] İkizler, A. A., Ün, R., (1979). Reactions of ester ethoxycarbonylhydrazones with some amine type compounds, *Chim. Acta Turc.*, 7, 269-290
- [20] Yüksek, H., Kucuk, M., Alkan, M., Bahceci, S., Kolaylı, S., Ocak, Z., Ocak, U., Sahinbas, E., Ocak, M., (2006). Synthesis and antioxidant activities of some new 4-(4-hydroxybenzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives with their acidic properties, *Asian J. Chem.*, 18 (1), 539-550

- [21] Bahceci, S., Yuksek, H., Ocak, Z., Koksall, C., Ozdemir, 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 (4), 783-794
- [22] Yuksek, H., Ucuncu, O., Alkan, M., Ocak, Z., Bahceci, S., Ozdemir, M., (2005) .Synthesis and non-aqueous medium titrations of some new 4-benzylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, Molecules, 10 (8), 961-970
- [23] Yüksek, H., Demirbaş, A., İkizler, A., Johansson, C. B., Çelik, C., İkizler, A. A.,(1997). Synthesis and antibacterial activities of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones, Arzheim.-Forsch/Drug Res., 47 (4), 405-409
- [24] İkizler, A. A., Demirbas, A., Johansson, C. B., Celik, C., Serdar, M., Yuksek, H.,(1998). Synthesis and biological activity of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, Acta Polon Pharm./Drug Res., 55 (2), 117-123
- [25] Alkan, M. (2001). Bazı 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve reaksiyonlarının incelenmesi, Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon
- [26] Yüksek, H., Bahçeci, Ş.,(1998). Synthesis of some N-alkyl-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on derivatives, C. Ü. Fen-Edebiyat Fak. Fen Bil. Derg., 20,73-78
- [27] Gürsoy-Kol, Ö. (2008). Bazı 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması, antioksidan ve asitlik özelliklerinin incelenmesi, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars
- [28] İkizler, A. A., Yüksek, H., (1993). Synthesis of some N,N'-linked biheteroaryles, Doğa Tr. J. Chemistry, 17, 150-153
- [29] İkizler, A. A., Yüksek, H., (1994). Reaction of 4-amino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones with 2,5-dimetoxytetrahydrofuran, Collect. Czech. Chem. Commun., 59 (3), 731-735
- [30] Yüksek, H., Ocak, Z., Alkan, M., Bahçeci, Ş., Özdemir, M., (2004). Synthesis and determination of p*K*_a values of some new 3,4-disubstituted-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives in non-aqueous solvents, Molecules, 9, 232-240

- [31] İkizler, A. A., İkizler A., Yıldırım, N., (1991). Synthesis of some benzylidenamino compounds, *Monatsh. Chem.*, 122 (6-7), 557-563
- [32] İkizler, A. A., Yıldırım, N., Yüksek, H., (1996). Synthesis of some arylidenamino compounds, *Modelling, Measurement & Control C*, 54: 21-30
- [33] İkizler, A. A., Uçar, F., Yuksek, H., Aytin, A., Yasa, I., Gezer, T., (1997). Synthesis and antifungal activity of some new arylidenamino compounds, *Acta Pol. Pharm.*, 54 (2), 135-140
- [34] Sadi, S. (2003). Bazı yeni 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars
- [35] Yüksek, H., Çakmak, İ., Sadi, S., Alkan, M., Baykara, H., (2005). Synthesis and GIAO NMR calculations for some novel 4-heteroarylidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives: Comparison of theoretical and experimental ¹H and ¹³C chemical shifts”, *Int. J. Mol. Sci.*, 6 (6-8), 219-229
- [36] İnce-Demirci, S. (2005). Bazı yeni 4-(2-hidroksi-5-bromobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve yapılarının aydınlatılması, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars
- [37] İnce, S., Yuksek, H., Alkan, M., Çakmak, I., (2004). B3LYP density functional calculations of ¹H and ¹³C nuclear shielding constants of some novel 4-(5-bromo-2-hydroxy-benzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, 2nd International Aegean Physical Chemistry Days, Balıkesir, 67
- [38] 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
- [39] 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-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones, *Indian J. Heterocy. Ch.*, 20,325-330
- [40] 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
- [41] Kemer, G., Yüksek, H., Kayalar, M.T., (2011). B3LYP density functional calculations of ¹H and ¹³C nuclear shielding constants of some 4,5-dihidro-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.
- [42] Gül, H. (2010). Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve asitlik özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [43] Kurt, İ. H. (2013). Bazı yeni 1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve in-vitro antioksidan özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [44] Yüksek, H., Gül, H., Manap, S., Ocak, Z., Şen, H., (2009). Bazı yeni heterosiklik schiff bazlarının sentezi, yapılarının aydınlatılması ve susuz ortam titrasyonları, XXIII. Ulusal Kimya Kongresi, Bildiri Özetleri Kitabı, OP 083, Sivas.
- [45] Yüksek, H., Gül, H., Şen, H., Gürsoy-Kol, Ö., Koca, E.,(2010). Bazı 3-alkil(aril)-4-(4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin antioksidan özelliklerinin incelenmesi, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 289, Zonguldak.
- [46] Kayalar, M.T., Yüksek, H., (2011). GIAO nmr calculations of some 3-alkyl(aryl)4-(4-phenylacetoxy-benzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones: comparison of theoretical and experimental ¹H and ¹³C chemical shifts, 2-nd International Conference on Organic Chemistry: Advances in Heterocyclic Chemistry, GeoHet-2011, Tbilisi, Georgia, PP 66.
- [47] Yokuş, Ö. A. (2012). Bazı yeni 1,2,4-triazol türevlerinin sentezi ve biyolojik aktivitelerinin incelenmesi, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [48] Tomruk, Z. (2008). Bazı yeni heterosiklik schiff bazlarının sentezi, pKa değerlerinin tayini ve DNA ile etkileşimlerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [49] Tomruk, Z., Yüksek, H., Arslantaş, A., Ocak, Z., (2009). Non-aqueous medium titrations of some 4-(4-benzensulfonyloxybenzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, 7th Aegean Analytical Chemistry Days

(AACD), International Conference, Fatsa, Turkey, Book of Abstracts PPII-5, page 118

- [50] Tomruk, Z., Arslantaş, A., Yüksek, H., Gürsoy-Kol, Ö., Manap, S., (2010). Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(4-benzensulfoniloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve in-vitro antioksidan özelliklerinin incelenmesi, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 301, Zonguldak.
- [51] Gürsoy, Ö. (2003). Bazı yeni potansiyel biyolojik aktif 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.
- [52] Yüksek, H., Gürsoy, O., Cakmak, I., Alkan, M., (2005). Synthesis and GIAO NMR calculation for some new 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives: comparison of theoretical and experimental ¹H and ¹³C chemical shifts, Magn. Reson. Chem., 43 (7), 585-587
- [53] Yüksek, H., Gürsoy, O., Cakmak, I., Baykara, H., Alkan, M., (2007). Synthesis and GIAO NMR calculations for some novel 1-acetyl-4-(arylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives: comparison of theoretical and experimental ¹H and ¹³C chemical shifts, Asian J. Spect., 11, 43-50
- [54] Yüksek, H., Alkan, M., Çakmak, İ., Ocak, Z., Bahçeci, Ş., Calapoğlu, M., Elmastaş, M., Kolomuç, A., Aksu, H., (2008). Preparation, GIAO NMR calculations and acidic properties of some novel 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives with their antioxidant activities, Int. J. Mol. Sci., 9, 12-32
- [55] Yüksek, H., Alkan, M., Atalay, Y. ve Bahçeci, Ş., (2004). Yoğunluk Fonksiyonu Teorisini (DFT) ve Hartree-Fock Yöntemini Kullanarak 3-Metil-4-Fenilasetilamino-4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-Triazol-5-on Molekülünün Titreşim Frekanslarının Hesaplanması, Kimya 2004, XVIII. Ulusal Kimya Kongresi, Kars, Bildiri Özetler Kitabı, 1017.
- [56] Atalay, Y., Alkan, M., Bahçeci, Ş., Yüksek, H., (2005). 3-Metil(Benzil)-4-(4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Molekül Titreşim Frekanslarının DFT ve HF Yöntemi İle Hesaplanması, Kimya 2005, XIX. Ulusal Kimya Kongresi, İzmir, Bildiri Özetleri Kitabı, 730.
- [57] Yüksek, H., Atalay, Y., Ocak, M., Ocak, Ü., Bahçeci, Ş. ve Yıldırım, N., (2004). DFT ve HF Yöntemi Kullanarak Bazı 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-Triazol-5-on

Türevlerinin Molekül Titreşim Frekanslarının Hesaplanması, Kimya 2004, XVIII. Ulusal Kimya Kongresi, Kars, Bildiri Özetler Kitabı, 950.

- [58] Avcı, D., Atalay, Y., Şekerci, M., Dinçer, M., (2009). Molecular structure and vibrational and chemical shift assignments of 3-(2-Hydroxyphenyl)-4-phenyl-1H-1,2,4-triazole-5-(4H)-thione by DFT and ab initio HF calculations, *Spectrochimica Acta Part A*, 73 (1), 212–217.
- [59] Atalay, Y., Yakuphanoglu, F., Sekerci, M., Avcı, D., Başoğlu, A., (2005). Theoretical studies of molecular structure and vibrational spectra of 2-amino-5-phenyl-1,3,4-thiadiazole, *Spectrochimica Acta Part A*, 64 (1), 68–72.
- [60] Xavier, R.J., Gobinath, E., (2011). FT-IR, FT-Raman, ab initio and DFT studies, HOMO-LUMO and NBO analysis of 3-amino-5-mercapto-1,2,4-triazole, *Spectrochimica Acta Part A*, 86, 242–251.
- [61] Pillai, R. R., Karrouchi, K., Fettach, S., Armaković, S., Armaković, S. J., Brik, Y., Taoufik, J., Radi, S., Faouzi, M. A., Ansar, M., (2019). Synthesis, spectroscopic characterization, reactive properties by DFT calculations, molecular dynamics simulations and biological evaluation of Schiff bases tethered 1,2,4-triazole and pyrazole rings, *Journal of Molecular Structure*, 1177, 47–54.
- [62] Aytemiz, F., Yüksek, H., Beytur, M., (2017). Spectroscopic Properties Of 3-Benzyl-4-[3-(3-Nitrobenzoxy)-4-Methoxybenzylideneamino]-4,5-Dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-One Molecule, *Caucasian Journal of Science*, 4 (1), 62-71.
- [63] Yüksek, H., Aytemiz, F., Beytur, M., Gürsoy Kol, Ö., (2017). Investigation of Theoretical and Experimental Spectroscopic Properties of 3-Methyl-4-[3-(p-nitrobenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one, *Iğdır University Journal of the Institute of Science and Technology*, 7 (2), 171-183.
- [64] Medetalibeyoğlu, H., Gürsoy-Kol, Ö., Beytur, M., Yüksek, H., (2017). 1-Metil-3-fenil-4-[3-(p-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Bazı Teorik Özelliklerinin İncelenmesi, *Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 10 (1), 25-36.
- [65] Beytur, M., Akyıldırım, O., Manap, S., Yüksek, H., (2018). 2-(3-Hidroksi-4-metoksibenzilidenamino)-5-merkapt-1,3,4-tiyadiazol Bileşiğinin Sentezi,

- Moleküler Yapısı, Spektral ve Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Iğdır University Journal of the Institute of Science and Technology, 8 (4), 229-238.
- [66] Köksal, C. (2001). Bazı 3-alkil(aril)-4-(3',4'-dihidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve özelliklerinin incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon.
- [67] Yüksek, H., Kolaylı, S., Küçük, M., Yüksek, M.Ö., Ocak, U., Şahinbaş, E., Sivrikaya, E., Ocak, M., (2006). Synthesis and Antioxidant Activities of Some 4-Benzylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives, Indian J. of Chem. Sect. B, 45B, 715-718 .
- [68] Yüksek, H., Bahçeci, Ş., Ocak, Z., Köksal, C., Özdemir, M., (2002). Synthesis and Potentiometric Titration of Some New 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives in Non-Aqueous Media, Mustafa Kemal University-International Organic Chemistry Meeting, Mustafa Kemal University, Hatay, Book of Abstracts, 66.
- [69] Turhan Irak, Z., Beytur, M., (2019). 4-Benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Antioksidan Aktivitelerinin Teorik Olarak İncelenmesi, Iğdır University Journal of the Institute of Science and Technology, 9 (1), 512-521.
- [70] Beytur, M., Turhan Irak, Z., Manap, S., Yüksek, H., (2019). Synthesis, Characterization and Theoretical Determination of Corrosion Inhibitor Activities of Some New 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-Triazol-5-one Derivatives, Heliyon, 5 (6), e01809, 1-8.
- [71] Gürsoy-Kol, Ö., Yüksek, H., İslamoğlu, F.,(2013). Synthesis and In vitro Antioxidant Activities of Novel 4-(3-Methyl-2-thienylmethylene-amino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives with Their Acidic Properties, J. Chem. Soc. Pak., 35(4), 1179-1190.
- [72] Dennington, R., Keith, T, Millam J., (2009). GaussView, Version 5, Semichem Inc., Shawnee Mission KS.
- [73] Frisch. MJ., Trucks. GW., Schlegel. HB., Scuseria. GE., Robb. MA, Cheeseman. JR., Scalmani. G., Barone V., Mennucci. B., Petersson. G. A., Nakatsuji. H., Caricato. M., Li. X., Hratchian. HP., Izmaylov. AF., Bloino J, Zheng .G., Sonnenberg. JL., 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., Vreven. T.J., Peralta JE, Ogliaro. F., Bearpark. M., Heyd. JJ, Brothers. E., Kudin. N., Staroverov. VN., Kobayashi. R., Normand. J., Raghavachari. K., Rendell. A., Burant. JC., Iyengar. SS., Tomasi. J., Cossi. M., Rega. N., Millam. JM., Klene. M., Knox. JE., Cross. JB., Bakken. V., Adamo. C., Jaramillo. J., Gomperts. R., Stratmann. RE., Yazyev. O., Austin. AJ., Cammi. R., Pomelli. CJ., Ochterski. W., Martin. LR., Morokuma. K., Zakrzewski. VG., Voth. GA., Salvador. P., Dannenberg. JJ., Dapprich. S., Daniels. AD., Farkas. O., Foresman. JB., Ortiz. JV., Cioslowski. J., Fox. D J., (2009)., Gaussian Inc., (Wallingford, CT).

- [74] J.B. Foresman. (1996). *Æ. Frisch, Exploring Chemistry with electronic structure methods* (2nd ed.), Pittsburgh, PA, Gaussian Inc. 266,278–283.
- [75] A.D. Becke.(1996). Density-functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact-exchange mixing. *The Journal of chemical physics*, 104(3), 1040-1046.
- [76] Gümüş, PH, Tamer, Ö., Avcı, D., Atalay Y., (2015). 4-(Metoksimetil)-1,6-dimetil-2-okso-1,2-dihidropiridin-3-karbonitril molekülünün teorik olarak incelenmesi. *Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*, 3, 303-311.
- [77] Z,Turhan., Irak, S., Gümüş., (2017). Heterotricyclic compounds via click reaction: a computational study. *Noble International Journal of Scientific Research*. 1(7), 80-89.
- [78] Apaydın, F. (1991). *Magnetik Rezonans*, Hacettepe Üniversitesi, 3, 6-8.
- [79] Jensen., F. (1999). *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd, 26-38.
- [80] Merrick. JP., Moran, D., Radom, L., (2007). An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. *Journal of Physical Chemistry A*, 111 (45), 11683-11700.
- [81] F, London. (1937). The quantic theory of inter-atomic currents in aromatic combinations, *J. Phys. Radium*, **8**, 397-409.
- [82] R, McWeeny. (1962). Perturbation Theory for Fock-Dirac Density Matrix, *Phys. Rev.*, **126** 1028.

- [83] R, Ditchfield (1974). HF method. Self-consistent perturbation theory of diamagnetism. 1. Gauge-invariant LCAO method for N.M.R. chemical shifts, *Mol. Phys.*, **27**, 789-807.
- [84] J. R. Cheeseman., G. W. Trucks., T. A. Keith., and M. J. Frisch., (1996). A Comparison of Models for Calculating Nuclear Magnetic Resonance Shielding Tensors,” *J. Chem. Phys.*, 104,5497-509.
- [85] Fukui, K. (1982). Role of Frontier Orbitals in Chemical Reactions, *Science*, pp. 747-754.
- [86] Mulliken, R.S. (1955). Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. *Journal of Chemical Physics*, 23,1833-1840.
- [87] I. G. Csizmadia. (1976). Theory and Practice of MO Calculations on Organic Molecules, Elsevier, Amsterdam.
- [88] Leach, Andrew R. (2001). *Molecular modelling, principles and applications*. Englewood Cliffs, N.J, Prentice Hall.
- [89] Ohlinger, William S., Philip E. Klunzinger, Bernard J. Deppmeier; Warren J. Hehre (2009). *Efficient Calculation of Heats of Formation. The Journal of Physical Chemistry A. ACS Publications*. **113** (10), 2165-2175.
- [90] Gökçe H, Bahçel 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-1H-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, PP-18, 9-11 Temmuz , Niğde.
- [91] İkizler, AA. (1996). *Organik Kimyaya Giriş*, Dördüncü Baskı, KTÜ Basımevi, Trabzon, Türkiye, 398s.
- [92] Lee, SY. (1998). Molecular Structure and Vibrational Spectra of Biphenyl in the Ground and the lowest Triplet States. Density Functional Theory Study, *Bull. Korean chemical Society*, 19 (1), 93-98.
- [93] 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-1H-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, 9-11 Temmuz Niğde.

- [94] 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, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi.
- [95] Beytur, M. (2014). Bazı yeni beş üyeli heterosiklik bileşiklerin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 709s.
- [96] Jamróz, M.H. (2004). Vibrational Energy Distribution Analysis: VEDA 4 program, Warsaw.
- [97] Gans, P. (1971). Vibrating Molecules. Chapman and Hall, 18-59.
- [98] Bahçeci, Ş., Yüksek, H., Ocak, Z., Köksal, C., Özdemir, M.(2002). Synthesis and non-aqueous medium titrations of some new 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives, Acta Chimica Slovenica, 49, 783-794.
- [99] Belletete, M., Morin, J.F., Leclerc, M., Durocher, G.A.(2005). Theoretical, Spectroscopic, and Photophysical Study of 2,7-Carbazolenevinylene-Based Conjugated Derivatives. J. Phys. Chem., 109A pp. 6953-6959
- [100] Zhenminga, S., Hepinga L, Yufang L., Dianshenga, L. (2011). Bob. Experimental and theoretical study of 10-methoxy-2-phenylbenzo[h]quinolone, Spectrochim. Acta A., 78 pp. 1143-1148
- [101] Koopmans, T. (1933). Über die zuordnung von wellenfunktionen und eigenwerten zu den einzelnen elektronen eines atoms. Physica (Amsterdam) 1 104.
- [102] Sastri,V.S., Perumareddi J.R., (1996). Corrosion. 53, 671.
- [103] Jesudason, E., Sridhar, S.K., Malar, E.J., Shanmugapandiyan, P., Inayathullah, M., Arul, V., Selvaraj, D, Jayakumar, R.(2009). Synthesis, pharmacological screening, quantum chemical and in vitro permeability studies of N-Mannich bases of benzimidazoles through bovine cornea. Eur. J. Med. Chem. 44 2307-2312.
- [104] Gökçe, H., Bahçeli, S. (2011). A study on quantum chemical calculations of 3-, 4-nitrobenzaldehyde oximes. Spectrochim. Acta A. 79, 1783-1793.
- [105] Arivazhagan, M., Subhasini, V.P. (2012). Quantum chemical studies on structure of 2-amino-5-nitropyrimidine. Spectrochim. Acta A. 91, 402-410.

- [106] Masoud, M.S., Ali, A.E., Shaker, M.A., Elasala, G.S. (2012). Synthesis, computational, spectroscopic, thermal and antimicrobial activity studies on some metal–urate complexes. *Spectrochim. Acta A*. 90, 93-108.
- [107] Kiyooka, S., Kaneno, D., Fujiyama, R. (2013). Parr's index to describe both electrophilicity and nucleophilicity. *Tetrahedron Letters*. 54, 339.
- [108] Pearson, R.G. (1987). Absolute electronegativity and hardness: Application to *Inorg. Chem.* 27, 734-740.
- [109] Sun, Y.X., Hao, Q.L., Wei, W.X., Yu, Z.X., Lu, L.D., Wang, X., Wang, Y.S. (2009). Study on Configuration Data Model of Aero-engine Assembly. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 904 pp. 74-78
- [110] Andraud, C., Brotin, T., Garvia, C, Pelle, F., Goldner, P., Bigot, B., Collet, A. (1994). Theoretical and experimental investigations of the nonlinear optical properties of vanillin, polyenovanillin, and bisvanillin derivatives, *J. Am. Chem. Soc.*, 116 pp. 2094-2101
- [111] Geskin, V.M., Lambert, C., Bredas. J.L. (2003). Origin of High Second- and Third-Order Nonlinear Optical Response in Ammonio/Borato Diphenylpolyene Zwitterions: The Remarkable Role of Polarized Aromatic Groups, *J. Am. Chem. Soc.*, 125 pp. 15651-15658
- [112] Kleinman, D.A., (1962). Nonlinear dielectric polarization in optical media. *Phys. Rev.*, 126 pp. 1977-1979
- [113] Zhang, C.R., Chen, H.S., Wang, G.H.(2004). Structure and properties of semiconductor microclusters $GaP_n(n=1-4)$: A first principle study, *Chem. Res. Chin. Univ.*, 20 pp. 640-646
- [114] Sun Y., Chen, X., Sun, L., Guo, X., Lu, W. (2004). The analysis of energy-related CO₂ emissions from 1950 to 2000, *J. Chem. Phys. Lett.*, 381 pp. 397-403
- [115] Binil, P.S., Mary, Y.S., Varghese, H.T., Panicker, C.Y., Anoop, M.R, Manojkumar, T.K. (2012). Infrared and Raman spectroscopic analyses and theoretical computation of 4-butyl-1-(4-hydroxyphenyl)-2-phenyl-3,5-pyrazolidinedione, *Spectrochim. Acta*, 94 pp. 101-109

- [116] Adant, C., Dupuis, M., Bredas, J.L.(2004). Ab initio study of the nonlinear optical properties of urea: Electron correlation and dispersion effects, *International Journal of Quantum Chemistry*, 56 pp. 497-507
- [117] Scrocco, E. and Tomasi, J., (1978).Electronic molecular structure, reactivity and intermolecular forces: An heuristic interpretation by means of electrostatic molecular potentials, *Adv. Quantum Chem.* 11, 115-121
- [118] Luque, F.J., Lopez, J.M., Orozco, M.(2000). Perspective on Electrostatic interactions of a solute with a continuum. A direct utilization of ab initio molecular potentials for the prevision of solvent effects, *Theor. Chem. Acc.*, 103 pp. 343-345
- [119] Scrocco, E., Tomasi, J. (1973). The Electrostatic Molecular Potential as a Tool for the Interpretation of Molecular Properties, in: *New Concepts II*, *Curr. Chem.*, 7 pp. 95-170
- [120] Li, Y., Liu, Y., Wang, H., Xiong, X., Wei, P., Li, F. (2013). Synthesis, crystal structure, vibration spectral, and DFT studies of 4-Aminoantipyrine and its derivatives, *Molecules*, 18 pp. 877-893
- [121] Kobinyi, H., Folkers, G., Martin, Y.C.(1998). 3D QSAR in Drug Design, Vol. 3, *Recent Advances*, Kluwer Academic Publishers
- [122] Moro, S., Bacilieri, M., Ferrari, C., Spalluto, G. (2005). Autocorrelation of Molecular Electrostatic Potential surface properties combined with partial least squares analysis as alternative attractive tool to generate ligand-based 3D-QSARs, *Curr. Drug Discovery Technol.*, 2 pp. 13-21

ÖZGEÇMİŞ

Adı-Soyadı :İhsan AVINCA
Doğum Yeri ve Tarihi :Digor / 01.06.1988
Adres :Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü
E posta :ihsanavinca@yandex.com

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lisans :Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü (2008-2012)
Yüksek Lisans :Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı (2015-)
Yüksek Lisans Tez Konusu: Bazı 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Gaussian 09W Programı ile Bazı Özelliklerinin İncelenmesi