

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

**BAZI YENİ 4-[3-(3-METOKSİBENZOKSİ)-BENZİLİDENAMİNO]-4,5-
DİHİDRO-1*H*-1,2,4-TRİAZOL-5-ON TÜREVLERİNİN SENTEZİ,
DENEYSEL VE TEORİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Hilal MEDETALİBEYOĞLU
DOKTORA TEZİ

DANIŞMAN
Prof. Dr. Haydar YÜKSEK

OCAK-2015
KARS

Bu Tez Çalışması 2013-FEF-75 Nolu Proje ile Kafkas Üniversitesi Araştırma Fonu Tarafından Desteklenmiştir.

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

BAZI YENİ 4-[3-(3-METOKSİBENZOKSİ)-BENZİLİDENAMİNO]-4,5-DİHİDRO-1H-1,2,4-TRİAZOL-5-ON TÜREVLERİNİN SENTEZİ, DENEYSEL VE TEORİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

**Hilal MEDETALİBEYOĞLU
DOKTORA TEZİ**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Haydar YÜKSEK**

**OCAK-2015
KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı DR.630 numaralı Doktora öğrencisi Hilal MEDETALİBEYOĞLU'nun Prof. Dr. Haydar YÜKSEK'in danışmanlığında doktora tezi olarak hazırladığı "Bazı Yeni 4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Sentezi, Deneysel ve Teorik Özelliklerinin İncelenmesi" adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy . . . birliği ile kabul edilmiştir.

30/01/2015

Adı ve Soyadı

İmza

Başkan : Prof. Dr. Haydar YÜKSEK (Danışman)

Üye : Doç. Dr. Erdoğan TARCAN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Özlem GÜRSOY KOL

Üye : Yrd. Doç. Dr. Faruk KARDAŞ

Üye : Yrd. Doç. Dr. Onur AKYILDIRIM

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun . . / . . / 2015 gün ve / sayılı kararıyla onaylanmıştır

Prof. Dr. Muzaffer ALKAN
Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim dalında doktora tezi olarak hazırlanmıştır.

Çalışmada, öncelikle 8 adet 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği sentezlenmiştir. Sonra bu bileşiklerin 3-hidroksibenzaldehidin trietilamin varlığında 3-metoksibenzoil klorür ile muamelesinden sentezlenen 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd ile reaksiyonları incelenmiş ve 8 adet yeni 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiştir. Sentez bölümünde ayrıca, bu bileşiklerden 5'inin asetik anhidrid ile reaksiyonundan 5 adet yeni 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği sentezlenmiştir. Sentezlenen biri benzaldehid türevi olmak üzere toplam 14 yeni bileşiğin yapıları IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV spektroskopik yöntemleri kullanılarak aydınlatılmıştır.

13 adet yeni 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin ¹H-NMR, ¹³C-NMR, infrared ve UV-vis 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 metod ve iki farklı temel set kullanılarak incelenmiştir. Çalışmada öncelikle incelenen bileşikler B3LYP/6-311G(d), HF/6-311G(d) ve B3LYP/3-21G, HF/3-21G metodlarına göre optimize edilmiştir. Optimize işleminden sonra ¹H-NMR ve ¹³C-NMR isotropik kayma değerleri Gaussian G09W paket programı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmıştır, B3LYP/6-311G(d), HF/6-311G(d) ve B3LYP/3-21G, HF/3-21G temel setleri deneysel verilerle mukayese edilmiştir. Burada bulunan değerler TMS için bulunan değerlerden çıkarılmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp} = a \cdot \delta_{calc} + b$ eşitliğine göre grafiğe geçirilmiştir. SigmaPlot programı kullanılarak a ve b sabitleri regresyon katsayısı ile standart hata değerleri bulunmuştur. Yapılan değerlendirme sonucunda her iki yöntemde incelenen bileşiklerin IR absorpsiyon frekansları hesaplanmış, deneysel verilerle mukayese edilerek uyumlu oldukları görülmüş, B3LYP ve HF metoduna göre

elde edilen veriler kullanılarak teorik infrared spektrumu oluşturulmuştur. Ayrıca, bileşiklerin deneysel infrared spektrumları da verilmiştir.

Çalışmada, 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında N-H grubu içeren 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin susuz çözücülerde (izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton ve *N,N*-dimetilformamid) tetrabutilamonyumhidroksit (TBAH) ile potansiyometrik titrasyonları yapılmış, titrasyon grafikleri çizilmiş ve yarı-nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri tayin edilerek asitlik üzerine çözücü ve yapı etkisi tartışılmıştır.

Çalışmada son olarak, sentezlenen yeni bileşiklerin üç farklı yöntemle (indirgeme gücü, serbest radikal giderme aktivitesi, metal şelat aktivitesi) *in-vitro* antioksidan aktiviteleri incelenmiştir.

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

Çalışmalarımın her aşamasında ve tezin hazırlanması sürecinde katkılarını esirgemeyen Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü Sayın Prof. Dr. Muzaffer ALKAN'a saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Bana ve tüm ekip arkadaşlarıma titiz çalışmalarıyla destek olan ve antioksidan incelemelerinde yardımını esirgemeyen Kimya Bölüm Başkan Yardımcısı Sayın Yrd. Doç. Dr. Özlem GÜRSOY KOL'a, asitlik çalışmalarının düzenlenmesinde yardımcı olan Sayın Yrd. Doç. Dr. Zafer OCAK'a ve bilgi ve birikiminden yararlandığım Sayın Yrd. Doç. Dr. Onur AKYILDIRIM'a teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca her konuda yardım ve desteğini gördüğüm çok değerli arkadaşım Sayın Yrd. Doç. Dr. Murat BEYTUR'a ve her konuda özveriyle yardım eden çok değerli arkadaşım Arş. Gör. Sevda MANAP'a, ve organik kimya araştırma laboratuvarında Doktora ve Yüksek Lisans yapan arkadaşlarıma teşekkürü bir borç bilirim.

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

Kars-2015

Hilal MEDETALİBEYOĐLU

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	III
İÇİNDEKİLER	VI
ÖZET	XI
SUMMARY	XIII
ŞEKİLLER DİZİNİ	XV
TABLolar DİZİNİ	XXV
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XXXIV
1. GENEL BİLGİLER	1
1.1. Giriş	1
1.2. Moleküler Titreşim Spektroskopisi	23
1.2.1. Molekül Titreşimleri	23
1.2.2. İnfrared Spektroskopisi	26
1.2.3. İki Atomlu Moleküllerin Titreşim Enerji Seviyeleri	27
1.2.3.1. Harmonik Titreşici Modeli	27
1.2.3.2. Anharmonik Titreşici Modeli	28
1.2.4. Çok Atomlu Moleküllerin Yapabileceği Temel Titreşim Hareketleri	29
1.2.4.1. Gerilme Titreşimleri: ν	30
1.2.4.1.1. Simetrik Gerilme: ν_s	30
1.2.4.1.2. Asimetrik (Anti-simetrik) Gerilme: ν_a	30
1.2.4.2. Açık Bükülme Titreşimleri: δ	31
1.2.4.2.1. Makaslama : δ_s	31
1.2.4.2.2. Sallanma: ρ_r	31
1.2.4.2.3. Dalgalanma: ω	32
1.2.4.2.4. Kıvrırma: t	32
1.2.4.2.5. Burulma: τ	32
1.2.4.3. Düzlem Dışı Açık bükülmesi: γ	33
1.3. Moleküler Simetri	34
1.4. Grup Frekansları	34
1.4.1. Grup Frekanslarına Etkiyen Faktörler	36
1.4.1.1. Molekül İçi Etkiler	37
1.4.1.2. Molekül Dışı Etkiler	38
1.5. Nükleer Magnetik Rezonans (NMR) Spektroskopisi	39
1.5.1. Spektroskopi Olarak Magnetik Rezonans	39
1.5.2. Nükleer Magnetik Rezonansın Temel İlkeleri	40
1.6. İminoesterlerin Sentezi	44
1.7. İminoesterlerin Reaksiyonları	45
1.8. 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Sentezi	49
1.9. 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Reaksiyonları	51
1.10. 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevleri Üzerine Yapılan	

	Teorik Çalışmalar	93
1.11.	Susuz Ortam Titrasyonları ve pK_a Tayini	102
1.11.1.	Susuz Ortam Çözücüleri	102
1.11.2.	Potansiyometri	104
1.11.3.	Direkt Potansiyometrik Titrasyonlar	105
1.11.4.	Potansiyometrik Titrasyonlar	105
1.11.5.	Yarı Nötralizasyon Metodu ile pK_a Tayini	106
1.11.6.	4,5-Dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on Türevleri ile İlgili Susuz Ortam Titrasyonları	106
1.12.	Serbest Radikaller ve Antioksidanlar	107
1.12.1.	Oksijen ve Reaktif Oksijen Türleri (ROT)	109
1.12.1.1.	Süperoksit Radikali ($O_2^{\cdot-}$)	110
1.12.1.2.	Hidrojen Peroksit (H_2O_2)	111
1.12.1.3.	Hidroksil (OH^{\cdot}) Radikali	112
1.12.1.4.	Singlet Oksijen ($O_2^{\uparrow\downarrow}$)	112
1.12.1.5.	Hipoklorik Asit(HOCl)	113
1.12.1.6.	Nitrik Asit(NO^{\cdot})	113
1.12.2.	Serbest Radikallerin Etkileri	113
1.12.2.1.	Serbest Radikallerin Lipitlere Etkileri	114
1.12.2.2.	Serbest Radikallerin Proteinlere Etkileri	114
1.12.2.3.	Serbest Radikallerin Nükleik Asitlere ve DNA'ya Etkileri	114
1.12.2.4.	Serbest Radikallerin Karbohidratlara Etkileri	115
1.12.3.	Antioksidanların Sınıflandırılması	115
1.12.4.	Antioksidan Aktivite Tayin Metotları	115
1.12.4.1.	HAT-Temelli Metotları	116
1.12.4.2.	ET-Temelli Metotları	117
1.13.	Yeni Bileşiklerin Sentezi	119
2.	MATERYAL, YÖNTEM VE HESAPLAMA METOTLARI	124
2.1.	Kuantum Mekaniği	124
2.1.1.	Schrödinger Denklemi	124
2.2.	Moleküler Spektroskopide Kuramsal Hesaplamalar	125
2.2.1.	Ab-initio Moleküler Orbital Yöntemleri	126
2.2.2.	Hartree Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi (HF-SCF)	127
2.2.3.	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)	127
2.2.4.	B3PW91 ve B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorileri	128
2.2.5.	Yarı-Deneysel Moleküler Yöntemler	129
2.2.6.	LCAO/MO Metodu	129
2.3.	Temel Setlerin Seçimi ve Adlandırılması	130
2.4.	Geometrik Optimizasyon ve PES	133
2.5.	NMR Spektroskopide Kuramsal Hesaplamalar	135
2.5.1.	GIAO Yöntemi	137

2.5.2.	CSGT ve IGAIM Yöntemleri	137
2.6.	Gaussian 09W Programı	138
2.7.	GaussView	139
2.8.	Sentez	140
2.8.1.	3-(3-Metoksibenzoksi)-benzaldehit (175)	141
2.8.2.	3-Metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (177)	142
2.8.3.	3-Etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (178)	143
2.8.4.	3- <i>n</i> -Propil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (179)	144
2.8.5.	3-Benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (180)	145
2.8.6.	3- <i>p</i> -Metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (181)	146
2.8.7.	3- <i>p</i> -Metoksibenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (182)	147
2.8.8.	3- <i>p</i> -Klorobenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (183)	148
2.8.9.	3-Fenil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (184)	149
2.8.10.	1-Asetil-3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (186)	150
2.8.11.	1-Asetil-3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (187)	151
2.8.12.	1-Asetil-3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (188)	152
2.8.13.	1-Asetil-3- <i>p</i> -metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (189)	153
2.8.14.	1-Asetil-3- <i>p</i> -klorobenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (190)	154
2.9.	Potansiyometrik Titrasyonlar	155
2.9.1.	Çözücüler	155
2.9.2.	Titranlar	155
2.9.3.	Cihazlar	155
2.9.4.	Hazırlanan Çözeltiler	155
2.9.5.	Deneyin Yapılışı	156
2.9.6.	Dönüm Noktası Tayini	156
2.10.	Yeni Maddelerin Antioksidan Özelliklerinin İncelenmesi	159
2.10.1.	İndirgeme Gücü	159
2.10.2.	Serbest Radikal Giderme Aktivitesi	160

2.10.3.	Metal Şelat Aktivitesi	161
3.	BULGULAR	162
3.1.	Sentezlenen Bileşiklerin IR, ¹ H-NMR, ¹³ C-NMR ve UV Spektrum Verileri	162
3.2.	Sentezlenen Bileşiklerin Teorik Verileri	169
3.2.1.	3-(3-Metoksibenzoksi)-benzaldehyd (175)	169
3.2.2.	3-Metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (177)	180
3.2.3.	3-Etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (178)	194
3.2.4.	3-(<i>n</i> -Propil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (179)	209
3.2.5.	3-Benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (180)	225
3.2.6.	3-(<i>p</i> -Metilbenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (181)	241
3.2.7.	3-(<i>p</i> -Metoksibenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (182)	257
3.2.8.	3-(<i>p</i> -Klorobenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (183)	274
3.2.9.	3-Fenil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (184)	290
3.2.10.	1-Asetil-3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (186)	305
3.2.11.	1-Asetil-3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (187)	320
3.2.12.	1-Asetil-3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (188)	335
3.2.13.	1-Asetil-3-(<i>p</i> -metilbenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (189)	352
3.2.14.	1-Asetil-(3- <i>p</i> -klorobenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-5-on (190)	369
3.3.	Potansiyometrik Titrasyon	386
3.4.	Antioksidan İncelemeleri	390
3.4.1.	İndirgeme Gücü	390
3.4.2.	Serbest Radikal Giderme Aktivitesi	392
3.4.3.	Metal Şelat Aktivitesi	393
4.	SONUÇLAR VE TARTIŞMA	394
4.1.	Sentezlenen Bileşiklerin Teorik Verilerinin Yorumlanması	394
4.2.	Sentezlenen Bileşiklere Ait Spektrum Verilerinin Yorumlanması	408
4.3.	Potansiyometrik Titrasyon Sonuçlarının Değerlendirilmesi	410

4.4.	Antioksidan İncelemesi Sonuçlarının Değerlendirilmesi	418
4.4.1.	İndirgeme Gücü	418
4.4.2.	Serbest Radikal Giderme Aktivitesi	418
4.4.3.	Metal Şelat Aktivitesi	419
4.5.	İncelenen Reaksiyonların Mekanizmaları	421
5.	KAYNAKLAR	424
6.	EKLER	446
	ÖZGEÇMİŞ	493

ÖZET

Bu çalışmada, öncelikle çalışma için gerekli olan 8 adet 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği sentezlenmiştir. Sonra bu bileşiklerin 3-hidroksibenzaldehidin trietilamin varlığında 3-metoksibenzoil klorür ile muamelesinden sentezlenen 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd ile reaksiyonları incelenmiş ve 8 adet yeni 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiştir. Sentez bölümünde ayrıca, bu bileşiklerden 5'inin asetik anhidrid ile reaksiyonundan 5 adet yeni 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği sentezlenmiştir. Sentezlenen biri yeni benzaldehid türevi olmak üzere toplam 14 yeni bileşiğin yapıları IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV spektral verileri kullanılarak aydınlatılmıştır.

Çalışmada ikinci olarak bir benzaldehid türevi ve 13 yeni heterosiklik 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin teorik olarak spektral verileri hesaplanmış ve deneysel verilerle mukayeseleri yapılarak elde edilen sonuçlar yorumlanmıştır.

Bu amaçla, öncelikle 14 bileşiğin B3LYP/6-311G(d), HF/6-311G(d) ve B3LYP/3-21G, HF/3-21G temel setleri kullanılarak optimize edilmiştir. Bu optimize yapılardan yola çıkılarak ¹H-NMR ve ¹³C-NMR verileri değerleri GIAO metoduna göre Gaussian G09W paket programı kullanılarak gaz fazında hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp} = a + b \cdot \delta_{calc}$ eşitliğine göre grafiğe geçirilmiş ve SigmaPlot programı kullanılarak a ve b sabitleri regresyon katsayısı ile standart hata değerleri bulunmuştur. Elde edilen sonuçlara göre teorik veriler, deneysel verilerle kıyaslanmış, uyumlu oldukları görülmüştür. Çalışmanın teorik kısmında ayrıca, sentezlenmiş 14 bileşiğin IR frekans değerleri B3LYP ve HF metodlarının 6-311G(d) ve 3-21G temel setleri kullanılarak gaz fazında hesaplanmış, elde edilen değerler uygun uyum faktörleri ile çarpılmıştır. Hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında veda4f programından yararlanılmıştır. Deneysel ve teorik olarak UV-vis değerleri etanolü ortamda hesaplanmış ve mukayese edilmiştir. İlaveten, 14 yeni bileşiğin bağ açıları, bağ

uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri aynı metodlar ve aynı setler kullanılarak hesaplanmış ve tablolar halinde verilmiştir.

Çalışmada üçüncü olarak 8 adet yeni 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin susuz çözücülerde (izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton ve *N,N*-dimetilformamid) tetrabutylamonyumhidroksit (TBAH) ile potansiyometrik titrasyonları yapılmış, titrasyon grafikleri çizilmiş ve yarı-nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri tayin edilerek asitlik üzerine çözücü ve yapı etkisi tartışılmıştır.

Çalışmada son olarak, sentezlenen 13 yeni bileşiğin 3 farklı yöntemle (indirgeme gücü, serbest radikal giderme aktivitesi, metal şelat aktivitesi) *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenerek elde edilen bulgular yorumlanmıştır.

2015, 495 sayfa

Anahtar Kelimeler: 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, Gaussian 09W, GIAO, B3LYP, HF, 6-311G(d) temel seti, 3-21G temel seti, potansiyometrik titrasyon, pK_a , asetilleme, antioksidan

SUMMARY

In this study, firstly eight 3-alkyl(aryl)-4-amino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one compounds requiring for this study were synthesized. Then, the reactions of these compounds with 3-(3-methoxybenzoxy)-benzaldehyde, which were synthesized by the reaction of 3-hydroxybenzaldehyde with 3-methoxybenzoyl chloride by using triethylamine, were investigated and eight novel 3-alkyl(aryl)-4-[3-(3-methoxybenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one compounds were obtained. In addition, five of synthesized these compounds were treated with acetic anhydride and five novel 1-acetyl-3-alkyl(aryl)-4-[3-(3-methoxybenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one compounds were synthesized. In order to identify the new compounds synthesized in the study, spectroscopic methods including IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR and UV were used.

The second part of the study, theoretically spectral datas, one of the new derivative of benzaldehyde and thirteen new heterocyclic 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives were calculated and these datas were with compared experimental datas, obtained conclusions were evaluated.

For this purpose, firstly, synthesized 14 new compounds have been optimized using B3LYP/6-311G(d) HF/6-311G(d) and B3LYP/3-21G, HF/3-21G basis sets. Starting from this optimized structure with ¹H-NMR and ¹³C-NMR spectral data values according to GIAO method was calculated using the method of Gaussian G09W program package in gas phase. Theoretically and experimentally values were plotted according to $\delta_{\text{exp}} = a \cdot \delta_{\text{calc.}} + b$, Eq. a and b constants regression coefficients with a standard error values were found using the SigmaPlot program. According to obtained conclusions, theoretical and experimental values were seen to be compatible. In the theoretical part of study also, theoretically calculated IR datas of synthesized 14 new compounds were calculated in gas phase by using of 6-311G(d) and 3-21G basis sets of B3LYP and HF methods and are multiplied with appropriate adjustment factors and the data obtained according to B3LYP and HF methods are formed using theoretical infrared spectrum. The identification of calculated IR data was used in veda4f program. Experimentally and theoretically UV-vis values in ethanol were calculated and

compared. Additionally, synthesized 14 new compounds were found bond angles, bond lengths, dipole moments, the HOMO-LUMO energy and total energy of the molecule with mulliken charges from both methods.

In the originally section of the study, synthesized eight new 3-alkyl(aryl)-4-[3-(3-methoxybenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones were titrated potentiometrically with TBAH in non-aqueous solvents (izopropyl alcohol, *tert*-butyl alcohol, acetone and *N,N*-dimethylformamide) graphs were drawn, half notralization potentials and pK_a values were determined by half notralization method. Otherwise, solvent effect and molecul structure on compounds acidity were discussed.

In the finally section of the study, synthesized thirteen compounds were analyzed for their antioxidant activities in three different methods (reducing power, free radical scavenging and metal chelating activity), were drawn their graphs and their results were interpreted.

2014, 495 Page

Key words: 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, Gaussian 09W, GIAO, B3LYP, HF, 6-311G(d) basic set, 3-21G basic set, potentiometric titration, pK_a acetylation, antioxidant

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1.	İki atomlu bir molekülün şekli	27
Şekil 1.2.	Harmonik titreşen iki atomlu bir molekülün enerji seviyeleri	28
Şekil 1.3.	Anharmonik titreşen iki atomlu molekülün enerji seviyeleri	29
Şekil 1.4.	Simetrik gerilme	30
Şekil 1.5.	Asimetrik (anti-simetrik) gerilme	30
Şekil 1.6.	Açı bükülme titreşimleri	31
Şekil 1.7.	Makaslama	31
Şekil 1.8.	Sallanma titreşimi	31
Şekil 1.9.	Dalgalanma titreşimi	32
Şekil 1.10.	Kıvrıma titreşimi	32
Şekil 1.11.	Burulma titreşimi	33
Şekil 1.12.	Düzlem dışı açı bükülmesi	33
Şekil 1.13.	a) Magnetik alan olmayan durumdaki numunenin rastgele spin yönelimleri, b) Net çekirdek spinine sahip numunenin dış magnetik alandaki davranışı.	41
Şekil 1.14.	Bir atomun enerji kuantumu salması ya da soğurması.	42
Şekil 1.15.	Hidrojen çekirdeğinin (protonun) magnetik alandaki enerji seviyeleri	44
Şekil 2.1.	Temel setlerin adlandırılması	132
Şekil 2.2.	a) Potansiyel enerji yüzeyi b) Potansiyel enerji yüzeyindeki eyer noktası	133
Şekil 2.3.	İki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arası mesafeye bağımlılığı	134
Şekil 2.4.	184 Bileşiğinin 0.05 N TBAH ile aseton ortamındaki titrasyonundan elde edilen; a) mL-mV Grafiği, b) $\Delta E/\Delta V$ Eğrisi, c) $\Delta^2 E/\Delta V^2$ Eğrisi	158
Şekil 3.1.	175 Bileşiğinin gausview görünümü	169
Şekil 3.2.	175 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	174
Şekil 3.3.	175 Bileşiğinin Teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis Spektrumları ve Değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	175
Şekil 3.4.	175 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	179
Şekil 3.5.	177 Bileşiğinin gausview görünümü	181
Şekil 3.6.	177 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	187
Şekil 3.7.	177 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis Spektrumları ve Değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	189

Şekil 3.8.	177 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) Hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	193
Şekil 3.9.	178 Bileşiğinin gausview görünümü	195
Şekil 3.10.	178 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	202
Şekil 3.11.	178 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	203
Şekil 3.12.	178 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G(b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO Enerjileri	208
Şekil 3.13.	179 Bileşiğinin gausview görünümü	210
Şekil 3.14.	179 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	217
Şekil 3.15.	179 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	218
Şekil 3.16.	179 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	223
Şekil 3.17.	180 Bileşiğinin gausview görünümü	225
Şekil 3.18.	180 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	233
Şekil 3.19.	180 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	234
Şekil 3.20.	180 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	239
Şekil 3.21.	181 Bileşiğinin gausview görünümü	241
Şekil 3.22.	181 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	249
Şekil 3.23.	181 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	250
Şekil 3.24.	181 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	256
Şekil 3.25.	182 Bileşiğinin gausview görünümü	257
Şekil 3.26.	182 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	266
Şekil 3.27.	182 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	267
Şekil 3.28.	182 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	273

Şekil 3.29.	183 Bileşiğinin gausview görünümü	2754
Şekil 3.30.	183 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	282
Şekil 3.31.	183 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	283
Şekil 3.32.	183 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	289
Şekil 3.33.	184 Bileşiğinin gausview görünümü	290
Şekil 3.34.	184 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	298
Şekil 3.35.	184 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	299
Şekil 3.36.	184 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	304
Şekil 3.37.	186 Bileşiğinin gausview görünümü	305
Şekil 3.38.	186 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	312
Şekil 3.39.	186 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	314
Şekil 3.40.	186 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	318
Şekil 3.41.	187 Bileşiğinin gausview görünümü	320
Şekil 3.42.	187 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	328
Şekil 3.43.	187 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	329
Şekil 3.44.	187 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	334
Şekil 3.45.	188 Bileşiğinin gausview görünümü	335
Şekil 3.46.	188 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	344
Şekil 3.47.	188 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	345
Şekil 3.48.	188 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	350
Şekil 3.49.	189 Bileşiğinin gausview görünümü	352
Şekil 3.50.	189 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve	

	B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	361
Şekil 3.51.	189 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	362
Şekil 3.52.	189 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	368
Şekil 3.53.	190 Bileşiğinin gausview görünümü	369
Şekil 3.54.	190 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları	378
Şekil 3.55.	190 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm ⁻¹)	379
Şekil 3.56.	190 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri	384
Şekil 4.1.	176 tipi bileşiklerin B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	396
Şekil 4.2.	176 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	397
Şekil 4.3.	176 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	398
Şekil 4.4.	176 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	399
Şekil 4.5.	185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	400
Şekil 4.6.	185 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	401
Şekil 4.7.	185 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	401
Şekil 4.8.	185 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C ve ¹ H NMR kimyasal kayma değerleri	402
Şekil 4.9.	177 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10 ⁻³ M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	411
Şekil 4.10.	178 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol	

	ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	412
Şekil 4.11.	179 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	412
Şekil 4.12.	180 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	413
Şekil 4.13.	181 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	413
Şekil 4.14.	182 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	414
Şekil 4.15.	183 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	414
Şekil 4.16.	184 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri	415
Şekil 4.17.	181, 183, 188 ve 189 bileşiklerinin konsantrasyona karşı % Serbest Radikal Giderme Aktiviteleri	419
Şekil 4.18.	176 Tipi bileşiklerin konsantrasyona karşı % Metal Şelat Aktiviteleri	420
Şekil 4.19.	185 Tipi bileşiklerin konsantrasyona karşı % Metal Şelat Aktiviteleri	421
Ek Şekil 1.	175 Bileşiğinin IR spektrumu	447
Ek Şekil 2.	175 Bileşiğinin ^1H -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	447
Ek Şekil 3.	175 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	448
Ek Şekil 4.	177 Bileşiğinin IR spektrumu	448
Ek Şekil 5.	177 Bileşiğinin ^1H -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	449
Ek Şekil 6.	177 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	449
Ek Şekil 7.	178 Bileşiğinin IR spektrumu	450
Ek Şekil 8.	178 Bileşiğinin ^1H -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	450
Ek Şekil 9.	178 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	451
Ek Şekil 10.	179 Bileşiğinin IR spektrumu	451
Ek Şekil 11.	179 Bileşiğinin ^1H -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	452
Ek Şekil 12.	179 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	452
Ek Şekil 13.	180 Bileşiğinin IR spektrumu	453
Ek Şekil 14.	180 Bileşiğinin ^1H -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	453
Ek Şekil 15.	180 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu	454
Ek Şekil 16.	181 Bileşiğinin IR spektrumu	454

Ek Şekil 17.	181 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	455
Ek Şekil 18.	181 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	455
Ek Şekil 19.	182 Bileşiğinin IR spektrumu	456
Ek Şekil 20.	182 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	456
Ek Şekil 21.	182 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	457
Ek Şekil 22.	183 Bileşiğinin IR spektrumu	457
Ek Şekil 23.	183 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	458
Ek Şekil 24.	183 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	458
Ek Şekil 25.	184 Bileşiğinin IR spektrumu	459
Ek Şekil 26.	184 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	459
Ek Şekil 27.	184 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	460
Ek Şekil 28.	186 Bileşiğinin IR spektrumu	460
Ek Şekil 29.	186 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	461
Ek Şekil 30.	186 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	461
Ek Şekil 31.	187 Bileşiğinin IR spektrumu	462
Ek Şekil 32.	187 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	462
Ek Şekil 33.	187 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	463
Ek Şekil 34.	188 Bileşiğinin IR spektrumu	463
Ek Şekil 35.	188 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	464
Ek Şekil 36.	188 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	464
Ek Şekil 37.	189 Bileşiğinin IR spektrumu	465
Ek Şekil 38.	189 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	465
Ek Şekil 39.	189 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	466
Ek Şekil 40.	190 Bileşiğinin IR spektrumu	466
Ek Şekil 41.	190 Bileşiğinin ¹ H-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	467
Ek Şekil 42.	190 Bileşiğinin ¹³ C-NMR (DMSO-d ₆) spektrumu	467
Ek Şekil 43.	175 Bileşiğinin UV spektrumu	468
Ek Şekil 44.	177 Bileşiğinin UV spektrumu	468
Ek Şekil 45.	178 Bileşiğinin UV Spektrumu	468
Ek Şekil 46.	179 Bileşiğinin UV Spektrumu	468
Ek Şekil 47.	180 Bileşiğinin UV Spektrumu	469
Ek Şekil 48.	181 Bileşiğinin UV Spektrumu	469
Ek Şekil 49.	182 Bileşiğinin UV Spektrumu	469
Ek Şekil 50.	183 Bileşiğinin UV Spektrumu	469
Ek Şekil 51.	184 Bileşiğinin UV Spektrumu	470
Ek Şekil 52.	186 Bileşiğinin UV Spektrumu	470
Ek Şekil 53.	187 Bileşiğinin UV Spektrumu	470
Ek Şekil 54.	188 Bileşiğinin UV Spektrumu	470
Ek Şekil 55.	189 Bileşiğinin UV Spektrumu	471
Ek Şekil 56.	190 Bileşiğinin UV Spektrumu	471
Ek Şekil 57.	175 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR	

	kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	472
Ek Şekil 58.	175 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	472
Ek Şekil 59.	175 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	473
Ek Şekil 60.	177 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	473
Ek Şekil 61.	177 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	474
Ek Şekil 62.	177 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	474
Ek Şekil 63.	178 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	475
Ek Şekil 64.	178 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	475
Ek Şekil 65.	178 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	476
Ek Şekil 66.	179 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	476
Ek Şekil 67.	179 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	477
Ek Şekil 68.	179 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	477
Ek Şekil 69.	180 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³ C- ve ¹ H-NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	478
Ek Şekil 70.	180 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve	

	HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	478
Ek Şekil 71.	180 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	479
Ek Şekil 72.	181 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	479
Ek Şekil 73.	181 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	480
Ek Şekil 74.	181 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	480
Ek Şekil 75.	182 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	481
Ek Şekil 76.	182 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	481
Ek Şekil 77.	182 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	482
Ek Şekil 78.	183 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	482
Ek Şekil 79.	183 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	483
Ek Şekil 80.	183 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	483
Ek Şekil 81.	184 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	484
Ek Şekil 82.	184 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	484

Ek Şekil 83.	184 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	485
Ek Şekil 84.	186 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	485
Ek Şekil 85.	186 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	486
Ek Şekil 86.	186 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	486
Ek Şekil 87.	187 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	487
Ek Şekil 88.	187 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	487
Ek Şekil 89.	187 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	488
Ek Şekil 90.	188 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	488
Ek Şekil 91.	188 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	489
Ek Şekil 92.	188 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	489
Ek Şekil 93.	189 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	490
Ek Şekil 94.	189 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	490
Ek Şekil 95.	189 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve	

	HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	491
Ek Şekil 96.	190 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	491
Ek Şekil 97.	190 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	492
Ek Şekil 98.	190 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması	492

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 1.1.	Formüller tablosu	2
Tablo 1.2.	Elektromagnetik dalga spektrum bölgeleri	24
Tablo 1.3.	IR bölgeleri	26
Tablo 1.4.	Bazı grup frekansları	36
Tablo 2.1.	184 Bileşiğinin asetondaki deney sonuçları	156
Tablo 2.2.	184 Bileşiğinin asetondaki deney sonuçlarının birinci ve ikinci türevleri	157
Tablo 2.3.	İndirgeme gücü tayininde ilave edilen reaktif miktarları	159
Tablo 2.4.	Serbest radikal giderme tayininde ilave edilen reaktif miktarları	160
Tablo 2.5.	Metal şelat aktivitesi tayininde ilave edilen reaktif miktarları	161
Tablo 3.1.	176 ve 185 Tipi bileşiklerin IR spektrum verileri (KBr, cm^{-1})	163
Tablo 3.2.	176 Tipi bileşiklerin $^1\text{H-NMR}$ spektrum verileri (DMSO- d_6 , δ/ppm)	164
Tablo 3.3.	185 Tipi bileşiklerin $^1\text{H-NMR}$ spektrum verileri (DMSO- d_6 , δ/ppm)	165
Tablo 3.4.	176 Tipi bileşiklerin $^{13}\text{C-NMR}$ spektrum verileri (DMSO- d_6 , δ/ppm)	166
Tablo 3.5.	185 Tipi bileşiklerin $^{13}\text{C-NMR}$ spektrum verileri (DMSO- d_6 , δ/ppm)	167
Tablo 3.6.	176 ve 185 Tipi bileşiklerin UV spektrum verileri	168
Tablo 3.7.	175 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve $^1\text{H-NMR}$ deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	170
Tablo 3.8.	175 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve $^1\text{H-NMR}$ deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	170
Tablo 3.9.	175 Bileşiğinin deneysel ve teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	171
Tablo 3.10.	175 Bileşiğinin deneysel ve teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	172
Tablo 3.11.	175 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	177
Tablo 3.12.	175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	178
Tablo 3.13.	175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	178
Tablo 3.14.	175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	180
Tablo 3.15.	175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	180
Tablo 3.16.	177 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve $^1\text{H-NMR}$ deneysel ve teorik	

	(6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)	181
Tablo 3.17.	177 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)	182
Tablo 3.18.	177 Bileşiminin deneysel ve teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	183
Tablo 3.19.	177 Bileşiminin deneysel ve teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	185
Tablo 3.20.	177 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	190
Tablo 3.21.	177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	191
Tablo 3.22.	177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	192
Tablo 3.23.	177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	194
Tablo 3.24.	177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	194
Tablo 3.25.	178 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)	195
Tablo 3.26.	178 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)	196
Tablo 3.27.	178 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	197
Tablo 3.28.	178 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	199
Tablo 3.29.	178 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	204
Tablo 3.30.	178 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	206
Tablo 3.31.	178 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	207
Tablo 3.32.	178 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	209
Tablo 3.33.	178 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	209
Tablo 3.34.	179 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)	210

Tablo 3.35.	179 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	211
Tablo 3.36.	179 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	212
Tablo 3.37.	179 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	214
Tablo 3.38.	179 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	220
Tablo 3.39.	179 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	221
Tablo 3.40.	179 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	222
Tablo 3.41.	179 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	224
Tablo 3.42.	179 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	224
Tablo 3.43.	180 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	225
Tablo 3.44.	180 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	226
Tablo 3.45.	180 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	227
Tablo 3.46.	180 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	230
Tablo 3.47.	180 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	235
Tablo 3.48.	180 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	237
Tablo 3.49.	180 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	238
Tablo 3.50.	180 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	240
Tablo 3.51.	180 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	240
Tablo 3.52.	181 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	241
Tablo 3.53.	181 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	242

Tablo 3.54.	181 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	243
Tablo 3.55.	181 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	246
Tablo 3.56.	181 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A ⁰)	252
Tablo 3.57.	181 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A ⁰)	253
Tablo 3.58.	181 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	254
Tablo 3.59.	181 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	257
Tablo 3.60.	181 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	257
Tablo 3.61.	182 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	258
Tablo 3.62.	182 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	259
Tablo 3.63.	182 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	260
Tablo 3.64.	182 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	263
Tablo 3.65.	182 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A ⁰)	269
Tablo 3.66.	182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A ⁰)	270
Tablo 3.67.	182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	272
Tablo 3.68.	182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	274
Tablo 3.69.	182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	274
Tablo 3.70.	183 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	275
Tablo 3.71.	183 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	276
Tablo 3.72.	183 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	277
Tablo 3.73.	183 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	279

Tablo 3.74.	183 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	285
Tablo 3.75.	183 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	287
Tablo 3.76.	183 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	288
Tablo 3.77.	183 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	290
Tablo 3.78.	183 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	290
Tablo 3.79.	184 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	291
Tablo 3.80.	184 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	291
Tablo 3.81.	184 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	292
Tablo 3.82.	184 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	295
Tablo 3.83.	184 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	300
Tablo 3.84.	184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	302
Tablo 3.85.	184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	303
Tablo 3.86.	184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	305
Tablo 3.87.	184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	305
Tablo 3.88.	186 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	306
Tablo 3.89.	186 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	306
Tablo 3.90.	186 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	307
Tablo 3.91.	186 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	310
Tablo 3.92.	186 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	315
Tablo 3.93.	186 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)	

	hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	316
Tablo 3.94.	186 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	317
Tablo 3.95.	186 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	319
Tablo 3.96.	186 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	319
Tablo 3.97.	187 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	320
Tablo 3.98.	187 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	321
Tablo 3.99.	187 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	322
Tablo 3.100	187 Bileşiğinin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	325
Tablo 3.101.	187 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	330
Tablo 3.102.	187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	332
Tablo 3.103.	187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	333
Tablo 3.104.	187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	335
Tablo 3.105.	187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	335
Tablo 3.106.	188 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	336
Tablo 3.107.	188 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve 1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	337
Tablo 3.108.	188 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	338
Tablo 3.109.	188 Bileşiğinin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})	341
Tablo 3.110.	188 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)	346
Tablo 3.111.	188 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A^0)	348
Tablo 3.112.	188 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	349

Tablo 3.113.	188 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	351
Tablo 3.114.	188 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	351
Tablo 3.115.	189 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	352
Tablo 3.116.	189 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	353
Tablo 3.117.	189 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	354
Tablo 3.118.	189 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	358
Tablo 3.119.	189 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A ⁰)	363
Tablo 3.120.	189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A ⁰)	365
Tablo 3.121.	189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	366
Tablo 3.122.	189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	369
Tablo 3.123.	189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji	369
Tablo 3.124.	190 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	370
Tablo 3.125.	190 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³ C- ve ¹ H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)	371
Tablo 3.126.	190 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	372
Tablo 3.127.	190 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm ⁻¹)	375
Tablo 3.128.	190 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A ⁰)	380
Tablo 3.129.	190 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (A ⁰)	382
Tablo 3.130.	190 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri	383
Tablo 3.131.	190 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri	385
Tablo 3.132.	190 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)	

	hesaplanan toplam enerji	385
Tablo 3.133.	177 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	386
Tablo 3.134.	178 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	387
Tablo 3.135.	179 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	387
Tablo 3.136.	180 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	388
Tablo 3.137.	181 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	388
Tablo 3.138.	182 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	389
Tablo 3.139.	183 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	389
Tablo 3.140.	184 Bileşiğinin <i>N,N</i> -dimetilformamid, aseton, <i>tert</i> -butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları	390
Tablo 3.141.	176 ve 185 Tipi bileşiklerin İndirgeme Gücü	391
Tablo 3.142.	176 ve 185 Tipi bileşiklerin absorbands değerleri ve karşın olan % Serbest Radikal Giderme Aktiviteleri	392
Tablo 3.143.	176 ve 185 Tipi Bileşiklerin absorbands değerleri ve karşın olan % Metal Şelat Aktiviteleri	393
Tablo 4.1	175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	395
Tablo 4.2	175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	396
Tablo 4.3	175 ve 176 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF (DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	397
Tablo 4.4	175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	398

Tablo 4.5	185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	400
Tablo 4.6	185 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	400
Tablo 4.7	185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	401
Tablo 4.8	185 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri	402
Tablo 4.9	176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) metodlarına göre hesaplanmış aromatik C-C ve C-H bağ uzunlukları	405
Tablo 4.10	176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/3-21G ve HF/3-21G metodlarına göre hesaplanmış aromatik C-C ve C-H bağ uzunlukları	405
Tablo 4.11	176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) DFT/3-21G ve HF/3-21G metodlarına göre hesaplanmış C(2)-NH bağ uzunlukları	406
Tablo 4.12	176 ve 185 Tipi bileşiklerinin toplam molekül enerjileri (6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP) (a.u.)	407
Tablo 4.13	176 Tipi bileşiklerin yarı nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan $\text{p}K_a$ değerleri	415

SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

A	: Absorbans
δ	: Kimyasal kayma (ppm)
ϵ	: Molar absorbtivite katsayısı
λ	: Dalga boyu (nm)
IR	: İnfrared
UV-vis	: Ultraviyole visible
DMSO	: Dimetilsülfoksit
\vec{A}	: Vektör potansiyeli
\vec{B}_o	: Dış magnetik alan vektörü
$c_{\mu i}$: Moleküler orbital açılım katsayı
D_e	: Spektroskopik ayrışma enerjisi
D_o	: Ayrışma (dissociation) enerjisi
ΔE	: Enerji farkı
δ	: Bağlı kimyasal kayma, açı bükülme titreşimi
δ_s	: Makaslama (scissoring)
E	: Enerji
E^j	: Elektron-elektron itme enerjisi
E^T	: Elektronların hareketinden doğan kinetik enerji terimi
E^V	: Çekirdek-elektron arasındaki çekimi ifade eden potansiyel enerji
E^{XC}	: Değişim korelasyon enerjisi
e	: Elektron yükü ($1e=1.6.10^{-19}C$)
γ	: Düzlem dışı açı bükülmesi (out of plane bending)
Hartree	: Hartree birimi (27.192 eV)
\hat{H}	: Hamiltoniyen operatörü
h	: Planck sabiti
\hbar	: h Planck sabitinin 2π 'ye bölümü
J	: Çiftlenim sabiti
k	: Boltzmann sabiti ($1.38.10^{-23} J.K^{-1}$)
χ_e	: Anharmoniklik sabiti
l	: Spin kuantum sayısı
\vec{l}	: Açısal momentum vektörü
λ	: Dalgaboyu
m	: Magnetik kuantum sayısı
μ	: Etkin kütle
$\vec{\mu}$: Magnetik moment vektörü
ν	: Frekans, gerilme titreşimi
$\vec{\nu}$: Dalga sayısı
Ω	: Larmor frekansı
\vec{P}	: Momentum operatörü
Ψ	: Dalga fonksiyonu
R_c	: Denge noktası
r_s	: Yoğunluk parametresi
\vec{R}_o	: Ayar orijini (Gauge origin)
ρ	: Elektron yoğunluğu
ρ_r	: Sallanma (rocking)

σ	: Perdeleme Sabiti
τ	: Burulma(torsion)
T	: Sıcaklık
t	: Kıvrıma (twisting)
V	: Potansiyel Enerji
AO	: Atomik Orbitaller
CC	: Çiftlenmiş Öbek (Coupled cluster)
CI	: Konfigürasyon Etkileşimi (Configuration interaction)
CSGT	: Ayar dönüşümlerinin sürekli seti (Continuous Set of Gauge)
DFT	: Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory)
GIAO	: Ayar içeren atomik orbital (Gauge Including Atomic Orbital)
GTO	: Gaussian Tipi Atomik Orbital (Gaussian-type orbitals)
HF	: Hatree-Fock
HF-SCF	: Hatree-Fock özuyumlu alan teorisi (Hatree-Fock Self Consistent Field)
IGAIM	: Moleküldeki atomlar için tek tek ayarlar
LCAO	: Atomik orbitallerin lineer kombinasyonu
MO	: Moleküler Orbital
MP2	: 2. Derece Moller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
MP4	: 4. Derece Moller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
NMR	: Nükleer Magnetik Rezonans (Nuclear Magnetic Resonance)
PES	: Potansiyel Enerji Düzeyi
ppm	: Milyonda bir kısım (parts per million)
QCISD(T)	: 2. Derece konfigürasyon etkileşmesi
STO	: Slater tipi atomik orbital
TMS	: Tetrametilsilan ($\text{Si}(\text{CH}_3)_4$)
ROT	: Reaktif oksijen türleri
DPPH	: 1,1-Difenil-2-pikril-hidrazil
BHT	: Butillenmiş hidroksi toluen
BHA	: Butillenmiş hidroksi anisol
TCA	: Trikloroasetik asit
HNP	: Yarı-nötralizasyon potansiyeli
TBAH	: Tetrabutilamonyum hidroksit

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

“Bazı yeni 4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, deneysel ve teorik özelliklerinin incelenmesi” başlıklı bu çalışmada, öncelikle yeni bir benzaldehid türevi olan 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd, 3-hidroksibenzaldehid ile 3-metoksibenzoil klorürün trietilamin varlığında reaksiyonundan sentezlenmiş ve 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri ile muamelesinden 8 adet yeni 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiştir. Sentez bölümünde ayrıca, bu bileşiklerden 5 tanesinin asetik anhidrid ile reaksiyonları incelenerek karşın olan 5 adet yeni *N*-asetil türevleri elde edilmiştir. Sentezlenen toplam 14 yeni bileşiğin yapıları IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV spektral verileri kullanılarak aydınlatılmıştır.

Çalışmanın orijinal bölümünde ayrıca, sentezlenen bir yeni benzaldehid türevi ve 13 adet 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin ¹H-NMR, ¹³C-NMR, infrared ve UV-vis spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve molekülün toplam enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı yöntem ve iki farklı temel set kullanılarak incelenmiştir. Çalışmada öncelikle incelenen bileşikler B3LYP/6-311(d), HF/6-311G(d) ve B3LYP/3-21G, HF/3-21G metodlarına göre optimize edilmiştir. Optimize işleminden sonra ¹H-NMR ve ¹³C-NMR isotropik kayma değerleri Gaussian G09W paket programı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp}=a+b \cdot \delta_{calc}$ eşitliğine göre grafiğe geçirilmiştir. Sigmaplot programı kullanılarak a ve b sabitleri regresyon katsayısı ile standart hata değerleri bulunmuştur. Yapılan değerlendirme sonucunda her iki yöntemin de deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür.

Aynı bileşiklerin her iki yöntemle IR absorpsiyon frekansları da skala faktörü ile çarpılarak hesaplanmış, deneysel verilerle mukayese edilerek uyumlu oldukları

görülmüş, elde edilen veriler kullanılarak teorik infrared spektrumu oluşturulmuştur. Ayrıca, bileşiklerin deneysel infrared spektrumları da verilmiştir.

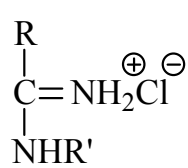
Çalışmada ayrıca 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H grubu içeren 176 tipi bileşiklerin farklı susuz çözücülerde (izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton ve *N,N*-dimetilformamid) tetrabutilamonyumhidroksit (TBAH) ile potansiyometrik titrasyonları yapılmış, titrasyon grafikleri çizilmiş ve yarı-nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri tayin edilerek asitlik üzerine çözücü ve yapı etkisi tartışılmıştır.

Çalışmada son olarak, sentezlenen 13 yeni heterosiklik bileşiğin 3 farklı yöntemle (indirgeme gücü, serbest radikal giderme aktivitesi, metal şelat aktivitesi) *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenerek elde edilen bulgular yorumlanmıştır.

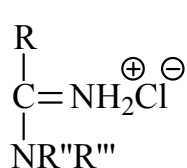
Çalışmada sentezlenen yeni bileşikler ve ilgili olan bileşiklerin formülleri Tablo 1.1' de verilmiştir.

Tablo 1.1. Formüller Tablosu

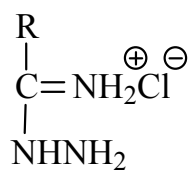
$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NH_2^+ Cl^- \\ \\ OR' \end{array}$ <p>1</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ N \\ // \quad \backslash \\ C \quad N \\ \quad \\ H \quad NH_2 \\ \backslash \quad / \\ O \end{array}$ <p>2</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NNHC(=O)OC_2H_5 \\ \\ NH_2 \end{array}$ <p>3</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NNH-C(=O)OC_2H_5 \\ \\ OR' \end{array}$ <p>4</p>
$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NH \\ \\ OR' \end{array}$ <p>5</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NNH-C(=O)OC(CH_3)_3 \\ \\ NH_2 \end{array}$ <p>6</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NNH-C(=O)NH_2 \\ \\ NH_2 \end{array}$ <p>7</p>	$\begin{array}{c} R \\ \\ C = NH_2^+ Cl^- \\ \\ NH_2 \end{array}$ <p>8</p>



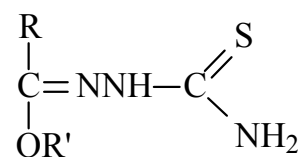
9



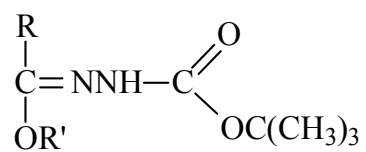
10



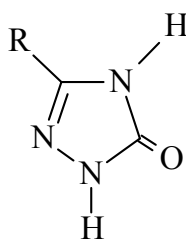
11



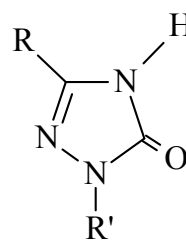
12



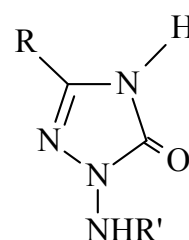
13



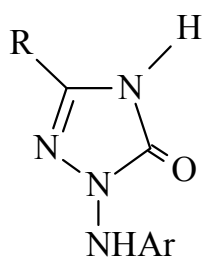
14



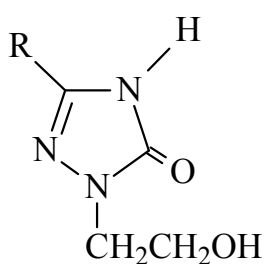
15



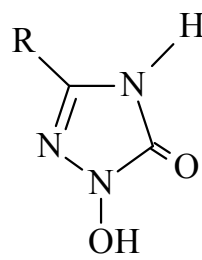
16



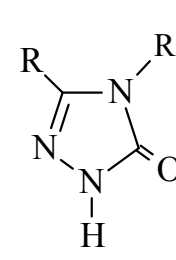
17



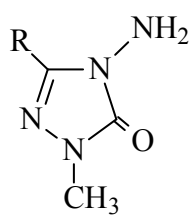
18



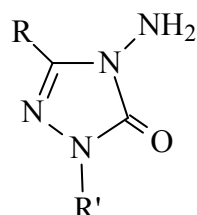
19



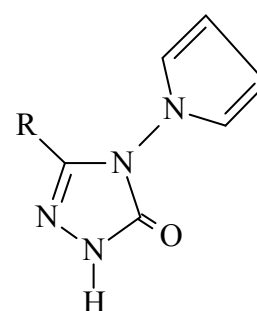
20



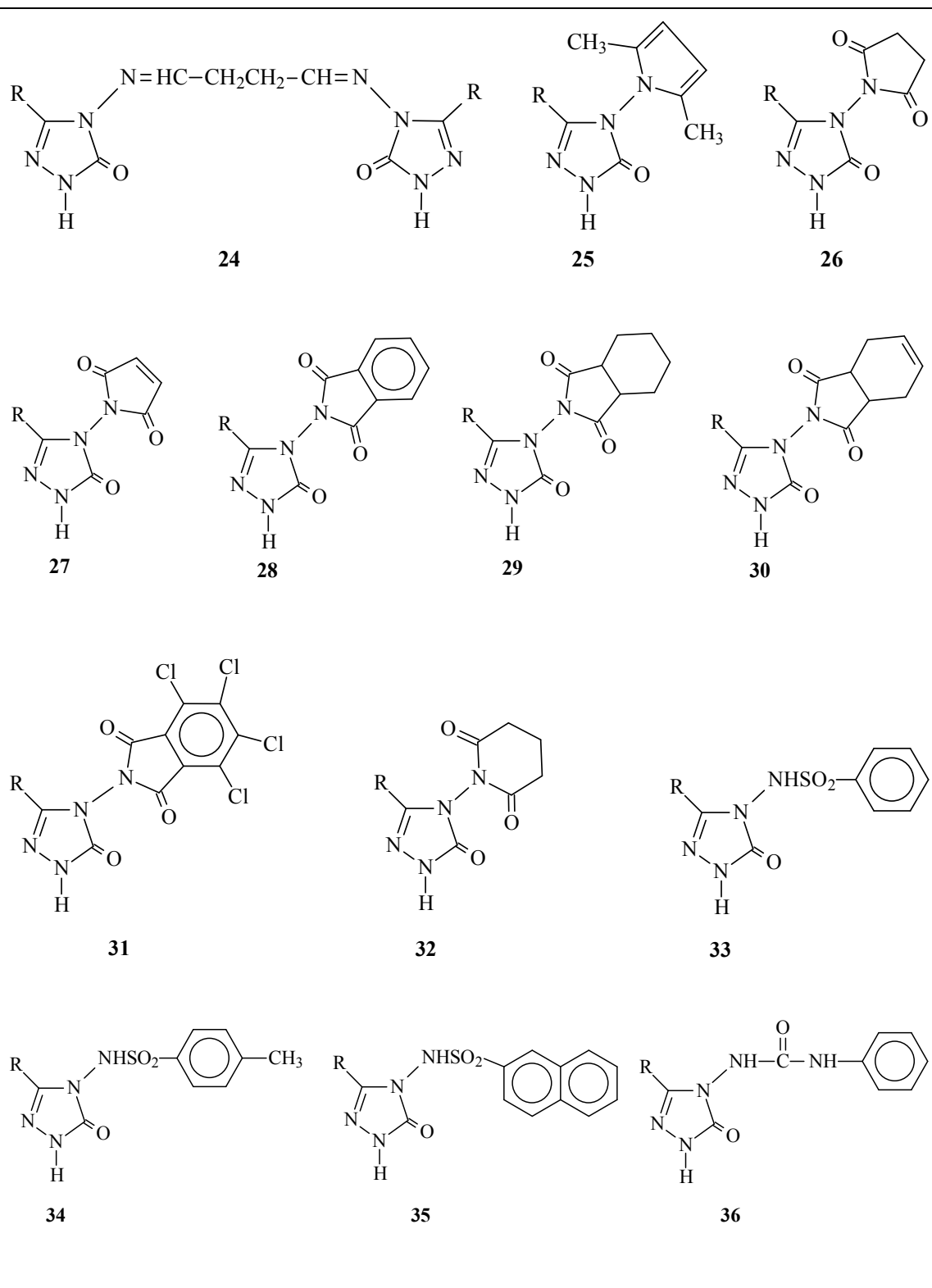
21

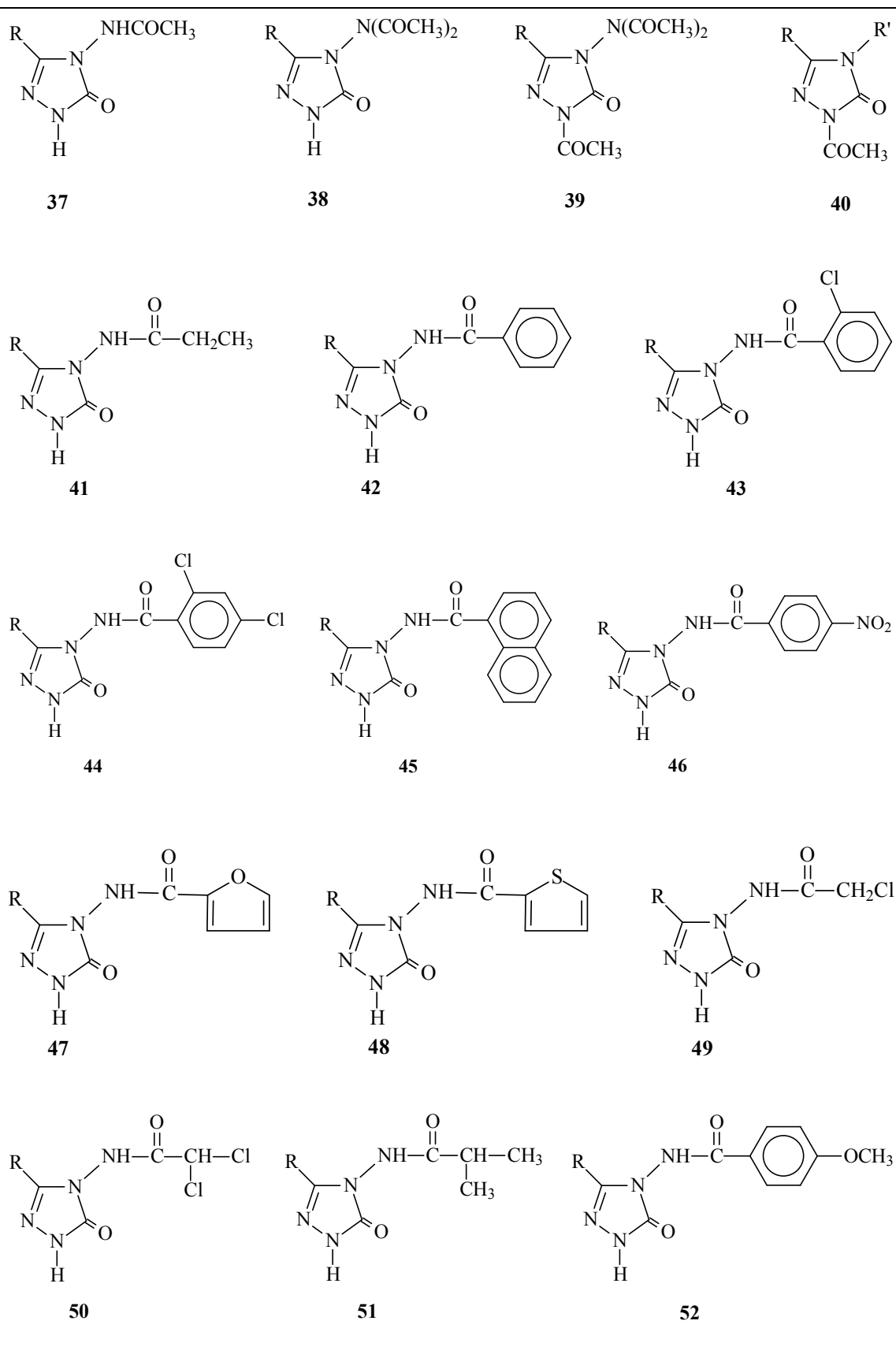


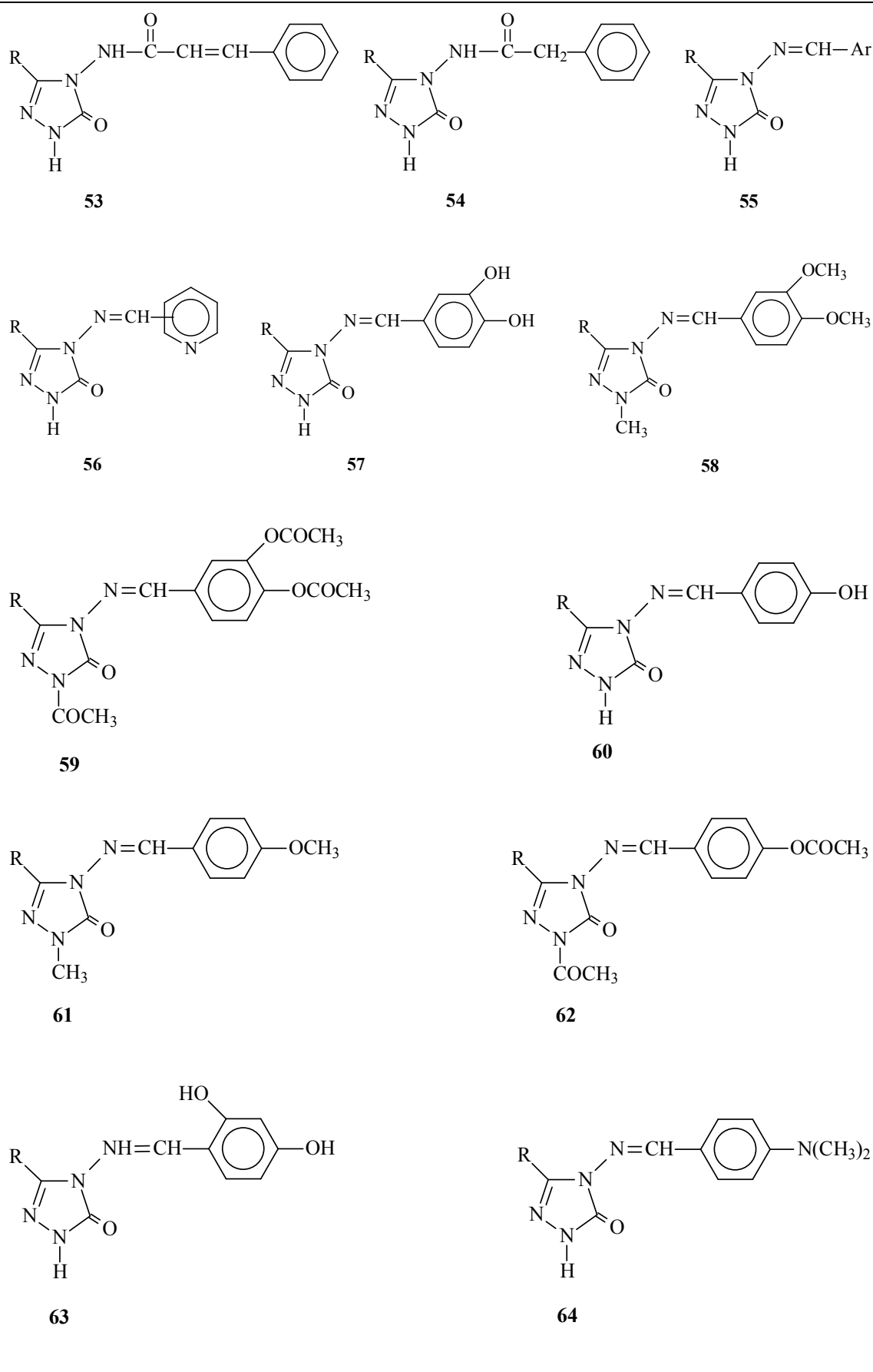
22

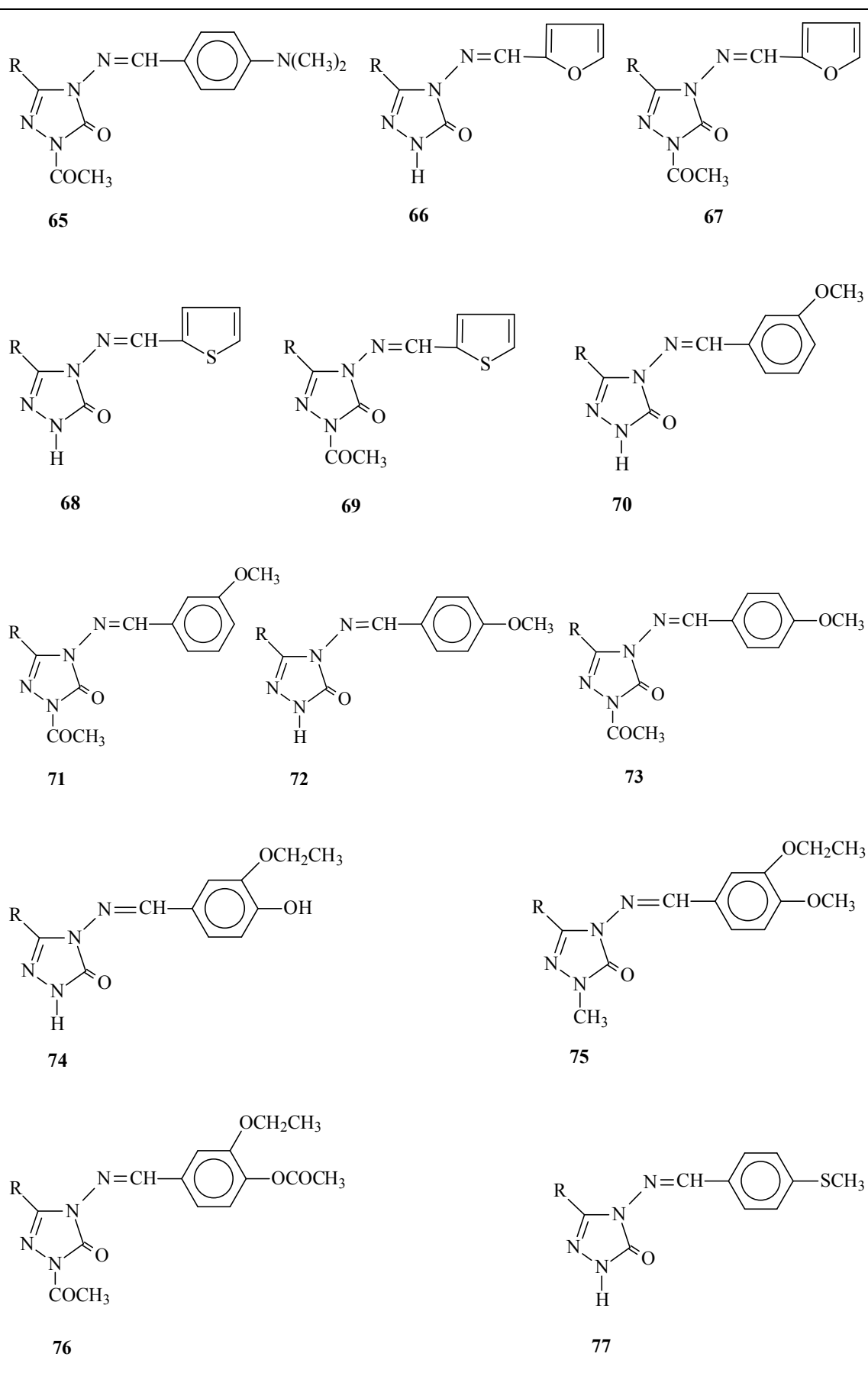


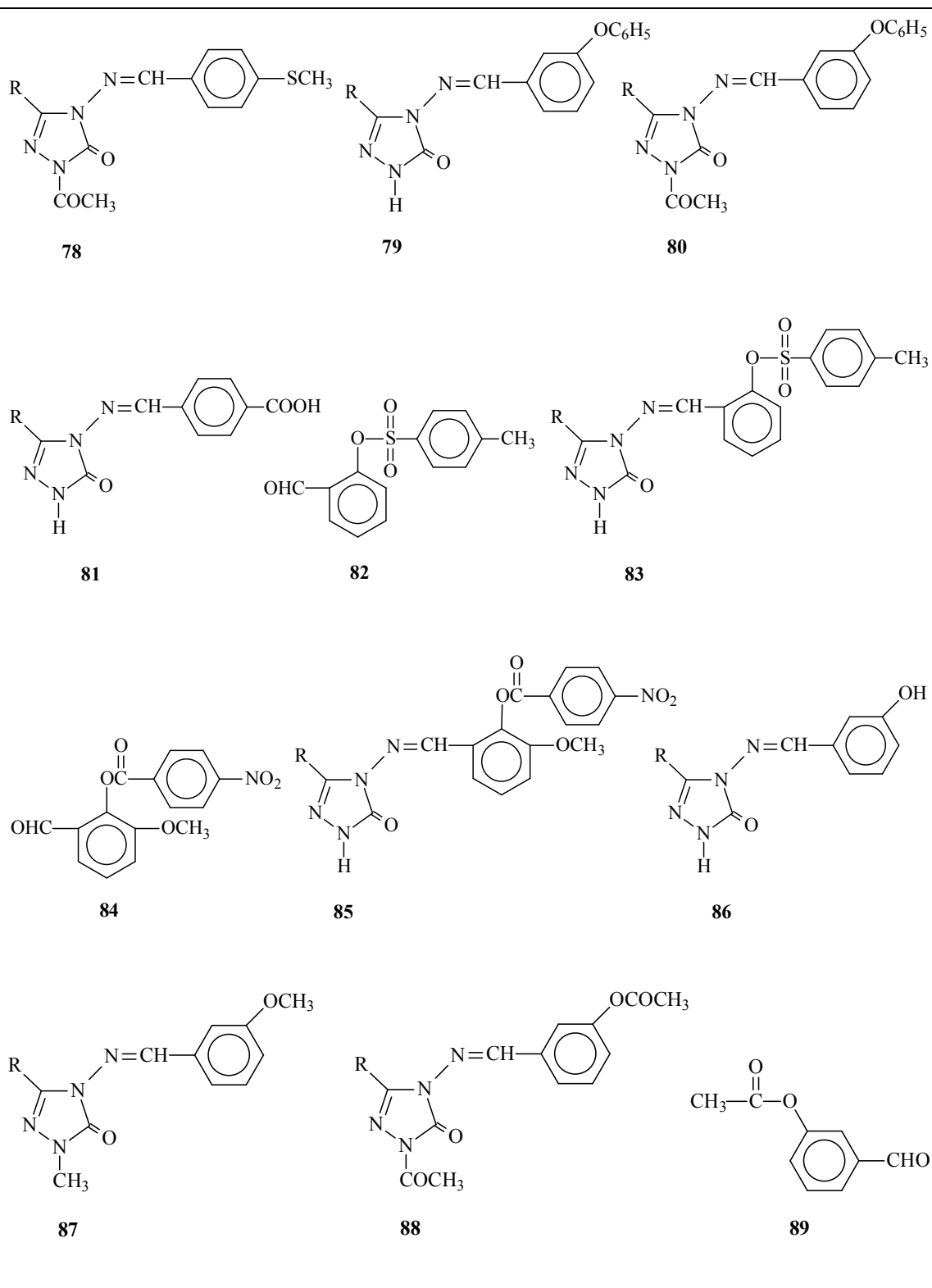
23

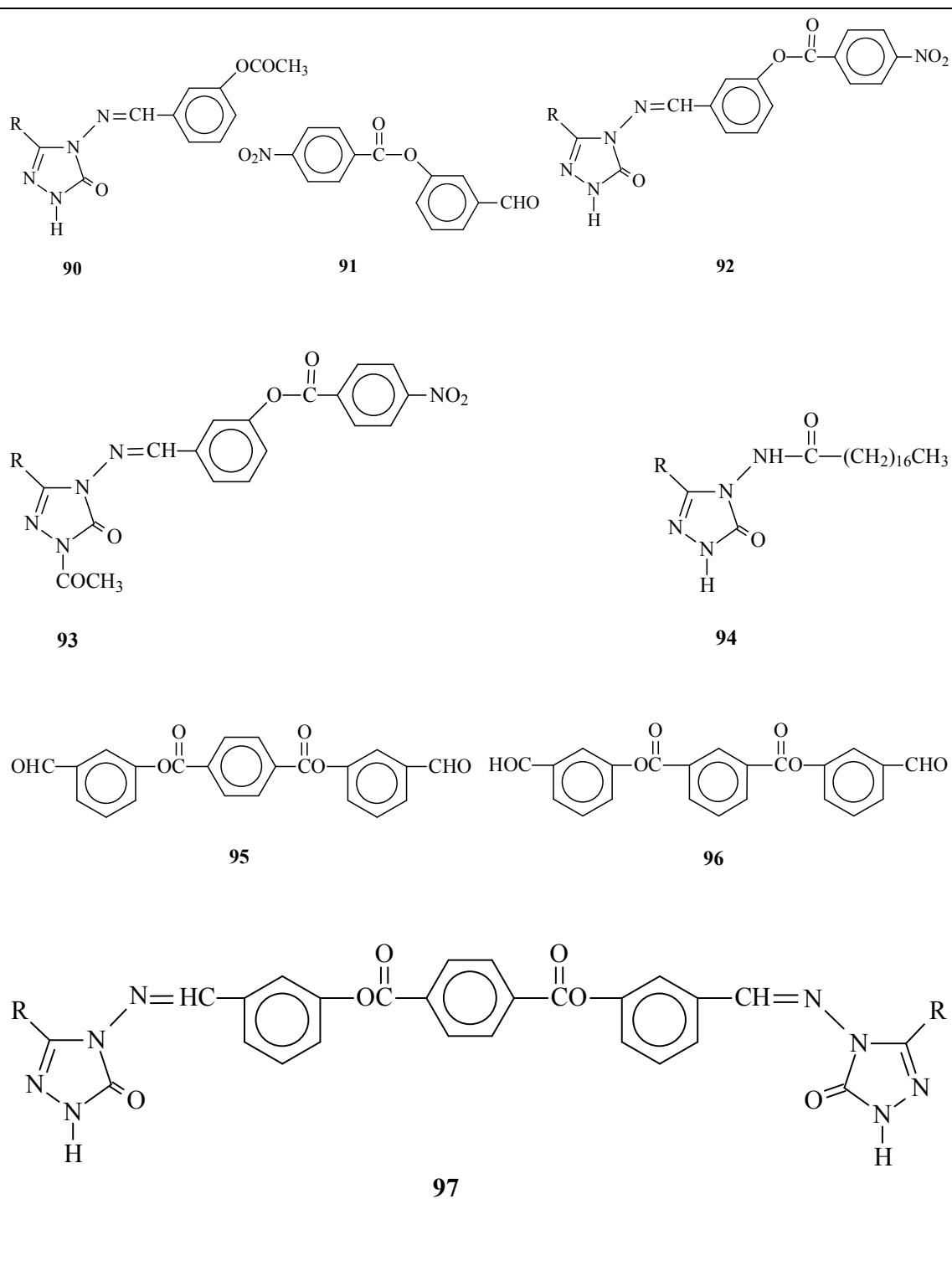


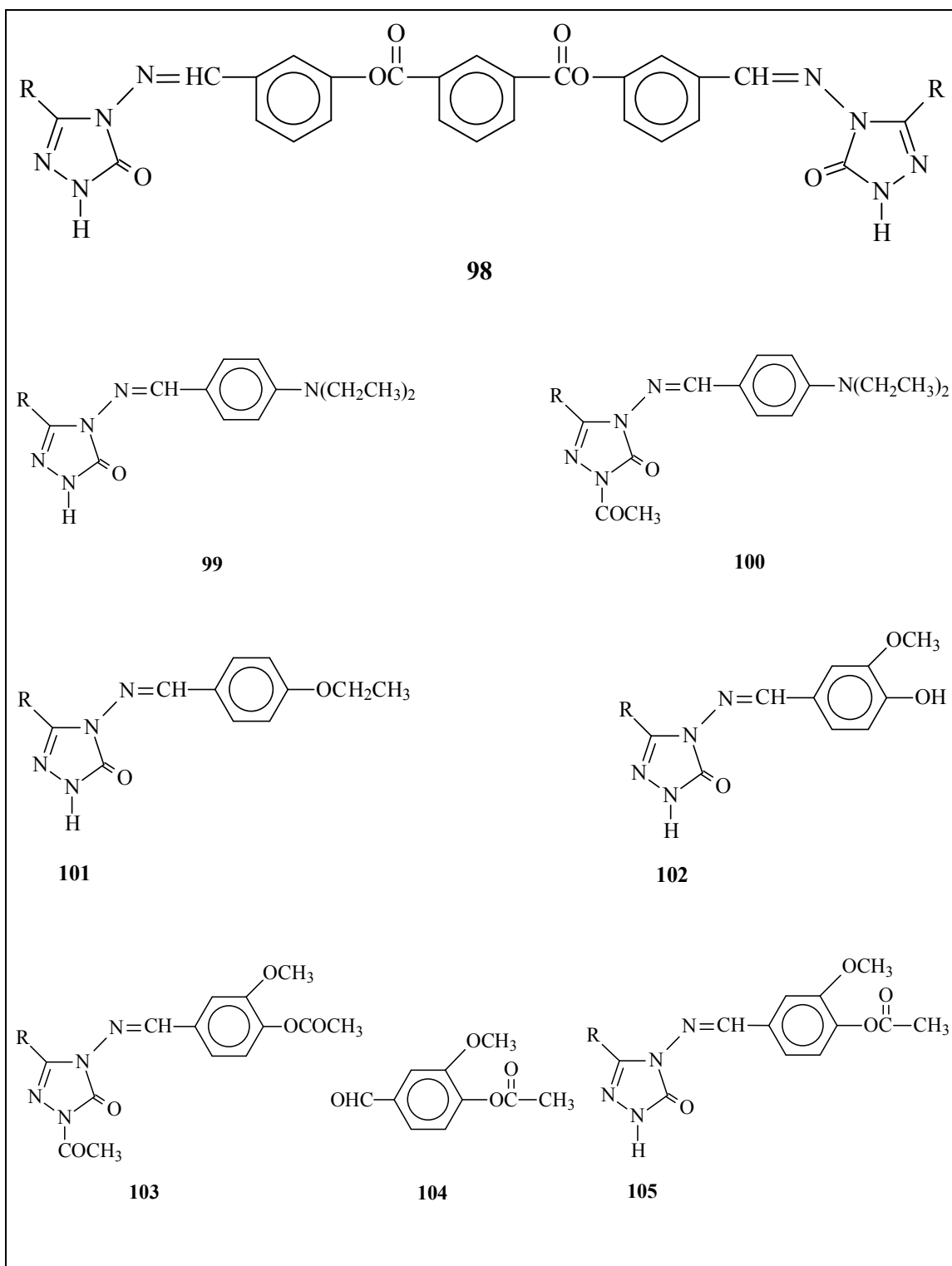


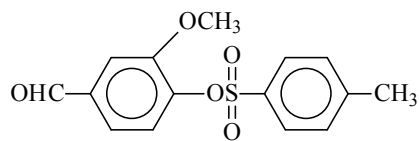




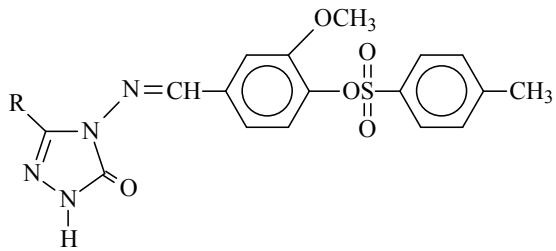




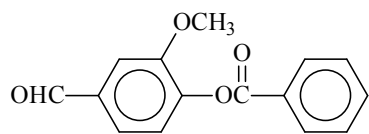




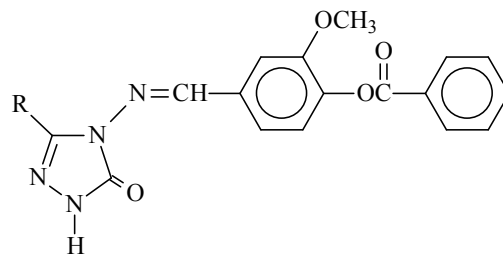
106



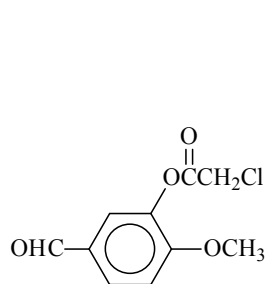
107



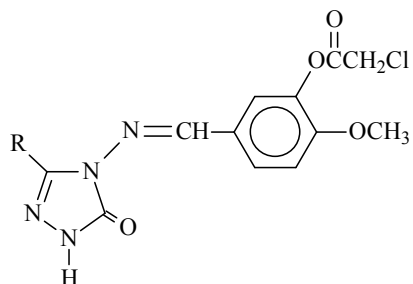
108



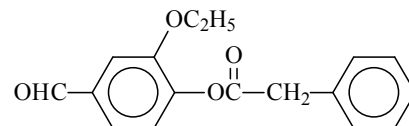
109



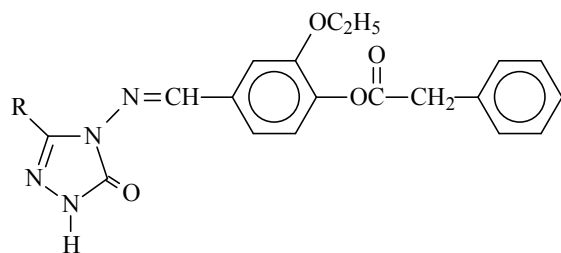
110



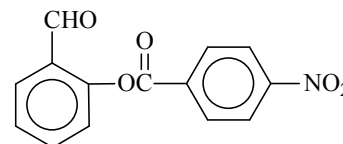
111



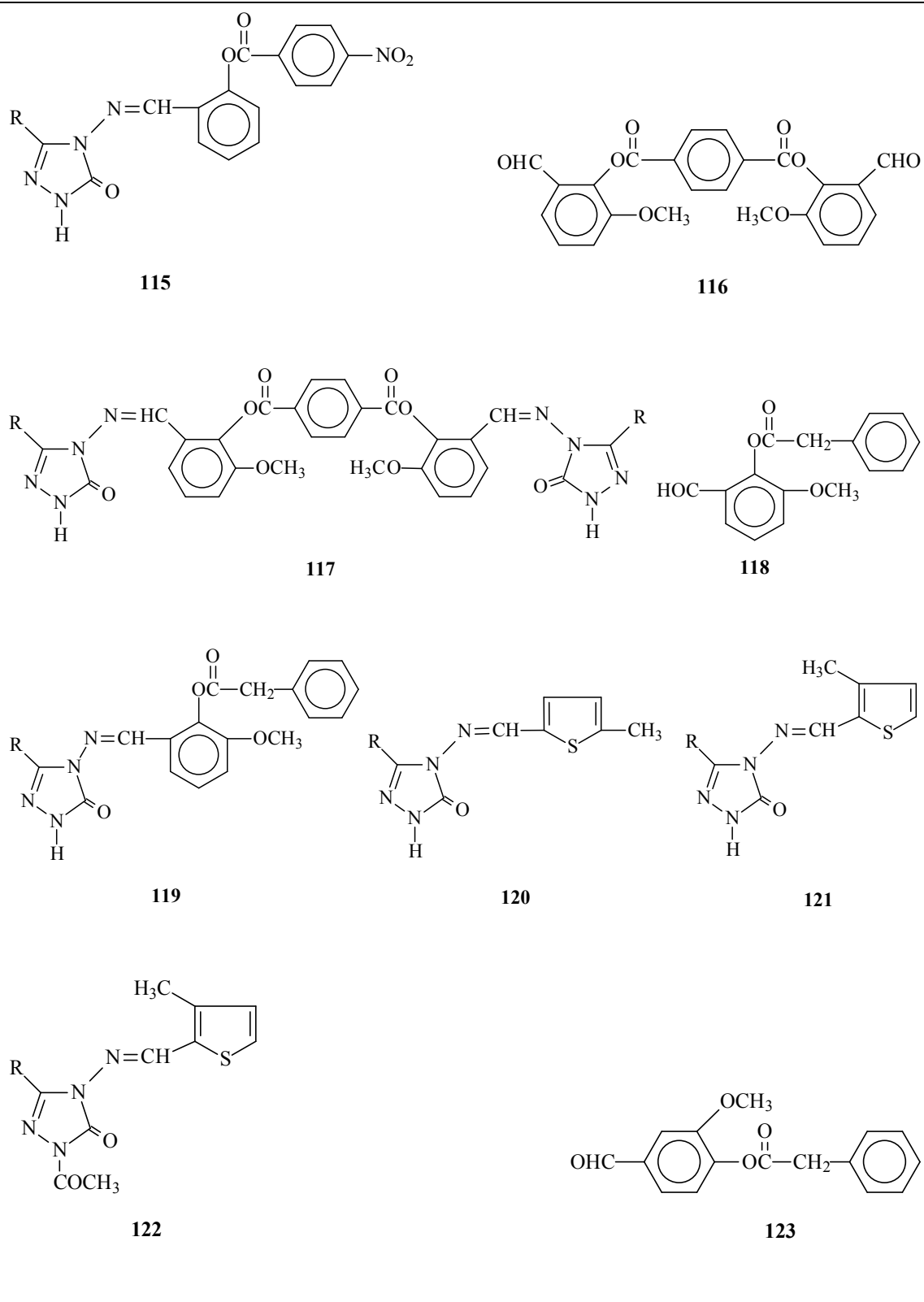
112

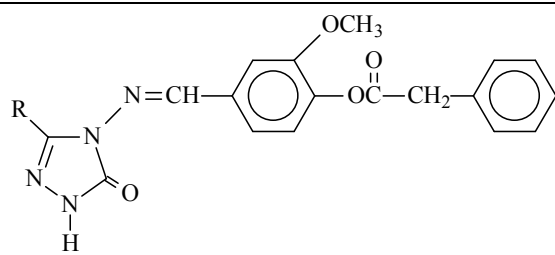


113

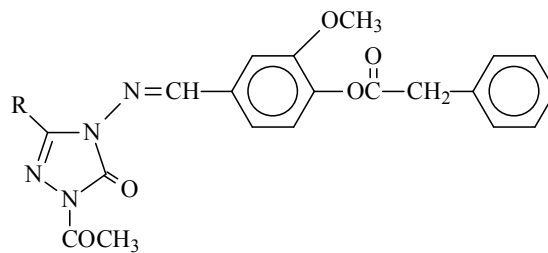


114

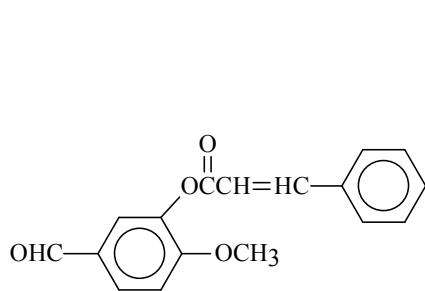




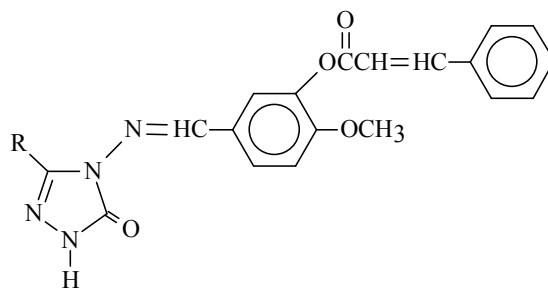
124



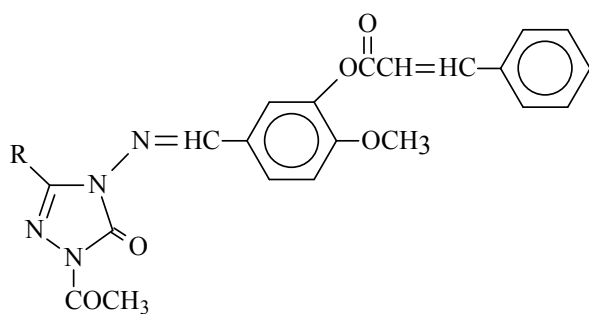
125



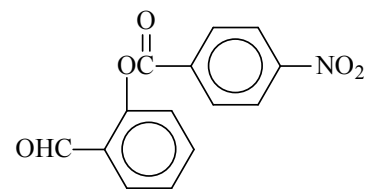
126



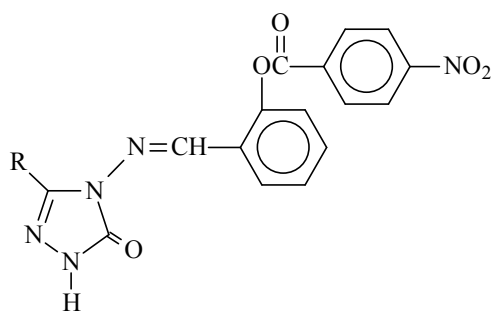
127



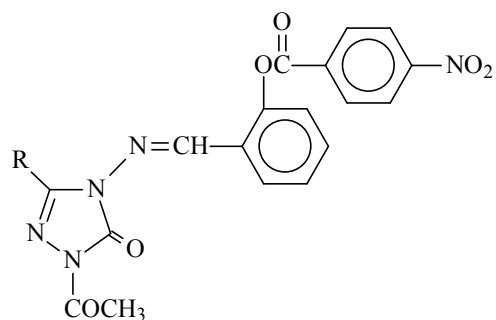
128



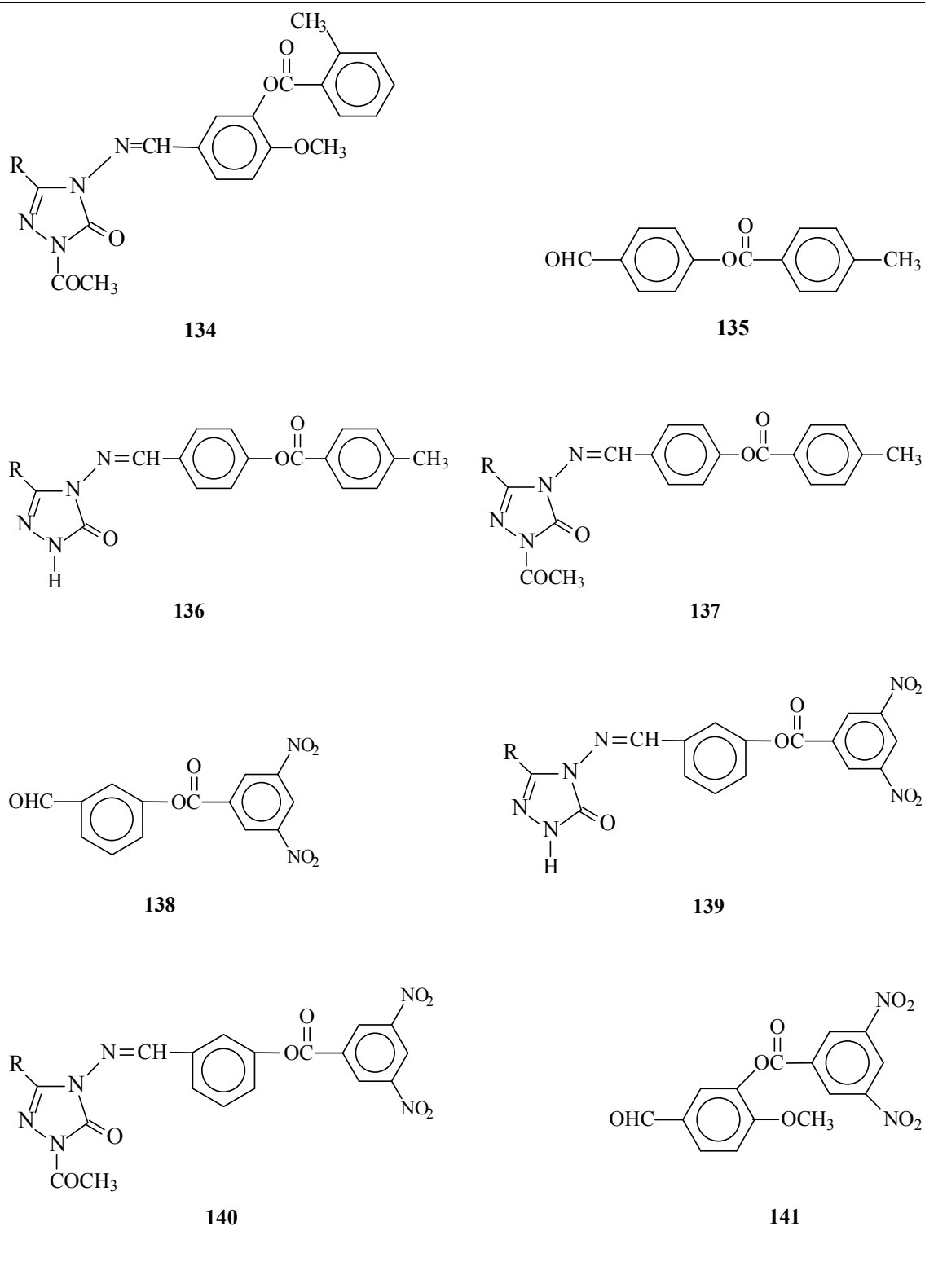
129

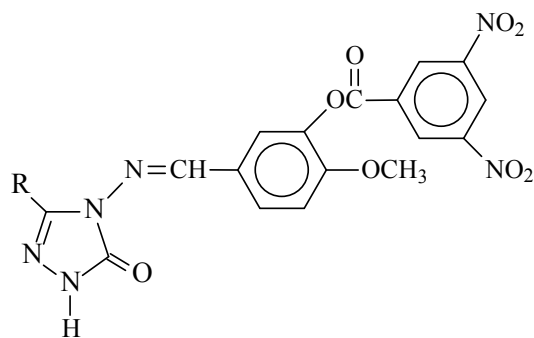


130

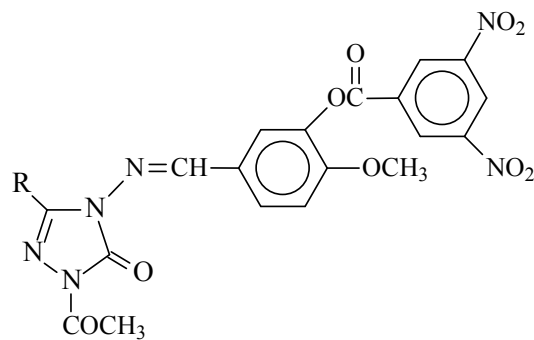


131

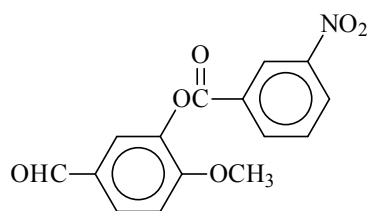




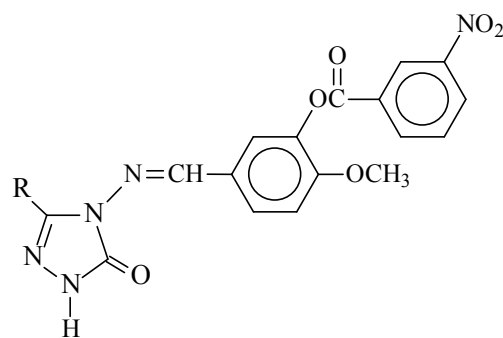
142



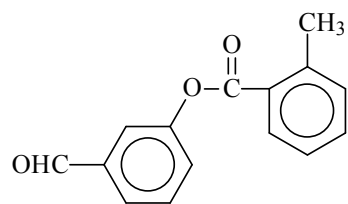
143



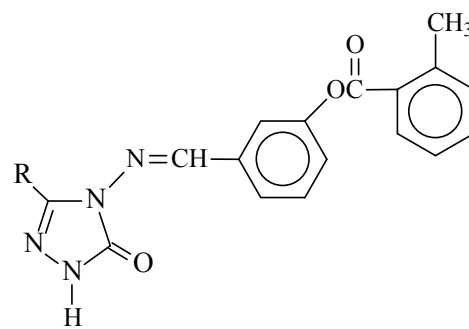
144



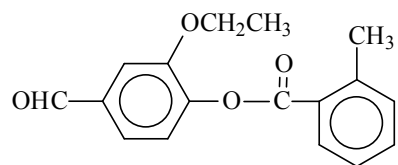
145



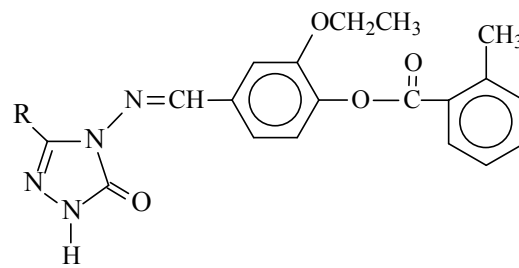
146



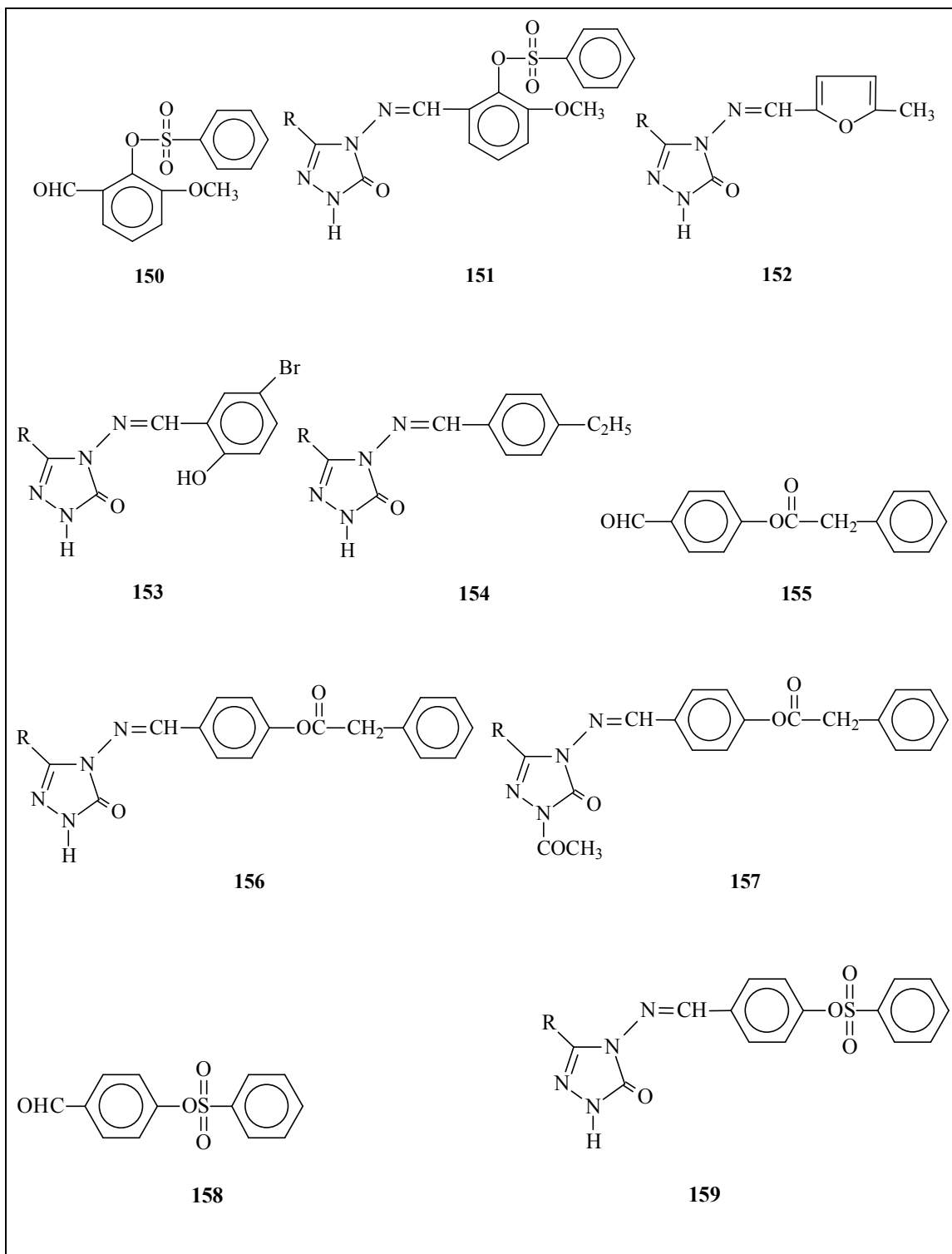
147

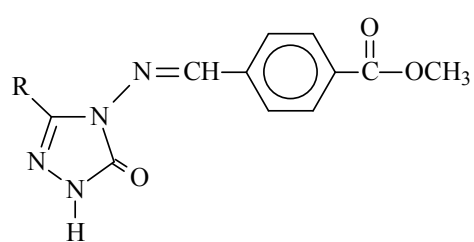


148

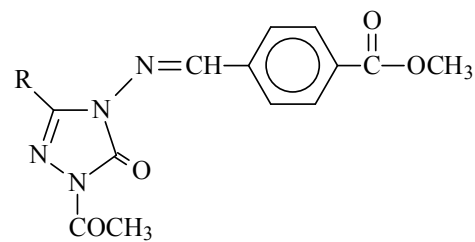


149

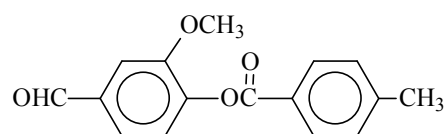




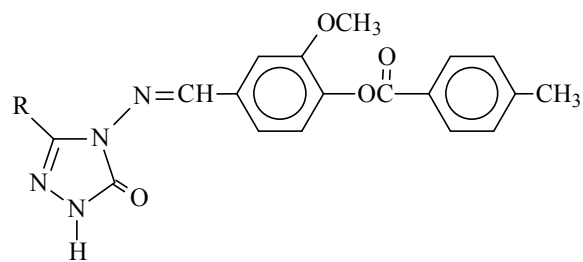
160



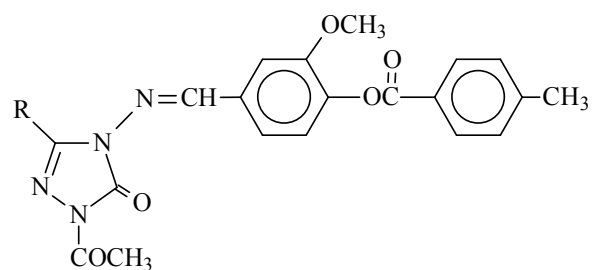
161



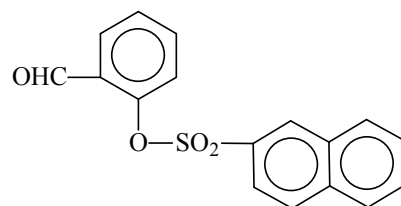
162



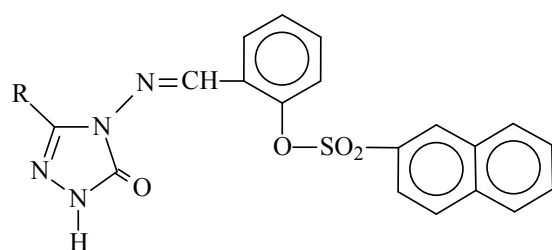
163



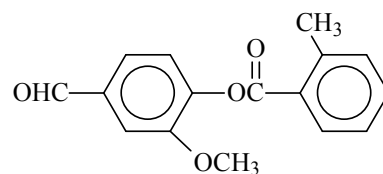
164



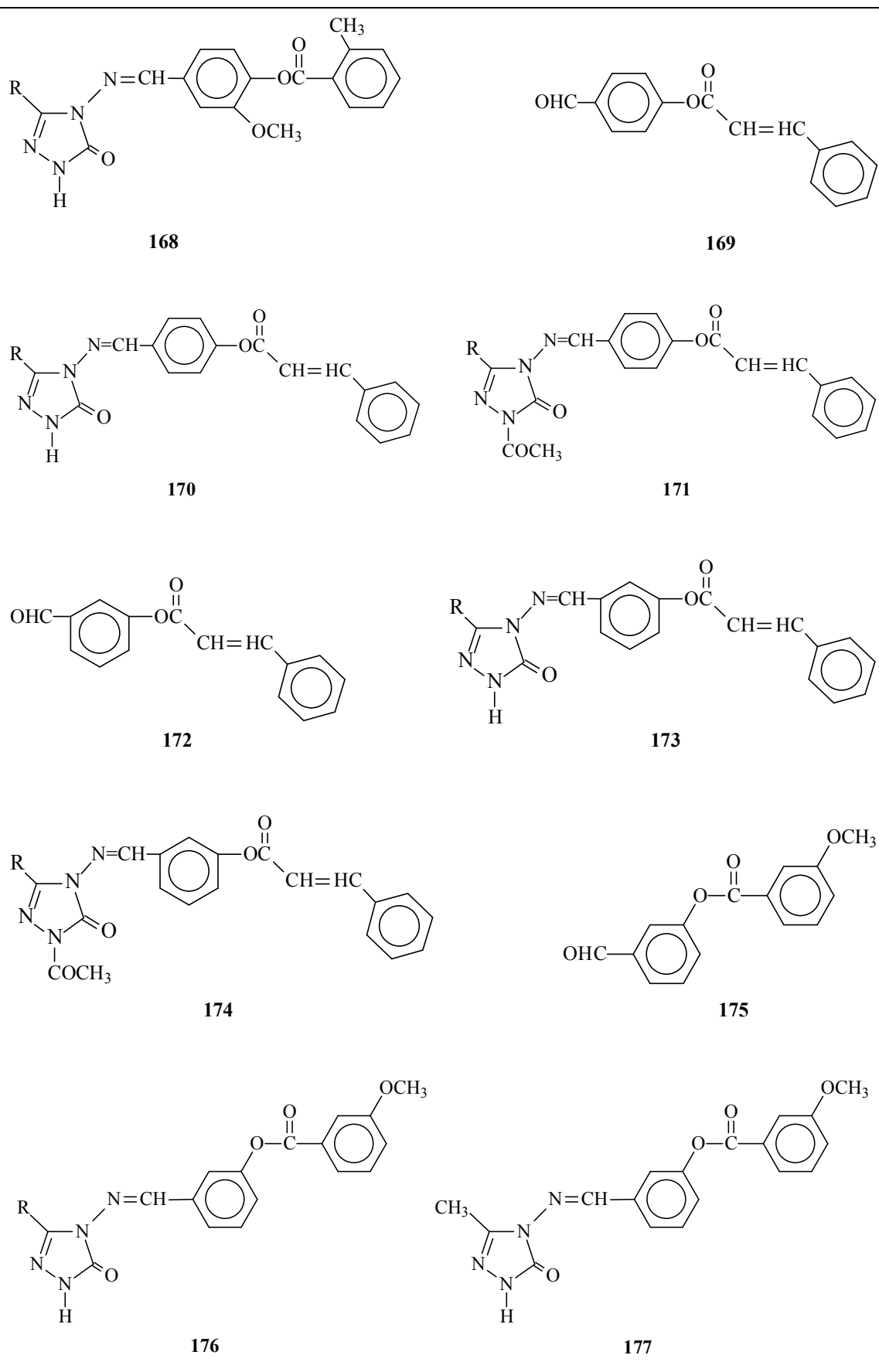
165

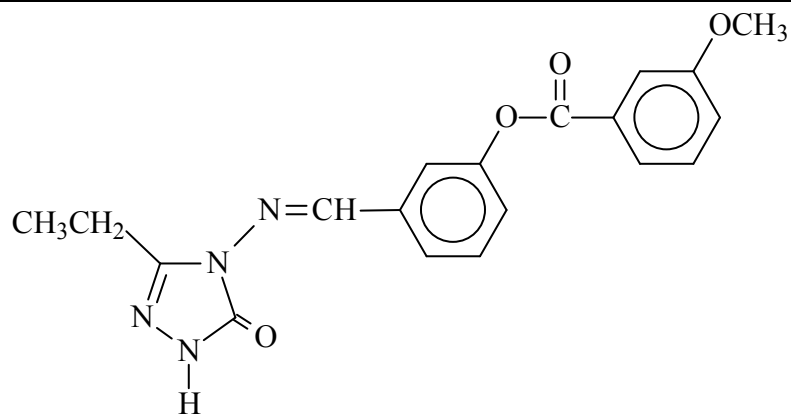


166

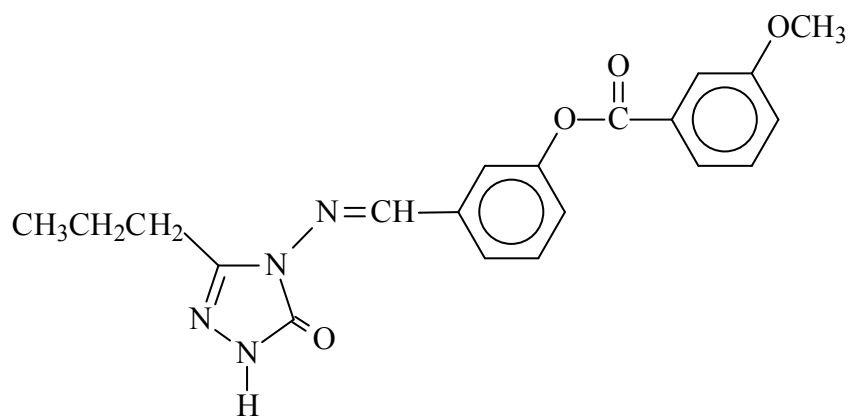


167

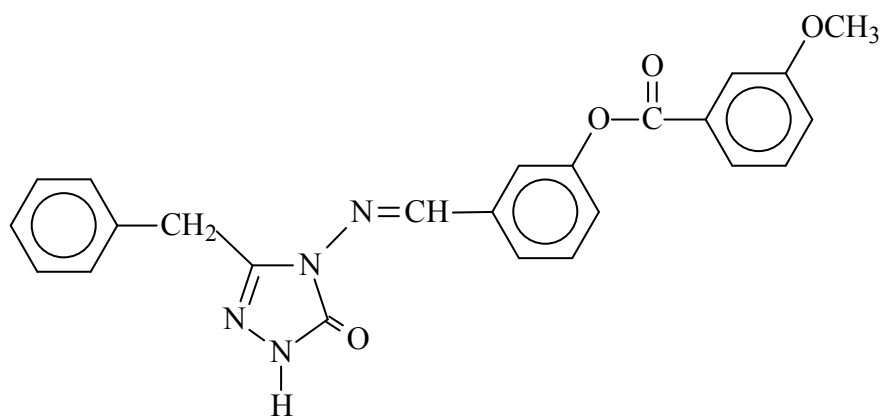




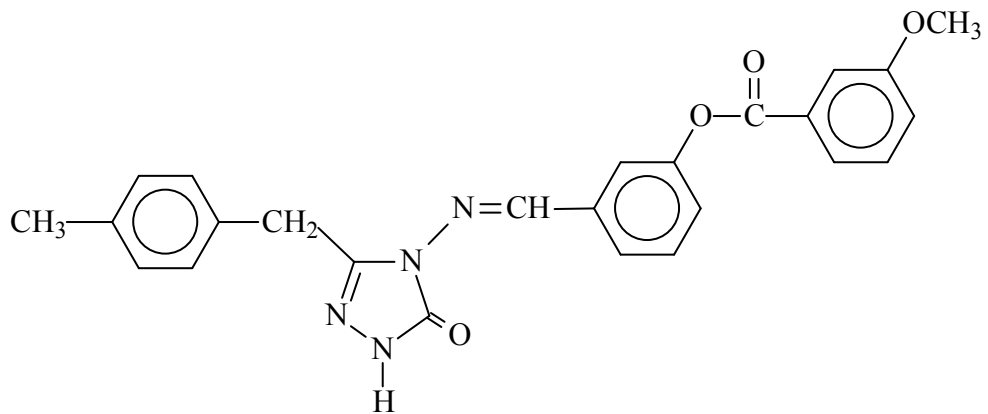
178



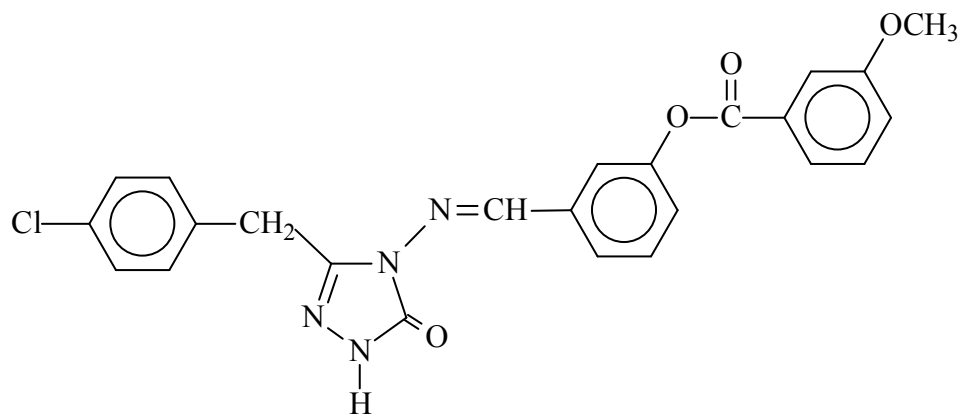
179



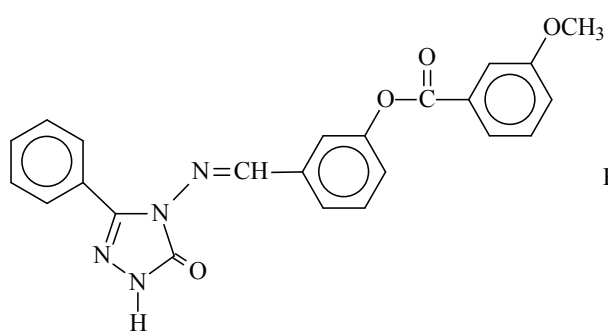
180



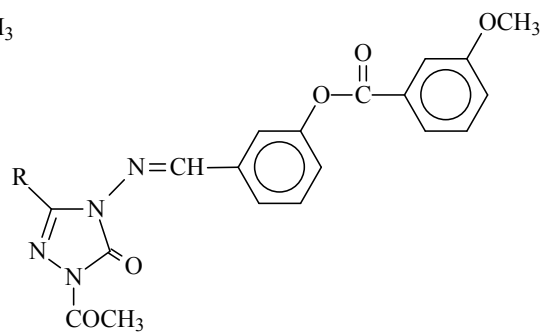
181



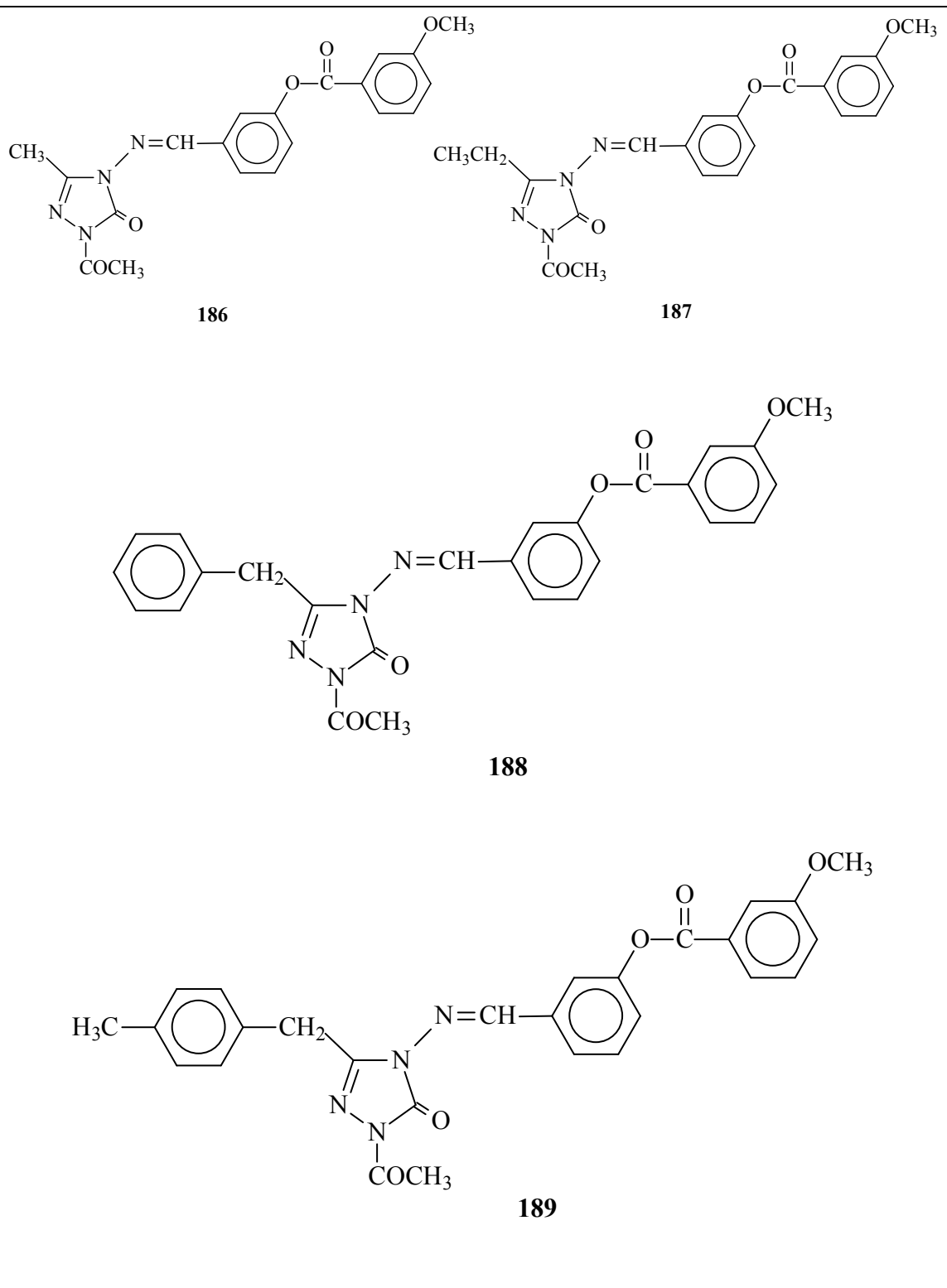
183

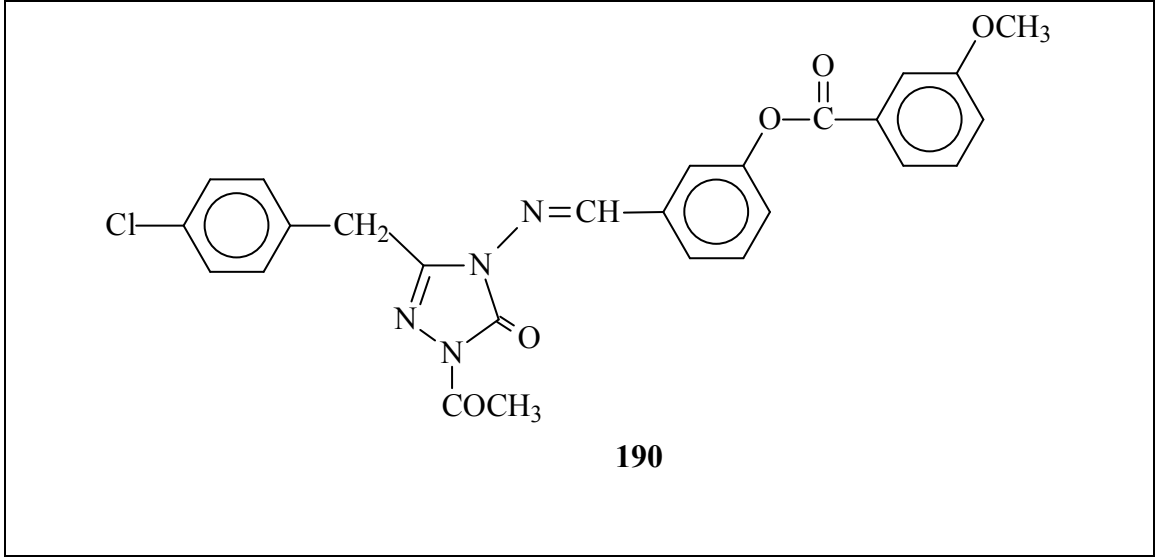


184



185





Birçok heterosiklik bileşik doğal ürünlerin yapısında yer alır ve yaşamda çok çeşitli yerlerde kullanılmaları nedeniyle büyük öneme sahiptirler. Özellikle ilaç ve boya sanayinde kullanılmaları, ayrıca birçoğunun sentetik olarak elde edilmeleri önemlerini daha da artırmıştır. Karbohidratlar, nükleik asitler, peptitler ve proteinler heterosiklik moleküllere örnek olarak gösterilebilir [1].

1,2,4-Triazol ve 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkası içeren heterosiklik bileşiklerin antimikrobiyal [2, 3] antifungal [4] antitümöral [5], anti-HIV [5], antikanserojen [6], antiviral [7], anti-tüberkülostatik [8], iltihap önleyici [9], ağrı kesici [10], antioksidan [11], farmakolojik özelliklere sahip [12], biyolojik özelliklere sahip [13], antikonvülzan [14], Anjiyotensin II antagonist [15], antiastmatik [16], antitiroid [17], anti-mikobakteriyal [18], antimikotik [19], anti-HCV [20] özellikleri gösterdiği birçok çalışma ile ortaya konmuştur.

Günümüzde kullanılan teorik yöntemler ile moleküllerin birçok özellikleri deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanmaya başlanmıştır. Kimyasal araştırmalarda bilgisayar kullanılarak yapılan kimyasal hesaplamalar, deneysel yöntemlerle elde edilen birçok maddenin; ¹H-NMR ve ¹³C-NMR spektral verileri, IR frekans değerleri, UV-vis değerleri, bağ açıları, bağ uzunlukları, formal yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjileri gibi çok sayıda özelliğinin daha kısa sürede ve daha güvenilir

bir şekilde elde edilmesini sağlar. Teorik yöntemler kullanılarak standart değerler elde edilmiş ve bu değerler temel alınarak deneysel çalışmalar arttırılmıştır [1].

1.2. Moleküler Titreşim Spektroskopisi

1.2.1. Molekül Titreşimleri

İki veya daha fazla atomun bir araya gelerek kararlı bir düzen kurmaları ile molekül veya molekül sistemleri oluşur. Atomların molekül içindeki düzen ve kararlılığını incelemek için en iyi yöntem moleküler spektroskopidir. Molekül titreşim spektroskopisi, moleküllerin yapısının tayininde kullanılır. Elektromagnetik dalgayla maddenin etkileşmesini inceler [21]. Bu incelemenin sonucunda moleküllerin geometrik ve elektronik yapıları ile aralarındaki etkileşmeler hakkında birçok bilgiyi elde edebiliriz. Numune molekülleri elektromagnetik dalga ile etkileştiğinde başlangıçtaki enerjisi, elektromagnetik dalgayı soğurması veya salmasıyla değişir. Soğrulan veya salınan elektromagnetik dalganın frekansı, band şiddeti incelenerek molekülün yapısıyla ilgili; simetri, bağ uzunluğu, bağlar arasındaki açılar, bağ kuvvetleri, kararlılığı gibi önemli bilgilerle birlikte molekülün fiziksel ve kimyasal yapısı hakkında bilgi edilebilmektedir [22]. Madde ile elektromagnetik dalganın etkileşmesi, molekülün enerji seviyeleri arasında geçişe neden olur. Bu geçişler, gelen elektromagnetik dalganın enerjisine bağlı olarak değişik spektrum bölgelerine ayrılır (Tablo 1.2.) [23]. Madde üzerine gönderilen elektromagnetik dalga soğrulduğunda madde ile arasında enerji alışverişi olur.

$$E = E'' - E' = hv \quad (1)$$

Burada, ΔE : iki seviye arasındaki enerji farkı, h : Planck sabiti, v : elektromagnetik dalga ışığının frekansıdır. Molekülün titreşim enerji seviyeleri arasındaki geçişler için E'' : üst titreşim seviyesinin enerjisi, E' : alt titreşim seviyesinin enerjisi olmak üzere, E' seviyesinden E'' seviyesine geçilmesi, molekülün ışığı soğurması; E'' enerji seviyesinden E' enerji seviyesine geçmesi de ışığın yayılımı olarak tanımlanır [23].

Tablo 1.2. Elektromagnetik dalga spektrum bölgeleri

Bölge	Dalga Boyu	Spektroskopi Türü	Frekans (Hz)
Radyo Dalgaları	300-3 m	NMR ve NQR	10^6-10^8
Mikrodalga	30-0,3 m	ESR ve Moleküler Dönme	$10^{10}-10^{12}$
Kızılötesi (İnfrared)	300-1 μm	Moleküler Dönme ve Titreşim	$10^{12}-3 \times 10^{14}$
Görünür ve Mor Ötesi (UV)	1 μm -300 Å	Elektronik Geçişler (Dış Elektronlar)	$3 \times 10^{14}-3 \times 10^{16}$
X-Işınları	100-0,3 Å	Elektronik Geçişler (İç Elektronlar)	$3 \times 10^{16}-10^{19}$
γ-Işınları	0,3-0,03 Å	Nükleer Geçişler	$10^{19}-10^{22}$

Elektromagnetik dalga spektrum bölgeleri şöyle tanımlanır [24]:

Radyo Dalgaları Bölgesi: Elektron veya çekirdeğin spininin işaret değiştirmesinden kaynaklanan enerji değişimleri bu bölgede incelenir. Radyo dalgaları bölgesi, Nükleer Magnetik Rezonans (NMR) ve Nükleer Kuadrupol Rezonans (NQR) spektrumlarını içerir.

Mikrodalga Bölgesi: Molekülün dönme enerji seviyelerinin değişimi incelenir. Dönme enerjileri arasındaki geçişlerin spektrumu, mikrodalga bölgesinde meydana gelir. Ayrıca çiftlenmemiş elektrona sahip sistemin magnetik özelliklerindeki değişimlerin de incelendiği bölgedir.

Kızılötesi (İnfrared) Bölgesi: Bir molekülün titreşim ve dönme enerji seviyeleri arasındaki geçişler incelenir. Molekülün titreşim frekansları bu bölgede, kızılötesi soğurma ve Raman saçılma spektroskopisi yöntemleri ile incelenir.

Görünür ve Mor Ötesi Bölgesi: Atom veya molekülde bulunan dış kabuktaki elektronların yer değiştirmesi incelenir. Bu bölgedeki spektroskopi türü (elektron spektroskopisi), molekül veya atomun en dış orbitalindeki elektronların çeşitli enerji seviyeleri arasındaki geçişlerine dayanır.

X-Işınları Bölgesi: Bir atom veya molekülde iç kabuktaki elektronların geçişleri bu bölgede olur. X-ışınları bölgesindeki spektroskopi türü X-ışınları spektroskopisi adını

alır. X-ışınları atom veya moleküllerde, iç orbitaldeki elektronların enerji seviyelerinin değişmesini sağlar [23].

γ-Işınları Bölgesi: Çekirdeğin içindeki enerji seviyeleri arasındaki geçişler incelenir. Bu geçişlerin enerjisi oldukça yüksektir. Çekirdek uyarılmış seviyede çok kısa bir süre kaldıktan sonra temel hale geri döner.

Serbest bir molekülün toplam enerjisi; titreşim, dönme, elektronik, öteleme ve nükleer dönme enerjileri olmak üzere beş kısımdan oluşur. Öteleme enerjisi sürekli bir enerji olması nedeniyle dikkate alınmaz. Nükleer dönme enerjisi ise diğer enerjilere kıyasla çok küçük olduğundan ihmal edilebilir [25]. Elektronik, titreşim ve dönme enerjilerinin birbirinden çok farklı olduğunu Born-Oppenheimer yaklaşımı vermektedir. Bu enerjilerin aralarındaki etkileşimler ihmal edilebilir olduğundan elektronik enerji geçişleri, titreşim ve dönme geçişlerinden ayrı incelenmelidir [26]. O halde bir molekülün toplam enerjisi;

$$\Delta E_{\text{toplam}} = E_{\text{elektronik}} + E_{\text{titreşim}} + E_{\text{dönme}} \quad (2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $E_{\text{elektronik}}$, moleküldeki elektronların hareketinden kaynaklanan elektronik enerji, $E_{\text{titreşim}}$, moleküldeki atomların titreşiminden kaynaklanan titreşim enerjisi, $E_{\text{dönme}}$, molekülün dönmesinden kaynaklanan dönme enerjisidir. Bir moleküldeki toplam enerji değişimi;

$$\Delta E_{\text{toplam}} = \Delta E_{\text{elektronik}} + \Delta E_{\text{titreşim}} + \Delta E_{\text{dönme}} \quad (3)$$

şeklindedir. Bu enerji değişimlerinin birbirlerine göre oranları ise

$$E_{\text{elektronik}} = 10^3 E_{\text{titreşim}} = 10^6 E_{\text{dönme}} \quad (4)$$

olarak ifade edilir [27].

1.2.2. Infrared Spektroskopisi

Kızılötesi (IR) spektroskopisi, moleküler titreşimleri analiz eden bir tekniktir. Bu spektroskopi tekniğinde örneğin, kızılötesi bölgede tüm frekansları içeren elektromagnetik dalga ile ışınlanarak geçen veya soğurulan ışık incelenir [28]. Kızılötesi spektroskopisinin temeli ışığın soğurulmasına dayanır. Soğurulan elektromagnetik dalganın elektrik alan bileşeni ile molekülün elektriksiz dipol momentinin etkileşmesi incelenir. Kızılötesi spektroskopisi ile molekül simetrisi, elektron dağılımı, bağ kuvveti gibi özellikler hakkında bilgi edinilebilir.

Kızılötesi spektroskopisi dalga boyu, dalga sayısı ve frekansa göre yakın, orta ve uzak kızılötesi bölge olmak üzere üç kısımda incelenir.

Tablo 1.3. IR bölgeleri [29]

Bölge	Dalga Boyu Aralığı (μm)	Dalga Sayısı Aralığı (cm^{-1})	Frekans Aralığı (Hz)
Yakın IR	0.78-2.5	12800-4000	3.8×10^{14} - 1.2×10^{14}
Orta IR	2.5-50	4000-200	1.2×10^{14} - 6.0×10^{12}
Uzak IR	50-1000	200-10	6.0×10^{12} - 3.0×10^{11}

Yakın IR Bölgesi: Molekül titreşimlerinin üst ton ve harmonikleri gözlenir.

Orta IR Bölgesi: Moleküler temel titreşimler genellikle bu bölgeye düştüğü için spektroskopide en çok kullanılan bölgedir. Bu sebeple IR bölge denilince genellikle bu bölge anlaşılır.

Uzak IR Bölgesi: Molekül saf dönü hareketi ve ağır atom içeren molekülün titreşimlerinin incelendiği bölgedir. Mikrodalga bölgesine yakın yerlerde moleküllerin dönme hareketleri de incelenebilir.

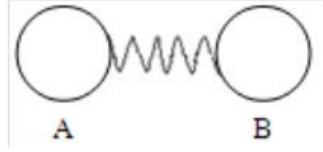
İnfrared spektroskopisi, maddenin infrared ışınlarının soğurulması üzerine kurulmuş bir spektroskopi dalıdır. Bir sistem yayınlayabildiği frekansa eşdeğerde, başka bir frekansı soğurabilir. N_2 , O_2 , Cl_2 gibi homonükleer ve CCl_4 gibi simetrik moleküller hariç tüm moleküller infrared ışınını soğurur ve infrared spektrumu verirler. Homonükleer ve

CCl_4 gibi simetrik moleküller infrared ışını soğuramazlar, çünkü bunlarda dipol moment değişimi olmamaktadır. Infrared ışınlarını soğuran maddelere infrared aktif maddeler denir.

Molekül ν frekanslı bir ışın soğurduğunda, molekülün $\vec{\mu}$ elektriksel dipol momentinin bileşiklerinden en az biri bu frekansta titreşecektir. Bu titreşim spektrumda infrared bölgede gözlenebilir. Titreşimle ilgili olan bu soğurma klasik teori ve kuantum mekaniksel teori olmak üzere iki kısımda incelenebilir [30-32].

1.2.3. İki Atomlu Moleküllerin Titreşim Enerji Seviyeleri

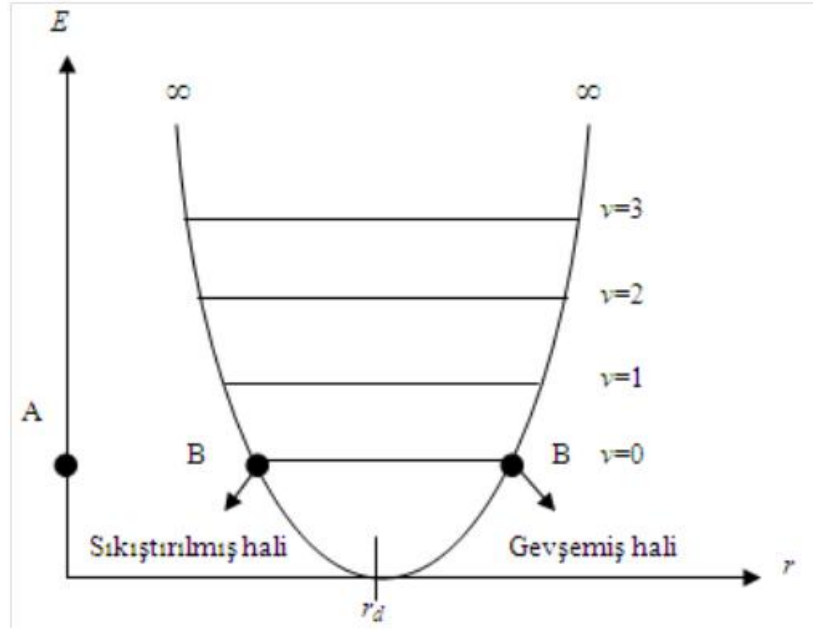
İki atomlu moleküllerin titreşim enerji seviyeleri hesaplanırken atomların birbirlerine bir yayla bağlı olduğu varsayılır (Şekil 1.1.).



Şekil 1.1. İki atomlu bir molekülün şekli.

1.2.3.1. Harmonik Titreşici Modeli

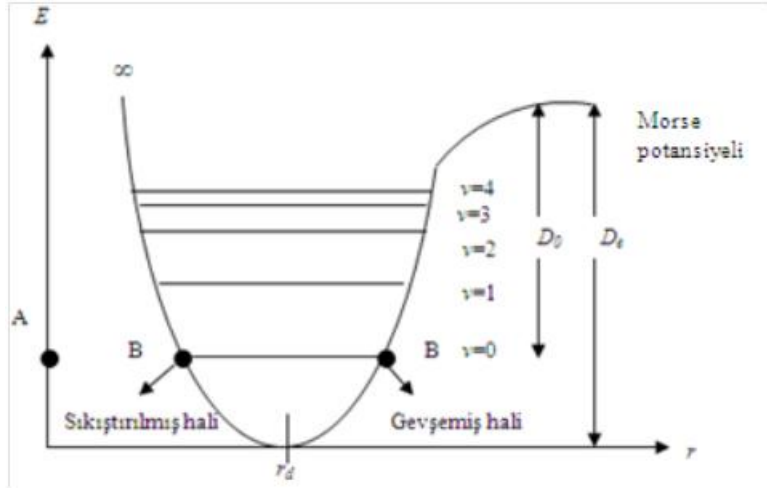
Harmonik titreşici modeline göre bu yay esnek olarak hareket eder. Atomlar denge noktasından (R_e) uzaklaştığında iki atomlu molekülün moleküler potansiyel enerjisi artar [30, 33].



Şekil 1.2. Harmonik titreşen iki atomlu bir molekülün enerji seviyeleri.

1.2.3.2. Anharmonik Titreşici Modeli

Moleküler potansiyel enerji Taylor serisine göre açıldığında kuadratik terimleri ihmal edilir, bu yalnızca bir yaklaşımdır. Aslında gerçek molekülde ihmal edilen terimler özellikle denge noktasından olan büyük uzaklıklarda önemlidir ve bu sebeple harmonik yaklaşıklık gerçek molekülün enerji seviyelerini bize vermez. Anharmonik yaklaşıklık bize molekülün gerçek titreşim enerji düzeylerini verir. Bu yaklaşımda enerji seviyeleri aralıkları birbirine eşit değildir ve yüksek uyarılma seviyelerinde bu aralıklar gitgide azalır. Böylece molekül atomlarına ayrılabilir. Anharmonik yaklaşıklıkta Morse potansiyel enerjisi kullanılır.



Şekil 1.3. Anharmonik titreşen iki atomlu molekülün enerji seviyeleri.

1.2.4. Çok Atomlu Moleküllerin Yapabileceği Temel Titreşim Hareketleri

Bir moleküldeki bütün atomların aynı faz ve frekansta basit harmonik hareket yaptıkları titreşimlere temel titreşimler (normal modlar) denir [24].

N atomlu bir molekülün her atomunun uzaysal konumu x , y , z yer değiştirme koordinatları ile belirlenir. Çok atomlu moleküllerin titreşim hareketi karışık olmakla beraber hesaplanabilmektedir. Bir molekülün temel titreşim kipleri (normal mod), bütün atomların aynı fazda ve aynı frekansta yaptıkları titreşim hareketleridir; fakat genlikler (kütlelerle ters orantılı) farklıdır.

N atomlu bir molekülün $3N$ tane serbestlik derecesi vardır. Lineer olmayan bir molekül için 3 eksen boyunca öteleme ve 3 eksen etrafında dönme titreşimleri serbestlik derecesinden çıkarılırsa, $3N-6$ tane (molekül lineer ise $3N-5$) temel titreşim elde edilir. Kapalı halka oluşturmeyen N atomlu bir molekülün $N-1$ bağ gerilmesi, $2N-5$ açılı bükülme (lineer ise $2N-4$) titreşimi vardır. Çok atomlu bir molekülün herhangi bir gözlenen bandına karşılık gelen titreşim hareketi $3N-6$ temel titreşimden bir veya birkaçının üst üste binmesi şeklinde açıklanabilir. Çok atomlu moleküllerin titreşimini dört grupta inceleyebiliriz [30, 32].

1.2.4.1. Gerilme Titreşimleri: ν

Bağın kendi eksenini doğrultusunda, periyodik uzama ve kısalma hareketine neden olan titreşimlerdir. Yer değiştirme vektörleri bağ uzunluğundaki değişmeyi verir. Bu tür titreşim hareketleri bağ açısını değiştirmez. Bağ simgesi " ν " ile gösterilir. Simetrik ve asimetrik (anti-simetrik) gerilme olarak ikiye ayrılır (Şekil 1.4-12) [30, 34].

1.2.4.1.1. Simetrik Gerilme: ν_s

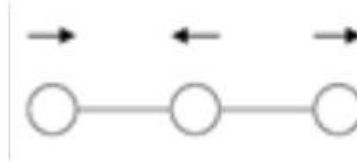
Molekülün tüm bağlarının aynı anda uzaması ve kısalması hareketidir ve " ν_s " ile gösterilir.



Şekil 1.4. Simetrik gerilme

1.2.4.1.2. Asimetrik (Anti-simetrik) Gerilme: ν_a

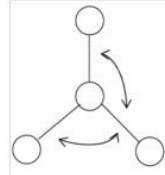
Moleküldeki bağların biri veya birkaçı uzarken diğeri kısalır ve " ν_a " ile gösterilir. Asimetrik gerilmenin enerjisi, genel olarak simetrik gerilme titreşim enerjisinden daha yüksektir.



Şekil 1.5. Asimetrik (anti-simetrik) gerilme

1.2.4.2. Açık Bükülme Titreşimleri: δ

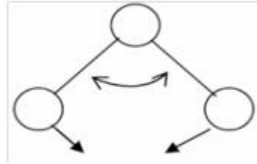
İki bağ arasındaki açının periyodik olarak değişerek deformasyona uğraması hareketidir. Yer değiştirme vektörleri bağ doğrultusuna diktir ve “ δ ” ile gösterilir. Molekül grupları için açı bükülmesinin özel şekilleri aşağıdaki gibidir.



Şekil 1.6. Açık bükülme titreşimleri

1.2.4.2.1. Makaslama : δ_s

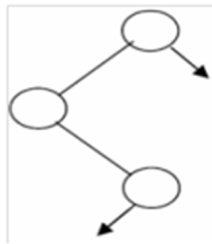
Yer değiştirme vektörlerinin bağa dik doğrultuda ve aynı noktaya doğru olduğu titreşim hareketidir ve “ δ_s ” ile gösterilir.



Şekil 1.7. Makaslama

1.2.4.2.2. Sallanma: ρ_r

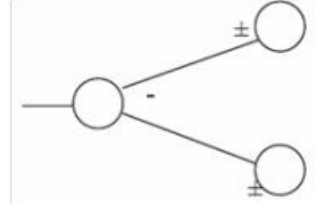
Bir grup atomla (atomlar arasındaki açı yer değiştirmeden) bir bağ yada iki bağ arasındaki açının bükülmesidir ve “ ρ_r ” ile gösterilir.



Şekil 1.8. Sallanma titreşimi

1.2.4.2.3. Dalgalanma: ω

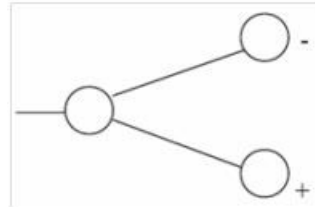
Bir bağ ile iki bağ tarafından tanımlanan bir düzlem arasındaki açının değişimine neden olan titreşim hareketidir. Molekölün tüm atomları denge konumunda düzlemsel iken, bir atomu bu düzleme dik hareket etmesidir ve “ ω ” ile gösterilir.



Şekil 1.9. Dalgalanma titreşimi

1.2.4.2.4. Kıvrırma: t

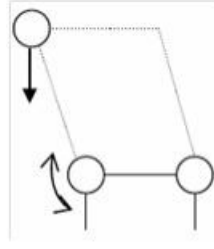
Bir bağ ile bağ düzlemi arasındaki açı değişimidir ve “ t ” ile gösterilir. Lineer ve düzlemsel olmayan moleküllerde bağların atomlar tarafından bükülmesine neden olur. Yer değiştirme vektörleri bağ doğrultusuna dik ve zıt yöndedir.



Şekil 1.10. Kıvrırma titreşimi

1.2.4.2.5. Burulma: τ

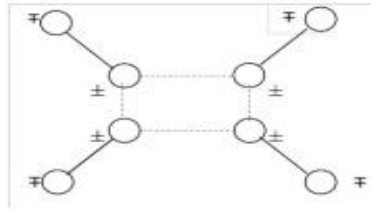
İki düzlem arasındaki açının bir bağ veya açığı bozarak (deforme ederek) periyodik olarak değişim hareketidir ve “ τ ” ile gösterilir.



Şekil 1.11. Burulma titreşimi

1.2.4.3. Düzlem Dışı Açı Bükülmesi: γ

Bir düzleme (en yüksek simetriye sahip düzlem) dik doğrultudaki açı değişimidir. Atomların hareketi ile bir düzlem yok edilmiş olur. Bu titreşim hareketi “ γ ” ile gösterilir. Genelde kapalı bir halka oluşturan moleküllerde görülür ve hareketin biçiminden dolayı “şemsiye” titreşimi olarak bilinir. Şekildeki (+) ve (-), sırasıyla kağıt düzlemin üstüne ve altına olan hareketleri göstermektedir.



Şekil 1.12. Düzlem dışı açı bükülmesi

Boltzmann olasılık dağılımına göre moleküllerin çoğu oda sıcaklığında taban titreşim enerji düzeyinde, çok az bir kısmı da uyarılmış titreşim enerji düzeyinde bulunabilir. Bu nedenle bir molekülün infrared spektrumunda şiddetli bandları birinci titreşim düzeylerinden kaynaklanan ($\nu=0 \rightarrow 1$) geçişlerinde gözlenir. Bu geçişlerde gözlenen titreşim frekanslarına temel titreşim frekansı denir. Temel titreşim bandları yanında, üst ton, birleşim ve fark bandları da bulunur. Temel titreşim frekansının iki, üç veya daha fazla katlarında (2ν , 3ν) üst ton geçişleri gözlenir. İki veya daha fazla temel titreşim frekansının toplamı ve farkı olarak ortaya çıkan frekanslarda da birleşim ve fark bandları oluşur. Bu bandların şiddeti, temel titreşim bandlarına göre zayıftır. Bu titreşimlerin gözlenebilir olması daha önce ifade ettiğimiz infrared gözlenebilirlik şartı ile mümkündür.

Rezonans şartı ise, aynı simetri türünde olan bir titreşim ile bir üst ton ve birleşim frekansı birbirine çok yakın olduğu durumlardaki etkileşmeler için olasıdır. Bu durumda spektrumda şiddetli bir temel titreşim bandı ile zayıf bir üst ton veya birleşim bandı gözleneceği yerde, temel titreşim bandı civarında gerçek değerlerden sapmış farklı iki şiddetli band gözlenir. Bu olay Fermi rezonansı olarak adlandırılır. Moleküllerin spektrumu çekildiğinde titreşim, frekans ve kip tayininde en çok yararlanılan grup frekanslarıdır. İzotropik yer değiştirmeden de yararlanılmaktadır.

1.3. Moleküler Simetri

Bir molekülü oluşturan atomların uzaydaki geometrik dağılımına moleküler simetri denir. Bir molekülün nokta, eksen ve düzlem gibi geometrik simetri elemanları bir grup oluşturur. Yansıma, dönü ve terslenme gibi simetri işlemleri simetri elemanlarına uygulandığında molekül ilk durumu ile özdeş olur, molekülün simetrisi değişmez. Bir moleküle simetri işlemleri uygulamasının sonunda molekülün en az bir noktası (simetri elemanlarının kesiştiği nokta veya kütle merkezi) yer değiştirmemiş olarak kaldığından, molekülün simetri elemanlarının oluşturduğu bu gruplara nokta grubu denir. Molekülün simetri özelliklerinden yararlanılarak karakter tabloları hazırlanmıştır. Moleküle ait temel titreşim modların hangi simetri türlerine ait olduğu ve bu titreşimlerin IR aktif olup olmadığı; grup teori yöntemiyle karakter tabloları kullanılarak bulunabilir. Bununla birlikte simetrisi bilinen bir molekülün $3N-6$ tane titreşiminden hangilerinin IR ve hangilerinin raman aktif olduğu belirlenebilir [24].

1.4. Grup Frekansları

Moleküldeki belli gruplar belli frekanslarla titreşim yaparlar. Buna grup frekansları denir. Molekülün titreşim frekans ve kiplerinin belirlenmesinde en çok grup frekansları kullanılır. Molekülün bütün atomlarının aynı faz ve frekansta hareket etmesi anlamına gelen temel titreşimlerin genlikleri, titreşim frekanslarının kütle ile ters orantılı olmalarından dolayı birbirinden farklıdır. Harmonik titreşicinin frekansı,

$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (5)$$

ile ifade edilir. Burada; k: kuvvet sabiti, μ : indirgenmiş küttedir. Kuvvet sabitinin büyük olması atomların denge pozisyonunda hareketinin zorlaşmasına sebep olacağından ikili ve üçlü bağların (C=C, C=O, C=N, C≡C, C≡N) gerilme frekansları tekli bağlardan daha yüksektir. Bazı gruplar molekülün diğer kısımlarından bağımsız olup, yaklaşık aynı frekansta soğurma gösterirler. Deneysel verilere göre; -NH₂, -C=N-, C-N, C=O gibi bazı grupların, IR ve Raman spektrumlarında, molekül grubu çevreye bağlı olmaksızın yaklaşık aynı frekansta soğurma gösterebilirler. Bu gruplar molekülün geri kalan kısmından bağımsız olarak hareket edebilirler [35].

Moleküllerin titreşimsel spektrumlarını yorumlayabilmek için grup frekanslarının önemli bir yeri vardır. Infrared ve Raman spektrumları incelenirken aynı grubun bulunduğu değişik moleküllerde grubun karakteristik infrared bandının, moleküle ait geri kalan kısmı ne olursa olsun, yaklaşık olarak aynı frekansta soğurma verdikleri gözlenmiştir. Moleküllerin temel titreşimleri aynı, genlikleri farklı ise; bu fark bazı grupların molekülün geri kalan kısmından bağımsız olarak hareket etmesine sebep olur [30, 36]. Bu gruplar molekülün diğer atomuna kıyasla hafif atomlar (-CH₃, C=O) veya ağır atomlar (≡C-Br, ≡C-F) içeren gruplardır.

Bağ kuvveti sabitlerinin molekülden moleküle değişmemesi sonucu grup frekansı sabit kalmaktadır. Karışık bir molekülün karakteristik grup frekanslarından oluşan infrared spektrumunun incelenmesi, infrared spektroskopisinin yapı analizinde önemli bir yöntem olduğunu ortaya koyar.

Gerilme ve bükülme hareket şekillerinde, bükülme kuvvet sabiti gerilme kuvvet sabitinden daha küçüktür. Bu nedenle gerilme titreşiminin neden olduğu frekans bölgesi bükülme titreşiminin neden olduğundan daha yüksek bölgededir. Aynı atoma bağlı bağların aynı anda gerildiği ve büküldüğü titreşim kipleri de mümkündür. Aynı grubun bulunduğu çeşitli moleküllerde çevre düzeni farklı olduğundan grup frekanslarında da

küçük deęişmeler söz konusudur. Tablo 1.4’de bazı grupların grup frekansları verilmiştir.

Tablo 1.4. Bazı grup frekansları [30, 37].

Grup	Gösterim	Titreşim Dalga Sayısı Aralığı (cm⁻¹)
-O-H gerilme	$\nu(\text{OH})$	3640-3600
-N-H gerilme	$\nu(\text{NH})$	3500-3380
-C-H gerilme (aromatik halkalarda)	$\nu(\text{CH})$	3100-3000
-C-H gerilme	$\nu(\text{CH})$	3000-2900
-CH ₃ gerilme	$\nu(\text{CH}_3)$	2962±10 ve 2872±5
-CH ₂ gerilme	$\nu(\text{CH}_2)$	2926±10 ve 2853±10
-C≡C gerilme	$\nu(\text{CC})$	2260-2100
-C≡N gerilme	$\nu(\text{CN})$	2200-2000
-C=O gerilme	$\nu(\text{CO})$	1800-1600
-NH ₂ bükülme	$\delta(\text{NH}_2)$	1600-1540
-CH ₂ bükülme	$\delta(\text{CH}_2)$	1465-1450
-CH ₃ bükülme	$\delta(\text{CH}_3)$	1450-1375
-CCH ₃ bükülme	$\rho_r(\text{CH}_3)$	1150-850
-S=O gerilme	$\nu(\text{SO})$	1080-1000
-C=S gerilme	$\nu(\text{CS})$	1200-1050
-C-H düzlem dışı açı bükülme	$\gamma(\text{CH})$	650-800

Moleküllerin normal titreşimlerini iskelet ve karakteristik grup titreşimleri olarak iki gruba ayırabiliriz. İskelet titreşimleri genellikle 1400-700 cm⁻¹ dalga sayısı aralığında gözlenir. Grup titreşim frekansları iskelet titreşim frekanslarından daha yüksek veya daha düşük frekanslardır.

1.4.1. Grup Frekanslarına Etkiyen Faktörler

Grup frekanslarına etkiyen faktörler molekül içi ve molekül dışı olmak üzere iki kısımda incelenir [30, 38].

1.4.1.1. Molekül İçi Etkiler

Molekül içi etkiler titreşimsel çiftlenim (coupling), komşu bağ etkisi ve elektronik etki olmak üzere üç kısma ayrılır.

Titreşimsel çiftlenim (coupling) bir molekülde frekansı birbirine yakın iki titreşim veya bir atoma bağlı iki titreşim arasında görülür. Buna örnek olarak iki atomlu C=O molekülü verilebilir. Bu molekülde gerilme titreşimi teorik olarak 1871 cm^{-1} 'de gözlenmesi gerekirken (Bu hesap CO_2 'den elde edilen kuvvet sabiti kullanılarak yapılmıştır), CO_2 molekülünün infrared spektrumuna baktığımızda 1871 cm^{-1} 'de bir pik gözlenmeyip 1340 cm^{-1} ve 2350 cm^{-1} olmak üzere iki gerilme titreşim gözlenmektedir. Bunun nedeni, CO_2 molekülündeki titreşimlerin birbirlerini etkilemeleri ve iki C=O bağı olmasıdır. Bu olaya titreşimsel çiftlenim denir.

Komşu bağı etkisinde önemli olan bağlar arasındaki kuvvet sabitidir. Bir bağa komşu olan bağı kuvvet sabitinin küçülmesi, o bağı kuvvet sabitinin de küçülmesine sebep olduğundan, bağı titreşim frekansı da düşer. Buna komşu bağ etkisi denir. Bunun tersi de doğrudur. Örneğin, nitril ($\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$, R: alkali radikal) bileşiklerinde R yerine halojenler geldiği zaman titreşim frekansının düştüğü görülmektedir.

Elektronik etki bağı elektron yoğunluğunda değişiklik meydana getiren etkilerdir. Bunlar indüktif ve rezonans etkisi olmak üzere iki kısımda incelenebilir. İndüktif etki bağı elektron yoğunluğunu artıran pozitif ve azaltan negatif etkiden oluşur. Bu etki, diğer gruplardaki elektron dağılımının elektrostatik etkisinin, bir gruba olan etkisi olarak tanımlanabilir. Rezonans etkisi ise, sadece elektronların yerlerinin birbirinden farklılık gösterdiği yapılar olarak tanımlanabilir. Bu yapılarda yalnız elektronlar hareket etmekte, çekirdek sabit kalmaktadır [30, 39].

1.4.1.2. Molekül Dışı Etkiler

Bir maddenin spektrumu en iyi gaz fazında iken alınır. Bunun nedeni madde gaz halinde iken moleküller arası uzaklık fazla olduğundan, molekül normal titreşimini yapar. Ancak madde sıvı halde iken molekül yakınında bulunan başka moleküllerden etkilenebilir. Bu etkilenme dipolar (çift kutupsal) etkilenme ve hidrojen bağı ile etkilenme olmak üzere iki çeşittir.

Polar bir molekülün pozitif ucuyla diğer bir molekülün negatif ucunun birbirlerini çekmeleri dipolar etkileşmedir. Örneğin, aseton molekülünün ((CH₃)₂-C=O) gaz halindeki titreşim frekansı 1738 cm⁻¹, sıvı haldeki aynı titreşimin frekansı 1715 cm⁻¹'de gözlenmiştir [30, 40]. Bunun nedeni sıvı haldeyken dipol olan iki C=O grubunun birbirlerini çekmeleridir. Böylece bağların polarlığı daha da artar ve karbonil grubunun bağ derecesi düşer. Bu halde meydana gelen kaymalar 25 cm⁻¹ civarındadır.

Polar çözücülerde, çözünen ve çözücü arasında etkileşim olmaktadır. Dolayısıyla değişik çözücülerde değişik dalga boylarında bantlar oluşabilmektedir [30, 40].

Hidrojen bağından ileri gelen kaymalar, dipolar etkilerden ileri gelen kaymalardan daha büyüktür.

Hidrojen bağı ile etkilenme bir molekülün A-H molekülü ile diğer molekülün donörü olan ve üzerinde ortaklanmamış elektron çifti bulunan B atomu arasındaki etkileşme olarak tanımlanır. (A-H...B). A; hidrojenden daha elektronegatif bir atom ihtiva eder. Burada H...B bağı, normal kovalent bağa göre çok zayıf olduğundan infrared bölgede 300 cm⁻¹'in altında gözlenir. Buna örnek olarak karboksilli asitler verilebilir. Bunlar polar olmayan çözücüler ile derişik çözeltilerinde dimer moleküllerden oluşurlar. Bu dimerleşmenin nedeni iki molekül arasında iki hidrojen bağının meydana gelmesidir. Bu tür hidrojen bağları O-H bağının titreşim dalga sayısını, 3560-3500 cm⁻¹'en 3000-2500 cm⁻¹'e yaklaşık 1000 cm⁻¹ kadar düşürür. Hidrojen bağı sonucu aynı zamanda O-H bağının soğurma bandında da genişleme gözlenebilir.

Hidrojen atomu etrafındaki kuvvet alanı A–H...B bağına oluşumu sonucunda değiştiğinden, A–H titreşim bantları da değişebilir. Hidrojen bağı A–H bağına da zayıflattığı için gerilme titreşim frekansı da düşer. Buna karşılık H...B bağı nedeniyle bükülme frekansı yükselir. Örneğin, primeramidlerde (R–NH₂C=O) C=O gerilme titreşimleri ve NH bükülme titreşimlerinin frekansları hidrojen bağına imkan sağlayan bir ortamda çalışıldığı zaman yaklaşık 40 cm⁻¹ düşer. C=O gerilme titreşimleri çok seyreltik çözeltilerde 1690 cm⁻¹'de, parafin KBr içinde ise 1650 cm⁻¹'de gözlenmektedir, çünkü bu ortamda amid molekülleri arasında hidrojen bağı meydana gelir. Buna karşılık seyreltik çözeltilerde 1620-1590 cm⁻¹'de gözlenen N–H gerilme titreşimleri 1650-1620 cm⁻¹'e yükselebilmektedir [30, 38].

1.5. Nükleer Magnetik Rezonans (NMR) Spektroskopisi

1.5.1. Spektroskopi Olarak Magnetik Rezonans

Magnetik Rezonans, bir spektroskopi aracı olarak kullanıldığı zaman, rezonans çizgi genişliği, rezonans çizgi şiddeti, rezonans çizgi yarımaları, rezonans çizgi kayması, rezonans çizgi şekli, durulma zamanları gibi fiziksel nicelikleri ölçer.

Spinlerin hem kendi aralarında ve hem de çevresi ile etkileşmeleri göz önünde tutularak ölçülen fiziksel nicelikler üstüne yapılan kuramsal yorumlar ve açıklamalar, spektroskopi ile uğraşanları, incelenen maddenin yapısını çözümlenmeye götürür. Bu nedenle, magnetik rezonans, değişik spektroskopik incelemelerin yapılabileceği yararlı bir araç olarak kabul edilmiş ve gelişimini bu amaç doğrultusunda sürdürmüştür [31, 41, 42].

Magnetik Rezonansın ilk uygulamaları, çekirdek fiziği, katıhal fiziği ve kimyasal fizik alanlarında olmuştur. Daha sonraları, düşük sıcaklıklar fiziği, biyofizik ve jeofizikte önemli uygulama alanları bulmuştur.

Nükleer Magnetik Rezonans Bloch tarafından kuramsal olarak ileri sürüldüğü 1946 yılını izleyen yıllarda deneysel olarak uygulamaya geçmiş ve organik bileşiklerin yapısı ve dinamik hareketleri üstüne çok başarılı sonuçlar vermiştir. NMR spektroskopisinin, çok karmaşık bileşiklerin yapısal özelliklerini incelemeye gösterdiği bu başarısı onu, daha sonraki yıllarda, biyolojik sistemlerin incelenmesine yöneltmiştir.

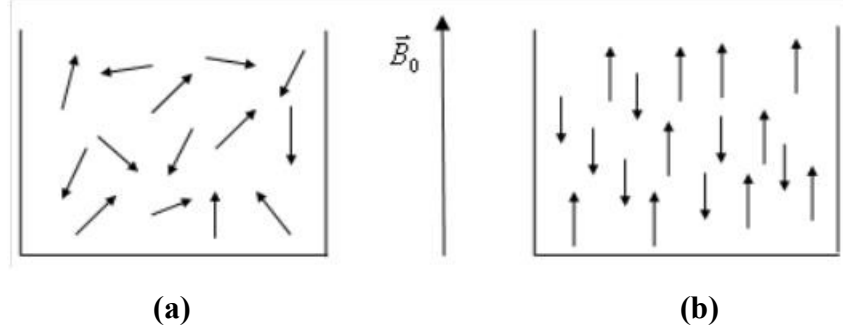
Böylece başlangıçta, fizik ve kimya gibi temel bilimlerde spektroskopik inceleme kolaylığı sağlayan, magnetik rezonans, bugün tıpta klinik amaçlı kullanılan bir araç olmuştur. Gerçekte, magnetik rezonansın öteki spektroskopik yöntemlerde bulunmayan durulma süreçleri gibi bir kavrama sahip olması ona normal doku ile hastalıklı dokuyu birbirinden ayırt etme özelliği kazandırmaktadır. 1960'lı yıllarda bu amaçla yapılan durulma zamanları ölçümleri, normal doku ile kanserli dokuları birbirinden ayırt etmede son derece başarılı sonuçlar vermiştir. Magnetik rezonansın bir tomografi aracı olarak düşünülmesi 1970'li yıllara rastlamaktadır. Spin sistemi üzerine dış magnetik alana ek olarak uygulanan alan gradyanlarına göre spin yoğunluğunun uzaysal dağılımını resimleme işlemi NMR Görüntüleme yada NMR Tomografi Tekniği olarak bilinmektedir. Bugün bu teknik, kliniklerde tanı ve tedavi amacıyla uygulanan bir tekniktir.

1.5.2. Nükleer Magnetik Rezonansın Temel İlkeleri [30, 43]

Magnetik rezonans, magnetik momentleri ve açısal momentumu olan magnetik sistemlerde bulunan bir olaydır. Magnetik rezonansın fizikle kaynaşmasının nedenlerinden biri atomik düzeyde süreçler üzerine bilgi verme yeteneğidir. Çoğu çekirdek spine (I) sahiptir ve bunun sonucu olarak da açısal momentuma (\vec{I}) ve magnetik momente ($\vec{\mu}$) sahip olur.

Magnetik çekirdek denilen ve belirtilen özellikleri olan (kendi etrafında dönen (spin hareketi yapan), elektrik yüküne sahip, kendi magnetik alanını yaratan (proton, ^1H vb.)) bu çekirdeklere dışarıdan bir \vec{B}_0 magnetik alanı uygulanarak spektroskopik çalışmalar

yapılabilir. Magnetik bir çekirdek bir dış magnetik alana konulduğunda çubuk mıknatıs gibi davranarak alanla aynı yönlü ya da zıt yönlü olmak üzere iki yönelime sahip olur. Şekil 1.13.'de belirtilen bu iki farklı duruma ait yönelimler farklı enerjidedir.



Şekil 1.13. a) Magnetik alan olmayan durumdaki numunenin rastgele spin yönelimleri, **b)** Net çekirdek spinine sahip numunenin dış magnetik alandaki davranışı.

Çekirdek spin kuantum sayısı I ile gösterilmek üzere çekirdeğin açısal momentumunun maksimum gözlenebilir bileşeni

$$I_z = m_I(\max)\hbar \quad (6)$$

şeklinde yazılabilir. Çekirdekler, spinlerine göre sınıflandırılabilir. Çekirdek spinleri $I=0$ olan, dolayısıyla açısal momentuma sahip olmayan çekirdeklerde asla magnetik rezonans gözlenmez. ^{12}C , ^{16}O , ^{32}S izotopları buna örnek olarak verilebilir.

$I = 1/2$ spinine sahip olan çekirdekler için ^1H , ^3H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P ; $I=1$ spinine sahip olan çekirdekler için ^2H , ^{14}N ; $I > 1$ olan çekirdeklere de ^{10}B , ^{11}B , ^{17}O , ^{23}Na , ^{27}Al , ^{35}C örnek olarak verilebilir.

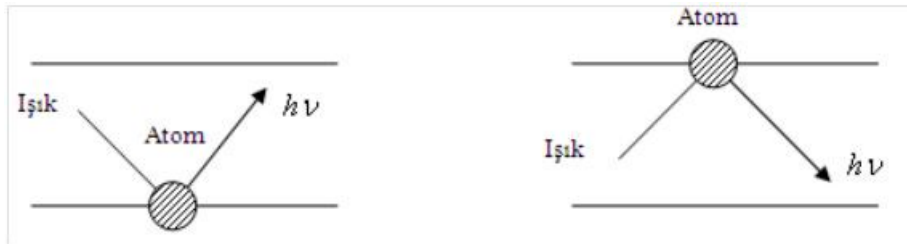
Magnetik moment açısal momentumla doğrusal orantılıdır ve aralarında

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{I} \quad (7)$$

şeklinde bir ilişki vardır. Burada γ jromagnetik orandır ve farklı çekirdekler için farklı değerlere sahiptir (H için $26753 \text{ s}^{-1} \cdot \text{gauss}^{-1}$). Spinleri sıfırdan farklı olan çekirdekler magnetik alana yerleştirildiğinde farklı enerji seviyelerine sahip olacak şekilde yönelirler. Örneğin proton, magnetik alan içinde iki izinli yönetime sahiptir. Bu enerji seviyeleri arasındaki ΔE enerji farkı, bu farkı oluşturan ν frekanslı ışınının $\Delta E = h\nu$ eşitliğini sağlamasıyla oluşur. Rezonans şartı olarak da bilinen bu eşitlik magnetik rezonans spektroskopisinin temelini oluşturur.

Rezonans kavramının kökeni klasik mekanikten gelmektedir. Basit bir örnekle şöyle açıklanabilir. İki basit sarkaç düşey olarak yan yana asıldıkları zaman birisinin hareketi öteki tarafından tekrarlanır. Yani, sarkaçlardan birisi durgun ve öteki hareketli ise hareketli tarafından durgun olana enerji aktarılır ve durgun olan da harekete koyulur. Sonra enerjisinin bir kesimini yeniden ilk sarkaca aktarır. Böylece, sönüm etkenlerinin olmadığı bir ortamda iki sarkaç arasında enerji akışı sürer gider. Sarkaçların doğal frekansları birbirine eşit oldukları zaman, aralarındaki enerji alış-verişi en etkin duruma ulaşır. İşte sarkaçların doğal frekanslarının birbirine eşit olduğu bu duruma rezonans denir.

Kuantum mekaniğinde rezonansa örnek olarak, ışık ile maddenin etkileşmesi verilebilir. Bu durumda atom ile elektromagnetik alan birbiri ile kenetlenen iki periyodik sistem olarak düşünülür. Atomların doğal frekansları geçiş frekansları olarak bilinir ve gelen ışığın frekansı da ayarlanabilir. O halde elektromagnetik alanın frekansı, atomun doğal frekansına ayarlandığı zaman, bu kuantum mekaniksel sistem klasik mekanikteki sarkaç sistemi gibi davranır. Yani, ya elektromagnetik alandan atoma enerji aktarılır ya da başlangıçta uyarılmış durumda olan atomdan elektromagnetik alana enerji aktarılır. Bunlardan ilkinde enerji soğurulması ve ikincisine de enerji salınması denir (Şekil 1.14.).



Şekil 1.14. Bir atomun enerji kuantumu salması ya da soğurulması.

Nükleer magnetik rezonans spektroskopisinde ν rezonans frekansının değeri rf (radyo frekans) bölgesine karşılık gelmektedir.

Magnetik moment $\vec{\mu}$, nin uygulanan \vec{B}_0 magnetik alanla etkileşmesi yaygın olarak Zeeman etkileşmesi olarak adlandırılmaktadır. Kuantum teorisine göre bu Zeeman etkileşmesi hamiltoniyen (\hat{H}) işlemcisi olarak karşımıza çıkmaktadır ve

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 \quad (8)$$

şeklindedir. Denklemden μ yerine eşiti (10) ve (11) denklemleri kullanılarak yazılırsa,

$$\hat{H} = -\gamma \vec{B}_0 \cdot \vec{I} \quad (9)$$

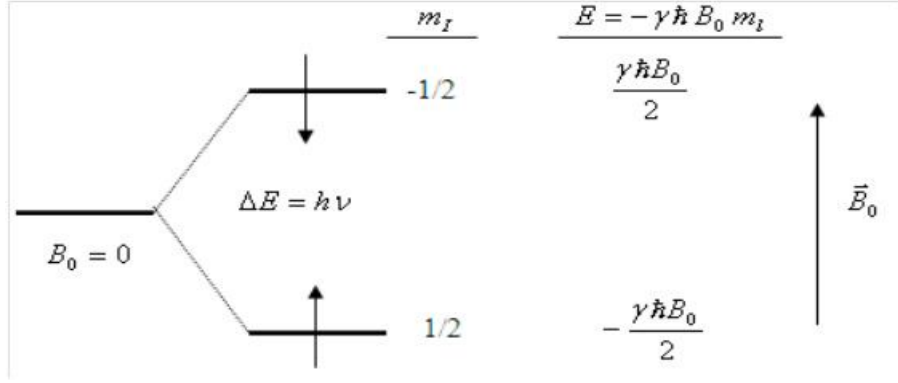
elde edilir. Burada γ , kuantum mekaniksel bir işlemci olarak yorumlanmaktadır. \vec{I} nin büyüklüğü $|\vec{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar$ şeklindedir. Uygulanan \vec{B}_0 magnetik alanı z eksenindedir ve çekirdek spininin z bileşeni $I_z = m_I \hbar$ şeklinde olduğundan

$$E = -\gamma \hbar B_0 m_I \quad (10)$$

Hamiltoniyene karşılık gelen enerjili özdeğeri bulunmuş olur. Bu bağıntı rezonans şartı olan ($E = h\nu$) ile birleştirilirse $\Delta E = h\nu = \hbar\gamma B$, dan

$$\nu = \frac{\gamma B_0}{2\pi} \quad (11)$$

elde edilir. Magnetik spin kuantum sayısı olan $m_I, -I, -I+1, \dots, I-1, I$ değerlerini alıp toplam $2I+1$ tanedir. O halde spin kuantum sayısı I olan çekirdek, magnetik alan içinde $2I+1$ tane enerji seviyesine ayrılır. Örneğin Şekil 1.15'deki çekirdek spin kuantum sayısı $1/2$ olan proton için iki enerji seviyesi vardır.

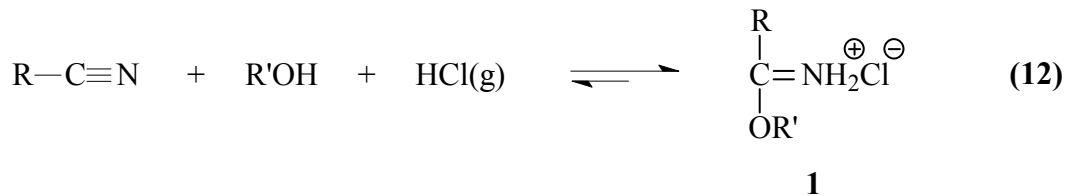


Şekil 1.15. Hidrojen çekirdeğinin (protonun) magnetik alandaki enerji seviyeleri.

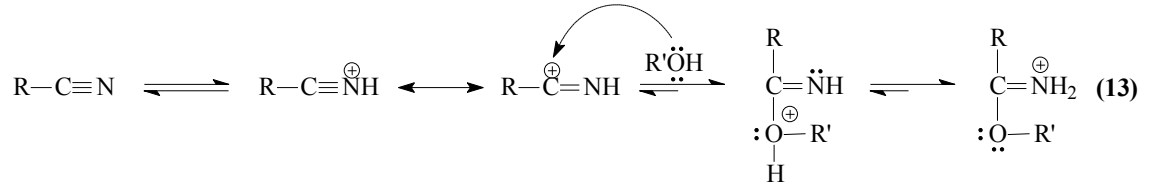
NMR’da etkileşme hamiltoniyeni, sıvı ve katı maddeler için birçok terimden oluşur. Hareketli sıvılarda bu hamiltoniyen iki terimden ibarettir.

1.6. İminoesterlerin Sentezi

Hidroklorürleri (1) halinde kullanılan, iminoesterlerin sentezi için çeşitli metotlar geliştirilmiştir. Bu metotlara amidlerden, ortoesterlerden, karbonil bileşiklerinden, iminoklorürlerden ve bazı doymamış sistemlerden başlayan yöntemler [44] örnek olarak verilebilirse de 1 tipi bileşiklerin sentezinde kullanılan en uygun yöntem olan Pinner Yöntemi [45] çalışmada kullanılmıştır. Bu yöntemde bir nitril, bir mutlak alkol (genellikle mutlak etanol) ile susuz bir çözücü (genellikle susuz dietil eter) içinde HCl gazı ile soğukta muamele edilir (Denklem 12).

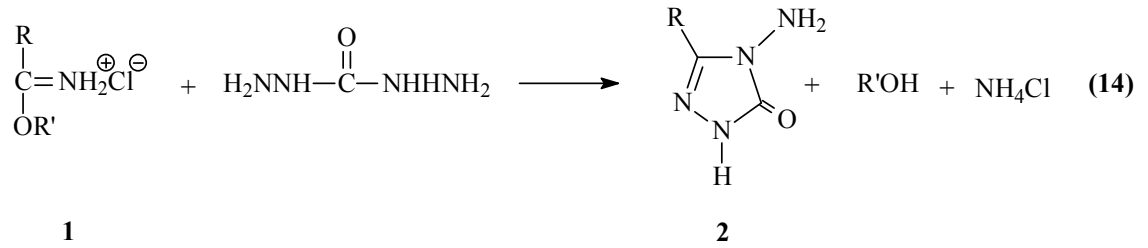


1 Tipi bileşiklerin Pinner yöntemine göre sentezlendiği reaksiyonun muhtemel mekanizması, asidik ortamda protonlanmış nitrile bir alkolün nükleofilik katılması üzerinden yürümektedir (Denklem 13) [46].

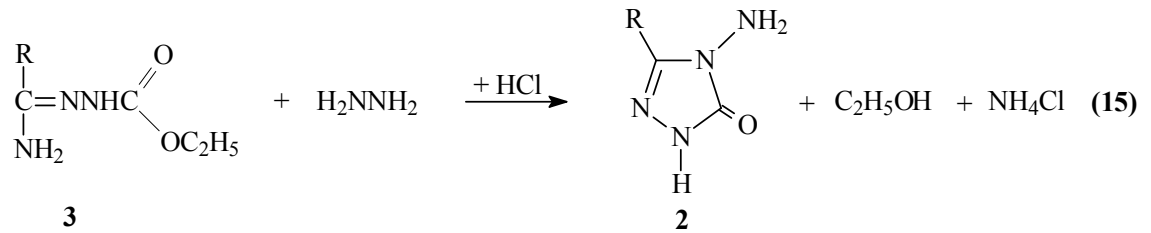


1.7. İminoesterlerin Reaksiyonları

Çalışmada çeşitli reaksiyonları incelenen 2 tipi 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi amacıyla bazı yöntemler geliştirilmiştir. Bunlardan birinde nitrillerden elde edilen iminoester hidroklorürlerin (1) karbohidrazid ile muamelesi öngörülmüştür (Denklem 14) [47].

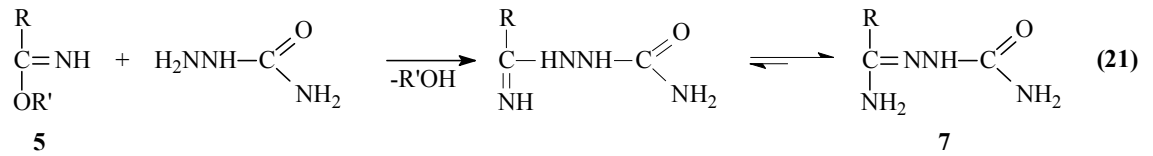
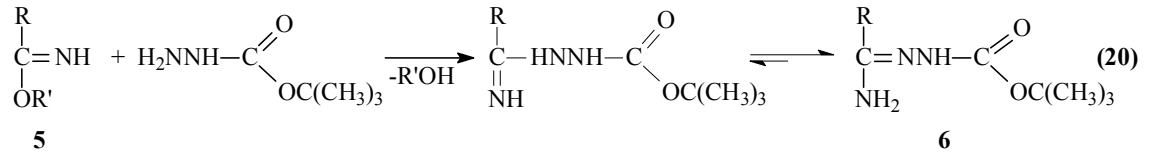
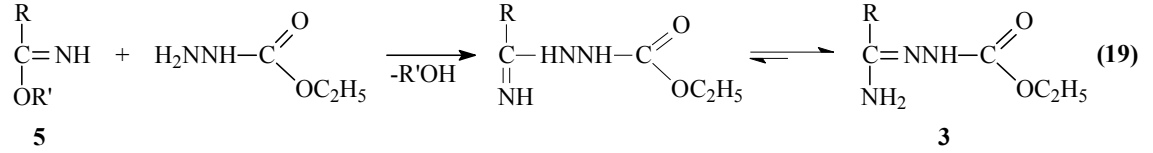


2 Tipi bileşiklerin sentezi amacıyla yapılan bir diğer çalışmada ise 3 tipi amid etoksikarbonilhidrazonlar, hidrazin ile reaksiyona sokulmuştur (Denklem 15) [48].

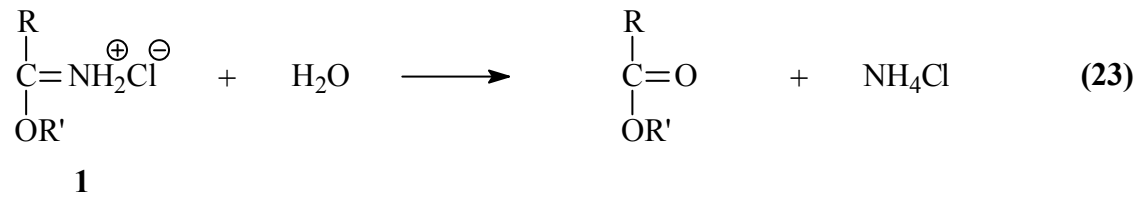
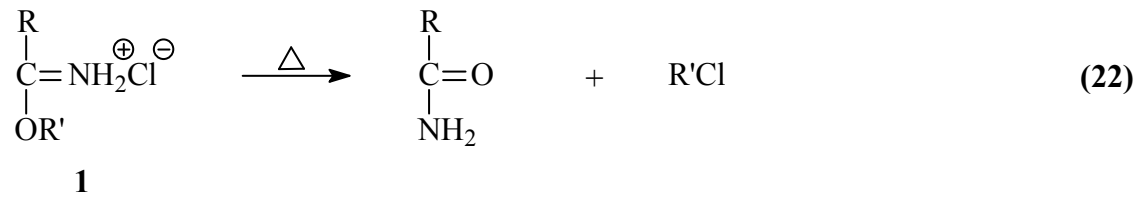


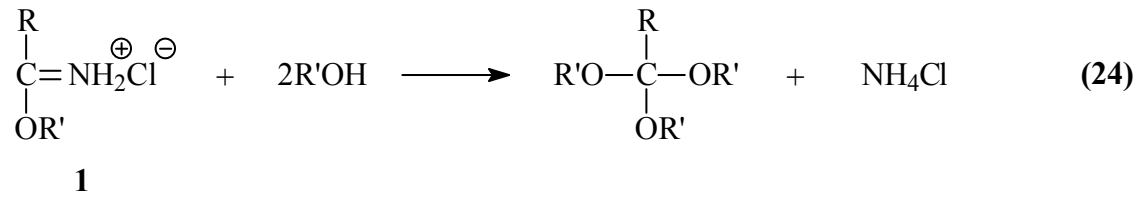
2 Tipi bileşiklerin sentezi için en uygun olan ve çalışmada da kullanılan yöntemde ise, 1 tipi iminoester hidroklorürlerin (alkil imidat hidroklorürler) soğuk mutlak etanolü ortamda etil karbazat ile muamelesinden elde edilen [48-54] ester etoksikarbonilhidrazonlar (4) hidrazin hidrat ile kaynar sulu ortamda muamele edilmişlerdir (Denklem 16 ve 17) [50-56].

sonucu, sırasıyla amid etoksikarbonilhidrazonlar (3), amid *tert* butoksikarbonilhidrazonlar (6) ve amid semikarbazonlar (7) elde edilmiştir (Denklem 19-21) [49, 57, 60].

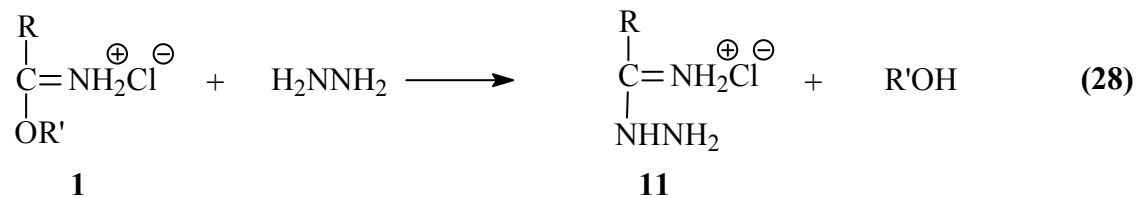
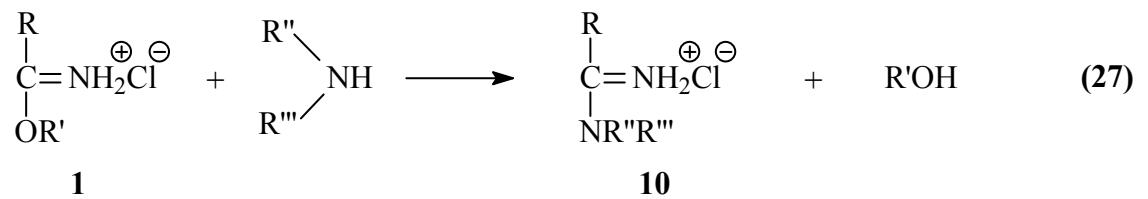
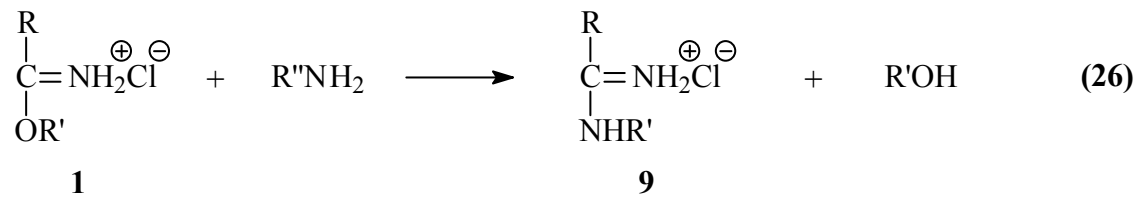
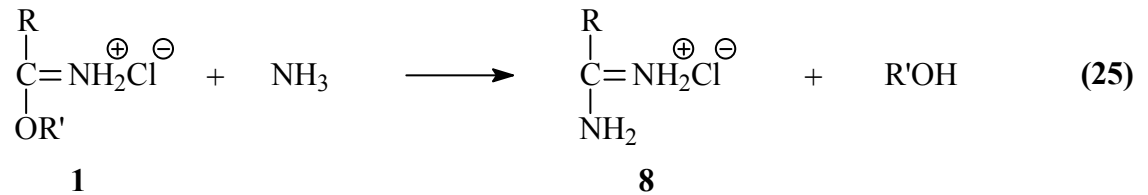


1 Tipi iminoester hidroklorürlerin de bugüne kadar birçok reaksiyonu incelenmiştir. İminoester hidroklorürlerin (1) kuru kuruya ısıtıldıklarında amidleri, hidroliz sonucu esterleri ve aşırı miktarda alkolle muamele edildiklerinde ortoesterleri verdikleri bilinmektedir (Denklem 22-24) [44, 45].



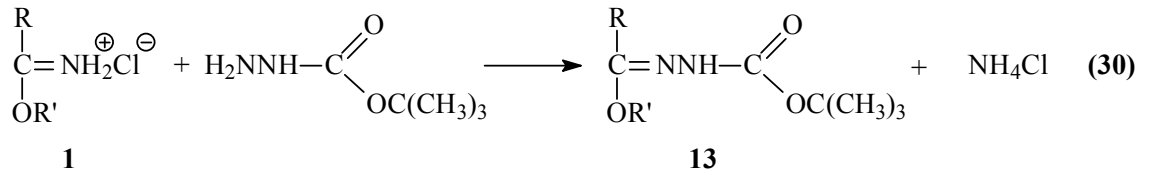
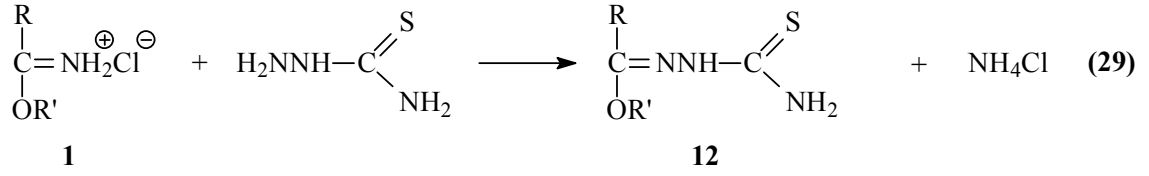


1 Tipi iminoester hidroklorürlerin başka reaksiyonları da incelenmiş olup; amonyak ile amidin hidroklorürleri (8), primer aminler ile *N*-substitue amidin hidroklorürleri (9), sekonder aminler ile *N,N*-disubstitue amidin hidroklorürleri (10) ve hidrazin ile amidrazon hidroklorürleri (11) verdiği bildirilmiştir (Denklem 25-28) [44].



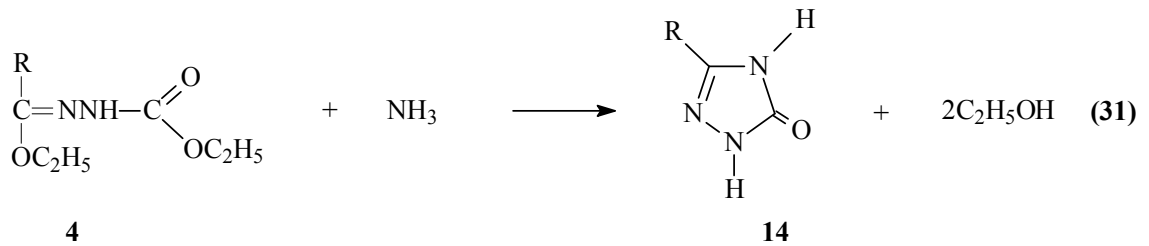
1 Tipi iminoester hidroklorürlerin incelenen diğer iki reaksiyonunda tiyosemikarbazit ve *tert*-butilkarbazat ile muamelesi sonucu -OR' grubu korunacak şekilde gerçekleşen

reaksiyonlar sonucunda karşın olan ester tiyosemikarbazonlar (12) ve ester *tert*-butoksikarbonilhidrazonlar (13) ele geçmiştir (Denklem 29 ve 30) [60-62].

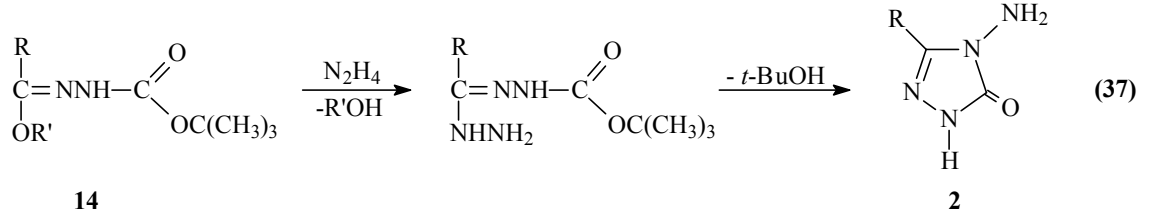


1.8. 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Sentezi

Denklem 16 uyarınca 1 tipi bileşiklerin etil karbazat ile reaksiyonundan elde edilen ve tez kapsamında bazı reaksiyonları 4 tipi ester etoksikarbonilhidrazonların Denklem 17 uyarınca 2 tipi bileşikleri oluşturduğu reaksiyon dışında bazı reaksiyonları da incelenmiş ve 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halka sistemini içeren farklı bileşikler sentezlenmiştir. Nitekim 4 tipi ester etoksikarbonilhidrazonların amonyak ile 3-alkil(aril)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (14), primer aminler ile 3,4-dialkil(diaryl)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (15), alkil hidrazinler ile 3-alkil(aril)-4-alkilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (16) ve aril hidrazinler ile de 3-alkil(aril)-4-arilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (17) bileşiklerini verdiği rapor edilmiştir (Denklem 31-34) [48, 50, 55, 56, 63-67].

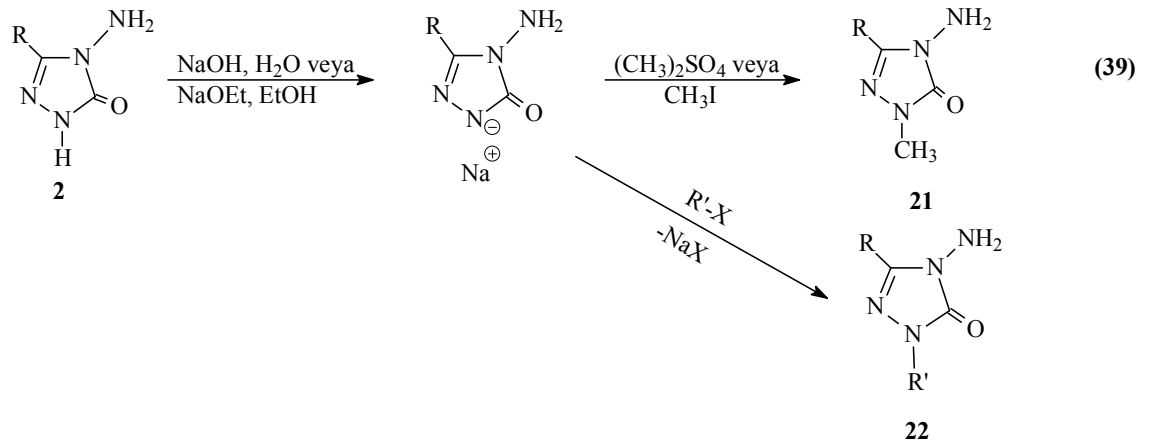
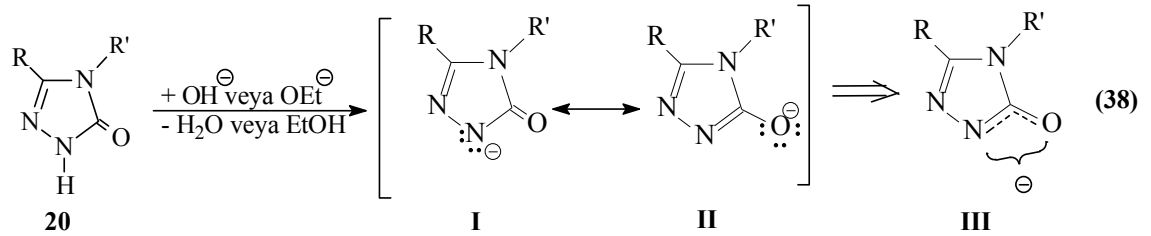


2 Tipi 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin Denklem 30 uyarınca sentezlenen 14 tipi ester *tert*-butoksikarbonilhidrazonların hidrazin hidrat ile reaksiyonundan da elde edildiği bildirilmiştir (Denklem 37) [60].



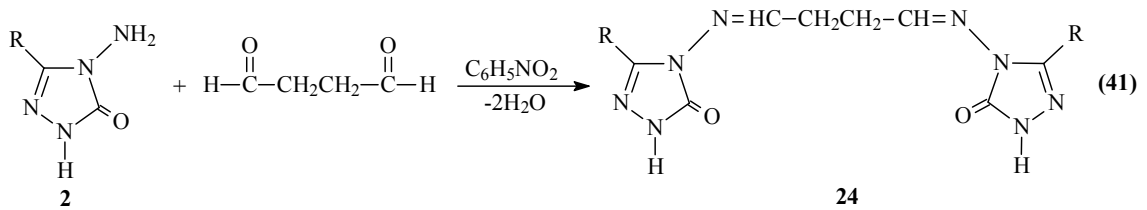
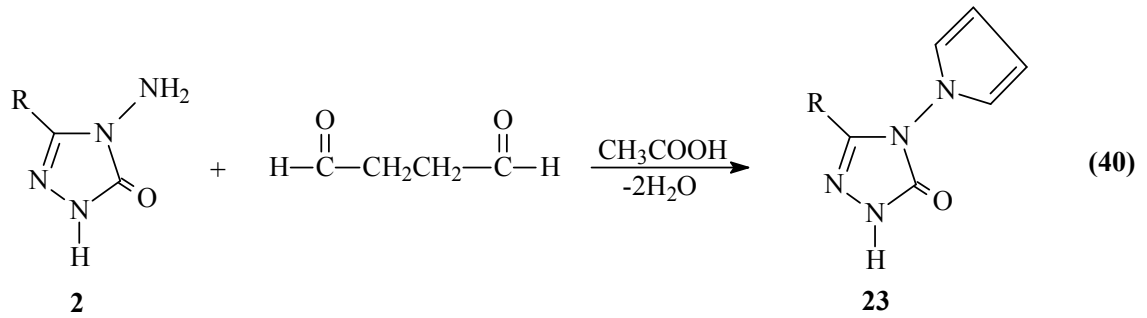
1.9. 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Reaksiyonları

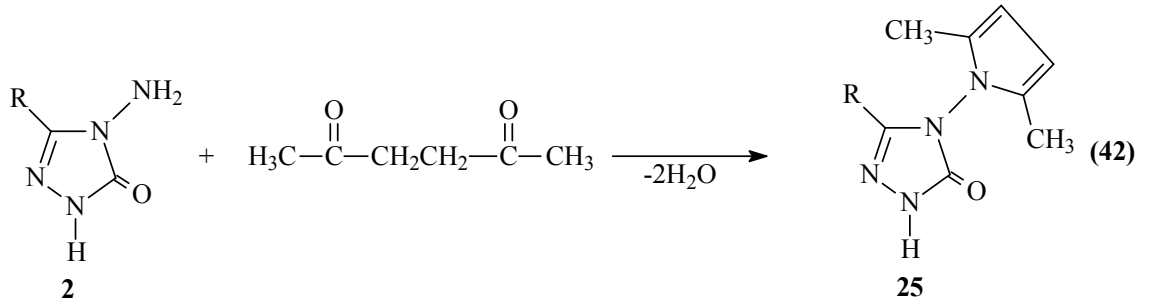
4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasının zayıf asidik özellikte olması nedeniyle (Denklem 38) 2 tipi bileşiklerin *N*-1’de alkilendirilebildiği ve karşın olan *N*-metil (21) ya da *N*-alkil (22) türevlerinin elde edildiği birçok çalışma gerçekleştirilmiştir (Denklem 39) [50, 52, 53, 70-77].



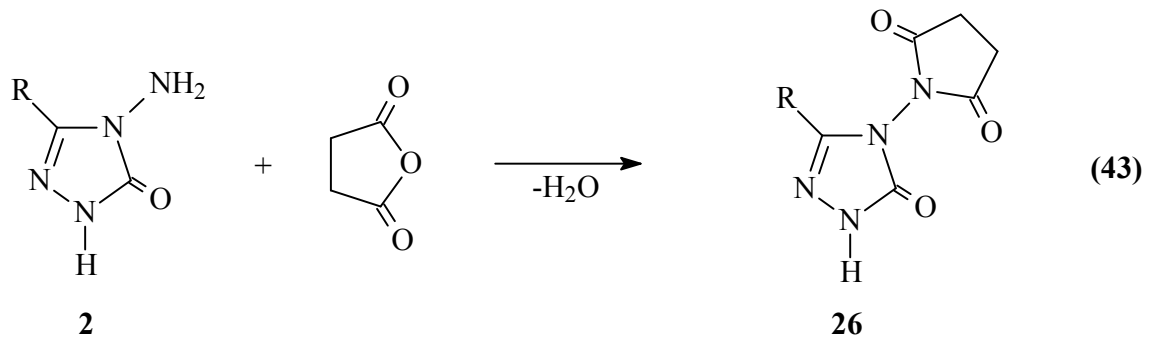
3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiklerinin 1980'li yıllardan sonra birçok reaksiyonu incelenmiş ve karşın olan heterosiklik bileşikler elde edilmiş ve bazı özellikleri incelenmiştir. Bu reaksiyonlardan bazıları aşağıda verilmiştir:

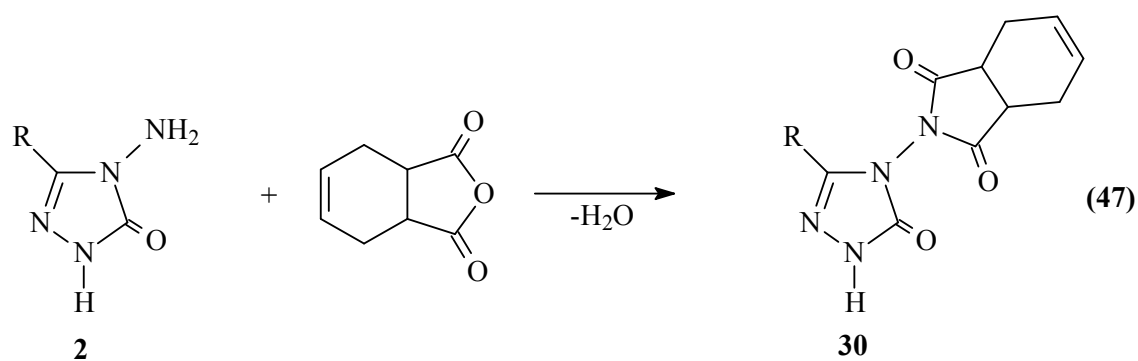
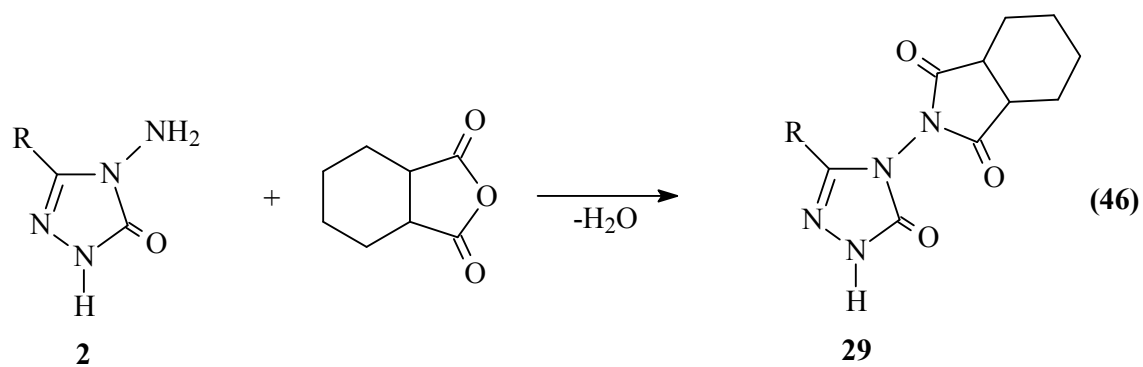
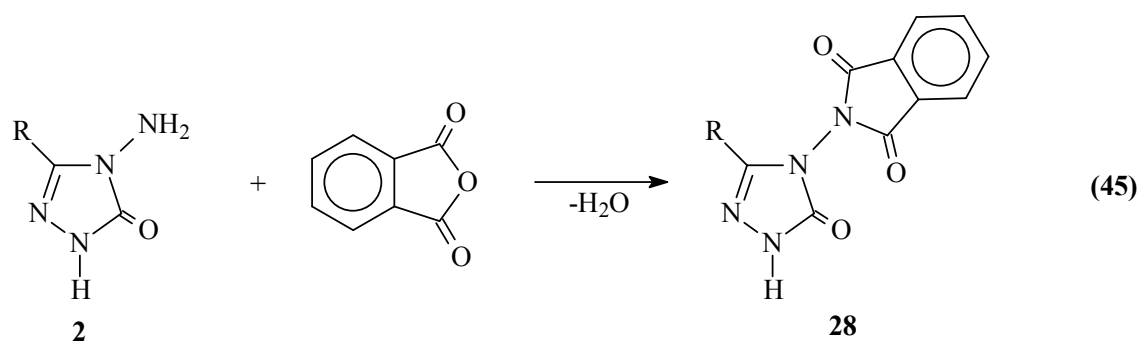
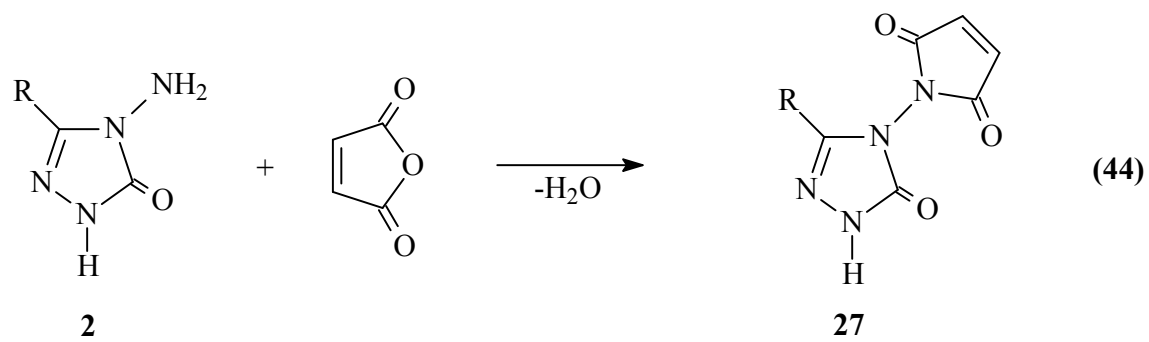
2 Tipi bileşiklerin reaksiyonlarının incelendiği iki farklı çalışmadan birinde suksindialdehid eşdeğeri olan 2,5-dimetoksitetrahidrofuran ile reaksiyon koşullarına bağlı olarak asetik asitli ortamda *N,N'*-bağlı biheterohalkalı bileşik olan 3-alkil(aril)-4-(pirrol-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (23) ve nötral ortamda (nitrobenzen) *N,N'*-bis-(3-alkil-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-1,4-butandiimin (24) bileşiklerini, diğerinde ise asetonil aseton ile *N,N'*-bağlı biheterohalkalı bileşik olan 3-alkil(aril)-4-(2,5-dimetilpirrol-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (25) bileşiklerini oluşturduğu rapor edilmiştir (Denklem 40-42) [50, 52, 53, 78, 79].

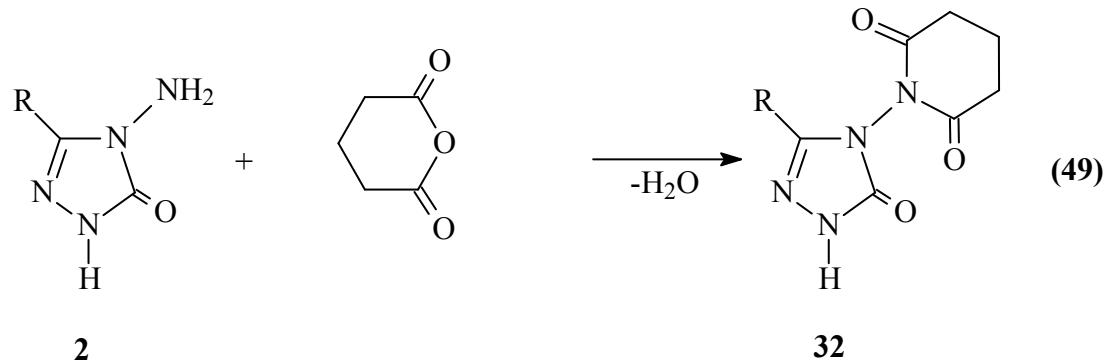
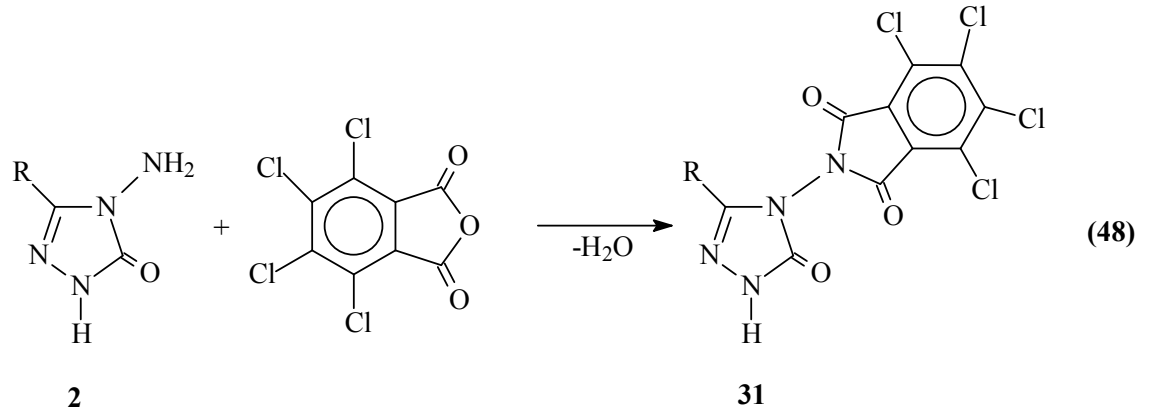




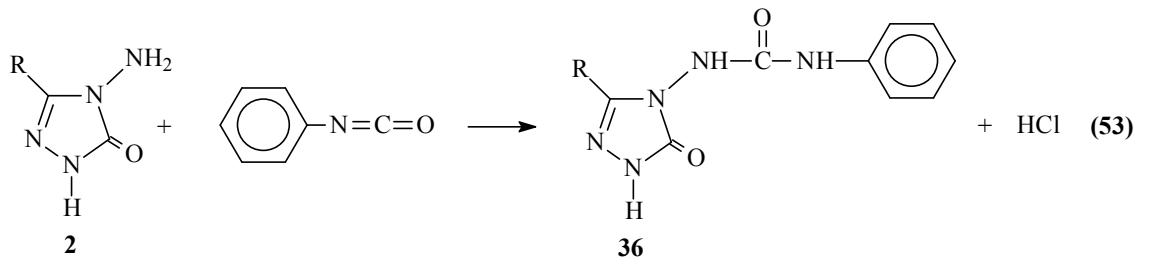
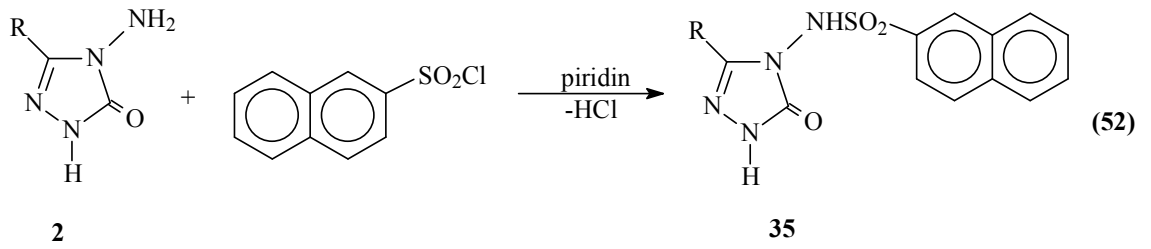
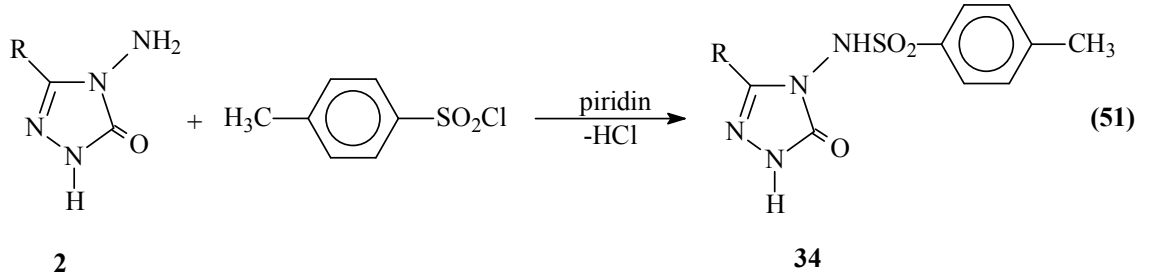
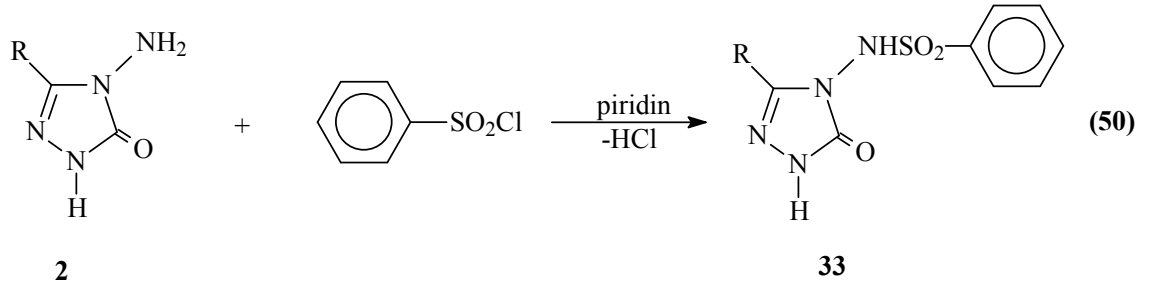
3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiklerinin bazı dikarboksilli asit anhidridleri ile reaksiyonlarının incelendiği birkaç çalışma yapılmış olup 2 tipi bileşiklerin suksinik anhidrid, maleik anhidrid, ftalik anhidrid, cis-hekzahidroftalik anhidrid, cis-1,2,3,6-tetrahidroftalik anhidrid, tetrakloroftalik anhidrid ve glutarik anhidrid ile muamelesinden *N,N'*-bağlı biheterohalkalı bileşikler olan sırasıyla, 3-alkil(aril)-4-suksinimido-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (26) ve 3-alkil(aril)-4-(2,5-dihidropirrol-2,5-dion-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (27), 3-alkil(aril)-4-ftalimido-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (28), 3-alkil(aril)-4-(cis-hekzahidroftalimido)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (29), 3-alkil(aril)-4-(cis-1,2,3,6-tetrahidroftalimido)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (30), 3-alkil(aril)-4-tetrakloroftalimido-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (31) ve 3-alkil(aril)-4-(piperidin-2,6-dion-1-il)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (32) bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 43-49) [50, 53, 80-85].



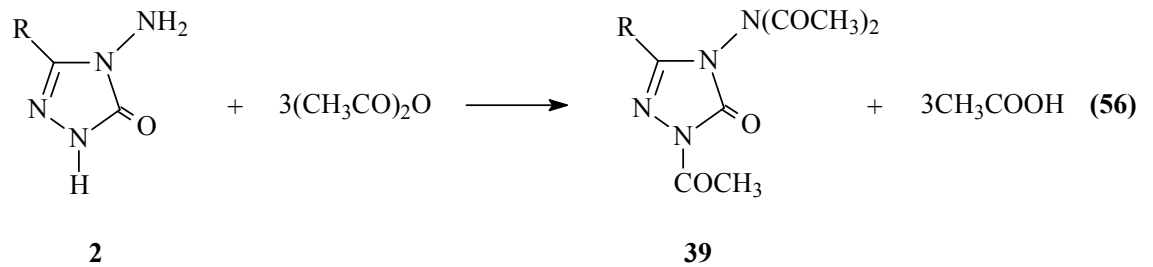
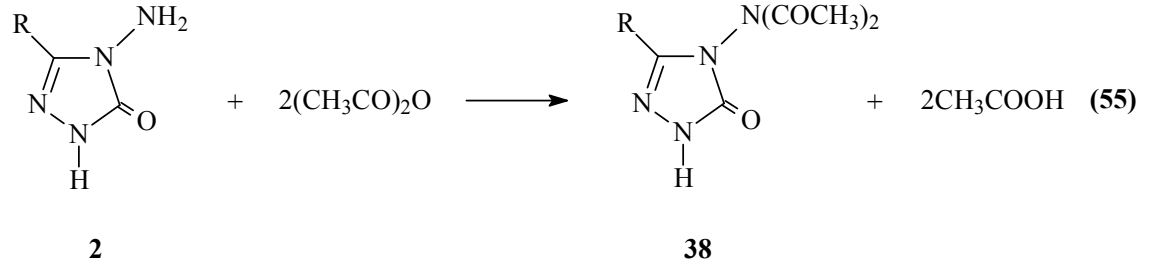
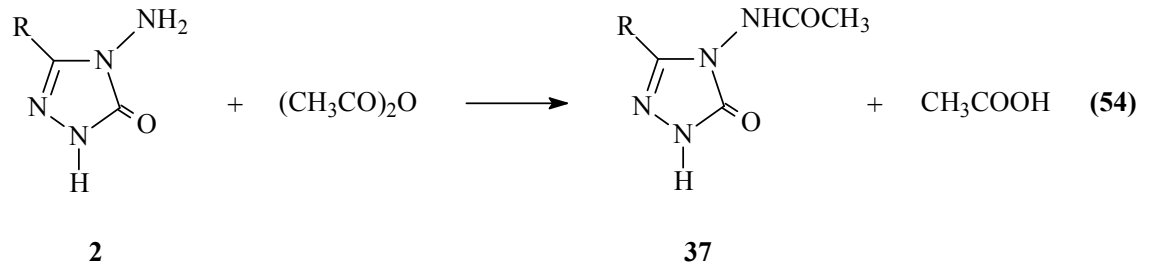




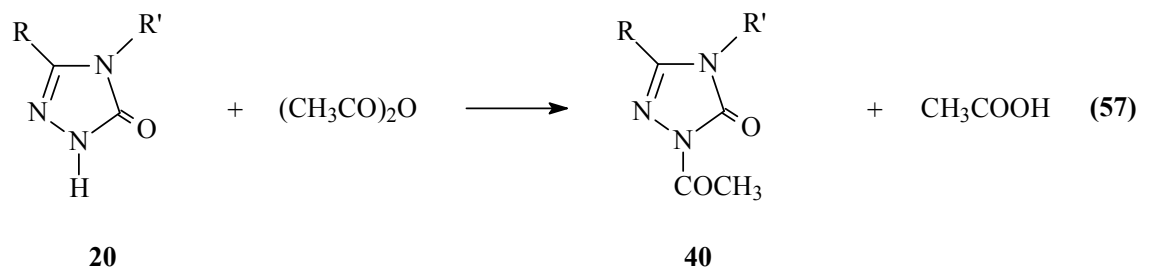
Bazı heterohalkalı amino bileşiklerinin sulfonik asit klorürleri ile sulfonilamino türevlerini verdikleri bilinmektedir [86, 87]. Nitekim yapılan bir çalışmada 2 tipi bileşiklerin benzen sulfonil klorür, 4-toluen sulfonil klorür ve naftalen-2-sulfonil klorür ile reaksiyonları incelenmiş ve karşın olan sırayla 3-alkil(aril)-4-benzensulfonilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (33), 3-alkil(aril)-4-(4-toluensulfonilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (34) ve 3-alkil(aril)-4-(naftalen-2-sulfonilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (35) bileşikleri sentezlenmiş ve antibakteriyel özellikleri incelenmiştir (Denklem 50-52) [88]. Diğer bir çalışmada 2 tipi bileşiklerin fenilizosyanat ile de reaksiyonları incelenmiş ve 36 tipi substitue üre türevlerinin oluştuğu bildirilmiştir (Denklem 53) [89].



3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiklerinin asetik anhidrid ile reaksiyonlarının incelendiği bir çalışmada reaksiyon koşullarına bağlı olarak 37 tipi monoasetil türevleri olan 3-alkil(aril)-4-asetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, 38 tipi diasetil türevleri olan 3-alkil(aril)-4-diasetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 39 tipi triasetil türevleri olan 1-asetil-3-alkil(aril)-4-diasetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 54-56) [50, 51].

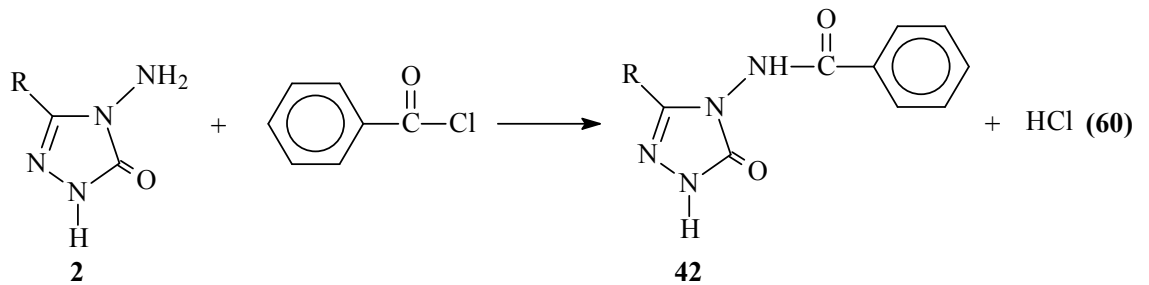
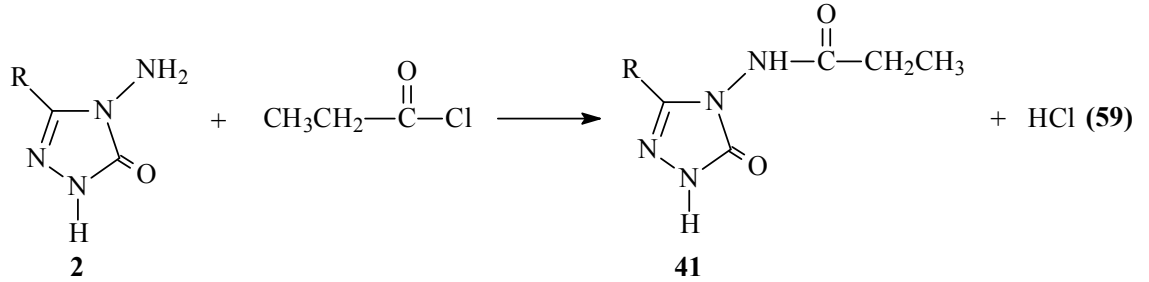
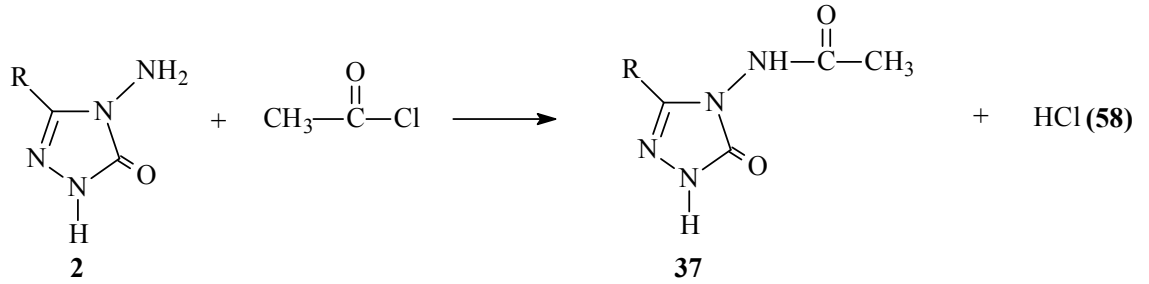


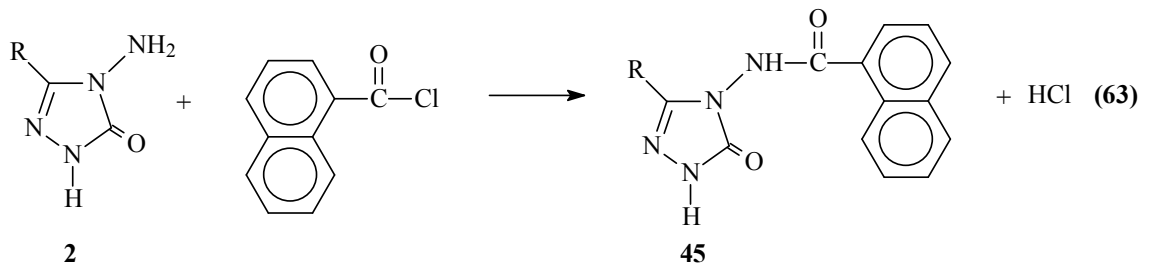
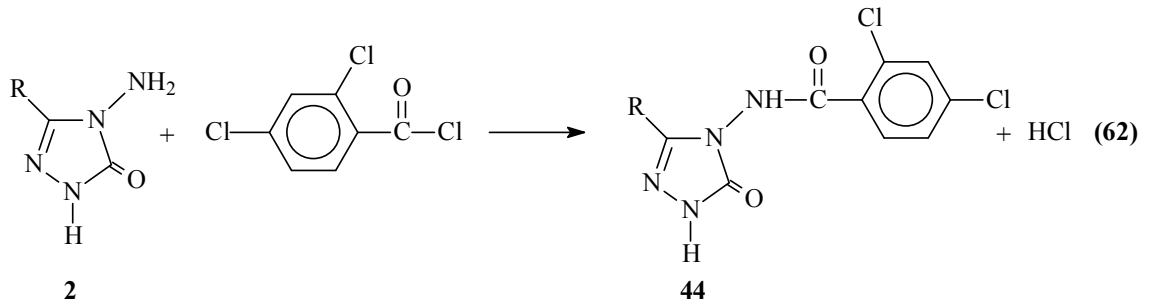
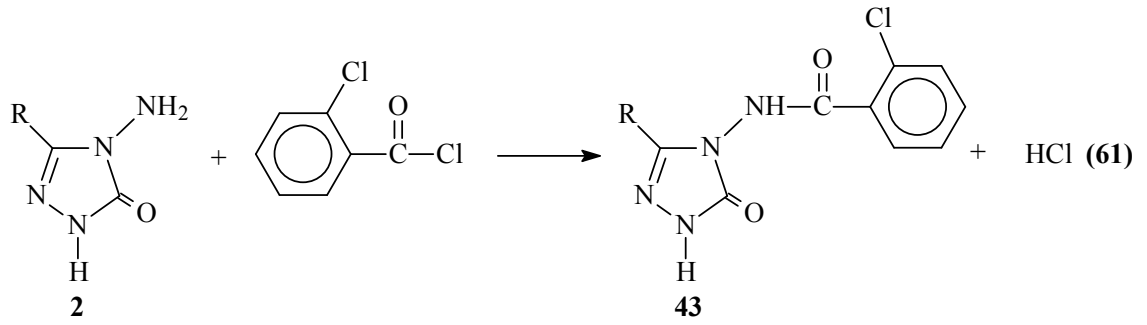
4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkası içeren 20 tipi bazı 3,4-disubstitue-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin de asetik anhidrid ile asetillendirme reaksiyonlarının incelendiği bazı çalışmalar son yıllarda yapılmış ve 40 tipi asetil türevlerinin elde edildiği bildirilmiştir (Denklemler 57) [71, 90].



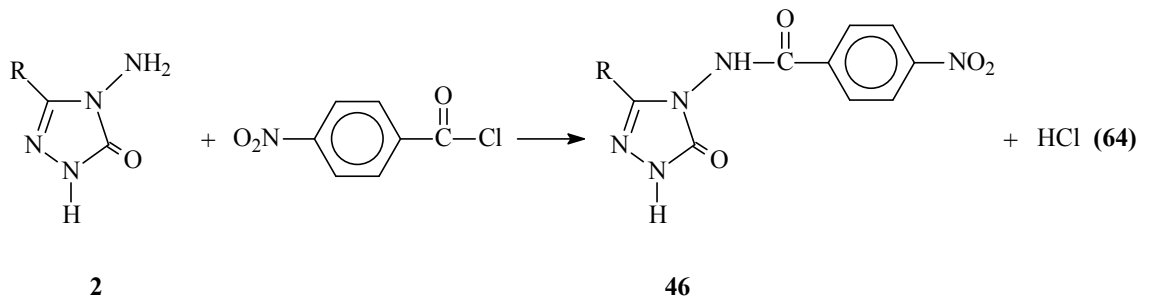
2 Tipi bileşiklerin açıl halojenürler ile de reaksiyonları bir çalışmada incelenmiş ve asetil klorür ile 37 tipi 3-alkil(aril)-4-asetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on,

propiyonil klorür ile 41 tipi 3-alkil(aril)-4-propiyonilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, benzoil klorür ile 42 tipi 3-alkil(aril)-4-benzoilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, 2-klorobenzoil klorür ile 43 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-klorobenzoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, 2,4-diklorobenzoil klorür ile 44 tipi 3-alkil(aril)-4-(2,4-diklorobenzoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 2-naftoil klorür ile 45 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-naftoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerini verdiği bildirilmiştir (Denklem 58-63) [89, 91].



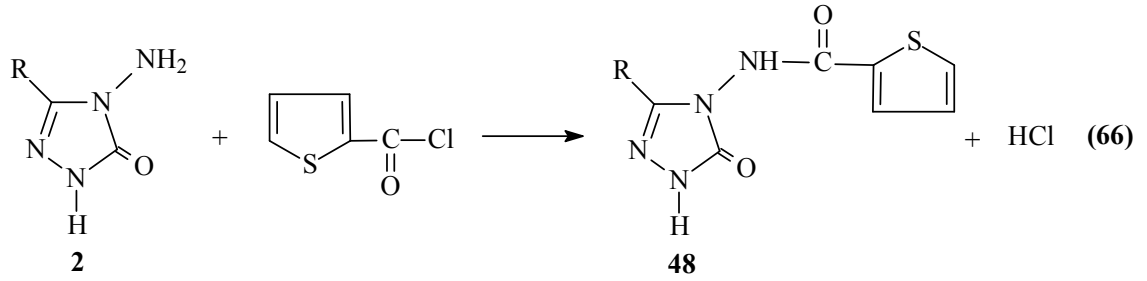
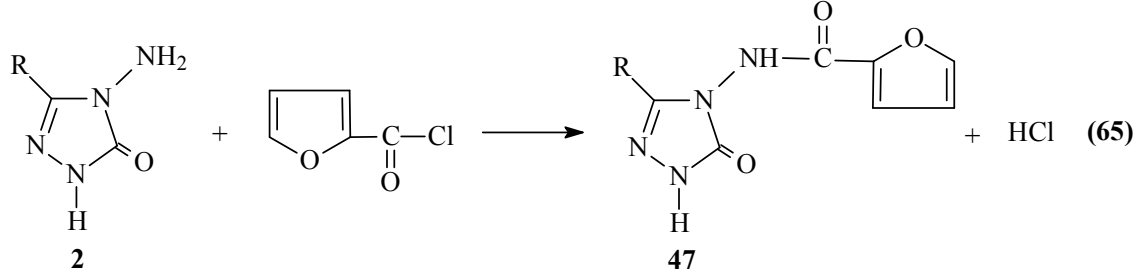


Bir başka çalışmada 2 tipi bileşiklerin 4-nitrobenzoil klorür ile reaksiyonları incelenmiş ve 46 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-nitrobenzoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin elde edildiği bildirilmiştir (Denklem 64) [92].

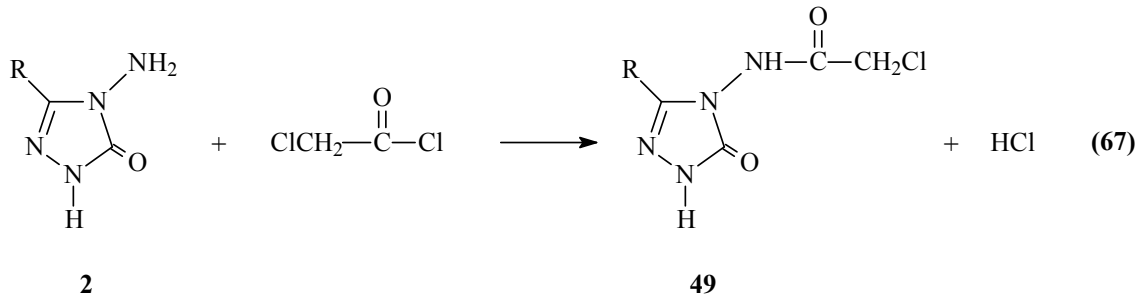


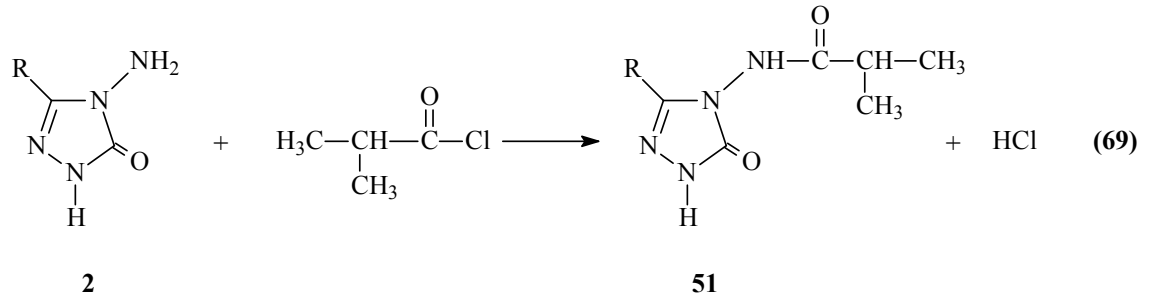
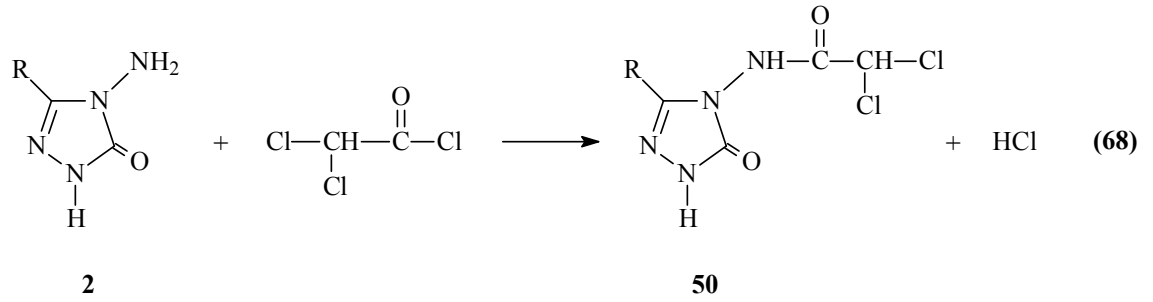
2 tipi bileşiklerin 2-furoil klorür ve tiyofen-2-karbonil klorür ile reaksiyonları incelenmiş ve karşın olan 47 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-furoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-

triazol-5-on ve 48 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-tiyenilkarbonilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerini verdiği rapor edilmiştir (Denklem 65 ve 66) [75, 93].

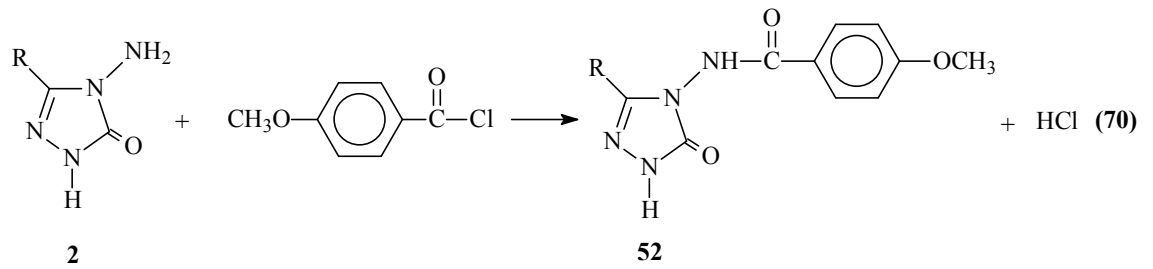


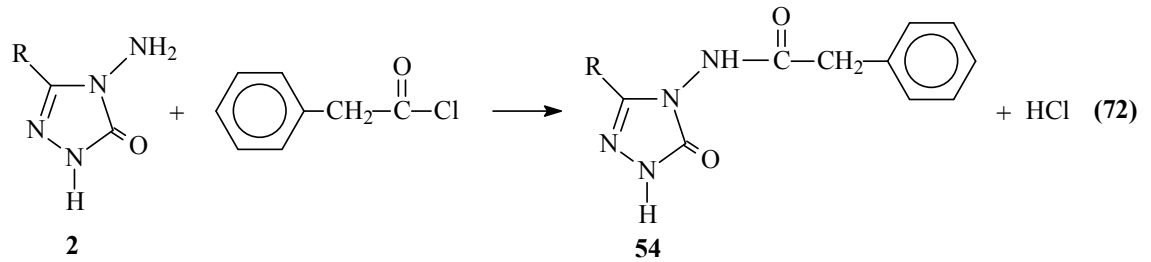
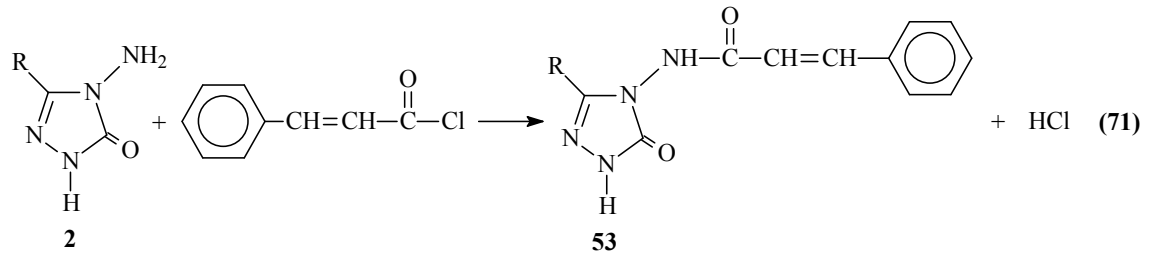
Benzer bir çalışmada ise 2 tipi bileşiklerin kloroasetil klorür, dikloroasetil klorür ve izobutiril klorür ile reaksiyonlarından karşın olan 3-alkil(aril)-4-kloroasetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (49), 3-alkil(aril)-4-dikloroasetilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (50) ve 3-alkil(aril)-4-izobutirilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (51) bileşiklerinin elde edildiği bildirilmiştir (Denklem 67-69) [94].



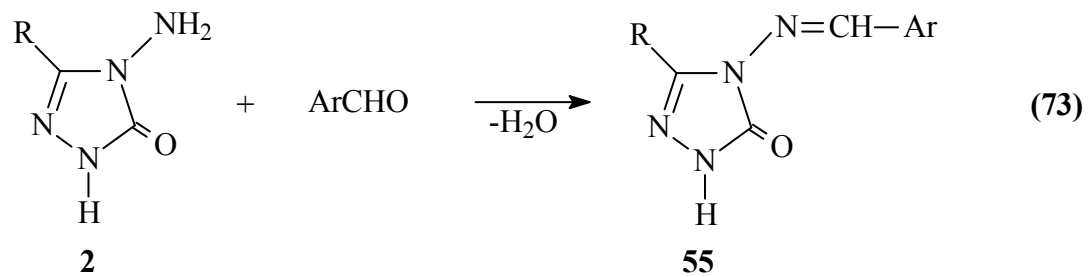


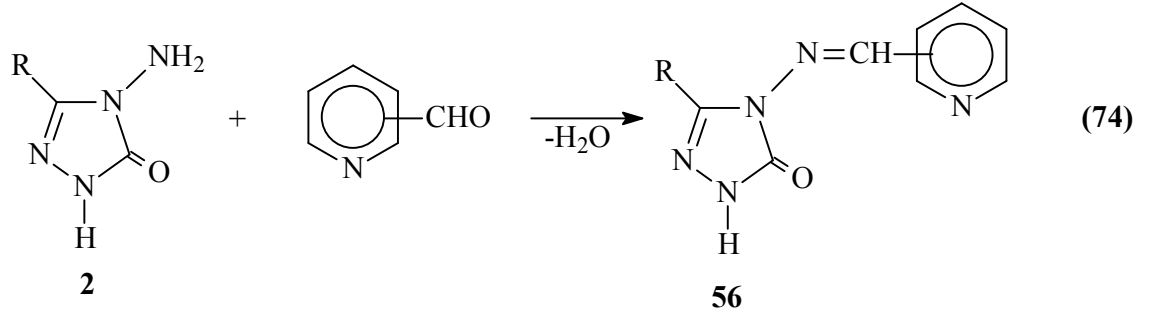
Yapılan bir diğer çalışmada ise 2 tipi bileşiklerin 4-metoksibenzoil klorür ile reaksiyonları incelenerek sentezlenen 52 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-metoksibenzoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin potansiyometrik olarak tetrabutilamonyum hidroksit ile bazı susuz çözücüler içinde titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri tayin edilmiştir (Denklem 70) [75, 95]. Benzer şekilde, 2 tipi bileşiklerin sintroil klorür ve fenilasetil klorür ile reaksiyonlarından 53 ve 54 tipi bileşiklerin oluştuğu bildirilmiştir (Denklem 71 ve 72) [11, 75].



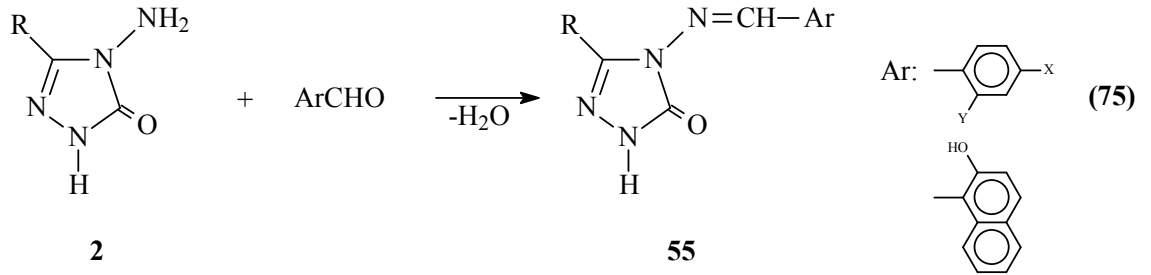


Aldehid ve ketonların primer aminler ile reaksiyonlarından oluşan imin tipi Schiff bazları kimyanın birçok alanında, tıpta, sanayide, teknolojiye geniş bir kullanım alanı bulmuştur. Bir primer amin gibi hareket eden ve N-NH₂ grubu içeren 2 tipi bileşiklerin bazı aromatik ve/veya heteroaromatik aldehidlerle reaksiyonları incelenerek karşın olan heteroaromatik Schiff bazları (55) elde edilmiştir (Denklem 73) [52, 53, 96, 97]. Nitekim 2 tipi bileşiklerin piridin-2-, piridin-3- ve piridin-4-karboksialdehidler ile muamelesinden 56 tipi heterosiklik Schiff bazları elde edilmiş ve bu bileşiklerin antifungal aktivite gösterdikleri belirlenmiştir (Denklem 74) [98].



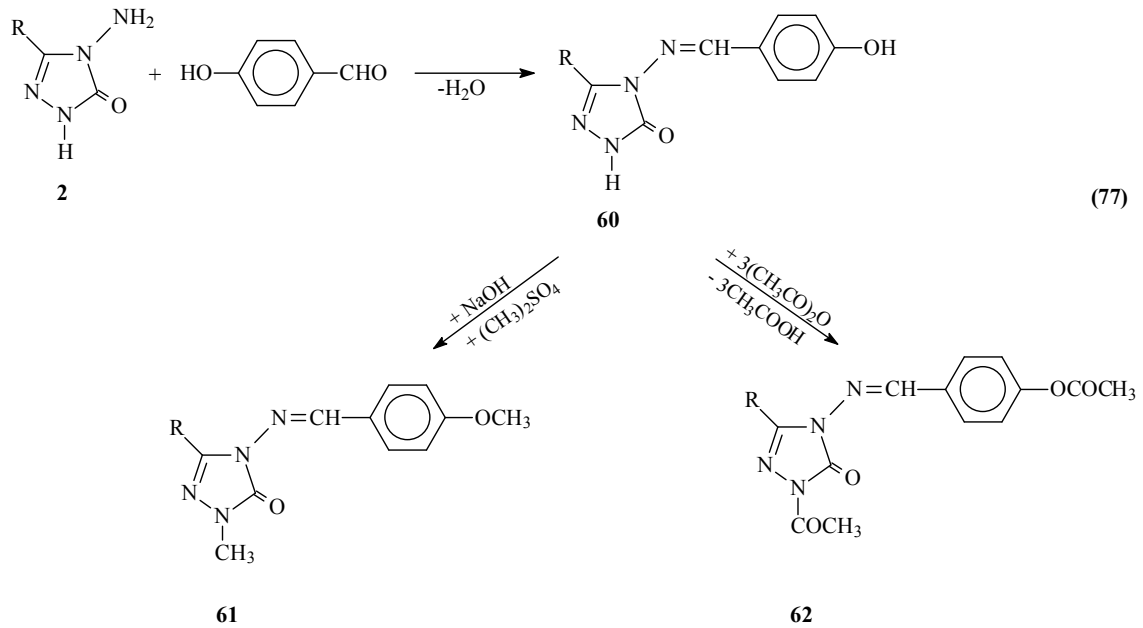
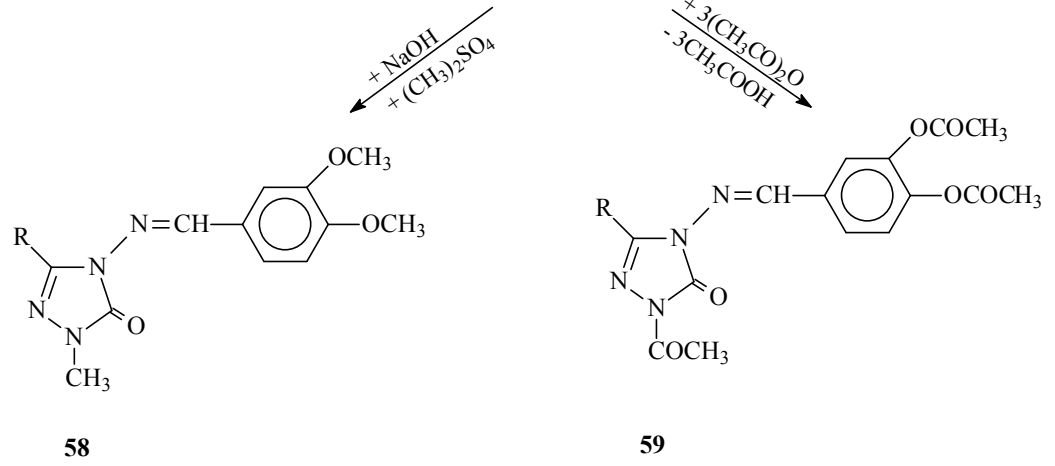
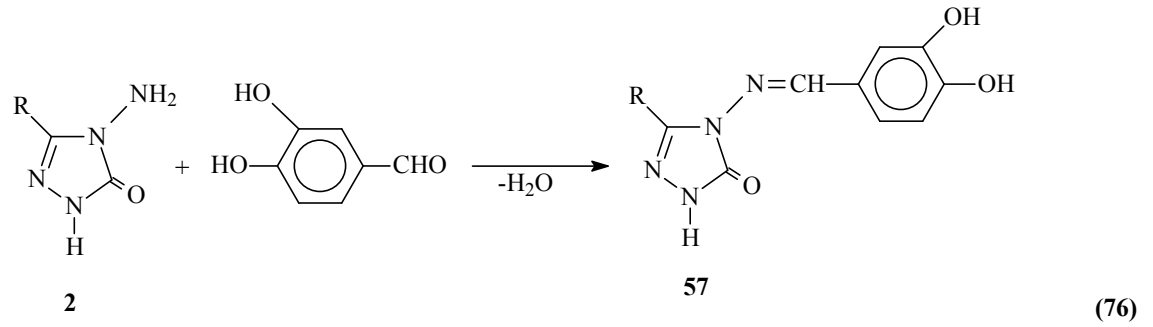


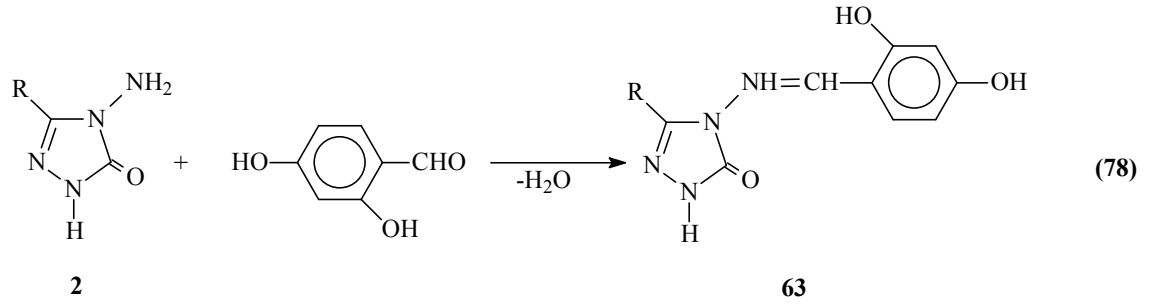
Bir başka çalışmada, 2 tipi bileşiklerin bazı aromatik aldehidler ile reaksiyonundan 55 tipi heterosiklik bileşikler elde edilmiş ve bu bileşiklerin anti-tumor ve anti-HIV aktiflikleri incelenmiştir (Denklem 75) [5].



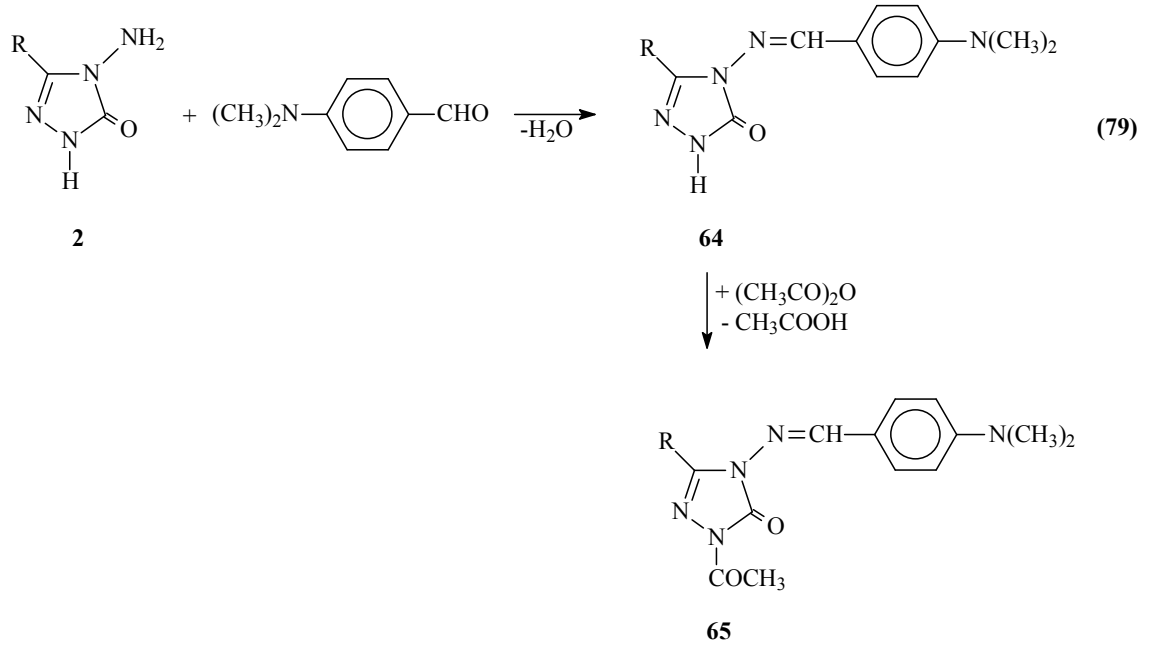
Biyomolekülleri oksidasyon hasarından koruyan ve organizmanın kendisinin sentezlediği ya da dışarıdan alınan antioksidanlara olan ilgi son yıllarda giderek artmaktadır. Nitekim, son yıllarda 2 tipi bileşiklerle ilgili yapılan üç çalışmadan birinde 2 bileşiklerinin 3,4-dihidroksibenzaldehid ile muamelesinden Schiff bazları olan 57 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 [71, 99-101]. Bu çalışmada ayrıca 57 tipi bileşiklerin *N*- ve *O*-metil ve asetil türevleri (58 ve 59) de elde edilmiştir (Denklem 76). Diğer çalışmada ise 2 bileşiklerinin 4-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden oluşan ve Schiff bazları olan 60 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş, *N*- ve *O*-metil ve asetil türevleri (61 ve 62) sentezlenmiş ve antioksidan özellikleri incelenmiştir (Denklem 77) [70, 75]. Bu çalışmada ayrıca 60 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları incelenerek pK_a değerleri belirlenmiştir. Son çalışmada ise 2 tipi bileşiklerin 2,4-dihidroksibenzaldehid ile

reaksiyonundan sentezlenen 63 tipi 3-alkil(aril)-4-(2,4-dihidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin antioksidan özellikleri incelenmiştir (Denklem 78) [102].



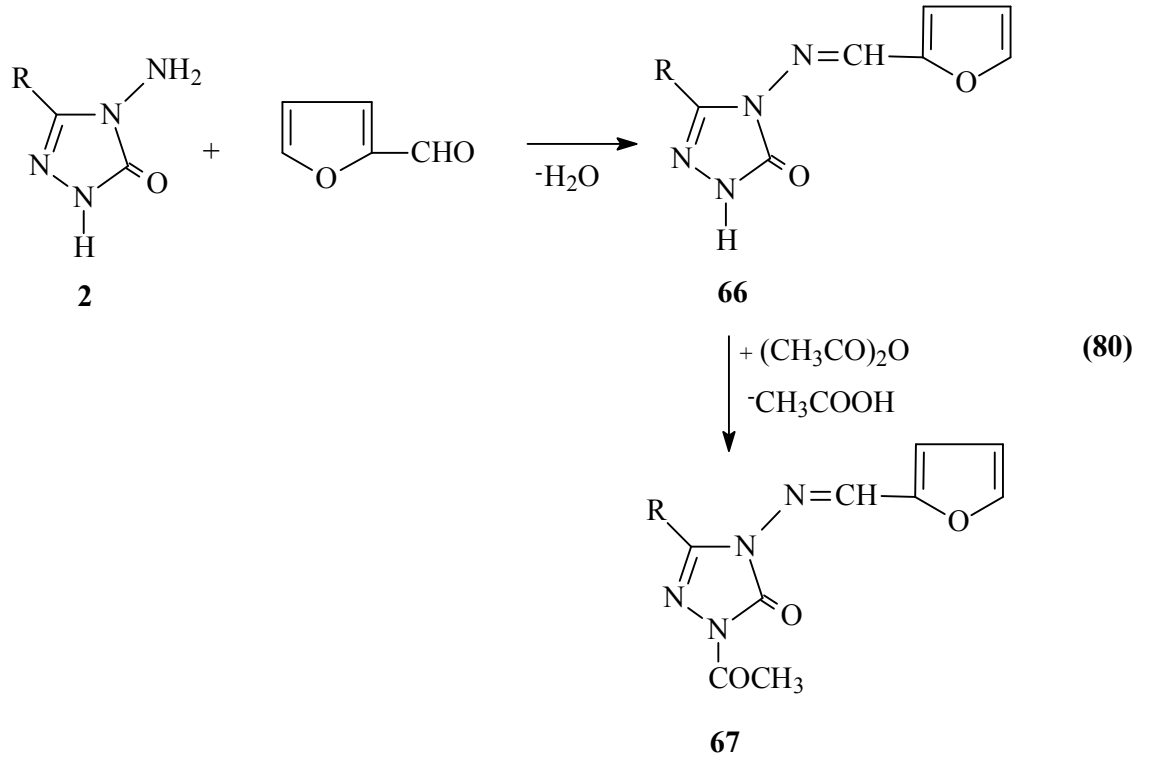


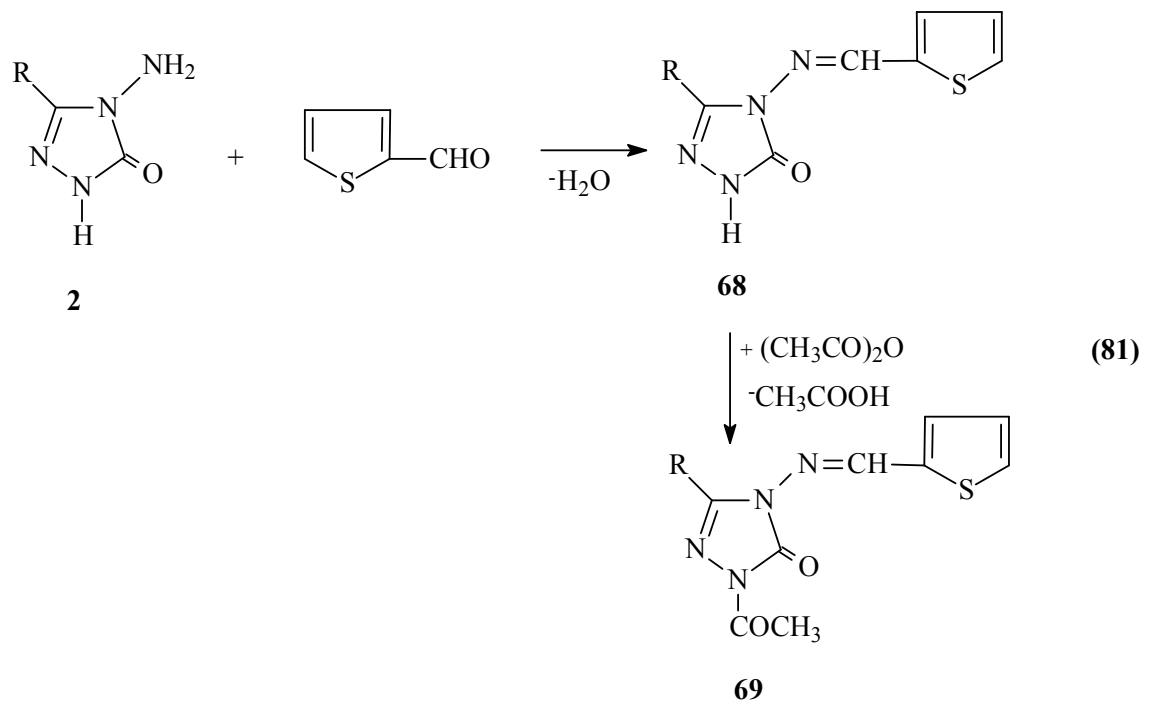
2 tipi bileşiklerin 4-dimetilaminobenzaldehid ile reaksiyonları incelenerek sentezlenen 64 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-dimetilaminobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve bu bileşiklerin asetonitril, izopropil alkol ve *N,N*-dimetilformamid susuz çözücülerinde potansiyometrik olarak TBAH ile titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri hesaplanmıştır. Çalışmada ayrıca 64 tipi bileşiklerin *N*-asetil türevleri (65) elde edilmiştir (Denklem 79) [90].



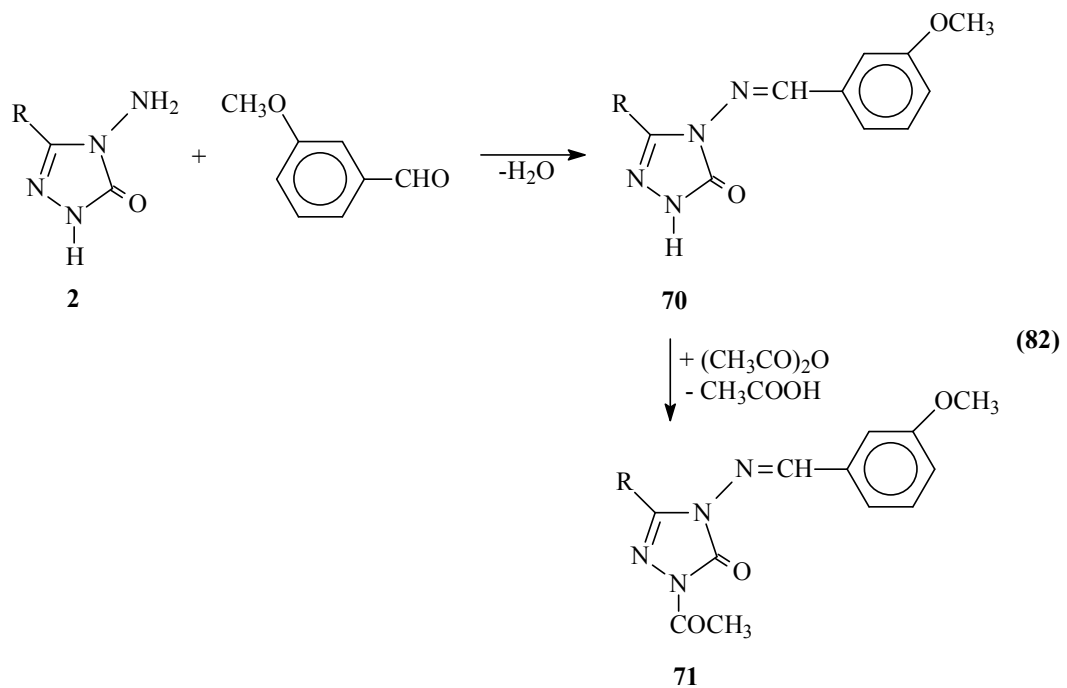
Benzer nitelikteki iki ayrı çalışmadan birinde 2 tipi bileşiklerin heteroaromatik aldehidler olan furfural (furan-2-karboksialdehid) ve tiyofen-2-karboksialdehid ile reaksiyonları incelenerek 3-alkil(aril)-4-(2-furilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (66) ve 3-alkil(aril)-4-(2-tiyenilmetilenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (68) bileşiklerinin sentezi gerçekleştirilmiş, diğerinde ise bu bileşiklerin asetik

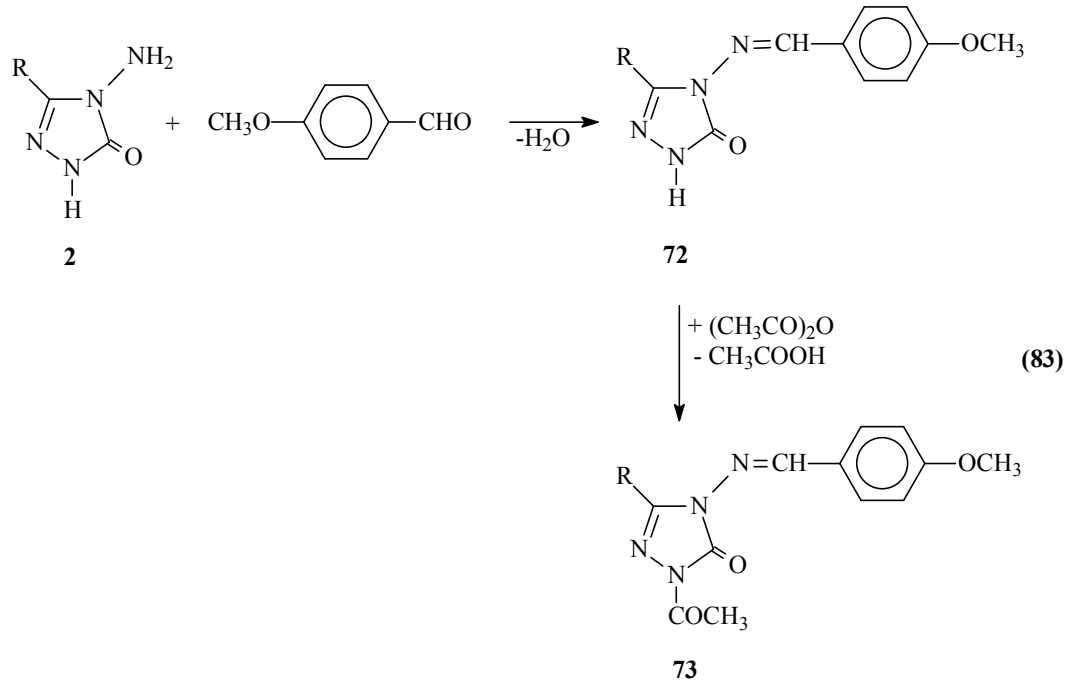
anhidrid ile reaksiyonları incelenerek 67 ve 69 tipi *N*-asetil türevleri elde edilmiştir. Ayrıca 66 tipi bileşiklerin potansiyometrik olarak asitlik sabitleri tayin edilmiştir. Bundan başka 68 ve 69 tipi bileşiklerin biyolojik aktivite incelemeleri çok yakın bir zamanda yapılmıştır (Denklemler 80 ve 81) [103-106].



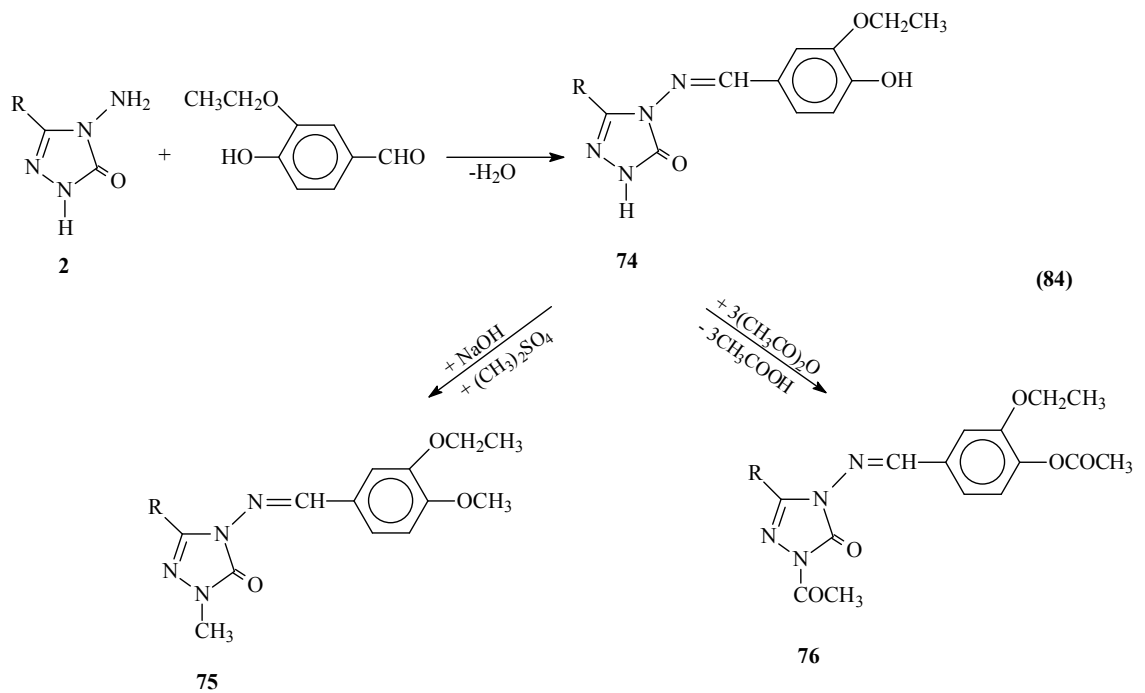


Schiff bazı tipinden 70 ve 72 bileşiklerinin sentezlendiği iki farklı çalışmadan birinde 2 tipi bileşikler; 3-metoksibenzaldehid, diğerinde ise 4-metoksibenzaldehid ile muamele edilmiştir. Sentezlenen 70 ve 72 tipi bileşiklerin susuz çözücülerde potansiyometrik olarak titrasyonları yapılarak asitlik sabitleri tayin edilmiş ve ayrıca *N*-asetil türevleri (71 ve 73) elde edilmiştir (Denklem 82 ve 83) [107-110].



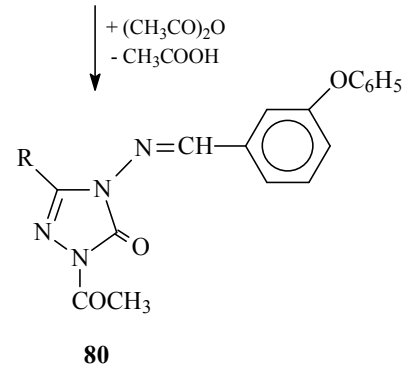
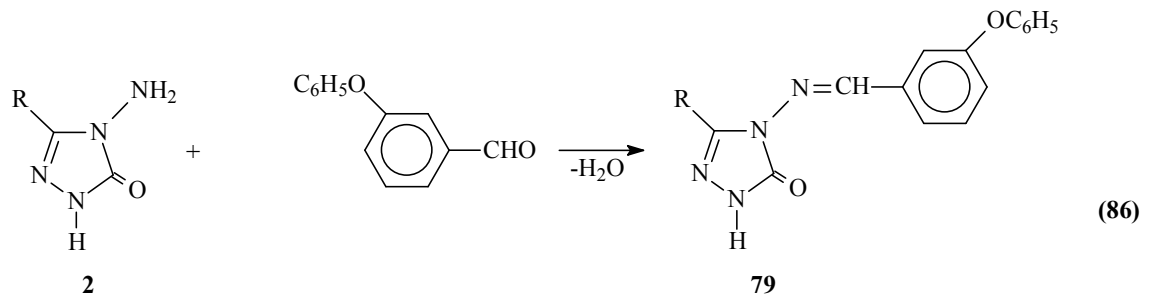
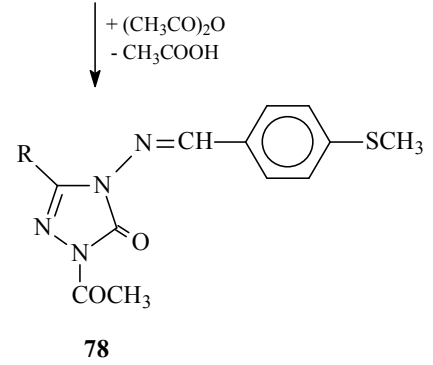
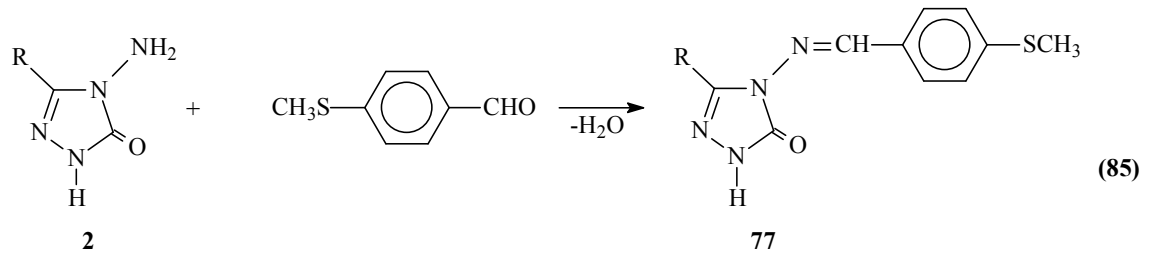


Yine yapılan başka bir çalışmada 2 tipi bileşiklerin 3-etoksi-4-hidroksibenzaldehid ile reaksiyonundan Schiff bazları olan 3-alkil(aril)-4-(3-etoksi-4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (74) bileşikleri elde edilmiş, susuz çözücülerde pK_a değerleri tayin edilmiş, *N*- ve *O*-metil (75) ile *N*- ve *O*-asetil (76) türevleri elde edilmiştir (Denklem 84) [72].



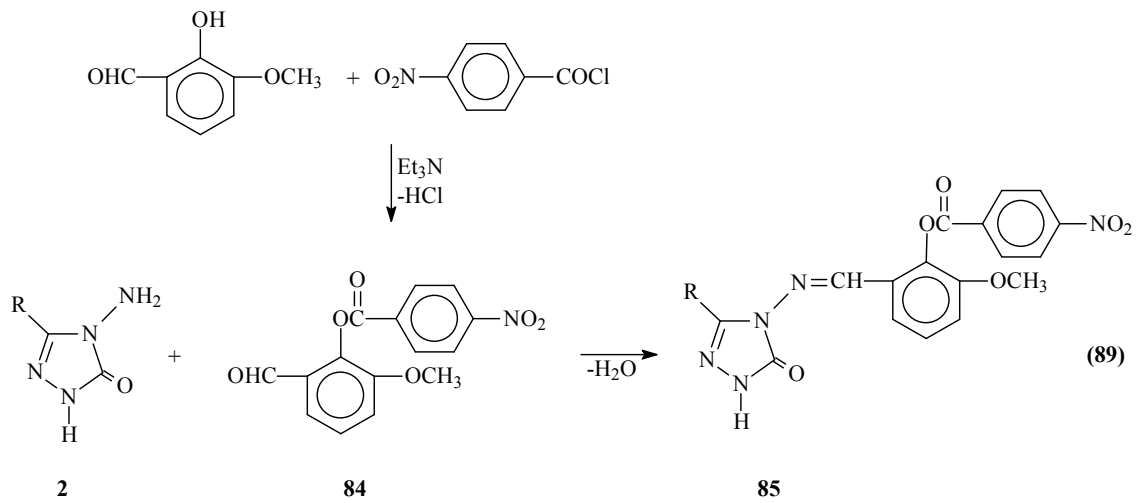
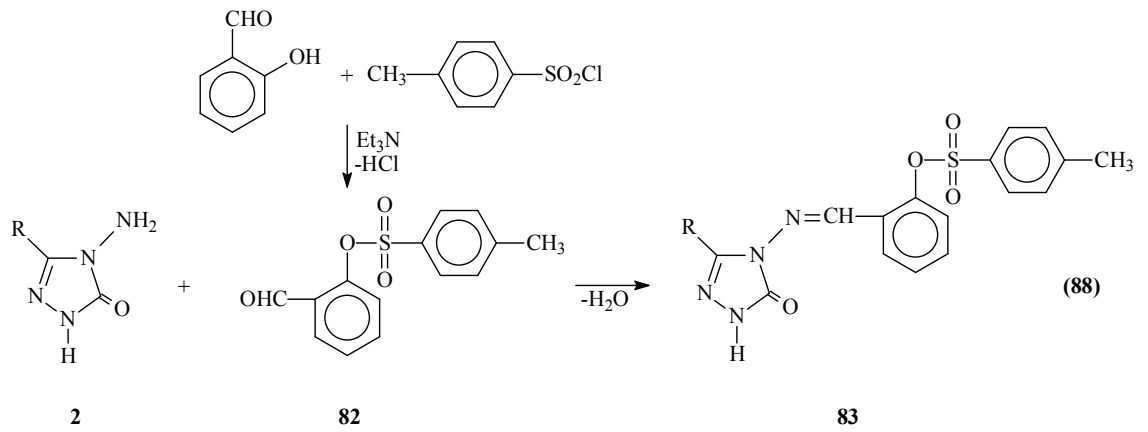
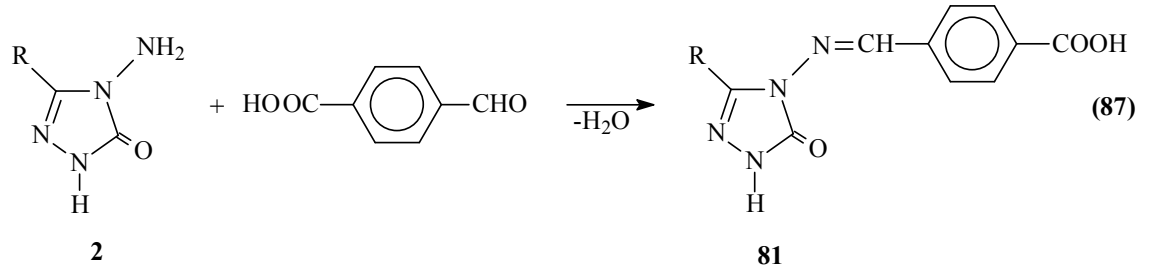
2 Tipi bileşiklerin son yıllarda sentezlenen bazı yeni türevlerinin son olarak elektrokimyasal davranışları incelenmiştir. Bu amaçla, daha önceden sentezlenen 68 ve 72 tipi bileşiklerin elektrokimyasal davranışları, 0,1 M tetrabutylamonyum tetrafluoroboratin (TBATFB) dimetilsülfoksitteki çözeltisinde ve camısı-karbon elektrotta ve çeşitli elektrokimyasal metotlarla incelenmiştir. Bu ortamda incelenen bütün moleküllerin diffüzyon katsayıları ve aktarılan elektron sayıları ultramikro camısı-karbon elektrot kullanılarak hesaplanmıştır. Dönüşümlü voltametri tekniği ile tüm moleküllerin bu ortamda ve camısı-karbon elektrot yüzeyinde (Ag/Ag^+ referans elektroda karşı), birer elektronlu iki indirgenme pikine sahip oldukları tespit edilmiştir. Ayrıca indirgenmenin tersinmez ve EC mekanizmasına sahip olduğu ve difüzyon kontrollü olarak gerçekleştiği sonucuna varılmıştır [111, 112].

Yapılan iki ayrı çalışmada 55 tipi Schiff bazları elde edilmiştir. Çalışmanın birinde 2 tipi bileşiklerin 4-metiltiyobenzaldehid ile reaksiyonundan 3-alkil(aril)-4-(4-metiltiyobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (77) bileşikleri elde edilmiş ve bunların asetik anhidrid ile reaksiyonundan da 78 tipi *N*-asetil türevleri elde edilmiştir. Sentezlenen bileşiklerin antioksidan özelliklerinin yanında, 77 tipi bileşiklerin asitlik özellikleri de incelenmiştir (Denklem 85) [113]. Diğer çalışmada ise 79 tipi bileşikler, 2 bileşiklerinin 3-fenoksibenzaldehid ile reaksiyonundan elde edilmiş ve bunların da asetik anhidrid ile muamelesinden 80 tipi *N*-asetil türevleri elde edilmiştir. Çalışmada sentezlenen bileşiklerin antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında 79 tipi bileşiklerin 4 farklı susuz çözücüde (izopropil alkol, *tert*-butil alkol, asetonitril, *N,N*-dimetil formamid) potansiyometrik yöntemle pK_a değerleri belirlenmiştir. Ayrıca, 79 ve 80 tipi bileşiklerin biyolojik aktivite incelemeleri çok yakın bir zamanda yapılmıştır (Denklem 86) [106, 114].

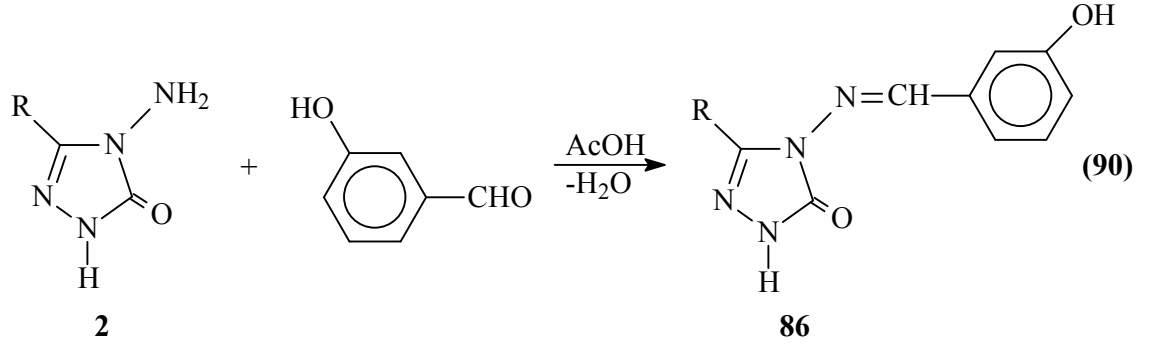


3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiklerinin 4-karboksi-benzaldehid [115], 2-(*p*-toluensulfonyloksi)-benzaldehyd [116] ve 2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzaldehid [117] ile sırasıyla 3-alkil(aril)-4-(4-karboksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (81), 3-alkil(aril)-4-[2-(*p*-toluensulfonyloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (83) ve 3-alkil(aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (85)

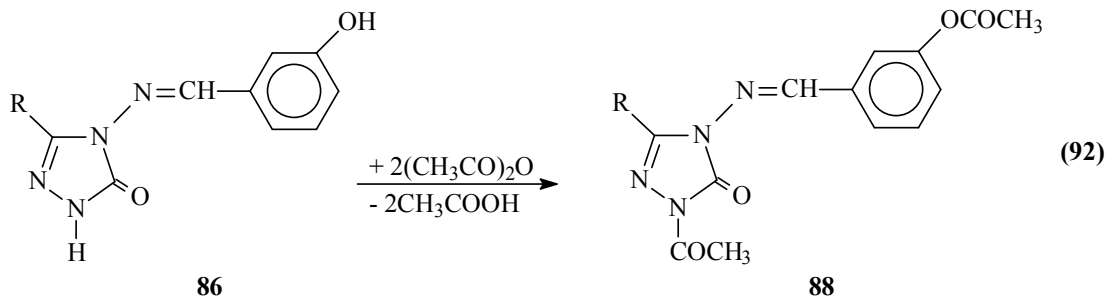
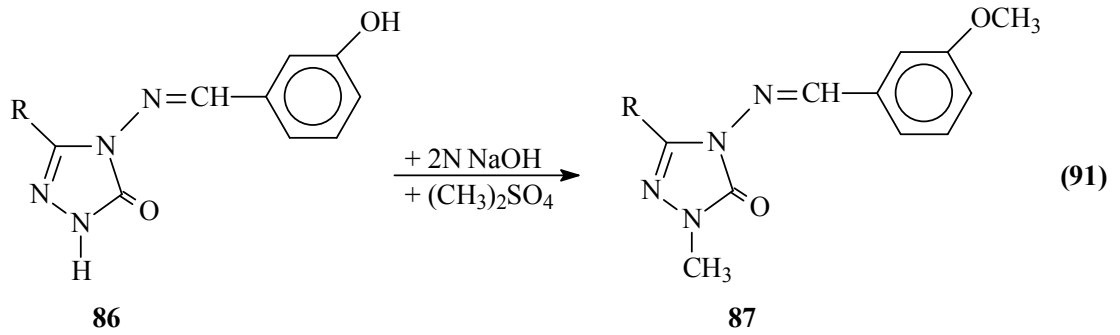
bileşiklerinin oluştuğu üç ayrı çalışma ile ortaya konmuştur (Denklem 87-89). Son iki çalışmada 82 ve 84 tipi benzaldehid türevleri elde edilerek 2 tipi bileşiklerle reaksiyona sokulmuştur. Bu çalışmalarda ayrıca, 81 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları yapılarak asitlik özellikleri; 83 ve 85 tipi bileşiklerin ise asitlik ve antioksidan özellikleri incelenmiştir.



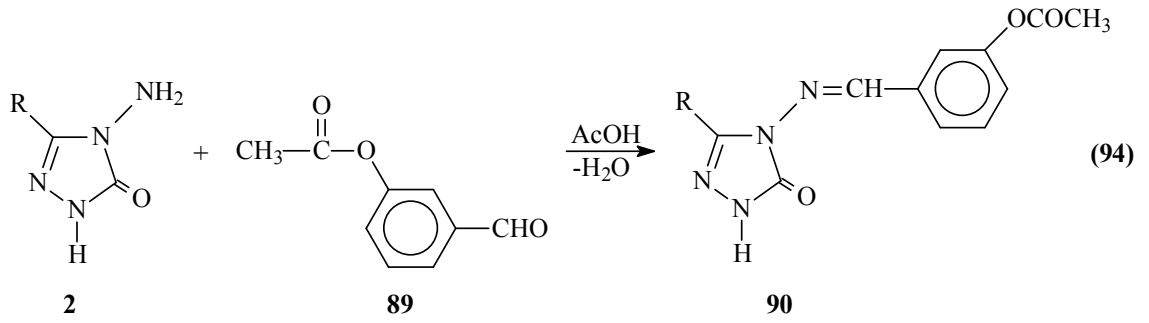
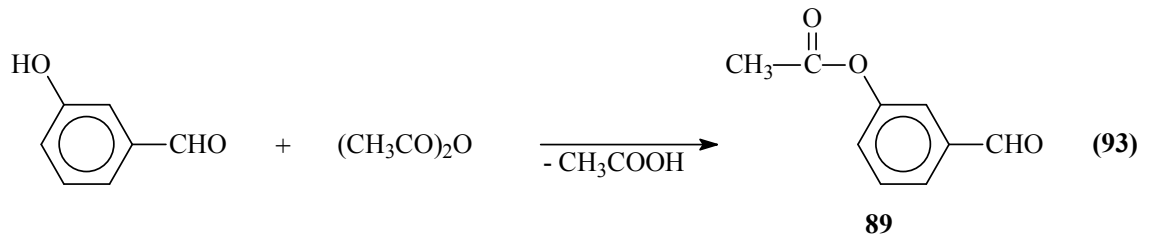
Ayrıca 2 tipi bileşiklerin 3-hidroksibenzaldehid ile reaksiyonundan 86 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 90) [77].



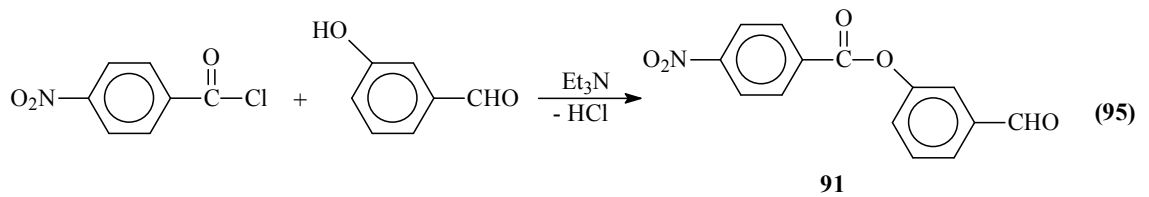
Çalışmada sentezlenen 86 tipi bileşikleri 2N NaOH'li ortamda $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_4$ ile muamele edilerek 87 tipi *N*- ve *O*-metil türevleri olan 1-metil-3-alkil(aril)-4-(3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 91). Ayrıca, 86 tipi bileşiklerinin asetik anhidrid ile muamelesinden 88 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-(3-asetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 92) [77].

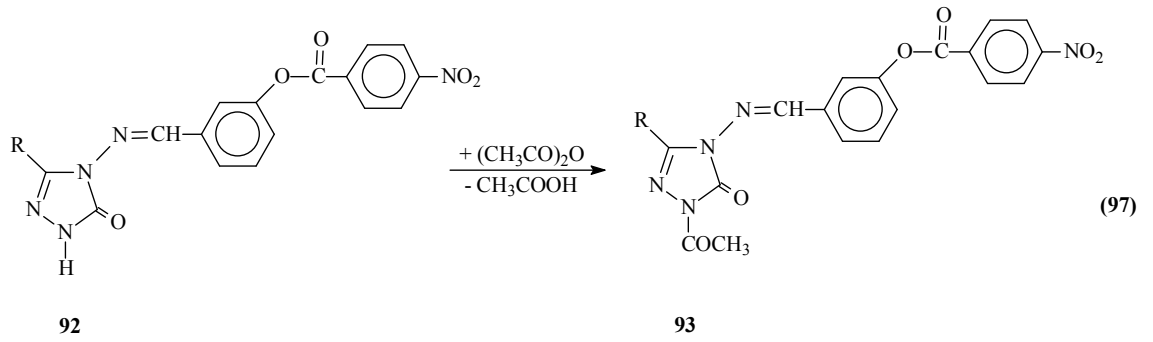
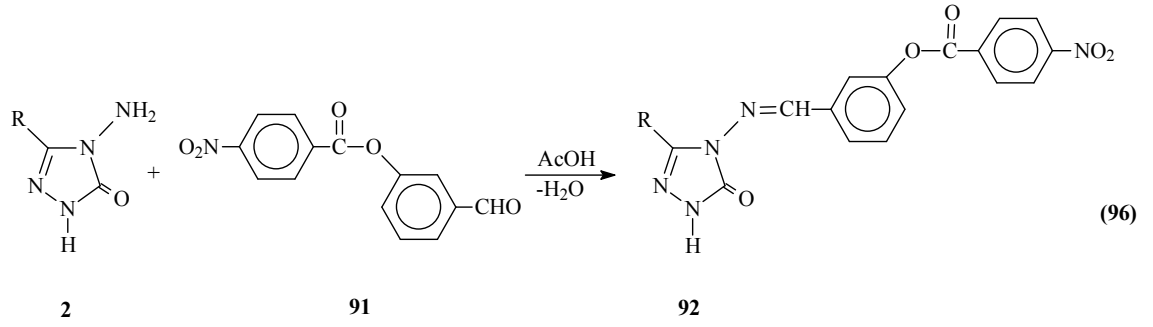


Son yıllarda yapılan bazı çalışmalarda, 3-hidroksibenzaldehidlerin bazı açıl halojenürlerle veya asetik anhidridle reaksiyonundan benzaldehid türevleri elde edilmiş ve bu benzaldehid türevlerinin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonları incelenmiştir. Nitekim 3-hidroksibenzaldehidin asetik anhidrid ile muamelesinden oluşturulan ve benzaldehid türevi olan 3-asetoksibenzaldehidin (89) 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 90 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-asetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 93 ve 94) [77].

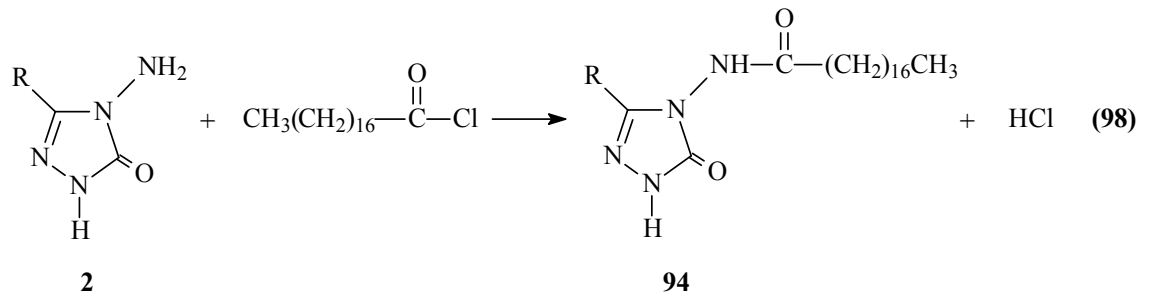


Bir diğer çalışmada, 2 tipi bileşiklerin 3-hidroksibenzaldehidin trietilamin varlığında soğukta 4-nitrobenzoilklorür ile muamelesinden elde edilen 91 tipi 3-(4-nitrobenzoksi)benzaldehyd ile ayrı ayrı reaksiyonundan 92 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(4-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiş ve ayrıca 92 tipi bileşiklerin *N*-asetil türevleri (93) de elde edilmiştir (Denklem 95-97) [77, 118].

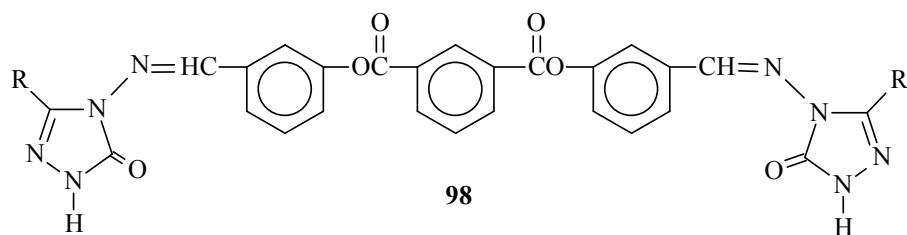
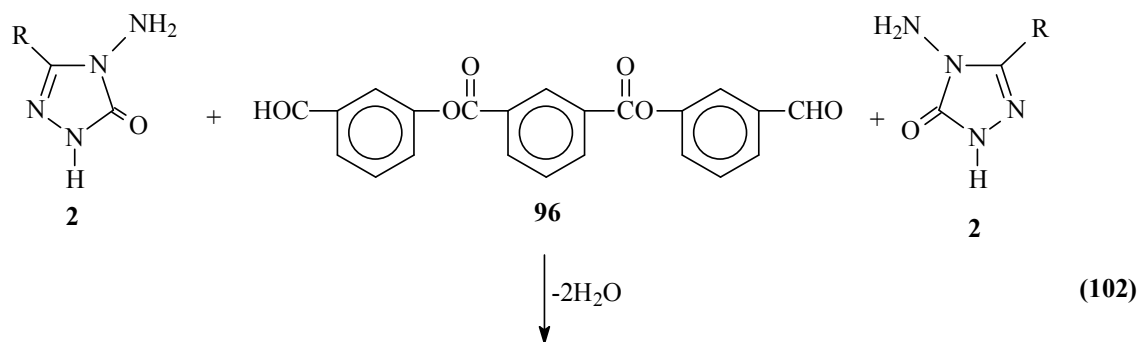
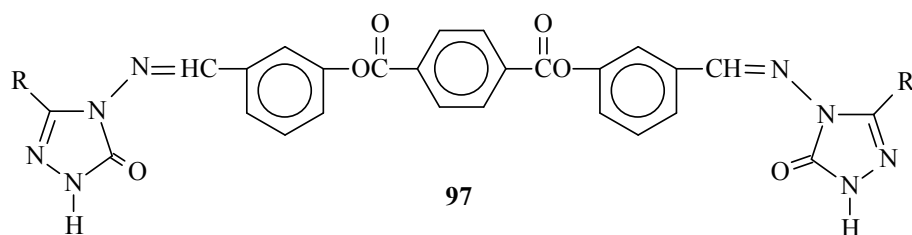
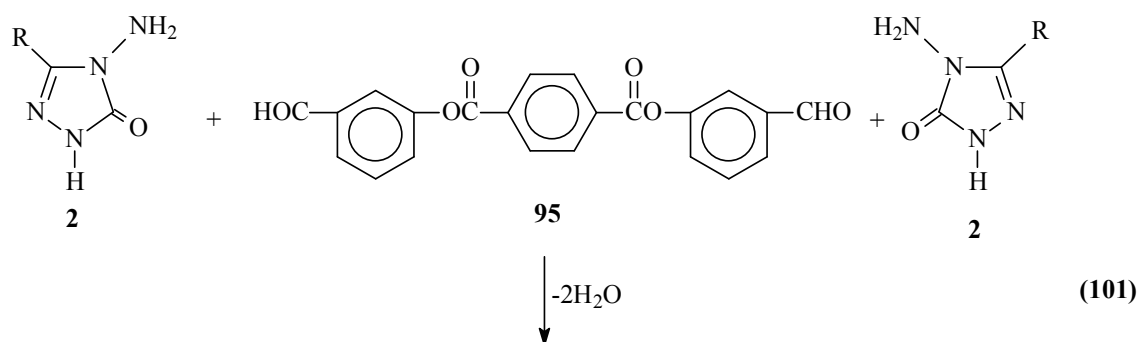
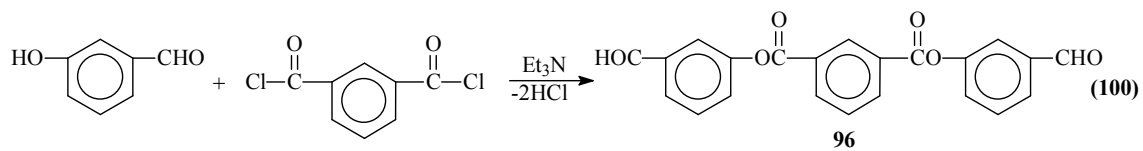
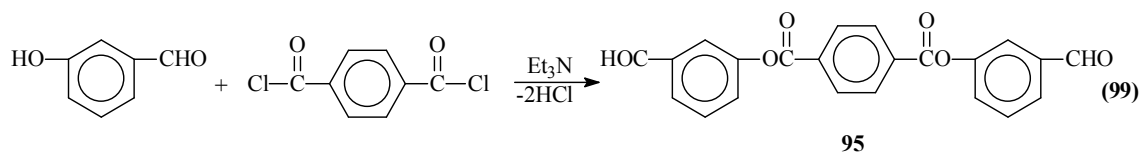




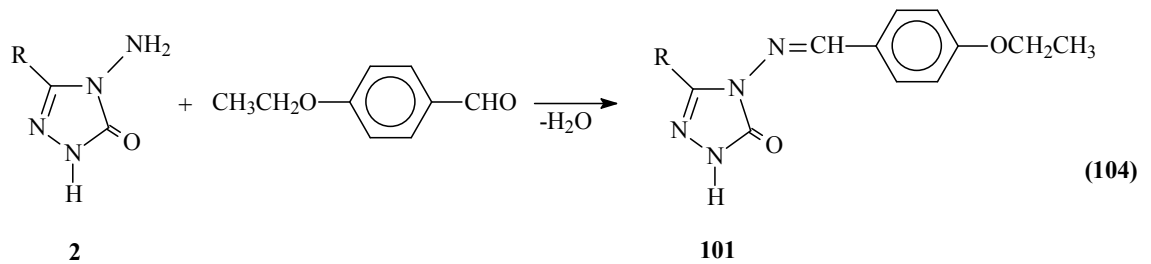
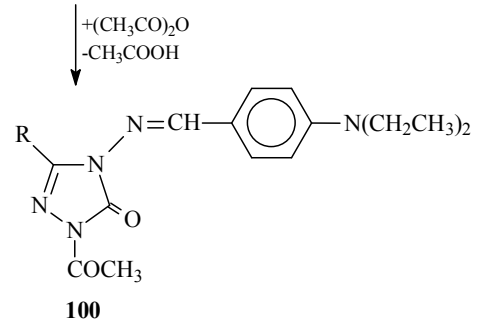
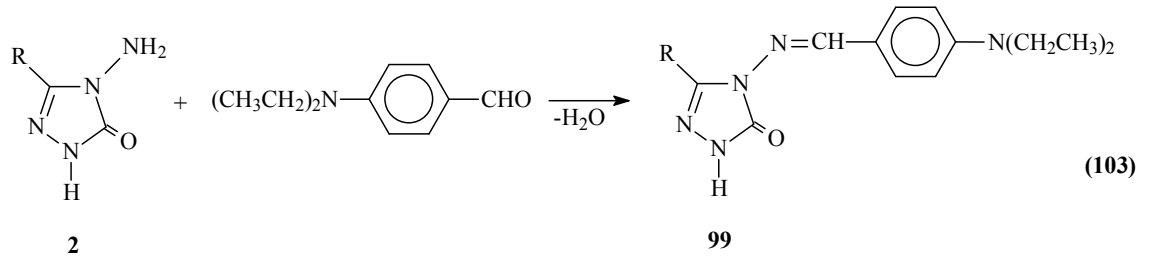
2 Tipi bileşiklerin *n*-oktadekanoil klorür (stearoil klorür) ile açillendirme reaksiyonu da incelenmiş ve 94 tipi 3-alkil(aril)-4-(*n*-oktadekanoilamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 98) [77].



Son yıllarda gerçekleştirilen bir çalışmada ise, 3-hidroksibenzaldehidin trietilamin varlığında tereftaloil klorür ve izoftaloil klorür ile Denklem 99 ve 100 uyarınca muamelesinden elde edilen di-(3-formilfenil) tereftalat (95) ve di-(3-formilfenil) izoftalat (96) ile 2 tipi bileşiklerin muamelesi sonucu 97 tipi di-[3-alkil(aril)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometinfenil tereftalat ve 98 tipi di-[3-alkil(aril)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometinfenil izoftalat bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 99-102) [119].

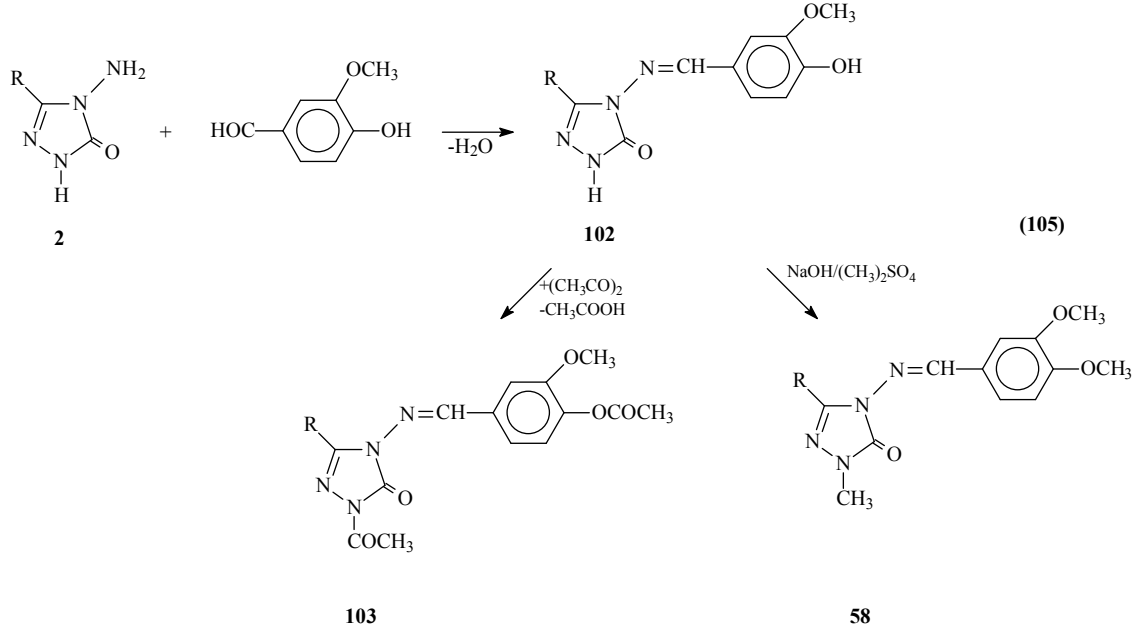


55 Tipi heterosiklik yeni imino bileşiklerinin elde edildiği iki ayrı çalışmada 2 tipi bileşiklerin 4-dietilaminobenzaldehid ve 4-etoksibenzaldehid ile reaksiyonlarından sırasıyla, 99 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-dietilaminobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 101 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-etoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. 99 tipi bileşiklerin *N*-asetil türevleri (100) de elde edilmiştir. Her iki çalışma kapsamında sentezlenen 99-101 tipi bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında 99 ve 101 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları incelenerek asitlik sabitleri bulunmuştur (Denklem 103 ve 104) [120, 121].

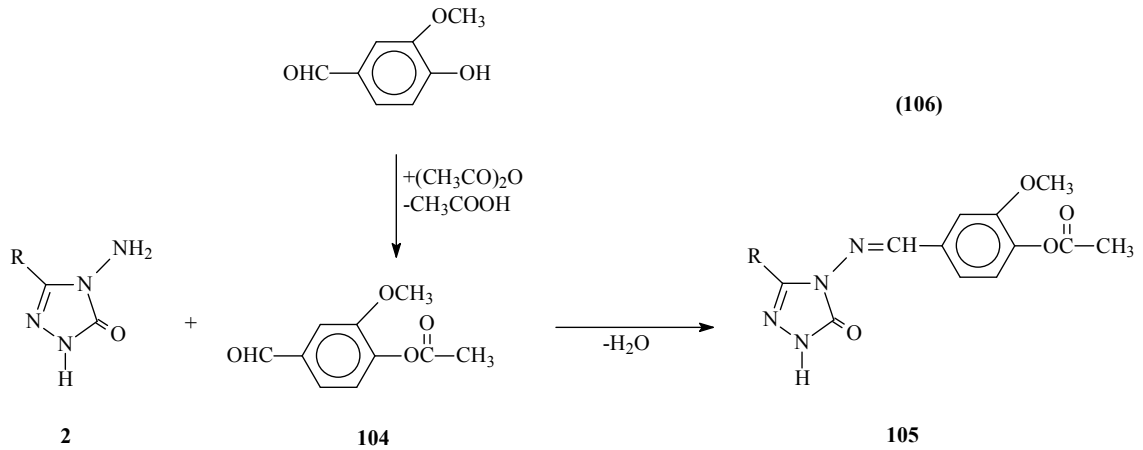


2 Tipi bileşiklerin vanillin (3-metoksi-4-hidroksibenzaldehid) ile reaksiyonları yakın bir zamanda incelenmiş ve 102 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-metoksi-4-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. Ayrıca, 102 tipi bileşiklerin asetillendirme ve metillendirme reaksiyonları incelenerek 103 ve 58 tipi bileşikler elde

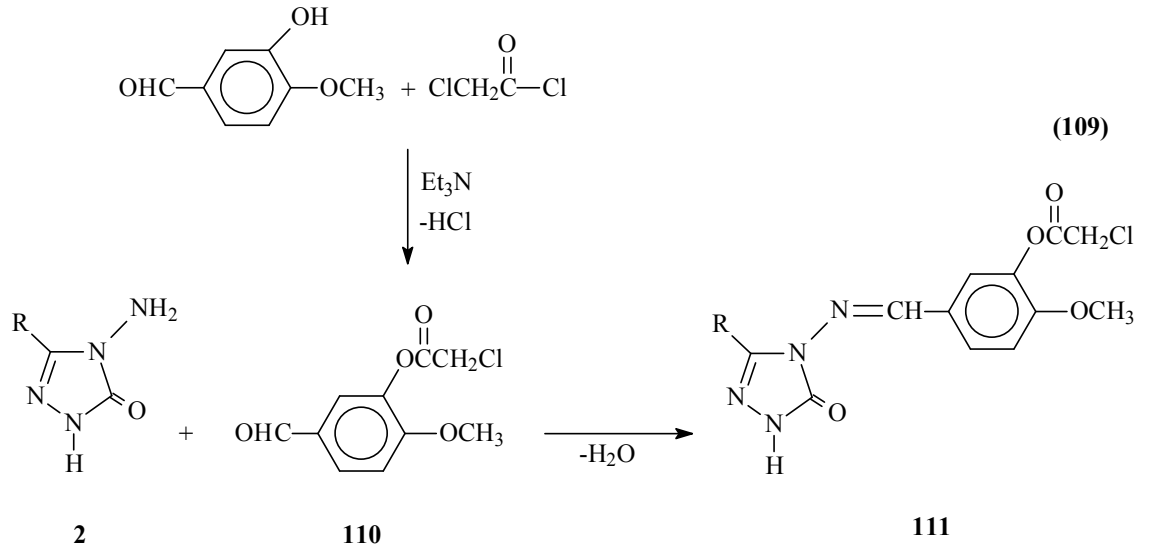
edilmiştir (Denklem 105). Çalışmada ayrıca, 103 tipi bileşiklerin farklı susuz çözücülerde TBAH ile potansiyometrik olarak titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon metodu ile asitlik sabitleri tayin edilmiştir. Buna ilaveten, sentezlenen yeni bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenmiştir [122, 123].

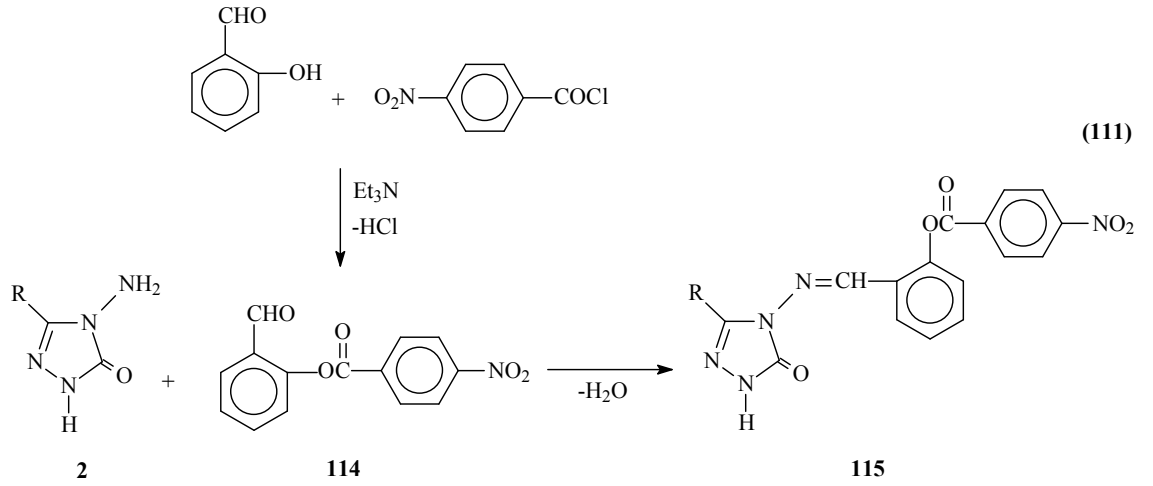


3-Metoksi-4-hidroksibenzaldehid bileşiğinin asetik anhidrid ile muamelesi sonucu elde edilen 3-metoksi-4-asetoksibenzaldehid (104) bileşiğinin 2 tipi 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleriyle reaksiyonundan 3-alkil(aril)-4-(3-metoksi-4-asetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (105) bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 106) [124].

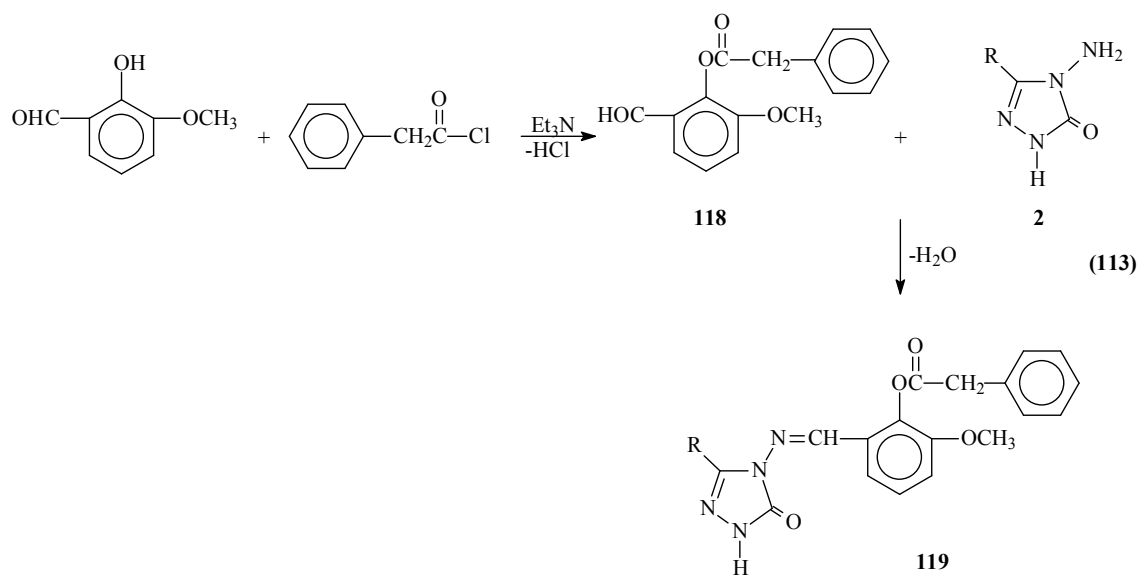
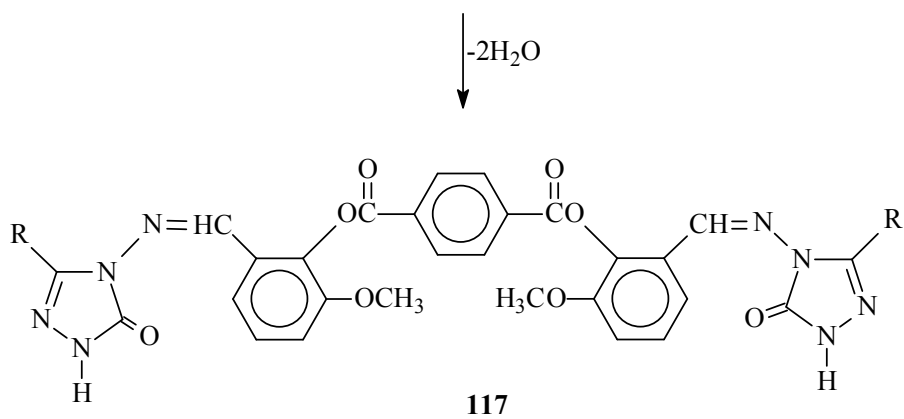
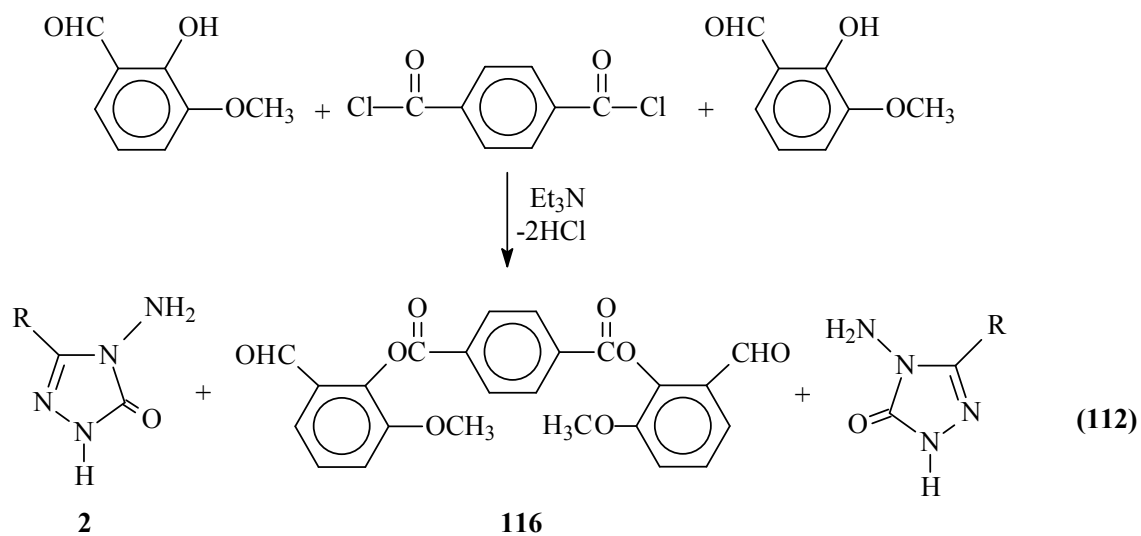


benzaldehyd türevi elde edilmiş olup bu bileşiğin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 111 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-kloroasetoksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. Benzer bir çalışmada ise fenilasetil klorürün buz banyosunda trietilamin varlığında 3-etoksi-4-hidroksibenzaldehyd ile reaksiyonundan elde edilen 112 tipi benzaldehyd türevinin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 113 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-etoksi-4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. Bir diğer çalışmada ise *p*-nitrobenzoil klorürün trietilamin varlığında buz banyosunda salisilaldehyd ile muamelesinden elde edilen 114 tipi benzaldehyd türevinin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 115 tipi 3-alkil(aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 109-111) [128-130].

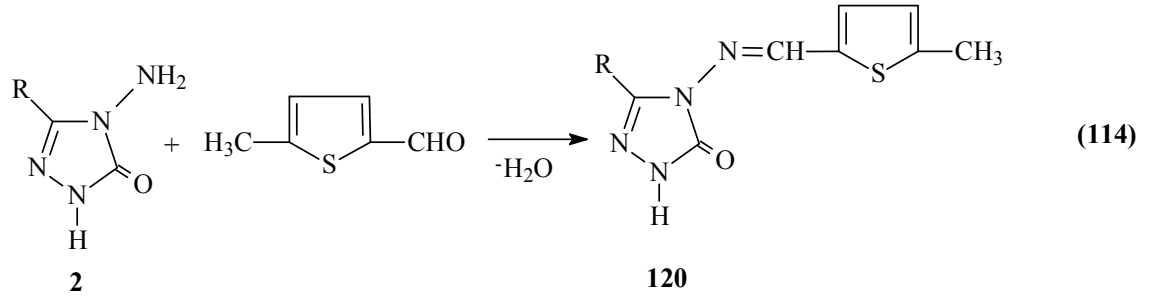


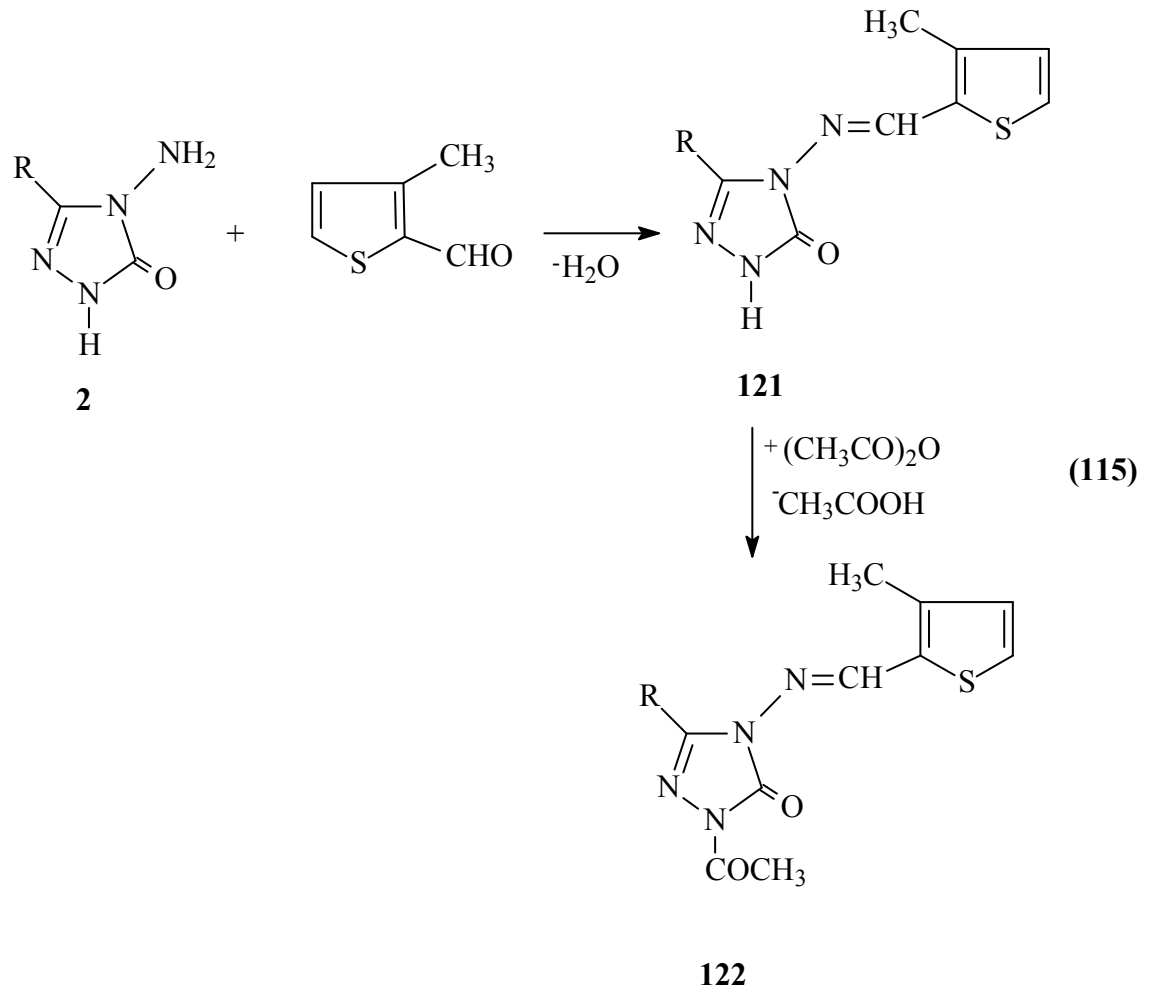


Başka bir çalışmada ise bir aromatik dikarboksilli asid halojenürü olan tereftaloil klorürün 3-metoksi-2-hidroksibenzaldehid ile buz banyosunda trietilamin varlığında muamelesinden elde edilen 116 tipi benzaldehid türevinin 2 tipi bileşikler ile reaksiyonundan 117 tipi di-[2-(3-alkil/aryl-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometin-6-metoksifenil] tereftalat bileşikleri elde edilmiştir. Benzer bir diğer çalışmada ise fenilasetil klorürün buz banyosunda trietilamin varlığında 3-metoksi-2-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden elde edilen 118 tipi benzaldehid türevinin 2 tipi bileşikler ile reaksiyonundan 119 tipi 3-alkil(aryl)-4-[3-metoksi-2-(fenilasetoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 112 ve 113) [131, 132].

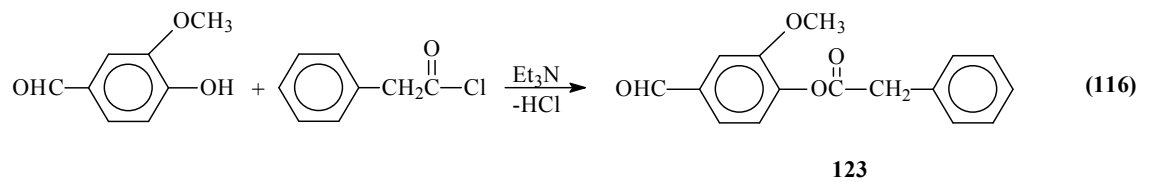


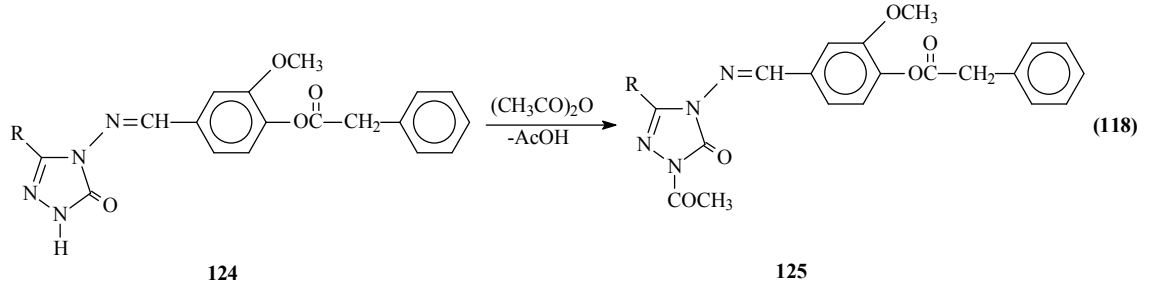
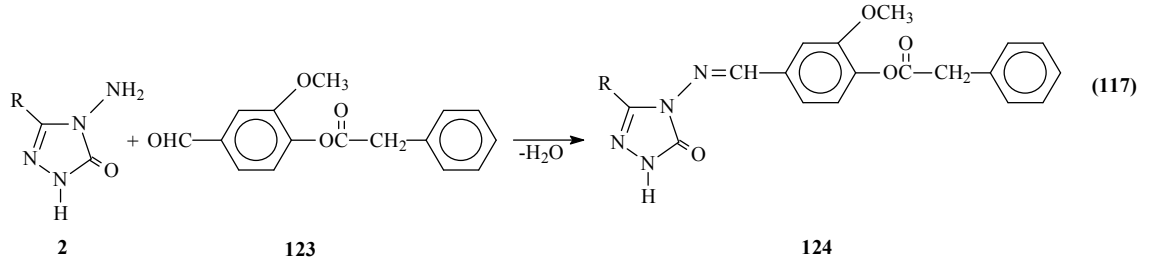
Benzer nitelikteki iki ayrı çalışmadan birinde 2 tipi bileşiklerin 5-metiltiyofen-2-karboksialdehid ve 3-metiltiyofen-2-karboksialdehid ile reaksiyonları incelenmiş, 120 ve 121 tipi bileşikler elde edilmiştir. 121 Tipi bileşiklerin *N*-asetil türevlerinin de sentezlendiği bu çalışmalarda elde edilen bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında 120 ve 121 bileşiklerinin asitlik özellikleri de incelenmiştir (Denklem 114 ve 115) [133, 134].



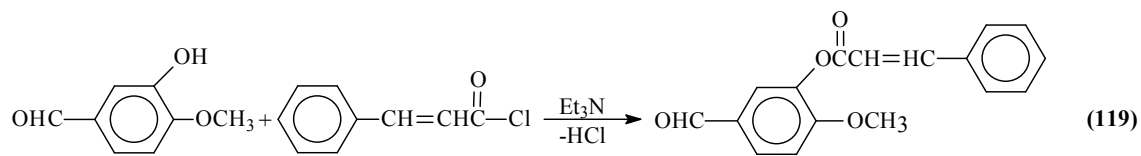


Son yıllarda yapılan bir başka çalışmada ise 3-metoksi-4-hidroksibenzaldehidin trietilaminli ortamda fenilasetil klorür ile reaksiyonundan elde edilen ve birer benzaldehid türevleri olan 3-metoksi-4-fenilasetoksibenzaldehid (123)'in 2 tipi bileşikler ile reaksiyonlarından 3-alkil(aril)-4-(3-metoksi-4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (124) bileşiği sentezlenmiştir. Bu çalışmada 124 bileşiğinin *N*-asetil türevleri olan 125 bileşiği de elde edilmiştir (Denklem 116-118) [135].

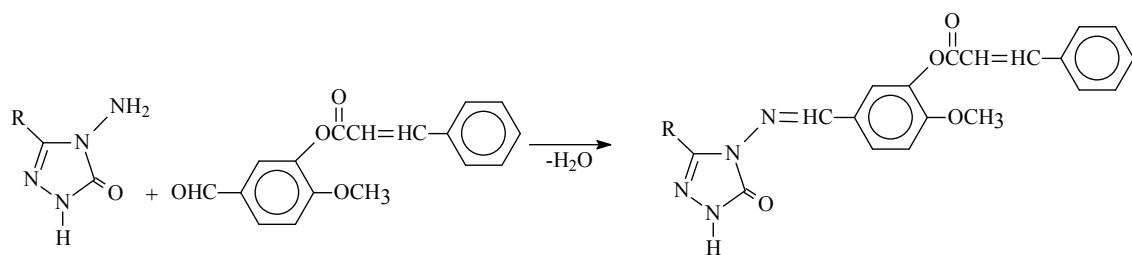




3-Hidroksi-4-metoksibenzaldehidin, sinnamoil klorür ile trietilamin varlığında muamelesinden elde edilen 4-metoksi-3-sinnamoiloksibenzaldehidin (126) 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 127 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-metoksi-3-sinnamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiş ve asetik anhidrid ile *N*-asetillendirme reaksiyonları incelenerek karşın olan 128 tipi bileşikler elde edilmiştir (Denklem 119 ve 120) [136, 137]. Bir başka çalışmada ise, 2 tipi bileşiklerin salisilaldehidin *p*-nitrobenzoil klorür ile reaksiyonundan elde edilen ve benzaldehid türevi olan 129 bileşiği ile muamelesinden karşın olan 3-alkil(aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (130) bileşikleri ve bu bileşiklerin asetillendirilmesinden de 131 tipi bileşikler sentezlenmiştir (Denklem 121 ve 122) [138]. Her iki çalışmada sentezlenen 127, 128, 130 ve 131 tipi bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H içeren 127 ve 130 tipi bileşiklerin 4 farklı susuz çözücüde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon metodu ile yarı nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan asitlik sabitleri tayin edilmiştir.



126

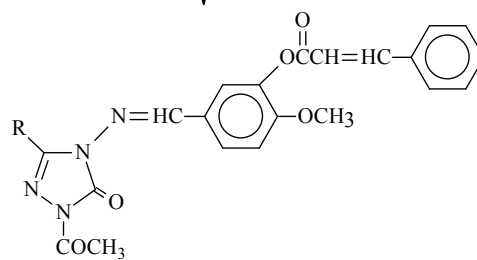


2

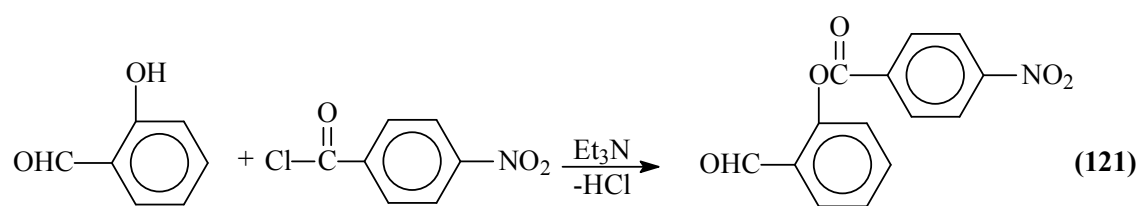
126

127

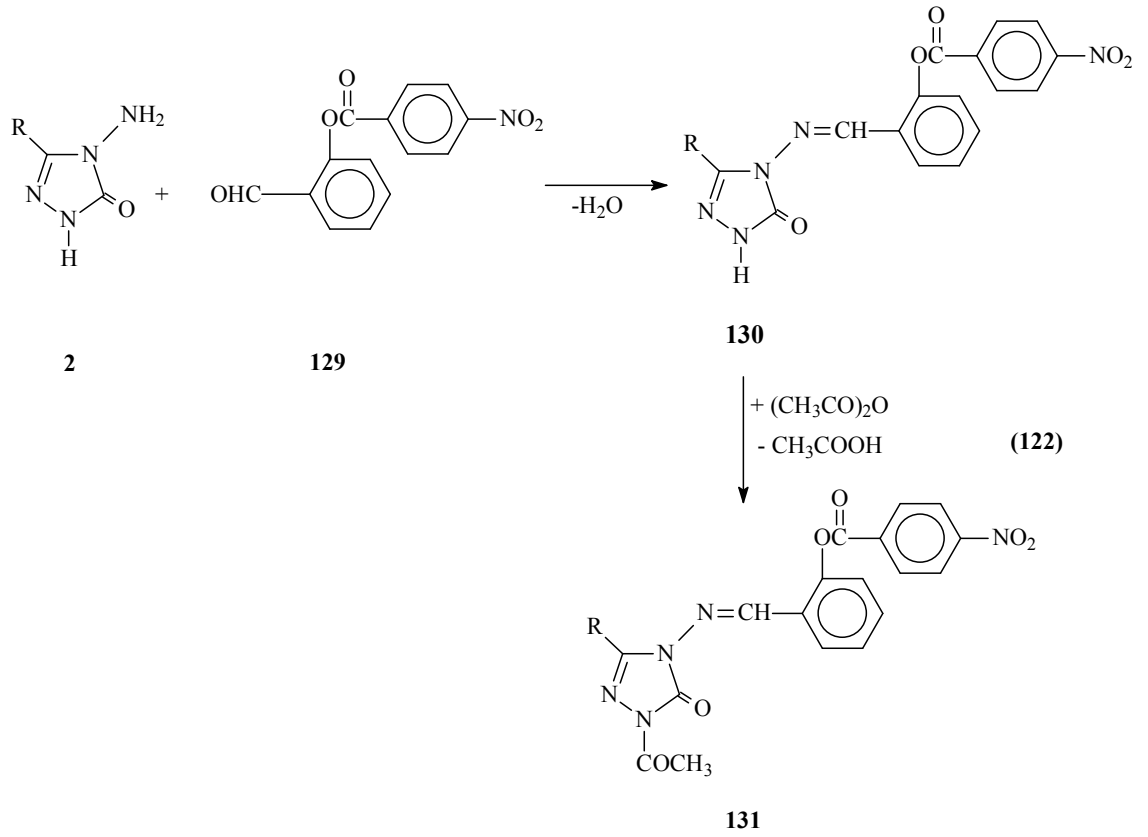
(120)



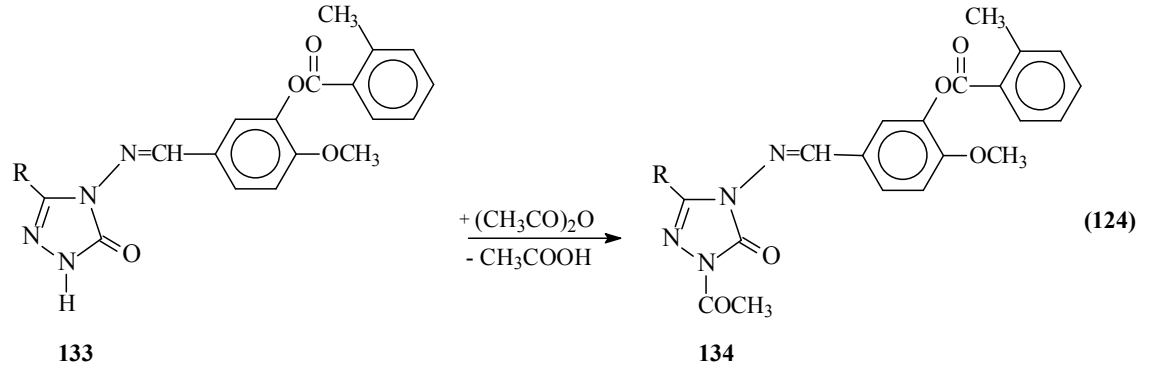
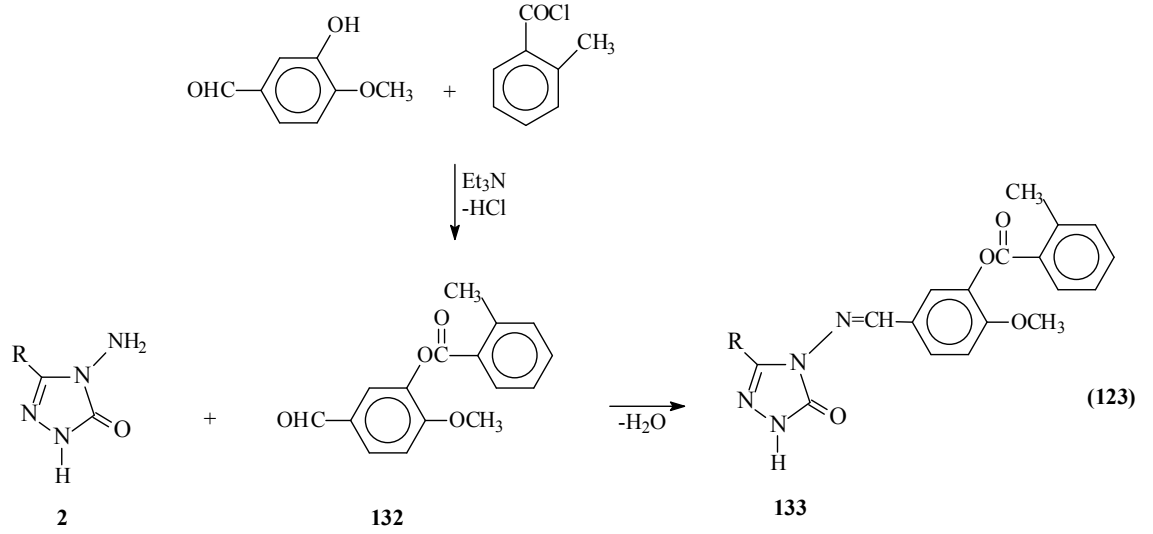
128



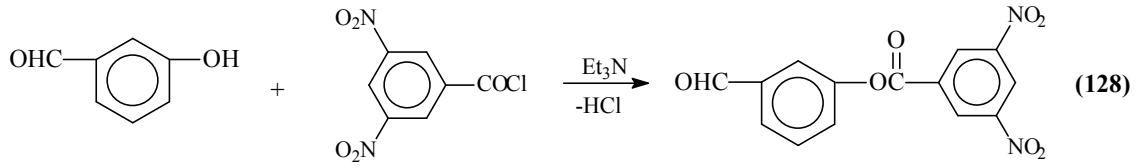
129



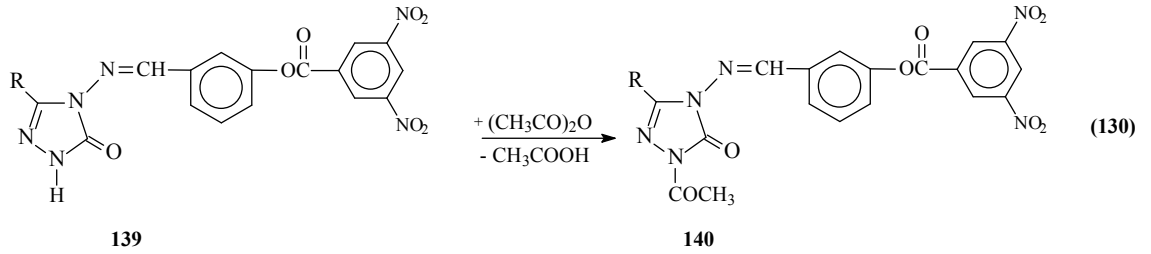
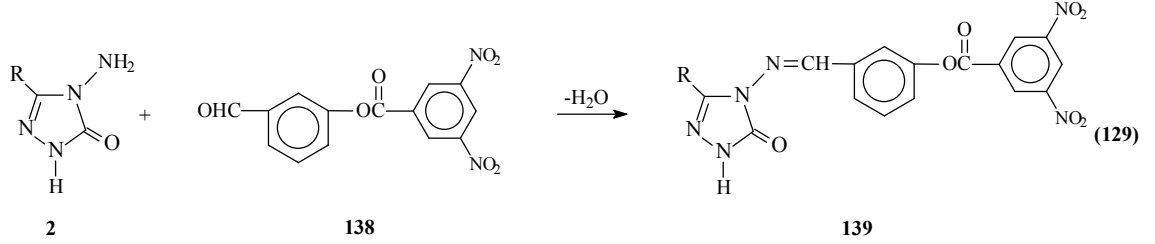
Başka bir çalışmada 3-hidroksi-4-metoksibenzaldehydin trietilaminli ortamda soğukta *o*-metilbenzoil klorür ile reaksiyonundan sentezlenen ve bir benzaldehyd türevi olan 3-(2-metilbenzoksi)-4-metoksibenzaldehyd (132) ile 2 tipi bileşiklerin muamelesinden 133 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(2-metilbenzoksi)-4-metoksi-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. Çalışmada ayrıca 133 tipi bileşiğin asetik anhidrid ile reaksiyonu da incelenmiş ve 134 tipi *N*-asetil türevleri elde edilmiştir (Denklem 123 ve 124) [139]. Bu çalışmada sentezlenen 133 ve 134 tipi bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi yanında 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H içeren 133 tipi bileşiklerin 4 farklı susuz çözücüde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılarak yarı nötralizasyon metodu ile asitlik sabitleri tayin edilmiştir.



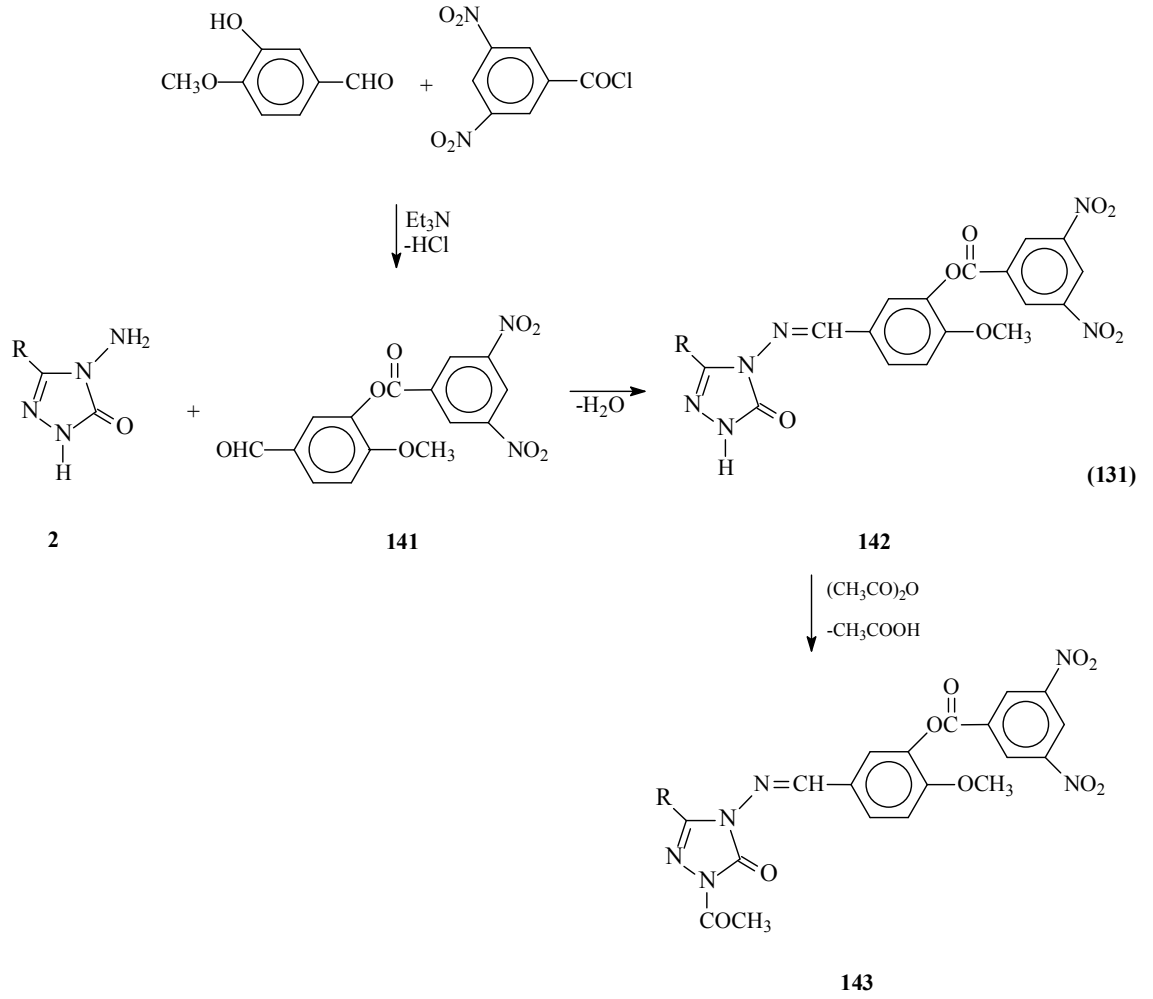
4-Hidroksibenzaldehidin trietilaminli ortamda soğukta *p*-metilbenzoil klorür ile reaksiyonundan sentezlenen ve bir benzaldehid türevi olan 4-(4-metilbenzoksi)benzaldehyd (138) ile 2 tipi bileşiklerin ayrı ayrı muamelesinden 136 tipi 3-alkil(aril)-4-[4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri ve bunların da asetik anhidrid ile reaksiyonundan *N*-asetil türevleri olan 137 tipi bileşiklerin de sentezlendiği bildirilmiştir (Denklem 125-127) [140]. Bu çalışmada sentezlenen 136 ve 137 tipi bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmiştir. Ayrıca 136 tipi bileşiklerin 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H protonu içerdiğinden dolayı 4 farklı susuz çözücüde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılarak yarı-nötralizasyon metodu ile yarı-nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan asitlik sabitleri tayin edilmiştir.



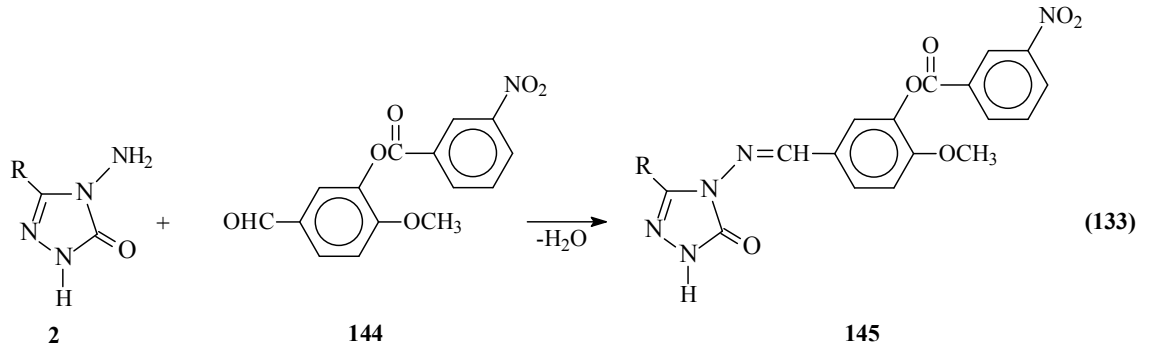
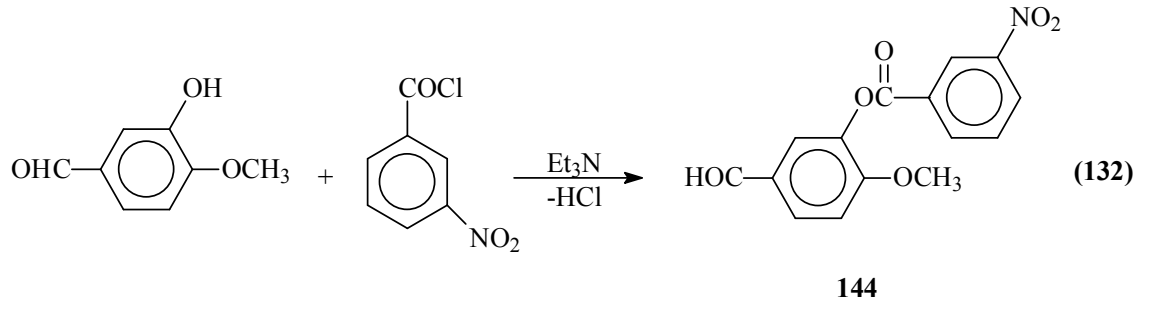
138



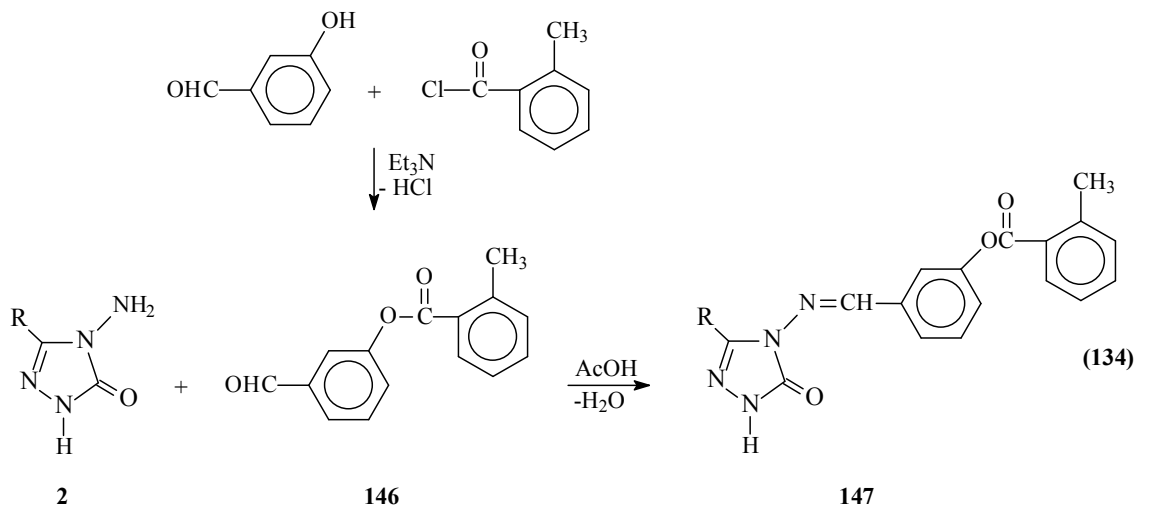
4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin 3-hidroksi-4-metoksibenzaldehidin trietilaminli ortamda soğukta 3,5-dinitrobenzoil klorür ile reaksiyonundan sentezlenen ve bir benzaldehid türevi olan 3-(3,5-dinitrobenzoksi)-4-metoksibenzaldehid (141) ile muamelesinden 142 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiştir. Sentezlenen bileşiklerin asetik anhidrid ile asetillendirme reaksiyonları da incelenmiş olup, karşın olan 143 tipi *N*-asetil türevleri elde edilmiştir. Bu çalışmada sentezlenen bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmiş ve ayrıca 142 tipi bileşiklerin *in-vitro* biyolojik aktiviteleri ve 142 ve 143 tipi bileşiklerin asitlik özellikleri de incelenmiştir.(Denklem 131) [142, 143].



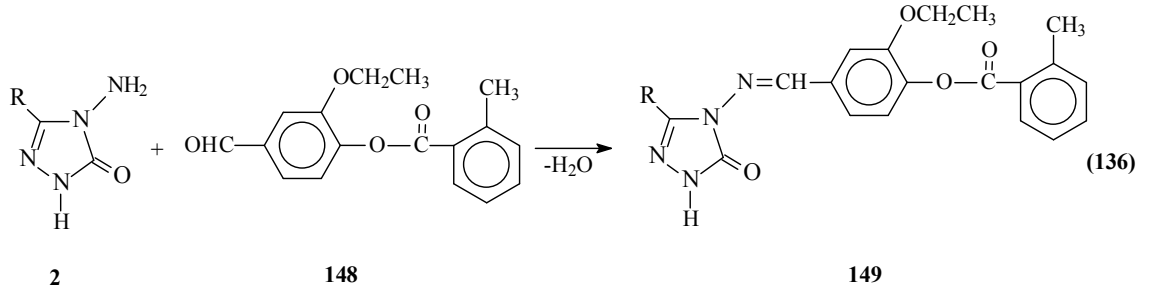
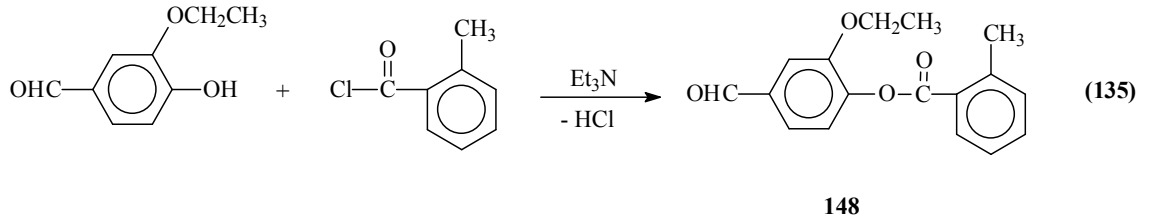
2 Tipi bileşiklerin 3-hidroksi-4-metoksibenzaldehidin trietilamin varlığında 3-nitrobenzoil klorür ile muamelesinden elde edilen 3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzaldehid (144) ile reaksiyonları incelenerek 145 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiştir. Sentezlenen bileşiklerin 3 farklı yöntemle *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenmiş ve 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H protonu içerdiğinden dolayı 4 farklı susuz çözücünde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılarak yarı-nötralizasyon metodu ile yarı-nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan asitlik sabitleri tayin edilmiştir (Denklem 132 ve 133) [144].



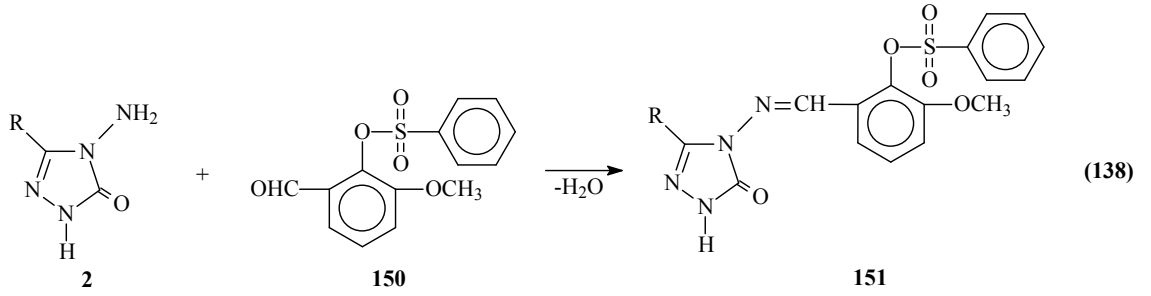
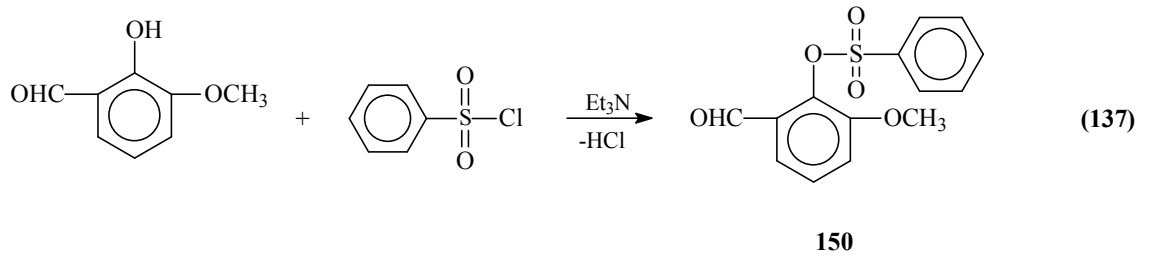
Yakın zamanda yapılan bir çalışmada *o*-toluoil klorürün trietilaminli ortamda etil asetat içinde soğukta 3-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden yeni bir aldehid olan 146 tipi 3-(2-metilbenzoksi)-benzaldehyd bileşiği ile 2 tipi bileşiklerin reaksiyonundan imin tipi heterosiklik bileşikler olan 147 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir. 147 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları yapılarak asitlik özellikleri ve antioksidan özellikleri incelenmiştir (Denklemler 133-134) [145].



o-Toluoil klorürün trietilaminli ortamda etil asetat içinde soğukta 3-etoksi-4-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden 148 tipi 3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzaldehyd bileşiği elde edilmiştir. Bu bileşiğin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan 149 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on imin tipi heterosiklik bileşikler sentezlenmiştir. Sentezlenen bileşiklerin antioksidan özellikleri incelenmiş ve asitlik incelemeleri yapılmıştır (Denklem 135 ve 136) [146].

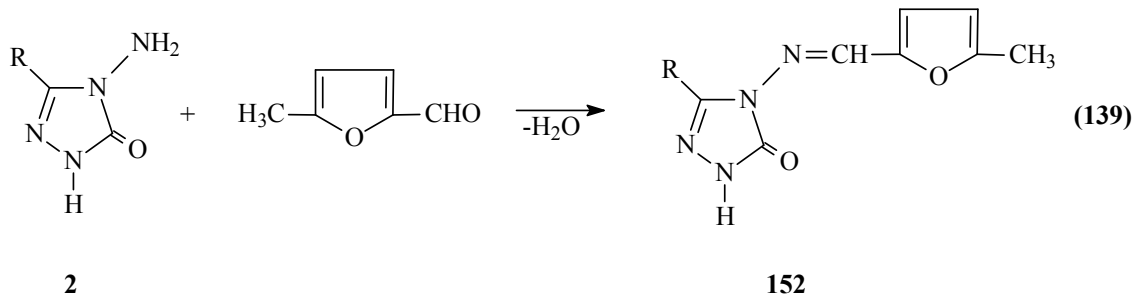


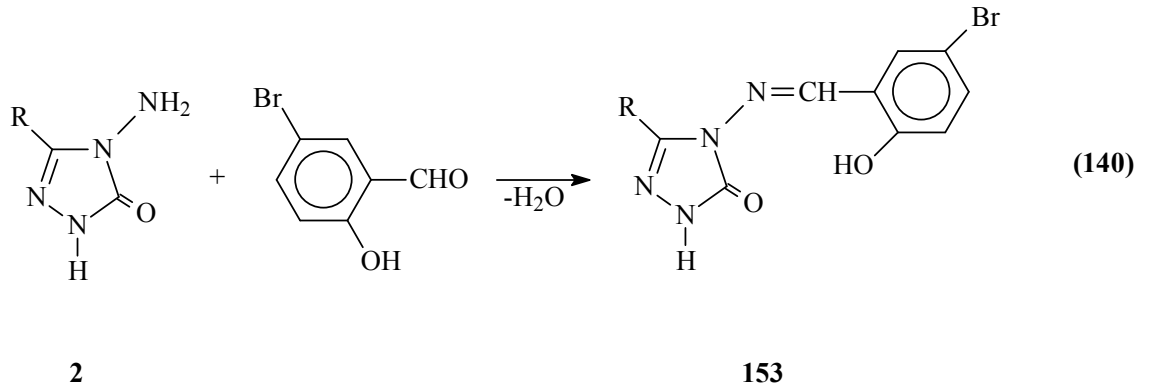
Son birkaç yılda yapılan farklı bir çalışmada, 2-hidroksi-3-metoksibenzaldehidin trietilamin varlığında soğukta benzensulfonil klorür ile reaksiyonundan sentezlenen ve bir benzaldehid türevi olan 2-benzensulfoniloksi-3-metoksibenzaldehid (150) ile 2 tipi bileşiklerin ayrı ayrı muamelesinden 151 tipi 3-alkil(aril)-4-(2-benzensulfoniloksi-3-metoksi)-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir. 151 tipi bileşiklerin potansiyometrik titrasyonları tetrabutylamonyum hidroksitle yapılmış ve yarı-nötralizasyon metodu ile yarı nötralizasyon potansiyelleri tayin edilmiş, titrasyon grafikleri çizilmiş ve her bir çözücüdeki asitlik sabitleri belirlenerek asitlik üzerine çözücü ve yapı etkileri incelenmiş ve *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenmiştir. (Denklem 137 ve 138) [147].



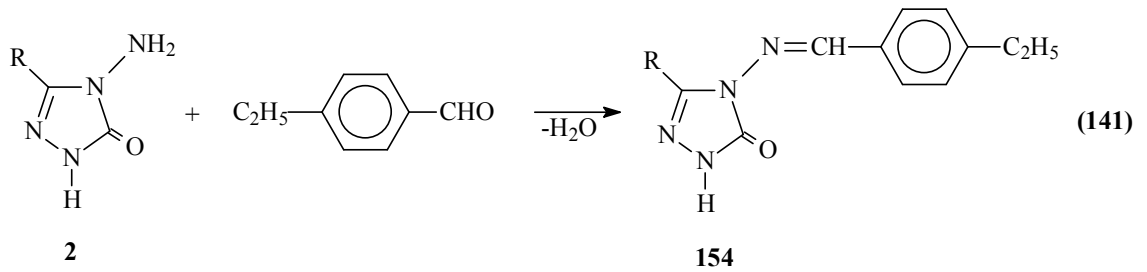
1.10. 4,5-Dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on Türevleri Üzerine Yapılan Teorik Çalışmalar

¹H- ve ¹³C-NMR spektrumlarının deneysel ve teorik olarak incelendiği iki farklı çalışma son yıllarda yapılmıştır. Çalışmalardan birinde 2 tipi bileşiklerin 5-metil-2-furfural ile muamelesinden 152 tipi 3-alkil(aril)-4-(5-metil-2-furilmetilenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri [148, 149], diğerinde ise 5-bromosalisilaldehid ile reaksiyonundan 153 tipi 3-alkil(aril)-4-(5-bromo-2-hidroksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve ¹H- ve ¹³C-NMR spektral değerleri deneysel ve teorik olarak incelenmiştir (Denklem 139 ve 140) [150, 151].



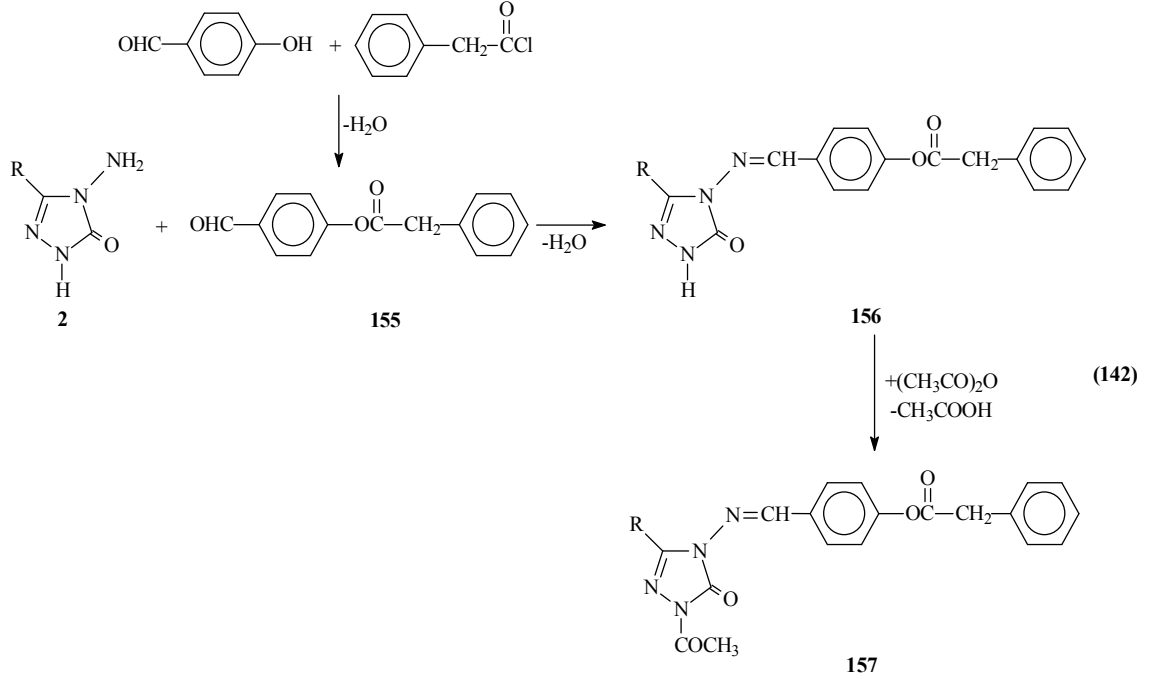


3-Alkil(Aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiklerinin 4-etilbenzaldehyd ile 3-alkil(aril)-4-(4-etilbenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (154) bileşiklerinin oluştuğu bir çalışma ile ortaya konmuştur (Denklem 141) [152, 153]. Bu çalışmada 154 tipi bileşiklerin asitlik ve antioksidan özellikleri incelenmiştir. Ayrıca, $^1\text{H-NMR}$ ve $^{13}\text{C-NMR}$ 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 [154, 155].

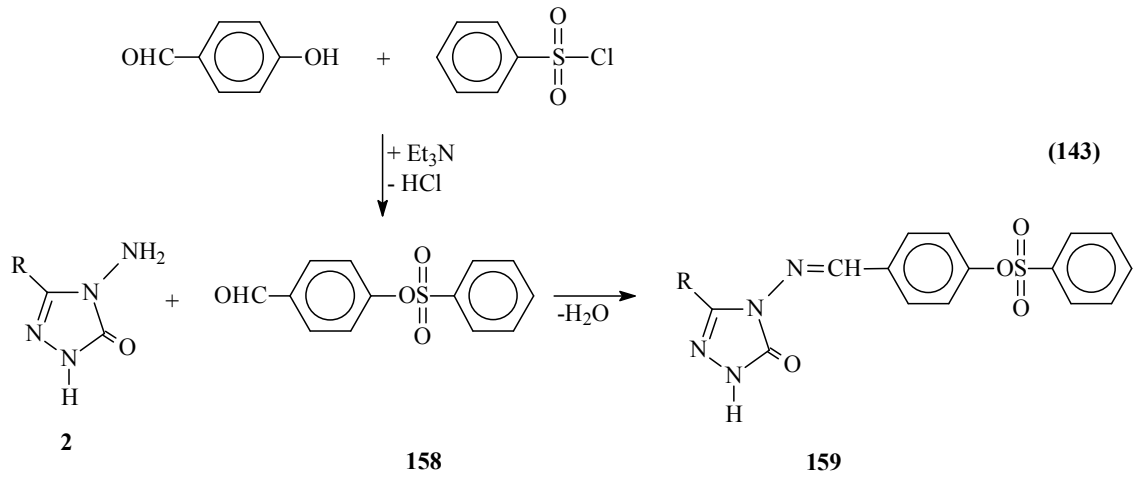


Yapılan farklı bir çalışmada ise, trietilamin varlığında 4-hidroksibenzaldehydin fenilasetil klorür ile muamelesinden elde edilen 155 tipi benzaldehyd türevinin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonundan elde edilen 156 tipi bileşikler ve elde edilen bu bileşiklerin asetik anhidrid ile muamelesinden 156 tipi *N*-asetil türevleri sentezlenmiş, yapıları aydınlatılmış ve *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenmiştir. 156 ve 157 tipi bileşiklerin *in-vitro* antioksidan özellikleri yanında 155 tipi bileşiklerin susuz ortam titrasyonları yapılarak asitlik sabitleri tayin edilmiştir (Denklem 142) [156-159]. Ayrıca, 156 tipi bileşiklerin $^1\text{H-NMR}$ ve $^{13}\text{C-NMR}$ ile infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri,

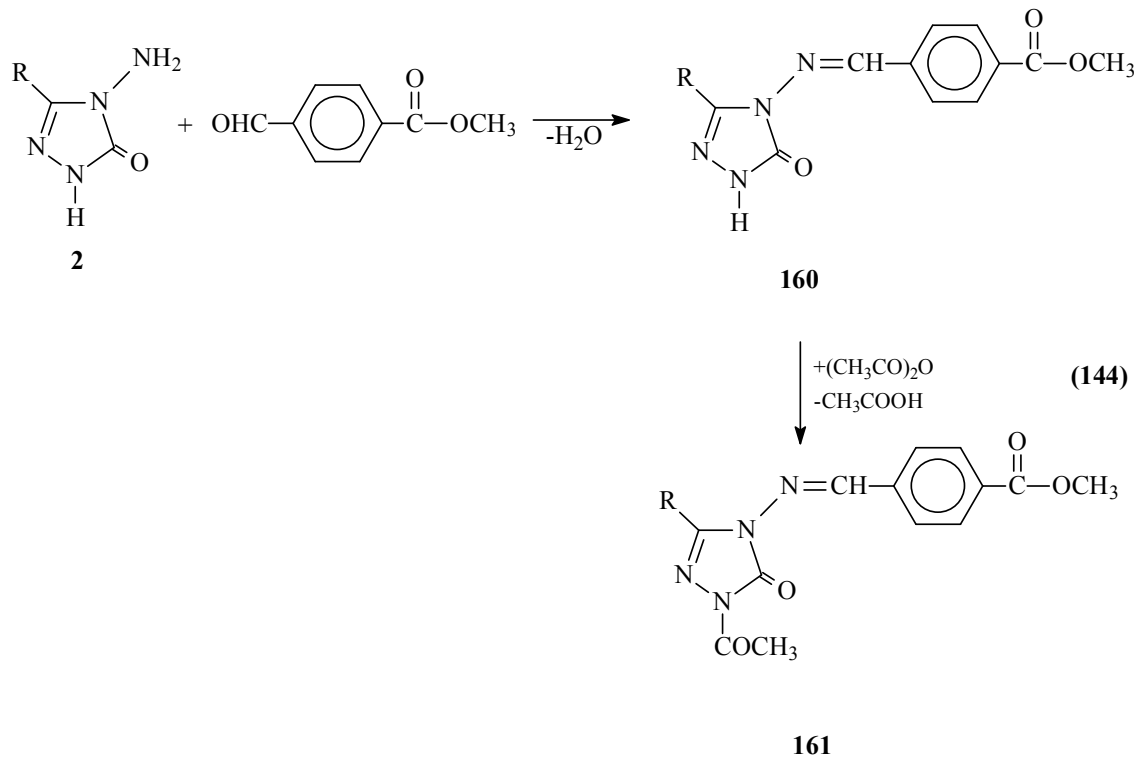
dipol momentleri ve enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı set kullanılarak son yıllarda incelenmiştir [154, 160].



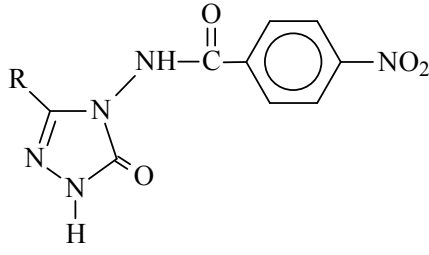
Benzensülfonil klorürün trietilamin varlığında 4-hidroksibenzaldehid ile buz banyosunda muamelesinden elde edilen 158 tipi benzaldehid türevinin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonu da son yıllarda incelenmiş ve 159 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-benzensulfoniloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol 5-on bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 143). Çalışmada ayrıca 159 tipi bileşiklerin farklı susuz çözücülerde potansiyometrik yöntemle pK_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 [106, 161-163]. Bunlardan başka, 159 tipi bileşiklerin 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 [154].



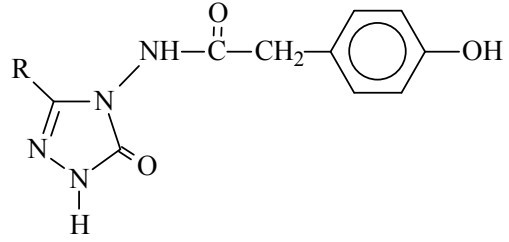
Son yıllarda yapılan bir çalışmada 2 tipi bileşiklerin metil 4-formil benzoat ile reaksiyonundan sentezlenen 160 tipi bileşikleri ve bunların asetik anhidrid ile muamelesinden *N*-asetil türevleri olan 161 tipi bileşikler sentezlenmiştir. Yapıları aydınlatılmış ve ¹H-NMR, ¹³C-NMR spektral verileri B3LYP metoduna göre çalışılmıştır (Denklem 144) [164-166].



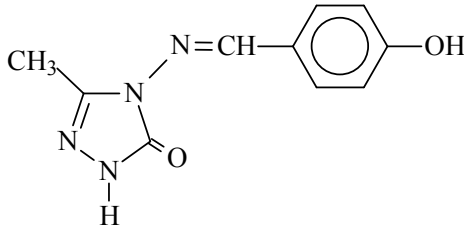
4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin teorik olarak incelenen GIAO ¹H-NMR ve ¹³C-NMR verileri 46 tipi bileşikler üzerinde çalışılmıştır. Ayrıca, IR frekans değerlerinin deneysel verilerle uyumu üzerinde az sayıda çalışma yapılmış olup bu çalışmalardan birinde 54 ve 63 tipi bileşiklerin diğerlerinde ise 60 (a) ve 60 (d) bileşiklerinin DFT ve HF yöntemleri ile titreşim frekansları hesaplanmış ve elde edilen veriler deneysel verilerle mukayese edilmiştir [92, 167-169].



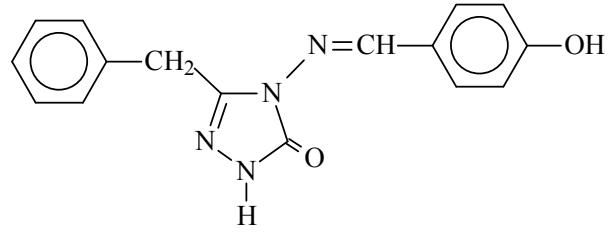
46



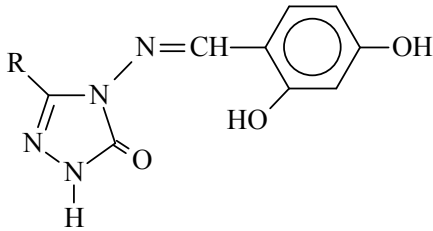
54



60 (a)



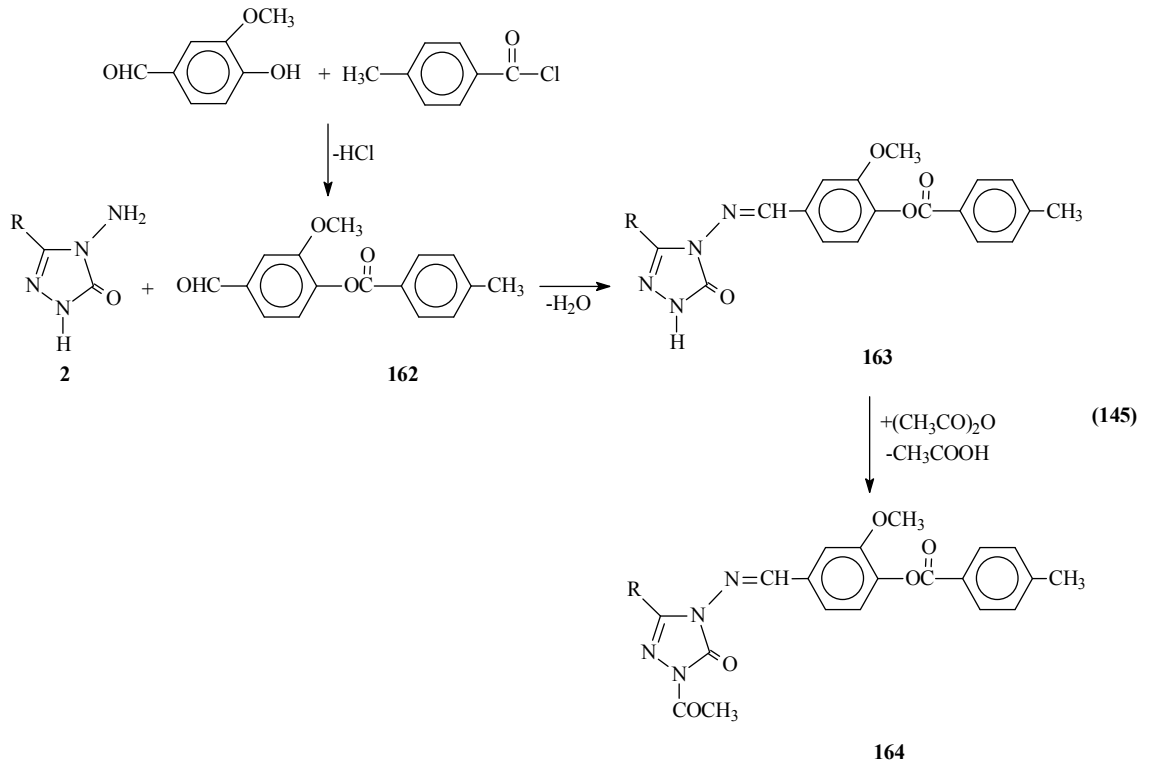
60 (d)



63

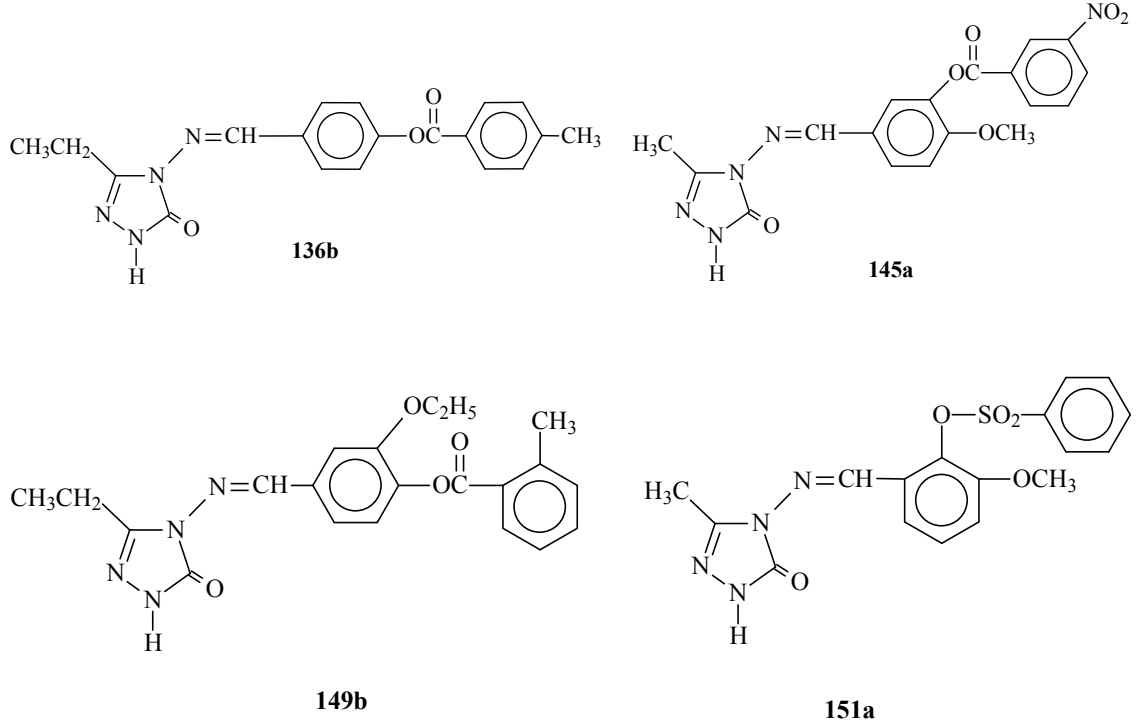
Son zamanlarda Yüksek ve çalışma arkadaşları tarafından 4-metilbenzoil klorürün trietilamin varlığında 3-metoksi-4-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden elde edilen 162 tipi 3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzaldehydin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonu sonucu 163 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve bu bileşiklerin asetik anhidrid

ile muamelesinden *N*-asetillendirme reaksiyonları incelenerek 164 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikler sentezlenmiştir. Sentezlenen bileşiklerin yapıları IR, Mikro-Raman, NMR ve UV-vis gibi spektroskopik yöntemler ile aydınlatılmıştır. Bu bileşiklerden bazılarının teorik olarak DFT/B3LYP temel set ile titreşim frekansları, HOMO-LUMO, moleküler elektrostatik potansiyeli ve doğal bağ orbital (NBO) hesaplamaları yapılmıştır (Denklem 145) [135, 170, 171].

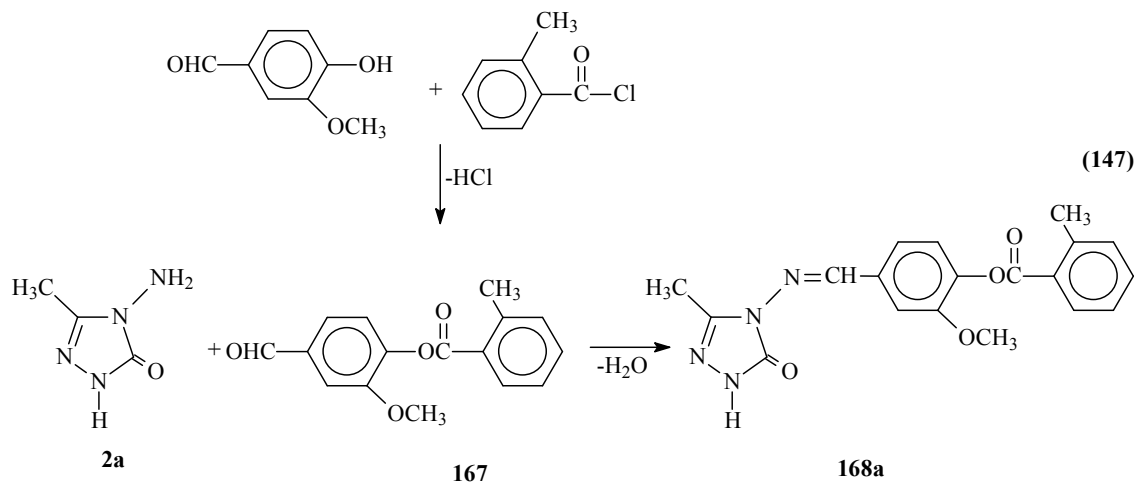
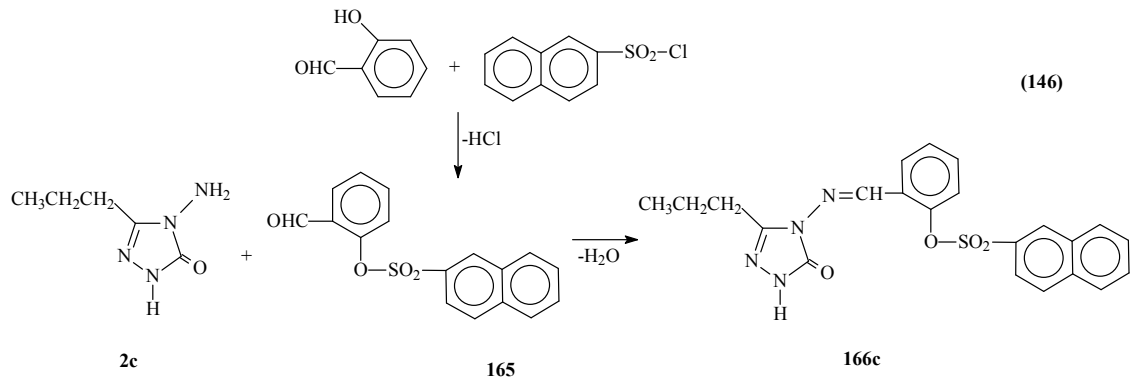
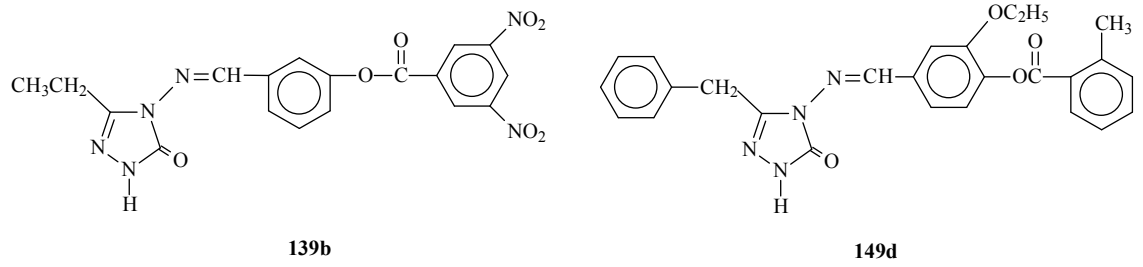


3-etil-4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (136b), 3-metil-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (145a), 3-etil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (149b) ve 3-metil-4-[2-(benzensulfoniloksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (151a) bileşiklerinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR ile infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ uzunlukları, bağ açıları, mulliken yükleri ve dipol momentleri ise teorik olarak bilgisayar ortamında iki farklı set kullanılarak incelenmiştir. İncelenen moleküllerin iki yöntemle IR absorpsiyon frekansları hesaplanmış ve her iki metoda göre elde edilen

veriler kullanılarak teorik infrared spektrumları oluşturulmuştur [140, 144, 146, 147, 172-175].

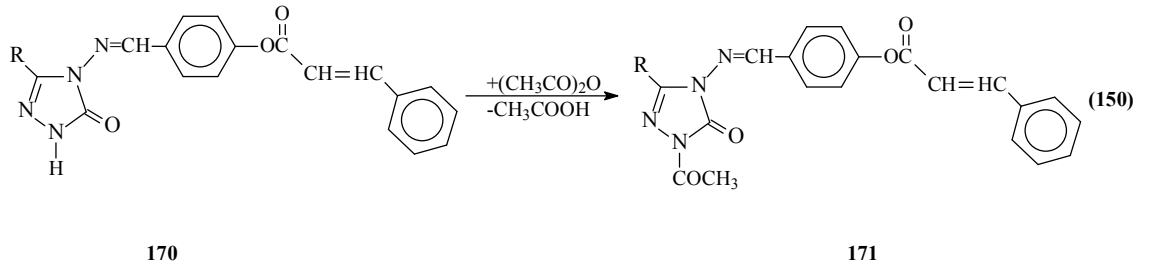
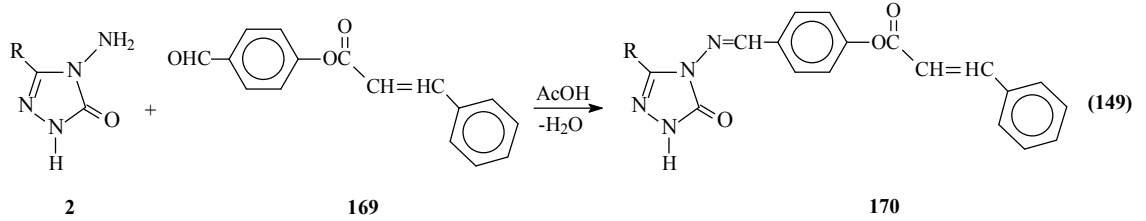
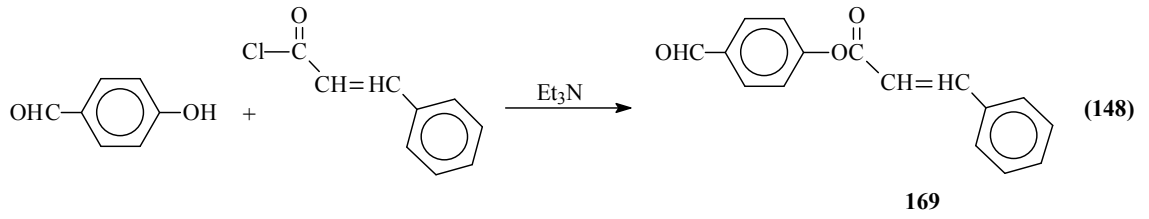


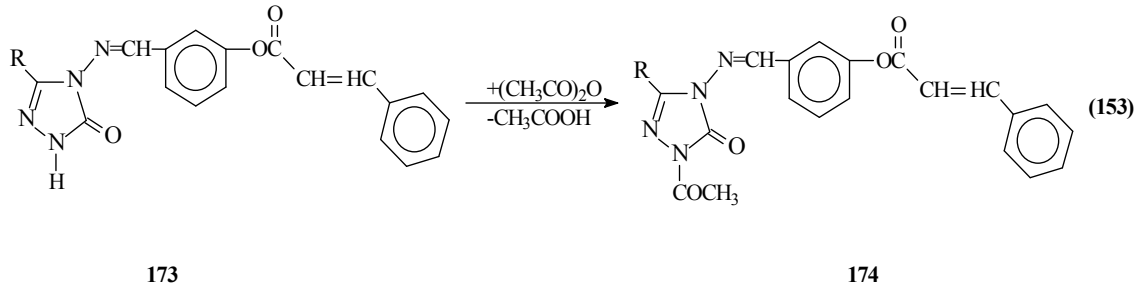
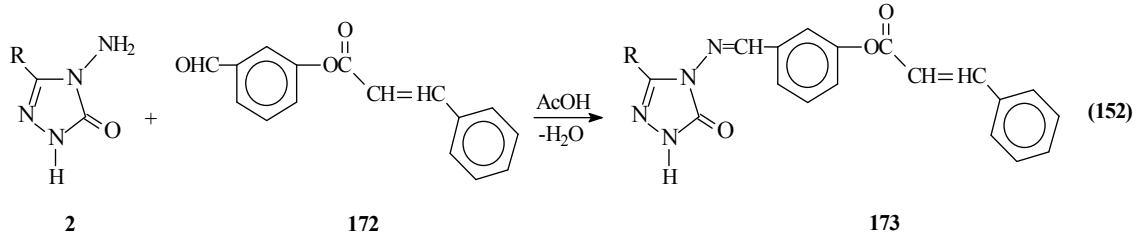
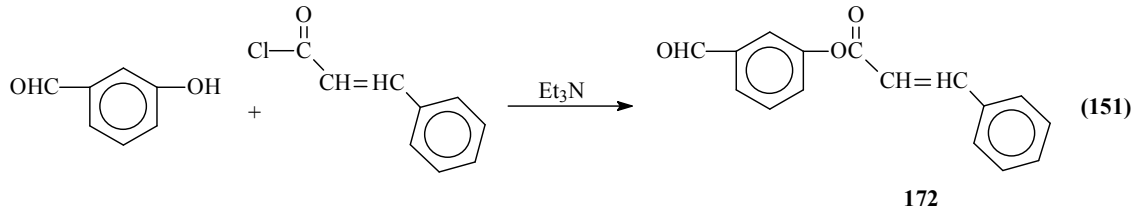
3-Etil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (139b) ve 3-benzil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (149d) bileşikleri ile 165 tipi 2-naftilsulfonyloksibenzaldehidin 2c bileşiği ile reaksiyonundan sentezlenen 3-*n*-propil-4-[2-(2-naftilsulfonyloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (166c) ve 3-metoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzaldehidle (167) 2a bileşiğinin muamelesinden sentezlenen 3-metil-4-[3-metoksi-4-(2-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (168a) bileşiklerinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR ile infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak mukayese edilmiştir. Ayrıca, her iki metoda göre bağ açıları, bağ uzunlukları, dipol momentleri, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri ve molekülün toplam enerjileri de hesaplanmıştır (Denklem 146 ve 147) [141, 146, 176-179].



Son birkaç yılda yapılan farklı bir çalışmada sinnamoil klorürün trietilamin varlığında 4-hidroksibenzaldehid ve 3-hidroksibenzaldehid ile muamelesinden elde edilen 169 ve 172 tipi 4-sinnamoiloksibenzaldehid ve 3-sinnamoiloksibenzaldehidin 2 tipi bileşiklerle reaksiyonu sonucu 170 tipi 3-alkil(aril)-4-(4-sinnamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 173 tipi 3-alkil(aril)-4-(3-sinnamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri elde edilmiş ve bu bileşiklerin asetik anhidrid ile muamelesinden 171 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-(4-sinnamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on ve 174

tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-(3-sinamoiloksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri sentezlenmiştir. Sentezlenen bileşiklerin yapıları IR, NMR ve UV-vis gibi spektroskopik yöntemler ile aydınlatılmış ve *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmiştir. 170 ve 173 tipi bileşiklerin 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on halkasında zayıf asidik N-H protonu içerdiğinden dolayı 4 farklı susuz çözücüde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılarak yarı-nötralizasyon metodu ile yarı-nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan asitlik sabitleri tayin edilmiştir. Ayrıca, sentezlenen bileşiklerin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR, infrared spektral verileri ile UV-Vis verileri deneysel ve teorik olarak mukayese edilmiştir. Ayrıca, teorik olarak HF/631G(d) ve DFT/631G(d) temel setleri ile bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, dipol momentleri HOMO-LUMO enerjileri ve molekülün toplam enerjileri hesaplanmıştır (Denklemler 148-153) [180,181].





1.11. Susuz Ortam Titrasyonları ve pK_a Tayini

1.11.1. Susuz Ortam Çözücülere

Saf su dışındaki diğer çözücüler içinde gerçekleşen reaksiyonlara susuz ortam reaksiyonları denir. Ancak, tam doğru olmamakla birlikte bazı çözücülerin suyla karıştırılmasıyla oluşan çözücülerdeki reaksiyonlara da susuz ortam reaksiyonları denilmektedir.

Bir reaksiyonun gerçekleşmesinde çözücü çok önemli bir rol oynar. Bir çözücü, sadece reaksiyona girecek maddeleri çözen, onların en küçük taneciklerinin çarpışmalarını sağlayan inert bir ortam değil, aksine çarpışan taneciklerin reaksiyona girmelerini kolaylaştıran bir vasıttır. Her maddeyi çözen ve adına universal çözücü denen bir

çözücü yıllardır aranmıştır. Bir çözücünün universal olmasında onun hidrojen bağı akseptörlüğünün veya donörlüğünün, ortaklanmamış elektron çifti donörlüğünün veya akseptörlüğünün, dipol momentinin, dielektrik sabitinin, kaynama ve donma noktasının, atmosfere karşı inertliğinin vs. büyük önemi vardır. Bu kriterler dikkate alındığında su universal olmaya en uygun çözücüdür. Ancak, ne yazık ki su universal değil, sadece eşsiz bir çözücüdür. Suyun çözücü olarak en olumsuz yanı organik maddelerin çoğunu çözmemesidir. Bu nedenle, suyun çözemediği maddelerin çözülmesi ve bazı özelliklerinin araştırılmasıyla susuz çözücülere ihtiyaç duyulmuş olup, genellikle bunlar organik çözücülerdir [182, 183].

Çok sayıda susuz çözücü olduğundan, suda çözünmeyen on binlerce organik madde bu çözücülerde çözülebilmüş ve titrasyonları mümkün olmuştur. Böylece organik maddeler hakkında çok yararlı bilgiler elde edilmiştir. Bu bilgiler arasında analitik bilgiler önemli bir yer tutar. Çünkü susuz ortamda gerçekleştirilen pek çok reaksiyon, sulu ortama benzer özellikler gösterir. Bu özelliklerin başlıcaları:

- Reaksiyonun hızlı olması,
- Reaksiyonun kantitatif denecek oranda sağa cereyan etmesi,
- Reaksiyonun tekrarlanabilmesi,
- Reaksiyonun stokiyometrik olması,
- Reaksiyonun dönüm noktasının tespit edilebilmesidir.

Susuz ortamlardaki kantitatif tayinlerde, sulu ortamlardaki gibi söz konusu maddelerin asitliğinden, bazlığınan, yükseltgenmesinden, indirgenmesinden, çökmesinden vs. yararlanılabilir.

İlk susuz ortam reaksiyonları 1910 yılında Folin ve Wenworth adlı bilim adamları tarafından gerçekleştirilmiştir. Bu bilim adamları, bazı yağ asitlerini kloroform karbontetraklorür çözücülerinde çözerek fenolftalein indikatörlüğünde sodyum etoksit ile titre etmişlerdir. Teorik ve pratik yönü büyük olan bu çalışma o sıralarda fazla ilgi görmemiş ve bu çalışmayı sadece birkaç çalışma takip etmiştir. 1948 yılında Hall ve arkadaşları tarafından zayıf asit olan ve suda titre edilemeyen fenol etilen diamin içinde

sodyum etoksit ile titre edilmiştir. Bu çalışmayı Fritz grubunun bu konudaki yoğun çalışmaları takip etmiş ve bilim dünyasının ilgisi bu alana kaymıştır. Bunun sonucunda da kısa bir sürede yüzlerce çalışma yapılmıştır.

Konu 1950'li yıllarda daha da önem kazanmıştır. Bunun nedenleri:

- Kimyasal bağlar üzerindeki çalışmaların artması,
- Instrumental metotların gelişmesi ve çoğalması,
- Atom pilleri ve roket yapımında çok saf metallere ihtiyaç duyulmasıdır.

Özellikle çok saf moleküllere ihtiyaç duyulması, bilim adamlarını susuz ortam çalışmalarına yöneltmiştir. Metal katyonları önce koordinasyon bileşikleri halinde çöktürülmüş, susuz çözücülerde kristallendirilerek saflaştırılmış, sonuçta atom pilleri ve roket yapımında kullanılacak saflıkta metaller elde edilmiştir. Böylece, koordinasyon kimyası ve susuz ortam reaksiyonları birlikte gelişmeye ve önem kazanmaya başlamıştır. Uzay çalışmaları nedeniyle ABD ve eski Sovyetler Birliği bu konuya fazlasıyla önem vermişlerdir [182].

1.11.2. Potansiyometri

Potansiyometrik titrasyonlar genellikle çok zayıf asit ve bazları, bazen de asit ve baz karışımlarını titre etmek için kullanılır [184]. Potansiyometrik analiz yöntemleri, elektrokimyasal hücrelerde fark edilebilir bir akım geçmezken yapılan potansiyel ölçümlerine dayanan yöntemlerdir. 20. yüzyılın başından beri potansiyometrik teknikler, titrimetrik analiz yöntemlerinde dönüm noktasının belirlenmesinde kullanılır. Titrimetrik analizler yüksek hassasiyetle yapılabilmesi, kolay ve kullanışlı olması nedeniyle hala geniş ölçüde kullanılmaktadır [182]. Potansiyometrik metodlarla yapılan tayinler genellikle iki gruba ayrılır: Direkt potansiyometrik titrasyonlar ve potansiyometrik titrasyonlar.

1.11.3. Direkt Potansiyometrik Titrasyonlar

Direkt potansiyometrik tayinler hızla gerçekleştirilen basit bir analiz şeklidir. Herhangi bir ön ayırmayı gerektirmez. Direkt potansiyometrik metotla, dengede bulunan çözeltilerde iyon aktiviteleri tayin edilir. Bu amaçla tayini yapılacak çözeltilere bir referans elektrot, bir de indikatör elektrot daldırılır. Bu elektrotlar arasındaki E_g , gözletlenen potansiyel farkı,

$$E_g = E_r - E_i + E_s \quad (154) \text{ olur.}$$

E_s , sınır potansiyeli olup, referans elektrot çözeltisiyle, tayini yapılacak çözeltinin sınır yüzeyleri arasında meydana gelir. E_r , referans elektrodun potansiyelidir ve sabittir. E_i ise indikatör elektrodun potansiyelidir [184].

1.11.4. Potansiyometrik Titrasyonlar

Potansiyometrik titrasyon, ayıracın her ilavesinden sonra potansiyel ölçülmesi üzerine kurulmuştur. Mekanik bir karıştırıcıyla iyice karıştırılan çözeltilere prensip olarak ayıraç başlangıçta fazla fazla ilave edilir ve dönüm noktasına doğru yavaş yavaş azaltılır. Dönüm noktasına yaklaşıldığı, her ilaveden sonra ölçülen potansiyelin değişme miktarından anlaşılır. Dönüm noktasını kesin olarak bulabilmek için titrasyona dönüm noktasının ötesinde de daha bir süre devam edilir. Titrasyon hangi reaksiyona dayanırsa dayansın, ayıraç özellikle dönüm noktası yakınında azar azar ilave edilir ve ölçümler birkaç defa tekrar edilir. Çözelti veya karışım her ölçüden sonra iyice karıştırılır. Ayıracın sarf edilen mL sayısına karşılık kalomel elektroda karşı bulunan potansiyel farkları milimetrik bir kağıda çizilirse S eğrisi elde edilir [184].

1.11.5. Yarı Nötralizasyon Metodu ile pK_a Tayini

Titrasyonlar sonucunda titrant hacmine karşılık olan pH ve mV değerleri okunarak bu değerlere göre titrasyon grafiği çizilmiştir. Çizilen grafiklerden dönüm noktaları bulunmuştur. Dönüm noktaları ilâve edilen titrant hacmine (mL) karşılık mV değerindeki en büyük sıçramanın olduğu noktalardır. Bu değerlerden de yarı nötralizasyon noktaları belirlenmiştir. Zayıf asit ve bazların yarı nötralizasyon noktalarındaki pK_a değerleri pH değerlerine eşit olduğu için pH değerleri pK_a değerleri olarak alınmıştır. Zayıf asit ve onun tuzu bir tampon çözelti oluşturur. Tampon çözeltide:

$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]} \quad (155)$$

eşitliğinden yarı nötralizasyonda, $[A^-] = [HA]$ olduğundan $pH = pK_a$ elde edilir (Denklem 155) [185, 186].

1.11.6. 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevleri ile İlgili Susuz Ortam Titrasyonları

4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin susuz ortamda potansiyometrik olarak TBAH ile titrasyonu ve pK_a değerlerinin tayini ile ilgili ilk çalışmalar 1991 yılında yapılmış olup iki farklı çalışmada çözücü olarak izopropil alkol kullanılmıştır [187, 188].

1994 yılında yapılan bir diğer çalışmada ise iki adet 1,2,4-triazol-5-on türevinin beş farklı susuz çözücüde TBAH ile potansiyometrik olarak titrasyonları incelendiği bildirilmiştir [189].

Özellikle 2002 yılından sonra yapılan birçok çalışmada yeni sentezlenen 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin farklı susuz çözücülerde hazırlanan çözeltilerinin

TBAH ile potansiyometrik olarak titrasyonları yapılmış, titrasyon grafikleri çizilmiş ve yarı nötralizasyon metodu ile pK_a değerleri tayin edilerek asitlik üzerine çözücü ve molekül yapısının etkisi (4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasındaki C-1'e bağlı substituentlerin asitliğe etkisi) incelenmiştir.

1.12. Serbest Radikaller ve Antioksidanlar

Atom veya moleküllerdeki elektronlar çekirdeğin etrafında orbital olarak tanımlanan bölgelerde hareket ederler. Her orbitalde birbirine zıt yönde hareket eden en fazla iki elektron bulunur. Bir atom veya molekül dış orbitallerinde bir veya daha fazla ortaklanmamış (eşleşmemiş) elektron bulunduruyorsa “serbest radikal (SR)” olarak tanımlanır. Bu tip moleküller, ortaklanmamış elektronlarından dolayı oldukça reaktiftirler [190, 191]. En basit serbest radikal bir elektron ve bir protonu olan hidrojen atomudur. Serbest radikallerde eşleşmemiş elektron, atom veya molekülün üst kısmına konulan bir nokta ile belirtilir [190].

Çeşitli fiziksel etkenler ve kimyasal olaylar nedeniyle çevrede ve hücrel koşullarda devamlı bir radikal oluşumu vardır. Serbest radikaller üç temel yolla oluşur [190, 192, 193].

a) Kovalent Bağların Homolitik Bölünmesi İle: Kovalent bağın kopması sırasında bağ yapısındaki iki elektronun her biri ayrı ayrı atomlar üzerinde kalır.



b) Normal Bir Molekülün Elektron Kaybetmesi İle: Radikal özelliği bulunmayan bir molekülden elektron kaybı sırasında dış orbitalinde eşleşmemiş elektron kalıyorsa radikal formu oluşur. Örneğin, tokoferol ve askorbik asit gibi hücrel antioksidanlar, radikal türlere tek elektron verip radikalleri indirgerken, kendilerinin radikal formu oluşur.

c) Normal Bir Moleküle Tek Bir Elektron Transferi İle: Radikal özelliği göstermeyen bir moleküle tek elektron transferi ile dış orbitalinde eşleşmemiş elektron oluşuyorsa bu tür indirgenme radikal oluşumuna neden olabilir. Örneğin, moleküler oksijenin tek elektron ile indirgenmesi, radikal formu olan süperoksidi meydana getirir.



Biyolojik sistemlerde serbest radikaller en fazla elektron transferi sonucu oluşurlar. Serbest radikaller pozitif yüklü, negatif yüklü veya nötral olabilirler. Biyolojik sistemlerde en önemli radikaller, serbest oksijen radikalleri (SOR) olmakla beraber; C, N, S türevi olan radikaller ve inorganik moleküller de vardır. Cu^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} , Mo^{5+} gibi geçiş metallerinin de ortaklanmamış elektronları olduğu halde serbest radikal olarak kabul edilmezler. Fakat bu iyonlar reaksiyonları katalizledikleri için serbest radikal oluşumunda önemli rol oynarlar [190, 192].

Reaktif oksijen türleri (ROT) oluşumu ve bunların meydana getirdiği hasarı önlemek için vücutta birçok savunma mekanizmaları vardır. Bu mekanizmalar “antioksidan savunma sistemleri” veya kısaca “antioksidanlar” olarak bilinirler. Antioksidanlar serbest radikalleri nötralize etmek için karşılıklı etkileşim halinde olan endergonik ve ekzergonik kaynaklı, çok çeşitli bileşiklerdir. Bu bileşikler gıda kökenli antioksidanlar (C vitamini, E vitamini, karotenoidler, lipoik asit gibi), antioksidan enzimler (SOD, glutatyon peroksidaz, glutatyon redüktaz gibi), metal bağlayıcı proteinler (ferritin, albümin, laktoferrin, seruloplasmin gibi) ve bitkilerde yaygın şekilde bulunan çeşitli antioksidan fitonutrientlerdir [190].

“Antioksidan” terimi uluslararası kabul edilmiş herhangi bir tanım ile sınırlandırılmamıştır. Gıdalardaki antioksidanlar “yağlar gibi kolaylıkla okside olabilen materyallerin oksidasyonunu önleyebilen veya geciktirebilen küçük miktardaki maddeler” olarak tanımlanmıştır. Lipidlerin yanı sıra protein, DNA ve karbohidrat gibi okside olabilen diğer tüm bileşikleri de içeren diğer bir tanım “okside olabilen substratlara kıyasla düşük konsantrasyonlarda bulunan ve substratların oksidasyonunu önleyen veya geciktiren maddeler” şeklindedir [190, 194].

1.12.1. Oksijen ve Reaktif Oksijen Türleri (ROT)

Moleküler oksijen (O_2), iki kovalent bağ yapmasına rağmen, molekülün paramanyetik özellikte olması eşleşmemiş elektron içerdiğini gösterir. Dış orbitallerinde bulunan iki elektron, spinleri aynı yönde ve farklı orbitallerde iken molekül minimum enerji seviyesindedir [190, 195]. Serbest radikal tanımına göre oksijen bir “diradikal” olarak değerlendirilir. Diradikal oksijen, spin kısıtlanmasından dolayı radikal olmayan maddelerle yavaş reaksiyona girmesine rağmen, diğer serbest radikaller ile kolaylıkla reaksiyona girer [190, 192, 196].

Oksijen bulunan bir ortamda fiziksel ve kimyasal etkenlerle, zorunlu metabolik reaksiyonlar sonucu oksijen radikalleri üretilir. Oksijen radikalleri biyolojik sistemlerde bulunan en önemli serbest radikallerdir. Bunlar arasında süperoksit radikali ($O_2^{\cdot-}$), hidroksil radikali ($\cdot OH$) ve radikal olmayan hidrojen peroksidin (H_2O_2) özel yerleri vardır ve “reaktif oksijen türleri (ROT)” olarak bilinirler [190].

Reaktif oksijen türleri, çeşitli serbest radikallerin oluştuğu serbest radikal zincir reaksiyonlarını başlatabilirler ve hücrede karbon merkezli organik radikaller (R^{\cdot}), peroksil (peroksi) radikalleri (ROO^{\cdot}), alkoksil (alkoksi) radikalleri (RO^{\cdot}), tiyil radikalleri (RS^{\cdot}) gibi önemli serbest radikallerin oluşumuna neden olurlar. Tiyil radikalleri oksijenle tekrar reaksiyona girip sülfenil (RSO^{\cdot}) veya tiyil peroksil (RSO_2^{\cdot}) gibi radikalleri de oluşturabilirler [190, 192, 196].

Reaktivite radikale ve ortamda bulunan moleküle bağlıdır. İki serbest radikal karşılaştığında eşleşmemiş elektronları kovalent bağ yaparak birleşir. Ancak bunun sonucunda oluşan türler de reaktif olabilir. Buna örnek olarak NO^{\cdot} ve $O_2^{\cdot-}$ 'in çok hızlı reaksiyonu ile bir nonradikal ürün olan peroksinitritin oluşumu verilebilir [190]:



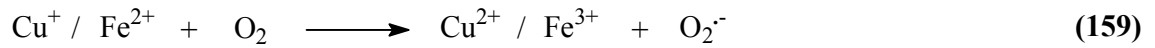
Bununla birlikte bir serbest radikal, radikal olmayan bir madde ile reaksiyona girerek yeni bir radikal oluşturabilir. Biyolojik moleküllerin büyük bir kısmı radikal olmadığı

için, *in vivo* şartlarda reaktif bir radikalin oluşumu, genellikle zincir reaksiyonunun başlamasına yol açabilir [190, 197].

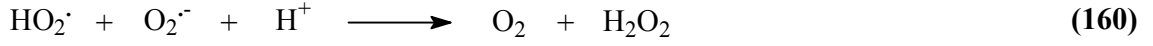
1.12.1.1. Süperoksit Radikali ($O_2^{\cdot-}$)

Hemen tüm aerobik hücrelerde oksijenin bir elektron alarak indirgenmesi sonucu süperoksit radikali oluşur. Başlıca şu yollarla üretilmektedir [190, 191, 198]

1. Katekolaminler, hidrokinoonlar, redükte flavinler, tiyoller, tetrahidrofolatlar gibi biyolojik moleküllerin aerobik ortamda otooksidasyonu sonucu süperoksit meydana gelir.
2. Aktive olmuş fagositik hücreler (nötrofiller, monositler, makrofajlar, eozinofiller), virüs veya bakteriyi inaktive etmek için bol miktarda süperoksit üretirler.
3. Mitokondriyal enerji metabolizması sırasında oluşan elektron sızıntısı sonucu kullanılan oksijenin % 1-3'ü süperoksit radikali yapımı ile sonlanır.
4. İndirgenmiş geçiş metallerinin otooksidasyonu süperoksidi oluşturabilir.



Süperoksit radikalinin önemi H_2O_2 kaynağı ve geçiş metal iyonlarının indirgeyicisi olmasıdır. Ayrıca hücrel koşullarda üretilen süperoksit hem oksitleyici hem de indirgeyici olarak davranabilir. Örneğin; ferrisitokrom c ile reaksiyonunda indirgeyici olarak davranarak bir elektron kaybeder ve oksijene dönüşür. Epinefrin oksidasyonunda ise oksidan olarak davranarak bir elektron alır ve H_2O_2 'ye indirgenir [190, 192]. Süperoksit radikali düşük pH değerlerinde daha reaktiftir ve oksidan olan perhidroksil radikali (HO_2^{\cdot}) oluşturmak üzere protonlanır. Süperoksit radikali ve perhidroksi radikali birbiriyle reaksiyona girince biri yükseltgenir, diğeri indirgenir. Bu dismutasyon reaksiyonu sonucu H_2O_2 oluşur [190].



1.12.1.2. Hidrojen Peroksit (H₂O₂)

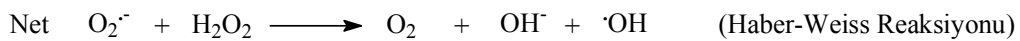
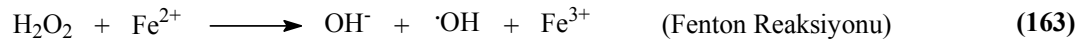
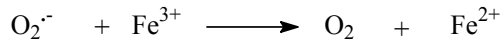
Moleküler oksijenin çevresindeki moleküllerden iki elektron alması veya süperoksidin bir elektron alması sonucu H₂O₂ meydana gelir [190].



Yapısında eşleşmemiş elektron içermediği için radikal değildir. Ancak biyolojik membranları geçerek hücrelerin arasına veya içine kolayca difüze olabilir ve uzun ömürlü bir oksidandır [190, 191, 198].

H₂O₂ bir radikal olmadığı halde, ROT içine girer ve serbest radikal biyokimyasında önemli rol oynar. Çünkü geçiş metal iyonları varlığında Fenton reaksiyonu sonucu; süperoksit radikali varlığında Haber-Weiss reaksiyonu sonucu en reaktif ve daha çok hasar verici olan hidroksil radikaline dönüşür [190, 199].

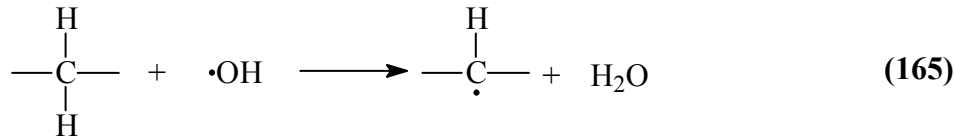
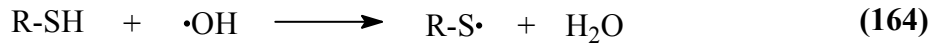
Haber-Weiss reaksiyonu süperoksidin direkt olarak H₂O₂ ile reaksiyonudur, katalizörsüz reaksiyon oldukça yavaş ilerler. Demirle katalizlenen ikinci şekli ise çok hızlıdır. Bu reaksiyonda önce ferri demir (Fe³⁺) süperoksit tarafından ferro demire (Fe²⁺) indirgenir. Sonra Fenton reaksiyonu ile H₂O₂'den ·OH ve ⁻OH üretilir. Reaksiyon mekanizması aşağıdaki şekildedir [190]:



1.12.1.3. Hidroksil Radikali ($\cdot\text{OH}$)

Hidroksil radikali geçiş metalleri varlığında H_2O_2 'nin indirgenmesiyle (Fenton reaksiyonu) oluşur. Suyun yüksek enerjili iyonlaştırıcı radyasyona maruz kalması sonucu da oluşur [190].

Biyolojik sistemlerdeki en reaktif ve hasar verici radikal türüdür. Yarılanma ömrü çok kısa olmasına rağmen ortamda rastladığı her biyomolekülle tepkimeye girer ve olduğu yerde büyük hasara neden olur [190, 191, 192]. Tiyoller ve yağ asitleri gibi molekülerden bir proton kopararak tiyil radikalleri ($\text{RS}\cdot$), C merkezli organik radikaller ($\text{R}\cdot$), organik peroksitler ($\text{RCOO}\cdot$) gibi yeni radikallerin oluşmasına sebep olur [190].



Her tür biyolojik molekülle reaksiyona girse de özellikle elektronca zengin bileşikler tercihli hedefleridir. Nükleik asitler (pürin ve pirimidin bazları) ve proteinler (aromatik amino asitler) ile çeşitli radikalik tepkimeler verir [190].

1.12.1.4. Singlet Oksijen ($\text{O}_2^{\uparrow\downarrow}$)

Moleküler oksijenin elektronlarından birinin enerji alarak kendi spininin ters yönünde olan başka bir orbitale yer değiştirmesiyle singlet oksijen oluşur. Singlet oksijen ortaklanmamış elektronu olmadığı için radikal değildir. Oksijenin ortaklanmamış elektronları paralel spinli olduğundan oksijendeki spin kısıtlaması singlet oksijende yoktur ve oldukça reaktif bir oksijen bileşiğidir [190, 192, 196]. Delta ve sigma olmak üzere iki şekli vardır. Delta şekli daha düşük enerjili (92 kJ) olduğundan sigma şekline (155 kJ) göre daha uzun yarıömürlüdür [190, 200].

Vücutta, pigmentlerin (flavin içeren nükleotidler, retinal, bilirubin) oksijenli ortamda ışığı absorblamasıyla, $O_2^{\cdot-}$ 'nin dismutasyon tepkimesi sırasında, porfiryaya gibi porfirin metabolizması hastalıklarında oluşabilir [190, 191].

1.12.1.5. Hipoklorik Asit (HOCl)

Doku makrofajları gibi fagositik hücreler, nötrofil, eozinofil gibi granüositler mikroorganizmaları öldürmek için klorlanmış oksidanlar üretebilir [190, 201, 202]. HOCl miyeloperoksidaz enzimi tarafından H_2O_2 ve Cl^- iyonunun birleşmesi sonucu oluşur. Dokularda hasar oluşturan güçlü bir oksidandır.

1.12.1.6. Nitrik Oksit (NO)

NO hem fizyolojik hem patofizyolojik süreçlerde önemli bir role sahip serbest radikaldir. Nitrik oksit çeşitli reseptörlerin aktivasyonu sonucu L-arginin ve oksijenden nitrik oksit sentaz (NOS) etkisiyle sentezlenir. Vasküler endotelial hücrelerde oluşturulan önemli bir vazodilatördür, önemli bir nörotransmitterdir, inflamasyon ve enfeksiyon durumlarında sitokinler ve endotoksinler tarafından indüklenerek bol miktarda üretilir ve parazitlerin öldürülmesinde rol oynar [190, 198, 201].

1.12.2. Serbest Radikallerin Etkileri

Güçlü reaktif özelliğe sahip olan serbest radikaller tüm hücre bileşenleriyle kolayca etkileşebilirler. Hücrenin savunma mekanizmaları ile ortadan kaldırılmazlarsa, biyolojik moleküllerle reaksiyona girerek yeni serbest radikallerin olduğu zincirleme bir reaksiyon başlatır [190].

1.12.2.1. Serbest Radikallerin Lipidlere Etkileri

Lipidler serbest radikallerin etkilerine karşı en hassas olan biyomoleküllerdir. Hücre membranlarındaki ve gıdalardaki kolesterol ve yağ asitleri serbest radikallerle kolayca reaksiyona girerek peroksidasyon ürünleri oluştururlar. Çoklu doymamış yağ asitlerinin serbest radikaller etkisi ile oksidatif yıkımı “nonenzimatik lipid peroksidasyonu” olarak bilinir ve zincir reaksiyonu şeklinde ilerler [190, 191].

1.12.2.2. Serbest Radikallerin Proteinlere Etkileri

Proteinler serbest radikallere karşı çoklu doymamış yağ asitlerinden daha az hassastır. Ancak proteinin aminoasit içeriğine göre radikalik hasardan etkilenme derecesi değişir. Triptofan, tirozin, fenilalanin, histidin gibi doymamış bağ içeren ve metiyonin, sistein gibi kükürt bulunduran aminoasitlere sahip proteinler serbest radikallerden kolaylıkla etkilenir [190, 203]. Bunun sonucunda karbon merkezli organik radikaller ve sülfür radikalleri oluşur. Bu reaksiyonlar sonucu albümin ve immunoglobulin G (IgG) gibi fazla sayıda disülfid bağı bulunduran proteinlerin tersiyer yapısı bozulur. Hemoglobinin ferro demiri (Fe^{+2}) süperoksit ve diğer oksitleyici ajanlarla oksitlenmeye duyarlı olup, bunun sonucunda oksijen taşımayan methemoglobin oluşur [190, 201].

1.12.2.3. Serbest Radikallerin Nükleik Asitlere ve DNA'ya Etkileri

DNA serbest radikallerden kolay etkilenen bir hedeftir. İyonize edici radyasyonla oluşan radikaller, DNA'yı etkileyerek hücre mutasyonuna ve ölümüne yol açabilirler. Aktive olmuş nötrofillerden salınan H_2O_2 membranlardan kolayca geçebildiği için hücre çekirdeğine kadar ulaşır. Burada oluşan hidroksil radikali dört DNA bazıyla kolayca reaksiyona girerek baz modifikasyonlarına neden olur [190, 198]. DNA hasarı onarılmazsa hücre disfonksiyonuna ve hatta hücre ölümüne yol açabilir [190].

1.12.2.4. Serbest Radikallerin Karbohidratlara Etkisi

Serbest radikallerin karbohidratlar üzerinde polisakkarit depolimerizasyonu ve özellikle monosakkarit otooksidasyonu gibi etkileri vardır. Monosakkaritlerin otooksidasyonu ile meydana gelen süperoksitler ve okzalaldehyitler diyabet ve sigara içimi ile ilgili patolojik olaylarda rol oynar. Okzaldehyitler ayrıca DNA, RNA ve proteinlere bağlanabilme özelliklerinden dolayı antimitotik etki gösterirler. Bu nedenle kanser ve yaşlanma olaylarında da rol oynarlar [190].

Bağ dokunun önemli bir mukopolisakkaridi olan hiyalüronik asit sinoviyal sıvıda bol miktarda bulunmaktadır. Romatoit artrit gibi enflamatuvar eklem hastalıklarında hiyalüronik asidin oluşan serbest radikal tarafından parçalandığı gösterilmiştir [190, 204, 205].

1.12.3. Antioksidanların Sınıflandırılması

Antioksidanların sınıflandırılması çeşitlilik göstermektedir. Doğal (endojen kaynaklı) ve eksojen kaynaklı antioksidanlar olarak sınıflandırılabilirdiği [193] gibi enzim ve enzim olmayan antioksidanlar [190, 206] şeklinde sınıflandırmalar da mevcuttur. Vücudumuzdaki antioksidan savunma sisteminde yer alan başlıca elemanlar ise; enzimler, metal iyonlarını bağlayan proteinler ve suda ve yağda çözünen radikal tutucularıdır [190, 198, 207].

1.12.4. Antioksidan Aktivite Tayin Metodları

Son zamanlarda toplam antioksidan kapasite veya toplam antioksidan aktiviteyi ölçmek için birkaç metod geliştirilmiştir. Trolox ekivalenti antioksidan kapasite (TEAC), toplam radikal tutma parametresi (TRAP), demir (III) iyonu indirgeme gücü (FRAP) ve oksijen radikalini absorblama kapasitesi (ORAC) bunlardan bazılarıdır [190].

Bu metodlar substrat, prob, reaksiyon şartları ve antioksidan etkinin hesaplanma şekline göre birbirinden farklıdır. Bu yüzden farklı metodlardan alınan sonuçları karşılaştırmak son derece zordur [190, 208].

Bu metodlar kimyasal reaksiyonlarına göre başlıca iki gruba ayrılırlar [190]:

Hidrojen atomu transferine (HAT) dayanan metodlar ve bir tek elektron transferine (ET) dayanan metodlar. HAT- ve ET-temelli metodlar örneğin koruyucu antioksidan kapasitesi yerine radikal veya oksidan giderici kapasitesini ölçmeyi hedefler. Basit “lipidsiz” sistemlerde; antioksidandan serbest radikal molekülüne elektron transferi veya H^+ verilmesinin direk ölçümü yapılır. Bu metodlar ticari kit halinde de olup, yaygın şekilde kullanılırlar [190].

1.12.4.1. HAT-Temelli Metodlar

ORAC, TRAP gibi HAT-temelli metodlarda peroksil radikali (ROO \cdot) oluşturmak üzere bir radikal başlatıcı kullanılır. Eklenen antioksidan radikaller için ortamdaki substrat ile yarışır. ROO \cdot tercihen antioksidandan bir hidrojen atomu alır. Sonuçta ROO \cdot ve hedef molekül arasındaki reaksiyon inhibe edilir veya geciktirilir [190, 209, 210].

1. ORAC (Oksijen Radikalini Absorblama Kapasitesi) Metodu: Çeşitli ekstraktlar ve fitokimyasalların antioksidan aktivitesini ölçmek için kullanılır. Metodun ilk halinde prob olarak floresan bir protein olan β -fikoeritrin (β -PE) ile ve peroksil radikal başlatıcısı olarak AAPH (2,2'-azobis(2-amidinopropan)dihidroklorit) bileşiği ile çalışılmıştır. Ancak β -PE'nin fotostabil olmaması, polifenolik maddelerle etkileşimi ve radikal başlatıcı eklenmediğinde bile fluoresansının azalması dezavantajlarıyla karşılaşmış ve sonraları ORAC metodu, prob olarak β -PE yerine floressein kullanılarak geliştirilmiştir. Floressein (FL, 3',6'-dihidroksispiro [izobenzofuran-1[3H], 9'[9H]-ksanten]-3-on) protein olmayan sentetik bir probdur [190, 194].

Bu metotta radikal başlatıcı olan AAPH, floressein veya β -PE'nin fluoresansında azalmaya neden olur. Reaksiyon ilerledikçe floressein veya β -PE tüketilir. Antioksidan varlığında AAPH radikalleri giderilir ve fluoresans azalması inhibe edilir [190, 211].

2. TRAP (Toplam Radikal Tuzaklayıcı Antioksidan Parametre) Metodu: Plazma ve serumun “total antioksidan kapasitesi”ni ölçmek için geliştirilmiştir. Bu metod plazma antioksidanlarını okside etmek için ABAP (2,2'-azobis(2-amidinopropan) hidroklorit) radikal başlatıcısı tarafından peroksil radikallerinin üretilmesi ve meydana gelen oksidasyon sırasında tüketilen oksijenin ölçülerek izlenmesine dayanır. Daha sonra metod, oksitlenebilir bir lipid substratı olan linoleik asidin eklenmesiyle modifiye edilmiştir [190, 208]. Modifiye metotta Cu^{2+} ya da bir azo başlatıcısı ile linoleik asit oksidasyonu yapay olarak indüklenir, otooksidasyonun ilerleyişi linoleik asit oksidasyonundan oluşan konjuge dienperoksitlerin absorbansının takibi ile izlenir [190, 210].

3. Crocin Ağartma Metodu: Crocin doğal bir karotenoid türevidir. Metod serbest radikal başlatıcı AAPH (2,2'-azobis(2-amidinopropan)dihidroklorit) tarafından, crocinin ağarmasını önlemede antioksidanların inhibisyon kapasitesini ölçer. Crocin safrandan elde edilen doğal pigmentler karışımı olduğu için çok fazla çeşitliliğe sahiptir ve karotenoidler gibi diğer gıda pigmentleri aynı dalga boyunda ($\lambda=450$ nm) ışık absorblar. Bu da crocinin endüstriyel uygulamasını sınırlar [190, 210].

1.12.4.2. ET-Temelli Metodlar

Antioksidanın, Fe^{3+} , ABTS^+ gibi bir oksidan tarafından yükseltgenmesi sonucunda bir elektron antioksidandan oksidana transfer edilir, bu da oksidanın renk değişimine sebep olur. UV/VIS ile absorbans değişimi ölçülür. Bu absorbans değişiminin derecesi antioksidan konsantrasyonuyla orantılı olduğundan, antioksidanın indirgeyici kapasitesi tayininde kullanılır. FCR ile toplam fenolik bileşik tayini, Cu^{2+} indirgeme kapasitesi, TEAC ve FRAP metodları bu sınıfa girer [190].

1. FCR ile Toplam Fenolik Bileşik Tayini: Metod başlangıçta proteinlerde fenol grubu içeren tirozin kalıntısı ile Folin-Ciocalteu ayırıcının (FCR) etkileşiminden dolayı protein analizi için düşünülmüştür. Daha sonraları daha genişletilerek toplam fenol metodu olarak kullanımı artmıştır. FCR Cu^+ , C vitamini gibi fenolik olmayan bileşikler tarafından da indirgenebildiği için fenolik bileşiklere spesifik değildir. Ancak fenolik bileşikler sadece bazik şartlar altında (metotta pH~10 için karbonat çözeltisi kullanılır) FCR ile reaksiyon verir. Fenolik antioksidanların varlığında ayıraçtaki Mo(VI)'nın indirgenmesiyle renk sarıdan maviye döner ve 760 nm'de absorbans ölçülür [190].

FCR örneğin indirgeyici kapasitesini ölçen bir metod olduğu için “antioksidan kapasite” ve FCR ile toplam fenol metodu arasında korelasyon bulunur. Basit ve tekrarlanabilir bir metod olduğundan, fenolik antioksidan çalışmalarında rutin olarak kullanılmaktadır [190, 210].

2. TEAC (Trolox Ekvivalenti Antioksidan Kapasite) Metodu: İlk kez 1993 yılında bildirilen metod daha sonraları geliştirilmiştir. Bu metotta metmiyoglobin/ H_2O_2 sisteminin oluşturduğu ferrilmiyoglobin radikali ABTS (2,2'-azinobis(3-etilbenzotiazolin-6-sülfonat)) ile etkileşerek ABTS^+ katyonik radikalini üretir. Oluşan ABTS^+ radikalinin antioksidan tarafından giderilmesi 734 nm'de absorbansın azalmasıyla takip edilir [190, 208]. Modifiye metotta ise ABTS^+ radikali, ABTS'nin potasyum persülfat oksidasyonu ile direkt üretilir. Antioksidan kapasite suda çözünen E vitamini analogu olan trolox konsantrasyonu (mM) olarak tayin edilir. TEAC, 1 mM troloxunkiyile aynı aktiviteyi göstermek için gerekli olan antioksidan konsantrasyonunu ifade eder. Kullanımı artmasına rağmen bazı sınırlamaları vardır. En büyük dezavantajı sentetik ABTS^+ radikalinin biyolojik sistemlerde bulunmamasıdır [190, 194, 210].

3. FRAP (Fe(III) İyonu İndirgeme Gücü) Metodu: Bu metotta düşük pH'da ferrik tripiridilriazin kompleksi (Fe^{3+} -TPTZ) antioksidanların etkisiyle ferröz kompleksine (Fe^{2+} -TPTZ) indirgenir. Oluşan kompleksin 593 nm'de absorbansı ölçülür. Böylece elektron vermenin antioksidanların toplam indirgeme kapasitesiyle lineer olduğu varsayılır. Bu yaklaşımın ana dezavantajı, metod okside olabilen bir substrat

içermediğinden antioksidanların koruyucu özellikleri hakkında bilgi sağlamamasıdır [190, 210, 212].

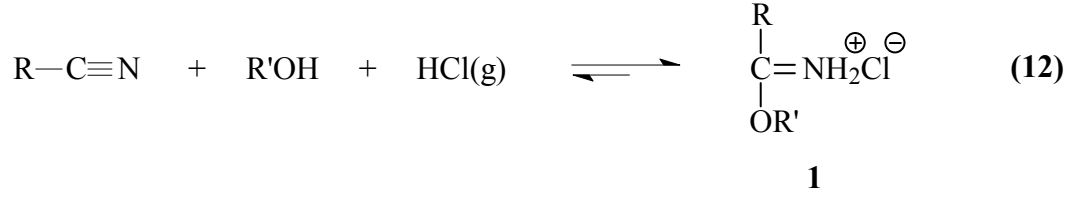
4. DPPH Radikali Giderme Metodu: 1,1-difenil-2-pikrilhidrazil (DPPH) radikali ticari olarak mevcut, stabil radikallerden biridir. Fenolik antioksidanların aktiviteleri üzerinde yapı etkisini çalışmak için kullanılan ilk sentetik antioksidanlardan biridir. Etanoldeki çözeltisi mor renklidir ve 515 nm’de maksimum absorpsiyon verir. Antioksidan tarafından indirgenince rengi solduğu için reaksiyonun ilerleyişi spektrofotometre ile izlenir. DPPH’in renginin solması antioksidan konsantrasyonu ile orantılıdır. Başlangıçtaki ilk DPPH konsantrasyonunu % 50 azaltmak için gerekli antioksidan miktarı “antiradikal etkinlik”i ifade eder ve EC50 (mg/ml) olarak isimlendirilir [190, 208]. EC50 değeri antioksidan aktiviteyi ölçmek için daha yaygın olarak kullanılan bir parametredir [190].

5. Oksidan Olarak Cu^{2+} Kullanan Toplam Antioksidan Potansiyel Metodu: Bu metoda dair az sayıda yayınlanmış bilgi vardır. Örnekte bulunan indirgenler (antioksidanlar) tarafından Cu^{2+} Cu^{+} ’e indirgenir. Cu^{+} kromojenik bir reaktif olan batokupronin (2,9-dimetil-4,7-difenil-1,10-fenantrolin) ile kompleks oluşturur. 490 nm’de maksimum absorpsiyon ölçülür [190, 210].

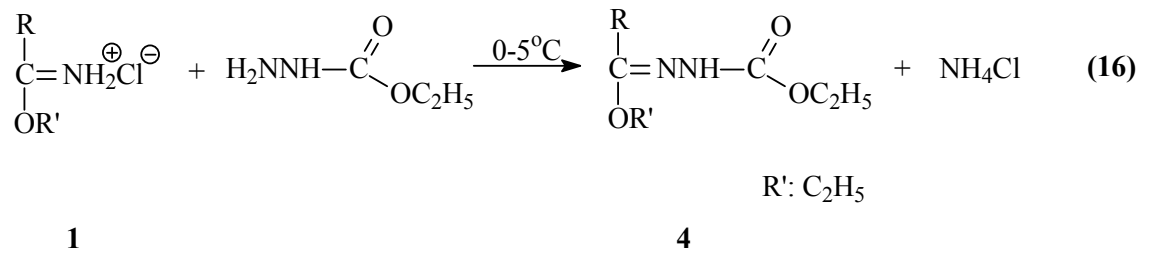
1.13. Yeni Bileşiklerin Sentezi

Tez kapsamında sentezi planlanan orijinal bileşiklerin elde edilmesinde 1 tipi hidroklorürleri halinde kullanılan, iminoesterlerin sentezi için çeşitli metotlar geliştirilmiştir. Bu metotlara amidlerden, ortoesterlerden, karbonil bileşiklerinden, iminoklorürlerden ve bazı doymamış sistemlerden başlayan yöntemler örnek olarak verilebilirse de 1 tipi bileşiklerin sentezinde kullanılan en uygun yöntem olan Pinner Yöntemi’ne [45] göre literatürde kayıtlı 1 tipi iminoester hidroklorürler (alkil imidat hidroklorürler) olan etil imidoasetat hidroklorür (1a), etil imidopropiyonat hidroklorür (1b), etil imido-*n*-butirat hidroklorür (1c), etil imidofenilasetat hidroklorür (1d), etil imido-*p*-tolilasetat hidroklorür (1e), etil imido-*p*-metoksifenilasetat hidroklorür (1f), etil imido-*p*-klorofenilasetat hidroklorür (1g), ve etil imidobenzoat hidroklorür (1h) bileşikleri elde edilmiştir. Bu yöntemde bir nitril, bir mutlak alkol (genellikle mutlak

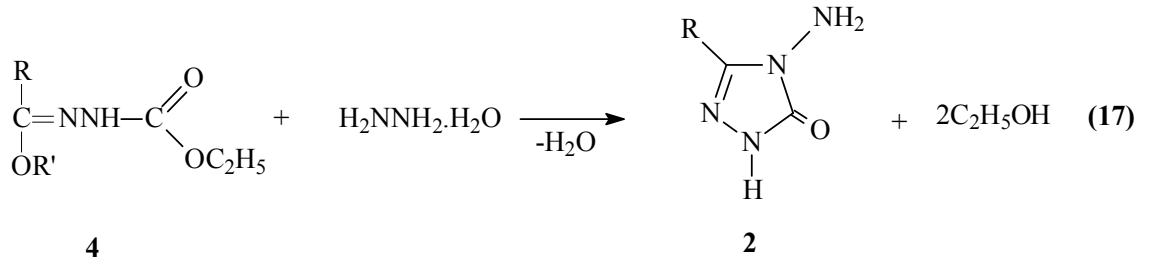
etanol) ile susuz bir çözücü (genellikle susuz dietil eter) içinde HCl gazı ile soğukta muamele edilir (Denklem 12).



1 tipi iminoesterhidroklorürler (alkil imidathidroklorürler) in soğuk mutlak etanolü ortamda etil karbazat ile muamelesinden elde edilen [48-54] etil karbazat ile ayrı ayrı muamelesinden literatürde kayıtlı 4 tipi ester etoksikarbonilhidrazonlar olan etil asetat etoksikarbonilhidrazon (4a), etil propiyonat etoksikarbonilhidrazon (4b), etil *n*-butirat etoksikarbonilhidrazon (4c), etil fenilasetat etoksikarbonilhidrazon (4d), etil *p*-tolilasetat etoksikarbonilhidrazon (4e), etil *p*-metoksifenilasetat etoksikarbonilhidrazon (4f), etil *p*-klorofenilasetat etoksikarbonilhidrazon (4g) ve etil benzoat etoksikarbonilhidrazon (4h) bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 16).

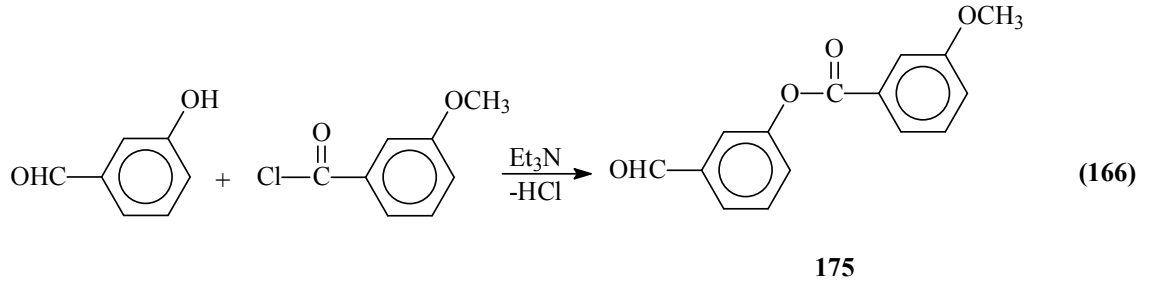


Elde edilen 4 tipi bileşiklerin hidrazin hidrat ile ayrı ayrı muamelesinden [50-56] çalışma için gerekli olan ve literatürde kayıtlı bulunan 2 tipi 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri olan 3-metil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2a), 3-etil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2b), 3-(*n*-propil)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2c), 3-benzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2d), 3-(*p*-metilbenzil)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2e), 3-(*p*-metoksibenzil)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2f), 3-(*p*-klorobenzil)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2g) ve 3-fenil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2h) bileşikleri elde edilmiştir (Denklem 17).



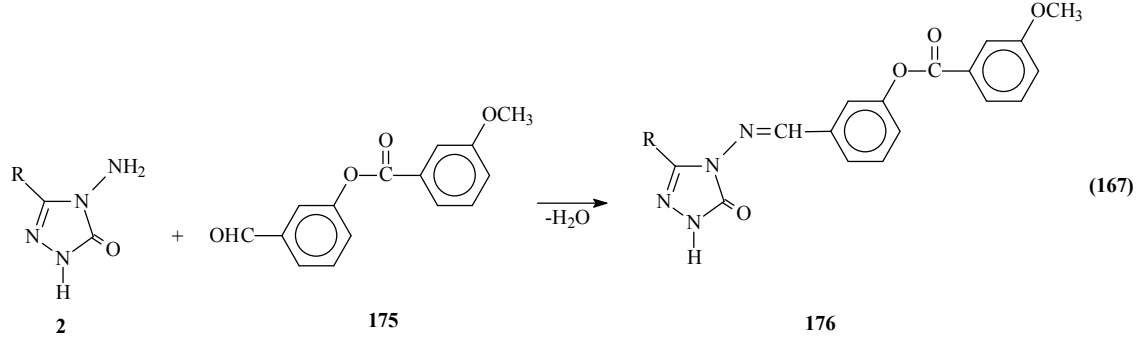
	R
2a	CH ₃
2b	CH ₂ CH ₃
2c	CH ₂ CH ₂ CH ₃
2d	CH ₂ C ₆ H ₅
2e	CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ (<i>p</i> -)
2f	CH ₂ C ₆ H ₄ OCH ₃ (<i>p</i> -)
2g	CH ₂ C ₆ H ₄ Cl (<i>p</i> -)
2h	C ₆ H ₅

Çalışmada 3-hidroksibenzaldehidin trietilaminli ortamda soğukta 3-metoksibenzoil klorür ile reaksiyonundan sentezlenen ve bir benzaldehid türevi olan 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd (175) sentezlenmiştir (Denklem 166).

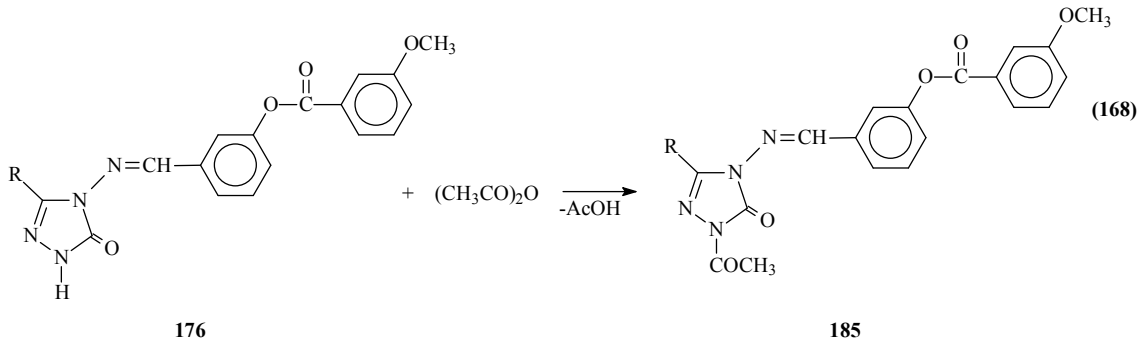


3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd (175) ile 2 tipi bileşiklerin ayrı ayrı muamelesinden 8 adet yeni 176 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri olan 3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (177), 3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (178), 3-(*n*-propil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (179), 3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (180), 3-(*p*-metilbenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (181), 3-(*p*-metoksibenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-

benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (182), 3-(*p*-klorobenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (183) ve 3-fenil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (184) bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 167).



Çalışmanın orijinal bölümünde ikinci olarak 176 tipi bileşiklerinin asetik anhidrid ile muamelesinden *N*-asetil türevleri olan 185 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleri olan 1-asetil-3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (186), 1-asetil-3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (187), 1-asetil-3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (188), 1-asetil-3-(*p*-metilbenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (189), 1-asetil-3-(*p*-klorobenzil)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (190) bileşikleri sentezlenmiştir (Denklem 168).



Biri yeni 1 adet benzaldehid türevi ve 13 adet heterosiklik 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR, UV-vis değerleri ve infrared spektral verileri deneysel ve teorik olarak, bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve molekülün toplam enerjileri ise teorik olarak bilgisayar ortamında Becke tipi 3-parametrelili Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ve Hartree-Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi setleri kullanılarak incelenmiştir. Çalışmada öncelikle bileşikler HF/6-311G(d), DFT/6-311G(d) ve HF/3-21G, DFT/3-21G metodlarına göre optimize edilmiştir. Optimize işleminden sonra ¹H- NMR ve ¹³C-NMR isotropik kayma değerleri Gaussian G09W paket programı kullanılarak GIAO metoduna göre hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp} = a \cdot \delta_{calc} + b$ eşitliğine göre grafikler oluşturulacak ve regresyon analizi yapılmıştır. IR frekans değerleri yine HF ve B3LYP metodlarının 6-311G(d) ve 3-21G temel setleri kullanılarak gaz fazında hesaplanmıştır. Teorik olarak hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında veda4f programından yararlanılmıştır.

Çalışmada ayrıca, 8 yeni bileşiğin potansiyometrik titrasyonları 4 farklı susuz çözücüde (izopropil alkol, *tert*-butil alkol, *N,N*-dimetilformamid ve aseton) tetrabutilamonyum hidroksitle yapılmış ve yarı nötralizasyon metodu ile yarı nötralizasyon potansiyelleri tayin edilmiş, titrasyon grafikleri çizilmiş ve her bir çözücüdeki asitlik sabitleri belirlenerek asitlik üzerine çözücü ve yapı etkileri incelenmiştir.

Çalışmada son olarak, sentezlenen 13 yeni bileşiğin 3 farklı yöntemle (indirgeme gücü, serbest radikal giderme aktivitesi, metal şelat aktivitesi) *in-vitro* antioksidan özellikleri incelenerek elde edilen bulgular yorumlanmıştır.

2. MATERYAL, YÖNTEM VE HESAPLAMA METOTLARI

2.1. Kuantum Mekaniği

2.1.1. Schrödinger Denklemi

De Broglie'nin, parçacıkların dalga özelliği ile ilgili ortaya attığı teori birçok bilim adamını etkilemişti. Bunlardan biride Avusturyalı fizikçi Erwin Schrödinger idi. Schrödinger, Zürih Üniversitesi sempozyumlarından birinde Bohr yörüngeleri ve Broglie'nin çalışmasıyla ilgili konuşmasını bitirdikten sonra sempozyumun hazırlayıcısı Peter Debye “Aptalca konuşuyorsun Schrödinger. Dalgalardan bahsediyorsun ama hiçbir dalga denklemin yok.” dedi [30, 213].

Yaklaşık bir yıl sonra Schrödinger'in bir dalga denklemi vardı. Schrödinger bu denklemi bilinen bir klasik dalga denklemi yerine De Broglie'nin, bir taneciğin dalga boyu durumunu koyarak elde etmişti. Zaten bu dalga denklemi fiziğin diğer temel ilkelerinden çıkarılamazdı, çünkü zaten kendisi bir temel ilkeydi. Buluş, büyük bir heyecanla karşılandı. Denklem hidrojen atomunun, harmonikosilatörün ve birkaç fiziksel sistemin daha tam çözümünü başarıyla gerçekleştirdi [214].

Doğadaki her şey hem parçacık hem de dalga karakteri gösterir. Bu durumu açıklamak için klasik yöntemler yetersiz kalır. Enerjinin kesikli olması, parçacıkların girişimi veya tünelleme gibi konuların açıklanmasında kuantum mekaniği ve onun temel denklemi olan Schrödinger denklemine ihtiyaç vardır.

Kuantum mekaniği ile bir molekülün enerjisini ve buna bağlı diğer fiziksel özelliklerini tayin etmek için Schrödinger eşitliğini çözmek gerekir. Schrödinger denkleminin çözümü ψ dalga fonksiyonunu verir. Sistemin bütün fiziksel özellikleri bu dalga fonksiyonundan çıkarılabilir. Schrödinger denkleminin en genel formu;

$$H\psi = E\psi \quad (169)$$

şeklindedir. Burada ψ yukarıda belirtildiği gibi dalga fonksiyonu, E sistemin enerjisi ve H Hamiltoniyen operatörüdür. ∇^2 Laplace operatörü, V potansiyel enerji operatörü ve \hbar , h Planck sabitinin 2π 'ye bölümü ($\hbar = h / 2\pi$) olmak üzere Hamiltoniyen operatörü,

$$H = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \quad (170)$$

olarak tanımlanır. Buna göre V potansiyeli içerisinde hareket eden ve ψ dalga fonksiyonu ile tanımlanan bir parçacık için Schrödinger denklemi şu şekilde verilir;

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r,t) + V\psi(r,t) \quad (171)$$

Yukarıda verilen denklem bir parçacık için geçerlidir. İzole edilmiş bir molekül için tam hamiltoniyen işlemcisi çekirdeklerin ve elektronların kinetik enerji operatörlerini, tüm yüklü parçacıklar arasındaki etkileşimleri ve çekirdeklerle elektronların spinlerine bağlı tüm magnetik moment etkileşimlerini içerir. Bu yüzden Schrödinger denkleminin tam çözümü sadece bir elektronlu atomlar için mümkündür. Schrödinger denkleminin birden fazla elektron içeren bir sistem için çözülebilir kılınabilmesi için bazı yaklaşımların yapılması gerekir.

2.2. Moleküler Spektroskopide Kuramsal Hesaplamalar

Kuantum mekaniğine göre çok küçük sistemler için bir molekülün enerjisini veren Schrödinger denkleminin tam çözümü mümkün değildir. Bu nedenle simülasyonla yaklaşık çözümler yapılır. Elektronik yapı metotları, yarı deneysel metotlar ve *ab-initio* metotlar olarak ikiye ayrılır.

2.2.1. Ab-İnitio Moleküler Orbital Yöntemleri

Ab-initio Latince kökenli bir kelime olup “başlangıçtan itibaren” anlamına gelir. *Ab-initio* moleküler orbital yöntemleri kuantum mekaniksel temellere dayanır. Bu yöntemler ile yapı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir. *Ab-initio* metotlar moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların tersine, ilgilenilen molekül için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fiziksel sabitler haricinde deneysel değerler kullanmadan Schrödinger dalga denkleminin yaklaşık bir çözümüne dayanır [30, 215]. Tek elektronlu Hidrojen atomu için bu denklemi çözmek mümkün olsa da çok elektronlu sistemlerde çözüm çok zor olduğundan, Hartree-Fock Self Consistent Field (HF-SCF) ve Density Functional Theory (DFT) gibi farklı matematiksel yaklaşımlar kullanılır.

Ab-initio hesaplamalarının avantajı, geniş aralıklı sistemler için kullanışlı olması, deneysel sonuçlara dayanmaması ve bozulmuş ya da uyarılmış durumları hesaplayabilmesidir. Birçok sistem için yüksek kalitede sonuçlar sağlar ve kullanılan molekül küçüldükçe doğruluk oranı artar. Dezavantajları ise pahalı bir yöntem olması, çok büyük miktarda bilgisayar işlem gücü gerektirmesi ve bilgisayarda fazla yer kaplamasıdır. Ayrıca hesaplama süresi de moleküler mekanik yöntemlere göre çok daha fazladır. Hesaplama süresini azaltmak için geometrilere ve kullanılan parametrelerde bazı basitleştirmeler yapılabilir; ancak bu basitleştirmeler kesin olmayan sonuçların elde edilmesine neden olur. Hesaplama süresi, molekülü veya moleküler sistemi içeren elektron sayısına bağlıdır.

Ab-initio metotları olan Hartree-Fock ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi metotları moleküllerin yapılarının tayin edilmesi, spektroskopik, elektronik ve lineer olmayan optik özellikler gibi moleküler özellikleri araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmesidir.

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

Hartree-Fock hesaplamalarında molekülün dalga fonksiyonu, temel fonksiyonlarından yararlanarak oluşturulur, Schrödinger dalga denklemi çözülür ve enerji özdeğeri bulunur. Varyasyon yöntemi kullanılarak enerji minimize edilir ve en uygun enerji özdeğerleri ve frekansları saptanır. Bu hesaplamaları Hartree-Fock SCF (Self Consistent Field) teorisi yardımıyla gerçekleştirebiliriz. Türkçe karşılığı “Öz Uyumlu Alan Teorisi”dir. Hartree-Fock hesaplamalarında merkezi alan yaklaşıklığı kullanılır. Merkezi alan yaklaşıklığında Coulomb elektron-elektron itmesi ilk başta hesaplara dahil edilmez ve bu itmenin net etkisi daha sonra düzeltme olarak hesaba katılır. Bu metodun ardındaki varsayım şudur; herhangi bir elektronun, kendisinin dışındaki tüm elektronların ve çekirdeğin oluşturacağı ortalama küresel potansiyel alanı içinde hareket edeceği kabul edilir [30, 216].

2.2.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT)

Moleküler sistemin temel hal özelliklerini incelemeye kullanılan geleneksel yaklaşımlardan yarı-deneysel ve *ab-initio* metotlarına alternatif olarak ortaya çıkan DFT, 1970’lerde katı hal hesaplamaları için kullanılan popüler bir metottu. Kuantum kimyasında 1990’lara kadar yeteri derecede doğru bir metot olarak kabul edilmedi. Bugünlerde ise DFT hem katı halde hem de kuantum kimyası alanında yaygın bir şekilde kullanılan bir metottur. Ancak bu metot molekülün sadece temel hal özelliklerini hesaplamakta, uyarılmış hallerdeki özelliklerini hesaplamamaktadır. Bununla beraber, özellikle çok atomlu moleküller üzerinde geniş temel setli kesin hesaplamaları yapma zorluğu gibi sınırlamalara sahiptir.

Karşılıklı elektron etkileşimini hesaba katan DFT’ nin popülaritesinin artmasının sebeplerinden biri daha az hesaplama gerektirmesidir. Ayrıca, d-bloğu metallerini içeren sistemler için DFT, yapılan HF hesaplamalarından deneysel verilerle daha uyumlu sonuçlar verir.

DFT teorisi, 1920'lerdeki Thomas Fermi-Dirac ve 1950'lerdeki Slater'ın çalışmaları gibi kuantum mekanik çalışmalardan çıkartılan metotlara dayanır. Geçen kırk yıl içerisinde popüleritesinde büyüme olan HF metodunun alternatifi olan DFT, 1964 de Hohenberg ve Walter-Kohn tarafından ileri sürülen teori [30, 217] üzerine inşa edilmiştir. Bu teoriye göre temel haldeki elektronik enerji, tamamen elektron yoğunluğu ile belirlenebilir. Diğer bir ifadeyle sistemin elektron yoğunluğu ile enerjisi arasında birebir ilişki vardır. Dalga fonksiyonu yaklaşımında N tane elektron içeren bir sistemde her bir elektron için 3 tane olmak üzere (spini de katarsak 4) $3N$ tane koordinat vardır. Elektron yoğunluğu ise $N-1$ tane koordinat üzerinden integrali alınmış dalga fonksiyonunun karesidir. Diğer taraftan yoğunluk sistemdeki elektron sayısından bağımsız olarak sadece 3 koordinata bağlı düşünülebilir. Dalga fonksiyonunun karmaşıklığı elektron sayısı ile artarken elektron yoğunluğu sistemin büyüklüğünden bağımsız olarak aynı sayıda değişkene bağlıdır. Farklı yoğunlukların farklı temel hal enerjileri verdiği ispatlanmasına rağmen tek problem bu iki niceliği birbirine bağlayacak fonksiyoneldir. Dolayısıyla DFT metotlarının amacı elektron yoğunluğunu enerji ile ilişkilendirecek fonksiyoneller üretmektir [30, 218, 219]. Burada terim olarak fonksiyon ve fonksiyonelin arasındaki farka dikkat etmek gerekir. Fonksiyon değişkenler setinden sayı üreten bir reçete iken fonksiyonel değişkenlere bağlı fonksiyondan sayı üreten reçetedir. Böylece dalga fonksiyonu ve elektron yoğunluğu fonksiyon iken enerji dalga fonksiyonuna veya elektron yoğunluğuna bağlı fonksiyoneldir.

2.2.4. B3PW91 ve B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorileri

DFT, moleküllerin değiş-tokuş ve karşılıklı enerjilerini daha iyi vermesi nedeni ile tam enerji ifadesi için, yalnız HF veya DFT modelleri yerine bu modellerin her ikisinin de enerji ifadeleri toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılarak karma modeller üretilmiştir. Bu modeller, toplam enerjiiyi, bağ uzunlukları ve iyonlaşma enerjileri gibi birçok büyüklüğü saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır. Bu modellerden bazıları [37, 220, 221]; (a) Kinetik enerji fonksiyoneli: Hartree 1928 (H28), Thomas-Fermi 1927 (TF27), ... (b) Değiş-tokuş enerji fonksiyoneli: Fock 1930 (F30), Dirac 1930 (D30), Becke 1988 (B88), ... (c) Karşılıklı etkileşim enerji fonksiyoneli: Lee-Yang-Parr

(LYP), Vosko-Wilk-Nusair (VWN), Perdew-Wang 1991 (PW91), ... gibi üç farklı enerji fonksiyonelleri çok sık karşılaşılan fonksiyonellerdir [221-223].

2.2.5. Yarı-Deneysel (Semi-Emprical) Moleküler Yöntemler

Yarı-deneysel metotlar, deneysel sonuçların yanı sıra *ab-initio* moleküler orbital yöntemleri gibi kuantum mekaniksel esaslara ve çok sayıda yaklaşıklıkla dayanmaktadır. Yarı-deneysel yöntemler elektron-elektron etkileşmelerine ait iki elektron integrallerini hesaplamazlar. Bu integral ifadeleri için inceleme konusu olan moleküle benzer elektronik yapıdaki moleküllerden, deneysel olarak elde edilen bilgilerden oluşturulmuş parametreleri kullanırlar. Bir başka deyişle yarı-deneysel metotlar Schrödinger dalga denklemini deney verilerinden türetilen parametreleri içeren ve çözümü daha kolay olan bir forma dönüştürerek çözerler.

Etkileşim integralleri için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi *ab-initio* yöntemlerin hesaplama süresi ile karşılaştırılmayacak kadar azdır. *Ab-initio* hesaplama metotlarının yetersiz kaldığı biyolojik makro moleküller üzerinde yapılacak hesaplamalarda deney verileri ile uyumlu ve oldukça hızlı hesaplamalar gerçekleştirebilmeleri açısından avantajlıdır. Çok küçük sistemler için kullanılabilceği gibi büyük kimyasal sistemler için de kullanılabilir [224].

2.2.6. LCAO/MO Metodu

Molekül sistemini tanımlayan toplam dalga fonksiyonu ψ antisimetrik olmalıdır. Bir elektronik dalga fonksiyonu için, elektronların fermiyon olmasından kaynaklanan dalga fonksiyonu'nun antisimetrik olması fiziksel bir gerekliliktir. Moleküldeki her bir elektron için tek elektron dalga fonksiyonunu tanımlamalıyız. Molekül içindeki her elektron (x_i, y_i, z_i) koordinatlarının bir fonksiyonu olan $\Phi_i(x_i, y_i, z_i)$ tek elektron moleküler orbital dalga fonksiyonuyla tanımlanır. Bu moleküler orbitallerden toplam dalga fonksiyonu ψ 'yi oluşturmanın en basit yolu, n elektronlu sistem için tek elektron

moleküler orbital dalga fonksiyonlarının Hartree çarpımı ile birbirleriyle çarpılarak bir kombinasyon oluşturulmasıdır [30, 225-227].

2.3. Temel Setlerin Seçimi ve Adlandırılması

Kuramsal hesaplamaların amacı moleküllerin özelliklerini matematiksel olarak açıklamaktır. Bu özelliklerin en önemlilerinden bir tanesi moleküler orbitallerdir. Bu orbitallere yaklaşımlar için temel setler kullanılır.

Esas itibariyle, temel fonksiyonların bir tam seti, tamamen spin orbitallerin temsil edilmesi için kullanılmalıdır ve fonksiyonların sonsuz sayıda kullanımı varyasyonel ifadesinde verilen bir Hartree-Fock enerjisi ile sonuçlanır. Bu sınırlayıcı enerjiye Hartree-Fock sınırı denir. Elektronlar arası etkileşme ihmal edildiğinden HF sınırı molekülün kesin taban-durum enerjisi değildir. Sonsuz temel set hesaplaması mümkün olmadığından her zaman sonlu temel set kullanılır ve temel set eksikliğine göre hata, temel set kesme (truncation) hatası olarak adlandırılır. Hartree-Fock SCF hesaplamasında, hesaplanan en düşük enerji ve Hartree-Fock sınırı arasındaki fark temel set kesme hatasının bir ölçüsüdür. Bu nedenle sayısal çözümlemede önemli noktalar, temel fonksiyonların sayısını az tutmak (değerleri belirlenecek olan iki elektron integrallerinin sayısını en aza indirmek için) ve bir integralin değerlendirilmesi için hesaplama çabasını en aza indirmek amacıyla onları akıllı bir şekilde seçmektir. Fakat yine de hesaplamayı küçük bir temel set kesme hatayla başarmaktır [41].

Temel setler atomik orbitallerin matematiksel tanımıdır. Genel bir ifadeyle temel setler; elektronların bulunabileceği yerleri matematiksel olarak hesaplayan sayılar tablosudur. Bir moleküler orbital; (i) moleküllerin atomlardan oluşması, (ii) aynı cins atomların farklı cins moleküllerde benzer özellikler göstermeleri nedeni ile atomik orbitallerin çizgisel toplamları olarak yazılabilir. ψ_i moleküler orbitali ile ϕ_μ atomik orbitalleri arasındaki bağıntı,

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^N c_{\mu i} \phi_{\mu} \quad (172)$$

ifadesi ile verilir. Burada $c_{\mu i}$ moleküler orbital açılım katsayıları olarak adlandırılır, ϕ_{μ} atomik orbitallerini ise temel fonksiyonlar olarak adlandırırız. Atomik orbitaller için birçok temel set önerilmiştir. Minimal temel setler orbitallerin en temel durumlarını tanımlarlar, herhangi bir atom için gerektiği sayıda temel fonksiyon içerirler; fakat molekülleri oluşturan atomların atomik orbitallerinde büyüklük, şekil veya yük bakımından önemli değişiklikler olması da özel tanımlamalar gerektirir. Bunun için temel sete polarize ve difüze fonksiyonlar eklenerek genişletilmiş temel set tanımlanmıştır. Genişletilmiş temel setler, molekülün yüksek dereceden orbitallerini hesaba katarak, moleküler yük dağılımındaki, komşu atomların etkileşmesinden kaynaklanan şekil ve boyut değişikliklerini tanımlar, böylece orbitallerin çok daha detaylı bir şekilde ifade edilmesini sağlarlar.

Molekül içindeki çekirdekler diğer çekirdeklerin etrafındaki polarize elektron yoğunluğunu bozduğundan, serbest atomların s, p, d, f ... gibi orbitallerinden daha esnek olan moleküler orbitallerin oluşturulması gerekir. Bunu sağlamanın en iyi yolu temel fonksiyonlarına daha yüksek açıl momentum kuantum sayısı eklemektir. Eklenen bu temel fonksiyonlara polarize fonksiyonlar denir. Bunlara örnek olarak 6-31G(d) ve 6-31G(d,p) temel fonksiyonları verilebilir. Polarizasyon fonksiyonları karbon atomları için 'd', hidrojen atomları için 'p' ve geçiş metalleri için 'f' isimlerini alırlar.

Elektron yoğunluğu çekirdekten uzak sistemler, yalın çifti moleküller, eksi yüklü sistemler (anyonlar), düşük iyonlaşma enerjili sistemler, uyarılmış haller için atomik orbitaller daha geniş bir uzay bölgesini kaplayacaklarından, yalnızca sıkıştırılmış temel setlerin kullanılması yetersiz kalmaktadır. Yetersizliklerin giderilebilmesi için dağınık fonksiyonlar (difüze) kullanılır. Difüze fonksiyonlu temel setler orbitallerin uzayda daha geniş yer işgal etmesine izin verir. Difüze fonksiyonlarının dahil edilmesi '+' veya '++' işaretleriyle olur. Hidrojen dışındaki ağır atomlar için '+' işareti, hem ağır atomlar hem hidrojen atomları için '++' işareti ile gösterilir. 6-31+G(d) temel seti, 6-31G(d)

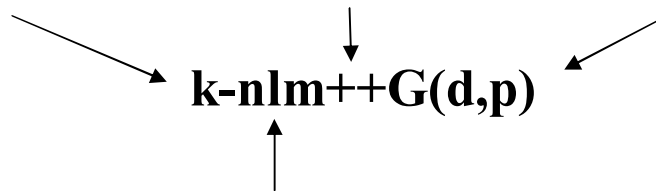
temel setinde ağır atomlara difüze fonksiyonu ilave edilmiş şeklidir. 6-31++G(d) temel seti ise hidrojen atomuna da difüzyon fonksiyonu ilave eder. Eğer anyonlar ile ilgileniliyorsa difüze fonksiyonunun kullanılması tavsiye edilir. Çift difüze fonksiyonlu temel setler (++) özellikle hidrürler ile çalışılıyorsa kullanışlıdır.

Program verilerinde bulundurulmuş ve literatürde değişik şekillerde gösterilen çok sayıda temel set vardır. Her bir temel setin nasıl okunacağını anlamak önemlidir. k-nlmG temel set split-valans tipi temel set olarak bilinir. Bu gösterimde k kor orbital veya iç kabuktaki elektronların kaç tane ilkel gaussian tipi fonksiyon ile temsil edildiğini gösterir. nlm ise hem valans orbitallerinin kaç tane yarıldığını hem de bunların kaç tane ilkel gaussian fonksiyonu ile temsil edildiğini gösterir. Eğer gösterimde sadece (nl) var ise ikili yarıma, (nlm) var ise üçlü yarıma dikkate alınır. Daha önce belirtildiği gibi temel set gösteriminde G den önce difüze fonksiyonlar için + veya ++ gösterimi kullanılır. Polarize fonksiyonları belirtmek için G den sonra parantez içinde d, df, p, pd harfleri kullanılır (Şekil 2.1.).

Kor orbital veya iç kabuktaki elektronlar kaç tane ilkel gaussian tipi fonksiyon ile temsil ediliyor.

Difüze fonksiyonlar için + veya ++ gösterimi kullanılır. + ağır atomlar için p-fonksiyonunu, ++ ise Hidrojen atomu için s- fonksiyonunu tanımlar

Karbon atomları için d, hidrojen atomları için p ve geçiş metalleri için f harfleri kullanılır.



Hem valans orbitallerinin kaç tane yarıldığını hem de bunların kaç tane ilkel gaussian fonksiyonu ile temsil edildiğini gösterir. Eğer gösterimde sadece (nl) var ise ikili yarıma, (nlm) var ise üçlü yarıma dikkate alınır.

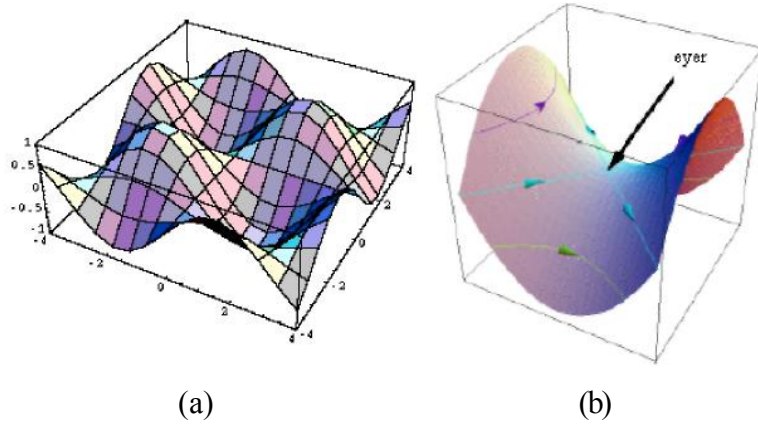
Şekil 2.1. Temel setlerin adlandırılması

Genelde atomik orbitali daha iyi tanımlamak için çok sayıda temel fonksiyona ihtiyaç duyulur. Örneğin, bir molekül sistemin elektriksel özellikleri (dipol moment, polarizebilite, vb.) hesaplanırken temel setlere difüze ve polarize fonksiyonlar eklenerek (6-31+G(d), 6-31++G(d), 6-31++G(d, p) ve 6-311++G(d, p) vb) doğruluğu artırılır. Ancak kullanılan temel fonksiyon sayısı fazlaştıkça daha fazla hesaplama süresi ve

daha fazla bilgisayar hafızası gerekir, bu nedenle yapılacak bir hesaplamada amaçlanan sonuca en uygun temel set seçilmelidir.

2.4. Geometrik Optimizasyon ve PES

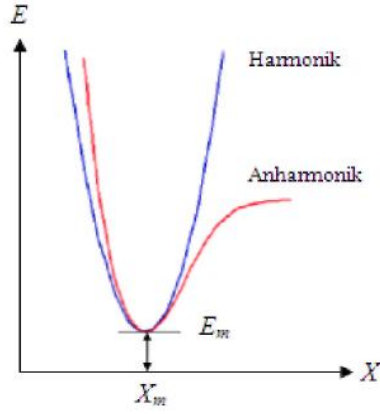
Bilgisayarlı hesaplama tekniğinde hesaplamalar moleküle ait belirli bir geometri oluşturularak başlar. Bir koordinat sistemindeki atomlar arasındaki yer değiştirmeler, molekülün enerjisiyle birlikte diğer birçok özelliklerinde kayda değer değişmelere neden olur. Molekülün yapısındaki değişiklikler sonucunda enerjinin koordinata bağımlılığı “potansiyel enerji yüzeyi (PES)” olarak tanımlanır (Şekil 2.2. (a)). Bu bağımlılık moleküler yapı ile molekülün enerjisi arasındaki ilişkidir. Bir molekül için potansiyel enerji eğrileri veya yüzeyi bilinirse denge durumundaki geometriye karşılık gelen minimum enerjili noktaları bulunabilir. Bir molekülün potansiyel enerji yüzeyi $3N-6$ boyuta sahiptir (doğrusal moleküllerde $3N-5$). Bir molekülün potansiyel enerji yüzeyi çok sayıda minimum ve maksimum içerir. Tek bir molekül için farklı minimumlar farklı konformasyonlara veya izomere karşılık gelir [30, 228-231].



Şekil 2.2. a) Potansiyel enerji yüzeyi b) Potansiyel enerji yüzeyindeki eyer noktası [220]

Potansiyel enerji yüzeyinde, bir yönde yerel minimum diğer yönde ise yerel maksimum olan noktalar vardır, bunlara eyer noktaları (saddlepoint) denir (Şekil 2.2. (b)). Eyer noktaları iki kararlı yapı arasındaki geçiş haline karşılık gelir.

İki atomlu bir molekülde bağ gerilmesine karşılık gelen elektronik enerji grafiği Şekil 2.3' te verilmiştir. Burada minimum enerjili nokta E_m ve minimum enerjiye karşılık gelen koordinat nokta X_m ile gösterilmektedir.



Şekil 2.3. İki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arası mesafeye bağımlılığı.

Burada potansiyelin harmonik kısmı Hooke yasası ile verilir;

$$E = E_m + \frac{1}{2}G(x - x_m)^2 \quad (173)$$

Burada G enerjinin koordinatlara göre ikinci türevidir ve kuvvet sabiti olarak adlandırılır. Çok boyutlu problemlerde genelleştirilmiş Hooke yasası şöyle yazılabilir;

$$E = E_m + \frac{1}{2} \left([x_1 - x_1^m] [x_2 - x_2^m] \dots [x_n - x_n^m] \right) \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1n} \\ \dots & G_{22} & \dots & G_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ G_{1n} & \dots & \dots & G_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - x_1^m \\ x_2 - x_2^m \\ \vdots \\ x_n - x_n^m \end{pmatrix} \quad (174)$$

Burada $(x-x^m)$ yer değiştirme vektörü, G elemanlarını köşegen ve köşegen dışı etkileşen kuvvet sabitlerinin oluşturduğu Hessian matrisi adını alır. Moleküler geometri optimizasyonu $x_1^m - x_2^m, \dots$ konumlarına karşılık gelen minimum enerjili noktaları bulmak demektir. Sistemin dengede olduğu yerler potansiyel enerji yüzeyindeki

minimumlardır. Bu da ilk aşamada gradyan vektörünü bulmaya, daha sonra da bu vektörü sıfır vektör yapan noktaları bulmaya karşılık gelir.

$$\langle g | \equiv g = \left[\frac{\partial E}{\partial x_1}, \frac{\partial E}{\partial x_2}, \dots \right] \quad \langle g | = (0, 0, \dots) \quad (175)$$

Potansiyel enerjinin koordinatlara göre birinci türevi yani gradyanının sıfır olduğu noktalar; minimumlar, eyer noktaları ve maksimumlardır. Kuvvet gradyanın negatiftir o nedenle bu noktalarda kuvvetde sıfırdır.

Paket programlarda geometrik optimizasyon için molekülün başlangıç geometrisi kartezyen koordinat veya iç koordinat (z-matrisi) cinsinden girilir, hesaplama için temel set seçilir ve optimizasyon başlatılır. Optimizasyon algoritmalarının çoğu kuvvet sabitleri matrisi olarak bilinen Hessian matrisini de hesaplar veya tahmin eder. Program potansiyel enerji yüzeyini dolaşır, enerji ve gradyan hesaplayarak hangi yöne ne kadar gidileceğine karar verir. Kuvvet sabitleri bu noktadaki yüzeyin eğriliğini tanımlayarak bir sonraki aşamanın belirlenmesini sağlar. Gradyan yüzey boyunca mevcut noktaların eğimini belirler. Her bir çevrimde gradyanın büyüklüğüne bağlı olarak geometri değişir ve bu hesaplamalar minimum bir değere ulaşınca kadar tekrarlanır. Yani hesaplanan geometride g vektörü sıfır ve bir sonraki aşamada hesaplanan geometrik parametrelerin değerleri ile hesaplanan değerler arasındaki fark ihmal edilebilir bir değer ise optimizasyon tamamlanmış olur.

2.5. NMR Spektroskopisinde Kuramsal Hesaplamalar [30]

Bir molekülün magnetik özellikleri arasında, molekülün NMR spektrumunu karakterize eden parametreler özellikle fizik ve kimya alanında çalışanlar için ilgi çekicidir. NMR organik bileşiklerin yapılarının belirlenmesinde kullanılan en güçlü tekniktir. Çok çeşitli çekirdeklerin çalışılmasında kullanılabilir: ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . NMR kimyasal kaymalar ve aynı zamanda dolaylı spin-spin çiftlenim sabitlerinin kuantum kimyasal

hesaplamaları çok önemlidir, çünkü deneysel NMR spektrumun işaretlenmesi açık değildir.

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

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

$$\sigma_K = \frac{1}{3} \text{Tr}(\sigma_K) \quad (176)$$

ile verilir. Aynı zamanda bağlı kaymalar da

$$\delta = \sigma_{ref} - \sigma_K \quad (177)$$

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

Daha elektronegatif atomların varlığı perdelenmeyi azaltarak daha yüksek kayma değerlerine sebep olurlar. Bu etki protona olan mesafe arttıkça azalır. Elektronegatif atomların sayısı arttıkça kayma miktarı da artar. Bu hesaplamalarda Gaussian birim sistemi kullanılır [232].

2.5.1. GIAO Yöntemi

GIAO yaklaşımı [233-236], atomik orbitaller $|\chi_\mu\rangle$ için yerel ayar orijinlerinin seçimini içerir. Özellikle bunun anlamı atomik orbitallerde merkezlenmiş karşılığı olan çekirdeklerde “doğal” ayar orijini olarak seçilir.

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

$$\chi_\mu(\vec{B}) = \exp\left[-\frac{i}{2c}\left(\vec{B} \times \vec{R}_\mu\right) \cdot \vec{r}\right] \chi_\mu(\vec{O}) \quad (178)$$

ile gerçekleştirilir. Burada \vec{R}_μ , χ_μ temel fonksiyonunun durum vektörüdür ve $\chi_\mu(\vec{O})$ ise alan bağımsız temel fonksiyonları ifade eder.

Eşitlik (178)'un alan-bağımlı temel fonksiyonları literatürde ayar-içeren atomik orbitaller (Gauge Including Atomic Orbital) (GIAO'lar orijinal olarak ayar-değişmezliği veya ayar-bağımsız atomik orbitaller diye biraz yanıltıcı olarak isimlendirildi. Boumanve Hansen [30, 237] tarafından önerilen isim, ayar-içeren atomik orbitaller 90'lı yılların başlarından beri standart olmuştur) veya London orbitalleri olarak tanımlanır.

2.5.2. CSGT ve IGAIM Yöntemleri

2. Mertebeden moleküler manyetik tepki özelliklerinin hesaplanması için birçok metot geliştirildi. Genellikle, ayar-değişmezliği yöntemleri [238, 239] gerektiren sonlu temel yaklaşım için de bu özelliklerin doğru şekilde tahmin edilmesini kabul eder. Açık şekilde alana bağlı olan temel fonksiyonları kullanan GIAO metot [240], ilk kez Ditchfield [235] tarafından kuantum kimyasal NMR kayma hesaplamaları için kabul

edildi. HF metodu ile daha fazla uygulamalar Pulay [236] ve Gauss [238] tarafından yapılmıştır. Keith ve Bader [239] tarafından geliştirilen ve gerçek uzayda her bir nokta için ayar dönüşümlerin devamlı bir setinin düzenlenmesi ile ayar-değişmezliğini sağlayan CSGT metodu, doğru akım yoğunluğunun tanımlanması ile perdeleme tensörlerinin uygun şekilde bulunmasını sağlar.

Ayar-değişmezliği Hartree-Fock (yeterli derecede geniş temel setlerde) metotları, elektron korelasyon etkileşmelerinin birbirine göre küçük olduğu çoğu hidrokarbon molekülleri ve diğer moleküller için deneysel sonuçlara yakın ^{13}C perdeleme sonuçlarını verir. Çok bağlı moleküller için, elektron korelasyon katkıları daha önemli hale gelir ve bu etkiler doğru perdeleme tensörleri elde etmek için elektron korelasyon etkileri içermeleri gereklidir (özellikle ^{15}N ve ^{17}O gibi çekirdekler için) [238]. Bu elektron korelasyon katkıları içermesi için, Gauss son zamanlarda deney ile tutarlı (uyumlu) olan perdeleme sabitlerini sağlamak için GIAO-MP2 [238] ve GIAO-CCSD [241] metotları geliştirdi. *Ab-initio* metotlarının alternatifi olarak ortaya çıkarılan Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'nin çeşitli moleküler özellikleri tahmin etmede başarılı olduğu gösterildi. Bu yüzden DFT manyetik tepki özellikleri özellikle perdeleme tensörlerinde incelemek için uygun olduğu görülür.

2.6. Gaussian 09W Programı

Bu çalışmada moleküler mekanik, yarı-deneysel ve *ab-initio* yöntemlerini içeren, çok sayıda teori ve temel set seçeneğine sahip olan oldukça kapsamlı bir program olan Gaussian 09W [242] paket programı kullanılmıştır.

Program kullanılırken öncelikle bir teori düzeyi belirlemek gerekmektedir. Gaussian 09W [242] programında en çok kullanılan teori düzeylerinin kısaltmaları şöyledir: HF (Hartree-Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi), B3LYP (Becke tipi 3-parametrelili Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (Lee-Yang-Parr korelasyon modelini kullanır.)), MP2 (2. derece Moller-PlessetPertürbasyon Teorisi), MP4 (4. derece Moller-PlessetPertürbasyon Teorisi), QCISD(T) (2. derece Konfigürasyon Etkileşmesi (tekli, ikili, üçlü)).

Bir sonraki adım ise bir temel set kümesi belirlemektir. Temel set fonksiyonları ve teori düzeyleri ile ilgili bilgiler önceki kısımlarda geniş olarak ele alınmıştır.

Gaussian 09W [242] programı ile atom ve moleküllerin enerjileri hesaplanabilir, geometrik optimizasyonları yapılabilir ve enerjiye bağlı olan titreşim frekansları, kuvvet sabitleri ve dipol momentleri hesaplanabilir. Program potansiyel enerji yüzeyinde dolaşarak minimumlar, geçiş halleri ve tepkime güzergâhını tarayabilir, molekül dalga fonksiyonunun kararlılığını test edebilir. Ayrıca IR ve Raman spektrumları, termokimyasal özellikleri, bağ ve tepkime enerjileri, molekül orbitalleri, atom yükleri, çok kutuplu momentler, NMR ve manyetik duyarlılık titreşimsel şiddetleri, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjileri, kutuplanabilirlik ve hiperkutuplanma, elektrostatik potansiyel ve elektron yoğunluğu gibi pek çok özelliğin atomlar ve moleküller için hesaplanmasına olanak tanır. Tüm bu özellikler gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında hesaplanabilir. Hesaplamalarda atom veya molekülün temel hali ya da uyarılmış hali kullanılabilir.

2.7. GaussView

GaussView programı, bir molekülün üç boyutlu tasarımını yaparak molekülün özelliklerinin görsel olarak tanımlanmasına, bu değerler üzerinde değişiklik yapılabilmesine ve giriş (input) dataları oluşturarak hesaplamaların başlatılmasına imkan veren, Gaussian paket programlarına dahil edilmiş olan bir grafik ara yüzüdür [225]. Bu program molekülleri görsel hale getirip onları istediğimiz gibi döndürmemize, hareket ettirmemize, moleküllerde değişiklik yapmamıza ve Gaussian programında çalışılmış bir molekül için hesaplanmış olan sonuçları grafiksel olarak incelememize olanak sağlar. Bu sonuçlar; optimize edilmiş moleküler yapılar, moleküler orbitaller, elektrostatik potansiyel yüzeyi, atomik yükler, IR, Raman, NMR, VCD spektrumları, titreşim frekanslarına bağlı normal mod animasyonları gibi sıralanabilir.

2.8. Sentez

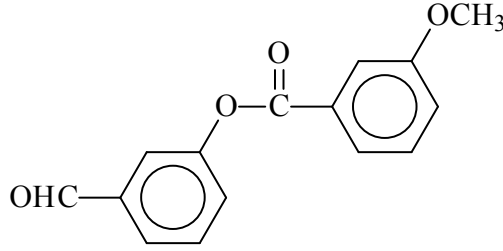
Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Organik Kimya Araştırma Laboratuvarında gerçekleştirilmiştir. Çalışmada kullanılan kimyasal maddeler Merck, Fluka ve Aldrich firmalarından sağlanmıştır. Gerekli çözücüler ise yerli ya da yurtdışı kaynaklardan temin edilmiştir.

Çalışma kapsamında sentezlenen bileşiklerin erime noktaları WRS-2A Microprocessor Melting-point Apparatus marka erime noktası tayin cihazında tayin edilmiştir. Yapı aydınlatılmasında kullanılan IR spektrumları çalışmanın yürütüldüğü laboratuvarında, ALPHA-P BRUKER FT-IR spektrometresinde alınmıştır. ¹H-NMR ve ¹³C-NMR spektrumları Mersin Üniversitesi Merkez Araştırma ve Uygulama Laboratuvarında, Bruker marka 400 MHz'lik NMR cihazında alınmıştır. UV absorpsiyon spektrumları da Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Organik Kimya araştırma Laboratuvarında PG Instruments Ltd T80 UV/VIS Spectrometerde %95'lik etanolde 10⁻⁴-10⁻⁵ M çözeltileri halinde 10 mm kuartz hücreleri kullanılarak alınmıştır. Çalışmada sentezlenen bileşiklerin indirgeme gücü, serbest radikal giderme aktivitesi ve metal şelat aktivitesi metotları ile antioksidan özellikleri Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Organik Kimya Araştırma Laboratuvarında incelenmiştir. Çalışmada PG Instruments Ltd T80 UV/VIS Spectrometer kullanılmıştır.

Çalışma kapsamında sentezlenen ve N-H grubu taşıyan asidik bileşiklerin dört farklı susuz çözücünde TBAH ile potansiyometrik titrasyonları Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Organik Kimya Araştırma Laboratuvarında Jenco model pH metre kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Çalışmada öncelikle nitrillerden başlanarak literatürde kayıtlı 8 adet iminoester hidroklorür elde edilmiş, sonra bu bileşiklerden 8 adet ester etoksikarbonilhidrazon ve son olarak çalışma için gerekli 8 adet 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2) bileşiği sentezlenmiştir. Bu bileşiklerin literatürde kayıtlı bileşiklerle identik olduğu IR spektrum verileri ve erime noktaları tayin edilerek belirlenmiştir.

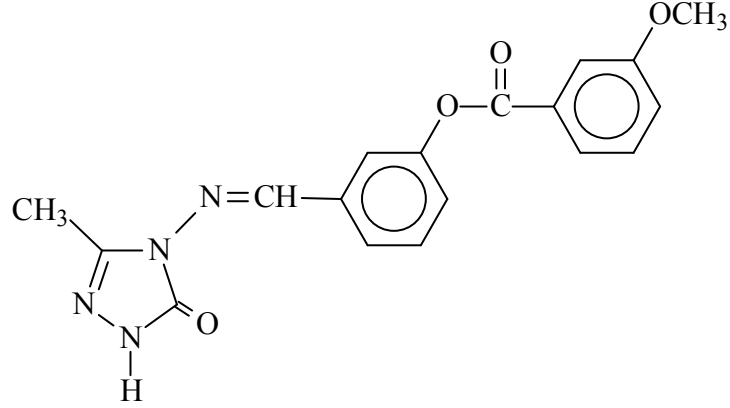
2.8.1. 3-(3-Metoksibenzoksi)-benzaldehyd (175):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-hidroksibenzaldehidin (1.22 g, 10 mmol) 100 mL etil asetatdaki çözeltilisine 3-metoksibenzoil klorür (1.706 g, 10 mmol) buz banyosunda karıştırarak ilave edilmiştir. Bu çözeltiliye karıştırarak trietilaminin (1.4 mL, 10 mmol) 20 mL etil asetatdaki çözeltisi yavaş yavaş ilave edilerek 30 dakika 0-5 °C de karıştırıldıktan sonra 1 saat daha oda sıcaklığında karıştırılmıştır. Daha sonra geri soğutucu altında 3 saat magnetik karıştırıcıda riflaks edilmiştir. Soğutulduktan sonra çöken tuz süzülerek uzaklaştırılmıştır. Süzüntü evaporatörde buharlaştırıldıktan sonra kalıntı su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde kurutulmuş ve etanolden kristallendirilmiştir (2.20 g, % 85.94 verim). E.n. 70 °C. IR: 2831 ve 2745(CHO), 1732, 1689(C=O), 1287(COO) cm⁻¹. ¹H-NMR (DMSO-d₆): δ 3.87 (s, 3H, OCH₃), 4.86 (s, 2H, OCH₂), 7.33-7.36 (m, 1H, ArH), 7.55 (t, 1H, ArH; *J*=8.40 Hz), 7.64-7.69 (m, 2H, ArH), 7.73 (t, 1H, ArH; *J*=8.00 Hz), 7.75-7.78 (m, 1H, ArH), 7.84-7.85 (m, 1H, ArH), 7.89-7.91 (m, 1H, ArH), 10.06 (s, 1H, CHO). ¹³C-NMR (100 MHz, DMSO-d₆): δ 55.42 (OCH₃), 114.43; 120.23; 122.15; 122.26; 127.31; 128.08; 129.95; 130.14; 130.52; 137.63; 151.10; 159.42 (ArC), 164.26 (COO), 192.30 (CHO). UV [Etanol, λ_{max}, nm (ε, L.mol⁻¹.cm⁻¹): 296 (8087), 240 (16586), 232 (15425), 220 (19448).

IR	:	Ek Şekil 1
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	:	Ek Şekil 2
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	:	Ek Şekil 3
UV (Etanol % 95)	:	Ek Şekil 43

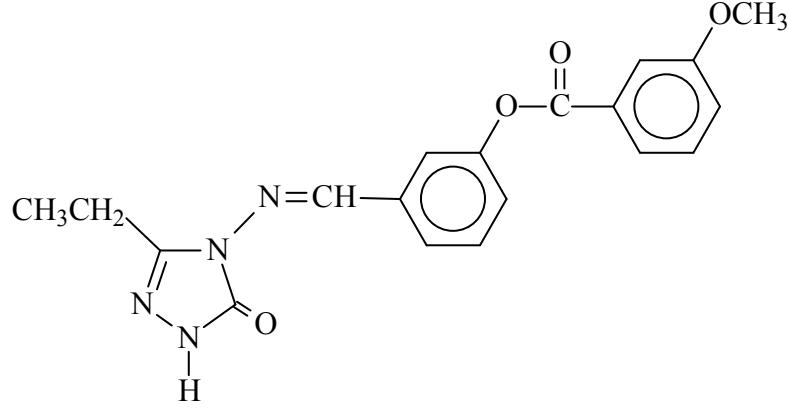
2.8.2. 3-Metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on(177) :



Yuvarlak dipli bir balonda 3-metil-4-amino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2a) (1.14 g, 10 mmol) bileşiğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.48 g, % 98.86 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **177** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 188 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 4
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 5
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 6
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 44

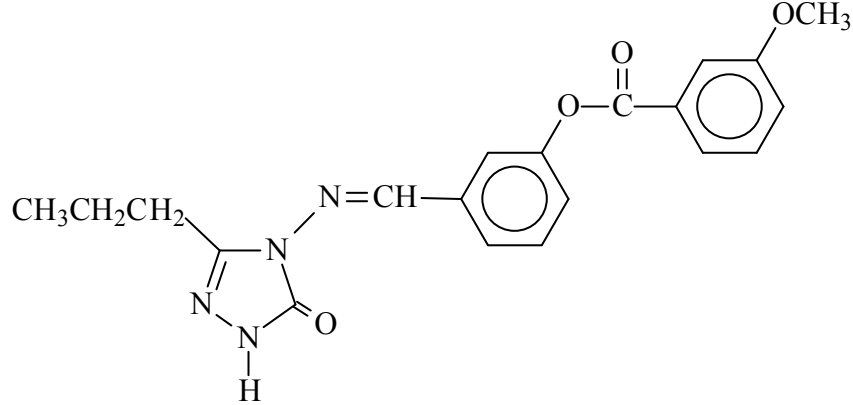
2.8.3. 3-Etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (178):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-etil-4-amino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2b) (1.28 g, 10 mmol) bileşiğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.59 g, % 98.36 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **178** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 192 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 7
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 8
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 9
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 45

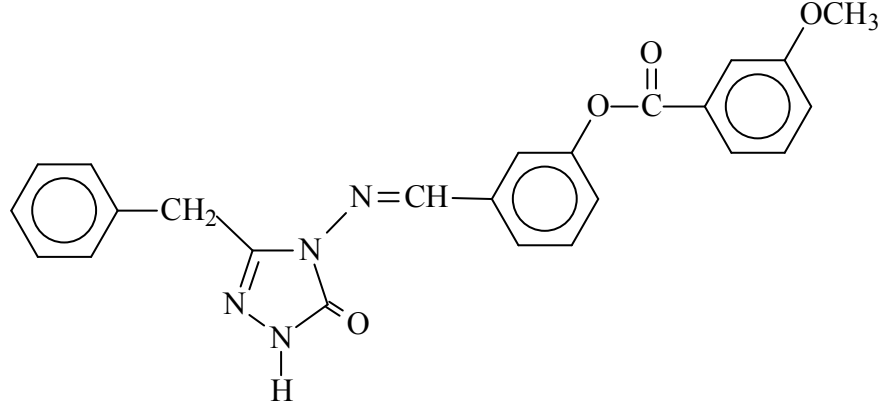
2.8.4. 3-*n*-Propil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (179):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-*n*-propil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2c) (1.42 g, 10 mmol) bileşiğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.71 g, % 97.50 verim) aynı karışımdan birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **179** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 169 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 10
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 11
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 12
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 46

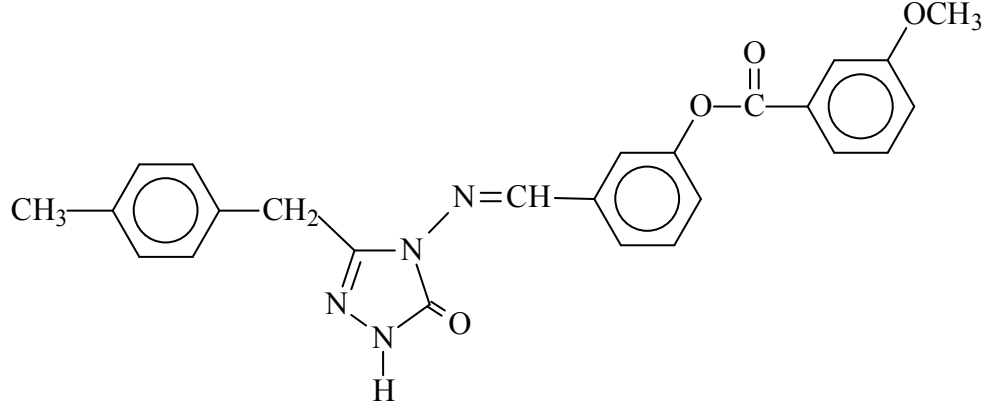
2.8.5. 3-Benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (180):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-benzil-4-amino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2d) (1.90 g, 10 mmol) bileşiğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzalhidin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (4.23 g, % 98.72 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **180** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 189 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 13
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 14
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 15
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 47

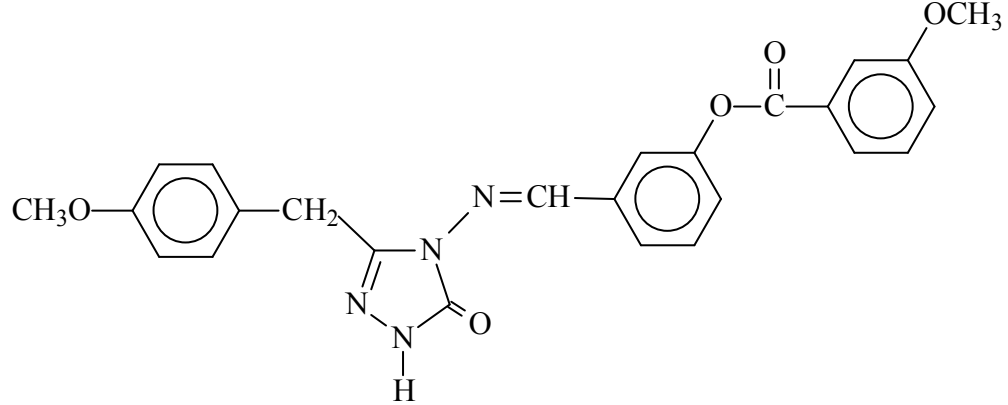
2.8.6. 3-*p*-Metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (181):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-*p*-metilbenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2e) (2.04 g, 10 mmol) bileşğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriğı soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (4.36 g, % 98.68 verim) aynı çözücüden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **181** bileşğii olarak tanımlanmıştır. E.n. 163 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 16
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 17
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 18
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 48

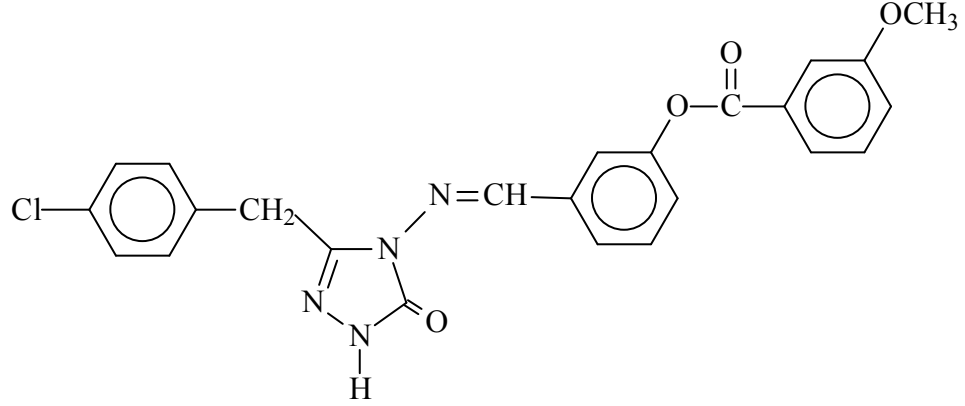
2.8.7 3-*p*-Metoksibenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (182):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-*p*-metoksibenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2f) (2.20 g, 10 mmol) bileşğinin 20 ml asetik asitteki çözeltilisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriğı soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürölmüşür. Daha sonra, çöken ham ürün süzölerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (4.52 g, % 98.63 verim) aynı çözücüden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **182** bileşğii olarak tanımlanmıştır. E.n. 172 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 19
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 20
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 21
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 49

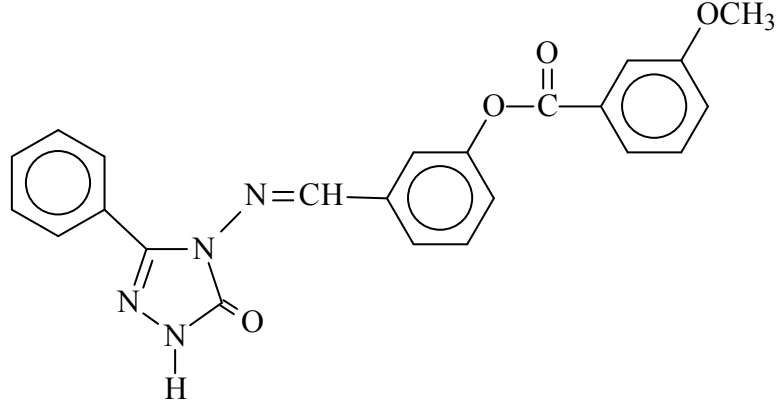
2.8.8. 3-*p*-Klorobenzil-4-[3-(3-metoksifenilkarboniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (183):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-*p*-klorobenzil-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (2g) (2.245 g, 10 mmol) bileşiminin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehydin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (4.57 g, % 98.78 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **183** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 185 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 22
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 23
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 24
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 50

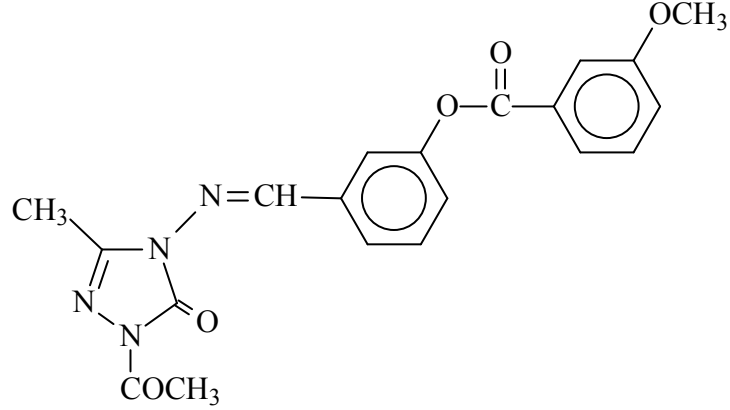
2.8.9. 3-Fenil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (184):



Yuvarlak dipli bir balonda 3-fenil-4-amino-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2i) (1.76 g, 10 mmol) bileşiğinin 20 ml asetik asitteki çözeltisine 3-(3-metoksibenzoksi)-benzalhidin (175) (2.56 g, 10 mmol) ilave edilerek geri soğutucu altında 1,5 saat kaynatılmıştır. Balon içeriği soğutulduktan sonra saf su ilavesi ile çöktürülmüştür. Daha sonra, çöken ham ürün süzülerek, saf su ile yıkanmış, desikatörde CaCl₂ üzerinde vakumda kurutulmuş ve etanolde kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (4.04 g, % 97.56 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutulduktan sonra **184** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 159 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 25
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.2	Ek Şekil 26
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.4	Ek Şekil 27
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 51

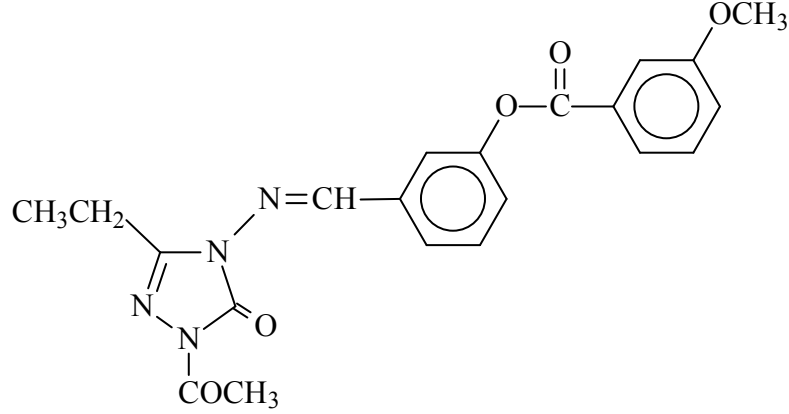
2.8.10. 1-Asetil-3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (186):



Yuvarlak dipli bir balonda 177 bileşiği (3.52 g, 10 mmol) 20 mL asetik anhidrit ile CaCl₂ tüpü takılı bir geri soğutucu altında 30 dakika kaynatıldıktan sonra 100 mL mutlak etanol ilave edilmiş ve 30 dakika daha kaynatılmıştır. Nihai çözelti 40-45 °C de ve düşük basınç altında buharlaştırılmış ve geriye kalan katı madde etanolden kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (2.47 g, % 62.86 verim) aynı çözücüden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutularak saflaştırıldıktan sonra **186** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 102 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 28
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.3	Ek Şekil 29
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.5	Ek Şekil 30
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 52

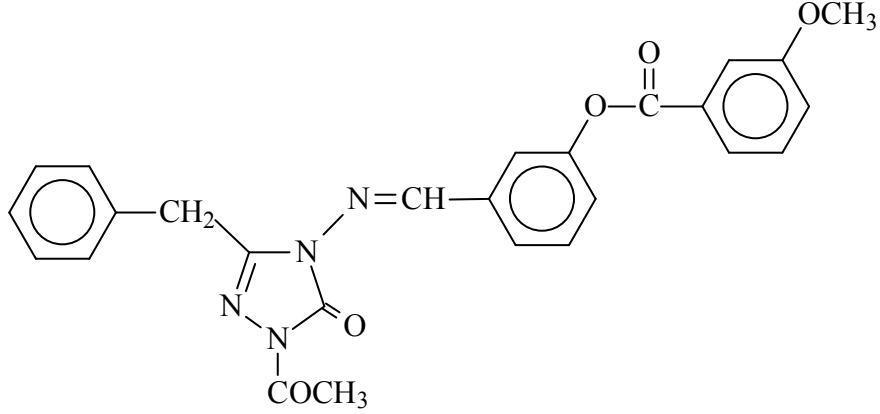
2.8.11. 1-Asetil-3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (187):



Yuvarlak dipli bir balonda 178 bileşiği (3.66 g, 10 mmol) 20 mL asetik anhidrit ile CaCl_2 tüpü takılı bir geri soğutucu altında 30 dakika kaynatıldıktan sonra 100 mL mutlak etanol ilave edilmiş ve 30 dakika daha kaynatılmıştır. Nihai çözelti 40-45 °C de ve düşük basınç altında buharlaştırılmış ve geriye kalan katı madde etanolden kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (1.92 g, % 47.14 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutularak saflaştırıldıktan sonra **187** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 115 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 31
$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6)	: Tablo 3.3	Ek Şekil 32
$^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6)	: Tablo 3.5	Ek Şekil 33
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 53

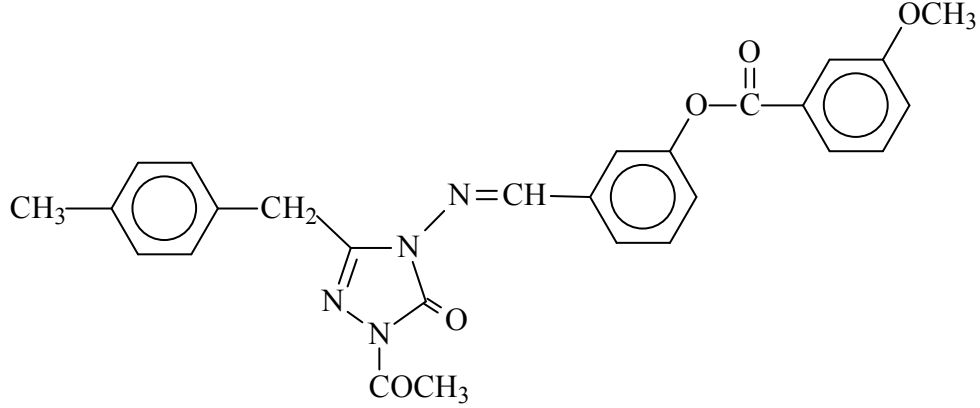
2.8.12. 1-Asetil-3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (188):



Yuvarlak dipli bir balonda 180 bileşiği (4.28 g, 10 mmol) 20 mL asetik anhidrit ile CaCl₂ tüpü takılı bir geri soğutucu altında 30 dakika kaynatıldıktan sonra 100 mL mutlak etanol ilave edilmiş ve 30 dakika daha kaynatılmıştır. Nihai çözelti 40-45 °C de ve düşük basınç altında buharlaştırılmış ve geriye kalan katı madde etanolden kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.60 g, % 76.66 verim) aynı çözücünden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutularak saflaştırıldıktan sonra **188** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 125 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 34
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.3	Ek Şekil 35
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.5	Ek Şekil 36
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 54

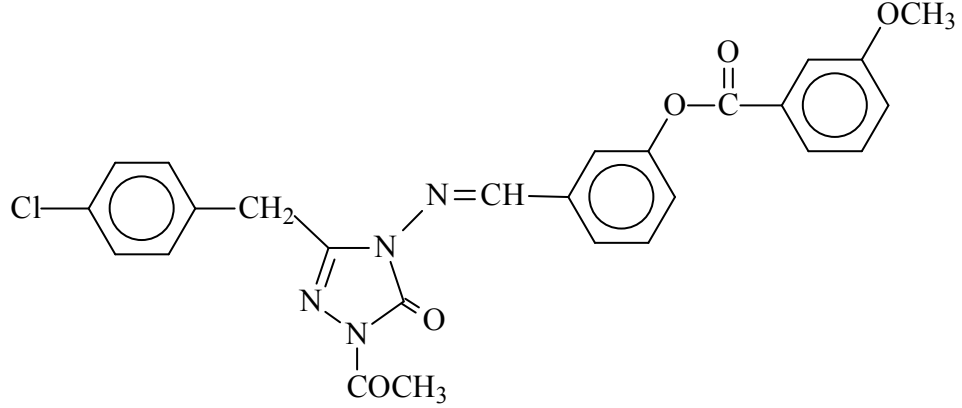
2.8.13. 1-Asetil-3-*p*-metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (189):



Yuvarlak dipli bir balonda 181 bileşiği (4.42 g, 10 mmol) 20 mL asetik anhidrit ile CaCl₂ tüpü takılı bir geri soğutucu altında 30 dakika kaynatıldıktan sonra 100 mL mutlak etanol ilave edilmiş ve 30 dakika daha kaynatılmıştır. Nihai çözelti 40-45 °C de ve düşük basınç altında buharlaştırılmış ve geriye kalan katı madde etanolden kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.95 g, % 81.66 verim) aynı çözücüden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutularak saflaştırıldıktan sonra **189** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 136 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 37
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.3	Ek Şekil 38
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.5	Ek Şekil 39
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 55

2.8.14. 1-Asetil-3-*p*-klorobenzil-4-[3-(3-metoksifenilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (190):



Yuvarlak dipli bir balonda 183 bileşiği (4.625 g, 10 mmol) 20 mL asetik anhidrit ile CaCl₂ tüpü takılı bir geri soğutucu altında 30 dakika kaynatıldıktan sonra 100 mL mutlak etanol ilave edilmiş ve 30 dakika daha kaynatılmıştır. Nihai çözelti 40-45 °C de ve düşük basınç altında buharlaştırılmış ve geriye kalan katı madde etanolden kristallendirilmiştir. Ele geçen kristaller (3.53 g, % 70.00 verim) aynı çözücüden birkaç kez daha kristallendirilip vakumda kurutularak saflaştırıldıktan sonra **190** bileşiği olarak tanımlanmıştır. E.n. 132 °C.

IR	: Tablo 3.1	Ek Şekil 40
¹ H-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.3	Ek Şekil 41
¹³ C-NMR (DMSO-d ₆)	: Tablo 3.5	Ek Şekil 42
UV (Etanol % 95)	: Tablo 3.6	Ek Şekil 56

2.9. Potansiyometrik Titrasyonlar

2.9.1. Çözücüler

175 Tipi bileşiklerin asitlik sabitlerinin tayininde susuz ortam çözücülerinden izopropil alkol, *tert*-butil alkol, *N,N*-dimetilformamid ve aseton tercih edilmiştir. Yapılan tercihte, titrant ve asitlerin çözücü içerisinde iyi çözünmeleri, çözücülerin sağladığı geniş potansiyel aralığı ve atmosfer şartlarında çalışma imkânı etkili olmuştur. Çözücüler; izopropil alkol, *tert*-butil alkol, *N,N*-dimetilformamid ve aseton Merck firmasından temin edilmiştir.

2.9.2. Titrantlar

Asitlerin titrasyonunda titrant olarak TBAH'ın izopropil alkoldeki standart 0.1 N'lik çözeltisi seyreltilerek 0,05 N'lik çözeltisi kullanılmıştır. Çözelti Merck firmasından alınmıştır.

2.9.3. Cihazlar

Yapılan çalışmada Jenco model pH metre kullanılmıştır. Kullanılan pH metre pH ölçümlerinde ± 0.01 kesinlikte, mV ölçümünde ± 0.05 'lik kesinliktedir. Elektrot olarak sağladığı büyük avantajlar nedeniyle pH elektrodu tercih edilmiştir. Titrasyonlarda 50 μL 'lik mikro pipet kullanılmıştır.

2.9.4. Hazırlanan Çözeltiler

Asitlik özellikleri incelenen bileşiklerin izopropil alkol, *tert*-butil alkol, *N,N*-dimetilformamid ve asetondeki 10^{-3} M 100 mL'lik çözeltileri hazırlanmıştır. Titrant

olarak kullanılan TBAH'nin izopropil alkoldeki 0,1 N'lik standart çözeltisinden seyreltilerek 0.05 N 250 mL'lik çözeltisi hazırlanmıştır.

2.9.5. Deneyin Yapılışı

Potansiyometrik titrasyon için gerekli çalışma düzeneği kurulmuş ve tampon tabletler yardımıyla pH'sı 7.00 ± 0.02 (25°C) ile 10.00 ± 0.05 (25°C) olan iki adet tampon çözelti hazırlanmıştır. pH Metrenin tamponlar yardımıyla kalibrasyonu yapılmıştır. Bütün çalışmalar 25°C 'de yapılmıştır. Asitlik özellikleri incelenen bileşiklerin hazırlanan 10^{-3} M'lik çözeltisinden 17 mL beher içine alınmış ve çözelti magnetik karıştırıcıyla karıştırılarak homojen hale getirilmiştir. 1 mL'lik pipetten karışmakta olan asit çözeltisine her defasında 0.05 mL 0.05 N'lik TBAH'nin izopropil alkoldeki çözeltisi ile potansiyometrik metotla titre edildi. Titrasyon sonucu okunan pH ve mV değerleri dikkate alınarak pK_a ve HNP değerleri yarı nötralizasyon metoduna göre hesaplandı.

2.9.6. Dönüm Noktası Tayini

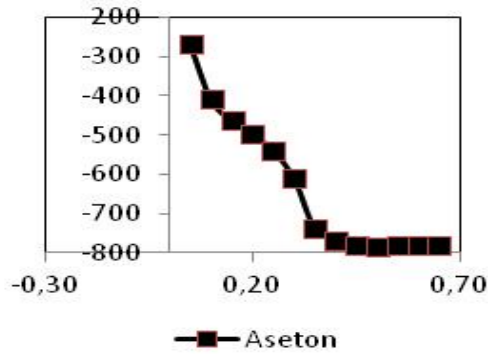
Tablo 2.1. 184 Bileşiğinin asetondaki deney sonuçları

TBAH (mL)	pH	mV
0.05	12.35	-269
0.10	15.00	-409
0.15	16.09	-464
0.20	16.69	-496
0.25	17.56	-541
0.30	18.81	-612
0.35		-740
0.40		-770
0.45		-780
0.50		-784
0.55		-780

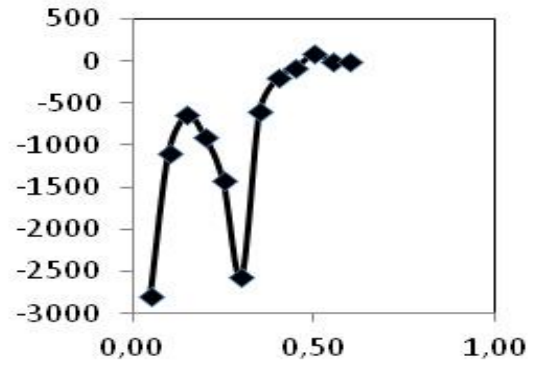
Bu deęerlerden donum noktasını belirlemek gu olduęundan birinci turev ve ikinci turev eęrisi izilmiřtir (řekil 2.4). Bunun iin $\Delta E/\Delta V$ ve $\Delta^2 E/\Delta V^2$ deęeri hesaplanarak titrant hacmine karřılık grafięe geirilmiřtir. $\Delta E/\Delta V$ deęerleri titrant hacmine karřı hesaplanmıřtır (Tablo 2.2).

Tablo 2.2. 184 Bileřinin asetondaki deney sonularının birinci ve ikinci turevleri

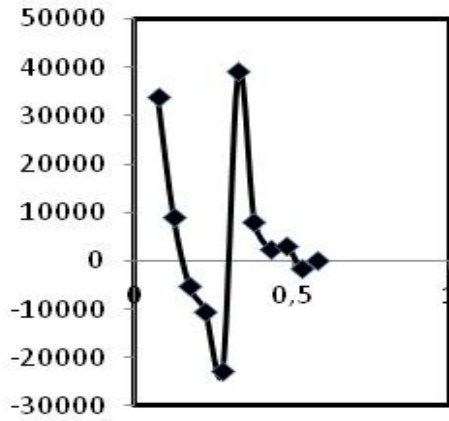
TBAH (mL)	mV	$\Delta E/\Delta V$	$\Delta^2 E/\Delta V^2$
0.05	-269	-2800	34000
0.10	-409		
0.15	-464	-1100	9200
0.20	-496	-640	-5200
0.25	-541	-900	-10400
0.30	-612	-1420	-22800
0.35	-740	-2560	39200
0.40	-770	-600	8000
0.45	-780	-200	2400
0.50	-784	-80	3200
0.55	-780	80	



a.



b.



c.

Şekil 2.4. 184 Bileşiğinin 0.05 N TBAH ile aseton ortamındaki titrasyonundan elde edilen; **a.** mL-mV Grafıđı, **b.** $\Delta E/\Delta V$ Eđrisi, **c.** $\Delta^2 E/\Delta V^2$ Eđrisi

Birinci ve ikinci turev eđrisinden yararlanarak, titrasyonun donum noktası belirlenmiřtir. Tablo 2.2'deki deđerlerden donum noktası 0.30 mL olduđu gorumuřtur. Donum noktası 0.30 mL titrant hacmine karřın olan -612 mV olarak bulunmuřtur. Yarı n6tralizasyondaki TBAH deđeri 0.15 mL olup pH deđerleri ise 16.09 dir. Yarı n6tralizasyondaki $pH = pK_a$ olduđundan 184 bileřiğinin asetonadaki pK_a deđerleri 16.09, yarı n6tralizasyon potansiyeli -464 olarak hesaplanmıřtır.

Yukarıda 6rnek olarak 184 bileřiğinin aseton ortamındaki potansiyometrik metotla yapılan titrasyon sonuları verilmiřtir.

2.10. Yeni Maddelerin Antioksidan Özelliklerinin İncelenmesi

2.10.1. İndirgeme Gücü

İndirgeme gücü Oyaizu metoduna göre yapılmıştır [243]. Bu metodun prensibi antioksidan bileşiklerin $K_3Fe(CN)_6$, TCA ve $FeCl_3$ ile oluşturduğu renkli komplekslerin UV spektrofotometresinde 700 nm’de ölçümüne dayanmaktadır. Reaksiyon karışımının absorbansındaki artış numunenin indirgeme gücü ile doğru orantılıdır. Kullanılan reaktifler şunlardır: Fosfat tamponu (0.2 M, pH = 6.6); $K_3Fe(CN)_6$ (%1); TCA çözeltisi (%10); $FeCl_3$ (%0.1); α -tokoferol (1mg/mL); BHT (1mg/mL); BHA (1mg/mL).

Çalışmada sentezi yapılan, her bir bileşikten 10 mg tartılarak bir miktar etil alkolde çözülmüştür. Son hacim yine aynı çözücülerden ilave edilerek 10 mL’ye tamamlanmıştır. Standartlar da 1 mg/mL olacak şekilde etanolde çözülmüş ve 10 mL’lik deney tüplerine aşağıdaki tabloya göre pipetlemeler yapılmıştır.

Tablo 2.3. İndirgeme Gücü Tayininde İlave Edilen Reaktif Miktarları

Reaktifler	S ₁	S ₂	S ₃	N ₁	N ₂	N ₃	Kör
Bileşik	-	-	-	100 μ L	250 μ L	500 μ L	-
Standart	100 μ L	250 μ L	500 μ L	-	-	-	-
Fosfat tamponu	2.4 mL	2.25 mL	2.0 mL	2.4 mL	2.25 mL	2.0 mL	-
$K_3Fe(CN)_6$	2.5 mL	2.5 mL	2.5 mL	2.5 mL	2.5 mL	2.5 mL	-

Deney tüpleri iyice karıştırılmış ve 50°C’de 20 dakika inkübasyona bırakılmıştır. İnkübasyonun ardından oda sıcaklığına getirilen her bir deney tüpüne %10’luk TCA çözeltisinden 2.5 mL ilave edilmiş ve 3000 rpm’de 10 dakika santrifüjlenmiştir. Supernatant kısmından 2.5 mL alınarak deney tüplerine aktarılmış ve çözeltiliye 2.5 mL su, ardından 0.5 mL $FeCl_3$ çözeltisinden ilave edilmiştir. Kör çözelti ise 2.5 mL TCA, 2.5 mL deiyonize su ve 0.5 mL $FeCl_3$ çözeltisinden oluşmuştur. Son olarak oluşan koyu lacivert rengin absorbansı 700 nm’de UV spektrofotometresinde ölçülmüştür.

2.10.2. Serbest Radikal Giderme Aktivitesi

Bileşiklerin serbest radikal giderme aktivitesi tayini 1,1-difenil-2-pikril-hidrazilin (DPPH) kullanıldığı Blois metoduna göre yapılmıştır [244]. Metodun prensibi serbest radikal toplayıcılarının renkli serbest radikal olan DPPH'ı indirgemesine dayanır. DPPH kırmızı renkli kararlı bir serbest radikaldir. Serbest radikaller antioksidan bileşikler tarafından giderildiğinde renk kırmızıdan sarıya döner. Reaksiyon karışımının 517 nm'deki absorbansındaki düşüş serbest radikal giderme aktivitesi ile doğru orantılıdır. Kullanılan reaktifler şunlardır: 0.1 mM DPPH (etanolda hazırlanmıştır); α -tokoferol (1mg/mL); BHA (1mg/mL).

Çalışmada sentezi yapılan bileşikler 1 mg/mL olacak şekilde etil alkolde çözülmüştür. Standartlar ise yine 1 mg/mL olacak şekilde etanolda çözülmüş ve 10 mL'lik deney tüplerine aşağıdaki tabloya göre pipetlemeler yapılmıştır.

Tablo 2.4. Serbest Radikal Giderme Tayininde İlave Edilen Reaktif Miktarları

Reaktifler	S ₁	S ₂	S ₃	N ₁	N ₂	N ₃	Kör	Kontrol
Bileşik	-	-	-	50 μ L	100 μ L	150 μ L	-	-
Standart	50 μ L	100 μ L	150 μ L	-	-	-	-	-
Etil alkol	2.95 mL	2.90 mL	2.85 mL	2.95 mL	2.90 mL	2.85 mL	-	3 mL
DPPH	1 mL	1 mL	1 mL	1 mL	1 mL	1 mL	4 mL	1 mL

Deney tüpleri iyice karıştırılmış ve oda sıcaklığında 30 dakika bekletildikten sonra 517 nm'de absorbansları UV spektrofotometresinde ölçülmüştür. Reaksiyon ortamındaki DPPH radikalini giderme aktivitesi için hesaplamalar aşağıdaki formüle göre hesaplanmıştır.

$$\% \text{ Serbest Radikal Giderme Aktivitesi} = (A_0 - A_1/A_0) \times 100$$

A₀: Kontrol reaksiyonunun absorbansı. **A₁**: Numune veya standardın absorbansı

2.10.3. Metal Şelat Aktivitesi

Metal şelat aktivitesi tayini Dinis metoduna göre yapılmıştır [245]. Metal şelat aktivitesi tayininin prensibi, ferrozin-Fe⁺² kompleks oluşumunun inhibisyonuna dayanmaktadır. Kullanılan reaktifler şunlardır: 2 mM FeCl₂.4H₂O; 5 mM ferrozin; α-tokoferol (1mg/mL); EDTA (1mg/mL).

Çalışmada sentezi yapılan bileşiklerin ve standartların etanolde 1mg/mL olacak şekilde çözeltileri hazırlanarak 10 mL'lik deney tüplerine aşağıdaki tabloya göre pipetlemeleri yapılmıştır.

Tablo 2.5. Metal Şelat Aktivitesi Tayininde İlave Edilen Reaktif Miktarları

Reaktifler	S ₁	S ₂	S ₃	N ₁	N ₂	N ₃	Kör	Kontrol
Bileşik	-	-	-	30 µL	60 µL	90 µL	-	-
Standart	30 µL	60 µL	90 µL	-	-	-	-	-
Etanol	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL	3.75 mL
FeCl ₂ .4H ₂ O	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL	0.05 mL
Ferrozin	0.2 mL	0.2 mL	0.2 mL	0.2 mL	0.2 mL	0.2 mL	-	0.2 mL

Deney tüplerine konulan numuneler ve standartlar 15, 30 ve 45 µg/mL konsantrasyonlarını oluşturacak ve toplam hacimleri 200 µL olacak şekilde saf su kullanılarak seyreltilmiştir. Sonra sırasıyla FeCl₂.4H₂O, etil alkol ve ferrozin ilave edilerek karıştırılmış ve oda sıcaklığında 10 dakika bekletilmiştir. Oluşan renk 562 nm'de UV spektrofotometresinde köre (ferrozin dışındakiler) karşı okunmuştur.

Ferrozin-Fe⁺² karmaşık oluşumunun inhibisyon yüzdesi aşağıdaki formüle göre hesaplanmıştır:

$$\text{Şelat yüzdesi} = (A_0 - A_1 / A_0) \times 100$$

A₀: Kontrol reaksiyonunun absorbansı, **A₁**: Numune veya standardın absorbansı

2. BULGULAR

3.1. Sentezlenen Bileşiklerin IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV Spektrum Verileri

Çalışmada sentezlenen 176 ve 185 tipi bileşiklerin IR spektrumları alınmış ve spektrumlarda ortaya çıkan karakteristik pikler değerlendirilerek yeni bileşiklerin yapı aydınlatılmasında kullanılmış ve pik değerleri tablolar halinde verilmiştir.

Çalışma kapsamında sentezlenen bileşiklerin ¹H-NMR spektrumları DMSO-d₆'da alınmış ve bu spektrumlarda gözlenen piklerin kimyasal kayma değerleri belirlenerek yeni bileşiklerin yapı aydınlatılmasında kullanılmış ve bu değerler tablolar halinde verilmiştir.

Bileşiklerin ¹H-NMR spektrumlarında δ 2,50-2,60 ppm civarında DMSO-d₆'dan ileri gelen metil protonlarına ait karakteristik pikler gözlenmiştir, ki bu durum literatürdeki verilerle uyumludur. Ayrıca bu spektrumların bazılarında kullanılan DMSO-d₆'nın içerdiği az miktardaki sudan ileri gelen karakteristik H₂O pikleri δ 3,50 ppm civarında ortaya çıkmıştır. Tetrametilsilan (TMS) sıfırı belirlemek amacıyla spektrumların alınmasında standart olarak kullanılmıştır.

¹³C-NMR spektrumlarının alınmasında da çözücü olarak kullanılan DMSO-d₆'dan ileri gelen karakteristik karbon pikleri δ 40 ppm civarında gözlenmiş olup, bu spektrumlardan elde edilen veriler yapı aydınlatılmasında kullanılmış ve tablolar halinde aşağıda verilmiştir.

Çalışmada, ayrıca organik bileşiklerin yapı aydınlatılmasına sınırlı katkısı olmasına karşın sentezlenen bileşiklerin %95'lik etanolde 10⁻⁴-10⁻⁵ M'lık çözeltileri halinde UV spektrumları alınmış, gözlenen piklerin λ_{\max} değerleri belirlenerek karşın olan ϵ_{\max} değerleri hesaplanmış ve bulunan değerler tablolar halinde sunulmuştur. Elde edilen verilerin literatürde 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerine ait UV absorpsiyon spektrumlarında ortaya çıkan verilerle uyumlu olduğu belirlenmiştir. Elde edilen yeni

bileşiklere ait IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV spektrum verileri tablolar halinde aşağıda verilmiştir.

Tablo 3.1. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin IR spektrum verileri (KBr, cm⁻¹)

Bileşik No	ν_{NH}	$\nu_{\text{C=O}}$	$\nu_{\text{C=N}}$	ν_{COO}	$\nu_{1,4\text{-disubstitue}}$ aromatik halka	$\nu_{1,3\text{-disubstitue}}$ aromatik halka	$\nu_{\text{Monosubstitue}}$ aromatik halka
177	3169	1735, 1700	1601,1578	1268	-	681 ve 776	-
178	3162	1737, 1701	1595	1264	-	680 ve 785	-
179	3165	1737, 1706	1582	1265	-	678 ve 779	-
180	3167	1730, 1698,	1578	1273	-	687 ve 813	775 ve 687
181	3166	1732, 1708	1584	1247	849	683 ve 777	-
182	3166	1707	1586	1244	803	684 ve 773	-
183	3167	1711	1594	1272	833	682 ve 795	-
184	3154	1733, 1685	1596	1254	-	676 ve 780	727 ve 676
186	-	1712	1581	1264	-	682 ve 788	-
187	-	1729	1582	1278	-	686 ve 789	-
188	-	1728	1596	1279	-	685 ve 786	745 ve 710
189	-	1766, 1733	1581	1260	817	686 ve 786	-
190	-	1724	1606	1272	805	682 ve 786	-

Tablo 3.2. 176 Tipi bileşiklerin ¹H-NMR spektrum verileri (DMSO-d₆, δ/ppm)

Bileşik No	CH ₃	CH ₂	CH ₂	COCH ₃	OCH ₃	OCH ₃	Aromatik H	N=CH	NH
177	2.29(s)	-	-	-	-	3.87(s)	7.33-7.36(m, 1H); 7.46-7.48(m 1H); 7.55(t, 1H, <i>J</i> =7.84 Hz); 7.60-7.64(m 2H); 7.75-7.79(m, 3H)	9.79(s)	11.87(s)
178	1.22(t, <i>J</i> =7.60 Hz)	2.70(q, <i>J</i> =7.60 Hz)	-	-	-	3.87(s)	7.33-7.36(m, 1H); 7.46-7.49(m 1H); 7.55(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.62(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.64-7.65(m, 1H); 7.75-7.79(m, 3H)	9.79(s)	11.89(s)
179	0.94(t, <i>J</i> =7.20 Hz)	1.70 (sext, <i>J</i> =7.20 Hz)	2.66 (t, <i>J</i> =7.20 Hz)	-	-	3.87(s)	7.33-7.36(m, 1H); 7.46-7.49(m 1H); 7.55(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.62(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.64-7.65(m, 1H); 7.75-7.79(m, 3H)	9.79(s)	11.90(s)
180	-	-	4.08(s)	-	-	3.88(s)	7.21-7.23(m, 1H); 7.27-7.33(m 4H); 7.34-7.38(m, 1H); 7.46-7.48(m, 1H); 7.57(m, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.61(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.66-7.67(m, 1H); 7.72-7.76(m, 2H); 7.77-7.80(m, 1H)	9.74(s)	12.02(s)
181	2.21(s)	-	4.02(s)	-	-	3.88(s)	7.08(d, 2H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.21(d, 2H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.35-7.38(m, 1H); 7.45-7.48(m, 1H); 7.57(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.61(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.66-7.67(m, 1H), 7.70-7.71(m, 1H); 7.73-7.75(m, 1H); 7.77-7.78 (m, 1H)	9.73(s)	12.00(s)
182	-	-	4.00(s)	-	3.68(s)	3.88(s)	6.84(d, 2H, <i>J</i> =8.80 Hz); 7.25(d, 2H, <i>J</i> =8.80 Hz); 7.35-7.37(m, 1H); 7.46-7.49(m, 1H); 7.57(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.62(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.75-7.76(m, 1H); 7.77-7.78(m, 1H); 7.79-7.80(m, 1H)	9.75(s)	11.99(s)
183	-	-	4.09(s)	-	-	3.88(s)	7.33-7.38(m, 5H); 7.45-7.48(m, 1H); 7.56(t, 1H, <i>J</i> =7.60 Hz); 7.61(t, 1H, <i>J</i> =7.60 Hz); 7.66-7.67(m, 1H); 7.72-7.75(m, 2H); 7.77-7.79(m, 1H)	9.75(s)	12.05(s)
184	-	-	-	-	-	3.86(s)	7.32-7.34(m, 1H); 7.47-7.55(m, 5H); 7.61-7.64(m, 2H); 7.73-7.79(m, 3H); 7.90-7.93(m, 2H)	9.73(s)	12.43(s)

Tablo 3.3. 185 Tipi bileşiklerin ¹H-NMR spektrum verileri (DMSO-d₆, δ/ppm)

Bileşik No	CH ₃	CH ₂	CH ₂	COCH ₃	OCH ₃	OCH ₃	Aromatik H	N=CH	NH
186	2.37(s)	-	-	2.50(s)	3.88(s)		7.34-7.37(m, 1H); 7.50-7.53(m, 1H); 7.56(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.62-7.67(m, 2H); 7.75-7.78(m, 1H); 7.82-7.85(m, 2H)	9.67(s)	-
187	1.25(s, <i>J</i> =7.60 Hz)	2.77(q, <i>J</i> =7.60 Hz)	-	2.52(s)	3.87(s)		7.34-7.36(m, 1H); 7.50-7.52(m, 1H); 7.55(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.62-7.66(m, 2H); 7.75-7.82(m, 3H)	9.65(s)	-
188	-	-	4.17(s)	2.52(s)	3.88(s)		7.21-7.25(m, 1H); 7.29-7.33(m, 2H); 7.35-7.40(m, 3H); 7.49-7.52(m, 1H); 7.58(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.63(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.66-7.67(m, 1H); 7.75-7.80(m, 3H)	9.63(s)	-
189	2.22(s)	-	4.11(s)	2.53(s)	3.88(s)		7.09 (d, 2H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.26 (m, 2H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.36-7.39 (m, 1H); 7.49-7.57 (m, 1H); 7.58 (t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.63 (t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.73-7.74 (m, 1H); 7.77-7.79 (m, 2H)	9.62(s)	-
190	-	-	4.18(s)	2.52(s)	3.88(s)		7.35-7.38(m, 3H); 7.40-7.43(m, 2H); 7.49-7.52(m, 1H); 7.57(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.63(t, 1H, <i>J</i> =8.00 Hz); 7.66-7.67(m, 1H); 7.75-7.80(m, 2H)	9.63(s)	-

Tablo 3.4. 176 Tipi bileşiklerin ¹³C-NMR spektrum verileri (DMSO-d₆, δ/ppm)

Bileşik No	C=O	COO	Triazol C ₂	N=CH	Triazol C ₁	Aromatik C	Alifatik C
177	-	164.33	152.40	151.15	144.31	159.39; 151.01; <u>135.21</u> ; 130.25; 130.16; 130.03; 125.94; 124.94; 122.13; 120.22(2C); 114.31	55.43 (OCH ₃); 11.08 (CH ₃)
178	-	164.33	152.46	151.33	148.04	159.42; 151.05; 135.27; 130.26; 130.15; 130.06; 125.82; 124.92; 122.14; 120.25; 120.21; 114.37	55.45 (OCH ₃); 18.44 (<u>CH₂CH₃</u>); 9.95(<u>CH₂CH₃</u>)
179	-	164.32	152.56	151.26	146.89	159.43; 151.05; 135.26; 130.27; 130.15; 130.06; 125.70; 124.92; 122.13; 120.36; 120.20; 114.38	55.45 (OCH ₃); 26.59 (<u>CH₂CH₂CH₃</u>); 18.80(<u>CH₂CH₂CH₃</u>); 13.44(<u>CH₂CH₂CH₃</u>)
180	-	164.32	152.14	151.17	146.25	159.46; 151.02; <u>135.76</u> ; 135.23; 130.26; 130.23; 130.10; <u>128.83(2C)</u> ; <u>128.38(2C)</u> ; <u>126.68</u> ; 125.83; 124.86; 122.14; 120.38; 120.23; 114.39	55.48 (OCH ₃); 31.11(CH ₂ Ph)
181	-	164.32	152.04	151.17	146.37	159.46; 151.02; <u>135.71</u> ; 135.26; <u>132.64</u> ; 130.25; 130.21; 130.09; <u>128.93(2C)</u> ; <u>128.69(2C)</u> ; 125.90; 124.83; 122.14; 120.29; 120.22; 114.41	55.47 (OCH ₃); 30.76(CH ₂ Ph); 20.54(PhCH ₃)
182	-	164.33	152.14	151.18	146.55	159.45; <u>158.05</u> ; 151.03; 135.26; 130.27; <u>130.21(2C)</u> ; 130.10; 129.91; <u>127.49</u> ; 125.87; 124.84; 122.14; 120.36; 120.23; 114.39; <u>113.78 (2C)</u>	55.47 (OCH ₃); 54.91(<i>p</i> -OCH ₃); 30.26(CH ₂ Ph)
183	-	164.32	152.19	151.15	145.91	159.45; 151.02; 135.18; <u>134.72</u> ; <u>131.40</u> ; <u>130.77(2C)</u> ; 130.27; 130.19; 130.09; <u>128.30 (2C)</u> ; 125.92; 124.88; 122.15; 120.31; 120.22; 114.40	55.47 (OCH ₃); 30.43(CH ₂ Ph)
184	-	164.28	155.41	151.29	144.59	159.41; 151.03; 135.00; 130.34; <u>130.12</u> ; 130.03; <u>128.50(2C)</u> ; <u>127.96(2C)</u> ; <u>126.57</u> ; 125.50; 125.10; 122.12; 120.98; 120.18; 114.39	55.92 (OCH ₃);

Tablo 3.5. 185 Tipi bileşiklerin ¹³C-NMR spektrum verileri (DMSO-d₆, δ/ppm)

Bileşik No	C=O	COO	Triazol C ₂	N=CH	Triazol C ₁	Aromatik C	Alifatik C
186	166.00	164.33	154.45	151.07	146.71	159.43; 147.81; 134.71; 130.36; 130.18; 130.03; 126.25; 125.47; 122.15; 120.57; 120.24; 114.39	55.47 (OCH ₃); 23.43 (COCH ₃); 11.21 (CH ₃)
187	165.94	164.31	154.46	151.07	148.03	159.42; 150.16; 134.72; 130.36; 130.16; 130.01; 125.44; 124.90; 122.13; 120.56; 120.21; 114.39	55.46 (OCH ₃); 23.43 (COCH ₃); 18.53(CH ₂ CH ₃); 9.37(CH ₂ CH ₃)
188	165.96	164.31	154.03	148.28	147.98	159.46; 151.03; 134.71; <u>134.67</u> ; 130.24; 130.06; <u>129.03</u> ; <u>128.83(2C)</u> ; <u>128.44(2C)</u> ; <u>126.93</u> ; 126.17; 125.38; 122.14; 120.67; 120.24; 114.40	55.49 (OCH ₃); 31.06(CH ₂ Ph); 23.51(COCH ₃)
189	165.97	164.31	153.97	148.40	147.97	159.47; 151.04; <u>136.02</u> ; 134.74; <u>131.51</u> ; 130.36; 130.24; 130.05; <u>129.00(2C)</u> ; <u>128.89(2C)</u> ; 126.26; 125.37; 122.15; 120.58; 120.24; 114.42	55.49 (OCH ₃); 30.73(CH ₂ Ph); 23.51(COCH ₃); 20.56(PhCH ₃)
190	165.93	164.32	154.02	151.04	147.99	159.45; 151.04; 134.68; <u>133.65</u> ; <u>131.66</u> ; <u>130.98(2C)</u> ; 130.37; 130.22; 130.05 <u>128.36(2C)</u> ; 126.26; 125.40; 122.16; 120.60; 120.24; 114.42	55.48 (OCH ₃); 30.38(CH ₂ Ph); 23.50(COCH ₃)

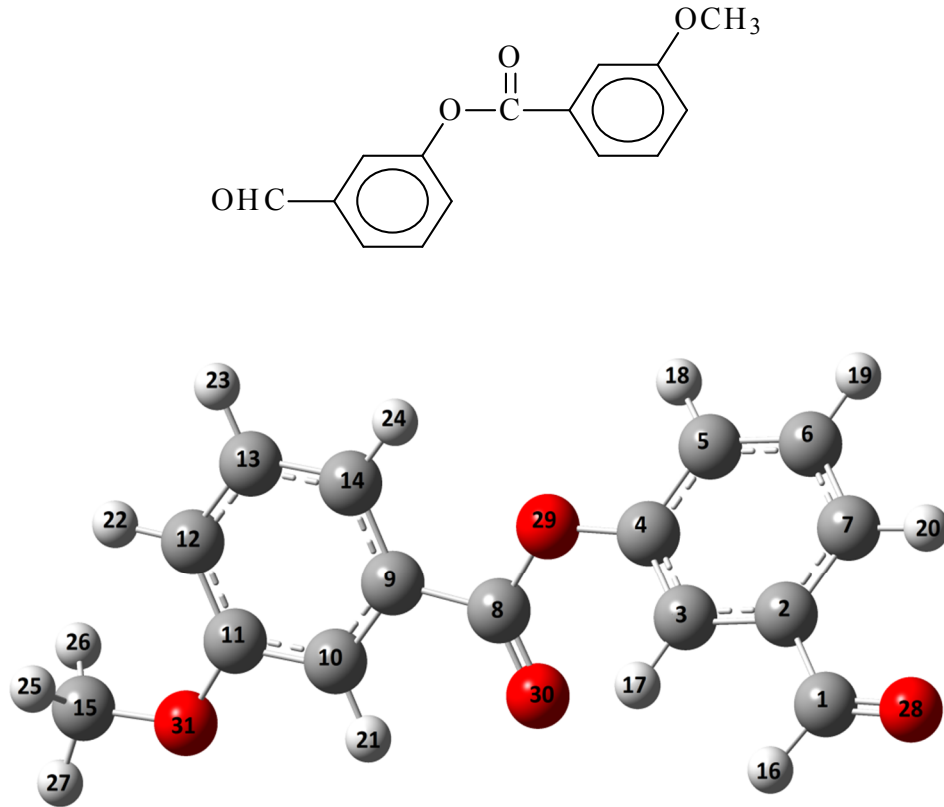
Tablo 3.6. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin UV spektrum verileri

Bileşik No	λ_{\max} (nm)	ϵ (L.mol⁻¹.cm⁻¹)	Ek Şekil No
177	296, 242, 220	16750, 13213, 23654	44
178	296, 242, 222, 218	18929, 24119, 24105, 24014	45
179	294, 240, 224	16424, 20607, 20424	46
180	296, 242, 220	20768, 26677, 26652	47
181	296, 246, 218,	13611, 20533, 35466	48
182	294, 242, 230	21516, 26766, 26858	49
183	296, 246, 222, 218	17021, 24821, 36221, 36578	50
184	296, 246, 220	16052, 30125, 33375	51
186	292, 242, 222	18225, 26050, 26458	52
187	290, 252, 240, 222	22743, 26589, 28119, 27264	53
188	290, 244, 220	18460, 28421, 30529	54
189	292, 242, 222	22903, 35590, 37987	55
190	292, 242, 224	19660, 29242, 30893	56

3.2. Sentezlenen Bileşiklerin Teorik Verileri

Teorik ve deneysel spektroskopik verileri incelenen benzaldehid türevi olan 175 bileşiği, 176 tipi bileşikleri ve bu bileşiklerin *N*-asetil türevi olan 185 tipi bileşiklerinin teorik NMR, spektral verileri (HF ve B3LYP metodlarına göre 6-311G(d) ve 3-21G temel setleri kullanılarak) deneysel verilerle karşılaştırmalı olarak, IR teorik frekans değerleri (HF ve B3LYP metodlarına göre 6-311G(d) ve 3-21G temel setleri kullanılarak), UV-vis verileri, bağ açıları, bağ uzunlukları, dipol momentleri, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri ve moleküllerin toplam enerjileri iki metod ve iki yönetime göre karşılaştırmalı olarak aşağıda tablolar ve şekiller halinde verilmiştir:

3.2.1. 3-(3-Metoksibenzoksi)-benzaldehyd (175):



Şekil 3.1. 175 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.7. 175 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	192.03	190.01	193.52	2.02	-1.49	171.77	176.01	20.26	16.02
C2	137.63	140.34	139.96	-2.71	-2.33	127.03	126.14	10.60	11.49
C3	128.09	130.58	130.86	-2.49	-2.77	121.24	122.10	6.85	5.99
C4	151.10	157.81	157.69	-6.71	-6.59	140.88	140.27	10.22	10.83
C5	127.31	128.74	130.97	-1.43	-3.66	119.45	121.49	7.86	5.82
C6	129.95	131.81	133.18	-1.86	-3.23	119.90	120.63	10.05	9.32
C7	122.26	126.30	126.11	-4.04	-3.85	117.61	117.62	4.65	4.64
C8	164.26	166.33	167.71	-2.07	-3.45	150.99	152.68	13.27	11.58
C9	130.52	134.68	133.80	-4.16	-3.28	122.60	121.67	7.92	8.85
C10	122.15	124.85	122.99	-2.70	-0.84	115.32	113.33	6.83	8.82
C11	159.42	165.25	165.46	-5.83	-6.04	149.60	149.43	9.82	9.99
C12	114.43	115.39	118.04	-0.96	-3.61	104.19	106.65	10.24	7.78
C13	130.14	131.83	133.36	-1.69	-3.22	120.84	122.37	9.30	7.77
C14	120.23	124.12	124.33	-3.89	-4.10	113.27	113.69	6.96	6.54
C15	55.42	53.46	54.00	1.96	1.42	35.31	35.78	20.11	19.64
H16	10.06	9.79	9.80	0.27	0.26	8.86	8.95	1.20	1.11
H17	7.84	7.56	7.68	0.28	0.16	6.89	7.17	0.95	0.67
H18	7.65	6.98	7.28	0.67	0.37	6.79	7.11	0.86	0.54
H19	7.73	7.18	7.44	0.55	0.29	6.85	7.12	0.88	0.61
H20	7.89	7.65	7.67	0.24	0.22	7.59	7.61	0.30	0.28
H21	7.76	7.55	7.38	0.21	0.38	7.46	7.26	0.30	0.50
H22	7.34	6.35	6.73	0.99	0.61	6.07	6.47	1.27	0.87
H23	7.55	7.05	7.30	0.50	0.25	6.79	7.09	0.76	0.46
H24	7.68	7.45	7.56	0.23	0.12	7.18	7.32	0.50	0.36
H25	3.87	3.21	3.39	0.66	0.48	2.52	2.72	1.35	1.15
H26	3.87	3.21	3.39	0.66	0.48	2.51	2.71	1.36	1.16
H27	3.87	3.70	3.78	0.17	0.09	3.09	3.15	0.78	0.72

Tablo 3.8. 175 Bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	192.03	154.62	156.61	37.41	35.42	150.59	153.30	41.44	38.73
C2	137.63	101.45	101.16	36.18	36.47	94.11	93.48	43.52	44.15
C3	128.09	90.85	90.87	37.24	37.22	84.12	84.44	43.97	43.65
C4	151.10	121.04	121.14	30.06	29.96	110.38	110.35	40.72	40.75
C5	127.31	90.47	91.98	36.84	35.33	86.12	87.66	41.19	39.65
C6	129.95	94.03	95.13	35.92	34.82	88.61	89.45	41.34	40.50
C7	122.26	90.30	90.25	31.96	32.01	86.13	86.24	36.13	36.02
C8	164.26	133.41	134.00	30.85	30.26	128.75	129.45	35.51	34.81
C9	130.52	96.30	95.55	34.22	34.97	90.05	89.23	40.47	41.29
C10	122.15	88.33	86.89	33.82	35.26	85.42	83.70	36.73	38.45
C11	159.42	124.29	124.37	35.13	35.05	118.70	115.39	40.72	44.03
C12	114.43	83.14	85.12	31.29	29.31	78.32	80.39	36.11	34.04
C13	130.14	94.37	95.61	35.77	34.53	89.01	90.44	41.13	39.70
C14	120.23	88.04	88.06	32.19	32.17	83.99	84.41	36.24	35.82
C15	55.42	31.54	32.17	23.88	23.25	15.59	16.19	39.83	39.23
H16	10.06	9.55	9.54	0.51	0.52	9.07	9.10	0.99	0.96
H17	7.84	7.83	7.85	0.01	-0.01	7.42	7.46	0.42	0.38

Tablo 3.8'in devamı

H18	7.65	5.91	6.24	1.74	1.41	5.84	6.21	1.81	1.44
H19	7.73	6.17	6.49	1.56	1.24	5.94	6.28	1.79	1.45
H20	7.89	6.98	6.93	0.91	0.96	6.88	6.92	1.01	0.97
H21	7.76	6.66	6.50	1.10	1.26	6.78	6.56	0.98	1.20
H22	7.34	5.25	5.68	2.09	1.66	4.94	5.44	2.40	1.90
H23	7.55	6.01	6.32	1.54	1.23	5.75	6.13	1.80	1.42
H24	7.68	6.64	6.78	1.04	0.90	6.49	6.69	1.19	0.99
H25	3.87	2.73	2.96	1.14	0.91	1.74	2.03	2.13	1.84
H26	3.87	2.73	2.96	1.14	0.91	1.74	2.02	2.13	1.85
H27	3.87	3.38	3.51	0.49	0.36	2.72	2.81	1.15	1.06

Tablo 3.9. 175 Bileşiğinin deneysel ve teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ COCC(75)	13	17
2	τ CCOC(57), τ CCCC(12)	25	26
3	δ COC(28), δ CCO(11)	49	46
4	τ COCC(29), τ CCOC(11), τ CCCC(28)	55	69
5	τ COCC(62), τ CCCC(12), τ HCOC(11)	70	83
6	τ OCC(51), τ CCCC(11)	110	110
7	δ COC(17), δ CCC(18), δ CCO(11)	155	148
8	τ CCCC(22)	174	170
9	ν OC(16), δ COC(12), τ CCOC(14)	210	205
10	δ OCC(16), δ CCC(48), τ HCOC(20), τ OCC(13), τ CCCC(12)	222	212
11	δ CCC(43), δ OCC(16), τ COCC(10), τ OCC(11), τ HCOC(19), τ CCCC(30)	225	221
12	τ CCCC(37)	240	233
13	δ COC(32)	273	268
14	τ CCCC(14), τ HCOC(41), τ COCC(10), τ CCCC(25)	292	277
15	δ COC(18), δ OCO(14), τ CCCC(10)	312	302
16	δ COC(35), δ OCO(11), δ OCC(12)	388	363
17	ν CC(16), δ CCC(36), δ COC(10), δ OCO(10)	439	428
18	δ CCC(11), τ CCCC(35), τ HCCC(12)	459	438
19	τ CCCC(35), τ HCCC(16)	463	442
20	δ CCC(14), δ COC(11), τ CCCC(10)	473	450
21	δ CCC(36)	501	490
22	τ OCC(30), τ CCCC(10)	579	548
23	δ CCC(11), τ CCCC(12), τ OCC(22)	581	563
24	δ CCC(17), δ COC(14), τ OCC(25)	589	568
25	δ CCO(15), δ CCC(17)	607	589
26	δ OCC(31), δ CCC(25)	684	667
27	δ CCC(17), τ CCCC(22), τ HCCC(12)	704	682
28	τ CCCC(22), τ HCCC(27)	716	683
29	τ CCCC(37), τ HCCC(23)	719	689
30	δ CCC(15), δ OCC(16), τ HCCC(14), τ OCOC(46)	801	753
31	δ OCC(14), δ CCC(13), τ OCOC(43), τ HCCC(15)	808	782
32	δ OCO(13), τ HCCC(35)	832	793
33	τ OCOC(26), τ HCCC(47), τ CCCC(13)	860	802
34	δ OCO(12), τ HCCC(16)	869	822
35	ν OC(19), τ HCCC(20)	927	876
36	τ HCCC(33)	962	890
37	ν OC(10), τ HCCC(26), τ CCCC(13)	967	896
38	ν OC(12), ν CC(15), δ CCC(14), τ HCCC(35), τ CCCC(11)	971	916
39	τ HCCC(53)	982	927
40	ν OC(10), ν CC(16), τ HCCC(45)	1003	943
41	ν CC(30), δ CCC(32), τ HCCC(46)	1027	961

Tablo 3.9'un devamı

42	v CC(23), δ CCC(52), τ CCCC(13), τ HCCC(57)	1035	978
43	δ CCC(15), τ HCCC(49)	1044	1002
44	v CC(19), δ CCC(49), τ HCCC(60), τ CCCC(11)	1056	1008
45	τ HCCC(37), τ CCCC(10)	1088	1021
46	v OC(62), v CC(17), δ HCC(23)	1124	1061
47	v CC(10), v OC(49), δ CCC(11), δ HCC(18)	1126	1085
48	v CC(19), δ HCC(23)	1136	1098
49	v CC(17), δ HCC(21)	1142	1110
50	v CC(21), δ HCC(29)	1158	1154
51	v CC(26), δ HCH(26), τ HCOC(27)	1168	1171
52	v CC(18), δ HCC(44)	1203	1177
53	δ HCC(28), δ HCH(26), τ HCOC(25)	1232	1185
54	δ HCC(20), δ HCH(13), τ HCOC(22)	1251	1199
55	v OC(15), v CC(19), δ HCC(28)	1261	1221
56	v OC(14), v CC(13), δ CCC(12), τ HCOC(12)	1266	1247
57	v CC(20), v OC(12), δ HCC(11), δ CCC(16)	1305	1285
58	v CC(12), v OC(44), δ HCC(51)	1324	1308
59	v OC(17), δ HCC(25)	1368	1311
60	δ HCC(76)	1372	1345
61	v CC(24), δ HCC(25)	1373	1349
62	v CC(10), δ HCO(71)	1465	1406
63	v CC(20), δ HCO(16)	1520	1460
64	v CC(16), δ HCC(11), δ HCH(11)	1526	1465
65	δ HCH(63), δ HCC(10)	1546	1480
66	δ HCH(74), τ HCOC(12)	1562	1498
67	δ HCH(71), τ HCOC(10)	1570	1508
68	δ CCC(22), δ HCC(23)	1573	1509
69	v CC(22), δ CCC(14), δ HCC(39), δ HCH(15)	1574	1511
70	v CC(36), δ CCC(17)	1690	1610
71	v CC(19), δ CCC(20), δ HCC(11)	1701	1619
72	v CC(41), δ HCC(14)	1715	1628
73	v CC(22)	1718	1638
74	v OC(48), v CC(34), δ CCC(12), δ HCC(11)	1895	1770
75	v OC(88)	1901	1784
76	v CH(100)	2987	2865
77	v CH(91)	3030	2983
78	v CH(50)	3086	3041
79	v CH(46)	3150	3117
80	v CH(46)	3188	3146
81	v CH(59)	3192	3149
82	v CH(62)	3206	3167
83	v CH(61)	3211	3175
84	v CH(44)	3221	3177
85	v CH(50)	3224	3186
86	v CH(28)	3236	3188
87	v CH(42)	3239	3195

Tablo 3.10. 175 Bileşiminin deneysel ve teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

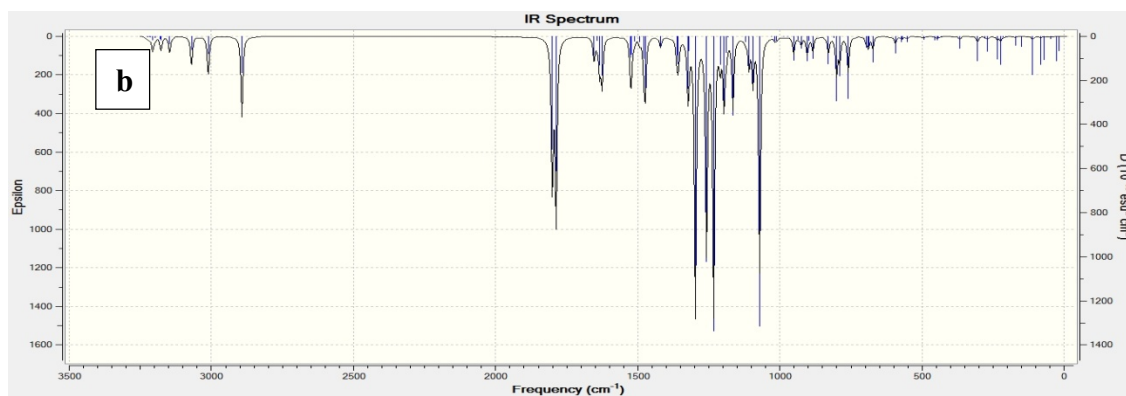
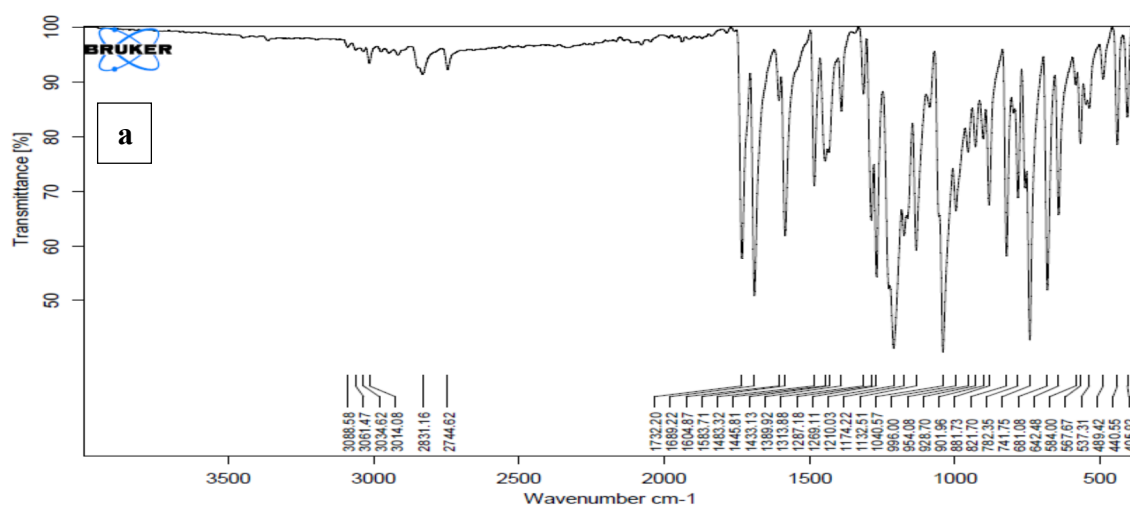
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CCOC(48), τ CCCC(18), τ CCOC(67)	23	28
2	τ CCCC(13), τ COCC(49), τ CCOC(43)	26	30
3	δ CCC(11), δ CCO(24), δ COC(33)	58	60
4	τ COCC(62), τ HCOC(10)	64	77
5	τ CCCC(22), τ COCC(30)	84	93
6	τ OCCC(50), τ CCCC(17)	123	127

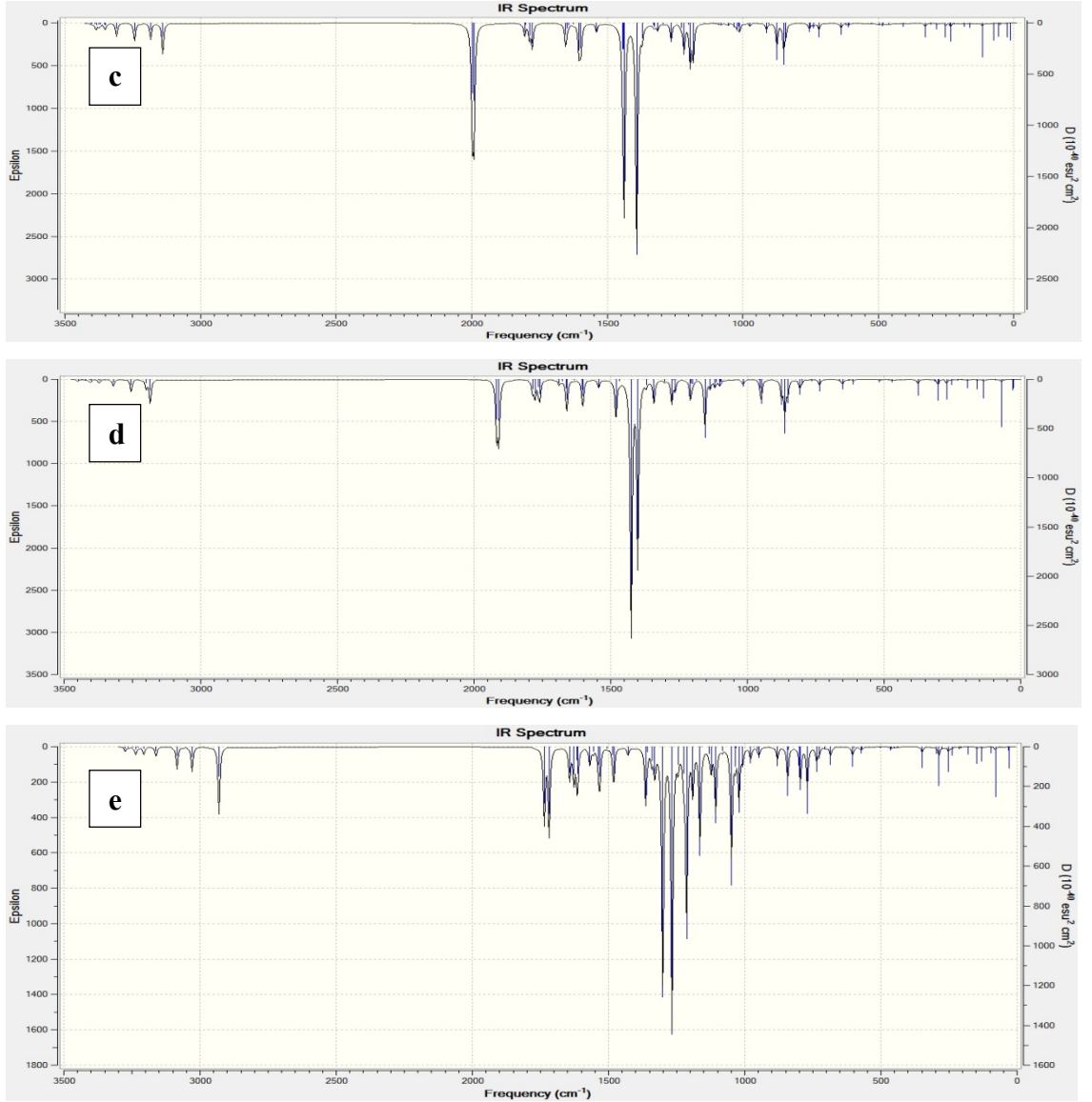
Tablo 3.10.'un devamı

7	δ CCC(26), δ COC(25)	144	142
8	τ CCCC(39)	176	174
9	ν OC(16), δ CCO(16), δ COC(18)	195	198
10	τ HCOC(44), τ CCCC(11), τ COCC(11), τ OCCC(11)	210	204
11	δ OCC(14), δ CCC(27), δ COC(15)	231	231
12	τ CCCC(35)	247	244
13	τ HCOC(16), τ CCCC(29), τ OCCC(11)	273	266
14	δ COC(32), δ CCC(10)	275	276
15	τ OCCC(17), τ CCCC(15), τ CCOC(12)	286	286
16	δ OCO(23), δ COC(42), δ COC(24)	341	336
17	ν CC(25), δ OCO(10), δ CCC(26)	427	423
18	δ COC(10), δ CCC(21)	439	435
19	τ CCCC(35), τ HCCC(14)	464	447
20	τ CCCC(37), τ HCCC(19)	469	449
21	δ CCC(25), δ CCO(10), ν CC(12)	493	486
22	τ CCCC(17), τ OCOC(10), τ OCCC(27), δ COC(19), δ CCC(13)	557	549
23	δ CCC(12), δ COC(22), τ OCCC(28), τ CCCC(13), τ OCOC(12)	571	553
24	τ CCCC(19), τ OCCC(34), δ CCC(23), δ CCO(17)	592	577
25	δ CCC(18), δ CCO(18), τ OCCC(31), τ CCCC(19)	602	583
26	δ CCC(32), δ OCC(31)	669	661
27	δ CCC(34), ν CC(11)	694	683
28	τ HCCC(30), τ CCCC(19)	727	701
29	τ HCCC(41), τ CCCC(37), δ CCC(16), δ OCC(31)	734	710
30	δ OCC(20), τ OCOC(52)	774	743
31	ν CC(15), δ OCC(20), τ CCCC(10), τ OCOC(53)	784	768
32	ν CC(12), δ OCO(28), δ COC(15)	795	770
33	τ HCCC(46), τ CCCC(10), τ OCOC(10)	862	812
34	τ HCCC(60)	865	813
35	ν CC(14), ν OC(22)	870	849
36	ν CC(16), ν OC(10), δ CCC(13)	923	914
37	τ HCCC(29)	996	919
38	τ HCCC(58)	998	935
39	τ HCCC(40), τ CCCC(15), ν CC(39), δ CCC(10)	1002	944
40	τ HCCC(31), τ CCCC(15), δ CCC(33), ν CC(22)	1012	973
41	ν CC(27), ν OC(24), τ HCCC(41)	1017	985
42	τ HCCC(46), τ CCCC(10)	1032	996
43	ν CC(26), δ CCC(43), ν OC(53)	1050	998
44	τ HCCC(63), τ CCCC(15)	1078	1002
45	ν OC(33), δ CCC(14), τ HCCC(38), τ CCCC(11)	1078	1012
46	τ HCCC(32), ν CC(14), δ HCC(20)	1090	1045
47	ν OC(11), δ HCC(16), δ CCC(11), τ HCCC(22), τ CCCC(12)	1095	1068
48	ν CC(12), δ HCC(20)	1098	1084
49	ν CC(23), δ HCC(20)	1099	1092
50	δ HCH(24), δ HCC(12), ν CC(19), τ HCOC(25)	1148	1120
51	ν OC(13), ν CC(18), δ CCC(13), δ HCC(17), δ HCH(22), τ HCOC(27)	1155	1124
52	δ HCH(22), ν CC(18), δ HCC(15), τ HCOC(28)	1155	1149
53	ν CC(18), ν OC(15), δ HCC(15)	1160	1171
54	δ HCC(56), δ HCH(13), τ HCOC(26)	1183	1181
55	ν CC(13), ν OC(10), δ HCC(41)	1219	1202
56	ν CC(20), ν OC(11), δ CCC(14), δ HCC(37)	1220	1223
57	ν CC(18), ν OC(12), δ CCC(11), δ HCC(15)	1245	1256
58	ν OC(45), ν CC(60)	1273	1284
59	ν CC(23), δ HCC(14), ν OC(23)	1295	1294
60	ν CC(11), δ HCC(40)	1334	1309
61	δ HCC(71), δ HCO(12)	1346	1316
62	ν CC(11), δ HCO(68)	1403	1378

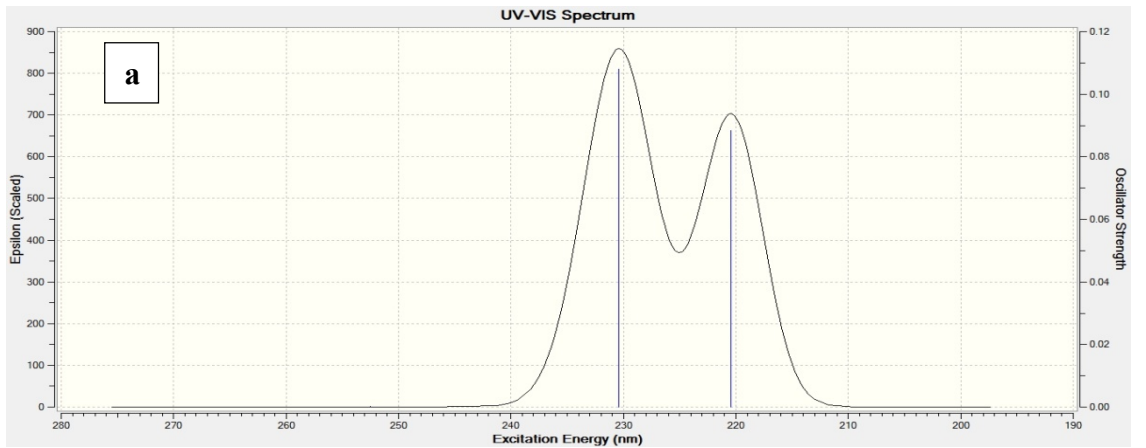
Tablo 3.10'un devamı

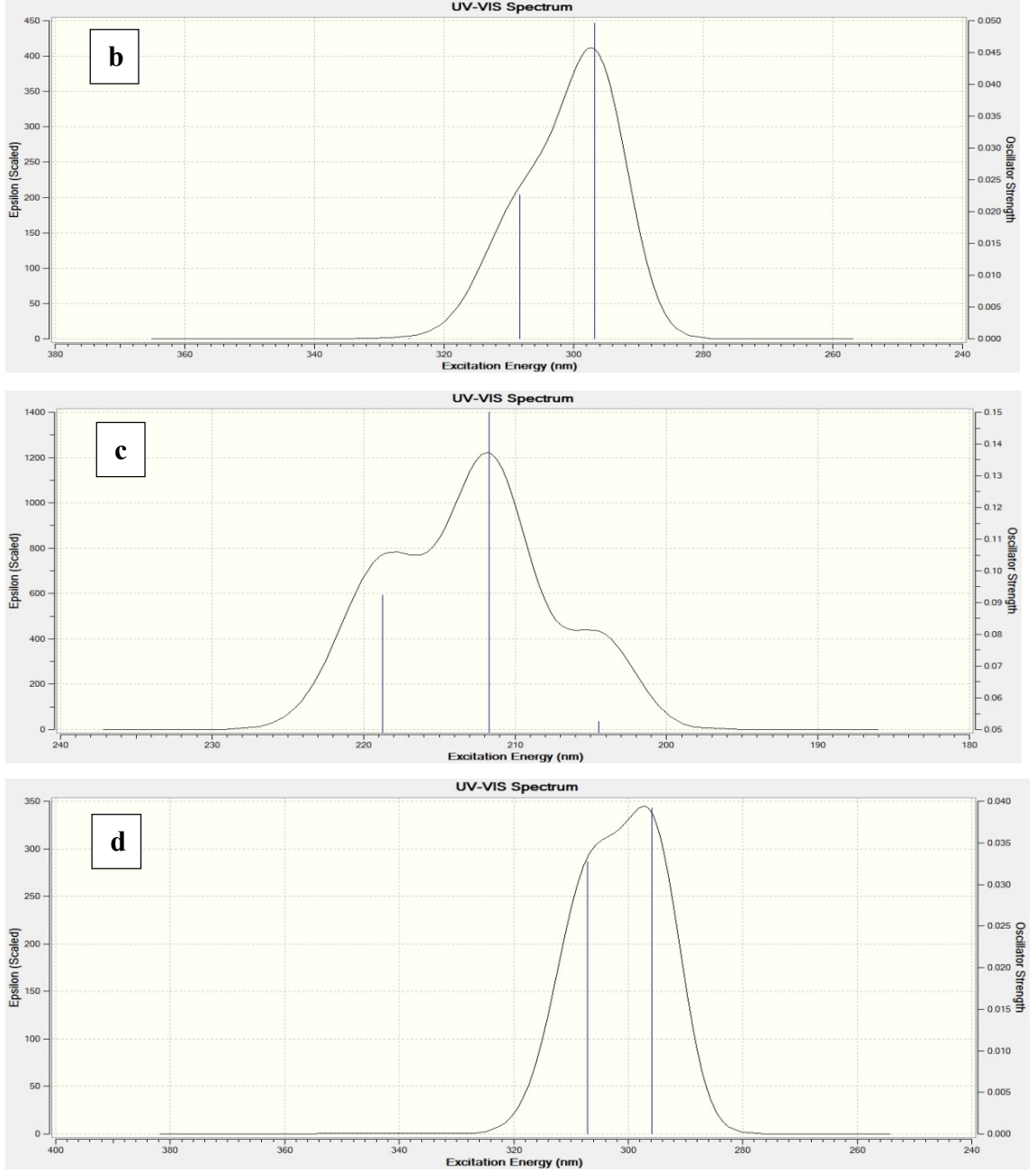
63	v CC(21), δ HCC(71), δ HCO(14)	1455	1429
64	v CC(17), δ HCC(12)	1458	1433
65	δ HCC(10), δ HCH(71)	1483	1453
66	δ CCC(13), δ HCC(42)	1508	1479
67	δ HCC(46), δ CCC(11), v CC(18)	1511	1483
68	δ HCH(76), τ HCOC(11)	1525	1502
69	δ HCH(73)	1534	1514
70	v CC(24), δ HCC(11), δ CCC(12)	1598	1558
71	v CC(40), δ CCC(13), δ HCC(14)	1603	1560
72	v CC(20), δ HCC(19), δ CCC(12)	1615	1570
73	v CC(33), δ HCC(11)	1623	1586
74	v OC(45)	1735	1658
75	v OC(46)	1742	1675
76	v CH(100)	2894	2828
77	v CH(91)	2907	2923
78	v CH(50)	2957	2977
79	v CH(46)	3016	3051
80	v CH(45)	3062	3093
81	v CH(59)	3065	3096
82	v CH(60)	3087	3113
83	v CH(45)	3091	3122
84	v CH(64)	3095	3123
85	v CH(28)	3108	3134
86	v CH(39)	3119	3150
87	v CH(26)	3133	3160





Şekil 3.2. 175 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm)	λ (nm)	Uyarma Enerjisi (eV)	Uyarma Enerjisi (eV)	f (osilatör gücü)	f (osilatör gücü)
HF/B3LYP	HF/B3LYP	HF/B3LYP	HF/B3LYP	HF/B3LYP	HF/B3LYP
6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
252.49/325.27	218.73/340.21	4.9104/3.8117	5.6682/3.6443	0.0002/0.0001	0.0923/0.0000
230.42/308.36	211.72/307.17	5.3807/4.0207	5.8561/4.0363	0.1081/0.0226	0.1500/0.0327
220.41/296.73	204.48/295.84	5.6253/4.1783	6.0633/4.1909	0.0883/0.0496	0.0525/0.0392

Şekil 3.3. 175 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.11. 175 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-C(2)-C(7)	120.297	120.214	119.227	118.914
2	C(1)-C(2)-C(3)	119.314	119.126	119.560	119.855
3	O(28)-C(1)-H(16)	120.460	120.539	121.508	122.300
4	O(28)-C(1)-C(2)	124.497	124.769	123.913	124.169
5	H(16)-C(1)-C(2)	115.044	114.692	114.579	113.530
6	C(2)-C(7)-H(20)	119.141	118.753	118.931	118.262
7	C(2)-C(7)-C(6)	119.630	119.581	119.398	119.441
8	C(2)-C(3)-C(4)	119.291	119.026	118.713	118.735
9	C(2)-C(3)-H(17)	120.799	120.305	121.148	121.310
10	H(17)-C(3)-C(4)	119.908	120.664	120.139	119.954
11	C(3)-C(4)-O(29)	121.147	123.444	125.013	125.579
12	C(3)-C(4)-C(5)	120.842	120.663	120.644	120.414
13	C(4)-O(29)-C(8)	120.333	121.537	128.034	125.248
14	O(29)-C(4)-C(5)	117.923	115.785	114.343	114.008
15	C(4)-C(5)-H(18)	119.246	118.858	118.497	118.291
16	C(4)-C(5)-C(6)	119.681	119.920	120.068	120.248
17	H(18)-C(5)-C(6)	121.073	121.222	121.435	121.460
18	C(5)-C(6)-H(19)	119.580	119.527	119.674	119.583
19	H(19)-C(6)-C(7)	120.253	120.322	120.362	120.487
20	C(6)-C(7)-C(2)	119.630	119.581	119.398	119.441
21	H(20)-C(7)-C(2)	119.141	118.753	118.931	118.262
22	O(29)-C(8)-O(30)	123.346	123.631	123.368	124.021
23	O(29)-C(8)-C(9)	111.920	111.161	111.505	110.251
24	O(30)-C(8)-C(9)	124.734	125.208	125.127	125.728
25	C(8)-C(9)-C(10)	117.216	116.967	116.971	116.563
26	C(8)-C(9)-C(14)	122.186	122.699	122.020	122.591
27	C(9)-C(10)-H(21)	120.483	120.189	120.640	120.165
28	C(9)-C(14)-H(24)	120.493	120.198	119.970	119.659
29	C(9)-C(10)-C(11)	120.282	120.336	120.065	120.247
30	C(10)-C(11)-O(31)	115.783	115.704	116.038	115.838
31	H(21)-C(10)-C(11)	119.236	119.474	119.295	119.588
32	C(10)-C(11)-C(12)	119.416	119.504	119.345	119.163
33	C(11)-O(31)-C(15)	119.967	118.644	120.977	118.198
34	O(31)-C(15)-H(25)	111.452	111.508	111.297	111.580
35	O(31)-C(15)-H(26)	111.450	111.538	111.297	111.579
36	O(31)-C(15)-H(27)	106.180	105.739	105.461	104.865
37	H(25)-C(15)-H(26)	109.446	109.454	109.460	109.333
38	H(25)-C(15)-H(27)	109.109	109.258	109.624	109.696
39	H(27)-C(15)-H(26)	109.110	109.245	109.623	109.696
40	O(31)-C(11)-C(12)	124.801	124.793	124.617	124.999
41	C(11)-C(12)-H(22)	121.106	121.011	120.691	120.629
42	H(22)-C(12)-C(13)	119.096	119.302	119.167	119.215
43	C(11)-C(12)-C(13)	119.798	119.687	120.796	120.155
44	C(12)-C(13)-C(14)	121.132	121.145	118.644	120.907
45	H(23)-C(13)-C(14)	119.837	119.797	119.942	119.915
46	C(13)-C(14)-C(9)	118.774	118.994	118.644	118.681
47	H(24)-C(14)-C(9)	120.493	120.198	119.970	119.659
48	C(14)-C(9)-C(10)	120.598	120.334	121.009	120.846

Tablo 3.12. 175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

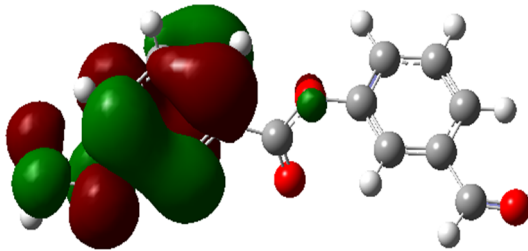
Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-C(2)	1.4864	1.4778	1.4832	1.4794
2	C(1)-H(16)	1.0955	1.0856	1.1116	1.1064
3	C(1)-O(28)	1.1835	1.2106	1.2086	1.2345
4	C(2)-C(3)	1.3840	1.3851	1.3976	1.3984
5	C(3)-H(17)	1.0743	1.0662	1.0821	1.0786
6	C(3)-C(4)	1.3815	1.3800	1.3914	1.3951
7	C(4)-O(29)	1.3780	1.3956	1.3917	1.4090
8	C(4)-C(5)	1.3766	1.3831	1.3920	1.3991
9	C(5)-H(18)	1.0743	1.0695	1.0842	1.0819
10	C(5)-C(6)	1.3894	1.3816	1.3951	1.3951
11	C(6)-H(19)	1.0745	1.0710	1.0847	1.0832
12	C(6)-C(7)	1.3784	1.3818	1.3878	1.3922
13	C(7)-H(20)	1.0732	1.0705	1.0839	1.0831
14	C(7)-C(2)	1.3914	1.3826	1.3997	1.3987
15	O(29)-C(8)	1.3402	1.3573	1.3732	1.3956
16	C(8)-O(30)	1.1784	1.2054	1.2024	1.2278
17	C(8)-C(9)	1.4916	1.4781	1.4884	1.4797
18	C(9)-C(10)	1.3802	1.3773	1.3928	1.3925
19	C(10)-H(21)	1.0722	1.0686	1.0828	1.0812
20	C(10)-C(11)	1.3903	1.3858	1.3972	1.3986
21	C(11)-O(31)	1.3451	1.3686	1.3606	1.3821
22	C(11)-C(12)	1.3851	1.3821	1.3988	1.3999
23	C(12)-H(22)	1.0726	1.0695	1.0827	1.0815
24	C(12)-C(13)	1.3901	1.3879	1.3965	1.3990
25	C(13)-C(14)	1.3770	1.3769	1.3872	1.3902
26	C(13)-H(23)	1.0749	1.0714	1.0851	1.0836
27	C(14)-H(24)	1.0713	1.0673	1.0815	1.0794
28	C(14)-C(9)	1.3934	1.3884	1.4028	1.4029
29	O(31)-C(15)	1.3980	1.4371	1.4197	1.4605
30	C(15)-H(25)	1.0849	1.0830	1.0953	1.0967
31	C(15)-H(26)	1.0849	1.0830	1.0953	1.0967
32	C(15)-H(27)	1.0784	1.0772	1.0881	1.0899

Tablo 3.13. 175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

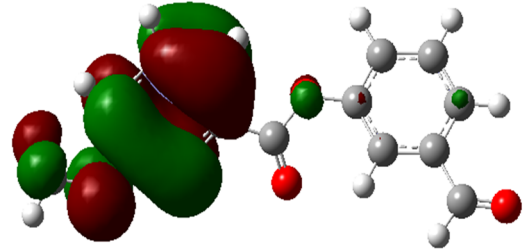
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.234	0.428	0.159	0.274
C2	-0.136	-0.259	-0.074	-0.114
C3	-0.230	-0.247	-0.202	-0.212
C4	0.311	0.380	0.228	0.303
C5	-0.217	-0.245	-0.193	-0.186
C6	-0.208	-0.232	-0.202	-0.185
C7	-0.182	-0.187	-0.154	-0.160
C8	0.647	1.008	0.435	0.707
C9	-0.203	-0.246	-0.159	-0.107
C10	-0.248	-0.199	-0.202	-0.165
C11	0.369	0.418	0.272	0.322
C12	-0.308	-0.266	-0.258	-0.207
C13	-0.195	-0.226	-0.193	-0.181
C14	-0.212	-0.209	-0.160	-0.182
C15	-0.416	-0.274	-0.464	-0.336

Tablo 3.13'ün devamı

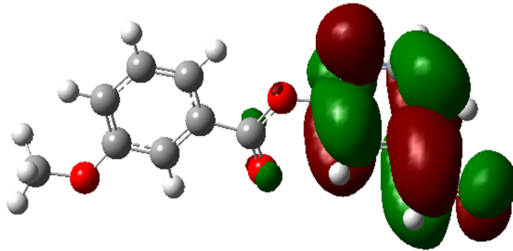
H16	0.181	0.210	0.159	0.166
H17	0.246	0.322	0.234	0.246
H18	0.238	0.270	0.215	0.211
H19	0.232	0.256	0.206	0.200
H20	0.251	0.284	0.217	0.216
H21	0.265	0.304	0.230	0.229
H22	0.242	0.256	0.217	0.198
H23	0.225	0.252	0.200	0.197
H24	0.244	0.274	0.213	0.206
H25	0.208	0.200	0.212	0.200
H26	0.208	0.200	0.212	0.200
H27	0.234	0.239	0.234	0.227
O28	-0.394	-0.548	-0.286	-0.434
O29	-0.504	-0.814	-0.368	-0.599
O30	-0.438	-0.619	-0.319	-0.482
O31	-0.460	-0.735	-0.336	-0.550



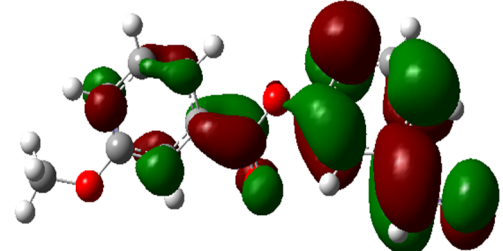
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32602 \text{ Hartree}$



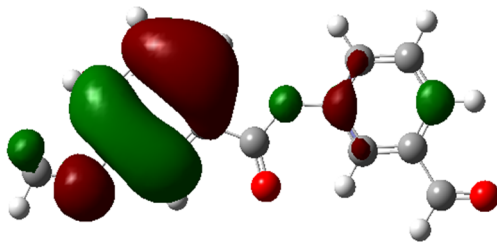
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,24146 \text{ Hartree}$



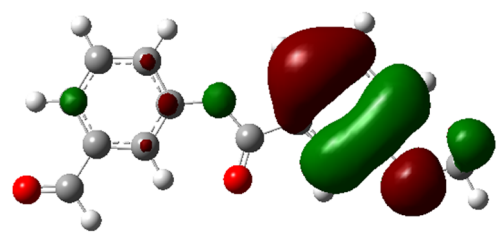
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07530 \text{ Hartree}$



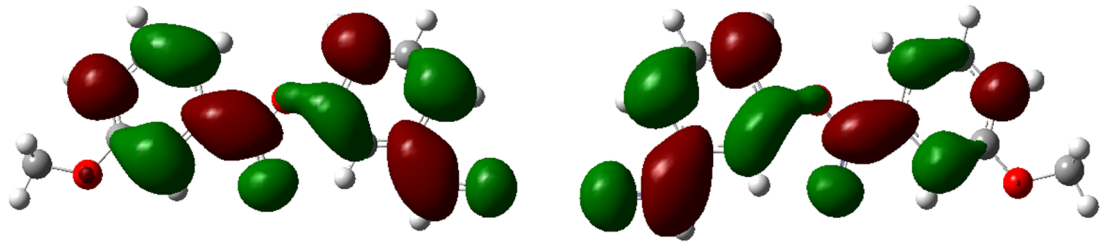
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,07210 \text{ Hartree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,32919 \text{ Hartree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,23353 \text{ Hartree}$



$E_{LUMO}(HF (b)) : 0,07681$ Hatree

$E_{LUMO}(B3LYP (b)) : 0,06357$ Hatree

Şekil 3.4. 175 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

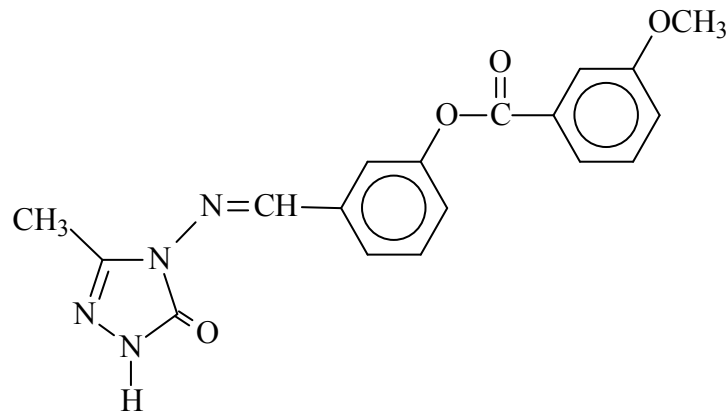
Tablo 3.14. 175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

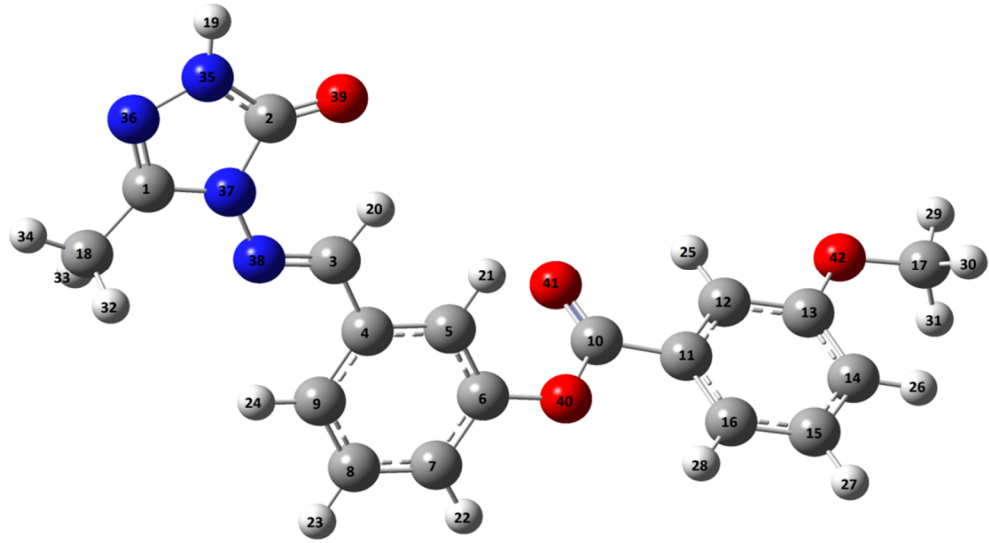
Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	-4.3029	-3.8842	-4.4915	-4.0223
μ_y	4.1064	4.0148	3.6630	3.3488
μ_z	-0.6977	-0.8776	-0.4041	-0.4621
μ_{Toplam}	5.9887	5.6547	5.8098	5.2542

Tablo 3.16. 175 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-874.645	-869.598	-879.917	-874.874

3.2.2. 3-Metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (177) :





Şekil 3.5. 177 Bileşiğinin gaussian görünümü

Tablo 3.16. 177 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	144.31	148.18	150.14	-3.87	-5.83	138.83	141.20	5.48	3.11
C2	151.15	152.45	153.50	-1.30	-2.35	141.66	142.64	9.49	8.51
C3	151.01	152.37	152.73	-1.36	-1.72	142.17	142.77	8.84	8.24
C4	135.21	140.01	139.53	-4.80	-4.32	126.65	126.43	8.56	8.78
C5	125.94	130.17	129.44	-4.23	-3.50	117.84	118.28	8.10	7.66
C6	152.40	157.69	157.43	-5.29	-5.03	142.81	141.26	9.59	11.14
C7	124.94	125.83	127.17	-0.89	-2.23	118.66	118.85	6.28	6.09
C8	130.03	131.55	133.08	-1.52	-3.05	120.34	121.10	9.69	8.93
C9	120.22	123.51	123.93	-3.29	-3.71	114.18	114.81	6.04	5.41
C10	164.33	166.45	168.01	-2.12	-3.68	151.05	152.85	13.28	11.48
C11	130.25	134.84	133.83	-4.59	-3.58	122.86	121.81	7.39	8.44
C12	122.13	124.76	122.85	-2.63	-0.72	115.20	113.22	6.93	8.91
C13	159.39	165.16	165.39	-5.77	-6.00	149.51	149.42	9.88	9.97
C14	114.31	114.94	117.77	-0.63	-3.46	103.99	106.58	10.32	7.73
C15	130.16	131.60	133.23	-1.44	-3.07	120.80	122.37	9.36	7.79
C16	120.22	124.19	124.31	-3.97	-4.09	113.43	113.70	6.79	6.52
C17	55.43	53.55	54.11	1.88	1.32	35.28	35.76	20.15	19.67
C18	11.08	12.18	12.15	-1.10	-1.07	0.51	0.57	10.57	10.51
H19	11.87	6.23	6.72	5.64	5.15	5.42	5.86	6.45	6.01
H20	9.79	9.59	9.53	0.20	0.26	8.98	8.96	0.81	0.83
H21	7.61	7.11	7.14	0.50	0.47	6.64	6.85	0.97	0.76
H22	7.47	6.79	7.04	0.68	0.43	6.65	6.84	0.82	0.63
H23	7.77	7.08	7.35	0.69	0.42	6.85	7.11	0.92	0.66
H24	7.78	7.74	7.85	0.04	-0.07	7.56	7.70	0.22	0.08
H25	7.75	7.53	7.35	0.22	0.40	7.44	7.24	0.31	0.51

Tablo 3.16'nin devamı

H26	7.34	6.34	6.73	1.00	0.61	6.05	6.47	1.29	0.87
H27	7.55	7.04	7.30	0.51	0.25	6.79	7.09	0.76	0.46
H28	7.63	7.45	7.55	0.18	0.08	7.19	7.32	0.44	0.31
H29	3.87	3.69	3.77	0.18	0.10	3.07	2.72	0.80	1.15
H30	3.87	3.20	3.38	0.67	0.49	2.51	3.14	1.36	0.73
H31	3.87	3.20	3.38	0.67	0.49	2.51	2.71	1.36	1.16
H32	2.29	1.98	2.10	0.31	0.19	1.50	1.65	0.79	0.64
H33	2.29	1.98	2.09	0.31	0.20	1.50	1.64	0.79	0.65
H34	2.29	1.70	1.76	0.59	0.53	1.30	1.35	0.99	0.94

Tablo 3.17. 177 Bileşğinin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değeri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	144.31	113.63	114.92	30.68	29.39	111.44	113.33	32.87	30.98
C2	151.15	115.48	115.98	35.67	35.17	114.77	115.31	36.38	35.84
C3	151.01	117.40	117.48	33.61	33.53	115.29	115.56	35.72	35.45
C4	135.21	100.74	100.09	34.47	35.12	93.44	92.69	41.77	42.52
C5	125.94	90.32	89.58	35.62	36.36	84.10	83.37	41.84	42.57
C6	152.40	120.82	120.82	31.58	31.58	111.03	110.91	41.37	41.49
C7	124.94	87.72	88.74	37.22	36.20	83.48	84.47	41.46	40.47
C8	130.03	93.45	94.74	36.58	35.29	88.71	90.01	41.32	40.02
C9	120.22	87.29	87.51	32.93	32.71	82.97	83.35	37.25	36.87
C10	164.33	133.14	133.82	31.19	30.51	128.36	129.28	35.97	35.05
C11	130.25	96.56	95.72	33.69	34.53	90.29	89.36	39.96	40.89
C12	122.13	88.41	86.90	33.72	35.23	85.48	83.67	36.65	38.46
C13	159.39	124.15	124.27	35.24	35.12	115.68	115.39	43.71	44.00
C14	114.31	82.57	85.08	31.74	29.23	78.11	80.32	36.20	33.99
C15	130.16	94.30	95.63	35.86	34.53	88.90	90.43	41.26	39.73
C16	120.22	88.14	88.15	32.08	32.07	83.97	84.42	36.25	35.80
C17	55.43	33.37	32.02	22.06	23.41	15.55	16.17	39.88	39.26
C18	11.08	-6.57	-6.80	17.65	17.88	-17.57	-17.70	28.65	28.78
H19	11.87	5.46	5.98	6.41	5.89	4.51	4.95	7.36	6.92
H20	9.79	9.38	9.30	0.41	0.49	8.78	8.69	1.01	1.10
H21	7.61	7.75	7.64	-0.14	-0.03	7.35	7.22	0.26	0.39
H22	7.47	5.73	6.03	1.74	1.44	5.69	6.03	1.78	1.44
H23	7.77	6.05	6.39	1.72	1.38	5.86	6.25	1.91	1.52
H24	7.78	6.87	6.99	0.91	0.79	6.77	6.94	1.01	0.84
H25	7.75	6.69	6.51	1.06	1.24	6.81	6.56	0.94	1.19
H26	7.34	5.22	5.67	2.12	1.67	4.93	5.44	2.41	1.90
H27	7.55	5.99	6.31	1.56	1.24	5.74	6.13	1.81	1.42
H28	7.63	6.64	6.78	0.99	0.85	6.49	6.69	1.14	0.94
H29	3.87	3.37	3.51	0.50	0.36	2.72	2.81	1.15	1.06
H30	3.87	2.72	2.96	1.15	0.91	1.73	2.03	2.14	1.84
H31	3.87	2.72	2.96	1.15	0.91	1.73	2.03	2.14	1.84
H32	2.29	1.50	1.63	0.79	0.66	0.80	0.96	1.49	1.33
H33	2.29	1.50	1.63	0.79	0.66	0.80	0.96	1.49	1.33
H34	2.29	0.97	1.07	1.32	1.22	0.43	0.53	1.86	1.76

Tablo 3.18. 177 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(18), τ CCCC(20), τ COCC(80)	7	10
2	τ NCCC(23), τ COCC(21), τ CNNC(34), τ CCCN(28)	14	15
3	τ COCC(38), τ NCCC(12), τ CCOC(63)	18	19
4	τ COCC(14), τ CCCC(16), δ COC(11)	41	41
5	τ CCCC(10), τ COCC(28), τ CCNN(20), τ NCCN(27)	56	50
6	δ COC(17), τ CCNN(10), τ NCCN(11), τ NCNN(26), τ NNCN(11), τ COCC(11)	62	63
7	δ NCC(13), τ COCC(17), τ HCOC(11)	70	82
8	τ COCC(53), δ CNN(22), δ CCN(26)	78	83
9	τ NCNN(10), τ CNNC(33), τ CCCN(15)	110	115
10	δ CCC(10), δ COC(17), δ CCO(13)	152	134
11	τ HCCN(15), τ CNNC(37)	163	162
12	τ HCCN(41), τ CNNC(10), τ CCCC(10), δ COC(12)	169	166
13	τ CNNC(25), τ HCCN(55)	181	173
14	ν CC(10), δ COC(10), δ CCC(11), τ CCCC(13)	185	191
15	δ CNN(14), δ CCC(10), δ NNC(17)	206	204
16	τ HCOC(18), τ CCCC(12), τ COCC(13), τ OCCC(25), τ CCCN(14), τ NCCN(31)	225	214
17	τ NCCC(11), τ NCNN(17), τ CCCC(30), τ HCOC(19), τ OCCC(11)	226	237
18	ν CC(12), δ CCN(22), δ COC(11), δ CCO(12)	245	240
19	δ COC(23)	271	263
20	τ HCOC(45), τ CCCC(25), τ COCC(10)	293	280
21	τ HNNC(17), τ HCCN(11), τ CNNC(33), τ NCNN(26)	293	290
22	δ COC(21), δ OCO(13)	307	296
23	δ CCO(13), δ CCN(36)	345	336
24	τ NCNN(16), τ NNCN(18), τ CCNN(36), τ NCCN(11)	362	348
25	δ NNC(15), δ OCN(17), δ CCO(13), δ CNN(16)	403	380
26	δ OCO(10), δ CCC(39), δ COC(11)	439	426
27	τ CCCC(47)	460	439
28	τ HNNC(58), τ ONNC(11)	462	451
29	τ HNNC(40), τ HCCC(11), τ CCCN(18)	481	454
30	τ HNNC(17)	488	463
31	δ CCC(21), δ COC(12)	504	492
32	δ CCC(12), δ COC(11), τ HCCC(11), τ OCOC(11), τ OCCC(37)	581	551
33	δ CCC(14), δ COC(19), τ OCCC(14)	583	567
34	δ CCC(10), δ CNN(13)	598	582
35	δ CCC(16), δ CNN(14)	612	592
36	δ OCN(33), δ CNN(11), δ CCN(12), ν NC(13)	621	594
37	τ CCOC(20), τ CCCC(12), δ OCO(10), τ OCCC(11)	628	600
38	ν CC(19), ν NC(13), δ OCN(33), δ CCN(12), δ CCC(14)	664	646
39	τ HNNC(11), τ NNCN(30), τ CNNC(15), τ HCCN(10), τ NCNN(49)	692	658
40	τ HCCC(18), τ CCCC(12), δ CCC(23)	706	683
41	δ CCC(20), τ HCCC(28), τ CCCC(17)	716	685
42	τ HCCC(38), τ CCCC(15), τ CCCN(20)	725	692
43	τ ONNC(80), ν CC(11), δ CCC(10)	779	739
44	τ HCCC(24), τ OCOC(43)	808	753
45	ν NN(10), δ CCC(12), τ CNNC(10), τ ONNC(83)	814	757
46	δ OCO(10), τ HCCC(31)	830	788
47	ν NC(16), ν CC(10), δ CNN(18), τ HCCC(11)	834	799
48	δ CNN(18), ν NC(14), τ HCCC(50), τ OCOC(29)	861	802
49	δ OCO(12), τ HCCC(15)	863	815
50	δ NNC(14), δ NCC(17), δ CCN(12)	887	846
51	ν OC(19), τ HCCC(17)	926	876
52	τ HCCC(42), τ CCCC(10)	966	891
53	ν OC(11), τ HCCC(34)	967	896

Tablo 3.18.'in devamı

54	τ HCCC(40)	982	917
55	ν OC(10), ν CC(11), τ HCCC(37)	984	917
56	ν CC(13), ν OC(11), δ CCC(12), τ HCCC(38)	995	956
57	ν CC(30), δ CCC(23), τ HCCC(55)	1027	961
58	ν CC(19), δ CCC(39), τ HCCC(58)	1035	967
59	δ HCH(13), δ NNC(14), τ HCCN(37)	1043	990
60	ν CC(30), δ CCC(20), τ HCCC(46)	1044	1002
61	τ HCNN(86), τ HCCC(57), τ CCCC(10)	1049	1005
62	ν CC(17), δ CCC(24), τ HCNN(88)	1082	1008
63	ν OC(32), δ HCH(21), τ HCCN(55)	1117	1061
64	ν OC(23), δ NNC(19)	1125	1062
65	δ HCH(25), τ HCCN(56), ν OC(32)	1126	1066
66	ν CC(12), ν OC(11), δ HCC(25)	1130	1085
67	ν CC(15), ν OC(13), δ HCC(16)	1138	1098
68	ν NN(20), ν CC(18), δ HCC(21), τ HCCN(15)	1142	1100
69	ν CC(20), δ HCC(22)	1151	1110
70	δ HCC(32), ν NN(28), δ HNN(14), τ HCCN(15)	1165	1164
71	ν CC(26), δ HCH(25), τ HCOC(28)	1168	1172
72	δ HCC(46)	1211	1180
73	δ HCC(28), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1185
74	δ HCH(12), τ HCOC(22), δ HCC(20)	1251	1199
75	ν CC(12), ν NN(18), ν NC(23), δ OCN(11), δ HCC(17)	1261	1205
76	ν CC(11), δ HCC(12)	1268	1223
77	ν NC(26), ν NN(14), δ CNN(14)	1276	1255
78	ν OC(15), ν CC(22)	1313	1282
79	ν OC(43), ν CC(12), ν NN(14), δ NCN(12)	1326	1291
80	δ HCC(17), ν OC(18)	1368	1310
81	δ HCC(26)	1373	1311
82	ν CC(21), δ HCC(68)	1374	1343
83	ν CC(35), δ HCC(16), ν NN(13), δ CNN(28)	1386	1350
84	ν NC(21), δ HCN(35), δ HCH(14)	1443	1373
85	δ HNN(63), δ HCN(14), δ HCH(51)	1475	1396
86	ν OC(11), ν NC(11), δ HCN(17), δ HCH(55), δ HNN(47)	1484	1417
87	δ HCH(10), ν CC(17), δ HNN(11)	1505	1440
88	δ HCN(12), ν CC(17), δ HCC(12)	1524	1459
89	ν CC(12), δ HCC(11), δ HCH(27), δ HCN(10)	1529	1465
90	δ HCH(77), τ HCCN(21)	1530	1475
91	δ HCH(58), δ HCC(10)	1546	1481
92	δ HCH(54), δ HCN(10), τ HCCN(19)	1551	1489
93	δ HCH(74), τ HCOC(14)	1562	1499
94	δ HCH(71), τ HCOC(12)	1570	1509
95	δ HCC(41), δ HCH(18), δ CCC(13)	1574	1511
96	δ HCC(27), δ CCC(14)	1577	1515
97	ν CC(33), δ HCC(10), δ CCC(12)	1691	1609
98	ν CC(33), δ HCC(11), δ CCC(11)	1696	1610
99	ν CC(22), δ HCC(13)	1717	1629
100	ν CC(36), δ HCC(10)	1719	1638
101	ν NC(47)	1779	1640
102	ν NC(58)	1802	1655
103	ν OC, ν NC	1864	1787
104	ν NC(12), ν OC(85)	1903	1793
105	ν CH(91)	3030	2982
106	ν CH(93)	3057	3022
107	ν CH(50)	3086	3040
108	ν CH(100)	3114	3074
109	ν CH(93)	3146	3116

Tablo 3.18.' in devamı

110	v CH(63)	3149	3116
111	v CH(52)	3188	3138
112	v CH(54)	3190	3145
113	v CH(33)	3199	3146
114	v CH(42)	3216	3168
115	v CH(66)	3218	3177
116	v CH(67)	3220	3180
117	v CH(40)	3226	3183
118	v CH(57)	3236	3185
119	v CH(48)	3239	3195
120	v NH(100)	3771	3656

Tablo 3.19. 177 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

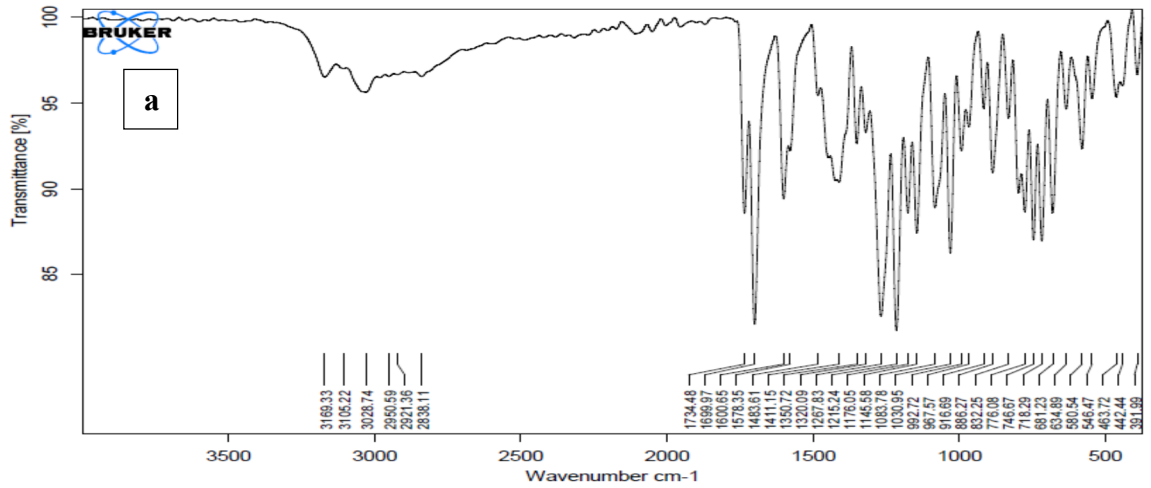
	TİTRESİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(22), τ NCNC(20), τ COCC(20), τ CCOC(15)	14	16
2	τ CCCC(21), τ COCC(43), τ CCOC(20)	17	22
3	δ NCC(15), δ CCO(14), δ CCC(25), δ COC(27), δ NNC(12), τ CNNC(12), τ CCOC(30)	31	31
4	δ NCC(14), δ COC(27), δ CCC(20), δ NNC(11), τ CNNC(12), τ CCOC(30), τ COCC(41)	31	35
5	τ NCNN(11), τ NNCC(38), τ CCNN(10), τ COCC(15), τ CCCC(14)	62	61
6	δ NCC(13), δ CCC(20), δ COC(25), δ NNC(18), τ COCC(51)	67	77
7	τ CCCC(10), τ COCC(52), δ NCC(14), δ COC(14), δ CCO(17), δ NNC(19)	76	78
8	τ CCCC(19), τ COCC(31)	87	94
9	τ NCNC(20), τ NCNN(18), τ CCCC(12), τ CNNC(14)	124	122
10	δ CCO(12), δ CCC(10), δ COC(15)	128	129
11	τ HCCN(74), τ CCCC(15)	159	150
12	τ CCCC(28)	173	169
13	v CC(10), δ COC(11), τ NCNC(22), τ CNNC(24), τ CCNN(14)	183	181
14	δ CCC(10), δ COC(16), τ NCNC(25), τ CNNC(23), τ CCNN(10)	185	185
15	τ HCOC(40), τ COCC(14), τ OCCC(17), δ CNN(10), δ COC(17), δ CCC(15)	208	208
16	δ CCC(11), δ COC(24), τ HCOC(45), τ CCCC(13), τ OCCC(10)	210	210
17	v CC(12), δ CCN(27), δ COC(11)	244	242
18	τ CCCC(23), τ CNNC(14)	263	258
19	τ HCOC(19), τ CCCC(24), δ COC(36)	270	268
20	δ CCO(11), δ CCC(12), δ COC(32), τ HCOC(11), τ CCCC(29)	273	271
21	τ NCNC(12), τ CNNC(32), τ CCCC(17)	281	287
22	δ OCO(14), δ COC(19), δ CCN(20)	327	324
23	τ NCNC(10), τ NCNN(33), τ CNNC(31)	348	330
24	τ NCNN(13), τ NNCC(22), τ CCNN(28), δ OCN(12), δ CNN(13), δ CCN(10), δ COC(10)	363	354
25	δ OCO(10), δ OCN(12), δ CCO(10), τ NCNN(14), τ NNCC(23), τ NNCC(23)	370	356
26	δ OCN(11), δ CCC(15)	422	416
27	δ COC(11), δ CCC(30)	439	435
28	τ CCCC(49)	464	447
29	τ CCOC(14), τ HCCC(20), τ CCCC(42), τ OCCC(10)	485	466
30	δ CCC(19)	492	486
31	τ HNNC(88), δ CCC(16), δ COC(18)	557	536
32	τ HCCC(13), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCCCC(39)	572	551
33	δ CCC(16), δ COC(21), v NC(14), v CC(13), δ OCN(26), δ CCN(10)	578	553
34	v NC(12), δ OCN(32), δ CCN(11), τ HNNC(92)	579	565
35	v CC(14), δ CCC(15), δ CNN(22)	581	572
36	δ COC(18), δ CCC(26), δ CCO(15)	594	584
37	δ CCC(10), v NC(16), v CC(15), τ CCOC(35), τ CCCC(16)	637	609

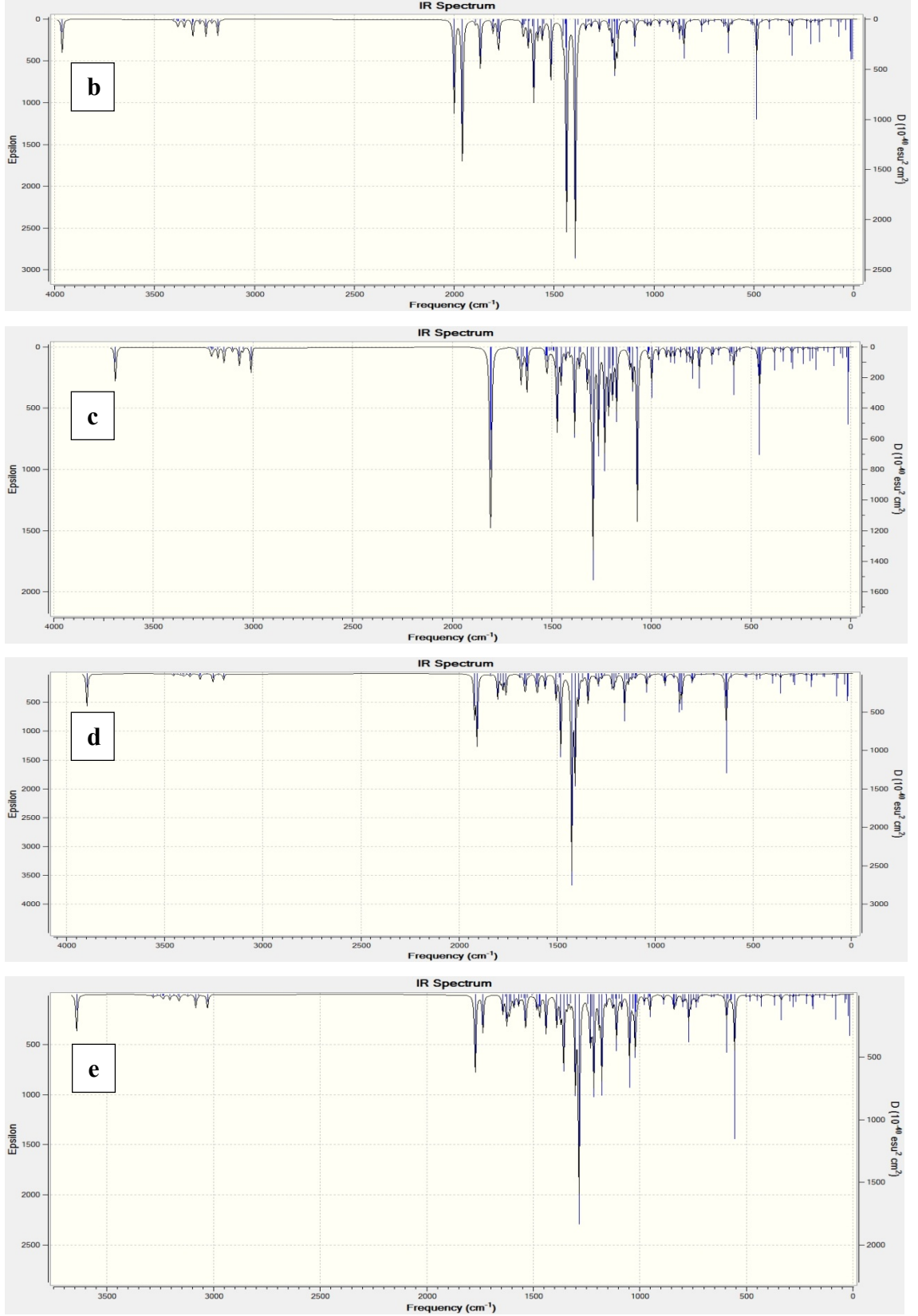
Tablo 3.19.'un devamı

38	v NC(11), v CC(18), δ CCC(14), τ OCCC(23), τ CCCC(26)	638	629
39	τ NCNC(23), τ CNNC(14), τ CCNN(15), τ NCNN(11)	674	642
40	v CC(14), δ OCO(10), δ CCC(28)	694	683
41	τ HCCC(31), τ CCCC(19)	727	702
42	τ CCCC(31), v NN(12), τ HCCC(42)	735	711
43	v NN(12), δ CCC(10), τ HCCC(42), τ CCCC(18)	737	723
44	v OC(10), v NC(12), v CC(13), δ NCN(36), δ CNN(14), τ ONNC(76), τ CCNN(12)	776	735
45	τ HCCC(13), τ OCOC(55)	784	744
46	v NC(11), v CC(12), δ NCN(34), δ CNN(15), δ OCO(27)	792	761
47	v OC(11), δ OCO(27), τ ONNC(74), τ CCNN(13)	795	771
48	δ NCC(23), δ NNC(11)	821	801
49	τ HCCC(34), τ CCCC(13)	861	809
50	τ HCCC(62), τ OCOC(10)	865	812
51	v CC(13), v OC(19)	876	857
52	v CC(14), v OC(10), δ CCC(15), δ NCN(31), δ CNN(22)	932	919
53	δ NCN(28), δ CNN(12), τ HCCC(62)	947	920
54	v CC(15), v OC(11), τ HCCC(51)	995	925
55	v CC(15), v OC(11), τ HCCC(51)	997	926
56	v CC(28), δ CCC(10), τ HCCC(38)	1002	945
57	v CC(12), δ CCC(23), τ HCCC(26)	1011	977
58	v NC(26), τ HCCC(34)	1017	985
59	v CC(23), v NC(34), v OC(16), δ CNN(15)	1032	986
60	τ HCCC(59), τ CCCC(16), τ HCNN(14)	1041	995
61	v OC(54), τ HCCC(51)	1050	995
62	v CC(13), δ CCC(39), τ HCCC(62)	1073	997
63	v OC(36), δ CCC(21), τ HCCC(47)	1077	1012
64	v NC(11), δ HCC(13), τ HCNN(83), τ HCCN(36)	1090	1047
65	v NC(11), δ HCH(15), δ HCC(13), τ HCCN(40)	1090	1060
66	v CC(18), v OC(13), δ HCC(17), δ CCC(11)	1099	1070
67	v CC(18), δ HCC(15), δ HCH(22), τ HCCN(59)	1100	1075
68	v CC(12), δ HCC(19), δ HCH(19), τ HCNN(12), τ HCCN(49)	1100	1087
69	v CC(17), δ HCC(20), τ HCNN(61), τ HCCN(14)	1108	1091
70	v NC(27), v NN(16), v CC(14)	1142	1116
71	v CC(30), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1155	1120
72	v OC(13), v CC(30), δ HCC(11), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1156	1137
73	v CC(25), δ HCC(12), δ HCH(16), τ HCOC(28)	1158	1149
74	v OC(12), δ HCC(15)	1172	1173
75	δ HCH(13), δ HCC(31), τ HCOC(24)	1184	1183
76	v CC(12), δ HCC(26)	1218	1189
77	v CC(14), δ HCC(41)	1219	1202
78	v CC(18), v OC(14), δ HCC(13)	1245	1241
79	v CC(19), v OC(12), v NN(16), δ CNN(14)	1264	1257
80	v CC(26), v OC(35)	1279	1279
81	v CC(15), δ HCC(10), v OC(23)	1295	1294
82	v CC(14), δ HCC(41)	1334	1309
83	v NC(12), δ HNN(57), δ HCN(10), δ HCC(30)	1345	1310
84	δ HCC(67), δ HNN(44)	1353	1323
85	δ HNN(17), δ HCN(32), δ HCC(16)	1367	1341
86	v NC(12), δ HCN(34)	1418	1390
87	v CC(15), δ HCC(11), δ HCH(97)	1444	1417
88	δ HCH(87), δ HCN(17), δ HCC(10)	1453	1419
89	v CC(12), δ HCC(15)	1458	1432
90	δ HCC(10), δ HCH(72)	1483	1452
91	δ HCH(66), τ HCCN(25)	1490	1473
92	δ HCC(22), δ HCH(75), τ HCCN(24)	1498	1482

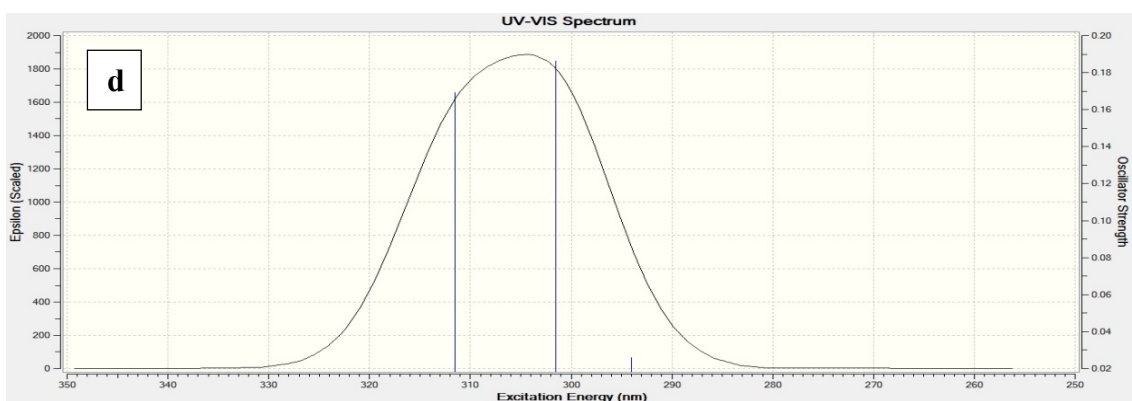
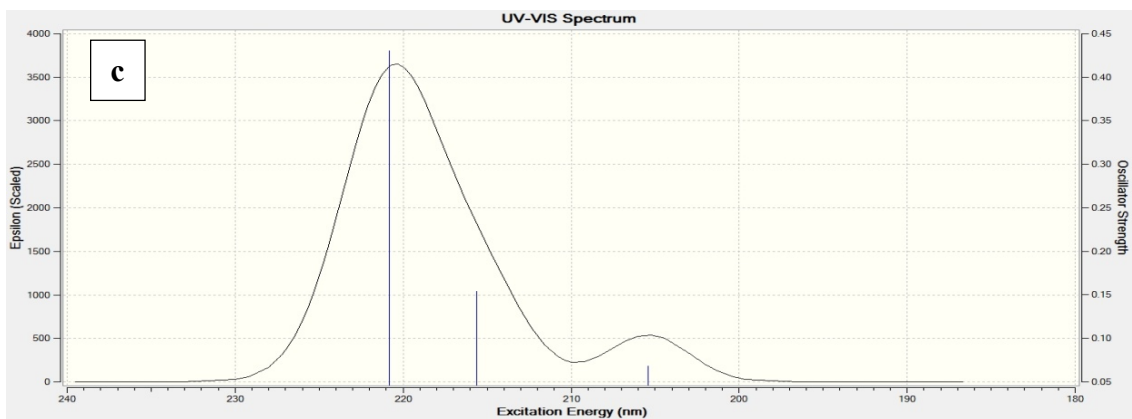
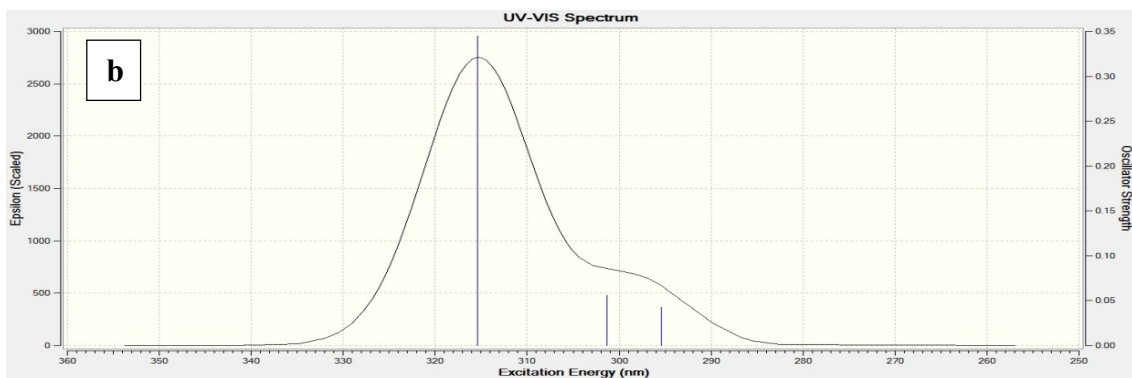
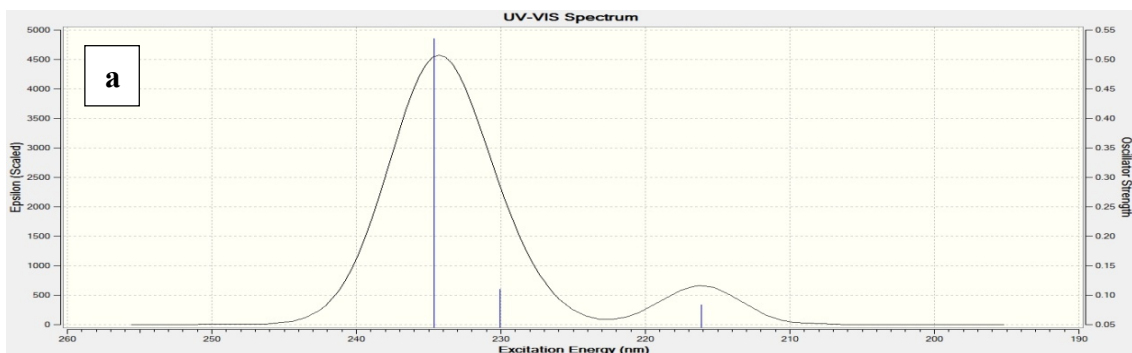
Tablo 3.19.'un devamı

93	δ HCC(47), δ CCC(10)	1508	1483
94	ν CC(19), δ HCC(25), δ HCH(76), τ HCCN(24)	1513	1490
95	δ HCH(76), τ HCOC(11)	1525	1502
96	δ HCH(74), τ HCOC(10)	1534	1514
97	ν NC(44), ν CC(26), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1535
98	ν NC(41), δ HCH(16), ν CC(41), δ HCC(17)	1600	1550
99	ν CC(25), δ HCC(20), δ CCC(10)	1613	1557
100	ν CC(33), δ HCC(14)	1623	1567
101	ν NC(40), ν CC(32), δ CCC(18)	1638	1572
102	ν CC(22), δ HCC(11), ν NC(45)	1671	1585
103	ν OC(84)	1733	1675
104	ν OC(85)	1745	1710
105	ν CH(91)	2907	2923
106	ν CH(92)	2932	2965
107	ν CH(50)	2956	2976
108	ν CH(100)	2983	3013
109	ν CH(92)	3015	3050
110	ν CH(92)	3016	3056
111	ν CH(51)	3061	3076
112	ν CH(52)	3063	3092
113	ν CH(36)	3080	3094
114	ν CH(68)	3090	3120
115	ν CH(67)	3092	3122
116	ν CH(31)	3097	3126
117	ν CH(55)	3108	3134
118	ν CH(48)	3119	3150
119	ν CH(28)	3138	3167
120	ν NH(100)	3540	3515





Şekil 3.6. 177 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları



λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
234.62/315.39	220.82/311.51	5.2845/3.9311	5.6148/3.9802	0.5356/0.3449	0.4306/0.1692
230.06/301.32	215.61/301.50	5.3893/4.1147	5.7503/4.1122	0.1096/0.0559	0.1543/0.1862
216.12/295.38	205.40/294.03	5.7369/4.1975	6.0363/4.2166	0.0836/0.0427	0.0682/0.0260

Şekil 3.7. 177 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.20. 177 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açılıarı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(37)-N(38)	121.062	121.276	120.430	120.701
2	C(1)-N(36)-N(35)	105.020	104.750	104.094	103.327
3	C(1)-N(37)-C(2)	108.082	108.260	109.216	109.287
4	C(1)-C(18)-H(32)	110.647	111.137	110.144	110.380
5	C(1)-C(18)-H(33)	110.649	111.158	110.144	110.380
6	C(1)-C(18)-H(34)	108.624	108.723	108.983	108.909
7	H(32)-C(18)-H(34)	109.546	109.258	109.799	109.765
8	H(33)-C(18)-H(32)	107.814	107.259	107.962	107.632
9	H(33)-C(18)-H(34)	109.548	109.270	109.799	109.765
10	N(36)-C(1)-N(37)	111.302	111.401	111.725	112.206
11	N(36)-N(35)-H(19)	120.841	120.313	120.148	119.487
12	N(36)-N(35)-C(2)	113.777	114.490	112.860	113.973
13	N(37)-C(1)-C(18)	123.272	123.480	122.367	122.485
14	H(19)-N(35)-C(2)	125.382	125.197	126.992	126.540
15	N(35)-C(2)-N(37)	101.818	101.098	102.105	101.206
16	N(35)-C(2)-O(39)	129.582	130.112	130.222	130.859
17	O(39)-C(2)-N(37)	128.600	128.790	127.673	127.934
18	C(2)-N(37)-N(38)	130.854	130.462	130.354	130.013
19	N(37)-N(38)-C(3)	120.006	119.209	118.992	117.229
20	N(38)-C(3)-H(20)	122.340	122.029	122.540	122.475
21	N(38)-C(3)-C(4)	120.404	117.948	120.047	119.613
22	H(20)-C(3)-C(4)	117.259	117.762	117.413	117.911
23	C(3)-C(4)-C(5)	119.033	119.572	117.828	119.082
24	C(3)-C(4)-C(9)	122.564	122.481	121.645	121.572
25	C(4)-C(5)-H(21)	120.989	120.233	120.936	121.089
26	C(4)-C(5)-C(6)	119.885	119.572	119.061	119.167
27	H(21)-C(5)-C(6)	119.125	120.190	120.004	119.744
28	C(5)-C(6)-O(40)	117.928	122.321	124.881	125.371
29	C(5)-C(6)-C(7)	121.117	121.037	120.820	120.661
30	O(40)-C(6)-C(7)	120.872	116.532	114.299	113.968
31	C(6)-C(7)-H(22)	120.051	119.242	118.721	118.559
32	C(6)-C(7)-C(8)	118.950	119.278	119.694	119.793
33	H(22)-C(7)-C(8)	120.998	121.480	121.585	121.648
34	C(7)-C(8)-H(23)	119.425	119.481	119.583	119.507
35	C(7)-C(8)-C(9)	120.709	120.519	120.328	120.343
36	H(23)-C(8)-C(9)	119.866	120.000	120.089	120.150
37	C(8)-C(9)-H(24)	120.516	120.851	121.131	121.542
38	C(8)-C(9)-C(4)	119.934	120.021	119.570	119.689
39	H(24)-C(9)-C(4)	119.549	119.129	119.300	118.769

Tablo 3.20.'nin devamı

40	C(9)-C(4)-C(5)	119.404	119.571	120.527	120.347
41	C(6)-O(40)-C(10)	120.030	120.567	128.248	125.479
42	O(40)-C(10)-O(41)	123.395	123.565	123.483	124.181
43	O(40)-C(10)-C(11)	111.899	111.211	111.449	110.232
44	O(41)-C(10)-C(11)	124.706	125.224	125.068	125.587
45	C(10)-C(11)-C(16)	122.175	122.641	122.033	122.615
46	C(10)-C(11)-C(12)	117.239	117.015	116.966	116.550
47	C(11)-C(12)-H(25)	120.464	120.163	120.618	120.120
48	C(11)-C(12)-C(13)	120.285	120.321	120.061	120.243
49	H(25)-C(12)-C(13)	119.251	119.517	119.321	119.637
50	C(12)-C(13)-O(42)	115.788	115.688	116.044	115.806
51	C(12)-C(13)-C(14)	119.428	119.522	119.360	119.196
52	C(13)-O(42)-C(17)	119.946	118.659	120.963	118.207
53	O(42)-C(13)-C(14)	124.784	124.790	124.596	124.998
54	O(42)-C(17)-H(29)	106.190	105.746	105.464	104.864
55	O(42)-C(17)-H(30)	111.459	111.547	111.308	111.613
56	O(42)-C(17)-H(31)	111.465	111.553	111.308	111.613
57	H(29)-C(17)-H(30)	109.105	109.243	109.618	109.684
58	H(29)-C(17)-H(31)	109.099	109.236	111.308	109.683
59	H(30)-C(17)-H(31)	109.430	109.419	109.445	109.293
60	C(13)-C(14)-C(15)	119.785	119.682	120.128	120.122
61	C(13)-C(14)-H(26)	121.116	120.999	120.696	120.618
62	C(14)-C(15)-C(16)	121.132	119.682	120.795	120.907
63	H(26)-C(14)-C(15)	119.099	119.319	119.176	119.260
64	C(14)-C(15)-H(27)	119.033	119.057	119.259	119.175
65	H(27)-C(15)-C(16)	119.835	119.814	119.946	119.918
66	C(15)-C(16)-H(28)	120.743	120.874	121.400	121.677
67	C(15)-C(16)-C(11)	118.784	119.002	118.655	118.697
68	H(28)-C(16)-C(11)	120.472	120.123	119.945	119.626
69	C(16)-C(11)-C(12)	120.586	120.344	121.001	120.835

Tablo 3.21. 177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

	Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP
		6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
1	C(1)-N(36)	1.2661	1.2786	1.2957	1.3125
2	C(1)-N(37)	1.3793	1.3816	1.3889	1.3890
3	C(1)-C(18)	1.4875	1.4840	1.4852	1.4861
4	C(18)-H(32)	1.0827	1.0824	1.0927	1.0948
5	C(18)-H(33)	1.0827	1.0824	1.0926	1.0948
6	C(18)-H(34)	1.0800	1.0749	1.0894	1.0911
7	N(37)-C(2)	1.3884	1.3971	1.4209	1.4328
8	C(2)-O(39)	1.1960	1.2185	1.2156	1.2372
9	N(35)-C(2)	1.3460	1.3543	1.3686	1.3778
10	N(35)-H(19)	0.9885	0.9919	1.0053	1.0087
11	N(35)-N(36)	1.3695	1.4278	1.3798	1.4390
12	N(37)-N(38)	1.3629	1.3985	1.3692	1.4099
13	N(38)-C(3)	1.2572	1.2669	1.2846	1.2972
14	C(3)-H(20)	1.0741	1.0701	1.0866	1.0848
15	C(3)-C(4)	1.4767	1.4716	1.4664	1.4653
16	C(4)-C(5)	1.3876	1.3884	1.4005	1.4032
17	C(4)-C(9)	1.3916	1.3866	1.4038	1.4036
18	C(5)-H(21)	1.0748	1.0657	1.0824	1.0778
19	C(5)-C(6)	1.3797	1.3807	1.3905	1.3949
20	C(6)-O(40)	1.3786	1.3957	1.3937	1.4100

Tablo 3.21'in devamı

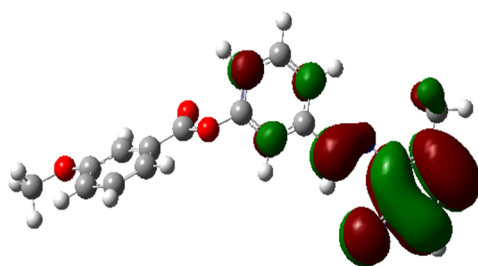
21	C(6)-C(7)	1.3767	1.3814	1.3892	1.3974
22	C(7)-H(22)	1.0736	1.0694	1.0840	1.0817
23	C(7)-C(8)	1.3872	1.3817	1.3958	1.3949
24	C(8)-H(23)	1.0747	1.0713	1.0849	1.0834
25	C(8)-C(9)	1.3799	1.3811	1.3869	1.3916
26	C(9)-H(24)	1.0726	1.0695	1.0830	1.0820
27	O(40)-C(10)	1.3400	1.3572	1.3733	1.3940
28	C(10)-O(41)	1.1782	1.2048	1.2018	1.2277
29	C(10)-C(11)	1.4921	1.4787	1.4891	1.4807
30	C(11)-C(12)	1.3802	1.3772	1.3926	1.3923
31	C(11)-C(16)	1.3933	1.3884	1.4026	1.4027
32	C(12)-H(25)	1.0722	1.0687	1.0829	1.0812
33	C(12)-C(13)	1.3902	1.3859	1.3972	1.3986
34	C(13)-O(42)	1.3455	1.3689	1.3611	1.3825
35	C(13)-C(14)	1.3851	1.3821	1.3986	1.3397
36	C(14)-H(26)	1.0726	1.0695	1.0827	1.0815
37	C(14)-C(15)	1.3902	1.3879	1.3966	1.3990
38	C(15)-H(27)	1.0750	1.0715	1.0851	1.0836
39	C(15)-C(16)	1.3770	1.3769	1.3872	1.3903
40	C(16)-H(28)	1.0713	1.0673	1.0815	1.0794
41	O(42)-C(17)	1.3977	1.4368	1.4193	1.4603
42	C(17)-H(29)	1.0785	1.0772	1.0882	1.0899
43	C(17)-H(30)	1.0849	1.0831	1.0954	1.0968
44	C(17)-H(31)	1.0850	1.0831	1.0954	1.0968

Tablo 3.22. 177 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

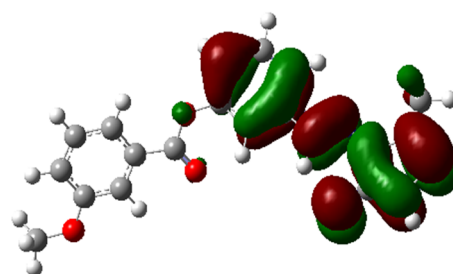
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.515	0.756	0.405	0.626
C2	0.787	1.249	0.583	0.940
C3	0.036	0.192	0.055	0.108
C4	-0.042	-0.164	-0.023	-0.056
C5	-0.272	-0.246	-0.209	-0.212
C6	0.327	0.383	0.231	0.301
C7	-0.211	-0.254	-0.193	-0.192
C8	-0.207	-0.227	-0.201	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.159	-0.172
C10	0.647	1.008	0.430	0.708
C11	-0.203	-0.246	-0.157	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.168	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.454	-0.336
C18	-0.670	-0.618	-0.670	-0.596
C19	0.406	0.404	0.371	0.353
H20	0.306	0.330	0.261	0.262
H21	0.240	0.324	0.229	0.247
H22	0.238	0.266	0.209	0.206
H23	0.227	0.251	0.200	0.195
H24	0.241	0.271	0.209	0.207
H25	0.264	0.305	0.230	0.230
H26	0.242	0.255	0.216	0.196

Tablo 3.22'nin devamı

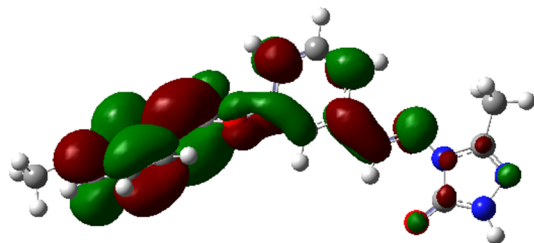
H27	0.224	0.251	0.199	0.195
H28	0.244	0.274	0.213	0.205
H29	0.233	0.239	0.233	0.227
H30	0.208	0.200	0.211	0.199
H31	0.207	0.200	0.211	0.199
H32	0.244	0.251	0.235	0.231
H33	0.245	0.251	0.236	0.231
H34	0.251	0.250	0.239	0.226
H35	-0.496	-0.760	-0.496	-0.592
N36	-0.266	-0.389	-0.198	-0.337
N37	-0.468	-0.849	-0.363	-0.622
N38	-0.271	-0.358	-0.206	-0.320
N39	-0.532	-0.670	-0.389	-0.520
O40	-0.509	-0.815	-0.373	-0.600
O41	-0.436	-0.616	-0.317	-0.481
O42	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



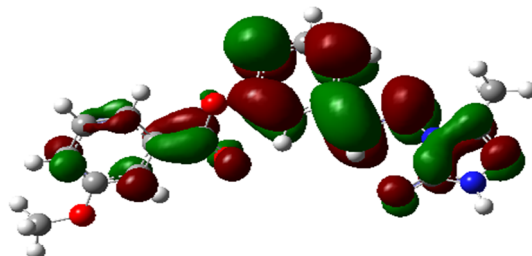
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32176 \text{ Hatree}$



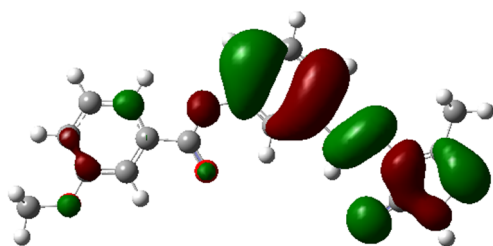
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22700 \text{ Hatree}$



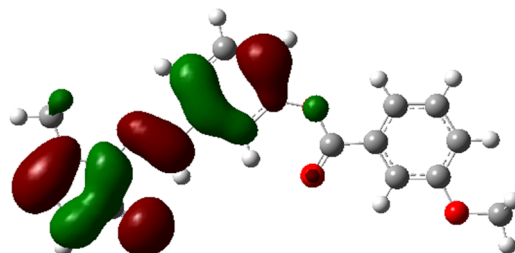
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07684 \text{ Hatree}$



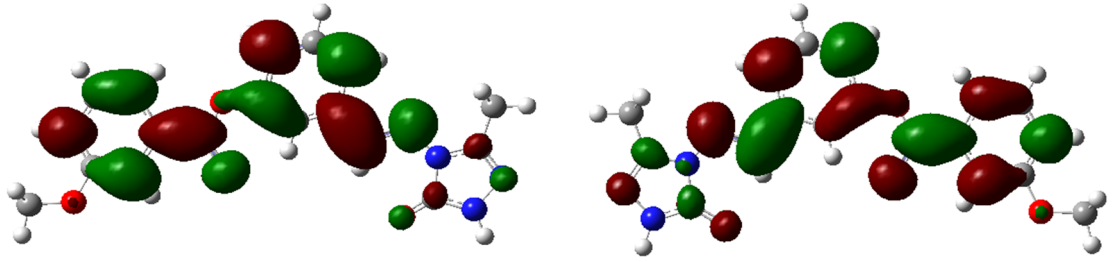
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06641 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31941 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,2180 \text{ Hatree}$



$E_{LUMO}(HF (b)) : 0,08002$ Hatree

$E_{LUMO}(B3LYP (b)) : 0,05784$ Hatree

Şekil 3.8. 177 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

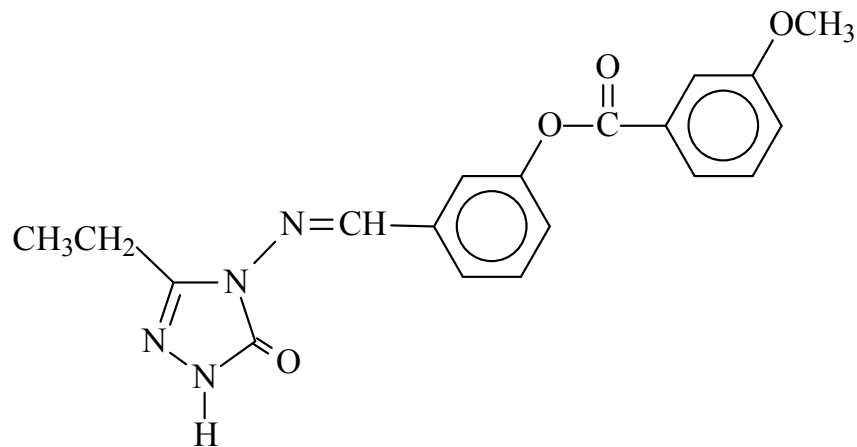
Tablo 3.23. 177 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

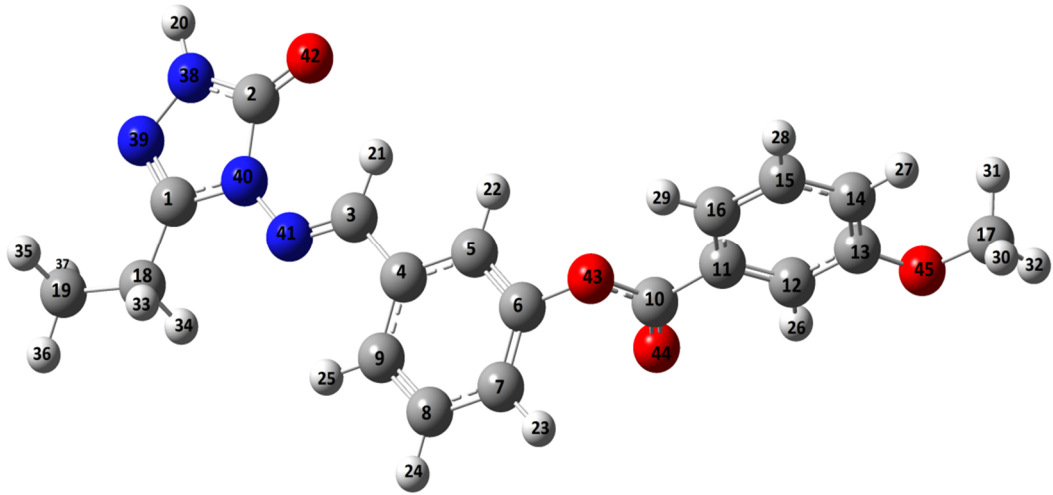
Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.9302	1.5181	1.4471	0.9850
μ_y	5.8613	5.4600	4.0492	3.3631
μ_z	1.7752	1.8080	1.3723	1.2629
μ_{Toplam}	6.4212	5.9486	4.5136	3.7250

Tablo 3.24. 177 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1208.419	-1201.421	-1208.419	-1215.710

3.1.3. 3-Etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (178):





Şekil 3.9. 178 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.25. 178 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	148.04	152.16	153.88	-4.12	-5.84	142.07	144.18	5.97	3,86
C2	151.33	152.63	153.69	-1.30	-2.36	141.81	142.80	9.52	8,53
C3	151.03	152.25	152.59	-1.22	-1.56	141.98	142.57	9.05	8,46
C4	135.27	140.06	139.57	-4.79	-4.30	126.76	126.53	8.51	8,74
C5	125.82	130.11	129.38	-4.29	-3.56	117.81	118.24	8.01	7,58
C6	152.46	157.75	157.41	-5.29	-4.95	142.00	141.27	10.46	11,19
C7	124.92	125.74	127.09	-0.82	-2.17	118.59	118.79	6.33	6,13
C8	130.06	131.53	133.07	-1.47	-3.01	120.33	121.11	9.73	8,95
C9	120.21	123.49	123.89	-3.28	-3.68	114.19	114.79	6.02	5,42
C10	164.33	166.43	168.00	-2.10	-3.67	151.05	152.86	13.28	11,47
C11	130.26	134.87	133.85	-4.61	-3.59	122.88	121.82	7.38	8,44
C12	122.14	124.77	122.85	-2.63	-0.71	115.19	113.32	6.95	8,82
C13	159.42	165.16	165.39	-5.74	-5.97	149.51	149.42	9.91	10,00
C14	114.37	114.93	117.77	-0.56	-3.40	103.97	106.57	10.40	7,80
C15	130.15	131.60	133.23	-1.45	-3.08	120.80	122.36	9.35	7,79
C16	120.25	124.19	124.31	-3.94	-4.06	113.43	113.71	6.82	6,54
C17	55.45	53.55	54.11	1.90	1.34	35.28	35.76	20.17	19,69
C18	18.44	22.00	21.85	-3.56	-3.41	6.63	6.53	11.81	11,91
C19	9.95	7.87	7.59	2.08	2.36	-3.88	-4.11	13.83	14,06
H20	11.89	6.28	6.79	5.61	5.10	5.46	5.91	6.43	5,98
H21	9.79	9.57	9.52	0.22	0.27	8.98	8.95	0.81	0,84
H22	7.64	7.12	7.15	0.52	0.49	6.64	6.85	1.00	0,79
H23	7.47	6.78	7.04	0.69	0.43	6.64	6.84	0.83	0,63
H24	7.62	7.08	7.36	0.54	0.26	6.84	7.11	0.78	0,51
H25	7.79	7.73	7.84	0.06	-0.05	7.56	7.70	0.23	0,09
H26	7.77	7.53	7.35	0.24	0.42	7.43	7.24	0.34	0,53
H27	7.34	6.34	6.73	1.00	0.61	6.05	6.47	1.29	0,87
H28	7.55	7.04	7.30	0.51	0.25	6.78	7.09	0.77	0,46
H29	7.75	7.45	7.55	0.30	0.20	7.19	7.32	0.56	0,43
H30	3.87	3.20	3.77	0.67	0.10	3.07	3.14	0.80	0,73

Tablo 3.25'in devamı

H31	3.87	3.30	3.38	0.57	0.49	2.51	2.72	1.36	1,15
H32	3.87	3.69	3.38	0.18	0.49	2.51	2.71	1.36	1,16
H33	2.70	2.44	2.54	0.26	0.16	1.75	1.86	0.95	0,84
H34	2.70	2.44	2.53	0.26	0.17	1.75	1.86	0.95	0,84
H35	1.22	0.78	0.95	0.44	0.27	0.31	0.50	0.91	0,72
H36	1.22	1.10	1.02	0.12	0.20	0.63	0.54	0.59	0,68
H37	1.22	1.08	1.00	0.14	0.22	0.63	0.54	0.59	0,68

Tablo 3.26. 178 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	148.04	116.35	117.43	31.69	30.61	114.12	115.75	33.92	32.29
C2	151.33	115.62	116.14	35.71	35.19	114.90	115.45	36.43	35.88
C3	151.03	117.28	117.37	33.75	33.66	115.14	115.42	35.89	35.61
C4	135.27	100.74	100.09	34.53	35.18	93.46	92.70	41.81	42.57
C5	125.82	90.27	89.54	35.55	36.28	84.07	83.35	41.75	42.47
C6	152.46	120.80	120.81	31.66	31.65	111.01	110.91	41.45	41.55
C7	124.92	87.70	88.74	37.22	36.18	83.44	84.45	41.48	40.47
C8	130.06	93.44	94.72	36.62	35.34	88.70	90.00	41.36	40.06
C9	120.21	87.30	87.49	32.91	32.72	82.98	83.33	37.23	36.88
C10	164.33	133.11	133.80	31.22	30.53	128.35	129.20	35.98	35.13
C11	130.26	96.57	95.73	33.69	34.53	90.30	89.36	39.96	40.90
C12	122.14	88.39	86.88	33.75	35.26	85.47	83.66	36.67	38.48
C13	159.42	124.11	124.23	35.31	35.19	115.68	115.39	43.74	44.03
C14	114.37	82.96	85.08	31.41	29.29	78.09	80.31	36.28	34.06
C15	130.15	94.31	95.64	35.84	34.51	88.89	90.43	41.26	39.72
C16	120.25	88.15	88.16	32.10	32.09	83.97	84.42	36.28	35.83
C17	55.45	31.36	32.01	24.09	23.44	15.55	16.16	39.90	39.29
C18	18.44	1.49	1.36	16.95	17.08	-12.93	-12.97	31.37	31.41
C19	9.95	-9.97	-10.18	19.92	20.13	-22.42	-22.58	32.37	32.53
H20	11.89	5.51	6.05	6.38	5.84	5.25	5.00	6.64	6.89
H21	9.79	9.33	9.26	0.46	0.53	9.48	8.67	0.31	1.12
H22	7.64	7.74	7.63	-0.10	0.01	8.05	7.21	-0.41	0.43
H23	7.47	0.72	6.02	6.75	1.45	6.40	6.02	1.07	1.45
H24	7.62	6.04	6.38	1.58	1.24	6.57	6.24	1.05	1.38
H25	7.79	6.85	6.96	0.94	0.83	7.47	6.91	0.32	0.88
H26	7.77	6.69	6.50	1.08	1.27	7.52	6.56	0.25	1.21
H27	7.34	6.22	5.67	1.12	1.67	5.64	5.43	1.70	1.91
H28	7.55	5.98	6.38	1.57	1.17	6.45	6.13	1.10	1.42
H29	7.75	6.63	6.77	1.12	0.98	7.20	6.69	0.55	1.06
H30	3.87	2.27	2.96	1.60	0.91	2.45	2.03	1.42	1.84
H31	3.87	2.27	2.96	1.60	0.91	2.45	2.03	1.42	1.84
H32	3.87	3.37	3.51	0.50	0.36	3.43	2.81	0.44	1.06
H33	2.70	1.72	1.83	0.98	0.87	1.53	0.97	1.17	1.73
H34	2.70	1.72	1.83	0.98	0.87	1.53	0.97	1.17	1.73
H35	1.22	0.49	0.41	0.73	0.81	0.47	-0.35	0.75	1.57
H36	1.22	-0.03	0.19	1.25	1.03	-0.05	-0.51	1.27	1.73
H37	1.22	0.49	0.41	0.73	0.81	-0.47	-0.35	1.69	1.57

Tablo 3.27 178 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ HCCC(34), τ CCCC(10), τ CNNC(10), τ COCC(78)	7	9
2	τ NCCC(13), τ CCCC(18), τ COCC(23), τ CNNC(36), τ CCCN(26)	11	14
3	τ COCC(44), τ CCOC(63)	17	18
4	δ COC(10), τ COCC(14), τ CCCC(12)	40	40
5	τ COCC(21), τ CCNN(22), τ NCCN(32)	54	49
6	τ NCNN(17), δ COC(15)	59	56
7	τ COCC(12), δ CNN(16), δ CCN(20)	69	68
8	δ NCC(75), τ COCC(13), τ HCOC(12)	70	74
9	τ COCC(10), τ CCCN(49)	73	83
10	δ CNN(10), τ CCCN(14)	108	113
11	δ CCC(12), δ COC(10), δ CCN(10)	141	123
12	τ CNNC(26)	156	155
13	τ CCCC(13)	164	169
14	δ CCN(26), τ CCCC(19)	179	180
15	ν CC(11), δ COC(10), δ CCC(12)	195	191
16	τ HCOC(11), τ CCCC(10), δ CCC(10), δ NNC(14)	220	213
17	τ CCCN(16), τ NCCN(27)	222	215
18	τ HCCN(30), τ HCCC(10), τ CNNC(21), τ HCOC(20), τ CCCC(30), τ OCCC(11)	226	223
19	τ NCNN(13), τ CCCC(11), τ HCCC(11), τ CNNC(21)	232	238
20	δ COC(20)	261	261
21	ν CC(11), δ CCC(19), τ HNNC(16), τ HCCN(10), τ NNCN(14)	280	270
22	τ HCOC(45), τ CCCC(19)	293	280
23	τ HNNC(16), τ HCCN(10), τ NNCN(14), τ CNNC(21)	295	292
24	δ COC(14), δ OCO(13)	307	298
25	τ NCNN(16), τ CCNN(35), τ NCCN(10)	363	350
26	δ CCO(25), δ CCC(11), δ COC(13)	372	360
27	δ NNC(16), δ OCN(21), δ CNN(17)	413	392
28	δ OCO(10), δ CCC(17), δ COC(11)	439	426
29	τ CCCC(10), τ HNNC(45)	460	439
30	τ HNNC(28), τ CCCC(35)	460	451
31	τ HNNC(27), τ HCCC(11), τ CCCN(11)	481	453
32	τ HNNC(11), τ HCCC(10), δ COC(10)	488	463
33	δ CCC(22), δ COC(12)	504	493
34	τ HCCC(11), δ CCC(14), δ COC(13)	581	551
35	δ CCC(13), δ COC(16), τ HCCC(10), τ CCCC(10), τ OCCC(17)	582	566
36	ν NN(11), δ NCN(10), δ CNN(16)	593	577
37	δ COC(13), δ CCC(15), δ CCO(12)	609	588
38	τ HNNC(10), τ NNCN(31), τ OCCC(11)	627	598
39	δ OCN(26), δ NCC(11), δ CCC(20), δ CCN(11)	647	622
40	τ HNNC(10), τ NNCN(31), δ HCC(10), τ CCCN(15)	683	652
41	ν CC(16), δ CCN(13), δ CCC(11)	695	676
42	τ HCCC(18), τ CCCC(11), δ CCC(21)	707	683
43	δ CCC(11), τ HCCC(28), τ CCCC(17)	716	685
44	τ HCCC(37), τ CCCC(15), τ CCCN(20)	725	692
45	ν CC(10)	779	738
46	τ HCCC(12), τ OCOC(38)	808	753
47	δ CCC(12), τ ONNC(59)	809	757
48	δ OCO(10), τ HCCC(30)	828	788
49	ν NC(16), δ CNN(26), τ HCCN(19), τ ONNC(10)	832	797
50	τ HCCN(10), τ HCCC(16)	835	798
51	τ HCCC(48), τ OCOC(28)	861	802
52	δ OCO(12), τ HCCC(15)	864	816
53	δ NNC(13), δ NCC(17), δ CCN(12)	887	846
54	ν OC(12), τ HCCC(10)	926	876

Tablo 3.27.'nin devamı

55	τ HCCC(41), τ HCNN(86), τ CCCC(10)	966	891
56	ν OC(11), τ HCCC(24)	967	896
57	τ HCCC(14), ν CC(11)	982	917
58	τ HCCC(11), ν CC(11)	982	917
59	ν CC(15), τ HCCC(25)	993	951
60	τ HCCC(21), ν CC(24)	996	961
61	τ HCCC(58), ν CC(11), δ CCC(13)	1027	967
62	ν CC(37), δ NNC(11), δ CCC(39)	1035	968
63	ν CC(30), δ CCC(10), τ HCCC(22)	1044	1002
64	τ HCNN(86), τ HCCC(57)	1049	1005
65	ν CC(17), δ CCC(24), τ HCNN(87)	1082	1008
66	ν CC(11), δ NNC(16), τ HCCN(16)	1087	1035
67	ν OC(61), ν CC(12)	1125	1062
68	ν NC(11), ν NN(19), ν CC(17), ν OC(32), ν CC(12)	1126	1074
69	ν OC(11), δ HCC(19), ν CC(12)	1129	1085
70	ν CC(12), δ HCC(21), ν OC(13)	1138	1098
71	ν NN(18), ν CC(11), τ HCCC(12), δ HCC(17)	1142	1108
72	ν CC(15), δ HCC(15)	1151	1110
73	δ HCC(38), τ HCCN(19), τ HCCC(12)	1161	1113
74	δ HCC(33), ν CC(20)	1168	1163
75	δ HCH(25), τ HCOC(23), ν NN(27), δ HNN(10)	1169	1172
76	δ HCC(40), ν CC(10)	1211	1180
77	δ HCC(17), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1185
78	δ HCH(12), τ HCOC(23), δ HCC(20)	1251	1199
79	ν NC(13), ν NN(18), δ OCN(11), ν CC(12), δ HCC(18)	1261	1204
80	ν OC(10), ν CC(11), δ HCC(12)	1267	1223
81	ν NC(26), ν NN(13), δ OCN(10), δ CNN(14)	1277	1255
82	ν NN(11), δ NCN(14), ν OC(16), ν CC(23)	1313	1275
83	δ HCC(51), τ HCCN(10), ν OC(43), ν CC(12)	1326	1283
84	ν CC(10), δ HCC(64), τ HCCN(13)	1337	1285
85	δ HCC(32), ν NC(11), δ CNN(17), τ HCCN(12)	1353	1308
86	δ HCC(24), ν OC(18)	1368	1310
87	ν NC(16), δ HCN(12), τ HCCN(13), δ HCC(23)	1373	1327
88	ν CC(21), δ HCC(42)	1377	1343
89	ν CC(35), δ HCC(16), ν NC(11), ν NN(14), δ CNN(13), τ HCCN(10)	1414	1350
90	δ HNN(43), δ HCN(13), δ HCH(14)	1461	1391
91	δ HNN(27), δ HCN(28), δ HCH(39)	1480	1403
92	δ HCH(10), ν OC(11), δ HNN(61)	1486	1420
93	ν NC(10), ν CC(20)	1507	1441
94	δ HCN(12), ν CC(11), δ HCC(14)	1525	1460
95	ν CC(10), δ HCC(10), δ HCH(10)	1532	1465
96	δ HCH(38), δ HCN(10)	1542	1479
97	δ HCH(55)	1546	1480
98	δ HCH(38), τ HCCN(11)	1550	1498
99	δ HCH(38), τ HCCN(10), τ HCOC(10)	1562	1499
100	δ HCH(64), τ HCOC(23)	1562	1509
101	δ HCH(21), τ HCCC(11), τ HCOC(10)	1570	1510
102	δ HCC(39), δ HCH(18), δ CCC(12)	1574	1511
103	δ HCC(10), δ CCC(14)	1577	1515
104	ν NC(10), ν CC(18), δ HCC(11), δ CCC(12)	1691	1609
105	ν CC(28), δ HCC(11), δ CCC(11)	1696	1610
106	ν NC(19), ν CC(13), δ HCC(11)	1717	1628
107	ν NC(31), ν CC(12), δ HCC(10)	1719	1633
108	ν CC(12), ν NC(42)	1770	1638
109	ν CC(10), ν NC(48)	1802	1653
110	ν OC(85), ν NC(12)	1863	1787

Tablo 3.27.'nin devamı

111	v OC(71), v NC(12)	1903	1792
112	v CH(91)	3030	2982
113	v CH(53)	3043	3010
114	v CH(34)	3055	3021
115	v CH(58)	3077	3029
116	v CH(50)	3086	3039
117	v CH(36)	3102	3085
118	v CH(12)	3116	3090
119	v CH(46)	3149	3116
120	v CH(23)	3188	3138
121	v CH(54)	3190	3145
122	v CH(15)	3199	3146
123	v CH(42)	3216	3168
124	v CH(30)	3218	3177
125	v CH(39)	3220	3180
126	v CH(40)	3226	3184
127	v CH(42)	3236	3185
128	v CH(47)	3239	3195
129	v NH(100)	3771	3656

Tablo 3.28. 178 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

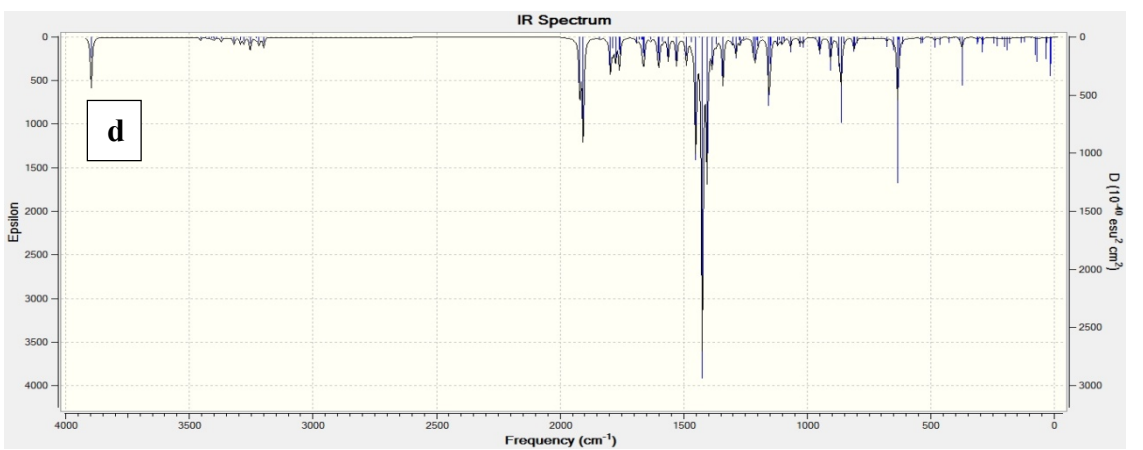
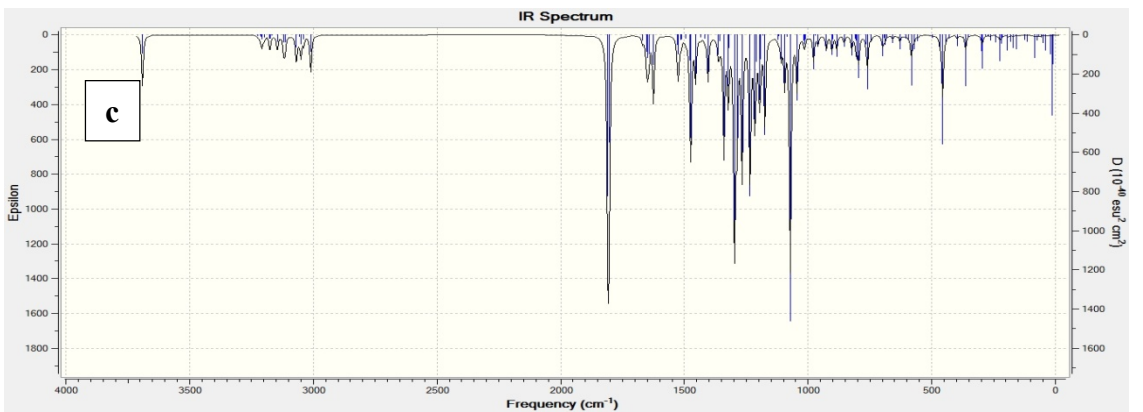
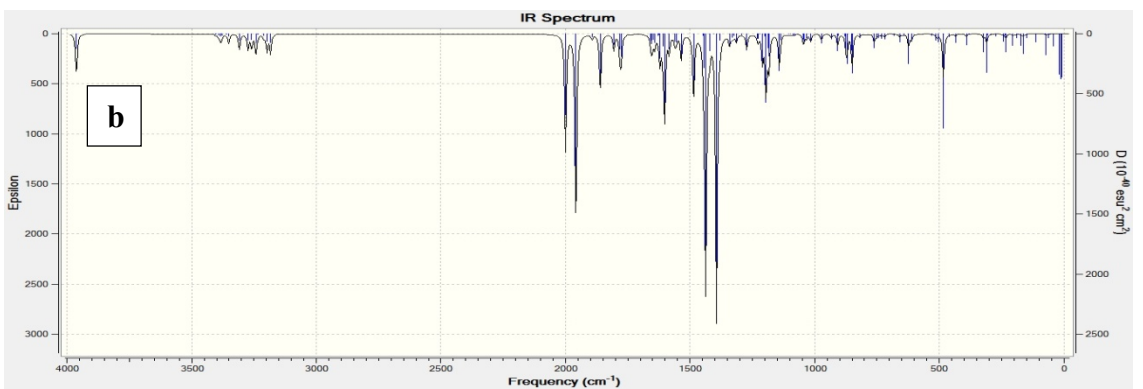
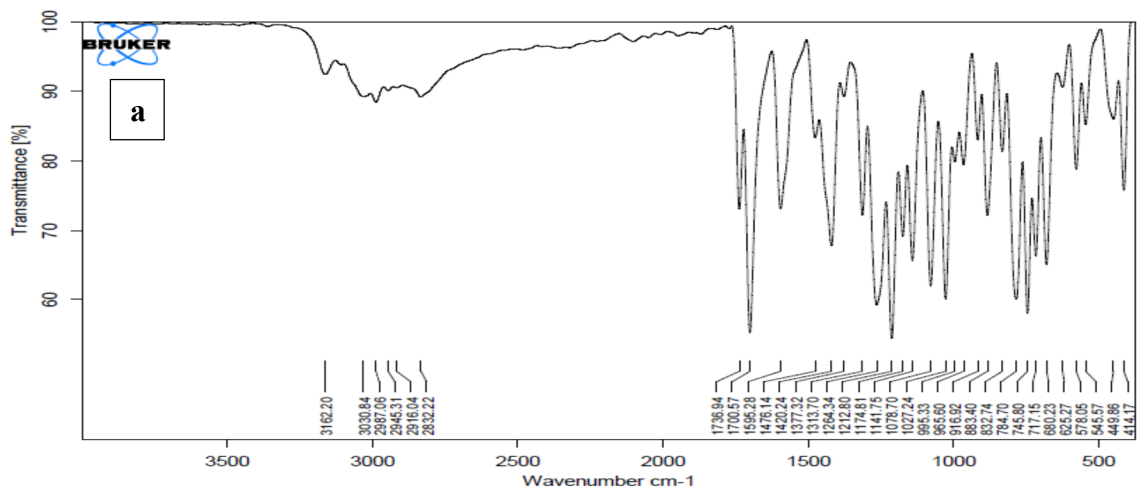
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCNC(23), τ CNNC(24), τ COCC(16), τ CCOC(13)	11	13
2	τ CCCC(20), τ COCC(44), τ CCOC(18)	17	22
3	δ NCC(16), δ CCO(13), δ CCC(24), δ COC(17), δ NNC(13)	29	30
4	τ COCC(43)	30	34
5	τ NNCC(21), τ CCCN(46), τ CCNN(14)	56	49
6	τ NCNN(11), τ NNCC(30), τ CCCN(13), τ COCC(48)	64	65
7	δ NCC(13), δ CCC(13), δ COC(25), δ CCO(13), δ NNC(17), τ COCC(20), τ NNCC(17), τ CCCN(18)	70	72
8	δ NCC(13), δ COC(13), δ CCO(13), δ NNC(17), τ NNCC(17), τ CCCN(18), τ COCC(52)	70	78
9	τ CCCC(18), τ COCC(31)	87	94
10	δ CCC(16), δ CCO(13), δ CCN(17)	111	111
11	τ NCNC(22), τ NCNN(23), τ CNNC(13), τ CCCC(10)	123	123
12	τ HCCN(10), τ NCNC(17), τ CNNC(25), τ CCNN(11)	164	157
13	τ CCCC(36)	176	173
14	v CC(10), δ CCC(10), δ COC(17)	183	185
15	δ CCN(32), δ COC(16), δ CCC(20)	192	191
16	τ HCOC(44), τ COCC(14), τ OCCC(17), τ CCCC(13)	210	208
17	δ CNN(12), δ COC(25), δ CCC(11)	210	211
18	τ HCCN(41), τ HCCC(12), τ NCNN(12)	223	219
19	v CC(10), δ COC(30), τ CCCC(23)	261	259
20	δ COC(26), τ CCCC(18)	264	262
21	τ HCOC(19), τ CCCC(31)	274	268
22	δ COC(13), δ CCC(15), τ CCCC(16), τ CNNC(10)	281	285
23	δ COC(12), δ CCC(17), τ NCNC(11), τ CNNC(33)	283	289
24	δ OCO(21), δ COC(19), τ NCNN(28), τ CNNC(30)	340	332
25	δ OCO(20), δ CCO(18), δ COC(10), τ NCNN(30), τ CNNC(31)	347	337
26	τ CCCC(10), τ NCNN(11), τ NNCC(25), τ CCNN(27)	370	354
27	δ OCN(23), δ CCC(16)	388	382
28	δ CCC(15)	422	416
29	δ CCC(29), δ COC(11), τ CCCC(42), τ HCCC(16)	439	435
30	τ HCCC(10), τ CCCC(49)	464	446
31	τ HCCC(20), τ CCCC(42), τ CCOC(14), τ OCCC(10)	485	466

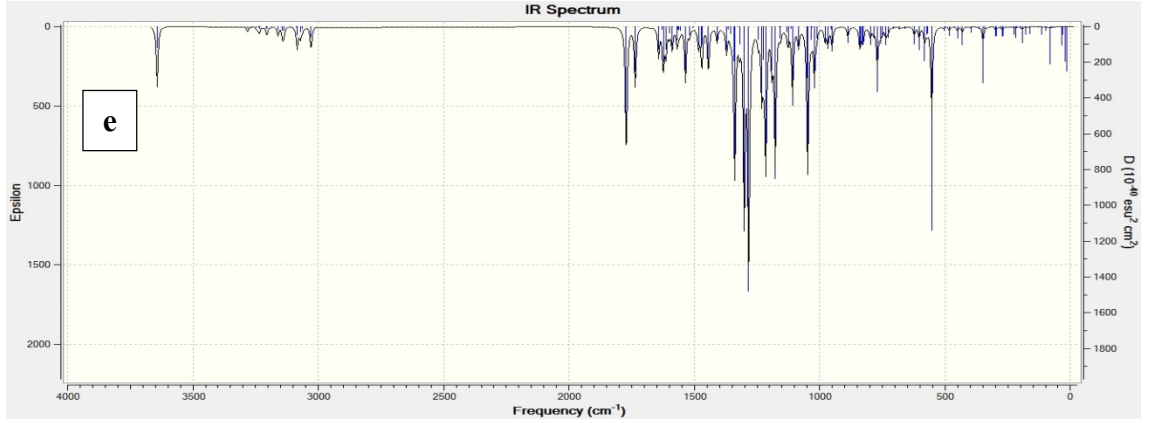
Tablo 3.28.'in devamı

32	δ CCC(19)	492	487
33	τ HNNC(88), δ CCC(16), δ COC(18)	557	534
34	ν CC(12), δ CCC(10), δ CNN(24), τ HCCC(13), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCCC(39)	570	551
35	δ CCC(16), δ COC(20), τ HCCC(12), τ OCOC(13), τ OCCC(14)	572	553
36	ν CC(11), δ OCN(10), δ CNN(24), τ HNNC(89)	577	561
37	δ CCC(24), δ COC(20), δ CCO(16)	592	583
38	δ OCN(21), δ CCC(20)	616	602
39	τ CCOC(34), τ CCCC(24), τ OCCC(22)	637	609
40	τ NCNC(20), τ CCNN(15), τ CCCN(12)	664	638
41	ν CC(18), δ CCN(12), δ CCC(13)	666	660
42	ν CC(14), δ OCO(10), δ CCC(29)	694	683
43	τ HCCC(31), τ CCCC(19)	727	702
44	τ HCCC(42), τ CCCC(30), NN(13)	736	710
45	ν NN(12), δ CCC(10), τ HCCC(41), τ CCCC(19)	737	724
46	ν OC(11), ν NC(19), δ NCN(30), δ CNN(20), τ ONNC(75), τ CCNN(14)	774	732
47	τ HCCC(12), τ OCOC(52), τ ONNC(45)	783	744
48	ν OC(10), ν NC(15), δ NCN(29), δ CNN(15), τ OCOC(41), τ ONNC(14)	784	758
49	ν OC(11), δ OCO(27)	792	771
50	δ NCC(23), δ NNC(11), τ HCCN(41), τ CNNC(12)	821	797
51	δ NCC(22), τ HCCN(27), τ ONNC(16), τ CNNC(12)	824	801
52	τ HCCC(34), τ CCCC(13)	862	809
53	τ HCCC(56), τ OCOC(10)	865	812
54	ν CC(13), ν OC(19)	876	857
55	δ NCN(12), ν CC(50)	924	918
56	ν CC(12), δ CCC(12), τ HCCC(44)	936	920
57	ν NC(13), δ NCN(21), δ CNN(14), τ HCCC(38)	970	925
58	ν CC(22), τ HCCC(31)	995	934
59	δ NCN(16), δ CNN(14), τ HCCC(28), ν NC(12), ν CC(13)	997	944
60	ν NC(13), ν CC(28), δ NCN(16), δ CNN(14), δ CCC(10), τ HCCC(28)	1002	945
61	ν CC(12), δ CCC(23), τ HCCC(20)	1011	977
62	ν CC(32), ν OC(24), δ CCC(10), τ HCCC(34)	1017	986
63	τ CCCC(16), τ HCNN(12), τ HCCC(58)	1041	995
64	ν NC(28), ν CC(13), δ CNN(14), τ HCCC(58), τ CCCC(16)	1046	995
65	ν CC(14), ν OC(54), δ CCC(39)	1050	997
66	ν NC(13), ν OC(18), ν CC(10), τ HCCC(62)	1073	1011
67	ν NC(14), ν CC(10), ν OC(14), δ CCC(10), τ HCCC(47)	1077	1013
68	δ HCC(19), δ CCC(12), τ HCNN(83)	1090	1047
69	ν OC(13), δ CCC(12), δ HCC(17), δ HCH(15), τ HCCN(15), τ HCCC(26)	1095	1070
70	ν CC(18), δ HCC(15), δ HCH(14), τ HCCN(14), τ HCCC(25)	1099	1075
71	ν CC(18), δ HCC(19)	1100	1087
72	ν CC(17), δ HCC(20), τ HCNN(77)	1106	1091
73	δ HCC(14), δ HCH(10), τ HCCN(27), τ HCCC(14)	1135	1114
74	ν NC(26), ν NN(16), ν CC(14)	1142	1116
75	δ HCH(24), τ HCOC(26), ν CC(29)	1155	1119
76	ν OC(13), ν CC(29), δ HCH(24), δ HCC(12), τ HCOC(26)	1156	1137
77	ν CC(25), δ HCC(12), δ HCH(16), τ HCOC(28)	1159	1149
78	ν OC(12), ν NC(10), δ HCC(15)	1171	1173
79	δ HCC(26), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1184	1182
80	ν CC(12), δ HCC(46)	1218	1188
81	ν CC(14), ν OC(10), δ HCC(41)	1219	1202
82	ν CC(15), ν OC(12), δ HCC(13)	1245	1239
83	ν CC(10), ν NN(12), δ CNN(11), ν OC(13)	1258	1256
84	ν CC(20), ν OC(40)	1277	1274
85	δ HCC(70), ν OC(23), τ HCCN(10)	1294	1282
86	ν CC(20), δ HCC(64), τ HCCN(12)	1303	1291

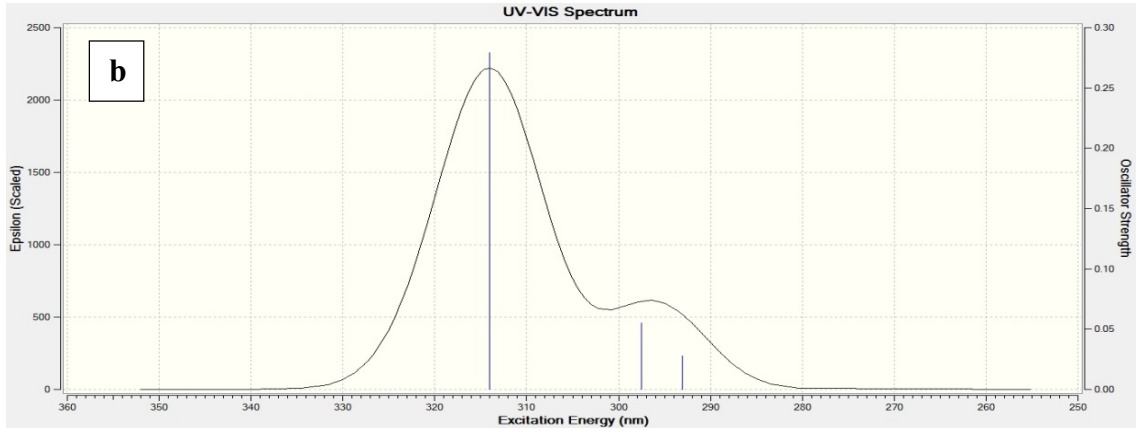
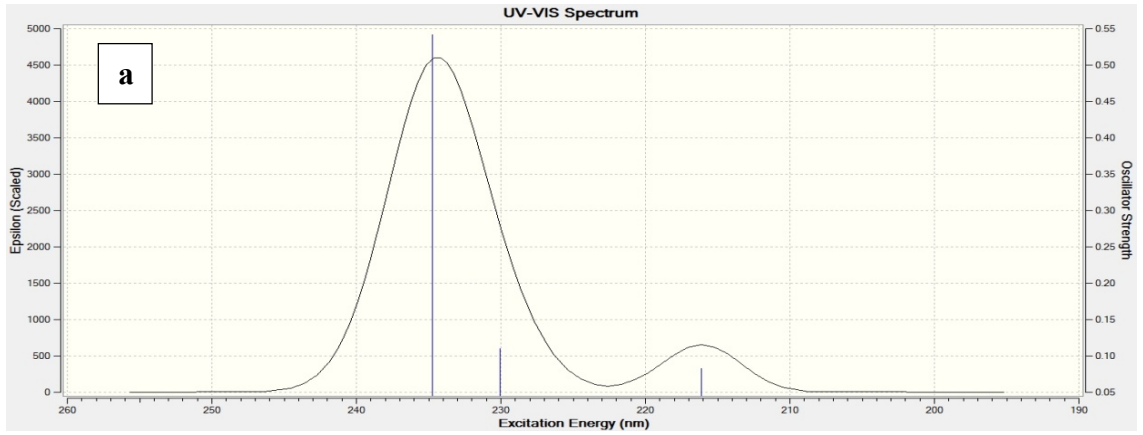
Tablo 3.28.'in devamı

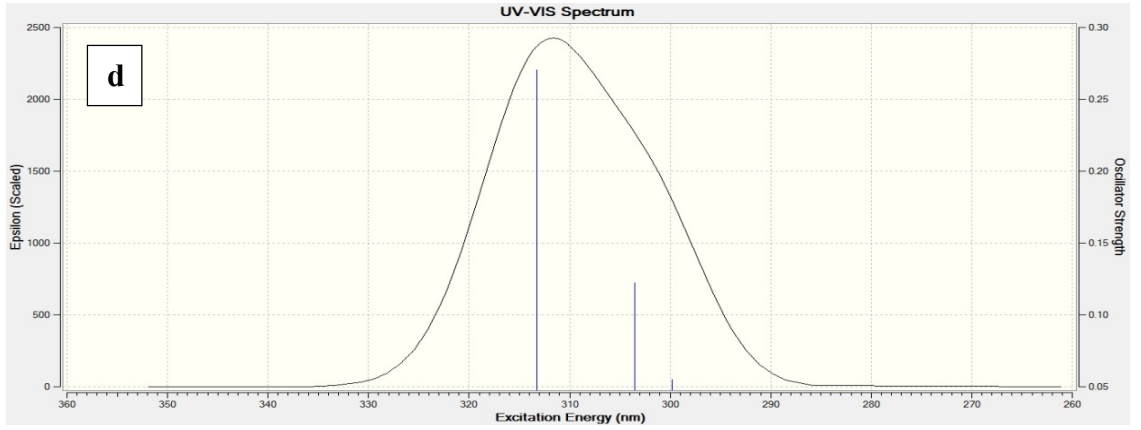
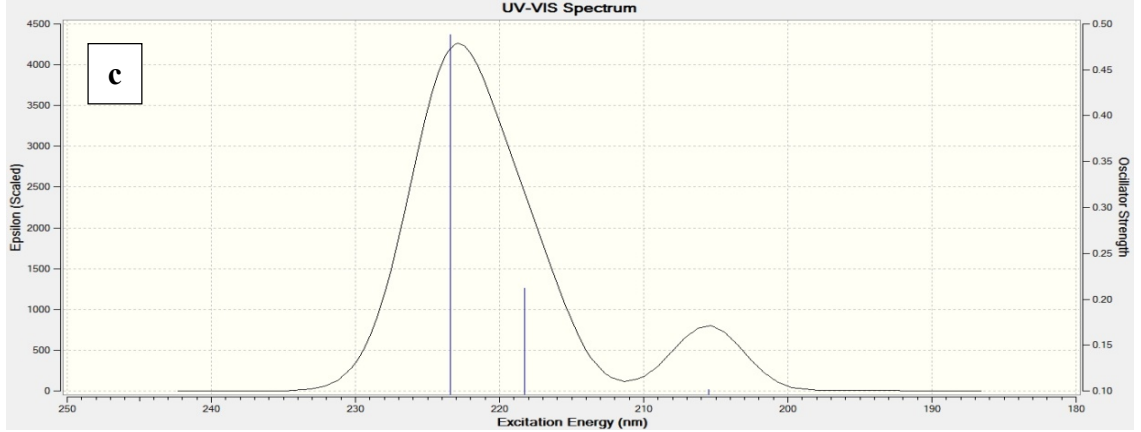
87	v CC(23), v NC(14), δ HCN(13), τ HCCN(13)	1319	1296
88	v CC(15), δ HCC(41)	1334	1309
89	δ HNN(74), δ HCC(73)	1352	1317
90	δ HCC(74), δ HNN(74)	1354	1324
91	δ HCN(34), τ HCCN(22)	1389	1360
92	v NC(12), δ HCN(26)	1420	1394
93	v CC(16), δ HCC(11), δ HCH(74)	1441	1418
94	δ HCH(67), δ HCN(18), δ HCC(10)	1453	1420
95	v CC(12), δ HCC(13)	1458	1432
96	δ HCC(10), δ HCH(67)	1483	1452
97	δ HCH(72), δ HCC(10)	1483	1467
98	δ HCC(46), δ CCC(10)	1508	1482
99	δ HCC(25), δ CCC(11), v CC(19)	1513	1483
100	δ HCH(76), τ HCOC(11), τ HCCN(12)	1515	1502
101	δ HCH(38), τ HCCN(12), τ HCCC(13)	1518	1507
102	δ HCH(75), τ HCCC(12), τ HCOC(11)	1525	1512
103	δ HCH(74)	1534	1514
104	v NC(49), v CC(26), δ HCC(10), δ CCC(11)	1598	1533
105	v NC(46), v CC(41), δ HCC(17)	1600	1544
106	v CC(24), δ HCC(20), δ CCC(11)	1613	1557
107	v CC(34), δ HCC(14), δ CCC(10)	1623	1568
108	v CC(32), v NC(40), δ CCC(19)	1632	1572
109	v CC(22), v NC(44), δ HCC(11)	1671	1585
110	v OC(84)	1732	1675
111	v OC(85)	1745	1710
112	v CH(91)	2907	2923
113	v CH(50)	2924	2956
114	v CH(57)	2935	2964
115	v CH(50)	2956	2976
116	v CH(61)	2960	2979
117	v CH(37)	2980	3028
118	v CH(47)	2992	3033
119	v CH(46)	3016	3050
120	v CH(51)	3061	3076
121	v CH(52)	3063	3092
122	v CH(36)	3080	3094
123	v CH(68)	3090	3120
124	v CH(67)	3092	3122
125	v CH(31)	3097	3126
126	v CH(56)	3108	3134
127	v CH(48)	3119	3150
128	v CH(28)	3138	3167
129	v NH(100)	3540	3515





Şekil 3.10. 178 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
234.73/314.08	223.41/313.24	5.2821/3.9475	5.5495/3.9581	0.5422/0.2795	0.4885/0.2703
230.05/297.51	218.28/303.51	5.3895/4.1674	5.6800/4.0849	0.1096/0.0551	0.2119/0.1221
216.10/293.10	205.52/299.81	5.7373/4.2301	6.0327/4.1355	0.0829/0.0279	0.1011/0.0549

Şekil 3.11. 178 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.29. 178 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açılı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(39)-N(38)	105.143	104.860	104.222	103.436
2	C(1)-N(40)-N(41)	121.161	121.345	120.490	120.718
3	C(1)-N(40)-C(2)	108.130	108.296	109.257	109.310
4	C(1)-C(18)-H(33)	108.112	108.417	108.213	108.393
5	C(1)-C(18)-H(34)	108.114	108.444	108.213	108.393
6	H(33)-C(18)-H(34)	105.764	105.085	106.772	106.321
7	C(1)-C(18)-C(19)	112.977	113.067	111.921	111.934
8	H(35)-C(19)-H(36)	108.260	108.260	108.799	108.943
9	H(35)-C(19)-C(37)	107.703	107.391	108.027	107.853
10	H(36)-C(19)-C(37)	108.256	108.252	108.799	108.943

Tablo 3.29.'un devamı

11	C(18)-C(19)-H(35)	111.385	111.369	110.676	110.528
12	C(18)-C(19)-H(36)	109.744	110.077	109.807	109.993
13	C(18)-C(19)-H(37)	111.379	111.367	110.676	110.527
14	N(39)-C(1)-N(40)	111.137	111.268	111.589	112.124
15	N(39)-N(38)-H(20)	120.847	120.340	120.167	119.535
16	N(39)-N(38)-C(2)	113.754	114.463	112.816	113.913
17	N(39)-C(1)-C(18)	126.067	125.586	126.111	125.305
18	H(20)-N(38)-C(2)	125.399	125.197	127.017	126.551
19	N(38)-C(2)-N(40)	101.836	101.113	102.117	101.217
20	N(38)-C(2)-O(42)	129.530	130.067	130.195	130.844
21	O(42)-C(2)-N(40)	128.634	128.820	127.688	127.939
22	C(2)-N(40)-N(41)	130.707	130.358	130.253	129.972
23	N(40)-C(1)-C(18)	122.796	123.146	122.301	122.572
24	N(40)-N(41)-C(3)	120.054	119.230	119.065	117.290
25	N(41)-C(3)-H(21)	122.366	122.029	122.548	122.464
26	N(41)-C(3)-C(4)	120.383	120.227	120.034	119.609
27	H(21)-C(3)-C(4)	117.250	117.744	117.418	117.926
28	C(3)-C(4)-C(5)	118.037	117.931	119.060	118.088
29	C(3)-C(4)-C(9)	122.566	122.498	121.639	121.569
30	C(4)-C(5)-H(22)	120.986	120.223	120.935	121.089
31	C(4)-C(5)-C(6)	119.888	119.575	119.060	119.169
32	H(22)-C(5)-C(6)	119.126	120.197	120.005	119.743
33	C(5)-C(6)-O(43)	117.932	122.336	124.880	125.378
34	C(5)-C(6)-C(7)	121.122	121.035	119.691	120.664
35	O(43)-C(6)-C(7)	120.863	116.518	114.297	113.958
36	C(6)-C(7)-H(23)	120.052	119.243	118.723	118.564
37	C(6)-C(7)-C(8)	118.944	119.277	119.691	119.788
38	H(23)-C(7)-C(8)	121.003	121.479	121.586	121.648
39	C(7)-C(8)-H(24)	119.424	119.475	119.583	119.509
40	C(7)-C(8)-C(9)	120.711	120.523	120.330	120.347
41	H(24)-C(8)-C(9)	119.865	120.001	120.088	120.144
42	C(8)-C(9)-H(25)	120.518	120.852	121.136	121.547
43	C(8)-C(9)-C(4)	119.938	120.017	119.569	119.689
44	H(25)-C(9)-C(4)	119.544	119.131	119.295	118.763
45	C(9)-C(4)-C(5)	119.397	119.571	120.527	120.343
46	C(6)-O(43)-C(10)	120.028	120.602	128.252	125.486
47	O(43)-C(6)-C(7)	120.863	116.518	114.297	113.958
48	O(43)-C(10)-O(44)	123.402	123.578	123.490	124.185
49	O(43)-C(10)-C(11)	111.898	111.213	111.448	110.224
50	O(44)-C(10)-C(11)	124.700	125.209	125.062	125.591
51	C(10)-C(11)-C(16)	122.175	122.645	122.033	122.607
52	C(10)-C(11)-C(12)	117.241	117.011	116.967	116.557
53	C(11)-C(12)-H(26)	120.463	120.160	120.617	120.115
54	C(11)-C(12)-C(13)	120.285	120.320	120.062	120.246
55	H(26)-C(12)-C(13)	119.251	119.520	119.322	119.639
56	C(12)-C(13)-O(45)	115.788	115.691	116.044	115.808
57	C(12)-C(13)-C(14)	119.429	119.523	119.361	119.192
58	C(13)-O(45)-C(17)	119.945	118.651	120.61	118.211
59	O(45)-C(13)-C(14)	124.783	124.786	124.595	125.000
60	O(45)-C(17)-H(30)	106.190	105.747	111.309	111.614
61	O(45)-C(17)-H(31)	111.466	111.552	111.309	111.613
62	O(45)-C(17)-H(32)	111.466	111.543	105.464	104.862
63	H(30)-C(17)-H(32)	109.104	109.245	109.618	109.682
64	H(31)-C(17)-H(32)	109.429	109.421	109.618	109.682
65	H(30)-C(17)-H(31)	109.099	109.236	109.444	109.295
66	C(13)-C(14)-C(15)	119.784	119.682	120.127	120.125

Tablo 3.29.'un devamı

67	C(13)-C(14)-H(27)	121.116	121.000	120.697	120.620
68	C(14)-C(15)-C(16)	121.132	121.129	120.795	120.125
69	H(27)-C(14)-C(15)	119.099	119.318	119.176	119.255
70	C(14)-C(15)-H(28)	119.033	119.056	119.259	119.174
71	H(28)-C(15)-C(16)	119.835	119.815	119.946	119.918
72	C(15)-C(16)-H(29)	120.744	120.874	121.401	121.678
73	C(15)-C(16)-C(11)	118.785	119.003	118.656	118.695
74	H(29)-C(16)-C(11)	120.470	120.124	119.943	119.627
75	C(16)-C(11)-C(12)	120.584	120.344	121.000	120.835

Tablo 3.30. 178 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

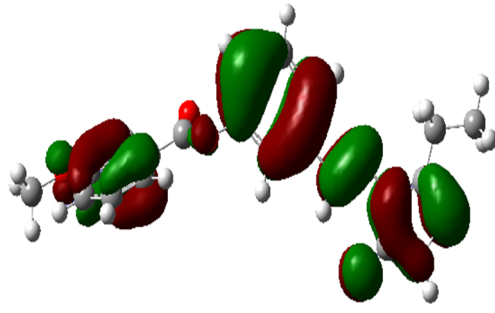
Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(39)	1.2664	1.2784	1.2956	1.3120
2	C(1)-N(40)	1.3810	1.3835	1.3903	1.3891
3	C(1)-C(18)	1.4944	1.4897	1.4929	1.4922
4	C(18)-H(33)	1.0850	1.0837	1.0955	1.0970
5	C(18)-H(34)	1.0849	1.0837	1.0954	1.0970
6	C(18)-C(19)	1.5249	1.5364	1.5288	1.5402
7	C(19)-H(35)	1.0827	1.0818	1.0915	1.0935
8	C(19)-H(36)	1.0841	1.0830	1.0923	1.0940
9	C(19)-H(37)	1.0827	1.0818	1.0915	1.0935
10	N(38)-N(39)	1.3690	1.4272	1.3793	1.4385
11	N(38)-H(20)	0.9885	0.9918	1.0053	1.0087
12	N(38)-C(2)	1.3458	1.3542	1.3684	1.3778
13	C(2)-O(42)	1.1961	1.2186	1.2157	1.2372
14	N(40)-C(2)	1.3880	1.3970	1.4505	1.4328
15	N(40)-N(41)	1.3628	1.3982	1.3690	1.4096
16	N(41)-C(3)	1.2572	1.2669	1.2846	1.2972
17	C(3)-H(21)	1.0740	1.0700	1.0866	1.0848
18	C(3)-C(4)	1.4767	1.4716	1.4665	1.4654
19	C(4)-C(5)	1.3876	1.3884	1.4005	1.4032
20	C(4)-C(9)	1.3916	1.3866	1.4038	1.4036
21	C(5)-H(22)	1.0748	1.0667	1.0823	1.0778
22	C(5)-C(6)	1.3797	1.3807	1.3905	1.3949
23	C(6)-O(43)	1.3787	1.3957	1.3937	1.4100
24	C(6)-C(7)	1.3767	1.3814	1.3892	1.3974
25	C(7)-H(23)	1.0736	1.0694	1.0840	1.0817
26	C(7)-C(8)	1.3872	1.3817	1.3958	1.3949
27	C(8)-H(24)	1.0747	1.0713	1.0849	1.0834
28	C(8)-C(9)	1.3799	1.3811	1.3869	1.3916
29	C(9)-H(25)	1.0726	1.0695	1.0830	1.0820
30	O(43)-C(10)	1.3399	1.3572	1.3732	1.3940
31	C(10)-O(44)	1.1782	1.2048	1.2019	1.2277
32	C(10)-C(11)	1.4921	1.4788	1.4892	1.4808
33	C(11)-C(16)	1.3933	1.3884	1.3926	1.4027
34	C(11)-C(12)	1.3802	1.3772	1.4026	1.3923
35	C(12)-H(26)	1.0722	1.0687	1.0829	1.0812
36	C(12)-C(13)	1.3902	1.3859	1.3972	1.3986
37	C(13)-O(45)	1.3455	1.3689	1.3611	1.3825
38	C(13)-C(14)	1.3851	1.3821	1.3986	1.3997
39	C(14)-H(27)	1.0726	1.0695	1.0827	1.0815
40	C(14)-C(15)	1.3902	1.3879	1.3966	1.3990
41	C(15)-H(28)	1.0750	1.0715	1.0851	1.0836

Tablo 3.30.'un devamı

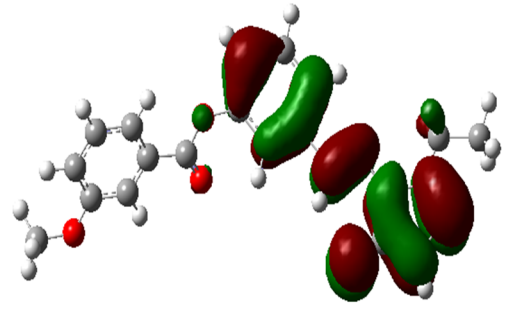
42	C(15)-C(16)	1.3770	1.3769	1.3872	1.3903
43	C(16)-H(29)	1.0713	1.0673	1.0815	1.0794
44	C(45)-O(17)	1.3977	1.4368	1.4193	1.4603
45	C(17)-H(30)	1.0849	1.0831	1.0954	1.0968
46	C(17)-H(31)	1.0785	1.0831	1.0882	1.0968
47	C(17)-H(32)	1.0849	1.0772	1.0954	1.0899

Tablo 3.31. 178 Bileşğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değeri

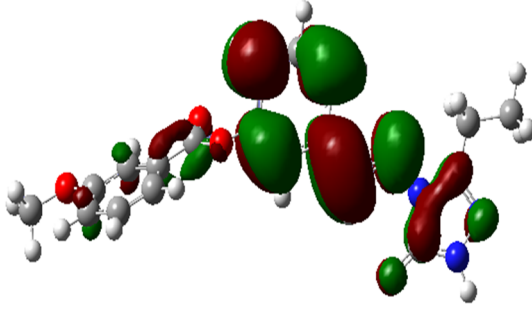
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.551	0.814	0.436	0.674
C2	0.782	1.249	0.583	0.940
C3	0.035	0.193	-0.055	0.109
C4	-0.043	-0.164	-0.023	-0.056
C5	-0.271	-0.246	-0.209	-0.212
C6	0.327	0.383	0.231	0.300
C7	-0.212	-0.254	-0.193	-0.192
C8	-0.208	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.159	-0.182
C10	0.647	1.008	0.430	0.708
C11	-0.203	-0.245	-0.157	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.484	-0.490	-0.496	-0.452
C19	-0.612	-0.581	-0.618	-0.550
H20	0.405	0.403	0.371	0.353
H21	0.305	0.330	0.261	0.262
H22	0.240	0.324	0.229	0.247
H23	0.238	0.266	0.209	0.206
H24	0.227	0.251	0.200	0.195
H25	0.242	0.272	0.210	0.207
H26	0.264	0.305	0.230	0.230
H27	0.242	0.255	0.216	0.196
H28	0.224	0.251	0.199	0.195
H29	0.244	0.274	0.213	0.206
H30	0.208	0.200	0.211	0.199
H31	0.232	0.239	0.233	0.226
H32	0.207	0.200	0.211	0.199
H33	0.242	0.257	0.232	0.231
H34	0.242	0.257	0.233	0.231
H35	0.225	0.226	0.220	0.209
H36	0.213	0.205	0.209	0.189
H37	0.225	0.226	0.220	0.209
N38	-0.592	-0.759	-0.496	-0.592
N39	-0.268	-0.401	-0.205	-0.349
N40	-0.481	-0.859	-0.375	-0.633
N41	-0.269	-0.358	-0.204	-0.319
O42	-0.533	-0.671	-0.390	-0.520
O43	-0.509	-0.815	-0.373	-0.600
O44	-0.436	-0.616	-0.317	-0.481
O45	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



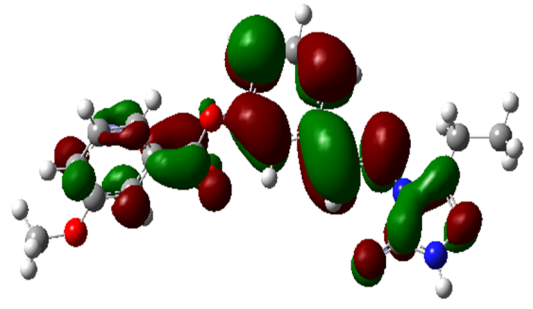
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32128 \text{ Hatree}$



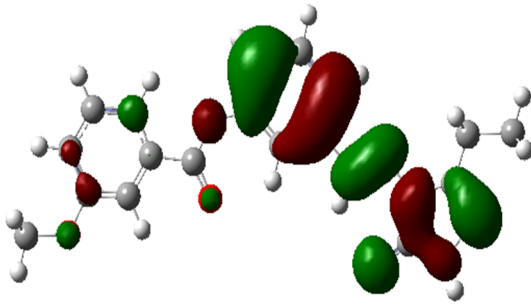
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22659 \text{ Hatree}$



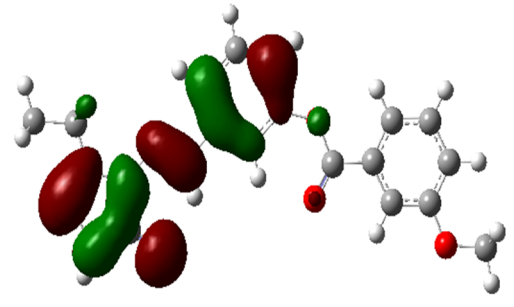
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07737 \text{ Hatree}$



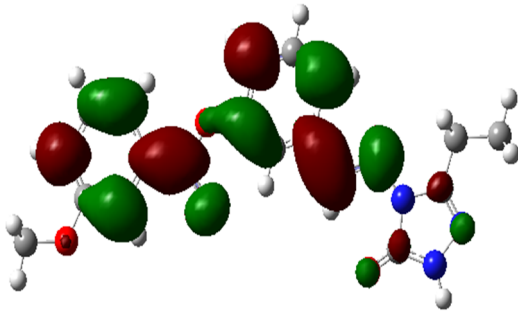
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06598 \text{ Hatree}$



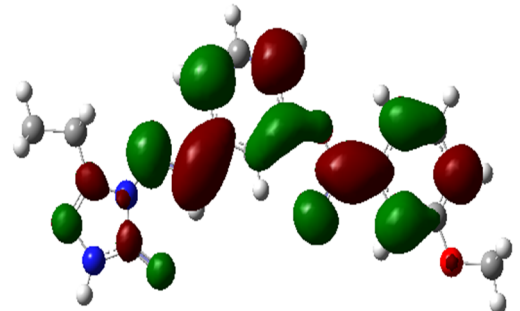
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31901 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,21771 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,08036 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,05757 \text{ Hatree}$

Şekil 3.12. 178 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G(b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

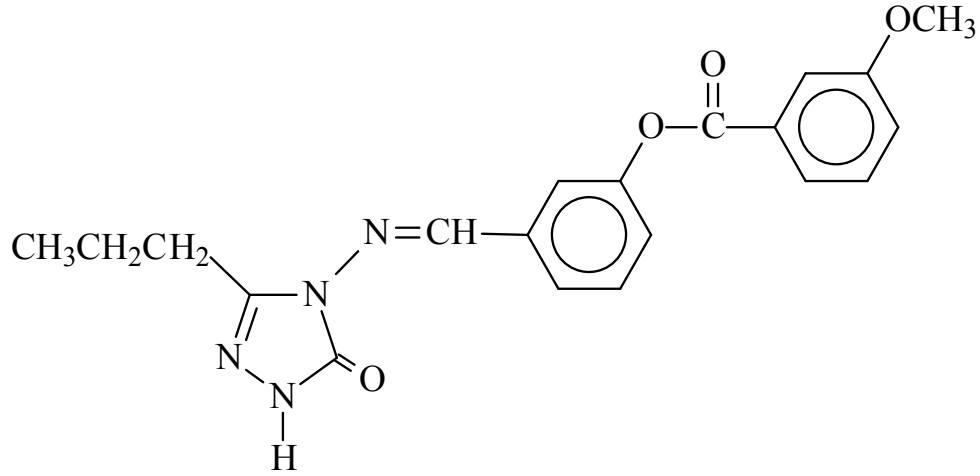
Tablo 3.32. 178 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

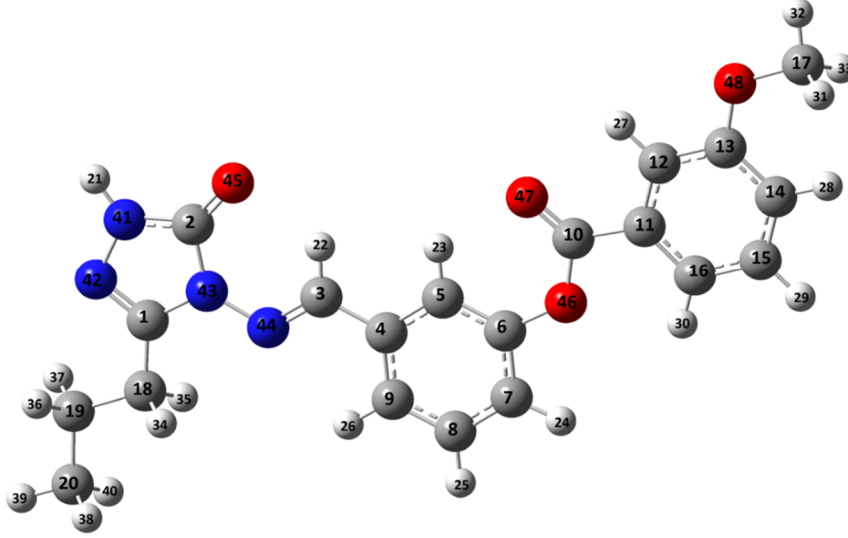
Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.6266	1.2468	-2.6038	0.7733
μ_y	5.7906	5.3591	3.5222	3.2636
μ_z	1.7723	1.7975	1.0431	1.2593
μ_{Toplam}	6.2704	5.7884	4.5027	3.5825

Tablo 3.33. 178 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1247.460	-1240.241	-1255.017	-1247.831

3.1.4. 3-*n*-Propil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (179):





Şekil 3.13. 179 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.34. 179 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.89	151.63	153.31	-4.74	-6.42	141.73	143.81	5.16	3.08
C2	151.26	152.63	153.59	-1.37	-2.33	141.73	142.71	9.53	8.55
C3	151.05	152.22	152.56	-1.17	-1.51	141.93	142.53	9.12	8.52
C4	135.26	140.06	139.55	-4.80	-4.29	126.80	126.56	8.46	8.70
C5	125.70	129.90	129.17	-4.20	-3.47	117.80	118.23	7.90	7.47
C6	152.46	157.68	157.35	-5.22	-4.89	142.00	141.26	10.46	11.20
C7	124.92	125.58	126.96	-0.66	-2.04	118.57	118.78	6.35	6.14
C8	130.06	131.50	133.05	-1.44	-2.99	120.33	121.12	9.73	8.94
C9	120.20	123.42	123.80	-3.22	-3.60	114.21	114.81	5.99	5.39
C10	164.32	166.35	167.90	-2.03	-3.58	151.05	152.86	13.27	11.46
C11	130.27	134.94	133.93	-4.67	-3.66	122.89	121.83	7.38	8.44
C12	122.13	124.77	122.86	-2.64	-0.73	115.19	113.23	6.94	8.90
C13	159.43	165.20	165.43	-5.77	-6.00	149.51	149.41	9.92	10.02
C14	114.38	114.95	117.78	-0.57	-3.40	103.97	106.56	10.41	7.82
C15	130.15	131.62	133.26	-1.47	-3.11	120.80	122.36	9.35	7.79
C16	120.36	124.18	124.30	-3.82	-3.94	113.43	113.71	6.93	6.65
C17	55.45	53.53	54.06	1.92	1.39	35.27	35.76	20.18	19.69
C18	26.59	30.51	30.07	-3.92	-3.48	13.64	13.29	12.95	13.30
C19	18.80	19.65	19.62	-0.85	-0.82	4.15	4.15	14.65	14.65
C20	13.44	14.44	13.77	-1.00	-0.33	1.70	1.14	11.74	12.30
H21	11.90	6.26	6.76	5.64	5.14	5.44	5.90	6.46	6.00
H22	9.79	9.58	9.53	0.21	0.26	8.98	8.95	0.81	0.84
H23	7.64	7.17	7.19	0.47	0.45	6.64	6.85	1.00	0.79
H24	7.47	6.78	7.04	0.69	0.43	6.64	6.84	0.83	0.63
H25	7.62	7.09	7.37	0.53	0.25	6.84	7.11	0.78	0.51
H26	7.78	7.74	7.85	0.04	-0.07	7.57	7.71	0.21	0.07
H27	7.77	7.53	7.35	0.24	0.42	7.43	7.24	0.34	0.53
H28	7.34	6.34	6.73	1.00	0.61	6.05	6.47	1.29	0.87
H29	7.55	7.04	7.30	0.51	0.25	6.78	7.09	0.77	0.46

Tablo 3.34.'ün devamı

H30	7.75	7.45	7.56	0.30	0.19	7.19	7.32	0.56	0.43
H31	3.87	3.21	3.39	0.66	0.48	2.51	2.70	1.36	1.17
H32	3.87	3.69	3.78	0.18	0.09	3.07	3.15	0.80	0.72
H33	3.87	3.21	3.39	0.66	0.48	2.51	2.72	1.36	1.15
H34	2.66	2.36	2.46	0.30	0.20	1.64	1.77	1.02	0.89
H35	2.66	2.36	2.44	0.30	0.22	1.63	1.75	1.03	0.91
H36	1.70	1.56	1.51	0.14	0.19	0.92	0.86	0.78	0.84
H37	1.70	1.55	1.49	0.15	0.21	0.92	0.85	0.78	0.85
H38	0.94	0.72	0.78	0.22	0.16	0.21	0.28	0.73	0.66
H39	0.94	0.99	0.99	-0.05	-0.05	0.52	0.50	0.42	0.44
H40	0.94	0.73	0.79	0.21	0.15	0.21	0.28	0.73	0.66

Tablo 3.35. 179 Bileşğinin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değeri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.89	115.96	116.99	30.93	29.90	113.95	115.54	32.94	31.35
C2	151.26	115.55	116.07	35.71	35.19	114.82	115.37	36.44	35.89
C3	151.05	117.30	117.39	33.75	33.66	115.10	115.40	35.95	35.65
C4	135.26	100.78	100.12	34.48	35.14	93.49	92.72	41.77	42.54
C5	125.70	90.23	89.52	35.47	36.18	84.06	83.35	41.64	42.35
C6	152.46	120.78	120.80	31.68	31.66	111.01	110.91	41.45	41.55
C7	124.92	87.71	88.76	37.21	36.16	83.42	84.44	41.50	40.48
C8	130.06	93.44	94.72	36.62	35.34	88.69	89.99	41.37	40.07
C9	120.20	87.31	87.50	32.89	32.70	82.98	83.32	37.22	36.88
C10	164.32	133.06	133.74	31.26	30.58	128.35	129.20	35.97	35.12
C11	130.27	96.62	95.77	33.65	34.50	90.31	89.36	39.96	40.91
C12	122.13	88.34	86.83	33.79	35.30	85.47	83.66	36.66	38.47
C13	159.43	124.07	124.20	35.36	35.23	115.68	115.39	43.75	44.04
C14	114.38	82.96	85.08	31.42	29.30	78.09	80.31	36.29	34.07
C15	130.15	94.33	95.66	35.82	34.49	88.89	90.43	41.26	39.72
C16	120.36	88.18	88.20	32.18	32.16	83.97	84.42	36.39	35.94
C17	55.45	31.37	32.03	24.08	23.42	15.55	16.16	39.90	39.29
C18	26.59	8.19	7.86	18.40	18.73	-6.47	-6.74	33.06	33.33
C19	18.80	-1.01	-0.98	19.81	19.78	-16.84	-16.79	35.64	35.59
C20	13.44	-4.78	-5.23	18.22	18.67	-17.89	-18.29	31.33	31.73
H21	11.90	5.48	6.02	6.42	5.88	4.51	4.98	7.39	6.92
H22	9.79	9.33	9.26	0.46	0.53	8.76	8.68	1.03	1.11
H23	7.64	7.73	7.62	-0.09	0.02	7.34	7.21	0.30	0.43
H24	7.47	5.71	6.02	1.76	1.45	5.68	6.02	1.79	1.45
H25	7.62	6.04	6.37	1.58	1.25	5.85	6.23	1.77	1.39
H26	7.78	6.85	6.97	0.93	0.81	6.75	6.91	1.03	0.87
H27	7.77	6.68	6.50	1.09	1.27	6.81	6.56	0.96	1.21
H28	7.34	5.22	5.67	2.12	1.67	4.92	5.44	2.42	1.90
H29	7.55	5.98	6.30	1.57	1.25	5.73	6.13	1.82	1.42
H30	7.75	6.63	6.76	1.12	0.99	6.48	6.69	1.27	1.06
H31	3.87	2.72	2.96	1.15	0.91	1.73	2.03	2.14	1.84
H32	3.87	3.38	3.52	0.49	0.35	2.72	2.81	1.15	1.06
H33	3.87	2.72	2.96	1.15	0.91	1.73	2.02	2.14	1.85
H34	2.66	1.64	1.75	1.02	0.91	0.70	0.85	1.96	1.81
H35	2.66	1.64	1.75	1.02	0.91	0.70	0.85	1.96	1.81
H36	1.70	0.81	0.74	0.89	0.96	-0.08	-0.17	1.78	1.87
H37	1.70	0.81	0.75	0.89	0.95	-0.08	-0.17	1.78	1.87
H38	0.94	0.01	0.10	0.93	0.84	-0.84	-0.72	1.78	1.66
H39	0.94	0.28	0.30	0.66	0.64	-0.52	-0.50	1.46	1.44
H40	0.94	0.01	0.10	0.93	0.84	-0.84	-0.72	1.78	1.66

Tablo 3.36. 179 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(45), τ CNNC(10), τ COCC(76)	7	10
2	τ CCCC(21), τ COCC(26), τ CNNC(34), τ CCCN(24)	9	15
3	τ COCC(49), τ CCOC(62)	17	19
4	τ COCC(14), δ CNN(10), δ CCN(10), τ CCCC(10)	39	38
5	τ COCC(10), τ CCNN(11), τ NCCN(16)	52	46
6	τ CCNN(12), τ NCCN(19)	55	52
7	τ COCC(28), δ CCO(12), τ CCCN(10)	61	62
8	τ NCNN(15), τ CCCN(11)	66	67
9	τ NNCN(10), τ CCCN(18), τ CNNC(14)	70	78
10	τ COCC(11), τ CCCN(15), τ CNNC(13)	78	83
11	δ CCC(12), δ CCN(13), τ CNNC(31), τ CCCN(13), δ CNN(15)	113	108
12	τ NCNN(11), τ CNNC(11), δ CCN(22), δ CCC(20)	118	120
13	δ COC(14), δ CCC(19), δ CCO(14)	156	151
14	τ CCCC(15), τ CNNC(15)	173	167
15	τ CNNC(39)	175	178
16	ν CC(10), δ COC(11), δ CCC(11)	187	191
17	δ CNN(13), δ CCC(16), δ COC(10), δ NNC(21)	211	209
18	τ HCOC(19), τ CCCC(12), τ COCC(14), τ OCCC(24), τ CCCN(18), τ NCCN(32)	224	214
19	τ NCCC(10), τ NCNN(16), τ CCCC(10), τ HCOC(20), τ OCCC(10)	226	236
20	τ HCCC(81)	250	242
21	ν CC(11), δ CCC(14), δ CCO(11)	251	250
22	δ COC(14)	273	264
23	τ HCOC(43), τ CCCC(18), τ COCC(10), τ HNNC(20), τ NCNN(26), τ CNNC(29)	286	279
24	τ HNNC(17), τ CNNC(11), τ NNCN(11), τ CCCN(10)	293	285
25	δ COC(14), δ OCO(13)	307	296
26	ν CC(17), δ CCC(44)	323	317
27	τ NCNN(16), τ NNCN(13), τ CCNN(32)	362	349
28	δ CCO(20), δ CCN(13), δ CCC(16)	366	355
29	δ NNC(16), δ OCN(18), δ CNN(18)	409	387
30	δ CCC(13), δ OCO(10)	439	426
31	τ CCCC(11), τ HNNC(51)	460	440
32	τ HNNC(33), τ CCCC(41)	461	451
33	τ HNNC(22), τ CCCN(12)	481	452
34	τ HNNC(11), τ CCOC(14), δ COC(10)	488	462
35	δ CCC(22), δ COC(10)	504	493
36	τ HCCC(11), τ OCOC(12), τ OCCC(37)	581	551
37	δ CCC(10), δ COC(16), τ OCCC(14)	583	567
38	δ CCO(12), δ COC(13)	599	584
39	δ CCC(10)	614	593
40	τ CCOC(19), τ CCCC(15)	628	598
41	δ OCN(25), δ NCC(11), δ CCC(18), δ CCN(11)	646	621
42	τ NCNN(39), τ CCCN(10)	683	653
43	τ HCCC(19), τ CCCC(11), δ CCC(21)	705	683
44	ν CC(10), δ CCC(10), τ HCCC(28), τ CCCC(16)	716	684
45	τ HCCC(44), τ CCCN(17)	724	692
46	δ CCC(11), δ CNN(13)	741	717
47	τ HCCN(11), τ ONNC(53), δ HCC(13)	766	735
48	τ HCCN(36), τ ONNC(24)	795	747
49	τ HCCC(12), τ OCOC(44)	808	753
50	ν NN(10), δ CCC(13), τ ONNC(81)	815	773
51	τ HCCC(13)	830	788
52	ν NC(17), ν CC(10), δ CNN(109), τ HCCC(19)	833	798
53	τ HCCC(49), τ OCOC(23)	861	802

Tablo 3.36.'nın devamı

54	δ OCO(12), τ HCCC(15)	865	816
55	ν NN(10), δ NNC(16), δ NCC(17), δ CCN(13)	888	847
56	ν OC(10), τ HCCC(10), δ HCC(28), τ HCCN(12)	910	876
57	δ HCC(24), τ HCCN(17), τ HCCC(21), ν OC(17)	926	880
58	τ HCCC(41), ν CC(46)	927	891
59	ν OC(11), τ HCCC(18), τ HCNN(87)	966	896
60	ν CC(48), τ HCCC(24)	967	902
61	τ HCCC(42)	982	917
62	τ HCCC(42), ν OC(10), ν CC(11)	984	917
63	ν CC(12), ν OC(10), δ CCC(10), τ HCCC(41)	995	956
64	τ HCCC(20), ν CC(11), δ CCC(13)	1027	961
65	τ HCCC(23), ν CC(19), δ CCC(41)	1035	967
66	ν CC(30), δ CCC(11), τ HCCC(23)	1044	1002
67	τ HCNN(87), τ HCCC(33)	1049	1005
68	ν CC(27), δ CCO(36)	1056	1007
69	ν CC(10), δ NNC(20), τ HCNN(87)	1082	1023
70	ν CC(54), δ CNN(11), δ NNC(31)	1090	1044
71	ν OC(63), ν CC(10), δ HCC(11)	1126	1062
72	ν NC(12), ν NN(30), ν CC(11), δ HCC(27)	1129	1083
73	ν OC(10), δ HCC(17), ν CC(15)	1138	1085
74	ν CC(15), δ HCC(22)	1142	1099
75	ν CC(15), δ HCC(16), ν NN(18), τ HCCC(10)	1143	1110
76	ν CC(18), δ CCC(11), τ HCCC(25)	1152	1123
77	τ HCCN(42), τ HCCC(22), ν CC(21)	1168	1129
78	δ HCC(32), ν NN(19), ν CC(10), τ HCCC(16)	1172	1164
79	δ HCH(26), τ HCOC(22), δ HCC(10), τ HCCN(45), τ HCCC(20)	1177	1172
80	δ HCC(17), ν CC(10)	1211	1180
81	δ HCC(17), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1185
82	δ HCH(12), τ HCOC(23), δ HCC(20)	1251	1199
83	ν NC(13), ν NN(17), δ OCN(11), ν CC(14), δ HCC(17)	1261	1205
84	ν OC(10), ν CC(11), δ HCC(12)	1267	1223
85	ν NC(26), ν NN(13), δ CNN(14), δ OCN(10)	1277	1254
86	δ HCC(55), τ HCCC(15)	1309	1257
87	τ HCCN(19), ν OC(16), ν CC(23)	1312	1267
88	ν CC(10), ν OC(10)	1326	1284
89	ν NN(13), δ HCC(10), τ HCCN(12), δ CNN(10)	1333	1303
90	δ HCC(23), ν OC(18)	1368	1310
91	ν CC(11), δ HCC(25)	1373	1314
92	δ HCC(72), τ HCCN(14)	1375	1327
93	ν CC(16), δ HCC(42), τ HCCN(14)	1378	1343
94	ν CC(36), δ HCC(16), ν NN(13), δ CNN(22), τ HCCN(17)	1394	1349
95	ν NC(14), δ HCN(18), τ HCCN(14)	1434	1365
96	δ HNN(64), τ HCCN(10), δ HCN(29), δ HCH(11)	1471	1397
97	δ HCN(33), δ HCH(20), τ HCCN(10)	1481	1408
98	δ HCH(34), ν OC(13), ν NC(10), δ HNN(63)	1485	1419
99	τ HCCN(14), ν CC(14)	1509	1442
100	δ HCN(11), ν CC(11), δ HCC(13)	1525	1459
101	ν CC(11), δ HCC(10), δ HCH(10)	1531	1465
102	δ HCH(25), τ HCCN(12)	1544	1479
103	δ HCH(53)	1546	1480
104	δ HCH(60), τ HCCC(10)	1548	1495
105	δ HCH(72), τ HCOC(11), τ HCCC(19)	1554	1498
106	δ HCH(12), τ HCCC(21), τ HCOC(12)	1562	1506
107	δ HCH(63), τ HCOC(11)	1564	1509
108	δ HCC(26), δ HCH(19), τ HCOC(10)	1570	1511
109	δ HCH(61), τ HCCC(12), δ HCC(41), δ CCC(13)	1574	1512

Tablo 3.36.'nın devamı

110	δ HCC(27), δ CCC(10)	1577	1515
111	ν CC(16), δ CCC(12)	1691	1609
112	ν CC(26), δ CCC(13)	1696	1610
113	ν CC(33), δ CCC(11)	1717	1627
114	ν NC(26), ν CC(14), δ HCC(12)	1719	1632
115	ν CC(12), ν NC(42)	1769	1638
116	ν NC(10), ν CC(11)	1802	1653
117	ν OC(85), ν NC(12)	1863	1786
118	ν OC(71), ν NC(11)	1903	1792
119	ν CH(91)	3020	2982
120	ν CH(80)	3030	2996
121	ν CH(22)	3047	3001
122	ν CH(15)	3052	3018
123	ν CH(69)	3060	3021
124	ν CH(50)	3069	3039
125	ν CH(50)	3083	3040
126	ν CH(83)	3086	3065
127	ν CH(45)	3097	3065
128	ν CH(46)	3149	3116
129	ν CH(23)	3188	3138
130	ν CH(16)	3190	3145
131	ν CH(33)	3199	3146
132	ν CH(42)	3216	3168
133	ν CH(27)	3218	3176
134	ν CH(39)	3220	3180
135	ν CH(57)	3226	3185
136	ν CH(26)	3236	3186
137	ν CH(48)	3239	3195
138	ν NH(100)	3771	3656

Tablo 3.37. 179 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCNC(25), τ CNNC(25), τ COCC(16), τ CCOC(11)	9	9
2	τ CCCO(10), τ COCC(43), τ CCOC(19)	17	19
3	δ NCC(15), δ CCC(22), δ CCO(10), δ COC(21), δ NNC(15)	27	27
4	τ COCC(42)	30	32
5	τ HCCN(14), τ CCCN(30), τ NNCC(11), τ CCNN(11)	51	46
6	δ COC(20), δ CCN(18), δ NNC(10)	59	60
7	τ NNCC(22), τ COCC(20), τ CCCN(20), τ NCNN(10)	62	62
8	τ NNCC(14), τ CCCN(24), τ CNNC(12), τ COCC(46)	67	71
9	τ CCCO(10), τ COCC(53), τ CCCN(27), τ NNCC(14), τ CNNC(10)	76	78
10	τ CCCO(12), τ COCC(30), τ CCCC(18)	87	94
11	δ CCC(34), δ CCN(15), δ CCO(16)	96	96
12	τ NCNC(18), τ NCNN(27), τ CCCC(11), τ CNNC(15)	127	128
13	δ CCO(10), δ COC(14), δ CCC(27)	157	157
14	τ CCCC(31)	173	170
15	δ CCC(10), δ COC(16), τ CCCC(31)	183	184
16	τ NCNC(25), τ CNNC(19), τ CCNN(16)	190	188
17	τ HCOC(39), τ COCC(14), τ OCCC(17), δ COC(13), δ CCC(13), δ CNN(12)	209	208
18	δ CCC(10), δ CNN(12), δ COC(25), τ HCOC(45), τ CCCC(13), τ OCCC(10)	210	210
19	τ HCCC(83)	233	234
20	ν CC(14), δ COC(12), δ CCC(10)	254	254
21	τ CCCO(27), τ CCCC(17), τ CNNC(13)	263	258

Tablo 3.37.'nin devamı

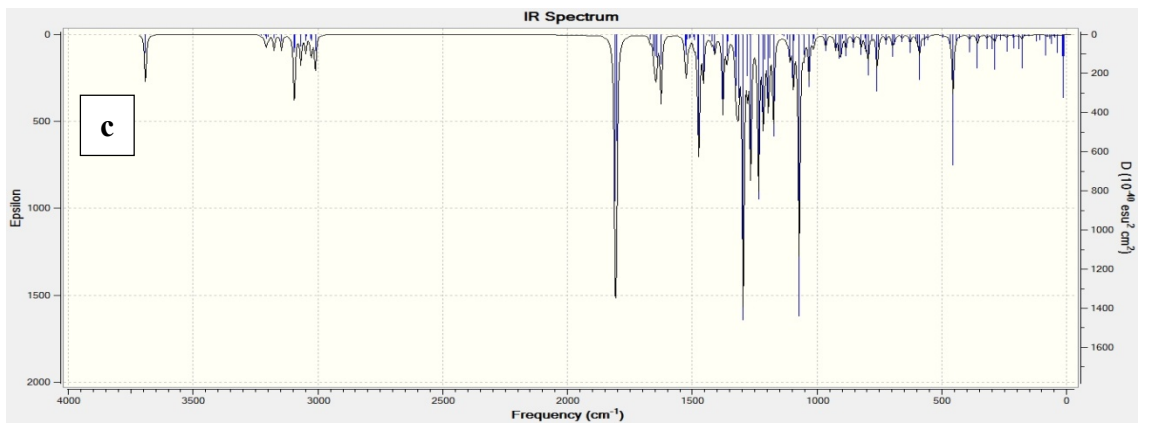
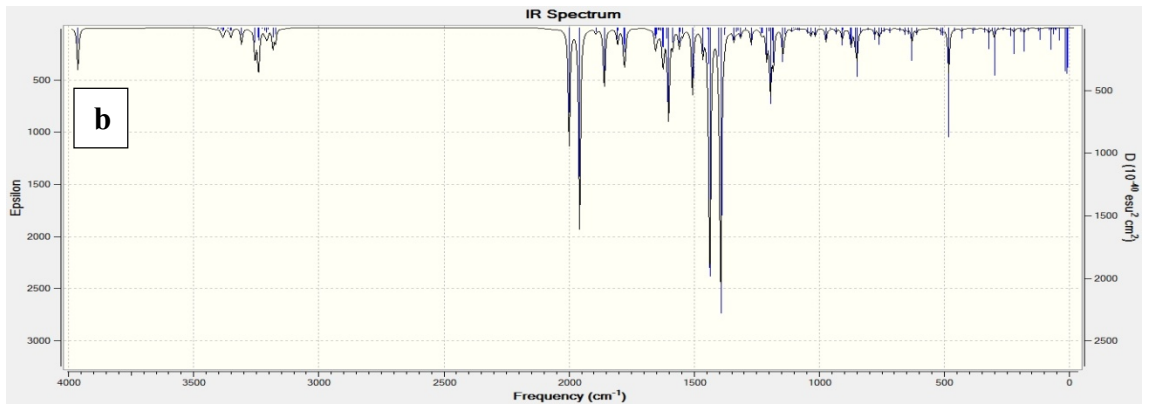
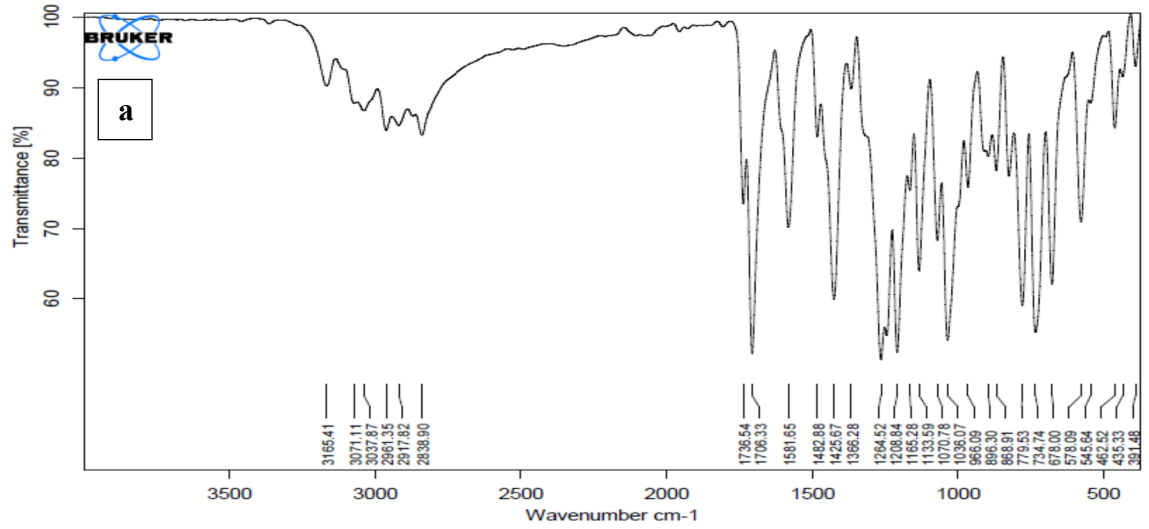
22	δ COC(28), τ HCOC(20), τ CCCC(30)	273	269
23	δ COC(28), δ CCC(13), τ HCOC(11), τ CCCC(30)	274	275
24	τ NCNC(11), τ CNNC(33), τ CCCC(18)	281	288
25	ν CC(17), δ CCC(41)	312	311
26	τ NCNN(30), τ CNNC(30), δ COC(18), δ OCO(18), δ CCC(12)	338	330
27	δ OCO(19), δ CCO(14), δ COC(10), τ CNNC(30), τ NCNN(34)	345	334
28	τ CCCC(10), τ NCNN(12), τ NNCC(24), τ CCNN(29)	370	354
29	δ OCN(20), δ CCC(11), δ CNN(10)	379	372
30	δ CCC(16)	423	417
31	δ CCC(22), δ COC(12)	439	435
32	τ HCCC(10), τ CCCO(27), τ CCCC(49)	464	446
33	τ CCCC(41), τ CCOC(14), τ HCCC(13), τ OCCC(10)	485	467
34	δ CCC(14)	492	487
35	τ HNNC(88), δ COC(18), δ CCC(16)	557	535
36	τ CCCC(11), τ HCCC(13), τ OCOC(16), τ OCCC(39)	572	551
37	δ CCC(15), δ COC(20), τ HNNC(89)	576	553
38	δ OCN(16), δ CNN(23), δ CCC(14)	583	571
39	δ CCO(19), δ COC(20), δ CCC(22)	592	583
40	ν NN(12), δ CCC(24), δ OCN(17)	616	602
41	τ CCCC(24), τ CCOC(25), τ OCCC(22)	637	609
42	τ NCNC(21), τ NCNN(10), τ CCNN(16), τ CCNN(16)	664	640
43	δ CCC(22), ν CC(14)	694	683
44	δ CNN(11), δ CCC(10)	708	698
45	τ HCCC(31), τ CCCO(20), τ CCCC(19)	727	702
46	τ HCCC(53), τ CCCC(23)	737	710
47	δ HCC(13), τ HCCN(48), τ ONNC(43)	743	727
48	ν NC(17), ν NN(12)	747	736
49	τ HCCN(22), τ ONNC(21), τ OCOC(14), ν NC(11), ν CC(16), δ NCN(31), δ CNN(12)	777	743
50	τ ONNC(10), τ OCOC(55), τ HCCC(13)	784	744
51	ν CC(16), δ NCN(27), δ CNN(14), δ OCO(27)	792	763
52	ν OC(11), δ OCO(27), τ ONNC(67), τ CCNN(13)	796	771
53	ν NC(10), δ NCC(23), δ NNC(11)	821	801
54	τ HCCC(29), τ CCCC(13)	861	809
55	τ HCCC(62), τ OCOC(10)	865	811
56	ν CC(54), ν OC(12), τ HCCC(16)	874	857
57	ν CC(51), τ HCCC(17), ν OC(19)	877	874
58	δ HCC(23), τ HCCN(19), τ HCCC(21)	896	881
59	τ HCCC(43), δ CCC(12), ν CC(14), ν OC(10)	932	920
60	τ HCCC(39), δ NCN(20), δ CNN(12), ν CC(23)	972	924
61	ν CC(61)	977	925
62	τ HCCC(29)	995	944
63	δ NCN(27), δ CNN(23), τ HCCC(27)	997	946
64	τ HCCC(25), τ CCCC(14), τ CCOC(10), ν CC(28), δ CCC(10)	1002	977
65	ν CC(32), ν NC(19), δ CCC(23)	1011	984
66	ν CC(26), ν OC(19), δ CCC(13), τ HCCC(34)	1017	986
67	τ HCCC(60), τ HCNN(11)	1041	994
68	τ HCCC(46), ν CC(12), δ CNN(13), ν NC(31)	1043	995
69	ν CC(12), ν OC(55), δ CCC(36), δ CCO(11)	1050	997
70	ν NC(13), ν CC(36), τ HCCC(67)	1073	1010
71	ν OC(25), δ CCC(19), τ HCCC(67)	1077	1012
72	τ HCNN(84), δ CCC(12), δ HCC(23)	1090	1046
73	ν OC(13), δ HCC(16), ν CC(19)	1099	1069
74	ν CC(19), δ HCC(19)	1100	1086
75	ν CC(18), δ HCC(21), τ HCNN(77)	1106	1091
76	ν CC(15), δ CCC(11), τ HCCC(39)	1112	1099

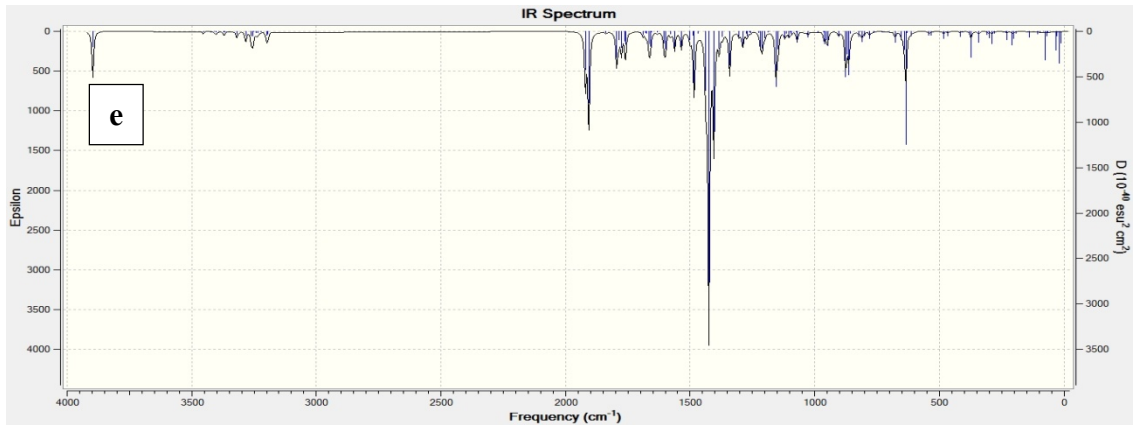
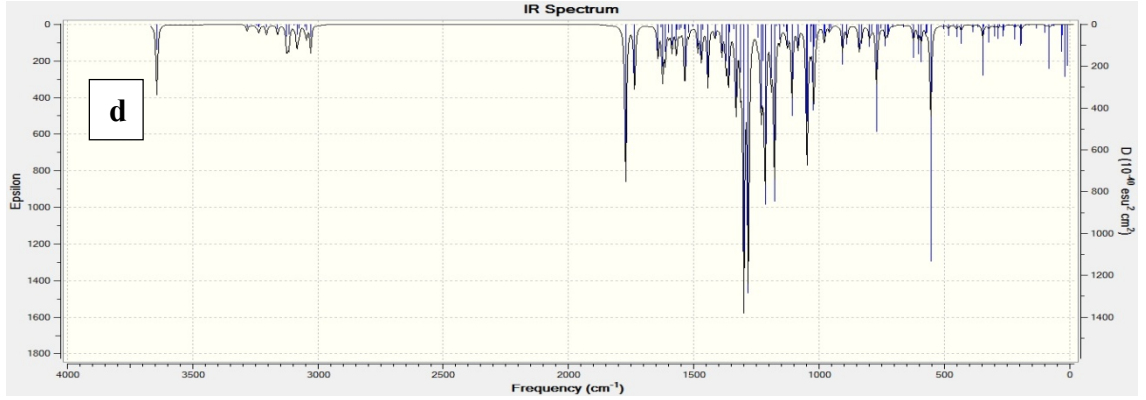
Tablo 3.37.'nin devamı

77	v NC(26), v NN(16), v CC(16)	1142	1116
78	δ HCH(23), τ HCOC(25), τ HCCN(40), δ HCC(13), τ HCCC(23)	1147	1119
79	v CC(29), δ HCC(13), τ HCCN(39), τ HCCC(24), τ HCOC(26)	1155	1128
80	v OC(13), δ HCC(12), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1156	1137
81	δ HCH(16), τ HCOC(28), v CC(28), δ HCC(12)	1159	1149
82	v OC(12), δ HCC(14), v NC(10)	1171	1172
83	δ HCC(29), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1184	1181
84	δ HCC(45), v CC(12)	1218	1188
85	v CC(14), v OC(10), δ HCC(41)	1219	1202
86	v CC(18), v OC(11), δ CCC(13), δ HCC(13)	1245	1238
87	v CC(13), v OC(10), v NC(10), v NN(11), δ CNN(11)	1257	1254
88	δ HCC(59), τ HCCC(14)	1275	1256
89	v CC(14), v NC(10), δ HCN(11), τ HCCN(16), v OC(40)	1276	1267
90	v CC(24), v OC(23), τ HCCN(10), δ HCC(10)	1294	1285
91	v CC(25), δ HCC(14), τ HCCN(31)	1305	1294
92	v CC(15), δ HCC(74), τ HCCN(15)	1334	1309
93	δ HNN(66), τ HCCN(15), δ HCC(74)	1334	1314
94	v CC(12), δ HCC(74), τ HCCN(15)	1348	1317
95	δ HCC(71), δ HNN(47)	1353	1323
96	δ HCN(16), τ HCCN(22), δ HNN(18), δ HCC(13)	1363	1339
97	δ HCN(23), τ HCCN(49)	1395	1366
98	v NC(12), δ HCN(26), τ HCCN(11)	1419	1393
99	δ HCH(33)	1434	1412
100	v CC(12), δ HCC(16), δ HCN(17)	1453	1418
101	v CC(12), δ HCC(37)	1458	1432
102	δ HCC(10), δ HCH(69), τ HCCN(11)	1482	1452
103	δ HCH(72), δ HCC(10)	1483	1466
104	δ HCC(30), δ HCH(44)	1505	1482
105	δ HCC(46)	1508	1483
106	δ HCH(45), δ HCC(24), v CC(16)	1513	1497
107	δ HCH(76), τ HCOC(11), τ HCCC(23)	1521	1502
108	δ HCH(76), τ HCCC(23), τ HCOC(11)	1521	1513
109	δ HCH(75), τ HCOC(11)	1525	1514
110	δ HCH(74), τ HCCC(19)	1534	1516
111	v NC(49), v CC(26), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1531
112	v NC(46), v CC(41), δ HCN(17), δ HCC(13)	1600	1543
113	v CC(27), δ HCC(21), δ CCC(10)	1613	1557
114	v CC(33), δ HCC(16), δ CCC(10)	1623	1567
115	v NC(40), v CC(32), δ CCC(19)	1630	1572
116	v CC(22), δ HCC(11), v NC(44)	1672	1585
117	v OC(84)	1732	1675
118	v OC(85)	1744	1710
119	v CH(94)	2901	2923
120	v CH(92)	2906	2939
121	v CH(78)	2927	2947
122	v CH(67)	2938	2968
123	v CH(73)	2944	2968
124	v CH(65)	2953	2976
125	v CH(69)	2956	2986
126	v CH(91)	2962	3007
127	v CH(79)	2983	3015
128	v CH(46)	3016	3050
129	v CH(51)	3061	3076
130	v CH(52)	3063	3092
131	v CH(36)	3080	3094
132	v CH(68)	3090	3120

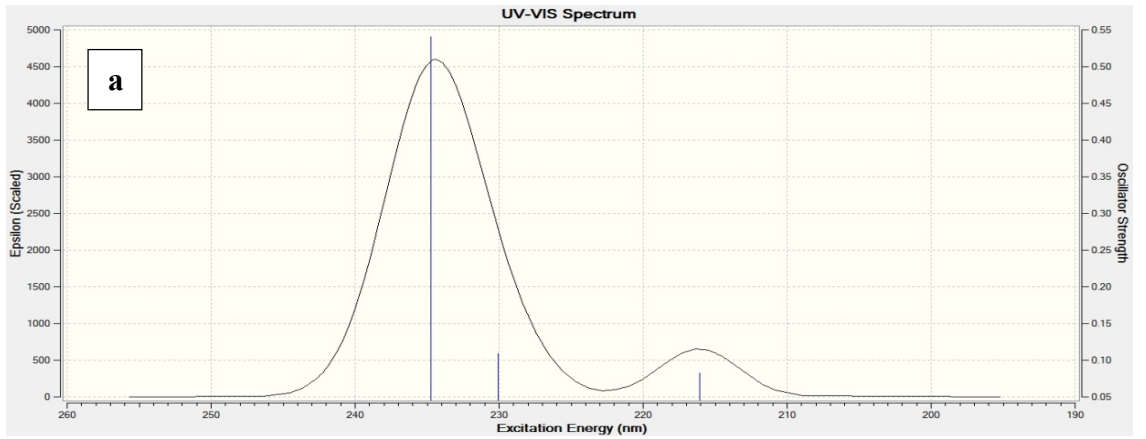
Tablo 3.37.'nin devamı

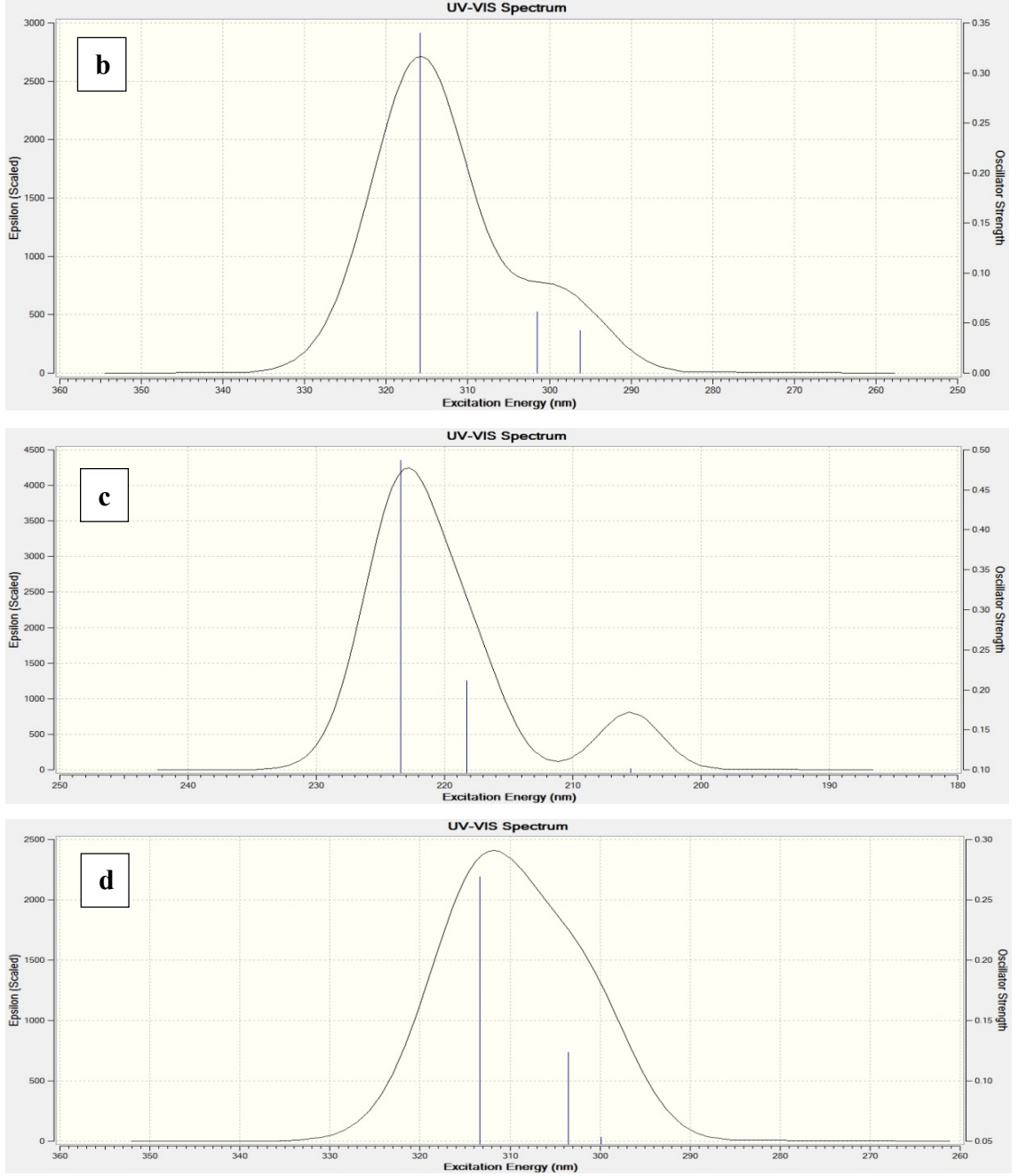
133	v CH(67)	3092	3122
134	v CH(31)	3097	3126
135	v CH(56)	3108	3134
136	v CH(48)	3119	3150
137	v CH(79)	3138	3168
138	v NH(100)	3540	3516





Şekil 3.14. 179 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
234.75/315.88	223.42/313.35	5.2816/3.9250	5.5493/3.9568	0.5411/0.3400	0.4872/0.2691
230.04/301.49	218.28/303.50	5.3896/4.1123	5.6800/4.0851	0.1095/0.0612	0.2112/0.1236
216.09/296.24	205.51/299.86	5.7376/4.1853	6.0331/4.1348	0.0830/0.0428	0.1017/0.0534

Şekil 3.15. 179 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.38. 179 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(42)-N(41)	105.154	104.869	104.233	103.226
2	C(1)-N(43)-N(44)	121.168	121.347	120.492	120.721
3	C(1)-N(43)-C(2)	108.145	108.312	109.268	109.315
4	C(1)-C(18)-H(34)	108.088	108.479	108.287	108.585
5	C(1)-C(18)-H(35)	108.092	108.512	108.286	108.585
6	H(34)-C(18)-H(35)	105.674	105.007	106.786	106.338
7	C(1)-C(18)-C(19)	113.339	113.491	112.426	112.483
8	C(18)-C(19)-H(36)	109.482	109.324	109.299	109.090
9	C(18)-C(19)-H(37)	109.474	109.327	109.299	109.090
10	H(36)-C(19)-H(37)	106.153	105.750	107.070	106.850
11	H(34)-C(18)-C(19)	110.656	110.481	110.340	110.319
12	H(35)-C(18)-C(19)	110.657	110.495	110.429	110.318
13	H(36)-C(19)-C(20)	109.482	110.061	110.044	110.205
14	H(37)-C(19)-C(20)	109.905	110.084	110.044	110.205
15	C(19)-C(20)-H(38)	111.512	111.566	110.849	110.791
16	C(19)-C(20)-H(39)	111.933	111.100	110.579	110.669
17	C(19)-C(20)-H(40)	111.512	111.603	110.849	110.791
18	H(38)-C(20)-H(39)	107.527	107.446	108.107	108.162
19	H(38)-C(20)-H(40)	107.628	107.472	108.246	108.162
20	H(39)-C(20)-H(40)	107.529	107.434	108.107	108.162
21	N(42)-C(1)-N(43)	111.106	111.237	111.567	112.104
22	N(42)-N(41)-H(21)	120.841	120.341	120.165	119.540
23	N(42)-N(41)-C(2)	113.758	114.467	112.810	113.906
24	N(42)-C(1)-C(18)	126.202	125.704	126.119	125.306
25	H(21)-N(41)-C(2)	125.401	125.192	127.024	126.554
26	N(41)-C(2)-N(43)	101.837	101.114	102.122	101.228
27	N(41)-C(2)-O(45)	129.526	130.066	130.195	130.834
28	O(45)-C(2)-N(43)	128.637	128.819	127.683	127.938
29	C(2)-N(43)-N(44)	130.685	130.339	130.240	129.964
30	N(43)-C(1)-C(18)	122.692	123.060	122.314	122.590
31	N(43)-N(44)-C(3)	120.068	119.250	119.078	117.296
32	N(44)-C(3)-H(22)	122.372	122.043	122.554	122.463
33	N(44)-C(3)-C(4)	120.376	120.209	120.023	119.609
34	H(22)-C(3)-C(4)	117.252	117.748	117.423	117.928
35	C(3)-C(4)-C(5)	118.040	117.925	117.838	118.067
36	C(3)-C(4)-C(9)	122.564	122.478	121.636	121.588
37	C(4)-C(5)-H(23)	120.986	120.204	120.934	121.068
38	C(4)-C(5)-C(6)	119.888	119.561	119.060	119.172
39	H(23)-C(5)-C(6)	119.126	120.229	120.007	119.759
40	C(5)-C(6)-O(46)	117.935	122.479	124.880	125.405
41	C(5)-C(6)-C(7)	121.123	121.017	120.825	120.659
42	O(46)-C(6)-C(7)	120.859	116.387	114.296	113.936
43	C(6)-C(7)-H(24)	120.052	119.230	118.723	118.566
44	C(6)-C(7)-C(8)	118.944	119.295	119.690	119.793
45	H(24)-C(7)-C(8)	121.003	121.475	121.587	121.641
46	C(7)-C(8)-H(25)	119.424	119.472	119.583	119.509
47	C(7)-C(8)-C(9)	120.711	120.525	120.331	120.349
48	H(25)-C(8)-C(9)	119.865	120.003	120.087	120.142
49	C(8)-C(9)-H(26)	120.860	120.860	121.138	121.564
50	C(8)-C(9)-C(4)	119.938	120.003	119.569	119.682
51	H(26)-C(9)-C(4)	119.543	119.137	119.293	118.754
52	C(9)-C(4)-C(5)	119.396	119.598	120.526	120.345

Tablo 3.38.'in devamı

53	C(6)-O(46)-C(10)	120.029	120.822	128.251	125.507
54	O(46)-C(6)-C(7)	120.859	116.387	114.296	113.936
55	O(46)-C(10)-O(47)	123.406	123.623	123.492	124.186
56	O(46)-C(10)-C(11)	111.897	111.195	111.448	110.205
57	O(47)-C(10)-C(11)	124.697	125.182	125.060	125.610
58	C(10)-C(11)-C(16)	122.174	122.651	122.032	122.591
59	C(10)-C(11)-C(12)	117.242	117.007	116.968	116.574
60	C(11)-C(12)-H(27)	120.463	120.157	120.616	120.123
61	C(11)-C(12)-C(13)	120.286	120.320	120.061	120.243
52	H(27)-C(12)-C(13)	119.252	119.522	119.322	119.634
63	C(12)-C(13)-O(48)	115.788	115.701	116.044	115.819
64	C(12)-C(13)-C(14)	119.429	119.521	119.361	119.189
65	C(13)-O(45)-C(17)	119.945	118.636	120.961	118.210
66	O(48)-C(13)-C(14)	124.783	124.777	124.595	124.992
67	O(48)-C(17)-H(31)	111.460	111.538	111.309	111.610
68	O(48)-C(17)-H(32)	106.190	105.752	105.465	104.863
69	O(48)-C(17)-H(33)	111.466	111.542	111.309	111.610
70	H(31)-C(17)-H(32)	109.104	109.247	109.617	109.682
71	H(31)-C(17)-H(33)	109.429	109.424	109.444	109.302
72	H(32)-C(17)-H(33)	109.098	109.241	109.618	109.681
73	C(13)-C(14)-C(15)	119.784	119.684	120.127	120.131
74	C(13)-C(14)-H(28)	121.117	120.999	120.697	120.631
75	C(14)-C(15)-C(16)	121.132	121.128	120.795	120.904
76	H(28)-C(14)-C(15)	119.099	119.317	119.176	119.238
77	C(14)-C(15)-H(29)	119.033	119.056	119.259	119.178
78	H(29)-C(15)-C(16)	119.835	119.816	119.946	119.918
79	C(15)-C(16)-H(30)	120.745	120.864	121.401	121.681
80	C(15)-C(16)-C(11)	118.786	119.005	118.656	118.698
81	H(30)-C(16)-C(11)	120.470	120.131	119.943	119.621
82	C(16)-C(11)-C(12)	120.584	120.342	121.000	120.835

Tablo 3.39. 179 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

	Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP
		6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
1	C(1)-N(42)	1.2786	1.2665	1.2958	1.3122
2	C(1)-N(43)	1.3825	1.3813	1.3906	1.3892
3	C(1)-C(18)	1.4893	1.4943	1.4925	1.4913
4	C(18)-H(34)	1.0844	1.0857	1.0964	1.0978
5	C(18)-H(35)	1.0845	1.0857	1.0964	1.0978
6	C(18)-C(19)	1.5373	1.5273	1.5317	1.5421
7	C(19)-H(36)	1.0827	1.0844	1.0939	1.0952
8	C(19)-H(37)	1.0827	1.0844	1.0939	1.0952
9	C(19)-C(20)	1.5395	1.5266	1.5295	1.5420
10	C(19)-H(38)	1.0850	1.0861	1.0946	1.0965
11	C(19)-H(39)	1.0838	1.0846	1.0930	1.0951
12	C(19)-H(40)	1.0850	1.0861	1.0947	1.0965
13	N(42)-N(41)	1.4273	1.3691	1.3794	1.4385
14	N(41)-H(21)	0.9918	0.9885	1.0053	1.0086
15	N(41)-C(2)	1.3540	1.3457	1.3683	1.3776
16	C(2)-O(45)	1.2186	1.1962	1.2158	1.2373
17	N(43)-C(2)	1.3970	1.3879	1.4204	1.4327
18	N(43)-N(44)	1.3981	1.3627	1.3689	1.4096
19	N(44)-C(3)	1.2668	1.2572	1.2846	1.2972
20	C(3)-H(22)	1.0700	1.0740	1.0866	1.0848

Tablo3.39.'un devamı

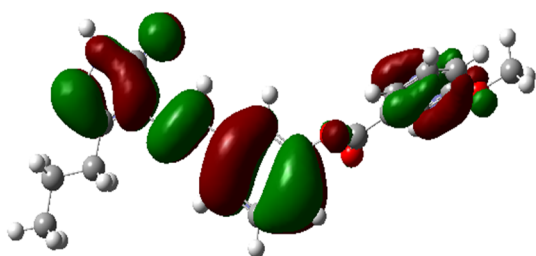
21	C(3)-C(4)	1.4717	1.4768	1.4666	1.4654
22	C(4)-C(5)	1.3884	1.3846	1.4005	1.4033
23	C(4)-C(9)	1.3866	1.3916	1.4038	1.4036
24	C(5)-H(23)	1.0657	1.0748	1.0821	1.0778
25	C(5)-C(6)	1.3807	1.3797	1.3907	1.3949
26	C(6)-O(46)	1.3958	1.3788	1.3936	1.4100
27	C(6)-C(7)	1.3814	1.3767	1.3894	1.3973
28	C(7)-H(24)	1.0694	1.0736	1.0840	1.0816
29	C(7)-C(8)	1.3817	1.3872	1.3956	1.3949
30	C(8)-H(25)	1.0713	1.0747	1.0849	1.0834
31	C(8)-C(9)	1.3811	1.3799	1.3869	1.3917
32	C(9)-H(26)	1.0695	1.0726	1.0830	1.0819
33	O(46)-C(10)	1.3572	1.3399	1.3729	1.3939
34	C(10)-O(47)	1.2048	1.1782	1.2020	1.2276
35	C(10)-C(11)	1.4788	1.4921	1.4893	1.4808
36	C(11)-C(16)	1.3844	1.3933	1.4026	1.4028
37	C(11)-C(12)	1.3772	1.3802	1.3926	1.3923
38	C(12)-H(27)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
39	C(12)-C(13)	1.3859	1.3902	1.3972	1.3986
40	C(13)-O(48)	1.3689	1.3455	1.3611	1.3825
41	C(13)-C(14)	1.3820	1.3851	1.3987	1.3997
42	C(14)-H(28)	1.0695	1.0726	1.0827	1.0815
43	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3966	1.3990
44	C(15)-H(29)	1.0715	1.0750	1.0851	1.0836
45	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3872	1.3902
46	C(16)-H(30)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
47	O(48)-C(17)	1.4368	1.3977	1.4193	1.4603
48	C(17)-H(31)	1.0831	1.0849	1.0954	1.0968
49	C(17)-H(32)	1.0772	1.0785	1.0882	1.0899
50	C(17)-H(33)	1.0831	1.0850	1.0954	1.0968

Tablo 3.40. 179 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

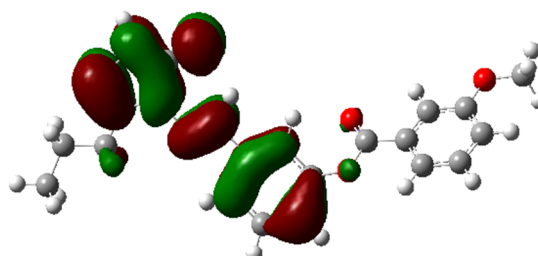
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.572	0.814	0.454	0.672
C2	0.781	1.249	0.582	0.940
C3	0.035	0.193	-0.055	0.109
C4	-0.043	-0.164	-0.023	-0.056
C5	-0.271	-0.247	-0.211	-0.212
C6	0.327	0.383	0.231	0.300
C7	-0.212	-0.254	-0.194	-0.192
C8	-0.208	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.159	-0.173
C10	0.647	1.008	0.431	0.708
C11	-0.204	-0.245	-0.158	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	-0.417	0.272	0.322
C14	-0.308	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.493	-0.463	-0.476	-0.430
C19	-0.404	-0.424	-0.404	-0.379
C20	-0.623	-0.590	-0.618	-0.557

Tablo 3.40.'in devamı

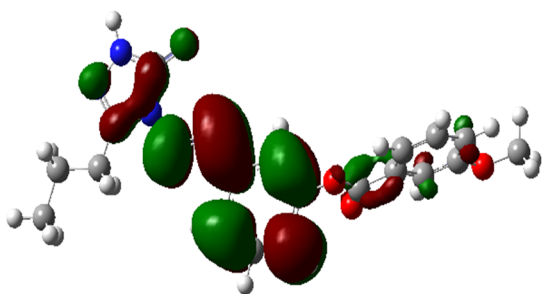
H21	0.405	0.403	0.371	0.353
H22	0.306	0.330	0.261	0.262
H23	0.240	0.324	0.230	0.246
H24	0.238	0.266	0.209	0.206
H25	0.227	0.251	0.200	0.195
H26	0.243	0.272	0.211	0.207
H27	0.264	0.305	0.230	0.230
H28	0.242	0.255	0.216	0.196
H29	0.224	0.251	0.199	0.195
H30	0.244	0.274	0.213	0.206
H31	0.208	0.200	0.211	0.199
H32	0.233	0.239	0.233	0.226
H33	0.207	0.200	0.211	0.199
H34	0.242	0.255	0.231	0.227
H35	0.243	0.255	0.231	0.227
H36	0.222	0.232	0.216	0.208
H37	0.222	0.232	0.216	0.208
H38	0.205	0.200	0.204	0.187
H39	0.217	0.209	0.214	0.193
H40	0.206	0.200	0.204	0.187
N41	-0.593	-0.759	-0.496	-0.592
N42	-0.268	-0.403	-0.205	-0.350
N43	-0.488	-0.862	-0.381	-0.635
N44	-0.268	-0.357	-0.203	-0.319
O45	-0.533	-0.671	-0.390	-0.521
O46	-0.509	-0.815	-0.372	-0.600
O47	-0.436	-0.616	-0.317	-0.481
O48	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



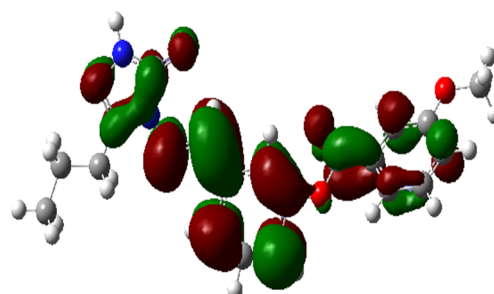
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32103 \text{ Hatree}$



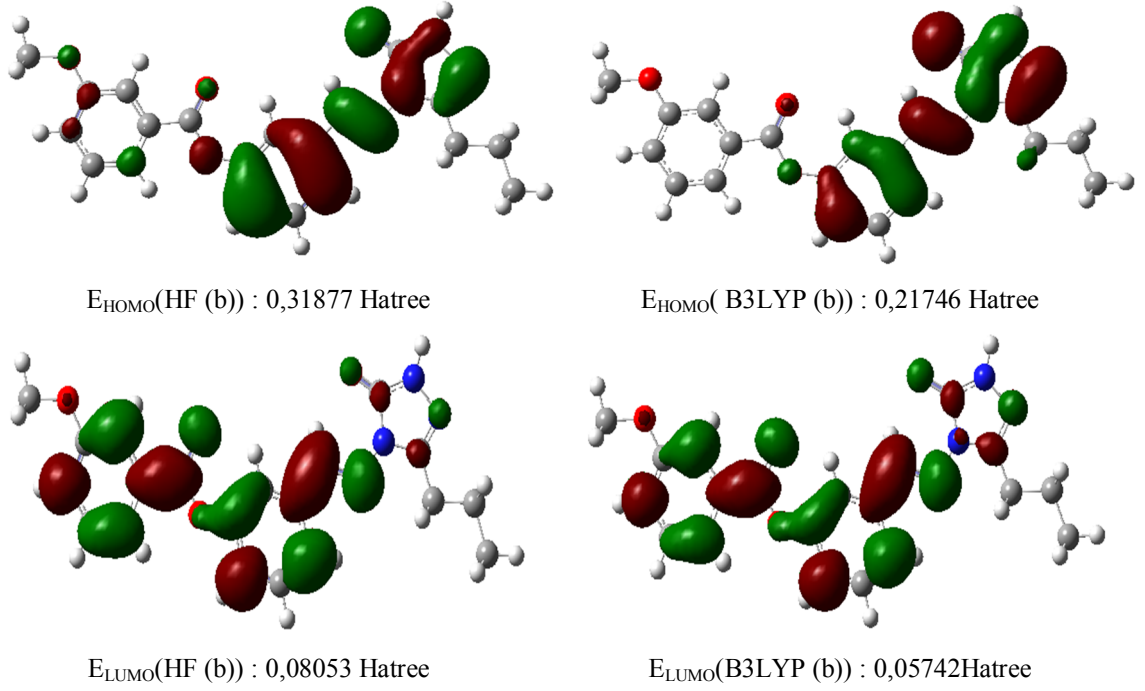
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22625 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07761 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : -0,06579 \text{ Hatree}$



Şekil 3.16. 179 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

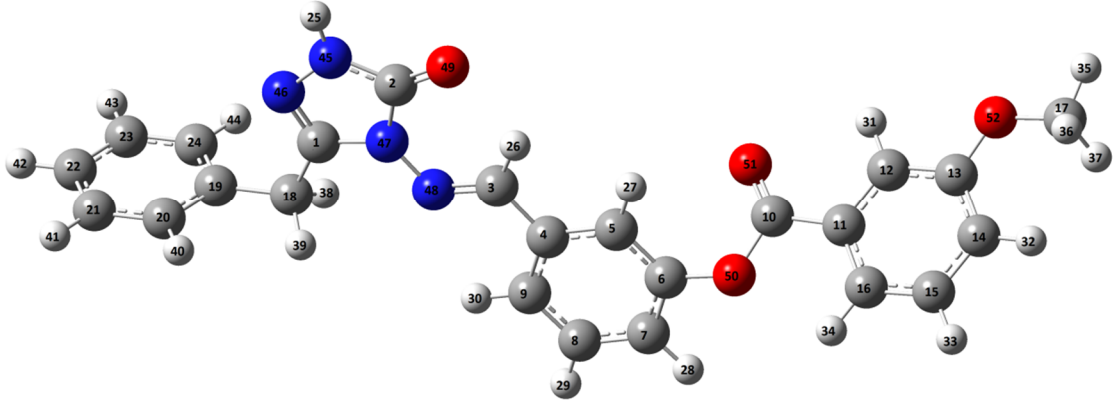
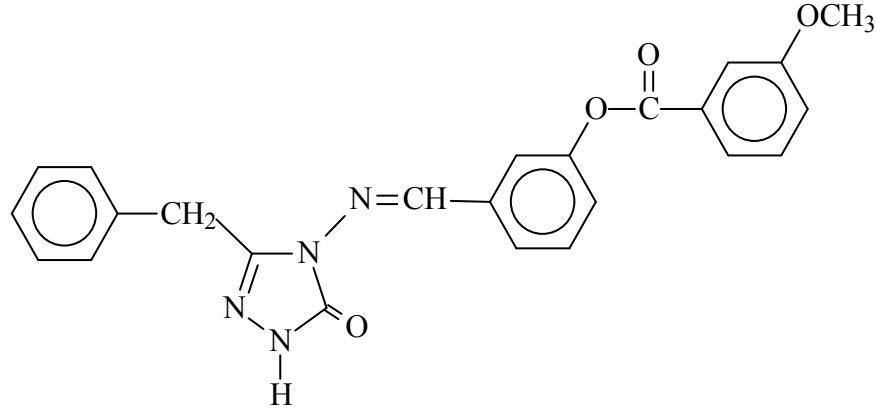
Tablo 3.41. 179 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.3693	1.0262	0.9802	0.6079
μ_y	5.9912	5.6167	4.1567	3.4768
μ_z	1.6604	1.6949	1.3068	1.2057
μ_{Toplam}	6.3660	5.9559	4.4662	3.7298

Tablo 3.42. 179 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1286.502	-1279.061	-1294.353	-1286.932

3.2.5. 3-Benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (180) :



Şekil 3.17. 180 Bileşiğinin gaussian görünümü

Tablo 3.43. 180 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - Ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/Ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.25	151.69	153.58	-5.44	-7.33	141.28	143.73	4.97	2.52
C2	151.17	152.49	153.47	-1.32	-2.30	141.75	142.67	9.42	8.50
C3	151.02	152.35	152.82	-1.33	-1.80	142.16	142.84	8.86	8.18
C4	135.27	139.99	139.47	-4.72	-4.20	126.69	126.44	8.58	8.83
C5	125.83	130.20	129.52	-4.37	-3.69	117.92	118.37	7.91	7.46
C6	152.46	157.75	157.38	-5.29	-4.92	142.06	141.29	10.40	11.17
C7	124.86	125.86	127.23	-1.00	-2.37	118.70	118.93	6.16	5.93
C8	130.10	131.62	133.13	-1.52	-3.03	120.41	121.16	9.69	8.94
C9	120.23	123.51	123.99	-3.28	-3.76	114.22	114.92	6.01	5.31
C10	164.32	166.49	168.05	-2.17	-3.73	151.08	152.89	13.24	11.43
C11	130.26	134.84	133.84	-4.58	-3.58	122.87	121.82	7.39	8.44
C12	122.14	124.78	122.87	-2.64	-0.73	115.21	113.25	6.93	8.89
C13	159.46	165.17	165.40	-5.71	-5.94	149.52	149.42	9.94	10.04

Tablo 3.43.'ün devamı

C14	114.39	115.00	117.83	-0.61	-3.44	103.99	106.57	10.40	7.82
C15	130.23	131.62	133.26	-1.39	-3.03	120.81	122.37	9.42	7.86
C16	120.38	124.19	124.31	-3.81	-3.93	113.43	113.72	6.95	6.66
C17	55.48	53.54	54.10	1.94	1.38	35.28	35.76	20.20	19.72
C18	31.11	35.35	34.80	-4.24	-3.69	18.00	17.56	13.11	13.55
C19	135.76	138.91	139.56	-3.15	-3.80	126.51	127.14	9.25	8.62
C20	128.83	133.59	133.78	-4.76	-4.95	122.37	122.48	6.46	6.35
C21	128.38	130.87	131.43	-2.49	-3.05	120.19	120.59	8.19	7.79
C22	126.68	129.82	130.31	-3.14	-3.63	118.96	119.27	7.72	7.41
C23	128.38	130.92	131.42	-2.54	-3.04	120.24	120.60	8.14	7.78
C24	128.83	133.70	133.81	-4.87	-4.98	122.41	122.49	6.42	6.34
H25	12.02	6.18	6.67	5.84	5.35	5.37	5.81	6.65	6.21
H26	9.74	9.60	9.55	0.14	0.19	9.02	9.00	0.72	0.74
OH27	7.66	7.14	7.18	0.52	0.48	6.67	6.88	0.99	0.78
H28	7.47	6.80	7.05	0.67	0.42	6.66	6.86	0.81	0.61
H29	7.61	7.11	7.38	0.50	0.23	6.86	7.12	0.75	0.49
H30	7.80	7.79	7.91	0.01	-0.11	7.61	7.76	0.19	0.04
H31	7.75	7.53	7.35	0.22	0.40	7.44	7.25	0.31	0.50
H32	7.36	6.35	6.74	1.01	0.62	6.06	6.48	1.30	0.88
H33	7.57	7.04	7.31	0.53	0.26	6.79	7.09	0.78	0.48
H34	7.73	7.47	7.57	0.26	0.16	7.20	7.33	0.53	0.40
H35	3.88	3.70	3.79	0.18	0.09	3.08	3.15	0.80	0.73
H36	3.88	3.21	3.38	0.67	0.50	2.51	2.71	1.37	1.17
H37	3.88	3.21	3.39	0.67	0.49	2.52	2.72	1.36	1.16
H38	4.08	3.62	3.77	0.46	0.31	2.99	3.18	1.09	0.90
H39	4.08	3.65	3.78	0.43	0.30	2.98	3.16	1.10	0.92
H40	7.28	6.98	7.16	0.30	0.12	6.69	6.90	0.59	0.38
H41	7.32	7.05	7.23	0.27	0.09	6.76	6.96	0.56	0.36
H42	7.22	6.98	7.16	0.24	0.06	6.70	6.89	0.52	0.33
H43	7.32	7.05	7.23	0.27	0.09	6.76	6.95	0.56	0.37
H44	7.28	6.98	7.16	0.30	0.12	6.70	6.90	0.58	0.38

Tablo 3.44. 180 Bileşğinin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değeri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.25	116.46	117.68	29.79	28.57	113.73	115.60	32.52	30.65
C2	151.17	115.56	115.98	35.61	35.19	114.90	115.34	36.27	35.83
C3	151.02	117.33	117.55	33.69	33.47	115.19	115.55	35.83	35.47
C4	135.27	100.69	100.01	34.58	35.26	93.41	92.63	41.86	42.64
C5	125.83	90.33	89.66	35.50	36.17	84.15	83.46	41.68	42.37
C6	152.46	120.81	120.81	31.65	31.65	111.05	110.93	41.41	41.53
C7	124.86	87.83	88.90	37.03	35.96	83.53	84.56	41.33	40.30
C8	130.10	93.51	94.78	36.59	35.32	88.76	90.02	41.34	40.08
C9	120.23	87.30	87.58	32.93	32.65	82.98	83.42	37.25	36.81
C10	164.32	133.09	133.77	31.23	30.55	128.38	129.23	35.94	35.09
C11	130.26	96.61	95.77	33.65	34.49	90.29	89.36	39.97	40.90
C12	122.14	88.37	86.86	33.77	35.28	85.48	83.68	36.66	38.46
C13	159.46	124.07	124.19	35.39	35.27	115.69	115.40	43.77	44.06
C14	114.39	82.99	85.10	31.40	29.29	78.12	80.33	36.27	34.06
C15	130.23	94.35	95.67	35.88	34.56	88.90	90.44	41.33	39.79
C16	120.38	88.19	88.22	32.19	32.16	83.98	84.43	36.40	35.95
C17	55.48	31.38	32.03	24.10	23.45	15.66	16.17	39.82	39.31
C18	31.11	14.19	13.75	16.92	17.36	-0.44	-0.78	31.55	31.89

Tablo 3.44.'ün devamı

C19	135.76	99.03	99.47	36.73	36.29	92.50	92.95	43.26	42.81
C20	128.83	96.26	96.29	32.57	32.54	91.05	91.12	37.78	37.71
C21	128.38	93.59	93.98	34.79	34.40	88.87	89.23	39.51	39.15
C22	126.68	92.91	93.32	33.77	33.36	88.07	88.45	38.61	38.23
C23	128.38	93.59	93.99	34.79	34.39	88.86	89.23	39.52	39.15
C24	128.83	96.25	96.29	32.58	32.54	91.05	91.12	37.78	37.71
H25	12.02	5.47	5.99	6.55	6.03	4.49	4.93	7.53	7.09
H26	9.74	9.37	9.30	0.37	0.44	8.82	8.73	0.92	1.01
H27	7.66	7.76	7.66	-0.10	0.00	7.37	7.25	0.29	0.41
H28	7.47	5.73	6.03	1.74	1.44	5.70	6.04	1.77	1.43
H29	7.61	6.05	6.39	1.56	1.22	5.87	6.25	1.74	1.36
H30	7.80	6.88	7.01	0.92	0.79	6.79	6.97	1.01	0.83
H31	7.75	6.69	6.50	1.06	1.25	6.82	6.57	0.93	1.18
H32	7.36	5.22	5.67	2.14	1.69	4.93	5.44	2.43	1.92
H33	7.57	5.98	6.30	1.59	1.27	5.74	6.13	1.83	1.44
H34	7.73	6.63	6.77	1.10	0.96	6.49	6.70	1.24	1.03
H35	3.88	3.38	3.52	0.50	0.36	2.72	2.82	1.16	1.06
H36	3.88	2.72	2.97	1.16	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H37	3.88	2.72	2.97	1.16	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H38	4.08	2.85	3.02	1.23	1.06	2.05	2.28	2.03	1.80
H39	4.08	2.84	3.02	1.24	1.06	2.05	2.28	2.03	1.80
H40	7.28	5.98	6.20	1.30	1.08	5.72	5.98	1.56	1.30
H41	7.32	5.96	6.19	1.36	1.13	5.69	5.94	1.63	1.38
H42	7.22	5.90	6.13	1.32	1.09	5.64	5.89	1.58	1.33
H43	7.32	5.96	6.19	1.36	1.13	5.69	5.94	1.63	1.38
H44	7.28	5.98	6.20	1.30	1.08	5.72	5.98	1.56	1.30

Tablo 3.45. 180 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(28), τ COCC(23), τ NCCC(19), τ CCCN(18)	6	8
2	τ CCCC(11), τ COCC(28), τ CCOC(21)	7	15
3	τ CCOC(30)	16	17
4	τ NNNC(13)	18	21
5	τ CNNC(16), τ CCCC(18), τ NCCC(11)	34	33
6	τ CNNC(14), τ CCCC(19), τ NCCC(13)	34	34
7	δ COC(10), τ CCNN(12), τ CCCC(13)	46	42
8	τ CCCC(12)	57	56
9	τ CCNN(23), δ COC(15), τ CCCN(10)	64	65
10	δ CCN(12), δ CCC(10), τ CCCC(22)	70	82
11	τ HCOC(10), τ CCCC(12), τ COCC(59), δ CCN(13), δ CCC(12)	84	83
12	δ CCO(11), τ CNNC(12), τ NNCC(13), τ NCCC(10), τ CCCN(11)	107	110
13	τ NNCC(12), δ NCC(13)	131	117
14	δ CNN(14), τ NNCC(13), τ NCNC(11), τ NCCC(11)	155	155
15	τ CCCC(16)	164	170
16	δ NCC(15), τ CCCC(21)	179	182
17	ν CC(10), δ NCN(14)	196	191
18	τ HCOC(18), τ CCCC(24), τ COCC(10), τ OCCC(19), τ CCCN(15)	223	214
19		224	216
20	τ CCCN(43), τ NNCC(19), τ HCOC(19), τ CCCC(29)	226	236
21	ν CC(11), τ CCCC(15)	246	237
22	δ COC(22), τ CCCN(19), τ HCOC(41), δ COC(12)	268	262
23	τ HCOC(41), τ CCCC(27), τ HNNC(26)	281	279
24	τ HNNC(20), τ CNNC(35), τ NNCC(15), τ HCOC(41), τ CCCC(24)	293	281
25	δ COC(23), δ OCO(13)	307	295
26	δ COC(10)	320	317

Tablo 3.45.'in devamı

27	δ CCC(31), τ HCCC(13)	346	333
28	τ CCCN(10), τ CCNN(32), τ COCC(10)	361	348
29	δ OCN(13), δ NCN(12), δ CNN(10), δ NNC(13), δ COC(10)	404	381
30	τ HCCC(17), τ CCCC(80)	431	411
31	δ CCC(26), δ COC(11)	439	426
32	τ CCCC(10)	459	439
33	δ CCO(10), δ CCC(12), τ HNNC(53)	461	449
34	τ HNNC(40), τ NCNC(11)	478	453
35	τ HNNC(20), τ HCCC(12), τ CCCN(12)	485	462
36	τ HCCC(12), τ CCCC(20)	500	478
37	δ CCC(16), δ COC(12)	504	492
38	τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCCC(36), δ OCN(11), δ CCC(18)	579	551
39	δ CCC(24), δ OCN(15), δ COC(12)	581	561
40	δ CCC(18), δ COC(18)	583	567
41	δ CCO(12)	600	584
42	δ CCC(17), δ CNN(12)	615	595
43	τ CCCN(19), τ COCC(11), τ CCOC(13), δ OCO(10)	628	599
44	δ CCC(17), δ OCN(18)	647	629
45	δ CCC(17), δ OCN(20), δ CCN(10)	651	632
46	τ HNNC(12), τ NNCC(12), τ NCNC(39), τ HCCC(14)	688	655
47	τ HCCC(24), τ CCCC(17), δ CCC(21)	705	683
48	ν CC(12), δ CCC(22)	716	684
49	τ HCCC(36), τ COCC(10), τ CCOC(19)	721	692
50	τ CCCC(43), τ HCCC(27), τ CCCN(18)	725	698
51	τ HCCC(48)	741	706
52	τ ONNC(80), τ HCCC(10)	778	738
53	τ HCCC(14)	808	751
54	τ HCCC(13), τ OCOC(42)	812	753
55	δ CNN(12)	814	786
56	τ HCCC(26)	831	789
57	ν CC(11), δ CNN(15), ν NC(11)	833	798
58	τ HCCC(50), τ OCOC(25)	860	802
59	δ OCO(11), τ HCCC(14)	861	815
60	τ HCCC(28)	873	835
61	ν NN(10), δ CCN(13)	889	839
62	ν NN(12), δ NCN(14), δ CCN(13), τ HCCC(99)	898	849
63	ν OC(11), τ HCCC(11)	926	876
64	τ HCCC(39), τ CCCC(10)	966	891
65	ν OC(12), τ HCCC(24)	967	896
66	τ HCCC(29), ν CC(10), δ HCC(30)	969	914
67	τ HCCC(17)	980	917
68	τ HCCC(31)	982	918
69	δ HCC(32), τ HCCC(31), δ NNC(34)	985	928
70	τ HCCC(84), τ CCCC(12)	995	947
71	ν CC(11), δ CCC(13)	1027	956
72	τ HCCC(22), τ CCCC(13)	1031	961
73	τ HCCC(58), ν CC(45), δ CCC(49)	1034	967
74	τ HCCC(36), τ CCCC(26), ν CC(19), δ CCC(39)	1035	977
75	ν CC(28), δ CCC(30), τ HCCC(22)	1044	1002
76	τ HCNN(88), τ HCCC(57)	1049	1005
77	ν CC(37), δ CCC(22), δ HCC(20)	1053	1007
78	ν CC(41), δ CCC(51), δ HCC(20)	1068	1011
79	δ NNC(34), τ HCNN(87)	1082	1026
80	ν CC(35), δ HCC(23), δ CCC(10)	1089	1044
81	ν OC(61), ν CC(40), δ HCC(25)	1113	1062
82	ν OC(10), δ HCC(19), δ CCC(12)	1126	1085

Tablo 3.45.'in devamı

83	v NC(12), v NN(38)	1129	1087
84	v CC(43), δ HCC(25), v OC(12)	1138	1097
85	v CC(33), δ HCC(20)	1142	1098
86	v CC(31), δ HCC(16)	1144	1110
87	v CC(16), δ HCC(32)	1150	1163
88	δ HCH(25), τ HCOC(22), v NC(10), v NN(28), δ HNN(10)	1158	1171
89	v CC(21), δ HCC(36), τ HCCC(12)	1168	1175
90	v CC(11), δ HCC(40)	1211	1180
91	v CC(10), δ HCC(17)	1232	1185
92	v CC(23), δ HCC(70), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1197
93	δ HCH(13), τ HCOC(23)	1242	1199
94	v NC(13), v NN(17), δ OCN(10), v CC(19), δ HCC(10), τ HCCC(10)	1250	1204
95	v CC(11), δ HCC(41), τ HCCC(26), τ HCOC(11)	1251	1208
96	v CC(20), δ HCC(14), τ HCCC(12)	1261	1215
97	v OC(10), v CC(12), δ HCC(12)	1267	1223
98	v NC(10), v NN(13), δ CNN(14)	1277	1255
99	v NN(11), τ HCCC(12), v CC(13), δ HCC(38)	1301	1275
100	v CC(11), v OC(16)	1313	1285
101	δ HCC(24), v OC(43), v CC(12)	1326	1306
102	δ HCC(24), v NC(10), δ CNN(15), τ HCCC(24)	1350	1311
103	δ HCC(12), τ HCCC(18), v OC(18)	1368	1321
104	v CC(56), δ HCC(23)	1373	1331
105	v CC(40), δ HCC(41)	1377	1343
106	v CC(61), δ HCC(17)	1409	1350
107	δ HCC(73), v NC(11), v NN(16), δ CNN(16), τ HCCC(13)	1411	1355
108	v NC(10), δ HNN(26), δ HCN(24), τ HCCC(16)	1463	1390
109	δ HNN(47), δ HCN(16), v OC(13)	1484	1401
110	v CC(10), v NC(12)	1506	1438
111	v CC(12), δ HCN(13), δ HCC(14)	1525	1460
112	v CC(22), δ HCC(10), δ HCH(11)	1533	1465
113	δ HCH(85)	1534	1476
114	v CC(12), δ HCC(25), δ HCN(16), δ HCH(12), τ HCCC(16)	1541	1479
115	δ HCH(57)	1546	1480
116	δ HCH(72), τ HCOC(13)	1562	1498
117	δ HCH(64), τ HCOC(11)	1570	1509
118	δ HCC(37), δ HCH(17), δ CCC(11), v CC(65)	1574	1511
119	δ HCC(11), δ CCC(11)	1577	1515
120	δ HCC(60), δ CCC(13), v CC(10)	1583	1524
121	v NC(10), v CC(27), δ HCC(10), δ CCC(10)	1690	1609
122	v CC(15), δ CCC(18)	1691	1610
123	v CC(30), δ CCC(12), δ HCC(11)	1696	1619
124	v NC(23), v CC(18), δ HCC(10)	1716	1628
125	v NC(22), v CC(16)	1717	1632
126	v CC(65), δ HCC(10)	1719	1638
127	v CC(46), δ HCC(18), v NC(42)	1772	1641
128	v NC(45), v CC(10)	1801	1653
129	v OC(85), v NC(12)	1863	1787
130	v OC(71), v NC(11)	1903	1792
131	v CH(91)	3030	2982
132	v CH(100)	3064	3014
133	v CH(100)	3086	3039
134	v CH(58)	3093	3039
135	v CH(46)	3149	3116
136	v CH(84)	3166	3126
137	v CH(91)	3170	3128
138	v CH(28)	3181	3138

Tablo 3.45.'in devamı

139	v CH(50)	3188	3139
140	v CH(54)	3190	3145
141	v CH(12)	3191	3146
142	v CH(91)	3199	3148
143	v CH(50)	3202	3159
144	v CH(48)	3216	3168
145	v CH(27)	3218	3177
146	v CH(40)	3220	3180
147	v CH(25)	3226	3184
148	v CH(40)	3236	3185
149	v CH(48)	3239	3195
150	v NH(100)	3770	3656

Tablo 3.46. 180 Bileşiminin Teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

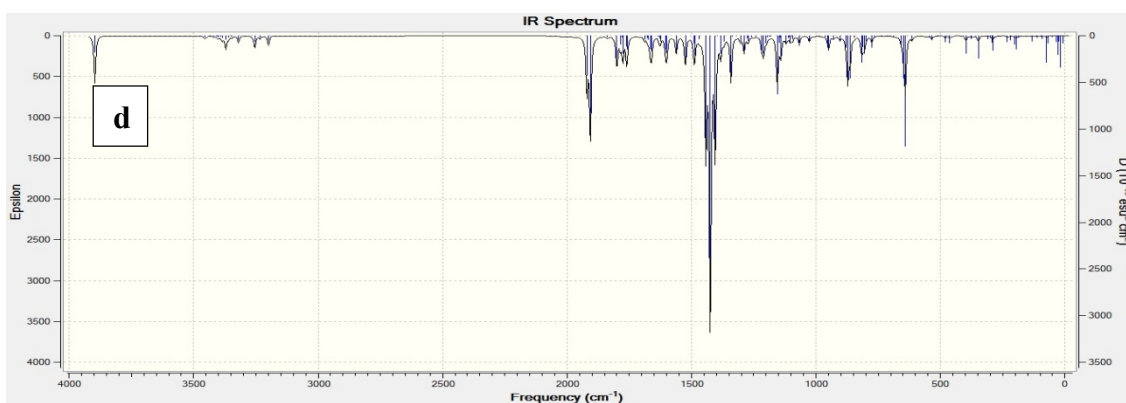
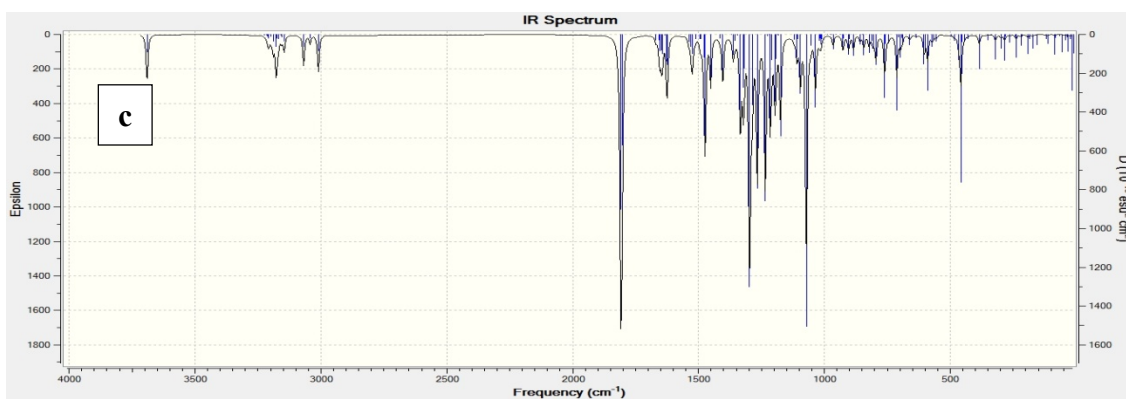
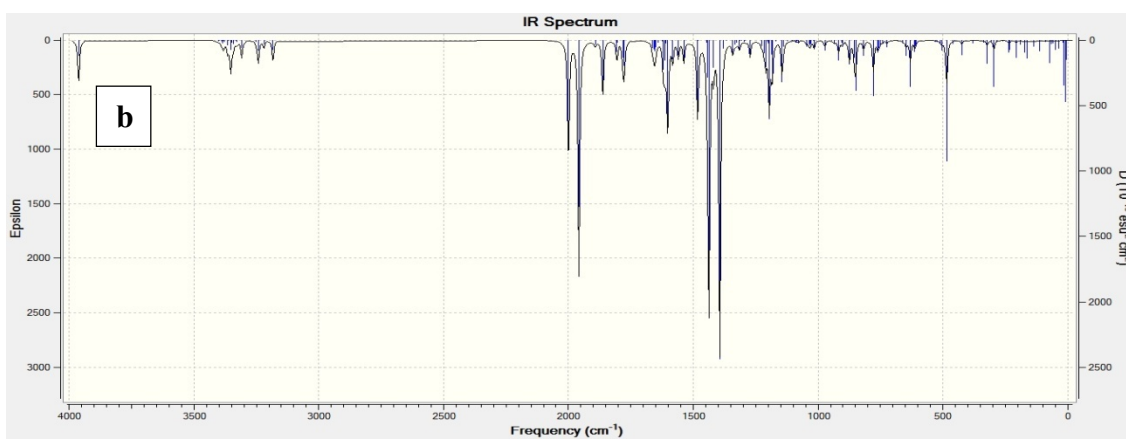
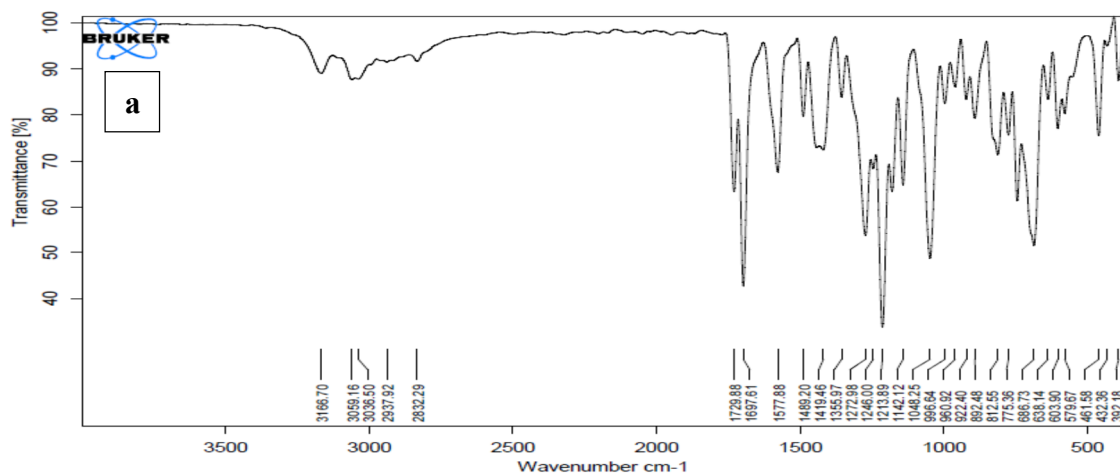
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(15), τ NCNC(17), τ CCCN(19)	7	7
2	τ CCCC(68)	10	16
3	τ CCOC(25), τ COCC(49), τ CCCC(10)	17	19
4	δ CCC(14), δ CNN(18), δ CCN(21), δ COC(15)	22	22
5	τ NCNC(23), τ CCCC(34), τ CCOC(22)	25	25
6	τ CNNC(10), τ CCCC(13), τ CCOC(16), τ CCCN(16), τ NCNC(11)	32	34
7	δ NCC(14), δ COC(20), τ CCCC(13)	48	48
8	τ CCNN(41), τ COCC(25)	63	63
9	τ HCOC(11), τ COCC(55), τ CCNN(12)	67	78
10	δ CNN(11), δ CCN(12), δ CCC(11), τ CCCC(22)	82	80
11	τ CCCC(22), τ COCC(26)	87	94
12	δ CCC(11), δ CCO(16)	101	100
13	τ CNNC(23), τ CCCN(13), τ NCNC(14), τ NNCC(22)	121	121
14	τ CCNN(11), τ CCCC(14), τ CNNC(15), τ CCCN(17)	168	163
15	τ CCCN(31), τ CCCC(20), τ CNNC(11)	178	175
16	δ CNN(11), CC(10), δ COC(11)	183	184
17	δ NCC(17), δ CCN(10), δ COC(29)	199	200
18	τ HCOC(44), τ CCCC(13), τ COCC(10), τ OCCC(18)	210	208
19	δ CNN(11)	212	210
20	v CC(14), δ CCC(10), τ CCCC(16)	240	235
21	τ CCCN(36), τ CCCC(12), τ CCNN(16)	262	258
22	δ COC(40)	266	267
23	τ HCOC(19), τ CCCC(30), τ OCCC(11)	273	269
24	τ CNNC(14), τ CCCN(27), τ CCNN(25), τ CCCC(17), τ OCCC(10)	280	286
25	δ OCO(12), δ COC(22)	316	316
26	δ CCC(21), τ NCNC(23)	327	316
27	δ CCC(12), τ HCCC(17), τ NNCC(16), τ NCNC(18)	343	328
28	τ CCCN(10), τ CCNN(29), δ OCO(13), δ COC(16)	361	354
29	δ OCO(15), δ OCN(10), τ CCNN(29), τ NNCC(15)	370	355
30	δ OCN(14), δ CCC(11), τ HCCC(18), τ CCCC(80)	420	409
31	δ OCN(16), τ HCCC(19), τ CCCC(79)	425	413
32	δ CCC(27), δ COC(11)	437	433
33	τ CCCC(48)	464	446
34	τ HCCC(21), τ CCCN(19), τ COCC(16), τ CCCC(17)	484	467
35	v CC(10), τ HCCC(20), τ CCCC(27), τ OCCC(10)	485	469
36	δ CCC(13), τ CCCC(10)	494	485
37	τ HNNC(89), δ CCC(17), δ COC(18)	557	540
38	δ OCN(17), δ CCC(11), δ NNC(14)	559	548
39	τ HCCC(12), τ CCCC(16), τ OCOC(13), τ OCCC(32)	572	551
40	δ CCC(12), δ COC(21), τ HNNC(95)	582	553

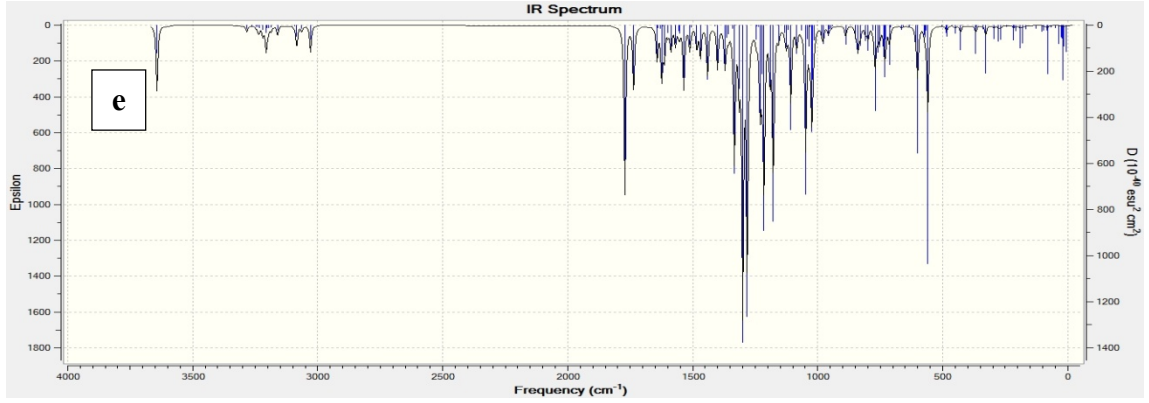
Tablo 3.46.'nm devami

41	δ CCC(18), δ CCO(11)	589	579
42	δ CCC(11), δ CCO(10)	597	587
43	δ OCN(14), δ CCC(11), τ CCCN(19), τ COCC(19), τ CCOC(18)	626	609
44	δ CCC(15), δ OCN(13), τ CCCN(16), τ OCCC(18)	637	613
45	δ CCC(49), τ NCNC(22)	648	636
46	δ CCC(14), τ NNCC(14), τ NCNC(43), τ CCNN(14)	668	641
47	ν CC(12), δ CCC(31)	694	683
48	τ HCCC(15), τ CCCC(21)	705	689
49	τ HCCC(31), τ CCCC(18)	727	702
50	τ HCCC(31), τ CCCC(31)	732	706
51	τ HCCC(42), τ COCC(10), τ CCOC(15), τ CCCN(15)	737	710
52	ν NN(10), τ HCCC(19)	742	725
53	τ ONNC(78), ν NC(14), δ NCC(12), δ CNN(29)	768	733
54	τ HCCC(13), τ OCOC(54)	784	744
55	ν NC(13), δ NCN(19), δ NCC(12), δ OCO(25)	792	753
56	ν CC(10), ν OC(12), δ OCO(28), τ ONNC(75)	793	771
57	ν CC(20)	798	781
58	δ CCN(23), δ CNN(11)	821	801
59	τ HCCC(26), τ CCOC(15), τ CCCC(10)	845	809
60	τ HCCC(57), τ CCCC(10), τ OCOC(10)	861	811
61	ν CC(10), τ HCCC(63)	865	819
62	ν CC(13), ν OC(20), τ HCCC(99)	877	838
63	ν CC(11), ν OC(18), τ HCCC(99)	897	857
64	ν CC(13), δ HCC(35), τ HCCC(30)	933	909
65	δ HCC(33), τ NCNC(12), τ HCCC(31)	934	913
66	δ NCC(33), τ HCCC(44)	970	920
67	δ NCC(12), τ HCCC(48)	993	924
68	ν CC(11), δ CCC(11), τ HCCC(31)	995	925
69	τ HCCC(28), τ CCCC(13)	997	944
70	ν CC(41), δ CCC(13), δ NCN(15), δ NCC(39)	1002	949
71	ν CC(62), δ CCC(12), τ HCCC(83), τ CCCC(14)	1007	967
72	ν CC(17), δ CCC(25), τ HCCC(26), τ CCOC(12)	1011	978
73	ν CC(51), ν OC(20), τ HCCC(34), δ HCC(20)	1017	985
74	ν NC(31), δ CNN(11)	1036	988
75	δ CCC(49), δ HCC(10), τ HCCC(55)	1040	994
76	τ HCCC(45), τ HCNN(13)	1041	995
77	ν CC(17), δ CCC(10), τ HCCC(82), τ CCCC(17)	1048	997
78	ν OC(56), ν CC(17), δ CCC(10), τ HCCC(19), τ CCCC(17)	1050	998
79	ν CC(52), δ CCC(23), τ HCCC(62)	1074	1005
80	ν OC(35), δ CCC(14), τ HCCC(47)	1078	1012
81	δ CCC(41), δ HCC(18), τ HCCC(30), τ CCCC(29)	1079	1029
82	ν CC(50), δ HCC(19), τ HCNN(84)	1085	1046
83	ν OC(12), ν CC(15), δ CCC(11), δ HCC(18)	1090	1069
84	ν CC(51), δ HCC(20)	1099	1080
85	ν CC(36), δ HCC(19)	1100	1086
86	ν CC(32), δ HCC(20), τ HCNN(75)	1106	1091
87	ν CC(62), ν NC(26), ν NN(15)	1128	1117
88	ν CC(13), δ HCH(23), τ HCOC(26)	1142	1118
89	ν NC(10), ν OC(12), δ HCC(12), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1155	1137
90	ν CC(19), δ HCH(24), τ HCOC(28)	1156	1149
91	ν OC(12), δ HCC(15)	1159	1172
92	ν NC(10), ν NN(11), δ HCC(23), δ NNC(10)	1171	1181
93	ν CC(23), δ HCC(36), τ HCOC(24), δ HCH(13)	1184	1188
94	ν CC(23), δ HCC(36), δ CCC(15)	1199	1188
95	ν CC(17), δ CCC(12), δ HCC(65)	1212	1194
96	ν CC(12), δ HCC(65), τ HCCC (10)	1214	1201

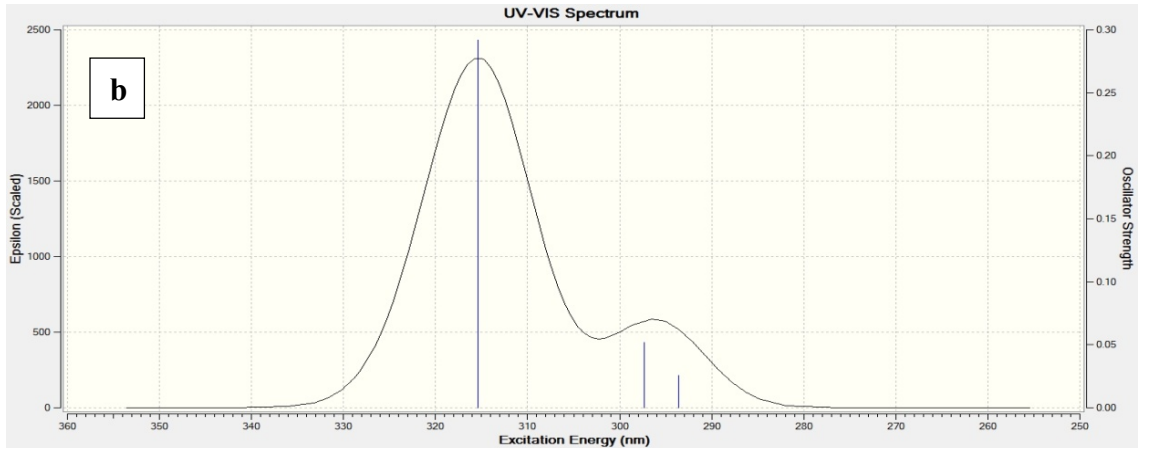
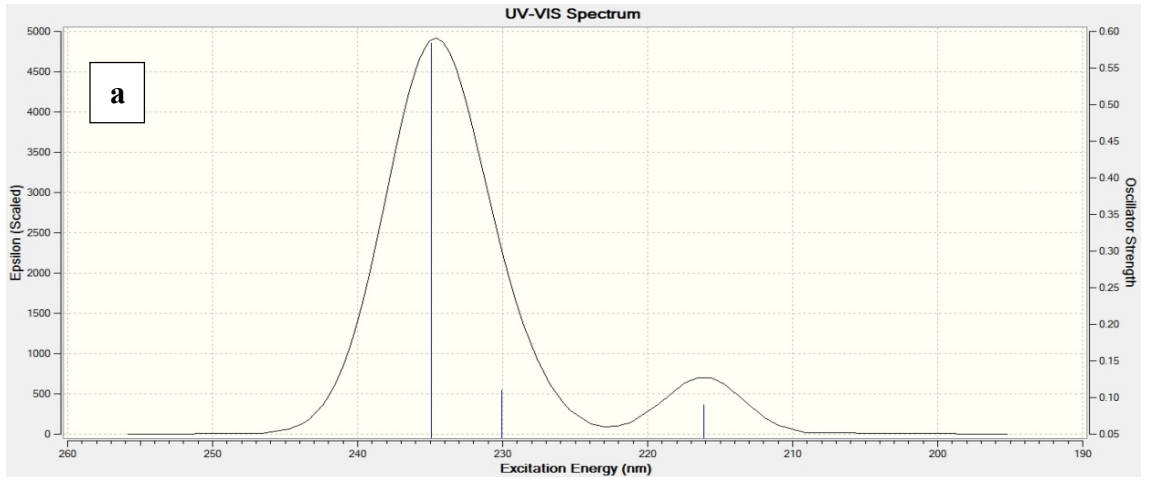
Tablo 3.46.'nmn devamı

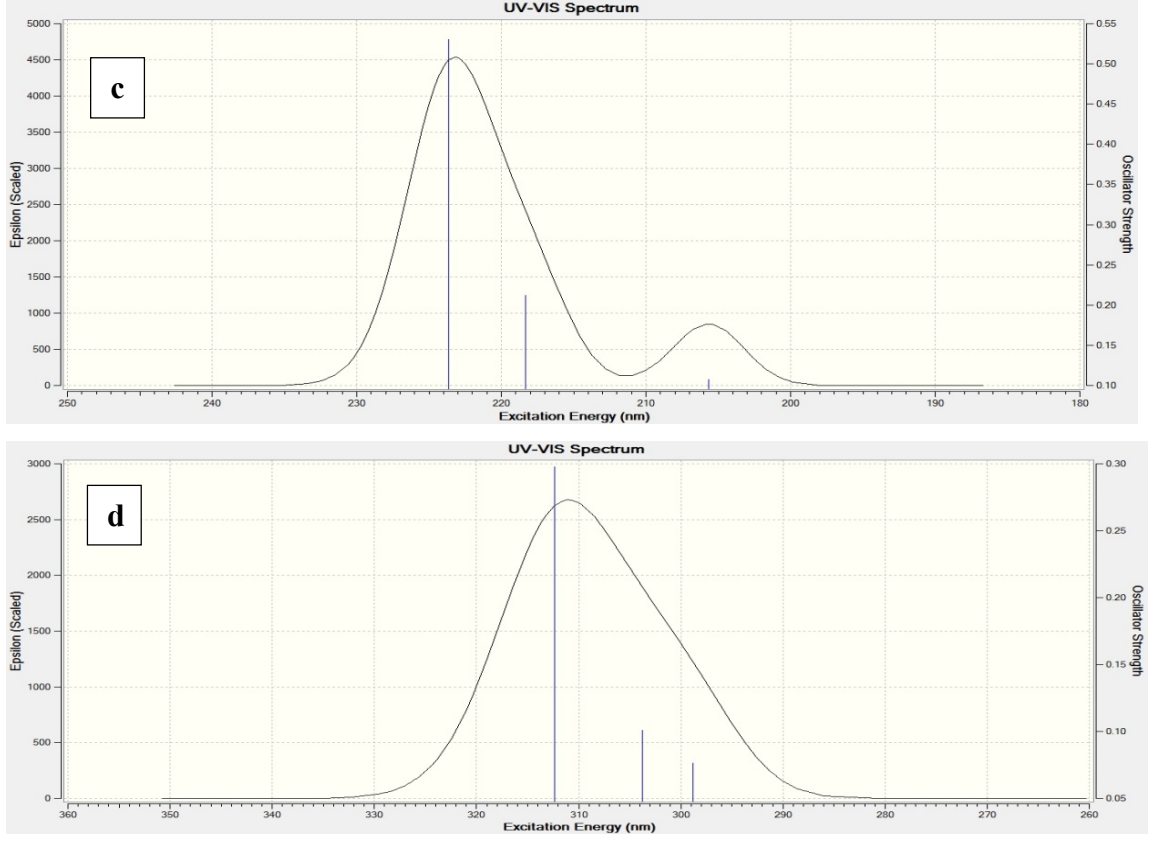
97	v CC(33), δ HCC(44), τ HCCC(24)	1218	1201
98	v OC(10), v CC(14), δ HCC(40), τ HCCC(24)	1219	1202
99	v CC(14), v OC(12), δ HCC(14)	1245	1237
100	v CC(12), v OC(10), v NN(12), v NC(13), δ NNC(18)	1256	1255
101	v CC(15), v NC(12), δ HCN(11), δ HCC(38), τ HCCC(15)	1267	1268
102	v OC(23), v CC(53), δ HCC(14)	1276	1285
103	v CC(32), v OC(23), δ HCC(10), τ HCCC(10)	1294	1287
104	v CC(33), v NC(12), v NN(10), δ HCN(11), δ HCC(13), τ HCCC(27)	1310	1294
105	v CC(26), δ HCC(40)	1334	1309
106	δ HNN(79), δ HCC(74)	1352	1317
107	δ HCC(74), δ HNN(77)	1354	1324
108	v CC(10), δ HCN(31), δ HCC(69), τ HCCC(27)	1382	1352
109	δ HCC(70), δ HCN(22), τ HCCC(37)	1385	1362
110	v NC(11), δ HCN(29)	1418	1390
111	v CC(17), δ HCN(17), δ HCC(11)	1453	1418
112	v CC(30), δ HCC(15)	1458	1432
113	δ HCC(10), δ HCH(89)	1476	1452
114	v CC(28), δ HCC(30), δ HCH(86)	1480	1458
115	v CC(10), δ HCC(30), δ HCH(72)	1483	1460
116	δ HCC(46)	1508	1482
117	v CC(20), δ HCC(25)	1513	1483
118	δ HCC(68), δ CCC(10)	1521	1498
119	δ HCH(76), τ HCOC(11)	1525	1502
120	δ HCH(74)	1534	1514
121	v NC(54), v CC(27), δ CCC(10), δ HCC(11)	1596	1531
122	v NC(49), v CC(21), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1543
123	v CC(29), δ HCC(16), δ CCC(13)	1600	1557
124	v CC(28), δ HCC(20), δ CCC(12)	1613	1564
125	v CC(45), δ HCC(25)	1617	1567
126	v NC(11), v CC(28), δ CCC(10), δ HCC(10)	1623	1572
127	v CC(47), δ HCC(23), v NC(39)	1635	1581
128	v CC(62), δ HCC(11), v NC(45)	1671	1585
129	v OC(85), δ CNN(12)	1732	1675
130	v OC(85)	1744	1709
131	v CH(91)	2907	2923
132	v CH(100)	2936	2956
133	v CH(50)	2956	2976
134	v CH(100)	2968	2985
135	v CH(46)	3016	3050
136	v CH(85)	3041	3074
137	v CH(92)	3043	3076
138	v CH(48)	3053	3076
139	v CH(51)	3061	3086
140	v CH(52)	3062	3092
141	v CH(36)	3063	3094
142	v CH(52)	3075	3095
143	v CH(51)	3080	3107
144	v CH(68)	3090	3120
145	v CH(67)	3092	3122
146	v CH(30)	3097	3126
147	v CH(56)	3108	3134
148	v CH(48)	3119	3150
149	v CH(50)	3138	3168
150	v NH(100)	3540	3515





Şekil 3.18. 180 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
234.91/315.40	223.65/312.33	5.2779/3.9310	5.5437/3.9697	0.5840/0.2917	0.5303/0.2976
230.06/297.34	218.31/303.73	5.3893/4.1698	5.6791/4.0821	0.1096/0.0518	0.2120/0.1007
216.13/293.61	205.66/298.79	5.7366/4.2227	6.0287/4.1496	0.0896/0.0259	0.1072/0.0762

Şekil 3.19. 180 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.47. 180 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açılı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(46)-N(45)	105.085	104.762	104.151	103.303
2	C(1)-N(47)-N(48)	121.201	121.375	120.504	120.764
3	C(1)-N(47)-C(2)	108.064	108.228	109.237	109.263
4	C(1)-C(18)-H(38)	107.913	108.167	107.954	108.152
5	C(1)-C(18)-H(39)	107.908	108.196	107.955	108.155
6	H(38)-C(18)-H(39)	105.622	105.118	106.600	106.330
7	N(46)-N(45)-H(25)	120.708	120.193	119.984	119.339
8	N(46)-N(45)-C(2)	113.844	114.566	112.948	114.063
9	N(46)-C(1)-C(18)	126.879	126.347	127.323	126.418
10	H(25)-N(45)-C(2)	125.449	125.240	127.068	126.598
11	N(45)-C(2)-N(47)	101.790	101.058	102.051	101.152
12	N(45)-C(2)-O(49)	129.588	130.153	130.266	130.918

Tablo 3.47.'nin devamı

13	O(49)-C(2)-N(47)	128.622	128.788	127.683	127.930
14	C(2)-N(47)-N(48)	130.732	130.393	130.260	129.973
15	N(47)-C(1)-C(18)	121.904	122.267	121.064	121.364
16	H(38)-C(18)-C(19)	110.609	110.583	110.757	110.663
17	H(39)-C(18)-C(19)	110.609	110.587	110.757	110.666
18	C(18)-C(19)-C(20)	120.619	120.674	120.453	120.479
19	C(18)-C(19)-C(24)	120.610	120.615	120.456	120.483
20	C(19)-C(20)-H(40)	119.716	119.565	119.656	119.497
21	C(19)-C(24)-H(44)	119.719	119.544	119.658	119.498
22	C(19)-C(20)-C(21)	120.724	120.749	120.539	120.551
23	H(40)-C(20)-C(21)	119.560	119.686	119.805	119.952
24	C(20)-C(21)-C(22)	120.099	120.083	120.079	120.078
25	C(20)-C(21)-H(41)	119.785	119.804	119.824	119.847
26	H(41)-C(21)-C(22)	120.116	120.113	120.097	120.075
27	C(21)-C(22)-C(23)	119.586	119.622	119.675	119.705
28	C(21)-C(22)-H(42)	120.207	120.191	120.162	120.148
29	H(42)-C(22)-C(23)	120.207	120.187	120.163	120.148
30	C(22)-C(23)-C(24)	120.101	120.087	120.079	120.077
31	C(22)-C(23)-H(43)	120.118	120.108	120.098	120.076
32	H(43)-C(23)-C(24)	119.781	119.805	119.824	119.847
33	C(23)-C(24)-C(19)	120.722	120.748	120.539	120.551
34	C(23)-C(24)-H(44)	119.559	119.708	119.803	119.951
35	H(44)-C(24)-C(19)	119.719	119.544	119.658	119.498
36	N(47)-N(48)-C(3)	120.057	119.251	119.102	117.273
37	N(48)-C(3)-H(26)	122.326	121.998	122.492	122.376
38	N(48)-C(3)-C(4)	120.421	120.236	120.074	119.717
39	H(26)-C(3)-C(4)	117.253	117.766	117.434	117.907
40	C(3)-C(4)-C(5)	118.014	117.940	117.813	117.991
41	C(3)-C(4)-C(9)	122.587	122.494	121.661	121.660
42	C(4)-C(5)-H(27)	120.986	120.230	120.934	121.055
43	C(4)-C(5)-C(6)	119.885	119.577	119.061	119.184
44	H(27)-C(5)-C(6)	119.128	120.188	120.005	119.761
45	C(5)-C(6)-O(50)	117.960	122.301	124.883	125.403
46	C(5)-C(6)-C(7)	121.119	121.035	120.819	120.641
47	O(50)-C(6)-C(7)	120.838	116.553	114.298	113.956
48	C(6)-C(7)-H(28)	120.044	119.246	118.720	118.565
49	C(6)-C(7)-C(8)	118.953	119.278	119.697	119.803
50	H(28)-C(7)-C(8)	121.002	121.476	121.583	121.632
51	C(7)-C(8)-H(29)	119.433	119.482	119.589	119.510
52	C(7)-C(8)-C(9)	120.703	120.521	120.326	120.352
53	H(29)-C(8)-C(9)	119.864	119.997	120.085	120.137
54	C(8)-C(9)-H(30)	120.489	120.821	121.104	121.533
55	C(8)-C(9)-C(4)	119.940	120.021	119.571	119.671
56	H(30)-C(9)-C(4)	119.571	119.157	119.325	118.796
57	C(9)-C(4)-C(5)	119.399	119.566	120.526	120.348
58	C(6)-O(50)-C(10)	119.998	120.544	128.246	125.487
59	O(50)-C(10)-O(51)	123.386	123.559	123.478	124.173
60	O(50)-C(10)-C(11)	111.903	111.224	111.450	110.214
61	O(51)-C(10)-C(11)	124.711	125.217	125.072	125.613
52	C(10)-C(11)-C(16)	122.174	122.643	122.033	122.596
63	C(10)-C(11)-C(12)	117.240	117.005	116.966	116.566
64	C(11)-C(12)-H(31)	120.465	120.160	120.619	120.127
65	C(11)-C(12)-C(13)	120.285	120.316	120.061	120.243
66	H(31)-C(12)-C(13)	119.251	119.524	119.320	119.629
67	C(12)-C(13)-O(52)	115.788	115.708	116.044	115.819
68	C(12)-C(13)-C(14)	119.428	119.518	119.360	119.186

Tablo 3.47.'nin devamı

69	C(13)-O(52)-C(17)	119.946	118.628	120.963	118.215
70	O(52)-C(13)-C(14)	124.785	124.774	124.596	124.995
71	O(52)-C(17)-H(35)	106.189	105.751	105.464	104.862
72	O(52)-C(17)-H(36)	111.459	111.527	111.308	111.608
73	O(52)-C(17)-H(37)	111.465	111.541	111.308	111.608
74	H(35)-C(17)-H(37)	109.100	109.241	109.618	109.682
75	H(35)-C(17)-C(36)	109.105	109.254	109.618	109.682
76	H(36)-C(17)-C(37)	109.431	109.429	109.446	109.306
77	C(13)-C(14)-C(15)	119.786	119.690	120.128	120.133
78	H(32)-C(14)-C(15)	119.099	119.315	119.176	119.236
79	C(14)-C(15)-H(33)	119.033	119.057	119.259	119.178
80	H(33)-C(15)-C(16)	119.835	119.817	119.946	119.917
81	C(15)-C(16)-H(34)	120.744	120.876	121.399	121.681
82	C(15)-C(16)-C(11)	118.784	118.998	118.655	118.695
83	C(16)-C(11)-C(12)	120.586	120.352	121.001	120.838
84	H(34)-C(16)-C(11)	120.472	120.126	119.946	119.624
85	C(16)-C(11)-C(12)	120.586	120.352	121.001	120.838
86	C(13)-C(14)-H(32)	121.116	120.995	120.696	120.631

Tablo 3.48. 180 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP	
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G	
1	C(1)-N(46)	1.2772	1.2651	1.2946	1.3110
2	C(1)-N(47)	1.3846	1.3818	1.3906	1.3905
3	C(1)-C(18)	1.4937	1.4988	1.4982	1.4971
4	C(18)-H(38)	1.0837	1.0839	1.0950	1.0969
5	C(18)-H(39)	1.0837	1.0839	1.0949	1.0970
6	C(18)-C(19)	1.5136	1.5122	1.5128	1.5172
7	C(19)-C(20)	1.3855	1.3873	1.3966	1.3994
8	C(20)-H(40)	1.0728	1.0762	1.0863	1.0848
9	C(20)-C(21)	1.3833	1.3843	1.3927	1.3957
10	C(21)-H(41)	1.0720	1.0754	1.0855	1.0840
11	C(21)-C(22)	1.3837	1.3845	1.3931	1.3967
12	C(22)-H(42)	1.0719	1.0753	1.0853	1.0838
13	C(22)-C(23)	1.3837	1.3845	1.3933	1.3966
14	C(23)-H(43)	1.0720	1.0754	1.0855	1.0840
15	C(23)-C(24)	1.3833	1.3843	1.3924	1.3958
16	C(24)-H(44)	1.0728	1.0762	1.0863	1.0848
17	C(24)-C(19)	1.3855	1.3872	1.3969	1.3994
18	N(46)-N(45)	1.4272	1.3634	1.3789	1.4387
19	N(45)-H(25)	0.9919	0.9886	1.0054	1.0087
20	N(45)-C(2)	1.3539	1.3458	1.3684	1.3774
21	C(2)-O(49)	1.2187	1.1961	1.2156	1.2373
22	N(47)-C(2)	1.3963	1.3879	1.4207	1.4325
23	N(47)-N(48)	1.3980	1.3628	1.3690	1.4097
24	N(48)-C(3)	1.2669	1.2573	1.2847	1.2973
25	C(3)-H(26)	1.0701	1.0740	1.0866	1.0848
26	C(3)-C(4)	1.4715	1.4767	1.4663	1.4651
27	C(4)-C(5)	1.3884	1.3876	1.4004	1.4034
28	C(4)-C(9)	1.3866	1.3920	1.4039	1.4036
29	C(5)-H(27)	1.0657	1.0748	1.0824	1.0778
30	C(5)-C(6)	1.3807	1.3797	1.3905	1.3948
31	C(6)-O(50)	1.3956	1.3786	1.3936	1.4098
32	C(6)-C(7)	1.3815	1.3767	1.3892	1.3974

Tablo 3.48.’ in devamı

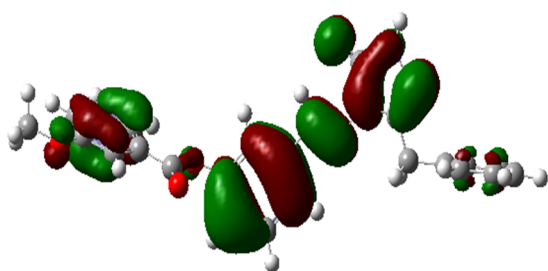
33	C(7)-H(28)	1.0694	1.0736	1.0840	1.0816
34	C(7)-C(8)	1.3817	1.3872	1.3957	1.3439
35	C(8)-H(29)	1.0712	1.0747	1.0849	1.0834
36	C(8)-C(9)	1.3811	1.3799	1.3868	1.3917
37	C(9)-H(30)	1.0695	1.0726	1.0803	1.0819
38	O(50)-C(10)	1.3573	1.3400	1.3734	1.3941
39	C(10)-O(51)	1.2048	1.1782	1.2019	1.2276
40	C(10)-C(11)	1.4787	1.4921	1.4891	1.4807
41	C(11)-C(16)	1.3884	1.3933	1.4026	1.4028
42	C(11)-C(12)	1.3772	1.3802	1.3926	1.3923
43	C(12)-H(31)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
44	C(12)-C(13)	1.3859	1.3902	1.3972	1.3998
45	C(13)-O(52)	1.3689	1.3455	1.3611	1.3824
46	C(13)-C(14)	1.3821	1.3851	1.3987	1.3998
47	C(14)-H(32)	1.0695	1.0726	1.0827	1.0815
48	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3966	1.3990
49	C(15)-H(33)	1.0715	1.0750	1.0851	1.0836
50	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3873	1.3902
51	C(16)-H(34)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
52	O(52)-C(17)	1.4368	1.3977	1.4193	1.4603
53	C(17)-H(35)	1.0772	1.0785	1.0882	1.0899
54	C(17)-H(36)	1.0831	1.0849	1.0954	1.0968
55	C(17)-H(37)	1.0831	1.0850	1.0952	1.0968

Tablo 3.49. 180 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

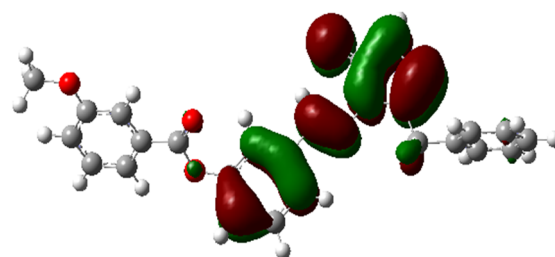
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.569	0.816	0.450	0.678
C2	0.782	1.250	0.583	0.941
C3	0.036	0.195	-0.053	0.110
C4	-0.043	-0.164	-0.023	-0.056
C5	-0.271	-0.246	-0.208	-0.212
C6	0.328	0.383	0.231	0.301
C7	-0.211	-0.254	-0.193	-0.192
C8	-0.208	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.159	-0.173
C10	0.647	1.008	0.430	0.708
C11	-0.204	-0.246	-0.157	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.587	-0.504	-0.589	-0.514
C19	0.071	-0.032	0.081	0.047
C20	-0.227	-0.213	-0.189	-0.176
C21	-0.203	-0.231	-0.192	-0.182
C22	-0.224	-0.241	-0.188	-0.186
C23	-0.203	-0.231	-0.193	-0.182
C24	-0.227	-0.213	-0.186	-0.176
H25	0.407	0.405	0.372	0.354
H26	0.306	0.331	0.261	0.263
H27	0.240	0.324	0.229	0.247

Tablo 3.49.'un devamı

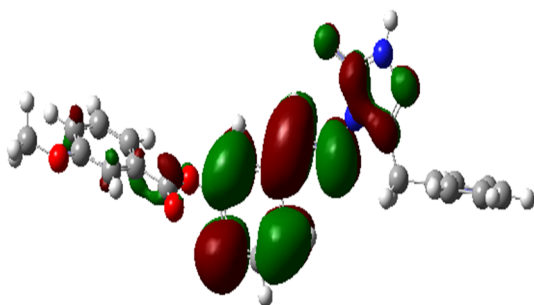
H29	0.228	0.252	0.201	0.196
H28	0.238	0.266	0.209	0.206
H30	0.243	0.271	0.211	0.207
H31	0.264	0.305	0.230	0.230
H32	0.242	0.255	0.216	0.196
H33	0.224	0.251	0.199	0.195
H34	0.244	0.274	0.213	0.206
H35	0.233	0.239	0.233	0.227
H36	0.208	0.200	0.211	0.199
H37	0.207	0.200	0.211	0.199
H38	0.266	0.270	0.249	0.240
H39	0.265	0.270	0.248	0.240
H40	0.212	0.239	0.187	0.184
H41	0.218	0.241	0.192	0.187
H42	0.217	0.241	0.192	0.186
H43	0.218	0.241	0.192	0.187
H44	0.213	0.239	0.188	0.184
N45	-0.592	-0.761	-0.497	-0.593
N46	-0.247	-0.383	-0.186	-0.334
N47	-0.478	-0.855	-0.373	-0.629
N48	-0.273	-0.362	-0.205	-0.322
O49	-0.532	-0.671	-0.389	-0.520
O50	-0.510	-0.815	-0.373	-0.600
O51	-0.436	-0.616	-0.317	-0.480
O52	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



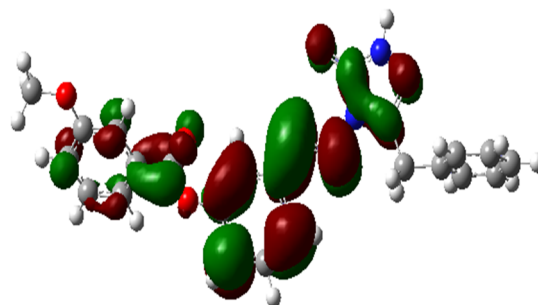
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32103 \text{ Hatree}$



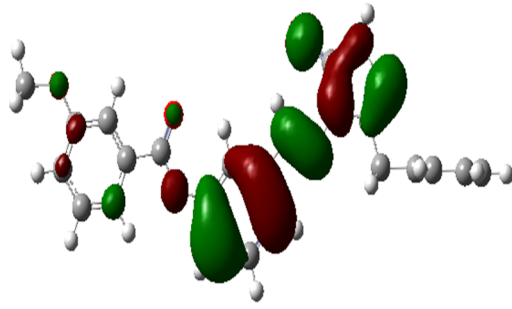
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22625 \text{ Hatree}$



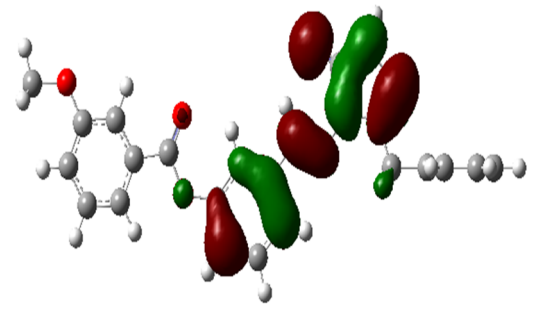
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07761 \text{ Hatree}$



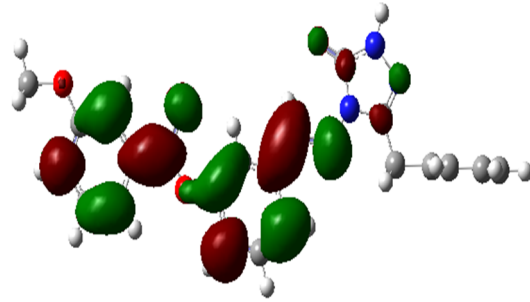
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06579 \text{ Hatree}$



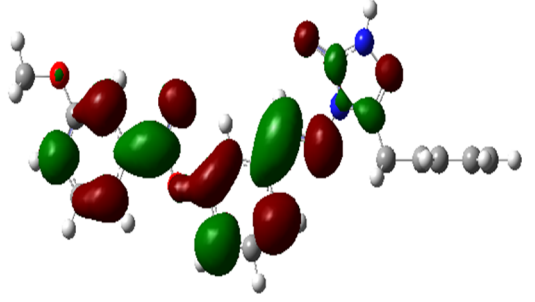
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31921 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,21807 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,07969 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,05832 \text{ Hatree}$

Şekil 3.20. 180 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

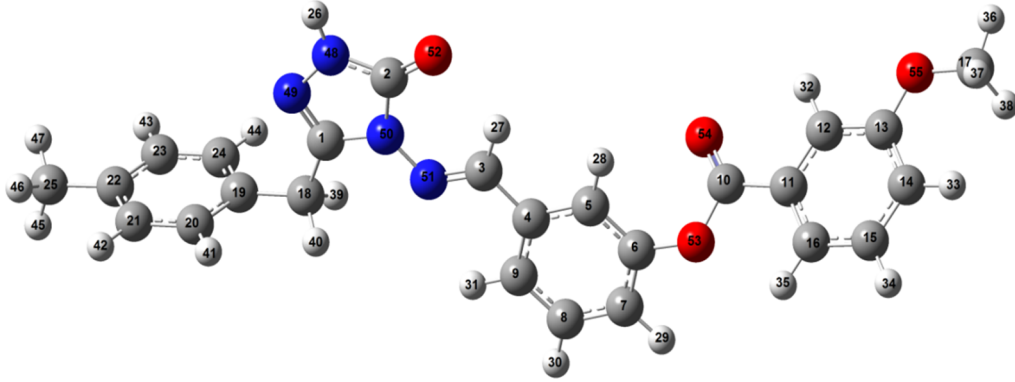
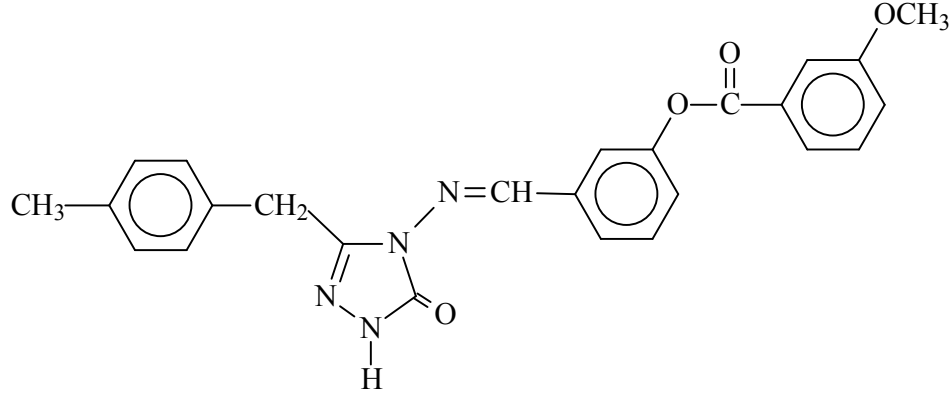
Tablo 3.50. 180 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF	HF	B3LYP	B3LYP
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
μ_x	1.5107	1.0617	1.0629	1.3160
μ_y	5.4894	5.1789	3.7320	2.9717
μ_z	1.8427	1.8765	1.4287	1.3859
μ_{Toplam}	5.9842	5.6098	4.1351	3.5332

Tablo 3.51. 180 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF	HF	B3LYP	B3LYP
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
(a.u.)	-1438.000	-1429.684	-1446.803	-1438.506

3.2.6. 3-*p*-Metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (181):



Şekil 3.21. 181 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.52. 181 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.37	151.78	153.66	-5.41	-7.29	141.42	143.87	4.95	2.50
C2	151.17	152.52	153.50	-1.35	-2.33	141.79	142.70	9.38	8.47
C3	151.02	152.25	152.76	-1.23	-1.74	142.04	142.76	8.98	8.26
C4	135.26	140.03	139.49	-4.77	-4.23	126.76	126.47	8.50	8.79
C5	125.90	130.16	129.50	-4.26	-3.60	117.87	118.34	8.03	7.56
C6	152.04	157.72	157.37	-5.68	-5.33	142.04	141.29	10.00	10.75
C7	124.83	125.79	127.21	-0.96	-2.38	118.64	118.91	6.19	5.92
C8	130.09	131.59	133.12	-1.50	-3.03	120.40	121.15	9.69	8.94
C9	120.22	123.52	123.98	-3.30	-3.76	114.22	114.90	6.00	5.32
C10	164.32	166.50	168.07	-2.18	-3.75	151.07	152.88	13.25	11.44
C11	130.25	134.83	133.81	-4.58	-3.56	122.89	121.83	7.36	8.42
C12	122.14	124.77	122.87	-2.63	-0.73	115.20	113.24	6.94	8.90
C13	159.46	165.15	165.38	-5.69	-5.92	149.51	149.42	9.95	10.04

Tablo 3.52.'nin devamı

C14	114.41	115.01	117.85	-0.60	-3.44	103.98	106.56	10.43	7.85
C15	130.21	131.61	133.25	-1.40	-3.04	120.80	122.37	9.41	7.84
C16	120.29	124.20	124.31	-3.91	-4.02	113.44	113.72	6.85	6.57
C17	55.47	53.53	54.09	1.94	1.38	35.28	25.76	20.19	29.71
C18	30.76	34.91	34.35	-4.15	-3.59	17.59	17.14	13.17	13.62
C19	132.64	135.93	136.20	-3.29	-3.56	122.89	123.17	9.75	9.47
C20	128.93	133.61	133.62	-4.68	-4.69	123.17	123.15	5.76	5.78
C21	128.69	131.56	131.99	-2.87	-3.30	120.02	120.28	8.67	8.41
C22	135.71	141.20	142.65	-5.49	-6.94	129.86	130.97	5.85	4.74
C23	128.69	131.65	132.02	-2.96	-3.33	120.05	120.27	8.64	8.42
C24	128.93	133.72	133.65	-4.79	-4.72	123.21	123.15	5.72	5.78
C25	20.54	21.18	20.76	-0.64	-0.22	7.38	6.97	13.16	13.57
H26	12.00	6.17	6.66	5.83	5.34	5.36	5.79	6.64	6.21
H27	9.73	9.59	9.54	0.14	0.19	9.02	9.00	0.71	0.73
H28	7.66	7.13	7.01	0.53	0.65	6.66	6.88	1.00	0.78
H29	7.46	6.79	7.05	0.67	0.41	6.65	6.85	0.81	0.61
H30	7.61	7.11	7.38	0.50	0.23	6.86	7.12	0.75	0.49
H31	7.78	7.79	7.91	-0.01	-0.13	7.61	7.76	0.17	0.02
H32	7.74	7.53	7.35	0.21	0.39	7.44	7.25	0.30	0.49
H33	7.36	6.35	6.74	1.01	0.62	5.06	6.48	2.30	0.88
H34	7.57	7.04	7.31	0.53	0.26	6.79	7.09	0.78	0.48
H35	7.70	7.47	7.57	0.23	0.13	7.20	7.33	0.50	0.37
H36	3.88	3.70	3.78	0.18	0.10	3.08	3.15	0.80	0.73
H37	3.88	3.20	3.38	0.68	0.50	2.51	3.71	1.37	0.17
H38	3.88	3.21	3.39	0.67	0.49	2.51	3.72	1.37	0.16
H39	4.02	3.58	3.72	0.44	0.30	2.95	3.13	1.07	0.89
H40	4.02	3.62	3.74	0.40	0.28	2.94	3.11	1.08	0.91
H41	7.21	6.89	7.06	0.32	0.15	6.63	6.83	0.58	0.38
H42	7.08	6.86	7.04	0.22	0.04	6.58	6.77	0.50	0.31
H43	7.08	6.87	7.04	0.21	0.04	6.58	6.77	0.50	0.31
H44	7.21	6.90	7.05	0.31	0.16	6.63	6.82	0.58	0.39
H45	2.21	2.20	2.25	0.01	-0.04	1.70	1.75	0.51	0.46
H46	2.21	1.90	1.99	0.31	0.22	1.45	1.54	0.76	0.67
H47	2.21	1.88	1.97	0.33	0.24	1.45	1.53	0.76	0.68

Tablo 3.53. 181 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.37	116.53	117.73	28.64	28.64	113.83	115.78	32.54	30.59
C2	151.17	115.59	116.01	35.16	35.16	114.94	115.37	36.23	35.80
C3	151.02	117.26	117.50	33.52	33.52	115.09	115.48	35.93	35.54
C4	135.26	100.74	100.04	35.22	35.22	93.43	92.65	41.83	42.61
C5	125.90	90.29	89.63	36.27	36.27	84.12	83.44	41.78	42.46
C6	152.04	120.79	120.80	31.24	31.24	111.04	110.92	41.00	41.12
C7	124.83	87.80	88.89	35.94	35.94	83.49	84.54	41.34	40.29
C8	130.09	93.50	94.77	35.32	35.32	88.75	90.02	41.34	40.07
C9	120.22	87.31	87.57	32.65	32.65	82.99	83.41	37.23	36.81
C10	164.32	133.07	133.75	30.57	30.57	128.37	129.22	35.95	35.10
C11	130.25	96.64	95.79	34.46	34.46	90.30	89.36	39.95	40.89
C12	122.14	88.35	86.85	35.29	35.29	85.48	83.67	36.66	38.47
C13	159.46	124.07	124.19	35.27	35.27	115.68	115.40	43.78	44.06
C14	114.41	82.98	85.10	29.31	29.31	78.10	80.33	36.31	34.08
C15	130.21	94.34	95.67	34.54	34.54	88.90	90.44	41.31	39.77
C16	120.29	88.20	88.22	32.07	32.07	83.98	84.43	36.31	35.86

Tablo 3.53.'ün devamı

C17	55.47	31.39	32.04	23.43	23.43	15.55	16.17	39.92	39.30
C18	30.76	13.81	13.36	17.40	17.40	-0.79	-1.14	31.55	31.90
C19	132.64	96.67	96.85	35.79	35.79	89.68	89.91	42.96	42.73
C20	128.93	96.24	96.16	32.77	32.77	91.61	91.61	37.32	37.32
C21	128.69	94.15	94.71	33.98	33.98	89.20	89.39	39.49	39.30
C22	135.71	101.91	103.04	32.67	32.67	95.92	96.89	39.79	38.82
C23	128.69	94.48	94.72	33.97	33.97	89.20	89.38	39.49	39.31
C24	128.93	96.24	96.16	32.77	32.77	91.58	91.58	37.35	37.35
C25	20.54	2.17	1.79	18.75	18.75	-10.54	-10.91	31.08	31.45
H26	12.00	5.46	5.98	6.02	6.02	4.48	4.92	7.52	7.08
H27	9.73	9.37	9.30	0.43	0.43	8.81	8.72	0.92	1.01
H28	7.66	7.75	7.65	0.01	0.01	7.37	7.25	0.29	0.41
H29	7.46	5.72	6.03	1.43	1.43	5.69	6.04	1.77	1.42
H30	7.61	6.05	6.38	1.23	1.23	5.87	6.25	1.74	1.36
H31	7.78	6.88	7.00	0.78	0.78	6.79	6.96	0.99	0.82
H32	7.74	6.68	6.50	1.24	1.24	6.82	6.57	0.92	1.17
H33	7.36	5.22	5.67	1.69	1.69	4.93	5.44	2.43	1.92
H34	7.57	5.98	6.30	1.27	1.27	5.74	6.13	1.83	1.44
H35	7.70	6.63	6.76	0.94	0.94	6.49	6.70	1.21	1.00
H36	3.88	3.38	3.52	0.36	0.36	2.72	2.82	1.16	1.06
H37	3.88	2.73	2.97	0.91	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H38	3.88	2.73	2.97	0.91	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H39	4.02	2.80	2.97	1.05	1.05	2.00	2.23	2.02	1.79
H40	4.02	2.80	2.97	1.05	1.05	2.00	2.23	2.02	1.79
H41	7.21	5.90	6.10	1.11	1.11	5.65	5.90	1.56	1.31
H42	7.08	5.80	6.02	1.06	1.06	5.51	5.76	1.57	1.32
H43	7.08	5.80	6.02	1.06	1.06	5.51	5.75	1.57	1.33
H44	7.21	5.89	6.10	1.11	1.11	5.65	5.89	1.56	1.32
H45	2.21	1.51	1.60	0.61	0.61	0.75	0.86	1.46	1.35
H46	2.21	1.17	1.29	0.92	0.92	0.48	0.60	1.73	1.61
H47	2.21	1.16	1.28	0.93	0.93	0.46	0.58	1.75	1.63

Tablo 3.54. 181 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(27), τ COCC(22)	6	7
2	τ COCC(21), τ CCOC(27), τ CCCN(27), τ CNNC(22)	6	15
3	τ CCOC(19), τ COCC(56), τ HCCC(57), τ CNNC(12), τ CCCC(10)	7	16
4	τ CCOC(52), τ COCC(10), τ CCCN(41), τ NCCN(12)	15	21
5	δ NCC(12), τ CCOC(14), τ NCCN(12), τ CCCN(41)	20	30
6	δ CCN(13), δ CNN(10), τ CCOC(11), τ CCCC(10)	30	33
7	τ CCCN(30), τ CCCC(17), τ HCCC(57)	34	41
8	τ NNCC(10), τ CCNN(11), τ CCCC(14)	44	42
9	τ CCCC(20), τ CCNN(15), τ NCCN(19)	57	54
10	δ COC(14), τ CCCN(10), τ CCNN(11), τ NCCN(11)	63	64
11	δ CCN(13), τ CCCC(17)	70	71
12	τ COCC(63), τ HCOC(11), τ CCCC(16)	70	83
13	δ CCO(12), τ NNCC(12), τ CNNC(30), τ CCCN(13)	106	109
14	δ CCN(18), τ NNCC(14)	127	114
15	τ CCCC(19), τ CNNC(19)	153	150
16	τ CNNC(11), τ CCCC(17)	160	155
17	τ CCCC(17)	165	169
18	δ NCC(10), τ CCCC(20)	179	182
19	ν CC(10), δ NCN(13)	196	191
20	τ COCC(13), τ OCC(22), τ HCOC(20), τ CCCC(26), τ CCCN(20)	223	213
21	δ NCN(10), τ OCC(11), τ HCOC(20), τ CCCC(30)	225	221

Tablo 3.54.'ün devamı

22	v CC(10), δ NNC(10), δ CNN(11), τ CCCN(44), τ NNCC(20)	230	236
23	δ COC(27), τ CCCN(19)	267	262
24	δ COC(23), δ CCC(34), τ CCCN(19), τ CNNC(31), τ HNNC(17), τ CNNC(18), τ NNCN(12)	275	274
25	δ COC(27), τ HCOC(41), τ CCCC(24)	293	278
26	δ CCC(35), τ NNCC(13), τ HCCC(15)	299	291
27	δ COC(23), δ OCO(13)	307	295
28	δ NCC(10)	317	314
29	τ CCCC(37), τ CNNC(12)	332	320
30	τ CCCN(10), τ CCNN(37), τ COCC(10), τ NCCN(10)	361	348
31	δ CCC(38)	390	379
32	δ OCN(15), δ NNC(16), δ COC(11), δ NCN(11)	404	381
33	τ HCCC(18), τ CCCC(80)	433	412
34	δ CCC(38), δ COC(11)	439	426
35	τ CCCC(40)	459	439
36	δ CCO(10), δ CCC(11), τ HNNC(58)	461	449
37	τ HNNC(41), τ NCNC(11)	477	453
38	τ HNNC(20), τ CCCN(23), τ HCCC(14)	484	462
39	δ CCC(13), τ CCCC(20)	502	480
40	δ COC(11), δ CCC(13)	505	494
41	v CC(13), δ CCC(17), τ CCCC(20)	542	524
42	δ COC(12), δ CCC(13), τ OCOC(10), τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCCC(36)	581	551
43	δ CCC(18), δ COC(18), τ OCCC(15)	583	566
44	δ CCC(22), δ OCN(18)	597	582
45	δ CCO(11), δ CCC(11)	611	590
46	τ CCCN(19), τ COCC(12), τ CCOC(13), τ OCCC(10)	627	597
47	δ CCC(22), δ OCN(20), δ CCN(11)	645	622
48	δ CCC(29), τ NCNC(19)	668	649
49	δ CCC(21), τ NCNC(22), τ NNCN(51)	689	659
50	δ CCC(20), τ HCCC(24), τ CCCC(18)	705	684
51	v CC(11), δ CCC(21), τ CCCC(17), τ HCCC(28)	716	684
52	τ COCC(10), τ CCOC(18), τ HCCC(35)	721	692
53	τ CCCC(21), τ CCCN(17), τ HCCC(26)	725	697
54	v CC(17), τ CCCC(15)	745	725
55	τ ONNC(79)	780	738
56	v CC(11), τ HCCC(28), τ OCOC(45)	803	753
57	v CC(12), τ OCOC(43), τ HCCC(24)	808	759
58	τ HCCC(35), τ ONNC(84)	814	771
59	δ CNN(10), τ HCCC(30)	828	788
60	v NC(15), δ CNN(29), τ HCCC(25)	833	797
61	v CC(29), τ HCCC(50), τ CCCC(10), τ OCOC(25)	856	802
62	δ OCO(11), τ HCCC(50), τ OCOC(28)	861	815
63	v CC(17), τ HCCC(21)	863	827
64	δ CCN(11), τ HCCC(99)	887	834
65	δ NCN(13), δ CCN(12), τ HCCC(99)	894	844
66	v CC(15), τ HCCC(29), τ CCCC(15)	900	860
67	v OC(19), τ HCCC(18)	926	876
68	v CC(29), δ HCC(16), τ HCCC(39), τ CCCC(10)	966	891
69	v OC(12), τ HCCC(36), τ CCCC(11)	966	896
70	τ HCCC(44), τ CCCC(11)	968	917
71	τ HCCC(40)	982	918
72	v CC(11), v OC(10), δ HCC(32), τ HCCC(29), τ CCCC(10)	984	927
73	τ HCCC(82), τ CCCC(13)	995	939
74	τ HCCC(69), τ CCCC(22)	1012	945
75	v CC(29), δ CCC(24), τ HCCC(83), τ CCCC(10)	1027	956

Tablo 3.54.'ün devamı

76	v CC(29), δ CCC(24), τ HCCC(83), τ CCCC(10)	1027	961
77	v CC(19), δ CCC(39), τ HCCC(58)	1035	968
78	v CC(28), δ CCC(30), τ HCCC(38)	1039	1002
79	τ HCNN(88), τ HCCC(46)	1044	1004
80	v CC(13), δ HCH(10), τ HCCC(57), τ CCCC(11)	1049	1006
81	v CC(38), δ CCC(33), δ HCC(12)	1060	1007
82	δ NNC(36), τ HCNN(87)	1082	1025
83	v CC(22), δ CNN(14), δ NNC(38), δ HCC(14), δ CCC(47)	1088	1033
84	τ HCCC(44)	1110	1059
85	v OC(61), v CC(56), δ HCC(23)	1123	1062
86	v OC(40), v CC(10), δ HCC(19), δ CCC(12)	1126	1085
87	v NC(12), v NN(37), v CC(12), δ HCC(25)	1129	1087
88	v OC(12), v CC(33), δ HCC(21)	1138	1098
89	v CC(31), δ HCC(23)	1142	1110
90	v CC(22), v NN(10), δ HCC(54)	1150	1133
91	v NC(10), v NN(27), δ HNN(10), δ HCC(33)	1158	1163
92	v CC(26), δ HCH(25), τ HCOC(27)	1168	1171
93	v CC(26), δ HCH(25), τ HCOC(27)	1211	1180
94	v CC(13), δ HCC(28), τ HCCC(13)	1214	1185
95	δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1199
96	v CC(23), δ HCC(75)	1240	1204
97	v CC(27), v NC(21), v NN(17), δ OCN(10), δ HCC(25)	1242	1204
98	v CC(14), δ HCC(41), τ HCCC(27), τ HCOC(11)	1251	1207
99	v CC(41), δ HCC(18)	1261	1214
100	v OC(10), v CC(17), δ HCC(23)	1263	1223
101	v CC(19), δ CCC(14), δ HCC(23)	1267	1226
102	v NN(13), v NC(26), δ CNN(14)	1277	1255
103	v NN(11), δ HCC(45), τ HCCC(15)	1294	1275
104	v CC(23), v OC(16)	1313	1285
105	v OC(43), v CC(12), δ HCC(24)	1326	1306
106	v NC(10), δ HCC(24), δ CNN(16), τ HCCC(24)	1350	1311
107	v OC(18), δ HCC(12), τ HCCC(14)	1368	1321
108	v CC(36), δ HCC(26)	1373	1322
109	v CC(40), δ HCC(74)	1377	1343
110	δ HCC(80)	1395	1344
111	v CC(61), v NN(16), v NC(11), δ HCC(17), τ HCCC(14)	1411	1349
112	v NC(10), δ HCN(46), δ HNN(25), τ HCCC(17)	1463	1390
113	δ HNN(47), δ HCN(16), δ HCH(90)	1478	1401
114	v OC(13), δ HNN(63), δ HCH(91)	1484	1417
115	v NC(10), v CC(21), δ HCC(40)	1489	1437
116	v CC(22), δ HCC(32)	1505	1438
117	v CC(19), δ HCC(14), δ HCN(13)	1525	1459
118	v CC(23), δ HCC(10), δ HCH(71)	1534	1465
119	δ HCH(88), δ HCN(17), τ HCCC(16)	1540	1475
120	δ HCH(61)	1546	1480
121	δ HCH(39), τ HCCC(21)	1548	1495
122	δ HCH(72), τ HCCC(16)	1549	1498
123	δ HCH(72), τ HCCC(17), τ HCOC(13)	1562	1498
124	δ HCH(71), τ HCOC(11)	1570	1509
125	δ HCC(41), δ HCH(16), δ CCC(13)	1574	1511
126	δ HCC(27), δ CCC(11)	1577	1515
127	δ HCC(59), δ CCC(14)	1606	1543
128	v CC(23), δ CCC(14)	1678	1607
129	v CC(33), v NC(10), δ CCC(12), δ HCC(10)	1691	1609
130	v CC(29), δ CCC(18), δ HCC(11)	1696	1610
131	v CC(22), v NC(23), δ HCC(10)	1717	1628

Tablo 3.54.'ün devamı

132	v NC(26), v CC(36), δ HCC(10)	1719	1633
133	v CC(65), δ HCC(41), δ HCH(16), δ CCC(13)	1729	1638
134	v CC(55), v NC(42), δ HCC(20)	1772	1650
135	v NC(47), v CC(10)	1801	1653
136	v OC(85), v NC(12)	1863	1787
137	v OC(88), v NC(11)	1903	1791
138	v CH(98)	3026	2981
139	v CH(99)	3030	2996
140	v CH(100)	3062	3013
141	v CH(100)	3076	3038
142	v CH(50)	3086	3039
143	v CH(100)	3092	3048
144	v CH(99)	3097	3074
145	v CH(46)	3149	3116
146	v CH(73)	3163	3121
147	v CH(73)	3164	3122
148	v CH(99)	3182	3138
149	v CH(99)	3185	3138
150	v CH(99)	3188	3141
151	v CH(54)	3190	3145
152	v CH(37)	3199	3146
153	v CH(42)	3216	3168
154	v CH(66)	3218	3177
155	v CH(67)	3220	3180
156	v CH(40)	3226	3184
157	v CH(57)	3236	3185
158	v CH(48)	3239	3195
159	v NH(100)	3770	3656

Tablo 3.55. 181 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1		4	5
2	τ CNNC(18), τ NCNC(13), τ CCCN(10), τ HCCC(32)	6	10
3	τ CCCC(55), τ CCOC(14), τ COCC(11)	11	15
4	τ COCC(47), τ CCOC(25), τ CCCC(10)	17	18
5	δ CCC(12), δ CNN(18), δ CCN(19), δ COC(12)	20	20
6	τ CCCC(14), τ NCNC(22), τ CCOC(18)	24	26
7	τ CCOC(20), τ CCCC(13), τ CCCN(16), τ CNNC(10)	32	34
8	δ COC(11), δ NCC(10), δ COC(20), τ CCCC(14)	43	42
9	τ NCNC(10), τ CCNN(41), τ COCC(25), τ CCNN(25)	63	63
10	δ CNN(129), δ CCN(13), τ CCCC(15), τ COCC(43), τ CCNN(12)	67	70
11	δ CCN(11), δ CNN(11), τ CCCC(15), τ COCC(56), τ HCOC(11)	70	78
12	τ CCCC(22), τ COCC(26)	87	94
13	δ CCC(12), δ CCO(19)	97	97
14	τ NCNC(16), τ CNNC(23), τ CCCN(12), τ NNCC(23)	120	121
15	δ CCC(11), τ CCCC(32)	155	150
16	τ CCCC(12), τ CNNC(18), τ CCCN(17), τ CCNN(13)	166	162
17	τ CCCN(32), τ CCCC(21)	177	175
18	v CC(10), δ COC(11), δ CNN(10)	183	184
19	δ COC(12), δ NCC(12), δ CCN(11), δ COC(29)	198	200
20	τ COCC(10), τ CCCC(13), τ OCCC(18), τ HCOC(44)	210	208
21	δ CNN(10), δ CCO(10)	217	216
22	τ CCCN(35), τ CCCC(12), τ CCNN(17)	262	257
23	δ COC(40)	265	267
24	τ CCCC(24), τ HCOC(18), τ OCCC(12)	273	268

Tablo 3.55.'in devamı

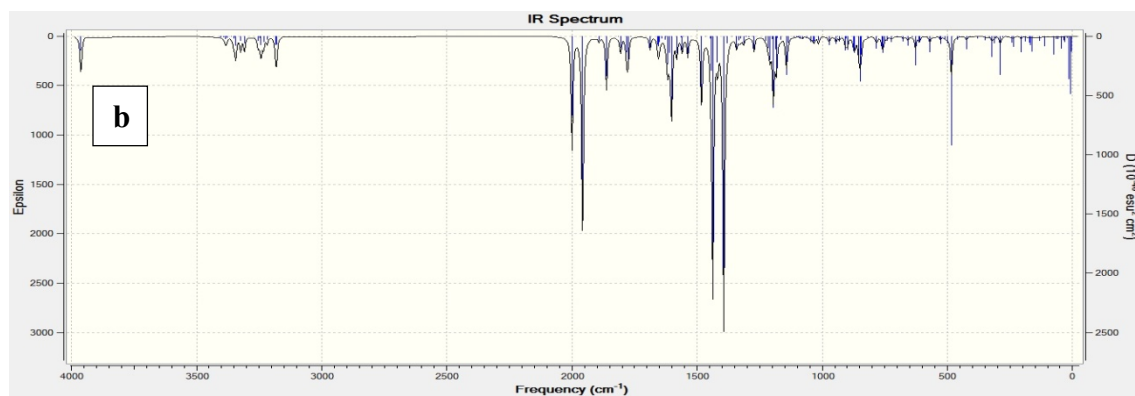
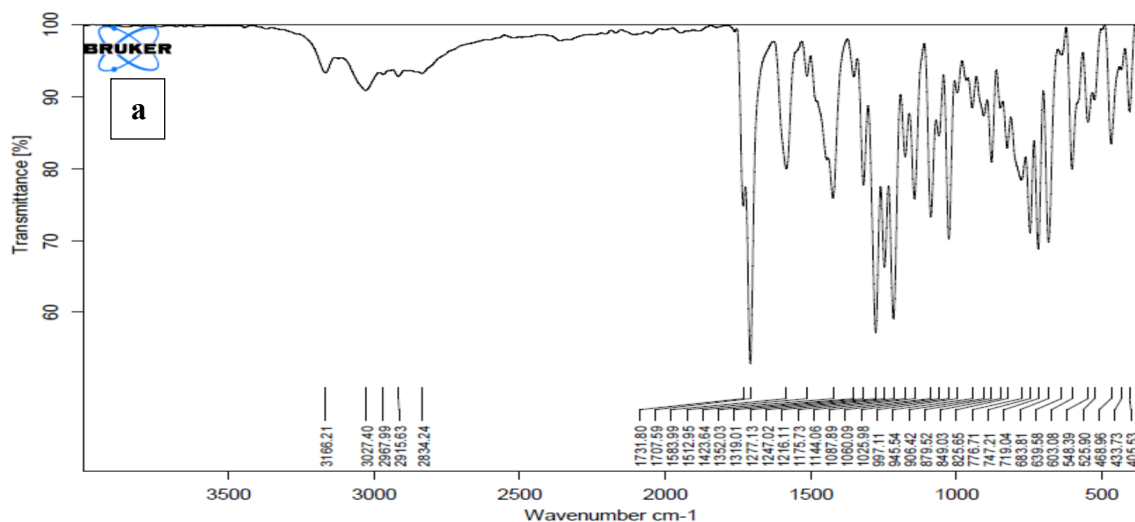
25	δ CCC(55), τ CCCC(12)	279	273
26	δ CCC(39), τ CCCN(24), τ CCNN(22), τ CNNC(12)	284	287
27	δ COC(22), δ OCO(11), τ CCCC(36)	314	310
28	δ COC(15), τ CCCC(41)	324	315
29	τ NCNC(27), τ NNCC(20)	339	324
30	δ OCO(16), δ COC(17), τ CCNN(24), τ NNCC(14)	360	354
31	δ OCO(16), τ CCNN(29), τ NNCC(14)	370	354
32	δ CCC(39)	378	370
33	δ CCC(16), δ OCN(15), τ CCCC(80), τ HCCC(17)	421	410
34	δ OCN(17), τ HCCC(19), τ CCCC(79)	426	413
35	δ COC(11), δ CCC(27)	437	433
36	τ CCCC(48)	464	446
37	δ CCC(12), τ HCCC(21), τ CCCN(19), τ CCOC(16)	482	467
38	δ CCC(12), τ CCCC(28), τ HCCC(20)	485	470
39	δ CCC(13), τ CCCC(11)	497	486
40	ν CC(14), δ CCC(13), τ CCCC(24), τ OCCC(10), τ HCCC(20)	529	515
41	δ CCC(17), δ COC(19), τ HNNC(90)	557	540
42	τ OCCC(32), τ OCOC(13), τ HCCC(12), τ CCCC(16)	572	551
43	δ COC(21), δ CCC(13), δ OCN(12), δ CNN(13), δ NNC(21)	577	553
44	δ OCN(13), δ NNC(22), τ HNNC(95)	582	566
45	δ CCO(19), δ COC(12), δ CCC(21)	592	583
46	ν NN(11), δ OCN(15), δ CCC(25)	617	603
47	τ CCCN(19), τ OCCC(19), τ COCC(19), τ CCOC(17)	637	609
48	δ CCC(17), τ NCNC(44), τ CCNN(13), τ NNCC(15)	664	638
49	δ CCC(44), τ NCNC(23)	673	658
50	ν CC(12), δ CCC(31)	694	682
51	ν CC(18), τ CCCC(12)	698	685
52	ν CC(16), τ CCCC(18), τ HCCC(27)	725	702
53	τ CCCC(11), τ COCC(10), τ HCCC(44), τ CCOC(15)	727	710
54	ν CC(11), δ CCC(22), τ CCCC(19), τ CCCN(15), τ HCCC(42)	737	714
55	ν NC(11), ν NN(11)	739	726
56	δ CNN(28), δ NCC(15), τ ONNC(78)	773	733
57	τ OCOC(54), τ HCCC(20)	784	744
58	δ NCN(15), δ NCC(14), τ HCCC(26), τ OCOC(54)	784	753
59	δ NCC(15), τ HCCC(14), τ ONNC(74)	792	764
60	ν CC(10), ν OC(12), δ OCO(27), τ ONNC(74)	793	771
61	δ CCN(23), δ CNN(11)	821	801
62	ν CC(29), τ HCCC(26), τ CCOC(15)	823	809
63	τ OCOC(10), τ HCCC(57), τ CCCC(10)	861	811
64	ν CC(24), τ HCCC(63)	865	813
65	ν OC(19), ν CC(12), τ HCCC(100)	876	831
66	ν CC(12), τ HCCC(42), τ CCCC(10)	885	839
67	ν CC(11), ν OC(18), τ HCCC(100)	892	857
68	ν CC(13), δ HCC(32), τ HCCC(23), τ NCNC(10)	933	909
69	ν CC(13), δ HCC(31), τ HCCC(23), τ NCNC(10)	933	920
70	δ NCC(38), τ HCCC(48)	975	923
71	ν CC(11), δ CCC(11), τ HCCC(31)	995	925
72	δ NCN(10), δ NCC(24), τ HCCC(28)	997	942
73	ν CC(41), δ CCC(13), τ HCCC(27), τ CCCC(13)	1002	944
74	ν CC(17), δ CCC(26), δ NCC(10), τ HCCC(40), τ CCCC(20)	1011	956
75	ν CC(17), τ HCCC(84), τ CCCC(15)	1015	960
76	τ HCCC(34), τ CCOC(12)	1017	977
77	ν CC(32), ν OC(21), δ HCC(20), τ HCCC(45), τ CCCC(26)	1028	985
78	ν NC(35), δ CNN(13), δ NNC(10)	1035	990
79	δ CCC(51), δ HCC(13), τ HCCC(54)	1040	994
80	τ HCCC(44), τ HCNN(13)	1041	995

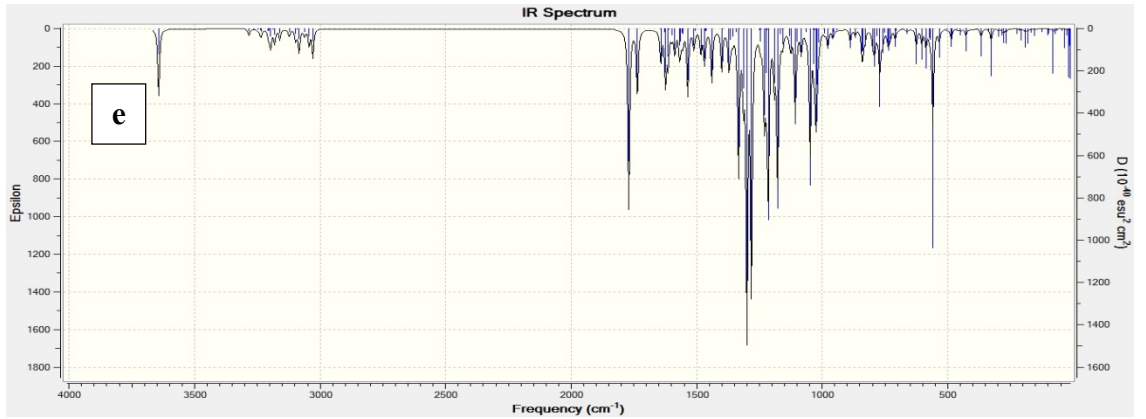
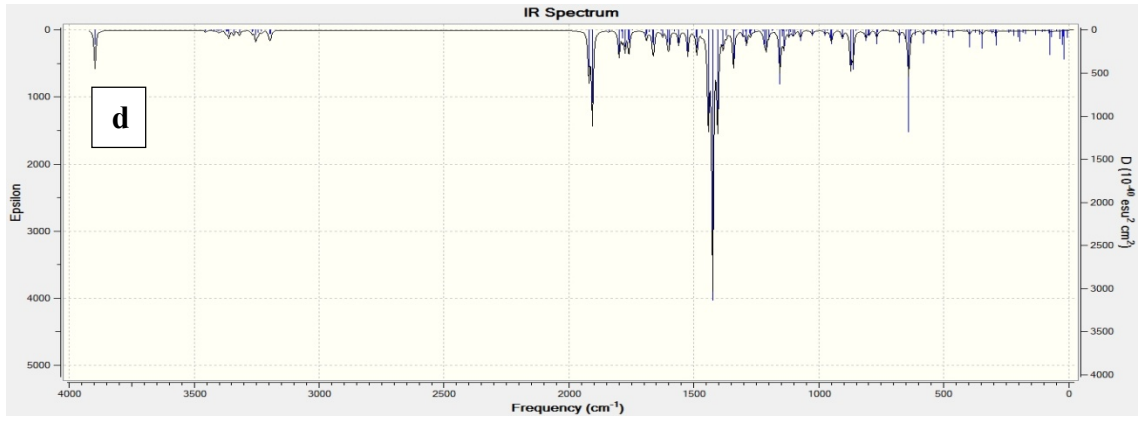
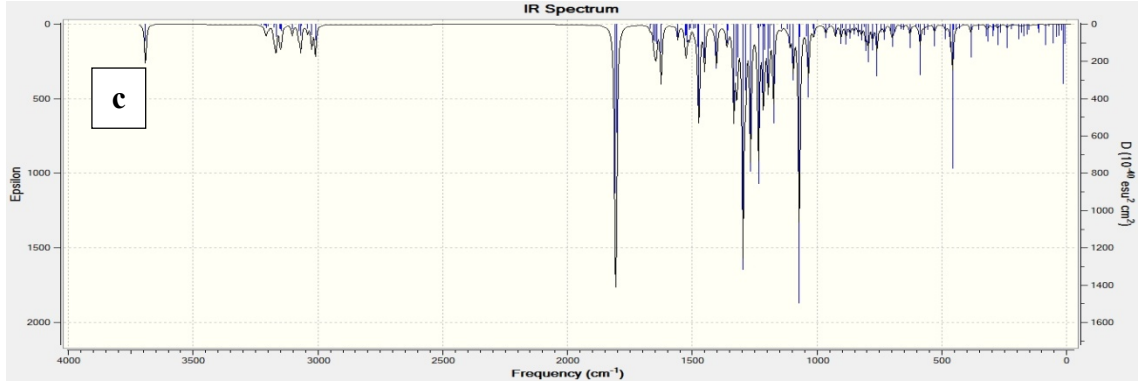
Tablo 3.55.'in devami

81	v CC(29), δ CCC(18), τ HCCC(82), τ CCCC(16)	1045	998
82	v OC(56), v CC(14), δ HCH(10), τ HCCC(44)	1050	1002
83	v OC(35), δ CCC(15), τ HCCC(62)	1074	1012
84	δ CCC(55), δ HCC(14), τ HCCC(47)	1077	1027
85	v CC(15), δ HCC(18), τ HCNN(84)	1090	1046
86	v CC(18), δ HCC(14), τ HCCC(43), τ CCCC(12)	1099	1063
87	v OC(12), v CC(18), δ CCC(11), δ HCC(14), τ HCCC(31), τ CCCC(12)	1099	1069
88	v CC(36), δ HCC(19), τ HCCC(17), τ CCCC(12)	1100	1086
89	v CC(32), δ HCC(20), τ HCNN(75)	1106	1091
90	v NC(26), v NN(15), v CC(53), δ HCC(21)	1112	1117
91	v CC(14), δ HCH(23), τ HCOC(26)	1142	1118
92	vCC(28), δ HCC(44), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1155	1126
93	v NC(10), v OC(12), v CC(19), δ HCC(12), τ HCOC(26)	1156	1137
94	δ HCH(16), τ HCOC(28), δ HCC(13)	1159	1149
95	v OC(12), v NC(10), δ HCC(15)	1171	1172
96	v CC(40)	1174	1177
97	v NN(11), v CC(17), δ HCC(24), δ NNC(10), τ HCCC(11)	1175	1181
98	δ HCC(34), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1184	1188
99	v CC(25), δ HCC(40), δ CCC(21), τ HCCC(26)	1215	1201
100	v CC(25), δ HCC(60), τ HCCC(26)	1217	1202
101	v CC(22), δ HCC(70)	1218	1203
102	v CC(22), v OC(10), δ CCC(16), δ HCC(18)	1219	1207
103	v CC(14), v OC(12), δ HCC(14)	1245	1237
104	v CC(12), v OC(10), v NC(14), v NN(12), δ NNC(19)	1256	1254
105	v NC(12), v CC(15), δ HCN(11), δ HCC(43), τ HCCC(18)	1263	1268
106	v CC(41), v OC(42), δ HCC(14)	1276	1283
107	v CC(32), v OC(23), δ HCC(10), τ HCCC(10)	1294	1287
108	v CC(33), v NC(12), v NN(10), δ HCC(13), δ HCN(11), τ HCCC(25)	1310	1294
109	v CC(26), δ HCC(40)	1334	1309
110	δ HCC(73), δ HNN(79)	1352	1317
111	δ HCC(74), δ HNN(77)	1354	1324
112	δ HCC(79)	1369	1348
113	v CC(10), δ HCN(30), τ HCCC(36)	1385	1351
114	v NC(11), δ HCN(30)	1418	1389
115	δ HCH(94)	1433	1410
116	v CC(20), δ HCC(47)	1435	1413
117	v CC(17), δ HCC(11), δ HCN(17)	1453	1418
118	v CC(30), δ HCC(15)	1458	1432
119	δ HCH(89), δ HCC(10)	1476	1452
120	δ HCH(87), δ HCC(10)	1483	1458
121	δ HCC(46)	1508	1482
122	δ HCC(20), δ HCH(38), τ HCCC(16)	1509	1483
123	v CC(21), δ HCC(25), δ HCH(35), τ HCCC(15)	1513	1500
124	δ HCH(76), τ HCCC(25), τ HCOC(11)	1513	1502
125	δ HCH(76), τ HCCC(25), τ HCOC(11)	1525	1502
126	δ HCC(64), δ CCC(1), δ HCH(74)	1534	1511
127	δ HCH(72), δ HCC(60), δ CCC(11)	1536	1514
128	v NC(54), v CC(23), δ CCC(11), δ HCC(10)	1587	1531
129	v NC(49), v CC(21), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1543
130	v CC(35), δ HCC(16), δ CCC(11)	1600	1557
131	v CC(29), δ HCC(20), δ CCC(11)	1613	1557
132	v CC(28), δ HCC(15)	1623	1567
133	v NC(11), v CC(54), δ CCC(10), δ HCC(24)	1626	1572
134	v CC(62), v NC(39), δ HCC(11)	1635	1585
135	v CC(56), v NC(45), δ HCC(23)	1671	1588

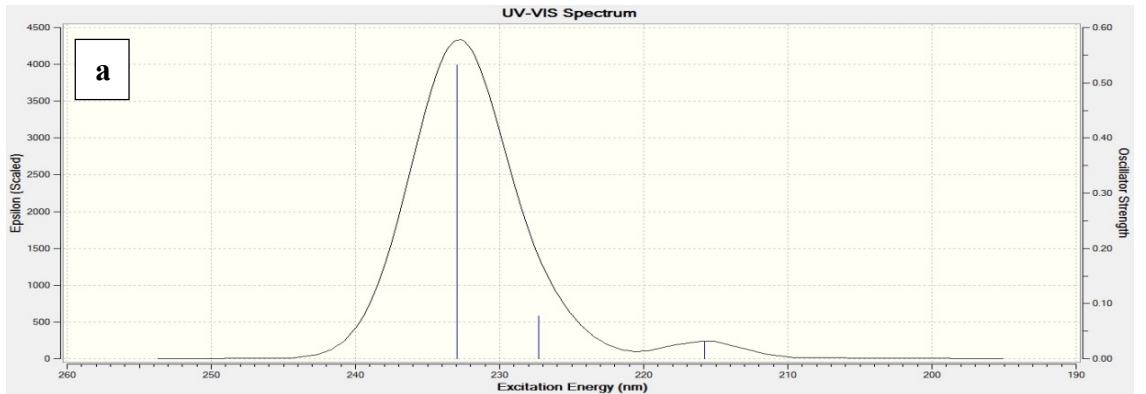
Tablo 3.55.'in devamı

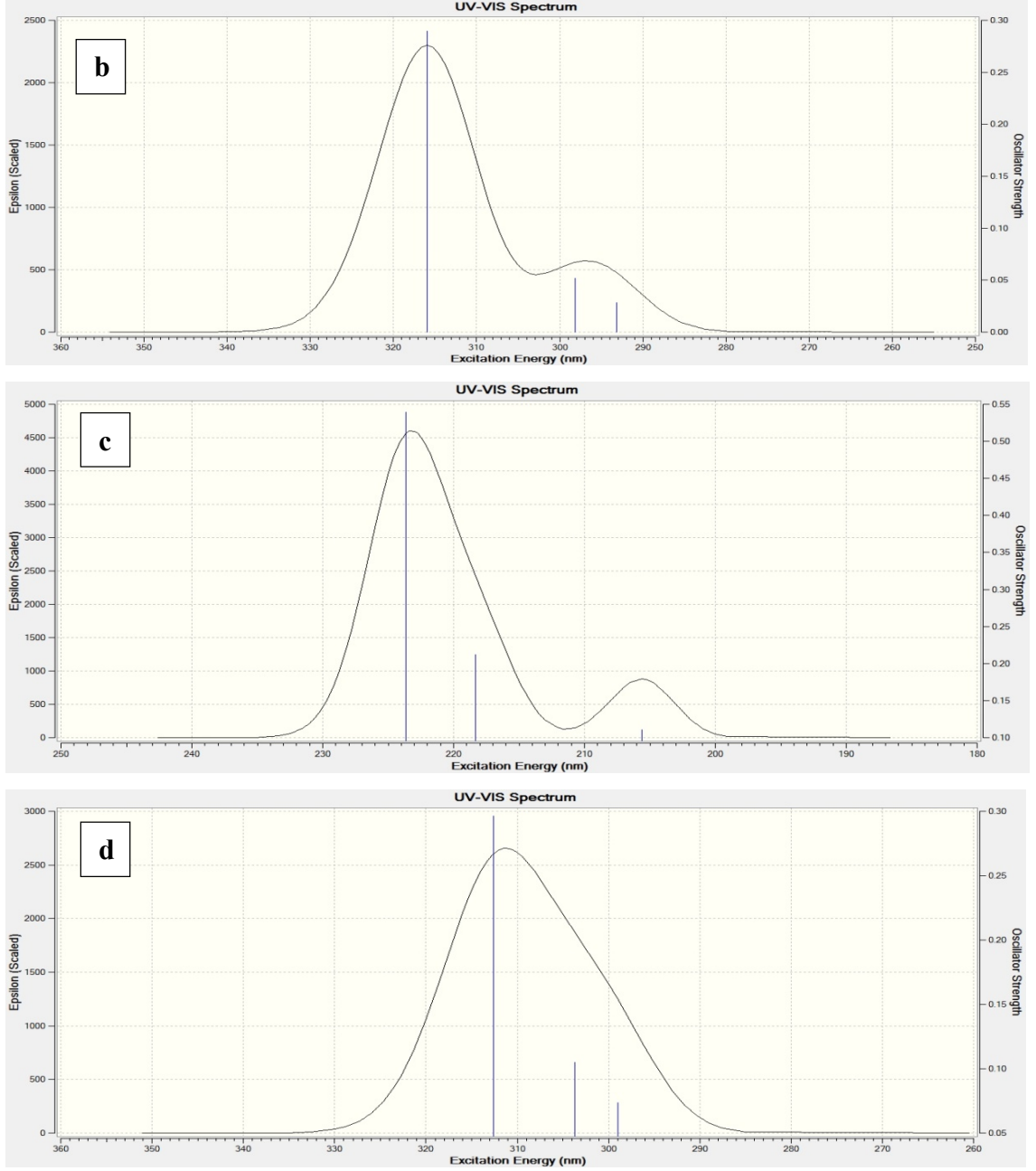
136	v OC(85), δ CNN(12)	1732	1675
137	v CH(98)	1744	1709
138	v CH(98)	2902	2923
139	v CH(99)	2907	2938
140	v CH(100)	2935	2955
141	v CH(98)	2949	2976
142	v CH(100)	2956	2984
143	v CH(100)	2966	2989
144	v CH(99)	2968	3014
145	v CH(46)	3016	3050
146	v CH(100)	3037	3069
147	v CH(100)	3037	3070
148	v CH(99)	3053	3076
149	v CH(99)	3058	3085
150	v CH(99)	3061	3090
151	v CH(52)	3063	3092
152	v CH(36)	3080	3094
153	v CH(68)	3090	3120
154	v CH(67)	3092	3122
155	v CH(31)	3097	3126
156	v CH(56)	3108	3134
157	v CH(48)	3119	3150
158	v CH(28)	3138	3169
159	v NH(100)	3540	3516





Şekil 3.22. 181 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.97/315.96	223.65/312.58	5.3219/3.9241	5.5436/3.9665	0.5321/0.2896	0.5392/0.2965
227.28/298.17	218.30/303.67	5.4552/4.1582	5.6794/4.0829	0.0772/0.0517	0.2123/0.1048
215.79/293.19	205.63/299.01	5.7455/4.2288	6.0294/4.1464	0.0305/0.0284	0.1110/0.0738

Şekil 3.23. 181 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.56. 181 Bileşinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(49)-N(48)	105.091	104.769	104.152	103.306
2	C(1)-N(50)-N(51)	121.210	121.386	120.516	120.776
3	C(1)-N(50)-C(2)	108.078	108.242	109.249	109.275
4	C(1)-C(18)-H(39)	107.866	108.117	107.914	108.112
5	C(1)-C(18)-H(40)	107.861	108.161	107.913	108.110
6	N(49)-N(48)-H(26)	120.709	120.194	119.984	119.337
7	N(49)-N(48)-C(2)	113.848	114.570	112.954	114.069
8	N(49)-C(1)-C(18)	126.903	126.366	127.345	126.441
9	N(50)-C(1)-C(18)	121.905	122.272	121.062	121.361
10	H(26)-N(48)-C(2)	125.442	125.235	127.061	126.594
11	N(48)-C(2)-N(50)	101.790	101.057	102.052	101.153
12	N(48)-C(2)-O(52)	129.584	130.150	130.264	130.916
13	O(52)-C(2)-N(50)	128.626	128.792	127.684	127.931
14	C(2)-N(50)-N(51)	130.709	130.368	130.235	129.949
15	H(39)-C(18)-C(19)	110.620	110.591	110.765	110.668
16	H(40)-C(18)-C(19)	110.622	110.593	110.763	110.670
17	C(18)-C(19)-C(20)	120.921	120.957	120.696	120.695
18	C(18)-C(19)-C(24)	120.913	120.873	120.705	120.696
19	C(19)-C(20)-H(41)	119.770	119.632	119.688	119.529
20	C(19)-C(24)-H(44)	119.774	119.612	119.692	119.530
21	C(19)-C(20)-C(21)	120.916	120.894	120.708	120.692
22	H(41)-C(20)-C(21)	119.313	119.474	119.603	119.779
23	C(20)-C(21)-C(22)	121.079	121.117	120.842	120.860
24	C(20)-C(21)-H(42)	119.242	119.363	119.544	119.692
25	H(42)-C(21)-C(22)	119.679	119.520	119.614	119.448
26	C(21)-C(22)-C(23)	117.846	117.803	118.301	118.286
27	C(21)-C(22)-C(25)	121.063	121.088	120.826	120.846
28	C(22)-C(25)-H(45)	110.989	111.274	110.433	110.603
29	C(22)-C(25)-H(46)	111.382	111.579	110.991	110.982
30	C(22)-C(25)-H(47)	111.383	111.591	110.998	110.979
31	H(45)-C(25)-H(47)	107.535	107.183	108.058	107.906
32	H(46)-C(25)-H(47)	107.831	107.800	108.192	108.347
33	H(45)-C(25)-H(46)	107.533	107.179	108.058	107.904
34	C(25)-C(22)-C(23)	121.079	121.096	120.864	120.855
35	C(22)-C(23)-H(43)	119.684	119.522	119.619	119.447
36	C(22)-C(23)-C(24)	121.080	121.121	120.841	120.861
37	C(23)-C(24)-C(19)	120.915	120.894	120.709	120.692
38	H(43)-C(23)-C(24)	119.236	119.357	119.540	119.691
39	C(23)-C(24)-H(44)	119.311	119.493	119.598	119.777
40	H(44)-C(24)-C(19)	119.774	119.612	119.692	119.530
41	C(24)-C(19)-C(20)	118.164	118.171	118.598	118.608
42	N(50)-N(51)-C(3)	120.072	119.259	119.120	117.291
43	N(51)-C(3)-H(27)	122.335	122.004	122.498	122.378
44	N(51)-C(3)-C(4)	120.410	120.229	120.063	119.707
45	H(27)-C(3)-C(4)	117.255	117.767	117.439	117.915
46	C(3)-C(4)-C(5)	118.020	117.947	117.820	117.996
47	C(3)-C(4)-C(9)	122.585	122.495	121.657	121.657
48	C(4)-C(5)-H(28)	120.984	120.229	120.932	121.046
49	C(4)-C(5)-C(6)	119.887	119.582	119.061	119.184
50	H(28)-C(5)-C(6)	119.128	120.184	120.007	119.770
51	C(5)-C(6)-O(53)	117.949	122.273	124.881	125.409
52	C(5)-C(6)-C(7)	121.122	121.041	120.823	120.643

Tablo 3.56'nin devamı

53	O(53)-C(6)-C(7)	120.846	116.574	114.296	113.948
54	C(6)-C(7)-H(29)	120.048	119.253	118.722	118.567
55	C(6)-C(7)-C(8)	118.948	119.269	119.693	119.802
56	H(29)-C(7)-C(8)	121.003	121.479	121.585	121.631
57	C(7)-C(8)-H(30)	119.431	119.481	119.589	119.508
58	C(7)-C(8)-C(9)	120.707	120.524	120.327	120.353
59	H(30)-C(8)-C(9)	119.862	119.995	120.084	120.139
60	C(8)-C(9)-H(31)	120.492	120.826	121.108	121.543
61	C(8)-C(9)-C(4)	119.941	120.024	119.572	119.671
52	H(31)-C(9)-C(4)	119.567	119.150	119.320	118.786
63	C(9)-C(4)-C(5)	119.395	119.558	120.524	120.347
64	C(6)-O(53)-C(10)	120.011	120.522	128.250	125.498
65	O(53)-C(10)-O(54)	123.396	123.562	123.487	124.181
66	O(53)-C(10)-C(11)	111.900	111.226	111.448	110.210
67	O(54)-C(10)-C(11)	124.703	125.211	125.066	125.609
68	C(10)-C(11)-C(16)	122.174	122.644	122.033	122.594
69	C(10)-C(11)-C(12)	117.241	117.004	116.967	116.570
70	C(11)-C(12)-H(32)	120.463	120.158	120.617	120.129
71	C(11)-C(12)-C(13)	120.285	120.316	120.061	120.242
72	H(32)-C(12)-C(13)	119.251	119.526	119.629	119.629
73	C(12)-C(13)-O(55)	115.788	115.712	116.044	115.821
74	C(12)-C(13)-C(14)	119.429	119.518	119.361	119.189
75	C(13)-O(55)-C(17)	119.945	118.620	120.962	118.210
76	O(55)-C(13)-C(14)	124.784	124.769	124.595	124.990
77	O(55)-C(17)-H(36)	106.190	105.752	105.464	104.864
78	O(55)-C(17)-H(37)	111.459	111.523	111.309	111.608
79	O(55)-C(17)-H(38)	111.465	111.542	111.309	111.607
80	H(36)-C(17)-H(37)	109.104	109.255	109.618	109.682
81	H(36)-C(17)-H(38)	109.099	109.241	109.618	109.682
82	H(37)-C(17)-H(38)	109.430	109.430	109.445	109.305
83	C(13)-C(14)-C(15)	119.784	119.690	120.127	120.132
84	H(33)-C(14)-C(15)	119.099	119.314	119.176	119.234
85	C(14)-C(15)-H(34)	119.033	119.058	119.259	119.180
86	H(34)-C(15)-C(16)	119.835	119.817	119.946	119.917
87	C(15)-C(16)-H(35)	120.744	120.881	121.400	121.683
88	C(15)-C(16)-C(11)	118.785	118.998	118.656	118.699
89	C(16)-C(11)-C(12)	120.585	120.353	121.000	120.836
90	H(35)-C(16)-C(11)	120.471	120.121	119.944	119.618

Tablo 3.57. 181 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

	Bağ Uzunluklar	HF	HF	B3LYP	B3LYP
		6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
1	C(1)-N(49)	1.2772	1.2652	1.2946	1.3113
2	C(1)-N(50)	1.3849	1.3821	1.3909	1.3908
3	C(1)-C(18)	1.4939	1.4990	1.4984	1.4973
4	C(18)-C(19)	1.5131	1.5116	1.5122	1.5167
5	C(18)-H(39)	1.0838	1.0840	1.0950	1.0970
6	C(18)-H(40)	1.0838	1.0840	1.0950	1.0970
7	C(19)-C(20)	1.3847	1.3862	1.3954	1.3988
8	C(19)-C(24)	1.3845	1.3861	1.3960	1.3988
9	C(20)-H(41)	1.0730	1.0765	1.0865	1.0850
10	C(20)-C(21)	1.3824	1.3836	1.3917	1.3946
11	C(21)-H(42)	1.0730	1.0765	1.0866	1.0850
12	C(21)-C(22)	1.3871	1.3884	1.3978	1.4011

Tablo 3.57.'nin devamı

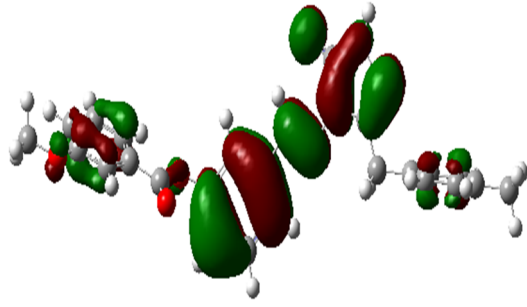
13	C(22)-C(25)	1.5169	1.5101	1.5095	1.5188
14	C(25)-H(45)	1.0860	1.0863	1.0958	1.0979
15	C(25)-H(46)	1.0834	1.0838	1.0928	1.0949
16	C(25)-H(47)	1.0834	1.0837	1.0927	1.0949
17	C(22)-C(23)	1.3869	1.3883	1.3981	1.4010
18	C(23)-H(43)	1.0729	1.0764	1.0866	1.0850
19	C(23)-C(24)	1.3826	1.3837	1.3914	1.3946
20	C(24)-H(44)	1.0730	1.0764	1.0865	1.0850
21	N(48)-C(2)	1.3537	1.3457	1.3683	1.3772
22	C(2)-O(52)	1.2188	1.1962	1.2157	1.2374
23	N(50)-C(2)	1.3962	1.3878	1.4206	1.4324
24	N(48)-H(26)	0.9918	0.9885	1.0054	1.0087
25	N(48)-N(49)	1.4274	1.3686	1.3791	1.4390
26	N(50)-N(51)	1.3978	1.3627	1.3689	1.4095
27	N(51)-C(3)	1.2669	1.2572	1.2847	1.2973
28	C(3)-H(27)	1.0701	1.0740	1.0866	1.0848
29	C(3)-C(4)	1.4716	1.4767	1.4664	1.4652
30	C(4)-C(5)	1.3884	1.3876	1.4004	1.4034
31	C(4)-C(9)	1.3866	1.3916	1.4039	1.4036
32	C(5)-H(28)	1.0657	1.0748	1.0824	1.0778
33	C(5)-C(6)	1.3807	1.3797	1.3905	1.3948
34	C(6)-O(53)	1.3967	1.3787	1.3938	1.4099
35	C(6)-C(7)	1.3815	1.3767	1.3892	1.3973
36	C(7)-H(29)	1.0694	1.0736	1.0840	1.0817
37	C(7)-C(8)	1.3817	1.3872	1.3958	1.3949
38	C(8)-H(30)	1.0713	1.0747	1.0849	1.0834
39	C(8)-C(9)	1.3811	1.3799	1.3869	1.3917
40	C(9)-H(31)	1.0695	1.0726	1.0830	1.0819
41	O(53)-C(10)	1.3572	1.3399	1.3733	1.3940
42	C(10)-O(54)	1.2048	1.1782	1.2019	1.2276
43	C(10)-C(11)	1.4788	1.4921	1.4891	1.4808
44	C(11)-C(12)	1.3772	1.3802	1.3926	1.3923
45	C(11)-C(16)	1.3884	1.3933	1.4026	1.4028
46	C(12)-H(32)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
47	C(12)-C(13)	1.3859	1.3902	1.3972	1.3986
48	C(13)-O(55)	1.3689	1.3455	1.3661	1.3825
49	C(13)-C(14)	1.3820	1.3851	1.3987	1.3998
50	C(14)-H(33)	1.0695	1.0226	1.0827	1.0815
51	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3966	1.3990
52	C(15)-H(34)	1.0715	1.0750	1.0851	1.0836
53	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3873	1.3902
54	C(16)-H(35)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
55	O(55)-C(17)	1.4368	1.3976	1.4193	1.4603
56	C(17)-H(36)	1.0772	1.0785	1.0882	1.0899
57	C(17)-H(37)	1.0831	1.0849	1.0954	1.0968
58	C(17)-H(38)	1.0831	1.0850	1.0954	1.0968

Tablo 3.58. 181 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

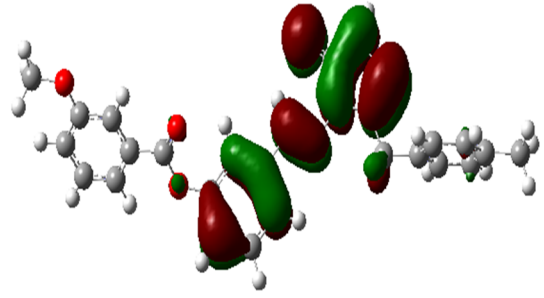
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.569	0.816	0.450	0.678
C2	0.782	1.250	0.583	0.941
C3	0.035	0.194	-0.054	0.110
C4	-0.043	-0.164	-0.023	-0.055

Tablo 3.58.'in devamı

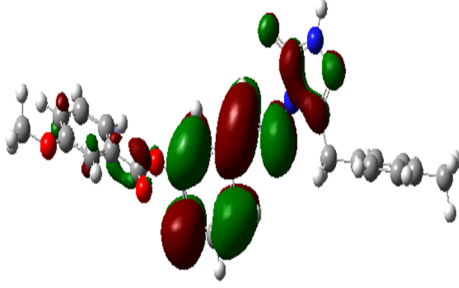
C5	-0.271	-0.246	-0.208	-0.212
C6	0.328	0.383	0.231	0.301
C7	-0.212	-0.254	-0.193	-0.192
C8	0.208	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.160	-0.173
C10	0.647	1.008	0.430	0.700
C11	-0.204	-0.246	-0.158	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.591	-0.504	-0.592	-0.514
C19	0.063	-0.040	0.087	0.045
C20	-0.214	-0.204	-0.190	-0.174
C21	-0.235	-0.225	-0.208	-0.185
C22	0.042	-0.071	0.075	0.016
C23	-0.235	-0.225	-0.207	-0.185
C24	-0.214	-0.204	-0.194	-0.174
C25	-0.653	-0.586	-0.676	-0.598
H26	0.405	0.404	0.372	0.354
H27	0.306	0.331	0.261	0.263
H28	0.240	0.324	0.229	0.247
H29	0.238	0.266	0.209	0.206
H30	0.227	0.252	0.200	0.196
H31	0.243	0.271	0.211	0.207
H32	0.264	0.305	0.230	0.230
H33	0.242	0.255	0.216	0.196
H34	0.224	0.251	0.199	0.195
H35	0.244	0.274	0.213	0.206
H36	0.233	0.239	0.233	0.226
H37	0.208	0.200	0.211	0.199
H38	0.207	0.200	0.211	0.199
H39	0.265	0.269	0.248	0.239
H40	0.254	0.269	0.247	0.239
H41	0.211	0.237	0.185	0.182
H42	0.212	0.235	0.186	0.179
H43	0.213	0.235	0.186	0.179
H44	0.212	0.237	0.186	0.182
H45	0.228	0.215	0.225	0.211
H46	0.221	0.215	0.217	0.201
H47	0.221	0.215	0.217	0.201
N48	-0.592	-0.761	-0.497	-0.593
N49	-0.247	-0.364	-0.186	-0.334
N50	-0.479	-0.855	-0.373	-0.629
N51	-0.272	-0.362	-0.205	-0.322
O52	-0.533	-0.671	-0.390	-0.521
O53	-0.509	-0.815	-0.373	-0.600
O54	-0.436	-0.616	-0.317	-0.480
O55	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



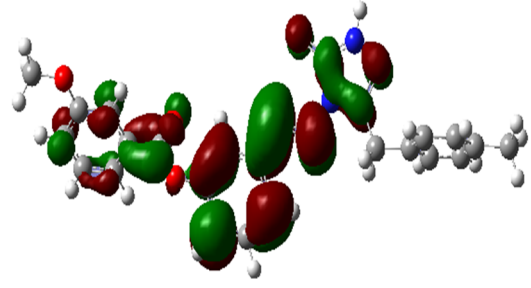
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32068 \text{ Hatree}$



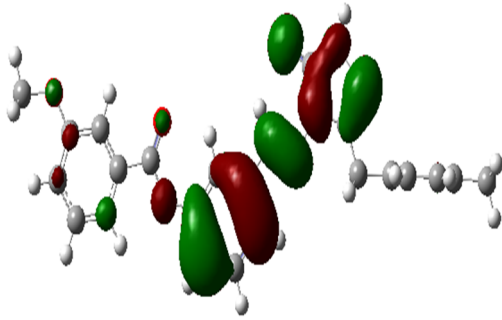
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22603 \text{ Hatree}$



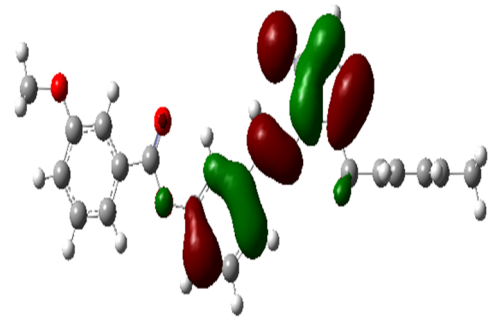
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07712 \text{ Hatree}$



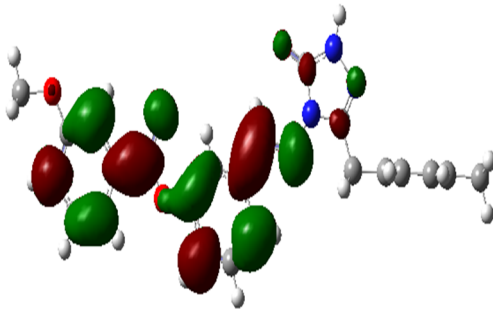
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06616 \text{ Hatree}$



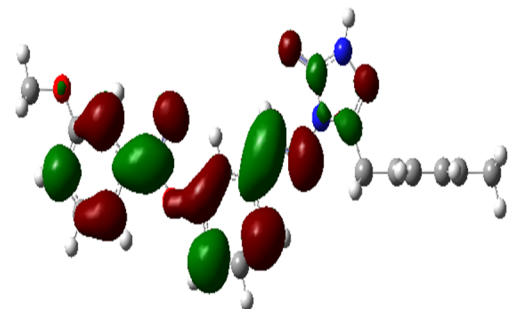
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31848 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,21713 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,08020 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,05774 \text{ Hatree}$

Şekil 3.24. 181 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

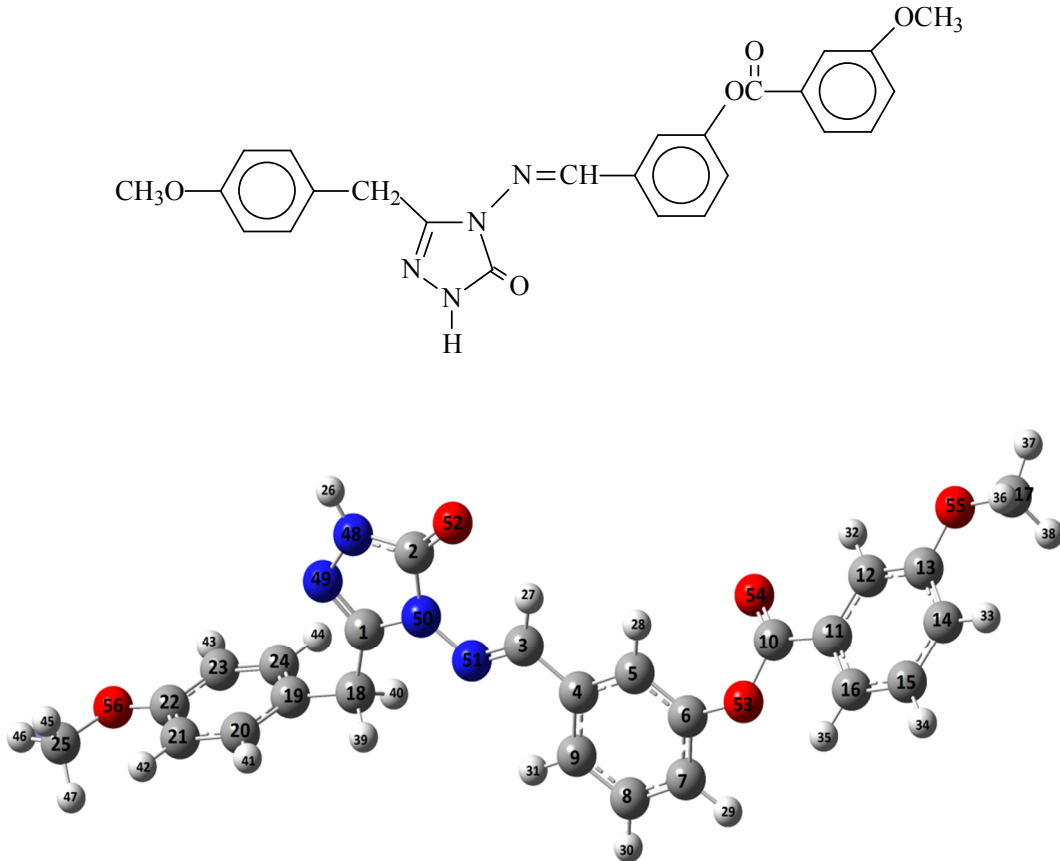
Tablo 3.59. 181 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.0908	0.6353	0.6376	0.1627
μ_y	5.4219	5.1172	3.6759	3.0312
μ_z	1.9191	1.9491	1.4930	1.3675
μ_{Toplam}	5.8540	5.5126	4.0184	3.3294

Tablo 3.60. 181 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1477.043	-1468.505	-1486.128	-1477.610

3.2.7. 3-*p*-Metoksibenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (182):



Şekil 3.25. 182 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.61. 182 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.55	151.95	153.76	-5.40	-7.21	141.26	143.76	5.29	2.79
C2	151.18	152.57	153.54	-1.39	-2.36	141.77	142.69	9.41	8.49
C3	151.03	152.14	152.67	-1.11	-1.64	142.12	142.82	8.91	8.21
C4	135.26	140.10	139.53	-4.84	-4.27	126.71	126.44	8.55	8.82
C5	125.87	130.07	129.41	-4.20	-3.54	117.89	118.34	7.98	7.53
C6	152.14	157.72	157.38	-5.58	-5.24	142.05	141.27	10.09	10.87
C7	124.84	125.72	127.17	-0.88	-2.33	118.68	118.92	6.16	5.92
C8	129.91	131.58	133.11	-1.67	-3.20	120.37	121.13	9.54	8.78
C9	120.23	123.51	123.96	-3.28	-3.73	114.16	114.89	6.07	5.34
C10	164.33	166.41	167.98	-2.08	-3.65	151.06	152.87	13.27	11.46
C11	130.27	134.97	133.94	-4.70	-3.67	122.86	121.82	7.41	8.45
C12	122.14	124.79	122.88	-2.65	-0.74	115.20	113.24	6.94	8.90
C13	159.45	165.20	165.43	-5.75	-5.98	149.52	149.42	9.93	10.03
C14	114.39	114.97	117.81	-0.58	-3.42	104.00	106.57	10.39	7.82
C15	130.10	131.63	133.28	-1.53	-3.18	120.81	122.37	9.29	7.73
C16	120.36	124.18	124.30	-3.82	-3.94	113.43	113.71	6.93	6.65
C17	55.47	53.52	54.08	1.95	1.39	35.28	35.76	20.19	19.71
C18	30.26	34.50	33.91	-4.24	-3.65	17.72	16.97	12.54	13.29
C19	127.49	129.64	130.04	-2.15	-2.55	120.67	121.61	6.82	5.88
C20	130.21	134.30	134.94	-4.09	-4.73	124.71	124.97	5.50	5.24
C21	113.78	109.21	110.65	4.57	3.13	113.23	113.41	0.55	0.37
C22	158.05	164.50	164.65	-6.45	-6.60	151.29	150.84	6.76	7.21
C23	113.78	120.43	119.74	-6.65	-5.96	113.26	113.41	0.52	0.37
C24	130.31	135.01	134.80	-4.70	-4.49	124.77	125.00	5.54	5.31
C25	54.91	53.19	53.69	1.72	1.22	44.37	44.66	10.54	10.25
H26	11.99	6.17	6.66	5.82	5.33	5.38	5.80	6.61	6.19
H27	9.75	9.59	9.54	0.16	0.21	9.02	9.00	0.73	0.75
H28	7.66	7.15	7.18	0.51	0.48	6.67	6.88	0.99	0.78
H29	4.47	6.78	7.05	-2.31	-2.58	6.66	6.86	-2.19	-2.39
H30	7.62	7.10	7.37	0.52	0.25	6.85	7.12	0.77	0.50
H31	7.79	7.79	7.90	0.00	-0.11	7.60	7.76	0.19	0.03
H32	7.77	7.53	7.34	0.24	0.43	7.44	7.25	0.33	0.52
H33	7.35	6.34	6.73	1.01	0.62	6.06	6.48	1.29	0.87
H34	7.57	7.04	7.31	0.53	0.26	6.79	7.09	0.78	0.48
H35	7.75	7.46	7.57	0.29	0.18	7.20	7.33	0.55	0.42
H36	3.88	3.21	3.39	0.67	0.49	2.51	2.71	1.37	1.17
H37	3.88	3.70	3.78	0.18	0.10	3.08	3.15	0.80	0.73
H38	3.88	3.21	3.40	0.67	0.48	2.51	3.72	1.37	0.16
H39	4.00	3.52	3.67	0.48	0.33	2.93	3.13	1.07	0.87
H40	4.00	3.61	3.73	0.39	0.27	2.93	3.12	1.07	0.88
H41	7.25	6.88	7.09	0.37	0.16	6.67	6.90	0.58	0.35
H42	6.84	6.13	6.44	0.71	0.40	6.42	6.59	0.42	0.25
H43	6.84	6.60	6.65	0.24	0.19	6.42	6.59	0.42	0.25
H44	7.25	6.91	7.05	0.34	0.20	6.68	6.90	0.57	0.35
H45	3.68	3.21	3.35	0.47	0.33	2.39	2.56	1.29	1.12
H46	3.68	3.60	3.71	0.08	-0.03	2.99	3.08	0.69	0.6
H47	3.68	3.18	3.34	0.50	0.34	2.40	2.56	1.28	1.12

Tablo 3.62. 182 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneyssel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.55	116.68	117.86	29.87	28.69	113.63	115.65	32.92	30.90
C2	151.18	115.64	116.05	35.54	35.13	114.92	115.35	36.26	35.83
C3	151.03	117.22	117.47	33.81	33.56	115.16	115.54	35.87	35.49
C4	135.26	100.76	100.05	34.50	35.21	93.43	92.63	41.83	42.63
C5	125.87	90.27	89.61	35.60	36.26	84.16	83.46	41.71	42.41
C6	152.14	120.78	120.80	31.36	31.34	111.06	110.92	41.08	41.22
C7	124.84	87.78	118.89	37.06	5.95	83.51	84.55	41.33	40.29
C8	129.91	93.49	94.77	36.42	35.14	88.72	90.00	41.19	39.91
C9	120.23	87.31	87.57	32.92	32.66	82.92	83.40	37.31	36.83
C10	164.33	133.05	133.74	31.28	30.59	128.37	129.21	35.96	35.12
C11	130.27	96.66	95.81	33.61	34.46	90.28	89.35	39.99	40.92
C12	122.14	88.34	86.84	33.80	35.30	85.49	83.68	36.65	38.46
C13	159.45	124.07	124.19	35.38	35.26	115.69	115.4	43.76	44.05
C14	114.39	82.97	85.10	31.42	29.29	78.12	80.33	36.27	34.06
C15	130.10	94.34	95.67	35.76	34.43	88.90	90.44	41.20	39.66
C16	120.36	88.21	88.23	32.15	32.13	83.96	84.42	36.40	35.94
C17	55.47	31.39	32.05	24.08	23.42	15.56	16.17	39.91	39.30
C18	30.26	13.39	12.92	16.87	17.34	-0.94	-1.29	31.20	31.55
C19	127.49	91.66	91.94	35.83	35.55	88.35	89.17	39.14	38.32
C20	130.21	96.74	97.17	33.47	33.04	92.82	93.10	37.39	37.11
C21	113.78	78.18	79.18	35.60	34.60	83.84	83.97	29.94	29.81
C22	158.05	123.59	123.61	34.46	34.44	117.75	117.24	40.30	40.81
C23	113.78	85.33	84.65	28.45	29.13	83.84	83.97	29.94	29.81
C24	130.31	96.76	96.55	33.55	33.76	92.81	93.09	37.50	37.22
C25	54.91	30.95	31.52	23.96	23.39	23.40	23.98	31.51	30.93
H26	11.99	5.46	5.98	6.53	6.01	4.52	4.94	7.47	7.05
H27	9.75	9.37	9.30	0.38	0.45	8.81	8.72	0.94	1.03
H28	7.66	7.74	7.64	-0.08	0.02	7.37	7.25	0.29	0.41
H29	4.47	5.72	6.03	-1.25	-1.56	5.69	6.04	-1.22	-1.57
H30	7.62	6.05	6.38	1.57	1.24	5.86	6.24	1.76	1.38
H31	7.79	6.87	6.99	0.92	0.80	6.77	6.95	1.02	0.84
H32	7.77	6.68	6.50	1.09	1.27	6.82	6.56	0.95	1.21
H33	7.35	5.22	5.67	2.13	1.68	4.93	5.44	2.42	1.91
H34	7.57	5.98	6.30	1.59	1.27	5.74	6.13	1.83	1.44
H35	7.75	6.62	6.76	1.13	0.99	6.49	6.70	1.26	1.05
H36	3.88	2.72	2.96	1.16	0.92	1.74	2.03	2.14	1.85
H37	3.88	3.38	3.52	0.50	0.36	2.72	2.82	1.16	1.06
H38	3.88	2.72	2.97	1.16	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H39	4.00	2.73	2.91	1.27	1.09	1.99	2.24	2.01	1.76
H40	4.00	2.80	2.96	1.20	1.04	1.99	2.24	2.01	1.76
H41	7.25	5.84	6.09	1.41	1.16	5.70	5.98	1.55	1.27
H42	6.84	4.96	5.32	1.88	1.52	5.28	5.46	1.56	1.38
H43	6.84	5.44	5.49	1.40	1.35	5.28	5.46	1.56	1.38
H44	7.25	5.91	6.1	1.34	1.15	5.69	5.98	1.56	1.27
H45	3.68	2.67	2.88	1.01	0.80	1.49	1.78	2.19	1.90
H46	3.68	3.23	3.40	0.45	0.28	2.52	2.66	1.16	1.02
H47	3.68	2.65	2.87	1.03	0.81	1.49	1.78	2.19	1.90

Tablo 3.63. 182 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(25), τ COCC(16), τ NCCC(35), τ CCCN(26)	5	5
2	τ COCC(68), τ CCOC(14), τ CCCC(12)	7	14
3	δ COC(10), τ COCC(13), τ CCOC(46)	14	15
4	τ COCC(63), τ CCCC(48), τ NCCC(16)	16	18
5	τ CNNC(13), τ CCOC(15), τ CCCC(15), τ NCCC(28), τ COCC(22)	25	26
6	τ CCCC(27), δ NCC(12), τ CCOC(16)	27	31
7	δ COC(42), τ CCNN(10), τ CCCC(14), τ COCC(65)	43	41
8	τ CCCC(16), τ COCC(65)	43	52
9	τ CCCC(12), τ CCNN(14), τ NCCN(18)	56	62
10	τ CCNN(16), τ CCCN(10)	63	67
11	τ HCOC(10), τ CCCC(15), τ COCC(15), δ CCN(12), δ CCO(10)	66	84
12	τ COCC(64), τ HCOC(12)	70	94
13	δ CCO(12), τ NNCC(10), τ CNNC(27), τ NCCC(14), τ CCCN(11)	107	108
14	τ NNCC(15), δ CCC(10), δ COC(14), τ CCCC(18), τ OCCC(23)	125	114
15	τ CNNC(15), τ NNCC(11), δ NCC(13)	126	152
16	τ CCCC(29), τ COCC(16), τ NCCC(12), τ CNNC(18), τ NNCC(17)	152	163
17	τ CCCC(18)	163	169
18	δ CCC(24)	172	180
19	ν CC(11), δ NCN(13), τ CCCC(20)	178	191
20	τ HCOC(19), τ CCCC(28), τ COCC(12), τ OCCC(22), ν CC(10)	195	215
21	τ CCCN(20), τ NCCN(31)	223	220
22	δ OCC(29), δ COC(19), τ HCOC(15), τ CCCC(23)	225	229
23	τ CCCN(42), τ NNCC(18)	226	237
24	τ HCOC(66), δ COC(18)	264	254
25	δ COC(22), τ CCCN(19)	273	262
26	τ HCOC(42), τ CCCC(26), τ HNNC(23), τ CNNC(21), τ NNCC(30)	280	279
27	τ HNNC(19), τ CNNC(29), τ NNCC(17), τ HCOC(41), τ CCCC(25)	293	282
28	δ COC(22), δ OCO(13)	307	294
29	δ COC(11)	317	312
30	δ CCC(21), δ COC(17), τ HCCC(12)	319	336
31	τ CCCN(10), τ CCNN(36), τ COCC(10), τ NCCN(10)	361	348
32	τ CCCC(22), τ OCCC(16), δ COC(16)	392	351
33	δ OCN(16), δ NCN(11), δ NNC(16), δ COC(10)	404	380
34	τ HCCC(15), τ CCCC(78), τ HNNC(21), δ CCC(38), δ COC(11)	439	422
35	δ CCC(24), δ OCC(54)	440	425
36	τ CCCC(78), τ HCCC(16)	443	437
37	τ CCCC(44)	460	445
38	τ HNNC(55), τ ONNC(10), τ NCNC(14)	462	452
39	τ HNNC(21), δ CCC(38), δ COC(11), τ CCCN(12)	480	456
40	τ HNNC(12), τ CCCN(16)	486	463
41	δ CCC(19), δ COC(12)	504	492
42	τ HCCC(24), τ OCCC(29), τ OCOC(10), τ OCCC(36), δ CCC(22)	530	518
43	δ COC(18), τ HCCC(10), τ CCCC(13)	580	545
44	τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCOC(10), τ OCCC(36), δ CCC(22)	582	551
45	δ CCC(17), δ COC(18)	584	566
46	δ CCC(11)	601	582
47	δ CCO(12)	614	590
48	τ CCCN(20), τ COCC(12), τ CCOC(13), τ OCCC(10)	627	598
49	δ CCC(22), δ OCN(21), τ CCCN(11)	645	622
50	δ CCC(39), τ NCNC(11), ν CC(12)	666	645
51	δ CCC(11), τ NCNC(43), τ HNNC(10), τ HCCC(11)	689	657
52	τ HCCC(25), τ CCCC(19), δ CCC(20)	705	683
53	ν CC(12), δ CCC(22), τ HCCC(28), τ CCCC(17)	716	684
54	τ HCCC(29), τ CCOC(15), τ OCOC(45), τ CCCN(12)	723	691
55	τ CCCC(25), τ HCCC(16), τ CCCN(10)	726	694

Tablo 3.63.'ün devamı

56	τ CCCC(18), τ HCCC(50), τ OCOC(21)	771	729
57	τ ONNC(79)	781	738
58	τ HCCC(74), τ OCOC(45), τ CCCN(12)	808	753
59	τ ONNC(83)	814	758
60	τ HCCC(11), τ CCCC(10)	817	781
61	τ HCCC(30)	829	788
62	ν NC(14), δ CNN(28), τ HCCC(22)	833	797
63	τ HCCC(50), τ OCOC(28), τ CCCC(18)	861	802
64	τ HCCC(90)	864	809
65	δ OCO(11), τ HCCC(14), ν CC(26)	872	816
66	ν CC(13), τ HCCC(99)	886	835
67	δ NCN(14), δ CCN(13), τ HCCC(32)	888	845
68	τ HCCC(47), τ OCCC(14)	923	859
69	ν OC(19), τ HCCC(17)	926	876
70	τ HCCC(39), τ CCCC(10)	966	891
71	τ HCCC(31)	967	896
72	τ HCCC(26), ν CC(12), δ HCC(31)	972	917
73	τ HCCC(40)	982	917
74	τ HCCC(32), δ CCN(13), ν OC(10), ν CC(11)	984	924
75	δ HCC(22), τ HCCC(38)	995	931
76	τ HCCC(65), τ CCCC(19)	1015	944
77	ν CC(30), δ CCC(25)	1027	956
78	τ HCCC(85), τ OCCC(14), τ CCCC(14)	1029	961
79	τ HCCC(58), ν CC(19), δ CCC(39)	1035	968
80	ν CC(28), δ CCC(31), τ HCCC(46)	1044	1002
81	τ HCNN(88), τ HCCC(57)	1049	1005
82	ν CC(37), δ CCC(49), δ HCC(18)	1055	1007
83	δ HCC(12), δ CCC(38), τ HCNN(86)	1082	1021
84	δ NNC(37), δ CNN(14)	1088	1026
85	ν OC(73), ν CC(12)	1104	1059
86	ν OC(61), ν CC(53), δ HCC(27)	1114	1062
87	ν OC(10), δ HCC(15), δ CCC(12)	1126	1085
88	ν NC(12), ν NN(37), ν CC(12), δ HCC(25)	1129	1087
89	ν CC(33), δ HCC(22), ν OC(40)	1138	1099
90	ν CC(30), δ HCC(20)	1142	1110
91	ν CC(16), δ HCC(56)	1150	1127
92	δ HCC(32), ν NC(10), ν NN(28)	1158	1163
93	δ HCH(26), τ HCOC(65), ν CC(26)	1168	1172
94	δ HCH(26), τ HCOC(65), ν CC(20)	1190	1172
95	ν CC(10), δ HCC(47)	1211	1180
96	δ HCC(64), ν CC(23)	1219	1185
97	ν CC(11), δ HCC(65), δ HCH(11), τ HCOC(67)	1228	1193
98	δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1199
99	τ HCOC(44), ν CC(19)	1250	1203
100	ν NC(20), ν NN(16), δ OCN(10), δ HCC(38), τ HCOC(11)	1251	1205
101	δ HCC(26), τ HCCC(20), τ HCOC(48)	1256	1210
102	ν CC(18), δ HCC(18)	1261	1219
103	ν OC(10), ν CC(11), δ HCC(12)	1267	1223
104	ν NC(26), ν NN(13), δ CNN(15)	1277	1255
105	ν OC(36), ν CC(12), δ HCC(47), τ HCCC(17)	1289	1270
106	ν OC(16), ν CC(22)	1313	1275
107	ν CC(14), ν OC(42)	1326	1285
108	δ HCC(24), ν CC(12), ν OC(44), τ HCOC(16)	1331	1306
109	δ HCC(59), ν NC(10), δ CNN(16), τ HCCC(23)	1350	1310
110	δ HCC(15), τ HCCC(19), ν OC(18)	1368	1321
111	ν CC(10), δ HCC(67)	1373	1327

Tablo 3.63.'ün devamı

112	v CC(40), δ HCC(78)	1376	1343
113	v CC(16), δ HCC(74)	1377	1346
114	v CC(61), δ HCC(12) v NC(11), v NN(15), δ CNN(17), τ HCCC(14)	1411	1349
115	v NC(10), δ HNN(25), δ HCN(46), τ HCCC(12)	1463	1390
116	δ HNN(63), δ HCN(16), v OC(13)	1484	1401
117	v NC(12), v CC(26), δ HCC(38)	1489	1437
118	v CC(24), δ HCC(35)	1506	1447
119	v CC(20), δ HCN(13), δ HCC(11)	1525	1459
120	v CC(24), δ HCC(10), δ HCH(71)	1534	1465
121	δ HCH(85)	1538	1474
122	δ HCH(81), δ HCN(15), τ HCCC(15)	1541	1479
123	δ HCH(60)	1546	1480
124	δ HCH(40), τ HCOC(23)	1553	1498
125	δ HCH(74), τ HCOC(12)	1562	1498
126	δ HCH(62), τ HCOC(21)	1567	1509
127	δ HCH(71), τ HCOC(10)	1570	1510
128	δ HCC(20), δ CCC(12), v CC(65), δ HCH(16)	1574	1511
129	δ HCC(27), δ CCC(10)	1577	1515
130	δ HCC(47), δ CCC(12)	1609	1542
131	v NC(10), v CC(32), δ CCC(14), δ HCC(10)	1682	1608
132	v NC(10), v CC(33), δ CCC(14), δ HCC(11)	1691	1609
133	v CC(33), δ HCC(11), δ CCC(18)	1696	1610
134	v NC(22), v CC(22), δ HCC(11)	1717	1628
135	v NC(27), v CC(36), δ HCC(10)	1719	1633
136	v CC(65), δ HCC(20), δ CCC(10)	1726	1638
137	v CC(50), δ HCC(19), v NC(42)	1772	1649
138	v NC(46), v CC(10)	1801	1653
139	v OC(84), v NC(12)	1863	1787
140	v OC(71), v NC(11)	1903	1791
141	v CH(85)	3025	2980
142	v CH(91)	3030	2982
143	v CH(98)	3063	3011
144	v CH(99)	3079	3036
145	v CH(87)	3086	3036
146	v CH(100)	3092	3039
147	v CH(83)	3136	3110
148	v CH(50)	3149	3116
149	v CH(52)	3174	3131
150	v CH(55)	3174	3133
151	v CH(52)	3188	3138
152	v CH(54)	3190	3145
153	v CH(84)	3198	3146
154	v CH(38)	3199	3163
155	v CH(88)	3200	3168
156	v CH(42)	3216	3172
157	v CH(67)	3219	3176
158	v CH(67)	3220	3180
159	v CH(50)	3226	3184
160	v CH(57)	3236	3185
161	v CH(48)	3239	3195
162	v NH(100)	3770	3656

Tablo 3.64. 182 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

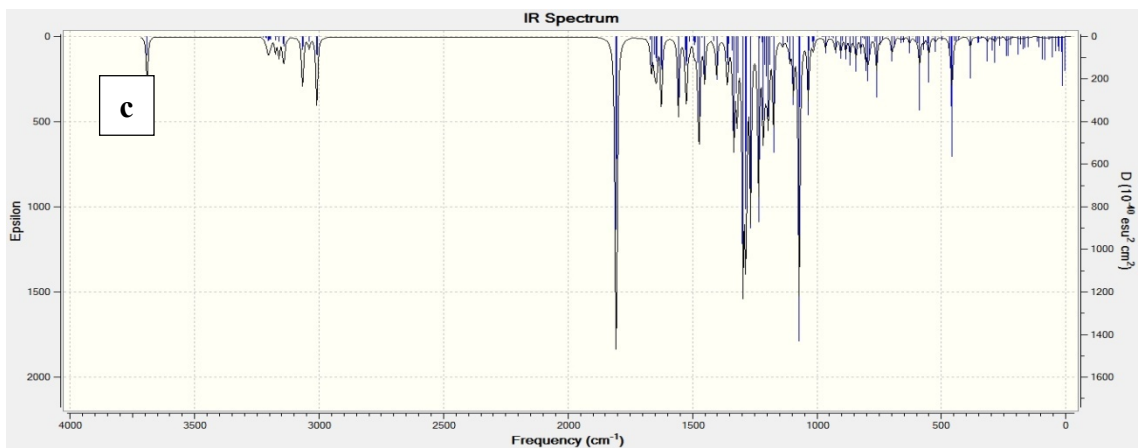
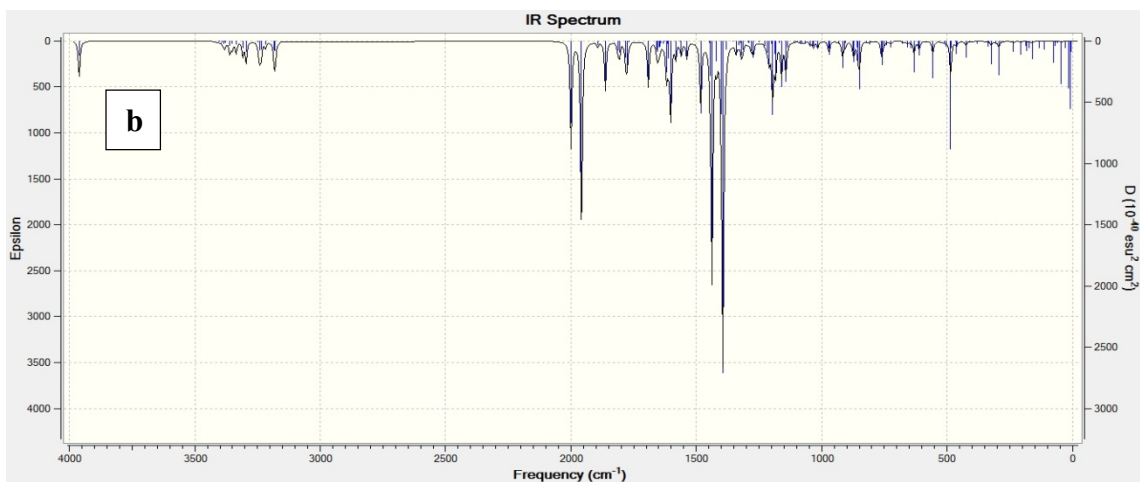
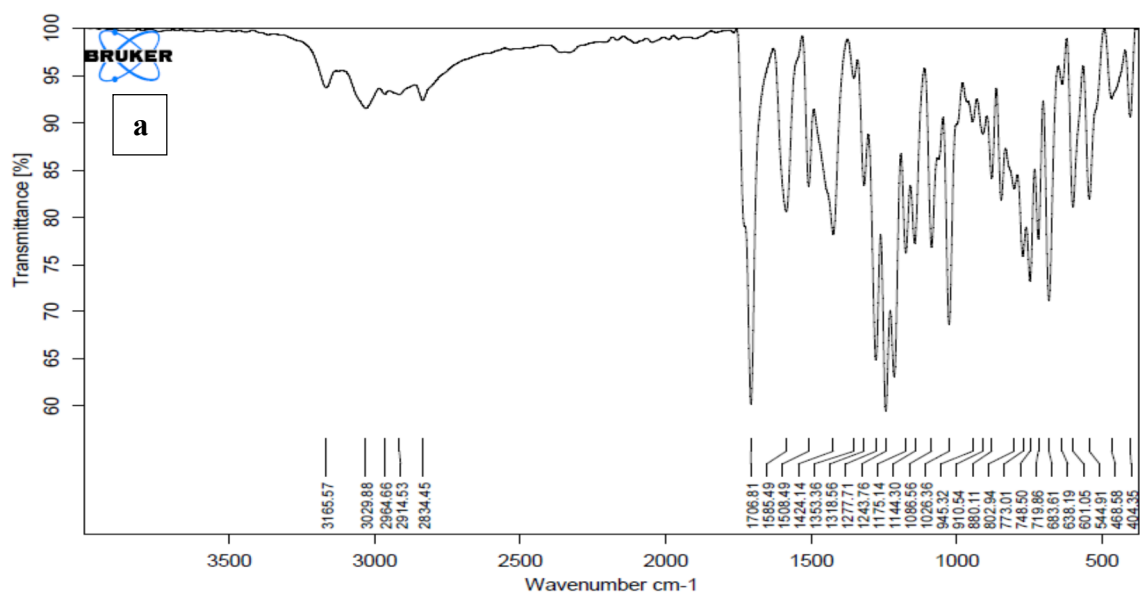
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(26), τ CCCN(33), τ NCNC(18), τ CNNC(16)	6	7
2	τ CCCC(68)	7	17
3	δ NCC(11), δ CCC(10), δ NNC(12), δ CCN(16), τ CCOC(18), τ COCC(51), τ CCCC(11)	17	18
4	δ NCC(11), δ CCC(10), δ NNC(12), τ CCOC(18), τ COCC(34), τ CCCC(11)	18	18
5	τ CCCC(20), τ CCCN(32), τ NCNC(24), τ COCC(11), τ CCOC(15)	21	23
6	τ NCCC(18), τ COCC(36), τ CCOC(26), τ CCCN(14), τ CCCC(10)	31	34
7	δ CCC(15), δ COC(18), τ COCC(75)	38	40
8	τ CCCC(14), τ NNCC(25), δ COC(21)	39	63
9	τ NNCC(14), τ COCC(25), τ CCNN(25)	63	64
10	τ COCC(53), τ CCCC(14), δ CCN(11), δ CNN(11)	66	78
11	δ CCC(19), τ COCC(43), τ CCNN(12)	67	93
12	τ CCOC(11), τ COCC(27), τ CCCC(22)	87	94
13	τ COCC(33), δ CCO(19)	96	98
14	τ CNNC(37), τ CCCC(15), τ CCNN(20), δ CCC(12), δ COC(19), τ OCC(26)	117	120
15	τ CNNC(22), τ CCCC(10), τ CCNN(12), τ NNCC(20), τ NCNC(16)	120	160
16	δ CCC(15), τ CCCC(21), τ COCC(20), τ HCOC(71), δ OCC(10)	154	163
17	τ CCCC(24), τ CCCN(15), τ CNNC(13)	168	174
18	δ COC(16), τ CNNC(11), τ CCNN(30)	177	185
19	δ CCO(11), δ COC(15), ν CC(10)	183	196
20	τ HCOC(40), τ COCC(13), τ OCC(17), δ COC(28), δ NCC(12)	195	208
21	τ HCOC(44), τ CCCC(13), τ OCC(10)	210	213
22	δ OCC(23), δ COC(15), δ CNN(10)	212	219
23	τ HCOC(61), δ COC(29)	254	234
24	τ CCOC(10), τ CCCO(19), τ CCCO(19), τ CCCN(32), τ CCCC(12), τ CCNN(16)	262	258
25	δ COC(38)	266	267
26	τ HCOC(18), τ CCCC(30), τ OCC(11)	273	268
27	τ NCCC(18), τ CCCC(17), τ CCNN(23), τ OCC(10)	280	286
28	δ COC(10), δ CCC(21), δ OCC(14)	299	311
29	δ CCC(11), τ CNNC(12), δ COC(21), δ OCO(10)	314	320
30	δ CCC(11), τ τ HCCC(13), τ CCNN(13), τ NCNC(24), τ NNCC(19), τ CNNC(11)	340	327
31	τ CCCC(21), τ OCC(17), δ COC(17), δ OCO(15)	359	349
32	τ CCNN(29), τ NNCC(18),	370	354
33	τ CCNN(11), τ NNCC(18), δ COC(15), τ CCCC(12)	383	354
34	δ OCN(19), δ CCC(10), δ OCC(54)	412	413
35	τ HCCC(16), τ CCCC(30), δ CCC(16), δ OCN(11)	422	427
36	δ CCC(24), δ COC(11)	438	432
37	δ OCC(20), δ COC(14), τ HCCC(18), τ CCCC(77)	441	442
38	τ HCCC(11), τ CCOC(24), τ CCCC(48)	464	446
39	τ HCCC(20), τ CCOC(16), τ CCCO(34), τ CCCC(18), τ OCC(10)	485	467
40	δ CCC(19)	489	485
41	τ HCCC(17), τ OCC(23), δ CCC(20), ν OC(10)	512	513
42	δ COC(19), τ HCCC(13), τ OCC(12), δ CCC(15)	557	534
43	τ HNNC(89), τ HCCC(11), τ OCC(12), τ CCCC(12), δ NNC(12)	564	540
44	τ HCCC(13), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCC(39)	573	551
45	δ COC(20), δ CCC(15), τ HNNC(95)	584	553
46	δ OCN(12), δ CNN(22), τ HCCC(14), τ OCC(10)	586	567
47	δ CCO(22), δ COC(20), δ CCC(18)	592	583
48	ν NN(11), δ OCN(15), δ CCC(24)	616	603
49	τ CCOC(17), τ CCCO(10), τ CCCC(13), τ OCC(18), τ CCCN(16)	637	609
50	τ CCNN(15), τ NCNC(43), δ CCC(27)	661	638

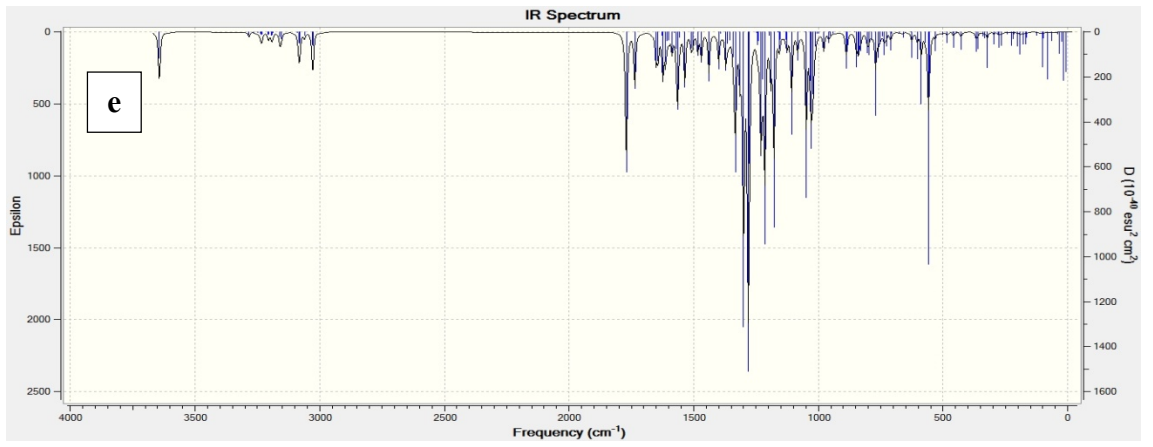
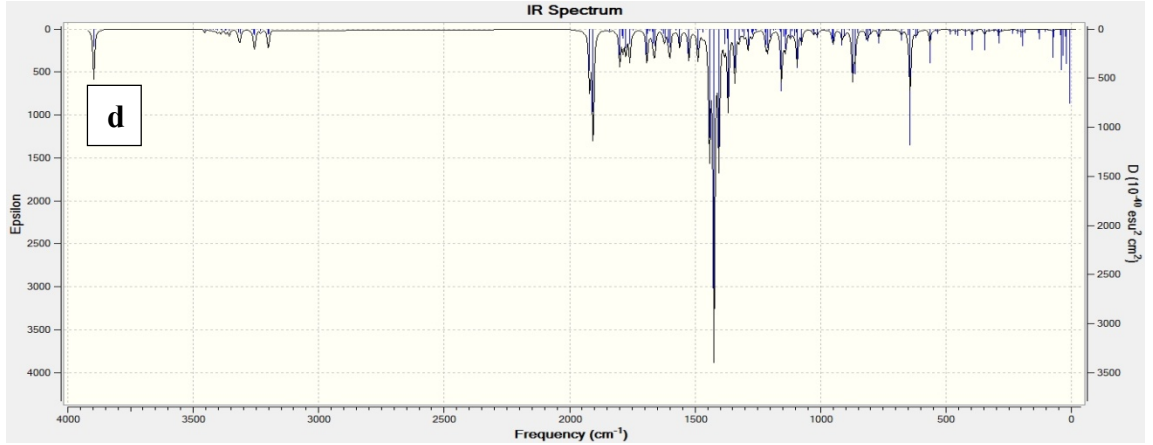
Tablo 3.64.'ün devamı

51	δ CCC(34), τ NNCC(11), τ CCNN(10), τ NCNC(31)	671	654
52	δ CCC(31), ν CC(12)	694	682
53	τ CCCC(11), ν CC(15)	698	685
54	τ HCCC(31), τ CCOC(26), τ CCCC(18)	727	702
55	τ HCCC(41), τ CCOO(20), τ CCOC(13), ν OC(12)	733	710
56	ν OC(14), τ CCCC(12), τ CCCN(15), τ HCCC(42)	737	718
57	ν NN(11), τ CCCC(17)	742	726
58	τ ONNC(77), δ NCC(14), ν NC(10), δ CNN(31)	775	733
59	τ HCCC(13), τ OCOC(54), τ CCCC(10)	784	744
60	ν NC(10), δ NCC(14), δ CNN(14), δ CCN(13), δ OCO(26)	792	759
61	ν OC(10), δ OCO(27), τ ONNC(74)	793	771
62	δ CCC(10), τ HCCC(16), τ CCCC(21)	804	776
63	ν NC(10), δ NCC(13), δ CNN(11), δ CCN(23)	821	801
64	τ HCCC(27), τ CCOC(15), ν CC(16)	831	809
65	τ HCCC(55)	861	811
66	ν CC(16), δ CCC(20), τ HCCC(63)	865	818
67	τ HCCC(97), ν CC(13), ν OC(20)	876	824
68	τ HCCC(99), τ OCCC(11)	895	854
69	ν OC(15), τ HCCC(52), τ OCCC(12)	921	858
70	δ HCC(32), τ HCCC(30), ν CC(13)	933	910
71	τ HCCC(42), τ NCNC(10), δ HCC(34), ν CC(10)	937	920
72	τ HCCC(48), δ NCC(42)	977	923
73	ν CC(17), ν OC(71)	993	925
74	τ HCCC(33)	995	944
75	δ NCC(19), δ CNN(18), τ HCCC(29)	997	945
76	τ HCCC(45), δ CCC(13), ν CC(42)	1002	965
77	τ HCCC(39), ν CC(17), δ CCC(26)	1011	972
78	τ HCCC(34), τ CCOC(13)	1017	977
79	ν CC(23), ν OC(19), δ CCC(42), δ HCC(13)	1032	985
80	ν NC(31), ν OC(31), δ CNN(12)	1036	987
81	ν NC(17), ν OC(34), τ HCCC(26), τ HCNN(13)	1041	992
82	τ HCCC(529), τ CCOO(12), ν OC(55)	1050	994
83	τ HCCC(57), τ CCCC(23)	1054	995
84	ν CC(11), δ CCC(35), τ HCCC(83), τ CCCC(15)	1056	998
85	ν OC(32), δ CCC(23), τ HCCC(62)	1073	1012
86	δ HCC(13), δ CCC(54), τ HCCC(47)	1077	1017
87	τ HCNN(84), ν CC(15), δ HCC(18)	1090	1045
88	ν OC(13), δ HCC(17), ν CC(19)	1099	1069
89	ν CC(19), δ HCC(19)	1100	1086
90	ν CC(18), δ HCC(19), τ HCNN(74)	1106	1091
91	ν CC(20), δ HCC(43)	1108	1115
92	ν NC(26), ν NN(16), ν CC(14)	1142	1117
93	δ HCH(23), τ HCOC(60)	1146	1119
94	δ HCH(11), τ HCOC(65), ν CC(26)	1152	1122
95	ν OC(13), δ HCC(12), ν CC(20), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1155	1137
96	δ HCH(24), τ HCOC(27), ν CC(20)	1156	1149
97	τ HCOC(53), δ HCC(13)	1159	1155
98	ν OC(12), δ HCC(28)	1171	1172
99	ν NN(10), δ HCC(23), τ HCOC(58)	1173	1181
100	δ HCC(32), δ CCC(13), τ HCOC(24), δ HCH(13)	1184	1188
101	ν CC(26), δ HCC(32), δ CCC(13)	1192	1189
102	ν CC(15), δ HCC(34)	1204	1199
103	ν CC(14), δ HCC(44)	1218	1202
104	δ HCC(42), τ HCCC(19), ν OC(10)	1219	1205
105	ν OC(43), δ HCC(10), ν CC(16)	1243	1233
106	ν CC(17), ν OC(11), δ HCC(11)	1245	1237

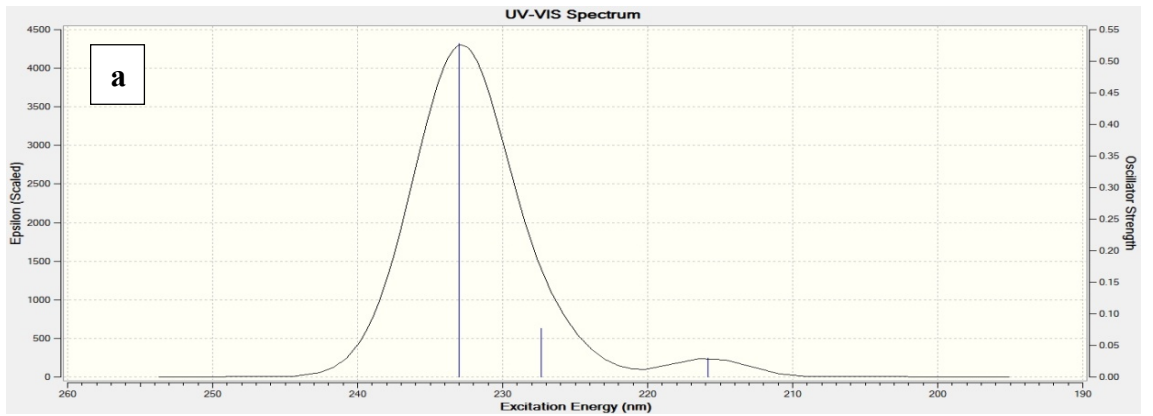
Tablo 3.64.'ün devamı

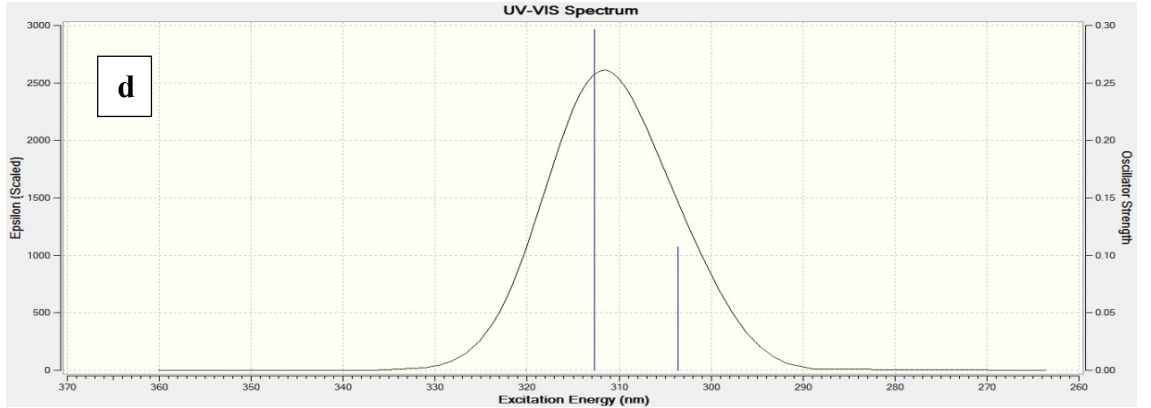
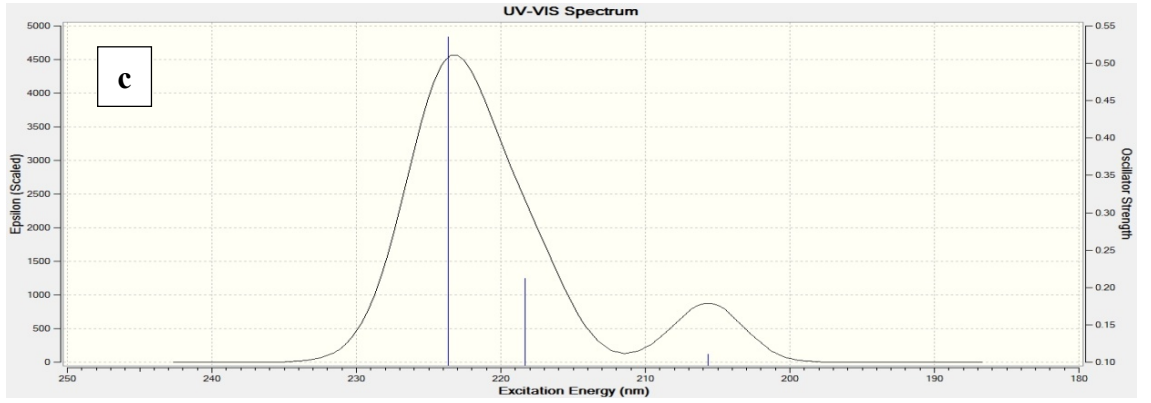
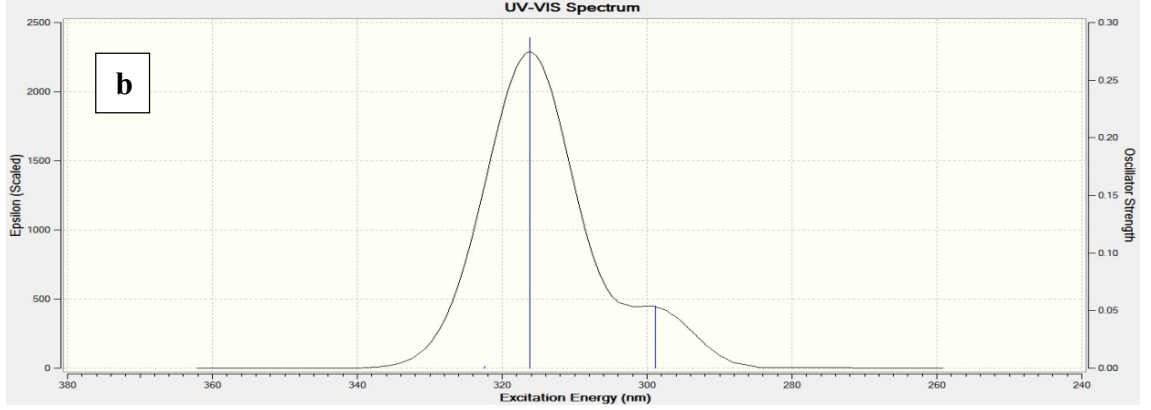
107	v CC(13), v OC(10), v NC(13), v NN(12), δ NNC(18)	1256	1254
108	v CC(16), v NC(12), δ HCN(11), δ HCC(45), τ HCCC(20)	1259	1268
109	v CC(25), τ HCCC(10), v OC(42)	1276	1287
110	v CC(24), δ HCC(16), v OC(22)	1294	1294
111	v CC(24), δ HCC(16), v NC(12), v NN(10), τ HCCC(25), δ HCN(11)	1311	1294
112	v CC(19), δ HCC(72)	1334	1309
113	δ HNN(79), δ HCC(75)	1345	1317
114	δ HCC(73)	1352	1324
115	δ HCC(71), δ HNN(77)	1354	1345
116	v CC(12), δ HCN(29), τ HCCC(37)	1385	1351
117	v NC(11), δ HCN(29)	1418	1389
118	v CC(25), δ HCC(40)	1431	1417
119	v CC(17), δ HCC(11), δ HCN(17)	1453	1418
120	v CC(19), δ HCC(16)	1458	1432
121	δ HCH(80)	1473	1452
122	δ HCH(83)	1477	1452
123	δ HCH(83)	1483	1458
124	δ HCC(20)	1508	1482
125	δ HCC(25), v CC(21)	1513	1483
126	δ HCH(40), τ HCOC(20), δ HCH(40)	1519	1502
127	δ HCH(76), τ HCOC(20)	1525	1502
128	δ HCC(33), δ HCH(36), τ HCOC(21)	1533	1510
129	δ HCH(74)	1534	1514
130	δ HCC(53), δ HCH(23), τ HCOC(11), δ HCC(53), δ CCC(10)	1538	1521
131	v NC(53), v CC(26), δ HCN(17), δ HCC(11), δ CCC(11)	1586	1531
132	v NC(49), v CC(21), δ HCC(14), δ CCC(11)	1598	1543
133	v CC(35), δ HCC(16), δ CCC(10)	1600	1552
134	v CC(26), δ HCC(20), δ CCC(11)	1613	1557
135	v CC(36), δ HCC(18), δ CCC(11)	1623	1567
136	v NC(12), v CC(49), δ CCC(16), δ HCC(21)	1625	1572
137	v CC(22), δ HCC(16), v NC(39)	1636	1585
138	v CC(22), δ HCC(16), v NC(45)	1671	1593
139	v OC(84), δ CNN(12)	1732	1675
140	v OC(85)	1745	1708
141	v CH(91)	2907	2921
142	v CH(91)	2909	2923
143	v CH(100)	2936	2954
144	v CH(99)	2956	2972
145	v CH(100)	2960	2976
146	v CH(100)	2967	2982
147	v CH(84)	3010	3045
148	v CH(46)	3016	3050
149	v CH(75)	3048	3076
150	v CH(80)	3049	3078
151	v CH(52)	3061	3082
152	v CH(52)	3063	3092
153	v CH(75)	3078	3094
154	v CH(68)	3080	3118
155	v CH(80)	3080	3119
156	v CH(68)	3090	3120
157	v CH(67)	3092	3122
158	v CH(30)	3097	3126
159	v CH(56)	3108	3134
160	v CH(48)	3119	3150
161	v CH(28)	3138	3169
162	v NH(100)	3540	3516





Şekil 3.26. 182 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.99/322.42	223.67/320.10	5.3214/3.8454	5.5433/3.8733	0.5277/0.0015	0.5356/0.0002
227.32/316.20	218.32/312.68	5.4542/3.9211	5.6791/3.9652	0.0772/0.2870	0.2120/0.2968
215.83/298.86	205.66/303.63	5.7445/4.1486	6.0285/4.0834	0.0305/0.0542	0.1109/0.1074

Şekil 3.27. 182 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.65. 182 Bileşiminin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A^0)

	Bağ Açılı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(49)-N(48)	105.093	104.773	104.159	103.308
2	C(1)-N(50)-N(51)	121.207	121.374	120.513	120.780
3	C(1)-N(50)-C(2)	108.064	108.257	109.230	109.289
4	C(1)-C(18)-H(39)	107.885	108.101	107.928	108.062
5	C(1)-C(18)-H(40)	107.887	108.058	107.927	108.063
6	H(39)-C(18)-H(40)	105.551	104.966	106.545	106.206
7	N(49)-N(48)-H(26)	120.697	120.194	119.963	119.338
8	N(49)-N(48)-C(2)	113.844	114.573	112.950	114.072
9	N(49)-C(1)-C(18)	126.849	126.381	127.302	126.432
10	N(50)-C(1)-C(18)	121.942	122.276	121.086	121.388
11	H(26)-N(48)-C(2)	125.459	125.233	127.087	126.590
12	N(48)-C(2)-N(50)	101.789	101.054	102.049	101.151
13	N(48)-C(2)-O(52)	129.598	130.154	130.282	130.913
14	O(52)-C(2)-N(50)	128.613	128.791	127.669	127.936
15	C(2)-N(50)-N(51)	130.726	130.366	130.257	129.931
16	H(39)-C(18)-C(19)	110.635	110.591	110.783	110.681
17	H(40)-C(18)-C(19)	110.638	110.658	110.782	110.748
18	C(18)-C(19)-C(20)	120.825	121.126	120.633	120.952
19	C(18)-C(19)-C(24)	120.816	120.942	120.635	120.728
20	C(19)-C(20)-H(41)	119.750	119.613	119.677	119.561
21	C(19)-C(24)-H(44)	119.750	119.621	119.678	119.557
22	C(19)-C(20)-C(21)	121.067	121.683	120.754	121.249
23	H(41)-C(20)-C(21)	119.182	118.704	119.569	119.190
24	C(20)-C(21)-C(22)	119.861	119.588	119.965	119.931
25	C(20)-C(21)-H(42)	120.819	119.204	120.858	119.251
26	H(42)-C(21)-C(22)	119.314	121.208	119.169	120.818
27	C(21)-C(22)-C(23)	119.783	119.336	119.829	119.198
28	C(21)-C(22)-O(56)	120.078	124.844	120.090	124.990
29	C(22)-O(56)-C(25)	115.689	118.470	116.244	117.941
30	O(56)-C(22)-C(23)	120.122	115.819	120.080	115.812
31	O(56)-C(25)-H(45)	111.157	111.592	110.855	111.633
32	O(56)-C(25)-H(46)	106.883	105.842	105.998	104.990
33	O(56)-C(25)-H(47)	111.141	111.581	110.852	111.667
34	H(45)-C(25)-H(46)	109.334	109.221	109.970	109.672
35	H(45)-C(25)-H(47)	109.340	109.305	109.160	109.155
36	H(46)-C(25)-H(47)	108.942	109.206	109.971	109.640
37	C(21)-C(22)-C(23)	119.783	119.336	119.829	119.198
38	C(22)-C(23)-C(24)	119.862	120.204	119.965	120.372
39	C(23)-C(24)-C(19)	121.066	121.256	120.754	120.930
40	H(43)-C(23)-C(24)	120.802	121.353	120.861	121.606
41	C(23)-C(24)-H(44)	119.184	119.123	119.568	119.513
42	H(44)-C(24)-C(19)	119.750	119.621	119.678	119.557
43	C(24)-C(19)-C(20)	118.359	117.933	118.732	118.319
44	N(50)-N(51)-C(3)	120.057	119.303	119.103	117.297
45	N(51)-C(3)-H(27)	122.326	122.019	122.488	122.379
46	N(51)-C(3)-C(4)	120.421	120.192	120.078	119.703
47	H(27)-C(3)-C(4)	117.253	117.790	117.433	117.918
48	C(3)-C(4)-C(5)	118.015	117.971	117.814	117.996
49	C(3)-C(4)-C(9)	122.591	122.463	121.662	121.657
50	C(4)-C(5)-H(28)	120.986	120.228	120.934	121.039
51	C(4)-C(5)-C(6)	119.891	119.571	119.064	119.183
52	H(28)-C(5)-C(6)	119.123	120.196	120.002	119.778

Tablo 3.65.'in devamı

53	C(5)-C(6)-O(53)	117.924	122.351	124.884	125.412
54	C(5)-C(6)-C(7)	121.117	121.041	120.817	120.645
55	O(53)-C(6)-C(7)	120.875	116.497	114.299	113.943
56	C(6)-C(7)-H(29)	120.053	119.247	118.721	118.568
57	C(6)-C(7)-C(8)	118.948	119.275	119.696	119.801
58	H(29)-C(7)-C(8)	120.998	121.478	121.583	121.631
59	C(7)-C(8)-H(30)	119.427	119.480	119.584	119.508
60	C(7)-C(8)-C(9)	120.709	120.521	120.327	120.353
61	H(30)-C(8)-C(9)	119.864	119.999	120.089	120.139
52	C(8)-C(9)-H(31)	120.492	120.829	121.109	121.548
63	C(8)-C(9)-C(4)	119.940	120.027	119.572	119.671
64	H(31)-C(9)-C(4)	119.568	119.145	119.319	118.781
65	C(9)-C(4)-C(5)	119.394	119.565	120.524	120.347
66	C(6)-O(53)-C(10)	120.030	120.628	128.245	125.504
67	O(53)-C(10)-O(54)	123.390	123.590	123.474	124.188
68	O(53)-C(10)-C(11)	111.900	111.210	111.451	110.207
69	O(54)-C(10)-C(11)	124.709	125.200	125.076	125.605
70	C(10)-C(11)-C(16)	122.175	122.646	122.035	122.592
71	C(10)-C(11)-C(12)	117.239	117.010	116.964	116.572
72	C(11)-C(12)-H(32)	120.465	120.158	120.619	120.131
73	C(11)-C(12)-C(13)	120.285	120.319	120.061	120.240
74	H(32)-C(12)-C(13)	119.250	119.523	119.319	119.628
75	C(12)-C(13)-O(55)	115.788	115.706	116.044	115.823
76	C(12)-C(13)-C(14)	119.428	119.522	119.359	119.191
77	C(13)-O(55)-C(17)	119.946	118.626	120.965	118.206
78	O(55)-C(13)-C(14)	124.784	124.773	124.597	124.986
79	O(55)-C(17)-H(36)	111.459	111.535	111.307	111.593
80	O(55)-C(17)-H(37)	106.189	105.753	105.463	104.865
81	O(55)-C(17)-H(38)	111.465	111.534	111.308	111.621
82	H(36)-C(17)-H(37)	109.105	109.250	109.619	109.688
83	H(36)-C(17)-H(38)	109.431	109.427	109.446	109.305
84	H(37)-C(17)-H(38)	109.099	109.244	109.619	109.676
85	C(13)-C(14)-C(15)	119.786	119.684	120.129	120.131
86	H(33)-C(14)-C(15)	119.099	119.320	119.176	119.234
87	C(14)-C(15)-H(34)	119.033	119.057	119.259	119.181
88	H(34)-C(15)-C(16)	119.835	119.816	119.946	119.917
89	C(15)-C(16)-H(35)	120.743	120.864	121.399	121.684
90	C(15)-C(16)-C(11)	118.784	119.004	118.655	120.835
91	C(16)-C(11)-C(12)	120.586	120.345	121.001	120.835
92	H(35)-C(16)-C(11)	120.473	120.132	119.946	119.614

Tablo 3.66. 182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

	Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP
		6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
1	C(1)-N(49)	1.2771	1.2651	1.2946	1.3111
2	C(1)-N(50)	1.3846	1.3819	1.3911	1.3910
3	C(1)-C(18)	1.4939	1.4991	1.4988	1.4977
4	C(18)-C(19)	1.5129	1.5117	1.5116	1.5158
5	C(18)-H(39)	1.0838	1.0840	1.0949	1.0971
6	C(18)-H(40)	1.0838	1.0840	1.0954	1.0971
7	C(19)-C(20)	1.3855	1.3868	1.3918	1.3952
8	C(19)-C(24)	1.3854	1.3869	1.4005	1.4031
9	C(20)-H(41)	1.0726	1.0762	1.0864	1.0849
10	C(20)-C(21)	1.3818	1.3936	1.3959	1.3970

Tablo 3.66.'nın devamı

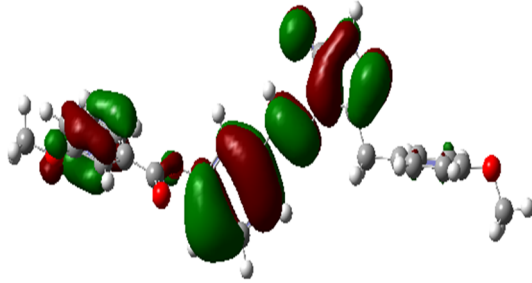
11	C(21)-H(42)	1.0706	1.0749	1.0827	1.0815
12	C(21)-C(22)	1.3811	1.3836	1.3962	1.3971
13	C(22)-O(56)	1.3882	1.3605	1.3641	1.3862
14	O(56)-C(25)	1.4506	1.4040	1.4179	1.4588
15	C(25)-H(45)	1.0827	1.0853	1.0956	1.0969
16	C(25)-H(46)	1.0778	1.0798	1.0886	1.0903
17	C(25)-H(47)	1.0827	1.0853	1.0957	1.0970
18	C(22)-C(23)	1.3811	1.3837	1.4004	1.4027
19	C(23)-H(43)	1.0706	1.0749	1.0843	1.0819
20	C(23)-C(24)	1.3818	1.3835	1.3853	1.3875
21	C(24)-H(44)	1.0726	1.0761	1.0862	1.0846
22	N(49)-N(48)	1.4270	1.3683	1.3793	1.4392
23	N(48)-H(26)	0.9919	0.9886	1.0053	1.0087
24	N(48)-C(2)	1.3539	1.3458	1.3682	1.3771
25	C(2)-O(52)	1.2187	1.1961	1.2158	1.2375
26	C(2)-N(50)	1.3964	1.3880	1.4205	1.4323
27	N(50)-N(51)	1.3979	1.3628	1.3687	1.4094
28	N(51)-C(3)	1.3669	1.2573	1.2847	1.2973
29	C(3)-H(27)	1.0701	1.0740	1.0866	1.0848
30	C(3)-C(4)	1.4716	1.4767	1.4666	1.4652
31	C(4)-C(5)	1.3884	1.3876	1.4004	1.4034
32	C(4)-C(9)	1.3866	1.3916	1.4039	1.4036
33	C(5)-H(28)	1.0657	1.0748	1.0823	1.0778
34	C(5)-C(6)	1.3808	1.3797	1.3906	1.3948
35	C(6)-O(53)	1.3956	1.3786	1.3937	1.4100
36	C(6)-C(7)	1.3815	1.3767	1.3893	1.3973
37	C(7)-H(29)	1.0694	1.0736	1.0840	1.0817
38	C(7)-C(8)	1.3817	1.3872	1.3957	1.3949
39	C(8)-H(30)	1.0713	1.0747	1.0849	1.0834
40	C(8)-C(9)	1.3811	1.3799	1.3869	1.3917
41	C(9)-H(31)	1.0695	1.0726	1.0830	1.0819
42	O(53)-C(10)	1.3574	1.3400	1.3731	1.3939
43	C(10)-O(54)	1.2048	1.1782	1.2019	1.2276
44	C(10)-C(11)	1.4787	1.4921	1.4892	1.4808
45	C(11)-C(12)	1.3772	1.3802	1.3926	1.3923
46	C(11)-C(16)	1.3885	1.3933	1.4026	1.4028
47	C(12)-H(32)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
48	C(12)-C(13)	1.3859	1.3902	1.3972	1.3986
49	C(13)-O(55)	1.3688	1.3455	1.3611	1.3825
50	C(13)-C(14)	1.3821	1.3851	1.3987	1.3998
51	C(14)-H(33)	1.0695	1.0726	1.0828	1.0815
52	C(14)-C(15)	1.3879	1.3901	1.3966	1.3990
53	C(15)-H(34)	1.0715	1.0749	1.0851	1.0836
54	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3873	1.3902
55	C(16)-H(35)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
56	O(55)-C(17)	1.4368	1.3977	1.4193	1.4602
57	C(17)-H(36)	1.0831	1.0849	1.0954	1.0968
58	C(17)-H(37)	1.0772	1.0785	1.0882	1.0899
59	C(17)-H(38)	1.0831	1.0850	1.0954	1.0968

Tablo 3.67. 182 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

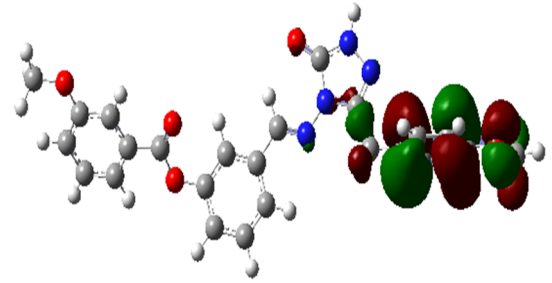
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.568	0.816	0.449	0.678
C2	0.782	1.250	0.583	0.941
C3	0.036	0.195	-0.054	0.110
C4	-0.043	-0.164	-0.023	-0.055
C5	-0.271	-0.246	-0.209	-0.212
C6	0.327	0.383	0.230	0.300
C7	-0.211	-0.254	-0.193	-0.192
C8	-0.208	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.205	-0.160	-0.173
C10	0.647	1.008	0.430	0.708
C11	-0.203	-0.246	-0.158	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.183
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.586	-0.502	-0.592	-0.515
C19	0.061	-0.041	0.077	0.041
C20	-0.215	-0.208	-0.190	-0.178
C21	-0.241	-0.247	-0.279	-0.214
C22	0.298	0.357	0.264	0.313
C23	-0.241	-0.247	-0.225	-0.189
C24	-0.215	-0.209	-0.182	-0.177
C25	-0.383	-0.278	-0.460	-0.332
H26	0.407	0.405	0.372	0.353
H27	0.306	0.331	0.261	0.263
H28	0.240	0.324	0.229	0.247
H29	0.238	0.266	0.209	0.206
H30	0.227	0.251	0.200	0.195
H31	0.242	0.270	0.212	0.207
H32	0.264	0.305	0.230	0.230
H33	0.242	0.255	0.216	0.196
H34	0.225	0.251	0.199	0.195
H35	0.244	0.274	0.213	0.274
H36	0.208	0.200	0.211	0.200
H37	0.233	0.239	0.233	0.239
H38	0.207	0.200	0.211	0.200
H39	0.264	0.269	0.246	0.269
H40	0.265	0.269	0.248	0.269
H41	0.214	0.243	0.187	0.243
H42	0.227	0.256	0.208	0.256
H43	0.227	0.256	0.202	0.256
H44	0.215	0.243	0.187	0.243
H45	0.197	0.196	0.210	0.196
H46	0.212	0.224	0.228	0.224
H47	0.198	0.196	0.208	0.196
N48	-0.592	-0.760	-0.497	-0.760
N49	-0.246	-0.382	-0.186	-0.382
N50	-0.478	-0.855	-0.373	-0.855
N51	-0.273	-0.362	-0.205	-0.362
O52	-0.532	-0.671	-0.390	-0.671

Tablo 3.67.'nin devamı

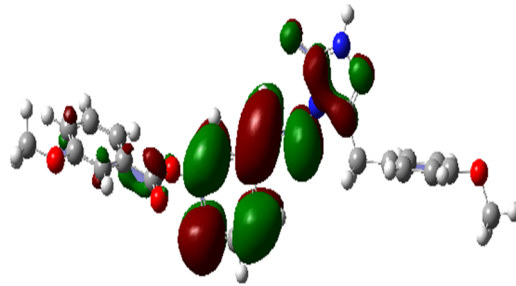
O53	-0.509	-0.815	-0.372	-0.815
O54	-0.436	-0.616	-0.317	-0.616
O55	-0.461	-0.735	-0.336	-0.735
O56	-0.489	-0.703	-0.341	-0.703



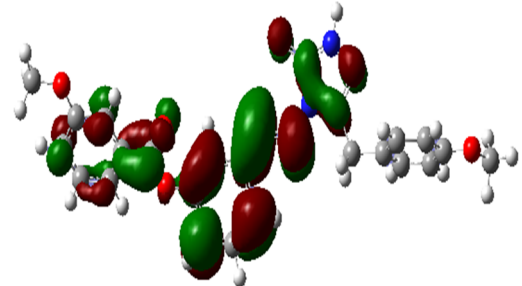
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32149 \text{ Hatree}$



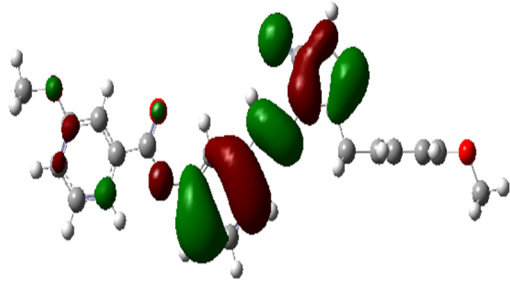
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22164 \text{ Hatree}$



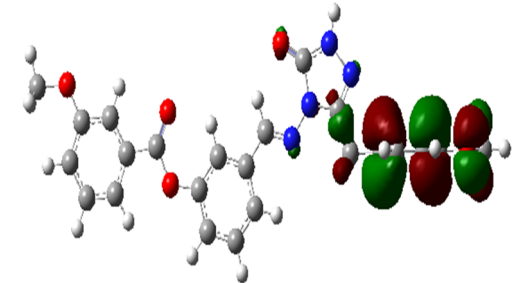
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07635 \text{ Hatree}$



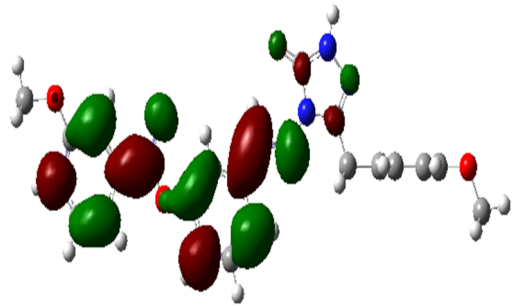
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06571 \text{ Hatree}$



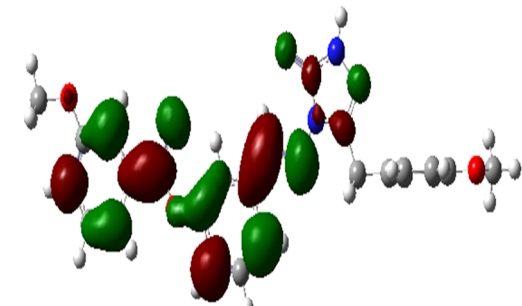
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31935 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,21308 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,07950 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,05737 \text{ Hatree}$

Şekil 3.28. 182 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

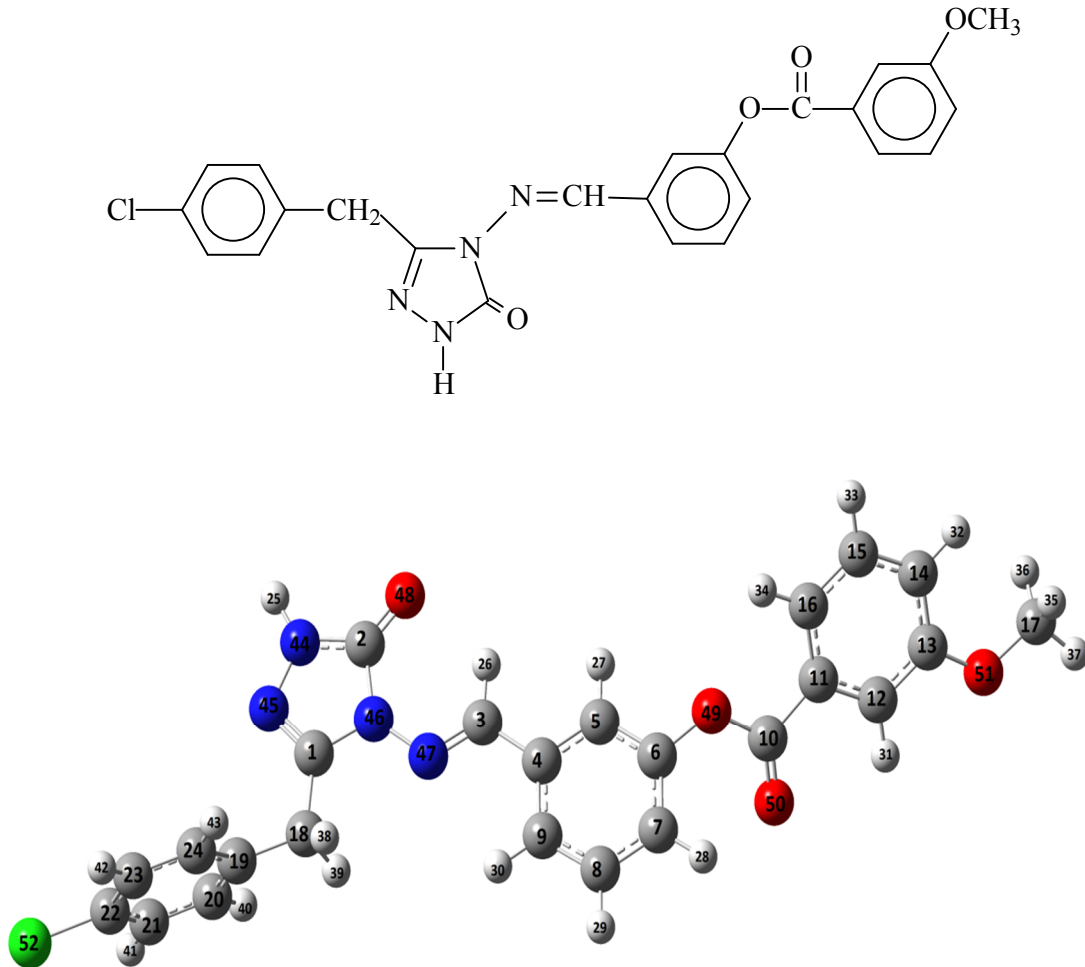
Tablo 3.68. 182 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.5141	1.1058	1.1601	0.6689
μ_y	6.3709	6.3360	4.7352	4.2588
μ_z	1.8664	1.9204	1.4736	1.3735
μ_{Toplam}	6.8091	6.7124	5.0931	4.5245

Tablo 3.69. 182 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1551.904	-1542.934	-1561.354	-1552.401

3.2.8. 3-p-Klorobenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (183):



Şekil 3.29. 183 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.70. 183 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	145.91	151.30	153.18	-5.39	-7.27	140.80	143.26	5.11	2.65
C2	151.15	152.48	153.42	-1.33	-2.27	141.62	142.58	9.53	8.57
C3	151.02	152.25	152.73	-1.23	-1.71	142.60	143.07	8.42	7.95
C4	135.18	140.14	140.24	-4.96	-5.06	126.38	126.3	8.80	8.88
C5	124.88	127.17	127.58	-2.29	-2.70	118.08	118.44	6.80	6.44
C6	152.19	157.67	157.35	-5.48	-5.16	142.14	141.3	10.05	10.89
C7	125.92	128.52	128.25	-2.60	-2.33	118.94	119.02	6.98	6.90
C8	130.09	131.33	132.14	-1.24	-2.05	120.43	121.15	9.66	8.94
C9	120.22	123.13	123.63	-2.91	-3.41	114.13	114.92	6.09	5.30
C10	164.32	166.33	167.75	-2.01	-3.43	151.11	152.91	13.21	11.41
C11	130.27	134.79	133.90	-4.52	-3.63	122.76	121.78	7.51	8.49
C12	122.15	124.68	122.87	-2.53	-0.72	115.22	113.25	6.93	8.90
C13	159.45	165.21	165.45	-5.76	-6.00	149.53	149.41	9.92	10.04
C14	114.40	114.95	117.64	-0.55	-3.24	104.06	106.57	10.34	7.83
C15	130.19	131.73	133.24	-1.54	-3.05	120.83	122.37	9.36	7.82
C16	120.31	124.21	124.26	-3.90	-3.95	113.40	113.71	6.91	6.60
C17	55.47	53.56	54.11	1.91	1.36	35.29	35.76	20.18	19.71
C18	30.43	34.62	34.07	-4.19	-3.64	17.41	16.99	13.02	13.44
C19	131.40	137.32	138.91	-5.92	-7.51	125.47	127.11	5.93	4.29
C20	130.77	134.74	135.52	-3.97	-4.75	123.29	123.86	7.48	6.91
C21	128.30	131.61	131.85	-3.31	-3.55	120.92	121.15	7.38	7.15
C22	134.72	146.20	144.73	-11.48	-10.01	128.97	127.23	5.75	7.49
C23	128.30	131.74	131.98	-3.44	-3.68	120.97	121.16	7.33	7.14
C24	130.77	134.66	135.44	-3.89	-4.67	123.32	123.86	7.45	6.91
H25	12.05	6.20	6.67	5.85	5.38	5.39	5.80	6.66	6.25
H26	9.75	9.59	9.56	0.16	0.19	9.01	8.98	0.74	0.77
H27	7.46	6.80	6.98	0.66	0.48	6.66	6.87	0.80	0.59
H28	7.66	7.37	7.43	0.29	0.23	6.66	6.85	1.00	0.81
H29	7.61	7.13	7.35	0.48	0.26	6.85	7.11	0.76	0.50
H30	7.78	7.73	7.85	0.05	-0.07	7.57	7.74	0.21	0.04
H31	7.74	7.53	7.36	0.21	0.38	7.44	7.24	0.30	0.50
H32	7.34	6.41	6.79	0.93	0.55	6.06	6.47	1.28	0.87
H33	7.56	7.07	7.32	0.49	0.24	6.79	7.09	0.77	0.47
H34	7.73	7.48	7.58	0.25	0.15	7.19	7.32	0.54	0.41
H35	3.88	3.18	3.35	0.70	0.53	2.51	2.71	1.37	1.17
H36	3.88	3.18	3.36	0.70	0.52	2.51	2.72	1.37	1.16
H37	3.88	3.68	3.76	0.20	0.12	3.08	3.15	0.80	0.73
H38	4.09	3.53	3.70	0.56	0.39	2.93	3.14	1.16	0.95
H39	4.09	3.57	3.72	0.52	0.37	2.92	3.12	1.17	0.97
H40	7.37	6.84	7.08	0.53	0.29	6.59	6.86	0.78	0.51
H41	7.35	6.86	7.01	0.49	0.34	6.63	6.79	0.72	0.56
H42	7.35	6.85	6.99	0.50	0.36	6.63	6.79	0.72	0.56
H43	7.37	6.83	7.07	0.54	0.30	6.59	6.86	0.78	0.51

Tablo 3.71. 183 Bileşinin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneyisel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	145.91	115.91	117.21	30.00	28.70	113.16	115.13	32.75	30.78
C2	151.15	115.45	115.90	35.70	35.25	114.74	115.23	36.41	35.92
C3	151.02	117.71	117.78	33.31	33.24	115.66	115.83	35.36	35.19
C4	135.18	100.43	99.89	34.75	35.29	93.10	92.49	42.08	42.69
C5	124.88	90.47	89.72	34.41	35.16	84.30	83.53	40.58	41.35
C6	152.19	120.83	120.79	31.36	31.40	111.09	110.91	41.10	41.28
C7	125.92	88.09	88.99	37.83	36.93	83.78	84.63	42.14	41.29
C8	130.09	93.56	94.79	36.53	35.30	88.77	90.01	41.32	40.08
C9	120.22	87.23	87.58	32.99	32.64	82.91	83.42	37.31	36.80
C10	164.32	133.12	133.78	31.20	30.54	128.41	129.24	35.91	35.08
C11	130.27	96.54	95.74	33.73	34.53	90.18	89.31	40.09	40.96
C12	122.15	88.39	86.86	33.76	35.29	85.50	83.69	36.65	38.46
C13	159.45	124.08	124.18	35.37	35.27	115.71	115.4	43.74	44.05
C14	114.40	83.08	85.11	31.32	29.29	78.19	80.34	36.21	34.06
C15	130.19	94.38	95.67	35.81	34.52	88.93	90.44	41.26	39.75
C16	120.31	88.19	88.23	32.12	32.08	83.95	84.43	36.36	35.88
C17	55.47	31.41	32.05	24.06	23.42	15.57	16.18	39.90	39.29
C18	30.43	13.50	13.06	16.93	17.37	-0.91	-1.22	31.34	31.65
C19	131.40	99.20	100.62	32.20	30.78	93.57	95.17	37.83	36.23
C20	130.77	97.53	98.26	33.24	32.51	91.72	92.32	39.05	38.45
C21	128.30	93.60	93.69	34.70	34.61	89.17	89.29	39.13	39.01
C22	134.72	111.87	110.92	22.85	23.80	99.50	98.33	35.22	36.39
C23	128.30	93.60	93.69	34.70	34.61	89.17	89.29	39.13	39.01
C24	130.77	97.54	98.26	33.23	32.51	91.70	92.3	39.07	38.47
H25	12.05	5.51	6.01	6.54	6.04	4.55	4.96	7.50	7.09
H26	9.75	9.35	9.28	0.40	0.47	8.81	8.72	0.94	1.03
H27	7.46	7.76	7.66	-0.30	-0.20	7.38	7.26	0.08	0.20
H28	7.66	5.74	6.03	1.92	1.63	5.72	6.04	1.94	1.62
H29	7.61	6.06	6.38	1.55	1.23	5.88	6.25	1.73	1.36
H30	7.78	6.84	6.99	0.94	0.79	6.76	6.95	1.02	0.83
H31	7.74	6.68	6.50	1.06	1.24	6.81	6.56	0.93	1.18
H32	7.34	5.23	5.67	2.11	1.67	4.94	5.44	2.40	1.90
H33	7.56	5.98	6.30	1.58	1.26	5.74	6.13	1.82	1.43
H34	7.73	6.52	6.76	1.21	0.97	6.49	6.70	1.24	1.03
H35	3.88	2.73	2.97	1.15	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H36	3.88	2.73	2.97	1.15	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H37	3.88	3.39	3.52	0.49	0.36	2.73	2.82	1.15	1.06
H38	4.09	2.82	3.02	1.27	1.07	2.06	2.33	2.03	1.76
H39	4.09	2.82	3.02	1.27	1.07	2.05	2.32	2.04	1.77
H40	7.37	5.95	6.26	1.42	1.11	5.73	6.09	1.64	1.28
H41	7.35	5.77	5.96	1.58	1.39	5.56	5.77	1.79	1.58
H42	7.35	5.77	5.96	1.58	1.39	5.56	5.77	1.79	1.58
H43	7.37	5.95	6.26	1.42	1.11	5.73	6.09	1.64	1.28

Tablo 3.72. 183 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(35), τ CCCN(23), τ COCC(18)	5	4
2	τ CNNC(25), τ COCC(61), τ CCCC(11), τ NCCC(14)	6	8
3	τ CCCC(12), τ COCC(32), τ CCOC(47)	14	10
4	δ CCN(10), τ CCOC(30), τ NCCC(24), τ CCCC(36)	16	15
5	τ CNNC(15), τ CCOC(16), τ CCCC(13), δ NCC(12)	27	27
6	τ CNNC(12), τ CCOC(11), τ CCCC(33), τ NCCC(27)	29	28
7	τ CCCC(18)	43	48
8	τ CCOC(11), τ CCNN(13)	56	54
9	δ COC(13), τ CCCN(12), τ CCNN(14)	62	62
10	δ CCO(13), δ COC(13)	65	66
11	τ HCOC(11), τ CCCC(13), τ COCC(64)	70	83
12	τ CNNC(29), τ NNCC(20), τ NCCC(14), τ CCCN(11)	106	109
13	δ NCC(19)	124	118
14	δ CCC(15), τ CCCC(24), τ CCCCC(20)	147	139
15	τ CNNC(20), τ NNCC(17), τ NCNC(10), τ NCCC(12)	152	155
16	τ CCCN(12)	163	165
17	τ CCCC(21)	178	172
18	τ CCCC(20)	195	190
19	τ HCOC(20), τ CCCC(27), τ COCC(12), τ OCCC(22), τ CCCN(20)	223	213
20	δ NCN(12), τ HCOC(20), τ CCCC(30), τ OCCC(11)	225	222
21	τ CCCN(40), τ NNCC(21), δ CNN(11), δ CCC(10), δ NNC(11)	228	238
22	δ CICC(47), τ CNNC(12), δ CCC(10)	255	248
23	δ COC(27), τ CCCN(17)	267	258
24	τ HCOC(41), τ CCCC(26), δ CICC(11), τ HNNC(20), τ NNCC(39)	288	278
25	τ HNNC(18), τ HCCC(11), τ CNNC(22), τ NNCC(19), τ CCCC(24), τ HCOC(40)	292	286
26	δ COC(20), τ CCCN(12), δ OCO(14)	307	292
27	δ OCO(13), δ COC(17)	311	300
28	τ CCCC(19), τ CCCCC(33)	326	310
29	τ CCCN(10), τ CCNN(35)	361	346
30	δ CCC(22), δ CICC(29)	379	366
31	δ NCN(10), δ NNC(14), δ OCN(11), δ COC(12)	401	378
32	ν CIC(27), δ OCN(13), δ CCC(10)	433	414
33	τ HCCC(17), τ CCCC(81)	435	415
34	δ CCC(38), τ HNNC(26), δ COC(11)	439	429
35	τ CCCC(47)	460	440
36	τ HNNC(55), τ ONNC(10)	462	454
37	τ HNNC(26), δ CCC(38), δ COC(11), τ HCCC(11), τ CCCN(18)	481	457
38	τ HNNC(12), τ HCCC(11), δ COC(10)	487	465
39	δ CCO(10), δ CCC(20)	504	491
40	τ HCCC(23), τ CCCC(18), τ CCCCC(22)	527	501
41	δ COC(13), τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCOC(10), τ OCCC(36), δ CCC(13)	581	551
42	δ CCC(18), δ COC(16), τ OCCC(15)	582	566
43	δ CCC(12)	596	577
44	δ OCN(10), δ CCO(10)	609	590
45	τ CCCN(18), τ COCC(11), τ CCOC(11)	625	598
46	δ CCC(27), δ OCN(14)	639	618
47	δ CCC(46)	662	643
48	τ HNNC(10), τ NNCC(11), τ NCNC(35), ν CC(12), ν CIC(21), δ CCC(15)	687	656
49	ν CC(11), ν CIC(22), δ CCC(19), τ HNNC(11), τ HCCC(12)	689	664
50	τ HCCC(12), δ CCC(20)	706	683
51	τ HCCC(28), τ CCCC(17)	716	683
52	τ HCCC(20), τ CCCC(40)	719	691
53	τ HCCC(29), τ CCCC(20), τ CCCN(19)	725	693
54	τ CCCC(14)	767	738
55	τ ONNC(76)	802	738

Tablo 3.72.'nin devamı

56	τ HCCC(24), τ OCOC(45)	808	753
57	τ HCCC(18), τ CNNC(10), τ ONNC(83)	813	770
58	τ HCCC(34), ν NC(12), ν CC(11), δ CNN(12)	824	786
59	ν NC(15), δ CNN(32), τ HCCC(32)	832	792
60	τ HCCC(51), τ OCOC(25), ν CC(15)	851	802
61	ν CC(14), τ HCCC(50), τ OCOC(28)	861	819
62	τ HCCC(99)	864	821
63	δ OCO(17), τ HCCC(99)	886	822
64	δ NCN(15), δ CCN(12)	887	837
65	τ HCCC(71), τ CCCC(15)	909	859
66	ν OC(19), τ HCCC(18)	926	880
67	τ HCCC(40), τ CCCC(10)	966	891
68	τ HCCC(38), τ CCOC(10)	967	894
69	τ HCCC(49), ν CC(11), δ HCC(31), τ CCCC(10)	973	913
70	τ HCCC(40)	982	918
71	δ HCC(32), τ HCCC(30), τ CCCC(11), ν OC(10), ν CC(11)	985	931
72	τ HCCC(84), τ CCCC(13)	995	944
73	τ HCCC(71), τ CCCC(18)	1019	946
74	ν CC(29), δ CCC(24)	1027	960
75	τ HCCC(84), τ CCCC(14)	1033	962
76	τ HCCC(56), ν CC(19), δ CCC(39)	1035	969
77	ν CC(28), δ CCC(29), τ HCCC(46)	1044	1002
78	τ HCNN(88), τ HCCC(57), τ CCCC(11)	1049	1005
79	ν CC(25), δ CCC(61), δ HCC(10)	1055	1007
80	δ CCC(43), δ NNC(15), τ HCNN(86)	1083	1025
81	δ CCC(13), δ NNC(38), δ CNN(14)	1089	1026
82	ν OC(62), ν CC(59), δ HCC(20)	1117	1062
83	ν OC(41), δ HCC(17), δ CCC(10)	1126	1087
84	ν NC(12), ν NN(35), ν CC(12), δ HCC(25)	1129	1089
85	ν CC(54), ν ClC(19), δ HCC(14), ν OC(11)	1137	1092
86	ν CC(48), δ HCC(22), ν OC(11), ν ClC(19)	1138	1104
87	ν CC(30), δ HCC(34)	1142	1109
88	ν CC(19), δ HCC(55)	1151	1124
89	δ HCC(25), ν NC(10), ν NN(30), δ HNN(10)	1159	1158
90	δ HCH(25), τ HCOC(26), ν CC(36)	1168	1171
91	ν CC(21), δ HCC(30), τ HCCC(12)	1191	1185
92	ν CC(13), δ HCC(48)	1211	1187
93	ν CC(22), δ HCC(70), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1197
94	δ HCH(13), τ HCOC(22), ν CC(25), δ HCC(64)	1235	1199
95	ν NC(19), ν NN(16), δ OCN(10), δ HCC(11)	1251	1204
96	ν CC(11), δ HCC(39), τ HCCC(26)	1251	1207
97	ν CC(20), δ HCC(14), τ HCCC(11)	1261	1217
98	ν OC(10), ν CC(11), δ HCC(12)	1267	1223
99	ν CC(14), ν NC(25), ν NN(13), δ CNN(14)	1276	1254
100	ν NN(11), τ HCCC(11), ν CC(12), δ HCC(48), τ HCCC(17)	1288	1275
101	ν CC(23), ν OC(16)	1312	1285
102	δ HCC(24), ν OC(16), ν CC(23)	1326	1305
103	δ HCC(24), ν NC(10), δ CNN(16), τ HCCC(23)	1351	1310
104	ν CC(51), δ HCC(31), ν OC(18)	1368	1311
105	δ HCC(26), τ HCCC(21)	1373	1323
106	ν CC(11), δ HCC(74)	1377	1335
107	ν CC(20), δ HCC(80)	1383	1343
108	ν CC(62), δ HCC(17), ν NC(11), ν NN(16), δ CNN(16), τ HCCC(14)	1410	1349
109	δ HNN(29), δ HCN(47), τ HCCC(15)	1464	1391
110	δ HNN(43), δ HCN(19), ν CC(30), δ HCC(37)	1484	1401
111	ν CC(30), δ HCC(38), ν OC(12), δ HNN(64)	1485	1431

Tablo 3.72.'nin devamı

112	v CC(23), v NC(13)	1507	1441
113	v CC(28), δ HCC(14)	1525	1462
114	v CC(18), δ HCN(11), δ HCH(74)	1535	1467
115	δ HCH(88), δ HCN(17), τ HCCC(15)	1542	1477
116	δ HCH(60)	1546	1480
117	δ HCH(74), τ HCOC(13)	1562	1498
118	δ HCH(71), τ HCOC(12)	1570	1509
119	δ HCC(41), δ HCH(16), δ CCC(13)	1574	1511
120	δ HCC(24), δ CCC(10)	1577	1514
121	v CC(12), δ HCC(60), δ CCC(11)	1587	1519
122	v CC(29), δ HCC(11), δ CCC(12)	1679	1603
123	v CC(33), δ CCC(15)	1691	1607
124	δ HCH(60), v CC(33), δ HCC(11), δ CCC(11)	1696	1610
125	v NC(28), v CC(46), δ HCC(21)	1713	1628
126	v NC(17), v CC(21)	1717	1632
127	v NC(14), v CC(35), δ HCC(10)	1719	1635
128	v CC(63), v NC(42)	1772	1638
129	v NC(44), v CC(11)	1801	1653
130	v OC(88), v NC(12)	1865	1784
131	v OC(88), v NC(12)	1903	1792
132	v CH(91)	3030	2982
133	v CH(99)	3066	3016
134	v CH(50)	3086	3040
135	v CH(99)	3096	3041
136	v CH(46)	3149	3116
137	v CH(46)	3182	3137
138	v CH(46)	3183	3139
139	v CH(70)	3188	3140
140	v CH(46)	3191	3146
141	v CH(41)	3200	3149
142	v CH(66)	3216	3158
143	v CH(73)	3216	3172
144	v CH(76)	3217	3173
145	v CH(41)	3219	3176
146	v CH(67)	3220	3178
147	v CH(41)	3226	3185
148	v CH(56)	3236	3195
149	v CH(97)	3239	3203
150	v NH(100)	3769	3654

Tablo 3.73. 183 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(12), τ NCNC(24), τ CCCC(26)	5	5
2	τ CNNC(13), τ CCCC(37), τ CCCN(13)	7	14
3	δ CCC(10), δ CNN(16), δ CCN(16), τ CCCC(13), τ CCOC(18), τ COCC(51)	17	17
4	τ CCOC(28), τ COCC(51), τ CCCC(11)	18	18
5	τ NCNC(25), τ CCCC(26), τ CCOC(17)	22	21
6	τ CNNC(11), τ CCCC(11), τ CCOC(24), τ CCCN(16)	31	34
7	δ COC(21), τ CCCC(18)	40	39
8	τ NCNC(10), τ CCNN(41), τ COCC(24)	63	63
9	δ CNN(11), δ CCN(12), τ CCCC(13)	64	64
10	τ HCOC(11), τ COCC(56), τ CCNN(12)	67	78
11	τ CCCC(22), τ COCC(27), δ CCO(20), δ CCC(13)	87	94
12	δ CCC(13), δ CCO(20), τ CCCC(18), τ COCC(13)	95	95
13	τ CNNC(22), τ NCNC(17), τ CCCN(12), τ NNCC(23)	120	120

Tablo 3.73.'ün devamı

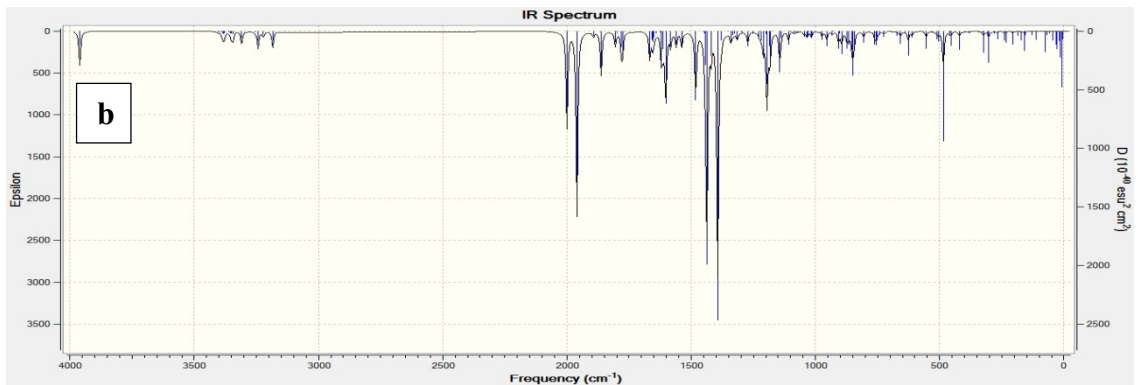
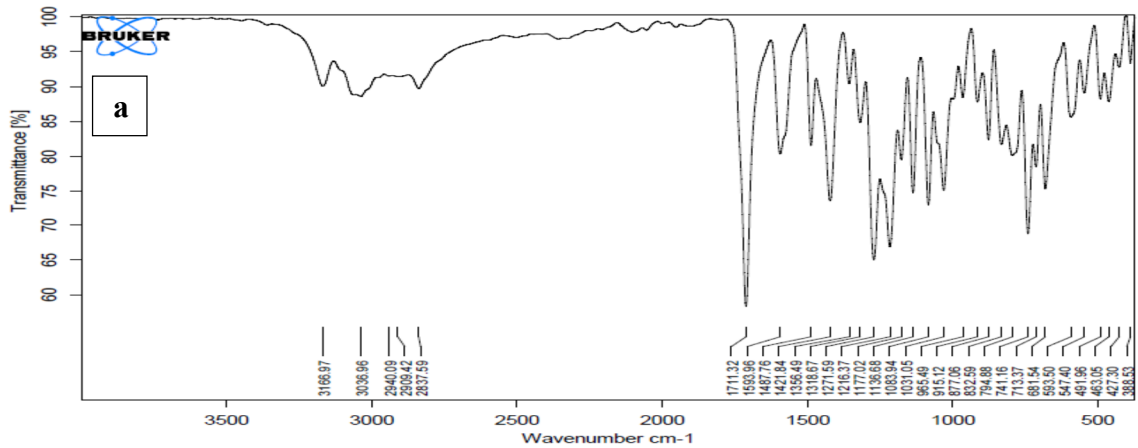
14	δ CCC(14), τ CCCC(30), τ CCCCC(20)	142	136
15	τ CNNC(20), τ CCCC(10), τ CCNN(13), τ CCCN(17)	165	160
16	τ CCCN(31), τ CCCC(23)	176	174
17	ν CC(10), δ CNN(11), δ COC(11)	183	184
18	δ NCC(12), δ CCN(10), δ COC(30)	196	197
19	τ HCOC(44), τ COCC(10), τ CCCC(13), τ OCCC(18)	210	208
20	δ CNN(11), δ CCO(10)	215	214
21	δ CICC(60)	236	230
22	τ CCCN(36), τ CCCC(13), τ CCNN(15)	263	257
23	δ COC(39)	265	266
24	τ HCOC(18), τ CCCC(31), τ OCCC(10)	273	268
25	τ CNNC(14), τ CCCN(27), τ CCNN(25), τ OCCC(10)	280	286
26	τ CCCC(16), τ CCCCC(32), δ COC(17)	310	304
27	δ COC(17), τ CCCCC(30), τ CCCC(18)	319	311
28	τ NCNC(31), τ NNCC(19)	338	323
29	δ CCC(23), δ CICC(22), τ HCCC(11), δ COC(18), δ OCO(16)	356	349
30	δ OCO(19), δ CCC(22), δ CICC(19), τ HCCC(12)	360	350
31	τ CCCN(10), τ CCNN(29), τ NNCC(15)	370	354
32	ν CIC(37), δ OCN(14)	405	396
33	τ HCCC(17), τ CCCC(80), δ CCC(17)	422	416
34	τ HCCC(19), τ CCCC(80)	433	416
35	δ CCC(23), δ COC(10)	438	434
36	τ CCCC(48)	464	446
37	τ HCCC(20), τ CCCN(19), τ CCOC(16), τ CCCC(18)	485	467
38	δ CCC(20)	491	485
39	τ HCCC(24), τ CCCC(24), τ CCCCC(21)	520	492
40	τ HNNC(89), δ CCC(17), δ COC(19)	557	542
41	τ HCCC(10), τ CCCC(16), τ OCOC(11), τ OCCC(32), δ OCN(18), δ CNN(13), δ NNC(20)	572	551
42	δ CCC(13), δ COC(21), τ OCOC(13), τ OCCC(21), τ HCCC(12)	573	553
43	δ OCN(17), δ NNC(21), τ HNNC(95)	584	559
44	δ CCO(16), δ COC(12), δ CCC(22)	591	582
45	ν NN(13), δ CCC(25), δ CNN(10)	610	597
46	τ CCCN(19), τ COCC(19), τ CCOC(17), τ OCCC(19)	637	608
47	ν CC(13), ν CIC(15), δ CCC(20), τ NNCC(15), τ NCNC(42), τ CCNN(12)	653	638
48	ν CC(13), ν CIC(15), δ CCC(20), τ NNCC(15), τ NCNC(42), τ CCNN(12)	661	644
49	δ CCC(41), τ NNCC(12), τ CCNN(12), τ NCNC(34)	670	650
50	ν CC(12), δ CCC(31)	694	682
51	τ CCCC(31)	705	685
52	τ HCCC(31), τ CCCC(18)	727	702
53	τ HCCC(44), τ COCC(10), τ CCOC(15), τ CCCN(15)	737	710
54	τ CCCC(14), ν NN(11)	739	722
55	τ ONNC(78), ν NC(13), δ CNN(28)	770	733
56	τ HCCC(13), τ OCOC(54)	784	744
57	ν NC(10), δ CNN(10), ν CC(12), τ HCCC(16), τ CCCC(16)	786	754
58	δ NCN(13), δ NCC(12), τ HCCC(12), τ CCCC(10), δ OCO(26), τ ONNC(74)	792	760
59	ν CC(10), ν OC(12), δ OCO(27), τ ONNC(74)	793	771
60	ν NC(10), δ CCN(16)	820	800
61	ν CC(11), δ CCC(11), τ HCCC(12), δ CCN(15)	822	805
62	τ HCCC(33), τ CCOC(15)	861	809
63	τ HCCC(63), τ CCCC(10), τ OCOC(10)	865	811
64	τ HCCC(100), ν OC(20), ν CC(13)	876	826
65	τ HCCC(99), τ CCCC(11)	895	849
66	ν CC(10), ν OC(18), τ HCCC(55), τ CCCC(12)	912	858
67	δ HCC(33), τ HCCC(30), ν CC(13)	933	913
68	τ HCCC(30), HCC(33), ν CC(13)	939	920

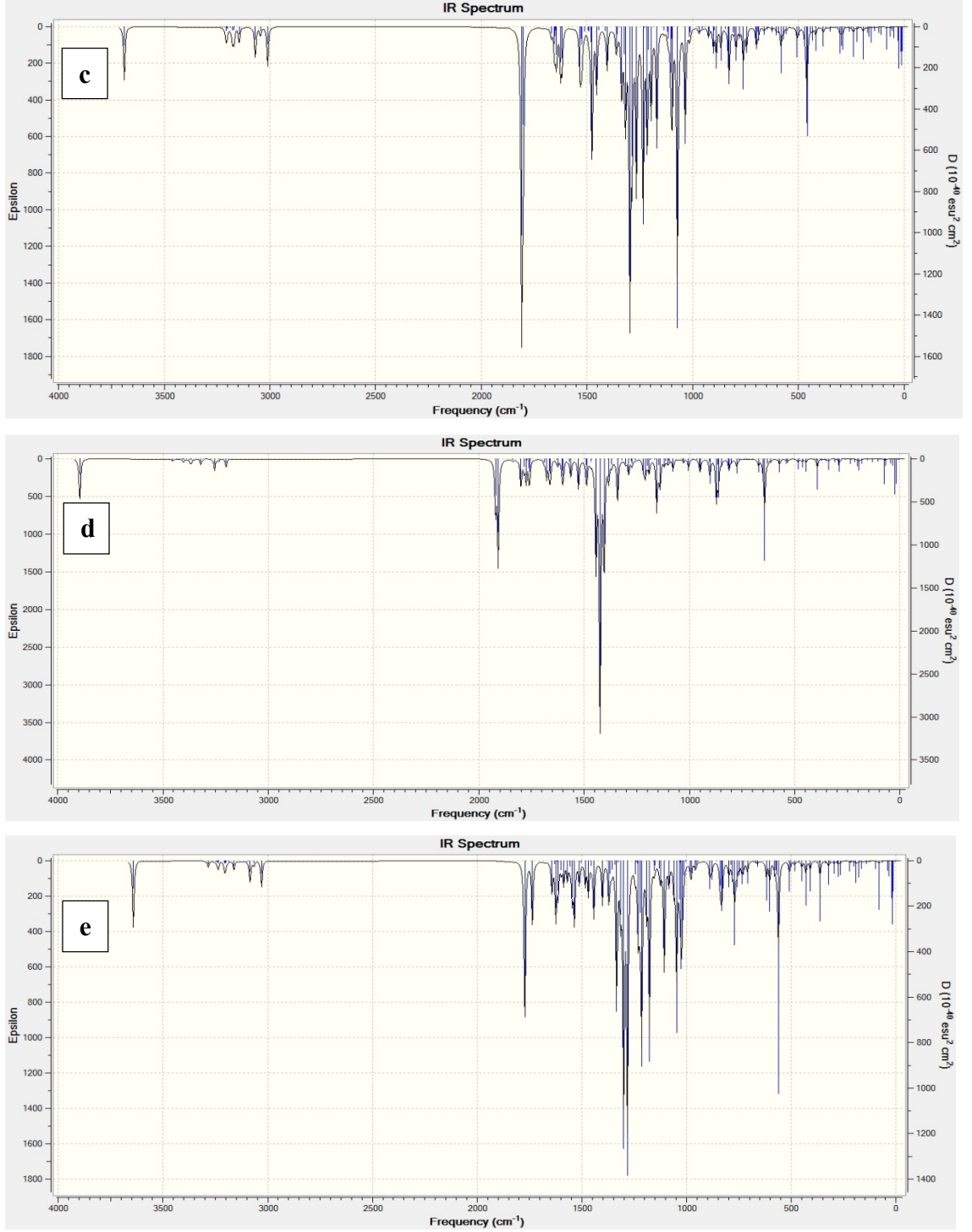
Tablo 3.73.'ün devamı

69	τ HCCC(49), δ NCC(41)	979	924
70	ν CC(11), δ CCC(11), τ HCCC(31)	995	925
71	τ HCCC(27), τ CCCC(13)	997	944
72	δ NCN(15), δ NCC(39), δ CCC(13), ν CC(41)	1002	948
73	τ HCCC(60), τ CCCC(10), ν CC(17), δ CCC(26)	1011	968
74	τ HCCC(84), τ CCCC(14)	1017	970
75	τ HCCC(26), τ CCOC(12), ν NC(31), δ CNN(12)	1035	978
76	ν CC(21), ν OC(21), δ CCC(53)	1041	985
77	ν NC(35), δ CNN(10), τ HCCC(17), τ HCNN(13)	1042	990
78	τ HCCC(57), ν NC(26), ν NN(15), ν OC(56)	1050	994
79	τ HCCC(82), τ CCCC(17)	1059	995
80	ν CC(29), δ CCC(18), τ HCCC(82), τ CCCC(17)	1060	998
81	ν OC(35), δ CCC(15), τ HCCC(62)	1074	1012
82	δ CCC(63), τ HCCC(47)	1078	1024
83	τ HCNN(84), τ HCOC(28), δ HCH(16), δ HCC(12), ν CC(61), ν ClC(15)	1082	1046
84	ν CC(60), ν ClC(14), δ HCC(18)	1090	1067
85	ν OC(12), δ HCC(17), δ CCC(12)	1099	1069
86	ν CC(36), δ HCC(20)	1100	1086
87	ν CC(32), δ HCC(20), τ HCNN(74)	1107	1092
88	ν CC(45), δ HCC(47)	1107	1112
89	ν NC(26), ν NN(15), ν OC(56), ν CC(13)	1142	1115
90	δ HCH(24), τ HCOC(26), ν CC(19)	1155	1118
91	ν OC(13), δ HCC(13), ν CC(19), τ HCOC(26)	1156	1136
92	ν CC(61), δ HCH(16), τ HCOC(28), δ HCC(16), τ HCCC(13)	1158	1149
93	ν CC(27), ν OC(12), δ HCC(16), τ HCCC(13)	1158	1172
94	ν NC(10), ν NN(12), δ NNC(11), δ HCC(21)	1171	1180
95	ν CC(10), δ HCC(36), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1184	1188
96	ν CC(21), δ HCC(14), δ CCC(12)	1198	1191
97	ν CC(16), δ HCC(69), τ HCCC(25)	1214	1199
98	ν CC(16), δ HCC(60), τ HCCC(25)	1218	1199
99	ν CC(14), ν OC(11), δ HCC(41)	1219	1202
100	ν CC(14), ν OC(12), δ HCC(14)	1245	1238
101	ν CC(13), ν OC(10), ν NN(13), ν NC(12), δ NNC(18), δ HCC(79)	1257	1255
102	ν CC(17), ν NC(11), δ HCN(10), τ HCCC(18), HCC(45)	1260	1270
103	ν CC(60), δ HCC(14), ν OC(42)	1276	1283
104	ν CC(30), τ HCCC(11), ν OC(23), δ HCC(10)	1294	1287
105	ν CC(32), δ HCC(13), ν NC(12), τ HCCC(28), δ HCN(11)	1312	1294
106	ν CC(26), δ HCC(40)	1334	1309
107	δ HNN(79), δ HCC(74)	1352	1318
108	δ HCC(74), δ HNN(78)	1355	1324
109	δ HCC(79), ν NN(13), δ NNC(18)	1360	1335
110	ν CC(10), δ HCN(33), τ HCCN(36)	1387	1353
111	ν NC(12), δ HCN(26)	1420	1392
112	ν CC(26), δ HCC(42)	1427	1404
113	ν CC(17), δ HCC(10), δ HCN(18)	1453	1418
114	ν CC(30), δ HCC(15)	1458	1432
115	δ HCC(10), δ HCH(91)	1477	1452
116	δ HCH(86)	1483	1460
117	δ HCC(46)	1508	1482
118	δ HCC(25), ν CC(21)	1513	1483
119	ν CC(11), δ HCC(65)	1524	1492
120	δ HCH(76), τ HCOC(11)	1525	1502
121	δ HCH(74), τ HCOC(10)	1534	1514
122	ν NC(54), ν CC(27), δ HCC(12), δ CCC(12)	1593	1531
123	ν NC(49), ν CC(21), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1543
124	ν CC(35), δ HCC(16), δ CCC(12)	1600	1557

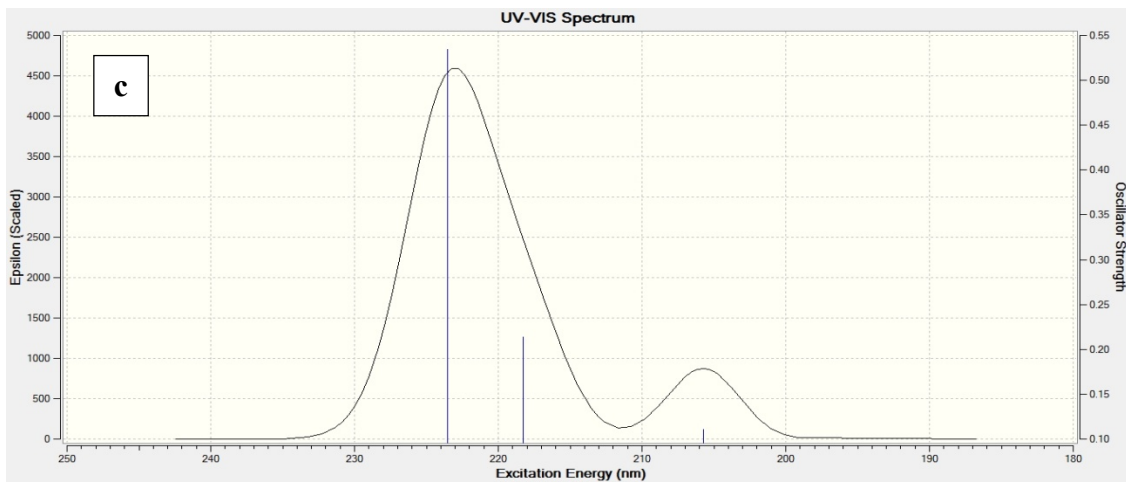
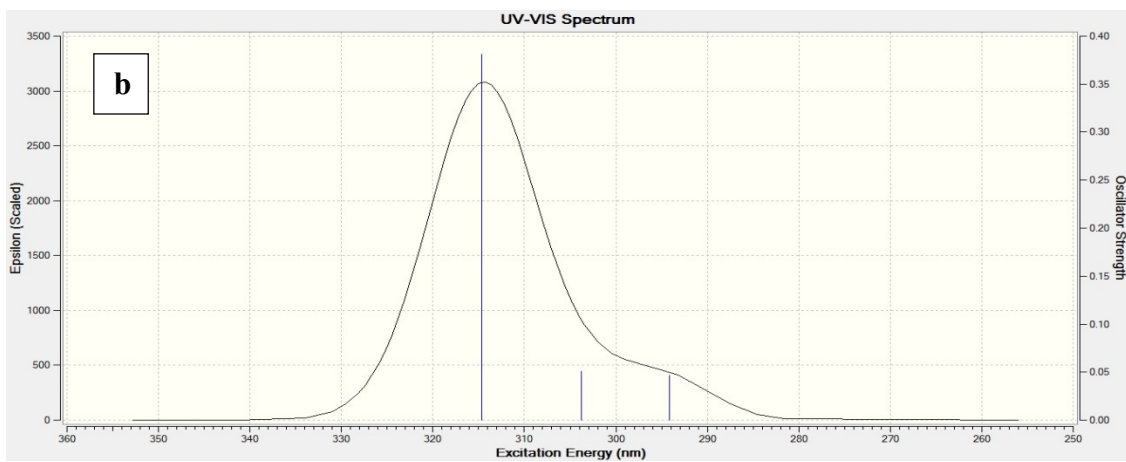
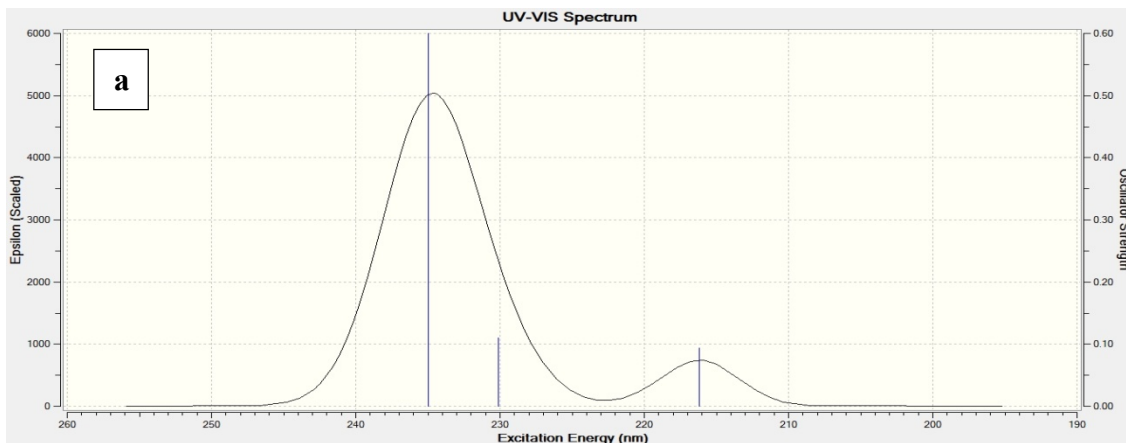
Tablo 3.73.'ün devamı

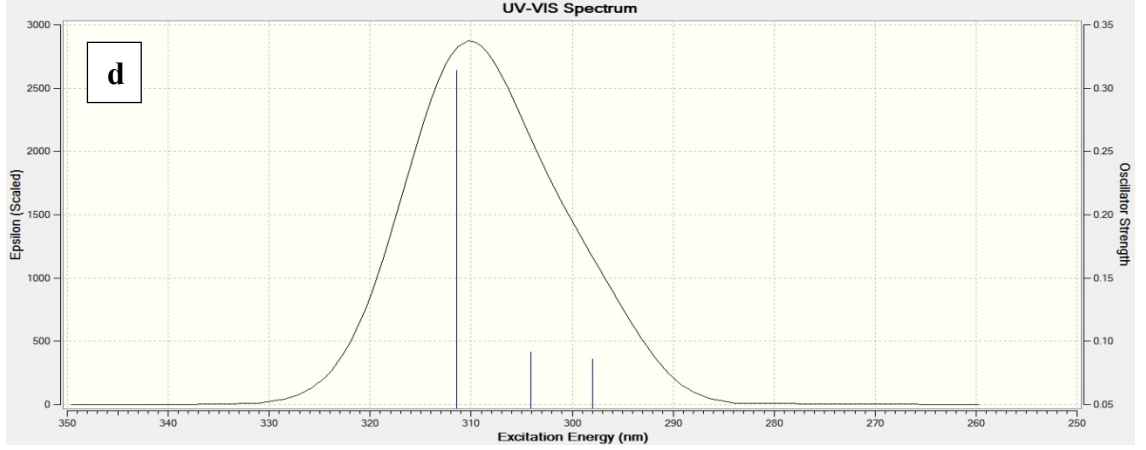
125	v CC(43), δ HCC(26), δ CCC(13)	1610	1561
126	v CC(42), δ HCC(22), δ CCC(10)	1613	1567
127	δ HCC(22), v CC(28)	1623	1567
128	v NC(39), v CC(28), δ CCC(10)	1636	1572
129	v CC(61), δ HCC(11), v NC(45)	1671	1585
130	v OC(85), δ CNN(12)	1734	1676
131	v OC(85)	1745	1711
132	v CH(91)	2907	2923
133	v CH(100)	2939	2959
134	v CH(50)	2957	2976
135	v CH(100)	2971	2988
136	v CH(46)	3016	3051
137	v CH(69)	3056	3076
138	v CH(64)	3057	3088
139	v CH(73)	3062	3089
140	v CH(52)	3063	3093
141	v CH(36)	3079	3095
142	v CH(67)	3091	3120
143	v CH(67)	3091	3122
144	v CH(69)	3092	3124
145	v CH(74)	3093	3125
146	v CH(72)	3097	3126
147	v CH(56)	3108	3134
148	v CH(48)	3119	3150
149	v CH(28)	3138	3169
150	v NH(100)	3538	3514





Şekil 3.30. 183 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
234.95/314.66	223.50/311.142	5.2771/3.9402	5.5475/3.9813	0.5996/0.3808	0.5346/0.3140
230.09/303.75	218.28/304.07	5.3885/4.0818	5.6799/4.0775	1.1098/0.0506	0.2134/0.0912
216.16/294.10	205.74/297.98	5.7356/4.2157	6.0262/4.1608	0.0933/0.0463	0.1106/0.0861

Şekil 3.31. 183 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.74. 183 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(45)-N(44)	105.059	104.740	104.136	103.281
2	C(1)-N(46)-N(47)	121.157	121.325	120.435	120.701
3	C(1)-N(46)-C(2)	108.028	108.189	109.187	109.217
4	C(1)-C(18)-H(38)	108.025	108.316	108.085	108.272
5	C(1)-C(18)-H(39)	108.029	108.276	108.083	108.272
6	N(45)-N(44)-H(25)	120.716	120.194	119.993	119.350
7	N(45)-N(44)-C(2)	113.825	114.545	112.920	114.045
8	N(45)-C(1)-C(18)	126.725	126.192	127.152	126.275
9	N(46)-C(1)-C(18)	121.974	122.355	121.132	121.141
10	H(25)-N(44)-C(2)	125.459	125.261	127.087	126.605
11	N(44)-C(2)-N(46)	101.787	101.072	102.042	101.143
12	N(44)-C(2)-O(48)	129.599	130.145	130.279	130.933
13	O(48)-C(2)-N(46)	128.614	128.783	127.679	127.923
14	C(2)-N(44)-N(45)	113.825	114.545	112.920	114.045
15	C(2)-N(46)-N(47)	130.812	130.485	130.378	130.082
16	C(1)-C(18)-C(19)	113.582	113.546	112.307	112.379
17	H(38)-C(18)-C(19)	110.609	110.605	110.769	110.683
18	H(39)-C(18)-C(19)	110.610	110.613	110.768	110.682
19	H(38)-C(18)-H(39)	105.630	105.102	106.608	106.323
20	C(18)-C(19)-C(20)	120.748	120.821	120.487	120.508
21	C(18)-C(19)-C(24)	120.744	120.725	120.494	120.507
22	C(19)-C(20)-H(40)	119.886	119.755	119.881	119.725
23	C(19)-C(24)-H(43)	119.889	119.765	119.884	119.725
24	C(19)-C(20)-C(21)	121.131	121.202	120.771	120.864
25	H(40)-C(20)-C(21)	118.983	119.043	119.349	119.411
26	C(20)-C(21)-C(22)	119.166	119.053	118.727	118.484
27	C(20)-C(21)-H(41)	120.652	120.765	120.981	121.136

Tablo 3.74.'ün devamı

28	H(41)-C(21)-C(22)	120.182	120.183	120.291	120.380
29	C(21)-C(22)-C(23)	120.901	121.033	121.986	122.319
30	C(21)-C(22)-Cl(52)	119.547	119.488	119.006	118.841
31	Cl(52)-C(22)-C(23)	119.552	119.479	119.008	118.841
32	C(22)-C(23)-H(42)	120.185	120.186	120.293	120.380
33	C(22)-C(23)-C(24)	119.167	119.054	118.727	118.484
34	H(42)-C(23)-C(24)	120.648	120.760	120.980	121.136
35	C(23)-C(24)-H(43)	118.983	119.031	119.345	119.411
36	H(43)-C(24)-C(19)	119.889	119.765	119.884	119.725
37	C(24)-C(19)-C(20)	118.507	118.455	119.018	118.985
38	N(46)-N(47)-C(3)	119.992	119.158	119.012	117.196
39	N(47)-C(3)-H(26)	122.295	121.900	122.459	122.349
40	N(47)-C(3)-C(4)	120.468	120.363	120.137	119.776
41	H(26)-C(3)-C(4)	117.237	117.737	117.404	117.875
42	C(3)-C(4)-C(5)	117.988	118.133	117.774	117.947
43	C(3)-C(4)-C(9)	119.879	122.788	121.685	121.685
44	C(5)-C(6)-O(49)	118.002	115.727	124.889	125.421
45	C(4)-C(5)-C(6)	119.879	120.217	119.063	119.186
46	H(27)-C(5)-C(6)	119.127	118.951	119.990	119.753
47	C(4)-C(5)-H(27)	120.993	120.832	120.947	121.061
48	C(5)-C(6)-C(7)	121.105	120.950	120.796	120.612
49	O(49)-C(6)-C(7)	120.812	123.215	114.314	113.967
50	C(6)-C(7)-H(28)	120.025	120.548	118.710	118.552
51	C(6)-C(7)-C(8)	118.976	118.664	119.719	119.832
52	H(28)-C(7)-C(8)	120.998	120.783	121.571	121.616
53	C(7)-C(8)-H(29)	119.438	119.052	119.587	119.508
54	C(7)-C(8)-C(9)	120.690	121.139	120.319	120.347
55	H(29)-C(8)-C(9)	119.872	119.809	120.093	120.146
56	C(8)-C(9)-H(30)	120.474	120.793	121.084	121.518
57	C(8)-C(9)-C(4)	119.936	119.950	119.561	119.655
58	H(30)-C(9)-C(4)	119.590	119.258	119.355	118.827
59	C(9)-C(4)-C(5)	119.414	119.079	120.541	120.368
60	C(6)-O(49)-C(10)	119.934	121.342	128.220	125.475
61	O(49)-C(10)-O(50)	123.339	123.702	123.427	124.123
52	O(49)-C(10)-C(11)	111.914	111.141	111.459	110.215
63	O(50)-C(10)-C(11)	124.747	125.157	125.114	125.662
64	C(10)-C(11)-C(16)	122.175	122.693	122.038	122.595
65	C(10)-C(11)-C(12)	117.234	116.980	116.958	116.565
66	C(11)-C(12)-H(31)	120.470	120.165	120.627	120.143
67	C(11)-C(12)-C(13)	120.283	120.340	120.062	120.241
68	H(31)-C(12)-C(13)	119.247	119.495	119.312	119.616
69	C(12)-C(13)-O(51)	115.787	115.696	116.042	115.821
70	C(12)-C(13)-C(14)	119.424	119.513	119.354	119.182
71	C(13)-O(51)-C(17)	119.951	118.632	120.972	118.220
72	O(51)-C(13)-C(14)	124.789	124.791	124.604	124.997
73	O(51)-C(17)-H(35)	111.461	111.557	111.303	111.601
74	O(51)-C(17)-H(36)	111.456	111.528	111.303	111.600
75	O(51)-C(17)-H(37)	106.187	105.746	105.460	104.860
76	H(35)-C(17)-H(36)	109.435	109.427	109.452	109.316
77	H(35)-C(17)-H(37)	109.102	109.234	109.621	109.686
78	H(36)-C(17)-H(37)	109.107	109.251	109.621	109.686
79	C(13)-C(14)-C(15)	119.790	119.677	120.134	120.139
80	H(32)-C(14)-C(15)	119.097	119.304	119.173	119.231
81	C(14)-C(15)-H(33)	119.033	119.062	119.259	119.180
82	H(33)-C(15)-C(16)	119.836	119.795	119.945	119.916
83	C(15)-C(16)-H(34)	120.741	120.821	121.392	121.675
84	C(15)-C(16)-C(11)	118.780	119.000	118.651	118.694
85	C(16)-C(11)-C(12)	120.592	120.326	121.004	120.840
86	H(34)-C(16)-C(11)	120.480	120.179	119.957	119.631

Tablo 3.75. 183 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(45)	1.2776	1.2651	1.2948	1.3122
2	C(1)-N(46)	1.3817	1.3802	1.3889	1.3887
3	C(1)-C(18)	1.4937	1.4987	1.4983	1.4953
4	C(18)-C(19)	1.5130	1.5116	1.5120	1.5290
5	C(18)-H(38)	1.0835	1.0838	1.0949	1.0928
6	C(18)-H(39)	1.0835	1.0837	1.0947	1.0930
7	C(19)-C(20)	1.3854	1.3865	1.3964	1.3993
8	C(19)-C(24)	1.3854	1.3865	1.3960	1.4011
9	C(20)-H(40)	1.0721	1.0757	1.0858	1.0842
10	C(20)-C(21)	1.3834	1.3835	1.3917	1.3974
11	C(21)-H(41)	1.0695	1.0732	1.0833	1.0817
12	C(21)-C(22)	1.3728	1.3804	1.3902	1.3861
13	C(22)-Cl(52)	1.8183	1.7456	1.7611	1.8345
14	C(22)-C(23)	1.3728	1.3804	1.3899	1.3872
15	C(23)-H(42)	1.0695	1.0732	1.0834	1.0818
16	C(23)-C(24)	1.3834	1.3835	1.3920	1.3958
17	C(24)-H(43)	1.0721	1.0756	1.0858	1.0829
18	N(44)-N(45)	1.4263	1.3679	1.3783	1.4365
19	N(44)-H(25)	0.9919	0.9886	1.0054	1.0088
20	N(44)-C(2)	1.3539	1.3470	1.3696	1.3758
21	C(2)-O(48)	1.2196	1.1950	1.2145	1.2389
22	C(2)-N(46)	1.3950	1.3885	1.4214	1.4327
23	N(46)-N(47)	1.4030	1.3637	1.3698	1.4181
24	N(47)-C(3)	1.2678	1.2583	1.2865	1.2982
25	C(3)-H(26)	1.0630	1.0713	1.0843	1.0780
26	C(3)-C(4)	1.4637	1.4770	1.4645	1.4558
27	C(4)-C(5)	1.3915	1.3854	1.4074	1.4123
28	C(4)-C(9)	1.3874	1.3959	1.4038	1.4028
29	C(5)-O(49)	1.3970	1.3773	1.3781	1.4086
30	C(5)-C(6)	1.3833	1.3835	1.3945	1.3969
31	C(6)-H(27)	1.0630	1.0733	1.0840	1.0758
32	C(6)-C(7)	1.3828	1.3779	1.3898	1.3950
33	C(7)-H(28)	1.0716	1.0748	1.0849	1.0836
34	C(7)-C(8)	1.3839	1.3898	1.3962	1.3984
35	C(8)-H(29)	1.0710	1.0746	1.0845	1.0831
36	C(8)-C(9)	1.3786	1.3761	1.3862	1.3896
37	C(9)-H(30)	1.0700	1.0726	1.0834	1.0827
38	O(49)-C(10)	1.3625	1.3437	1.3964	1.3999
39	C(10)-O(50)	1.2053	1.1780	1.1961	1.2279
40	C(10)-C(11)	1.4795	1.4900	1.4891	1.4803
41	C(11)-C(12)	1.3779	1.3794	1.3925	1.3940
42	C(11)-C(16)	1.3928	1.3940	1.4036	1.4068
43	C(12)-H(31)	1.0678	1.0710	1.0819	1.0805
44	C(12)-C(13)	1.3917	1.3923	1.3992	1.4041
45	C(13)-O(51)	1.3681	1.3456	1.3603	1.3830
46	C(13)-C(14)	1.3804	1.3833	1.3976	1.3986
47	C(14)-H(32)	1.0694	1.0726	1.0826	1.0814
48	C(14)-C(15)	1.3879	1.3918	1.3973	1.3986
49	C(15)-H(33)	1.0714	1.0749	1.0850	1.0835
50	C(15)-C(16)	1.3727	1.3746	1.3854	1.3863
51	C(16)-H(34)	1.0691	1.0722	1.0827	1.0815
52	O(51)-C(17)	1.4349	1.3975	1.4199	1.4589

Tablo 3.75.'in devamı

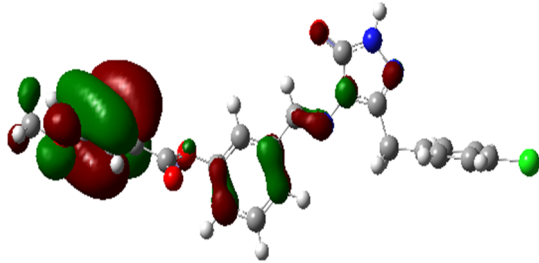
53	C(17)-H(35)	1.0834	1.0785	1.0952	1.0971
54	C(17)-H(36)	1.0722	1.0848	1.0881	1.0900
55	C(17)-H(37)	1.0834	1.0851	1.0953	1.0971

Tablo 3.76. 183 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

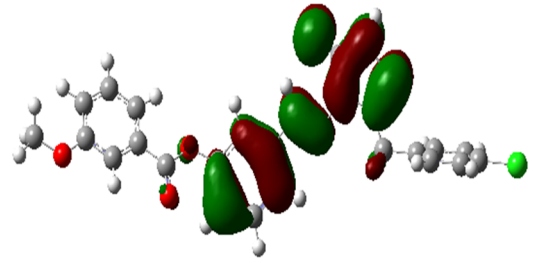
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.569	0.818	0.450	0.680
C2	0.782	1.250	0.584	0.942
C3	0.038	0.197	-0.055	0.111
C4	-0.044	-0.165	-0.016	-0.056
C5	-0.270	-0.240	-0.234	-0.211
C6	0.328	0.384	0.231	0.301
C7	-0.211	-0.253	-0.178	-0.191
C8	-0.208	-0.227	-0.205	-0.183
C9	-0.194	-0.204	-0.158	-0.173
C10	0.647	1.008	0.434	0.707
C11	-0.203	-0.246	-0.160	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.165
C13	0.369	0.417	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.182
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.586	-0.505	-0.589	-0.514
C19	0.064	-0.034	0.081	0.045
C20	-0.216	-0.203	-0.187	-0.166
C21	-0.128	-0.187	-0.115	-0.154
C22	-0.163	-0.318	-0.167	-0.261
C23	-0.128	-0.187	-0.115	-0.154
C24	-0.216	-0.203	-0.186	-0.166
H25	0.400	0.405	0.374	0.356
H26	0.307	0.332	0.260	0.264
H27	0.241	0.325	0.217	0.247
H28	0.238	0.268	0.228	0.207
H29	0.228	0.253	0.203	0.196
H30	0.242	0.270	0.210	0.205
H31	0.264	0.305	0.229	0.230
H32	0.242	0.255	0.229	0.197
H33	0.225	0.251	0.216	0.196
H34	0.244	0.274	0.200	0.205
H35	0.208	0.200	0.211	0.200
H36	0.208	0.200	0.212	0.200
H37	0.234	0.239	0.233	0.227
H38	0.268	0.274	0.251	0.243
H39	0.268	0.274	0.252	0.243
H40	0.222	0.253	0.197	0.197
H41	0.252	0.277	0.223	0.218
H42	0.252	0.277	0.223	0.218
H43	0.223	0.253	0.197	0.197
N44	-0.592	-0.759	-0.497	-0.592
N45	-0.247	-0.384	-0.185	-0.335
N46	-0.478	-0.856	-0.373	-0.629
N47	-0.275	-0.364	-0.206	-0.324

Tablo 3.76.'nın devamı

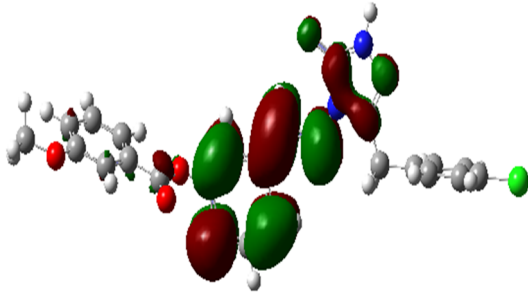
O48	-0.530	-0.668	-0.389	-0.518
O49	-0.510	-0.815	-0.369	-0.600
O50	-0.436	-0.616	-0.319	-0.480
O51	-0.461	-0.735	-0.337	-0.550
Cl52	-0.111	0.093	-0.081	0.082



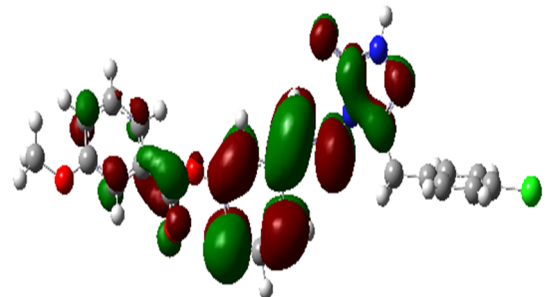
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32149 \text{ Hatree}$



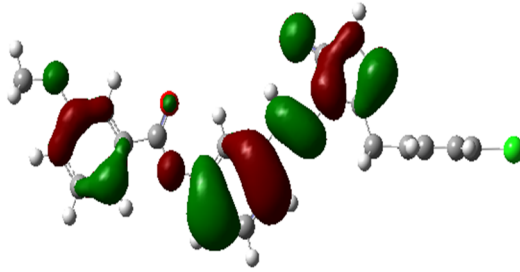
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22164 \text{ Hatree}$



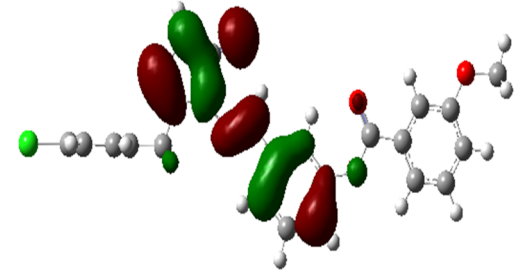
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07635 \text{ Hatree}$



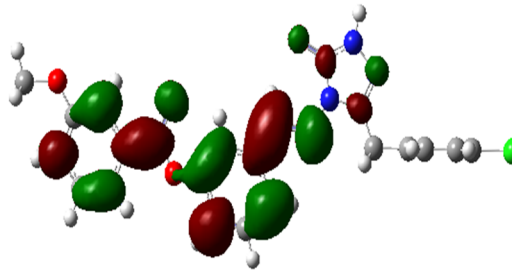
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06571 \text{ Hatree}$



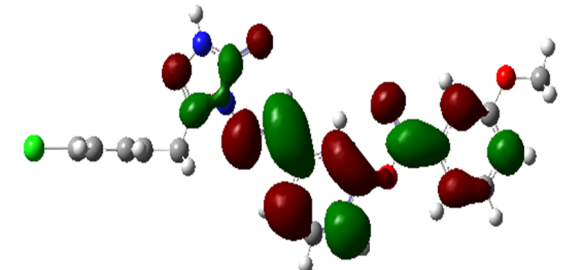
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,32352 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,22277 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,07636 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,06153 \text{ Hatree}$

Şekil 3.32. 183 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

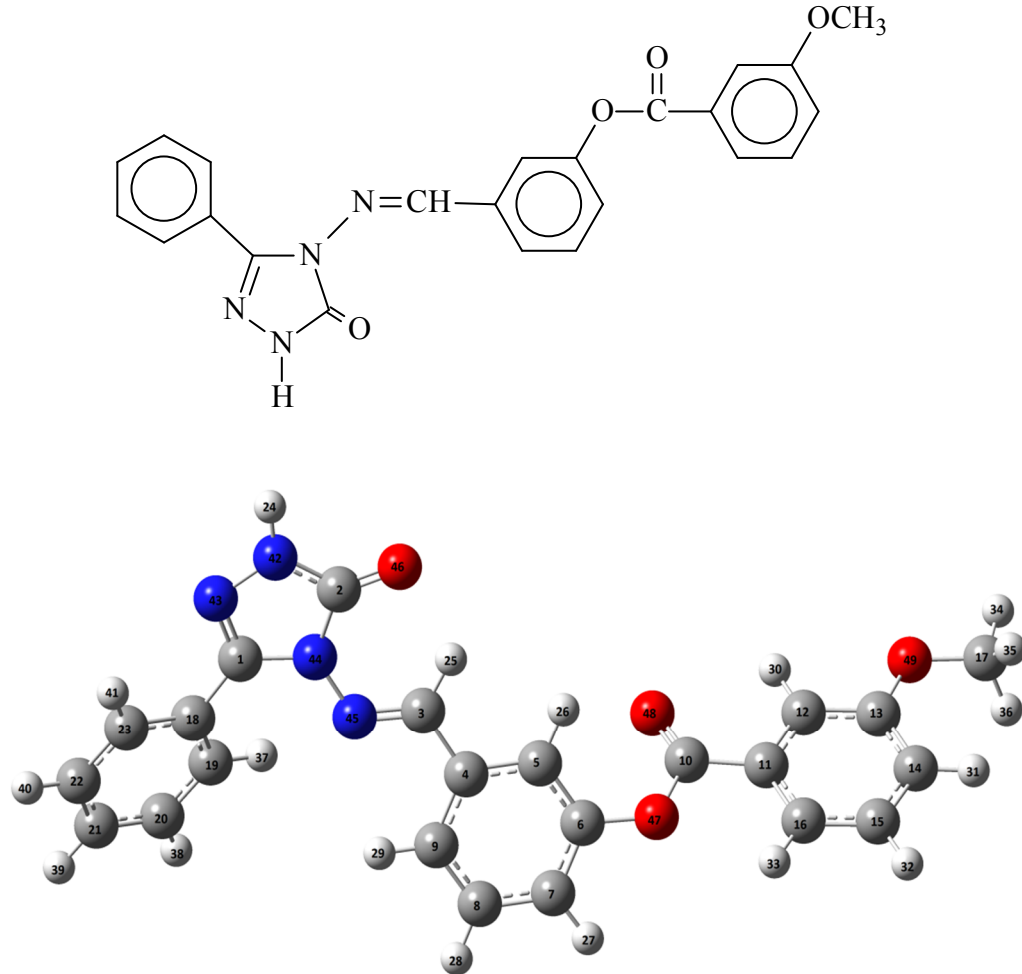
Tablo 3.77. 183 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	4.0430	3.7970	-4.1639	3.0135
μ_y	-6.0677	5.6395	0.0554	3.4938
μ_z	1.7663	1.7521	-1.8020	1.1793
μ_{Toplam}	7.5022	7.0208	4.5375	4.7622

Tablo 3.78. 183 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1896.924	-1886.398	-1906.427	-1895.901

3.2.9. 3-Fenil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (184) :



Şekil 3.33. 184 Bileşiğinin gausview görünümü

Tablo 3.79. 184 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- Ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	144.59	150.43	150.84	-5.84	-6.25	140.93	141.87	3.66	2.72
C2	151.29	152.82	153.79	-1.53	-2.50	142.02	142.93	9.27	8.36
C3	151.03	153.26	153.70	-2.23	-2.67	142.79	143.53	8.24	7.50
C4	135.00	140.21	139.69	-5.21	-4.69	126.92	126.62	8.08	8.38
C5	125.50	130.08	129.41	-4.58	-3.91	118.89	118.51	6.61	6.99
C6	155.41	157.61	157.29	-2.20	-1.88	142.16	141.46	13.25	13.95
C7	125.10	125.78	127.16	-0.68	-2.06	118.50	118.87	6.60	6.23
C8	130.03	131.62	133.10	-1.59	-3.07	120.50	121.28	9.53	8.75
C9	120.18	124.14	124.52	-3.96	-4.34	114.94	115.38	5.24	4.80
C10	164.28	166.53	168.07	-2.25	-3.79	151.31	153.13	12.97	11.15
C11	130.34	134.93	133.93	-4.59	-3.59	122.89	121.82	7.45	8.52
C12	122.12	124.71	122.82	-2.59	-0.70	115.16	113.21	6.96	8.91
C13	159.41	165.12	165.35	-5.71	-5.94	149.50	149.42	9.91	9.99
C14	114.39	114.99	118.81	-0.60	-4.42	103.96	106.58	10.43	7.81
C15	130.12	131.71	133.33	-1.59	-3.21	120.81	122.37	9.31	7.75
C16	120.98	124.30	124.41	-3.32	-3.43	113.48	113.74	7.50	7.24
C17	55.42	53.46	54.02	1.96	1.40	35.28	35.76	20.14	19.66
C18	126.57	131.89	131.23	-5.32	-4.66	118.71	117.79	7.86	8.78
C19	128.50	133.15	133.19	-4.65	-4.69	124.36	124.47	4.14	4.03
C20	127.96	130.05	131.13	-2.09	-3.17	117.83	118.76	10.13	9.20
C21	130.12	132.49	133.85	-2.37	-3.73	123.36	124.72	6.76	5.40
C22	127.96	130.90	131.78	-2.94	-3.82	118.93	119.61	9.03	8.35
C23	128.50	131.81	131.26	-3.31	-2.76	123.10	122.59	5.40	5.91
H24	12.43	6.51	7.08	5.92	2.65	5.69	6.20	6.74	6.23
H25	9.73	9.73	9.70	0.00	-2.07	9.07	9.07	0.66	0.66
H26	7.63	7.19	7.24	0.44	0.25	6.67	6.89	0.96	0.74
H27	7.49	6.80	7.06	0.69	0.55	6.61	6.83	0.88	0.66
H28	7.61	7.09	7.35	0.52	0.43	6.78	7.04	0.83	0.57
H29	7.78	7.73	7.80	0.05	-0.04	7.45	7.52	0.33	0.26
H30	7.76	7.54	7.37	0.22	-0.04	7.44	7.24	0.32	0.52
H31	7.33	6.37	6.75	0.96	0.80	6.05	6.48	1.28	0.85
H32	7.55	7.04	7.31	0.51	0.43	6.79	7.09	0.76	0.46
H33	7.74	7.46	7.56	0.28	-3.70	7.20	7.32	0.54	0.42
H34	3.86	3.70	3.78	0.16	0.08	3.08	3.15	0.78	0.71
H35	3.86	3.21	3.39	0.65	0.47	2.51	2.72	1.35	1.14
H36	3.86	3.20	3.38	0.66	4.54	2.51	2.71	1.35	1.15
H37	7.92	7.78	7.86	0.14	-0.36	7.32	7.44	0.60	0.48
H38	7.50	7.16	7.38	0.34	0.10	6.87	7.10	0.63	0.40
H39	7.48	7.14	7.38	0.34	0.12	6.98	7.23	0.50	0.25
H40	7.50	7.16	7.38	0.34	0.54	6.85	7.08	0.65	0.42
H41	7.92	7.72	7.74	0.20	-7.74	7.41	7.45	0.51	0.47

Tablo 3.80. 184 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	144.59	112.42	112.28	32.17	32.31	112.56	113.04	32.03	31.55
C2	151.29	116.26	116.73	35.03	34.56	115.43	115.98	35.86	35.31
C3	151.03	118.59	118.92	32.44	32.11	115.86	116.27	35.17	34.76
C4	135.00	100.46	99.71	34.54	35.29	93.64	92.83	41.36	42.17

Tablo 3.80.'nin devamı

C5	125.50	90.97	90.32	34.53	35.18	84.24	83.58	41.26	41.92
C6	155.41	120.83	120.82	34.58	34.59	111.05	110.93	44.36	44.48
C7	125.10	88.11	89.25	36.99	35.85	83.59	84.63	41.51	40.47
C8	130.03	93.64	94.96	36.39	35.07	88.86	90.10	41.17	39.93
C9	120.18	87.16	87.55	33.02	32.63	83.25	83.67	36.93	36.51
C10	164.28	133.06	133.74	31.22	30.54	128.39	129.22	35.89	35.06
C11	130.34	96.57	95.75	33.77	34.59	90.29	89.36	40.05	40.98
C12	122.12	88.33	85.82	33.79	36.30	85.48	83.68	36.64	38.44
C13	159.41	124.14	124.24	35.27	35.17	115.69	115.40	43.72	44.01
C14	114.39	83.06	85.14	31.33	29.25	78.12	80.34	36.27	34.05
C15	130.12	94.37	95.67	35.75	34.45	88.91	90.44	41.21	39.68
C16	120.98	88.20	88.24	32.78	32.74	83.98	84.42	37.00	36.56
C17	55.42	31.44	32.09	23.98	23.33	15.56	16.18	39.86	39.24
C18	126.57	93.89	93.40	32.68	33.17	86.17	85.33	40.40	41.24
C19	128.50	93.84	93.58	34.66	34.92	91.72	91.79	36.78	36.71
C20	127.96	93.10	93.95	34.86	34.01	86.73	87.67	41.23	40.29
C21	130.12	95.16	96.12	34.96	34.00	92.29	93.53	37.83	36.59
C22	127.96	92.96	93.65	35.00	34.31	87.31	87.98	40.65	39.98
C23	128.50	92.87	92.25	35.63	36.25	91.50	90.96	37.00	37.54
H24	12.43	5.74	6.38	6.69	3.35	4.80	5.35	7.63	7.08
H25	9.73	9.70	9.64	0.03	-2.01	9.82	8.94	-0.09	0.79
H26	7.63	7.78	7.68	-0.15	-0.19	7.40	7.28	0.23	0.35
H27	7.49	5.76	6.07	1.73	1.54	5.71	6.05	1.78	1.44
H28	7.61	6.12	6.46	1.49	1.32	5.88	6.26	1.73	1.35
H29	7.78	6.82	6.99	0.96	0.77	6.79	6.92	0.99	0.86
H30	7.76	6.68	6.50	1.08	0.83	6.82	6.57	0.94	1.19
H31	7.33	5.23	5.67	2.10	1.88	4.93	6.44	2.40	0.89
H32	7.55	5.99	6.30	1.56	1.44	5.74	6.13	1.81	1.42
H33	7.74	6.63	6.77	1.11	-2.91	6.49	6.70	1.25	1.04
H34	3.86	3.39	3.52	0.47	0.34	2.72	2.82	1.14	1.04
H35	3.86	2.73	2.97	1.13	0.89	1.74	2.03	2.12	1.83
H36	3.86	2.73	2.97	1.13	4.95	1.74	2.03	2.12	1.83
H37	7.92	7.84	7.89	0.08	-0.39	6.88	6.99	1.04	0.93
H38	7.50	6.04	6.33	1.46	1.15	5.78	6.11	1.72	1.39
H39	7.48	6.01	6.30	1.47	1.20	5.91	6.25	1.57	1.23
H40	7.50	6.05	6.31	1.45	1.61	5.82	6.11	1.68	1.39
H41	7.92	7.32	7.33	0.60	-7.33	6.96	6.98	0.96	0.94

Tablo 3.81. 184 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ COCC(86), τ NCCC(35), τ CNNC(12)	6	9
2	τ CCOC(19), τ COCC(18), τ CCCN(22), τ CNNC(41)	8	17
3	δ CCO(12), τ COCC(30)	17	20
4	δ CCN(20), τ CCCC(22), τ COCC(17), τ CCCN(24)	33	33
5	τ CCCC(20), τ COCC(10), τ CCCN(17)	41	42
6	τ CCNN(16), τ CCCC(11), τ NCCN(13)	45	44
7	δ COC(14), δ CCO(15), τ COCC(43), τ CNNC(10)	59	57
8	τ CCCC(13), τ COCC(19), τ CCCN(22)	69	74
9	τ COCC(47), τ CNNC(10), τ CCCN(11), τ NNCN(16), τ NNCC(19)	71	82
10	τ COCC(50), τ CCCC(10), τ CNNC(21)	82	85
11	δ CCC(21), δ CCN(27)	110	109
12	τ NCCC(14), τ CNNC(18), τ NNCC(13), τ CCCN(14), τ NCCN(12)	126	127
13	δ COC(11), δ CCO(14), τ CCCN(14)	153	148
14	δ COC(10), τ CCCC(28), τ CCCO(12)	171	169
15	δ COC(10), τ CCCC(10)	186	192

Tablo 3.81.'in devamı

16	δ CCC(14), δ CNN(11), δ NNC(12)	205	207
17	δ CCC(12), τ CNNC(42)	210	211
18	τ COCC(14), τ OCCC(26), τ HCOC(16), τ CCCC(15), τ NCCN(25), τ CCCN(13)	223	217
19	τ CCNN(12), τ CCCC(20), τ OCCC(11), τ HCOC(20)	226	233
20	v CC(10), δ CCO(11)	247	245
21	δ COC(24), τ CCCC(10)	271	263
22	τ COCC(10), τ CCCC(26), τ HCOC(48)	293	283
23	δ COC(21), δ OCO(12)	306	296
24	τ NNCN(11)	314	308
25	v CC(11), δ CCC(11), τ NNCN(11)	329	322
26	v CC(11), δ CCC(11), τ CCNN(25)	365	352
27	δ CCC(11), δ CCO(22), δ COC(11), δ CCN(10)	387	372
28	δ CNN(10), δ CCC(11), δ NNC(11), δ COC(11), δ OCN(20)	417	403
29	τ HCCC(17), τ CCCC(72)	431	411
30	δ CCC(38), δ COC(11), δ OCO(10)	439	427
31	τ CCCC(35)	459	439
32	τ HNNC(29), τ CCCC(11)	470	450
33	τ CCOC(13), τ HCCC(15), τ CCCN(26)	483	458
34	δ CCC(11), τ HNNC(24)	495	474
35	δ CCC(20)	504	494
36	τ HNNC(17), τ CCCC(26), τ CCCN(13), τ HCCC(11)	535	516
37	δ CCC(11), δ COC(11), τ OCCC(37), τ CCCC(10), τ HCCC(12), τ OCOC(12)	581	552
38	δ CCC(10), δ COC(20), τ OCCC(13), τ CCCC(11)	583	567
39	δ CCC(12), δ CCO(14), δ COC(13)	602	586
40	τ CCCC(11), τ CCOC(11), τ OCCC(11)	624	596
41	δ CCC(21), δ CNN(10)	634	612
42	δ CCC(64), δ CCN(10), δ OCN(24)	643	626
43	δ CCC(43), δ OCN(32), δ CCN(17)	656	630
44	δ CCC(28)	696	679
45	δ CCC(21), τ CCCC(18), τ CCCO(12), τ HCCC(19)	707	683
46	δ CCC(21), τ CCCC(19), τ HCCC(28)	716	685
47	τ CCOC(21), τ HCCC(36), τ CCCN(20)	725	692
48	τ HCCC(38), τ CCCC(35)	729	699
49	τ NNCN(27), τ NNCC(15), τ CNNC(23), τ CCCC(25), τ HCCC(18)	750	702
50	τ ONNC(72)	774	740
51	δ CCC(15), τ OCOC(43), τ HCCC(24)	809	751
52	τ HCCC(10), τ CCCC(12), τ ONNC(49)	811	753
53	δ OCO(10), τ HCCC(18), τ CCCC(27)	828	777
54	δ OCO(10), τ HCCC(28), τ CCCC(10), τ ONNC(20)	829	789
55	v NC(12), δ CNN(12), τ HCCC(17)	836	799
56	τ OCOC(28), τ HCCC(49)	861	802
57	δ OCO(10), τ HCCC(13)	863	816
58	δ NCC(14), δ NNC(11), τ HCCC(12)	888	845
59	τ HCCC(99)	904	847
60	v OC(19), τ HCCC(18)	926	879
61	τ HCCC(42), τ CCCC(12)	966	891
62	v OC(11), τ HCCC(37)	968	897
63	τ HCCC(34)	982	916
64	τ HCCC(46)	982	919
65	τ HCCC(35)	996	926
66	δ NNC(10), τ HCCC(39)	997	947
67	v CC(22), δ CNN(11), δ NNC(21), τ HCCC(55)	1014	961
68	v CC(30), δ CCC(32), τ HCCC(77), τ CCCC(10)	1027	965
69	v CC(15), δ CCC(30), δ NNC(17)	1035	970

Tablo 3.81.'in devamı

70	v CC(21), δ CCC(15), τ HCCC(56)	1036	972
71	τ HCCC(82), τ CCCC(24)	1044	985
72	τ HCNN(86), τ HCCC(82), τ CCCC(12)	1044	1001
73	v CC(30), δ CCC(17), τ HCCC(57)	1052	1002
74	v CC(18), δ CCO(26), τ HCCC(37), τ CCCC(26)	1060	1008
75	v CC(43), δ CCC(39), δ HCC(20)	1071	1010
76	v CC(32), δ HCC(24), δ CCC(27), τ HCNN(86)	1079	1044
77	v OC(63), v CC(34), δ HCC(28)	1117	1062
78	v OC(11), v CC(10), δ HCC(19)	1126	1085
79	v NN(19), v CC(22), δ HCC(25)	1129	1090
80	v CC(14), v OC(12), δ HCC(22)	1138	1099
81	v NN(16), v CC(22), δ HCC(14)	1138	1107
82	v CC(18), δ HCC(24)	1142	1111
83	v NC(11), v CC(20), δ CNN(12)	1151	1142
84	v CC(11), v NN(19), δ HCC(31), δ HNN(13)	1162	1165
85	v CC(25), δ HCH(26), τ HCOC(27)	1168	1173
86	v CC(19), v NC(13), δ HCC(37)	1199	1177
87	δ HCC(41)	1213	1180
88	δ HCC(27), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1186
89	v CC(23), δ HCC(74), δ HCH(12), τ HCOC(21)	1236	1199
90	v CC(21), δ HCC(20), τ HCOC(11)	1251	1201
91	v NC(20), v NN(15), v CC(12), δ HCC(18)	1261	1205
92	v CC(17), δ HCC(36)	1267	1223
93	v CC(17), δ HCC(36)	1267	1257
94	v OC(10), v NC(27), v NN(14), δ CNN(14)	1277	1283
95	v NN(16), v CC(21), v OC(16)	1313	1295
96	v OC(42), δ HCC(19)	1326	1311
97	v OC(18), δ HCC(24)	1368	1313
98	v CC(31), δ HCC(26)	1373	1317
99	v CC(21), δ HCC(78)	1375	1344
100	v CC(36), δ HCC(78)	1396	1349
101	v CC(21), δ HCC(54)	1400	1351
102	v NC(20), δ HCN(43), δ HNN(10)	1443	1374
103	v OC(11), v NC(14), δ HNN(51), δ HCN(14)	1485	1404
104	v CC(12), δ HCN(13), δ HNN(29)	1495	1431
105	δ HCN(11), δ HCC(14)	1522	1457
106	v CC(16), δ HCC(13), δ HCH(11)	1525	1465
107	v CC(11), δ HCC(20), δ HCN(17)	1535	1471
108	v CC(16), δ HCC(10), δ HCH(62)	1546	1481
109	δ HCH(74), τ HCOC(13)	1562	1499
110	δ HCH(71), τ HCOC(10)	1570	1510
111	δ HCH(19), δ HCC(40), δ CCC(12)	1574	1511
112	δ HCC(28), δ CCC(10)	1576	1515
113	δ HCC(50), δ CCC(15)	1587	1523
114	v NC(30), v CC(28), δ HCC(10)	1681	1582
115	v CC(31), δ CCC(17)	1691	1610
116	v CC(33), δ CCC(13), δ HCC(11)	1696	1611
117	v CC(47), δ HCC(19), δ CCC(10)	1711	1617
118	v CC(22), δ HCC(13)	1717	1629
119	v CC(47), δ HCC(19)	1719	1637
120	v CC(20), v NC(33)	1753	1638
121	v NC(44), v CC(14)	1800	1650
122	v OC(86), v NC(11)	1863	1787
123	v OC(88), v NC(11)	1903	1792
124	v CH(91)	3030	2982
125	v CH(50)	3086	3040

Tablo 3.81.'in devamı

126	v CH(46)	3149	3116
127	v CH(49)	3176	3134
128	v CH(52)	3188	3143
129	v CH(72)	3189	3145
130	v CH(73)	3190	3146
131	v CH(35)	3199	3147
132	v CH(49)	3202	3158
133	v CH(42)	3213	3169
134	v CH(40)	3220	3175
135	v CH(67)	3220	3177
136	v CH(40)	3221	3179
137	v CH(42)	3226	3185
138	v CH(40)	3232	3185
139	v CH(56)	3236	3194
140	v CH(47)	3239	3196
141	v NH(100)	3769	3651

Tablo 3.82. 184 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

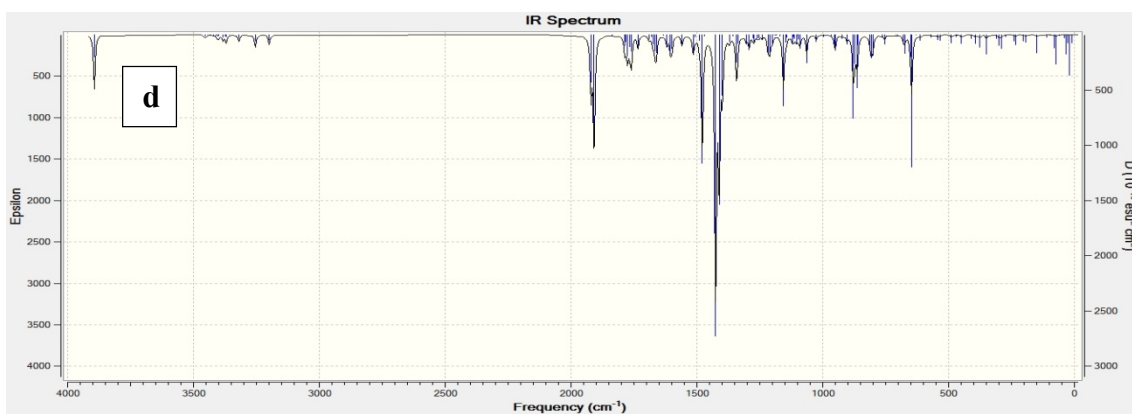
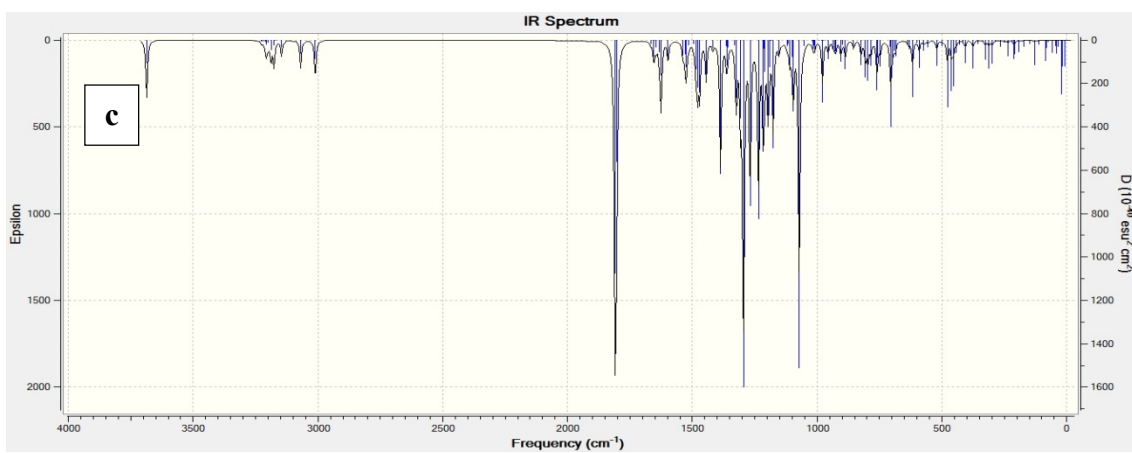
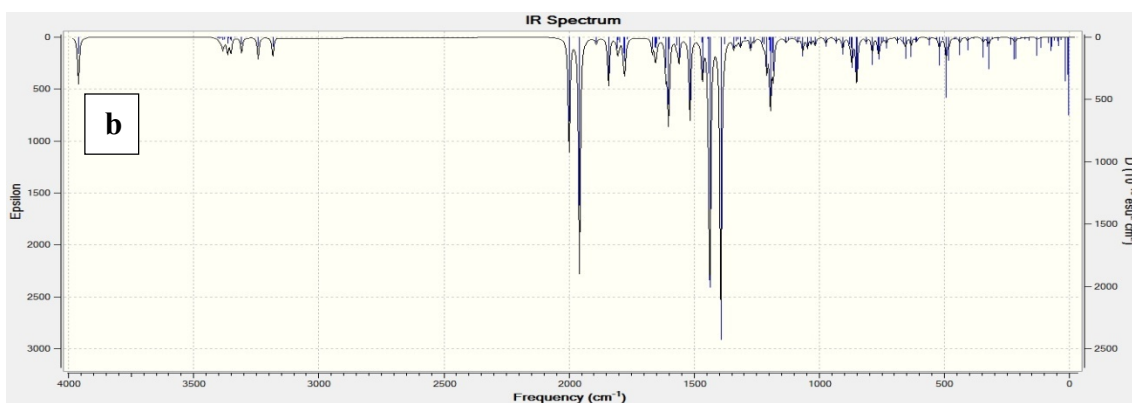
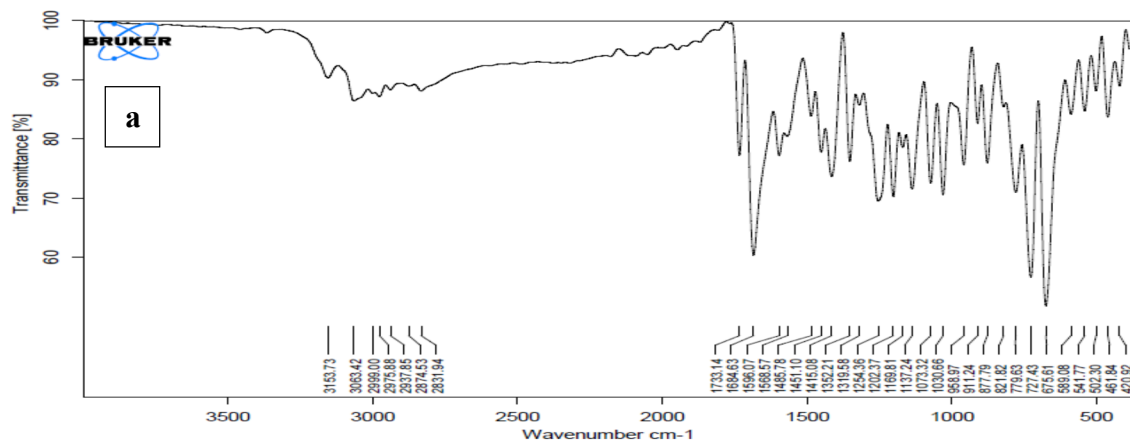
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(44), τ CCCO(10), τ CCNN(14), τ COCC(11), τ CNNC(12)	9	6
2	τ CCCN(34), τ COCC(27), τ CCCC(36)	17	12
3	δ NCC(14), δ COC(10), δ CCC(14), δ NNC(13), τ CCCN(15)	22	19
4	δ CCO(10), δ NCC(22), δ CCC(24), δ COC(15), τ COCC(47)	29	25
5	τ CCCO(10), τ COCC(44), δ COC(15), τ CCCN(18)	36	30
6	δ NCC(10), δ CCN(13), δ COC(25), τ CCNN(13), τ NNCC(15)	53	59
7	τ CCCN(15), τ CCNN(20), τ NNCN(14), τ COCC(51)	64	64
8	τ CCCO(11), τ COCC(53), τ CCCN(14)	71	77
9	τ NNCN(29), τ NNCC(22), τ CCCC(10), τ COCC(44)	87	88
10	τ CCCO(13), τ COCC(25), τ CCCN(15), τ CCNN(12), τ NNCC(11)	90	94
11	δ CCN(13), δ CCC(26), δ COC(13)	99	100
12	τ NCCC(17), τ CNNC(36)	135	136
13	τ CCCC(20), δ CCC(12), τ CCCN(13)	157	170
14	δ CCC(33), δ CCN(19), τ CCCC(21)	174	174
15	δ COC(25)	185	188
16	τ HCOC(47), τ CNNC(14), τ COCC(10), τ OCCC(18)	210	206
17	τ HCOC(11), τ CCCC(10), τ CNNC(22), δ CNN(14), δ COC(10)	212	208
18	δ CNN(12), δ COC(18), τ CNNC(35)	219	216
19	v CC(12), v OC(10), δ CCC(10), δ COC(13)	249	249
20	τ CCCO(16), τ CCCC(34)	264	256
21	τ HCOC(20), τ CCCC(22), δ CCC(13), δ COC(27)	272	268
22	δ CCO(10), δ CCC(15), δ COC(29), τ HCOC(10), τ CCCC(14)	273	275
23	τ NCCC(15), τ CCNN(16), τ CCCC(14), τ COCC(10)	280	283
24	v CC(13), δ CCC(12)	317	322
25	τ CCCC(19), τ CNNC(27), τ NNCC(18), δ CCO(15), δ OCO(13)	342	333
26	δ CCO(16), δ OCO(18), τ CNNC(18), τ NNCC(11), τ CCNN(16)	356	341
27	τ CCCC(26), τ CCNN(15), τ NNCN(17), τ NNCC(30)	372	357
28	δ OCN(26), δ CCC(15), δ NNC(11)	407	398
29	τ HCCC(18), τ CCCC(55)	424	412
30	δ CCC(16), τ CCCC(34)	427	423
31	δ CCC(16)	443	441
32	τ CCCO(29), τ CCCC(31)	464	446
33	τ HCCC(21), τ CCCC(42), τ CCOC(14)	485	467
34	δ CCO(10), δ CCC(16)	493	489
35	τ HCCC(13), τ CCCC(27), τ NNCN(18), τ CCCN(10), τ CCNN(11)	518	498
36	τ HCCC(12), τ CCCC(11), τ OCOC(14), τ OCCC(38), δ COC(19)	557	550

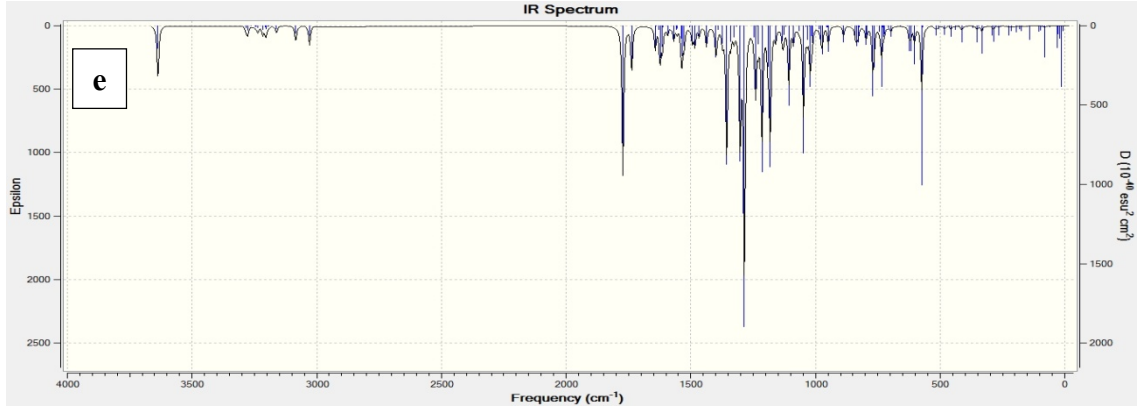
Tablo 3.82.'nin devamı

37	δ CCC(12), δ COC(20), τ HCCC(13), τ CCCC(13), τ OCOC(15), τ OCCC(39)	573	553
38	τ HNNC(95)	587	554
39	δ CCC(17), δ COC(20)	591	582
40	NN(16), δ OCN(14), δ CCC(15), δ CCN(11), δ CNN(10)	612	596
41	δ OCN(26), δ NCC(14), δ CNN(10)	617	602
42	τ HCCC(11), τ CCCC(22), τ CCOC(24)	639	610
43	δ CCC(65)	646	637
44	δ CCC(32)	685	673
45	δ CCC(25), ν CC(11)	694	682
46	τ HCCC(26), τ CCCC(19), τ NNCC(25), τ NNCN(10), τ ONNC(16)	727	698
47	τ HCCC(23), τ CCCO(22), τ CCCC(19)	727	702
48	τ HCCC(18), τ CCOC(14), τ NNCC(18)	732	706
49	τ HCCC(23), τ CCCC(20), τ NNCC(19)	734	710
50	ν NN(11), τ HCCC(34), τ CCCC(12), τ CCOC(13)	737	719
51	τ NNCN(10), τ ONNC(59), ν NC(15), δ CNN(14), δ CCN(13)	781	739
52	τ HCCC(12), τ OCOC(53)	784	744
53	ν NC(11), δ CNN(26), ν CC(10), δ OCO(26)	792	767
54	ν OC(10), δ OCO(25), τ CCCC(13), τ ONNC(47)	798	771
55	τ HCCC(15), τ CCCC(27), τ NNCC(17), δ NCC(11), δ NNC(11)	820	796
56	ν OC(10), δ NCC(19), δ NNC(15), τ HCCC(11), τ CCCC(19), τ NNCC(18)	837	800
57	τ HCCC(37)	862	806
58	τ OCOC(10), τ HCCC(61)	865	811
59	ν CC(10), ν OC(20), τ HCCC(98)	877	857
60	ν CC(10), ν OC(19), τ HCCC(99)	904	857
61	δ NNC(13), ν CC(10)	931	915
62	τ HCCC(51), ν CC(19), δ NCC(11)	966	918
63	τ HCCC(42), ν NC(14), δ NCC(13), δ CNN(11)	990	920
64	δ NNC(17), τ HCCC(37)	996	939
65	τ HCCC(37)	998	944
66	τ HCCC(41), ν CC(35), δ CCC(15)	1002	950
67	ν NN(38), ν CC(11), δ CCO(22)	1010	978
68	τ HCCC(24), τ CCOC(16)	1011	979
69	ν CC(31), ν OC(24), δ CCC(12), δ CCO(10), τ HCCC(13)	1013	986
70	τ HCCC(57), τ CCCC(24)	1017	991
71	τ HCCC(54), δ HCC(19), δ CCC(71)	1037	995
72	τ HCCC(68), τ HCNN(12), τ CCOC(16)	1041	996
73	δ CCC(23), δ CCO(21), ν OC(51)	1050	997
74	ν CC(53), δ CCC(24), τ HCCC(80), τ CCCC(13)	1062	1001
75	ν OC(32), δ CCC(23), τ HCCC(60), τ CCCC(10)	1075	1012
76	τ HCCC(51), τ CCCC(25)	1078	1014
77	ν CC(14), δ CCC(38), HCC(18), τ HCCC(25)	1084	1028
78	τ HCNN(84), ν CC(20), δ HCC(13), τ HCCC(10)	1090	1051
79	ν OC(13), δ HCC(17)	1091	1068
80	ν CC(45), δ HCC(20)	1099	1080
81	δ HCC(19), ν CC(21)	1100	1087
82	ν CC(14), δ HCC(16), δ NCN(15), τ HCNN(75)	1106	1092
83	ν CC(14), ν NN(12), δ NCN(15), ν NC(15), δ CCC(15), δ HCC(16)	1127	1092
84	δ HCH(23), τ HCOC(27), ν CC(25)	1138	1118
85	ν NC(28), ν CC(15)	1144	1120
86	ν OC(13), δ HCC(12), δ HCH(24), τ HCOC(27)	1155	1140
87	δ HCH(15), τ HCOC(27), ν CC(21)	1156	1149
88	ν OC(25), δ HCC(14), ν CC(25)	1160	1172
89	δ HCC(53), ν NC(14)	1174	1187
90	ν CC(19), δ HCC(38), δ HCH(13), τ HCOC(23)	1184	1190

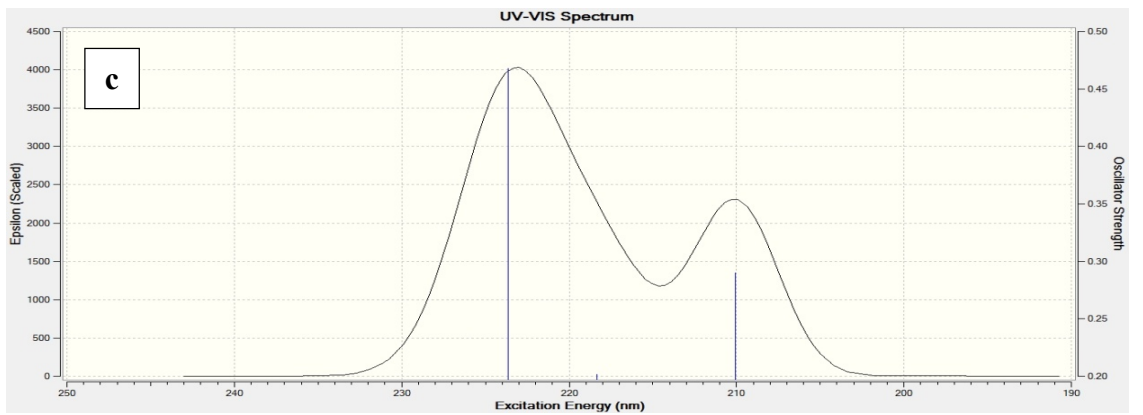
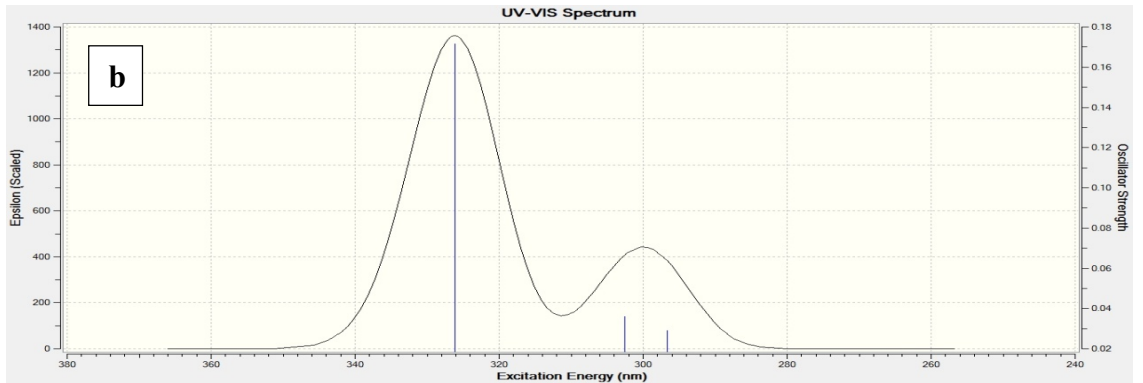
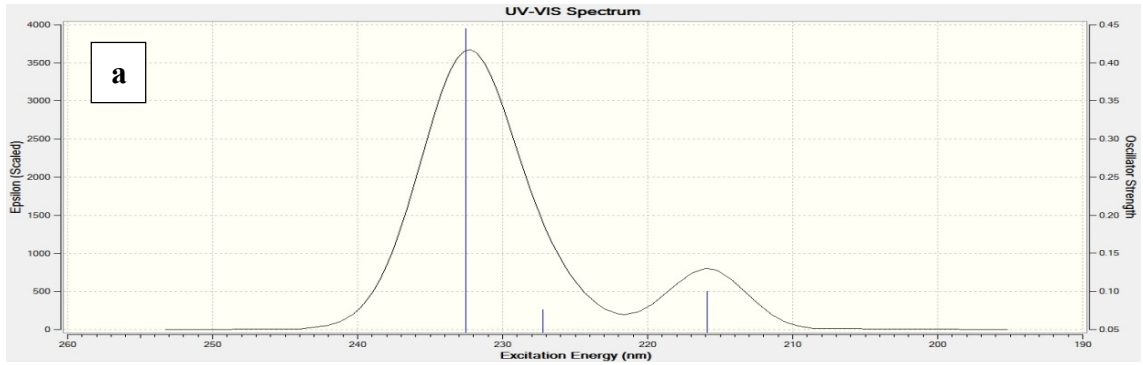
Tablo 3.82.'nin devamı

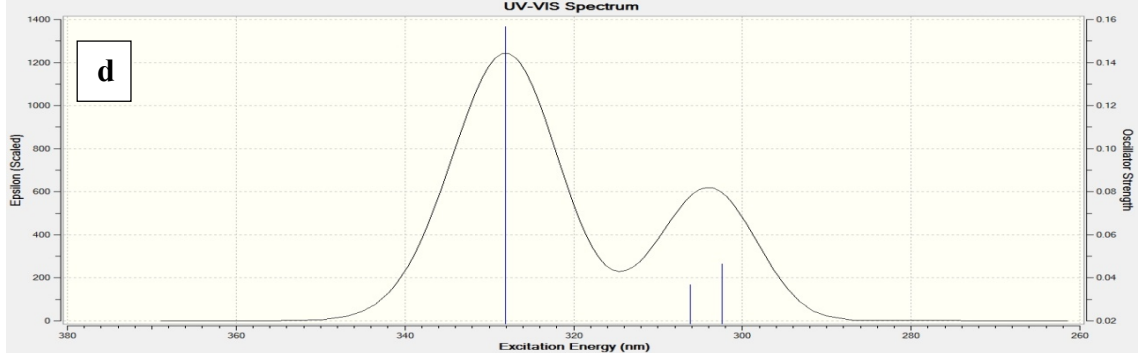
91	v NC(12), v NN(12), δ HCC(67), v CC(22)	1215	1196
92	v CC(13), δ HCC(38)	1219	1202
93	v CC(23), δ HCC(63)	1219	1202
94	v CC(13), v OC(13), δ HCC(37)	1231	1241
95	v OC(16), v CC(13), δ HCC(14)	1245	1257
96	v CC(46), v OC(20), v NN(11), δ CNN(11)	1270	1271
97	v CC(37), v OC(25)	1282	1281
98	v CC(27), v OC(21), δ HCC(14)	1295	1293
99	v NC(20), δ HNN(35), δ HCC(42)	1334	1308
100	v CC(15), δ HCC(37), v NC(14), δ HNN(14)	1343	1310
101	δ HCC(68), δ HNN(17)	1354	1325
102	δ HNN(36), δ HCC(46), δ HCH(70)	1367	1341
103	δ HNN(11), δ HCN(31), δ HCC(31)	1375	1350
104	δ HCN(35)	1416	1387
105	δ HCC(13), δ CCC(11), δ HCN(16)	1452	1415
106	v CC(19), δ HCC(15)	1458	1432
107	v NC(10), δ HCC(25), v CC(20)	1470	1441
108	δ HCC(26), δ HCH(72), δ HCC(26)	1483	1452
109	v NC(17), δ HCC(48)	1508	1474
110	v CC(21), δ HCC(45)	1513	1482
111	v CC(15), δ HCC(61), δ CCC(12)	1520	1484
112	δ HCC(44), δ HCH(75), τ HCOC(11)	1525	1501
113	δ HCH(77), τ HCOC(11)	1534	1502
114	δ HCH(73), τ HCOC(10), v CC(18), v NC(15), δ HCC(12)	1575	1514
115	v NC(29), v CC(10), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1537
116	v CC(24), δ HCC(15)	1600	1554
117	v CC(26), v NC(13), δ HCC(12), δ CCC(11)	1605	1557
118	v CC(18), δ HCC(18), δ CCO(13)	1613	1566
119	v CC(38), δ HCC(19)	1621	1571
120	v CC(48), δ HCC(24)	1623	1581
121	v CC(22), v NC(41), δ HCC(11)	1668	1585
122	v OC(84)	1733	1676
123	v OC(85), v NC(12)	1745	1710
124	v CH (91)	2907	2923
125	v CH (50)	2956	2976
126	v CH (91)	3016	3050
127	v CH (51)	3049	3081
128	v CH (68)	3061	3084
129	v CH (68)	3061	3091
130	v CH (52)	3063	3093
131	v CH (46)	3073	3095
132	v CH (52)	3088	3104
133	v CH (67)	3090	3122
134	v CH (67)	3091	3123
135	v CH (41)	3091	3123
136	v CH (37)	3097	3130
137	v CH (56)	3108	3134
138	v CH (48)	3119	3150
139	v CH (32)	3129	3163
140	v CH (28)	3138	3169
141	v NH(100)	3538	3510





Şekil 3.34. 184 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.53/326.15	223.64/328.06	5.3320/3.8014	5.5440/3.7793	0.4448/0.1717	0.4677/0.1568
227.20/302.50	218.32/306.21	5.4571/4.0987	5.6791/4.0490	0.0764/0.0361	0.2016/0.0367
215.88/296.63	210.09/302.37	5.7432/4.1798	5.9016 /4.1004	0.1005/0.0291	0.2902/0.0465

Şekil 3.35. 184 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.83. 184 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(43)-N(42)	105.411	105.269	104.868	104.505
2	C(1)-N(44)-N(45)	122.095	122.552	122.277	123.462
3	C(1)-N(44)-C(2)	107.869	108.138	109.005	109.030
4	C(1)-C(18)-C(19)	122.143	122.858	123.179	124.032
5	C(1)-C(18)-C(23)	118.286	118.005	117.268	116.908
6	N(43)-N(42)-H(24)	120.784	120.291	120.166	119.682
7	N(43)-N(42)-C(2)	129.276	128.754	112.773	113.885
8	N(43)-C(1)-C(18)	123.239	122.582	122.107	120.719
9	H(24)-N(42)-C(2)	125.405	125.093	127.043	126.433
10	N(42)-C(2)-N(44)	102.068	101.354	102.409	101.604
11	N(42)-C(2)-O(46)	129.413	129.824	129.941	130.200
12	O(46)-C(2)-N(44)	128.518	128.818	127.649	128.195
13	C(2)-N(44)-N(45)	129.276	128.754	128.518	127.507
14	N(44)-C(1)-C(18)	125.847	126.681	126.951	128.305
15	C(18)-C(19)-H(37)	120.265	119.953	119.965	118.827
16	C(18)-C(19)-C(20)	120.042	120.128	119.889	120.041
17	C(18)-C(23)-H(41)	119.396	119.011	119.800	118.590
18	C(18)-C(23)-C(22)	120.281	120.464	120.357	120.508
19	H(37)-C(19)-C(20)	119.693	119.919	120.146	121.132
20	C(19)-C(20)-C(21)	120.261	120.479	120.451	120.041
21	C(19)-C(20)-H(38)	119.589	119.439	119.469	119.386
22	H(38)-C(20)-C(21)	120.149	120.082	120.080	119.982
23	C(20)-C(21)-C(22)	119.859	119.654	119.780	119.551
24	C(20)-C(21)-H(39)	120.048	120.171	120.121	120.279
25	H(39)-C(21)-C(22)	120.093	120.175	120.098	120.171
26	C(21)-C(22)-C(23)	120.053	120.197	120.040	120.209
27	C(21)-C(22)-H(40)	120.214	120.153	120.215	120.097

Tablo 3.83.'ün devamı

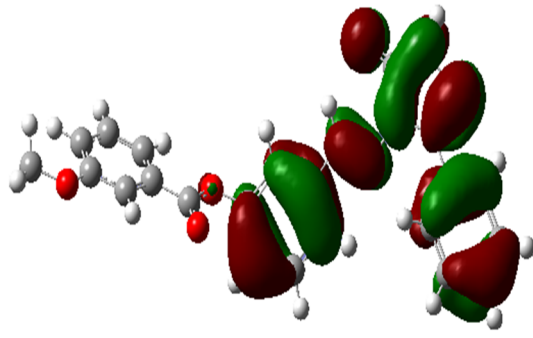
28	H(40)-C(22)-C(23)	119.733	119.650	119.745	119.693
29	C(22)-C(23)-H(41)	120.323	120.526	120.562	120.901
30	H(41)-C(23)-C(18)	119.396	119.011	119.080	118.590
31	C(23)-C(18)-C(19)	119.503	119.078	119.480	119.060
32	N(44)-N(45)-C(3)	120.100	119.420	119.438	117.572
33	N(45)-C(3)-H(25)	122.636	122.329	122.753	122.306
34	N(45)-C(3)-C(4)	120.056	119.918	119.862	120.223
35	H(25)-C(3)-C(4)	117.308	117.752	117.385	117.471
36	C(3)-C(4)-C(5)	118.110	117.953	119.077	117.382
37	C(3)-C(4)-C(9)	122.422	122.430	121.756	122.408
38	C(4)-C(5)-H(26)	120.991	120.241	120.928	120.945
39	C(4)-C(5)-C(6)	119.829	119.556	119.077	119.308
40	H(26)-C(5)-C(6)	119.179	120.197	119.995	119.747
41	C(5)-C(6)-O(47)	118.288	122.381	124.886	125.459
42	C(5)-C(6)-C(7)	121.137	121.025	120.809	120.585
43	O(47)-C(6)-C(7)	120.495	116.475	114.305	113.956
44	C(6)-C(7)-H(27)	119.950	119.228	118.720	118.578
45	C(6)-C(7)-C(8)	118.991	119.297	119.695	119.800
46	H(27)-C(7)-C(8)	121.060	121.474	121.584	121.622
47	C(7)-C(8)-H(28)	119.467	119.484	119.584	119.501
48	C(7)-C(8)-C(9)	120.678	120.532	120.349	120.382
49	H(28)-C(8)-C(9)	119.855	119.984	120.066	120.117
50	C(8)-C(9)-H(29)	120.556	120.854	121.001	120.975
51	C(8)-C(9)-C(4)	119.896	119.970	119.542	119.715
52	H(29)-C(9)-C(4)	119.547	119.174	119.454	119.310
53	C(9)-C(4)-C(5)	119.468	119.617	120.527	120.210
54	C(6)-O(47)-C(10)	119.731	120.712	128.243	125.509
55	O(47)-C(10)-O(48)	123.352	123.590	123.476	124.130
56	O(47)-C(10)-C(11)	111.925	111.170	111.450	110.193
57	O(48)-C(10)-C(11)	124.723	125.240	125.074	125.677
58	C(10)-C(11)-C(16)	122.159	122.632	122.033	122.583
59	C(10)-C(11)-C(12)	117.254	117.034	116.966	116.579
60	C(11)-C(12)-H(30)	120.462	120.168	120.619	120.154
61	C(11)-C(12)-C(13)	120.284	120.325	120.061	120.233
52	H(30)-C(12)-C(13)	119.254	119.507	119.320	119.613
63	C(12)-C(13)-O(49)	115.789	115.700	116.044	115.828
64	C(12)-C(13)-C(14)	119.429	119.526	119.360	119.192
65	C(13)-O(49)-C(17)	119.944	118.639	120.962	118.204
66	O(49)-C(13)-C(14)	124.782	124.774	124.597	124.980
67	O(49)-C(17)-H(34)	106.191	105.750	105.463	104.866
68	O(49)-C(17)-H(35)	111.461	111.551	111.307	111.598
69	O(49)-C(17)-H(36)	111.466	111.528	111.308	111.598
70	H(34)-C(17)-H(35)	109.103	109.233	109.618	109.687
71	H(34)-C(17)-H(36)	109.099	109.252	109.618	109.687
72	H(35)-C(17)-H(36)	109.438	109.430	109.446	109.313
73	C(13)-C(14)-C(15)	119.785	119.674	120.128	120.136
74	C(13)-C(14)-H(31)	121.116	121.004	120.696	120.635
75	C(14)-C(15)-C(16)	119.785	121.135	120.128	120.898
76	H(31)-C(14)-C(15)	119.099	119.322	119.176	119.229
77	C(14)-C(15)-H(32)	119.034	119.063	119.259	119.187
78	H(32)-C(15)-C(16)	119.835	119.802	119.946	119.915
79	C(15)-C(16)-H(33)	120.750	120.847	121.399	121.677
80	C(15)-C(16)-C(11)	118.784	119.006	118.655	118.704
81	H(33)-C(16)-C(11)	120.467	120.147	119.946	119.618
82	C(16)-C(11)-C(12)	120.587	120.334	121.001	120.838

Tablo 3.84. 184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

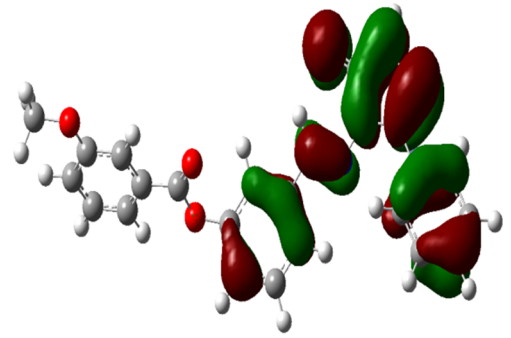
Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(43)	1.2834	1.2691	1.3021	1.3211
2	C(1)-N(44)	1.3880	1.3852	1.3967	1.3983
3	C(1)-C(18)	1.4684	1.4773	1.4692	1.4672
4	C(18)-C(19)	1.3880	1.3897	1.4015	1.4029
5	C(18)-C(23)	1.3914	1.3898	1.4032	1.4091
6	C(19)-H(37)	1.0662	1.0718	1.0810	1.0782
7	C(19)-C(20)	1.3838	1.3836	1.3921	1.3958
8	C(20)-H(38)	1.0717	1.0750	1.0852	1.0839
9	C(20)-C(21)	1.3825	1.3849	1.3928	1.3947
10	C(21)-H(39)	1.0719	1.0753	1.0853	1.0838
11	C(21)-C(22)	1.3850	1.3847	1.3944	1.3993
12	C(22)-H(40)	1.0714	1.0749	1.0852	1.0837
13	C(22)-C(23)	1.3796	1.3829	1.4032	1.3893
14	C(23)-H(41)	1.0699	1.0732	1.0834	1.0820
15	N(44)-C(2)	1.3995	1.3894	1.4209	1.4358
16	C(2)-O(46)	1.2182	1.1955	1.2151	1.2370
17	N(42)-C(2)	1.3515	1.3451	1.3683	1.3748
18	N(42)-H(24)	0.9920	0.9887	1.0057	1.0090
19	N(42)-N(43)	1.4169	1.3642	1.3713	1.4202
20	N(44)-N(45)	1.3998	1.3642	1.3705	1.4142
21	N(45)-C(3)	1.2671	1.2571	1.2845	1.2971
22	C(3)-H(25)	1.0693	1.0738	1.0861	1.0839
23	C(3)-C(4)	1.4721	1.4770	1.4669	1.4656
24	C(4)-C(5)	1.3886	1.3875	1.4004	1.4042
25	C(4)-C(9)	1.3866	1.3920	1.4040	1.4034
26	C(5)-H(26)	1.0657	1.0749	1.0823	1.0778
27	C(5)-C(6)	1.3806	1.3796	1.3905	1.3945
28	C(6)-O(47)	1.3956	1.3790	1.3935	1.4091
29	C(6)-C(7)	1.3815	1.3764	1.3893	1.3973
30	C(7)-H(27)	1.0694	1.0738	1.0840	1.0816
31	C(7)-C(8)	1.3815	1.3873	1.3956	1.3945
32	C(8)-H(28)	1.0712	1.0747	1.0849	1.0833
33	C(8)-C(9)	1.3814	1.3799	1.3871	1.3920
34	C(9)-H(29)	1.0697	1.0728	1.0831	1.0814
35	O(47)-C(10)	1.3573	1.3399	1.3730	1.3947
36	C(10)-O(48)	1.2048	1.1782	1.2020	1.2275
37	C(10)-C(11)	1.4787	1.4921	1.4891	1.4805
38	C(11)-C(12)	1.3772	1.3802	1.3925	1.3924
39	C(11)-C(16)	1.3884	1.3933	1.4027	1.4028
40	C(12)-H(30)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
41	C(12)-C(13)	1.3859	1.3902	1.3973	1.3986
42	C(13)-O(49)	1.3689	1.3456	1.3611	1.3824
43	C(13)-C(14)	1.3821	1.3806	1.3987	1.3998
44	C(14)-H(31)	1.0695	1.0726	1.0827	1.0815
45	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3966	1.3990
46	C(15)-H(32)	1.0715	1.0750	1.0851	1.0836
47	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3872	1.3902
48	C(16)-H(33)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
49	O(49)-C(17)	1.4369	1.3976	1.4193	1.4603
50	C(17)-H(34)	1.0722	1.0785	1.0882	1.0899
51	C(17)-H(35)	1.0831	1.0849	1.0954	1.0967
52	C(17)-H(36)	1.0831	1.0850	1.0954	1.0967

Tablo 3.85. 184 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

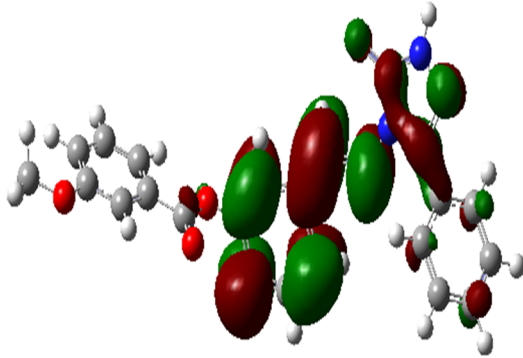
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP) 6-311G(d)	B3LYP) 3-21G
C1	0.510	0.863	0.378	0.694
C2	0.773	1.252	0.578	0,948
C3	0.039	0.192	-0.054	0.112
C4	-0.046	-0.163	-0.024	-0.054
C5	-0.271	-0.246	-0.209	-0.209
C6	0.333	0.383	0.231	0,301
C7	-0.215	-0.253	-0.193	-0.190
C8	-0.207	-0.228	-0.203	-0.184
C9	-0.198	-0.209	-0.162	-0.182
C10	0.647	1.008	0.430	0.707
C11	-0.204	-0.246	-0.158	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.166
C13	0.368	0.417	0.271	0.322
C14	-0.300	-0.267	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.211	-0.209	-0.160	-0.182
C17	-0.416	-0.273	-0.464	-0.336
C18	-0.014	-0.138	-0.014	-0.051
C19	-0.197	-0.211	-0.163	-0.222
C20	-0.219	-0.240	-0.206	-0.184
C21	-0.205	-0.229	-0.179	-0.180
C22	-0.211	-0.239	-0.196	-0.182
C23	-0.204	-0.195	-0.167	-0,174
H24	0.407	0.406	0.373	0.357
H25	0.305	0.335	0.262	0.269
H26	0.239	0.324	0.229	0.248
H27	0.236	0.266	0.210	0.207
H28	0.227	0.252	0.201	0.197
H29	0.250	0.277	0.219	0.219
H30	0.264	0.305	0.229	0.230
H31	0.242	0.255	0.216	0.197
H32	0.225	0.251	0.199	0.196
H33	0.245	0.274	0.213	0.206
H34	0.208	0.239	0.211	0.227
H35	0.233	0.200	0.233	0.199
H36	0.207	0.200	0.211	0.199
H37	0.241	0.287	0.219	0.247
H38	0.223	0.245	0.196	0.186
H39	0.222	0.247	0.196	0.189
H40	0.223	0.247	0.197	0.190
H41	0.246	0.279	0.210	0.217
N42	-0.588	-0.757	-0.489	-0.585
N43	-0.253	-0.399	-0.198	-0.350
N44	-0.496	-0.879	-0.393	-0.663
N45	-0.271	-0.360	-0.209	-0.323
O46	-0.530	-0.671	-0.387	-0.519
O47	-0.512	-0.815	-0.372	-0.601
O48	-0.436	-0.616	-0.317	-0.480
O49	-0.461	-0.735	-0.336	-0.550



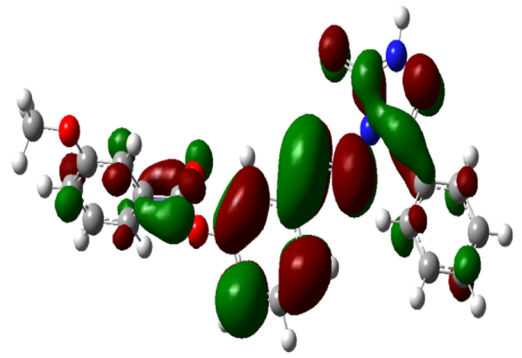
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,31863 \text{ Hatree}$



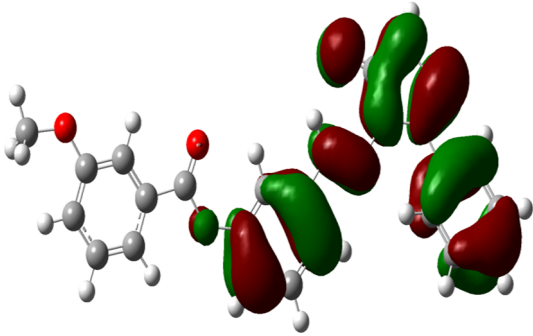
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,22452 \text{ Hatree}$



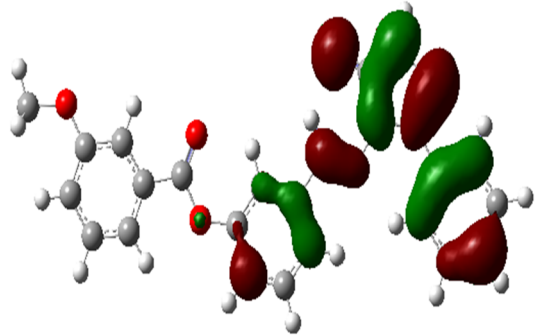
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07736 \text{ Hatree}$



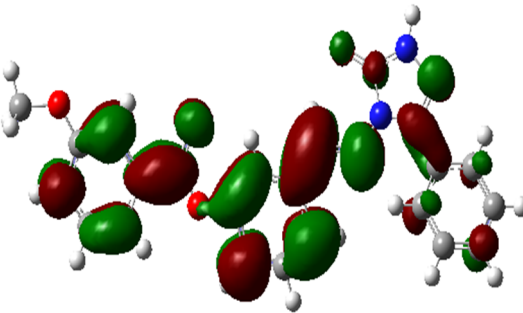
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06770 \text{ Hatree}$



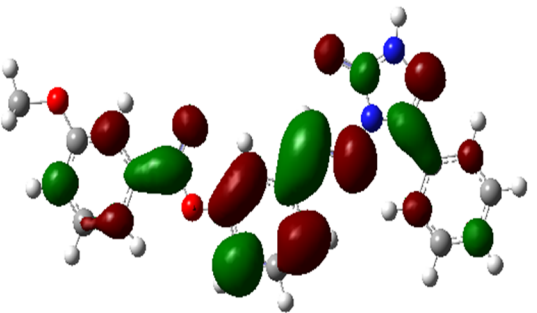
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,31624 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,21589 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,07835 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,06202 \text{ Hatree}$

Şekil 3.36. 184 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

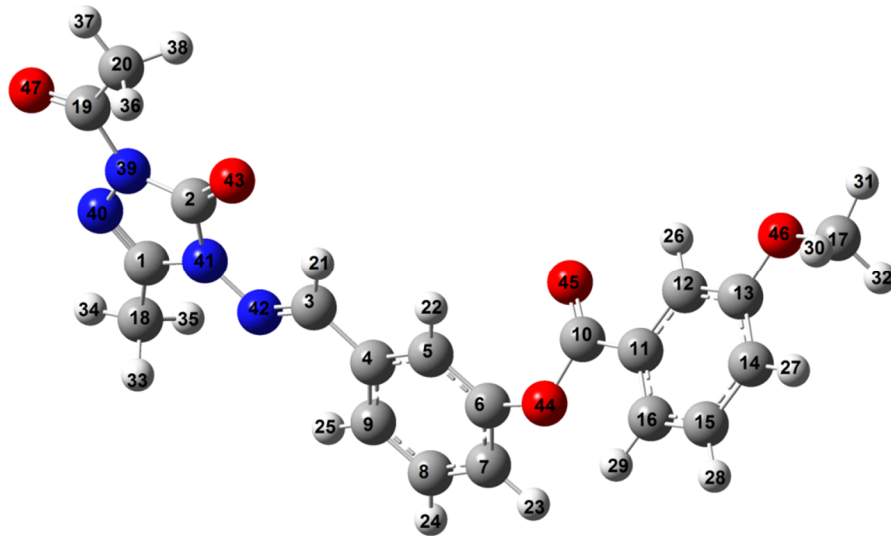
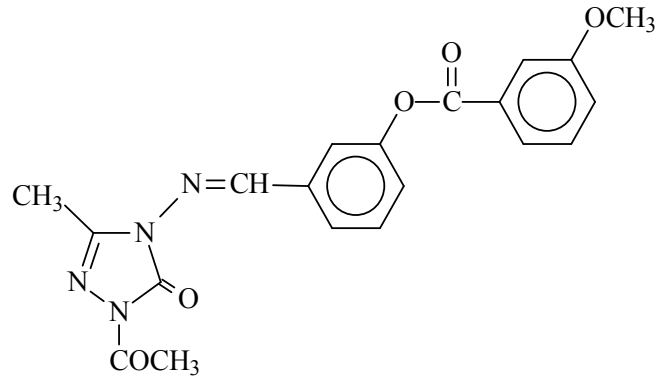
Tablo 3.86. 184 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	1.3767	1.1997	1.2302	1.0900
μ_y	-6.3166	-5.7891	-4.3570	-3.4800
μ_z	-1.3959	-1.4134	-1.0961	-0.9854
μ_{Toplam}	6.6138	6.0788	4.6582	3.7774

Tablo 3.87. 184 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1398.957	-1390.865	-1407.483	-1399.409

3.2.10. 1-Asetil-3-metil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (186):



Şekil 3.37. 186 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.88. 186 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.71	150.20	153.41	-3.49	-6.70	139.83	143.55	6.88	3.16
C2	151.07	154.29	154.84	-3.22	-3.77	142.67	143.22	8.40	7.85
C3	147.81	153.55	154.39	-5.74	-6.58	143.16	144.04	4.65	3.77
C4	134.71	139.26	138.85	-4.55	-4.14	125.87	125.57	8.84	9.14
C5	126.25	130.22	129.66	-3.97	-3.41	120.14	120.05	6.11	6.20
C6	154.45	157.84	157.43	-3.39	-2.98	142.43	141.51	12.02	12.94
C7	125.47	126.42	127.68	-0.95	-2.21	117.50	118.35	7.97	7.12
C8	130.03	131.76	133.15	-1.73	-3.12	120.71	121.61	9.32	8.42
C9	120.24	123.58	124.19	-3.34	-3.95	114.46	115.21	5.78	5.03
C10	164.33	166.45	167.95	-2.12	-3.62	151.38	153.22	12.95	11.11
C11	130.36	134.36	133.50	-4.00	-3.14	122.62	121.69	7.74	8.67
C12	122.15	124.75	122.84	-2.60	-0.69	115.25	113.24	6.90	8.91
C13	159.43	165.22	165.40	-5.79	-5.97	149.57	149.42	9.86	10.01
C14	114.39	115.28	117.95	-0.89	-3.56	104.12	106.59	10.27	7.80
C15	130.18	131.71	133.27	-1.53	-3.09	120.83	122.37	9.35	7.81
C16	120.57	124.11	124.29	-3.54	-3.72	113.33	113.72	7.24	6.85
C17	55.47	53.54	54.08	1.93	1.39	35.30	35.77	20.17	19.70
C18	11.21	12.35	12.44	-1.14	-1.23	0.49	0.70	10.72	10.51
C19	166.00	164.44	168.07	1.56	-2.07	151.44	155.51	14.56	10.49
C20	23.43	24.57	24.86	-1.14	-1.43	11.43	11.76	12.00	11.67
H21	9.67	9.56	9.54	0.11	0.13	8.94	8.95	0.73	0.72
H22	7.64	7.21	7.26	0.43	0.38	6.62	6.82	1.02	0.82
H23	7.52	6.86	7.10	0.66	0.42	6.65	6.90	0.87	0.62
H24	7.62	7.12	7.38	0.50	0.24	6.85	7.12	0.77	0.50
H25	7.84	7.74	7.86	0.10	-0.02	7.57	7.72	0.27	0.12
H26	7.82	7.57	7.39	0.25	0.43	7.43	7.23	0.39	0.59
H27	7.35	6.33	6.70	1.02	0.65	6.06	6.47	1.29	0.88
H28	7.56	7.03	7.29	0.53	0.27	6.79	7.09	0.77	0.47
H29	7.76	7.45	7.56	0.31	0.20	7.18	7.31	0.58	0.45
H30	3.88	3.19	3.37	0.69	0.51	2.51	2.71	1.37	1.17
H31	3.88	3.69	3.76	0.19	0.12	3.08	3.14	0.80	0.74
H32	3.88	3.18	3.36	0.70	0.52	2.51	2.71	1.37	1.17
H33	2.37	2.00	2.17	0.37	0.20	1.52	1.72	0.85	0.65
H34	2.37	1.83	1.87	0.54	0.50	1.46	1.43	0.91	0.94
H35	2.37	2.00	2.16	0.37	0.21	1.51	1.70	0.86	0.67
H36	2.50	2.14	2.26	0.36	0.24	1.56	1.70	0.94	0.80
H37	2.50	1.60	1.64	0.90	0.86	1.14	1.16	1.36	1.34
H38	2.50	2.17	2.28	0.33	0.22	1.57	1.70	0.93	0.80

Tablo 3.89. 186 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	146.71	115.89	118.01	30.82	28.70	112.50	115.35	34.21	31.36
C2	151.07	117.47	117.63	33.60	33.44	115.33	115.50	35.74	35.57
C3	147.81	118.63	119.15	29.18	28.66	116.07	116.63	31.74	31.18
C4	134.71	100.14	99.57	34.57	35.14	92.70	92.11	42.01	42.60
C5	126.25	90.74	90.19	35.51	36.06	84.32	83.77	41.93	42.48
C6	154.45	120.91	120.89	33.54	33.56	111.04	110.87	43.41	43.58
C7	125.47	88.41	89.38	37.06	36.09	84.08	84.94	41.39	40.53

Tablo 3.89'un devamı

C8	130.03	93.76	94.93	36.27	35.10	88.87	89.99	41.16	40.04
C9	120.24	87.52	87.90	32.72	32.34	83.16	83.63	37.08	36.61
C10	164.33	133.24	133.85	31.09	30.48	128.53	129.30	35.80	35.03
C11	130.36	96.43	95.69	33.93	34.67	90.09	89.27	40.27	41.09
C12	122.15	88.40	86.89	33.75	35.26	85.49	83.70	36.66	38.45
C13	159.43	124.42	124.48	35.01	34.95	115.72	115.40	43.71	44.03
C14	114.39	83.18	85.14	31.21	29.25	78.28	80.36	36.11	34.03
C15	130.18	94.30	95.55	35.88	34.63	88.97	90.44	41.21	39.74
C16	120.57	88.15	88.20	32.42	32.37	83.96	84.43	36.61	36.14
C17	55.47	31.56	31.19	23.91	24.28	15.60	16.19	39.87	39.28
C18	11.21	-6.41	-6.56	17.62	17.77	-17.72	-17.73	28.93	28.94
C19	166.00	127.55	129.97	38.45	36.03	125.39	128.54	40.61	37.46
C20	23.43	4.34	4.44	19.09	18.99	-7.78	-7.60	31.21	31.03
H21	9.67	9.24	9.21	0.43	0.46	8.68	8.65	0.99	1.02
H22	7.64	7.78	7.70	-0.14	-0.06	7.37	7.28	0.27	0.36
H23	7.52	5.81	6.10	1.71	1.42	5.74	6.06	1.78	1.46
H24	7.62	6.10	6.42	1.52	1.20	5.90	6.26	1.72	1.36
H25	7.84	6.86	6.99	0.98	0.85	6.78	6.96	1.06	0.88
H26	7.82	6.66	6.48	1.16	1.34	6.81	6.56	1.01	1.26
H27	7.35	5.25	5.68	2.10	1.67	4.95	5.44	2.40	1.91
H28	7.56	6.03	6.34	1.53	1.22	5.75	6.13	1.81	1.43
H29	7.76	6.63	6.78	1.13	0.98	6.49	6.70	1.27	1.06
H30	3.88	2.74	2.98	1.14	0.90	1.74	2.03	2.14	1.85
H31	3.88	3.39	3.51	0.49	0.37	2.73	2.82	1.15	1.06
H32	3.88	2.74	2.98	1.14	0.90	1.74	2.03	2.14	1.85
H33	2.37	1.53	1.71	0.84	0.66	0.82	1.04	1.55	1.33
H34	2.37	1.14	1.18	1.23	1.19	0.59	0.62	1.78	1.75
H35	2.37	1.53	1.71	0.84	0.66	0.82	1.04	1.55	1.33
H36	2.50	1.96	2.05	0.54	0.45	1.17	1.29	1.33	1.21
H37	2.50	0.99	1.05	1.51	1.45	0.42	0.45	2.08	2.05
H38	2.50	1.96	2.05	0.54	0.45	1.17	1.29	1.33	1.21

Tablo 3.90. 186 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTRESİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ COCC(51), τ NCCC(37), τ CNNC(10)	5	14
2	τ CCCC(14), τ COCC(27), τ CCN(14), τ CNNC(12), τ NCCN(10)	12	17
3	τ CCOC(65), τ NCCC(13), τ COCC(29), τ CCCC(20)	16	18
4	τ NCNN(30), τ CCNN(18), τ NCCN(38)	35	36
5	τ CCCC(28), τ COCC(19)	37	40
6	δ COC(22), δ CCO(12), τ COCC(19), τ CCNC(15)	52	51
7	τ CCNC(60)	65	67
8	δ CCN(18), δ CNN(10), δ NCC(10), τ COCC(25), τ CCCC(10)	67	74
9	τ COCC(65), τ HCOC(11)	70	84
10	τ CCN(18), τ CNNC(15), τ CCNN(23), τ NCCN(10), τ NCNN(11)	91	94
11	δ COC(15), δ CCC(13), τ CCNN(27), τ CNNC(19)	130	128
12	δ CCO(13), τ CNNC(12), τ CCNN(18)	140	137
13	δ NCC(10), δ NCN(13), δ NNC(10), δ CCC(12)	161	157
14	τ HCCN(55), τ CNNC(12), τ NCNN(21)	172	161
15	τ CCCC(12), τ NCNN(13)	176	166
16	τ HCCN(69)	185	171
17	τ CNNC(28), τ NCCN(11), τ HCCN(56)	192	177
18	δ CCC(12), δ COC(19)	196	199
19	δ NCN(10), δ CCC(14), τ HCOC(12), τ COCC(13), τ OCCC(24), τ CCCC(18)	225	215
20	δ CCC(12), δ COC(19), δ CCN(14), τ HCOC(12), τ CCCC(18), τ OCCC(12)	226	219

Tablo 3.90.'nmn devamı

21	τ CCCC(15), τ NCNN(14), τ CCCN(33), τ NCCN(22)	228	237
22	ν CC(13), δ NCN(15), δ CCO(10)	250	244
23	δ COC(28), τ CCCN(14)	270	264
24	τ COCC(10), τ HCOC(45), τ CCCC(25)	292	280
25	δ COC(21), δ OCO(15)	307	296
26	δ CCN(37)	339	327
27	τ NCNN(11), τ CNNC(16), τ NNCN(14), τ CCCN(10), τ CCNN(34), τ NCCN(10)	365	350
28	τ CNNC(35), τ CCNN(11)	375	364
29	δ CCO(19), δ CNN(15), δ OCN(23), δ CCN(29)	391	371
30	δ CCN(25), δ OCN(18)	396	377
31	δ CCC(38), δ COC(10), δ OCO(10), τ CCCC(12)	439	426
32	δ CCN(10), τ CCCC(30)	457	437
33	ν NC(10), δ CCN(11), τ CCCC(18)	468	444
34	τ CCCC(12), τ HCCC(15), τ CCOC(11), τ CCCN(10)	480	457
35	δ CCC(12), δ NNC(13), δ CCO(13)	496	467
36	δ CCC(21), δ COC(10)	507	496
37	δ COC(12), δ CCC(13), τ OCCC(37), τ OCOC(12), τ HCCC(11)	581	551
38	δ COC(20), δ CCC(14), τ CCCC(12), τ OCCC(29)	583	567
39	τ HCCN(11), τ ONNC(24)	600	583
40	δ CCC(10), τ ONNC(15)	612	583
41	δ CCC(11), τ HCCN(16), τ ONNC(32)	613	592
42	δ OCO(10), τ CCOC(26), τ CCCN(19), τ COCC(13), τ CCCC(15)	624	598
43	ν CC(26), δ OCC(32), τ NNCN(21)	629	606
44	ν CC(17), δ CCC(11), δ NNC(16), τ NNCN(11)	675	654
45	τ NNCN(21), τ CNNC(31), τ NCNN(16), τ CNNC(13)	690	655
46	δ NCC(11), δ CNN(11), δ CCN(11), δ OCN(18), δ CCC(10)	699	675
47	δ CCC(14), τ CCCC(18), τ HCCC(18)	711	683
48	δ CCC(18), τ CCCC(18), τ OCCC(10), τ HCCC(27)	716	686
49	τ CCCC(15), τ HCCC(37), τ CCOC(20)	725	691
50	ν CC(10), δ CCC(13), τ ONNC(41)	796	739
51	τ OCOC(45), τ HCCC(24)	808	753
52	ν NN(13), τ NCNN(11), τ ONNC(41)	816	769
53	δ OCO(12), τ HCCC(30)	830	789
54	τ OCOC(23), τ HCCC(50)	848	802
55	τ OCOC(29), τ HCCC(49)	861	809
56	τ HCCC(15)	874	826
57	ν OC(20), τ HCCC(19)	926	875
58	ν CC(22), ν NN(11), τ HCCC(42)	955	891
59	ν OC(11), τ HCCC(49)	966	896
60	ν CC(15), ν NC(11), ν NN(10), δ NNC(10), τ HCCC(25)	967	913
61	τ HCCC(39)	982	917
62	τ HCCC(39)	985	918
63	ν OC(10), ν CC(13), δ CCC(11), τ HCCC(42)	998	957
64	ν CC(19), δ HCH(11), τ HCCN(29), τ HCCC(55)	1020	961
65	ν CC(30), δ CCC(32), δ HCH(10), τ HCCN(25)	1027	968
66	ν CC(21), δ CCC(21), τ HCCC(56)	1034	968
67	ν CC(25), δ CCC(23), τ HCCC(46)	1044	1002
68	τ HCCC(59), τ HCNN(85)	1051	1006
69	ν CC(17), δ CCC(23), δ HCH(19), τ HCCN(47)	1077	1008
70	δ HCH(17), τ HCCC(39), τ HCNN(89)	1082	1022
71	δ HCH(19), τ HCCN(53)	1114	1059
72	ν OC(60), δ HCH(21), τ CNNC(10), τ HCCN(57)	1117	1061
73	ν CC(19), δ HCC(22), δ HCH(21), τ HCCN(58)	1124	1067
74	ν CC(10), ν OC(48), δ HCH(26), δ NNC(11), τ HCCN(10), τ HCOC(26)	1126	1079
75	ν OC(11), ν CC(14), δ HCC(20)	1137	1084

Tablo 3.90.'nm devami

76	v CC(18), δ HCC(23)	1142	1099
77	v CC(11), v NC(21), δ HCC(21), δ NNC(13)	1144	1111
78	v CC(21), v NN(26), τ HCCN(17)	1156	1136
79	v CC(25), δ HCC(40)	1168	1167
80	v NN(18), δ HCC(14), δ HCH(26), τ HCOC(26), τ HCCN(16)	1204	1172
81	δ HCC(33)	1219	1181
82	δ HCC(26), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1185
83	v NC(15), v NN(11), δ OCC(12), δ HCC(20), τ HCOC(11)	1251	1197
84	v CC(15), δ HCC(19), δ HCH(11), τ HCOC(18)	1262	1199
85	v OC(11), v CC(11), δ HCC(12), τ HCOC(11)	1266	1222
86	v NN(22), v NC(13), δ NCN(12)	1296	1246
87	v OC(17), v CC(20), δ NCN(11)	1310	1276
88	v CC(16), v OC(42)	1325	1286
89	v NN(13), v NC(32), δ OCN(10)	1361	1303
90	v OC(17), δ HCC(20)	1368	1311
91	δ HCC(30)	1373	1313
92	v CC(22), δ HCC(78)	1376	1343
93	v CC(24), v NC(17), δ HCC(17), δ CNN(12), δ HCH(13)	1413	1349
94	v NC(11), δ HCN(37), δ NNC(10), δ HCH(11)	1440	1370
95	δ HCH(92), δ HCN(10)	1477	1407
96	δ HCH(64), δ HCN(15)	1481	1417
97	v CC(16), δ HCH(14)	1500	1435
98	δ HCH(72), τ HCCN(23)	1516	1458
99	v CC(14), δ HCC(10), δ HCH(50), τ HCCN(15)	1524	1459
100	v CC(13), δ HCH(24), δ HCC(12)	1528	1465
101	δ HCH(76), τ HCCN(22)	1530	1475
102	δ HCH(76), τ HCCN(24)	1534	1475
103	δ HCH(61)	1546	1480
104	δ HCH(55), δ HCN(10), τ HCCN(19)	1549	1486
105	δ HCH(72), δ HCN(37), τ HCOC(12)	1562	1498
106	δ HCH(71), τ HCOC(10)	1570	1509
107	δ HCC(40), δ HCH(16), δ CCC(12)	1574	1511
108	δ HCC(27), δ CCC(14)	1577	1515
109	v CC(32), δ HCC(10), δ CCC(17)	1691	1610
110	v CC(32), δ HCC(11), δ CCC(15)	1698	1611
111	v CC(21), δ HCC(14)	1717	1628
112	v CC(31)	1718	1638
113	v NC(64), v CC(12)	1796	1647
114	v NC(64)	1802	1663
115	v OC(40)	1859	1772
116	v OC(88)	1904	1786
117	v OC(50)	1921	1811
118	v CH(91)	3030	2982
119	v CH(92)	3059	3025
120	v CH(97)	3070	3036
121	v CH(50)	3086	3041
122	v CH(100)	3117	3078
123	v CH(100)	3135	3095
124	v CH(46)	3149	3117
125	v CH(92)	3152	3122
126	v CH(97)	3159	3131
127	v CH(52)	3188	3142
128	v CH(54)	3191	3145
129	v CH(34)	3202	3147
130	v CH(42)	3211	3169
131	v CH(67)	3220	3176

Tablo 3.90.'nın devamı

132	ν CH(46)	3222	3180
133	ν CH(57)	3227	3185
134	ν CH(56)	3236	3187
135	ν CH(48)	3238	3193

Tablo 3.91. 186 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm^{-1})

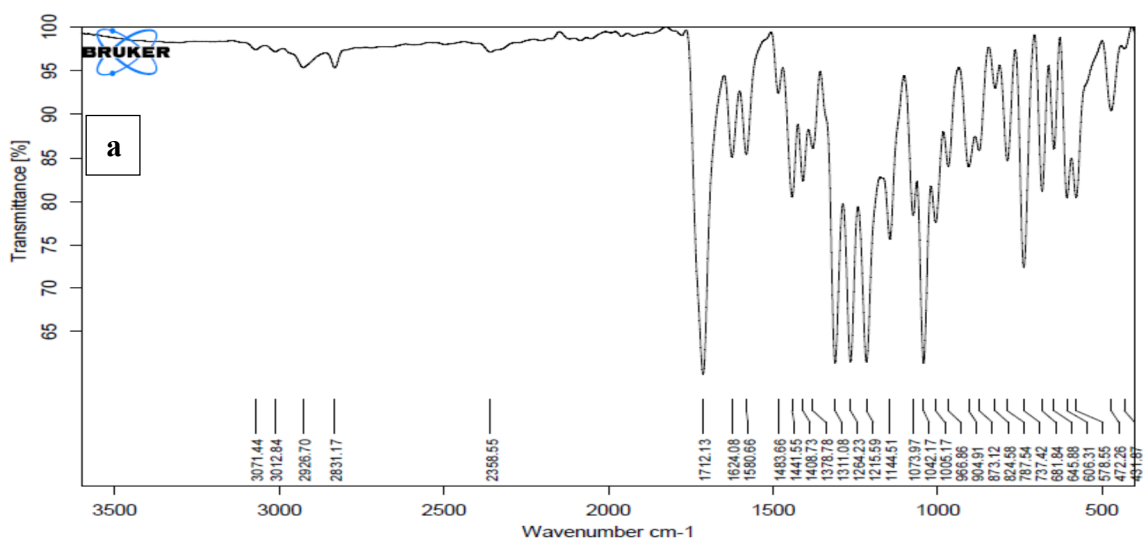
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCNC(16), τ CCCC(12), τ CNNC(25), τ COCC(17)	13	14
2	τ CCCC(13), τ COCC(34), τ CCOC(24)	17	17
3	δ NCC(18), δ CCO(12), δ CCC(22), δ COC(22), δ NNC(17)	25	24
4	τ CNNC(11), τ COCC(41), τ CCOC(34)	30	32
5	τ NCNN(32), τ CCNC(14), τ NNCC(23)	40	38
6	τ CCNC(65)	62	59
7	δ CCC(13), δ COC(28), δ NNC(16), τ HCOC(10), τ COCC(57)	66	68
8	δ COC(15), δ CCO(17), δ NNC(15), τ CCCC(10), τ COCC(48)	67	80
9	τ COCC(31), τ CCCC(22)	87	94
10	τ NCNC(10), τ NNCC(11), τ CCNN(18), τ CCCC(15)	102	98
11	δ CCC(11), δ COC(13), δ CCO(12), τ HCCN(29), τ NCNC(12), τ CNNC(14), τ CCNN(13)	124	123
12	δ CCO(12), δ CCC(17), δ COC(12), τ NCNC(18), τ CNNC(13), τ CCNN(22)	141	124
13	δ NCC(11), δ CNN(15), τ HCCN(48)	157	141
14	δ CNN(15), δ NCC(11), τ HCCN(50), τ CCNN(10)	167	157
15	τ HCCN(16), τ NCNC(11), τ CCNN(11), τ CCCC(27)	173	160
16	τ CCCC(15), τ HCCN(62)	179	169
17	τ NCNC(16), τ CNNC(19), τ CCNN(10)	185	183
18	δ COC(32)	194	196
19	τ HCOC(45), τ COCC(14), τ OCCC(18), τ CCCC(13)	210	209
20	δ CNN(22), δ CCN(22)	219	216
21	ν CC(14), δ COC(12), δ CCN(10)	248	247
22	τ CCCC(22)	263	257
23	δ COC(34), τ HCOC(21), τ CCCC(23)	270	269
24	δ CCO(10), δ CCC(11), δ COC(30), τ HCOC(11), τ CCCC(30)	273	272
25	τ CNNC(26), τ CCCC(17)	281	285
26	δ OCO(11), δ COC(16), δ CCN(23)	325	323
27	δ OCO(11), δ CCO(12), δ CNN(18), δ COC(13)	353	348
28	δ OCN(28), δ CCN(27), τ NCNN(17), τ NNCC(17), τ CNNC(20)	371	352
29	δ OCN(23), δ CCN(27), τ NCNN(17), τ NNCC(21), τ CCNN(37), τ CNNC(20)	372	363
30	δ OCN(23), δ CCN(27), τ NCNN(11), τ NNCC(10), τ CCNN(40)	375	364
31	δ OCC(13), δ CCN(12)	419	409
32	δ CCC(32), δ COC(10)	434	428
33	δ CCC(17), δ NNC(12)	454	446
34	τ CCCC(49)	464	447
35	τ HCCC(20), τ CCCC(42), τ CCOC(14), τ OCCC(10)	485	467
36	δ CCC(18)	495	488
37	δ CCC(16), δ COC(18), τ HCCC(13), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCCC(39)	557	550
38	δ CCC(16), δ COC(20), τ CCOC(34), τ CCCC(17), τ HCCC(12), τ OCOC(13), τ OCCC(21)	573	553
39	ν NN(10), ν CC(15), δ OCC(15), δ CNN(23), δ CCC(14)	581	570
40	ν NC(16), ν CC(29), δ OCC(34)	585	575
41	δ COC(19), δ CCC(28), δ CCO(14)	594	584
42	τ HCCN(14), τ ONNC(41)	614	595
43	ν CC(23), δ CCN(12), τ CCCC(17), τ CCOC(34)	634	608

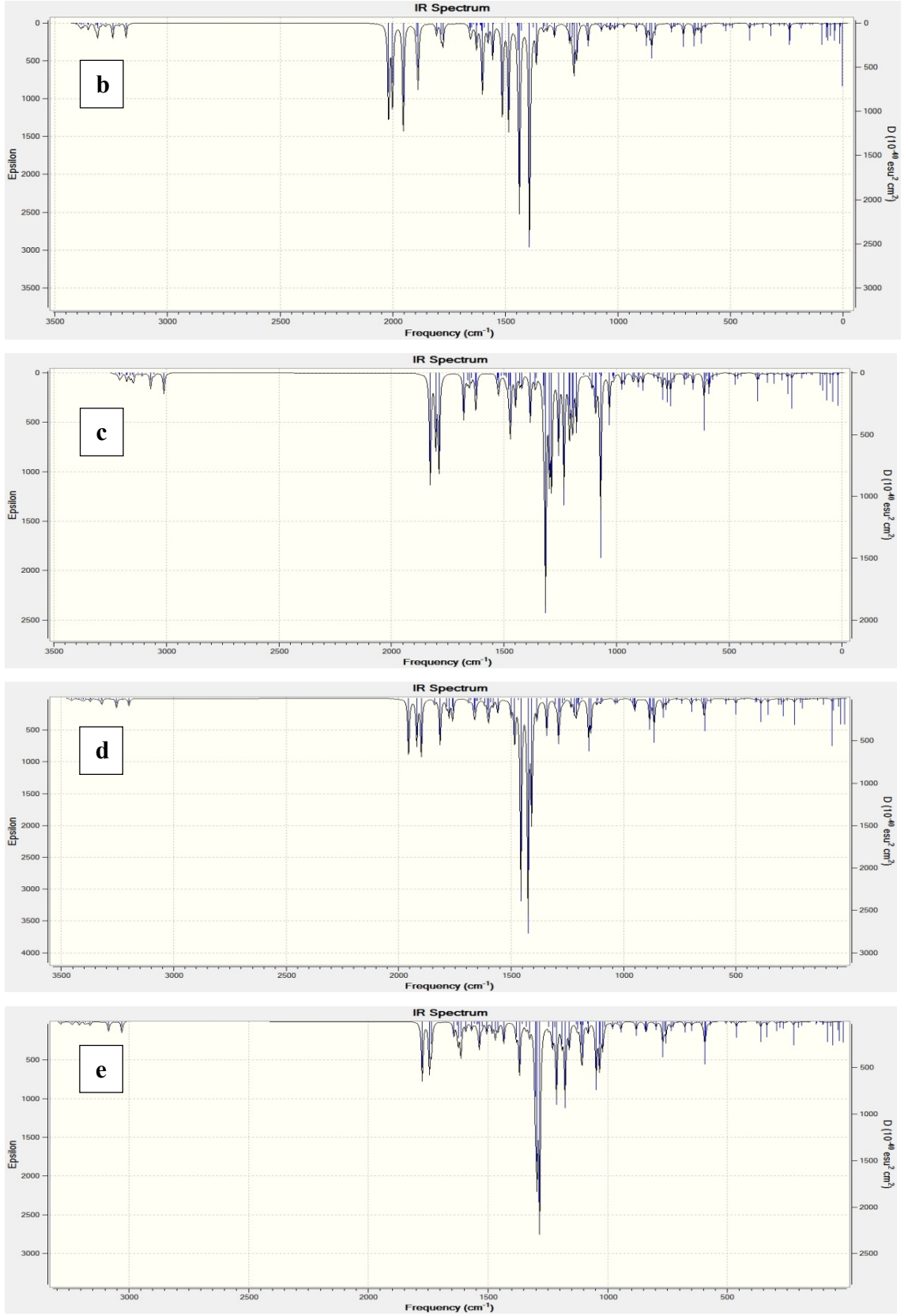
Tablo 3.91.'in devamı

44	v CC(21), δ CCN(13), τ OCCC(23), τ CCCC(27)	637	626
45	δ OCN(12), δ NCC(13), δ CCC(14)	672	655
46	τ NCNC(19), τ ONNC(10), τ CNNC(12)	693	656
47	v CC(14), δ CCC(28), τ ONNC(43), τ CCNN(13)	694	682
48	τ HCCC(31), τ CCCC(19)	727	702
49	τ HCCC(42), τ CCCC(30)	737	710
50	δ NCN(21)	749	730
51	τ ONNC(43), τ CCNN(13), τ HCCC(13), τ OCOC(55)	784	737
52	δ OCO(17), τ HCCC(12), τ OCOC(52)	790	743
53	v OC(11), δ OCO(27)	801	770
54	δ NCC(11), δ NCN(12), τ ONNC(42), τ CCNN(15)	804	782
55	τ HCCC(34), τ CCCC(13)	862	810
56	τ HCCC(63), τ OCOC(10)	865	812
57	v CC(11), v OC(15), δ OCO(11), τ HCCC(54)	871	850
58	v CC(13)	882	862
59	v CC(23), v OC(11), δ CCC(14), δ NCN(17), τ HCCN(14)	933	912
60	v CC(21), δ NCN(13), τ HCCN(14), τ HCCC(46)	943	919
61	v CC(10), v OC(15), τ HCCC(54)	996	926
62	v CC(14), v OC(11), τ HCCC(33)	998	926
63	v CC(28), δ CCC(10), τ HCCC(28)	1002	945
64	v CC(13), δ CCC(22), τ HCCC(26)	1011	978
65	v CC(32), v OC(24), δ CCC(10), τ HCCC(34)	1017	985
66	v NC(14), δ HCH(12), τ HCCN(31), τ HCCC(60), τ CCCC(14)	1040	995
67	v NC(10), τ HCCC(51), τ HCNN(15)	1041	996
68	v OC(55), v NC(10), δ CCC(22), τ HCCC(51)	1050	996
69	v NC(12), δ CCC(17), τ HCCN(14), τ HCCC(62)	1074	999
70	v OC(34), δ CCC(22), τ HCCC(47)	1078	1012
71	v NC(14), τ HCNN(82), τ HCCN(11)	1087	1044
72	δ CNN(12), δ HCC(18), δ CCC(12), τ HCCN(15)	1090	1047
73	δ HCH(20), τ HCCN(54)	1094	1065
74	v CC(18), v OC(13), δ HCC(17), δ CCC(12)	1099	1068
75	v CC(18), δ HCC(15), δ CNN(14), τ HCNN(21)	1100	1073
76	δ HCH(21), τ HCCN(55), τ HCNN(24)	1100	1075
77	v CC(12), δ HCC(19), τ HCNN(48), τ HCCN(21)	1107	1086
78	v CC(18), δ NCN(12), τ HCCN(19), δ HCC(21)	1121	1091
79	v CC(31), v NC(10), v NN(10), δ HCH(24), τ HCOC(25), τ HCCN(13)	1148	1120
80	v NC(10), v NN(10), v CC(31), δ HCH(24), δ OCC(11), τ HCOC(26)	1155	1121
81	v OC(13), v CC(31), δ HCC(13), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1156	1137
82	v CC(10), δ HCC(12), δ HCH(15), τ HCOC(27)	1166	1150
83	v CC(10), v OC(12), δ HCC(14)	1171	1172
84	v NN(13), v CC(18), v OC(13), δ HCC(17), δ HCH(13), τ HCOC(25)	1184	1180
85	δ HCC(39)	1218	1188
86	v CC(14), v OC(10), δ HCC(41)	1219	1202
87	v CC(19), v OC(13), δ HCC(12)	1243	1240
88	v NC(42), v NN(15)	1258	1250
89	v CC(18), v OC(36), δ HCH(13), τ HCOC(25)	1279	1257
90	v CC(27), v OC(23), δ HCC(10)	1294	1280
91	v CC(27), v NC(33), δ HCC(26), δ CNN(15)	1323	1294
92	v CC(15), δ HCC(41)	1334	1309
93	δ HCN(10), δ HCC(50)	1348	1321
94	v NC(14), δ HCN(19), δ HCC(28)	1363	1333
95	δ HCN(38)	1417	1384
96	δ HCH(95)	1436	1407
97	v CC(16), δ HCC(11), δ HCH(98)	1445	1417
98	δ HCH(95), δ HCN(17), δ HCC(10)	1453	1419
99	v CC(12), δ HCC(15)	1458	1431

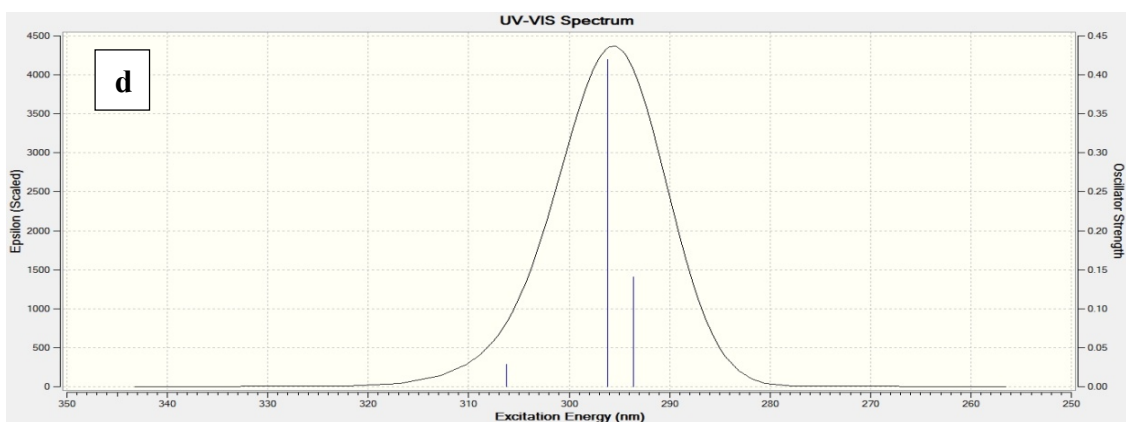
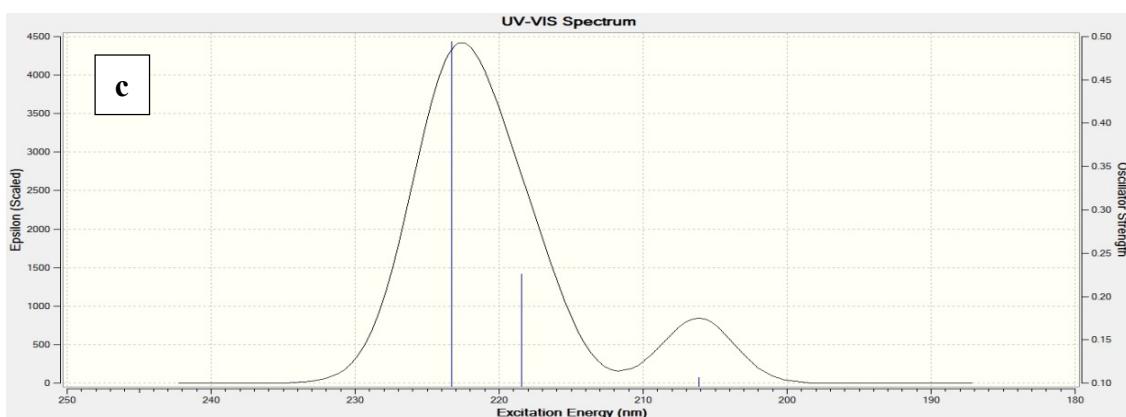
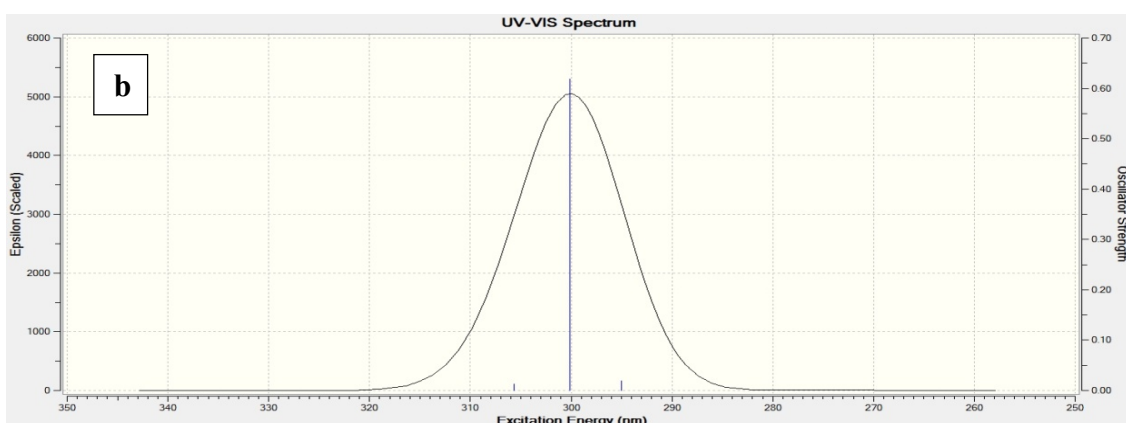
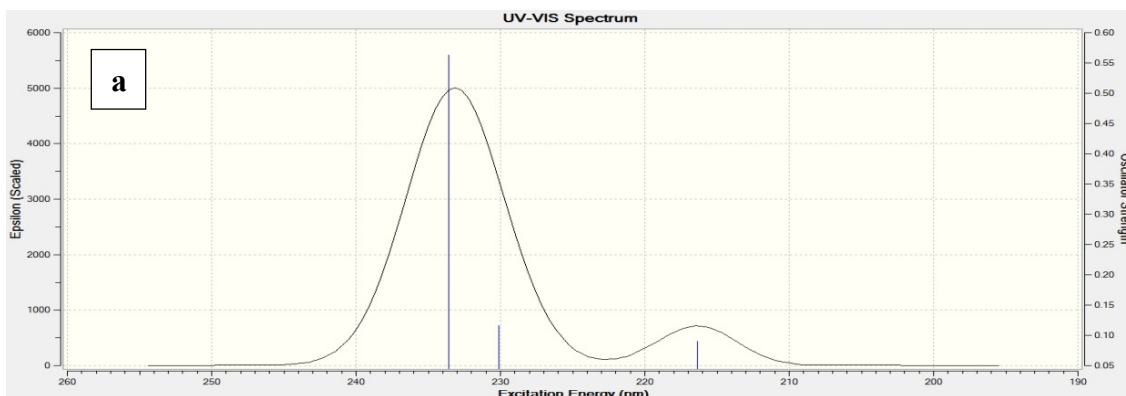
Tablo 3.91.'in devamı

100	δ HCH (72), τ HCCN(24)	1470	1453
101	δ HCC(10), δ HCH(72)	1483	1453
102	δ HCH(66), τ HCCN(25)	1488	1472
103	δ HCC(27), δ HCH(76), τ HCCN(24)	1497	1482
104	δ HCC(20), δ CCC(10), δ HCH(74), τ HCCN(26)	1504	1483
105	δ HCH(76), δ HCC(47), τ HCCN(23), δ CCC(10)	1508	1488
106	ν CC(19), δ HCC(24), δ HCH(74), τ HCCN(26)	1513	1493
107	δ HCH(76), τ HCOC(11)	1525	1503
108	δ HCH(74)	1534	1514
109	ν CC(26), ν NC(39), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1537
110	ν CC(41), ν NC(13), δ HCH(14), δ HCC(17)	1600	1557
111	ν CC(24), δ HCC(20), δ CCC(10)	1613	1557
112	ν CC(34), δ HCC(16), δ CCC(10)	1623	1567
113	ν NC(43), ν CC(30), δ CCC(17)	1649	1572
114	ν CC(21), ν NC(45), δ HCC(11)	1671	1585
115	ν OC(83)	1726	1676
116	ν OC(85)	1744	1684
117	ν OC(46)	1777	1713
118	ν CH(91)	2907	2924
119	ν CH(92)	2933	2967
120	ν CH(96)	2946	2977
121	ν CH(94)	2957	2978
122	ν CH(100)	2985	3016
123	ν CH(100)	3003	3032
124	ν CH(46)	3016	3051
125	ν CH(92)	3018	3060
126	ν CH(96)	3029	3071
127	ν CH(51)	3062	3080
128	ν CH(52)	3064	3093
129	ν CH(36)	3083	3096
130	ν CH(67)	3091	3121
131	ν CH(66)	3092	3123
132	ν CH(29)	3097	3126
133	ν CH(56)	3108	3134
134	ν CH(48)	3119	3152
135	ν CH(26)	3138	3168





Şekil 3.38. 186 Bileşiminin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları



λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
233.56/305.68	223.27/306.25	5.3086/4.0560	5.5532/4.0485	0.5635/0.0133	0.4944/0.0289
230.11/300.10	218.45/296.12	5.3881/4.1315	5.6756/4.1870	0.1160/0.6182	0.2256/0.4198
216.34/295.01	206.15/293.56	5.7311/4.2026	6.0143/4.2235	0.0905/0.0186	0.1064/0.1408

Şekil 3.39. 186 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.92. 186 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açılı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(40)-N(39)	105.770	105.508	104.543	103.744
2	C(1)-N(41)-N(42)	120.975	121.129	120.272	120.488
3	C(1)-N(41)-C(2)	108.151	108.209	109.246	109.227
4	C(1)-C(18)-H(33)	110.538	110.982	110.099	110.302
5	C(1)-C(18)-H(34)	108.517	108.681	108.875	108.805
6	C(1)-C(18)-H(35)	110.542	110.980	110.099	110.302
7	H(33)-C(18)-H(35)	107.879	107.292	108.036	107.700
8	H(34)-C(18)-H(33)	109.678	109.435	109.862	109.861
9	H(34)-C(18)-H(35)	109.678	109.446	109.862	109.862
10	N(40)-C(1)-N(41)	111.683	111.914	112.041	112.710
11	N(40)-N(39)-C(19)	119.251	119.033	118.857	118.595
12	N(39)-C(19)-O(47)	119.737	119.732	120.513	120.642
13	N(39)-C(19)-C(20)	116.694	115.798	115.264	114.021
14	O(47)-C(19)-C(20)	123.569	124.470	124.223	125.337
15	C(19)-C(20)-H(36)	111.197	111.480	110.990	110.991
16	C(19)-C(20)-H(37)	107.039	107.378	107.237	107.378
17	C(19)-C(20)-H(38)	111.216	111.485	110.990	110.995
18	H(36)-C(20)-H(37)	110.194	110.173	110.299	110.523
19	H(36)-C(20)-H(38)	107.029	106.204	107.056	110.526
20	H(37)-C(20)-H(38)	110.197	110.151	110.299	106.468
21	O(47)-C(19)-N(39)	119.737	119.732	124.223	120.642
22	C(19)-N(39)-C(2)	128.974	128.716	129.765	129.251
23	N(39)-C(2)-N(41)	102.622	102.118	102.792	102.165
24	N(39)-C(2)-O(43)	129.540	129.924	129.598	129.891
25	O(43)-C(2)-N(41)	127.838	127.957	127.611	127.944
26	C(2)-N(41)-N(42)	130.865	130.654	130.483	130.284
27	N(41)-C(1)-C(18)	123.094	123.131	122.180	122.098
28	N(40)-C(1)-C(18)	125.223	124.955	125.779	125.192
29	N(41)-N(42)-C(3)	120.423	119.566	119.242	117.363
30	N(42)-C(3)-H(21)	122.541	122.228	122.716	122.661
31	N(42)-C(3)-C(4)	120.346	120.205	120.114	119.751
32	H(21)-C(3)-C(4)	117.113	117.567	117.170	117.588
33	C(3)-C(4)-C(5)	117.977	117.869	119.062	117.901
34	C(3)-C(4)-C(9)	122.434	122.452	121.682	121.666
35	C(4)-C(5)-H(22)	120.849	120.256	120.988	121.126
36	C(4)-C(5)-C(6)	119.732	119.536	119.062	119.170
37	H(22)-C(5)-C(6)	119.418	120.203	119.949	119.704
38	C(5)-C(6)-O(44)	119.960	122.614	124.875	125.412
39	C(5)-C(6)-C(7)	121.092	120.949	120.767	120.573
40	O(44)-C(6)-C(7)	118.872	116.320	114.357	114.016

Tablo 3.92.'nin devamı

41	C(6)-C(7)-H(23)	119.636	119.179	118.702	118.525
42	C(6)-C(7)-C(8)	119.145	119.372	119.741	119.877
43	H(23)-C(7)-C(8)	121.219	121.449	121.557	121.597
44	C(7)-C(8)-H(24)	119.521	119.482	119.587	119.508
45	C(7)-C(8)-C(9)	120.530	120.512	120.328	120.341
46	H(24)-C(8)-C(9)	119.949	120.006	120.085	120.150
47	C(8)-C(9)-H(25)	120.549	120.832	121.108	121.532
48	C(8)-C(9)-C(4)	119.911	119.952	119.517	119.605
49	H(25)-C(9)-C(4)	119.540	119.216	119.374	118.864
50	C(9)-C(4)-C(5)	119.589	119.678	120.584	120.434
51	C(6)-O(44)-C(10)	119.544	120.971	128.197	125.440
52	O(44)-C(10)-O(45)	123.206	123.551	123.387	124.068
53	O(44)-C(10)-C(11)	111.970	111.140	111.477	110.193
54	O(45)-C(10)-C(11)	124.824	125.308	125.136	125.739
55	C(10)-C(11)-C(16)	122.163	122.627	122.037	122.553
56	C(10)-C(11)-C(12)	117.234	117.038	116.957	116.611
57	C(11)-C(12)-H(26)	120.477	120.192	120.635	120.160
58	C(11)-C(12)-C(13)	120.278	120.321	120.064	120.238
59	H(26)-C(12)-C(13)	119.245	119.486	119.301	119.602
60	C(12)-C(13)-O(46)	115.786	115.730	116.040	115.833
61	C(12)-C(13)-C(14)	119.418	119.515	119.348	119.181
52	C(13)-O(46)-C(17)	119.962	118.632	120.977	118.208
63	O(46)-C(13)-C(14)	124.796	124.755	124.612	124.986
64	O(46)-C(17)-H(30)	111.452	111.517	111.298	111.584
65	O(46)-C(17)-H(31)	106.183	105.741	105.458	104.862
66	O(46)-C(17)-H(32)	111.454	111.538	111.298	111.584
67	H(30)-C(17)-H(31)	109.109	109.251	109.624	109.692
68	H(30)-C(17)-H(32)	109.442	109.447	109.459	109.335
69	H(31)-C(17)-H(32)	109.106	109.249	109.624	109.692
70	H(26)-C(12)-C(13)	119.245	119.486	119.301	119.602
71	C(13)-C(14)-C(15)	119.798	119.685	119.348	120.142
72	C(13)-C(14)-H(27)	121.107	121.011	120.690	120.613
73	H(27)-C(14)-C(15)	119.096	119.303	119.171	119.246
74	C(14)-C(15)-C(16)	121.130	121.135	120.796	120.904
75	C(14)-C(15)-H(28)	119.030	119.065	119.260	119.183
76	H(28)-C(15)-C(16)	119.839	119.800	119.944	119.913
77	C(15)-C(16)-H(29)	120.745	120.821	121.386	121.644
78	C(15)-C(16)-C(11)	118.773	119.007	118.647	118.700
79	H(29)-C(16)-C(11)	120.482	120.172	119.967	119.657
80	C(16)-C(11)-C(12)	120.603	120.336	121.006	120.836

Tablo 3.93.186 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

	Bağ Uzunlukları	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(41)	1.3843	1.3809	1.3907	1.3932
2	C(1)-N(40)	1.2751	1.2614	1.2898	1.3077
3	C(1)-C(18)	1.4836	1.4873	1.4849	1.4857
4	C(18)-H(33)	1.0823	1.0826	1.0925	1.0947
5	C(18)-H(34)	1.0792	1.0796	1.0889	1.0909
6	C(18)-H(35)	1.0823	1.0827	1.0926	1.0947
7	N(41)-C(2)	1.3847	1.3775	1.4070	1.4163
8	C(2)-O(43)	1.2166	1.1924	1.2137	1.2372
9	N(39)-C(2)	1.3762	1.3734	1.3978	1.4032
10	N(39)-N(40)	1.4353	1.3806	1.3917	1.4506

Tablo 3.93.'ün devamı

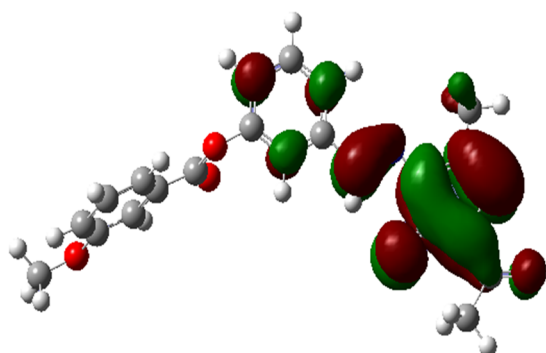
11	N(39)-C(19)	1.4046	1.4122	1.4314	1.4265
12	C(19)-C(20)	1.5080	1.5061	1.5081	1.5149
13	C(19)-O(47)	1.2017	1.1775	1.2000	1.2234
14	C(20)-H(36)	1.0809	1.0813	1.0913	1.0934
15	C(20)-H(37)	1.0784	1.0792	1.0884	1.0901
16	C(20)-H(38)	1.0809	1.0813	1.0914	1.0934
17	N(41)-N(42)	1.4008	1.3642	1.3716	1.4143
18	N(42)-C(3)	1.2670	1.2574	1.2845	1.2969
19	C(3)-H(21)	1.0699	1.0737	1.0863	1.0846
20	C(3)-C(4)	1.4709	1.4763	1.4661	1.4648
21	C(4)-C(5)	1.3883	1.3854	1.4006	1.4033
22	C(4)-C(9)	1.3864	1.3937	1.4036	1.4035
23	C(5)-H(22)	1.0656	1.0746	1.0820	1.0778
24	C(5)-C(6)	1.3807	1.3815	1.3909	1.3949
25	C(6)-O(44)	1.3949	1.3782	1.3922	1.4087
26	C(6)-C(7)	1.3816	1.3746	1.3897	1.3975
27	C(7)-H(23)	1.0693	1.0741	1.0840	1.0817
28	C(7)-C(8)	1.3817	1.3895	1.3955	1.3949
29	C(8)-H(24)	1.0712	1.0746	1.0848	1.0833
30	C(8)-C(9)	1.3811	1.3777	1.3868	1.3917
31	C(9)-H(25)	1.0695	1.0726	1.0829	1.0819
32	O(44)-C(10)	1.3579	1.3782	1.3739	1.3955
33	C(10)-O(45)	1.2049	1.1781	1.2019	1.2276
34	C(10)-C(11)	1.4782	1.4916	1.4885	1.4800
35	C(11)-C(12)	1.3773	1.3802	1.3927	1.3925
36	C(11)-C(16)	1.3885	1.3934	1.4027	1.4029
37	C(12)-H(26)	1.0687	1.0722	1.0828	1.0812
38	C(12)-C(13)	1.3859	1.3903	1.3973	1.3986
39	C(13)-O(46)	1.3686	1.3452	1.3608	1.3822
40	C(13)-C(14)	1.3821	1.3851	1.3988	1.4000
41	C(14)-H(27)	1.0695	1.0726	1.0827	1.0815
42	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3965	1.3990
43	C(15)-H(28)	1.0714	1.0749	1.0850	1.0836
44	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3871	1.3901
45	C(16)-H(29)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0793
46	O(46)-C(17)	1.4370	1.3979	1.4195	1.4604
47	C(17)-H(30)	1.0830	1.0849	1.0953	1.0967
48	C(17)-H(31)	1.0772	1.0784	1.0881	1.0900
49	C(17)-H(32)	1.0830	1.0849	1.0954	1.0967

Tablo 3.94. 186 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

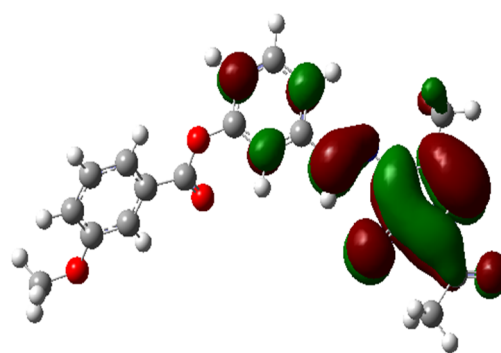
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.533	0.765	0.422	0.632
C2	0.811	1.315	0.611	0.991
C3	0.043	0.196	-0.050	0.112
C4	-0.051	-0.165	-0.024	-0.055
C5	-0.256	-0.245	-0.210	-0.211
C6	0.333	0.384	0.231	0.302
C7	-0.222	-0.252	-0.193	-0.191
C8	-0.204	-0.227	-0.201	-0.183
C9	-0.194	-0.203	-0.158	-0.172
C10	0.646	1.008	0.431	0.707
C11	-0.204	-0.246	-0.159	-0.107

Tablo 3.94.'ün devamı

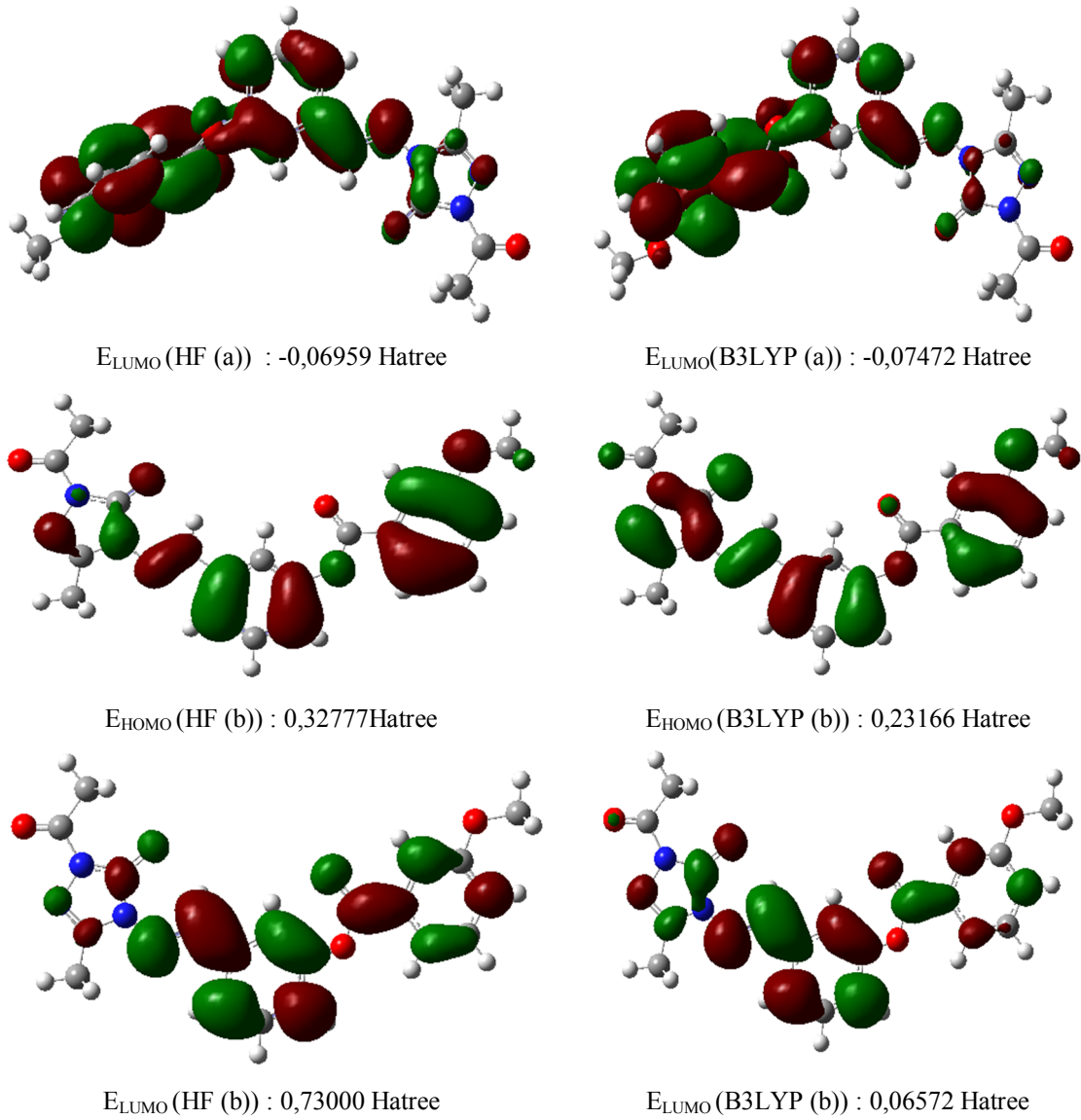
C12	-0.240	-0.190	-0.203	-0.165
C13	0.369	0.418	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.265	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.181
C16	-0.212	-0.200	-0.160	-0.182
C17	-0.416	-0.274	-0.464	-0.336
C18	-0.675	-0.619	-0.673	-0.597
C19	0.583	0.881	0.429	0.664
C20	-0.727	-0.689	-0.720	-0.638
H21	0.304	0.328	0.260	0.261
H22	0.242	0.324	0.231	0.247
H23	0.236	0.269	0.212	0.208
H24	0.229	0.254	0.203	0.198
H25	0.243	0.272	0.211	0.208
H26	0.265	0.305	0.230	0.229
H27	0.243	0.256	0.217	0.197
H28	0.225	0.252	0.199	0.196
H29	0.244	0.274	0.213	0.206
H30	0.208	0.200	0.212	0.200
H31	0.234	0.239	0.234	0.227
H32	0.208	0.200	0.211	0.200
H33	0.246	0.254	0.238	0.235
H34	0.261	0.254	0.248	0.234
H35	0.247	0.259	0.239	0.235
H36	0.253	0.260	0.246	0.238
H37	0.249	0.249	0.237	0.223
H38	0.253	0.260	0.247	0.238
N39	-0.478	-0.905	-0.362	-0.651
N40	-0.253	-0.345	-0.192	-0.306
N41	-0.477	-0.861	-0.370	-0.632
N42	-0.273	-0.356	-0.206	-0.318
O43	-0.524	-0.665	-0.383	-0.516
O44	-0.513	-0.815	-0.371	-0.600
O45	-0.435	-0.617	-0.317	-0.481
O46	-0.460	-0.735	-0.336	-0.550
O47	-0.396	-0.552	-0.281	-0.431



E_{HOMO} (HF (a)) : -0,32547 Hatree



E_{HOMO} (B3LYP (b)) : -0,23961 Hatree



Şekil 3.40. 186 Bileşiğinin (6-311G(d)(a) HF/B3LYP, 3-21G(b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

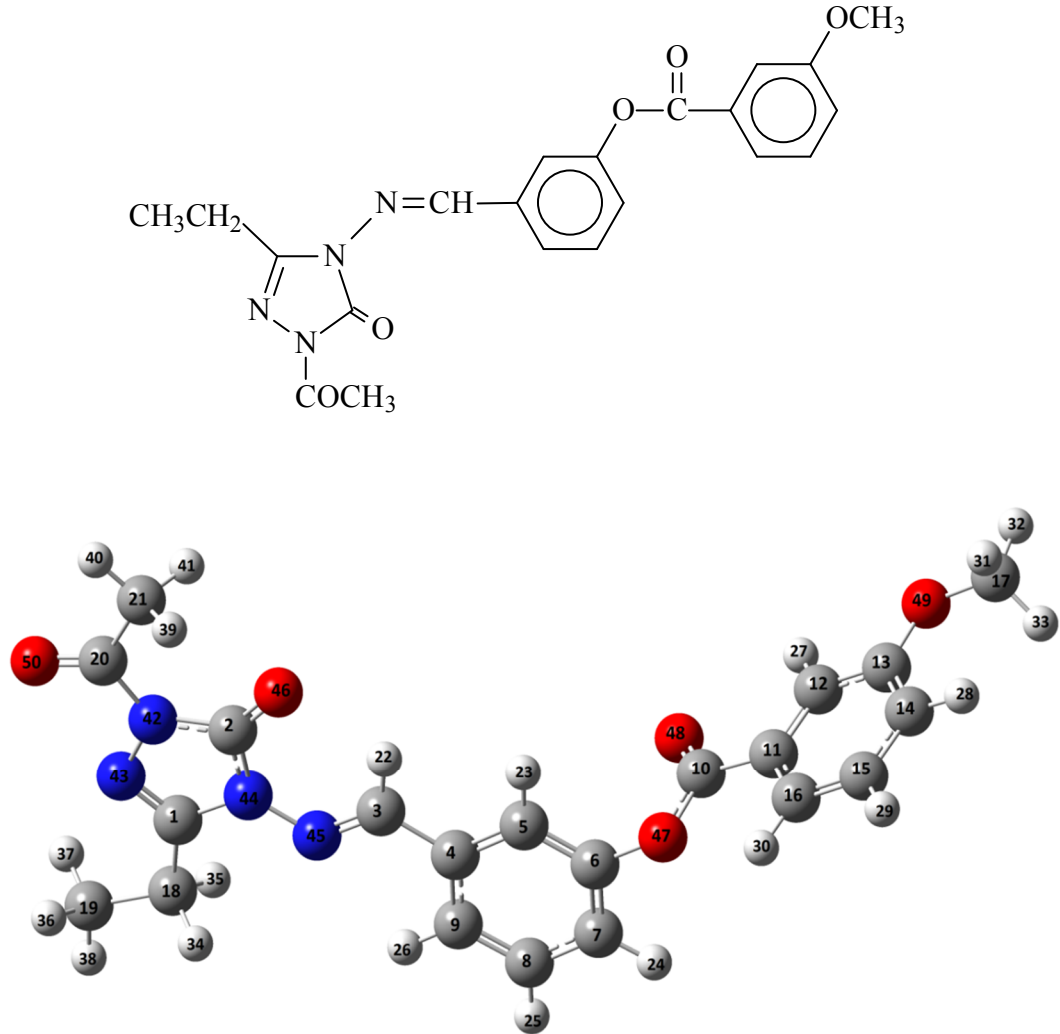
Tablo 3.95. 186 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF	HF	B3LYP	B3LYP
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
μ_x	7.0546	6.3365	5.9903	5.1631
μ_y	-6.5512	-6.0344	-4.9729	-4.2226
μ_z	-1.4866	-1.5253	-1.1429	-1.0421
μ_{Toplam}	9.7414	8.8821	7.8689	6.7508

Tablo 3.96. 186 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF	HF	B3LYP	B3LYP
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G
(a.u.)	-1360.231	-1352.352	-1368.400	-1360.546

3.2.11. 1-Asetil-3-etil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (187):



Şekil 3.41. 187 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.97. 187 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	148.03	153.96	156.85	-5.93	-8.82	142.94	146.31	5.09	1.72
C2	151.07	154.44	155.00	-3.37	-3.93	142.81	143.36	8.26	7.71
C3	150.16	153.38	154.22	-3.22	-4.06	142.96	143.85	7.20	6.31
C4	134.72	139.32	138.89	-4.60	-4.17	126.00	125.69	8.72	9.03
C5	125.44	130.20	129.65	-4.76	-4.21	120.06	119.99	5.38	5.45
C6	154.46	157.81	157.41	-3.35	-2.95	142.45	141.52	12.01	12.94
C7	124.90	126.36	127.64	-1.46	-2.74	117.47	118.32	7.43	6.58
C8	130.01	131.73	133.13	-1.72	-3.12	120.70	121.61	9.31	8.40
C9	120.22	123.59	124.17	-3.37	-3.95	114.49	115.22	5.73	5.00

Tablo 3.97.'nin devamı

C10	164.31	166.44	167.94	-2.13	-3.63	151.39	153.24	12.92	11.07
C11	130.36	134.34	133.47	-3.98	-3.11	122.64	121.70	7.72	8.66
C12	122.13	124.75	122.85	-2.62	-0.72	115.24	113.23	6.89	8.90
C13	159.42	165.19	165.37	-5.77	-5.95	149.57	149.42	9.85	10.00
C14	114.39	115.25	117.92	-0.86	-3.53	104.11	106.59	10.28	7.80
C15	130.16	131.68	133.34	-1.52	-3.18	120.83	122.37	9.33	7.79
C16	120.56	124.13	124.30	-3.57	-3.74	113.34	113.72	7.22	6.84
C17	55.46	53.56	54.10	1.90	1.36	35.30	35.77	20.16	19.69
C18	18.53	22.43	22.27	-3.90	-3.74	6.79	6.71	11.74	11.82
C19	9.37	7.69	7.44	1.68	1.93	-4.04	-4.24	13.41	13.61
C20	165.94	164.52	168.12	1.42	-2.18	151.55	155.58	14.39	10.36
C21	23.43	24.57	24.86	-1.14	-1.43	11.45	11.77	11.98	11.66
H22	9.65	9.54	9.52	0.11	0.13	8.93	8.95	0.72	0.70
H23	7.65	7.21	7.26	0.44	0.39	6.62	6.82	1.03	0.83
H24	7.51	6.85	7.10	0.66	0.41	6.64	6.89	0.87	0.62
H25	7.62	7.12	7.38	0.50	0.24	6.85	7.12	0.77	0.50
H26	7.80	7.73	7.86	0.07	-0.06	7.57	7.72	0.23	0.08
H27	7.78	7.56	7.39	0.22	0.39	7.43	7.23	0.35	0.55
H28	7.35	6.33	6.70	1.02	0.65	6.06	6.47	1.29	0.88
H29	7.55	7.04	7.29	0.51	0.26	6.79	7.08	0.76	0.47
H30	7.76	7.45	7.56	0.31	0.20	7.17	7.31	0.59	0.45
H31	3.87	3.19	3.37	0.68	0.50	2.51	2.71	1.36	1.16
H32	3.87	3.69	3.76	0.18	0.11	3.08	3.14	0.79	0.73
H33	3.87	3.18	3.36	0.69	0.51	2.51	2.71	1.36	1.16
H34	2.77	2.46	2.60	0.31	0.17	1.76	1.95	1.01	0.82
H35	2.77	2.45	2.59	0.32	0.18	1.75	1.92	1.02	0.85
H36	1.25	1.19	1.05	0.06	0.20	0.76	0.60	0.49	0.65
H37	1.25	1.20	0.97	0.05	0.28	0.32	0.53	0.93	0.72
H38	1.25	0.78	1.05	0.47	0.20	0.76	0.59	0.49	0.66
H39	2.52	2.15	2.27	0.37	0.25	1.57	1.71	0.95	0.81
H40	2.52	1.62	1.66	0.90	0.86	1.14	1.17	1.38	1.35
H41	2.52	2.19	2.29	0.33	0.23	1.57	1.71	0.95	0.81

Tablo 3.98. 187 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	148.03	118.61	120.45	29.42	27.58	115.14	117.68	32.89	30.35
C2	151.07	117.56	117.72	33.51	33.35	115.46	115.63	35.61	35.44
C3	150.16	118.44	118.97	31.72	31.19	115.91	116.49	34.25	33.67
C4	134.72	100.14	99.56	34.58	35.16	92.74	92.12	41.98	42.60
C5	125.44	90.67	90.14	34.77	35.30	84.29	83.75	41.15	41.69
C6	154.46	120.87	120.85	33.59	33.61	111.02	110.87	43.44	43.59
C7	124.90	88.38	89.36	36.52	35.54	84.04	84.92	40.86	39.98
C8	130.01	93.73	94.90	36.28	35.11	88.85	89.99	41.16	40.02
C9	120.22	87.52	87.87	32.70	32.35	83.17	83.62	37.05	36.60
C10	164.31	133.22	133.84	31.09	30.47	128.52	129.29	35.79	35.02
C11	130.36	96.42	95.66	33.94	34.70	90.10	89.27	40.26	41.09
C12	122.13	88.43	86.93	33.70	35.20	85.49	83.70	36.64	38.43
C13	159.42	124.41	124.47	35.01	34.95	115.72	115.40	43.70	44.02
C14	114.39	83.19	85.16	31.20	29.23	78.27	80.36	36.12	34.03
C15	130.16	94.27	95.52	35.89	34.64	88.97	90.44	41.19	39.72
C16	120.56	88.17	88.21	32.39	32.35	83.96	84.43	36.60	36.13
C17	55.46	31.52	32.15	23.94	23.31	15.59	16.19	39.87	39.27
C18	18.53	1.67	1.57	16.86	16.96	-12.90	-12.89	31.43	31.42

Tablo 3.98.'in devamı

C19	9.37	-10.03	-10.21	19.40	19.58	-22.59	-22.72	31.96	32.09
C20	165.94	127.60	130.00	38.34	35.94	125.46	128.58	40.48	37.36
C21	23.43	4.35	4.45	19.08	18.98	-7.78	7.59	31.21	15.84
H22	9.65	9.20	9.16	0.45	0.49	8.66	8.63	0.99	1.02
H23	7.65	7.76	7.69	-0.11	-0.04	7.36	7.27	0.29	0.38
H24	7.51	5.80	6.09	1.71	1.42	5.73	6.05	1.78	1.46
H25	7.62	6.09	6.41	1.53	1.21	5.89	6.25	1.73	1.37
H26	7.80	6.84	6.97	0.96	0.83	6.76	6.93	1.04	0.87
H27	7.78	6.65	6.48	1.13	1.30	6.80	6.56	0.98	1.22
H28	7.35	5.25	5.68	2.10	1.67	4.94	5.44	2.41	1.91
H29	7.55	6.03	6.34	1.52	1.21	5.75	6.13	1.80	1.42
H30	7.76	6.64	6.78	1.12	0.98	6.48	6.69	1.28	1.07
H31	3.87	2.74	2.98	1.13	0.89	1.74	2.03	2.13	1.84
H32	3.87	3.38	3.51	0.49	0.36	2.73	2.81	1.14	1.06
H33	3.87	2.74	2.98	1.13	0.89	1.74	2.03	2.13	1.84
H34	2.77	1.73	1.89	1.04	0.88	0.83	1.04	1.94	1.73
H35	2.77	1.73	1.89	1.04	0.88	0.83	1.04	1.94	1.73
H36	1.25	0.61	0.47	0.64	0.78	-0.13	-0.31	1.38	1.56
H37	1.25	0.61	0.47	0.64	0.78	-0.13	-0.31	1.38	1.56
H38	1.25	0.01	0.25	1.24	1.00	-0.74	-0.46	1.99	1.71
H39	2.52	1.97	2.06	0.55	0.46	1.18	1.29	1.34	1.23
H40	2.52	1.00	1.06	1.52	1.46	0.42	0.46	2.10	2.06
H41	2.52	1.97	2.06	0.55	0.46	1.18	1.29	1.34	1.23

Tablo 3.99. 187 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(45), τ CNNC(11), τ COCC(54)	5	11
2	τ CCCC(18), τ COCC(20), τ CNNC(13), τ CCCN(10)	9	16
3	τ COCC(29), τ CCOC(64)	16	18
4	τ NCNN(28), τ COCC(10), τ CCNN(39), τ NCCN(39)	35	35
5	δ NCC(10), τ COCC(17), δ CCC(27)	37	39
6	δ COC(20), τ COCC(20), δ CCO(10), τ CNNC(11), τ CCNC(17)	52	50
7	τ CCNC(41), τ CCCN(21)	58	56
8	δ NCC(10), τ COCC(29), δ CNN(13), δ CCN(20), τ CCCC(16), τ CCOC(11)	62	70
9	τ CCNC(35), τ CCCN(22), τ HCOC(11), τ CCCC(10), τ COCC(65)	70	74
10	τ COCC(59), τ CCNC(22), τ CCCN(40)	77	84
11	τ CNNC(13), τ NNCN(10), τ CCNN(24), τ CCCN(10)	90	93
12	δ CCN(14)	124	116
13	τ CNNC(18), τ NNCN(10), τ CNNC(20), τ CCNN(22), τ NCNN(12)	127	129
14	δ CNN(11), δ CCC(15), δ CCN(13), δ NCN(10)	149	140
15	τ HCCN(44), τ CNNC(11), τ NCNN(14)	162	155
16	τ HCCN(16), τ CNNC(10)	168	161
17	τ CNNC(14), τ CCCC(12)	181	170
18	δ NCC(10), τ HCCN(68)	191	175
19	δ CCC(13), δ COC(19)	196	198
20	τ HCOC(18), τ CCCC(14), τ COCC(14), τ OCCC(24)	224	215
21	τ HCCN(27), τ NCNN(11), τ HCOC(20), τ OCCC(22), τ CCCC(31), τ COCC(10)	225	226
22	τ HCCN(13), τ HCCC(12), τ NCNN(16)	246	239
23	ν CC(12), δ NCN(15)	249	241
24	δ COC(17), τ CCCN(14)	269	263
25	δ CNN(20), δ CCN(10), δ CCC(20), δ NCN(13)	283	273
26	τ HCOC(45), τ CCCC(17), τ COCC(10)	293	281
27	δ COC(15), δ CCC(10), δ OCO(16)	307	298

Tablo 3.99.'un devamı

28	τ NCNN(10), τ NNCN(15), τ CNNC(15), τ CCNN(35), τ NCCN(11)	366	352
29	δ CCO(18), δ CCC(14), τ CNNC(15), τ CCNN(12)	372	358
30	τ CNNC(18), δ CNN(15), δ CCC(14)	374	361
31	ν NC(11), δ OCN(36), δ OCC(14), δ CCN(23)	388	373
32	δ OCC(25), δ CCN(14), δ OCN(31), δ NNC(15)	398	377
33	δ OCO(10), δ CCC(38), δ COC(10)	439	426
34	τ CCCC(10)	459	439
35	δ CCO(10), δ CCN(11)	474	449
36	τ CCOC(17), τ CCCN(10)	482	459
37	δ NNC(19), δ CCO(13)	497	471
38	δ CCC(21)	507	495
39	τ HCCC(11), τ OCOC(12), τ OCCC(37), δ CCC(14), δ COC(11)	581	551
40	δ CCC(11), δ COC(16), τ CCCC(12), τ OCCC(31)	583	566
41	ν NN(12), δ NCN(12), δ CCC(12)	594	577
42	τ HCCN(18), τ ONNC(23), δ CCO(14)	608	582
43	δ COC(12), τ HCCN(14), δ ONN(25)	612	589
44	τ CCOC(20), τ CCCC(16), δ OCO(11), τ CCCN(19), τ COCC(12)	624	598
45	ν CC(21), δ OCC(41), δ OCC(42)	633	608
46	τ NNCN(27), τ CCCN(11), τ CNNC(25), τ NCNN(12)	681	649
47	δ CCC(11), δ NCC(14), δ CCN(10)	687	665
48	τ HCCC(19), τ CCCC(10), δ CCC(21)	708	683
49	δ CCC(23), τ HCCC(28), τ CCCC(17)	716	686
50	τ HCCC(43), τ CCOC(14)	725	691
51	ν CC(15), δ OCN(15), δ CNN(15), δ CCN(18)	746	720
52	τ ONNC(42), ν CC(10), δ CCC(13)	798	737
53	τ HCCC(12), τ OCOC(45)	808	753
54	ν NN(12), δ CCC(16), τ HCCN(11), τ ONNC(35)	810	772
55	τ HCCC(12), δ OCO(10)	830	789
56	τ HCCN(41), τ CNNC(10)	834	799
57	τ HCCC(49), τ OCOC(23), δ NNC(11)	846	802
58	ν NC(10), τ HCCC(50), τ OCOC(29)	861	808
59	τ HCCC(12)	873	824
60	ν OC(12), τ HCCC(11)	925	875
61	ν CC(10), δ OCN(11)	941	891
62	τ HCCC(17), τ HCNN(86)	966	895
63	τ HCCC(16)	967	904
64	τ HCCC(25)	982	917
65	τ HCCC(31)	985	918
66	δ CCC(11), τ HCCC(45)	998	956
67	τ HCCC(54), ν CC(38)	1001	962
68	ν CC(14), τ HCCN(15), δ CCC(32)	1027	966
69	τ HCCC(63), ν CC(16), δ HCH(10), τ HCCN(27)	1028	968
70	ν CC(40), τ HCCN(11), δ CCC(23)	1034	985
71	ν CC(25), δ CCC(19), τ HCCC(23)	1044	1002
72	τ HCNN(86), τ HCCC(16)	1051	1005
73	ν CC(27), δ CCO(27), τ HCNN(88)	1082	1008
74	δ HCH(19), τ HCCN(55), τ ONNC(10)	1114	1058
75	ν OC(42), ν NC(13), δ HCH(17), τ HCCN(14), τ HCCC(13)	1120	1061
76	ν OC(18), δ NNC(11), ν CC(19), δ HCC(24)	1124	1062
77	ν OC(11), δ HCC(20)	1126	1084
78	ν CC(24), τ HCCC(17)	1137	1090
79	ν CC(15), δ HCC(22)	1139	1099
80	ν CC(12), δ HCC(15)	1142	1110
81	δ HCC(12), δ HCH(10), τ HCCN(17), τ HCCC(12), ν CC(17)	1156	1112
82	ν NN(26), τ HCCN(19), δ HCC(11), δ HCH(10), τ HCCC(12)	1161	1136
83	δ HCC(40), ν CC(20)	1168	1166

Tablo 3.99.'un devamı

84	δ HCH(26), τ HCOC(27), ν NN(20), δ HCC(11), τ HCCN(20)	1203	1172
85	δ HCC(11)	1217	1181
86	δ HCC(17), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1185
87	ν NC(10), δ HCC(20), τ HCOC(11)	1251	1198
88	τ HCOC(11), ν CC(17), δ HCC(14)	1261	1199
89	ν CC(10), ν OC(11), δ HCC(12), τ HCOC(11)	1266	1222
90	δ NCN(14), ν NC(14), ν NN(19)	1298	1246
91	δ NCN(12), ν CC(20), ν OC(17)	1310	1271
92	δ HCC(69), τ HCCN(11), ν OC(42), ν CC(11)	1325	1285
93	ν CC(11), δ HCC(10), τ HCCN(13)	1337	1285
94	ν NC(33), ν NN(11), δ CNN(12)	1347	1299
95	ν NC(11), δ HCC(26), ν OC(17)	1368	1308
96	δ HCC(25)	1373	1311
97	ν NC(13), δ HCN(11), δ HCC(10)	1375	1326
98	ν CC(17), δ HCC(41), ν NC(21)	1385	1344
99	ν CC(25), δ HCC(17), ν NC(10), ν NN(11), δ NNC(15)	1427	1349
100	δ HCN(36), τ HCCN(13), δ HCH(11)	1461	1398
101	δ HCH(90)	1480	1406
102	δ HCH(48)	1482	1422
103	ν CC(16), τ HCCN(10)	1504	1437
104	δ HCH(51), τ HCCN(17)	1517	1458
105	δ HCN(10), δ HCH(20), ν CC(11), δ HCC(13)	1524	1460
106	ν CC(13), δ HCC(12), δ HCH(11)	1530	1466
107	δ HCH(75), τ HCCN(24)	1534	1475
108	δ HCH(38), δ HCN(11)	1541	1476
109	δ HCH(58), δ HCC(10)	1546	1480
110	δ HCH(32), τ HCOC(12), τ HCCN(13)	1549	1499
111	δ HCH(32), τ HCOC(12), τ HCCN(10)	1561	1499
112	δ HCH(25), τ HCOC(10), τ HCCC(12)	1562	1509
113	δ HCH(25), τ HCOC(10), τ HCCC(12)	1570	1509
114	δ HCC(33), δ HCH(10), δ CCC(12)	1574	1511
115	δ HCC(27), δ CCC(14)	1577	1515
116	ν CC(17), δ CCC(12)	1691	1610
117	ν CC(29), δ CCC(14)	1698	1611
118	ν CC(21), δ HCC(16)	1717	1628
119	ν CC(13), δ HCC(11)	1718	1638
120	ν NC(56), ν CC(10)	1788	1645
121	ν NC(67)	1802	1658
122	ν OC(40)	1857	1771
123	ν OC(87)	1904	1787
124	ν OC(40)	1920	1810
125	ν CH(91)	3030	2983
126	ν CH(53)	3045	3012
127	ν CH(37)	3056	3024
128	ν CH(57)	3070	3031
129	ν CH(95)	3079	3035
130	ν CH(50)	3086	3041
131	ν CH(38)	3105	3088
132	ν CH(98)	3120	3095
133	ν CH(50)	3135	3095
134	ν CH(46)	3149	3117
135	ν CH(95)	3159	3130
136	ν CH(23)	3188	3142
137	ν CH(17)	3190	3145
138	ν CH(33)	3201	3147
139	ν CH(42)	3211	3169

Tablo 3.99.'un devamı

140	v CH(26)	3220	3175
141	v CH(39)	3223	3180
142	v CH(57)	3227	3185
143	v CH(26)	3236	3187
144	v CH(47)	3238	3193

Tablo 3.100. 187 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

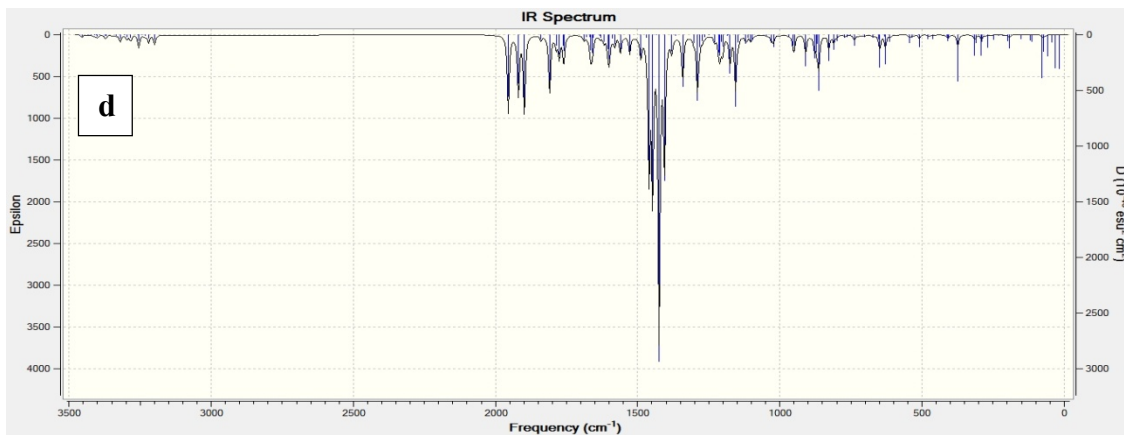
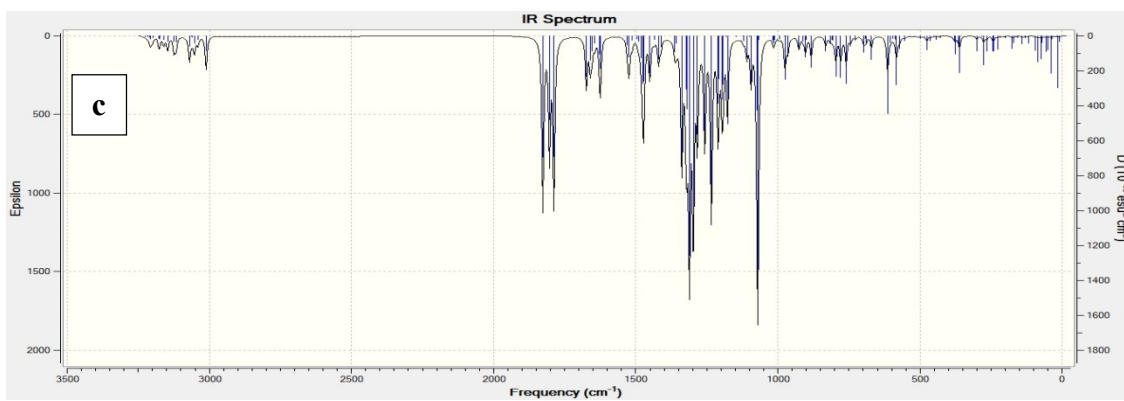
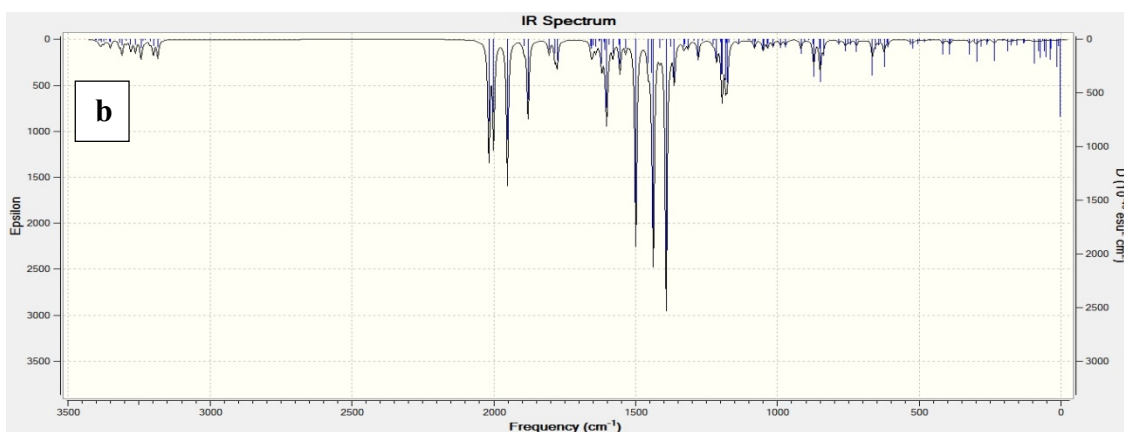
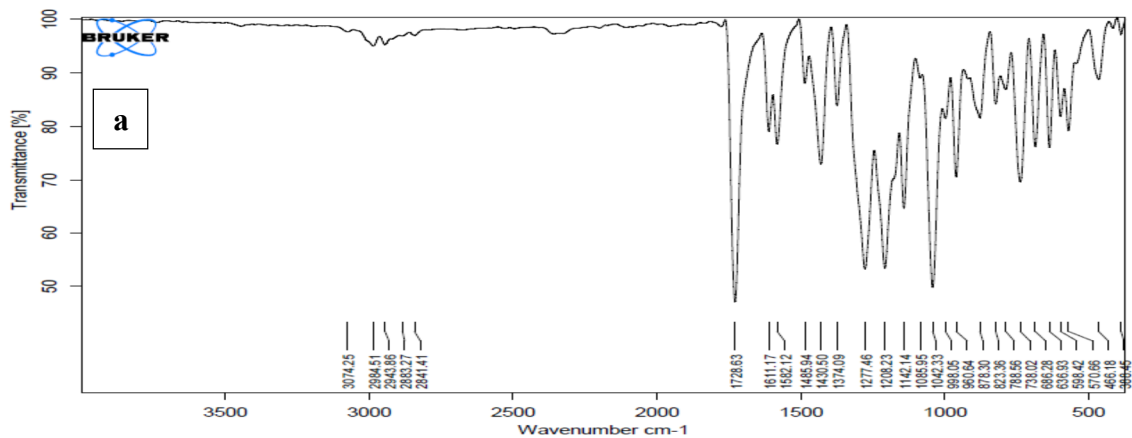
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCNC(19), τ CNNC(25), τ COCC(14), τ CCOC(10)	5	11
2	τ CCCO(13), τ COCC(38), τ CCCC(14), τ CCOC(19)	9	16
3	δ NCC(19), δ CCO(10), δ CCC(22), δ COC(21), δ NNC(17)	15	18
4	τ COCC(44)	34	34
5	τ NCNN(37), τ NNCC(23)	35	38
6	τ CCNC(48), τ CCCN(34)	50	49
7	τ CCNC(38), δ NNC(15), δ COC(15), δ CCO(15)	55	55
8	δ CCC(10), δ COC(30), δ NNC(15), τ COCC(56), τ HCOC(10)	60	68
9	τ CCCO(11), τ COCC(48), τ CCCN(21), τ CCNC(28)	67	72
10	τ COCC(31), τ CCCC(22)	73	82
11	τ NNCC(12), τ CCNN(16), τ CCCC(15), τ NCNC(10)	86	91
12	δ CCC(10), δ CCN(14), δ CCO(10)	118	113
13	τ HCCN(13), τ NCNC(15), τ CNNC(24), τ CCNN(11), δ CNN(19), δ CCN(14)	122	125
14	δ CNN(19), δ CCC(13), δ CCN(13), τ NCNC(18), τ CNNC(26), τ CCNN(16)	142	137
15	τ HCCN(56), τ CNNC(11), τ CCCC(14), τ CCNN(11)	154	151
16	τ CCNN(17), τ CCCC(11), v CC(12)	161	157
17	v CC(11), δ NCC(10), τ CCCC(17), τ HCCN(40)	173	166
18	v CC(11), δ NCC(10), τ CCCC(17), τ HCCN(24)	182	170
19	δ COC(35), δ CCC(11)	187	193
20	τ HCOC(45), τ COCC(13), τ OCC(17), τ CCCC(13)	213	210
21	τ HCCN(43), τ NCNC(11), τ HCCC(12)	215	220
22	v CC(13), δ CNN(13), δ CCN(11), δ NNC(10)	235	233
23	τ CCCO(25), τ CCCC(16), δ COC(32)	237	235
24	δ COC(28), τ CCCC(16)	257	256
25	τ HCOC(19), τ CCCC(30)	271	266
26	τ CNNC(24), τ CCCC(10)	279	273
27	δ CNN(20), δ CCC(16)	293	290
28	δ OCO(21), δ COC(19), τ NCNN(16), τ NNCC(14), τ CNNC(20)	349	343
29	τ NCNN(16), τ NNCC(10), τ CNNC(20), δ CCN(25), δ OCN(23)	355	348
30	v NC(20), δ OCN(39), δ CCN(12), δ CCC(13), δ OCC(18)	357	351
31	τ NCNN(11), τ NNCC(14), τ CCNN(34), τ ONNC(12)	371	363
32	δ OCC(24), δ CNN(13), δ CCN(10), τ NNCC(29), τ CCNN(13)	380	367
33	δ CCC(12)	419	415
34	δ CCC(27), δ COC(12)	438	428
35	τ CCCO(26), δ CCC(27), δ COC(10)	453	437
36	v NC(15), δ CCN(15), τ CCCC(49), τ HCCC(10)	460	447
37	τ CCCC(41), τ CCOC(14), τ HCCC(13), τ OCC(10)	475	459
38	δ CCO(10), δ CCC(14)	484	483
39	τ HCCC(13), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCC(40), δ COC(19), δ CCC(16)	555	537
40	δ CCC(15), δ COC(20), δ CNN(20), v CC(13)	557	552
41	v NN(10), δ CNN(25), τ OCOC(13), τ OCC(21), τ HCCC(12)	567	562
42	v CC(19), δ OCC(39)	580	567
43	δ CCO(19), δ COC(20), δ CCC(27)	585	574
44	τ HCCN(14), τ ONNC(37)	596	583

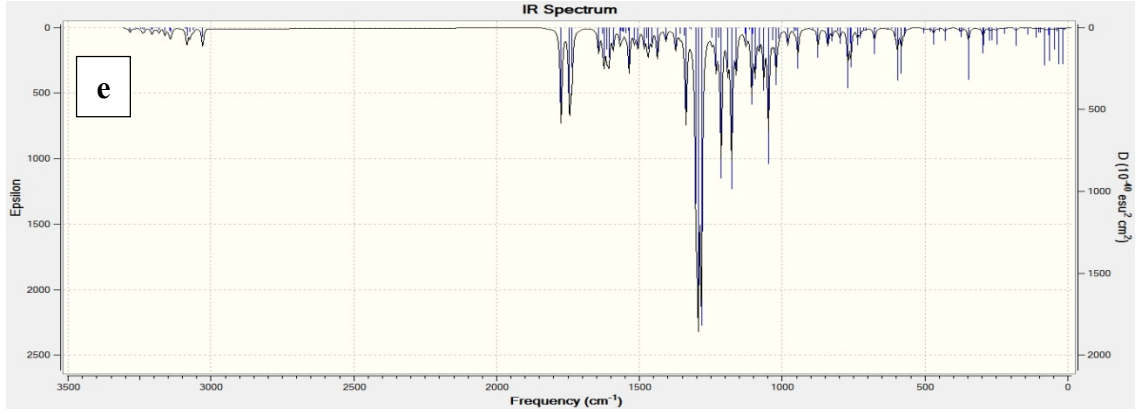
Tablo 3.100.'ün devamı

45	τ CCCC(26), τ CCOC(25), τ OCCC(23)	605	593
46	τ NCNC(16), τ CCCN(10), τ CCC(12), NCC(11)	650	632
47	δ CCC(14), δ NCC(14), τ NCNC(16), τ CCCN(11)	656	648
48	δ CCC(28), ν CC(14)	676	665
49	ν CC(18), δ OCN(12), δ CCN(17), δ CCC(11), δ CNN(10)	684	668
50	τ HCCC(31), τ CCCO(20), τ CCCC(19)	692	673
51	τ HCCC(53), τ CCCC(11)	712	702
52	ν NN(10), δ NCN(18)	762	718
53	τ ONNC(41), τ CCNN(14), τ OCOC(55), τ HCCC(13)	772	734
54	HCCC(12), OCOC(52), δ OCO(12)	774	752
55	ν OC(11), δ OCO(27), τ CCNN(11), τ HCCN(15), τ ONNC(31)	792	769
56	δ OCO(16)	796	778
57	τ HCCN(41), τ CNNC(13), τ ONNC(12)	808	781
58	τ HCCC(29), τ CCCC(12)	822	787
59	τ HCCC(56), τ OCOC(10), ν CC(10), ν OC(10)	834	803
60	ν CC(11), ν NN(10), δ OCN(10), τ HCCC(62)	883	852
61	ν OC(12)	899	868
62	ν NC(11), ν CC(24), τ HCCN(12)	922	872
63	τ HCCC(46), ν CC(10), ν OC(10)	923	880
64	ν CC(30), δ NCN(15), τ HCCN(10)	938	894
65	τ HCCC(44)	941	894
66	τ HCCC(28)	953	931
67	ν CC(56), δ HCH(20), τ HCCN(56), δ CCC(10)	956	937
68	τ HCCC(25), τ CCCC(13), τ CCOC(10), ν CC(13), δ CCC(22)	980	941
69	ν CC(31), ν OC(23), δ CCC(14), τ HCCC(34)	981	943
70	τ HCNN(12), τ HCCC(63), τ CCCC(10)	987	960
71	τ HCCC(49), δ CCC(35), δ CCO(12), ν CC(11), ν OC(55)	997	976
72	ν CC(11), ν NC(28), δ CCC(35), δ CCO(12), τ HCCC(49)	1003	980
73	ν OC(32), δ CCC(23), τ HCCC(67)	1033	982
74	ν NC(26), ν CC(10), τ HCCC(47)	1064	1031
75	δ CCC(11), δ HCC(21)	1070	1033
76	δ CNN(11), τ HCCN(16), δ HCH(14), τ HCCC(24)	1074	1035
77	δ HCH(20), τ HCCN(56)	1075	1056
78	ν OC(13), δ HCC(17)	1085	1062
79	ν CC(19), δ HCH(11), δ HCC(14), τ HCCN(11), τ HCCC(21)	1087	1071
80	ν CC(19), δ HCC(19)	1090	1082
81	ν CC(18), δ HCC(21), δ CNN(11), δ NCN(13), τ HCCN(22)	1103	1084
82	δ HCC(13), δ HCH(10), τ HCCN(26), τ HCCC(13)	1109	1107
83	ν CC(23), ν NC(10), δ HCH(24), δ OCC(11), τ HCOC(25), τ HCCN(13)	1115	1136
84	ν NC(10), δ HCH(24), δ OCC(11), τ HCOC(25)	1149	1141
85	ν CC(30), ν OC(14), δ HCC(13), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1162	1151
86	δ HCH(16), τ HCOC(28), ν CC(15), δ HCC(13)	1176	1155
87	ν OC(12), ν CC(10), δ HCC(14), δ OCC(10)	1194	1167
88	ν NN(13), δ HCC(15), δ CNN(10), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1204	1168
89	δ HCC(41), ν OC(12)	1209	1191
90	ν CC(14), δ HCC(42), ν OC(12)	1239	1213
91	ν CC(19), ν OC(12), δ CCC(13), δ HCC(11)	1251	1239
92	ν NC(43), ν NN(10)	1265	1251
93	ν CC(15), ν OC(38)	1276	1252
94	ν CC(16), ν OC(23), δ HCC(10)	1286	1265
95	δ HCC(68), τ HCCN(12)	1306	1274
96	ν CC(22), ν NC(15), δ HCN(13), τ HCCN(10)	1311	1277
97	ν CC(24), δ HCC(10), ν NC(26), δ CNN(16)	1313	1291
98	ν CC(15), δ HCC(41)	1322	1309
99	δ HCC(76)	1362	1315
100	δ HCN(28), τ HCCN(24)	1395	1362

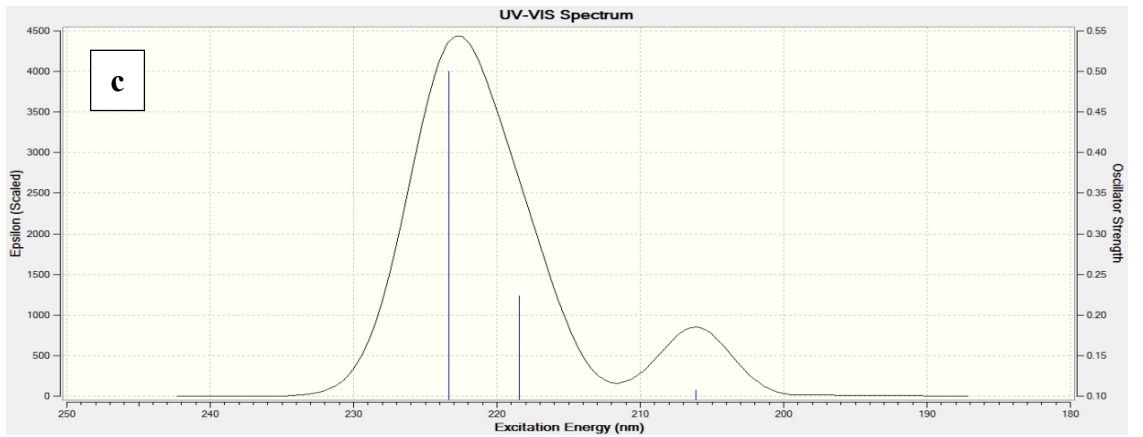
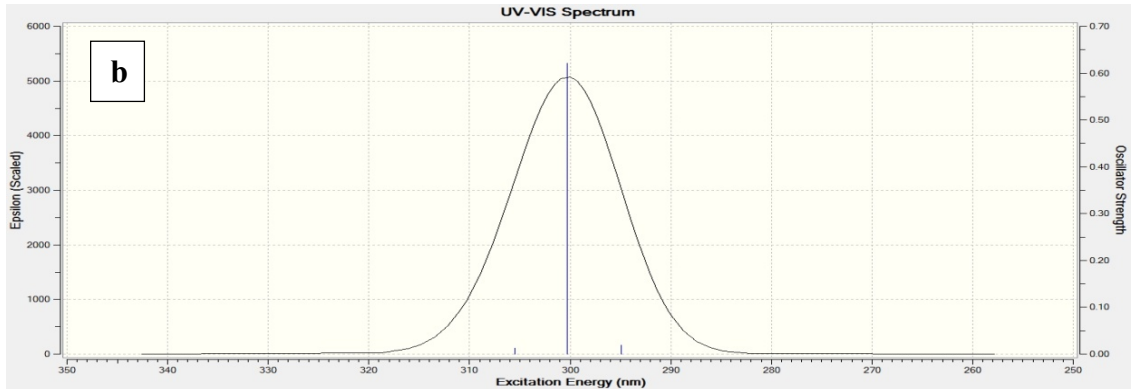
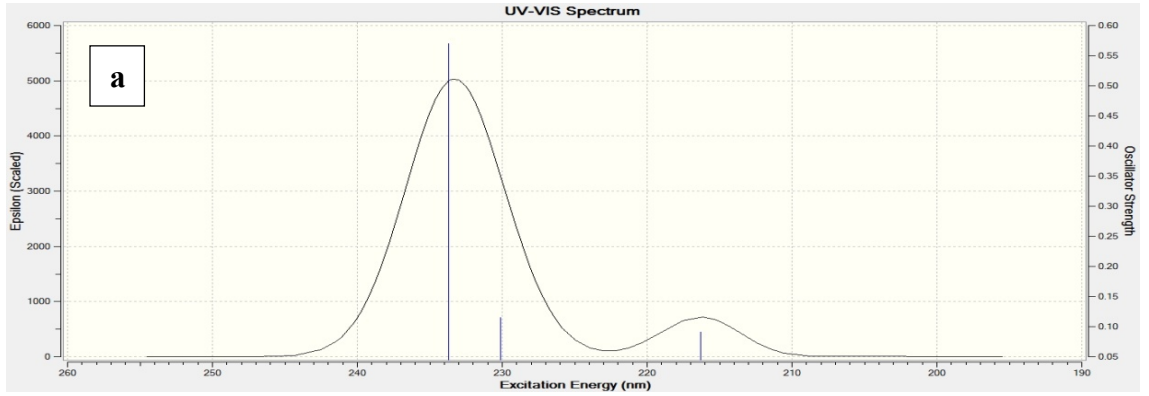
Tablo 3.100.'ün devamı

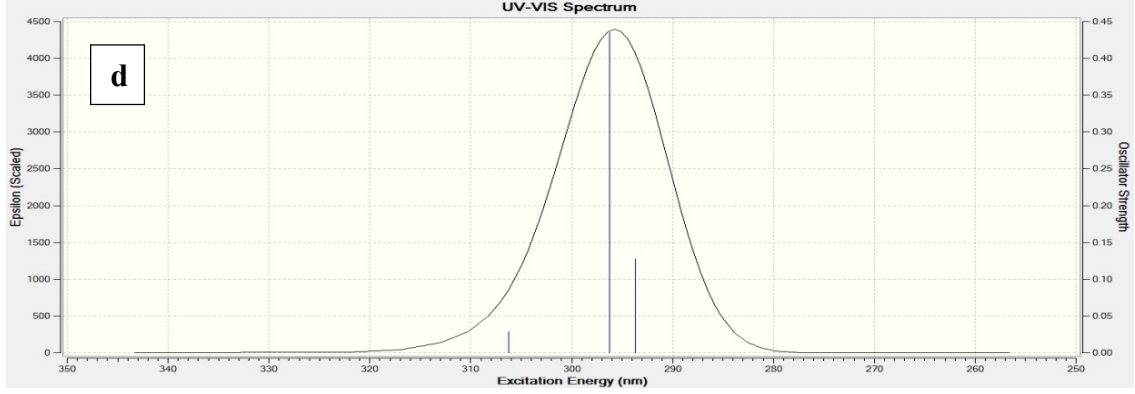
101	δ HCN(32)	1413	1370
102	δ HCH(95)	1415	1385
103	δ HCH(74), δ HCC(16), ν CC(12)	1435	1400
104	δ HCH(73), δ HCN(17), δ HCC(12)	1448	1421
105	ν CC(12), δ HCC(15)	1455	1422
106	δ HCH(70), τ HCCN(24)	1461	1428
107	δ HCC(10), δ HCH(70)	1464	1437
108	δ HCH(72), δ HCC(10)	1471	1438
109	δ HCC(17), δ HCH(74), τ HCCN(26)	1476	1442
110	δ HCC(46), δ CCC(10)	1479	1460
111	ν CC(16), δ HCH(74), τ HCCN(26), δ HCC(24)	1490	1460
112	δ HCH(76), τ HCOC(11), τ HCCN(12)	1491	1470
113	δ HCH(39), τ HCCN(12), τ HCCC(13)	1499	1470
114	δ HCH(75), τ HCCC(13), τ HCOC(11)	1503	1472
115	δ HCH(75), τ HCOC(11)	1506	1476
116	δ NC(46), ν CC(26), δ HCC(10), δ CCC(10)	1614	1568
117	δ NC(42), ν CC(41), δ HCC(13)	1621	1569
118	ν CC(27), δ HCC(22)	1639	1586
119	ν CC(32), δ HCC(16), δ CCC(10)	1641	1596
120	ν NC(41), ν CC(29), δ CCC(18)	1707	1602
121	ν CC(22), δ HCC(11), δ NC(43)	1720	1615
122	ν OC(83)	1773	1726
123	ν OC(85)	1818	1741
124	ν OC(46)	1833	1763
125	ν CH(91)	2893	2906
126	ν CH(50)	2907	2934
127	ν CH(59)	2917	2946
128	ν CH(96)	2931	2953
129	ν CH(94)	2939	2957
130	ν CH(61)	2946	2963
131	ν CH(37)	2964	3008
132	ν CH(99)	2979	3015
133	ν CH(100)	2993	3015
134	ν CH(46)	3007	3036
135	ν CH(96)	3016	3050
136	ν CH(51)	3044	3062
137	ν CH(52)	3046	3064
138	ν CH(36)	3056	3066
139	ν CH(67)	3066	3087
140	ν CH(66)	3075	3094
141	ν CH(29)	3077	3098
142	ν CH(56)	3081	3103
143	ν CH(48)	3089	3105
144	ν CH(36)	3092	3111





Şekil 3.42. 187 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
233.68/305.48	223.35/306.26	5.3058/4.0587	5.5512/4.0483	0.5703/0.0132	0.5002/0.0283
230.10/300.30	218.45/296.23	5.3883/4.1287	5.6758/4.1854	0.1154/0.6209	0.2236/0.4352
216.30/294.89	206.14/293.66	5.7320/4.2044	6.0145/4.2220	0.0906/0.0192	0.1075/0.1277

Şekil 3.43. 187 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.101. 187 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(43)-N(42)	104.685	103.873	105.911	105.635
2	C(1)-N(44)-N(45)	120.340	120.490	121.800	121.188
3	C(1)-N(44)-C(2)	120.340	109.260	108.203	108.249
4	C(1)-C(18)-H(34)	108.143	108.280	107.984	108.243
5	C(1)-C(18)-H(35)	108.420	108.280	107.989	108.254
6	C(1)-C(18)-C(19)	111.867	111.889	112.919	113.061
7	H(34)-C(18)-C(19)	110.840	110.921	110.926	110.938
8	H(35)-C(18)-C(19)	110.840	110.922	110.923	110.929
9	C(18)-C(19)-H(36)	110.719	110.570	111.392	111.390
10	C(18)-C(19)-H(37)	110.719	110.570	111.385	111.383
11	C(18)-C(19)-H(38)	109.707	109.909	109.632	109.964
12	N(43)-C(1)-N(44)	111.890	112.607	111.502	111.759
13	N(43)-N(42)-C(20)	118.869	118.606	119.255	119.050
14	N(42)-C(20)-O(50)	120.523	120.644	119.751	119.745
15	O(50)-C(20)-C(21)	124.212	125.332	123.547	124.446
16	C(20)-C(21)-H(39)	110.988	110.989	111.203	111.487
17	C(20)-C(21)-H(40)	107.241	107.381	107.038	107.038
18	C(20)-C(21)-H(41)	110.988	111.000	111.211	111.481
19	N(43)-N(42)-C(2)	111.333	112.095	111.742	107.376
20	N(43)-C(1)-C(18)	125.954	125.155	125.838	125.392
21	N(42)-C(2)-N(44)	102.803	102.166	102.641	102.133
22	N(42)-C(2)-O(46)	129.564	129.876	129.485	129.876
23	O(46)-C(2)-N(44)	127.633	127.958	127.874	127.991
24	C(2)-N(44)-N(45)	130.372	130.251	130.708	130.555
25	N(44)-C(1)-C(18)	122.156	122.238	122.660	122.838
26	N(44)-N(45)-C(3)	119.319	117.470	120.477	119.623

Tablo 3.101.'in devamı

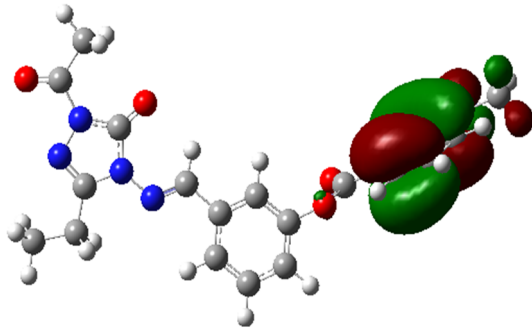
27	N(45)-C(3)-H(22)	122.728	122.667	122.573	122.235
28	N(45)-C(3)-C(4)	120.096	119.704	120.323	120.183
29	H(22)-C(3)-C(4)	117.176	117.629	117.104	117.581
30	C(3)-C(4)-C(5)	117.742	117.940	117.987	117.880
31	C(3)-C(4)-C(9)	121.674	121.615	122.436	122.443
32	C(4)-C(5)-H(23)	120.988	121.130	120.854	120.253
33	C(4)-C(5)-C(6)	119.061	119.155	119.738	119.535
34	H(23)-C(5)-C(6)	119.951	119.715	119.408	120.208
35	C(5)-C(6)-O(47)	124.874	125.419	119.913	122.621
36	C(5)-C(6)-C(7)	120.770	120.577	121.099	120.952
37	O(47)-C(6)-C(7)	114.356	114.004	118.913	116.311
38	C(6)-C(7)-H(24)	118.704	118.518	119.646	119.182
39	C(6)-C(7)-C(8)	119.738	119.885	119.134	119.372
40	H(24)-C(7)-C(8)	121.558	121.598	121.220	121.446
41	C(7)-C(8)-H(25)	119.587	119.511	119.520	119.482
42	C(7)-C(8)-C(9)	120.330	120.334	120.535	120.510
43	H(25)-C(8)-C(9)	120.083	120.155	119.945	120.008
44	C(8)-C(9)-H(26)	121.115	121.543	120.550	120.839
45	C(8)-C(9)-C(4)	119.516	119.604	119.916	119.954
46	H(26)-C(9)-C(4)	119.369	118.853	119.533	119.207
47	H(39)-C(21)-H(40)	110.303	110.519	110.200	110.184
48	H(39)-C(21)-H(41)	107.050	106.463	107.024	106.200
49	H(40)-C(21)-H(41)	110.303	110.528	110.197	110.141
50	H(36)-C(19)-H(37)	107.952	107.793	107.635	107.319
51	H(36)-C(19)-H(38)	108.844	108.972	108.347	108.334
52	H(37)-C(17)-H(38)	108.844	108.972	108.342	108.330
53	C(9)-C(4)-C(5)	120.584	120.445	119.577	119.676
54	C(6)-O(47)-C(10)	128.201	125.470	119.521	120.962
55	O(47)-C(10)-O(48)	123.396	124.077	123.211	123.559
56	O(47)-C(10)-C(11)	111.475	110.185	111.970	111.141
57	O(48)-C(10)-C(11)	125.129	125.738	124.819	125.300
58	C(10)-C(11)-C(16)	122.036	122.555	122.162	122.635
59	C(10)-C(11)-C(12)	116.958	116.610	117.236	117.033
60	C(11)-C(12)-H(27)	120.634	120.171	120.475	120.193
61	C(11)-C(12)-C(13)	120.064	120.230	120.279	120.325
62	H(27)-C(12)-C(13)	119.302	119.599	119.246	119.483
63	C(12)-C(13)-O(49)	116.041	115.831	115.786	115.724
64	C(12)-C(13)-C(14)	119.349	119.189	119.419	119.518
65	C(13)-O(49)-C(17)	120.975	118.205	119.961	118.637
66	O(49)-C(13)-C(14)	124.611	124.979	124.795	124.758
67	O(49)-C(17)-H(31)	111.299	111.587	111.453	111.514
68	O(49)-C(17)-H(32)	105.458	104.863	106.183	105.741
69	O(49)-C(17)-H(33)	111.299	111.587	111.456	111.547
70	C(13)-C(14)-C(15)	120.138	120.141	119.796	119.680
71	C(13)-C(14)-H(28)	120.691	120.620	121.107	121.013
72	C(14)-C(15)-C(16)	120.796	120.896	121.131	121.137
73	H(28)-C(14)-C(15)	119.171	119.239	119.096	119.307
74	C(14)-C(15)-H(29)	119.260	119.187	119.030	119.066
75	H(29)-C(15)-C(16)	119.944	119.917	119.840	119.797
76	C(15)-C(16)-H(30)	121.387	121.643	120.747	120.824
77	C(15)-C(16)-C(11)	118.647	118.709	118.774	119.008
78	H(30)-C(16)-C(11)	119.965	119.648	120.480	120.167
79	C(16)-C(11)-C(12)	121.006	120.835	120.602	120.331
80	C(13)-C(14)-H(28)	120.691	120.171	121.107	121.013
81	H(31)-C(17)-H(32)	109.623	109.691	109.108	109.252
82	H(31)-C(17)-H(33)	109.458	109.329	109.441	109.445
83	H(32)-C(17)-H(33)	109.623	109.691	109.106	109.244

tablo 3.102. 187 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

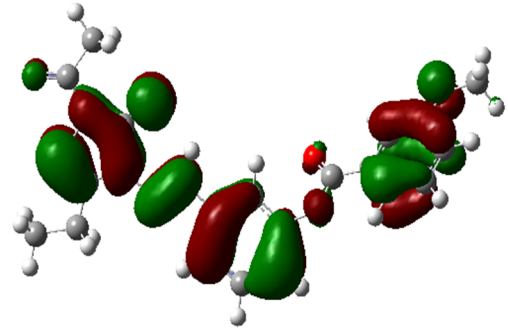
Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(43)	1.2616	1.2750	1.3072	1.2897
2	C(1)-N(44)	1.3826	1.3852	1.3936	1.3922
3	C(1)-C(18)	1.4942	1.4834	1.4918	1.4925
4	C(18)-H(34)	1.0849	1.0837	1.0970	1.0955
5	C(18)-H(35)	1.0849	1.0837	1.0970	1.0955
6	C(18)-C(19)	1.5250	1.5367	1.5401	1.5287
7	C(19)-H(36)	1.0823	1.0816	1.0933	1.0912
8	C(19)-H(37)	1.0823	1.0816	1.0933	1.0911
9	C(19)-H(38)	1.0840	1.0829	1.0939	1.0912
10	N(42)-N(43)	1.3800	1.4346	1.4498	1.3912
11	N(42)-C(20)	1.4117	1.4042	1.4259	1.4308
12	C(20)-O(50)	1.1777	1.2019	1.2236	1.2003
13	C(20)-C(21)	1.5061	1.5080	1.5149	1.5082
14	C(21)-H(39)	1.0813	1.0809	1.0935	1.0913
15	C(21)-H(40)	1.0792	1.0784	1.0901	1.0883
16	C(21)-H(41)	1.0813	1.0809	1.0934	1.0914
17	N(42)-C(2)	1.3733	1.3761	1.4034	1.3978
18	C(2)-O(46)	1.1926	1.2167	1.2372	1.2138
19	N(44)-C(2)	1.3771	1.3845	1.4163	1.4066
20	N(44)-N(45)	1.3641	1.4005	1.4138	1.3714
21	N(45)-C(3)	1.2573	1.2670	1.2968	1.2845
22	C(3)-H(22)	1.0737	1.0698	1.0846	1.0863
23	C(3)-C(4)	1.4765	1.4710	1.4649	1.4662
24	C(4)-C(5)	1.3855	1.3883	1.4033	1.4006
25	C(4)-C(9)	1.3937	1.3865	1.4036	1.4036
26	C(5)-H(23)	1.0746	1.0656	1.0778	1.0820
27	C(5)-C(6)	1.3814	1.3807	1.3949	1.3909
28	C(6)-O(47)	1.3783	1.3950	1.4087	1.3923
29	C(6)-C(7)	1.3746	1.3815	1.3975	1.3897
30	C(7)-H(24)	1.0741	1.0693	1.0817	1.0840
31	C(7)-C(8)	1.3892	1.3817	1.3949	1.3955
32	C(8)-H(25)	1.0746	1.0712	1.0833	1.0848
33	C(8)-C(9)	1.3778	1.3816	1.3917	1.3868
34	C(9)-H(26)	1.0726	1.0695	1.0819	1.0830
35	O(47)-C(10)	1.3410	1.3578	1.3953	1.3738
36	C(10)-O(48)	1.1781	1.2049	1.2276	1.2019
37	C(10)-C(11)	1.4916	1.4782	1.4801	1.4886
38	C(11)-C(16)	1.3933	1.3885	1.4028	1.4027
39	C(11)-C(12)	1.3802	1.3773	1.3925	1.3927
40	C(12)-H(27)	1.0722	1.0687	1.0812	1.0829
41	C(12)-C(13)	1.3903	1.3859	1.3986	1.3973
42	C(13)-O(49)	1.3452	1.3686	1.3823	1.3608
43	C(13)-C(14)	1.3851	1.3821	1.3999	1.3987
44	C(14)-H(28)	1.0726	1.0695	1.0815	1.0827
45	C(14)-C(15)	1.3902	1.3879	1.3990	1.3965
46	C(15)-H(29)	1.0749	1.0714	1.0836	1.0851
47	C(15)-C(16)	1.3770	1.3769	1.3901	1.3872
48	C(16)-H(30)	1.0713	1.0673	1.0793	1.0815
49	O(49)-C(17)	1.3979	1.4370	1.4604	1.4195
50	C(17)-H(31)	1.0849	1.0830	1.0967	1.0953
51	C(17)-H(32)	1.0784	1.0772	1.0899	1.0881
52	C(17)-H(33)	1.0849	1.0830	1.0967	1.0954

Tablo 3.103. 187 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

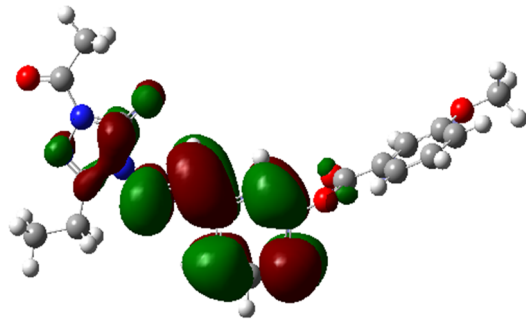
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	DFT 6-311G(d)	DFT 3-21G
C1	0.823	0.568	0.680	0.452
C2	1.315	0.810	0.991	0.611
C3	0.197	0.043	0.113	-0.049
C4	-0.165	-0.051	-0.055	-0.024
C5	-0.245	-0.256	-0.211	-0.210
C6	0.384	0.334	0.302	0.231
C7	-0.252	-0.222	-0.191	-0.193
C8	-0.227	-0.204	-0.183	-0.201
C9	-0.230	-0.194	-0.172	-0.158
C10	1.008	0.646	0.707	0.431
C11	-0.246	-0.204	-0.107	-0.159
C12	-0.199	-0.241	-0.165	-0.203
C13	0.418	0.359	0.322	0.272
C14	0.266	-0.300	-0.207	-0.259
C15	-0.227	-0.195	-0.182	-0.193
C16	-0.209	-0.212	-0.182	-0.160
C17	-0.274	-0.416	-0.336	-0.464
C18	-0.492	-0.488	-0.455	-0.473
C19	-0.582	-0.614	-0.551	-0.619
C20	0.881	0.582	0.664	0.428
H21	-0.689	-0.727	-0.638	-0.720
H22	0.328	0.304	0.261	0.260
H23	0.324	0.242	0.247	0.231
H24	0.268	0.236	0.208	0.212
H25	0.254	0.228	0.198	0.202
H26	0.273	0.244	0.206	0.212
H27	0.305	0.265	0.229	0.230
H28	0.256	0.243	0.197	0.217
H29	0.252	0.225	0.196	0.199
H30	0.274	0.244	0.206	0.213
H31	0.200	0.208	0.200	0.212
H32	0.239	0.234	0.227	0.234
H33	0.200	0.208	0.200	0.211
H34	0.259	0.243	0.234	0.235
H35	0.259	0.244	0.234	0.236
H36	0.232	0.231	0.215	0.226
H37	0.232	0.232	0.215	0.227
H38	0.206	0.213	0.190	0.209
H39	0.260	0.253	0.238	0.246
H40	0.249	0.248	0.223	0.236
H41	0.260	0.253	0.238	0.246
N42	-0.904	-0.478	-0.650	-0.359
N43	-0.359	-0.258	-0.319	-0.202
N44	-0.871	-0.488	-0.642	-0.380
N45	-0.355	-0.271	-0.317	-0.204
O46	-0.666	-0.525	-0.517	-0.383
O47	-0.815	-0.513	-0.600	-0.371
O48	-0.617	-0.435	-0.481	-0.317
O49	-0.735	-0.460	-0.550	-0.336
O50	-0.553	-0.397	-0.431	0.282



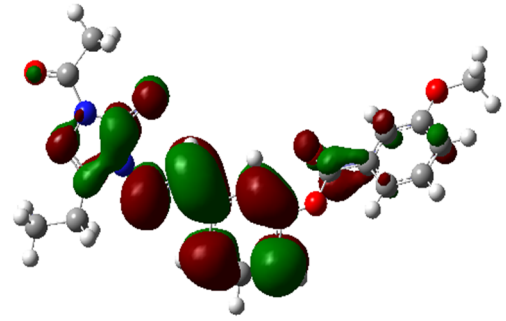
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32547 \text{ Hatree}$



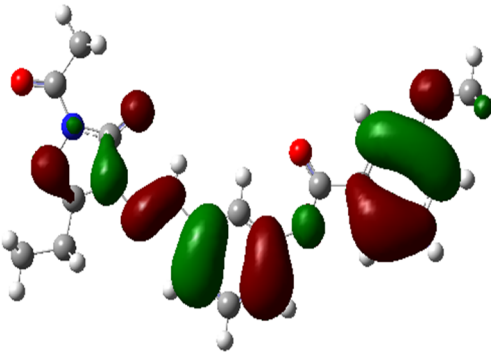
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,23961 \text{ Hatree}$



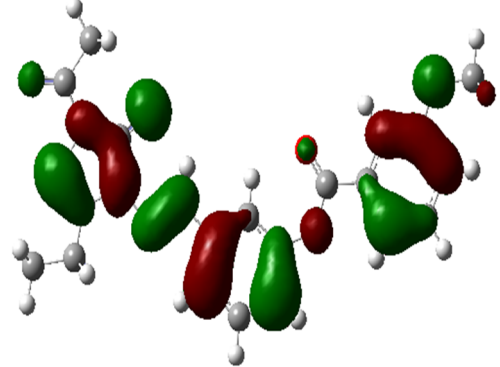
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : -0,06959 \text{ Hatree}$



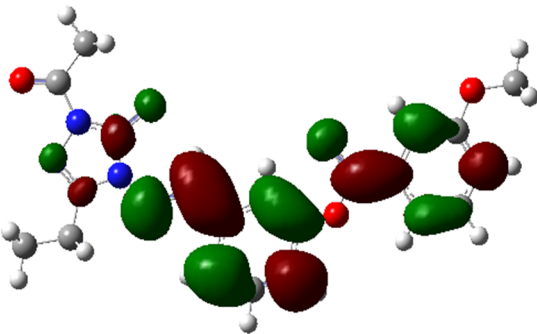
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,07472 \text{ Hatree}$



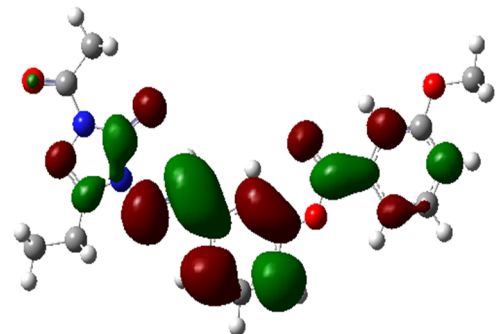
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,32777 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,23166 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,73000 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,06572 \text{ Hatree}$

Şekil 3.44. 187 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G(b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

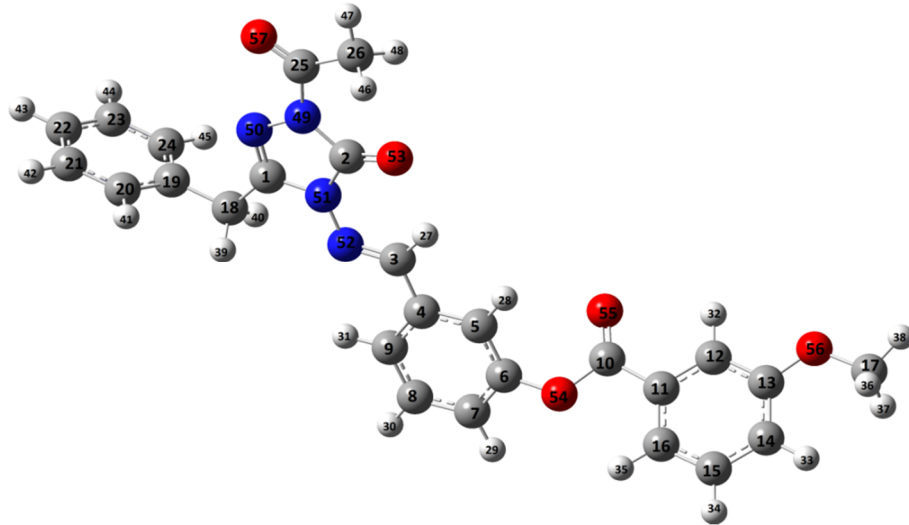
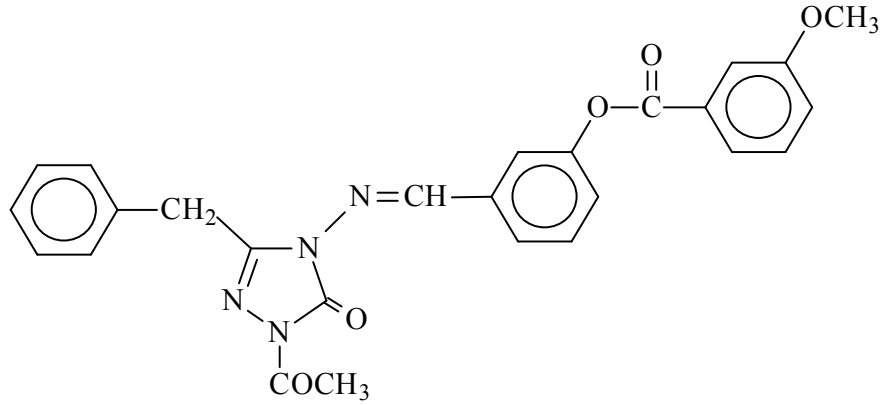
Tablo 3.104. 187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	-5.8891	5.0922	-4.7979	3.4360
μ_y	-6.1023	6.2285	-4.2614	4.4099
μ_z	1.6611	-0.2084	1.1606	-0.0847
μ_{Toplam}	8.6417	8.0479	6.5212	5.4313

Tablo 3.105. 187 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1391.169	-1399.272	-1399.642	-1407.721

3.2.12. 1-Asetil-3-benzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (188):



Şekil 3.45. 188 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.106. 188 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.98	153.55	153.57	-5.57	-5.59	142.25	145.92	5.73	2.06
C2	151.03	154.38	154.82	-3.35	-3.79	142.82	143.27	8.21	7.76
C3	148.28	153.49	154.47	-5.21	-6.19	143.11	144.11	5.17	4.17
C4	134.71	139.16	138.67	-4.45	-3.96	125.95	125.58	8.76	9.13
C5	126.17	130.07	129.58	-3.90	-3.41	120.17	120.14	6.00	6.03
C6	154.03	157.72	157.34	-3.69	-3.31	142.46	141.52	11.57	12.51
C7	125.38	126.28	127.63	-0.90	-2.25	117.51	118.42	7.87	6.96
C8	129.03	131.74	133.13	-2.71	-4.10	120.77	121.65	8.26	7.38
C9	120.24	123.49	124.13	-3.25	-3.89	114.49	115.30	5.75	4.94
C10	164.31	166.41	167.89	-2.10	-3.58	151.39	153.23	12.92	11.08
C11	130.24	134.35	133.49	-4.11	-3.25	122.64	121.71	7.60	8.53
C12	122.14	124.81	122.91	-2.67	-0.77	115.26	113.24	6.88	8.90
C13	159.46	165.15	165.34	-5.69	-5.88	149.58	149.43	9.88	10.03
C14	114.40	115.24	117.90	-0.84	-3.50	104.13	106.60	10.27	7.80
C15	130.06	131.66	133.22	-1.60	-3.16	120.84	122.38	9.22	7.68
C16	120.67	124.14	124.32	-3.47	-3.65	113.34	113.73	7.33	6.94
C17	55.49	53.57	54.11	1.92	1.38	35.31	35.78	20.18	19.71
C18	31.06	35.31	34.76	-4.25	-3.70	18.01	17.61	13.05	13.45
C19	134.67	137.58	133.68	-2.91	0.99	125.15	126.20	9.52	8.47
C20	128.83	133.79	133.96	-4.96	-5.13	122.37	122.58	6.46	6.25
C21	128.44	131.11	131.45	-2.67	-3.01	120.36	120.63	8.08	7.81
C22	126.93	130.31	130.60	-3.38	-3.67	119.49	119.58	7.44	7.35
C23	128.44	131.28	131.74	-2.84	-3.30	120.41	120.65	8.03	7.79
C24	128.83	133.45	133.81	-4.62	-4.98	122.40	122.57	6.43	6.26
C25	165.96	164.22	167.99	1.74	-2.03	151.08	155.30	14.88	10.66
C26	23.51	24.66	24.96	-1.15	-1.45	11.43	11.76	12.08	11.75
H27	9.63	9.58	9.56	0.05	0.07	8.99	9.00	0.64	0.63
H28	7.66	7.30	7.35	0.36	0.31	6.65	6.85	1.01	0.81
H29	7.50	6.85	7.10	0.65	0.40	6.66	6.91	0.84	0.59
H30	7.63	7.14	7.40	0.49	0.23	6.87	7.13	0.76	0.50
H31	7.80	7.79	7.92	0.01	-0.12	7.62	7.78	0.18	0.02
H32	7.78	7.56	7.38	0.22	0.40	7.44	7.24	0.34	0.54
H33	7.37	6.35	6.73	1.02	0.64	6.07	6.48	1.30	0.89
H34	7.58	7.05	7.31	0.53	0.27	6.79	7.09	0.79	0.49
H35	7.76	7.46	7.57	0.30	0.19	7.19	7.33	0.57	0.43
H36	3.88	3.18	3.36	0.70	0.52	2.51	2.72	1.37	1.16
H37	3.88	3.19	3.37	0.69	0.51	2.52	2.72	1.36	1.16
H38	3.88	3.70	3.77	0.18	0.11	3.09	3.15	0.79	0.73
H39	4.17	3.65	3.84	0.52	0.33	3.00	3.24	1.17	0.93
H40	4.17	3.61	3.79	0.56	0.38	2.99	3.21	1.18	0.96
H41	7.31	6.98	7.17	0.33	0.14	6.69	6.92	0.62	0.39
H42	7.37	7.12	7.29	0.25	0.08	6.79	6.98	0.58	0.39
H43	7.23	7.05	7.21	0.18	0.02	6.75	6.92	0.48	0.31
H44	7.37	7.06	7.23	0.31	0.14	6.79	6.97	0.58	0.40
H45	7.31	6.97	7.17	0.34	0.14	6.70	6.92	0.61	0.39
H46	2.52	2.12	2.24	0.40	0.28	1.52	1.67	1.00	0.85
H47	2.52	1.54	1.59	0.98	0.93	1.07	1.09	1.45	1.43
H48	2.52	2.15	2.26	0.37	0.26	1.53	1.67	0.99	0.85

Tablo 3.107. 188 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.98	118.38	119.60	29.60	28.38	114.87	117.70	33.11	30.28
C2	151.03	117.35	117.48	33.68	33.55	115.52	115.57	35.51	35.46
C3	148.28	118.50	119.26	29.78	29.02	115.94	116.62	32.34	31.66
C4	134.71	100.28	99.54	34.43	35.17	92.71	92.05	42.00	42.66
C5	126.17	90.85	90.33	35.32	35.84	84.35	83.85	41.82	42.32
C6	154.03	120.99	120.92	33.04	33.11	111.05	110.89	42.98	43.14
C7	125.38	88.49	89.60	36.89	35.78	84.11	85.04	41.27	40.34
C8	129.03	93.93	95.18	35.10	33.85	88.91	9.02	40.12	120.01
C9	120.24	87.02	87.72	33.22	32.52	83.18	83.71	37.06	36.53
C10	164.31	133.23	133.85	31.08	30.46	128.54	129.31	35.77	35.00
C11	130.24	96.40	96.66	33.84	33.58	90.09	89.28	40.15	40.96
C12	122.14	88.46	86.94	33.68	35.20	85.50	83.72	36.64	38.42
C13	159.46	124.31	124.37	35.15	35.09	115.73	115.40	43.73	44.06
C14	114.40	83.18	85.14	31.22	29.26	78.29	80.37	36.11	34.03
C15	130.06	94.37	95.62	35.69	34.44	88.98	90.45	41.08	39.61
C16	120.67	87.07	88.12	33.60	32.55	83.96	84.44	36.71	36.23
C17	55.49	31.55	32.17	23.94	23.32	15.60	16.19	39.89	39.30
C18	31.06	12.27	11.97	18.79	19.09	-0.54	-0.83	31.60	31.89
C19	134.67	100.14	100.48	34.53	34.19	91.24	92.03	43.43	42.64
C20	128.83	95.61	95.54	33.22	33.29	91.30	91.35	37.53	37.48
C21	128.44	94.26	93.90	34.18	34.54	89.06	89.23	39.38	39.21
C22	126.93	93.13	93.47	33.80	33.46	88.54	88.74	38.39	38.19
C23	128.44	93.42	94.40	35.02	34.04	88.94	89.25	39.50	39.19
C24	128.83	95.27	95.43	33.56	33.40	90.83	91.09	38.00	37.74
C25	165.96	127.74	130.17	38.22	35.79	125.09	128.38	40.87	37.58
C26	23.51	4.09	4.20	19.42	19.31	-7.76	-7.58	31.27	31.09
H27	9.63	9.18	9.15	0.45	0.48	8.72	8.69	0.91	0.94
H28	7.66	7.76	7.68	-0.10	-0.02	7.39	7.31	0.27	0.35
H29	7.50	5.83	6.13	1.67	1.37	5.75	6.07	1.75	1.43
H30	7.63	6.19	6.52	1.44	1.11	5.91	6.27	1.72	1.36
H31	7.80	7.05	7.24	0.75	0.56	6.80	6.98	1.00	0.82
H32	7.78	6.65	6.48	1.13	1.30	6.81	6.57	0.97	1.21
H33	7.37	5.24	5.67	2.13	1.70	4.95	5.44	2.42	1.93
H34	7.58	6.01	6.32	1.57	1.26	5.75	6.14	1.83	1.44
H35	7.76	6.64	6.78	1.12	0.98	6.49	6.71	1.27	1.05
H36	3.88	2.74	2.98	1.14	0.90	1.75	2.03	2.13	1.85
H37	3.88	2.74	2.97	1.14	0.91	1.75	2.03	2.13	1.85
H38	3.88	3.39	3.51	0.49	0.37	2.73	2.82	1.15	1.06
H39	4.17	2.76	2.88	1.41	1.29	2.08	2.37	2.09	1.80
H40	4.17	2.95	3.18	1.22	0.99	2.03	2.33	2.14	1.84
H41	7.31	6.36	6.42	0.95	0.89	5.74	5.98	1.57	1.33
H42	7.37	5.98	6.05	1.39	1.32	5.72	5.94	1.65	1.43
H43	7.23	5.83	6.04	1.40	1.19	5.68	5.91	1.55	1.32
H44	7.37	5.83	6.16	1.54	1.21	5.70	5.95	1.67	1.42
H45	7.31	6.22	6.39	1.09	0.92	5.68	6.01	1.63	1.30
H46	2.52	1.93	2.02	0.59	0.50	1.15	1.27	1.37	1.25
H47	2.52	0.99	1.06	1.53	1.46	0.36	0.40	2.16	2.12
H48	2.52	1.89	1.98	0.63	0.54	1.13	1.26	1.39	1.26

Tablo 3.108. 188 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ COCC(34)	5	7
2	τ CNNC(10), τ CCCC(21), τ COCC(13)	6	13
3	δ COC(11), τ CCOC(35), τ CCCC(51), τ CCCN(14)	14	16
4	τ CCCC(10), τ COCC(22), τ CCOC(58)	15	18
5	τ CNNC(27), τ CCCC(17), τ NNCC(11), τ CCOC(12)	30	27
6	δ NCC(11), δ CCN(10), τ CCOC(12), δ CNN(11), τ CCCC(12)	33	32
7	τ CNNC(10), τ CCNN(14), τ NNCC(12), τ CCCN(35), τ NCCN(20)	37	37
8	δ NCC(11), δ CCC(14), τ CCCC(13)	43	46
9	τ CCCC(13), δ COC(17), δ CCO(10), τ CNNC(11), τ CCCN(12)	52	53
10	τ CCCN(39)	64	65
11	δ CCN(11), δ CCC(16)	65	70
12	τ HCOC(10), τ CCCC(16), τ COCC(57)	70	82
13	τ CCCN(12), τ CCNN(25), τ NCNN(11)	91	94
14	δ CCO(12)	122	112
15	τ NNCC(30), τ CCNN(21), τ NCNC(12), τ CNNC(17), τ NCNN(14)	127	129
16	δ CNN(15), τ HCCN(36), δ NCN(13)	157	149
17	τ HCCN(20), τ CNNC(11), τ NNCC(10), τ NCNN(18)	160	157
18	τ HCCN(36), τ CNNC(10), τ NCNN(10)	169	163
19	τ CCCC(12)	181	172
20	δ NCC(13), τ HCCN(64)	192	179
21		198	197
22	τ HCOC(19), τ CCCC(27), τ COCC(13), τ OCCC(22), τ CCCN(42), τ NCCN(26)	225	214
23	τ CCCC(12), τ HCOC(20), τ CCCN(42), τ COCC(10), τ OCCC(21), τ NCCN(26)	226	229
24	τ CCCN(41), τ NNCC(22), τ CCCC(17)	237	235
25	δ CNN(15), δ CCN(11), δ NCN(14), τ CCCC(13)	255	245
26	δ COC(22), τ CCCN(18)	269	263
27	τ HCOC(41), τ CCCC(26), τ COCC(10)	292	279
28	δ COC(22), δ OCO(15)	306	294
29	δ CNN(13), δ CCN(12)	328	319
30	δ CCC(31), τ HCCC(10)	344	330
31	τ CCNN(11), τ NCNC(16), τ HCCC(10), τ CNNC(23)	362	345
32	τ CNNC(11), τ CCNN(23)	367	359
33	δ OCN(23), δ CNN(10), δ OCC(13), δ CCN(21)	388	371
34	δ OCC(19), δ CCN(32), δ OCN(21), δ NNC(11)	397	376
35	τ HCCC(17), τ CCCC(80)	430	410
36	δ CCC(11), τ HCCC(15), τ CCCN(12), δ COC(10)	438	420
37	δ CCC(23), τ CCCC(10)	450	434
38	τ CCCC(13)	467	444
39	τ HCCC(15), τ CCCN(12), δ CCC(37), δ COC(10)	480	457
40	δ NCN(14), τ CCCC(11)	492	466
41	τ HCCC(10), τ CCCC(20), δ CCC(11)	501	480
42	δ CCC(12), δ COC(10)	510	497
43	τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCOC(10), τ OCCC(36)	581	551
44	δ CCC(17), δ COC(18), τ CCCC(12), τ OCCC(30)	583	566
45	δ CCC(19)	592	574
46	τ HCCN(12), τ ONNC(19), δ CCC(10), δ CCO(12)	603	582
47	δ CCO(13), τ HCCN(12), τ ONNC(20)	612	586
48	δ CCC(12)	616	594
49	τ CCCN(19), τ COCC(14), τ CCOC(14), δ OCO(10)	624	599
50	ν CC(13), δ OCC(35)	642	618
51	δ CCC(49)	647	632
52	τ NNCC(11), τ NCNC(34), τ CNNC(10), τ NCNN(15)	686	651
53	δ CCC(24), δ OCN(10), δ CCN(13)	690	668

Tablo 3.108.' in devamı

54	τ HCCC(24), τ CCCC(17), τ ONNC(40), δ CCC(20)	709	683
55	ν CC(13), δ CCC(22), τ HCCC(28), τ CCCC(18), τ OCCC(10)	716	685
56	τ HCCC(35), τ CCOC(19)	724	692
57	τ HCCC(24), τ CCCC(38)	730	702
58	τ HCCC(23), τ CCCC(14)	757	721
59	τ ONNC(40), δ CCC(12), τ HCCC(13), τ OCOC(46)	794	738
60	τ HCCC(13), τ OCOC(46)	808	753
61	δ CCC(12), ν CC(11)	811	766
62	δ CNN(12), τ NCNN(10), τ ONNC(42)	816	783
63	δ OCO(12), τ HCCC(28)	830	790
64	τ HCCC(51), τ OCOC(24)	848	802
65	τ HCCC(49), τ OCOC(29)	861	809
66	δ CCC(12)	874	827
67	τ HCCC(98), δ CCC(11)	876	838
68	τ HCCC(10)	897	842
69	ν OC(12), τ HCCC(11)	926	876
70	τ HCCC(39), τ CCCC(10), ν NN(10), ν CC(17)	954	891
71	τ HCCC(25)	966	896
72	τ HCCC(11)	967	910
73	τ HCCC(15), δ HCC(26), τ CNNC(10)	968	915
74	τ HCCC(21)	979	918
75	τ HCCC(32)	982	919
76	δ HCC(30), τ HCCC(26), ν CC(11), δ CCC(12)	986	925
77	τ HCCC(84), τ CCCC(13)	998	945
78	ν CC(11), δ CCC(14), δ HCH(11), τ HCCN(14)	1026	958
79	τ HCCC(22), ν CC(11), δ CCC(32)	1027	962
80	τ HCCC(57), τ CCCC(10)	1030	969
81	ν CC(15), δ HCH(10), τ HCCN(13), δ CCC(18)	1034	973
82	τ HCCC(34), τ CCCC(24), ν CC(18), δ CCC(18)	1034	977
83	ν CC(28), δ CCC(31), τ HCCC(22)	1044	1002
84	τ NCNN(87), τ HCCC(59), ν CC(37)	1051	1005
85	ν CC(37), δ CCC(22), δ HCC(26), τ HCCC(22), τ CNNC(10), τ CCCC(25)	1053	1008
86	ν CC(28), δ CCC(56), δ HCC(22)	1069	1012
87	ν CC(14), δ HCC(21), δ CCC(12), τ HCNN(89)	1082	1043
88	δ NNC(28), ν CC(26), δ HCC(25)	1113	1055
89	δ HCH(23), τ HCCN(16), τ ONNC(13)	1114	1059
90	ν OC(61), ν NC(21)	1123	1061
91	ν OC(10), δ HCC(19), δ CCC(12), δ HCH(25), τ HCOC(25), ν CC(15)	1125	1086
92	ν CC(34), δ HCC(26), ν OC(42)	1126	1097
93	ν CC(34), δ HCC(21), ν OC(11)	1138	1100
94	ν CC(30), δ HCC(16)	1142	1110
95	ν NN(29), τ HCCN(10), ν CC(23), δ HCC(23)	1145	1131
96	δ HCC(37), ν CC(12)	1156	1166
97	δ HCH(25), τ HCOC(25), ν CC(20)	1168	1171
98	δ HCC(36), ν NN(21), τ HCCN(11)	1201	1175
99	ν CC(11), δ HCC(25)	1216	1182
100	ν CC(10), δ HCC(18), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1186
101	ν NC(13), δ HCC(15), δ OCC(10), ν CC(25), δ HCH(259), τ HCOC(26)	1232	1195
102	ν CC(15), δ HCC(57), τ HCCC(12)	1243	1198
103	δ HCH(12), τ HCOC(19), ν CC(17), δ HCC(10), τ HCCC(10)	1250	1199
104	δ HCC(39), τ HCCC(27), τ HCOC(11)	1251	1211
105	ν CC(10), δ HCC(13), τ HCCC(11)	1261	1216
106	ν OC(12), ν CC(12), δ HCC(12), τ HCOC(11)	1266	1223
107	δ NCN(10), ν NC(17), ν NN(18)	1295	1245
108	ν CC(12), δ HCC(38), τ HCCC(11)	1302	1270

Tablo 3.108.' in devamı

109	v CC(11), δ HCC(10), v OC(17)	1310	1285
110	v NC(28), τ HCCC(14), v OC(42), v CC(12)	1325	1296
111	v NC(21), δ HCC(15), v NN(11), δ CNN(11), τ HCCC(18)	1344	1305
112	δ HCC(24), v OC(17)	1368	1312
113	v CC(11), δ HCC(19), τ HCCC(10)	1373	1320
114	v CC(67), δ HCC(12), v NC(11)	1375	1331
115	v CC(41), δ HCC(41), v NC(18), τ HCCC(16)	1383	1344
116	v CC(61), δ HCC(17)	1409	1349
117	δ NCC(71), v NC(11), v NN(13)	1425	1355
118	v CC(10), δ HCN(35), τ HCCC(22), δ HCN(40)	1462	1392
119	δ HCN(91), δ HCH(84)	1480	1407
120	v NC(11), δ HCN(10), v CC(21)	1502	1434
121	δ HCH(30), τ HCCN(11)	1517	1459
122	δ HCH(40), v CC(11), δ HCC(14)	1525	1460
123	v CC(24), δ HCC(11), δ HCH(11)	1532	1465
124	δ HCH(83), τ HCCC(10), v CC(14), δ HCC(25)	1533	1471
125	δ HCH(74), τ HCCN(12)	1534	1475
126	v CC(27), δ HCC(22), δ HCN(18), τ HCCC(14)	1539	1479
127	δ HCH(59), δ HCC(10)	1546	1480
128	δ HCH(72), τ HCOC(17)	1562	1498
129	δ HCH(66), τ HCOC(12)	1570	1509
130	δ HCC(38), δ HCH(15), δ CCC(12)	1574	1511
131	δ HCC(10), δ CCC(10)	1577	1515
132	v CC(12), δ HCC(60), δ CCC(13)	1583	1524
133	v CC(25), δ HCC(10), δ CCC(11)	1691	1610
134	v CC(14), δ CCC(17)	1691	1611
135	v CC(16), δ CCC(12), δ HCC(11)	1698	1619
136	v CC(31), δ HCC(13)	1716	1628
137	v CC(65), δ HCC(21)	1717	1638
138	v CC(39), δ HCC(15)	1718	1639
139	v NC(44)	1789	1645
140	v NC(64)	1801	1657
141	v OC(39)	1857	1771
142	v OC(88)	1904	1786
143	v CH(91)	1922	1812
144	v CH(91)	3030	2982
145	v CH(98)	3064	3015
146	v CH(95)	3070	3036
147	v CH(98)	3086	3041
148	v CH(98)	3094	3041
149	v CH(49)	3135	3095
150	v CH(46)	3149	3117
151	v CH(83)	3159	3126
152	v CH(86)	3167	3129
153	v CH(49)	3170	3131
154	v CH(49)	3181	3139
155	v CH(22)	3188	3142
156	v CH(54)	3191	3146
157	v CH(12)	3192	3148
158	v CH(10)	3202	3149
159	v CH(10)	3203	3160
160	v CH(42)	3211	3170
161	v CH(26)	3220	3176
162	v CH(39)	3223	3180
163	v CH(40)	3227	3186
164	v CH(26)	3236	3189
165	v CH(47)	3238	3194

Tablo 3.109. 188 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CCOC(11), τ COCC(11), τ CCCN(18), τ CNNC(28), τ CCCC(31), τ NCNC(25)	2	9
2	τ CCCC(22), τ NCNC(11), τ CCCC(20), τ CCCN(20), τ CNNC(22)	7	14
3	τ COCC(45), τ CCOC(17)	16	19
4	δ CCC(10), δ CNN(21), δ COC(15), δ CCN(20), τ CCOC(13)	20	23
5	τ CCOC(24), τ NCNC(22), τ CCCC(12)	25	25
6	τ CCOC(18), τ CCCN(13)	31	33
7	τ CCNN(20), τ NCNC(23), τ CCCC(10)	40	39
8	δ NCC(17), δ COC(13), δ CCC(13), τ CCCC(15), τ NCNC(10)	44	43
9	τ CCCC(31), τ NCNC(14)	60	62
10	δ CNN(14), δ CCO(16), δ COC(14)	65	67
11	τ COCC(59), τ HCOC(10)	66	80
12	τ CCCC(21), τ COCC(29)	87	94
13	δ CCO(15), τ CCNN(13), τ NCNC(13)	100	101
14	δ CCO(11), τ CCNN(18), τ CNNC(11)	102	114
15	τ CCNN(22), τ NNCC(31), τ NCNC(12)	139	134
16	δ CNN(17), τ HCCN(16)	148	146
17	δ CNN(16), δ HCC(41), τ CCCN(17), τ CNNC(11)	170	156
18	τ CCCC(20), τ CCCN(11), τ HCCN(48)	178	167
19	τ CCCC(12), τ CNNC(19), τ CCCN(17), τ HCCN(16)	181	177
20	ν CC(10), δ NCC(10), τ HCCN(48), τ CCCN(11)	183	190
21	δ COC(33)	196	201
22	τ CCCC(12), τ COCC(10), τ OCCC(17), τ HCOC(44)	210	209
23	τ CCCC(14)	232	222
24	δ CNN(22)	248	244
25	τ CCCC(25), τ CCOC(10), τ CCCN(33)	263	258
26	δ COC(38)	266	268
27	δ COC(10), τ CCCC(32), τ HCOC(15), τ OCCC(10)	273	270
28	τ CCCC(18), τ CNNC(12), τ CCCN(13), τ OCCC(10)	281	289
29	δ COC(21), δ OCO(12)	319	311
30	δ OCO(18), δ CCC(32), τ HCCC(11)	331	345
31	δ CCC(11), δ COC(14), δ OCO(11), δ CNN(14), δ OCN(13)	357	350
32	δ OCN(22), δ CCN(12), τ CCNN(27), τ NNCC(12), τ ONNC(10), τ NCNC(11)	366	358
33	δ OCC(14), δ CCN(34), δ OCN(11), τ NNCC(16), τ CCNN(17), τ NCNC(10)	369	361
34	δ CCN(20), τ CCNN(26), τ NNCC(18)	374	379
35	δ CCC(15), δ OCN(11), τ CCCC(74), τ HCCC(16)	410	408
36	δ OCC(16), τ HCCC(19), τ CCCC(78)	424	411
37	δ CCC(35), δ COC(11)	432	428
38	δ CNN(11), δ CCN(15), τ CCCC(34), τ CCCN(12)	456	446
39	δ CNN(12), τ CCCC(48), τ CCCN(12)	464	447
40	τ HCCC(18), τ CCCC(15), τ CCOC(15)	485	466
41	τ HCCC(18), τ CCCC(25)	485	470
42	δ CCC(16)	498	489
43	δ COC(18), δ CCC(16), τ OCCC(32), τ OCOC(10), τ HCCC(10), τ OCCC(32)	557	551
44	δ COC(22), τ OCOC(13), τ OCCC(21), τ HCCC(12)	573	553
45	δ CCC(10), δ NNC(10)	575	559
46	δ OCC(24), δ CCC(18), δ CCO(13)	592	570
47	ν CC(11), δ OCC(27), δ CCC(10), δ COC(10), δ CCO(18)	595	583
48	ν CC(13), δ NNC(12), δ OCC(12), τ ONNC(10)	600	592
49	τ CCCC(15), τ COCC(16), τ CCOC(13), τ HCCN(10), τ ONNC(30), τ NCNC(11), τ HCCN(10)	612	607
50	τ ONNC(11), τ OCCC(20), τ CCCN(16)	637	614

Tablo 3.109.'un devamı

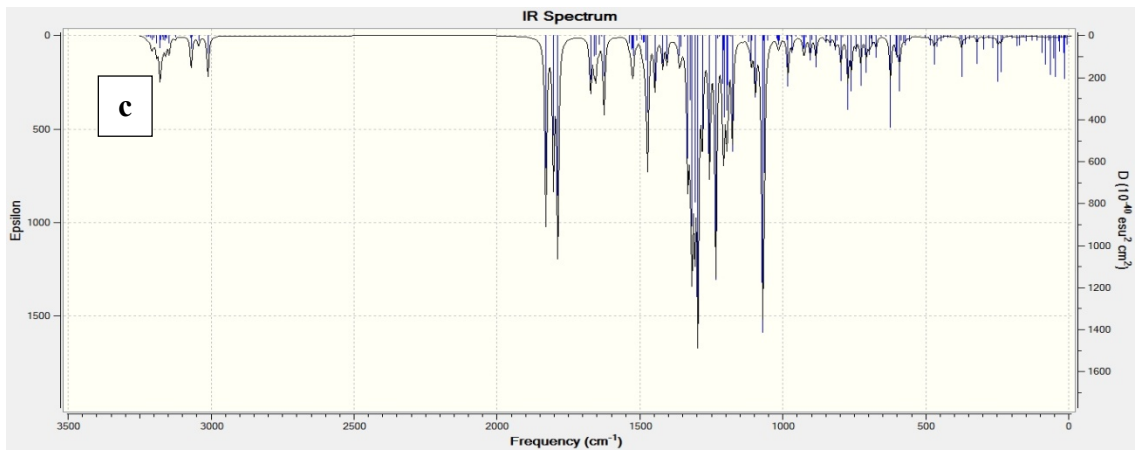
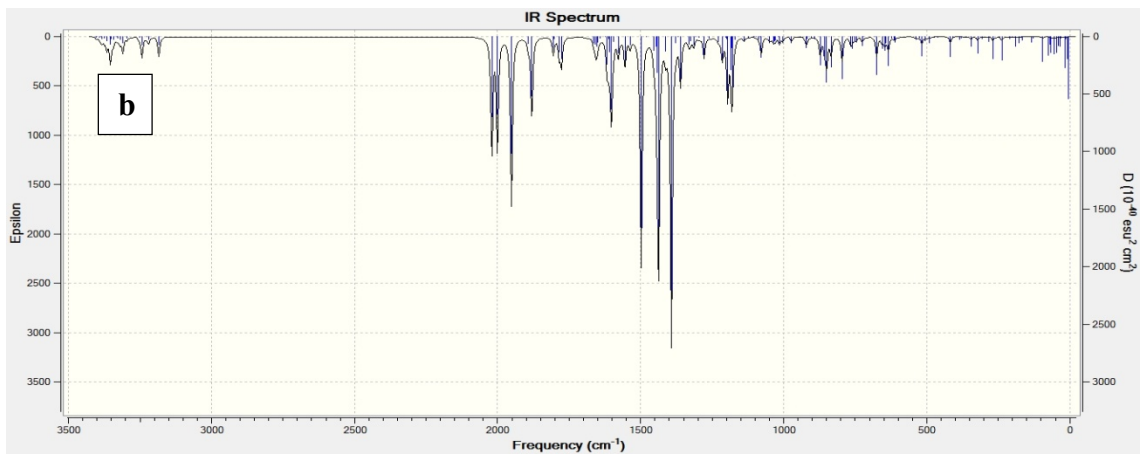
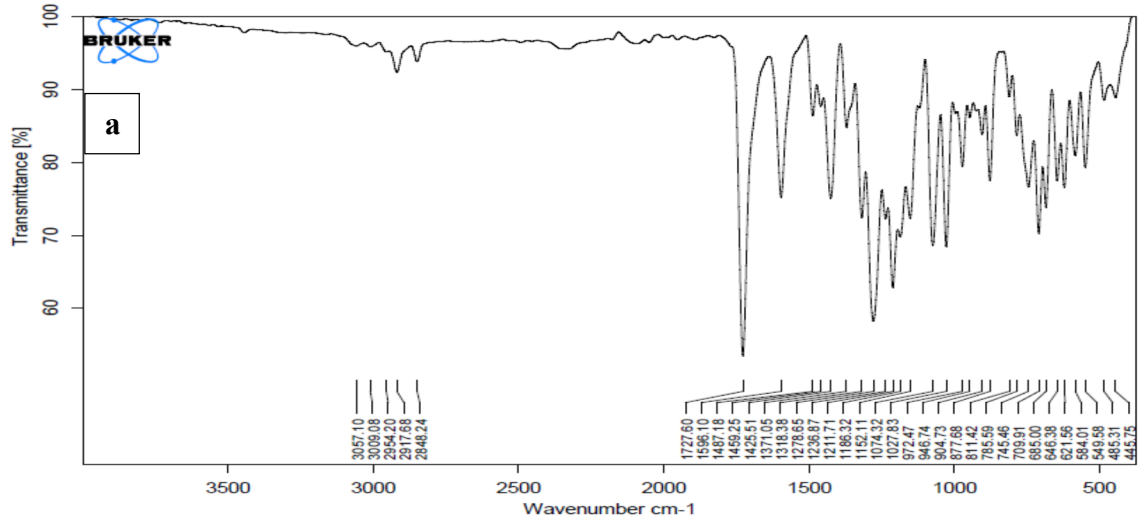
51	δ CCC(51)	648	628
52	δ CCC(27), δ CCN(11)	671	637
53	δ CCC(10), δ CCN(10), τ NNCC(14), τ CCNN(21), τ NCNC(29)	687	655
54	ν CC(12), δ CCC(31)	694	683
55	τ CCCC(37), τ HCCC(28)	723	702
56	τ CCCC(11), τ NCNC(10), τ HCCC(31)	727	704
57	τ NCNC(15), τ HCCC(37), τ CCCC(11)	734	706
58	τ COCC(11), τ HCCC(42), τ CCOC(15), τ CCCN(15)	737	709
59	δ NCC(10)	750	731
60	τ ONNC(30)	781	740
61	τ OCOC(55), τ HCCC(13)	784	744
62	δ CCC(14), δ OCO(23)	792	760
63	ν CC(10), ν OC(12), δ OCO(28), τ ONNC(43)	802	770
64	δ CCN(10)	806	789
65	τ HCCC(25), τ CCOC(16), τ CCCC(10)	851	807
66	τ OCOC(10), τ HCCC(58)	862	812
67	δ CCC(11), τ HCCC(63)	865	822
68	ν OC(17), τ HCCC(98)	872	838
69	ν OC(14)	884	852
70	ν CC(12), τ HCCC(99)	896	862
71	ν CC(12), δ HCC(29), τ HCCC(60), τ NCNC(12)	934	900
72	ν CC(13), δ HCC(29), τ NCNC(12), τ HCCC(25)	934	917
73	ν CC(16), δ NCC(13), τ HCCC(43)	946	919
74	τ HCCC(46)	990	922
75	δ NCC(11), δ CNN(19), τ HCCC(29)	996	925
76	τ HCCC(34)	998	929
77	ν CC(42), δ CCC(13), τ HCCC(27)	1002	945
78	ν CC(34), τ CCCC(15), τ HCCC(81)	1008	967
79	ν CC(17), δ CCC(26), τ HCCC(26), τ CCOC(12)	1011	976
80	ν CC(24), ν OC(23), τ HCCC(34)	1017	986
81	δ CCCC(25), δ HCC(16), τ HCCC(60)	1039	992
82	τ HCCC(50), τ HCNN(14)	1041	996
83	ν CC(28), δ CCC(12), τ HCCC(82), τ CCCC(15)	1047	997
84	ν OC(56), τ HCCC(25), τ CCCC(19)	1050	998
85	ν CC(34), ν NC(26)	1062	1003
86	ν OC(35), δ CCC(14), τ HCCC(62)	1074	1012
87	ν NC(27), τ HCCC(47)	1078	1024
88	δ CCC(30), δ HCC(20), τ HCCC(29), τ CCCC(31)	1079	1029
89	ν CC(32), δ HCC(21), τ HCNN(80)	1085	1044
90	ν CC(15), δ HCC(17), δ CNN(19), δ NCC(11)	1090	1057
91	HCH(24), τ HCCN(19), τ ONNC(14), τ HCCN(19)	1094	1064
92	ν CC(17), ν OC(13), δ HCC(14), δ CCC(11)	1099	1069
93	ν CC(35), δ HCC(19)	1100	1080
94	ν CC(36), δ HCC(19), τ HCNN(74)	1104	1087
95	ν CC(32), δ HCC(20), δ NCC(13), δ CNN(14), δ HCH(10), τ HCNN(14)	1111	1091
96	ν CC(30), ν NC(10), ν NN(11), δ OCC(11)	1129	1120
97	ν CC(19), δ HCH(23), τ HCOC(26)	1148	1121
98	ν OC(13), ν CC(20), δ HCC(13), HCH(26)	1155	1136
99	ν CC(20), δ HCH(24), τ HCOC(28)	1156	1150
100	ν CC(10), ν OC(12), δ HCC(13)	1164	1172
101	ν CC(15)	1171	1173
102	ν CC(21), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1183	1178
103	ν CC(19), δ HCC(19), δ CCC(13)	1199	1183
104	ν CC(15), δ HCC(65)	1213	1188
105	δ HCC(26), τ HCCC(10)	1215	1189
106	ν CC(38), ν OC(11), δ HCC(71)	1218	1198

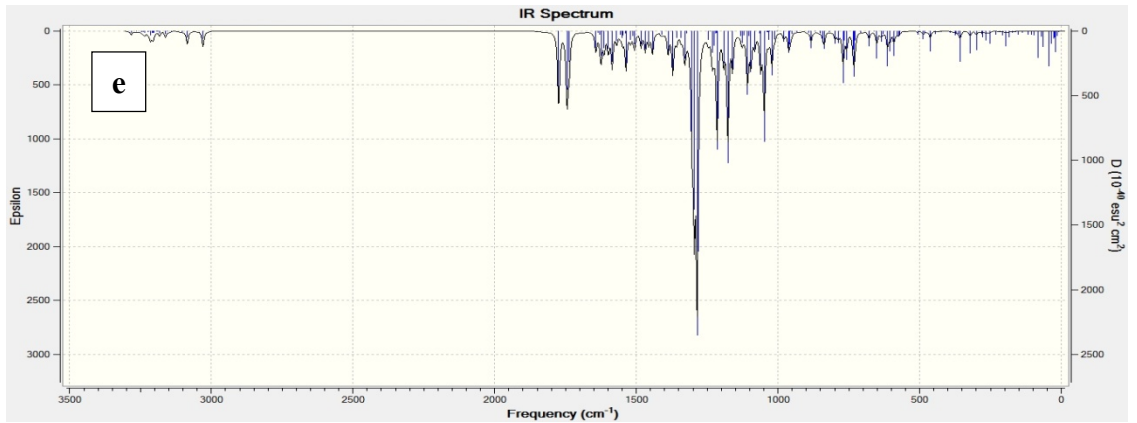
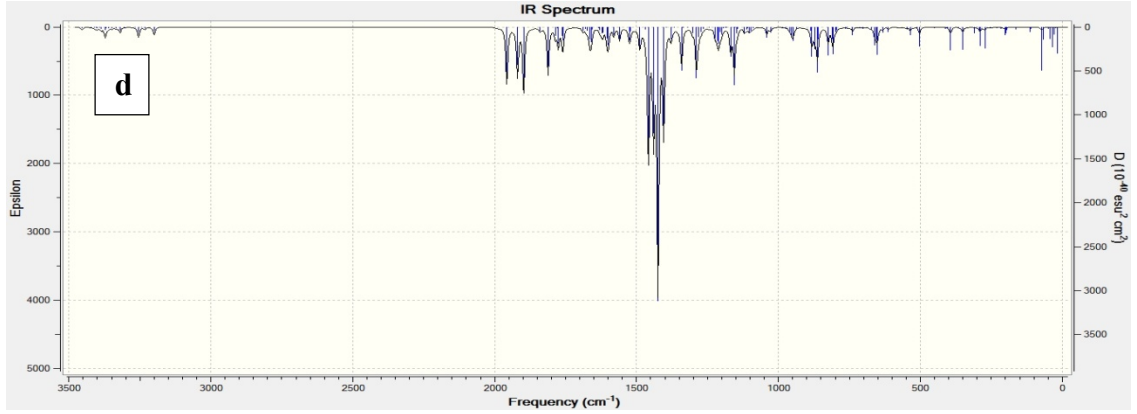
Tablo 3.109.'un devamı

107	v CC(38), v OC(11), δ HCC(41)	1219	1202
108	v CC(13), v OC(12), δ HCC(12)	1243	1240
109	v NC(38), δ CNN(10)	1252	1250
110	v CC(17), v OC(11), δ HCC(36), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1268	1258
111	v CC(38), v OC(41)	1276	1277
112	v CC(30), v OC(22), δ HCC(10)	1294	1283
113	v CC(38), v NC(16), v NN(110), δ HCN(12), τ HCCC(22)	1308	1294
114	v CC(23), v NC(25), δ CNN(13), δ HCC(38)	1325	1310
115	δ HCC(40), τ HCCC(69)	1334	1311
116	v CC(11), δ HCC(75)	1352	1323
117	δ HCC(53), δ HCN(23)	1382	1339
118	δ HCC(53), δ HCN(12), τ HCCC(34)	1386	1362
119	δ HCN(33)	1417	1393
120	δ HCH(95)	1436	1405
121	v CC(18), δ HCC(10), δ HCN(17)	1453	1417
122	v CC(30), δ HCC(15)	1458	1431
123	δ HCH(72), τ HCCN(12)	1470	1453
124	δ HCH(85), δ HCC(12), τ HCCN(12), τ HCCC(10)	1474	1454
125	v CC(17), δ HCC(29)	1480	1459
126	δ HCC(53), δ HCH(78), τ HCCC(11)	1483	1468
127	δ HCC(19), δ HCH(73), τ HCCN(13)	1504	1483
128	δ HCC(46)	1508	1484
129	v CC(21), δ HCC(25), δ HCH(71), τ HCCN(14)	1513	1493
130	v CC(10), δ HCC(66), δ CCC(10)	1521	1495
131	δ HCH(75), τ HCOC(11)	1525	1503
132	δ HCH(74), τ HCOC(10)	1534	1514
133	v NC(55), v CC(28), δ HCC(11), δ CCC(11)	1597	1530
134	v CC(21), v NC(45), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1543
135	v CC(36), δ HCC(16), δ CCC(12)	1600	1557
136	v CC(26), δ HCC(20), δ CCC(11)	1613	1564
137	v CC(50), δ HCC(25)	1617	1568
138	v NC(13), v CC(27), δ HCC(10)	1623	1572
139	v CC(48), v NC(41), δ HCC(23)	1646	1577
140	v CC(61), v NC(44), δ HCC(11)	1671	1585
141	v OC(83)	1724	1676
142	v OC(85)	1744	1684
143	v OC(46)	1778	1712
144	v CH(91)	2907	2924
145	v CH(99)	2936	2977
146	v CH(95)	2946	2977
147	v CH(98)	2957	2994
148	v CH(99)	2969	3032
149	v CH(98)	3003	3046
150	v CH(46)	3016	3051
151	v CH(49)	3028	3071
152	v CH(65)	3041	3077
153	v CH(86)	3043	3080
154	v CH(60)	3054	3082
155	v CH(51)	3062	3092
156	v CH(90)	3063	3093
157	v CH(36)	3064	3096
158	v CH(52)	3076	3102
159	v CH(66)	3083	3111
160	v CH(67)	3091	3121
161	v CH(66)	3092	3123
162	v CH(26)	3097	3127

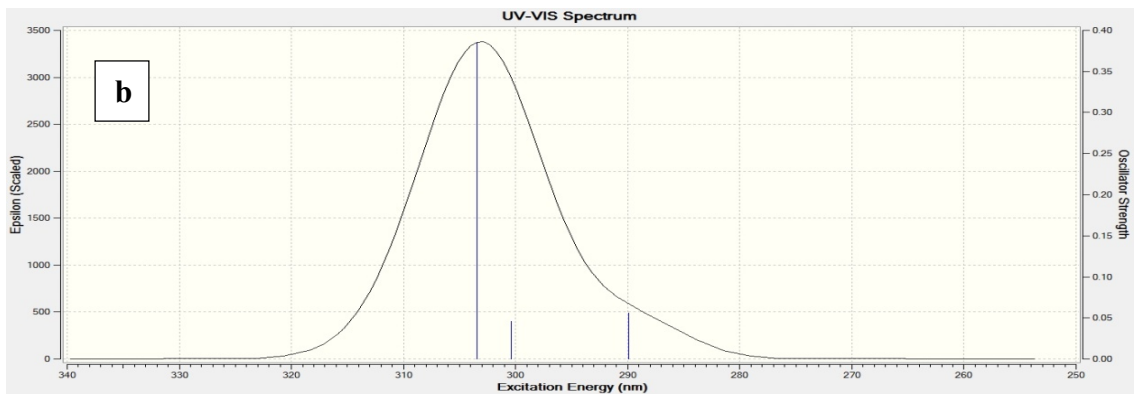
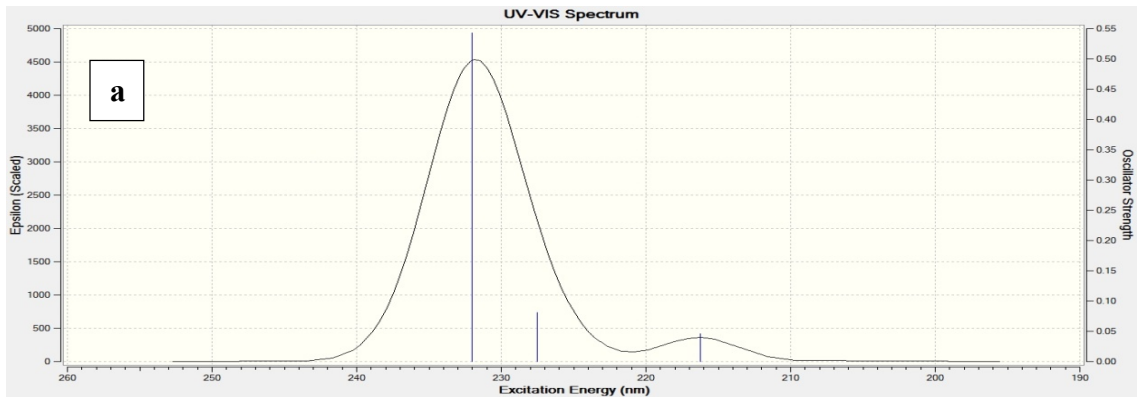
Tablo 3.109.'un devamı

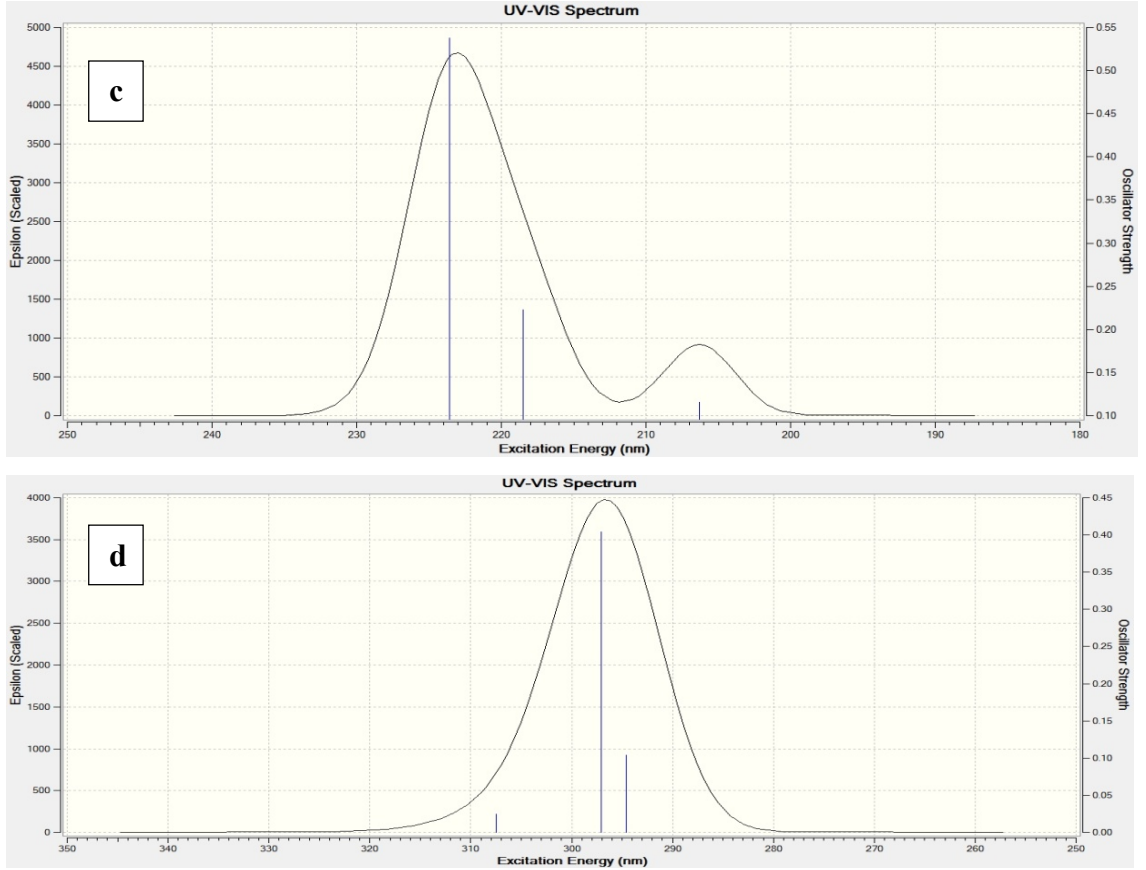
163	v CH(56)	3108	3134
164	v CH(48)	3119	3150
165	v CH(28)	3138	3168





Şekil 3.46. 188 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.02/303.46	223.58/307.46	5.3437/4.0857	5.5455/4.0325	0.5431/0.3852	0.5381/0.0242
227.50/300.39	218.47/297.06	5.4499/4.1274	5.6751/4.1737	0.0807/0.0455	0.2226/0.4042
216.25/289.90	206.30/294.57	5.7335/4.2768	6.0099/4.2090	0.0457/0.0563	0.1156/0.1043

Şekil 3.47. 188 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.110. 188 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(50)-N(49)	105.821	105.509	104.571	103.710
2	C(1)-N(51)-N(52)	121.127	121.243	120.365	120.811
3	C(1)-N(51)-C(2)	108.151	108.192	109.286	109.093
4	C(1)-C(18)-H(39)	107.722	107.910	107.834	107.707
5	C(1)-C(18)-H(40)	107.732	107.955	107.825	109.218
6	H(39)-C(18)-H(40)	105.607	105.043	106.608	109.674
7	N(50)-N(49)-C(25)	119.248	119.055	118.847	118.587
8	N(49)-C(25)-O(57)	119.790	119.795	120.603	120.599
9	C(25)-N(49)-C(2)	128.913	128.625	129.684	129.297
10	O(57)-C(25)-C(26)	123.547	124.456	124.168	125.375
11	C(25)-C(26)-H(46)	111.210	111.453	111.010	111.014

Tablo 3.110.'un devamı

12	C(25)-C(26)-H(47)	107.013	107.364	107.205	107.397
13	C(25)-C(26)-H(48)	111.234	111.505	110.999	110.949
14	H(46)-C(17)-H(48)	107.031	106.203	107.059	106.481
15	H(46)-C(17)-C(47)	110.189	110.152	110.302	110.559
16	H(47)-C(17)-C(48)	110.195	110.194	110.297	110.479
17	N(50)-N(49)-C(2)	111.839	112.320	111.468	112.116
18	N(50)-C(1)-C(18)	126.815	126.305	127.328	124.567
19	N(49)-C(2)-N(51)	102.606	102.096	102.754	102.212
20	N(49)-C(2)-O(53)	129.556	129.968	129.647	129.859
21	O(53)-C(2)-N(51)	127.838	127.936	127.599	127.928
22	C(2)-N(51)-N(52)	130.713	130.555	130.348	130.040
23	N(51)-C(1)-C(18)	121.602	121.812	120.751	122.477
24	H(39)-C(18)-C(19)	110.707	110.737	110.808	109.942
25	H(40)-C(18)-C(19)	110.703	110.682	110.789	110.117
26	C(18)-C(19)-C(20)	120.579	120.645	120.399	119.509
27	C(18)-C(19)-C(24)	120.567	120.568	120.442	121.034
28	C(19)-C(20)-H(41)	119.773	119.634	119.696	119.272
29	C(19)-C(24)-H(45)	119.776	119.631	119.730	119.447
30	C(19)-C(20)-C(21)	120.677	120.693	120.497	120.259
31	H(41)-C(20)-C(21)	119.549	119.673	119.806	120.283
32	C(20)-C(21)-C(22)	120.086	120.092	120.074	120.131
33	C(20)-C(21)-H(42)	120.118	119.797	119.828	119.787
34	H(42)-C(21)-C(22)	120.126	120.111	120.097	120.081
35	C(21)-C(22)-C(23)	119.624	119.651	119.708	119.777
36	C(21)-C(22)-H(43)	120.188	120.172	120.138	120.128
37	H(43)-C(22)-C(23)	120.188	120.177	120.154	120.094
38	C(22)-C(23)-C(24)	120.087	120.068	120.063	120.066
39	C(22)-C(23)-H(44)	120.128	120.137	120.117	120.089
40	H(44)-C(23)-C(24)	119.784	119.795	119.820	119.845
41	C(23)-C(24)-C(19)	120.675	120.710	120.500	120.313
42	C(23)-C(24)-H(45)	119.549	119.659	119.769	120.408
43	H(45)-C(24)-C(19)	119.776	119.631	119.730	119.272
44	C(24)-C(19)-C(20)	118.851	118.786	119.157	119.445
45	N(51)-N(52)-C(3)	120.488	119.613	119.375	117.360
46	N(52)-C(3)-H(27)	122.538	122.197	122.675	122.546
47	N(52)-C(3)-C(4)	120.351	120.213	120.130	119.961
48	H(27)-C(3)-C(4)	117.110	117.589	117.195	117.492
49	C(3)-C(4)-C(5)	117.961	117.848	117.723	117.800
50	C(3)-C(4)-C(9)	122.458	122.444	121.696	121.858
51	C(4)-C(5)-H(28)	120.844	120.231	120.986	121.104
52	C(4)-C(5)-C(6)	119.735	119.513	119.063	119.213
53	H(28)-C(5)-C(6)	119.420	120.250	119.951	119.683
54	C(5)-C(6)-O(54)	119.967	122.769	124.876	125.408
55	C(5)-C(6)-C(7)	121.094	120.934	120.768	120.580
56	O(54)-C(6)-C(7)	118.863	116.179	114.356	114.011
57	C(6)-C(7)-H(29)	119.636	119.168	118.702	118.538
58	C(6)-C(7)-C(8)	119.143	119.395	119.742	119.854
59	H(29)-C(7)-C(8)	121.220	121.436	121.555	121.608
60	C(7)-C(8)-H(30)	119.526	119.484	119.593	119.517
61	C(7)-C(8)-C(9)	120.529	120.504	120.327	120.331
52	H(30)-C(8)-C(9)	119.944	120.013	120.080	120.152
63	C(8)-C(9)-H(31)	120.552	120.826	121.084	121.297
64	C(8)-C(9)-C(4)	119.916	119.944	119.519	119.678
65	H(30)-C(9)-C(4)	119.561	119.229	119.397	119.023
66	C(9)-C(4)-C(5)	119.582	119.708	120.581	120.342
67	H(31)-C(9)-C(4)	119.561	119.229	119.397	119.023

Tablo 3.110.'un devamı

68	C(6)-O(54)-C(10)	119.500	121.151	128.197	125.449
69	O(54)-C(10)-O(55)	123.210	123.590	123.387	124.048
70	O(54)-C(10)-C(11)	111.969	111.160	111.477	110.217
71	O(55)-C(10)-C(11)	124.821	125.250	125.137	125.735
72	C(10)-C(11)-C(16)	122.163	122.669	122.037	122.599
73	C(10)-C(11)-C(12)	117.234	116.995	116.957	116.561
74	C(11)-C(12)-H(32)	120.476	120.187	120.636	120.168
75	C(11)-C(12)-C(13)	120.278	120.331	120.063	120.333
76	H(32)-C(12)-C(13)	119.245	119.482	119.301	119.598
77	C(12)-C(13)-O(56)	115.786	115.705	116.040	115.810
78	C(12)-C(13)-C(14)	119.418	119.510	119.348	119.187
79	C(13)-O(56)-C(17)	119.962	118.655	120.977	118.236
80	O(56)-C(13)-C(14)	124.796	124.784	124.612	125.002
81	O(56)-C(17)-H(36)	111.453	111.518	111.298	111.610
82	O(56)-C(17)-H(37)	111.455	111.554	111.298	111.578
83	O(56)-C(17)-H(38)	106.183	105.739	105.458	104.852
84	H(36)-C(17)-H(38)	109.109	109.247	109.459	109.677
85	H(36)-C(17)-C(37)	109.442	109.452	109.624	109.336
86	H(37)-C(17)-C(38)	109.106	109.232	109.624	109.693
87	C(13)-C(14)-C(15)	119.797	119.684	120.139	120.140
88	H(33)-C(14)-C(15)	119.096	119.300	119.171	119.253
89	C(14)-C(15)-H(34)	119.030	119.063	119.260	119.186
90	H(34)-C(15)-C(16)	119.839	119.797	119.944	119.915
91	C(15)-C(16)-H(35)	120.745	120.839	121.386	121.648
92	C(15)-C(16)-C(11)	118.773	119.000	118.647	118.699
93	C(16)-C(11)-C(12)	120.602	120.335	121.007	120.840
94	H(35)-C(16)-C(11)	120.481	120.161	119.967	119.653

Tablo 3.111. 188 Bileşğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å⁰)

Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP	
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G	
1	C(1)-N(50)	1.2740	1.2606	1.2888	1.3072
2	C(1)-N(51)	1.3875	1.3835	1.3928	1.3916
3	C(1)-C(18)	1.4937	1.4989	1.4981	1.4918
4	C(18)-H(39)	1.0840	1.0839	1.0952	1.0931
5	C(18)-H(40)	1.0834	1.0839	1.0946	1.0921
6	C(18)-C(19)	1.5135	1.5119	1.5126	1.5301
7	C(19)-C(20)	1.3856	1.3870	1.3967	1.4003
8	C(19)-C(24)	1.3850	1.3869	1.3964	1.3979
9	C(20)-H(41)	1.0728	1.0762	1.0864	1.0849
10	C(20)-C(21)	1.3827	1.3841	1.3921	1.3951
11	C(21)-H(42)	1.0718	1.0753	1.0853	1.0839
12	C(21)-C(22)	1.3840	1.3843	1.3933	1.3980
13	C(22)-H(43)	1.0718	1.0753	1.0853	1.0838
14	C(22)-C(23)	1.3832	1.3843	1.3928	1.3961
15	C(23)-H(44)	1.0719	1.0753	1.0853	1.0840
16	C(23)-C(24)	1.3836	1.3841	1.3927	1.3970
17	C(24)-H(45)	1.0728	1.0762	1.0863	1.0832
18	N(49)-N(50)	1.4356	1.3801	1.3915	1.4503
19	N(49)-C(2)	1.3755	1.3729	1.3974	1.4030
20	N(49)-C(25)	1.4051	1.4129	1.4321	1.4263
21	C(25)-O(57)	1.2014	1.1771	1.1997	1.2235
22	C(25)-C(26)	1.5083	1.5063	1.5084	1.5147
23	C(26)-H(46)	1.0809	1.0813	1.0913	1.0933

Tablo 3.111.'in devamı

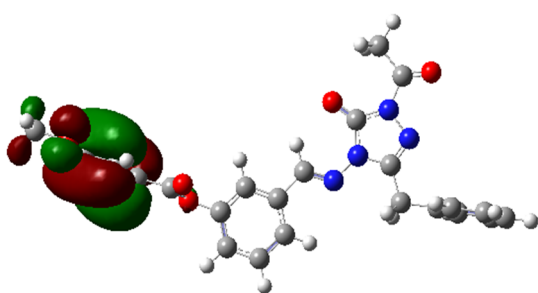
24	C(26)-H(47)	1.0784	1.0792	1.0884	1.0900
25	C(26)-H(48)	1.0809	1.0813	1.0912	1.0936
26	C(2)-O(53)	1.2170	1.1926	1.2139	1.2369
27	C(2)-N(51)	1.3836	1.3769	1.4065	1.4178
28	N(51)-N(52)	1.4002	1.3641	1.3715	1.4146
29	N(52)-C(3)	1.2670	1.2574	1.2846	1.2967
30	C(3)-H(27)	1.0699	1.0737	1.0863	1.0845
31	C(3)-C(4)	1.4710	1.4764	1.4661	1.4651
32	C(4)-C(5)	1.3884	1.3855	1.4007	1.4034
33	C(4)-C(9)	1.3865	1.3938	1.4035	1.4035
34	C(5)-H(28)	1.0656	1.0746	1.0818	1.0778
35	C(5)-C(6)	1.3807	1.3815	1.3911	1.3949
36	C(6)-O(54)	1.3849	1.3782	1.3922	1.4084
37	C(6)-C(7)	1.3816	1.3746	1.3899	1.3976
38	C(7)-H(29)	1.0693	1.0741	1.0840	1.0816
39	C(7)-C(8)	1.3817	1.3894	1.3953	1.3946
40	C(8)-H(30)	1.0712	1.0746	1.0848	1.0833
41	C(8)-C(9)	1.3812	1.3777	1.3869	1.3918
42	C(9)-H(31)	1.0695	1.0726	1.0830	1.0818
43	O(54)-C(10)	1.3579	1.3410	1.3736	1.3958
44	C(10)-O(55)	1.2049	1.1781	1.2021	1.2276
45	C(10)-C(11)	1.4782	1.4916	1.4886	1.4798
46	C(11)-C(16)	1.3885	1.3933	1.4027	1.4028
47	C(11)-C(12)	1.3773	1.3802	1.3927	1.3925
48	C(12)-H(32)	1.0687	1.0722	1.0829	1.0812
49	C(12)-C(13)	1.3859	1.3903	1.3973	1.3986
50	C(13)-O(56)	1.3686	1.3452	1.3608	1.3821
51	C(13)-C(14)	1.3821	1.3851	1.3987	1.3998
52	C(14)-H(33)	1.0695	1.0726	1.0827	1.0815
53	C(14)-C(15)	1.3879	1.3902	1.3966	1.3990
54	C(15)-H(34)	1.0714	1.0749	1.0851	1.0836
55	C(15)-C(16)	1.3769	1.3770	1.3871	1.3902
56	C(16)-H(35)	1.0673	1.0713	1.0815	1.0794
57	O(56)-C(17)	1.4370	1.3979	1.4195	1.4605
58	C(17)-H(36)	1.0830	1.0849	1.0953	1.0967
59	C(17)-H(37)	1.0830	1.0849	1.0954	1.0967
60	C(17)-H(38)	1.0772	1.0784	1.0881	1.0899

Tablo 3.112. 188 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

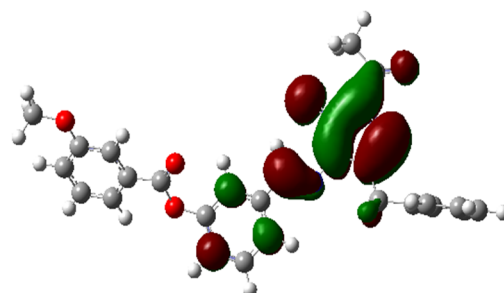
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.585	0.826	0.467	0.692
C2	0.810	1.317	0.611	0.992
C3	0.043	0.199	-0.049	0.115
C4	-0.052	-0.165	-0.025	-0.054
C5	-0.255	-0.245	-0.211	-0.210
C6	0.333	0.384	0.231	0.303
C7	-0.221	-0.252	-0.194	-0.190
C8	-0.205	-0.227	-0.207	-0.183
C9	-0.194	-0.204	-0.158	-0.178
C10	0.646	1.008	0.432	0.707
C11	-0.204	-0.246	-0.159	-0.107
C12	-0.240	-0.199	-0.203	-0.165
C13	0.369	0.418	0.272	0.323

Tablo 3.112.'nin devamı

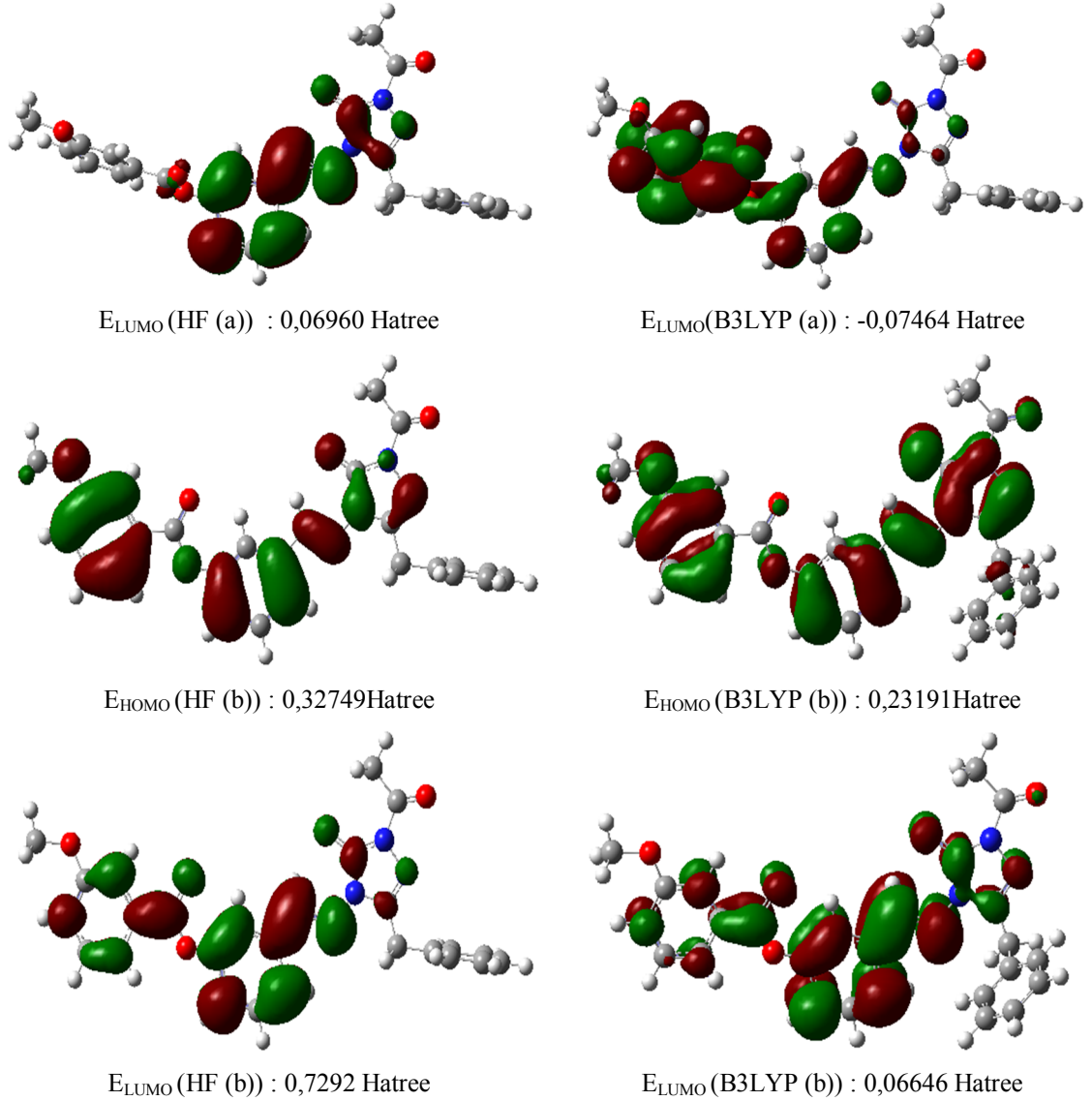
C14	-0.300	-0.266	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.212	-0.209	-0.160	-0.182
C17	-0.416	-0.274	-0.464	-0.336
C18	-0.595	-0.506	-0.598	-0.505
C19	0.072	-0.033	0.083	-0.032
C20	-0.224	-0.208	-0.180	-0.182
C21	-0.201	-0.229	-0.190	-0.183
C22	-0.221	-0.238	-0.186	-0.185
C23	-0.201	-0.230	-0.190	-0.184
C24	-0.224	-0.213	-0.189	-0.192
C25	0.582	0.881	0.429	0.664
C26	-0.727	-0.689	-0.720	-0.638
H27	0.304	0.328	0.260	0.262
H28	0.242	0.324	0.232	0.248
H29	0.236	0.269	0.212	0.209
H30	0.229	0.254	0.230	0.198
H31	0.245	0.272	0.213	0.210
H32	0.265	0.305	0.230	0.230
H33	0.243	0.256	0.217	0.197
H34	0.225	0.252	0.199	0.196
H35	0.244	0.274	0.213	0.205
H36	0.208	0.200	0.212	0.200
H37	0.208	0.200	0.211	0.200
H38	0.234	0.239	0.234	0.227
H39	0.267	0.273	0.252	0.245
H40	0.268	0.272	0.252	0.239
H41	0.211	0.239	0.186	0.202
H42	0.218	0.243	0.193	0.191
H43	0.217	0.242	0.193	0.188
H44	0.218	0.242	0.193	0.188
H45	0.212	0.237	0.187	0.196
H46	0.252	0.259	0.245	0.238
H47	0.248	0.249	0.237	0.223
H48	0.253	0.259	0.246	0.239
N49	-0.480	-0.906	-0.363	-0.651
N50	-0.235	-0.342	-0.182	-0.314
N51	-0.486	-0.867	-0.378	-0.635
N52	-0.274	-0.359	-0.206	-0.318
O53	-0.525	-0.667	-0.383	-0.516
O54	-0.513	-0.815	-0.370	-0.600
O55	-0.435	-0.617	-0.318	-0.481
O56	-0.460	-0.735	-0.336	-0.550
O57	-0.393	-0.550	-0.279	-0.431



E_{HOMO} (HF (a)) : -0,32537 Hatree



E_{HOMO} (B3LYP (a)) : -0,23894 Hatree



Şekil 3.48. 188 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

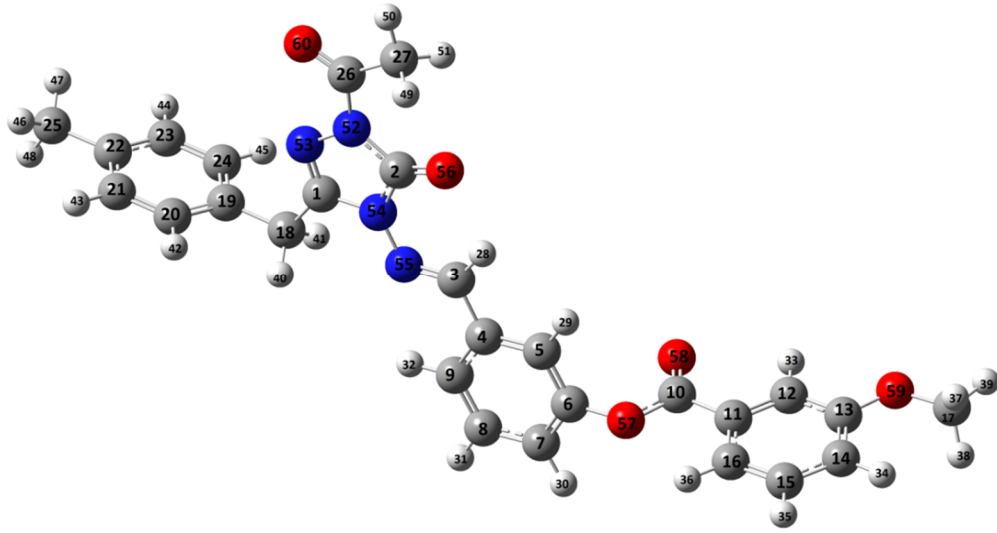
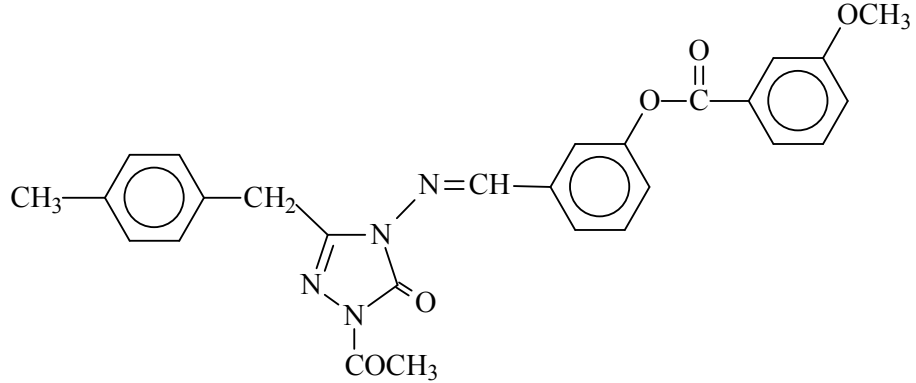
Tablo 3.113. 188 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	-2.8804	-2.8804	-2.0656	-2.0656
μ_y	-6.1377	-6.1377	-3.7212	-3.7212
μ_z	4.3493	4.3493	3.3990	3.3990
μ_{Toplam}	8.0551	8.0551	5.4468	5.4468

Tablo 3.114. 188 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1589.811	-1580.611	-1599.492	-1590.320

3.2.13. 1-Asetil-3-*p*-metilbenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (189):



Şekil 3.49. 189 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.115. 189 Bileşiğinin TMS'ye göre ^{13}C - ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.97	153.65	156.66	-5.68	-8.69	142.39	146.06	5.58	1.91
C2	151.04	154.42	154.86	-3.38	-3.82	142.85	143.30	8.19	7.74
C3	148.40	153.41	154.43	-5.01	-6.03	142.99	144.03	5.41	4.37
C4	134.74	139.19	138.67	-4.45	-3.93	126.03	125.64	8.71	9.10
C5	126.26	130.04	129.57	-3.78	-3.31	120.10	120.10	6.16	6.16
C6	153.97	157.68	157.31	-3.71	-3.34	142.47	141.54	11.50	12.43
C7	125.37	126.22	127.61	-0.85	-2.24	117.50	118.43	7.87	6.94
C8	130.05	131.72	133.12	-1.67	-3.07	120.77	121.65	9.28	8.40
C9	120.24	123.49	124.11	-3.25	-3.87	114.52	115.31	5.72	4.93
C10	164.31	166.41	167.89	-2.10	-3.58	151.40	153.25	12.91	11.06

Tablo 3.115.'in devamı

C11	130.36	134.38	133.51	-4.02	-3.15	122.66	121.71	7.70	8.65
C12	122.15	124.81	122.90	-2.66	-0.75	115.25	113.24	6.90	8.91
C13	159.47	165.15	165.34	-5.68	-5.87	149.57	149.42	9.90	10.05
C14	114.42	115.23	117.91	-0.81	-3.49	104.11	106.60	10.31	7.82
C15	130.24	131.66	133.23	-1.42	-2.99	120.83	122.38	9.41	7.86
C16	122.58	124.14	124.32	-1.56	-1.74	113.35	113.74	9.23	8.84
C17	55.49	53.55	54.09	1.94	1.40	35.30	35.77	20.19	19.72
C18	30.73	34.92	34.36	-4.19	-3.63	17.62	17.21	13.11	13.52
C19	131.51	134.53	135.36	-3.02	-3.85	121.52	122.23	9.99	9.28
C20	129.00	133.87	133.83	-4.87	-4.83	123.15	123.23	5.85	5.77
C21	128.89	131.97	132.20	-3.08	-3.31	120.19	12.31	8.70	116.58
C22	136.02	141.82	143.04	-5.80	-7.02	130.46	131.34	5.56	4.68
C23	128.89	131.86	132.14	-2.97	-3.25	120.27	120.35	8.62	8.54
C24	129.00	133.40	133.68	-4.40	-4.68	123.20	123.23	5.80	5.77
C25	20.56	21.29	20.87	-0.73	-0.31	7.42	7.01	13.14	13.55
C26	165.97	164.24	168.00	1.73	-2.03	151.11	155.32	14.86	10.65
C27	23.51	24.70	25.00	-1.19	-1.49	11.44	11.77	12.07	11.74
H28	9.62	9.58	9.57	0.04	0.05	8.98	9.00	0.64	0.62
H29	7.66	7.30	7.35	0.36	0.31	6.65	6.85	1.01	0.81
H30	7.50	6.84	7.09	0.66	0.41	6.65	6.91	0.85	0.59
H31	7.63	7.14	7.40	0.49	0.23	6.87	7.13	0.76	0.50
H32	7.79	7.79	7.92	0.00	-0.13	7.62	7.78	0.17	0.01
H33	7.77	7.55	7.37	0.22	0.40	7.44	7.24	0.33	0.53
H34	7.37	6.35	6.73	1.02	0.64	6.06	6.48	1.31	0.89
H35	7.58	7.05	7.31	0.53	0.27	6.79	7.09	0.79	0.49
H36	7.73	7.46	7.57	0.27	0.16	7.18	7.32	0.55	0.41
H37	3.88	3.19	3.36	0.69	0.52	2.51	2.72	1.37	1.16
H38	3.88	3.19	3.37	0.69	0.51	2.52	2.72	1.36	1.16
H39	3.88	3.70	3.77	0.18	0.11	3.08	3.15	0.80	0.73
H40	4.11	3.62	3.88	0.49	0.23	2.96	3.19	1.15	0.92
H41	4.11	3.56	3.74	0.55	0.37	2.95	3.17	1.16	0.94
H42	7.09	6.90	7.07	0.19	0.02	6.63	6.85	0.46	0.24
H43	7.26	6.94	7.11	0.32	0.15	6.60	6.79	0.66	0.47
H44	7.26	6.88	7.05	0.38	0.21	6.61	6.79	0.65	0.47
H45	7.09	6.86	7.05	0.23	0.04	6.64	6.85	0.45	0.24
H46	2.22	2.05	2.11	0.17	0.11	1.49	1.55	0.73	0.67
H47	2.22	1.84	1.92	0.38	0.30	1.69	1.56	0.53	0.66
H48	2.22	2.20	2.27	0.02	-0.05	1.48	1.76	0.74	0.46
H49	2.53	2.12	2.24	0.41	0.29	1.51	1.67	1.02	0.86
H50	2.53	1.53	1.58	1.00	0.95	1.06	1.09	1.47	1.44
H51	2.53	2.15	2.26	0.38	0.27	1.52	1.67	1.01	0.86

Tablo 3.116. 189 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.97	118.33	119.61	29.64	28.36	115.00	117.83	32.97	30.14
C2	151.04	117.38	117.51	33.66	33.53	115.55	115.59	35.49	35.45
C3	148.40	118.44	119.23	29.96	29.17	115.85	116.55	32.55	31.85
C4	134.74	100.27	99.50	34.47	35.24	92.76	92.07	41.98	42.67
C5	126.26	90.87	90.36	35.39	35.90	84.32	83.83	41.94	42.43
C6	153.97	120.96	120.90	33.01	33.07	111.04	110.88	42.93	43.09
C7	125.37	88.43	89.58	36.94	35.79	84.07	85.03	41.30	40.34
C8	130.05	93.91	95.18	36.14	34.87	88.90	90.02	41.15	40.03

Tablo 3.116.'nın devamı

C9	120.24	87.00	87.66	33.24	32.58	83.18	83.70	37.06	36.54
C10	164.31	133.21	133.84	31.10	30.47	128.52	129.3	35.79	35.01
C11	130.36	96.44	95.69	33.92	34.67	90.11	89.28	40.25	41.08
C12	122.15	88.48	86.97	33.67	35.18	85.50	83.71	36.65	38.44
C13	159.47	124.34	124.40	35.13	35.07	115.72	115.4	43.75	44.07
C14	114.42	83.16	81.03	31.26	33.39	78.27	80.36	36.15	34.06
C15	130.24	94.34	95.59	35.90	34.65	88.97	90.44	41.27	39.80
C16	122.58	88.10	88.15	34.48	34.43	83.97	84.44	38.61	38.14
C17	55.49	31.51	32.14	23.98	23.35	15.60	16.19	39.89	39.30
C18	30.73	11.78	11.46	18.95	19.27	-0.86	-1.17	31.59	31.90
C19	131.51	97.93	98.03	33.58	33.48	88.42	89.01	43.09	42.50
C20	129.00	95.30	95.45	33.70	33.55	91.66	91.71	37.34	37.29
C21	128.89	94.56	94.78	34.33	34.11	89.38	89.41	39.51	39.48
C22	136.02	102.16	103.20	33.86	32.82	96.48	97.23	39.54	38.79
C23	128.89	94.86	94.98	34.03	33.91	89.33	89.41	39.56	39.48
C24	129.00	95.62	95.35	33.38	33.65	91.53	91.64	37.47	37.36
C25	20.56	2.08	1.70	18.48	18.86	-10.51	-10.89	31.07	31.45
C26	165.97	127.72	130.15	38.25	35.82	125.11	128.4	40.86	37.57
C27	23.51	4.29	4.41	19.22	19.10	-7.74	-7.57	31.25	31.08
H28	9.62	9.20	9.17	0.42	0.45	8.71	8.68	0.91	0.94
H29	7.66	7.76	7.69	-0.10	-0.03	7.39	7.30	0.27	0.36
H30	7.50	5.83	6.13	1.67	1.37	5.74	6.07	1.76	1.43
H31	7.63	6.20	6.53	1.43	1.10	5.90	6.27	1.73	1.36
H32	7.79	7.05	7.24	0.74	0.55	6.80	6.98	0.99	0.81
H33	7.77	6.65	6.48	1.12	1.29	6.81	6.57	0.96	1.20
H34	7.37	5.24	5.67	2.13	1.70	4.95	5.44	2.42	1.93
H35	7.58	6.02	6.33	1.56	1.25	5.75	6.14	1.83	1.44
H36	7.73	6.64	6.78	1.09	0.95	6.49	6.70	1.24	1.03
H37	3.88	2.74	2.98	1.14	0.90	1.75	2.03	2.13	1.85
H38	3.88	2.75	2.98	1.13	0.90	1.75	2.82	2.13	1.06
H39	3.88	3.39	3.51	0.49	0.37	2.73	2.03	1.15	1.85
H40	4.11	2.67	2.78	1.44	1.33	2.01	2.30	2.10	1.81
H41	4.11	2.93	3.15	1.18	0.96	2.00	2.29	2.11	1.82
H42	7.09	6.28	6.32	0.81	0.77	5.64	5.91	1.45	1.18
H43	7.26	5.83	5.83	1.43	1.43	5.53	5.76	1.73	1.50
H44	7.26	5.62	6.01	1.64	1.25	5.53	5.76	1.73	1.50
H45	7.09	6.13	6.29	0.96	0.80	5.63	5.90	1.46	1.19
H46	2.22	1.43	1.50	0.79	0.72	0.50	0.59	1.72	1.63
H47	2.22	0.71	0.85	1.51	1.37	0.73	0.86	1.49	1.36
H48	2.22	1.46	1.54	0.76	0.68	0.52	0.61	1.70	1.61
H49	2.53	1.97	2.06	0.56	0.47	1.14	1.26	1.39	1.27
H50	2.53	0.97	1.05	1.56	1.48	0.35	0.40	2.18	2.13
H51	2.53	1.88	1.97	0.65	0.56	1.14	1.26	1.39	1.27

Tablo 3.117. 189 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(28), τ COCC(11)	2	6
2	τ COCC(21), τ CCCC(10), τ CCOC(57)	4	16
3	τ CCOC(17), τ CCCC(19), τ HCCC(64), τ COCC(14)	6	17
4	τ CCCC(11), τ COCC(18), τ CCOC(57)	14	18
5	τ CNNC(19), τ CCNC(13)	17	23
6	δ NCC(17), τ CCOC(10), τ CCCC(10)	29	29
7	τ HCCC(55), τ CCCC(13), τ NCCN(17)	30	31
8	τ CNNC(15), τ CCNN(15), τ NNCC(12), τ CCNC(30), τ NCCN(22)	37	37
9	τ CCCC(18)	40	43

Tablo 3.117.'nin devamı

10	δ COC(10), τ CNNC(10), δ CCO(10), τ CCNC(11)	52	52
11	τ CCCC(12), δ CNN(10), δ CCN(15)	59	65
12	τ CCCC(10), τ CCNC(43)	64	67
13	τ HCOC(10), τ CCCC(11), τ COCC(64)	70	82
14	τ CCCN(12), τ CCNN(24), τ NCNN(10)	91	94
15	δ NCC(16), δ CCN(12), τ CCCC(12)	112	105
16	τ NNCC(21), τ CCNN(17), τ CNNC(17), τ NCNN(15)	126	126
17	τ CCCC(10), τ NNCC(13)	138	130
18	τ HCCN(13), τ CNNC(13), τ NCNN(14)	158	157
19	τ HCCN(34), τ CNNC(10), τ NCNN(10)	166	164
20	τ HCCN(11)	177	168
21	τ CCCC(19)	181	172
22	δ NCC(10), τ HCCN(67)	192	183
23	ν OC(10)	207	202
24	τ HCOC(20), τ CCCC(31), τ COCC(13), τ CCCN(10), τ OCCC(22), τ NCCN(27)	225	213
25	τ CCCN(41), τ NNCC(22), τ HCOC(20), τ CCCN(10), τ CCCC(31), τ COCC(10), τ OCCC(22), τ NCCN(27)	226	236
26	ν CC(30), δ NCN(20)	249	241
27	δ COC(30), τ CCCN(17)	269	263
28	τ HCOC(41), τ CCCC(27), δ CCC(18)	292	278
29	δ CCC(18), τ HCOC(41)	292	282
30	δ COC(22), δ OCO(15)	306	294
31	τ CCCC(29), δ CCN(17)	320	309
32	δ OCO(15), δ COC(22)	328	319
33	τ CNNC(12), τ CCNN(14), τ NCNC(16)	362	345
34	τ CNNC(12), τ CCNN(24)	367	359
35	ν NC(10), δ OCN(30), δ CCC(23)	390	371
36	δ CCC(23), δ CCN(19), τ HCCC(16)	393	378
37	δ OCC(19), δ CCC(10), δ CCN(23), δ OCN(10)	400	383
38	τ HCCC(23), τ CCCC(79)	432	412
39	δ CCC(36)	438	419
40	δ CCC(26), τ CCCC(14)	447	433
41	τ CCCC(39)	466	444
42	τ HCCC(11), τ CCCN(12)	480	457
43	δ NCN(13), δ CCO(13)	496	468
44	δ CCC(11), τ CCCC(28)	502	483
45	δ CCC(13), δ COC(10)	508	497
46	δ CCC(19), τ CCCC(17)	548	530
47	τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCOC(10), τ OCCC(36), δ CCC(13), δ COC(11)	581	551
48	δ CCC(18), δ COC(18), τ CCCC(12), τ OCCC(29)	583	566
49	τ HCCN(11), τ ONNC(23)	599	582
50	τ HCCN(11), τ ONNC(23)	612	583
51	δ CCC(12), δ CCO(11), τ ONNC(16)	613	591
52	τ CCCN(21), τ COCC(14), τ CCOC(14), δ OCO(11)	624	599
53	ν CC(11), δ OCC(36)	642	618
54	δ CCC(29), τ NCNC(22)	668	647
55	δ CCC(31), τ NCNC(12), τ CNNC(29), τ NCNN(15)	687	657
56	ν NC(61), δ CCN(13), δ CCC(24)	689	667
57	τ HCCC(25), τ CCCC(19), τ ONNC(40), δ CCC(21)	709	683
58	ν CC(13), δ CCC(22), τ HCCC(28), τ CCCC(18), τ OCCC(10)	716	685
59	τ HCCC(43), τ CCOC(15), τ OCOC(46)	725	692
60	τ CCCC(28)	738	712
61	ν CC(27), τ HCCC(38)	748	729
62	τ ONNC(40), δ CCC(21)	795	738
63	τ HCCC(61), τ OCOC(46), τ CCOC(15)	808	753
64	ν NN(10), τ HCCC(28)	811	767

Tablo 3.117.'nin devamı

65	τ HCCC(36), ν CC(27), τ NCNN(11), τ ONNC(42)	816	779
66	τ HCCC(25), δ OCO(12)	830	790
67	τ HCCC(51), τ OCOC(24), ν CC(10)	843	803
68	ν CC(19), τ HCCC(15)	855	808
69	τ HCCC(48), τ CCOC(10), τ OCOC(28)	861	819
70	τ HCCC(86)	875	832
71	τ HCCC(99)	892	832
72	ν CC(20), τ HCCC(30), τ CCCC(16)	901	861
73	ν OC(19), τ HCCC(20), τ CCOC(10)	926	876
74	τ HCCC(39), τ CCCC(10), ν CC(19), ν NN(10), δ OCN(13)	954	891
75	τ HCCC(18), τ CCOC(10), δ HCC(23)	965	897
76	ν NN(11), δ OCN(11), δ NCN(10)	966	912
77	τ HCCC(45), τ CCOC(16)	967	918
78	τ HCCC(40)	982	919
79	ν CC(12), δ HCC(29), τ HCCC(28), ν OC(10), δ CCC(14)	986	924
80	τ HCCC(80), τ CCCC(16)	998	938
81	τ HCCC(65), τ CCCC(23)	1011	944
82	ν CC(11), δ CCC(15), τ HCCN(25), τ HCCC(73)	1026	958
83	τ HCCC(73), ν CC(11)	1026	962
84	τ HCCC(63), ν CC(30), δ CCC(32)	1027	969
85	ν NN(10), ν CC(21), δ HCH(11), δ CCC(21)	1034	973
86	ν CC(28), δ CCC(30), τ HCCC(38)	1039	1002
87	τ HCNN(86), τ HCCC(46)	1044	1006
88	ν CC(10), δ HCH(12), τ HCCC(65)	1051	1007
89	ν CC(36), δ CCC(33), δ HCC(12)	1060	1008
90	δ CCC(54), δ HCC(15), τ HCNN(88)	1082	1032
91	δ NNC(29), δ HCH(10), τ HCCC(43)	1111	1055
92	δ HCH(19), τ HCCN(54), τ ONNC(10)	1114	1059
93	δ HCH(13), τ HCCC(39), ν NC(22)	1122	1060
94	ν OC(61), ν CC(56), δ HCC(23)	1124	1061
95	ν OC(10), δ HCC(19), δ CCC(11), δ HCH(25)	1125	1086
96	ν CC(33), δ HCC(24), ν OC(42)	1126	1100
97	ν CC(30), δ HCC(24), ν OC(12)	1138	1110
98	ν NN(28), δ CNN(10), τ HCCN(20), ν CC(13), δ HCC(17)	1142	1130
99	ν CC(23), δ HCC(51)	1156	1134
100	δ HCC(28), ν CC(25)	1168	1166
101	δ HCH(25), τ HCOC(26), ν NN(22), τ HCCN(22)	1201	1171
102	ν CC(11), δ HCC(53), τ HCCC(13)	1215	1181
103	ν CC(10), δ HCC(23)	1216	1186
104	ν NC(17), ν NN(12), δ OCC(13), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1196
105	δ HCH(12), τ HCOC(20), ν CC(23), δ HCC(55)	1241	1199
106	ν CC(18), δ HCC(75)	1242	1204
107	ν CC(14), δ HCC(35), τ HCCC(25), τ HCOC(11)	1251	1210
108	ν CC(39), δ HCC(30)	1261	1215
109	ν OC(12), ν CC(12), δ HCC(12), δ CCC(14)	1263	1223
110	ν CC(17), δ HCC(22), δ CCC(23)	1266	1226
111	δ NCN(10), ν NC(17), ν NN(17)	1295	1245
112	δ HCC(45), τ HCCC(15)	1295	1270
113	ν CC(20), ν OC(17), δ HCC(10)	1310	1285
114	ν NC(31), δ CNN(10), τ HCCC(15), ν OC(42), ν CC(12)	1325	1296
115	ν NC(16), ν NN(11), δ CNN(11), τ HCCC(16)	1344	1306
116	δ HCC(24), ν OC(17)	1368	1312
117	ν CC(10), δ HCC(25), τ HCCC(11)	1373	1320
118	ν CC(35), δ HCC(11)	1375	1323
119	ν CC(10), δ HCC(70), ν NC(18), τ HCCC(17)	1383	1343
120	ν CC(41), δ HCC(79)	1395	1344

Tablo 3.117.'nin devamı

121	ν CC(61), δ HCC(17), ν NC(12), ν NN(12), δ NNC(13)	1426	1350
122	δ HCN(40), τ HCCC(21)	1462	1392
123	δ HCH(91)	1478	1407
124	δ HCH(91)	1480	1418
125	τ HCCN(10), ν CC(18), δ HCC(42)	1490	1433
126	ν CC(21), δ HCC(40)	1501	1438
127	δ HCH(26), τ HCCN(23)	1517	1459
128	δ HCH(44), τ HCCN(13), ν CC(11), δ HCC(14)	1525	1460
129	ν CC(24), δ HCH(75)	1531	1465
130	δ HCH(82), δ HCC(11), τ HCCN(23)	1534	1470
131	δ HCH(75), τ HCCN(24), δ HCN(18), τ HCCC(14)	1538	1475
132	δ HCH(62), δ HCC(10)	1546	1480
133	δ HCH(68), τ HCCC(21)	1548	1495
134	δ HCH(73), τ HCOC(13), τ HCCC(17)	1549	1498
135	δ HCH(74), τ HCCC(12), τ HCOC(12)	1562	1498
136	δ HCH(71), τ HCOC(11)	1570	1509
137	δ HCC(39), δ HCH(15), δ CCC(12)	1574	1511
138	δ HCC(48), δ CCC(11)	1577	1515
139	δ CCC(14), δ HCC(60)	1607	1543
140	ν CC(25), δ CCC(11)	1679	1607
141	ν CC(32), δ CCC(11)	1691	1610
142	ν CC(32), δ CCC(17)	1698	1611
143	ν CC(32), δ HCC(10)	1717	1628
144	ν CC(65)	1718	1638
145	ν NC(49), ν CC(55), δ HCC(20)	1729	1643
146	ν CC(50), δ HCC(19), ν NC(52)	1789	1650
147	ν OC(39), ν NC(49)	1801	1657
148	ν OC(40)	1857	1770
149	ν OC(88)	1904	1786
150	ν OC(49)	1922	1811
151	ν CH(91)	3026	2982
152	ν CH(97)	3030	2997
153	ν CH(97)	3063	3013
154	ν CH(95)	3070	3036
155	ν CH(97)	3076	3040
156	ν CH(50)	3086	3040
157	ν CH(90)	3092	3049
158	ν CH(89)	3098	3075
159	ν CH(98)	3135	3095
160	ν CH(46)	3149	3117
161	ν CH(97)	3159	3122
162	ν CH(84)	3164	3122
163	ν CH(95)	3164	3131
164	ν CH(99)	3182	3139
165	ν CH(99)	3185	3142
166	ν CH(69)	3188	3142
167	ν CH(54)	3191	3146
168	ν CH(34)	3202	3148
169	ν CH(42)	3211	3170
170	ν CH(66)	3220	3177
171	ν CH(67)	3223	3180
172	ν CH(57)	3227	3186
173	ν CH(42)	3236	3189
174	ν CH(47)	3238	3195

Tablo 3.118. 189 Bileşiminin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ NCCC(42)	2	7
2	τ CCCC(16), τ CCNC(18), τ NCNC(28)	4	14
3	τ CCCC(17), τ CCCO(15), τ COCC(32), τ CNNC(16), τ CCCN(14)	8	21
4	δ CCC(14), δ NNC(14), τ COCC(46), τ CCOC(16)	16	23
5	τ COCC(16), τ CCNC(10), δ COC(12), δ CNN(20), δ CCN(20)	19	26
6	δ CCC(10), τ COCC(15), τ CCNN(12), τ HCCC(80)	23	31
7	τ CCCC(10), τ COCC(15), τ CCNN(13), τ CCCN(13)	31	37
8	δ CCC(11), δ NCC(13), δ COC(13), τ CCCC(14), τ CCNC(32)	37	42
9	τ NCNC(22), τ CCCC(10), τ CCNN(18), τ HCCC(57), τ CCNC(11)	40	45
10	τ CCNC(44), τ NCNC(12), τ CCCC(33)	60	62
11	δ CCC(10), δ COC(27), δ NNC(14), δ CNN(13)	61	66
12	τ CCCO(14), τ COCC(60), τ HCOC(10)	66	79
13	τ CCCO(11), τ COCC(28), τ CCCC(22)	86	94
14	τ CNNC(20), τ NNCC(11), τ CCNN(13), τ CCCC(10), δ CCO(15)	94	101
15	δ CCC(10), τ CCCC(15), τ CCCN(19), τ CCNN(13), τ CNNC(11)	102	106
16	τ CCNN(11), CNN(10), τ CCCC(19)	127	121
17	δ CNN(11), τ HCCN(14), τ CCNN(21), τ NNCC(31), τ NCNC(12)	138	141
18	τ HCCN(13)	167	151
19	τ HCCN(30), τ CCCN(17), τ CNNC(12)	170	162
20	τ CCCC(18), τ CCCN(13), τ HCCN(47)	178	171
21	δ COC(11), τ CNNC(17), τ CCCN(15), τ HCCN(22)	181	187
22	τ CNNC(28), δ NCC(12)	194	190
23	δ CCC(10), δ COC(27)	196	202
24	τ HCOC(44), τ COCC(13), τ OCCC(17), τ CCCC(13)	210	209
25	δ CC(12), δ CNN(16), δ NNC(10)	242	240
26	τ CCCO(22), τ COCC(10), τ CCCC(26), τ CCCN(32)	263	257
27	δ COC(38)	266	266
28	τ HCOC(19), τ CCCC(31), τ OCCC(11)	273	269
29	τ NCCC(10), δ CCC(10), τ CCCC(14)	280	286
30	δ CCC(47)	284	289
31	τ CCCC(31), δ CCN(10)	312	303
32	δ CCN(12), δ COC(18), δ OCO(10)	318	324
33	δ OCO(14), δ CCO(12), δ OCN(23)	357	346
34	δ OCN(15), τ CCNN(27), τ NCNC(11), τ NNCC(12), τ ONNC(11)	365	355
35	τ CCCC(15), τ CCNN(15), τ NNCC(19)	374	361
36	δ CCC(17), δ CCN(31), δ OCC(14)	375	374
37	δ CCC(39), δ CCN(16)	378	381
38	τ HCCC(21), τ CCCC(40), δ OCN(12), δ OCC(10), δ CCC(13)	409	410
39	δ OCC(15), τ HCCC(19), τ CCCC(79)	426	411
40	δ CCC(35), δ COC(11)	432	428
41	δ CCC(16), δ NNC(11), τ CCCO(26), δ CNN(11), δ CCN(13)	456	446
42	δ CCC(16), δ NNC(11), τ CCCO(26), τ CCCC(48), τ HCCC(10)	464	447
43	τ CCCC(42), τ HCCC(14), τ OCCC(10)	485	466
44	δ CCC(11), τ CCCC(17)	487	470
45	δ CCO(10), δ CCC(15)	498	489
46	δ CC(11), δ CCC(15), τ CCCC(19)	534	518
47	τ HCCC(14), τ CCCC(11), τ OCOC(15), τ OCCC(40), δ CCC(16), δ COC(18)	557	551
48	δ CCC(13), δ COC(21), τ OCOC(13), τ OCCC(20), τ HCCC(13)	573	553
49	δ CCC(15), δ OCC(23), δ CNN(11), NN(11), δ NNC(14)	581	570
50	δ CCC(18), δ COC(17), δ CCO(14)	593	583
51	δ OCC(26), τ HCCN(10), τ ONNC(15), τ NCNC(10)	598	589
52	τ NCNC(13), τ ONNC(35), τ CCOC(14), τ CCCC(12), τ HCCN(13)	612	607
53	τ CCCN(16), τ OCCC(20)	637	610

Tablo 3.118.' in devamı

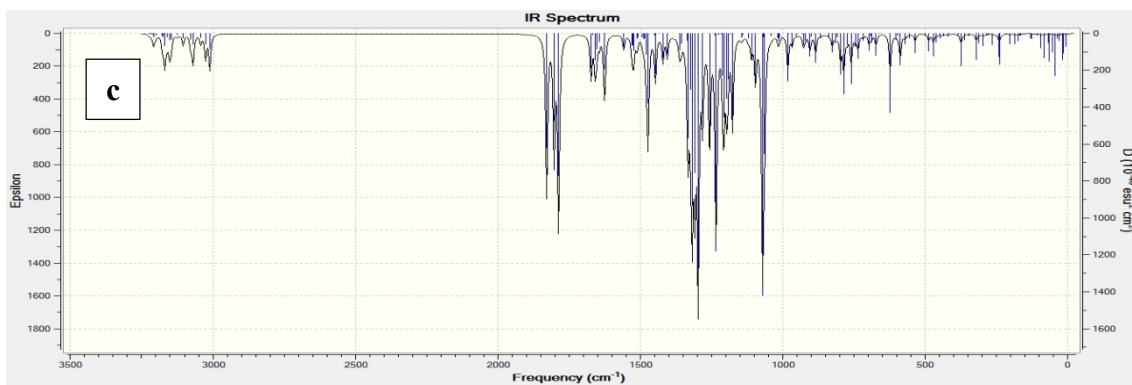
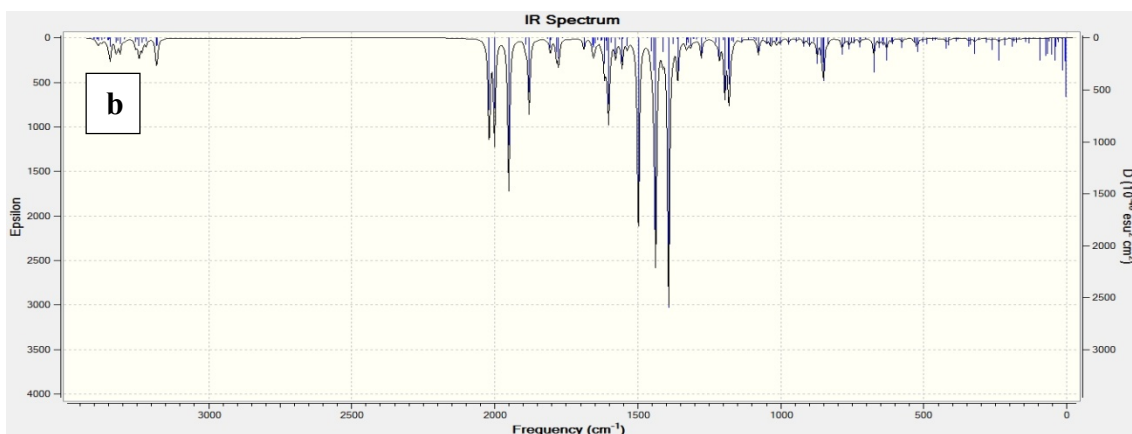
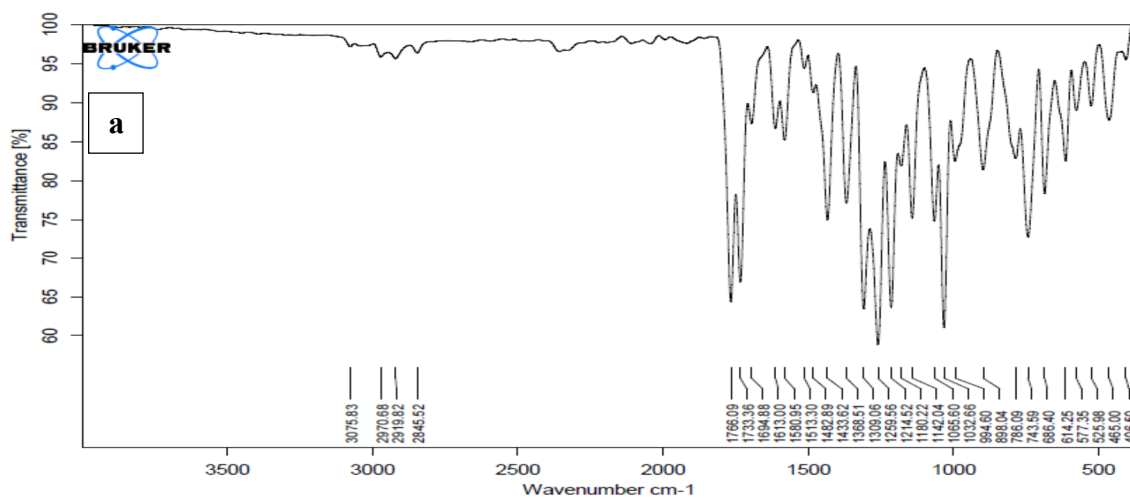
54	δ CCC(44)	668	627
55	δ NCC(21), δ CCC(11), δ CCN(13)	669	654
56	δ CCC(26), τ NNCC(14), τ CCNN(22), τ NCNC(29)	688	657
57	δ CCC(30), δ CC(12)	694	683
58	δ CC(30), τ NCNC(18)	708	690
59	τ HCCC(31), τ CCO(22), τ CCCC(19)	727	702
60	δ CC(12), τ HCCC(54), τ CCOC(17), τ CCCC(18)	731	708
61	τ CCCC(11), τ HCCC(10), δ CC(12)	737	715
62	δ NN(11), δ NCC(14)	748	731
63	τ ONNC(34), τ OCOC(55), τ HCCC(13)	784	735
64	τ HCCC(17), τ OCOC(52)	787	744
65	τ HCCC(28), τ NCNC(12), δ OCO(14)	790	763
66	ν OC(11), δ OCO(27)	799	770
67	δ NCC(15), τ HCCC(11), τ ONNC(45)	802	783
68	τ HCCC(24), τ CCOC(11), ν CC(27)	824	807
69	ν CC(16), τ HCCC(28)	862	809
70	τ HCCC(63), τ OCOC(10)	865	812
71	τ HCCC(90), ν OC(17)	872	830
72	τ HCCC(19)	882	840
73	ν OC(15), τ HCCC(30)	890	854
74	τ HCCC(99)	891	863
75	τ HCCC(22), δ HCC(31), ν CC(11)	932	901
76	τ HCCC(32), ν CC(13)	934	919
77	τ HCCC(30), τ CCCC(12), ν CC(12), δ NCC(12), τ HCCN(13)	947	921
78	δ NCC(11), τ HCCC(29)	996	924
79	τ HCCC(27)	998	929
80	τ HCCC(28)	1002	944
81	τ HCCC(49), ν CC(18), δ CCC(26)	1011	946
82	τ HCCC(57), ν CC(18)	1015	965
83	τ HCCC(35), τ CCOC(13)	1017	977
84	ν CC(31), ν OC(12), δ CCC(12), τ HCCC(45), τ CCCC(26)	1027	986
85	τ HCCC(66), τ CCCC(20), δ CCC(51), δ HCC(14)	1040	993
86	τ HCCC(54), τ HCNN(14)	1041	996
87	δ CCC(24), δ CCO(23), τ HCCC(82), τ CCCC(16)	1044	997
88	δ HCH(16), τ HCCC(25), ν OC(56)	1050	1001
89	ν OC(32), δ CCC(23), ν NC(26)	1061	1012
90	ν NC(25), τ HCCC(67)	1074	1024
91	δ CCC(35), δ HCC(11), τ HCCC(46)	1078	1028
92	τ HCNN(80), ν CC(15), δ HCC(11)	1090	1044
93	δ CNN(14), δ CCN(10), τ HCCC(29), δ HCH(20), τ HCCN(56)	1094	1058
94	δ HCH(22), τ HCCC(32), ν CC(19), δ HCC(14), τ CCCC(12)	1099	1063
95	δ HCH(20), τ HCCN(54), δ CCC(13), ν CC(42), δ HCC(14), τ CCCC(12)	1099	1065
96	ν OC(13), δ HCC(17), τ HCCC(32), τ CCCC(12), ν CC(19)	1100	1069
97	ν CC(10), δ HCC(20), ν OC(13), τ HCNN(72)	1104	1087
98	ν CC(18), δ HCC(21), δ NCC(12), δ CNN(17), δ HCH(10), τ HCCN(28)	1111	1091
99	ν NC(10), ν NN(10), δ OCC(10), τ HCCN(11), ν CC(53), δ HCC(22)	1113	1119
100	δ HCH(24), τ HCOC(26), ν CC(20)	1148	1120
101	ν CC(20), δ HCC(40), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1155	1126
102	ν CC(20), δ HCC(16), δ HCH(24), τ HCOC(26)	1156	1136
103	δ HCH(15), τ HCOC(28), δ HCC(10)	1164	1150
104	ν CC(21)	1171	1163
105	ν CC(37), ν OC(13), δ HCC(14)	1175	1172
106	ν NN(10), ν CC(19), δ CNN(10), δ HCC(17), τ HCCC(12)	1176	1178
107	δ HCC(18), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1183	1185

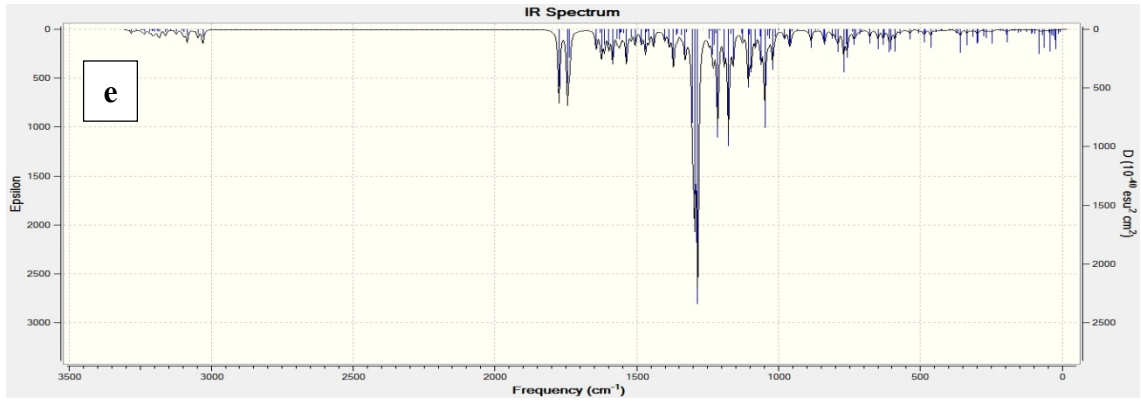
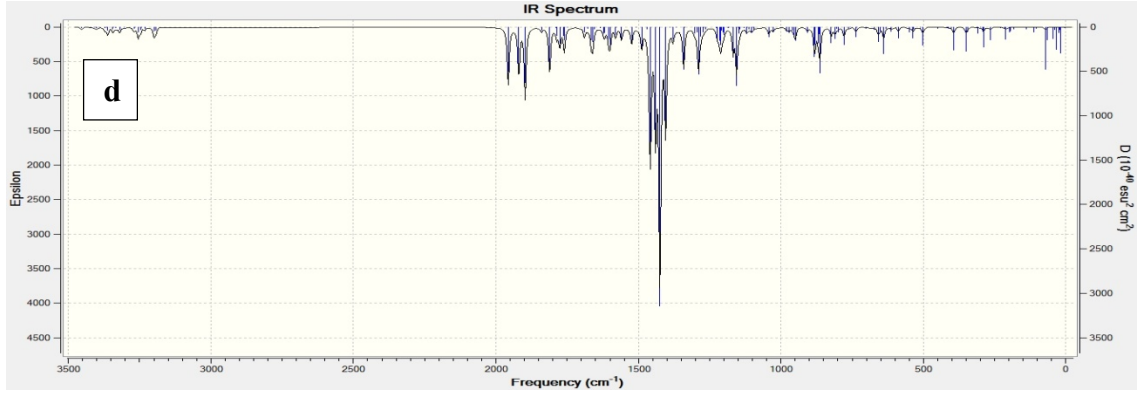
Tablo 3.118.' in devamı

108	δ HCC(32), ν CC(18), δ CCC(21), δ HCC(17)	1216	1189
109	ν CC(24), δ CCC(11), δ HCC(68)	1217	1197
110	ν CC(27), δ HCC(41), ν OC(11)	1218	1202
111	ν CC(13), δ HCC(59)	1219	1203
112	ν CC(14), ν OC(13), δ HCC(12)	1243	1240
113	ν NC(40), δ CNN(10)	1252	1251
114	ν CC(16), ν OC(11), δ HCC(43), τ HCCC(19)	1264	1257
115	ν CC(34), ν OC(41)	1276	1277
116	ν CC(16), ν OC(22), δ HCC(10)	1294	1283
117	ν CC(27), ν NC(16), ν NN(11), δ HCC(14), δ HCN(12), τ HCCC(21)	1308	1294
118	ν CC(15), δ HCC(37), ν NC(25), δ CNN(16)	1325	1309
119	τ HCCC(70), δ HCC(40)	1334	1312
120	δ HCC(33)	1352	1323
121	δ HCN(14), δ HCC(78)	1370	1337
122	δ HCN(17), δ HCC(41), τ HCCC(39)	1384	1352
123	δ HCN(34)	1417	1390
124	δ HCH(95)	1434	1406
125	δ HCH(95), δ HCC(47), ν CC(18)	1435	1410
126	ν CC(18), δ HCC(47), δ HCH(95)	1436	1414
127	δ HCC(12), δ HCN(17)	1453	1418
128	ν CC(18), δ HCC(15)	1458	1431
129	δ HCC(11), δ HCH(72), τ HCCN(24)	1470	1453
130	δ HCC(11), δ HCH(86), τ HCCN(23)	1474	1454
131	δ HCH(82), τ HCCC(11), δ HCC(10)	1483	1467
132	δ HCC(36), δ HCH(74), τ HCCN(26)	1504	1482
133	δ HCC(46)	1508	1484
134	δ HCH(74), τ HCCN(25), τ HCCC(16)	1509	1493
135	δ HCH(60), δ HCC(52), ν CC(18)	1513	1500
136	δ HCH(74), τ HCOC(12), τ HCCC(24)	1513	1503
137	δ HCH(75), τ HCOC(12), τ HCCC(12)	1525	1503
138	δ HCC(61), δ CCC(10), δ HCH(74)	1534	1507
139	δ HCH(70), τ HCOC(11), δ HCC(65), δ CCC(11)	1536	1514
140	ν NC(52), ν CC(23), δ CCC(11), δ HCC(11)	1587	1530
141	ν NC(45), ν CC(21), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1543
142	ν CC(36), δ HCC(12), δ CCC(10)	1600	1557
143	ν CC(24), δ HCC(11), δ CCC(11)	1613	1558
144	ν CC(21), δ HCC(10), δ CCO(17)	1623	1567
145	ν NC(15), ν CC(55), δ HCC(26)	1626	1572
146	ν CC(22), δ HCC(25), ν NC(41)	1646	1585
147	ν CC(22), δ HCC(25), ν NC(41)	1671	1586
148	ν OC(83)	1724	1676
149	ν OC(85)	1744	1683
150	ν OC(47)	1778	1712
151	ν CH(98)	2902	2924
152	ν CH(93)	2907	2940
153	ν CH(100)	2935	2977
154	ν CH(96)	2946	2978
155	ν CH(98)	2949	2988
156	ν CH(98)	2957	2992
157	ν CH(99)	2967	3014
158	ν CH(99)	2970	3032
159	ν CH(99)	3003	3044
160	ν CH(46)	3016	3051
161	ν CH(96)	3028	3071
162	ν CH(93)	3037	3071
163	ν CH(80)	3038	3076

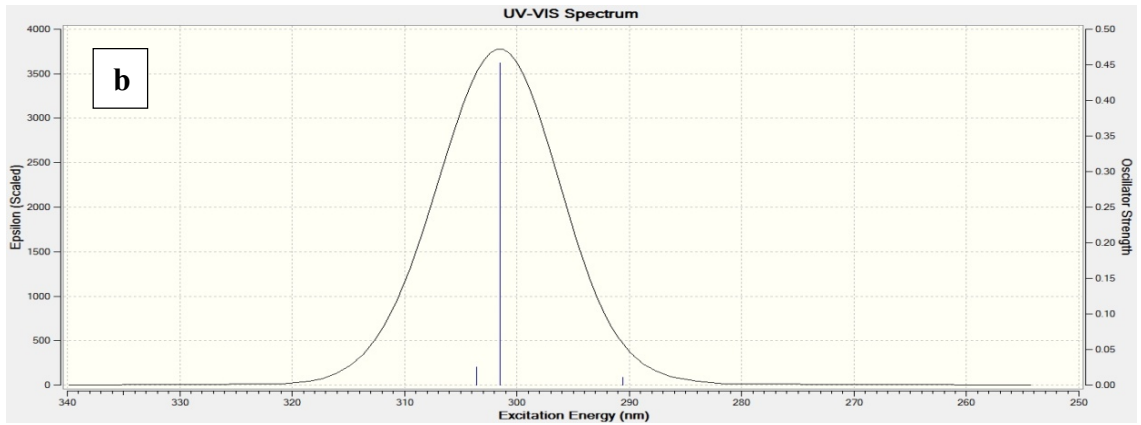
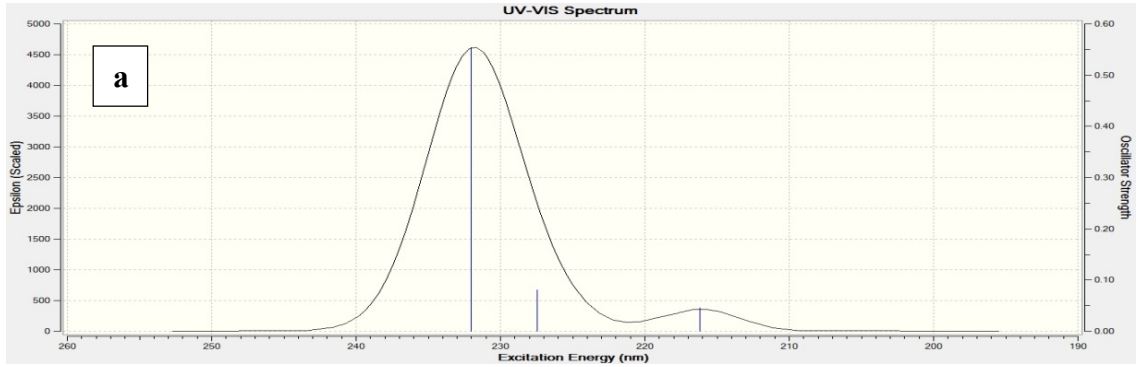
Tablo 3.118.'in devamı

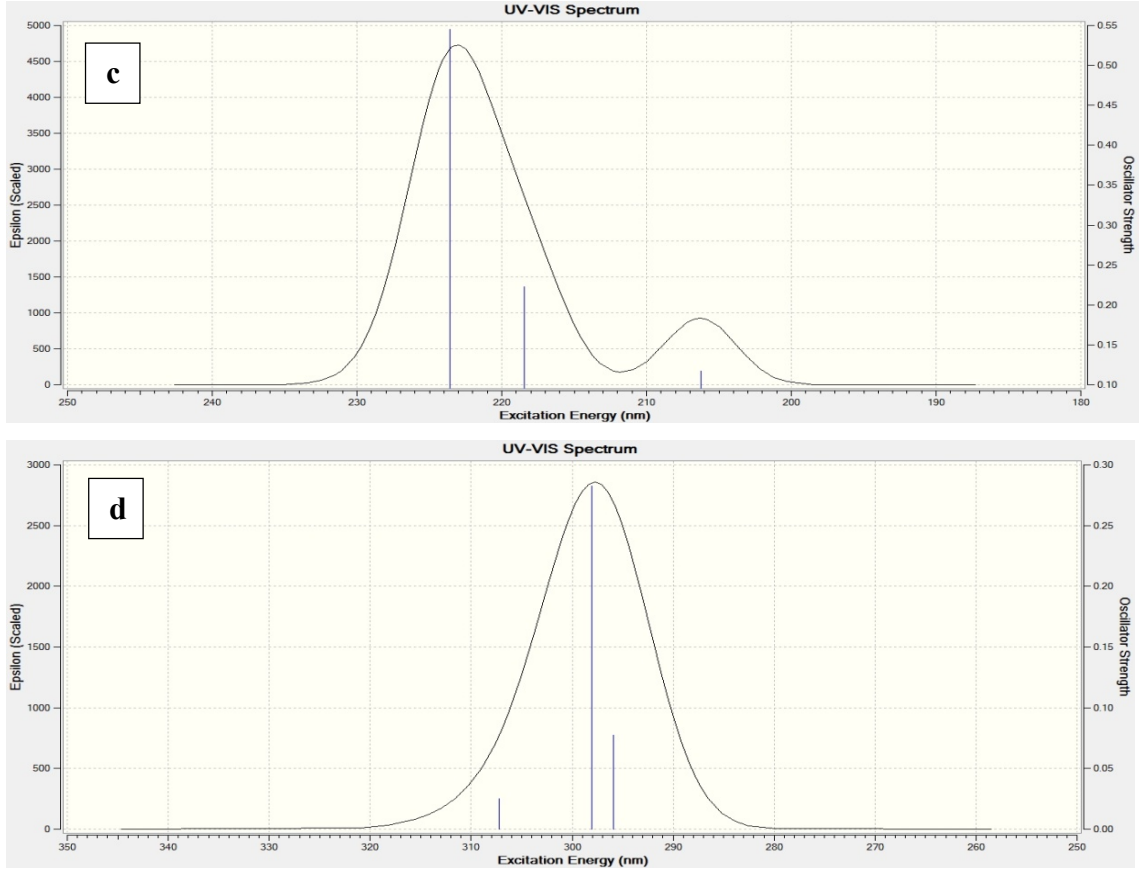
164	v CH(99)	3054	3080
165	v CH(99)	3058	3088
166	v CH(52)	3062	3093
167	v CH(36)	3064	3096
168	v CH(48)	3083	3105
169	v CH(68)	3091	3121
170	v CH(66)	3092	3123
171	v CH(29)	3097	3127
172	v CH(56)	3108	3134
173	v CH(48)	3119	3150
174	v CH(28)	3138	3167





Şekil 3.50. 189 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.05/303.55	223.58/307.21	5.3431/4.0845	5.5453/4.0358	0.5546/0.0252	0.5454/0.0251
227.46/301.47	218.46/298.05	5.4507/4.1126	5.6753/4.1598	0.0805/0.4523	0.2228/0.2828
216.18/290.60	206.27/295.92	5.4507/4.2665	6.0107/4.1897	0.0458/0.0106	0.1169/0.0775

Şekil 3.51. 189 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.119. 189 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açılı	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(53)-N(52)	105.827	105.518	104.571	103.710
2	C(1)-N(54)-N(55)	121.135	121.257	120.375	120.824
3	C(1)-N(54)-C(2)	108.166	108.208	109.301	109.101
4	C(1)-C(18)-H(40)	107.677	107.857	107.791	107.664
5	C(1)-C(18)-H(41)	107.685	107.922	107.790	109.152
6	N(53)-N(52)-C(26)	119.255	119.065	118.853	118.592
7	N(52)-C(26)-O(60)	119.805	119.813	120.622	120.614
8	O(60)-C(26)-C(27)	124.523	124.432	124.143	125.345
9	C(26)-C(27)-H(49)	111.218	111.449	111.005	111.094
10	C(26)-C(27)-H(50)	107.013	107.360	107.203	107.390
11	C(26)-C(27)-H(51)	110.230	111.518	111.004	110.881

Tablo 3.119.'un devamı

12	H(49)-C(27)-H(50)	110.193	110.146	110.302	110.598
13	H(49)-C(27)-H(51)	107.027	106.199	107.056	106.475
14	H(50)-C(27)-H(51)	110.192	110.199	110.304	110.442
15	N(53)-N(52)-C(2)	111.841	112.319	111.473	112.107
16	N(53)-C(1)-C(18)	126.834	126.319	127.347	124.607
17	N(54)-C(1)-C(18)	121.607	121.823	120.752	122.454
18	C(26)-N(52)-C(2)	128.904	128.616	129.674	129.301
19	N(52)-C(2)-N(54)	102.606	102.097	102.754	102.221
20	N(52)-C(2)-O(56)	129.552	129.961	129.645	129.834
21	O(56)-C(2)-N(54)	127.842	127.942	127.601	127.944
22	C(2)-N(54)-N(55)	130.690	130.526	130.325	130.026
23	H(40)-C(18)-C(19)	107.677	110.759	110.821	109.989
24	H(41)-C(18)-C(19)	107.685	110.681	110.811	110.086
25	C(18)-C(19)-C(20)	120.884	120.912	120.663	121.295
26	C(18)-C(19)-C(24)	120.868	120.843	120.671	119.718
27	C(19)-C(20)-H(42)	119.829	119.682	119.741	119.558
28	C(19)-C(20)-C(21)	120.870	120.840	120.669	120.423
29	H(42)-C(20)-C(21)	119.299	119.476	119.539	120.010
30	C(20)-C(21)-C(22)	121.068	121.132	120.837	120.931
31	C(20)-C(21)-H(43)	119.239	119.344	119.539	119.614
32	H(43)-C(21)-C(22)	119.693	119.524	119.624	119.454
33	C(21)-C(22)-C(23)	117.878	117.818	118.326	120.931
34	C(21)-C(22)-C(25)	121.073	120.935	120.849	121.240
35	C(22)-C(25)-H(46)	111.352	111.534	110.968	110.799
36	C(22)-C(25)-H(47)	110.994	111.574	110.960	110.836
37	C(22)-C(25)-H(48)	111.359	111.279	110.448	110.894
38	C(21)-C(22)-C(23)	117.878	117.818	118.326	118.331
39	H(46)-C(25)-H(47)	107.820	107.772	108.172	107.847
40	H(46)-C(25)-H(48)	107.570	107.155	108.091	108.157
41	H(47)-C(25)-H(48)	107.563	107.297	108.092	108.192
42	C(25)-C(22)-C(23)	121.039	121.239	120.817	120.429
43	C(22)-C(23)-H(44)	119.689	119.561	119.626	119.489
44	C(22)-C(23)-C(24)	121.071	121.111	120.834	120.857
45	C(23)-C(24)-C(19)	120.867	120.855	120.669	120.473
46	C(24)-C(19)-C(20)	118.246	118.245	118.665	118.977
47	H(44)-C(23)-C(24)	119.240	119.328	119.749	119.654
48	C(23)-C(24)-H(45)	119.304	119.434	119.581	120.233
49	H(45)-C(24)-C(19)	119.828	119.710	119.749	119.288
50	N(54)-N(55)-C(3)	120.507	119.613	119.394	117.326
51	N(55)-C(3)-H(28)	122.546	122.199	122.684	122.537
52	N(55)-C(3)-C(4)	120.341	120.218	120.117	117.747
53	H(28)-C(3)-C(4)	117.113	117.583	117.199	117.445
54	C(3)-C(4)-C(5)	117.970	117.841	117.729	117.747
55	C(3)-C(4)-C(9)	122.456	122.461	121.691	121.913
56	C(4)-C(5)-H(29)	120.851	120.229	120.983	121.069
57	C(4)-C(5)-C(6)	119.740	119.522	119.062	119.228
58	H(29)-C(5)-C(6)	119.409	120.243	119.955	119.703
59	C(5)-C(6)-O(57)	119.916	122.759	124.876	125.412
60	C(5)-C(6)-C(7)	121.099	120.938	120.771	120.569
61	O(57)-C(6)-C(7)	118.910	116.186	114.353	114.019
62	C(6)-C(7)-H(30)	119.647	119.176	118.704	118.536
63	C(6)-C(7)-C(8)	119.135	119.384	119.739	119.855
64	H(30)-C(7)-C(8)	121.218	121.440	121.557	121.608
65	C(7)-C(8)-H(31)	119.525	119.483	119.593	119.510
66	C(7)-C(8)-C(9)	120.533	120.512	120.328	120.339

Tablo 3.119.'un devamı

67	H(31)-C(8)-C(9)	119.941	120.006	120.079	120.151
68	C(8)-C(9)-H(32)	120.525	120.828	121.088	121.296
69	C(8)-C(9)-C(4)	119.919	119.945	119.520	119.669
70	H(32)-C(9)-C(4)	119.556	119.227	119.392	119.034
71	C(9)-C(4)-C(5)	119.574	119.698	120.580	120.339
72	C(6)-O(57)-C(10)	119.525	121.136	128.202	125.434
73	O(57)-C(10)-O(58)	123.213	123.596	123.394	124.051
74	O(57)-C(10)-C(11)	111.970	111.170	111.475	110.224
75	O(58)-C(10)-C(11)	124.818	125.234	125.131	125.724
76	C(10)-C(11)-C(16)	122.162	122.677	122.037	122.592
77	C(10)-C(11)-C(12)	117.236	116.986	116.957	116.570
78	C(11)-C(12)-H(33)	120.475	120.183	120.634	120.168
79	C(11)-C(12)-C(13)	120.279	120.332	120.063	120.237
80	H(33)-C(12)-C(13)	119.246	119.485	119.302	119.595
81	C(12)-C(13)-O(59)	115.786	115.703	116.041	115.802
82	C(12)-C(13)-C(14)	119.419	119.509	119.349	119.191
83	C(13)-O(59)-C(17)	119.961	118.654	120.975	118.230
84	C(13)-C(14)-H(34)	121.108	121.016	120.691	120.603
85	O(59)-C(13)-C(14)	124.795	124.788	124.610	125.007
86	O(59)-C(17)-H(37)	111.453	111.523	111.299	111.587
87	O(59)-C(17)-H(38)	111.456	111.547	111.299	111.592
88	O(59)-C(17)-H(39)	106.184	105.740	105.458	104.860
89	H(37)-C(17)-H(38)	109.441	109.454	109.458	109.334
90	H(37)-C(17)-H(39)	109.108	109.244	109.624	109.688
91	H(38)-C(17)-H(39)	109.441	109.233	109.623	109.687
92	C(13)-C(14)-C(15)	119.796	119.685	120.138	120.132
93	H(34)-C(14)-C(15)	119.096	119.299	119.171	119.265
94	C(14)-C(15)-H(35)	119.030	119.062	119.260	119.182
95	H(35)-C(15)-C(16)	119.839	119.798	119.944	119.913
96	C(15)-C(16)-H(36)	120.747	120.843	121.387	121.650
97	C(15)-C(16)-C(11)	118.774	118.997	118.647	118.698
98	C(16)-C(11)-C(12)	120.602	120.337	120.006	120.838
99	H(36)-C(16)-C(11)	120.480	120.160	119.965	119.652

Tablo 3.120. 189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları		HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(53)	1.2759	1.2607	1.2890	1.3088
2	C(1)-N(54)	1.3864	1.3835	1.3927	1.3928
3	C(1)-C(18)	1.4940	1.4992	1.4984	1.4939
4	C(18)-H(40)	1.0852	1.0839	1.0954	1.0927
5	C(18)-H(41)	1.0826	1.0841	1.0946	1.0929
6	C(18)-C(19)	1.5132	1.5113	1.5120	1.5294
7	C(19)-C(20)	1.3880	1.3855	1.3963	1.3978
8	C(20)-H(42)	1.0725	1.0764	1.0864	1.0830
9	C(20)-C(21)	1.3787	1.3838	1.3906	1.3959
10	C(21)-H(43)	1.0731	1.0763	1.0866	1.0850
11	C(21)-C(22)	1.3905	1.3879	1.3986	1.4003
12	C(22)-C(25)	1.5167	1.5099	1.5093	1.5187
13	C(25)-H(46)	1.0828	1.0837	1.0958	1.0943
14	C(25)-H(47)	1.0847	1.0861	1.0929	1.0959
15	C(25)-H(48)	1.0851	1.0839	1.0924	1.0974
16	C(23)-H(44)	1.0726	1.0764	1.0865	1.0851
17	C(22)-C(23)	1.3833	1.3886	1.3921	1.4027

Tablo 3.120.'nin devamı

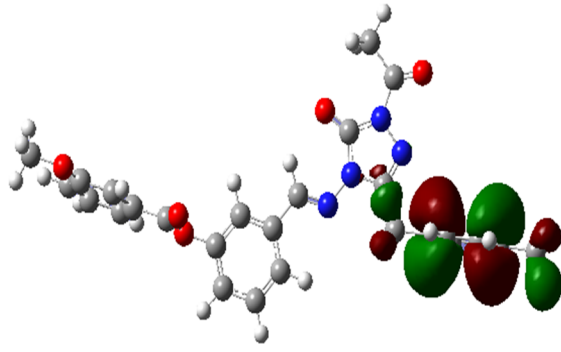
18	C(23)-C(24)	1.3861	1.3830	1.3921	1.3938
19	C(24)-H(45)	1.0730	1.0764	1.0866	1.0849
20	C(24)-C(19)	1.3815	1.3862	1.3950	1.4000
21	N(52)-N(53)	1.4357	1.3803	1.3916	1.4498
22	N(52)-C(26)	1.4059	1.4118	1.4313	1.4289
23	C(26)-O(60)	1.2017	1.1775	1.1998	1.2236
24	C(26)-C(27)	1.5093	1.5064	1.5085	1.5146
25	C(27)-H(49)	1.0833	1.0813	1.0913	1.0962
26	C(27)-H(50)	1.0791	1.0793	1.0884	1.0911
27	C(27)-H(51)	1.0799	1.0813	1.0913	1.0934
28	N(52)-C(2)	1.3708	1.3736	1.3979	1.3967
29	C(2)-O(56)	1.2201	1.1923	1.2134	1.2407
30	N(54)-C(2)	1.3807	1.3767	1.4068	1.4147
31	N(54)-N(55)	1.4106	1.3644	1.3717	1.4274
32	N(55)-C(3)	1.2683	1.2583	1.2862	1.2979
33	C(3)-H(28)	1.0618	1.0708	1.0838	1.0772
34	C(3)-C(4)	1.4608	1.4767	1.4643	1.4544
35	C(4)-C(5)	1.3926	1.3855	1.4075	1.4134
36	C(4)-C(9)	1.3856	1.3959	1.4039	1.4014
37	C(5)-O(57)	1.3965	1.3775	1.3781	1.4091
38	C(5)-C(6)	1.3812	1.3833	1.3944	1.3955
39	C(6)-H(29)	1.0637	1.0733	1.0840	1.0762
40	C(6)-C(7)	1.3842	1.3780	1.3897	1.3958
41	C(7)-H(30)	1.0715	1.0748	1.0849	1.0836
42	C(7)-C(8)	1.3838	1.3899	1.3963	1.3984
43	C(8)-H(31)	1.0709	1.0745	1.0845	1.0830
44	C(8)-C(9)	1.3802	1.3760	1.3860	1.3906
45	C(9)-H(32)	1.0705	1.0726	1.0834	1.0827
46	O(57)-C(10)	1.3620	1.3439	1.3969	1.3992
47	C(10)-O(58)	1.2047	1.1778	1.1959	1.2275
48	C(10)-C(11)	1.4811	1.4901	1.4893	1.4822
49	C(11)-C(16)	1.3914	1.3939	1.4035	1.4057
50	C(11)-C(12)	1.3790	1.3796	1.3925	1.3949
51	C(12)-H(33)	1.0662	1.0711	1.0819	1.0793
52	C(12)-C(13)	1.3903	1.3923	1.3991	1.4026
53	C(13)-O(59)	1.3765	1.3456	1.3600	1.3896
54	C(13)-C(14)	1.3810	1.3834	1.3977	1.3986
55	C(14)-H(34)	1.0691	1.0726	1.0827	1.0812
56	C(14)-C(15)	1.3876	1.3918	1.3973	1.3986
57	C(15)-H(35)	1.0713	1.0749	1.0849	1.0834
58	C(15)-C(16)	1.3735	1.3748	1.3854	1.3868
59	C(16)-H(36)	1.0692	1.0722	1.0827	1.0816
60	O(59)-C(17)	1.4390	1.3978	1.4203	1.4628
61	C(17)-H(37)	1.0827	1.0848	1.0951	1.0963
62	C(17)-H(38)	1.0828	1.0849	1.0952	1.0962
63	C(17)-H(39)	1.0758	1.0785	1.0880	1.0893

Tablo 3.121. 189 Bileşiminin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değerleri

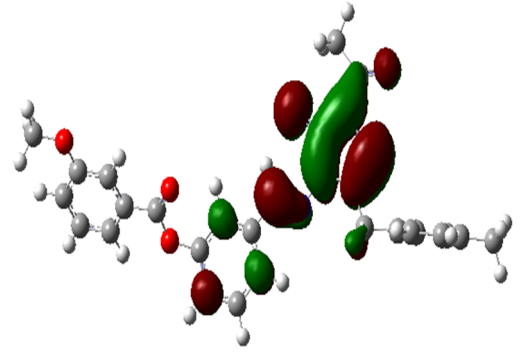
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.586	0.825	0.466	0.692
C2	0.810	1.317	0.611	0.992
C3	0.043	0.198	-0.049	0.115
C4	-0.051	-0.165	-0.025	-0.054

Tablo 3.121.'in devamı

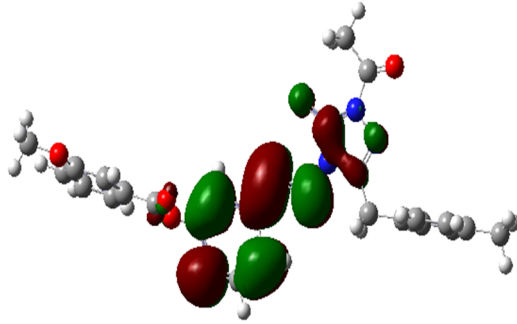
C5	-0.256	-0.245	-0.211	-0.210
C6	0.334	0.384	0.231	0.302
C7	-0.221	-0.252	-0.194	-0.190
C8	-0.205	-0.227	-0.202	-0.183
C9	-0.194	-0.204	-0.158	-0.179
C10	0.646	1.008	0.432	0.707
C11	-0.204	-0.246	-0.159	-0.107
C12	-0.241	-0.199	-0.203	-0.165
C13	0.369	0.418	0.272	0.322
C14	-0.300	-0.266	-0.259	-0.207
C15	-0.195	-0.227	-0.193	-0.182
C16	-0.212	-0.209	-0.160	-0.182
C17	-0.416	-0.274	-0.464	-0.336
C18	-0.600	-0.505	-0.600	-0.506
C19	0.065	-0.041	0.090	0.030
C20	-0.211	-0.201	-0.184	-0.189
C21	-0.233	-0.223	-0.203	-0.188
C22	0.045	-0.069	0.077	0.015
C23	-0.232	-0.223	-0.208	-0.186
C24	-0.211	-0.203	-0.195	-0.179
C25	-0.654	-0.587	-0.678	-0.599
C26	0.582	0.881	0.429	0.664
C27	-0.727	-0.689	-0.720	-0.638
H28	0.304	0.328	0.260	0.262
H29	0.242	0.324	0.232	0.247
H30	0.236	0.269	0.212	0.209
H31	0.229	0.254	0.230	0.198
H32	0.245	0.273	0.213	0.212
H33	0.265	0.305	0.230	0.230
H34	0.243	0.256	0.217	0.197
H35	0.225	0.252	0.198	0.196
H36	0.244	0.274	0.213	0.205
H37	0.208	0.200	0.212	0.200
H38	0.234	0.239	0.211	0.200
H39	0.208	0.200	0.234	0.227
H40	0.267	0.271	0.251	0.244
H41	0.267	0.271	0.251	0.238
H42	0.210	0.237	0.184	0.194
H43	0.213	0.236	0.187	0.180
H44	0.213	0.236	0.187	0.183
H45	0.211	0.236	0.185	0.200
H46	0.222	0.217	0.220	0.209
H47	0.222	0.217	0.218	0.209
H48	0.227	0.222	0.223	0.197
H49	0.252	0.259	0.245	0.238
H50	0.248	0.248	0.236	0.223
H51	0.253	0.259	0.246	0.238
N52	-0.480	-0.906	-0.363	-0.651
N53	-0.235	-0.342	-0.182	-0.315
N54	-0.486	-0.867	-0.379	-0.635
N55	-0.274	-0.359	-0.205	-0.317
O56	-0.525	-0.667	-0.384	-0.516
O57	-0.513	-0.815	-0.370	-0.600
O58	-0.435	-0.617	-0.318	-0.481
O59	-0.460	-0.735	-0.336	-0.550
O60	-0.393	-0.550	-0.279	-0.432



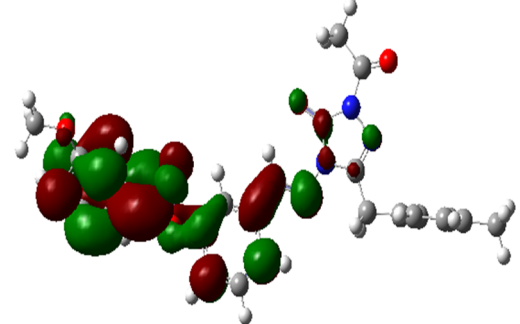
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (a)}) : -0,32034 \text{ Hatree}$



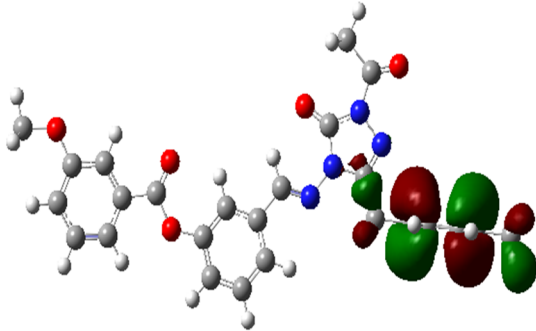
$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,20603 \text{ Hatree}$



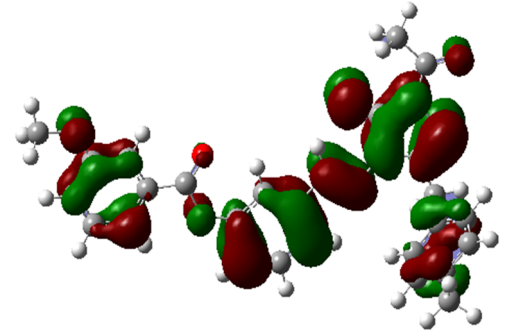
$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (a)}) : 0,07023 \text{ Hatree}$



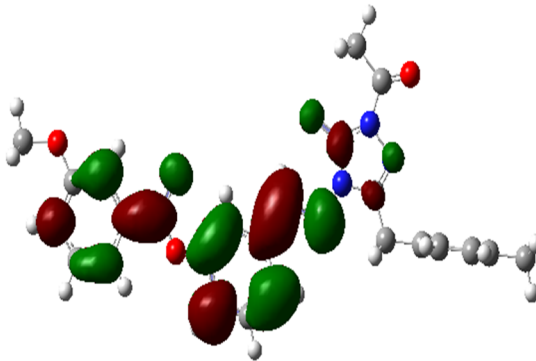
$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (a)}) : -0,06616 \text{ Hatree}$



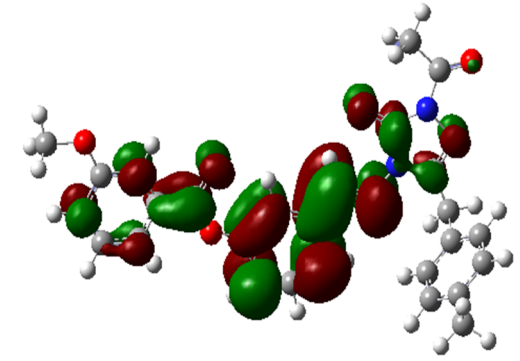
$E_{\text{HOMO}}(\text{HF (b)}) : 0,32346 \text{ Hatree}$



$E_{\text{HOMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,23091 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{HF (b)}) : 0,7350 \text{ Hatree}$



$E_{\text{LUMO}}(\text{B3LYP (b)}) : 0,06570 \text{ Hatree}$

Şekil 3.52. 189 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

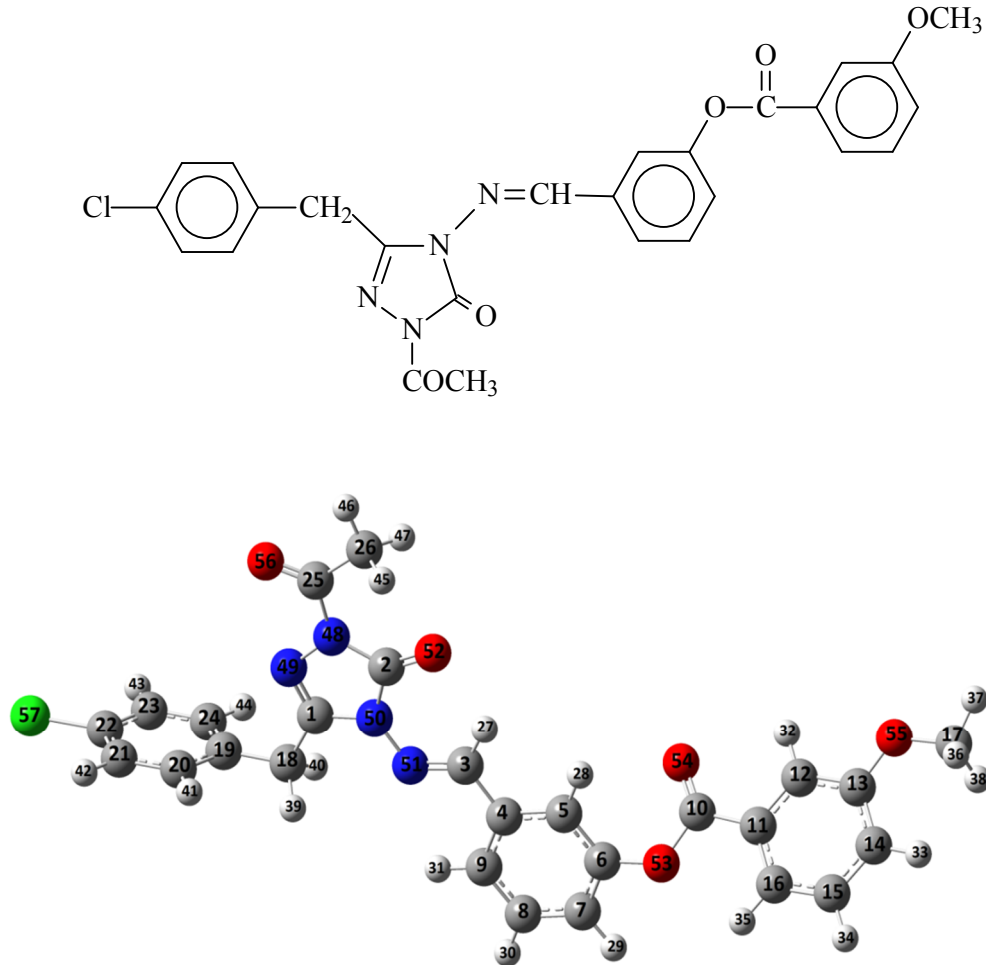
Tablo 3.122. 189 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	2.2502	2.2502	0.7069	2.6763
μ_y	5.3941	5.3941	3.5750	5.0312
μ_z	3.1746	3.1746	2.5957	2.5455
μ_{Toplam}	6.6511	6.6511	4.4741	6.2414

Tablo 3.123. 189 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerji

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-1628.853	-1619.436	-1638.803	-1629.431-

3.2.14. 1-Asetil-3-*p*-klorobenzil-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (190):



Şekil 3.53. 190 Bileşiğinin gaussview görünümü

Tablo 3.124. 190 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (6-311G(d) HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.99	152.95	156.01	-4.96	-8.02	141.76	145.43	6.23	2.56
C2	151.04	154.28	154.77	-3.24	-3.73	142.67	143.17	8.37	7.87
C3	151.04	153.86	154.68	-2.82	-3.64	143.55	144.35	7.49	6.69
C4	134.68	138.87	138.51	-4.19	-3.83	125.59	125.35	9.09	9.33
C5	126.26	130.21	129.64	-3.95	-3.38	120.42	120.26	5.84	6.00
C6	154.02	157.73	157.29	-3.71	-3.27	142.39	141.41	11.63	12.61
C7	125.40	126.49	127.68	-1.09	-2.28	117.53	118.34	7.87	7.06
C8	130.05	131.76	133.12	-1.71	-3.07	120.74	121.61	9.31	8.44
C9	120.24	123.36	124.08	-3.12	-3.84	114.33	115.22	5.91	5.02
C10	164.32	166.42	167.89	-2.10	-3.57	151.33	153.14	12.99	11.18
C11	130.37	134.26	133.46	-3.89	-3.09	122.53	121.67	7.84	8.70
C12	122.16	124.83	122.92	-2.67	-0.76	115.28	113.26	6.88	8.90
C13	159.45	165.17	165.33	-5.72	-5.88	149.59	149.42	9.86	10.03
C14	114.42	115.34	117.94	-0.92	-3.52	104.20	106.61	10.22	7.81
C15	130.22	131.70	133.24	-1.48	-3.02	120.85	122.37	9.37	7.85
C16	120.60	124.12	124.32	-3.52	-3.72	113.30	113.72	7.30	6.88
C17	55.48	53.55	54.09	1.93	1.39	35.22	35.78	20.26	19.70
C18	30.38	34.56	34.00	-4.18	-3.62	17.41	17.03	12.97	13.35
C19	131.66	135.93	137.90	-4.27	-6.24	124.13	126.17	7.53	5.49
C20	130.98	134.98	135.68	-4.00	-4.70	13.31	123.97	117.67	7.01
C21	128.36	131.92	131.94	-3.56	-3.58	121.11	121.20	7.25	7.16
C22	133.65	146.61	144.96	-12.96	-11.31	129.50	127.55	4.15	6.10
C23	128.36	131.93	132.17	-3.57	-3.81	121.15	121.22	7.21	7.14
C24	130.98	134.29	135.34	-3.31	-4.36	123.30	123.93	7.68	7.05
C25	165.93	164.23	167.96	1.70	-2.03	151.01	155.21	14.92	10.72
C26	23.50	24.65	24.94	-1.15	-1.44	11.36	11.69	12.14	11.81
H27	9.63	9.58	9.56	0.05	0.07	8.97	8.99	0.66	0.64
H28	7.66	7.30	7.35	0.36	0.31	6.66	6.85	1.00	0.81
H29	7.50	6.85	7.09	0.65	0.41	6.67	6.91	0.83	0.59
H30	7.63	7.14	7.39	0.49	0.24	6.86	7.12	0.77	0.51
H31	7.79	7.75	7.89	0.04	-0.10	7.58	7.75	0.21	0.04
H32	7.77	7.54	7.36	0.23	0.41	7.44	7.24	0.33	0.53
H33	7.36	6.35	6.72	1.01	0.64	6.07	6.47	1.29	0.89
H34	7.57	7.05	7.30	0.52	0.27	6.79	7.09	0.78	0.48
H35	7.75	7.45	7.56	0.30	0.19	7.18	7.32	0.57	0.43
H36	3.88	3.19	3.36	0.69	0.52	2.51	2.71	1.37	1.17
H37	3.88	3.70	3.77	0.18	0.11	3.08	3.14	0.80	0.74
H38	3.88	3.19	3.37	0.69	0.51	2.51	2.71	1.37	1.17
H39	4.18	3.60	3.80	0.58	0.38	2.94	3.20	1.24	0.98
H40	4.18	3.52	3.73	0.66	0.45	2.92	3.17	1.26	1.01
H41	7.36	6.86	7.10	0.50	0.26	6.59	6.88	0.77	0.48
H42	7.41	6.93	7.06	0.48	0.35	6.66	6.81	0.75	0.60
H43	7.41	6.87	7.01	0.54	0.40	6.66	6.81	0.75	0.60
H44	7.36	6.82	7.09	0.54	0.27	6.59	6.88	0.77	0.48
H45	2.52	2.12	2.24	0.40	0.28	1.51	1.66	1.01	0.86
H46	2.52	1.55	1.58	0.97	0.94	1.08	1.09	1.44	1.43
H47	2.52	2.14	2.25	0.38	0.27	1.52	1.66	1.00	0.86

Tablo 3.125. 190 Bileşiminin TMS'ye göre ¹³C- ve ¹H-NMR deneysel ve teorik (3-21G HF, B3LYP, HF (DMSO) ve B3LYP(DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	HF	HF/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO	B3LYP	B3LYP/ DMSO	Fark	Fark/ DMSO
C1	147.99	116.34	118.42	31.65	29.57	114.24	116.63	33.75	31.36
C2	151.04	113.77	114.70	37.27	36.34	111.64	112.78	39.40	38.26
C3	151.04	118.63	118.92	32.41	32.12	116.39	116.6	34.65	34.44
C4	134.68	99.97	99.45	34.71	35.23	92.61	92.06	42.07	42.62
C5	126.26	90.92	90.15	35.34	36.11	84.66	83.83	41.60	42.43
C6	154.02	120.94	120.84	33.08	33.18	111.15	110.89	42.87	43.13
C7	125.40	88.58	89.48	36.82	35.92	84.24	85.02	41.16	40.38
C8	130.05	93.63	94.88	36.42	35.17	88.75	89.99	41.30	40.06
C9	120.24	87.21	87.80	33.03	32.44	82.90	83.62	37.34	36.62
C10	164.32	133.25	133.90	31.07	30.42	128.41	129.24	35.91	35.08
C11	130.37	96.32	95.58	34.05	34.79	90.06	89.25	40.31	41.12
C12	122.16	88.58	86.99	33.58	35.17	85.61	83.73	36.55	38.43
C13	159.45	124.15	124.19	35.30	35.26	115.76	115.4	43.69	44.05
C14	114.42	83.20	85.17	31.22	29.25	78.27	80.36	36.15	34.06
C15	130.22	94.37	95.67	35.85	34.55	88.92	90.44	41.30	39.78
C16	120.60	88.11	88.21	32.49	32.39	83.89	84.43	36.71	36.17
C17	55.48	31.40	32.03	24.08	23.45	15.59	16.19	39.89	39.29
C18	30.38	13.53	13.12	16.85	17.26	-0.87	-1.17	31.25	31.55
C19	131.66	98.55	99.79	33.11	31.87	92.87	94.32	38.79	37.34
C20	130.98	97.45	98.32	33.53	32.66	91.66	92.44	39.32	38.54
C21	128.36	93.81	93.84	34.55	34.52	89.36	89.36	39.00	39.00
C22	133.65	112.14	111.15	21.51	22.50	99.78	98.59	33.87	35.06
C23	128.36	93.81	93.84	34.55	34.52	89.35	89.36	39.01	39.00
C24	130.98	97.45	98.32	33.53	32.66	91.66	92.44	39.32	38.54
C25	165.93	131.03	133.48	34.90	32.45	128.66	131.72	37.27	34.21
C26	23.50	2.84	3.01	20.66	20.49	-8.63	-8.4	32.13	31.90
H27	9.63	9.36	9.27	0.27	0.36	8.83	8.72	0.80	0.91
H28	7.66	7.85	7.74	-0.19	-0.08	7.45	7.30	0.21	0.36
H29	7.50	5.78	6.07	1.72	1.43	5.75	6.06	1.75	1.44
H30	7.63	6.08	6.40	1.55	1.23	5.88	6.26	1.75	1.37
H31	7.79	6.82	7.00	0.97	0.79	6.72	6.96	1.07	0.83
H32	7.77	6.71	6.52	1.06	1.25	6.83	6.57	0.94	1.20
H33	7.36	5.24	5.67	2.12	1.69	4.94	5.44	2.42	1.92
H34	7.57	5.99	6.30	1.58	1.27	5.74	6.13	1.83	1.44
H35	7.75	6.62	6.78	1.13	0.97	6.48	6.7	1.27	1.05
H36	3.88	2.73	2.97	1.15	0.91	1.74	2.03	2.14	1.85
H37	3.88	3.39	3.52	0.49	0.36	2.74	2.03	1.14	1.85
H38	3.88	2.73	2.96	1.15	0.92	1.74	2.82	2.14	1.06
H39	4.18	2.83	3.06	1.35	1.12	2.08	2.37	2.10	1.81
H40	4.18	2.83	3.07	1.35	1.11	2.08	2.37	2.10	1.81
H41	7.36	5.95	6.27	1.41	1.09	5.72	6.1	1.64	1.26
H42	7.41	5.80	5.98	1.61	1.43	5.6	5.79	1.81	1.62
H43	7.41	5.80	5.98	1.61	1.43	5.60	5.79	1.81	1.62
H44	7.36	5.95	6.27	1.41	1.09	5.72	6.10	1.64	1.26
H45	2.52	1.43	1.54	1.09	0.98	0.54	0.69	1.98	1.83
H46	2.52	0.54	0.60	1.98	1.92	-0.01	0.02	2.53	2.5
H47	2.52	1.43	1.54	1.09	0.98	0.54	0.69	1.98	1.83

Tablo 3.126. 190 Bileşiminin teorik (6-311G(d) HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(21), τ COCC(34)	4	6
2	τ CCCC(25), τ COCC(45)	7	12
3	τ CCOC(52), τ CCCC(49), τ CCNC(11)	11	15
4	τ CCCC(12), τ COCC(21), τ COCC(52)	14	18
5	τ CNNC(16), τ CCCC(16), τ NCCN(12)	26	24
6	δ NCC(14), δ CCC(11), τ CCOC(26), τ CCCC(18), τ NCCN(12)	26	26
7	τ CNNC(13), τ CCNN(14), τ NNCC(12), τ CCNC(38), τ NCCN(26)	36	37
8	τ HCCC(17), τ CCCC(27)	39	42
9	δ COC(18), τ CNNC(11), τ CCNC(11)	51	52
10	τ CCCC(14), δ CNN(10), δ CCN(15)	56	64
11	τ CCCC(26), τ CCNC(42)	64	66
12	τ HCOC(10), τ CCCC(11), τ COCC(63)	70	82
13	τ CCCN(12), τ CCNN(25), τ CCCN(25)	91	94
14	δ NCC(19), τ CCCC(15), δ CCN(14)	105	99
15	τ CCCC(12), τ CNNC(16), τ NCNN(15), τ CCNN(25)	125	120
16	τ NNCC(29), τ CCNN(17), τ NCNC(17)	130	127
17	τ HCCN(10), τ CNNC(14), τ NNCC(10)	158	157
18		166	163
19	τ HCCN(49)	173	166
20	τ CCCC(20)	179	172
21	δ NCC(10), τ HCCN(67)	191	179
22	ν OC(10)	205	201
23	τ HCOC(21), τ CCCC(25), τ COCC(13), τ OCCC(17), τ HCCN(21), τ CCCN(35)	225	213
24	τ CCCN(41), τ NNCC(20), τ HCOC(16), τ CCCN(35), τ OCCC(17), τ HCCN(21)	225	235
25	ν CC(12), δ NCN(18), δ CNN(13)	248	240
26	δ CCC(19), δ CICC(55)	260	250
27	δ COC(29), τ CCCN(15)	269	263
28	τ HCOC(41), τ CCCC(28), τ COCC(10)	292	277
29	δ COC(21), δ OCO(14)	306	293
30	τ CCCC(24), τ CCCCC(31)	315	301
31	δ COC(11), δ CNN(12), δ CCN(16)	320	313
32	τ CNNC(25), τ CCNN(14), τ NCNC(16)	362	345
33	τ CNNC(12), τ CCNN(23)	367	359
34	δ CCC(45), δ CICC(29)	379	365
35	δ OCN(29), δ CNN(10), δ CCN(10)	392	371
36	δ OCC(16), δ CCN(29)	399	381
37	ν ClC(23), τ CCCC(35), δ CCC(10)	423	403
38	τ HCCC(17), τ CCCC(81)	434	414
39	δ CCC(37), δ COC(10)	439	427
40	τ CCCC(35), ν ClC(23), δ CCC(10)	459	440
41	τ CCCC(12), δ CCN(10)	471	447
42	τ HCCC(15), τ CCCN(13), τ CCOC(10)	481	458
43	δ NCN(13), δ CCO(13)	495	468
44	δ CCC(15), δ COC(10)	507	495
45	τ HCCC(20), τ CCCC(22), τ CCCCC(20)	529	504
46	τ HCCC(11), τ CCCC(13), τ OCOC(10), τ OCCC(36), δ CCC(13)	581	551
47	δ CCC(18), δ COC(19), τ CCCC(11), τ OCCC(27)	583	566
48		599	581
49	τ HCCN(16), τ ONNC(28)	611	582
50	δ CCC(10), δ CCO(12), τ HCCN(10), τ ONNC(27)	612	591
51	τ CCCN(21), τ COCC(15), τ CCOC(16), δ OCO(10)	624	599
52	ν CC(16), δ OCC(37)	642	617
53	δ CCC(45)	662	642

Tablo 3.126.'nin devamı

54	v ClC(20), δ CCC(14), τ NNCC(10), τ NCNC(25)	676	652
55	v ClC(15), δ CCC(10), τ NNCC(10), τ NCNC(25), τ CNNC(28)	687	653
56	δ CCC(16)	694	673
57	τ HCCC(24), τ CCCC(19), τ ONNC(41), δ CCC(19)	709	683
58	v CC(12), δ CCC(21), τ HCCC(28), τ CCCC(18), τ OCCC(16)	716	685
59	τ HCCC(34), τ CCOC(20)	724	691
60	τ HCCC(15), τ CCCC(50), v ClC(20), δ CCC(14)	736	705
61	τ ONNC(41), δ CCC(19)	789	738
62	τ HCCC(21), τ OCOC(45)	805	753
63	τ HCCC(24), τ OCOC(44)	808	756
64	v NN(12), τ NCNN(11), τ ONNC(42)	815	775
65	τ HCCC(30), δ OCO(12)	830	790
66	τ HCCC(45), τ OCOC(21), v CC(11)	840	802
67	τ HCCC(12)	854	804
68	τ HCCC(48), τ OCOC(28)	861	814
69	τ HCCC(99)	874	819
70	τ HCCC(99)	885	830
71	τ HCCC(42), τ CCCC(11), δ CCC(12)	910	859
72	v OC(19), τ HCCC(19)	926	877
73	τ CCCC(10), τ HCCC(40), v NN(10), v CC(18)	954	891
74	v OC(11), τ HCCC(30)	966	897
75	v NC(10), v CC(12), δ NCN(12), τ HCNN(75)	967	911
76	τ HCCC(43), v CC(10), δ HCC(30), τ CNNC(11)	972	918
77	τ HCCC(40)	982	919
78	δ HCC(30), τ HCCC(29), v OC(10), δ CCC(13)	986	928
79	τ HCCC(77), τ CCCC(11)	998	943
80	τ HCCC(66), τ CCCC(18)	1017	945
81	v CC(30), δ CCC(32), δ HCH(10), τ HCCN(26)	1027	959
82	v CC(30), δ CCC(32), δ HCH(10), τ HCCN(26), τ HCCC(50)	1027	963
83	τ HCCC(84), τ CCCC(10)	1032	969
84	v NN(10), v CC(21), δ HCH(11), τ HCCN(27), δ CCC(21)	1034	974
85	v CC(28), δ CCC(31), τ HCCC(46)	1044	1002
86	τ HCNN(75), τ HCCC(59), τ CCCC(10)	1050	1007
87	v CC(31), δ CCC(61), τ HCNN(14), δ HCC(10)	1055	1008
88	δ CCC(62), τ HCNN(89)	1083	1025
89	δ NNC(30), τ HCNN(89)	1114	1054
90	δ HCH(19), τ HCCN(54), τ HCCC(62), τ CCCC(18), v CC(59), δ HCC(20)	1117	1059
91	v OC(61), v NC(23)	1122	1061
92	v OC(10), δ HCC(19), δ CCC(12), v CC(17)	1125	1086
93	v CC(54), v ClC(18), δ HCC(14), v OC(46)	1126	1093
94	v CC(45), δ HCC(22), v OC(10)	1138	1100
95	v CC(45), v OC(10), v ClC(18), δ HCC(23)	1138	1110
96	v CC(21), δ HCC(57)	1142	1125
97	v NN(30), τ HCCN(26), v CC(21)	1157	1132
98	δ HCC(40), v CC(25)	1168	1166
99	δ HCH(25), τ HCOC(26), v CC(19), δ HCC(30), τ HCCC(12)	1192	1171
100	v CC(11), δ HCC(33), v NN(21), τ HCCN(23)	1202	1182
101	v CC(10), δ HCC(39)	1217	1186
102	v NC(13), v NN(10), δ HCC(11), δ OCC(10), δ HCH(25), τ HCOC(26)	1232	1195
103	v CC(25), δ HCH(10), δ HCC(64), τ HCOC(16)	1235	1198
104	v CC(17), δ HCH(10), δ HCC(52), τ HCOC(16), τ HCCC(10)	1251	1199
105	v CC(13), δ HCC(38), τ HCCC(26), τ HCOC(11)	1251	1209
106	v CC(23), δ HCC(13), τ HCCC(13)	1262	1217
107	v CC(50), δ HCC(31), v OC(17)	1266	1223
108	δ NCN(11), v CC(11), δ HCC(46), τ HCCC(17)	1289	1245

Tablo 3.126.'nın devamı

109	v NC(17), v NN(18)	1295	1270
110	v CC(25), δ HCC(64), v OC(17)	1310	1285
111	v NC(27), τ HCCC(15), v OC(42), v CC(12)	1325	1295
112	v NC(18), δ HCC(17), δ CNN(10), τ HCCC(14)	1345	1306
113	v CC(50), δ HCC(31), v OC(17)	1368	1311
114	δ HCC(24)	1373	1312
115	v CC(29), τ HCCC(12), v NC(12), δ HCC(55)	1375	1321
116	v CC(14), δ HCC(54), v NC(14), τ HCCC(16)	1383	1334
117	v CC(41), δ HCC(75)	1383	1344
118	v CC(61), δ HCC(17), v NC(11), v NN(11), δ NNC(13)	1425	1350
119	δ HCN(41), τ HCCC(20)	1463	1394
120	δ HCH(90)	1480	1408
121	v CC(30), δ HCC(37)	1484	1431
122	v NC(10), v CC(22)	1503	1436
123	δ HCH(72), τ HCCN(23)	1517	1459
124	δ HCH(22), v CC(19), δ HCC(14)	1525	1460
125	v CC(21), δ HCC(10), δ HCH(76)	1533	1466
126	δ HCH(84), τ HCCN(23)	1534	1472
127	δ HCH(74), τ HCCN(24), δ HCN(18), τ HCCC(13)	1540	1476
128	δ HCH(61), δ HCC(10)	1546	1479
129	δ HCH(74), τ HCOC(12)	1562	1498
130	δ HCH(71), τ HCOC(11)	1570	1509
131	δ HCC(40), δ HCH(16), δ CCC(12)	1574	1512
132	δ HCC(26), δ CCC(12)	1577	1515
133	v CC(12), δ HCC(59), δ CCC(11)	1587	1519
134	v CC(27), δ CCC(13)	1680	1607
135	v CC(32), δ HCC(10), δ CCC(11), δ HCH(61)	1691	1610
136	v CC(32), δ CCC(17), δ HCC(11)	1698	1611
137	v CC(46), δ HCC(21)	1713	1628
138	v CC(43), δ HCC(18)	1717	1631
139	v CC(65)	1718	1638
140	v NC(53)	1790	1644
141	v NC(64)	1801	1657
142	v OC(40)	1858	1772
143	v OC(88)	1903	1786
144	v OC(49)	1923	1813
145	v CH(91)	3030	2982
146	v CH(95)	3066	3016
147	v CH(95)	3070	3036
148	v CH(50)	3086	3041
149	v CH(95)	3096	3044
150	v CH(98)	3135	3095
151	v CH(46)	3150	3117
152	v CH(95)	3159	3131
153	v CH(73)	3182	3138
154	v CH(73)	3182	3141
155	v CH(52)	3188	3143
156	v CH(54)	3191	3146
157	v CH(34)	3203	3148
158	v CH(42)	3212	3170
159	v CH(60)	3217	3173
160	v CH(63)	3218	3174
161	v CH(66)	3221	3177
162	v CH(39)	3223	3179
163	v CH(57)	3227	3186
164	v CH(56)	3236	3189
165	v CH(48)	3239	3195

Tablo 3.127. 190 Bileşimin teorik (3-21G HF ve B3LYP) IR değerleri (cm⁻¹)

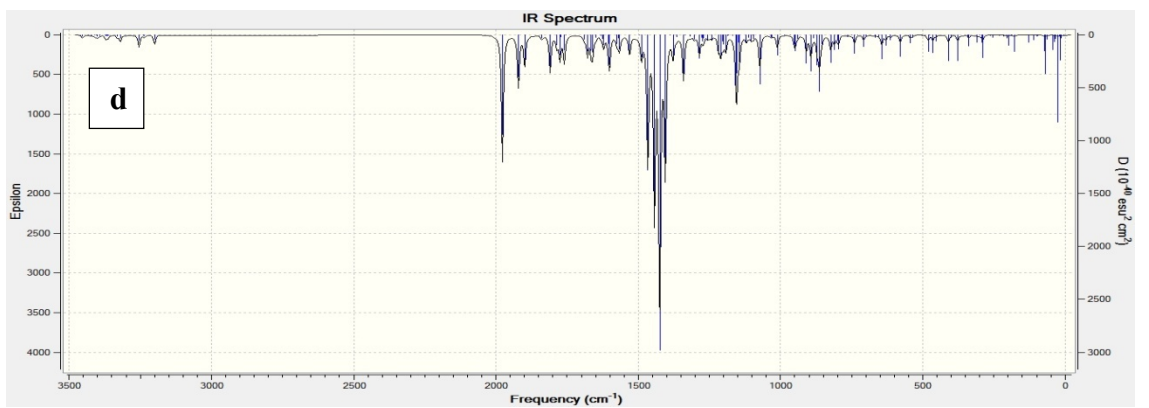
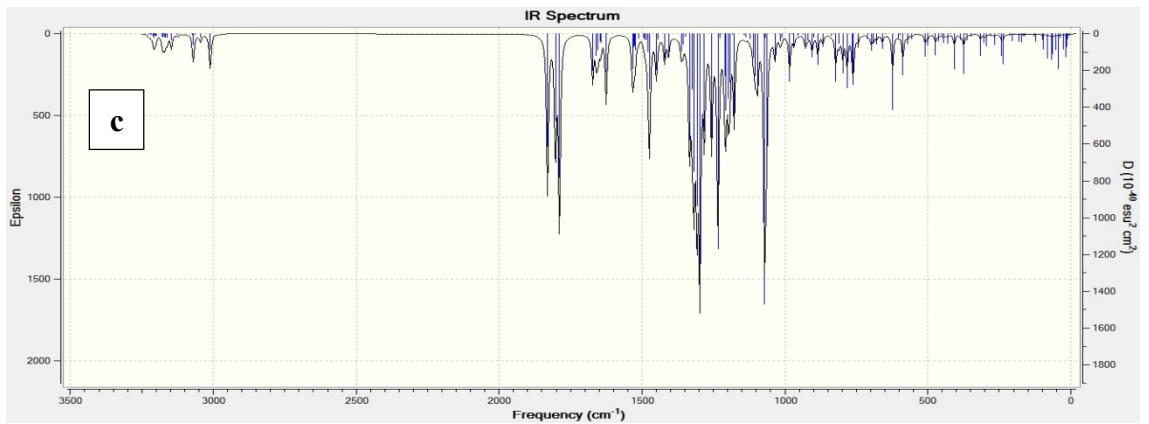
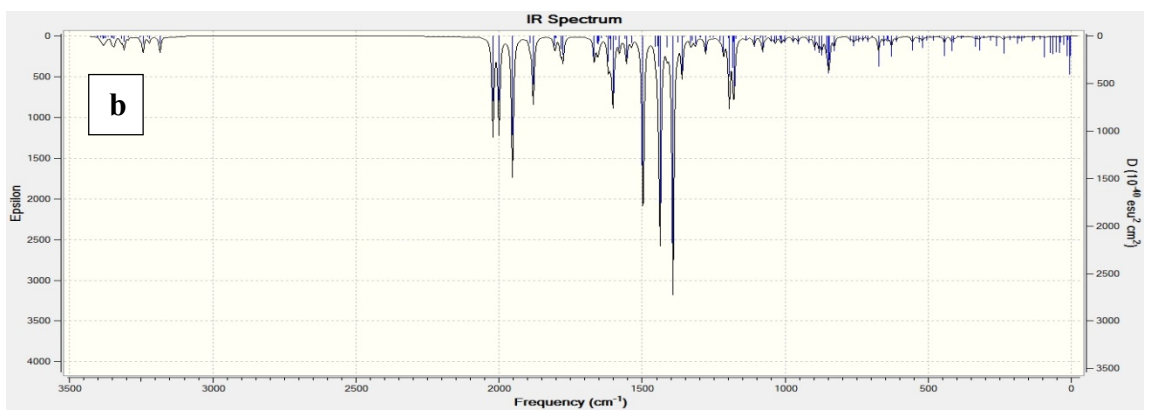
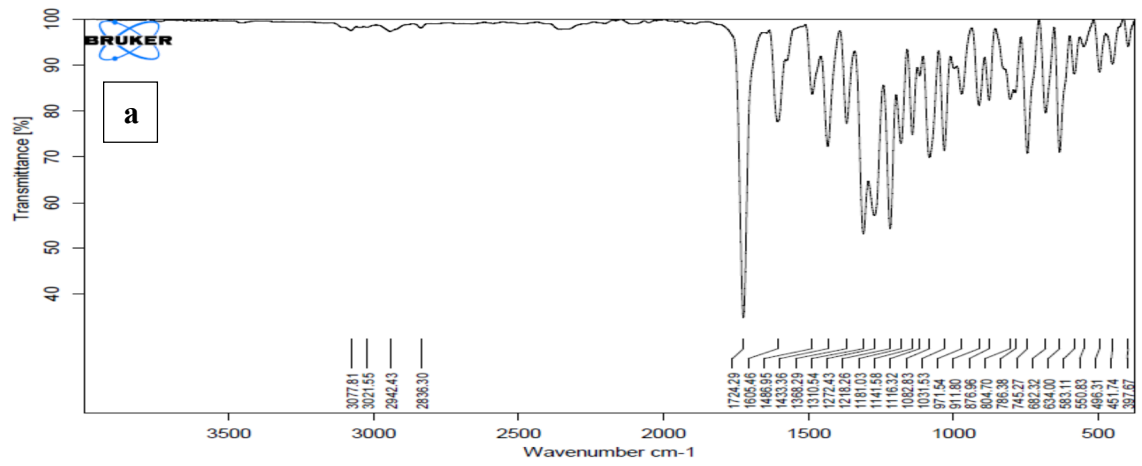
	TİTREŞİM TÜRLERİ	HF	B3LYP
1	τ CNNC(20), τ NCNC(22), τ COCC(11), τ CCCN(19)	5	6
2	τ CCCC(34), τ COCC(13)	11	15
3	δ CCC(10), δ CNN(17), δ CCN(17), τ CCCC(12), τ COCC(43), τ CCOC(15)	16	17
4	τ NCNC(13), τ CCCC(21), δ COC(10), δ CNN(18), δ CCN(17)	17	19
5	τ NCNC(14), τ CCOC(27), τ COCC(10), τ CCCC(15)	22	21
6	δ CCC(10), τ CCCC(21), τ CCOC(25), τ CCCN(14)	31	32
7	τ CNNC(12), τ CCCC(18), τ CCOC(19), δ COC(14)	33	34
8	τ NCNC(27), τ CCNN(16)	40	40
9	δ COC(16), δ CNN(13)	58	59
10	τ CCCC(36), τ CCNN(14), τ COCC(16)	64	66
11	τ HCOC(11), τ COCC(54)	66	78
12	δ NCC(15), δ CCO(13), τ COCC(29), τ CCCC(22)	86	89
13	τ CCCC(16), τ COCC(17), δ NCC(14), δ CCO(14)	90	94
14	τ CCCN(19), τ NCNC(11), τ CCNN(18)	100	97
15	τ CCCC(19), τ CCCCC(10)	116	113
16	τ NNCC(28), τ CCNN(19), τ NCNC(11)	137	132
17	τ HCCN(71), δ CNN(13)	161	144
18	δ CNN(14), τ CCCN(18), τ CNNC(16)	169	157
19	τ CNNC(14), τ CCCC(18), τ HCCN(73)	173	165
20	τ CNNC(21), τ CCCC(14), τ CCCN(28)	179	177
21		184	184
22	δ COC(31)	195	198
23	τ HCOC(44), τ COCC(10), τ OCCC(17), τ CCCC(13)	210	208
24	ν CC(10), δ CNN(13), δ CCN(10)	230	227
25	δ CICC(61)	237	230
26	τ CCCN(35), τ CCCC(14)	263	258
27	δ COC(39), τ HCOC(11), τ CCCC(32), τ OCCC(10)	264	266
28	τ HCOC(18), τ CCCC(32), τ OCCC(10)	273	268
29	τ CNNC(13), τ CCCN(30), τ CCNN(13), τ CCCC(18), τ OCCC(10)	281	286
30	τ CCCC(15), τ CCCCC(28), δ COC(12)	307	296
31	δ COC(12), τ CCCCC(28), τ CCCC(15)	311	306
32	δ OCN(11), δ OCO(16), δ COC(14), δ CCN(10)	343	337
33	τ NCNC(13), τ CCNN(23), δ CCC(17), δ CICC(18)	358	344
34	δ CCC(20), δ CICC(19), τ HCCC(14), τ CCNN(19)	364	348
35	τ CCNN(18), τ NNCC(18), δ CCN(21), ν CIC(11)	372	360
36	ν CIC(15), δ CCN(20), τ CCNN(27), τ NNCC(18)	373	367
37	ν CIC(33), δ OCC(11)	413	405
38	δ OCN(12), δ CCC(12)	422	413
39	τ HCCC(19), τ CCCC(80)	433	417
40	δ CCC(25)	436	430
41	τ CCCC(35), δ CCC(12), δ CCN(17), δ CNN(18)	458	446
42	δ CNN(16), δ CCN(13), τ CCCC(48)	464	447
43	τ HCCC(21), τ CCCN(19), τ CCOC(16), τ CCCC(18)	485	466
44	δ CCC(18), δ CCN(17), δ CNN(18)	493	487
45	τ HCCC(20), τ CCCC(18), τ CCCCC(16)	526	500
46	τ HCCC(10), τ CCCC(16), τ OCOC(11), τ OCCC(32), δ CCC(17), δ COC(18)	557	551
47	δ CCC(13), δ COC(21), δ OCC(33), τ OCOC(13), τ OCCC(21), ν CC(10), HCCC(12)	572	553
48	ν NC(11), δ OCC(33), ν CC(10), τ OCOC(13), τ OCCC(21), τ HCCC(20)	573	559
49	δ CCC(11), δ NNC(16)	586	572
50	δ CCC(16), δ COC(10), δ CCO(19)	595	585
51	τ HCCN(13), τ ONNC(48), τ NCNC(10)	606	586

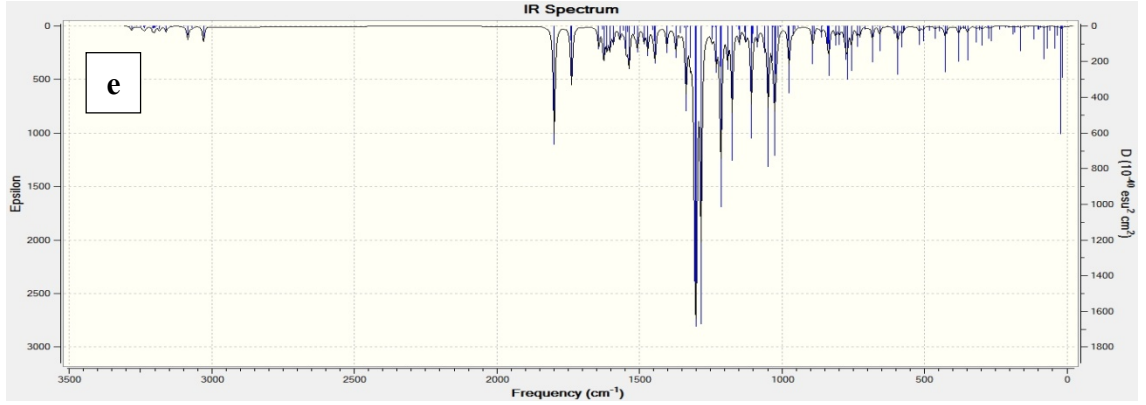
Tablo 3.127.'nin devamı

52	τ CCCN(19), τ COCC(19), τ CCOC(18), τ OCCC(19)	636	608
53	ν CIC(18), ν CC(17), δ CCC(20)	643	634
54	τ NNCC(14), τ NCNC(29), τ CCNN(17), δ CCC(46)	662	642
55	δ CCC(35), τ NCNC(12)	672	651
56	δ CCC(20), τ NNCC(15), τ CCNN(20), τ NCNC(33)	681	659
57	ν CC(19), δ CCC(31)	694	683
58	τ HCCC(12), τ CCCC(42), NCC(15)	723	700
59	τ HCCC(31), τ CCCC(31)	727	702
60	τ HCCC(44), τ COCC(11), τ CCOC(15), τ CCCN(15)	736	710
61	δ NCC(10), ν NN(10)	748	730
62	τ HCCC(12), τ OCOC(52), τ CCCC(16)	777	744
63	τ ONNC(54), τ OCOC(55), τ HCCC(13)	784	749
64	τ HCCC(11), τ CCCC(15), δ OCO(21)	791	754
65	ν OC(11), ν CC(10), δ OCO(28), δ NCC(10)	804	770
66	δ NCC(11), τ ONNC(52)	812	783
67	δ CCC(11), τ HCCC(18), ν CC(11)	826	805
68	τ HCCC(27), τ CCOC(15), ν CC(22), ν NN(10)	854	809
69	τ HCCC(57), τ OCOC(10), τ CCCC(10)	861	812
70	τ HCCC(100)	865	827
71	ν CC(15), ν OC(19)	877	832
72	ν OC(14), τ HCCC(99)	897	857
73	τ HCCC(50), τ CCCC(13)	919	861
74	δ HCC(34), τ HCCC(29), ν CC(12)	936	910
75	τ HCCC(45), τ NCNC(10), δ HCC(33), ν CC(11)	938	920
76	τ HCCC(51), ν NC(10), ν CC(13), τ HCCN(20)	975	925
77	ν CC(12), δ CCC(13), τ HCCC(25)	995	928
78	ν NC(11), ν CC(11), τ HCCN(19), τ HCCC(28)	997	940
79	τ HCCC(27), τ CCCC(13), δ CCC(13), ν CC(42)	1002	944
80	τ HCCC(67), τ CCCC(12), δ CCC(16), ν CC(17)	1011	968
81	τ HCCC(84), τ CCCC(14)	1018	971
82	τ HCCC(25), τ CCOC(12), δ CCC(56)	1040	978
83	ν CC(21), ν OC(21), τ HCCC(26), τ HCNN(14)	1042	985
84	ν NC(28)	1048	990
85	τ HCCC(53), ν OC(54)	1050	995
86	τ HCCC(59), τ CCCC(17)	1060	995
87	ν CC(29), δ CCC(17), τ HCCC(82), τ CCCC(15)	1061	998
88	ν OC(35), δ CCC(14), τ HCCC(62)	1074	1012
89	δ CCC(63), τ HCCC(47)	1078	1024
90	τ HCNN(84), CC(61), CIC(15), δ HCC(11)	1083	1048
91	δ HCH(20), τ HCCN(58), CC(14), δ HCC(17)	1090	1063
92	ν CC(36), δ CNN(12), δ HCH(20), τ HCCN(56)	1093	1067
93	ν OC(12), δ HCC(16), δ CCC(11), ν CC(19)	1099	1069
94	ν CC(21), δ NCC(10), δ CNN(14), δ HCC(13)	1100	1069
95	ν CC(36), δ HCC(19), τ HCNN(74)	1106	1087
96	ν CC(45), δ HCC(25)	1108	1091
97	δ HCH(10), τ HCCN(26), δ HCC(59), δ NCC(19), δ CNN(22)	1128	1109
98	ν CC(24), δ HCC(47), τ HCCN(20)	1140	1111
99	δ HCH(23), τ HCOC(26), ν CC(14)	1153	1119
100	ν OC(14), δ HCC(14), τ HCOC(26), δ CC(20)	1155	1133
101	δ HCH(24), τ HCOC(28), δ CC(20)	1156	1149
102	δ OC(13), δ CC(25), δ HCC(16), τ HCCC(14)	1159	1171
103	δ NN(10), δ CC(11), δ HCC(16)	1168	1173
104	δ CC(12), δ HCC(49), δ HCH(13), τ HCOC(24)	1183	1187
105	δ CC(20), δ HCC(16), δ CCC(12)	1198	1191
106	δ HCC(69), δ CC(16)	1214	1199
107	δ CC(16), δ HCC(31), τ HCCC(25)	1218	1201

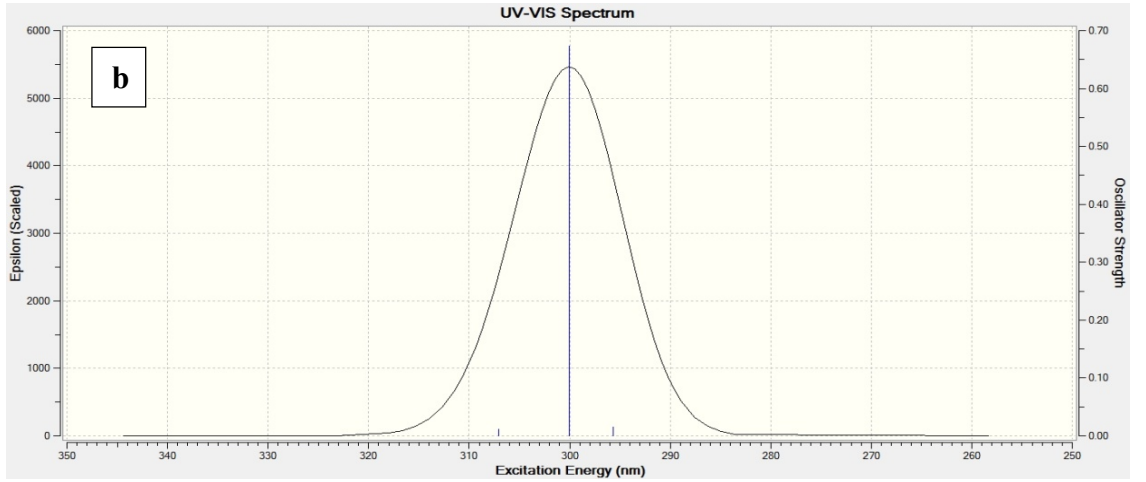
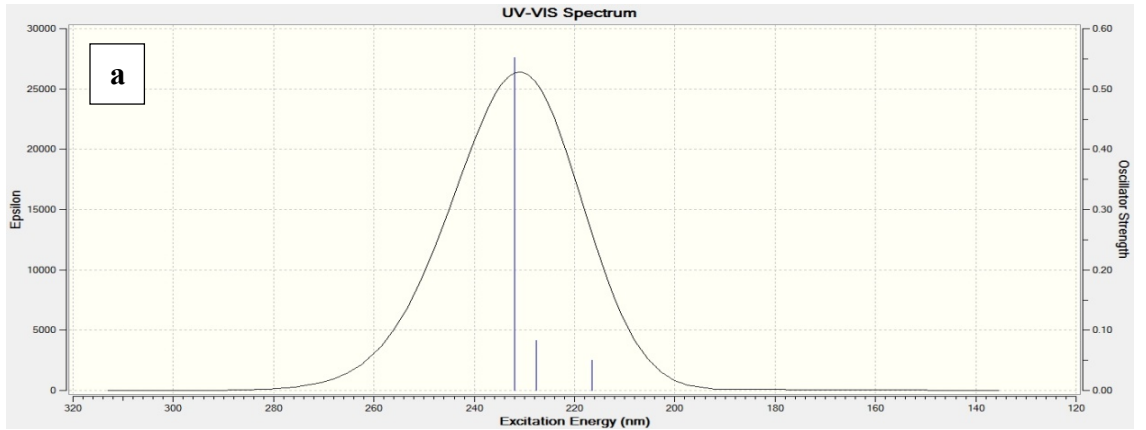
Tablo 3.127.'nin devamı

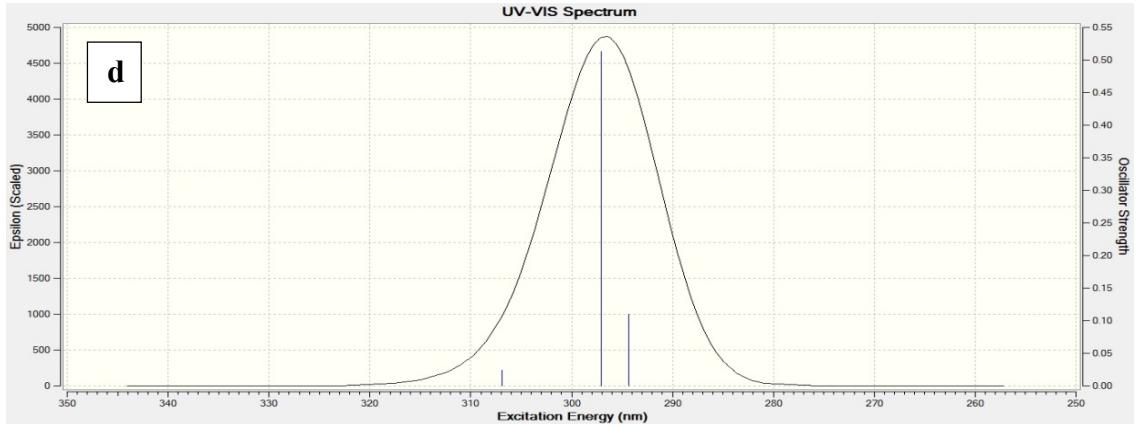
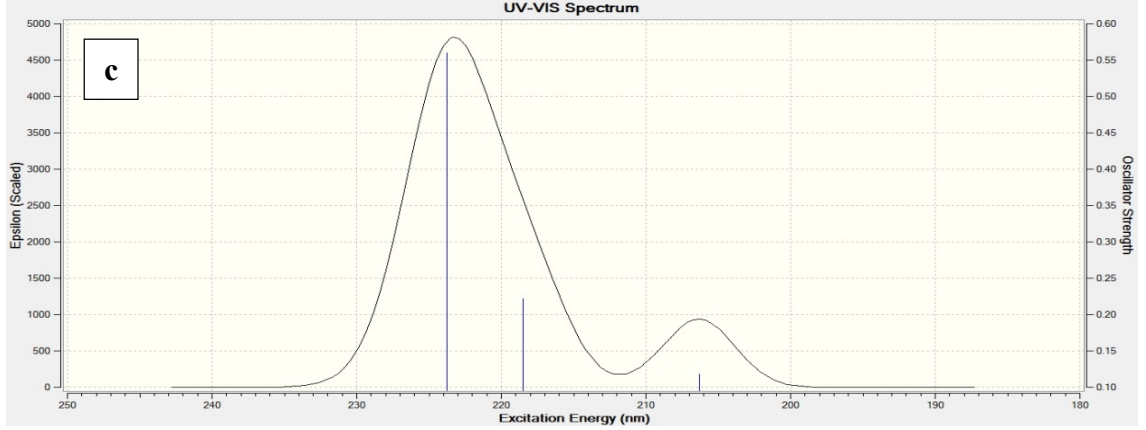
108	v CC(14), δ HCC(41)	1218	1202
109	v CC(15), v OC(13), v NN(11), δ HCC(10)	1239	1239
110	v CC(12), v NC(21)	1251	1254
111	v NC(24), δ HCC(45), τ HCCC(19), v CC(13)	1261	1260
112	v CC(22), τ HCCC(12), v OC(41)	1276	1275
113	v CC(60), δ HCC(14), v OC(23)	1294	1283
114	v CC(23), δ HCC(69), v NC(15), τ HCCC(21), δ HCN(13)	1311	1289
115	v CC(30), δ HCC(11), v NC(22), δ CNN(11), τ HCCC(14)	1332	1295
116	v CC(25), δ HCC(39)	1334	1309
117	δ HCC(75)	1352	1324
118	δ HCC(79)	1360	1335
119	δ HCN(33), τ HCCC(30)	1390	1354
120	δ HCN(21)	1423	1394
121	δ HCH(96), δ HCC(46), v CC(24)	1427	1398
122	v CC(24), δ HCC(41), δ HCH(95)	1431	1404
123	v CC(17), δ HCC(10), δ HCN(17)	1454	1419
124	v CC(29), δ HCC(15)	1458	1432
125	δ HCC(11), δ HCH(88)	1473	1452
126	δ HCH(87), δ HCC(22), τ HCCN(24), v CC(42)	1476	1455
127	δ HCH(72), τ HCCN(25), δ HCC(10)	1483	1464
128	δ HCC(32), δ HCH(75), τ HCCN(25)	1498	1482
129	δ HCC(46)	1508	1483
130	δ HCH(75), τ HCCN(25), δ HCC(25), v CC(21)	1513	1487
131	v CC(11), δ HCC(66), δ CCC(10)	1525	1492
132	δ HCH(76), τ HCOC(12)	1525	1502
133	δ HCH(74)	1534	1514
134	v NC(51), v CC(29), δ HCC(12), δ CCC(13)	1593	1535
135	v NC(49), v CC(21), δ HCC(10), δ CCC(10)	1598	1547
136	v CC(36), δ HCC(16), δ CCC(12)	1600	1557
137	v CC(43), δ HCC(10), δ CCC(13)	1610	1560
138	v CC(42), δ HCC(22), δ CCC(11)	1613	1567
139	v CC(28), δ HCC(16)	1623	1568
140	v NC(42), v CC(24), δ CCC(12)	1644	1572
141	v CC(61), δ HCC(11), v NC(44)	1670	1585
142	v OC(83)	1725	1676
143	v OC(86)	1745	1679
144	v OC(82)	1796	1736
145	v CH(91)	2907	2923
146	v CH(100)	2941	2961
147	v CH(95)	2943	2977
149	v CH(100)	2973	2991
150	v CH(100)	2999	3032
151	v CH(46)	3016	3051
152	v CH(95)	3026	3072
153	v CH(69)	3056	3081
154	v CH(91)	3057	3088
155	v CH(72)	3062	3089
156	v CH(52)	3064	3093
157	v CH(36)	3083	3095
158	v CH(67)	3091	3120
159	v CH(67)	3091	3122
160	v CH(69)	3092	3124
161	v CH(73)	3093	3126
162	v CH(72)	3097	3126
163	v CH(56)	3108	3133
164	v CH(48)	3119	3150
165	v CH(28)	3137	3167





Şekil 3.54. 190 Bileşiğinin deneysel (a) ve teorik (6-311G(d) HF (b) ve B3LYP (c), 3-21G HF (d) ve B3LYP (e)) IR spektrumları





λ (nm) HF/B3LYP 6-311G(d)	λ (nm) HF/B3LYP 3-21G	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 6-311G(d)	Uyarma Enerjisi (eV) HF/B3LYP 3-21G	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 6-311G(d)	f (osilatör gücü) HF/B3LYP 3-21G
232.04/307.04	223.73/306.86	5.3431/4.0380	5.5416/4.0404	0.5524/0.0111	0.5601/0.0241
227.67/300.07	218.50/297.04	5.4458/4.1318	5.6744/4.1739	0.0827/0.6734	0.2216/0.5130
216.52/295.69	206.32/294.37	5.7262/4.1930	6.0093/4.2118	0.0500/0.0151	0.1185/0.1098

Şekil 3.55. 190 Bileşiğinin teorik (6-311G(d) HF (a) ve B3LYP (b), 3-21G HF (c) ve B3LYP (d)) UV-vis spektrumları ve değerleri(6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP)(cm⁻¹)

Tablo 3.128. 190 Bileşiğinin 6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları (A⁰)

	Bağ Açıları	HF 6-311G(d)	B3LYP 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 3-21G
1	C(1)-N(49)-N(48)	105.797	105.490	104.717	103.894
2	C(1)-N(50)-N(51)	121.088	121.226	120.013	120.186
3	C(1)-N(50)-C(2)	108.105	108.146	109.587	109.564
4	C(1)-C(18)-H(39)	107.840	108.004	107.933	108.104
5	C(1)-C(18)-H(40)	107.852	108.083	107.933	108.104
6	H(39)-C(18)-H(40)	105.610	105.039	106.576	106.276
7	N(49)-N(48)-C(25)	119.212	119.019	120.221	120.446
8	N(48)-C(25)-O(56)	119.708	119.713	121.053	120.802
9	C(25)-N(48)-C(2)	128.961	128.672	128.193	127.127
10	O(56)-C(25)-C(26)	123.639	124.543	125.125	126.254
11	C(25)-C(26)-H(45)	111.205	111.437	110.411	110.356

Tablo 3.128.' in devamı

12	C(25)-C(26)-H(46)	107.022	107.373	107.886	108.094
13	C(25)-C(26)-H(47)	111.223	111.521	110.411	110.357
14	H(45)-C(26)-H(46)	110.189	110.136	110.366	110.542
15	H(45)-C(26)-H(47)	107.041	106.213	107.416	106.964
16	H(46)-C(27)-H(47)	110.192	110.192	110.367	110.543
17	N(48)-N(49)-C(2)	111.827	112.308	111.586	112.428
18	N(48)-C(1)-C(18)	126.641	126.132	126.767	126.002
19	N(50)-C(1)-C(18)	121.692	121.909	121.150	121.259
20	N(48)-C(2)-N(50)	102.602	102.096	102.027	101.376
21	N(48)-C(2)-O(52)	129.564	129.967	120.938	131.247
22	O(52)-C(2)-N(50)	127.833	127.938	127.035	127.377
23	C(2)-N(50)-N(51)	130.796	130.620	130.400	130.250
24	C(1)-C(18)-C(19)	113.771	113.884	112.336	112.421
25	H(39)-C(18)-C(19)	110.697	110.732	110.912	110.843
26	H(40)-C(18)-C(19)	110.689	110.671	110.912	110.845
27	C(18)-C(19)-C(20)	120.717	120.792	120.475	120.490
28	C(18)-C(19)-C(24)	120.704	120.689	120.475	120.488
29	C(19)-C(20)-H(41)	119.941	119.816	119.916	119.752
30	C(19)-C(24)-H(44)	119.945	119.836	119.916	119.752
31	C(19)-C(20)-C(21)	121.089	121.150	120.746	120.836
32	H(41)-C(20)-C(21)	119.941	119.034	119.338	119.412
33	C(20)-C(21)-C(22)	119.165	119.078	118.746	118.503
34	C(20)-C(21)-H(42)	120.649	120.751	120.972	121.127
35	H(42)-C(21)-C(22)	120.186	120.171	120.282	120.370
36	C(21)-C(22)-C(23)	120.917	121.034	121.967	122.299
37	C(21)-C(22)-Cl(57)	119.539	119.475	119.017	118.850
38	Cl(57)-C(22)-C(23)	119.544	119.491	119.017	118.850
39	C(22)-C(23)-H(43)	120.191	120.208	120.282	120.369
40	C(22)-C(23)-C(24)	119.164	119.048	118.746	118.503
41	H(43)-C(23)-C(24)	120.645	120.744	120.972	121.127
42	C(23)-C(24)-H(44)	118.967	118.993	119.338	119.412
43	H(44)-C(24)-C(19)	119.945	119.836	119.916	119.752
44	C(24)-C(19)-C(20)	118.577	118.518	119.049	119.021
45	N(50)-N(51)-C(3)	120.418	119.515	119.269	117.421
46	N(51)-C(3)-H(27)	122.506	122.148	122.652	122.562
47	N(51)-C(3)-C(4)	120.396	120.299	120.101	119.753
48	H(27)-C(3)-C(4)	117.098	117.553	117.246	117.685
49	C(3)-C(4)-C(5)	117.923	117.780	117.728	117.913
50	C(3)-C(4)-C(9)	122.463	122.504	121.691	121.669
51	C(4)-C(5)-H(28)	120.823	120.230	120.982	121.129
52	C(4)-C(5)-C(6)	119.721	119.527	119.051	119.172
53	H(28)-C(5)-C(6)	119.455	120.237	119.968	119.700
54	C(5)-C(6)-O(53)	120.156	122.788	124.915	125.417
55	C(5)-C(6)-C(7)	121.070	120.908	120.758	120.568
56	O(53)-C(6)-C(7)	118.697	116.188	114.327	114.015
57	C(6)-C(7)-H(29)	119.603	119.166	118.682	118.518
58	C(6)-C(7)-C(8)	119.176	119.409	119.765	119.879
59	H(29)-C(7)-C(8)	121.220	121.425	121.553	121.602
60	C(7)-C(8)-H(29)	119.526	119.478	119.592	119.512
61	C(7)-C(8)-C(9)	120.515	120.510	120.306	120.335
52	H(30)-C(8)-C(9)	119.960	120.011	120.102	120.153
63	C(8)-C(9)-H(31)	120.516	120.813	121.055	121.470
64	C(8)-C(9)-C(4)	119.904	119.928	119.538	119.629
65	H(31)-C(9)-C(4)	119.580	119.259	119.407	118.901
66	C(9)-C(4)-C(5)	119.614	119.716	120.582	120.417
67	C(6)-O(53)-C(10)	119.655	121.140	128.161	125.383

Tablo 3.128.' in devamı

68	O(53)-C(10)-O(54)	123.195	123.553	123.339	124.021
69	O(53)-C(10)-C(11)	111.969	111.181	111.476	110.244
70	O(54)-C(10)-C(11)	124.836	125.266	125.186	125.735
71	C(10)-C(11)-C(16)	122.168	122.681	122.046	122.618
72	C(10)-C(11)-C(12)	117.225	116.975	116.943	116.533
73	C(11)-C(12)-H(32)	120.482	120.190	120.641	120.151
74	C(11)-C(12)-C(13)	120.278	120.330	120.057	120.242
75	H(32)-C(12)-C(13)	119.240	119.481	119.302	119.608
76	C(12)-C(13)-O(55)	115.786	115.703	116.037	115.803
77	C(12)-C(13)-C(14)	119.413	119.502	119.350	119.176
78	C(13)-O(55)-C(17)	119.967	118.658	120.992	118.248
79	O(55)-C(13)-C(14)	124.801	124.794	124.613	125.022
80	O(55)-C(17)-H(36)	111.449	111.520	111.298	111.598
81	O(55)-C(17)-H(37)	106.181	105.738	105.453	104.849
82	O(55)-C(17)-H(38)	111.451	111.537	111.298	111.599
83	H(36)-C(17)-H(37)	109.112	109.247	109.626	109.691
84	H(36)-C(17)-H(38)	109.447	109.462	109.460	109.321
85	H(37)-C(17)-H(38)	109.108	109.238	109.626	109.691
86	C(13)-C(14)-C(15)	119.802	119.693	120.141	120.143
87	H(33)-C(14)-C(15)	119.094	119.297	119.172	119.248
88	C(14)-C(15)-H(34)	119.030	119.061	119.259	119.173
89	H(34)-C(15)-C(16)	119.840	119.799	119.947	119.916
90	C(15)-C(16)-H(35)	120.741	120.840	121.385	121.660
91	C(15)-C(16)-C(11)	118.769	118.991	118.646	118.680
92	C(16)-C(11)-C(12)	120.606	120.345	120.011	120.849
93	H(35)-C(16)-C(11)	120.490	120.169	119.969	119.660

Tablo 3.129. 190 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan bağ uzunlukları (Å^0)

Bağ Uzunlukları	HF	HF	B3LYP	B3LYP	
	6-311G(d)	3-21G	6-311G(d)	3-21G	
1	C(1)-N(49)	1.2605	1.2750	1.2889	1.3074
2	C(1)-N(50)	1.3822	1.3780	1.3914	1.3869
3	C(1)-C(18)	1.4987	1.4937	1.4983	1.4975
4	C(18)-C(19)	1.5115	1.5128	1.5120	1.5163
5	C(18)-H(39)	1.0838	1.0834	1.0953	1.0967
6	C(18)-H(40)	1.0838	1.0834	1.0943	1.0967
7	C(19)-C(20)	1.3863	1.3855	1.3964	1.3996
8	C(19)-C(24)	1.3862	1.3855	1.3957	1.3996
9	C(20)-H(41)	1.0757	1.0721	1.0857	1.0842
10	C(20)-C(21)	1.3832	1.3834	1.3911	1.3962
11	C(21)-H(42)	1.0731	1.0695	1.0832	1.0816
12	C(21)-C(22)	1.3804	1.3729	1.3905	1.3867
13	C(22)-Cl(57)	1.7449	1.8171	1.7602	1.8328
14	C(22)-C(23)	1.3803	1.3729	1.3896	1.3867
15	C(23)-H(43)	1.0731	1.0695	1.0832	1.0816
16	C(23)-C(24)	1.3833	1.3834	1.3921	1.3962
17	C(24)-H(44)	1.0757	1.0721	1.0858	1.0842
18	N(48)-N(49)	1.3795	1.4346	1.3909	1.4499
19	N(48)-C(25)	1.4138	1.4006	1.4331	1.4211
20	C(25)-O(56)	1.1769	1.2038	1.1994	1.2257
21	C(25)-C(26)	1.5060	1.5052	1.5080	1.5127
22	C(26)-H(45)	1.0813	1.0813	1.0914	1.0936
23	C(26)-H(46)	1.0792	1.0786	1.0883	1.0900
24	C(26)-H(47)	1.0813	1.0813	1.0913	1.0936

Tablo 3.129.'un devamı

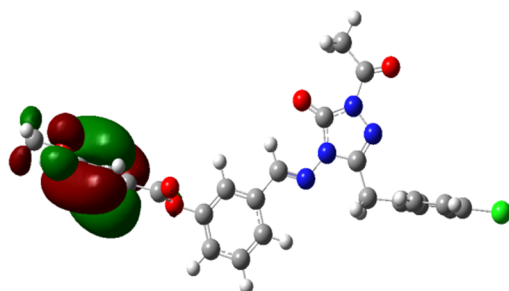
25	N(48)-C(2)	1.3733	1.3821	1.3976	1.4078
26	C(2)-O(52)	1.1922	1.2075	1.2135	1.2281
27	N(50)-C(2)	1.3874	1.3972	1.4072	1.4296
28	N(50)-N(51)	1.3647	1.4009	1.3722	1.4135
29	N(51)-C(3)	1.2576	1.2674	1.2848	1.2973
30	C(3)-H(27)	1.0737	1.0699	1.0862	1.0845
31	C(3)-C(4)	1.4762	1.4710	1.4657	1.4646
32	C(4)-C(5)	1.3853	1.3884	1.4007	1.4023
33	C(4)-C(9)	1.3939	1.3865	1.4035	1.4036
34	C(5)-H(28)	1.0745	1.0657	1.0818	1.0779
35	C(5)-C(6)	1.3817	1.3809	1.3911	1.3951
36	C(6)-O(53)	1.3778	1.3943	1.3918	1.4083
37	C(6)-C(7)	1.3746	1.3816	1.3900	1.3977
38	C(7)-H(29)	1.0741	1.0693	1.0840	1.0816
39	C(7)-C(8)	1.3896	1.3816	1.3954	1.3948
40	C(8)-H(30)	1.0746	1.0712	1.0848	1.0833
41	C(8)-C(9)	1.3775	1.3810	1.3869	1.3916
42	C(9)-H(31)	1.0726	1.0695	1.0830	1.0819
43	O(53)-C(10)	1.3413	1.3587	1.3741	1.3962
44	C(10)-O(54)	1.1781	1.2046	1.2021	1.2274
45	C(10)-C(11)	1.4914	1.4780	1.4883	1.4797
46	C(11)-C(16)	1.3934	1.3885	1.4027	1.4029
47	C(11)-C(12)	1.3802	1.3773	1.3928	1.3924
48	C(12)-H(32)	1.0722	1.0687	1.0829	1.0812
49	C(12)-C(13)	1.3903	1.3859	1.3973	1.3986
50	C(13)-O(55)	1.3450	1.3685	1.3606	1.3819
51	C(13)-C(14)	1.3852	1.3821	1.3988	1.3998
52	C(14)-H(33)	1.0726	1.0695	1.0827	1.0815
53	C(14)-C(15)	1.3901	1.3879	1.3966	1.3990
54	C(15)-H(34)	1.0749	1.0714	1.0851	1.0836
55	C(15)-C(16)	1.3770	1.3769	1.3872	1.3902
56	C(16)-H(35)	1.0713	1.0673	1.0814	1.0794
57	O(55)-C(17)	1.3980	1.4370	1.4196	1.4606
58	C(17)-H(36)	1.0849	1.0830	1.0953	1.0967
59	C(17)-H(37)	1.0784	1.0772	1.0881	1.0899
60	C(17)-H(38)	1.0849	1.0830	1.0953	1.0967

Tablo 3.130. 190 Bileşğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan mulliken yük değeri

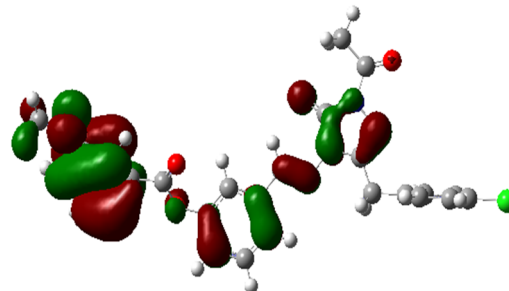
	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
C1	0.850	0.586	0.700	0.466
C2	1.297	0.810	0.974	0.612
C3	0.201	0.045	0.115	-0.048
C4	-0.167	-0.053	-0.056	-0.025
C5	-0.244	-0.253	-0.210	-0.211
C6	0.385	0.330	0.303	0.231
C7	-0.252	-0.221	-0.190	-0.193
C8	-0.227	-0.205	-0.183	-0.201
C9	-0.204	-0.194	-0.172	-0.158
C10	1.007	0.646	0.707	0.432
C11	-0.246	-0.204	-0.107	-0.159
C12	-0.199	-0.240	-0.165	-0.203
C13	0.418	0.369	0.323	0.272
C14	-0.266	-0.300	-0.207	-0.259

Tablo 3.130.'un devamı

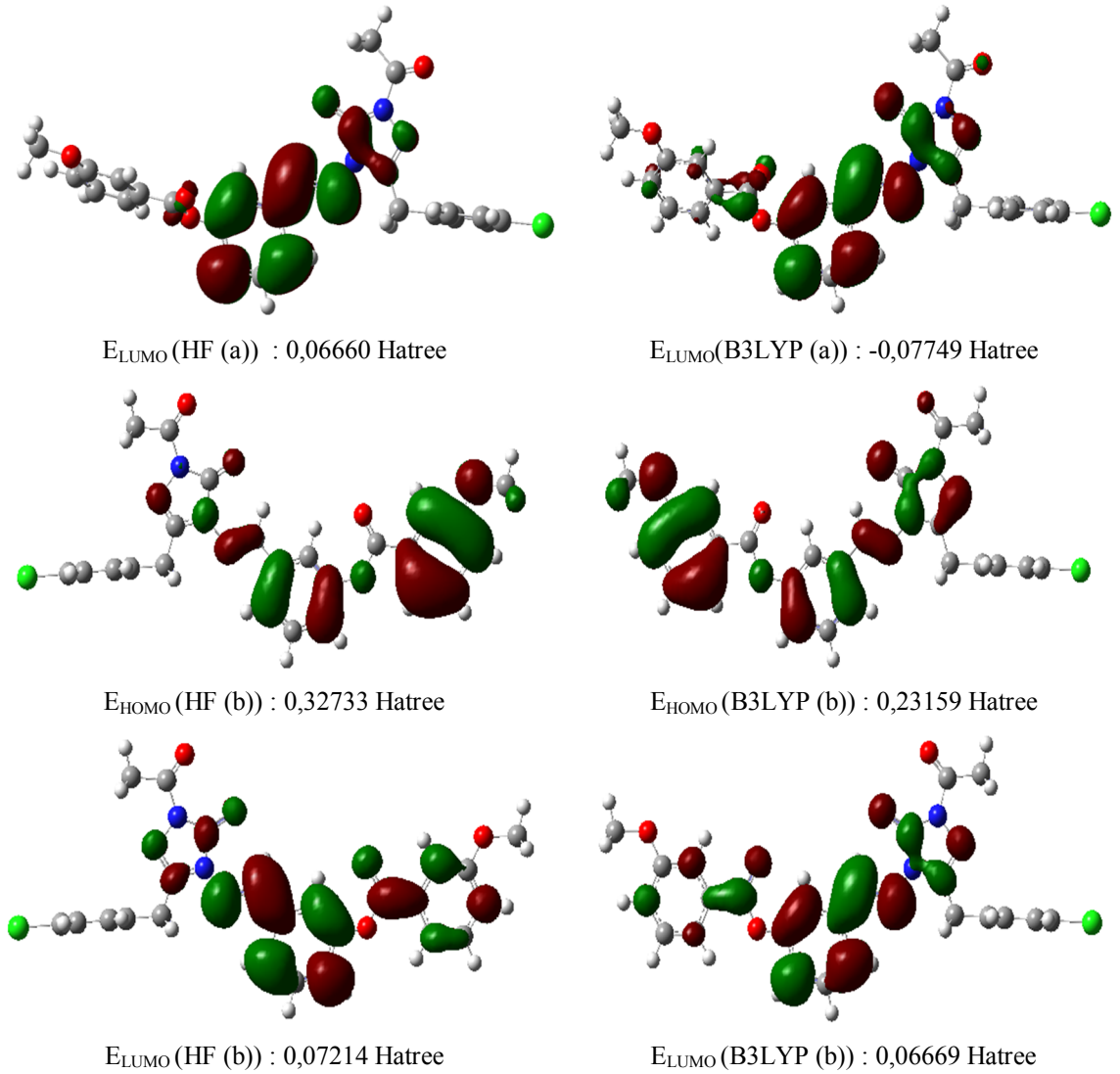
C15	-0.227	-0.195	-0.182	-0.193
C16	-0.209	-0.212	-0.182	-0.160
C17	-0.274	-0.416	-0.336	-0.464
C18	-0.508	-0.595	-0.516	-0.596
C19	-0.037	0.066	0.043	0.083
C20	-0.204	-0.213	-0.167	-0.176
C21	-0.187	-0.125	-0.154	-0.113
C22	-0.320	-0.161	-0.263	-0.165
C23	-0.187	-0.125	-0.154	-0.112
C24	-0.204	-0.214	-0.167	-0.192
C25	0.864	0.582	0.655	0.429
C26	-0.668	-0.727	-0.622	-0.720
H27	0.334	0.305	0.266	0.261
H28	0.327	0.243	0.249	0.233
H29	0.269	0.237	0.209	0.213
H30	0.253	0.229	0.198	0.203
H31	0.268	0.243	0.205	0.212
H32	0.306	0.265	0.231	0.230
H33	0.256	0.243	0.197	0.217
H34	0.251	0.225	0.196	0.200
H35	0.273	0.244	0.205	0.213
H36	0.200	0.250	0.200	0.234
H37	0.239	0.253	0.227	0.212
H38	0.200	0.253	0.200	0.212
H39	0.280	0.270	0.248	0.254
H40	0.280	0.271	0.248	0.254
H41	0.254	0.221	0.198	0.196
H42	0.279	0.252	0.220	0.224
H43	0.279	0.252	0.220	0.223
H44	0.254	0.222	0.198	0.197
H45	0.258	0.253	0.238	0.246
H46	0.247	0.250	0.222	0.238
H47	0.257	0.253	0.238	0.247
N48	-0.885	-0.480	-0.641	-0.363
N49	-0.391	-0.236	-0.340	-0.183
N50	-0.870	-0.486	-0.640	-0.379
N51	-0.367	-0.277	-0.324	-0.207
O52	-0.622	-0.523	-0.479	-0.382
O53	-0.815	-0.511	-0.600	-0.370
O54	-0.615	-0.435	-0.479	-0.318
O55	-0.735	-0.460	-0.550	-0.336
O56	-0.556	-0.392	-0.434	-0.271
Cl57	0.099	-0.110	0.087	-0.079



E_{HOMO} (HF (a)) : -0,32656 Hatree



E_{HOMO} (B3LYP (a)) : -0,24138 Hatree



Şekil 3.56. 190 Bileşiğinin (6-311G(d) (a) HF/B3LYP, 3-21G (b) HF/B3LYP) hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

Tablo 3.131. 190 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan dipol moment değerleri

Dipol Moment	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
μ_x	-7.6014	-4.8502	-6.5264	-3.7921
μ_y	-7.0332	-6.6035	-5.2852	-4.0743
μ_z	2.6497	4.3678	2.1578	3.4087
μ_{Toplam}	10.6897	9.2849	8.6708	6.5268

Tablo 3.132. 190 Bileşiğinin (6-311G(d) HF/B3LYP, 3-21G HF/B3LYP) hesaplanan toplam enerjisi

Enerji	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
(a.u.)	-2048.734	-2037.328	-2059.115	-2047.713

3.3. Potansiyometrik Titrasyon

Bu çalışmada sentezlenen 8 adet yeni 176 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton ve *N,N*-dimetilformamid çözücülerindeki 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonucu elde edilen değerler titrant hacmine (TBAH) karşı mV olarak Tablo 3.133-140'da verilmiştir. Deneyler beşer kez tekrarlanmıştır. Yeni bileşikler için pH metreden okunan pH ve mV değerleri aşağıda verilmiştir.

Tablo 3.133. 177 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

177	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.58	-387	16.41	-487	15.66	-471	11.13	-204
0.10	15.46	-431	17.26	-526	-	-707	12.66	-280
0.15	16.55	-487	18.00	-570	-	-741	13.43	-332
0.20	17.16	-516	-	-756	-	-752	13.96	-353
0.25	18.16	-571	-	-779	-	-758	15.33	-422
0.30	18.98	-613	-	-787	-	-758	15.59	-442
0.35	-	-666	-	-793	-	-760	15.95	-460
0.40	-	-718	-	-795	-	-762	16.04	-470
0.45	-	-754	-	-793	-	-762	16.41	-479
0.50	-	-791	-	-795	-	-	16.58	-485
0.55	-	-819	-	-	-	-	16.64	-487
0.60	-	-819	-	-	-	-	16.73	-486

Tablo 3.134. 178 Bileşiminin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

178	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	13.21	-316	16.42	-481	15.58	-472	12.30	-269
0.10	14.45	-383	17.52	-538	17.52	-537	14.42	-377
0.15	15.16	-417	-	-692	-	-714	15.77	-450
0.20	15.81	-450	-	-704	-	-741	16.19	-470
0.25	16.08	-465	-	-764	-	-753	16.52	-486
0.30	16.30	-469	-	-776	-	-761	16.68	-489
0.35	16.55	-488	-	-783	-	-762	16.77	-500
0.40	16.81	-503	-	-783	-	-763	16.80	-501
0.45	17.11	-518	-	-782	-	-763	16.89	-507
0.50	17.38	-532	-	-782	-	-	17.00	-511
0.55	17.64	-546	-	-	-	-	17.09	-514
0.60	17.88	-559	-	-	-	-	17.18	-517

Tablo 3.135. 179 Bileşiminin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

179	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.55	-385	16.27	-470	14.67	-387	13.35	-321
0.10	15.31	-424	17.18	-522	-	-708	15.36	-423
0.15	16.05	-464	19.61	-629	-	-797	15.93	-470
0.20	16.47	-488	-	-724	-	-845	16.13	-470
0.25	17.39	-532	-	-750	-	-852	16.34	-479
0.30	18.08	-569	-	-774	-	-857	16.70	-495
0.35	-	-675	-	-782	-	-859	16.73	-499
0.40	-	-715	-	-786	-	-859	16.81	-503
0.45	-	-751	-	-785	-	-	16.96	-509
0.50	-	-788	-	-	-	-	17.07	-517
0.55	-	-812	-	-	-	-	17.14	-516
0.60	-	-816	-	-	-	-	17.21	-517

Tablo 3.136. 180 Bileşiminin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

180	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.23	-368	13.82	-346	15.43	-443	13.09	-304
0.10	14.88	-401	16.54	-488	-	-692	15.83	-451
0.15	15.31	-425	17.80	-552	-	-728	16.46	-484
0.20	15.98	-460	-	-779	-	-744	16.55	-459
0.25	16.51	-481	-	-789	-	-752	16.60	-490
0.30	17.09	-517	-	-793	-	-753	16.81	-502
0.35	17.45	-536	-	-791	-	-754	16.97	-511
0.40	17.71	-550	-	-791	-	-754	17.12	-518
0.45	18.01	-566	-	-	-	-756	17.23	-524
0.50	18.22	-576	-	-	-	-	17.25	-526
0.55	18.45	-587	-	-	-	-	17.30	-526
0.60	18.66	-598	-	-	-	-	-	-

Tablo 3.137. 181 Bileşiminin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

181	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.36	-373	16.53	-486	18.49	-601	13.39	-324
0.10	14.98	-407	17.85	-627	-	-722	16.04	-458
0.15	15.95	-456	-	-697	-	-735	16.60	-495
0.20	18.29	-576	-	-748	-	-742	16.80	-505
0.25	18.90	-609	-	-772	-	-753	16.97	-513
0.30	-	-681	-	-779	-	-752	17.14	-522
0.35	-	-725	-	-780	-	-751	17.20	-525
0.40	-	-761	-	-782	-	-753	17.33	-527
0.45	-	-794	-	-784	-	-	17.37	-528
0.50	-	-824	-	-785	-	-	17.38	-528
0.55	-	-835	-	-	-	-	-	-
0.60	-	-835	-	-	-	-	-	-

Tablo 3.138. 182 Bileşğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

182	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.20	-360	16.43	-486	14.49	-385	12.96	-299
0.10	14.73	-392	17.48	-528	17.89	-565	15.98	-454
0.15	17.36	-529	-	-688	-	-696	16.07	-478
0.20	17.50	-537	-	-702	-	-707	16.72	-496
0.25	18.60	-594	-	-770	-	-718	16.85	-506
0.30	-	-680	-	-789	-	-718	17.04	-514
0.35	-	-734	-	-791	-	-718	17.15	-518
0.40	-	-776	-	-790	-	-	17.22	-524
0.45	-	-810	-	-790	-	-	17.26	-524
0.50	-	-835	-	-790	-	-	17.28	-524
0.55	-	-847	-	-	-	-	-	-
0.60	-	-855	-	-	-	-	-	-

Tablo 3.139. 183 Bileşğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

183	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.16	-362	16.15	-467	14.34	-334	11.63	-235
0.10	14.62	-390	17.01	-512	-	-684	14.40	-378
0.15	19.62	-644	18.24	-575	-	-704	14.83	-391
0.20	-	-718	-	-710	-	-719	15.41	-422
0.25	-	-763	-	-775	-	-729	15.75	-446
0.30	-	-808	-	-788	-	-738	16.11	-467
0.35	-	-842	-	-795	-	-735	16.25	-474
0.40	-	-858	-	-794	-	-735	16.53	-481
0.45	-	-860	-	-793	-	-736	16.64	-496
0.50	-	-862	-	-793	-	-	16.76	-495
0.55	-	-862	-	-793	-	-	16.86	-504
0.60	-	-	-	-	-	-	16.87	-504

Tablo 3.140. 184 Bileşiminin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyonu sonuçları

184	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0.05	14.13	-361	12.35	-269	13.80	-346	11.66	-237
0.10	14.42	-376	15.00	-409	14.50	-380	12.92	-300
0.15	14.66	-391	16.09	-464	15.03	-410	14.60	-400
0.20	15.16	-417	16.69	-496	19.70	-656	15.44	-440
0.25	15.65	-442	17.56	-541	-	-712	15.57	-444
0.30	16.32	-477	18.81	-612	-	-726	15.95	-456
0.35	16.86	-504	-	-740	-	-737	16.03	-460
0.40	17.13	-519	-	-770	-	-741	16.16	-469
0.45	17.36	-531	-	-780	-	-744	16.61	-491
0.50	17.59	-543	-	-784	-	-747	16.65	-493
0.55	17.80	-554	-	-780	-	-748	16.78	-500
0.60	18.04	-567	-	-780	-	-	16.84	-502

3.4. Antioksidan İncelemeleri

3.4.1. İndirgeme Gücü

Sentezlenen bileşiklerin üç farklı konsantrasyonda indirgeme gücü testleri yapılmış, UV spektrofotometresinde 700 nm'de ölçülen absorban değerleri tablo halinde aşağıda verilmiştir.

Tablo 3.141. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin İndirgeme Gücü

Bileşikler	İndirgeme Gücü (µg/mL, 700 nm)		
	50	100	150
177	0.176	0.149	0.162
178	0.171	0.146	0.144
179	0.161	0.151	0.154
180	0.174	0.161	0.137
181	0.179	0.159	0.134
182	0.169	0.161	0.159
183	0.173	0.147	0.144
184	0.171	0.164	0.138
186	0.170	0.152	0.141
187	0.164	0.164	0.129
188	0.169	0.157	0.137
189	0.173	0.162	0.150
190	0.170	0.153	0.161
BHT	0.761	1.435	2.023
BHA	1.243	1.914	3.006
α -Tokoferol	0.567	1.031	1.901

Kontrol reaksiyonunun absorbanansı 0.184'tür.

3.4.2. Serbest Radikal Giderme Aktivitesi

Sentezlenen bileşiklerin üç farklı konsantrasyonda serbest radikal giderme aktivite testleri yapılmış, UV spektrofotometresinde 517 nm’de ölçülen absorbanans değerleri ve buna karşılık gelen % Serbest Radikal Giderme Aktiviteleri tablo halinde aşağıda verilmiştir.

Tablo 3.142. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin absorbanans değerleri ve karşın olan % Serbest Radikal Giderme Aktiviteleri

Bileşikler	Absorbans ve %Serbest Radikal Giderme Aktivitesi ($\mu\text{g/mL}$, %inh, 517 nm)					
	12.5		25		37.5	
	A	% Aktivite	A	% Aktivite	A	% Aktivite
177	0.244	2.8	0.246	2.0	0.244	2.8
178	0.248	1.2	0.252	NEGATİF	0.247	1.6
179	0.253	NEGATİF	0.249	0.8	0.249	0.8
180	0.247	1.6	0.252	NEGATİF	0.248	1.2
181	0.249	0.8	0.247	1.6	0.247	1.6
182	0.246	2.0	0.251	0.0	0.252	-0.4
183	0.250	0.4	0.245	2.4	0.245	2.4
184	0.248	1.2	0.251	0.0	0.243	3.2
186	0.245	2.4	0.247	1.6	0.252	NEGATİF
187	0.246	2.0	0.248	1.2	0.253	NEGATİF
188	0.244	2.8	0.244	2.8	0.243	3.2
189	0.248	1.2	0.248	1.2	0.247	1.6
190	0.243	3.2	0.244	2.8	0.245	2.4
BHT	0.158	37.1	0.110	56.2	0.092	63.3
BHA	0.060	76.1	0.053	78.9	0.052	79.3
α -Tokoferol	0.053	78.9	0.053	78.9	0.052	79.3

Kontrol reaksiyonunun absorbanansı 0.251’dir.

3.4.3. Metal Şelat Aktivitesi

Sentezlenen bileşiklerin üç farklı konsantrasyonda metal şelat aktivite testleri yapılmış, UV spektrofotometresinde 562 nm’de ölçülen absorbans değerleri ve buna karşılık gelen % Metal Şelat Aktiviteleri tablo halinde aşağıda verilmiştir.

Tablo 3.143. 176 ve 185 Tipi Bileşiklerin absorbans değerleri ve karşın olan % Metal Şelat Aktiviteleri

Bileşikler	Absorbans ve % Metal Şelat Aktivitesi ($\mu\text{g/mL}$, %inh, 562 nm)					
	12.5		25		37.5	
	A	% Aktivite	A	% Aktivite	A	% Aktivite
177	0.206	17.9	0.216	13.9	0.225	10.4
178	0.174	30.7	0.178	29.1	0.196	21.9
179	0.209	16.7	0.21	16.3	0.223	11.2
180	0.179	28.7	0.181	27.9	0.208	17.1
181	0.175	30.3	0.183	27.1	0.192	23.5
182	0.21	16.3	0.195	22.3	0.18	28.3
183	0.171	31.9	0.183	27.1	0.195	22.3
184	0.179	28.7	0.202	19.5	0.209	16.7
186	0.17	32.3	0.177	29.5	0.184	26.7
187	0.18	28.3	0.189	24.7	0.206	17.9
188	0.208	17.1	0.206	17.9	0.206	17.9
189	0.187	25.5	0.195	22.3	0.209	16.7
190	0.185	26.3	0.189	24.7	0.203	19.1
EDTA	0.031	87.6	0.031	87.6	0.03	88.0
α -Tokoferol	0.114	54.6	0.09	64.1	0.078	68.9

Kontrol reaksiyonunun absorbansı 0.251’dir.

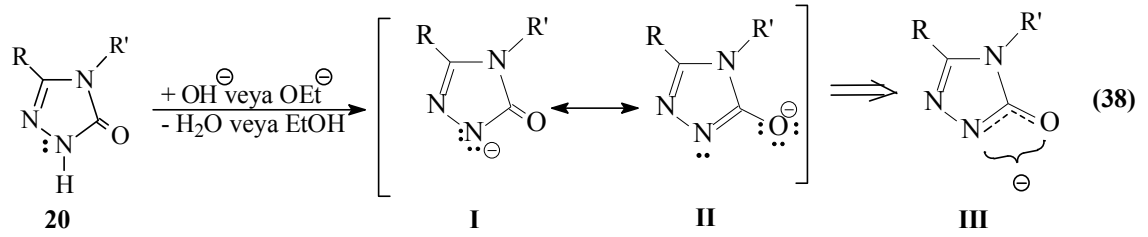
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

4.1. Sentezlenen Bileşiklerin Teorik Verilerinin Yorumlanması

Tez kapsamında incelenen biri benzaldehid diğerleri heterosiklik Schiff bazları olmak üzere toplam 14 bileşiğin deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR değerleri, titreşim frekansları, UV-vis değerleri, bağ açıları bağ uzunlukları, mulliken yükleri, dipol momentleri ve molekülün toplam enerjileri B3LYP ve HF metodlarıyla 6-311G(d) ve 3-21G temel setleri kullanılarak optimize edilerek hesaplanmış ve bulgular bölümünde tablolar ve şekiller halinde verilmiştir. Teorik çalışmalar Gaussian 09W programı kullanılarak yapılmıştır. Deneysel ve teorik ^{13}C -NMR ve ^1H -NMR değerleri en küçük kareler yöntemine göre (teorik hesaplanan değerler/deneysel hesaplanan değerler) bulunan R^2 değerleri arasında yakın bir ilişki bulunmuştur. Deneysel sonuçlar yapılan teorik çalışmalarda B3LYP ve HF metodları, 6-311G(d) ve 3-21G temel setleriyle mukayese edildiğinde B3LYP metodu ve 6-311G(d) temel setinin deneysel sonuçlarla daha uyumlu olduğu gözlemlenmiştir.

176 tipi bileşiklerin R değerleri arasında bireysel ilişki değerlendirildiğinde; B3LYP/6-311G(d) için; ^{13}C : 0.9977, ^1H : 0.8673, HF/6-311G(d) için; ^{13}C : 0.9937, ^1H : 0.8431, B3LYP/3-21G için; ^{13}C : 0.9906, ^1H : 0.7747 ve HF/3-21G için; ^{13}C : 0.9899, ^1H : 0.7916 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür. 176 tipi bileşiklerde çözünürlü ortamda teorik NMR değerleri alınıp regresyon analizi yapılmıştır. R^2 değerleri arasında bireysel ilişki değerlendirildiğinde; B3LYP/6-311G(d)(DMSO) için; ^{13}C : 0.9984, ^1H : 0.8812, HF/6-311G(d)(DMSO) için; ^{13}C : 0.9755, ^1H : 0.8519, B3LYP/3-21G(DMSO) için; ^{13}C : 0.9868, ^1H : 0.8440 ve HF/3-21G(DMSO) için; ^{13}C : 0.9879, ^1H : 0.8152 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür. Bulunan standart hata oranı $\delta_{\text{calc}} = a \delta_{\text{exp}} + b$ formülüne göre hesaplanmış ve her bir bileşik için bu oranlar Tablo 4.1-4'de gösterilmiştir. Teorik ve deneysel karbon ve proton kimyasal kayma oranları arasında a, b ve R^2 değerine göre doğrusal bir korelasyon gözlenmiştir. N-H protonları hariç B3LYP/6-311G(d) ve HF/6-311G(d), B3LYP/3-21G ve HF/3-21G metod ve temel setlerine göre incelenen tüm bileşikler için hesaplanan ve deneysel olarak elde edilen değerler arasında bir uyum görülmüştür. Buna karşın, N-H protonları için hesaplanan değerler ile deneysel değerler

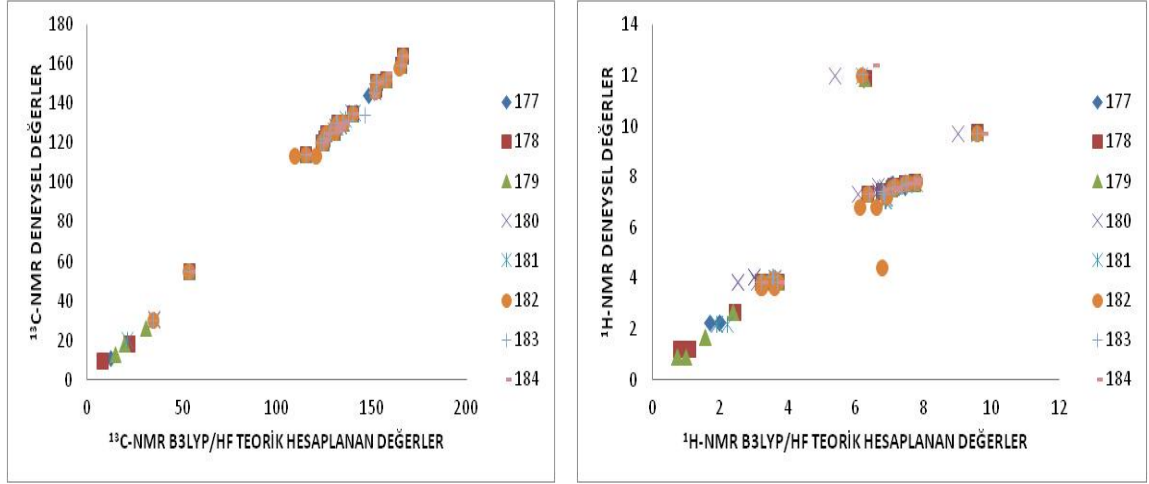
arasında beklenenden daha yüksek bir fark ortaya çıkmıştır. Bunun nedeni olarak da 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasındaki N-H protonunun asidik özellik taşıması gösterilebilir. Şöyle ki denklem 38'den de görüleceği üzere proton ayrıldıktan sonra N atomu üzerinde kalan elektron çifti karbonil gurubu ile rezonans sonucu delokalize olmuştur. Bu da oluşan anyonun kararlılığını artırır, dolayısıyla N-H protonunu asidik yapar.



Bu durum yapılan potansiyometrik titrasyon ile de desteklenmektedir. Nitekim, tuz oluşumu üzerinden *N*-alkil-1,2,4-triazol türevlerinin elde edildiği bilinmektedir [50, 71, 73].

Tablo 4.1. 175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ¹³C- ve ¹H-NMR için bulunan R², standart hata, a ve b değerleri

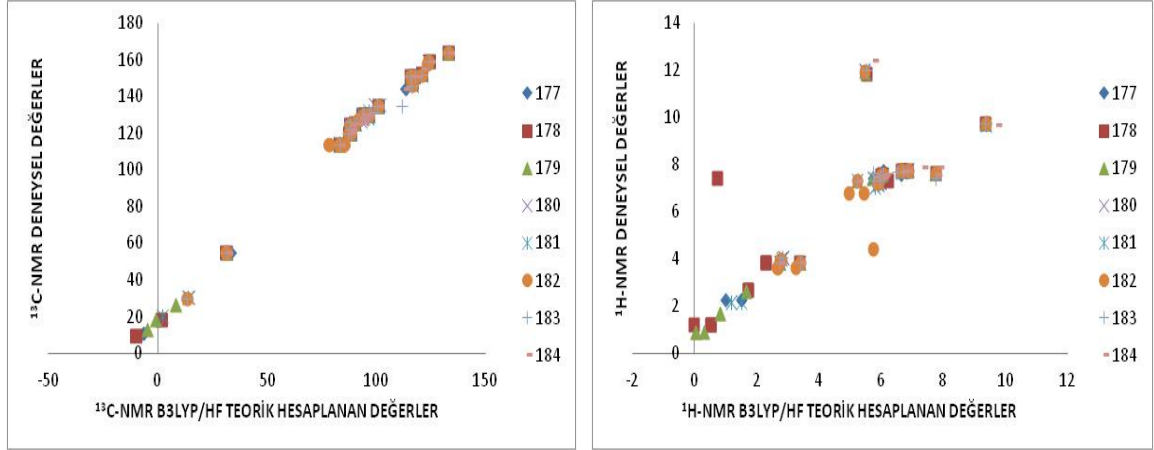
		¹³ C				¹ H			
		R ²	S. hata	a	b	R ²	S. hata	a	b
175	DFT	0.9940	2.4298	1.0185	-0.0148	0.9848	0.2637	1.0287	-0.6511
	HF	0.9772	4.6709	0.9927	-9.3674	0.9725	0.3701	1.0654	-1.3291
177	DFT	0.9990	1.7738	1.0273	-0.7981	0.8871	1.1900	0.7714	0.6692
	HF	0.9968	3.1848	1.0337	-13.4669	0.8653	1.3432	0.7820	0.1844
178	DFT	0.9991	1.9789	1.0260	-0.6170	0.9212	1.1075	0.7978	0.4754
	HF	0.9979	3.0272	1.0396	-14.3766	0.9051	1.2615	0.8171	-0.0921
179	DFT	0.9993	1.8993	1.0172	0.6150	0.9340	1.0547	0.8078	0.3965
	HF	0.9982	3.0100	1.0412	-14.5500	0.9208	1.2026	0.8316	-0.2125
180	DFT	0.9982	1.8329	1.0185	0.6690	0.8061	1.0869	0.6915	1.4688
	HF	0.9960	2.8122	1.0527	-15.6691	0.7760	1.2540	0.7204	0.8642
181	DFT	0.9988	1.8556	1.0216	0.4096	0.8873	1.0600	0.7733	0.7934
	HF	0.9972	2.8468	1.0494	-15.1402	0.8604	1.2293	0.7870	0.2479
182	DFT	0.9966	2.5126	1.0226	0.5727	0.8119	1.1054	0.6965	1.3651
	HF	0.9960	2.8359	1.0550	-15.7358	0.7814	1.2667	0.7188	0.7986
183	DFT	0.9972	2.6081	1.0329	-1.2896	0.8158	1.1556	0.6903	1.4115
	HF	0.9942	3.7732	1.0393	-13.0600	0.7868	1.3554	0.7315	0.7374
184	DFT	0.9972	1.6976	1.0437	-2.7881	0.7574	1.1362	0.6327	2.0228
	HF	0.9896	3.3397	1.0571	-16.0933	0.7197	1.2837	0.6389	1.5741



Şekil 4.1. 176 tipi bileşiklerin B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.2. 175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

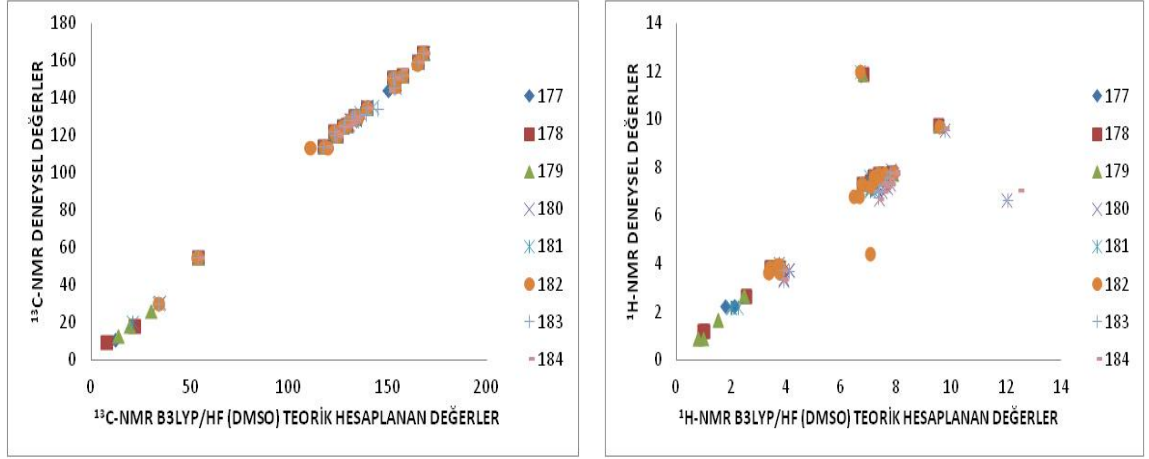
		^{13}C				^1H			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
175	DFT	0.9892	2.9850	0.9266	-23.8087	0.9190	0.6120	0.9985	-1.0955
	HF	0.9912	2.8723	0.9866	-37.8964	0.9424	0.5761	1.1288	-2.3757
177	DFT	0.9927	2.9158	0.8896	-18.5516	0.7448	1.2974	0.7474	0.1903
	HF	0.9908	3.5234	0.9544	-32.5750	0.7096	1.4986	0.7901	-0.5431
178	DFT	0.9952	2.7903	0.8897	-18.6450	0.6735	1.7386	0.7598	-0.2478
	HF	0.9947	3.1675	0.9599	-33.3911	0.7961	1.4503	0.8718	-0.4819
179	DFT	0.9959	2.7362	0.8848	-17.9261	0.8499	1.1552	0.8053	-0.2747
	HF	0.9954	3.1661	0.9646	-33.9642	0.8521	1.2683	0.8918	-1.1594
180	DFT	0.9886	2.8184	0.8838	-18.0687	0.6176	1.1332	0.6725	0.8320
	HF	0.9887	3.0699	0.9675	-34.5271	0.7569	1.3527	0.7315	0.0075
181	DFT	0.9927	2.7437	0.8778	-17.1546	0.8747	1.1122	0.7610	0.1259
	HF	0.9922	3.0824	0.9545	-32.7518	0.8548	0.7173	0.8213	-0.7151
182	DFT	0.9904	2.9236	0.8873	-18.3275	0.8038	1.1688	0.6686	0.8228
	HF	0.9869	3.6537	0.9490	-31.1589	0.7778	1.4282	0.7485	-0.1408
183	DFT	0.9825	3.5388	0.8898	-18.1778	0.7829	1.1639	0.6637	0.8437
	HF	0.9893	3.0113	0.9705	-34.5786	0.7560	1.3860	0.7253	0.0147
184	DFT	0.9886	2.1660	0.9277	-24.2599	0.7061	1.2818	0.6138	1.4979
	HF	0.9802	3.1072	1.0060	-39.6664	0.6791	1.5091	0.6704	0.7114



Şekil 4.2. 176 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.3. 175 Bileşiği ve 176 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF (DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

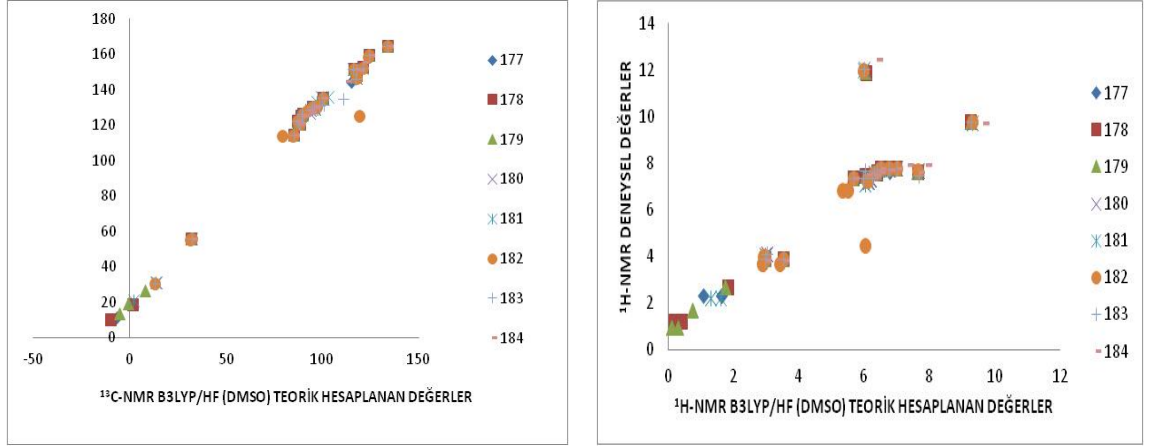
		$^{13}\text{C}(\text{DMSO})$				$^1\text{H}(\text{DMSO})$			
		R^2	S.Hata	a	b	R^2	S. Hata	a	b
175	DFT	0.9970	1.7381	1.0321	-1.1065	0.9940	0.1630	1.0169	-0.4259
	HF	0.9829	4.1066	1.0093	-10.8965	0.9823	0.2945	1.0629	-1.1383
177	DFT	0.9993	1.4479	1.0309	-0.7302	0.8871	1.1900	0.7714	0.6692
	HF	0.9935	3.2130	1.0360	-13.3160	0.7757	1.2677	0.7949	0.2709
178	DFT	0.9993	1.6810	1.0310	-0.7710	0.9351	1.0216	0.8201	0.4720
	HF	0.9980	2.9746	1.0444	-14.5263	0.9174	1.1956	0.8384	-0.0690
179	DFT	0.9995	1.5823	1.0236	0.2485	0.9340	1.0547	0.8078	0.3965
	HF	0.9982	3.0100	1.0412	-14.550	0.9313	1.1416	0.8546	-0.2024
180	DFT	0.9987	1.5664	1.0247	0.3443	0.8327	1.0054	0.7060	1.5336
	HF	0.8327	1.0054	0.7060	1.5336	0.7963	1.1890	0.7310	0.9772
181	DFT	0.9990	1.6499	1.0288	-0.0455	0.9039	0.9832	0.7880	0.8444
	HF	0.9942	4.2268	1.0785	-18.7164	0.8767	1.1237	0.7766	0.6181
182	DFT	0.9966	2.5126	1.0226	0.5727	0.8119	1.1054	0.6965	1.3651
	HF	0.9959	2.8567	1.0602	-16.0010	0.8373	1.0217	0.7090	1.4413
183	DFT	0.9980	2.1802	1.0372	-1.3893	0.8334	1.0960	0.6998	1.5125
	HF	0.9943	3.7431	1.0446	-13.3280	0.7969	1.2872	0.7190	1.0426
184	DFT	0.9981	1.3993	1.0419	-2.0857	0.7985	1.0276	0.6543	2.0289
	HF	0.9901	3.2612	1.0588	-15.9598	0.7528	1.1951	0.6562	1.6291



Şekil 4.3. 176 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.4. 175 Bileşiği ve 176 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

	^{13}C (DMSO)					^1H (DMSO)			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
175	DFT	0.9881	3.1504	0.9315	-23.9984	0.9438	0.4906	0.9745	-0.7690
	HF	0.9883	3.3070	0.9871	-37.6783	0.9676	0.4181	1.1078	-2.0352
177	DFT	0.9924	3.0019	0.8968	-19.2532	0.7896	1.1603	0.7579	0.2985
	HF	0.9887	3.9010	0.9558	-32.4019	0.7449	1.3811	0.7958	-0.3867
178	DFT	0.9947	2.9206	0.8919	-18.6453	0.8560	1.0932	0.8110	-0.1134
	HF	0.9935	3.5085	0.9621	-33.3324	0.8228	1.3176	0.8639	-0.9314
179	DFT	0.9956	2.8411	0.8880	-18.0623	0.8795	1.0443	0.8262	-0.2482
	HF	0.9945	3.4827	0.9679	-34.0647	0.8521	1.2683	0.8918	-1.1594
180	DFT	0.9880	2.9045	0.8863	-18.0897	0.8218	1.0097	0.6800	0.9776
	HF	0.9864	3.3779	0.9701	-34.5368	0.7817	1.2481	0.7306	0.2341
181	DFT	0.9922	2.8354	0.8819	-17.3815	0.8974	1.0021	0.7729	0.2321
	HF	0.9907	3.3694	0.9585	-32.9420	0.8726	1.2240	0.8291	-0.5612
182	DFT	0.9607	6.0215	0.8895	-17.1301	0.8287	1.0694	0.6705	1.0046
	HF	0.9851	3.9092	0.9493	-30.8744	0.7922	1.3466	0.7401	0.1306
183	DFT	0.9831	3.4814	0.8922	-18.1834	0.8179	1.0430	0.6718	0.9935
	HF	0.9873	3.2839	0.9723	-34.4823	0.7794	1.2805	0.7217	0.2652
184	DFT	0.9862	2.3689	0.9242	-23.6053	0.7617	1.1185	0.6313	1.5638
	HF	0.9767	3.3637	1.0019	-38.8385	0.7231	1.2930	0.6500	1.0855

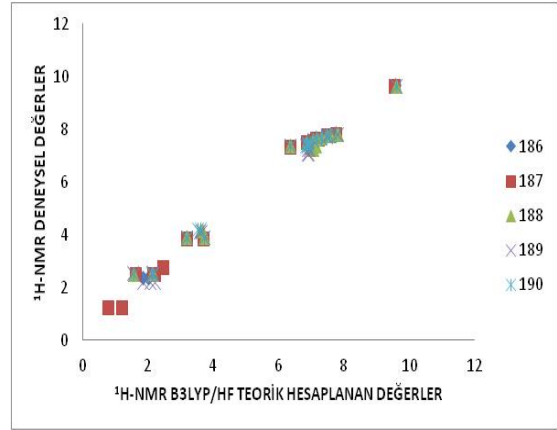
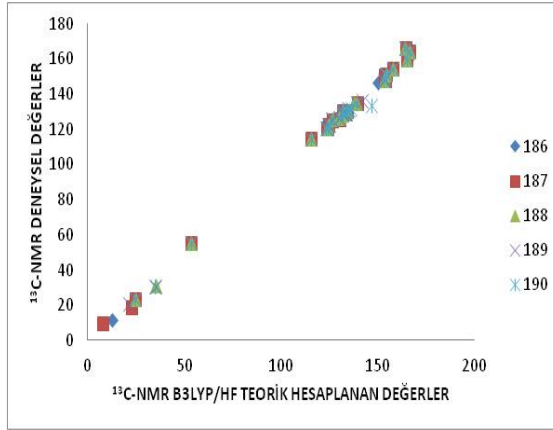


Şekil 4.4. 176 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

185 tipi bileşiklerin R^2 değerleri arasında bireysel ilişki değerlendirildiğinde; B3LYP/6-311G(d) için; ^{13}C : 0.9984, ^1H : 0.9949, HF/6-311G(d) için; ^{13}C : 0.9696, ^1H : 0.9942, B3LYP/3-21G için; ^{13}C : 0.9933, ^1H : 0.9554 ve HF/3-21G için; ^{13}C : 0.9927, ^1H : 0.9679 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür. 185 tipi bileşiklerde ise R^2 değerleri arasında bireysel ilişki değerlendirildiğinde; B3LYP/6-311G(d)(DMSO) için; ^{13}C :0.9990, ^1H : 0.9965, HF/6-311G(d)(DMSO) için; ^{13}C : 0.9760, ^1H : 0.9958, B3LYP/3-21G(DMSO) için; ^{13}C : 0.9928, ^1H : 0.9687 ve HF/3-21G(DMSO) için; ^{13}C : 0.9724, ^1H : 0.9817 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür. Bulunan standart hata oranı $\delta_{\text{calc}} = a \delta_{\text{exp}} + b$ formülüne göre hesaplanmış ve her bir bileşik için bu oranlar Tablo 4.5-8'de gösterilmiştir. Teorik ve deneysel karbon ve proton kimyasal kayma oranları arasında a, b ve R^2 değerine göre doğrusal bir korelasyon gözlenmiştir. Gaz fazında GIAO yöntemine göre B3LYP/6-311G(d), HF/6-311G(d), B3LYP/3-21G, HF/3-21G ve çözücülü ortamda (DMSO) GIAO yöntemine göre ise B3LYP/6-311G(d)(DMSO), HF/6-311G(d)(DMSO), B3LYP/3-21G(DMSO) ve HF/3-21G(DMSO) metodlarına göre incelenen tüm bileşikler için hesaplanan ve deneysel olarak elde edilen değerler arasında bir uyum görülmüştür. Teorik değerler deneysel değerlerle mukayese edildiğinde B3LYP yöntemi 6-311G(d) temel setinde elde edilen değerlerin deneysel değerlerle daha uyumlu olduğu görülmüştür.

Tablo 4.5. 185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

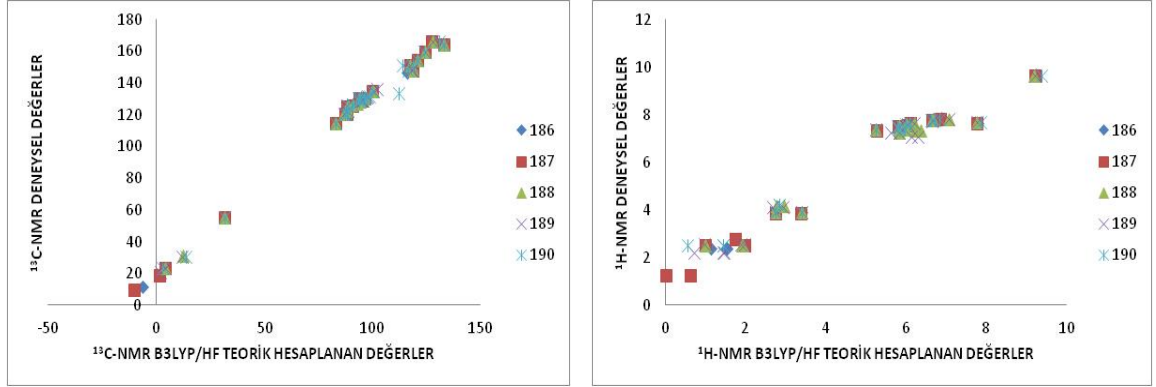
		^{13}C				^1H			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
186	DFT	0.9991	1.9229	1.0199	0.0587	0.9957	0.2582	1.0182	-0.5627
	HF	0.9971	3.4815	1.0253	-12.6692	0.9951	0.2861	1.0544	-1.1865
187	DFT	0.9991	2.0826	1.0193	0.2308	0.9953	0.2813	0.9930	-0.3752
	HF	0.9978	3.3718	1.0306	-13.3327	0.9939	0.3302	1.0300	-1.0157
188	DFT	0.9987	1.9087	1.0146	1.1343	0.9946	0.2455	1.0504	-0.7382
	HF	0.9965	3.1592	1.0375	-13.7902	0.9942	0.2666	1.1093	-1.5160
189	DFT	0.9989	1.9669	1.0169	0.7923	0.9941	0.2746	1.0180	-0.5030
	HF	0.9973	3.1392	1.0385	-14.0091	0.9928	0.3174	1.0648	-1.1926
190	DFT	0.9974	2.6909	1.0152	1.2798	0.9948	0.2435	1.0397	-0.7303
	HF	0.8593	21.9744	1.0147	-15.2163	0.9948	0.2565	1.1010	-1.5177



Şekil 4.5. 185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.6. 185 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

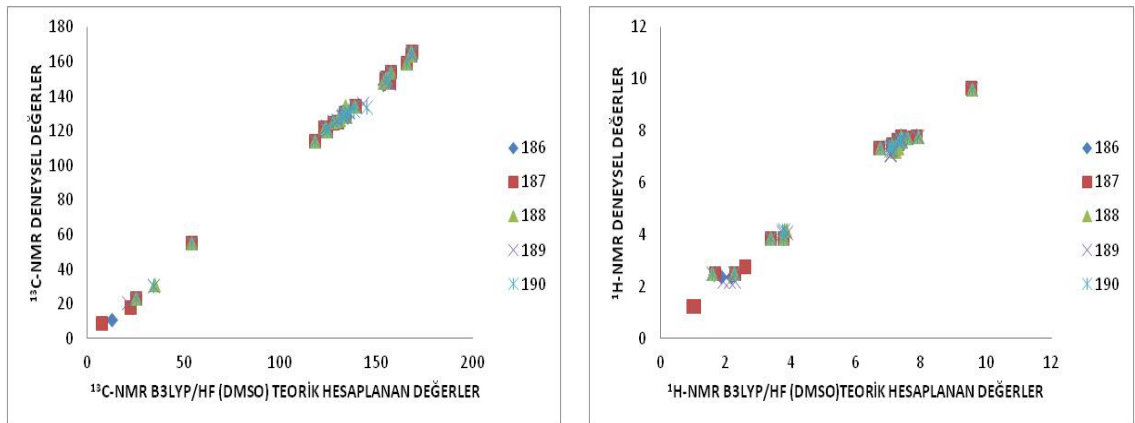
		^{13}C				^1H			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
186	DFT	0.9944	2.9411	0.8889	-18.2628	0.9579	0.5531	0.9710	-0.8822
	HF	0.9922	3.7101	0.9486	-31.7284	0.9693	0.5142	1.0633	-1.8613
187	DFT	0.9959	2.8020	0.8864	-17.8640	0.9662	0.5243	0.9668	-0.8545
	HF	0.9949	3.3661	0.9534	-32.3536	0.9734	0.5091	1.0612	-1.8591
188	DFT	0.9931	2.6831	0.8887	-18.4852	0.9484	0.5099	0.9797	-0.9976
	HF	0.9910	3.2909	0.9555	-32.7920	0.9613	0.4881	1.0906	-2.1360
189	DFT	0.9946	2.6719	0.8831	-17.7189	0.9577	0.5130	0.9848	-1.0036
	HF	0.9930	3.2755	0.9491	-32.0333	0.9689	0.4764	1.0738	-1.9925
190	DFT	0.9886	3.4776	0.8887	-18.1058	0.9470	0.5520	1.0241	-1.3801
	HF	0.9926	3.0177	0.9591	-33.1604	0.9664	0.4869	1.1461	-2.5580



Şekil 4.6. 185 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP ve HF yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.7. 185 Tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

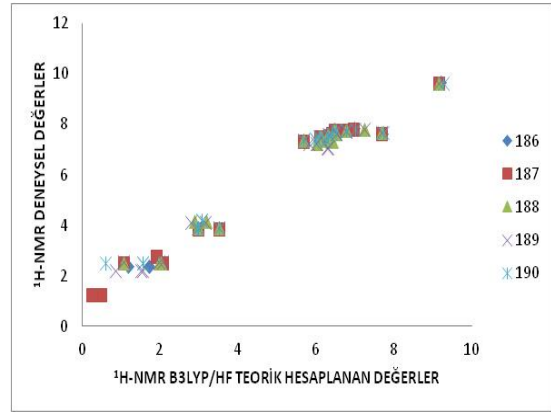
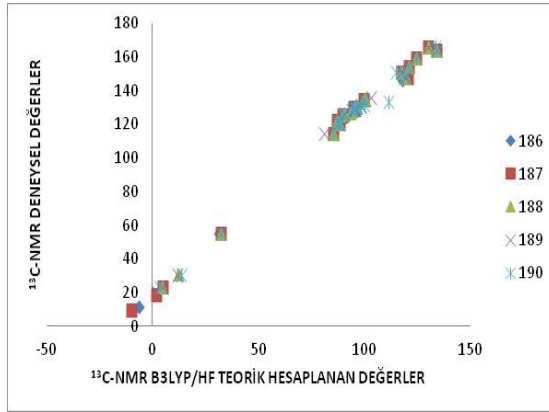
		^{13}C (DMSO)				^1H (DMSO)			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
186	DFT	0.9994	1.5725	1.0272	-0.1056	0.9970	0.2163	1.0180	-0.4350
	HF	0.9973	3.3910	1.0327	-12.8372	0.9962	0.2534	1.0599	-1.0700
187	DFT	0.9993	1.8755	1.0275	-0.0715	0.9973	0.2126	1.0046	-0.3279
	HF	0.9979	3.3118	1.0388	-13.6395	0.9965	0.2562	1.0457	-0.9666
188	DFT	0.9990	1.6915	1.0203	0.7584	0.9961	0.2070	1.0509	-0.5950
	HF	0.9968	3.0287	1.0472	-14.3803	0.9956	0.2341	1.1122	-1.3626
189	DFT	0.9991	1.7706	1.0267	0.2134	0.9958	0.2343	1.0229	-0.3929
	HF	0.8912	21.4340	1.0274	-16.0866	0.9946	0.2782	1.0739	-1.0829
190	DFT	0.9983	2.2024	1.0243	0.7538	0.9965	0.1993	1.0405	-0.5882
	HF	0.9970	2.9752	1.0453	-14.2098	0.9962	0.2192	1.1044	-1.3639



Şekil 4.7. 185 tipi bileşiklerin 6-311G(d) B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

Tablo 4.8. 185 Tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C - ve ^1H -NMR için bulunan R^2 , standart hata, a ve b değerleri

		^{13}C (DMSO)				^1H (DMSO)			
		R^2	S. hata	a	b	R^2	S. hata	a	b
186	DFT	0.9937	3.1478	0.8954	-18.6633	0.9699	0.4650	0.9707	-0.7373
	HF	0.9952	4.1500	0.9537	-31.8280	0.9815	0.3974	1.0638	-1.6984
187	DFT	0.9953	3.0220	0.8910	-18.0079	0.9781	0.4236	0.9769	-0.7811
	HF	0.9868	5.2643	0.9277	-28.1456	0.9865	0.3644	1.0744	-1.7825
188	DFT	0.9926	2.7928	0.8933	-18.5994	0.9636	0.4247	0.9798	-0.8415
	HF	0.8982	6.8151	0.9495	-34.6889	0.9776	0.3687	1.0910	-1.9376
189	DFT	0.9939	2.8517	0.8890	-18.2393	0.9695	0.4341	0.9885	-0.8784
	HF	0.9914	3.6446	0.9559	-32.4251	0.9821	0.3617	1.0801	-1.8427
190	DFT	0.9887	3.4831	0.8943	-18.3767	0.9623	0.4608	1.0216	-1.1911
	HF	0.9906	3.4117	0.9650	-33.4186	0.9806	0.3660	1.1430	-2.3377



Şekil 4.8. 185 tipi bileşiklerin 3-21G B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H NMR kimyasal kayma değerleri

Tez kapsamında sentezlenen ve teorik olarak incelenen bileşiklerin 6-311G(d) ve 3-21G temel setlerinde B3LYP ve HF metodları kullanılarak IR teorik verileri ile deneysel ve teorik spektrumları materyal, yöntem ve hesaplama metodları bölümünde verilmiştir. 14 bileşiğin B3LYP ve HF yöntemlerine ve 6-311G(d) ve 3-21G temel setlerine göre teorik titreşim frekansları hesaplanmıştır. Yapılan analiz sonucunda hesaplanan frekanslar içerisinde B3LYP ve HF yöntemlerine ile 6-311G(d) ve 3-21G temel setlerinde negatif frekanslara rastlanmamıştır. Bu sonuç elde ettiğimiz yapının kararlı bir yapı olduğunu göstermektedir. Negatif frekans bulunması yapının bir geçiş yapısı olduğunu gösterir. İki farklı yöntem ve iki farklı temel sete göre elde edilen değerler kullanılarak teorik IR spektrumları çizilmiş ve B3LYP/6-311G(d): 0.9905, HF/6-311G(d): 0.9516, B3LYP/3-21G: 0.9650 ve HF/3-21G: 0.9085 uyum faktörleri ile çarpılmıştır. Teorik IR

spektrumları ile deneysel olarak elde edilen IR spektrumları ile mukayese edilmiştir. Bu karşılaştırma sonucu teorik bulguların deneysel verilerle ve literatürdeki benzer bileşiklerle ilgili yapılan benzer çalışmalarda elde edilen değerlerle uyumlu olduğu ortaya konmuştur [154, 170, 180, 246-250]. Teorik olarak hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında veda4f programından yararlanılmıştır. Sentezlenen moleküllerin düzlemsel ve lineer olmayan bir yapıda olup 3N-6 adet serbest titreşimi vardır. Deneysel olarak 176 tipi bileşiklerde 1737-1698 cm⁻¹ aralıklarında iki adet karbonil piki ve 185 tipi bileşiklerde 1766-1712 cm⁻¹ aralıklarında üç adet karbonil piki görülürken teorik olarak karbonil(C=O) grubuna ait frekanslar B3LYP/6-311G(d)'de 1791-1786 ve B3LYP/6-311G(d) ise 1903-1863 cm⁻¹ aralıklarında ve ayrıca B3LYP/3-21G'de 1707-1675 ve HF/3-21G ise 1746-1732 cm⁻¹ aralıklarında gözlemlenmiştir. Deneysel verilere en yakın değerler HF metodu 3-21G temel setinde görülmüştür. Teorik olarak elde edilen diğer titreşim frekansları deneysel yöntemlerle elde edilen frekanslarla uyumlu olduğu gözlemlenmiştir.

Tez kapsamında bağ uzunlukları teorik olarak incelenen 13 heterosiklik bileşiklerle ilgili elde edilen bağ uzunluklarının deneysel verilerle uyumunu görmek için 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında C-1'e bağlı benzen halkası içeren bileşiklerin C-C bağ uzunlukları ile C-H bağ uzunluklarının literatürde kayıtlı deneysel verilerle karşılaştırması yapılmıştır. Benzen halkasındaki tüm C-H bağları eşit uzunlukta ve 1.084 Å⁰ olarak ölçülmüştür [250]. C-1'e bağlı fenil grubu içeren 176 tipi beş bileşiğin fenil halkasına ait hesaplanan C-C bağ uzunlukları ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.395 Å⁰, HF/6-311G(d)'ye göre 1.386 Å⁰ ve DFT/3-21G'ye göre 1.397 Å⁰, HF/3-21G'ye göre 1.384 Å⁰; C-H bağ uzunlukları ise DFT/6-311G(d)'ye göre 1.086 Å⁰, HF/6-311G(d)'ye göre 1.075 Å⁰ ve DFT/3-21G'ye göre 1.083 Å⁰, HF/3-21G'ye göre 1.072 Å⁰ olarak bulunmuştur. *N*-asetil türevi 185 tipi üç bileşiğin fenil halkasına ait hesaplanan C-C bağ uzunlukları ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.394 Å⁰, HF/6-311G(d)' ye göre 1.386 Å⁰ ve DFT/3-21G'ye göre 1.396 Å⁰; HF/3-21G' ye göre 1.383 Å⁰; C-H bağ uzunlukları ise DFT/6-311G(d)'ye göre 1.086 Å⁰, HF/6-311G(d)'ye göre 1.075 Å⁰ ve DFT/3-21G' ye göre 1.084 Å⁰, HF/3-21G'ye göre 1.072 Å⁰ olarak bulunmuştur (Tablo 4.9-10). C-3'e bağlı fenil grubu içeren 176 tipi sekiz bileşiğin fenil halkasına ait hesaplanan C-C bağ uzunlukları ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.392

A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.384 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.394 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.386 A^0 ; C-H bağ uzunlukları ise DFT/6-311G(d)'ye göre 1.080 A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.074 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.081 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.073 A^0 olarak bulunmuştur (Tablo 4.9-10). *N*-asetil türevi olan 185 tipi bileşiklerde C-1'e bağlı gruplarda fenil halkası taşıyan bileşiklerin hesaplanan C-C bağ uzunlukları ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.396 A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.384 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.398 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.384 A^0 ; C-H bağ uzunlukları ise DFT/6-311G(d)'ye göre 1.083 A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.073 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.082 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.070 A^0 olarak bulunmuştur (Tablo 4.9-10). Son olarak, 176 tipi bileşiklerde C-10'a bağlı fenil grubu için hesaplanan C-C bağ uzunlukları ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.393 A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.386 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.396 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.386 A^0 ; C-H bağ uzunlukları ise DFT/6-311G(d)'ye göre 1.080 A^0 , HF/6-311G(d)'ye göre 1.071 A^0 ve DFT/3-21G'ye göre 1.081 A^0 , HF/3-21G'ye göre 1.073 A^0 olarak hesaplanmıştır (Tablo 4.9-10). Sonuçlar irdelendiğinde fenil halkasına ait DFT/6-311G(d)'ye göre hesaplanan ortalama C-C bağ uzunluklarının literatürdeki [250] ölçülen uzunlukla hemen hemen aynı olduğu ve HF/6-311G(d), DFT/3-21G ve HF/3-21G(d)'ye göre hesaplanan ortalama uzunlukların ise literatürdeki deneysel değere çok yakın olduğu görülmüştür. Aynı moleküller için DFT/6-311G(d)'ye göre hesaplanan ortalama C-H bağ uzunluklarının literatürdeki [154, 170, 180, 250] ölçülen uzunluğa (1.084 A^0) yakın olduğu, HF'ye göre hesaplanan ortalama uzunlukların ise literatürdeki deneysel değerden biraz daha düşük olduğu görülmüştür. Ayrıca, benzen halkasındaki C-C bağlarının kısmi çifte bağ karakteri taşıdığı da hesaplanan uzunluklarla ortaya konmuştur. C-C Tek bağ uzunluğu etanda 1.54 A^0 , C=C çift bağ uzunluğu ise etilende 1.34 A^0 olarak verilmiştir [250] ki, fenil halkasına ait hesaplanan ve bulunan C-C bağ uzunlukları bu iki değer arasındadır. Bu sonuçlar, her iki yöntemle göre hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlerle tamamen uyumlu olduğunu ortaya koymuştur (Tablo 4.9-10).

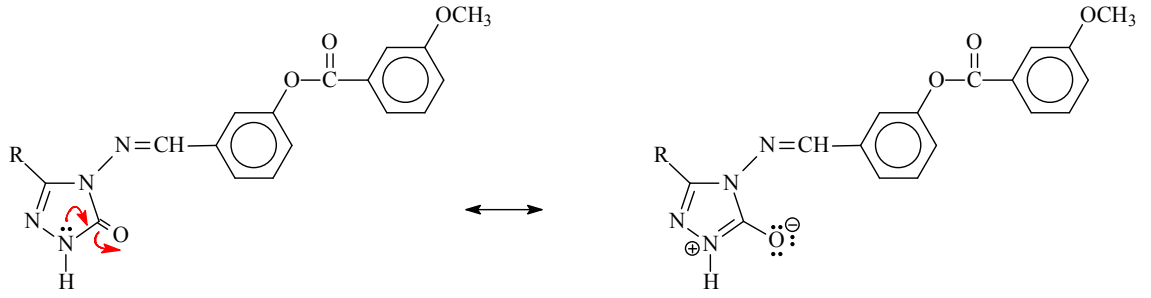
Tablo 4.9. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) metodlarına göre hesaplanmış aromatik C-C ve C-H bağ uzunlukları

176 ve 185 tipi Bileşikler	C-1'e Bağlı Ar-C-C Bağlı Uzunluğu(A ⁰)		C-1'e Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-3'e Bağlı Ar-C-C Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-3'e Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-10'a Bağlı Ar-C-C Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-10'a Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)	
	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT
	6-311G(d)	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G	6-311G
177	-	-	-	-	1.384	1.383	1.074	1.069	1.386	1.383	1.073	1.069
178	-	-	-	-	1.384	1.383	1.074	1.069	1.386	1.383	1.073	1.069
179	-	-	-	-	1.383	1.395	1.074	1.083	1.386	1.396	1.073	1.083
180	1.385	1.394	1.076	1.086	1.384	1.394	1.074	1.083	1.386	1.396	1.072	1.084
181	1.386	1.395	1.077	1.087	1.383	1.395	1.074	1.084	1.386	1.396	1.060	1.083
182	1.386	1.395	1.076	1.085	1.383	1.395	1.074	1.084	1.386	1.396	1.073	1.083
183	1.384	1.393	1.074	1.085	1.385	1.396	1.074	1.084	1.386	1.396	1.073	1.083
184	1.389	1.398	1.074	1.084	1.384	1.395	1.074	1.084	1.385	1.396	1.073	1.083
186	-	-	-	-	1.384	1.395	1.074	1.083	1.386	1.396	1.073	1.083
187	-	-	-	-	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
188	1.385	1.394	1.076	1.086	1.383	1.395	1.074	1.083	1.386	1.396	1.073	1.083
189	1.386	1.394	1.076	1.087	1.385	1.396	1.074	1.084	1.386	1.396	1.073	1.083
190	1.386	1.393	1.074	1.085	1.384	1.395	1.074	1.083	1.386	1.396	1.073	1.083

Tablo 4.10. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/3-21G ve HF/3-21G metodlarına göre hesaplanmış aromatik C-C ve C-H bağ uzunlukları

176 ve 185 tipi Bileşikler	C-1'e Bağlı Ar-C-C Bağlı Uzunluğu(A ⁰)		C-1'e Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-3'e Bağlı Ar-C-C Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-3'e Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-10'a Bağlı Ar-C-C Bağ Uzunluğu(A ⁰)		C-10'a Bağlı Ar-C-H Bağ Uzunluğu(A ⁰)	
	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF	DFT
	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G
177	-	-	-	-	1.395	1.398	1.084	1.081	1.396	1.387	1.083	1.081
178	-	-	-	-	1.395	1.378	1.084	1.081	1.396	1.397	1.083	1.081
179	-	-	-	-	1.383	1.398	1.069	1.081	1.382	1.397	1.069	1.081
180	1.384	1.397	1.072	1.084	1.383	1.389	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
181	1.385	1.398	1.073	1.085	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
182	1.383	1.397	1.072	1.083	1.383	1.397	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
183	1.381	1.395	1.071	1.083	1.385	1.399	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
184	1.385	1.399	1.070	1.082	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
186	-	-	-	-	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
187	-	-	-	-	1.384	1.395	1.074	1.084	1.386	1.396	1.073	1.083
188	1.384	1.397	1.072	1.084	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081
189	1.385	1.398	1.073	1.085	1.385	1.399	1.069	1.081	1.384	1.398	1.069	1.081
190	1.381	1.394	1.071	1.083	1.383	1.398	1.069	1.081	1.383	1.397	1.069	1.081

Teorik bağ uzunluklarının incelenmesinden ilginç bir diğer sonuca daha varılmıştır. Sentezlenen 176 tipi bileşiklerin B3LYP ve HF yöntemlerine göre hesaplanan bağ uzunlukları incelendiğinde C(2)-NH bağ uzunluklarının ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.365 A⁰, HF/6-311G(d)'ye göre 1.346 A⁰, DFT/3-21G'ye göre 1.377 A⁰, HF/3-21G'ye göre 1.357 A⁰ ve 185 tipi bileşiklerin C(2)-NH bağ uzunluklarının ortalaması DFT/6-311G(d)'ye göre 1.396 A⁰, HF/6-311G(d)'ye göre 1.363 A⁰, DFT/3-21G'ye göre 1.399 A⁰, HF/3-21G'ye göre 1.374 A⁰ olduğu görülmüştür (Tablo 4.11). Hesaplanan bu değerlerin literatürde verilen C-C tek bağ uzunluğu (1.54 A⁰) ile C=C çift bağ uzunluğu (1.34 A⁰) arasında olduğu görülmektedir [250], ki bu durum aşağıdaki rezonans formülleri ile açıklanabilir.



176

Nitekim, sentezlenen bileşiklerin *N*-asetil türevleri olan 186 tipi bileşiklerin B3LYP ve HF yöntemleri ile hesaplanan C(2)-NH bağ uzunlukları incelendiğinde bu durumun kısmen ortadan kalktığı görülmüştür.

Tablo 4.11. 176 ve 185 Tipi bileşiklerin DFT/6-311G(d), HF/6-311G(d), DFT/3-21G ve HF/3-21G metodlarına göre hesaplanmış C(2)-NH bağ uzunlukları

176 ve 185 tipi Bileşikler	C(2)-NH BAĞI UZUNLUĞU (Å ⁰)		C(2)-NH BAĞI UZUNLUĞU(Å ⁰)	
	HF 6-311G(d)	DFT 6-311G(d)	HF 3-21G	DFT 3-21G
177	1.346	1.354	1.369	1.378
178	1.346	1.354	1.368	1.378
179	1.346	1.368	1.354	1.378
180	1.346	1.368	1.354	1.377
181	1.346	1.368	1.354	1.377
182	1.346	1.368	1.354	1.377
183	1.347	1.369	1.354	1.376
184	1.245	1.368	1.352	1.375
186	1.325	1.398	1.376	1.403
187	1.373	1.403	1.373	1.398
188	1.376	1.398	1.376	1.403
189	1.373	1.398	1.371	1.397
190	1.373	1.398	1.382	1.408
ORTALAMA DEĞER	1.357	1.378	1.364	1.387

B3LYP metoduyla elde edilen bağ açılarının beklenen değerlere daha yakın olduğu görülmüştür. Düzlem açısı moleküllerin geometrisinde önemli bir faktördür, çünkü düzlem açısı moleküldeki etkileşen iki kuvvetin denge durumunda oluşmaktadır. Düzlem açıları, B3LYP modelinde HF modeline göre daha büyüktür.

Tez kapsamında teorik olarak toplam enerjileri hesaplanan 13 bileşiğe ait toplam enerji değerleri aşağıda tablolar halinde verilmiştir:

Tablo 4.12 176 ve 185 Tipi bileşiklerinin toplam molekül enerjileri (6-311G(d) HF/B3LYP ve 3-21G HF/B3LYP) (a.u.)

Bileşik No:	Substituent(R)	HF 6-311G(d)	HF 3-21G	B3LYP 6-311G(d)	B3LYP 3-21G
177	-CH ₃	-1208.419	-1201.421	-1222.703	-1215.710
178	-CH ₂ CH ₃	-1247.460	-1240.241	-1255.017	-1247.831
179	-CH ₂ CH ₂ CH ₃	-1286.502	-1279.061	-1294.353	-1286.932
180	-CH ₂ C ₆ H ₅	-1438.000	-1429.684	-1446.803	-1438.506
181	-CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ (<i>p</i> -)	-1477.043	-1468.505	-1486.128	-1477.610
182	-CH ₂ C ₆ H ₄ OCH ₃ (<i>p</i> -)	-1551.904	-1542.934	-1561.354	-1552.401
183	-CH ₂ C ₆ H ₄ Cl (<i>p</i> -)	-1896.924	-1886.398	-1906.427	-1895.901
184	-C ₆ H ₅	-1398.957	-1390.865	-1407.483	-1399.409
186	-CH ₃	-1360.231	-1352.352	-1368.400	-1360.546
187	-CH ₂ CH ₃	-1391.169	-1399.272	-1399.642	-1407.721
188	-CH ₂ C ₆ H ₅	-1589.811	-1580.611	-1599.492	-1590.320
189	-CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃ (<i>p</i> -)	-1628.853	-1619.436	-1638.803	-1629.431
190	-CH ₂ C ₆ H ₄ Cl (<i>p</i> -)	-2048.734	-2037.328	-2059.115	-2047.713

Tablo 4.12’de görüldüğü üzere 176 tipi bileşiklerin C-1’e bağlı alkil gruplarına göre toplam enerjileri hesaplanmıştır. Tabloda metil-, etil-, *n*-propil-, benzil-, *p*-metilbenzil-, *p*-metoksibenzil-, *p*-klorobenzil-, fenil- sırasına göre toplam enerjiler verilmiştir. Ayrıca, 175 tipi bileşiklerin *N*-asetil türevleri olan 185 tipi bileşiklerin toplam enerjileri de metil-, etil-, benzil-, *p*-metilbenzil-, *p*-klorobenzil- gruplarına göre hesaplanmış ve tabloya geçirilmiştir.

Tez kapsamında 14 bileşiğe ait deneysel verilerle karşılaştırılamayan ve teorik olarak iki yöntem ve iki temel setle hesaplanan bağ açıları, mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri ve enerjilerinin literatürdeki verilerle uyumlu olduğu görülmüştür [154, 180, 246-250].

4.2. Sentezlenen Bileşiklere Ait Spektrum Verilerinin Yorumlanması

Bu tez çalışmasında ilk olarak bilinen 8 adet 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiştir. Bu bileşiklerin 3-(3-metoksibenzoksi)-benzaldehyd ile muamelesinden heterosiklik schiff bazları olan 8 adet yeni 176 tipi 3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği sentezlenmiştir. 176 Tipi bileşiklerin asetik anhidrid ile reaksiyonundan 5 adet yeni 185 tipi 1-asetil-3-alkil(aril)-4-[3-(3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiği elde edilmiş ve yapıları IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR ve UV spektrum verileri kullanılarak aydınlatılmıştır.

Benzaldehyd türevi olan 175 bileşiğinin IR spektrumunda beklendiği üzere 2831 ve 2745 cm⁻¹ de CHO hidrojenine ait fermi rezonansı gerilme titreşimleri, 1732 ve 1689 cm⁻¹ de iki adet C=O gerilme titreşimi görülmüştür. Bu bileşiğin ¹H-NMR spektrumunda CHO protonu yine δ 10.66 ppm'de görülmüştür. Ayrıca, δ 7.91-7.33 ppm aralığında aromatik protonlar, δ 3.87 ppm'de PhCH₃ protonları görülmüş olup, bu değerler önerilen yapının doğruluğunu ortaya koymaktadır. ¹³C-NMR spektrumunda ise karakteristik nitelikteki CHO karbonil karbonu δ 192.30 ppm'de görülürken, ester karbonil karbonu δ 164.26 ppm'de ortaya çıkmıştır ki, bu değer literatürdeki verilerle uyumludur ve yapıyı doğrular niteliktedir.

176 Tipi bileşiklerin IR spektrum verileri beklendiği üzere 3170-3154 cm⁻¹ aralığında N-H gerilme titreşimleri ve 1700 cm⁻¹ civarında C=O gerilme titreşimlerine ait pikler görülmüştür. 185 Tipi bileşiklerin IR spektrumlarında ise, beklendiği üzere 3170-3154 cm⁻¹ aralığında N-H gerilme titreşimlerinin kaybolduğu görülmektedir. Bu da asetillendirmenin gerçekleştiğini ortaya koymaktadır. Bu sonuçlar literatürdeki verilerle uyumlu bulunmuştur. Buna ilaveten, 1601-1582 cm⁻¹ aralığında C=N gerilme titreşimleri ve 1272-1244 cm⁻¹ aralığında COO gerilme titreşimleri ortaya çıkmıştır.

176 ve 185 Tipi bileşiklerin ¹H-NMR spektrumları incelendiğinde 176 tipi bileşiklerde δ 12.43-11.87 ppm aralığında N-H protonlarına ait pikler görülmüş, ancak 184 bileşiğinde N-H protonuna ait pik δ 12,43 ppm' de ortaya çıkmıştır ki bu değer 4,5-

dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasında C-3'e baęlı fenil grubu içeren bileşikler için karakteristik nitelik göstermekte ve literatürdeki verilerle uyumludur. 185 Tipi bileşiklerin ¹H-NMR spektrumları incelendiğinde ise N-H protonlarına ait piklerin kaybolduęu, buna karşın δ 2.53-2.50 ppm aralığında COCH₃ protonlarına ait singlet pikin ortaya çıktığı görülmüş olup, bu da asetillendirmenin gerçekleştiğini kanıtlar niteliktedir. Ayrıca 176 tipi bileşiklerin ¹H-NMR spektrumlarında δ 9.79-9.63 ppm aralığında N=CH protonları görülmüş, ancak N-asetil türevleri olan 185 tipi bileşiklerde bu pikin daha yüksek alanda yani daha düşük ppm' de (δ 9.67-9.62 ppm aralığında) ortaya çıktığı görülmüştür. δ 7.93-6.84 ppm aralığında aromatik protonlar görülmüş ve literatürde verilen değerlerle uyumlu olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca, 3.88-3.86 ppm aralığında singlet OCH₃ protonları görülmüştür. Bunlardan başka, 177 bileşiginde δ 2.29 ppm'de CH₃, 178 bileşiginde δ 1.22 ppm'de CH₂CH₃ ve 2.70 ppm'de CH₂CH₃, 179 bileşiginde δ 0.94 ppm'de CH₂CH₂CH₃, 1.70 ppm'de CH₂CH₂CH₃ ve 2.66 ppm'de CH₂CH₂CH₃, 180 bileşiginde δ 4.08 ppm'de benzilik CH₂, 181 bileşiginde δ 2.21 ppm'de PhCH₃ ve 4.02 ppm'de benzilik CH₂, 182 bileşiginde δ 3.68 ppm'de PhOCH₃ ve 4.00 ppm'de benzilik CH₂, 183 bileşiginde δ 4.09 ppm'de benzilik CH₂, 186 bileşiginde δ 2.37 ppm'de CH₃, 187 bileşiginde δ 1.25 ppm'de CH₂CH₃ ve 2.77 ppm'de CH₂CH₃, 188 bileşiginde δ 4.17 ppm'de benzilik CH₂, 189 bileşiginde δ 2.22 ppm'de PhCH₃ ve 4.11 ppm'de benzilik CH₂ ve 190 bileşiginde δ 4.18 ppm'de benzilik CH₂ protonlarına rastlanmıştır. 176 ve 185 tipi bileşiklerdeki aril gruplarına ait aromatik karbonların farklılandırılması başarılmış, 1,3-disubstitue benzen halkasına ait aromatik karbon verileri ve triazol halkasında C-1'e baęlı aromatik protonlar verileri tespit edilmiştir. Tespit edilen aromatik protonlar altı çizilerek gösterilmiştir.

176 ve 185 Tipi bileşiklerin ¹³C-NMR spektrumlarında ester C=O karbonları δ 164.33-164.26 ppm aralığında, 1,2,4-triazol C-2 karbonları δ 155.41-151.15 ppm aralığında, N=CH karbonları δ 151.33-148.28 ppm aralığında ve triazol C-1 karbonları ise δ 148.03-144.31 ppm aralığında ortaya çıkmıştır. OCH₃ karbonları beklendiği üzere δ 55.92-55.42 ppm aralığında görülürken 185 tipi bileşiklerde farklı olarak δ 166.00-165.93 ppm aralığında COCH₃ karbonları ve δ 23.51-23.43 ppm aralığında COCH₃ karbonları ortaya çıkmış olup, bu değerler literatür değerleri ile uyumlu bulunarak asetillendirmenin gerçekleştiğinin kanıtı olarak kabul edilmiştir. Ayrıca, 177 bileşiginde

δ 11.08 ppm'de CH₃, 178 bileşiğinde δ 9.95 ppm'de CH₂CH₃ ve 18.44 ppm'de CH₂CH₃, 179 bileşiğinde δ 13.44 ppm'de CH₂CH₂CH₃, 18.80 ppm'de CH₂CH₂CH₃ ve 26.59 ppm'de CH₂CH₂CH₃, 180 bileşiğinde δ 31.11 ppm'de CH₂Ph, 181 bileşiğinde δ 20.54 ppm'de PhCH₃ ve 30.76 ppm'de CH₂Ph, 182 bileşiğinde δ 30.26 ppm'de CH₂Ph ve 54.91 ppm'de *p*-PhOCH₃, 183 bileşiğinde δ 30.43 ppm'de CH₂Ph, 186 bileşiğinde δ 11.21 ppm'de CH₃, 187 bileşiğinde δ 9.37 ppm'de CH₂CH₃ ve 18.53 ppm'de CH₂CH₃, 188 bileşiğinde δ 31.06 ppm'de CH₂Ph, 189 bileşiğinde δ 20.56 ppm'de PhCH₃ ve 30.73 ppm'de CH₂Ph ve 190 bileşiğinde δ 30.38 ppm'de CH₂Ph karbonlarına ait piklere rastlanmıştır. 176 ve 185 Tipi bileşiklerdeki aril gruplarına ait aromatik karbonların farklılandırılması başarılmış, triazol halkasında C-1'e bağlı aromatik karbon verileri tespit edilmiş ve altı çizili olarak belirtilmiştir.

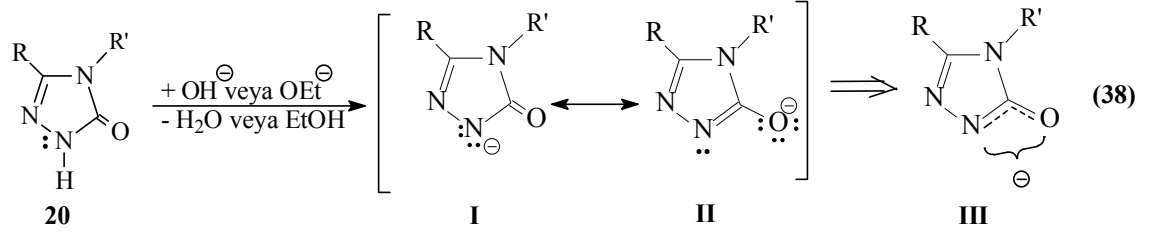
4.3. Potansiyometrik Titrasyon Sonuçlarının Değerlendirilmesi

Tez kapsamında sentezlenen 176 tipi 8 adet yeni bileşiğin asitlik sabitleri ve yarı nötralizasyon değerleri tayin edilmiştir. Çalışma potansiyometrik titrasyon kullanılarak 25°C'de susuz ortamda gerçekleştirilmiştir. 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sulu ortamdaki çözünürlüğü çok az olduğundan susuz ortam çözücülerini tercih edilmiştir. Çözücü olarak amfiprotik ve dipolar aprotik çözücüler olan izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton, *N,N*-dimetilformamid; titrant olarak ise yaygın kullanıma sahip tetrabutylamonyum hidroksidin (TBAH) izopropil alkoldeki çözeltisi kullanılmıştır.

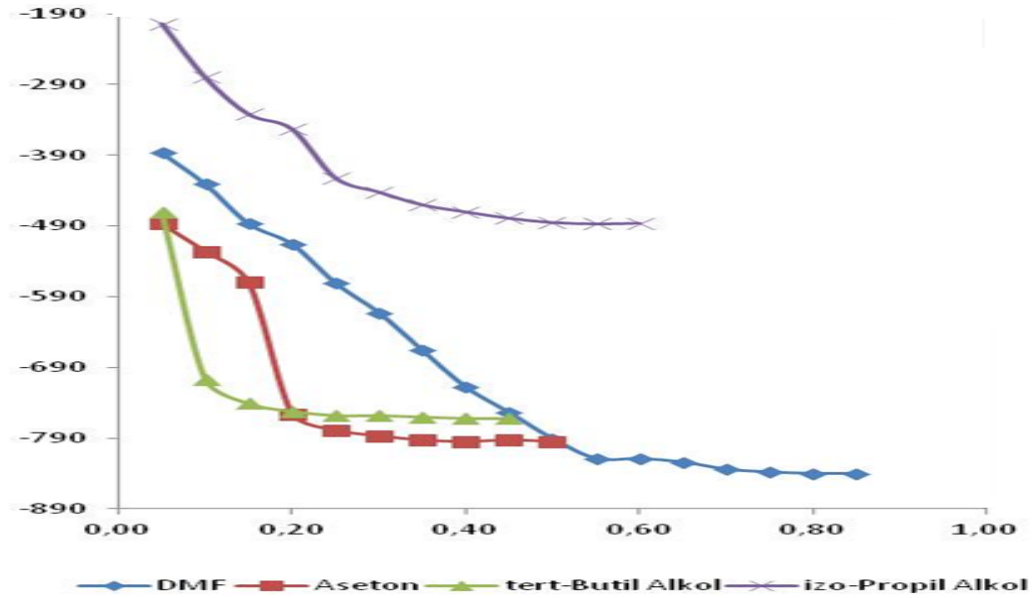
4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halka sisteminde N-H protonunun zayıf asidik özellik gösterdiği bilinmektedir [11, 52, 53, 70-77, 95, 251]. N-H protonunun asidik özellik göstermesi aşağıdaki şekilde açıklanabilir:

4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasındaki N-H hidrojeni Denklem 38 uyarınca proton halinde ayrıldığında oluşan anyon rezonans ile kararlılık kazandığından, başka bir deyişle hidrojen proton halinde ayrıldığında geride kalan elektron çifti ikinci

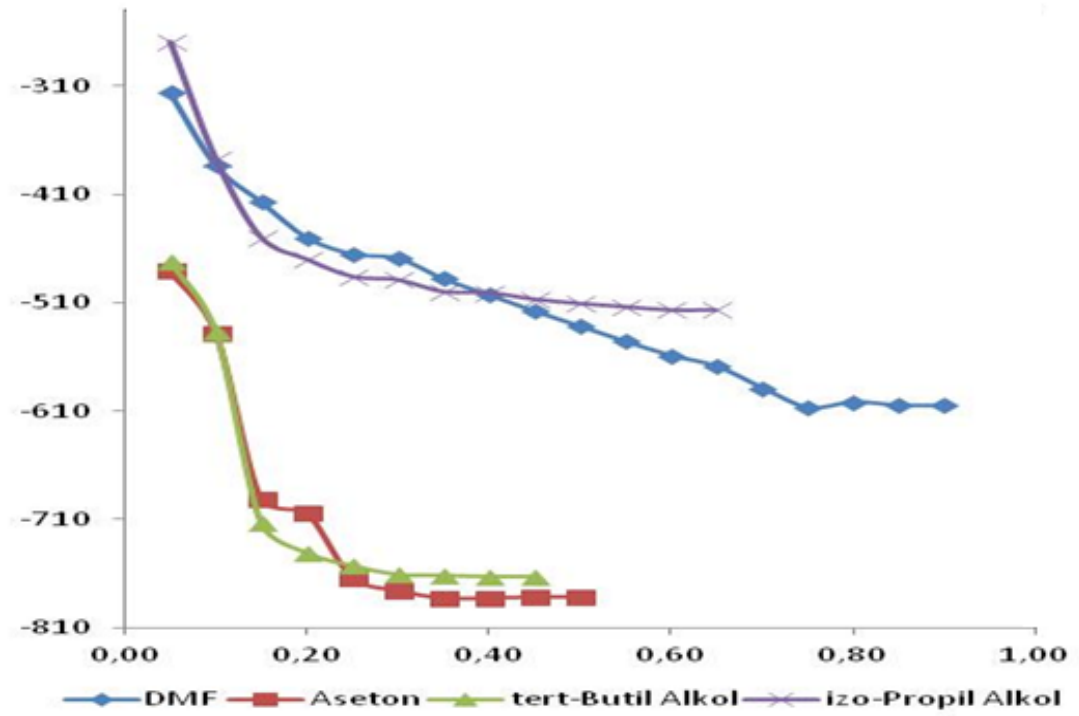
elektronegatif atom olan oksijeni de içine alacak şekilde delocalize olduğundan barındırılması kolay olur ve denge sağa kayar; dolayısıyla da asitlik artar.



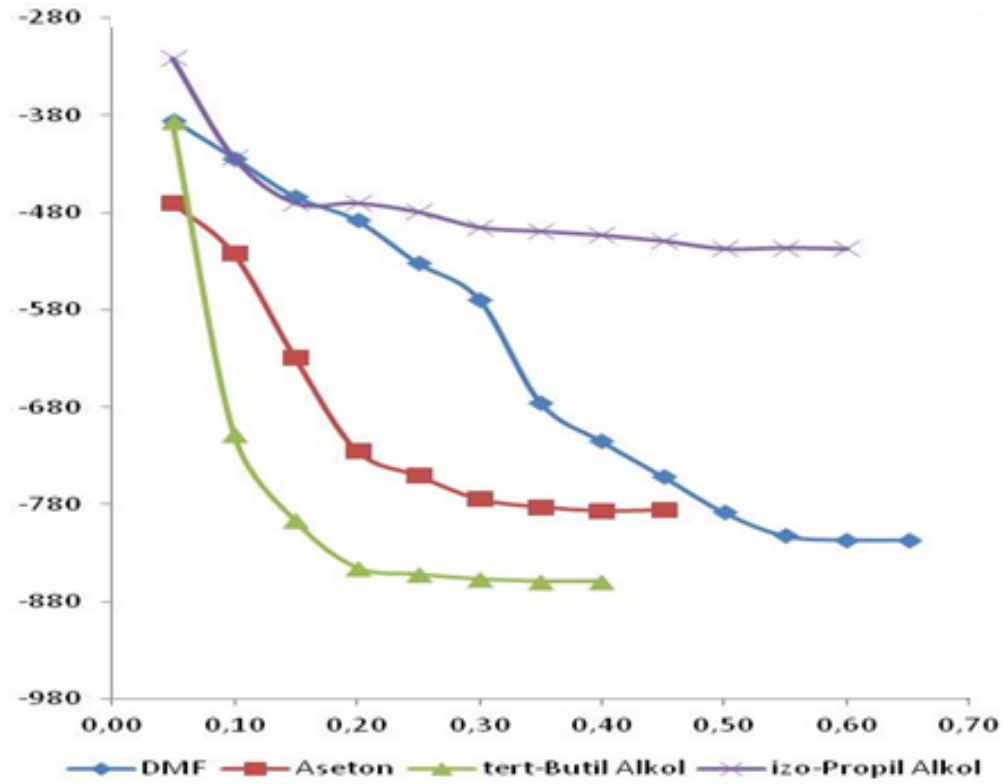
I ve II Rezonans yapılarının rezonans hibridi III olup, negatif yükün elektronegatif azot ve oksijen atomlarını içine alacak şekilde delocalize olduğunu göstermektedir. Çalışmada potansiyometrik yöntemle asitlik sabitleri tayin edilen 176 tipi bileşiklerin izopropil alkol, *tert*-butil alkol, *N,N*-dimetilformamid ve aseton susuz çözücülerindeki çözeltilerinin TBAH ile potansiyometrik titrasyonları yapılmış, elde edilen titrasyon verileri Tablo 3.133-140'de verilmiştir. Bu verilerden yararlanarak herbir bileşiğin bu dört çözücüdeki titrasyon grafikleri çizilmiş ve Şekil 4.9-16'da verilmiştir.



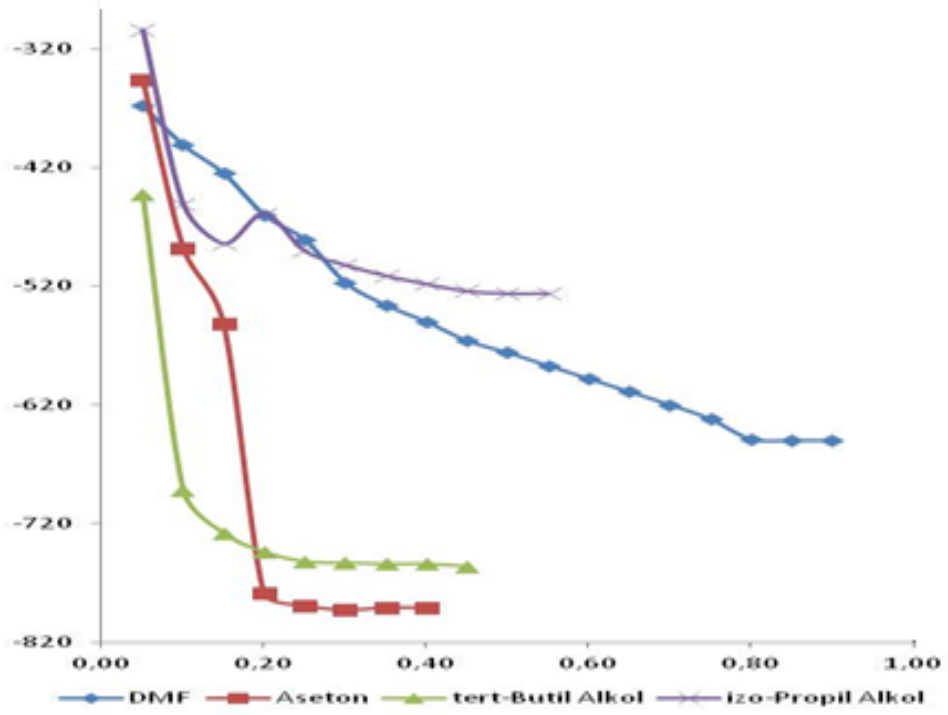
Şekil 4.9. 177 Bileşiğin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} m'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



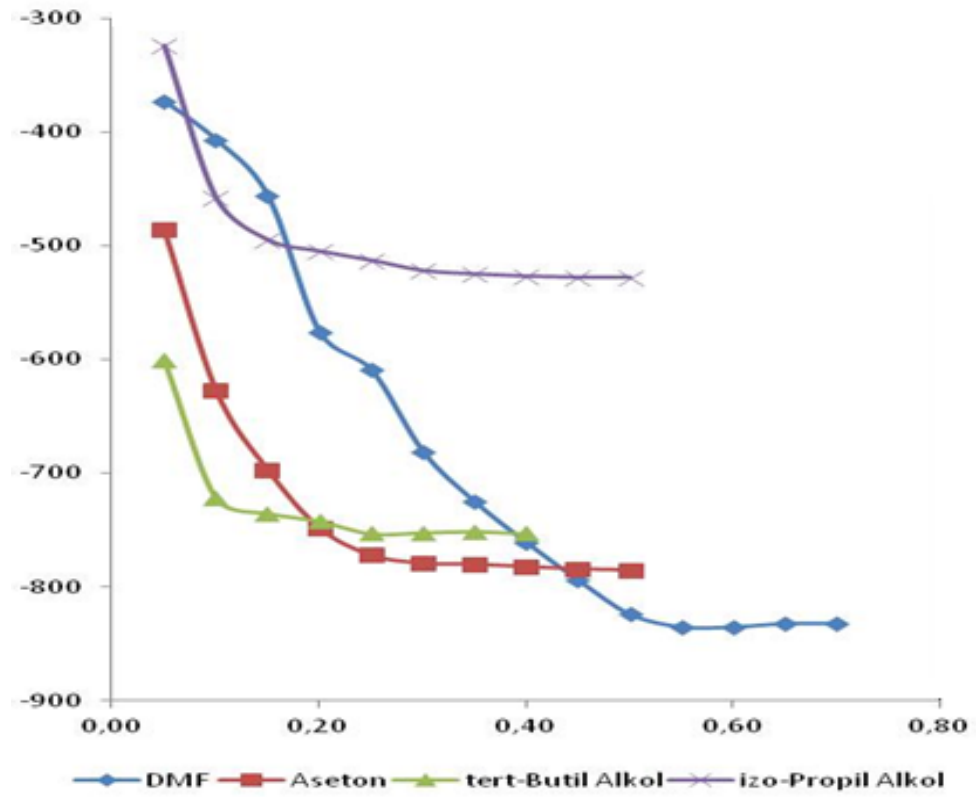
Şekil 4.10. 178 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil Alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



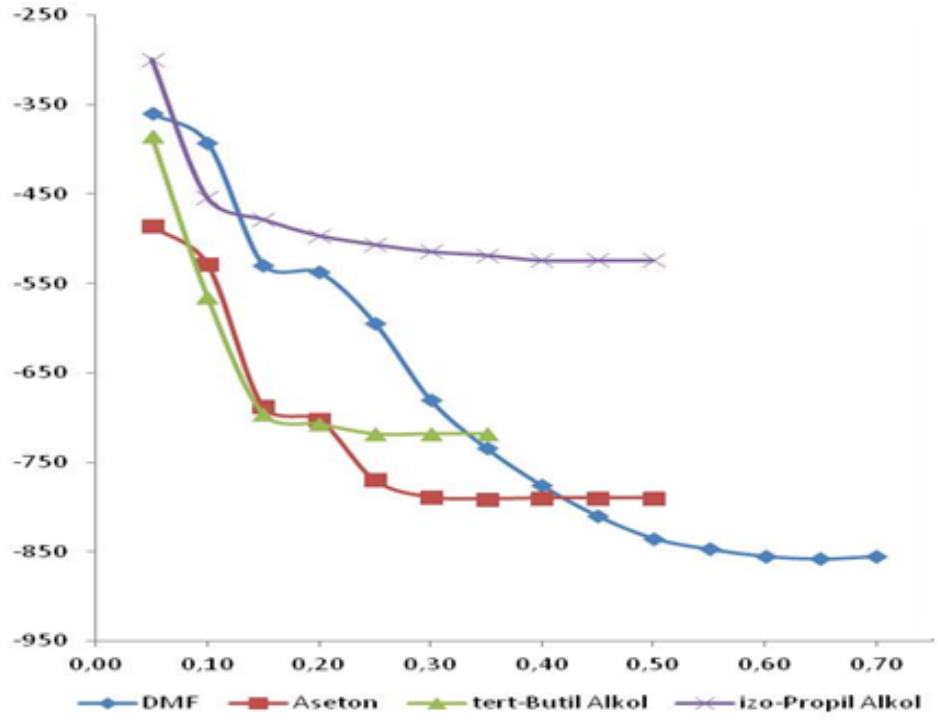
Şekil 4.11. 179 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



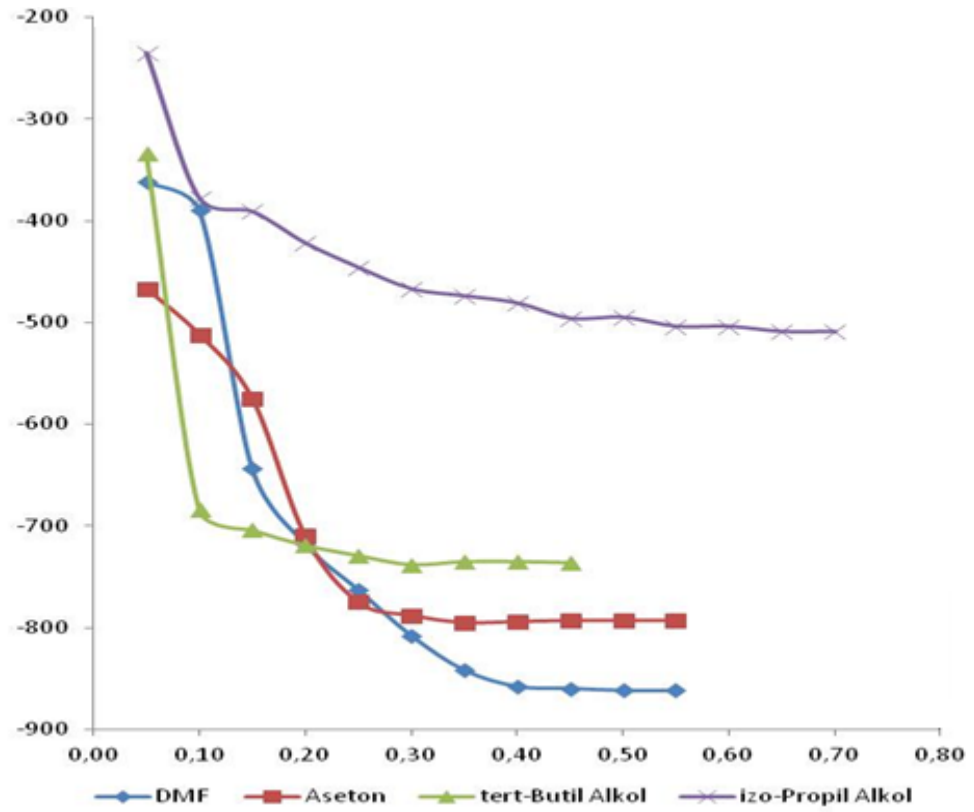
Şekil 4.12. 180 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



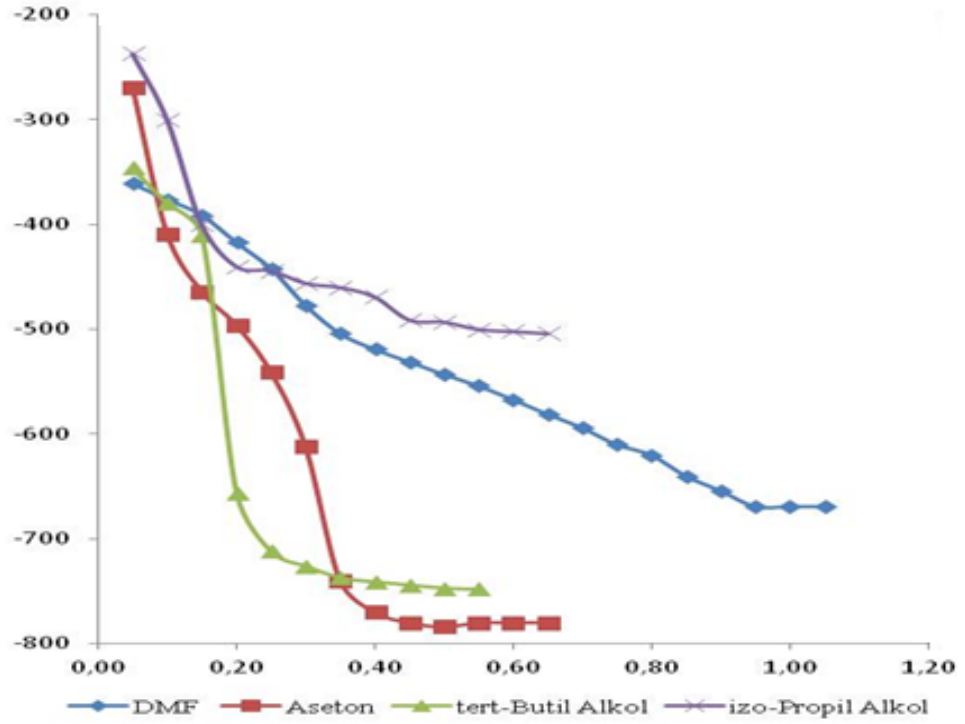
Şekil 4.13. 181 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



Şekil 4.14. 182 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



Şekil 4.15. 183 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri



Şekil 4.16. 184 Bileşiğinin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil Alkol ve izopropil alkol 10^{-3} M'lık çözeltilerinin 0.05 N TBAH ile titrasyon grafikleri

176 tipi bileşiklerin *N,N*-dimetilformamid, aseton, *tert*-butil alkol ve izopropil alkol çözücülerindeki yarı nötralizasyon potansiyelleri ve asitlik sabitleri aşağıda Tablo 4.13'te verilmiştir:

Tablo 4.13. 176 Tipi bileşiklerin yarı nötralizasyon potansiyelleri ve karşın olan pK_a değerleri

Bileşik No	DMF		Aseton		<i>tert</i> -Butil Alkol		İzopropil Alkol	
	pK_a	HNP	pK_a	HNP	pK_a	HNP	pK_a	HNP
177	16.55	-487	16.83	-506	-	-	12.66	-280
178	16.42	-478	16.42	-481	15.58	-472	-	-
179	16.05	-464	16.27	-470	-	-	-	-
180	-	-	15.18	-417	-	-	-	-
181	14.67	-390	-	-	-	-	-	-
182	14.20	-360	16.43	-486	-	-	-	-
183	14.16	-362	16.58	-489	-	-	-	-
184	-	-	16.09	-464	14.15	-363	15.44	-440

4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin asitlik özellikleri her bir R grubu için değişik susuz ortam çözücülerinde potansiyometrik metotla incelendi. Yapılan çalışmalarda 8 farklı 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin p*K*_a ve HNP değerleri tayin edildi. 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sulu ortamdaki çözünürlüğü çok az olduğundan susuz ortam çözücülerini tercih edildi. Çözücü olarak amfiprotik ve dipolar aprotik çözücülerden izopropil alkol, *tert*-butil alkol, aseton ve *N,N*-dimetilformamid kullanıldı. Titrasyonda titrant olarak yaygın kullanılan tetrabutyl amonyum hidroksidin (TBAH) izopropil alkoldeki çözeltisi kullanıldı.

Sonuçlar çözücülerin dielektrik sabitine göre incelendiğinde teorik olarak asitlik sıralaması dielektrik sabitinin artmasıyla asitlik artar. Bu sonuca göre asitlik artışı *tert*-butil alkol < izopropil alkol < aseton < *N,N*-dimetilformamid şeklindedir. Elde edilen sonuçlara göre incelendiğinde bileşiklerin çözücülerdeki sıralamaları aşağıdaki gibidir:

- 177:** İzopropil alkol > *N,N*-dimetilformamid > Aseton
- 178:** *tert*-Butil alkol > *N,N*-dimetilformamid > Aseton
- 179:** *N,N*-Dimetilformamid > Aseton
- 180:** Aseton
- 181:** *N,N*-Dimetilformamid
- 182:** *N,N*-Dimetilformamid > Aseton
- 183:** *N,N*-Dimetilformamid > Aseton
- 184:** *tert*-Butil alkol > izopropil alkol > Aseton

Dielektrik sabitine göre asitlik kuvvetleri irdelendiğinde izopropil alkol ve *tert*-butil alkol'ün dielektrik sabitleri sırasıyla 19.4 ve 12.0 olan çözücülerdeki 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerini asitliklerinin dielektrik sabiti büyük olan çözücüde (izopropil alkolde) daha asidik olması beklenir. 176 tipi bileşiklerde sadece 177 ve 184 bileşiklerinde izopropil alkolde asitlik değerleri elde edilmiştir. Ancak sadece 184 bileşiğinde sıralama yapılabilmiş ve teorik sıralamanın aksine *tert*-butil alkolde daha asidik değer tayin edilememiştir. Diğer bileşiklerden 177, 180, 179, 181, 183 ve 182 bileşiklerinin *tert*-butil alkolde, 177 ve 184 bileşikleri dışındaki tüm bileşiklerin

izopropil alkoldeki asitlik deęerleri titrasyon eęrilerinde tipik S Őekli elde edilemedięinden tayin edilememiŐtir.

Dipolar aprotik özücüler incelendięinde asitlik kuvvetindeki artış aseton < *N,N*-dimetilformamid sıralamasında olması beklenir. 181 bileŐięinin asetondaki, 184, 180 bileŐięinin *N,N*-dimetilformamiddeki asitlik deęerleri grafikten hesaplanamadıęından sıralamaya alınamamıŐtır.

Bilindięi gibi dipolar aprotik özücüler liyonyum iyonu verdikleri halde liyat iyonu vermezler. Moleküler asit HA ve özücü S olduęunda protofilik (*N,N*-dimetilformamid gibi) özücülerde denge,



Őeklinindedir. (179) numaralı dengelerde protofilik özücülerde birinci ve ikinci dengeler büyük oranda gerekleŐirken üçüncü denge ok düşük oranda saęa kayar. Üçüncü dengedeki serbest SH^+ ortamda bulunabilecek en kuvvetli asittir ve titrantla doęrudan reaksiyona girebilir. Ancak özücü profobik (aseton gibi) ise (179) dengesi ok daha düşük oranda saęa kayar. Üçüncü denge ise eser oranda meydana gelir. Böyle profobik özücüde meydana gelen SH^+ iyonu, protofilik özücüde meydana gelenden ok daha kuvvetli asittir. Bu teorik aıklamaya dayanarak alıŐılan asitlerin oęunluęunda aseton ortamında *N,N*-dimetilformamiddekinden daha asidik olması aıklanabilir.

Fonksiyonel gruplara göre incelendięinde: R fonksiyonel gruplarının asidik protona olan uzaklıęı nedeniyle etkisi ok azdır. Her bir özücüye göre bileŐiklerin asitlikleri incelendięinde

İzopropil alkol ortamında : 177 > 184

***N,N*-Dimetilformamid ortamında** : 182 > 183 > 181 > 179 > 178 > 177,

***tert*-Butil Alkolde** : 184 > 178

Aseton ortamında : 180 > 184 > 179 > 178 > 182 > 183 > 177

şeklinde belirlendi.

Asitlik kuvvetindeki bu sıralamaya C-1'e bağlı farklı grupların etkisinin yanında literatürde de yer aldığı gibi asitlik kuvvetine London çekim kuvvetleri, çözünürlük gibi faktörlerin de etkili olduğu düşünülmektedir.

Çözücülerin farklandırma ve seviyeleme etkileri incelendiğinde bileşiklerinin kullanılan çözücülerde farklandırıldığı görüldü.

4.4. Antioksidan İncelemesi Sonuçlarının Değerlendirilmesi

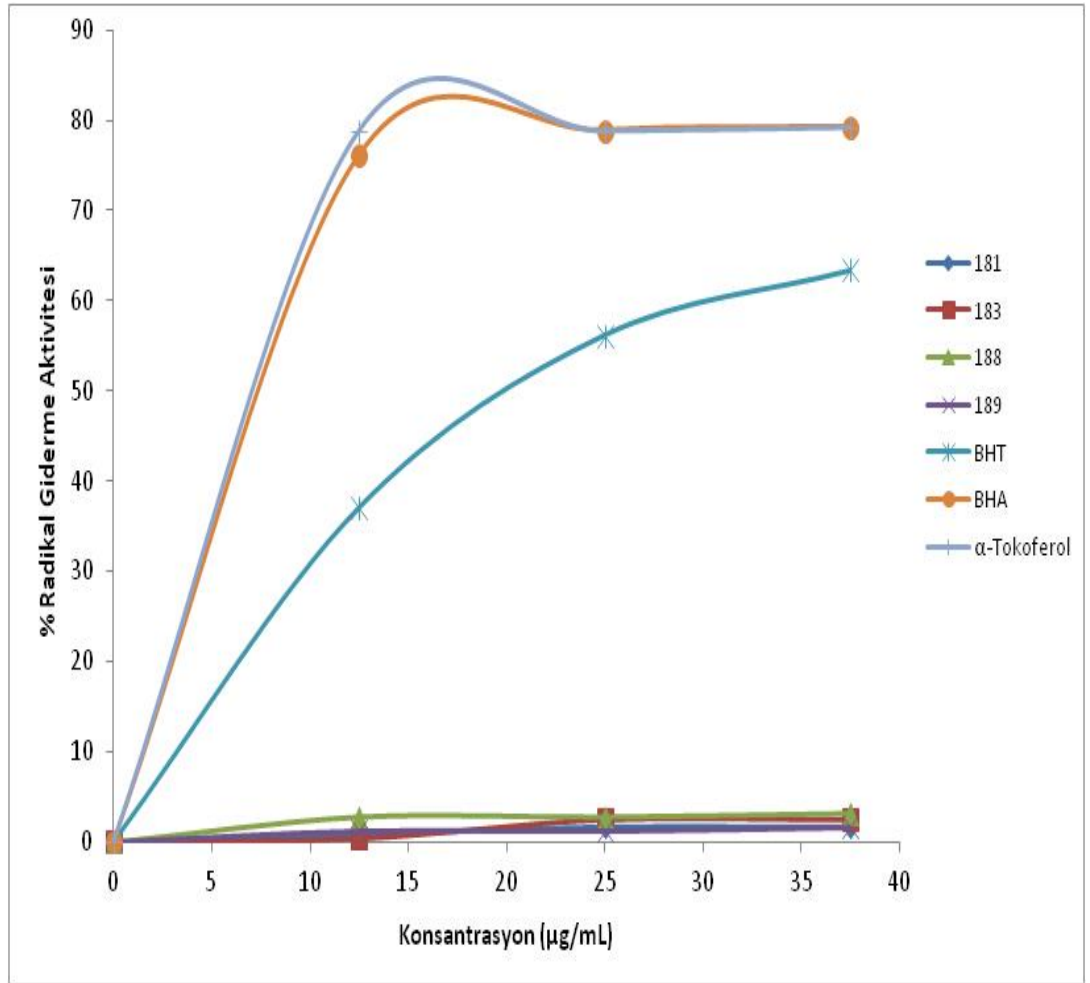
4.4.1. İndirgeme Gücü

Sentezlenen bileşiklerin yapılan indirgeme gücü testleri sonucunda ele geçen bulgular Tablo 3.141'de verilmiştir. 700 nm'de yapılan ölçümlerde sentezlenen bileşiklerin absorbanlarının, kontrole göre düşük çıkması bileşiklerin indirgeyici özelliklerinin olmadığını göstermektedir.

4.4.2. Serbest Radikal Giderme Aktivitesi

Sentezlenen yeni bileşikler, Tablo 3.142'de anlaşılacağı üzere, kontrole yakın değerlerde absorban değerlerine sahiptir ve standart antioksidanlar ile karşılaştırıldıklarında

bileşiklerin radikal giderme aktivitesine sahip olmadıkları görülmektedir. Bununla beraber 181, 183, 188 ve 189 bileşikleri, diğer bileşiklere kıyasla anlamlı olarak, çok düşük de olsa radikal giderme aktivitesinde artış gösterdikleri için verileri grafiğe geçirilmiş ve aşağıda verilmiştir. Şekil 4.17'deki grafikte bu bileşiklerin ve standart antioksidanların 517 nm'de değişen derişimlerde yapılan ölçümlerde serbest radikal giderme aktiviteleri % inhibisyon olarak görülmektedir.

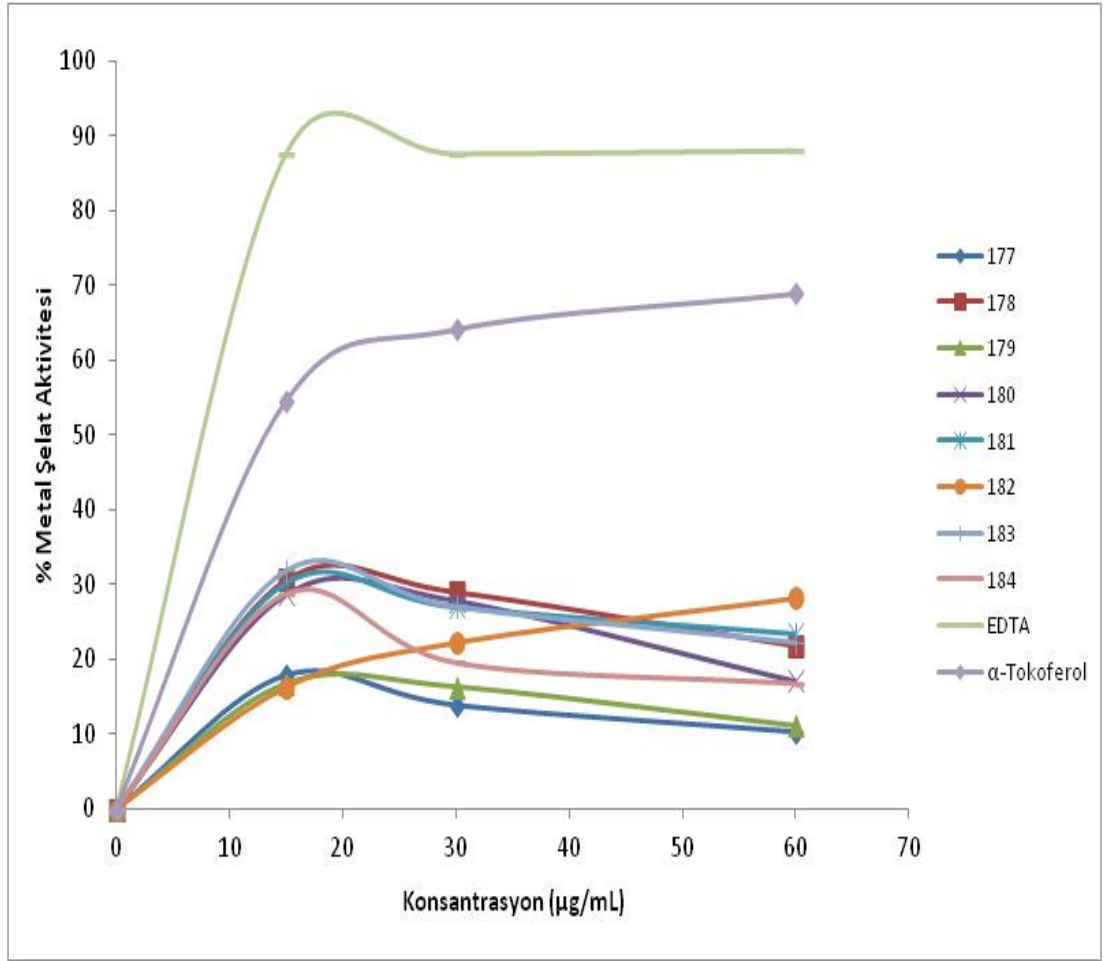


Şekil 4.17. 181, 183, 188 ve 189 bileşiklerinin konsantrasyona karşı % Serbest Radikal Giderme Aktiviteleri

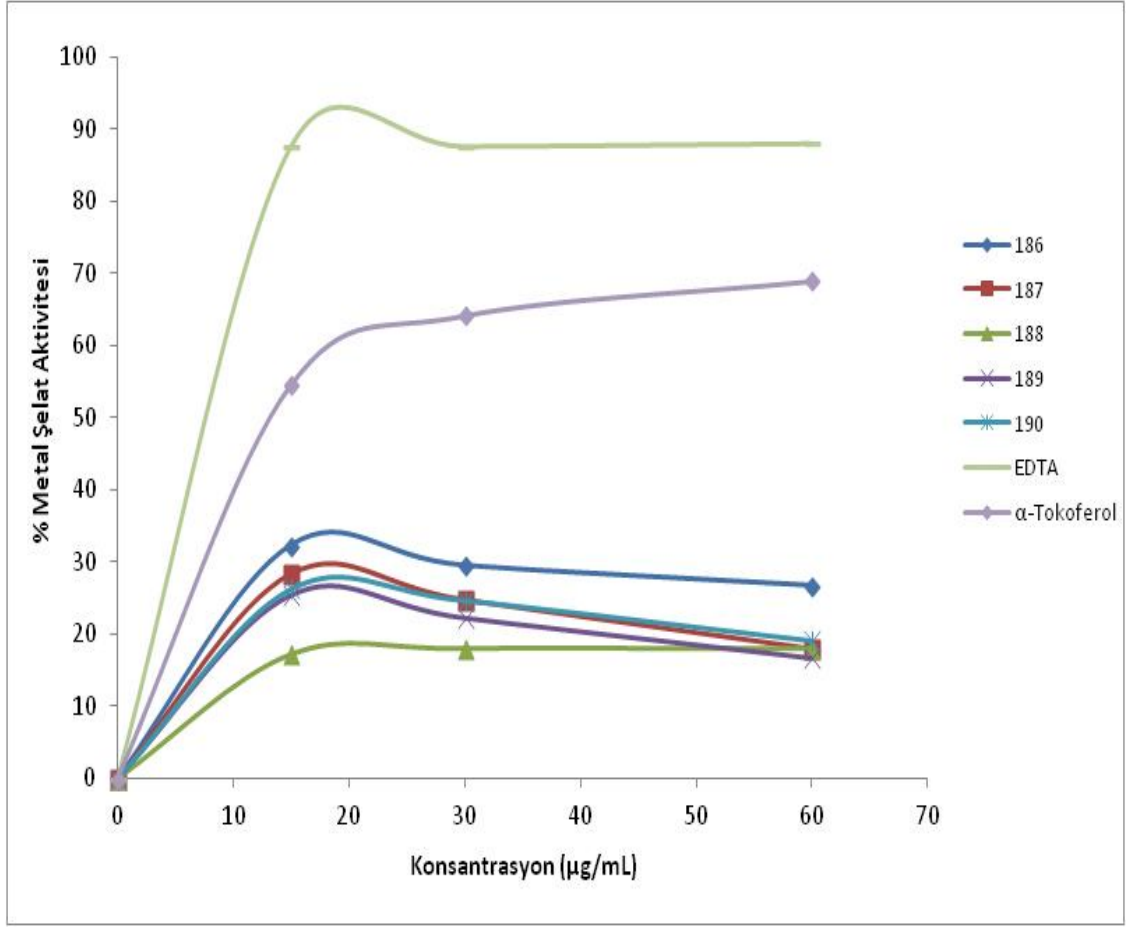
4.4.3. Metal Şelat Aktivitesi

Şekil 4.18-19'daki grafikde sentezlenen bileşiklerin ve standartların metal şelatlama aktiviteleri % inhibisyon olarak gösterilmektedir. Tablo 3.143'te ve grafiklerde 176 ve

185 tipi bileşiklerin, 182 ve 188 bileşikleri hariç, metal şelatlama aktivitesine sahip olmadıkları görülmektedir. Çünkü artan konsantrasyon ile absorbansın düşmesi beklenirken, 182 ve 188 bileşikleri dışında diğer tüm bileşiklerde absorbanslar artmaktadır ve yalnızca en düşük konsantrasyonu dikkate alacak olursak bu bileşiklerin standart antioksidanlardan α -tokoferole göre orta düzeyde şelatlama gösterdikleri görülmektedir. Bir sıralama yapmak gerekirse; EDTA > α -tokoferol > 182 > 188 şeklinde yazılabilir.



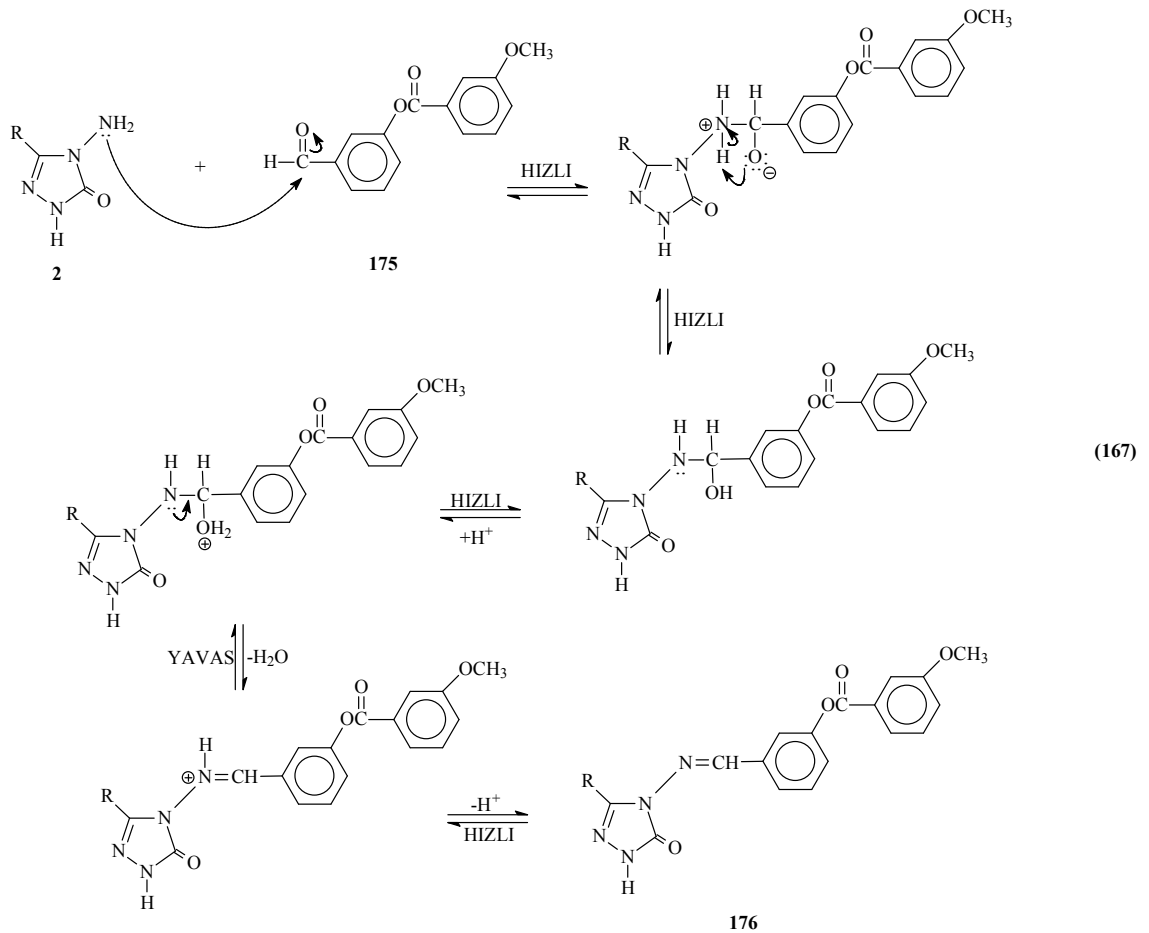
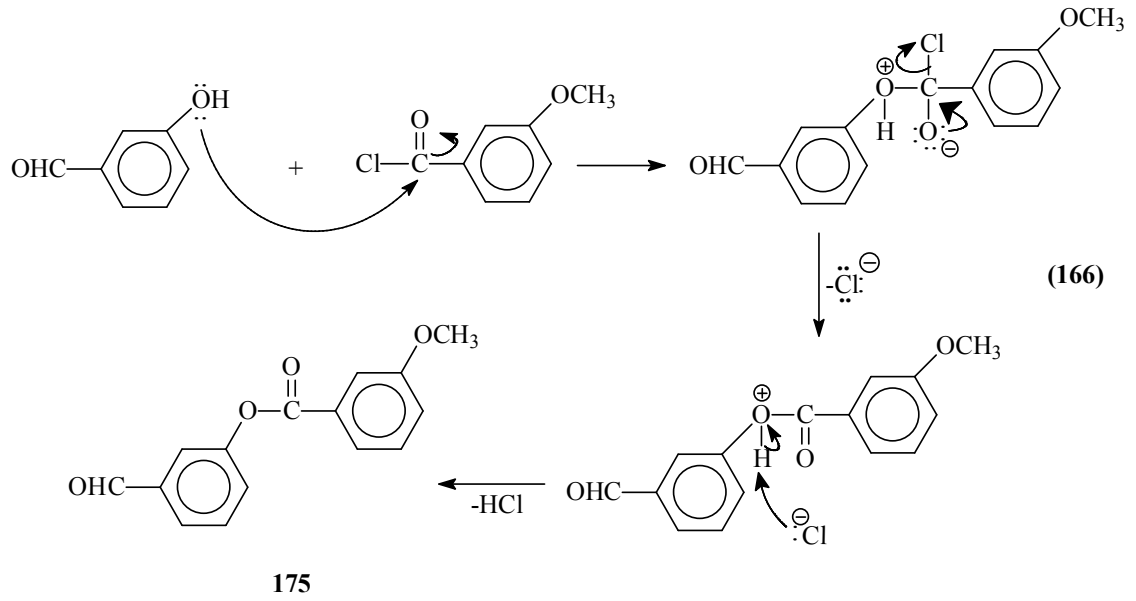
Şekil 4.18. 176 Tipi bileşiklerin konsantrasyona karşı % Metal Şelat Aktiviteleri



Şekil 4.19. 185 Tipi Bileşiklerin Konsantrasyona Karşı % Metal Şelat Aktiviteleri

4.5. İncelenen Reaksiyonların Mekanizmaları

Tez kapsamında öncelikle 3-hidroksibenzaldehid soğukta ve trietilamin varlığında 3-metoksibenzoil klorür ile muamelesinden benzaldehid türevi olan 175 bileşiği elde edilmiştir. Bu reaksiyonun muhtemel mekanizması aşağıda verilmiştir (Denklem 166).



Tez kapsamında, öncelikle benzaldehid bileşiği olan 175 sentezlendikten sonra bu bileşiğin 2 tipi 3-alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşikleriyle

asetik asitteki reaksiyonundan birer Schiff bazı olan 176 tipi bileşikler elde edilmiştir. Asidik ortamda daha kolay olduğu bilinen [252-254] bu reaksiyonun muhtemel mekanizması iki basamağı kapsar. Birinci basamakta 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on halkasına bağılı amino grubunun azotunun aromatik aldehid karbonil karbonuna nükleofilik saldırısı, ikinci basamakta ise oluşan katılma ürününden H₂O eliminasyonu ile Schiff bazının oluşumu gerçekleşir (Denklem 167).

5. KAYNAKLAR

- [1] Eydemir, H. “Biyolojik aktif bazı maddelerin teorik olarak İncelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir, (2010).
- [2] Turan-Zitouni, G., Kaplancikli, Z. A., Yildiz, M. T., Chevallet, P., Kaya, D., “Synthesis and antimicrobial activity of 4-phenyl/cyclohexyl-5-(1-phenoxyethyl)-3-[*n*-(2-thiazolyl)acetamido]thio-4*H*-1,2,4-triazole derivatives”, Eur. J. Med. Chem., 40 (6): 607-613 (2005).
- [3] Bayrak, H., Demirbas, A., Demirbas, N., Karaoglu, S. A., “Cyclization of some carbothioamide derivatives containing antipyrine and triazole moieties and investigation of their antimicrobial activities”, Eur. J. Med. Chem., 45 (11): 4726-4732 (2010).
- [4] Sancak, K., Unver, Y., Kazak, C., Dugdu, E., Arslan, B., “Synthesis and characterisations of some new 2,4-dihydro-[1,2,4]-triazol-3-one derivatives and X-ray crystal structures of 4-(3-phenylallylideneamino)-5-thiophen-2-yl-methyl-2,4-dihydro-[1,2,4]triazol-3-one”, Turk. J. Chem., 34 (5): 771-780 (2010).
- [5] Ikizler, A. A., Ikizler, A. Yüksek, H., Serdar, M., “Antitumor activities of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, Modelling, Measurement & Control C, AMSE press, 57: 25-33 (1998).
- [6] Guzeldemirci, N. U, Kucukbasmaci, O., “Synthesis and antimicrobial activity evaluation of new 1,2,4-triazoles and 1,3,4-thiadiazoles bearing imidazo[2,1-*b*]thiazole moiety”, Eur. J. Med. Chem., 45 (1): 63-68 (2010).
- [7] Hashem, A. I., Youssef, A. S. A., Kandeel, K. A., Abou-Elmalgd, W. S. I., “Conversion of some 2(3*H*)-furanones bearing a pyrazolyl group into other heterocyclic systems with a study of their antiviral activity”, Eur. J. Med. Chem., 42 (7): 934-939 (2007).
- [8] Bektas, H., Demirbas, A., Demirbas, N., Bayrak, H., Karaoglu, S. A., “Synthesis and antimicrobial activities of some new biheterocyclic compounds containing 1,2,4-triazol-3-one and 1,3,4-thiadiazole moieties”, Turk. J. Chem., 34 (4): 517-527 (2010).
- [9] Aytac, S. P., Tozkoparan, B., Kaynak, F. B., Aktay, G., Goktas, O., Unuvar, S., “Synthesis of 3,6-disubstituted 7*H*-1,2,4-triazolo[3,4-*b*]-1,3,4-thiadiazines as novel analgesic/anti-inflammatory compounds”, Eur. J. Med. Chem., 44 (11): 4528-4538 (2009).
- [10] Tozkoparan, B., Kupeli, E., Yesilada, E., Ertan, M., “Preparation of 5-aryl-3-alkylthio-1,2,4-triazoles and corresponding sulfones with anti-inflammatory-analgesic activity”, Bioorgan. Med. Chem., 15 (4): 1808-1814 (2007).

- [11] Alkan, M., Yuksek, H., Islamoglu, F., Bahceci, S., Calapoglu, M., Elmastas, M., Aksit, H., Ozdemir, M., "A study on 4-acylamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", *Molecules*, 12 (8): 1805-1816 (2007).
- [12] Kucukguzel, S. G., Rollas, S., Erdeniz, H., Kiraz, M., Ekinci, A. C., Vidin, A., "Synthesis, characterization and pharmacological properties of some 4-arylhydrazono-2-pyrazoline-5-one derivatives obtained from heterocyclic amines", *Eur. J. Med. Chem.*, 35 (7-8): 761-771 (2000).
- [13] Zahid, H. C., Sajjad, H. S., Moulay, H. Y., Taibi, B. H., "Metal based biologically active compounds: Design, synthesis, and antibacterial/antifungal/cytotoxic properties of triazole-derived schiff bases and their oxovanadium(IV) complexes", *Eur. J. Med. Chem.*, 45: 2739-2747 (2010).
- [14] Shalini, M., Yogeewari, P., Sriram, D., Stables, J. P., "Cyclization of the semicarbazone template of aryl semicarbazones: synthesis and anticonvulsant activity of 4,5-diphenyl-2*H*-1,2,4-triazol-3(4*H*)-one", *Biomed. Pharmacother.*, 63: 187-193 (2009).
- [15] Ashton, W. T., Cantone, C. L., Chang, L. L., Hutchins, S. M., Strelitz, R. A., MacCoss, M., Chang, R. S. L., Lotti, V. J., Faust, K. A., "Nonpeptide angiotensin- II antagonists derived from 4*H*-1,2,4-triazoles and 3*H*-imidazo[1,2-*b*][1,2,4]triazoles", *J. Med. Chem.*, 36 (5): 591-609 (1993).
- [16] Naito, Y., Akahoshi, F., Takeda, S., Okada, T., Kajii, M., Nishimura, H., Sugiura, M., Fukaya, C., Kagitani, Y., "Synthesis and pharmacological activity of triazole derivatives inhibiting eosinophilia", *J. Med. Chem.*, 39 (15): 3019-3029 (1996).
- [17] Takaoka, M., Manabe, S., Yamoto, T., Teranishi, M., Matsunuma, N., Masuda, H., Goto, N., "Comparative-study of goitrogenic actions of 3-substituted 1,2,4-triazoles in rats", *J. Vet. Med. Sci.*, 56 (2): 341-346 (1994).
- [18] Klimešová, V., Zahajská, L., Waissner, K., Kaustová, J., Möllmann, U., "Synthesis and antimycobacterial activity of 1,2,4-triazole 3-benzylsulfanyl derivatives", *Il Farmaco*, 59 (4): 279-288 (2004).
- [19] Wujec, M., Pitucha, M., Dobosz, M., Kosikowska, U., Malm, A., "Synthesis and potential antimycotic activity of 4-substituted-3-(thiophene-2-yl-methyl)- Δ^2 -1,2,4-triazoline-5-thiones", *Acta Pharm.*, 54 (3): 251-260 (2004).
- [20] Rostom, S. A. F., Shalaby, M. A., El-Demellawy, M. A., "Polysubstituted pyrazoles, part 5. synthesis of new 1-(4-chlorophenyl)-4-hydroxy-1*H*-pyrazole-3-carboxylic acid hydrazide analogs and some derived ring systems. a novel class of potential antitumor and anti-hcv agents", *Eur. J. Med. Chem.*, 38 (11-12): 959-974 (2003).

- [21] Woodward, L. A. , “Int. Theory and Mol. Vibration Spectroscopy”, Oxford, (1972).
- [22] Barrow, G.M. , “Molecular Spectroscopy”, Mc. Graw -Hill, New York, (1962).
- [23] Chang, R. , “Basic Principles of Spectroscopy”, Mc. Graw -Hill, New York, (1971).
- [24] Gümüştüfek, İ., “2-Fenilbenzimidazolasit molekülünün titreşimsel spektrumlarının teorik ve deneysel yöntemlerle incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Nevşehir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Nevşehir, (2013).
- [25] Whiffen , D. H. , “Spectroscopy”, Second Edition, Longman London, (1971).
- [26] Akyüz, S. , “An Infrared and Raman Spectroscopic Investigation of Copper (II)” Journal of Inclusion Phenomena, 4:219-223 (1986).
- [27] Banwell, C.N. , “Fundamentals of Molecular Spectroscopy”, 3.ed., Mc.Graw Hill, London, (1983).
- [28] Kurt. M., Doktora Tez. Gazi Üniv. Fen Bil. Enst. Ankara, (2003).
- [29] Cotton, F. A., “Chemical Applications of Group Theory 2nd ed.” Wiley, London, (1971).
- [30] Apaydın, F., “Magnetik Rezonans”, Hacettepe Üniversitesi, 3, 6-8 (1991).
- [31] Gündüz, T., “İnstrümental Analiz”, Gazi Kitapevi Tic. Ltd. Şti., 749-769 (2002).
- [32] Gans, P., “Vibrating Molecules”, Chapman and Hall, 18-59 (1971).
- [33] Atkins, P., W., Friedman, R., S., 1997, “Molecular Quantum Mechanics”, Third Edition, Oxford University Press, 335 (1997).
- [34] Alpert, N., L., Keiser, W.,E., Szymanski, H., A., “IR Theory and Practice of Infrared Spectroscopy”, Plenum Press, 379 (1964).
- [35] Mc. Cullough, R.L., Jones, L. H. And Crosby, G. A., “An analysis of the vibrational spectrum of the tetracyanonickelate (II) Ion in a crystal lattice”, Spectrochim Acta, 16, 929 (1960).
- [36] Herzberg, G., “Molecular Spectra and Molecular Structure, II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules”, VRN Company, 35, 190-241 (1945).

- [37] Rao, C., "Chemical Application of Infrared Spectroscopy", Academic Press Inc., 50-85 (1963).
- [38] Colthup, N., B., Daly, L., H., Wiberley, S., E., "Introduction to Infrared and Raman", Academic Press Inc., (1964).
- [39] Davies, M., "Infrared Spectroscopy and Molecular Structure", Elsevier, (1963).
- [40] Alpert, N., L., Keiser, W., E. and Szymanski, H., A., "IR theory and practica of infrared spectroscopy", Second edition, Plenum press, (1970).
- [41] Avcı D., "Heteroatom içeren bazı aromatik molekülerin lineer olmayan optik ve spektroskopik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi", Doktora Tezi, Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya, (2009).
- [42] Günay, N., "Bromo ve kloro kumarin karboksilatların geometrik ve spektroskopik özelliklerinin teorik olarak incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kocaeli Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kocaeli, (2010).
- [43] Slichter, C., P., "Manyetik Rezonansın İlkeleri", Ankara Üniversitesi Basımevi, 292, (1984).
- [44] Roger, R., Neilson, O. G., "The chemistry of imidates", Chem. Rev., 61: 179-211 (1961).
- [45] Pinner, A., "Die imidoäther und ihre derivate", 1.Auflage, Oppenheim, Berlin (1892).
- [46] Sykes, P., "A guidebook to mechanizm in organic chemistry", Fourth Edition, Great Britain (1977).
- [47] Milcent, R., Redeuilh, C., "Synthesis of 4-amino-3-aryl-1,2,4-triazol-5(4H)-ones", J. Heterocycl. Chem., 16 (2): 403-407 (1979).
- [48] Pesson, M., Dupin, S., Antoine, M., "Emploi de l'hydrazinocarbonate d'ethyle pour la synthèse des hydroxy-3 triazoles-1,2,4", Bull. Soc. Chim. France, 1364-1371 (1962).
- [49] Ün, R., İkizler, A., "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 (1975).
- [50] Yüksek, H., "3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1,2,4-triazol-5-on'ların bazı reaksiyonlarının incelenmesi", Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon (1992).

- [51] İkizler, A. A., Yüksek, H., "Acetylation of 4-amino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Org. Prep. Proced. Int., 25: 99-105 (1993).
- [52] Karabacak, E., "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, (1998).
- [53] Karabacak, M., "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, (1998).
- [54] Kara, E., "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, (2000).
- [55] İkizler, A. A., "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, (1975).
- [56] İkizler, A. A., Ün, R., "Reactions of ester ethoxycarbonylhydrazones with some amine type compounds", Chim. Acta Turc., 7: 269-290 (1979).
- [57] Ün, R., İkizler, A. A., "Preparations of aromatic amide carbethoxyhydrazones, aromatic amide carbamyhydrazones and related 3-aryl- Δ^2 -1,2,4-triazolin-5-ones", Chim. Acta Turc., 3: 1-22 (1975).
- [58] İkizler, A., İkizler, A. A., Yüksek, H., "Adipik asit dihidrazin bazı iminoesterler ile reaksiyonu", Doğa TU Kim. D. C., 13: 7-12 (1989).
- [59] İkizler, A. A., Yüksek, H., Bahçeci, S., "¹H-NMR spectra of some ditriazolyls and ditriazolylalkanes", Monatsh. Chem., 123 (1-2): 191-198 (1992).
- [60] İkizler, A. A., İkizler, A., Yüksek, H., Bahçeci, Ş., Sancak, K., "Synthesis of some tert-butoxyhydrazones and related 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Tr. J. Chem., 18 (9): 51-56 (1994).
- [61] İkizler, A., "Bazı 1,2,4-triazol türevlerinin sentezi", Doğa Bilim Dergisi Temel Bilm., 7: 31-36 (1983).
- [62] Ayça, E., İkizler, A. A., Aslan, R., "Preparations and some reactions of aromatic ester thiosemicarbazones", Chim. Acta Turc., 12: 305-314 (1984).
- [63] Ayça, E., İkizler, A. A., Serdar, M., "Preparation of 3-alkyl(aryl)-4-aryl- Δ^2 -1,2,4-triazolin-5-ones", Chim. Acta Turc., 9: 99-108 (1981).
- [64] Yavuz E., "Bazı 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi", Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1997).

- [65] İkizler, A. A., Serdar, M., Uzunismail, N., "Bazı 1,2,4-triazolin-5-on türevlerinin elde edilmesi", Doğa TU Kim. D. C., 12: 271-275 (1988).
- [66] Ayça, E., İkizler, A. A., Serdar, M., "Preparation of 3-alkyl(aryl)-4-aryl- Δ^2 -1,2,4-triazolin-5-ones", Chim. Acta Turc., 9: 99-108 (1981).
- [67] İkizler, A. A., İkizler, A., Yüksek, H., "¹H-NMR spectra of 3-alkyl(aryl)-4, Magn. Reson. Chem., 31 (12): 1088-1090 (1993).
- [68] İkizler, A. A., Yüksek, H., "Synthesis of 3-alkyl-4-(2-hydroxyethyl) and 3-alkyl-4-(2-chloroethyl)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Doğa-Tr. J. Chem., 16: 284-288 (1994).
- [69] İkizler, A. A., Sancak, K., "Synthesis of 4-hydroxy-4,5-dihydro-1,2,4-triazol-5-ones", Monatsh. Chem., 123 (3): 257-263 (1992).
- [70] Yüksek, H., Kucuk, M., Alkan, M., Bahceci, S., Kolaylı, S., Ocak, Z., Ocak, U., Sahinbas, E., Ocak, M., "Synthesis and antioxidant activities of some new 4-(4-hydroxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives with their acidic properties", Asian J. Chem., 18 (1): 539-550 (2006).
- [71] Bahceci, S., Yüksek, H., Ocak, Z., Koksall, C., Ozdemir, M., "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 (2002).
- [72] Yüksek, H., Ucuncu, O., Alkan, M., Ocak, Z., Bahceci, S., Ozdemir, M., "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 (2005).
- [73] Yüksek, H., Demirbaş, A., İkizler, A., Johansson, C. B., Çelik, C., İkizler, A. A., "Synthesis and antibacterial activities of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Arzneim.-Forsch/Drug Res., 47 (4): 405-409 (1997).
- [74] İkizler, A. A., Demirbas, A., Johansson, C. B., Celik, C., Serdar, M., Yüksek, H., "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 (1998).
- [75] Alkan, M., "Bazı 3-alkil(aryl)-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, (2001).
- [76] Yüksek, H., Bahçeci, Ş., 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 (1998).

- [77] Gürsoy-Kol, Ö., “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, (2008).
- [78] İkizler, A. A., Yüksek, H., “Synthesis of some *N,N'*-linked biheteroaryles”, Doğa Tr. J. Chemistry, 17: 150-153 (1993).
- [79] İkizler, A. A., Yüksek, H., “Reaction of 4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones with 2,5-dimetoxytetrahydrofuran”, Collect. Czech. Chem. Commun., 59 (3): 731-735 (1994).
- [80] Yüksek, H., İkizler, A. A., “Synthesis of 4-succinimido-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, Tr. J. Chem., 18: 57-61 (1994).
- [81] İkizler, A. A., Yüksek, H., “A study on 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, Rev. Roum. Chem., 41 (7-8): 585-590 (1996).
- [82] Bahçeci, Ş., “Bazı biheteroaril bileşiklerinin sentezi ve özelliklerinin incelenmesi”, Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1994).
- [83] İkizler, A., Bahçeci, Ş., İkizler, A. A., “Synthesis of new 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, Indian J. Chem. Sect. B, 35 (2): 137-140 (1996).
- [84] İkizler, A., Bahçeci, Ş., İkizler, A. A., “Synthesis of some new *N,N'*-linked biheteroaryls”, Polish J. Chem., 69 (11): 1497-1502 (1995).
- [85] İnce, N., “3-Alkil(aril)-4-Amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on’ların bazı karboksilli asit anhidritleri ile reaksiyonlarının incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1995).
- [86] Becker, H. G. O., Timpe, H. J., “Synthesis and reactions of 1-alkyl-4-sulfonylimino-1,2,4-triazolium ylides”, J. Prakt. Chem., 312 (6): 1112-1120 (1970).
- [87] Kim, H. R., Song, J. H., Ryu, E. K., “Study on the alkylation and sulfonylation of 3-aryl-1-methyl-1,2,4-triazolin-5-ones”, Synth. Commun., 24 (21): 3065-3071 (1994).
- [88] Dogan, N., İkizler, A., Johannson, C. B., İkizler, A. A., “Synthesis and antibacterial activities of some new arenesulfonamides and urea derivatives”, Acta Pol. Pharm., 53 (4): 277-281 (1996).
- [89] Doğan, N., “Bazı 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-Triazol-5-on türevlerinin sentezi ve özelliklerinin incelenmesi, Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon (1995).
- [90] Bahçeci, S., Yüksek, H., Ocak, Z., Azaklı, I., Alkan M., Ozdemir, M., “Synthesis and potentiometric titrations of some new 4-(benzylideneamino)-

4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives in non-aqueous media”, Collect. Czech. Chem. Commun., 67 (8): 1215-1222 (2002).

- [91] Ikizler, A., Dogan, N., Ikizler, A. A., “The acylation of 4-amino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones”, Rev. Roum. Chim., 43 (8): 741-746 (1998).
- [92] Yüksek, H., Alkan, M., Çakmak, İ., Ocak, Z., Bahçeci, Ş., Calapoğlu, M., Elmastaş, M., Kolomuç, A., Aksu, H., “Preparation, GIAO NMR calculations and acidic properties of some novel 4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives with their antioxidant activities”, Int. J. Mol. Sci., 9, 12-32 (2008).
- [93] Yüksek, H., Ocak, Z., Alkan, M., Bahçeci, Ş., Özdemir, M., “Synthesis and determination of pK_a values of some new 3,4-disubstituted-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives in non-aqueous solvents”, Molecules, 9: 232-240 (2004).
- [94] Yüksek, H., Alkan, M., Ocak, Z., Bahçeci, S., Ocak, M., Özdemir, M., “Synthesis and acidic properties of some new potential biologically active 4-acylamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives”, Indian J. Chem., 43 (7): 1527-1531 (2004).
- [95] Yüksek, H., Alkan, M., Bahçeci, S., Çakmak, I., Ocak, Z., Baykara, H., Aktaş, O., Ağyel, E., “Synthesis, determination of pK_a values and GIAO NMR calculations of some new 3-alkyl-4-(p-methoxybenzoylamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones”, J. Mol. Struct., 873: 142-148 (2008).
- [96] Ikizler, A. A., Ikizler A., Yıldırım, N., “Synthesis of some benzylidenamino compounds”, Monatsh. Chem., 122 (6-7): 557-563 (1991).
- [97] İkizler, A. A., Yıldırım, N., Yüksek, H., “Synthesis of some arylidenamino compounds”, Modelling, Measurement & Control C, 54: 21-30 (1996).
- [98] Ikizler, A. A., Uçar, F., Yüksek, H., Aytin, A., Yasa, I., Gezer, T., “Synthesis and antifungal activity of some new arylidenamino compounds”, Acta Pol. Pharm., 54 (2): 135-140 (1997).
- [99] Köksal, C., “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, (2001).
- [100] Yüksek, H., Kolaylı, S., Küçük, M., Yüksek, M.Ö., Ocak, U., Şahinbaş, E., Sivrikaya, E., Ocak, M., “Synthesis and Antioxidant Activities of Some 4-Benzylidenamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives”, Indian J. of Chem. Sect. B, 45B, 715-718 (2006).
- [101] Yüksek, H., Bahçeci, Ş., Ocak, Z., Köksal, C., Özdemir, M., “Synthesis and Potentiometric Titration of Some New 4,5-Dihydro-1H-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, (2002).

- [102] Ocak, M., Yüksek, H., Kolaylı, S., Küçük, M., Ocak, Ü., Bahçeci, Ş., Alkan, M., Şahinbaş, E. ve Yıldırım, N., "Triazol halkası içeren bazı schiff bazlarının antioksidan özellikleri", XVIII. Ulusal Kimya Kongresi, Kars, 556 (2004).
- [103] Yüksek, H., Ocak, Z., Özdemir, M., Ocak, M., Bekar, M., Aksoy, M., "A study on novel 4-heteroarylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Indian J. Heterocycl. Chem., 13 (1): 49-52 (2003).
- [104] Bekar, M., "Bazı 4-arilidenamino-4,5-dihidro-1,2,4-triazol-5-on'ların sentezi ve özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1996).
- [105] Aksoy, M., "Bazı 3,4-disubstitue-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin *N*-asetil türevlerinin sentezi, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1997).
- [106] Yokuş, Ö. A., "Bazı yeni 1,2,4-triazol türevlerinin sentezi ve biyolojik aktivitelerinin incelenmesi", Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2012).
- [107] Ermiş, B., "Bazı amino triazollerden arilidenamino türevlerinin sentezi, Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1996).
- [108] Mutlu, T., "Bazı 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin asetik anhidrid ile reaksiyonları", Yüksek Lisans Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (1998).
- [109] Yüksek, H., Bahçeci, S., Ocak, Z., Alkan, M., Ermiş, B., Mutlu, T., Ocak, M., Özdemir, M., "Synthesis of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Indian J. Heterocycl. Ch., 13 (4): 369-372 (2004).
- [110] Yüksek, H., Bahçeci, S., Ocak, Z., Özdemir, M., Ocak, M., Ermiş, B., Mutlu, T., "Synthesis and determination of acid dissociation constants of some new 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives", Asian J. Chem., 17 (1): 195-201 (2005).
- [111] Yüksek, H., Gökçe, G., Zeybek, B., Bahçeci, Ş., Kılıç, E., "Electrochemical behaviour of some 3,4-disubstitue-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", 3rd Black Sea Basin Conference on Analytical Chemistry (3rd BBCAC), Constanta, Romania, 121-122 (2005).
- [112] Gökçe, G., Yüksek, H., Demirel, A., Bahçeci, Ş., Kılıç, E., "Electrochemical behaviour of some 4-(4-methoxybenzylidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives", 3rd Black Sea Basin Conference on Analytical

Chemistry (3rd BBCAC), Constanta, Romania, 129-130 (2005).

- [113] Kardaş, F., “Bazı yeni 3-substitue-4-(4-metiltiyobenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, potansiyometrik titrasyonları ve antioksidan özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2006).
- [114] Aktaş, Ö., “Bazı yeni 4-(3-fenoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, antioksidan ve asidik özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2006).
- [115] Akyıldırım, O., “3-Alkil(aril)-4-(4-karboksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve susuz ortam titrasyonları”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2005).
- [116] Albayrak, Ö., “Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-[2-(p-toluensulfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve susuz ortam titrasyonları”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2008).
- [117] Medetalibeyoğlu, H., “Bazı Yeni 4-[2-(4-nitrobenzoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve asitlik sabitlerinin tayini”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2008).
- [118] Kol, Ö. G., Yüksek, H., “Synthesis and *in vitro* antioxidant evaluation of some novel 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives”, E-Journal of Chem., 7 (1): 123-136 (2010).
- [119] Yüksek, H., Kol, Ö. G., “Preparation, characterization and potentiometric titrations of some new di-[3-(3-alkyl/aryl-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one-4-yl)-azomethinphenyl]isophthalate/terephthalate derivatives”, Turk. J. Chem., 32 (6): 773-784 (2008).
- [120] Alkan, M., Yüksek, H., Kol, Ö. G., and Calapoğlu, M., “Synthesis, acidity and antioxidant properties of some novel 3,4-disubstitued-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one-derivatives”, Molecules, 13: 107-121 (2008).
- [121] Cüce, Y., “Bazı yeni 4-(4-etoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması, antioksidan ve bazı özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2007).
- [122] Manap, S., “Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(3,4-disubstituebenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması, antioksidan ve asitlik özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas

Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2009).

- [123] Üre, S., “Bazı 1-metil-3-alkil(aril)-4-(3,4-dimetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve antioksidan özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2010).
- [124] Aras, A., “Bazı 4-(3-metoksi-4-asetoksi)-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2012).
- [125] Medetalibeyoğlu, H., Yüksek, H., “Bazı 3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(*p*-toluensulfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi”, XXIII. Ulusal Kimya Kongresi, Bildiri Özetleri Kitabı, OP 084, Sivas, (2009).
- [126] Yüksek, H., Medetalibeyoğlu, H., Gürsoy-Kol, Ö., Akyıldırım, O., Calapoğlu, M., “Bazı 3-alkil(aril)-4-[3-metoksi-4-(*p*-toluensulfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi”, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 290, Zonguldak, (2010).
- [127] Yüksek, H., Koca, E., Köçek, N., Yıldız, Ç., Manap, S., Berkyürek, A., “Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(3-metoksi-4-benzoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin susuz ortam titrasyonları”, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 283, Zonguldak, (2010).
- [128] Yüksek, H., Kutanis, O., Boz, M. E., Erkurt, Y., Ocak, Z., Manap, S., Beytur, M., “Bazı 3-alkil(aril)-4-(3-kloroasetoksi-4-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin asitlik sabitlerinin tayini”, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 295, Zonguldak, (2010).
- [129] Yüksek, H., Alkan, M., Oğuz, Ş., Oğuzalp, T., Kayalar, M.T., Beytur, M., “Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-(3-etoksi-4-fenilasetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve susuz ortam titrasyonları”, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 293, Zonguldak, (2010).
- [130] Yüksek, H., Berkyürek, A., Balseven, H., Manap, S., “Bazı yeni 3-alkil(aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve yapılarının aydınlatılması”, 24. Ulusal Kimya Kongresi, OP 284, Zonguldak, (2010).
- [131] Alkan, M., Gürbüz, A., Yüksek, H., Ocak, Z., “Bazı di-[2-(3-alkil/aril-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on-4-il)-azometin-5-metoksifenil] tereftalat bileşiklerinin susuz çözücülerde pK_a sabitlerinin tayini”, 5. Ulusal Analitik Kimya Kongresi, Bildiri Özetleri Kitapçığı, 88, Erzurum, (2010).

- [132] Alkan, M., Gürbüz, A., Yüksek, H., Ocak, Z., “Bazı 3-alkil(aril)-4-(2-fenilasetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin potansiyometrik titrasyonları”, 5. Ulusal Analitik Kimya Kongresi, Bildiri Özetleri Kitapçığı, 89, Erzurum, (2010).
- [133] Gürsoy-Kol, Ö., Yüksek, H., İslamoğlu, F., “*In vitro* Antioxidant and acidic properties of novel 4-(5-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives. Synthesis and Characterization”, *Revista de Chimie (Rev. Chim.)* (Bucharest), 63(11), 1103-1111 (2012).
- [134] Gürsoy-Kol, Ö., Yüksek, H., İslamoğlu, F., “Synthesis and *In vitro* Antioxidant Activities of Novel 4-(3-Methyl-2-thienylmethylene-amino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives with Their Acidic Properties”, *J. Chem. Soc. Pak.*, 35(4), 1179-1190 (2013).
- [135] Akyıldırım, O. “Bazı potansiyel biyolojik aktif heterosiklik bileşiklerin sentezi, Yapılarının Aydınlatılması ve Bazı Özelliklerinin İncelenmesi”, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2011).
- [136] Tokalı, F. S., “1,2,4-Triazol-5-on türevlerinin sentezi üzerine bir çalışma”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2011).
- [137] Toz, M., “Bazı yeni azot içeren beş üyeli heterosiklik bileşiklerin sentezi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2012).
- [138] Berkyürek, A., “Bazı Yeni 3-alkil(aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-benzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Sentezi, Yapılarının Aydınlatılması, Antioksidan ve Asitlik Özelliklerinin İncelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2011).
- [139] Kutanis, O., “Bazı Yeni 4-[3-(2-Metilbenzoksi)-4-metoksi]-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin Sentezi ve Bazı Özelliklerinin İncelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2012).
- [140] Koca, E., “Bazı yeni 4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2013).
- [141] Kara S. “Bazı yeni 4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2013).

- [142] Zafer, Z., "3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin 3-(3,5-dinitrobenzoksi)-4-metoksibenzaldehyd ile reaksiyonları", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2013).
- [143] Polat, M., "Bazı yeni 1-asetil-3,4-disubstitue-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve *in-vitro* antioksidan özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2014).
- [144] Aytemiz, F., "3-Alkil(aril)-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2013).
- [145] Ulufer, S., "Bazı yeni 4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2014).
- [146] Bankoğlu, B., "3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on'ların 3-etoksi-4-(2-metil-benzoksi)-benzaldehyd ile reaksiyonlarının incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2014).
- [147] Yıldız, Ç., "Bazı yeni 4-(2-benzensülfoniloksi-3-metoksi)-benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2014).
- [148] Sadi, S., "Bazı yeni 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2003).
- [149] Yüksek, H., Çakmak, İ., Sadi, S., Alkan, M., Baykara, H., "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 (2005).
- [150] İnce-Demirci, S., "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, (2005).
- [151] İnce, S., Yüksek, H., Alkan, M., Çakmak, I., "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 (2004).

- [152] Kemer, G., "Bazı yeni 1,2,4-triazol türevlerinin sentezi, antioksidan ve asitlik özelliklerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2007).
- [153] Yüksek, H., Gürsoy Kol, Ö., Kemer, G., Ocak, Z., Anıl, B., "Synthesis and in-vitro antioxidant evaluation of some novel 4-(4-substituted) benzylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones", Indian J. Heterocy. Ch., 20: 325-330 (2011).
- [154] Kayalar, M. T., "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, (2012).
- [155] Kemer, G., Yüksek, H., Kayalar, M.T., "B3LYP density functional calculations of ¹H and ¹³C nuclear shielding constants of some 4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives", 2nd International Conference on Organic Chemistry: "Advances in Heterocyclic Chemistry", GeoHet-2011, Tbilisi, Georgia, PP 65, (2011).
- [156] Gül, H., "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 incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2010).
- [157] Kurt, İ. H., "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, (2013).
- [158] Yüksek, H., Gül, H., Manap, S., Ocak, Z., Şen, H., "Bazı yeni heterosiklik schiff bazlarının sentezi, yapılarının aydınlatılması ve susuz ortam titrasyonları", XXIII. Ulusal Kimya Kongresi, Bildiri Özetleri Kitabı, OP 083, Sivas, (2009).
- [159] Yüksek, H., Gül, H., Şen, H., Gürsoy-Kol, Ö., Koca, E., "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 (2010).
- [160] Kayalar, M.T., Yüksek, H., GIAO nmr calculations of some 3-alkyl(aryl)4-(4-phenylacetoxy-benzylidenamino)-4,5-dihydro-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, (2011).
- [161] Tomruk, Z., "Bazı yeni heterosiklik schiff bazlarının sentezi, p*K*_a değerlerinin tayini ve DNA ile etkileşimlerinin incelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2008).

- [162] Tomruk, Z., Yüksek, H., Arslantaş, A., Ocak, Z., “Non-aqueous medium titrations of some 4-(4-benzensulfonyloxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-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 (2009).
- [163] Tomruk, Z., Arslantaş, A., Yüksek, H., Gürsoy-Kol, Ö., Manap, S., “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, (2010).
- [164] Gürsoy, Ö., “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, (2003).
- [165] Yüksek, H., Gursoy, O., Cakmak, I., Alkan, M., “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”, Magn. Reson. Chem., 43 (7): 585-587 (2005).
- [166] Yüksek, H., Gursoy, O., Cakmak, I., Baykara, H., Alkan, M., “Synthesis and GIAO NMR calculations for some novel 1-acetyl-4-(arylidenamino)-4,5-dihydro-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 (2007).
- [167] Yüksek, H., Alkan, M., Atalay, Y. ve Bahçeci, Ş., “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, (2004).
- [168] Atalay, Y., Alkan, M., Bahçeci, Ş., Yüksek, H., “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, (2005).
- [169] Yüksek, H., Atalay, Y., Ocak, M., Ocak, Ü., Bahçeci, Ş. ve Yıldırım, N., “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, (2004).
- [170] Gökçe, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gürsoy Kol, Ö., “the syntheses, molecular structures, spectroscopic properties (ir, micro-raman, nmr and uv-vis) and dft calculations of antioxidant 3-alkyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one molecules”, Lett. Org. Chem., 10, 395-441 (2013).

- [171] Gokce H., Akyildirim O., Bahceli S., Yuksek H., Gursoy Kol O. "The 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one molecule investigated by a joint spectroscopic and quantum chemical calculations", J. Mol. Struct., 1056-1057, 273–284, (2014)
- [172] Koca, E., Yüksek, H., Kayalar, M.T. "3-Etil-4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının teorik GIAO hesaplamaları", XVI. Ulusal Kimya Kongresi, Burdur, 684 (2013).
- [173] Aytemiz, F., Yüksek, H., Kayalar, M.T. "3-Metil-4-[3-(3-nitrobenzoksi)-4-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının spektroskopik özelliklerinin deneysel ve teorik olarak incelenmesi", XVI. Ulusal Kimya Kongresi, Burdur, 684 (2013).
- [174] Bankoğlu, B., Yüksek, H., Kayalar, M.T. "3-etil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının B3LYP ve HF metodlarına göre hesaplanmış teorik değerleri ile deneysel değerlerinin karşılaştırılması", XVI. Ulusal Kimya Kongresi, Burdur, 684 (2013).
- [175] Yıldız, Ç., Yüksek, H., Kayalar, M.T. "b3lyp ve hf metodları kullanılarak 3-Metil-4-[2-(benzensulfoniloksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının spektroskopik özellikleri", XVI. Ulusal Kimya Kongresi, Burdur, 684 (2013).
- [176] Kara, S., Gürsoy Kol, Ö., Yüksek, H., Beytur, M. "3-etil-4-[3-(3,5-dinitrobenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının bazı spektroskopik özelliklerinin incelenmesi", I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Özet Kitapçığı, Van, Sayfa 61 (2014).
- [177] Bankoğlu, B., Yüksek, H. "3-Benzil-4-[3-etoksi-4-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülünün teorik spektral değerleri ile deneysel değerlerinin karşılaştırılması", I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Özet Kitapçığı, Van, Sayfa 17 (2014).
- [178] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Beytur, M. "Yeni 3-*n*-propil-4-[2-(2-naftilsulfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşığının bazı spektroskopik özelliklerinin incelenmesi", I. Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Özet Kitapçığı, Van, Sayfa 54 (2014).
- [179] Manap, S., Yüksek, H. "Yeni 3-metil-4-[3-metoksi-4-(2-metilbenzoksi)benzilidenamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on molekülünün teorik spektral değerlerinin deneysel değerlerle karşılaştırılması", I.

Uluslararası Katılımlı Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Özet Kitapçığı, Van, Sayfa 64 (2014).

- [180] Beytur, M., “Bazı yeni beş üyeli heterosiklik bileşiklerin sentezi ve bazı özelliklerinin incelenmesi”, Doktora Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars, (2014).
- [181] Beytur, M., Yüksek, H., Gürsoy Kol, Ö. “Synthesis and antioxidant activities of some novel 3-alkyl(aryl)-4-(4-sinamoyloxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, The 22nd Iranian Seminar of Organic Chemistry, Tabriz, Iran, P-0185, August 19-21, (2014).
- [182] Gündüz, T., “Susuz ortam titrasyonları”, Gazi Büro Kitabevi Tic. Ltd. Şti, Ankara, (1998).
- [183] Gündüz, T., “Susuz ortam reaksiyonları ve önemi”, XI. Ulusal Kimya Kongresi, Van, 117 (1997).
- [184] Huber, W., “Titrations in nonaqueous solvents”, Express Translation Service, Academic Press Inc., New York, (1967).
- [185] Ocak, Z., “Bazı yeni triazol türevlerinin potansiyometrik özellikleri”, Doktora Tezi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Trabzon, (2003).
- [186] Alkan, M., Bahçeci, Ş., Yüksek, H., Ocak, Z., ve Özdemir, M., “Bazı yeni 3-alkil(aryl)-4-izobutirilamino-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiklerinin sentezi ve susuz ortamda p*K*_a değerlerinin tayini”, XVI. Ulusal Kimya Kongresi, Konya, 684 (2002).
- [187] İkizler, A. A., Erdoğan, Y., “Determination of p*K*_a values of some benzylidenamino compounds in non-aqueous media”, Doğa-Tr. J. Chemistry, 15: 337-344 (1991).
- [188] İkizler, A. A., Şentürk, H. B., İkizler, A., “p*K*_a Values of some 1,2,4-triazole derivatives in non-aqueous media”, Doğa-Tr. J. Chemistry, 15: 345-354 (1991).
- [189] Erdogan, Y., Aslan, A., Demirbas, A., Yaylı, N., “Potentiometric titration of two carboxylic acids and two triazol derivatives in non-aqueous media”, Modelling, Measurement & Control, C, AMSE Press, 46 (3): 49-54 (2006).
- [190] İşbilir, Ş. S., “Yaprakları salata-baharat olarak tüketilen bazı bitkilerin antioksidan aktivitelerinin incelenmesi”, Doktora Tezi, Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Edirne, (2008).
- [191] Halliwell, B., Gutteridge, J. M. C., “Role of free-radicals and catalytic metal-ions in human disease - an overview”, Methods in Enzymology, 186: 1-85 (1990).

- [192] Akkuş, İ., “Serbest radikaller ve fizyopatolojik etkileri”, Mimoza Yayınları, Konya, (1995).
- [193] Onat, T., Emerk, K., Sözman E. Y., (Ed.), “İnsan biyokimyası”, Palme Yayıncılık, Ankara, (2002).
- [194] Becker, E. M., Nissen, L. S., Skibsted, L. H., “Antioxidant evaluation protocols: Food quality or health effects”, European Food Research and Technology, 10.107/s00217-004-1012-4 (2004).
- [195] Lee, J. D., “Concise inorganic chemistry”, Chapman&Hall, 4th Ed., New York, (1991).
- [196] <http://www.mustafaaltinisik.org> (Ocak 2007).
- [197] Nehir El, S., Karakaya, S., Taş, A. A., “Bazı gıdalardaki fenolik bileşiklerin antioksidan etkilerinin *in vitro* koşullarda saptanması”, TÜBİTAK Projesi, No:TOGTAG-1698, İzmir, (1999).
- [198] Halliwell, B., “Free radicals and antioxidants: A personal view”, Nutrition Reviews, 52 (8): 253-265 (1994).
- [199] Halliwell, B., Clement, M. V., Long, L. H., “Hydrogen peroxida in the human body”, FEBS Letter, 486: 10-13 (2000).
- [200] Cotton, F. A., Wilkinson, G., “Advanced inorganic chemistry”, John Wiley & Sons Inc., 5th Ed., USA, (1988).
- [201] Murray, R. K., Granner, D. K., Mayes, P. A., Rodwell, V. W, “Harper’ın biyokimyası”, (Çev: Dikmen N., Özgünen T.), Barış Kitabevi, 24. baskı, İstanbul, (1996).
- [202] Meram, I., Aktaran, Ş., “Serbest radikallerin biyomoleküller üzerine etkileri”, Arşiv, 11, 299-304 (2002).
- [203] Van Der Vliet, A., O’neill, C. A., Halliwell, B., Cross, C., Kaur, H., “Aromatic hydroxylation and nitration of phenylalanine and tyrosine by peroxynitrite”, FEBS Letters, 339: 89-92 (1994).
- [204] Hawkins, C. L., Davies, M. J., “Degradation of hyaluronic acid, poly- and mono-saccharides, and model compounds by hypochlorite: Evidence for radical intermediates and fragmentation”, Free Radical Biology and Medicine, 24 (9): 1396-1410 (1998).
- [205] McNeil, J. D., Wiebkin, O. W., Betts, W. H., Cleland, L. G., “Depolymerisation products of hyaluronic acid after expose to oxygen-derived free radicals”, Annals of the Rheumatic Diseases, 44, 780-789 (1985).

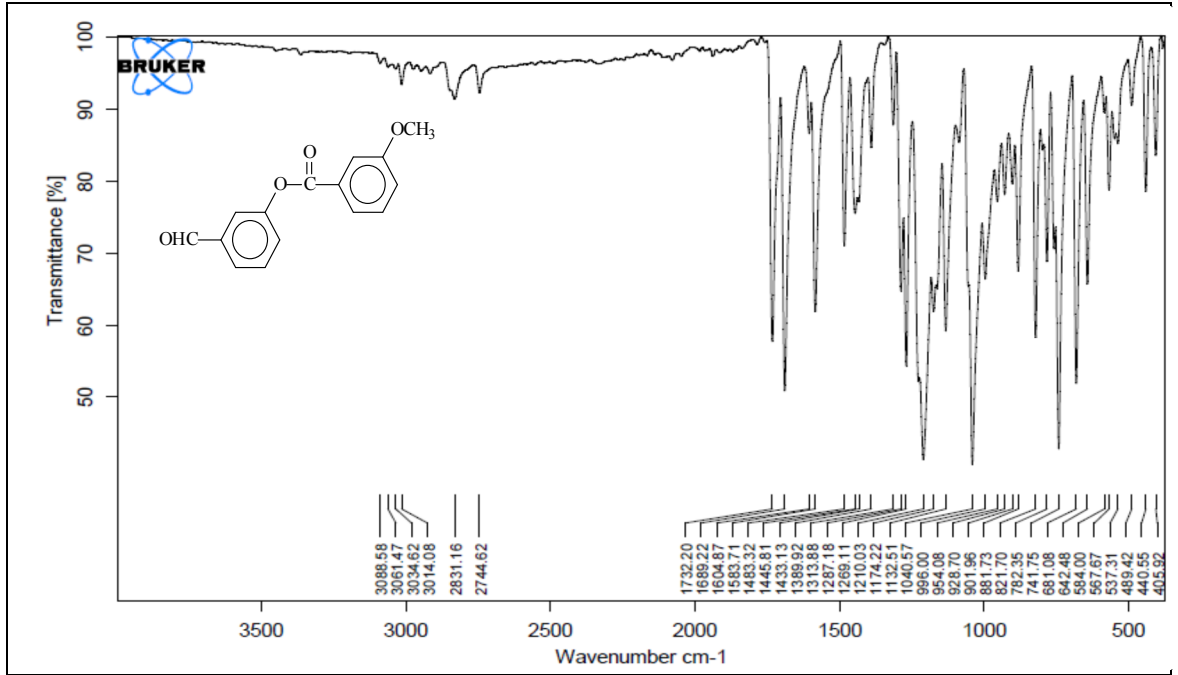
- [206] Seven, A., Candan, G., “Antioksidan savunma sistemleri”, Cerrahpaşa Tıp Dergisi, 27 (1): 41-50 (1996).
- [207] Percival, M., “Antioxidants”, Clinical Nutrition Insights, 10: 1-4 (1998).
- [208] Frankel, E. N., Meyer, A. S., “The problems of using one-dimensional methods to evaluate multifunctional food and biological antioxidants”, Journal of the Science of Food and Agriculture, 80: 1925-1941 (2000).
- [209] Ou, B., Huang, D., Hampsch-Woodill, M., Flanagan, J. A., Deemer, E. K., “Analysis of antioxidant activities of common vegetables employing oxygen radical absorbance capacity (ORAC) and ferric reducing antioxidant power (FRAP) assays: A comparative study”, Journal of Agricultural and Food Chemistry, 50: 3122-3128 (2002).
- [210] Huang, D., Ou, B., Prior, R., “The chemistry behind antioxidant capacity assays”, Journal of Agricultural and Food Chemistry, 53: 1841-1856 (2005).
- [211] Tomer, D., Mcleman, L., Ohmine, S., Scherer, P. M., Murray, B. K., O’Neill, K. L., “Comparison of the total oxyradical scavenging capacity and oxygen radical absorbance capacity antioxidant assays”, Journal of Medicinal Food, 10 (2): 337-344 (2007).
- [212] Benzie, I. F. F., Strain, J. J., “The ferric reducing ability of plasma (FRAP) assay a measure of “Antioxidant Power”: The FRAP assay”, Analytical Biochemistry, 239: 70-76 (1996).
- [213] Parker, B., “Kuantumu Anlamak”, Güncel Yayıncılık, çeviri: Aklın E., 278, (2005).
- [214] Türkpençe, D., “Kuantum Mekanikine Felsefi Bakış”, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilimdalı, Yüksek Lisans Semineri, Samsun, (2006).
- [215] Jensen, F., “Introduction to Computational Chemistry”, John Wiley & Sons Ltd., 26-38, (1999).
- [216] Haken, H., and Wolf, H., C., “Atom ve Kuantum Fiziği”, çeviri: Okur, İ., Değişim yayınları, 345-350, (2000).
- [217] Hohenberg, P., Kohn, W., “Inhomogeneous Electron Gas”, Phys. Rev. B, 136, 864 (1964).
- [218] Parr R., G. and Yang W., “Density Functional Theory”, Oxford University Press, (1989).
- [219] Bartolotti, L., J., Flurchick, K., “An Introduction to Density Functional Theory”. Rev. Comp. Chem., 7, 187-216, (1996).

- [220] Bransden, B., H., Joachain, C., J., "Physics of Atoms Molecules", Longman, 505, 386-387, (1983).
- [221] Leach, A., R., "Molecular Modeling: Principles and Applications", Addison Wesley Longman Ltd., (1996).
- [222] Kohn, W. and Sham, L., J., "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", Phys. Rev. A, 140(4), 1133–1138, (1965).
- [223] Becke, A., D., "Density functional thermochemistry. III. The role of exact Exchange", J. Chem. Phys., 98, 5648-5652, (1993).
- [224] Cramer, J., C., "Essential of computational chemistry: theories and models", Second edition, John Wiley & Sons, Ltd., 266-267, (2004).
- [225] Foresman, B., J., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", Second Edition, Gaussian Inc., 261, (1996).
- [226] Frisch, A. and Frisch, M., J., "Gaussian 98 User's Reference", Gaussian Inc., (1998).
- [227] Frisch, E., Nielsen, A., B., Holdre, A., J., "GaussView User's Reference", Version 2.0, Gaussian Inc., (2000).
- [228] Özdemir, M., "Benzosülfonikasıit hidrazit'in konformasyon analizi, titreşim ve kimyasal kayma değerlerinin DFT metodu ile hesaplanması", Yüksek lisans tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 30-32, (2007).
- [229] Jensen, F., "Introduction to Computational Chemistry", John Wiley & Sons Ltd, 440-462, (1999).
- [230] Pulay, P., "Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry, Ab Initio Methods in Quantum Chemistry", By K.P. Lavvley 11nd ed., John Wiley & Sons Ltd., 118-143, (1987).
- [231] Csizmadia, G., L., "Computational Adv. In organic chem., Molecular str. And reactivity" . Ed. by Öğretir, C., Csizmadia, G., L., NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, 15-74, (1981).
- [232] Mills, I., Cvitas, T., Homann, K., Kallay, N. and Kuchitsu, K., "Quantities, units and symbols in physical chemistry", Blackwell, 119, (1993).
- [233] Hameka, H., F., "On the nuclear magnetic shielding in the hydrogen molecule", Mol. Phys., 1, 203-215, (1958).
- [234] Hameka, H., F., "Relationship between proton shielding constants and electric dipole moments in the hydrogen halides", Mol. Phys., 2, 64-74, (1959).

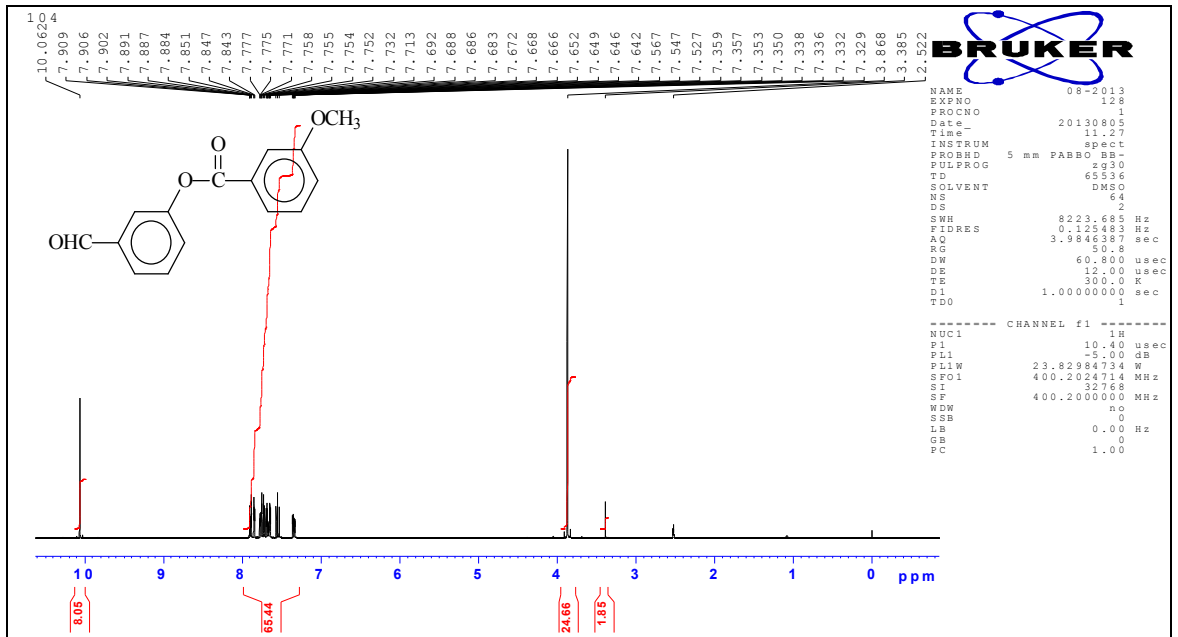
- [235] Ditchfield, R., "Self-consistent perturbation theory of diamagnetism I. A gauge-invariant LCAO method for N.M.R. chemical shifts", *Mol. Phys.*, 27, 789-807, (1974).
- [236] Wolinski, K., Hinton, J., F. and Pulay, P., "Efficient implementation of the gauge-independent atomic orbital method for NMR chemical shift calculations", *J. Am. Chem. Soc.*, 112, 8251-8260, (1990).
- [237] Hansen, A., E. and Bouman, T., D., "Localized orbital/local origin method for calculation and analysis of NMR shieldings. Applications to ^{13}C shielding tensors", *J. Chem. Phys.*, 82, 5035-5047, (1985).
- [238] Gauss, J., "Effects of electron correlation in the calculation of nuclear magnetic resonance chemical shifts", *J. Chem. Phys.*, 99, 3629-3643, (1993).
- [239] Keith, T., A. and Bader, R., F., W., "Calculation of magnetic response properties using a continuous set of gauge transformations", *Chem. Phys. Lett.*, 210, 223-231, (1993).
- [240] Kutzelnigg, W., "Theory of magnetic susceptibilities and NMR chemical shifts in terms of localized quantities", *Isr. J. Chem.*, 19, 193-200, (1980).
- [241] Gauss, J. and Stanton, J., F., "Coupled-cluster calculations of nuclear magnetic resonance chemical shifts", *J. Chem. Phys.*, 103, 3561-3578, (1995).
- [242] Frisch, M.J.; Trucks, G.W.; Schlegel, H.B.; Scuseria, G.E.; Robb, M.A.; Cheeseman, J.R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G.A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H.P.; Izmaylov, A.F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J.L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J.A.; Jr. Vreven, T.; Peralta, J.E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J.J.; Brothers, E.; Kudin, N.; Staroverov, V.N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J.C.; Iyengar, S.S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J.M.; Klene, M.; Knox, J.E.; Cross, J.B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R.E.; Yazyev, O.; Austin, A.J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J.W.; Martin, L.R.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V.G.; Voth, G.A.; Salvador, P.; Dannenberg, J.J.; Dapprich, S.; Daniels, A.D.; Farkas, O.; Foresman, J.B.; Ortiz, J.V.; Cioslowski, J.; and Fox, D.J. Gaussian Inc., Wallingford, CT., (2009).
- [243] Oyaizu, M., "Antioxidative activities of browning reaction prepared from glucosamine", *Japanese J. Nutr.*, 44: 307-315 (1986).
- [244] Blois, M. S., "Antioxidant determinations by the use of a stable free radical", *Nature*, 181: 1199-1200 (1958).

- [245] Dinis, T. C. P., Madeira, V. M. C., Almeida, L. M., "Action of phenolic derivatives (acetoaminophen, salicylate and 5-aminosalicylate) as inhibitors of membrane lipid peroxidation and as peroxy radical scavengers", Arch. Biochem. Biophys., 315: 161-169 (1994).
- [246] Lee, S.Y., "Molecular Structure and Vibrational Spectra of Biphenyl in the Ground and the lowest Triplet States. Density Functional Theory Study", Bull. Korean chem. Soc., 19(1), 93-98, (1998).
- [247] Gökçe, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H., "3-Benzil-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Molekül Yapısı, Spektroskopik Özellikleri ve Kuantum Kimyasal Hesaplamaları", Adım Fizik Günleri – 2012, Pamukkale Üniversitesi, Denizli, Nisan 26 –28, (2012).
- [248] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gökçe, H., Bahçeli, S., "1-Asetil-3-benzil-4-[3-metoksi-4-(4-metilbenzoksi)benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiğinin Molekül Yapısı, Spektroskopik Özellikleri ve Kuantum Kimyasal Hesaplamaları", Fizik Günleri, 2012, Pamukkale Üniversitesi, Denizli, Nisan 26 –28, (2012).
- [249] Akyıldırım, O., Yüksek, H., Gökçe, H., Bahçeli, S., "The molecular structure, spectroscopic properties and quantum chemical calculations of 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5 ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, Niğde, Turkey, PP-17, July 9-11, (2012).
- [250] Gökçe, H., Bahçeli, S., Akyıldırım, O., Yüksek, H., "The molecular structure, spectroscopic properties and quantum chemical calculations of 3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, Niğde, Turkey, PP-18, July 9-11, (2012).
- [251] İkizler, A. A., Şentürk, H. B., İkizler, A., "p*K*_a Values of some 1,2,4-triazole derivatives in non-aqueous media", Doğa-Tr. J. Chemistry, 15: 345-354 (1991).
- [252] Fessenden, R. J., Fessenden, J. S., "Organic Chemistry", Third Edition, Brooks, Cole Publishing Company, California (1986).
- [253] Ternary, A. L., "Contemporary Organic Chemistry", Second Edition, W. B. Saunders Company, Philadelphia (1979).
- [254] İkizler, A. A., "Organik Kimyaya Giriş", Dördüncü Baskı, KTÜ Basımevi, Trabzon (1996).

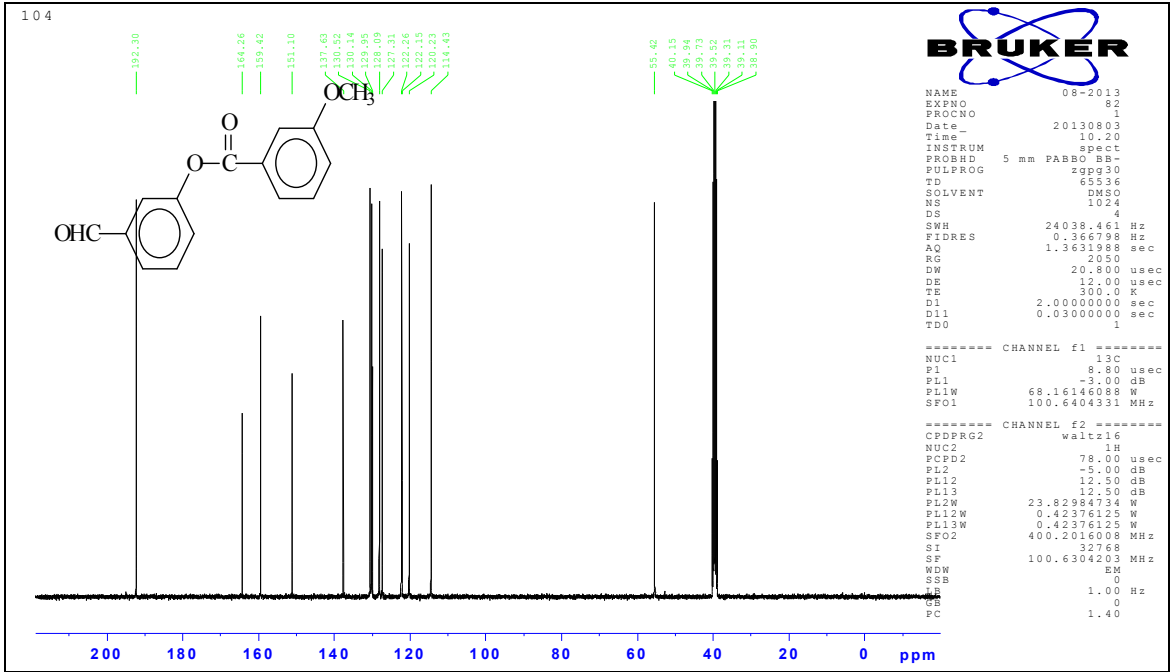
EKLER



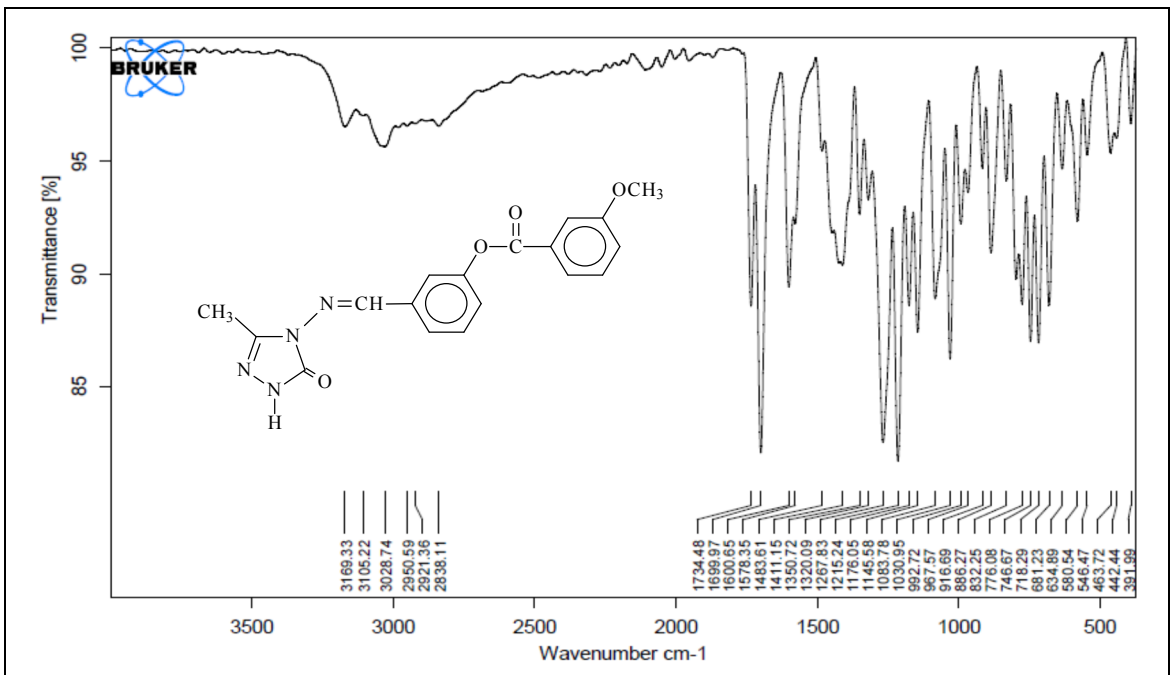
Ek Şekil 1. 175 Bileşiğinin IR spektrumu



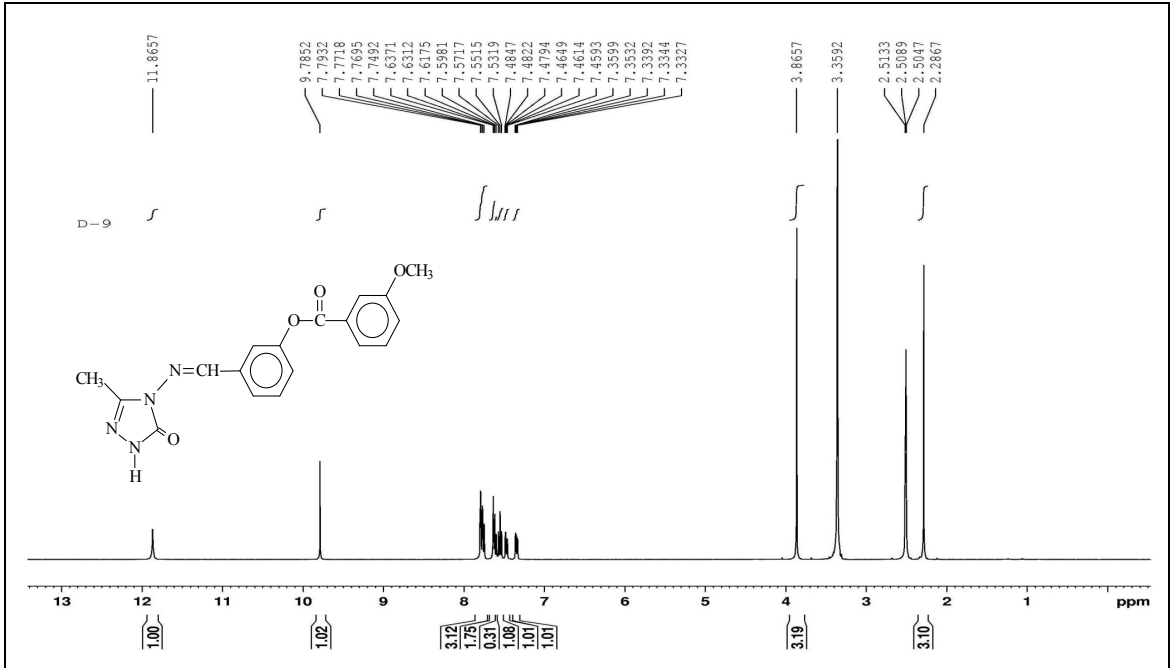
Ek Şekil 2. 175 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



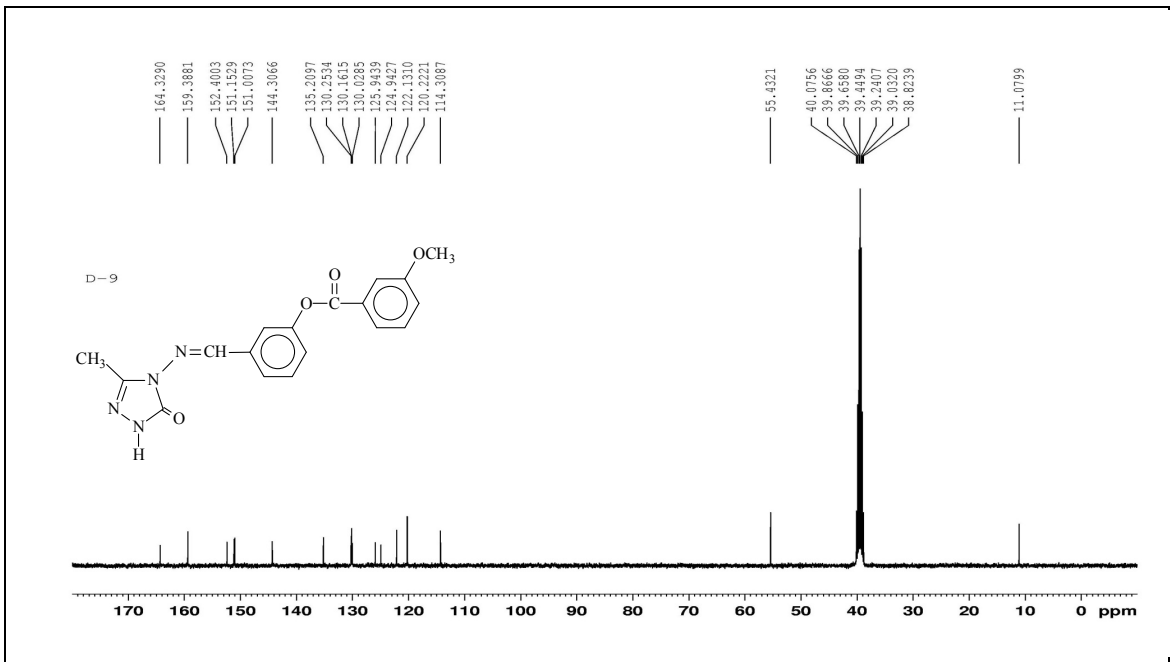
Ek Şekil 3.175 Bileşiminin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



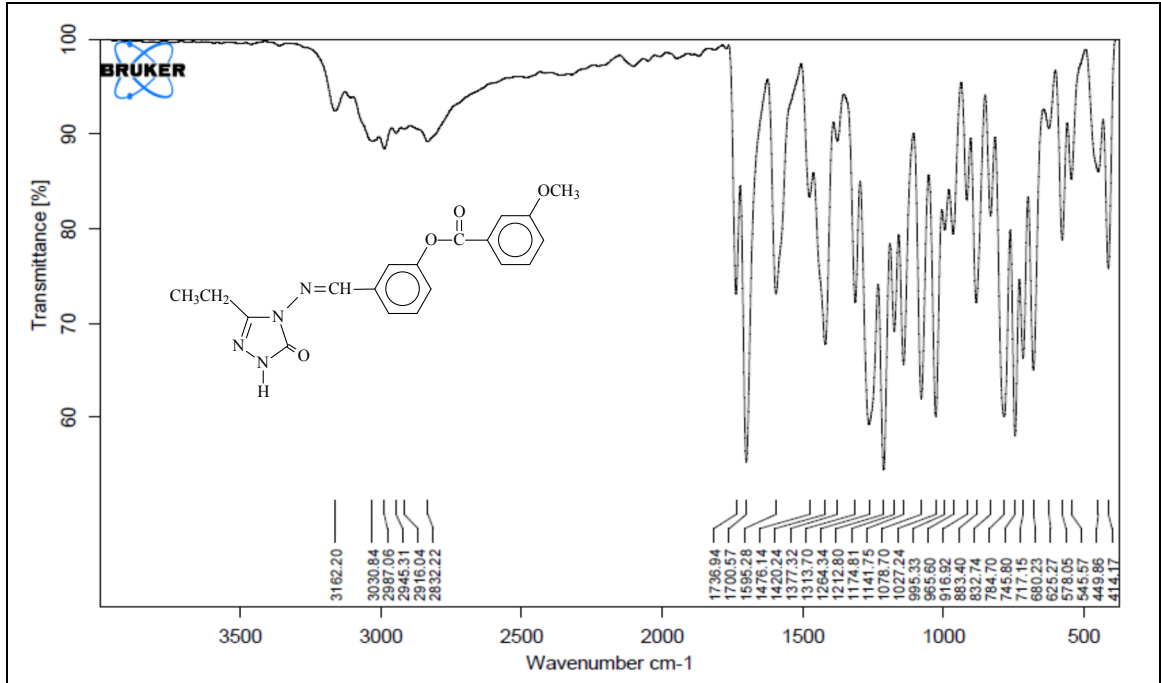
Ek Şekil 4. 177 Bileşiminin IR spektrumu



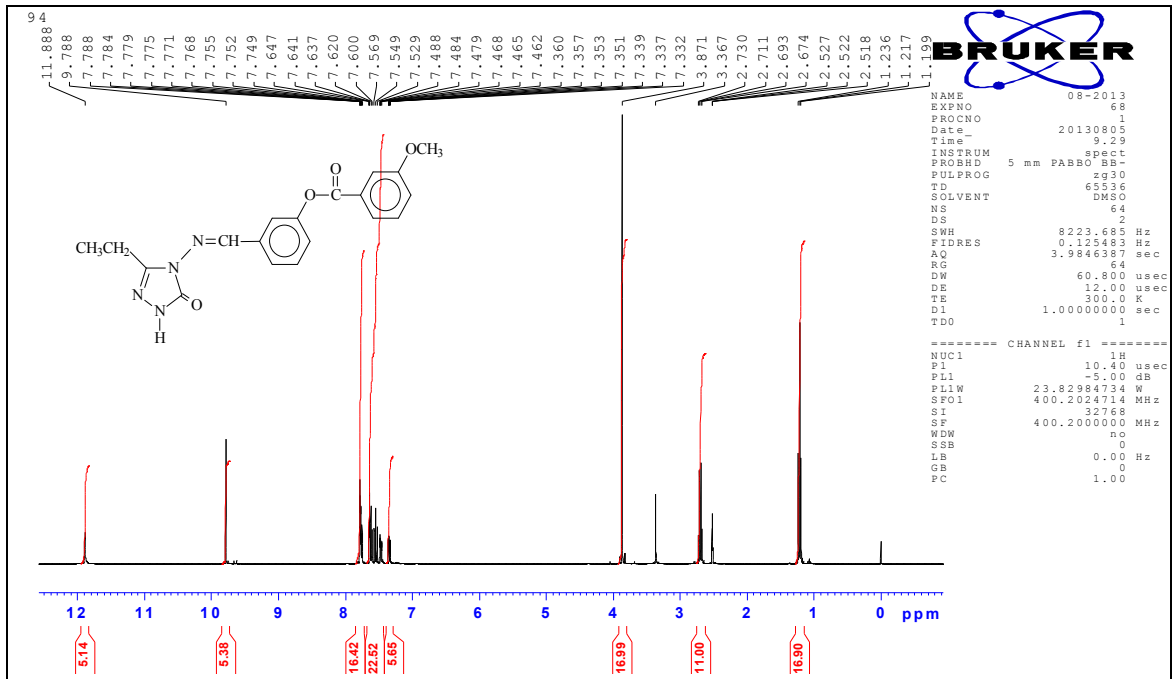
Ek Şekil 5. 177 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



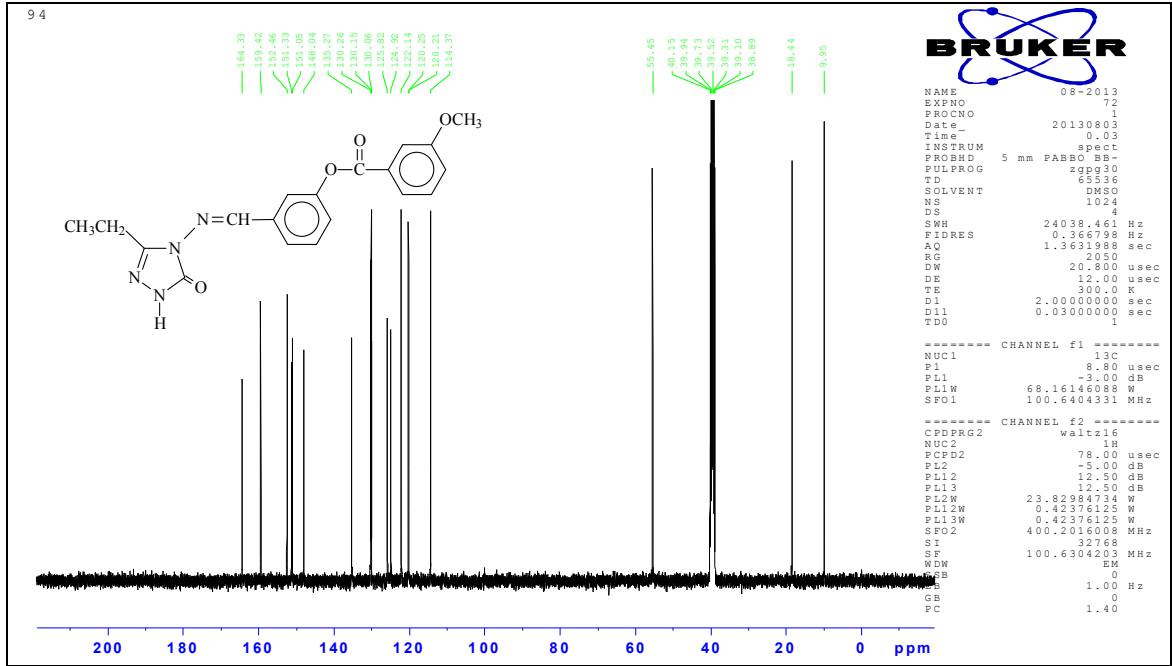
Ek Şekil 6. 177 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



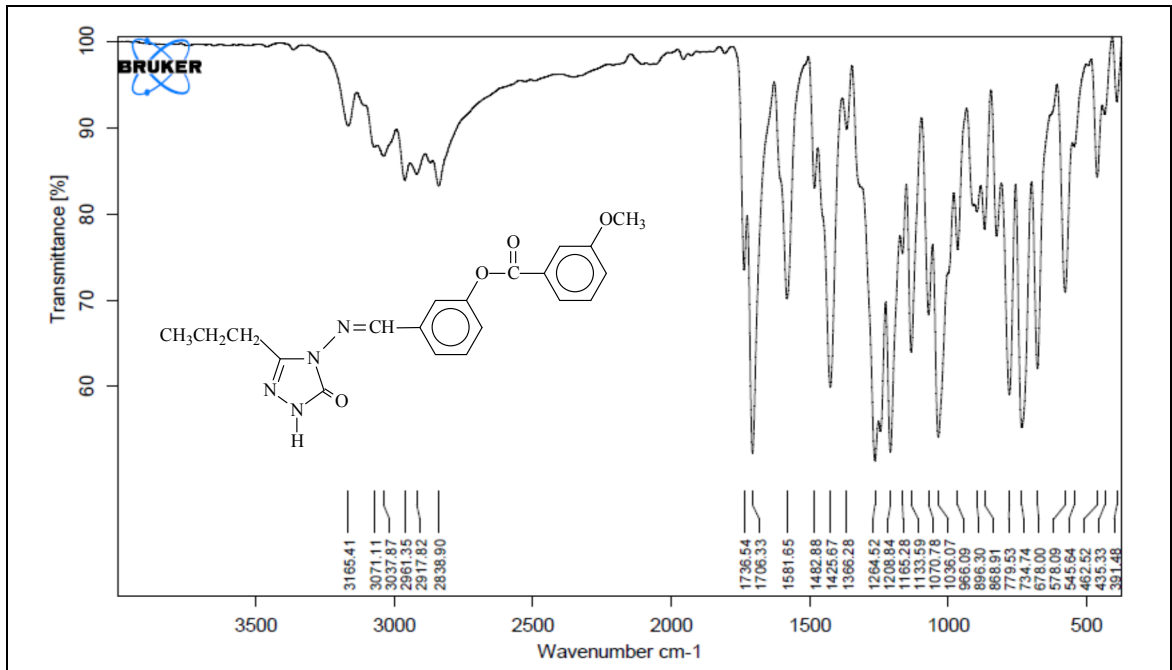
Ek Şekil 7.178 Bileşiğinin IR spektrumu



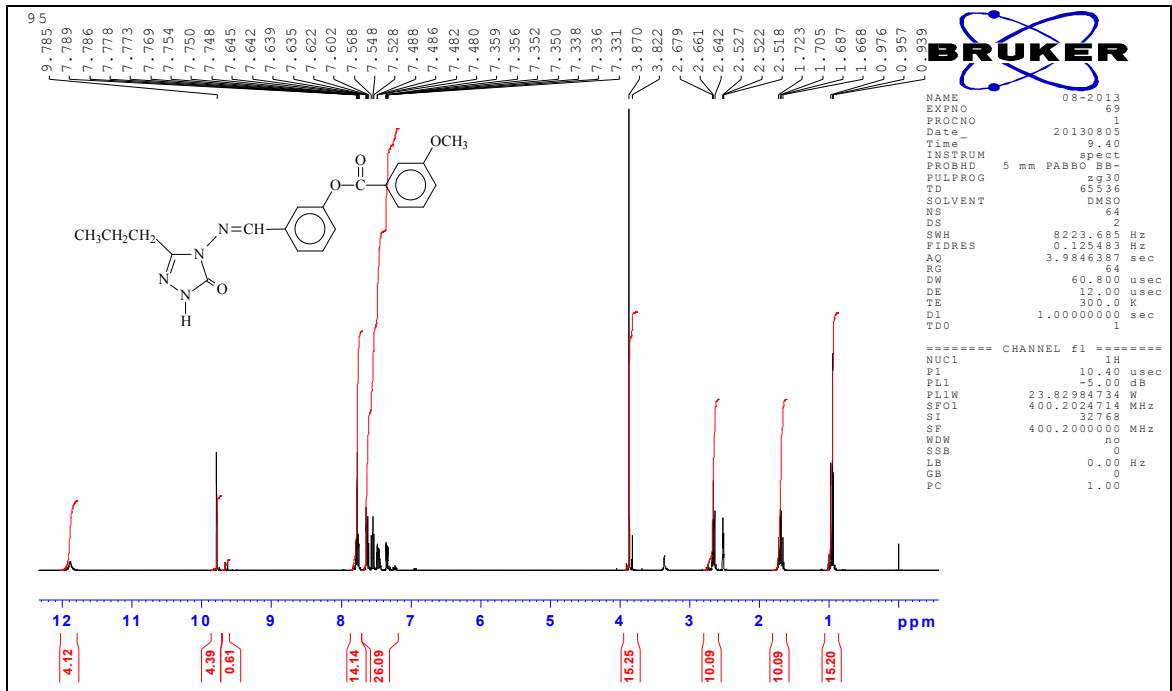
Ek Şekil 8. 178 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



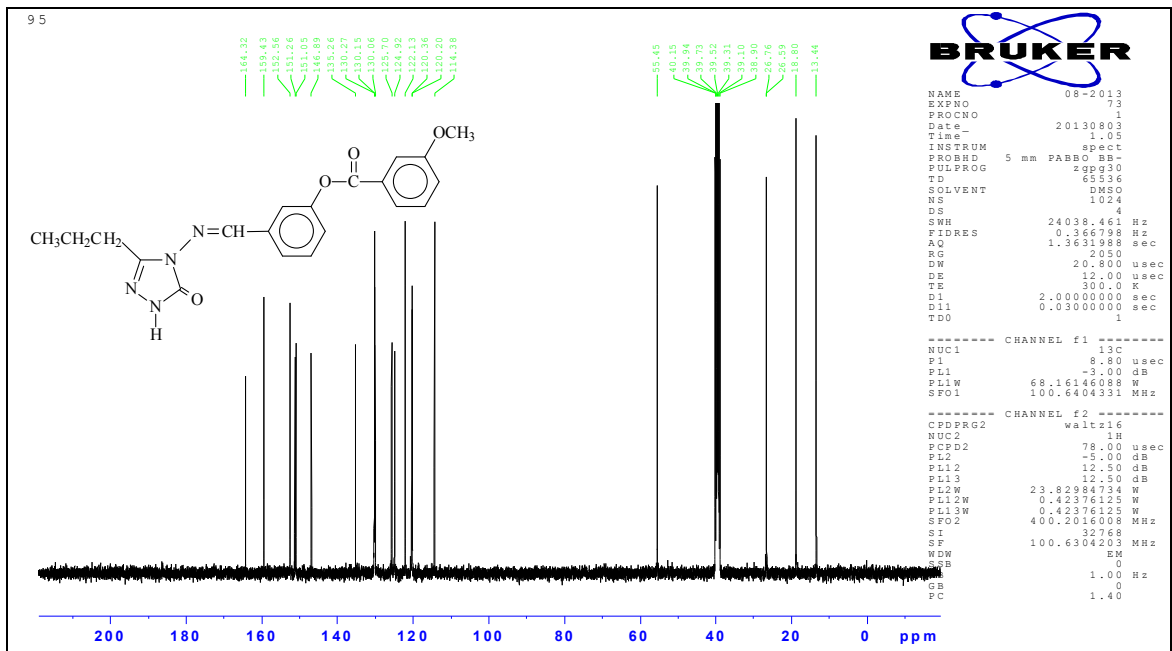
Ek Şekil 9. 178 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



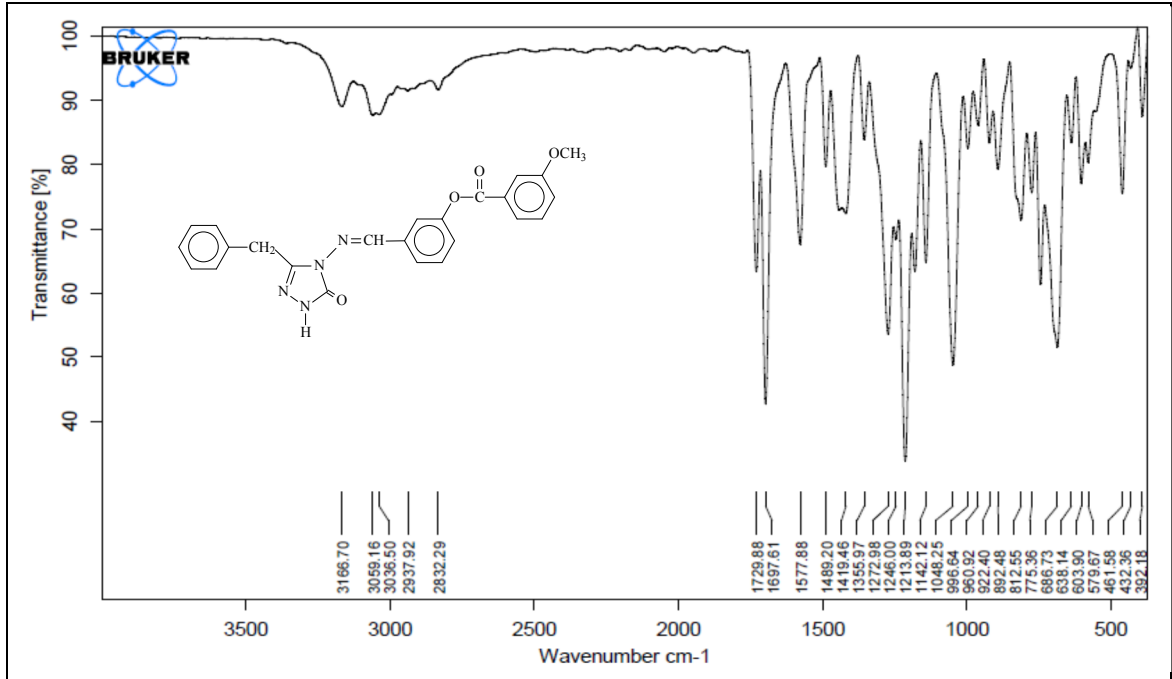
Ek Şekil 10. 179 Bileşiğinin IR spektrumu



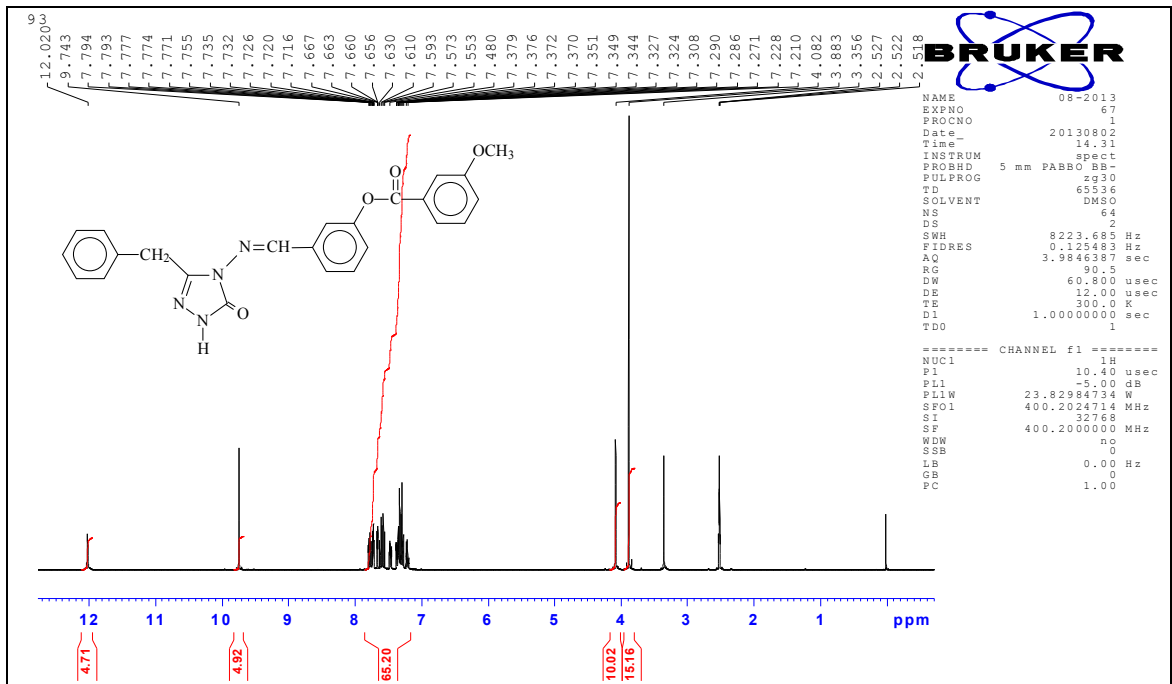
Ek Şekil 11. 179 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



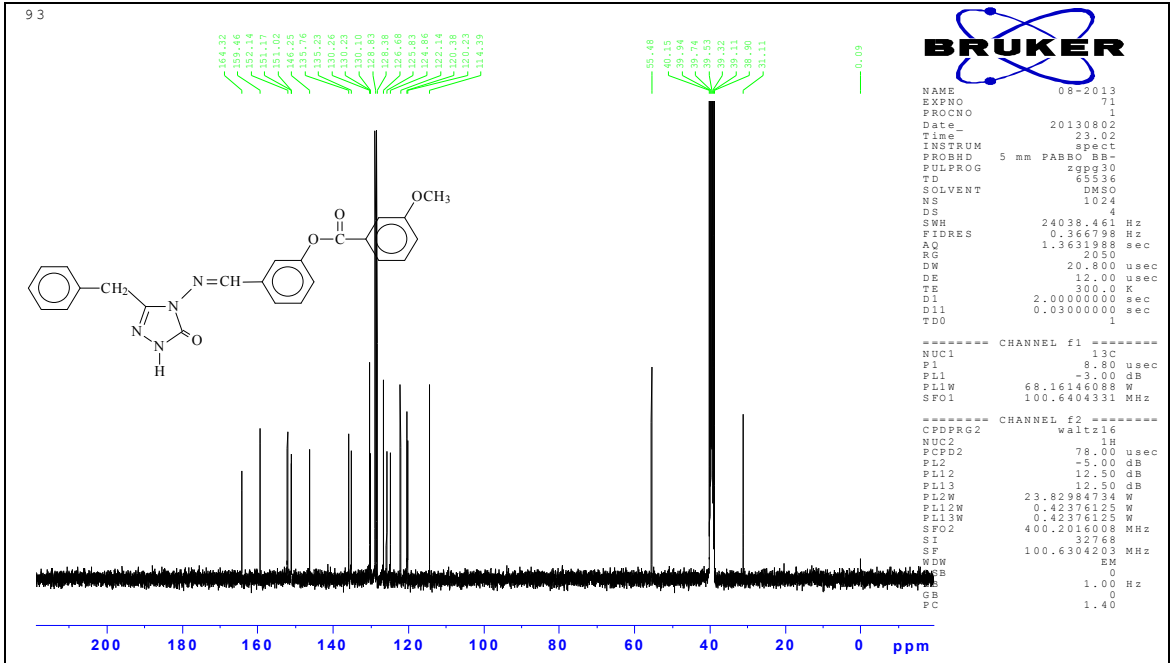
Ek Şekil 12. 179 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



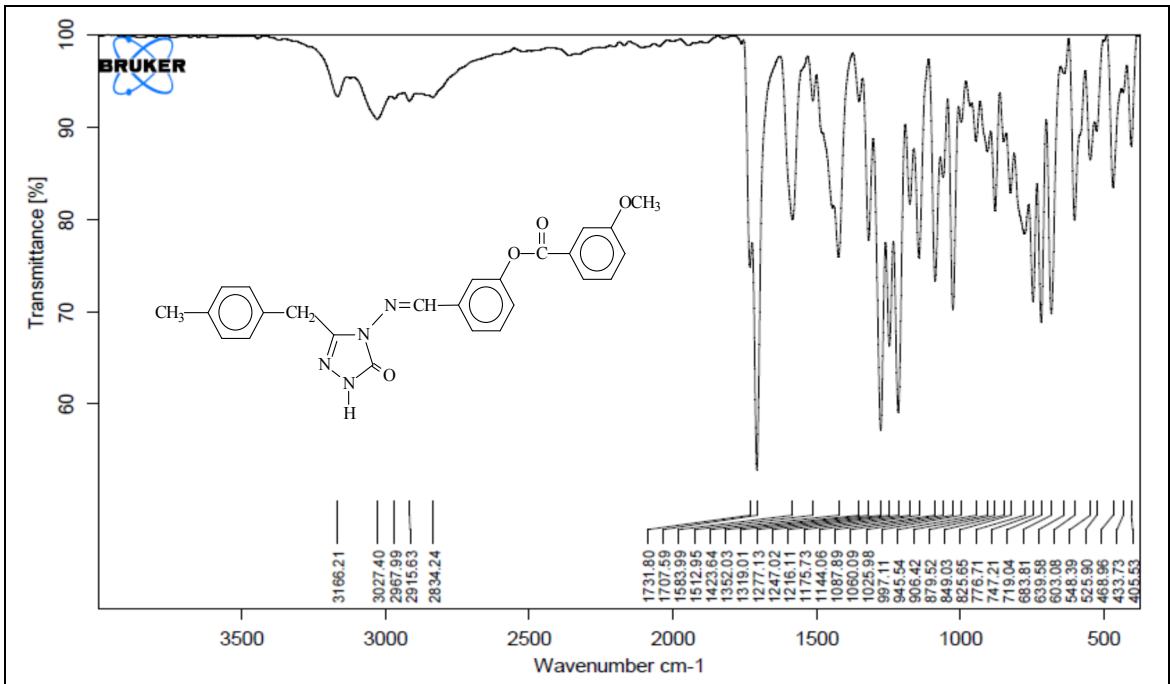
Ek Şekil 13. 180 Bileşiğinin IR spektrumu



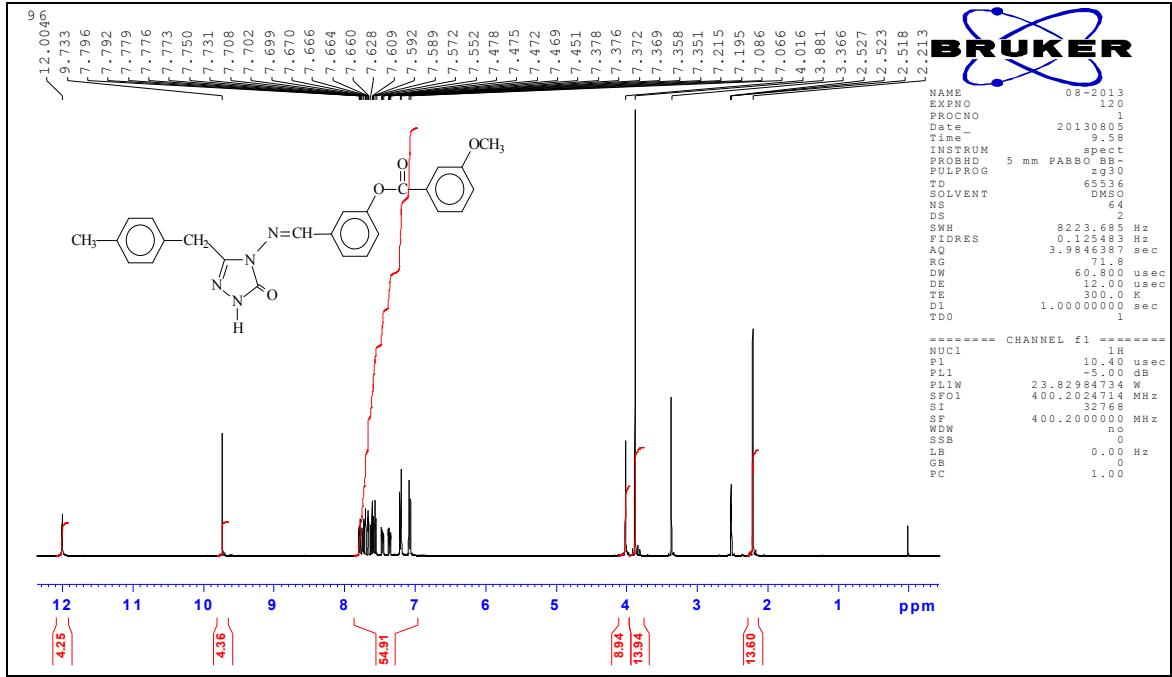
Ek Şekil 14. 180 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



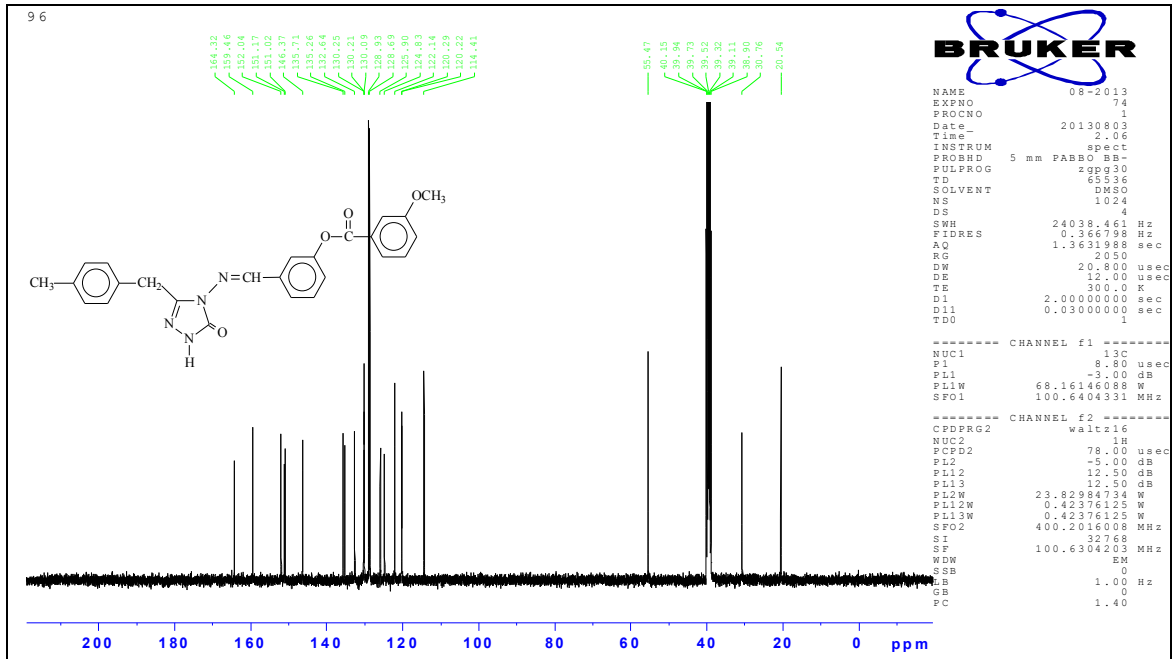
Ek Şekil 15. 180 Bileşinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



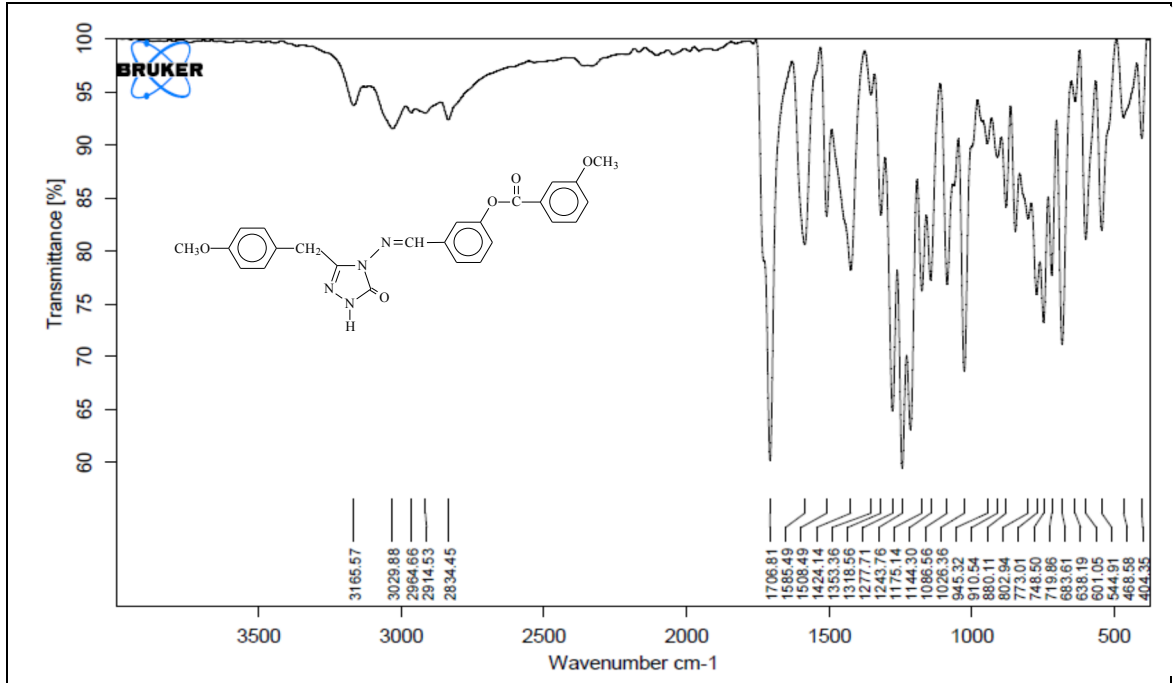
Ek Şekil 16. 181 Bileşinin IR spektrumu



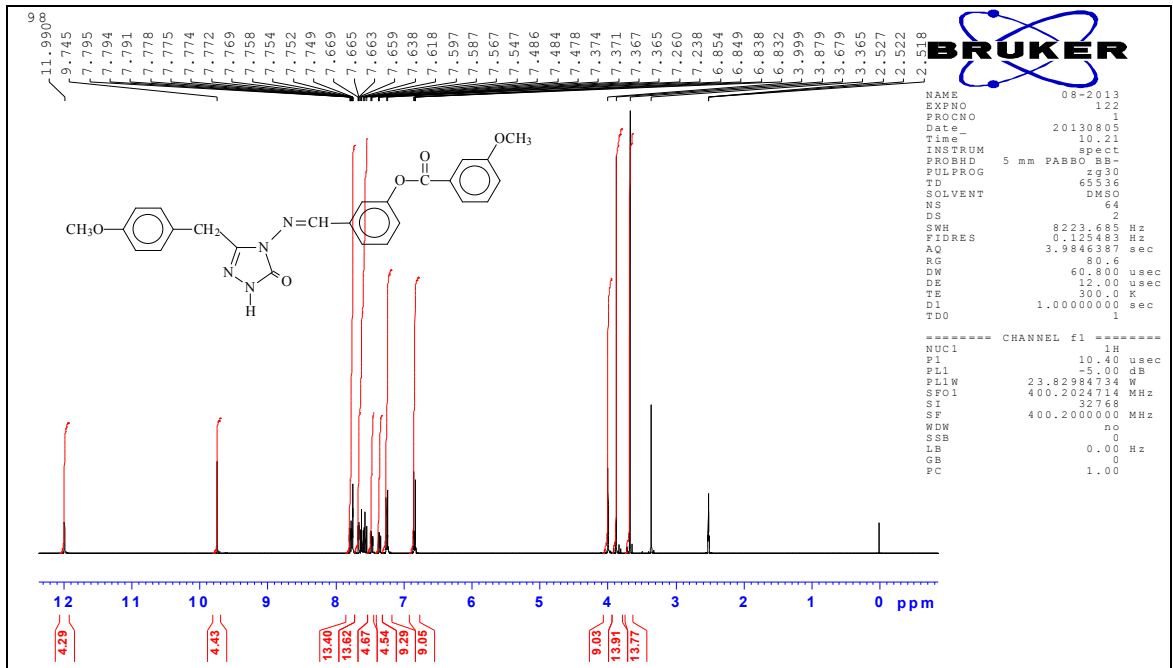
Ek Şekil 17. 181 Bileşiminin $^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) spektrumu



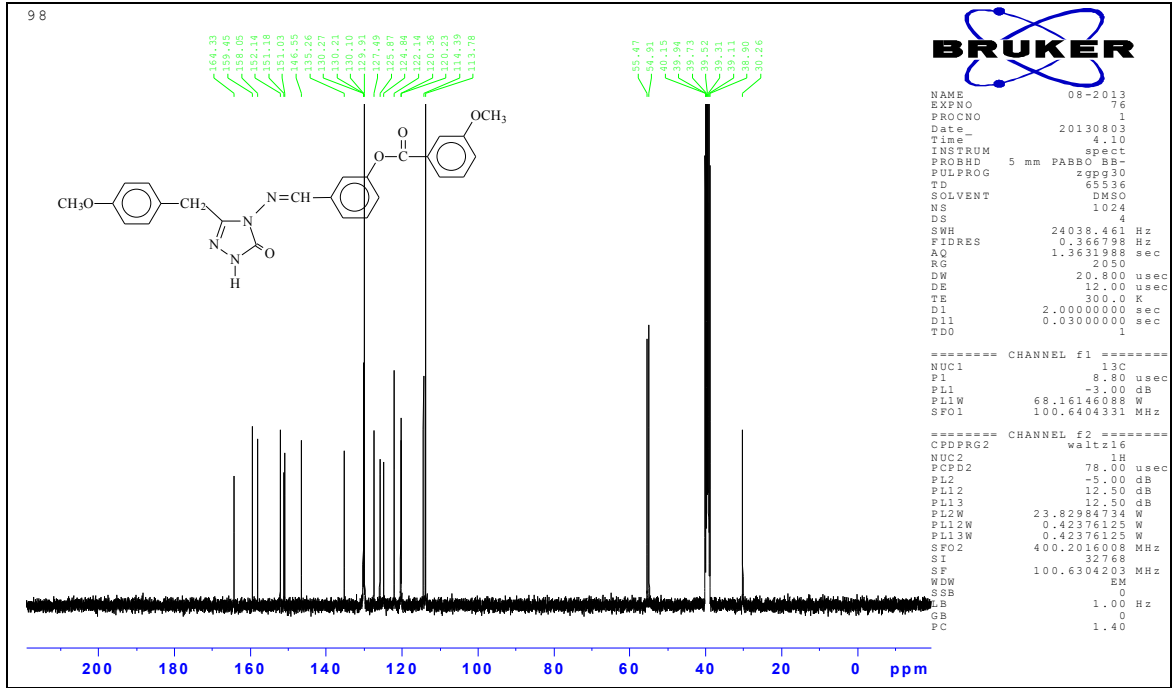
Ek Şekil 18. 181 Bileşiminin $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO-d_6) spektrumu



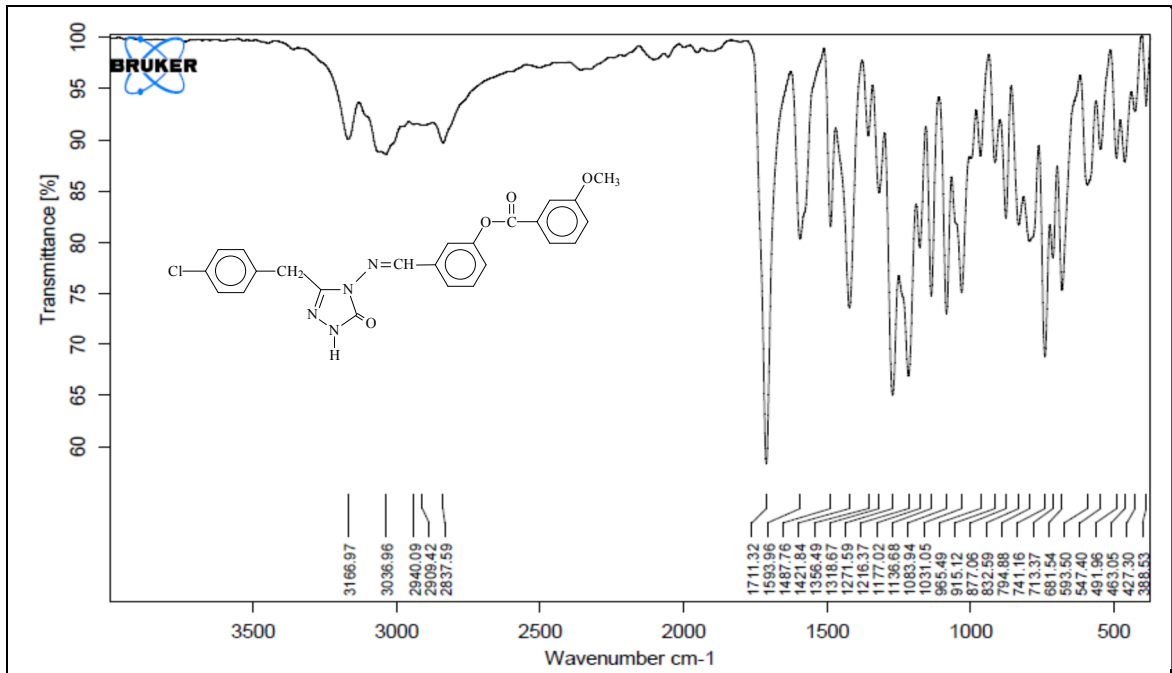
Ek Şekil 19. 182 Bileşiğinin IR spektrumu



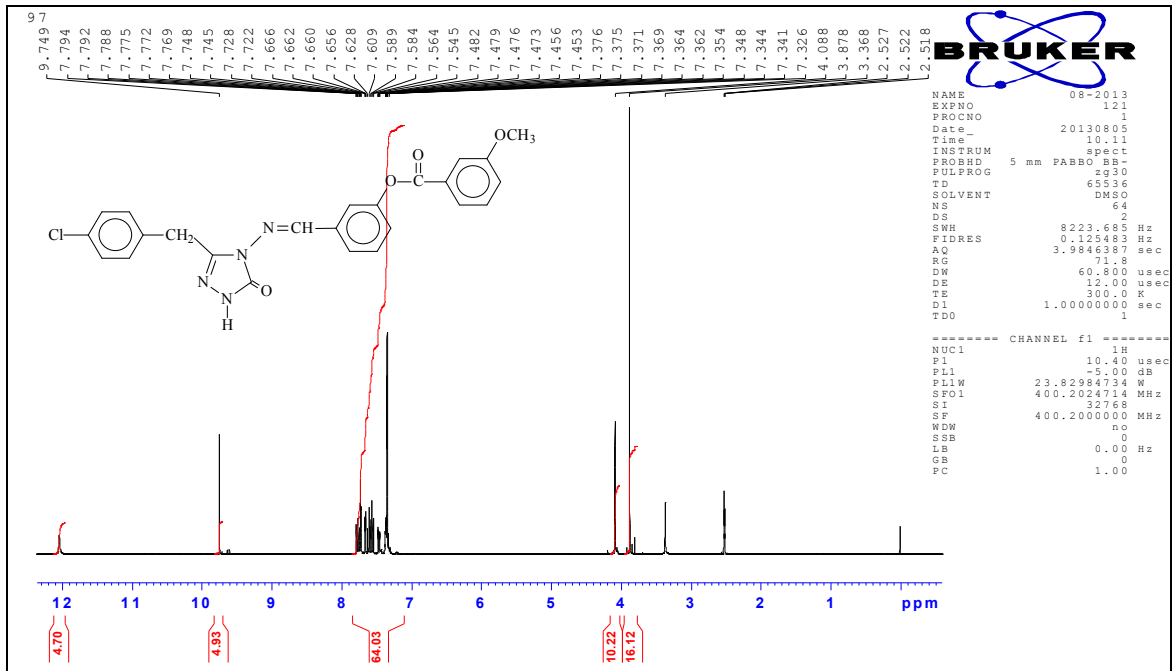
Ek Şekil 20. 182 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



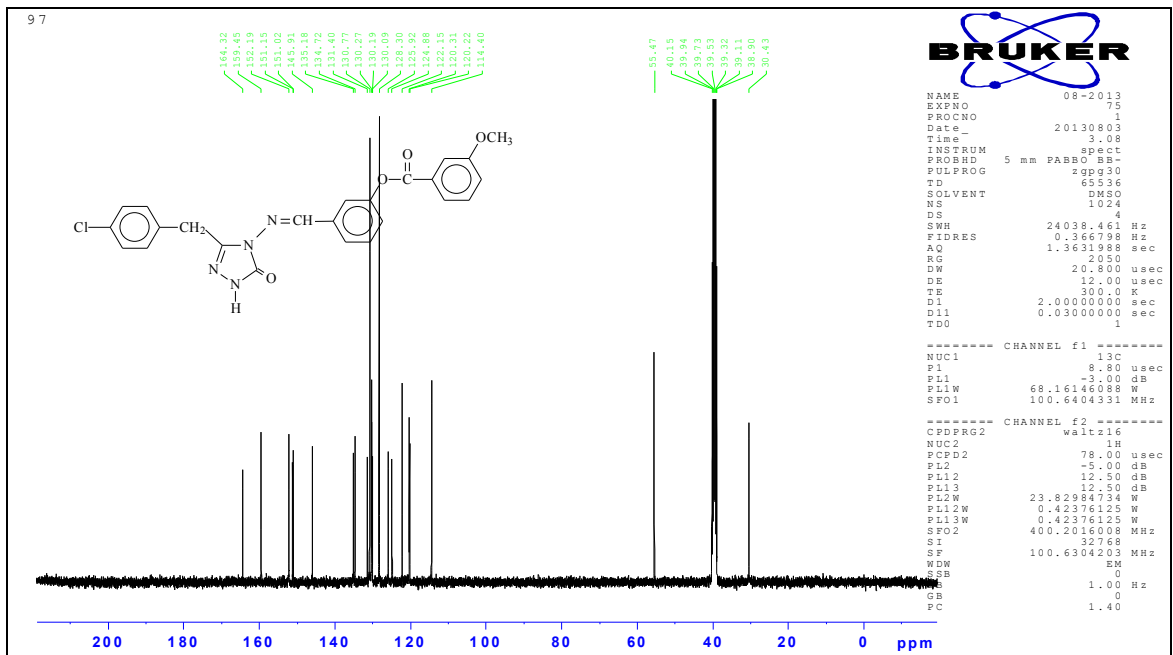
Ek Şekil 21. 182 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



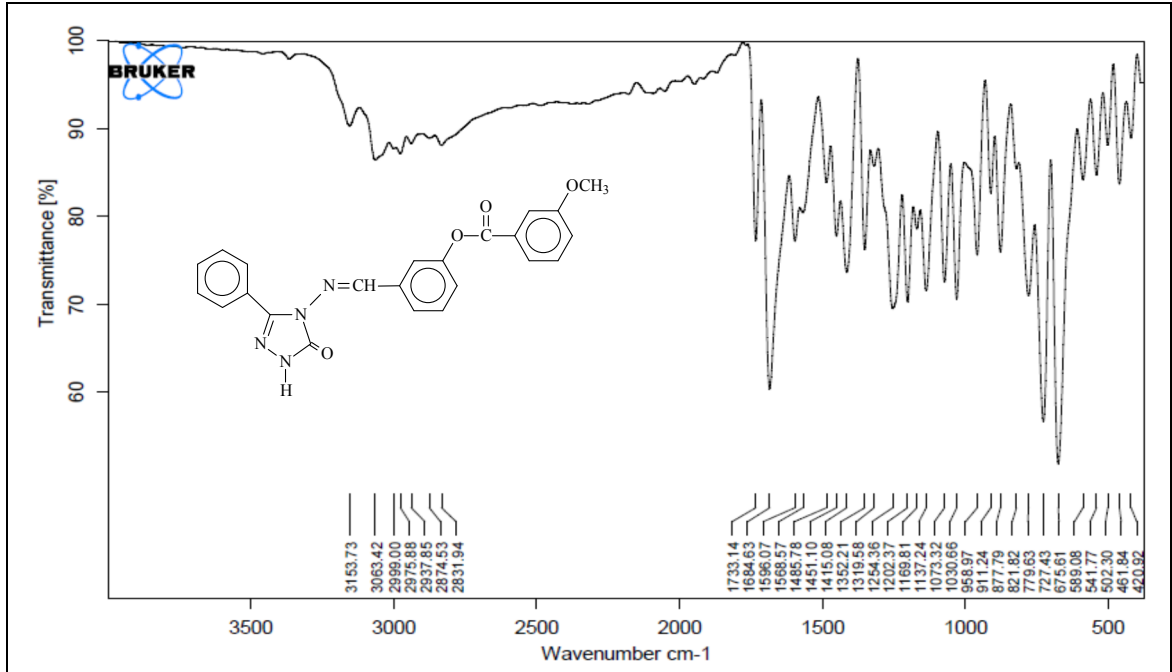
Ek Şekil 22. 183 Bileşiğinin IR spektrumu



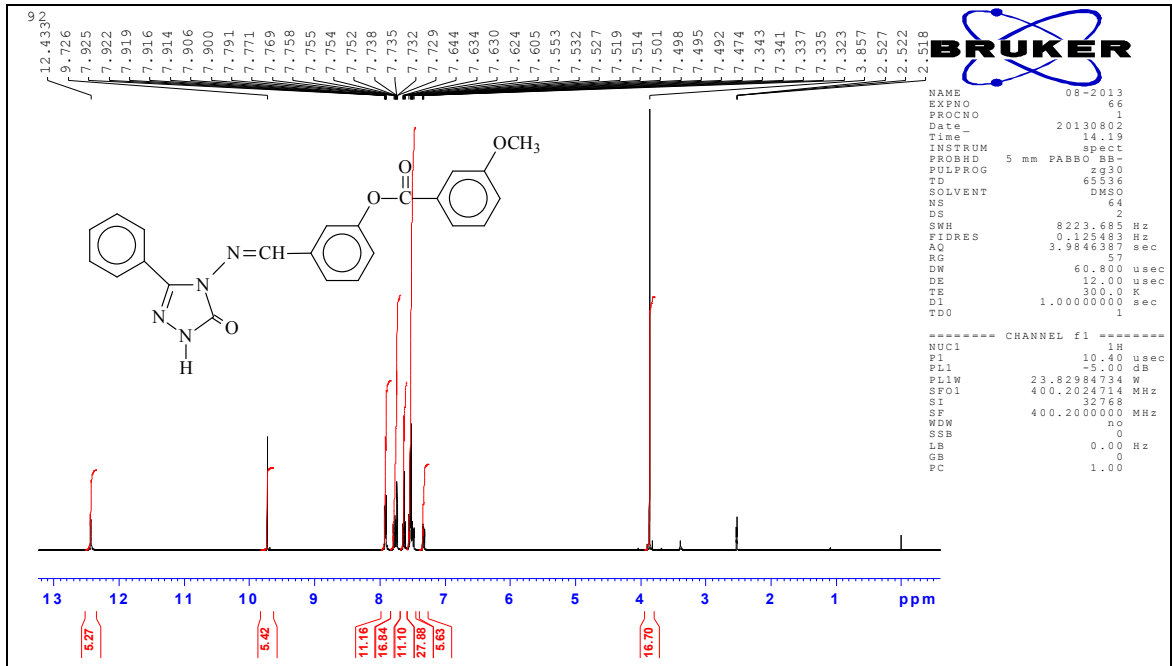
Ek Şekil 23. 183 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



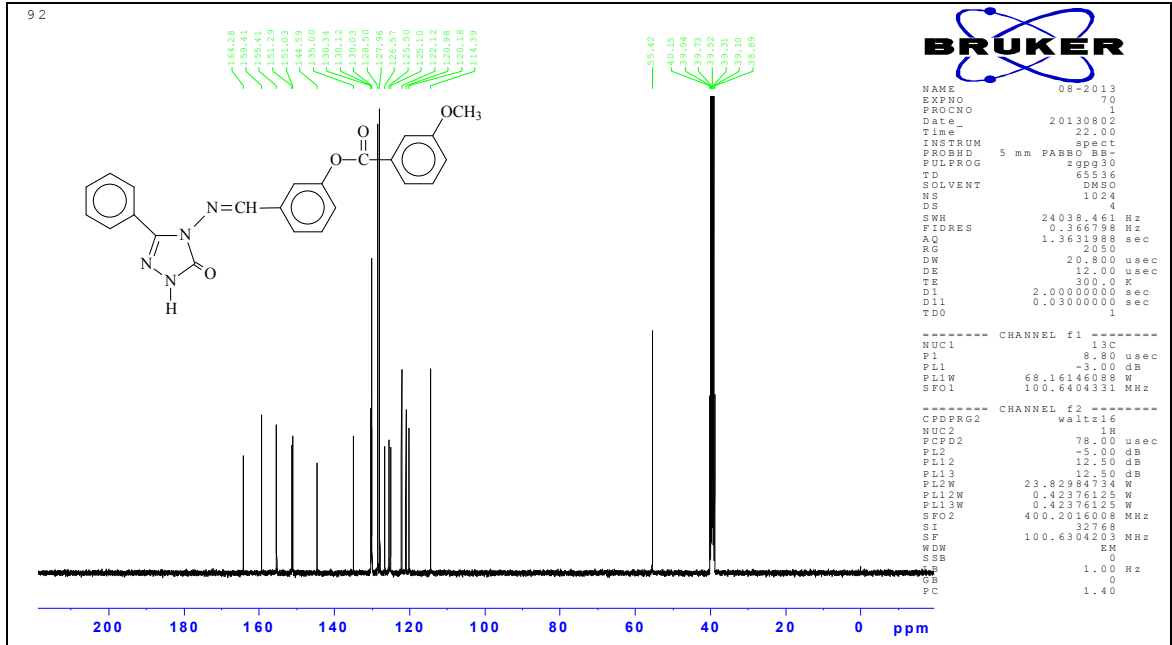
Ek Şekil 24. 183 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



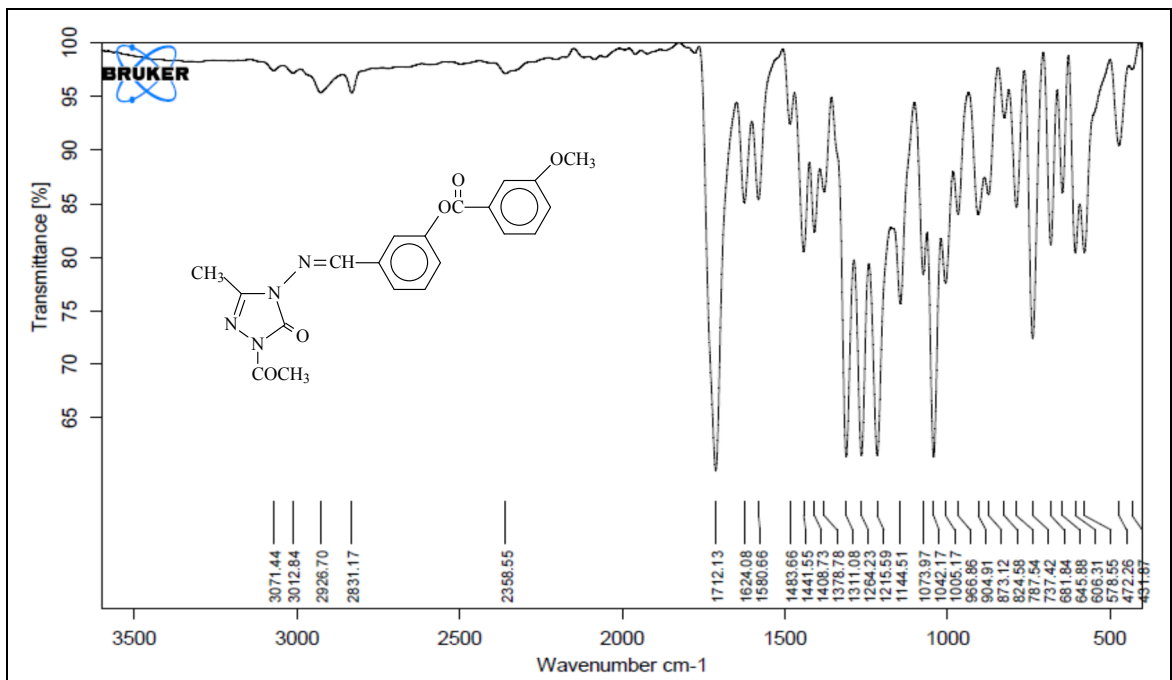
Ek Şekil 25. 184 Bileşiğinin IR spektrumu



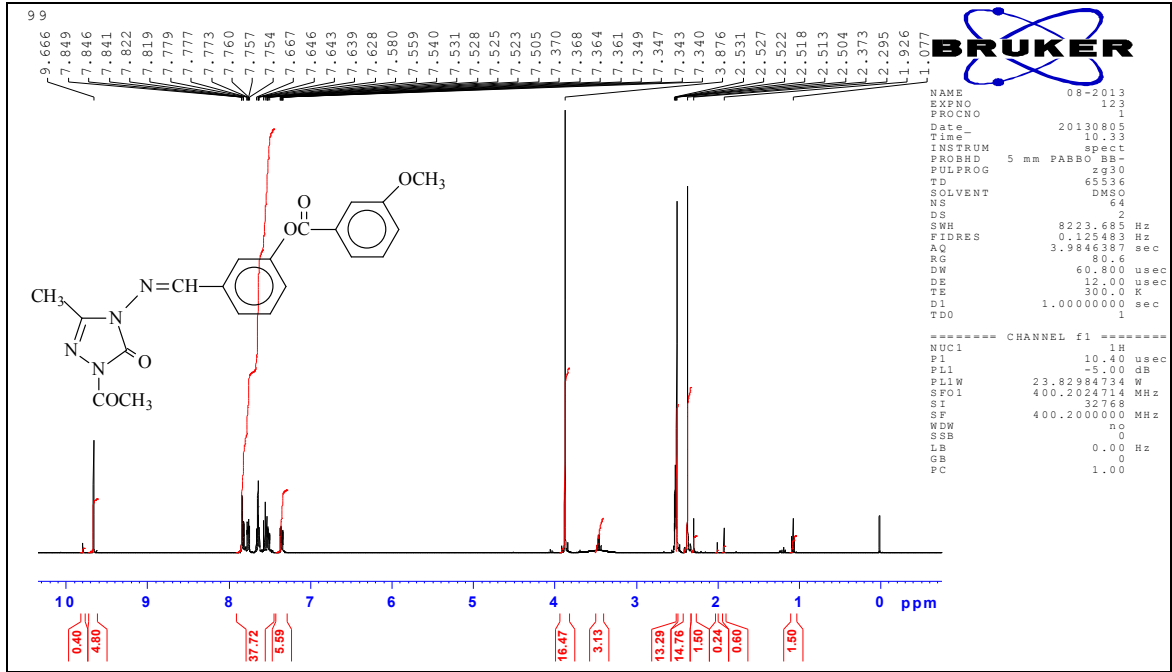
Ek Şekil 26. 184 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



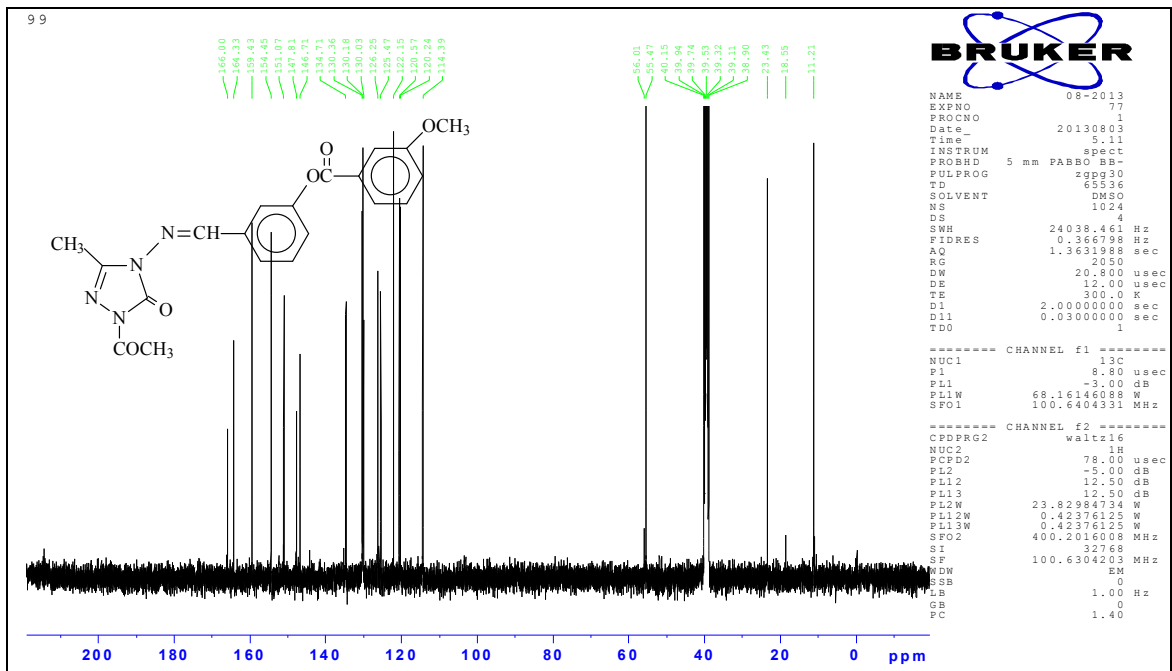
Ek Şekil 27. 184 Bileşiğinin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



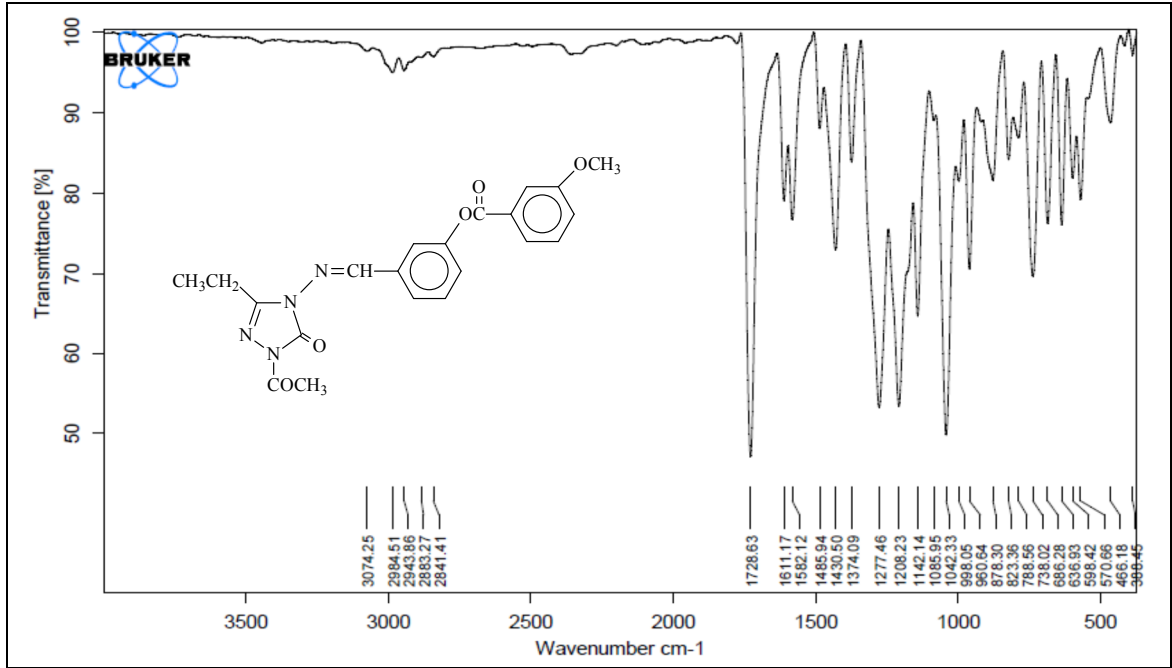
Ek Şekil 28. 186 Bileşiğinin IR spektrumu



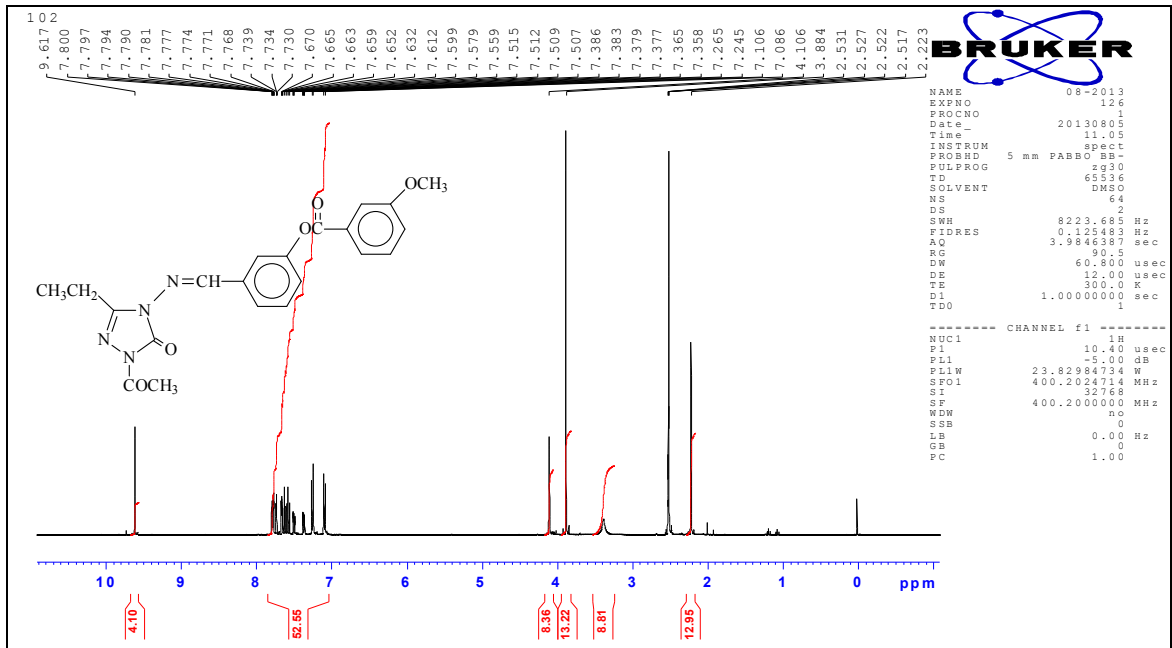
Ek Şekil 29. 186 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



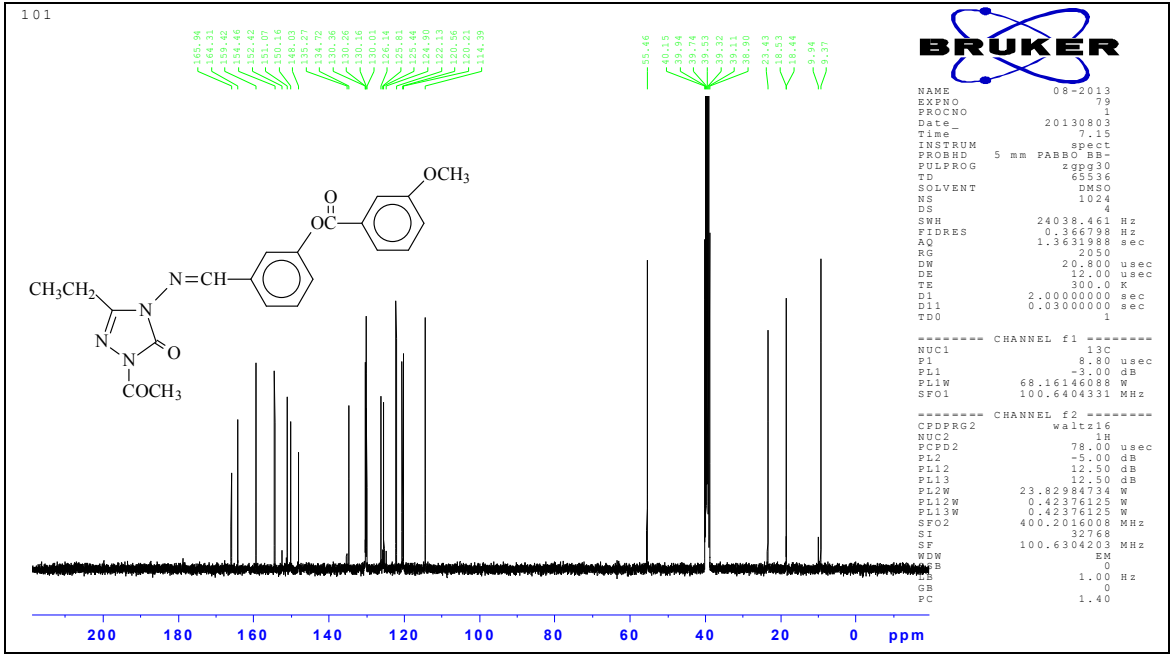
Ek Şekil 30. 186 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



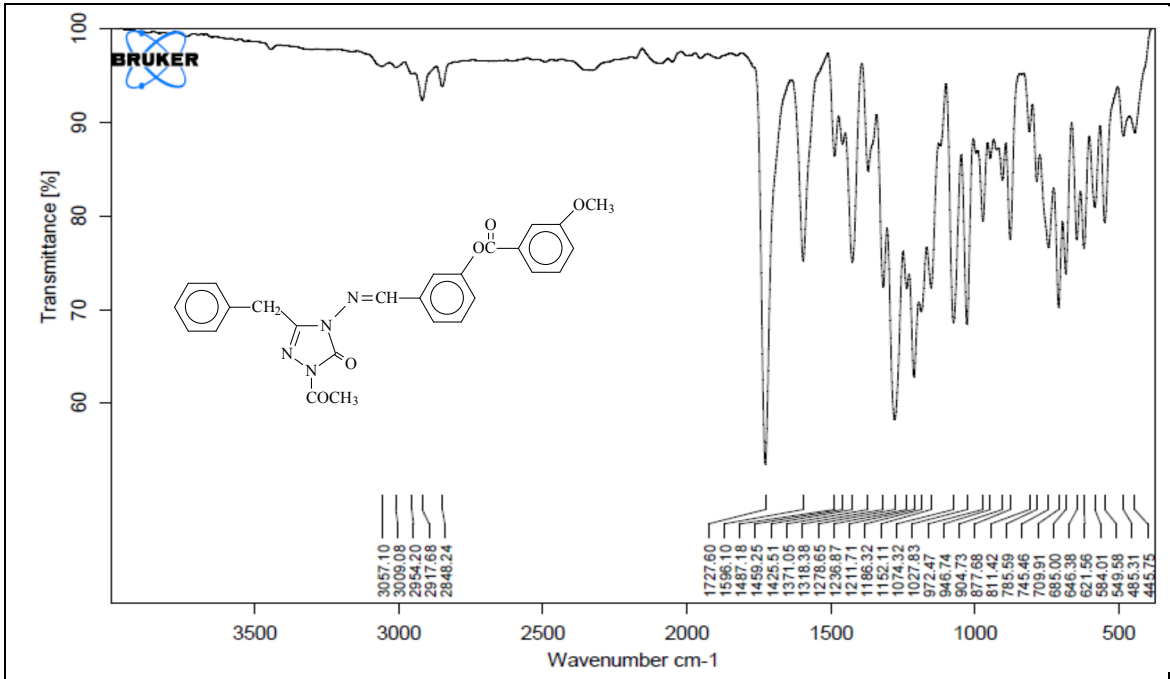
Ek Şekil 31. 187 Bileşiğinin IR spektrumu



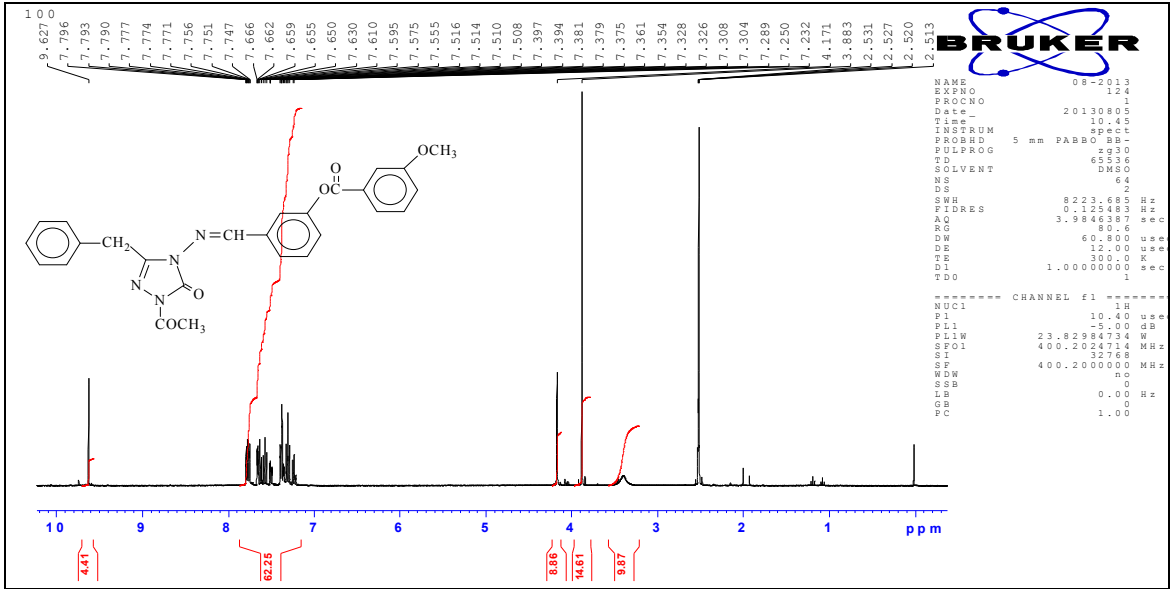
Ek Şekil 32. 187 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



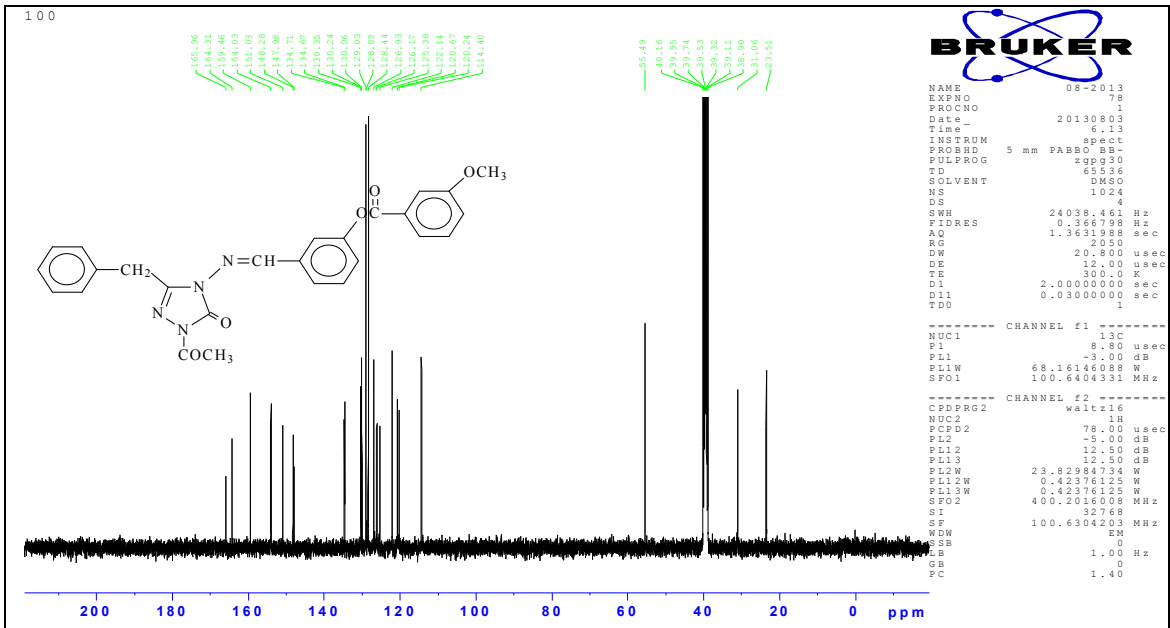
Ek Şekil 33. 187 Bileşiminin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



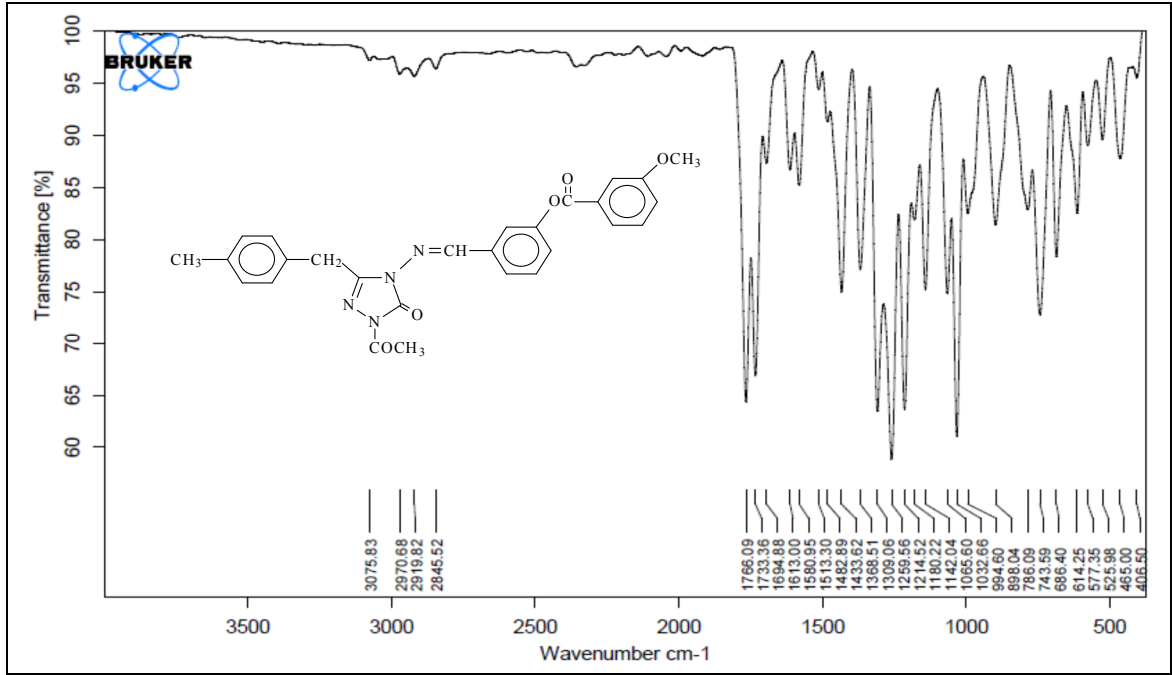
Ek Şekil 34. 188 Bileşiminin IR spektrumu



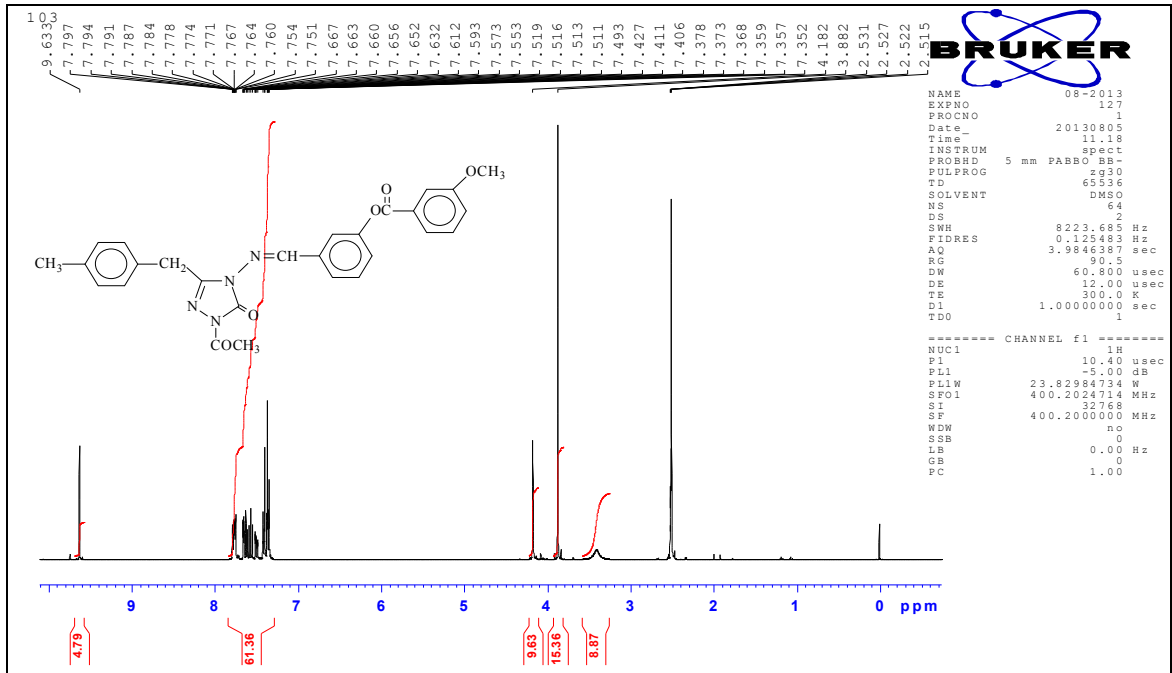
Ek Şekil 35. 188 Bileşiğinin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



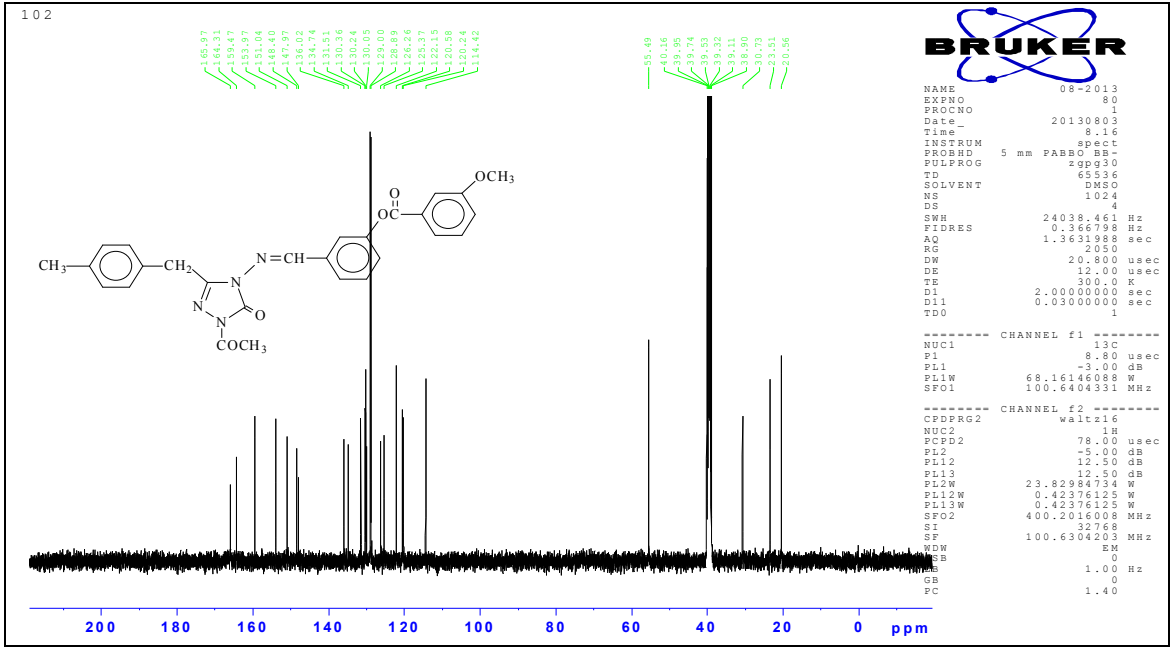
Ek Şekil 36. 188 Bileşiğinin ¹³C-NMR (DMSO-d₆) spektrumu



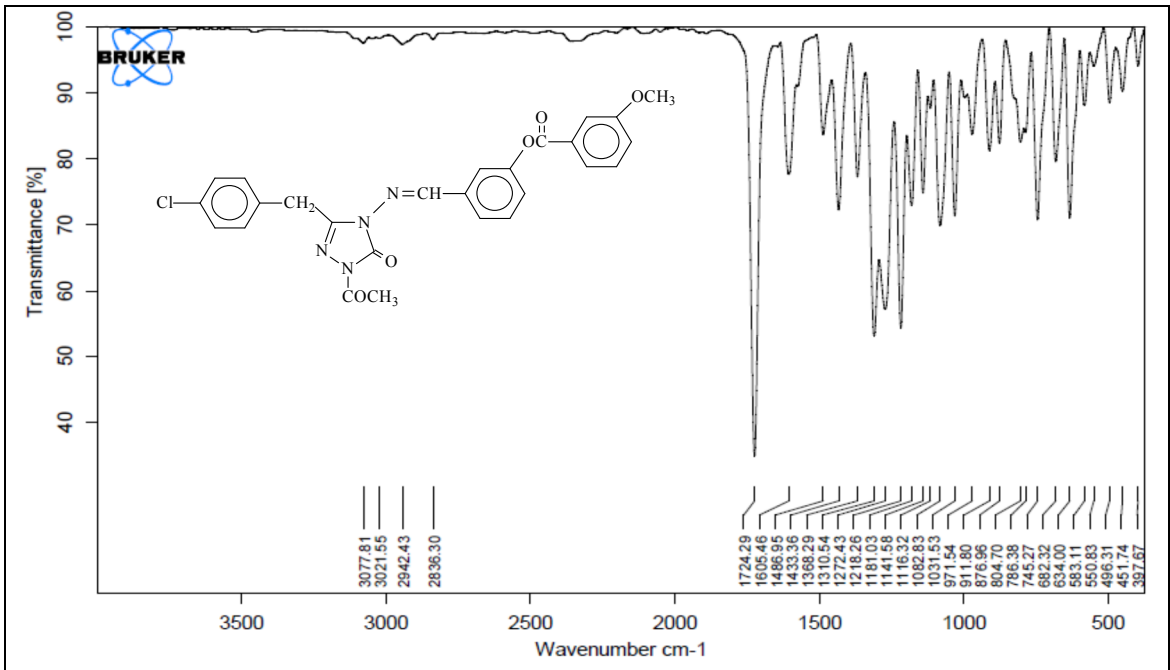
Ek Şekil 37. 189 Bileşiminin IR spektrumu



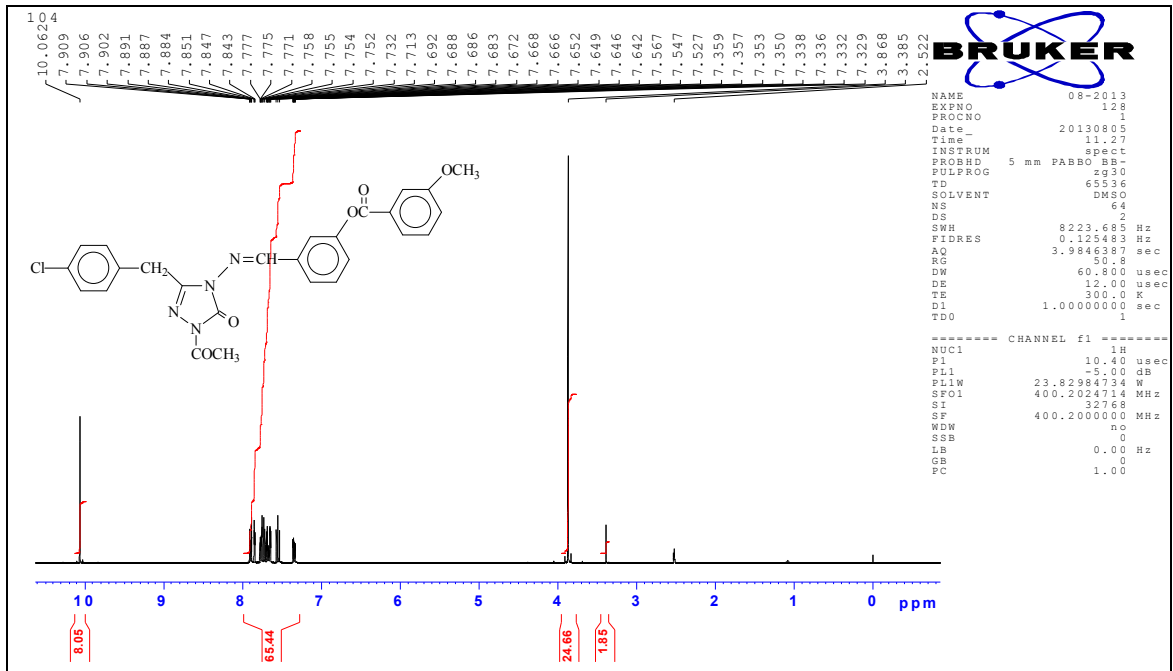
Ek Şekil 38. 189 Bileşiminin ¹H-NMR (DMSO-d₆) spektrumu

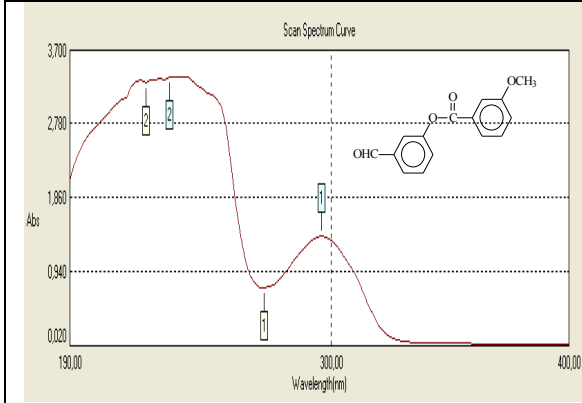


Ek Şekil 39. 189 Bileşiminin ^{13}C -NMR (DMSO- d_6) spektrumu



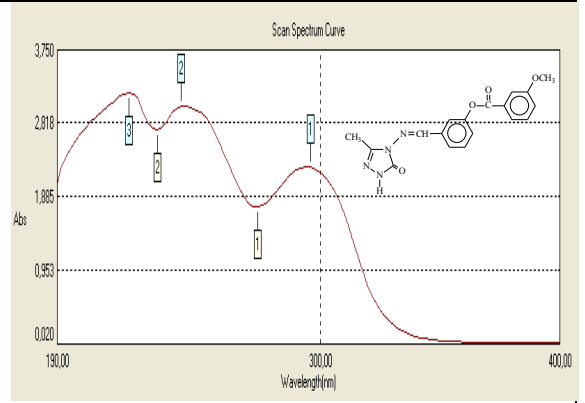
Ek Şekil 40. 190 Bileşiminin IR spektrumu





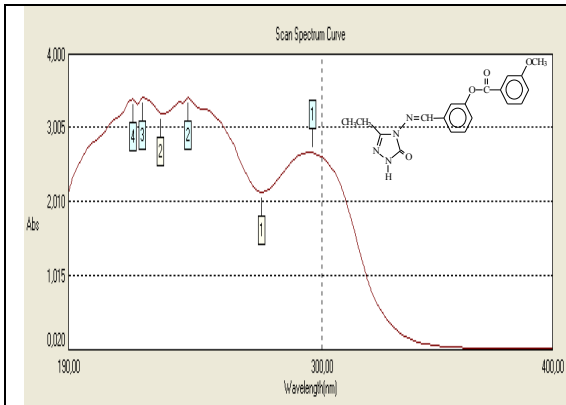
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	1,391	8087
240,00	3,367	16586
232,00	3,378	15425
220,00	3,345	19448

Ek Şekil.43. 175 Bileşiğinin UV spektrumu



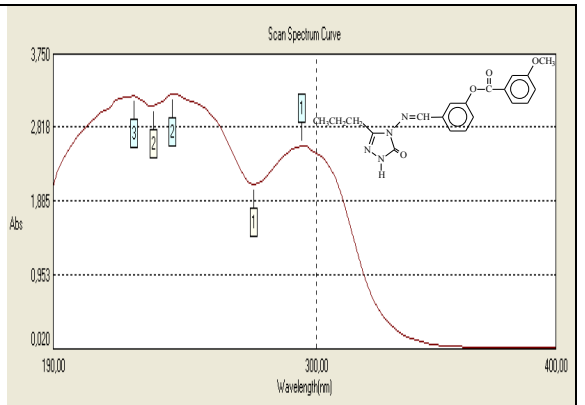
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	2.278	16750
242,00	3,039	13213
220,00	3.217	23654

Ek Şekil.44. 177 Bileşiğinin UV spektrumu



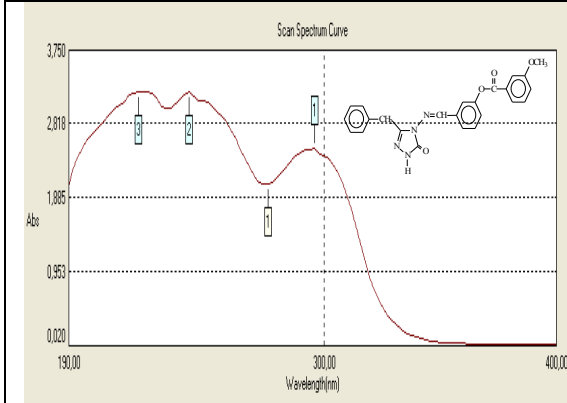
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	2,688	18929
242,00	3,425	24119
222,00	3,423	24105
218,00	3,410	24014

Ek Şekil. 45.178 Bileşiğinin UV spektrumu



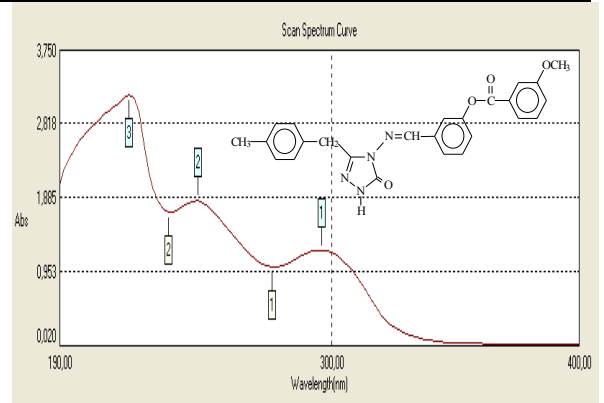
Wavelength(nm)	Abs	Comment
294,00	2,595	16424
240,00	3,256	20607
224,00	3.227	20424

Ek Şekil.46. 179 Bileşiğinin UV spektrumu



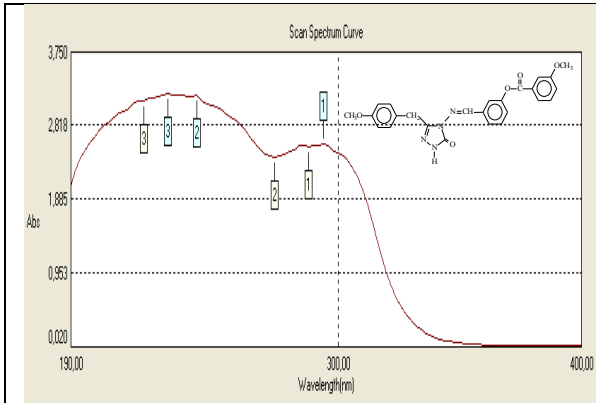
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	2,513	20768
242,00	3,228	26677
220,00	3,225	26652

Ek Şekil.47. 180 Bileşiğinin UV spektrumu



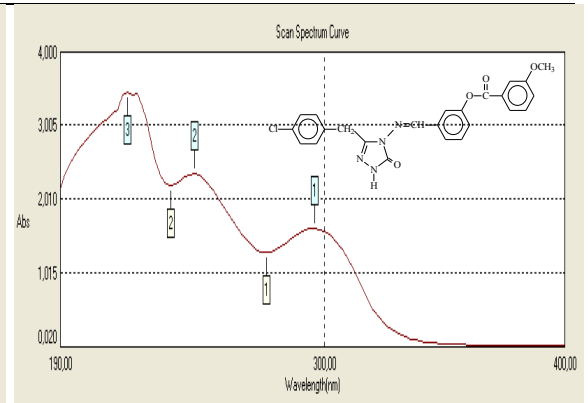
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	1,225	13611
246,00	1,848	20533
218,00	3,192	35466

Ek Şekil.48. 181 Bileşiğinin UV spektrumu



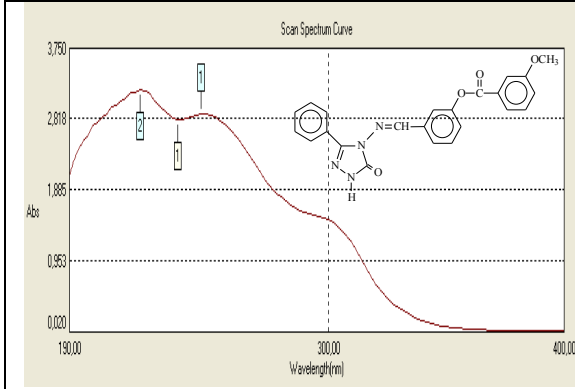
Wavelength(nm)	Abs	Comment
294,00	2,582	21516
242,00	3,212	26766
230,00	3,223	26858

Ek Şekil. 49.182 Bileşiğinin UV spektrumu



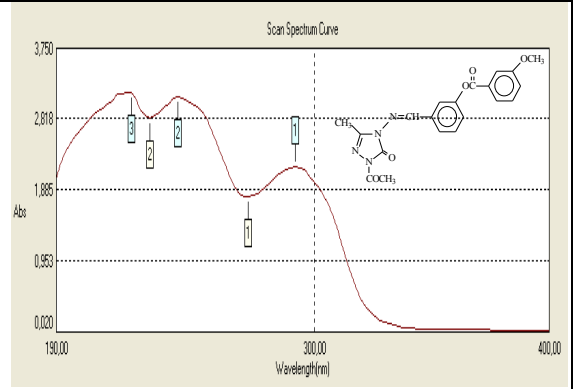
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	1,617	17021
246,00	2,358	24821
222,00	3,441	36221
218,00	3,475	36578

Ek Şekil. 50.183 Bileşiğinin UV spektrumu



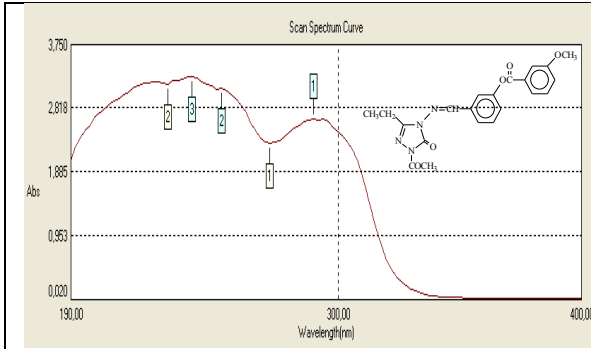
Wavelength(nm)	Abs	Comment
296,00	1,541	16052
246,00	2,892	30125
220,00	3,204	33375

Ek Şekil 51. 184 Bileşiminin UV spektrumu



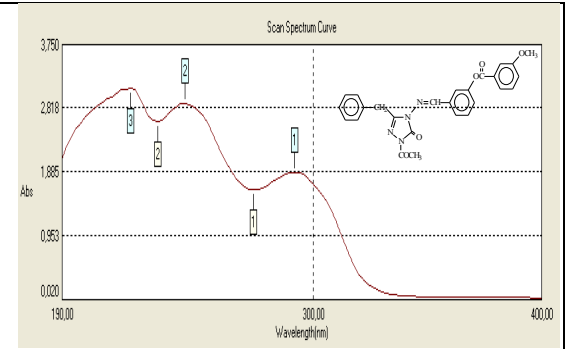
Wavelength(nm)	Abs	Comment
292,00	2,187	18225
242,00	3,126	26050
222,00	3,175	26458

Ek Şekil 52. 186 Bileşiminin UV spektrumu



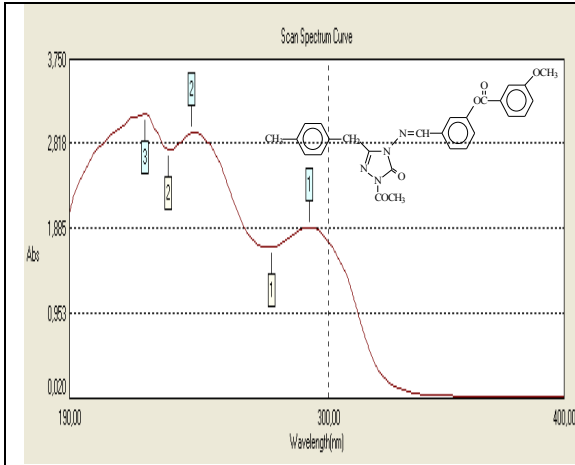
Wavelength(nm)	Abs	Comment
290,00	2,661	22743
252,00	3,111	26589
240,00	3,290	28119
222,00	3,190	27264

Ek Şekil 53. 187 Bileşiminin UV spektrumu



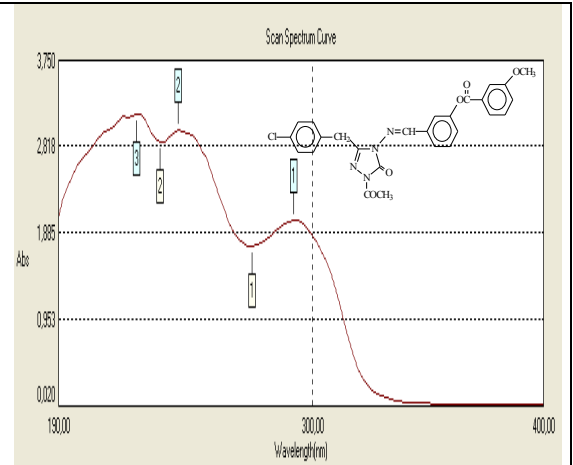
Wavelength(nm)	Abs	Comment
292,00	1,883	18460
244,00	2,899	28421
220,00	3,114	30529

Ek Şekil 54. 188 Bileşiminin UV spektrumu



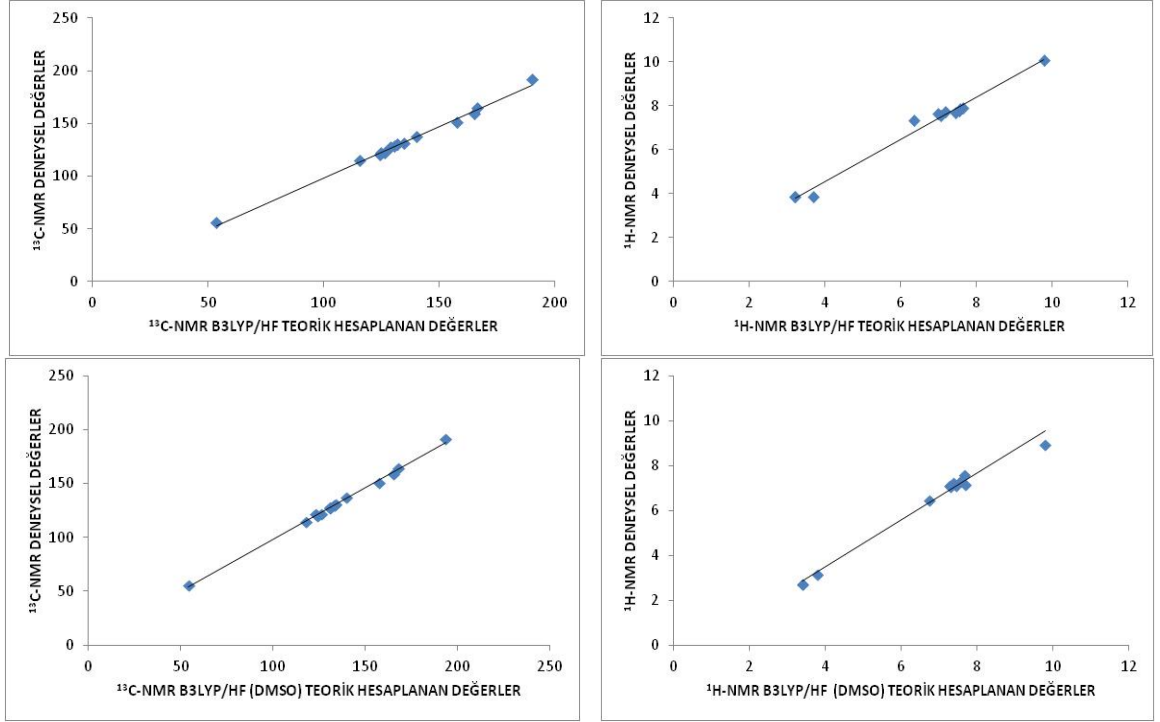
Wavelength(nm)	Abs	Comment
290,00	1,901	22903
242,00	2,954	35590
222,00	3,153	27987

Ek Şekil 55. 189 Bileşiğinin UV spektrumu

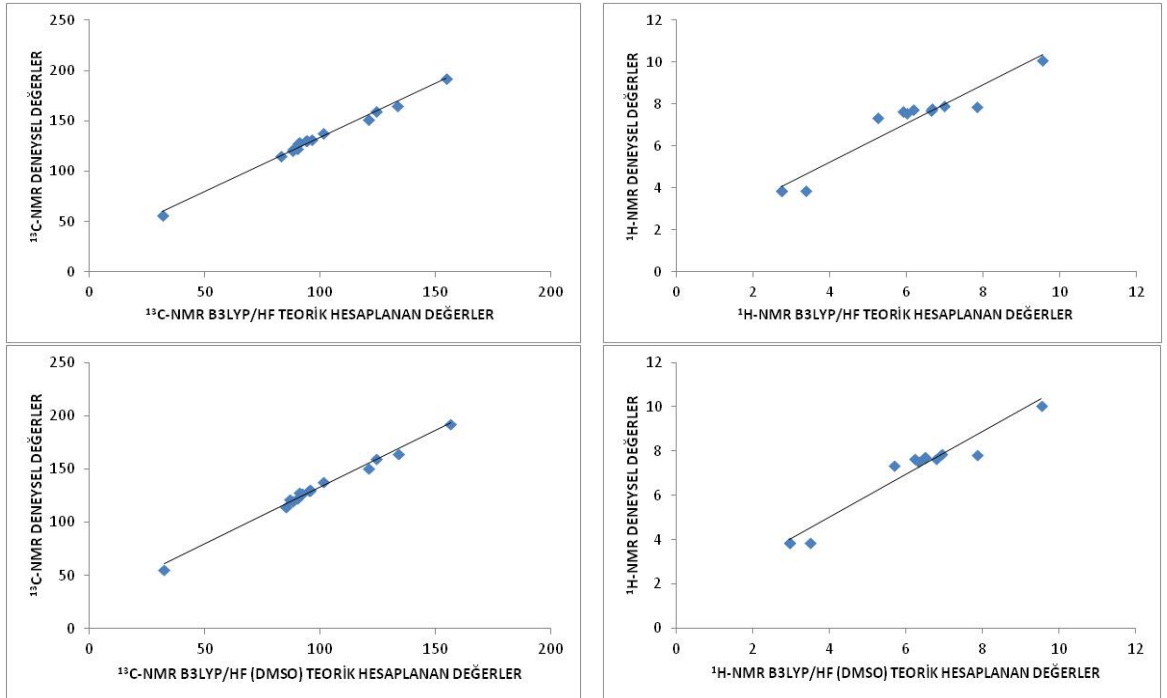


Wavelength(nm)	Abs	Comment
292,00	2,025	19660
242,00	3,012	29242
224,00	3,182	30893

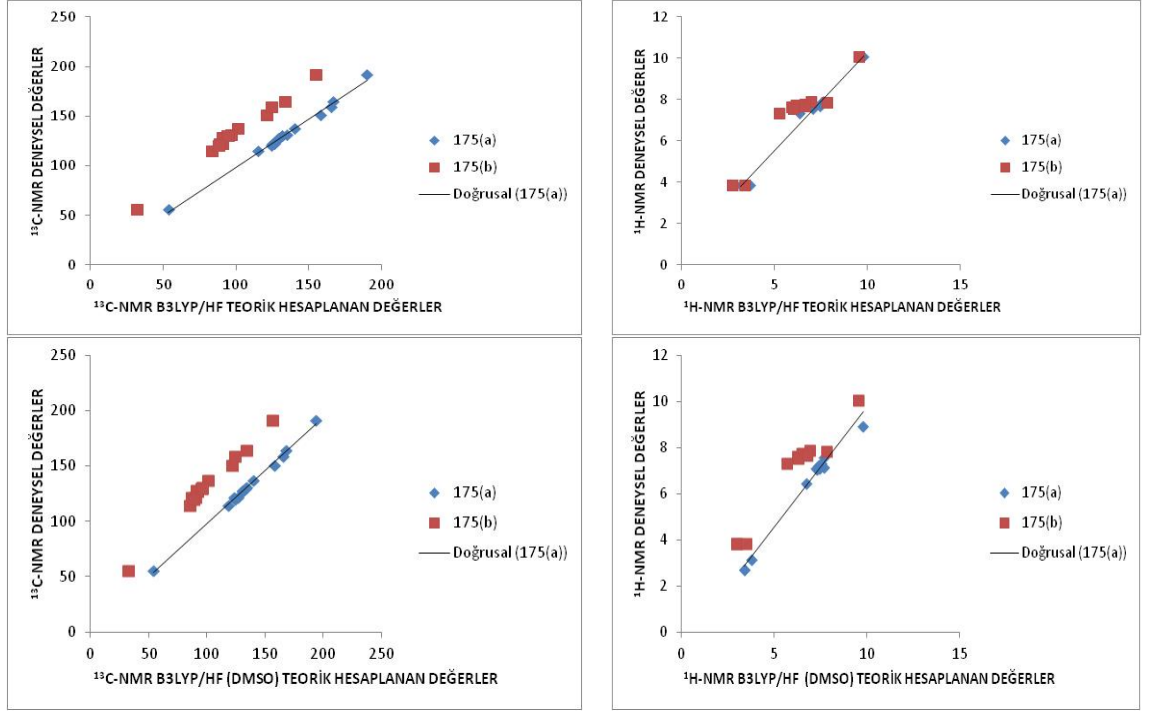
Ek Şekil 56. 190 Bileşiğinin UV spektrumu



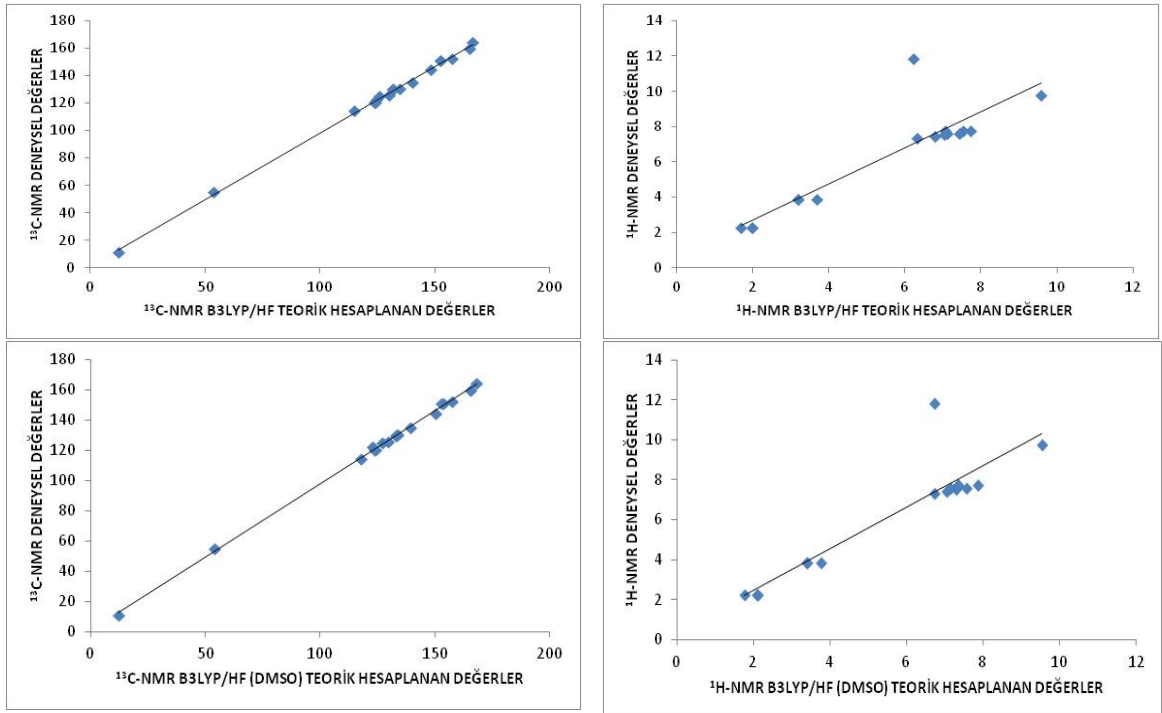
Ek Şekil 57. 175 Bileşiğinin 6-31G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



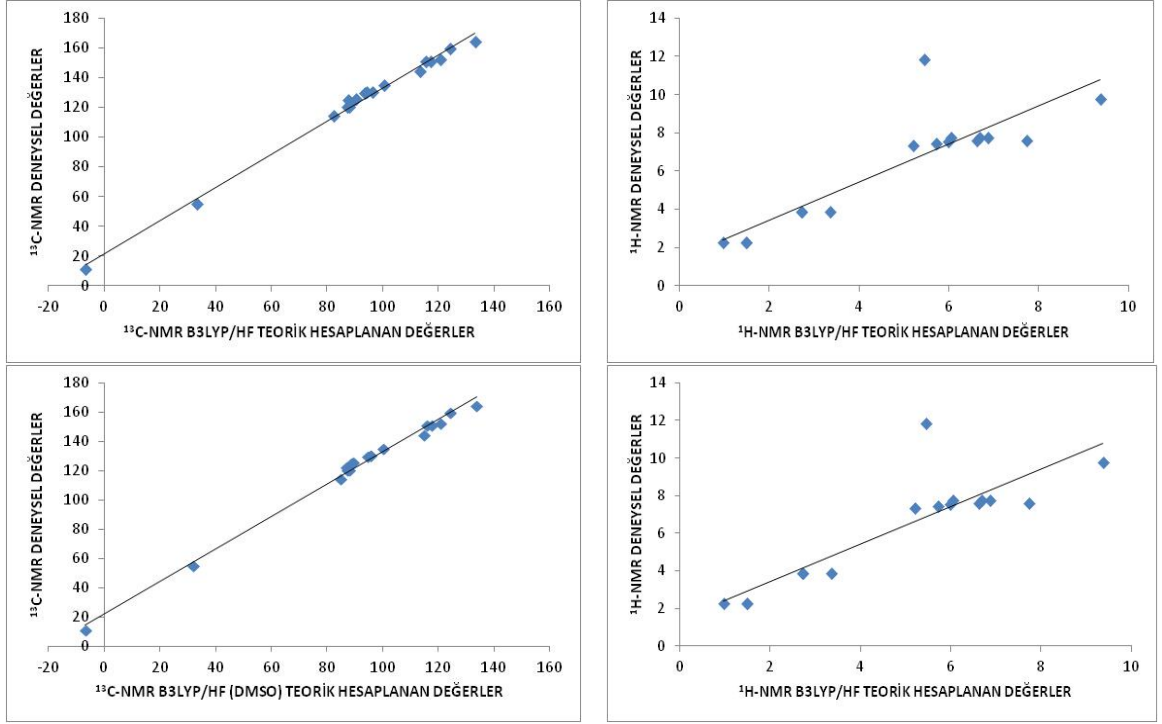
Ek Şekil 58. 175 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



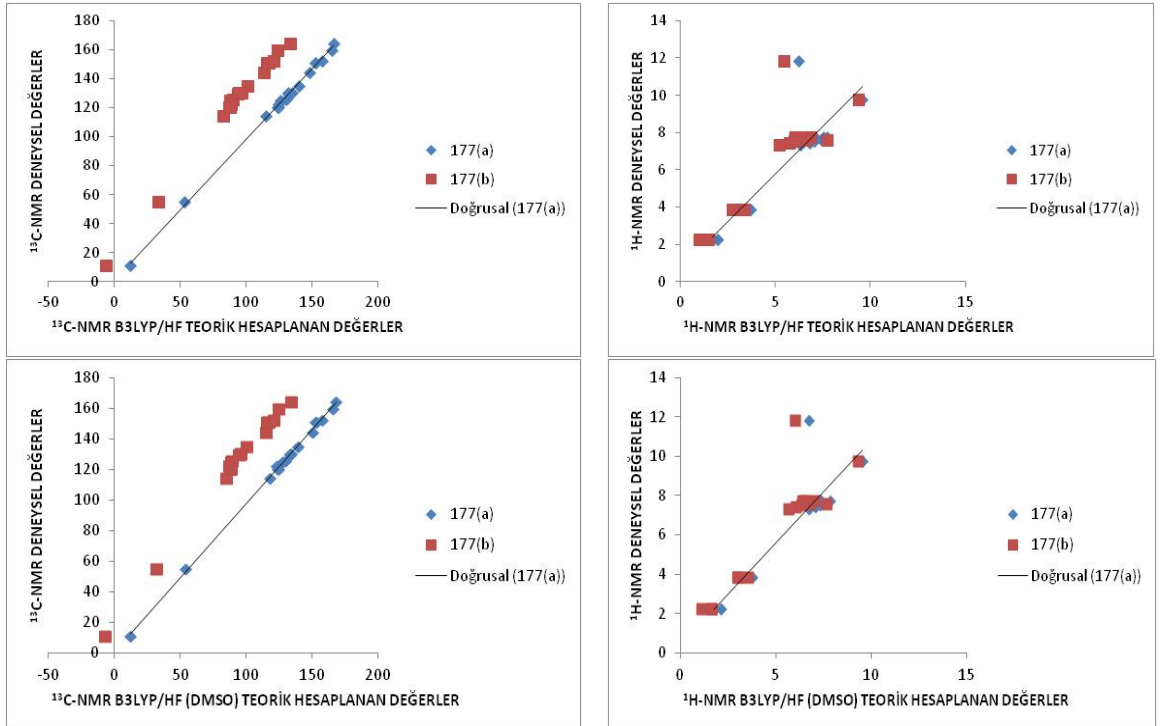
Ek Şekil 59. 175 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



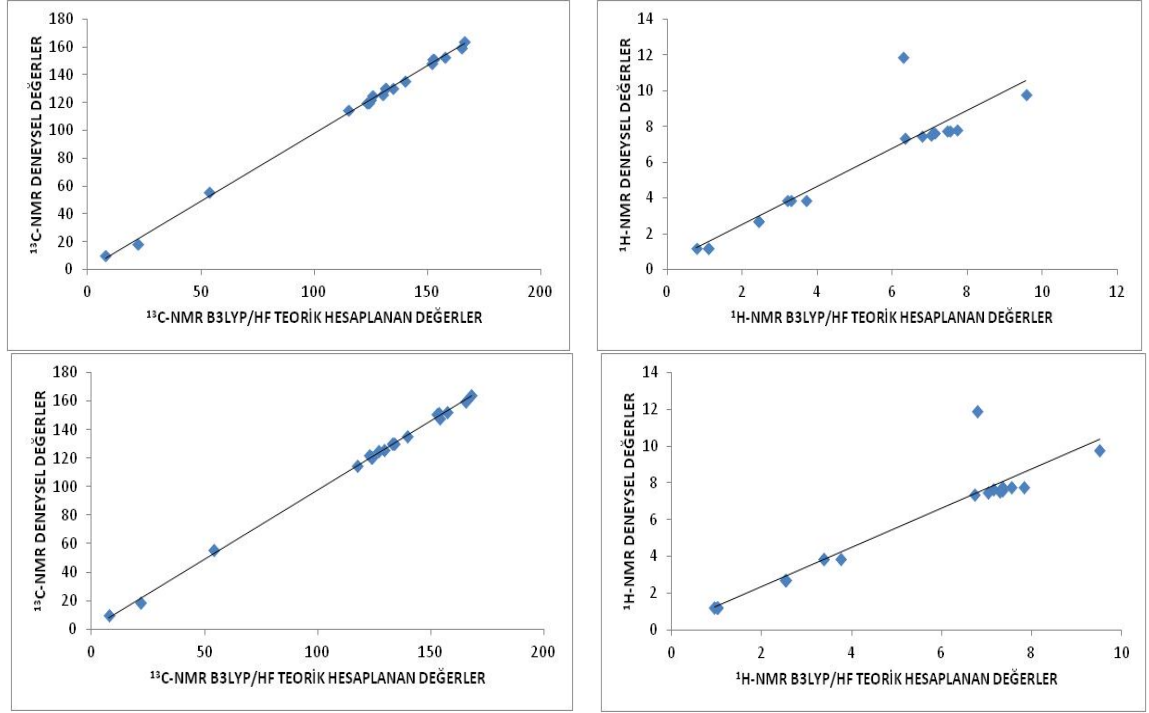
Ek Şekil 60. 177 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



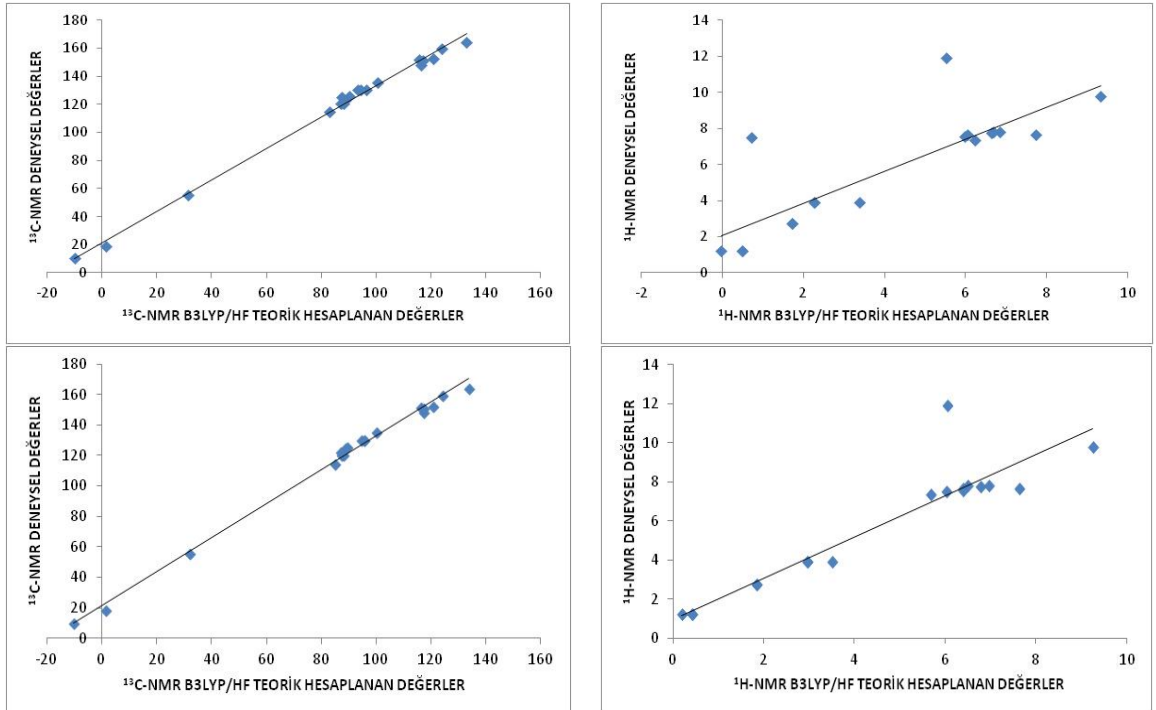
Ek Şekil 61. 177 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



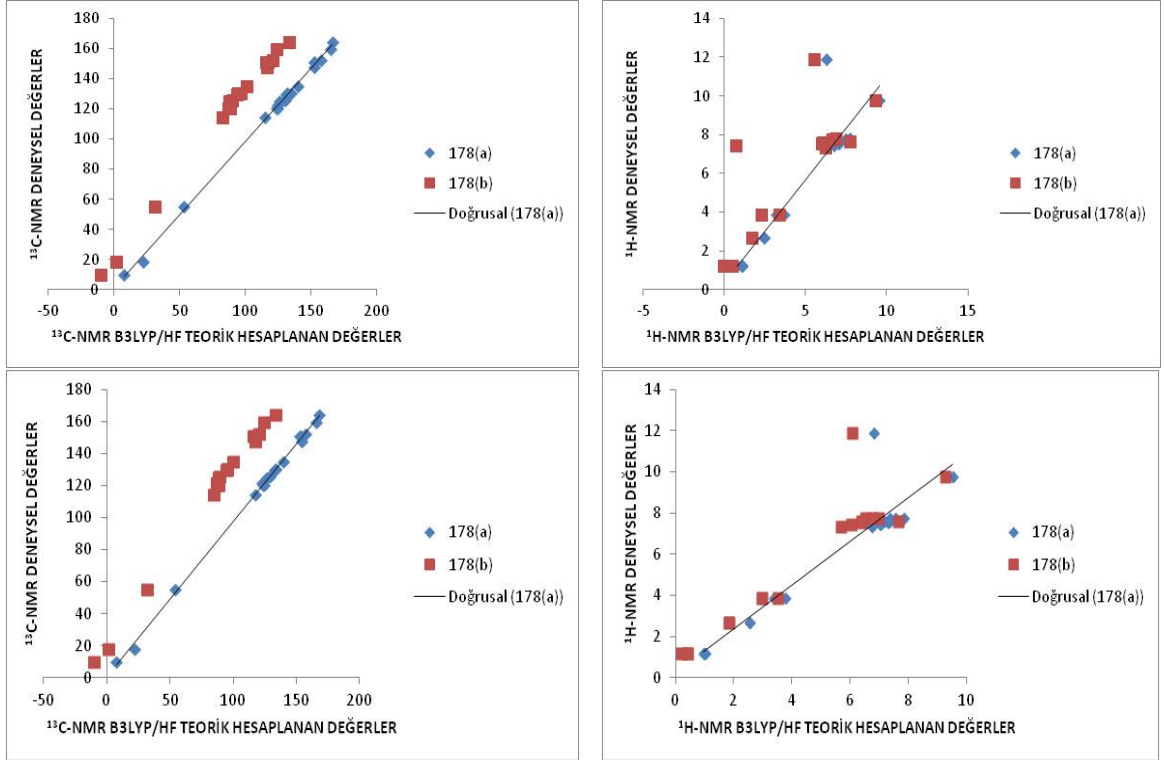
Ek Şekil 62. 177 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



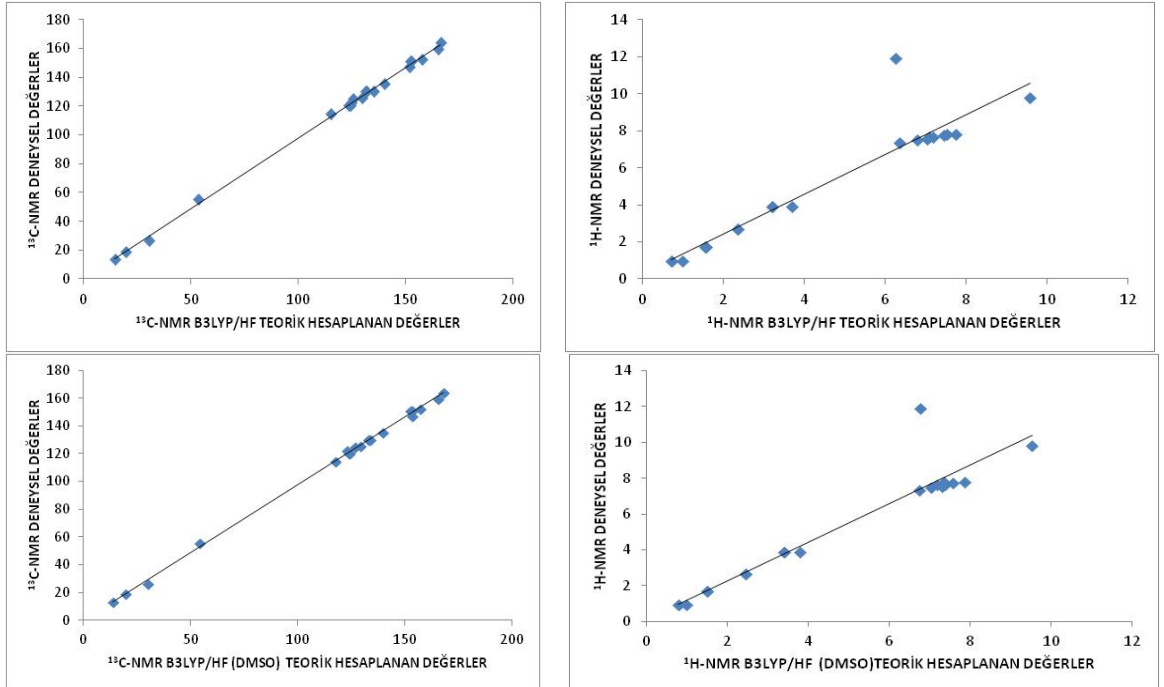
Ek Şekil 63. 178 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



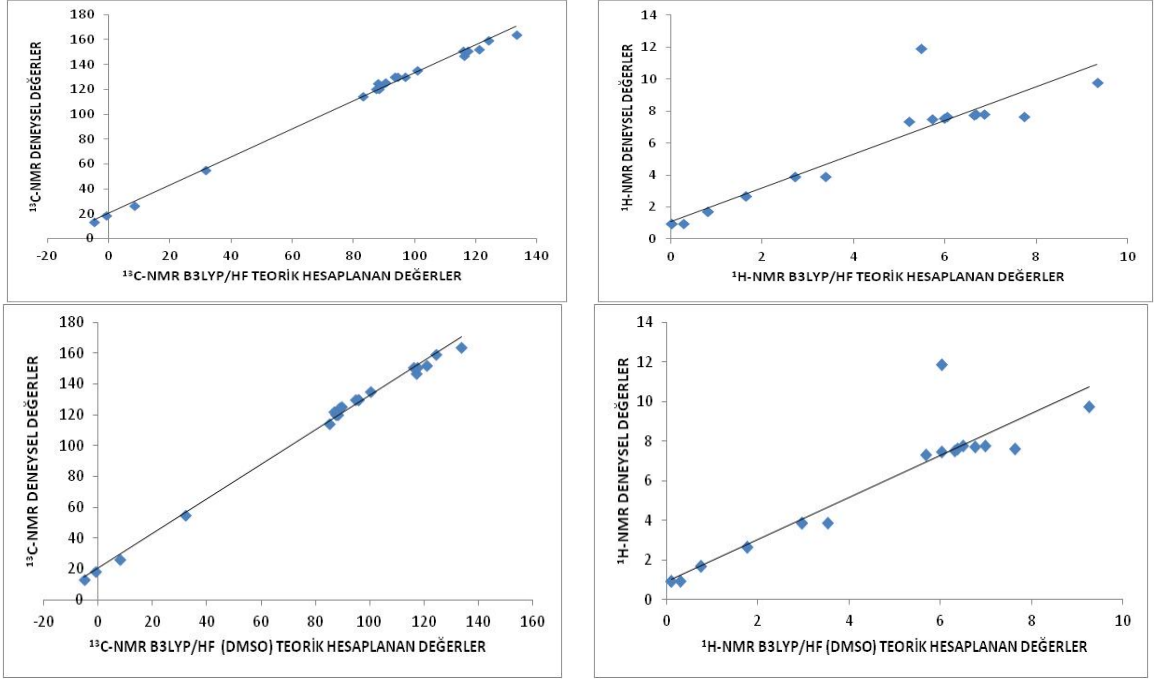
Ek Şekil 64. 178 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



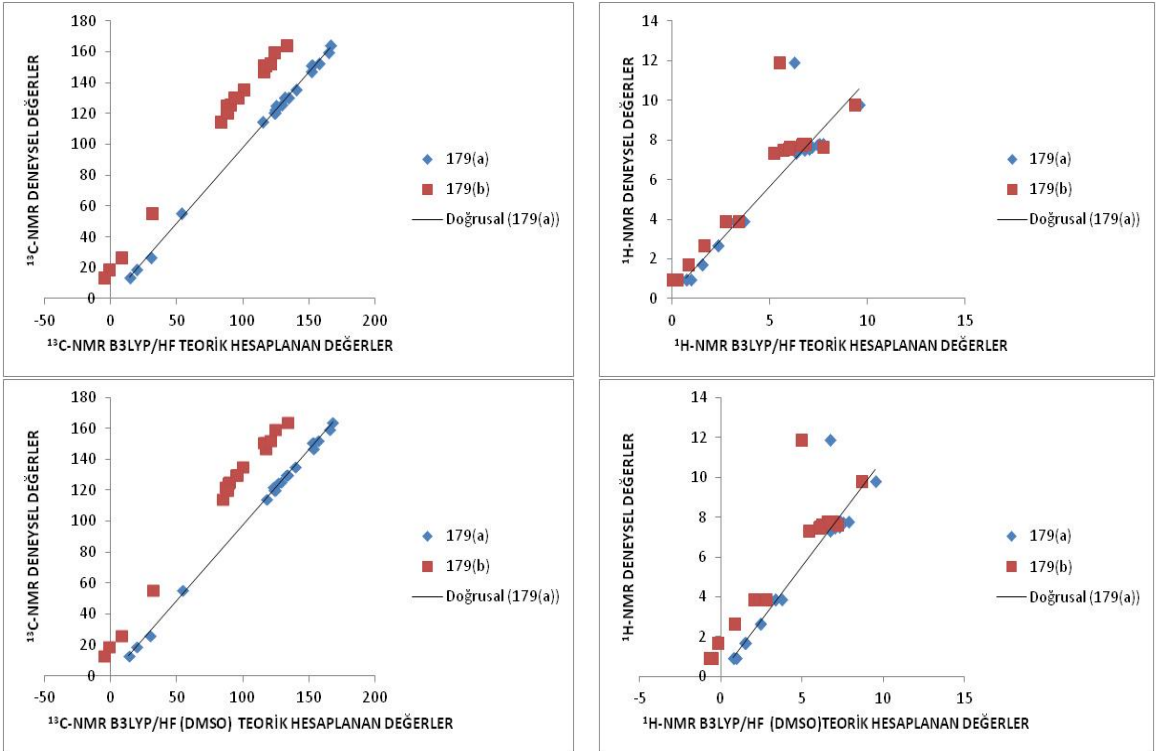
Ek Şekil 65. 178 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



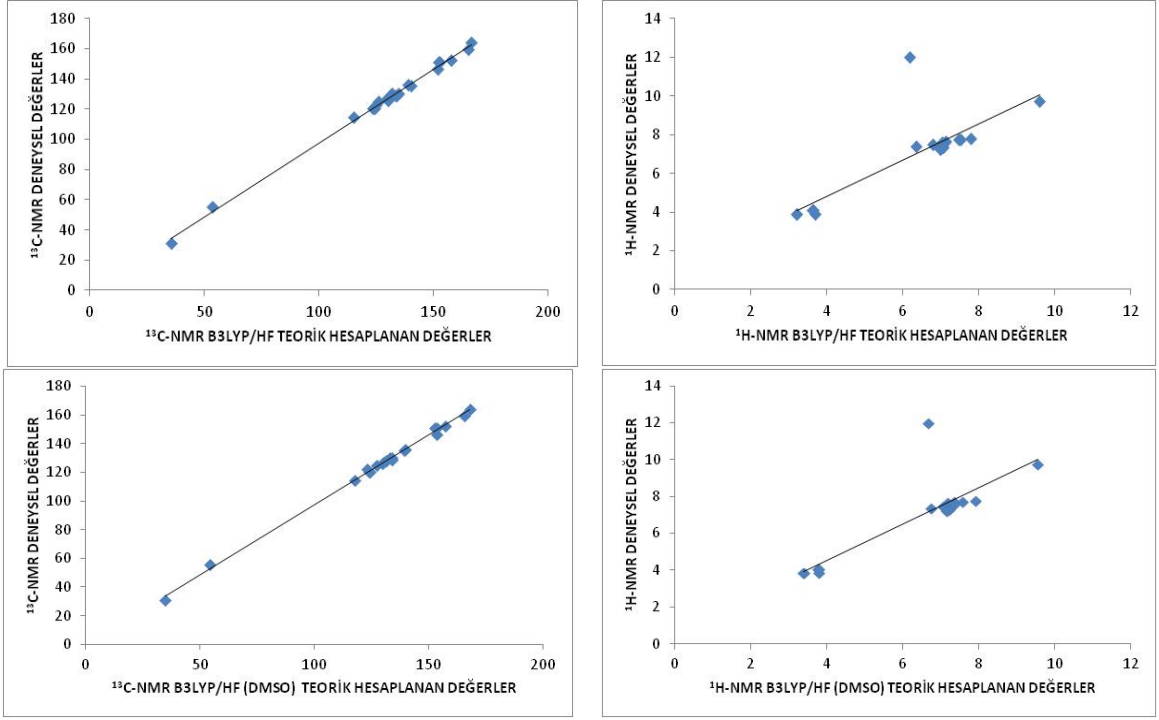
Ek Şekil 66. 179 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) (6311G(d) temel setine göre) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



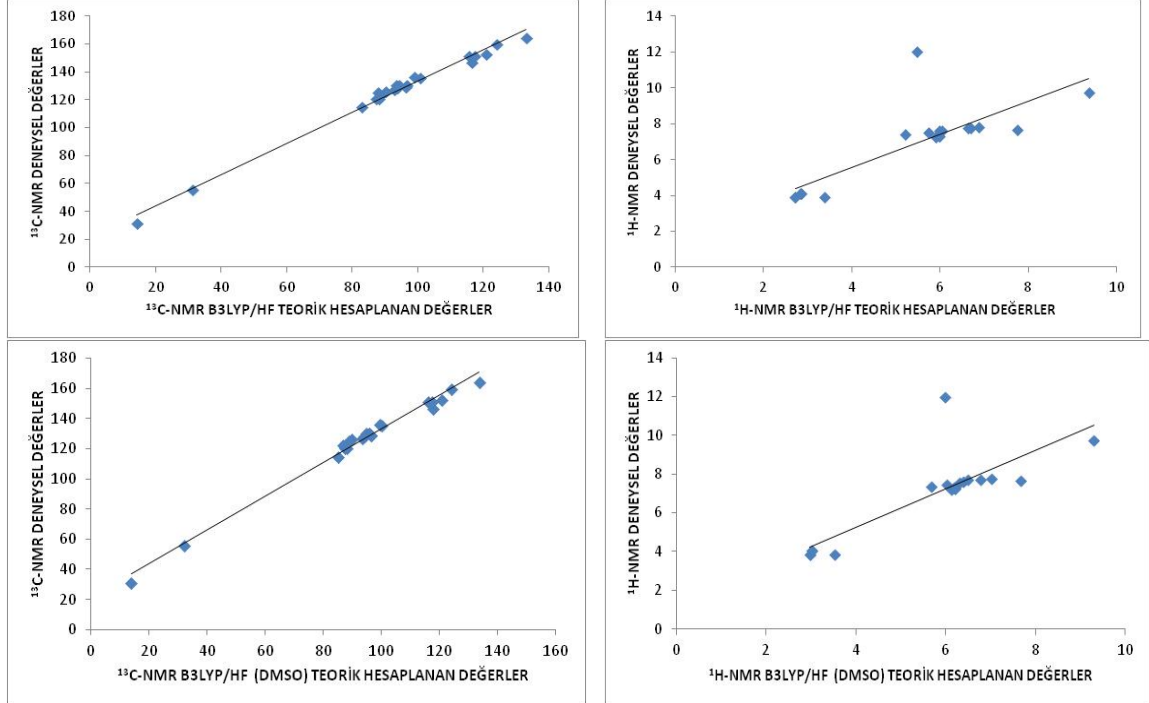
Ek Şekil 67. 179 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



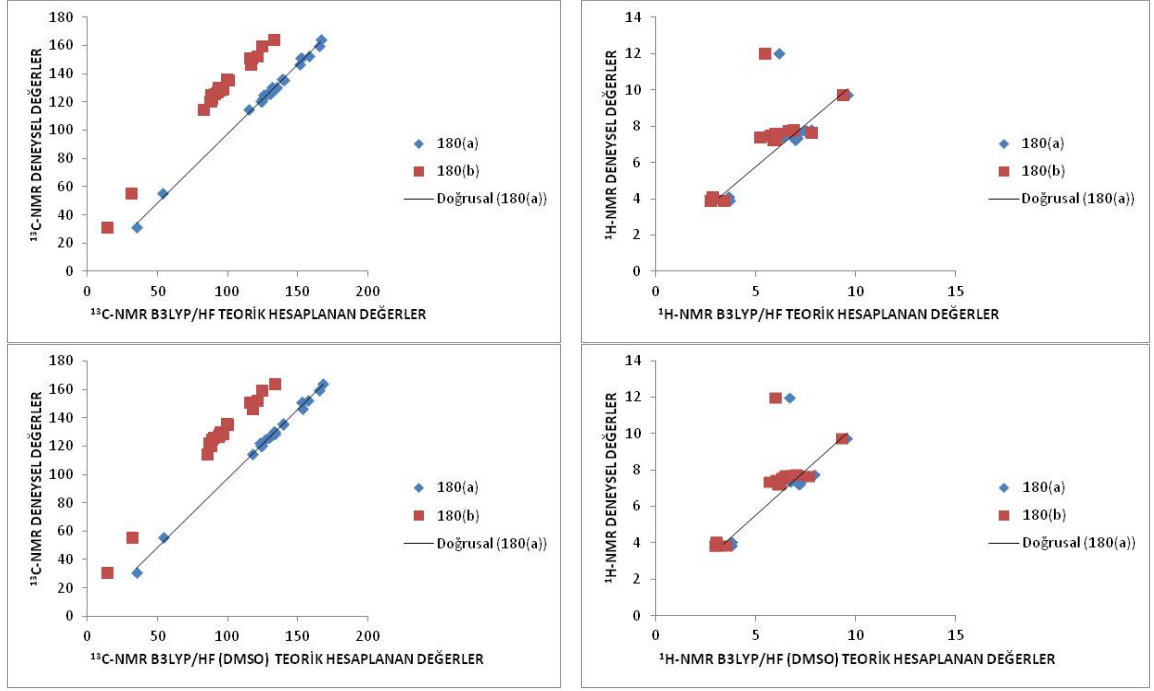
Ek Şekil 68. 179 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



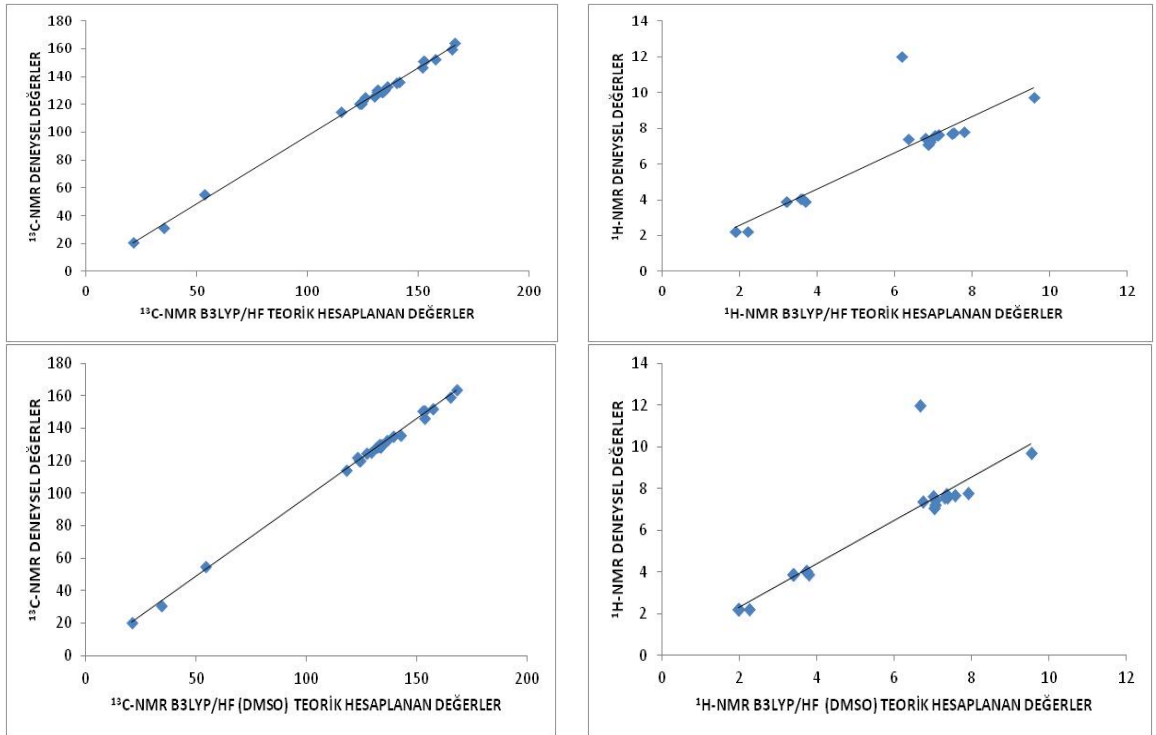
Ek Şekil 69. 180 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



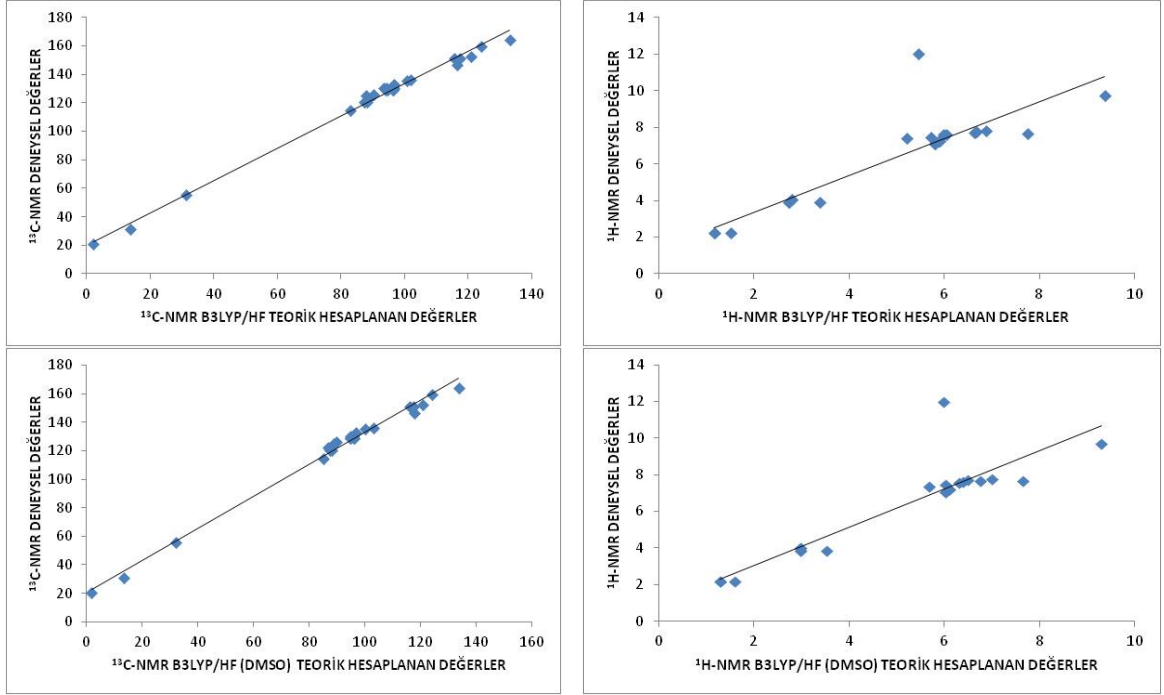
Ek Şekil 70. 180 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



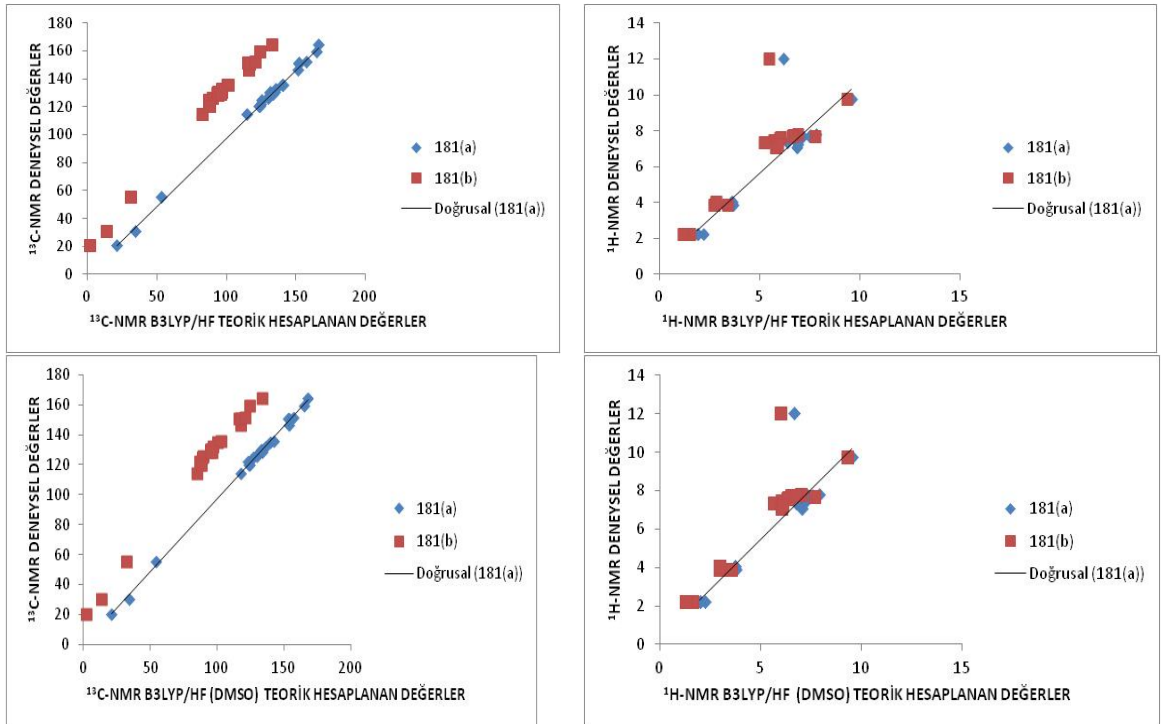
Ek Şekil 71. 180 Bileşiminin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



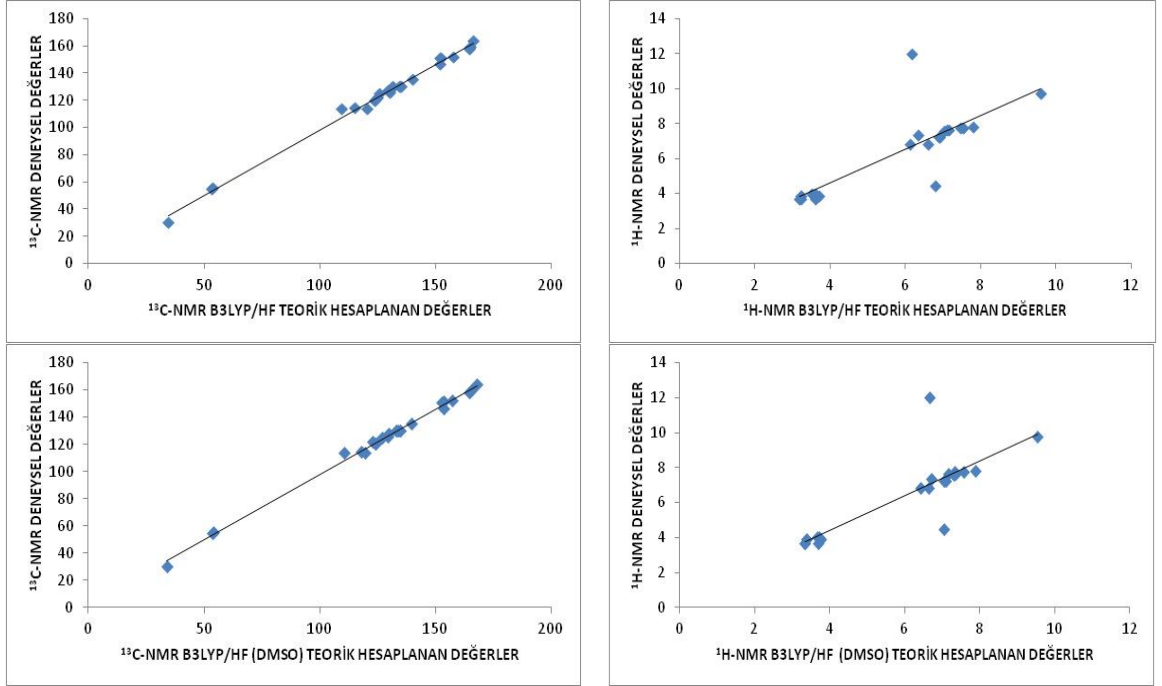
Ek Şekil 72. 181 Bileşiminin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



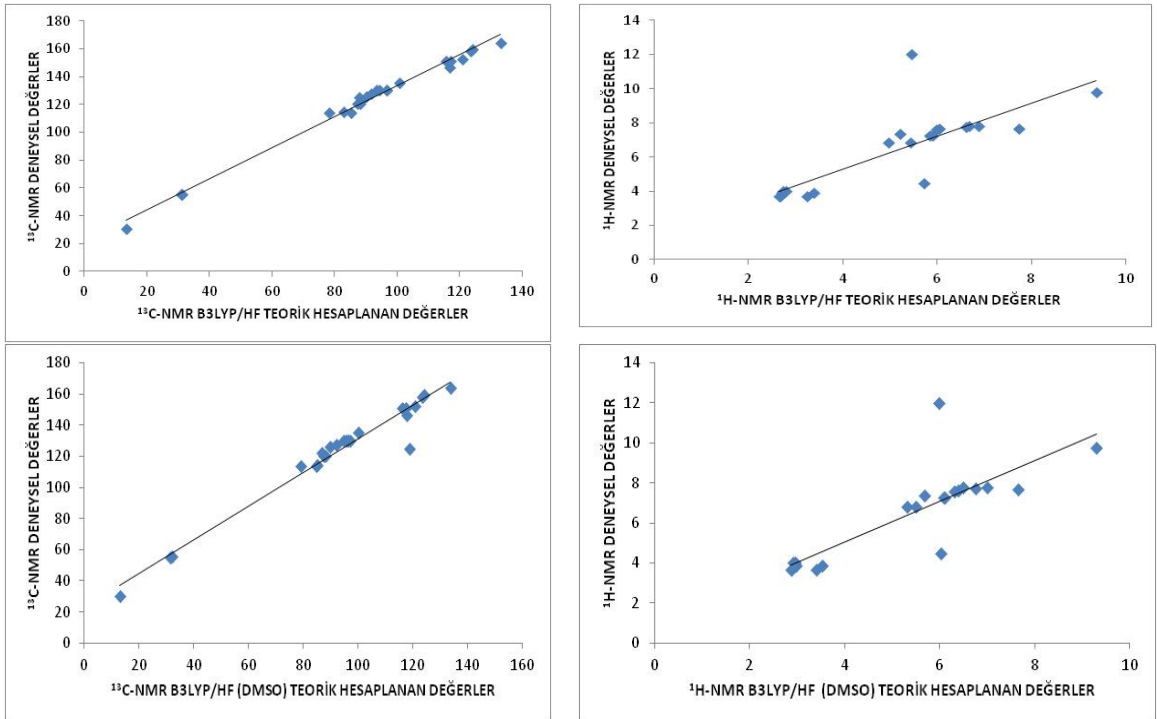
Ek Şekil 73. 181 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



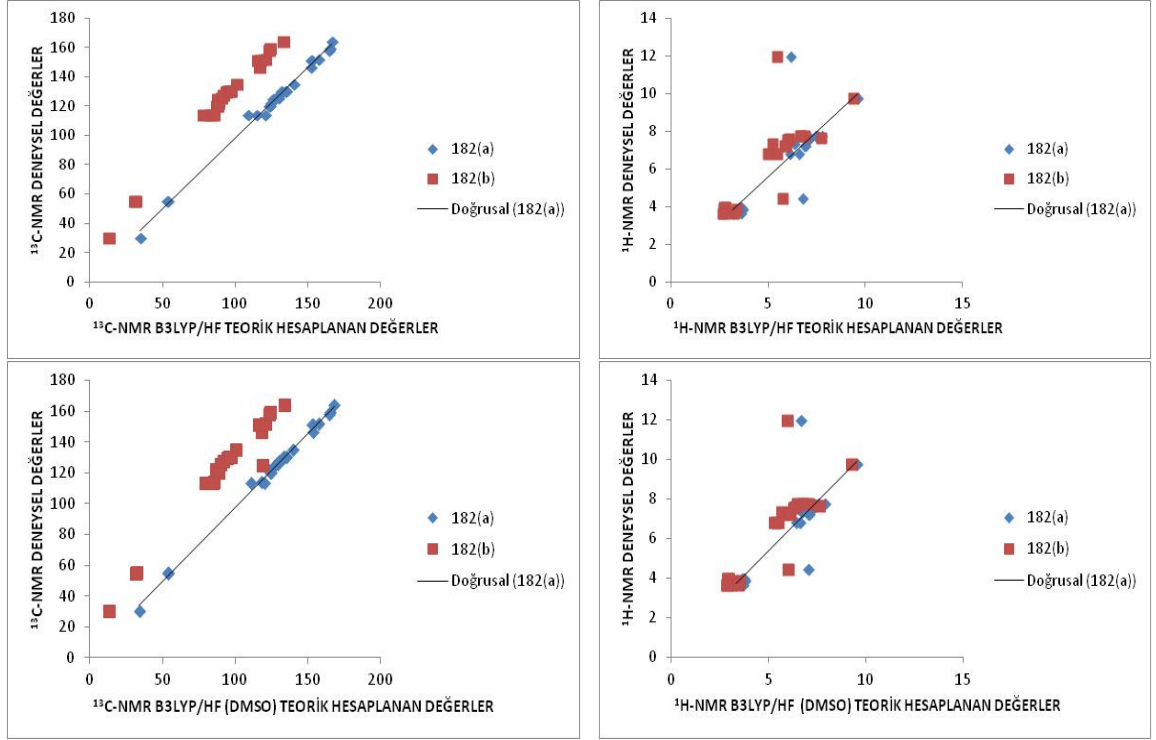
Ek Şekil 74. 181 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



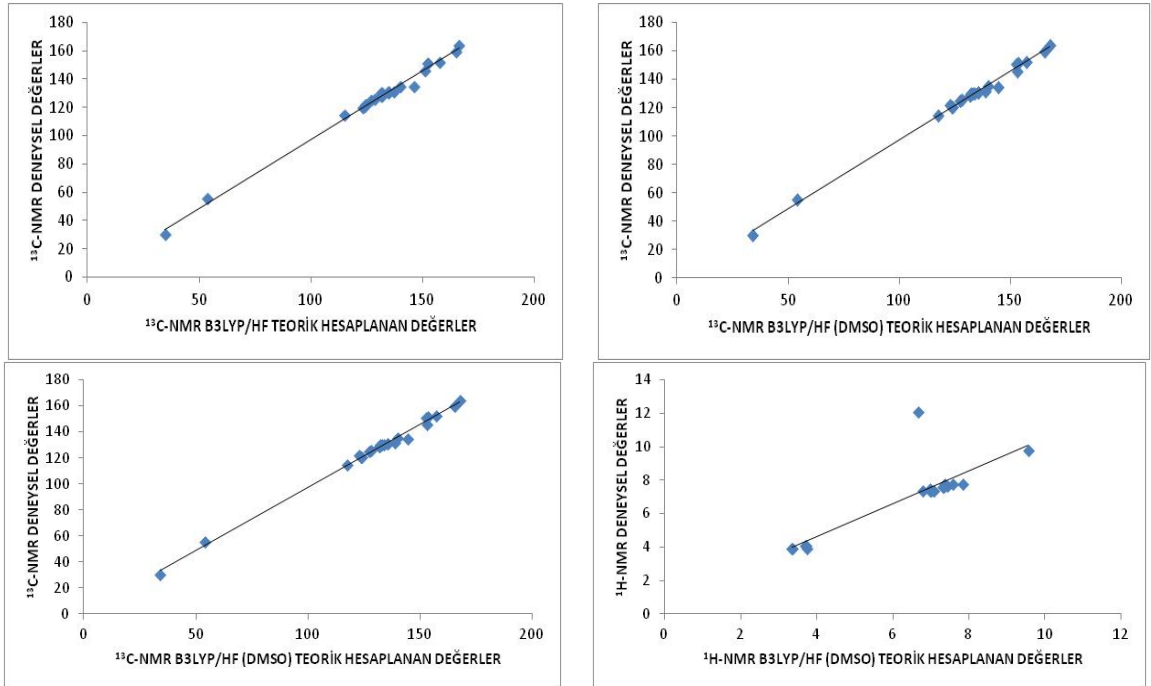
Ek Şekil 75. 182 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



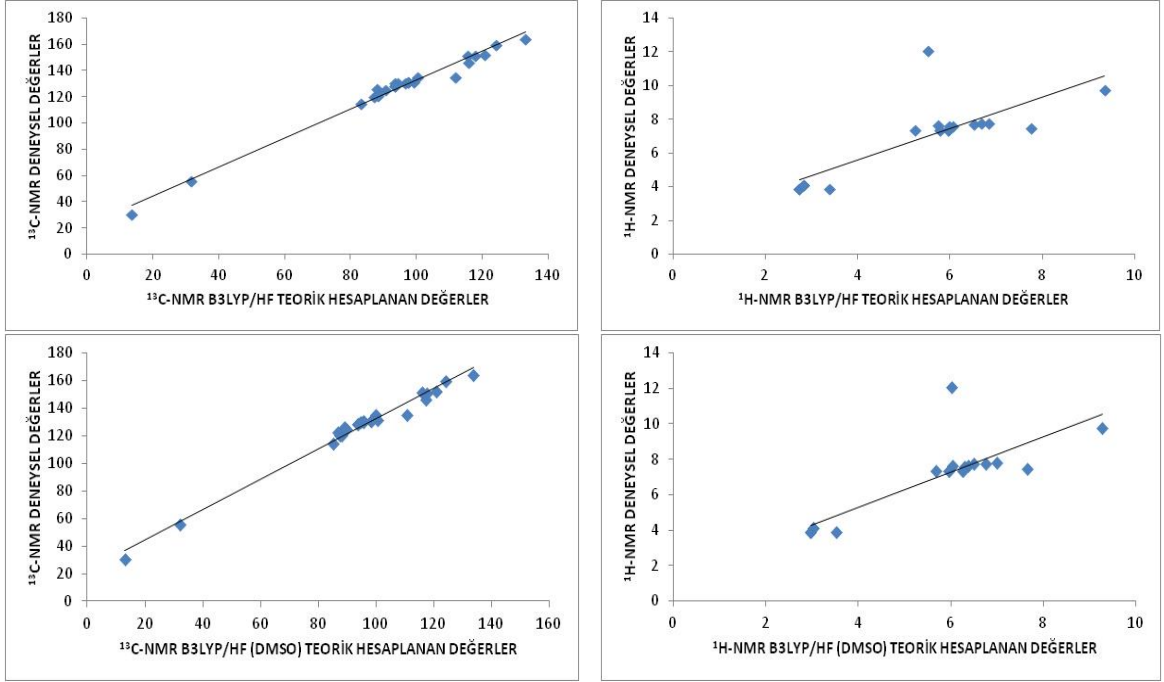
Ek Şekil 76. 182 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



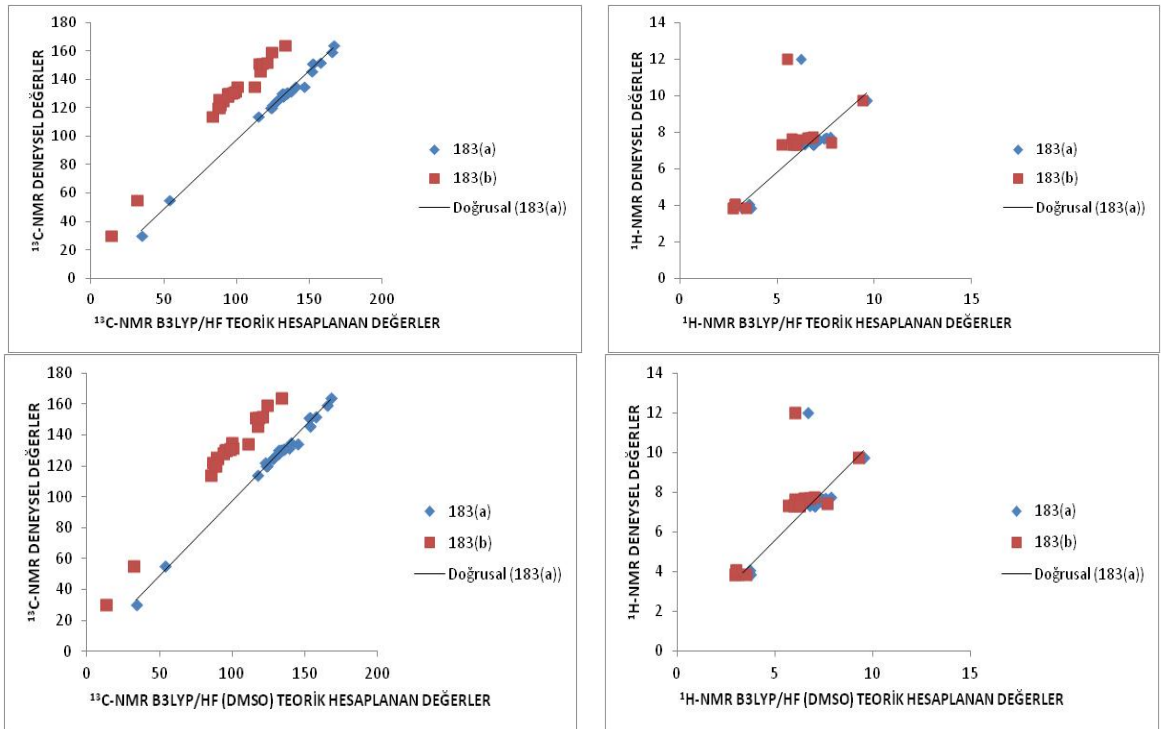
Ek Şekil 77. 182 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



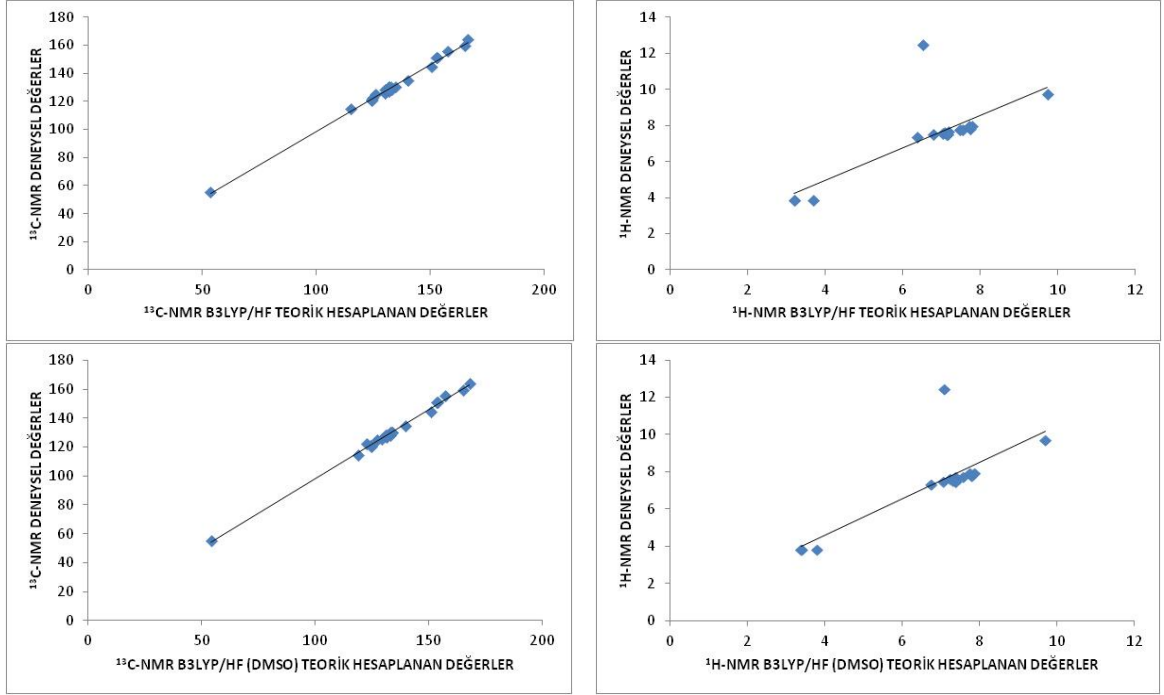
Ek Şekil 78. 183 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



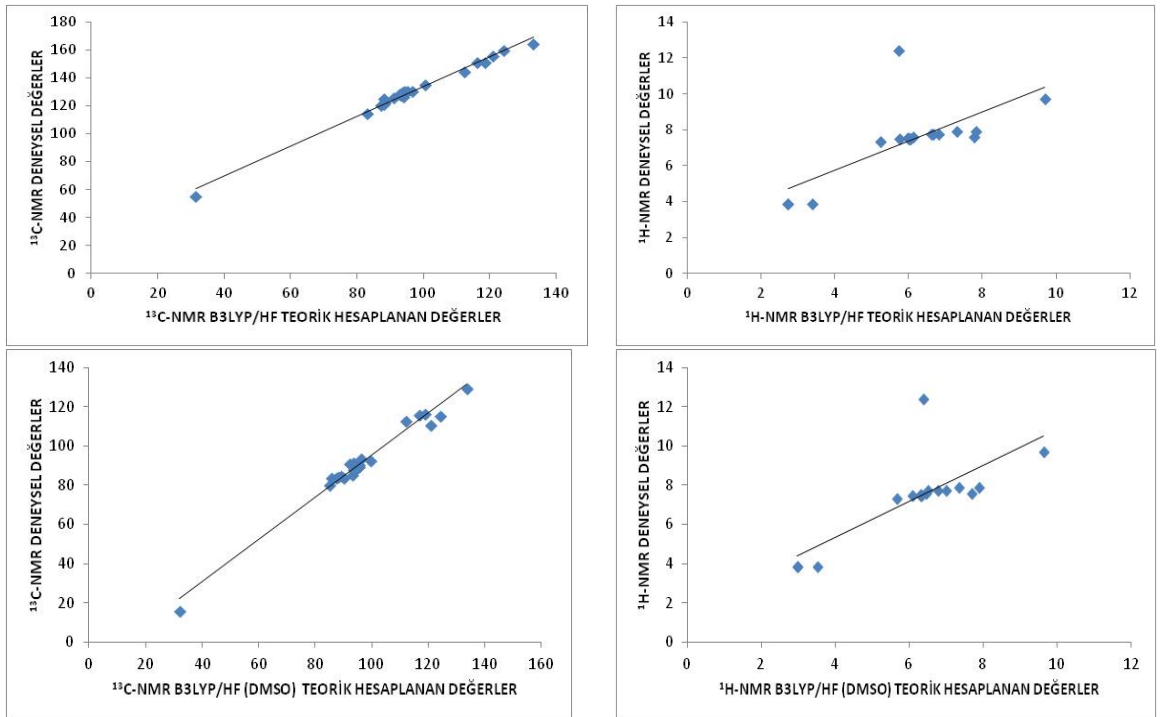
Ek Şekil 79. 183 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



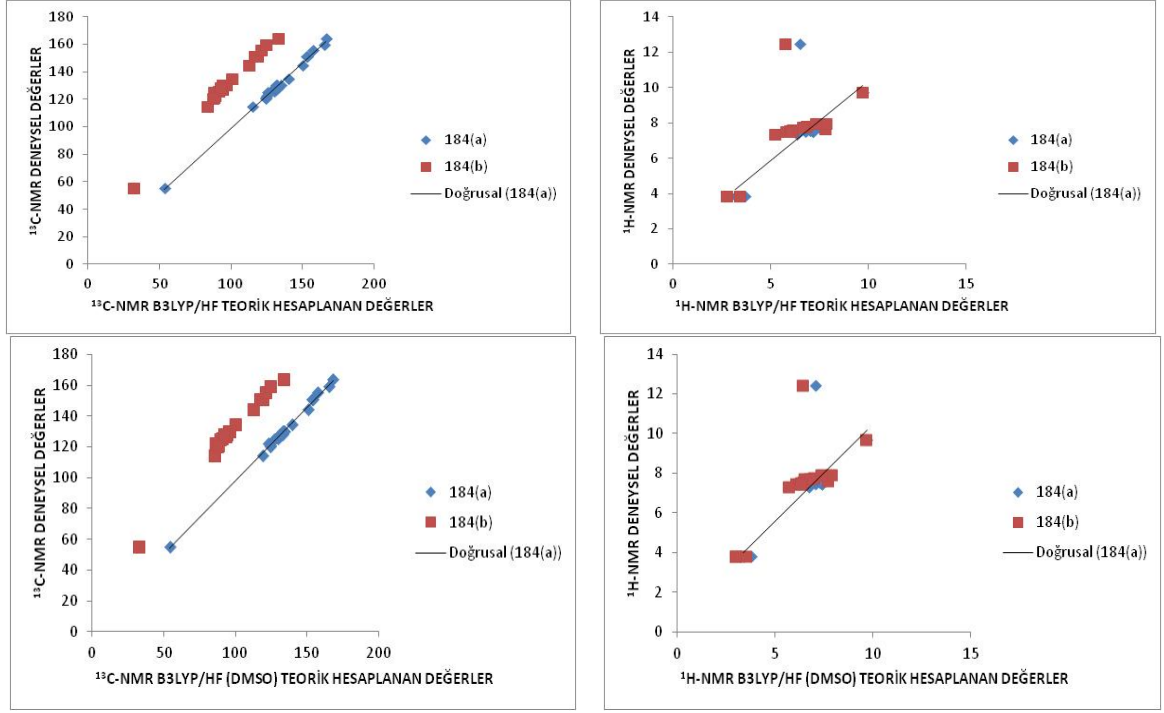
Ek Şekil 80. 183 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



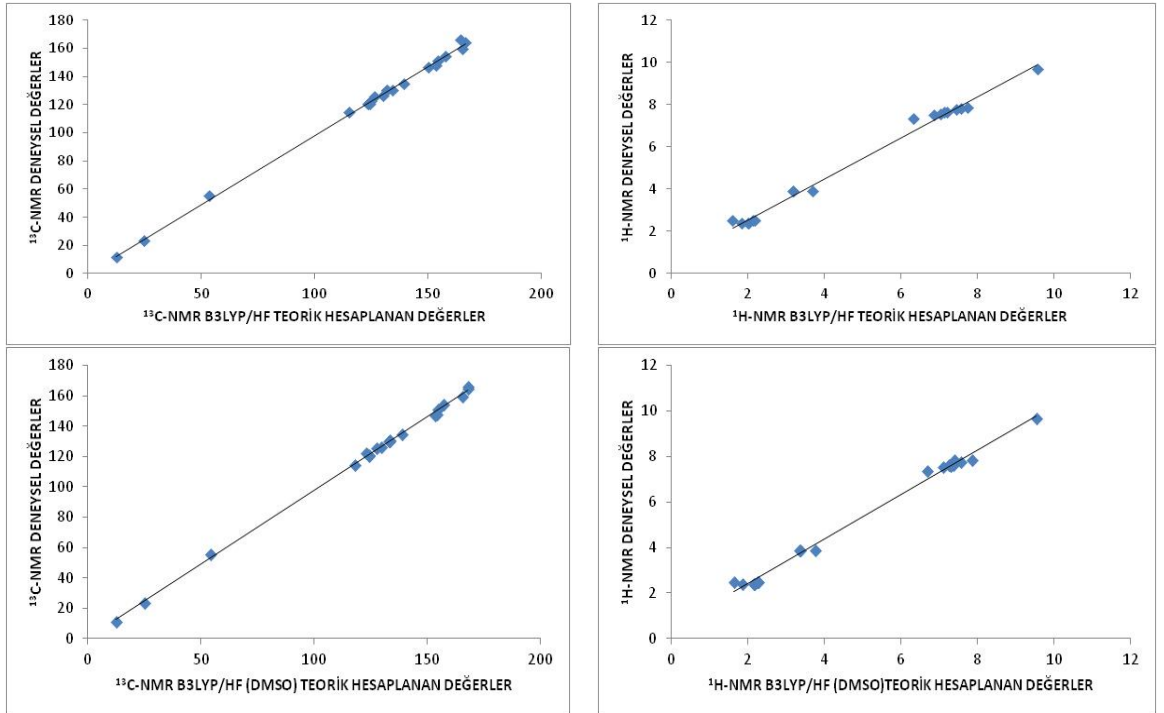
Ek Şekil 81. 184 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



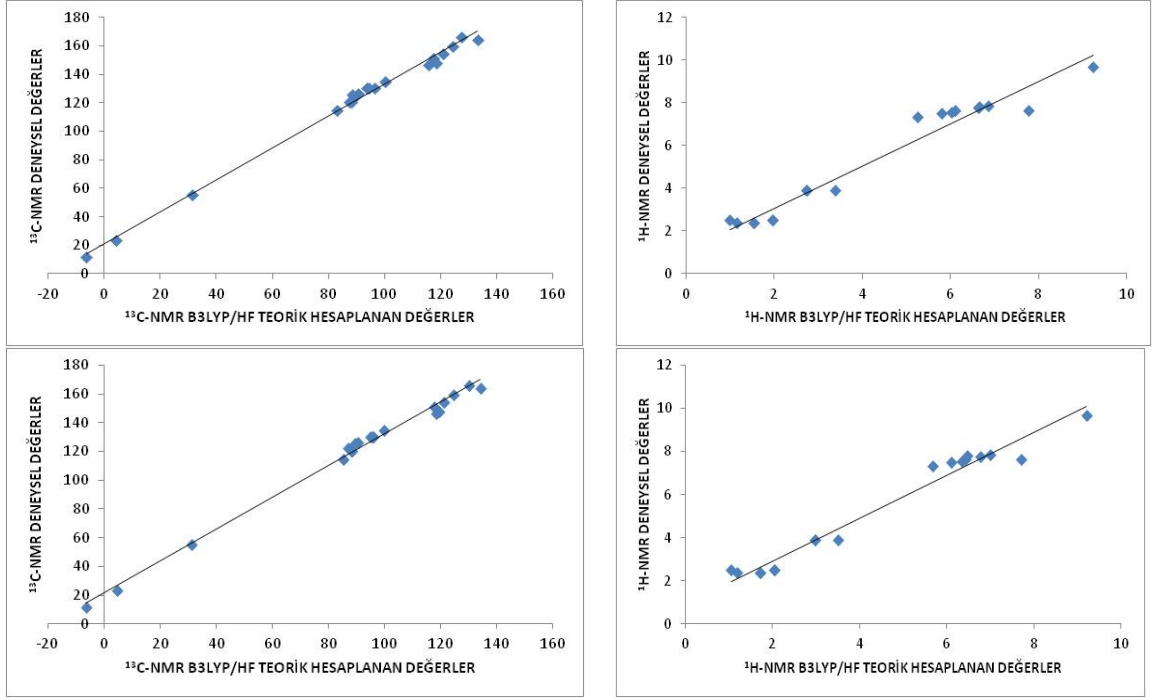
Ek Şekil 82. 184 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



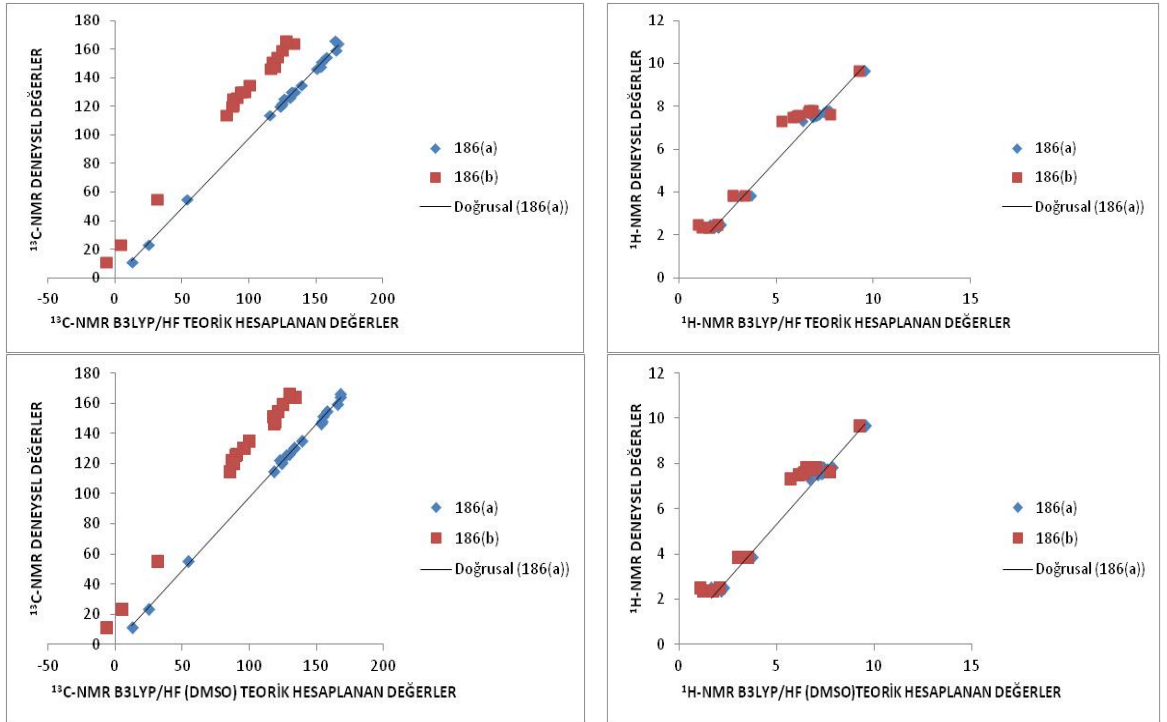
Ek Şekil 83. 184 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



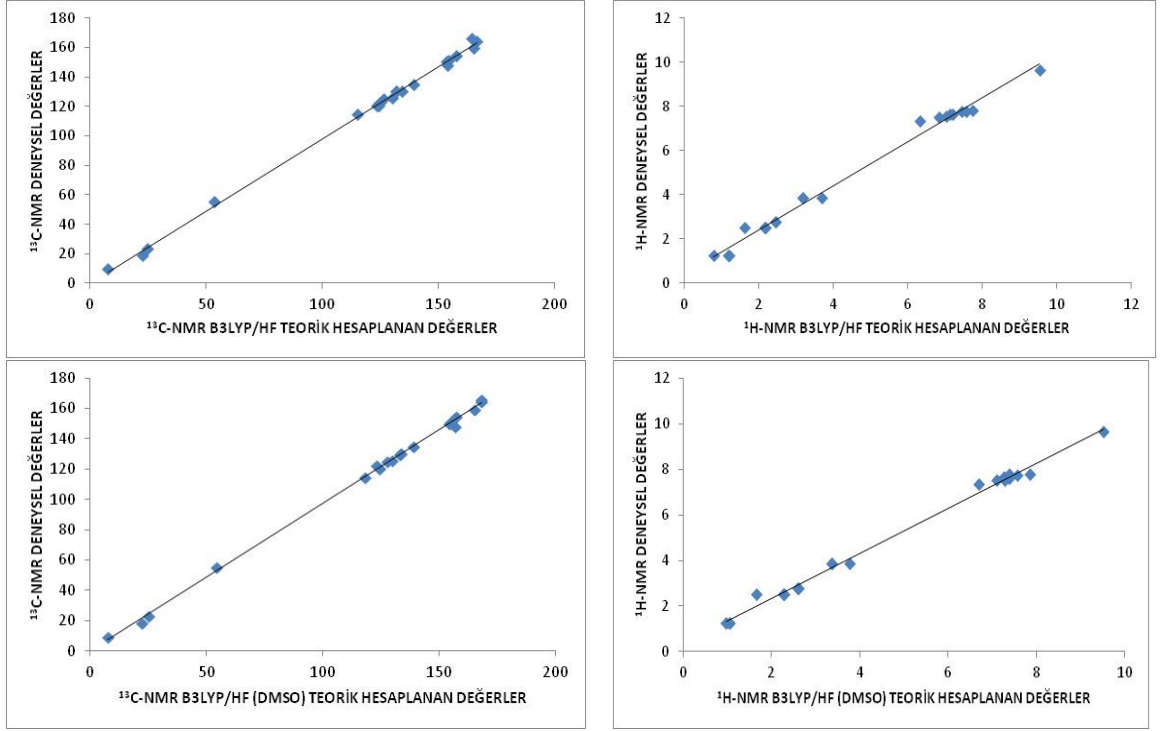
Ek Şekil 84. 186 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



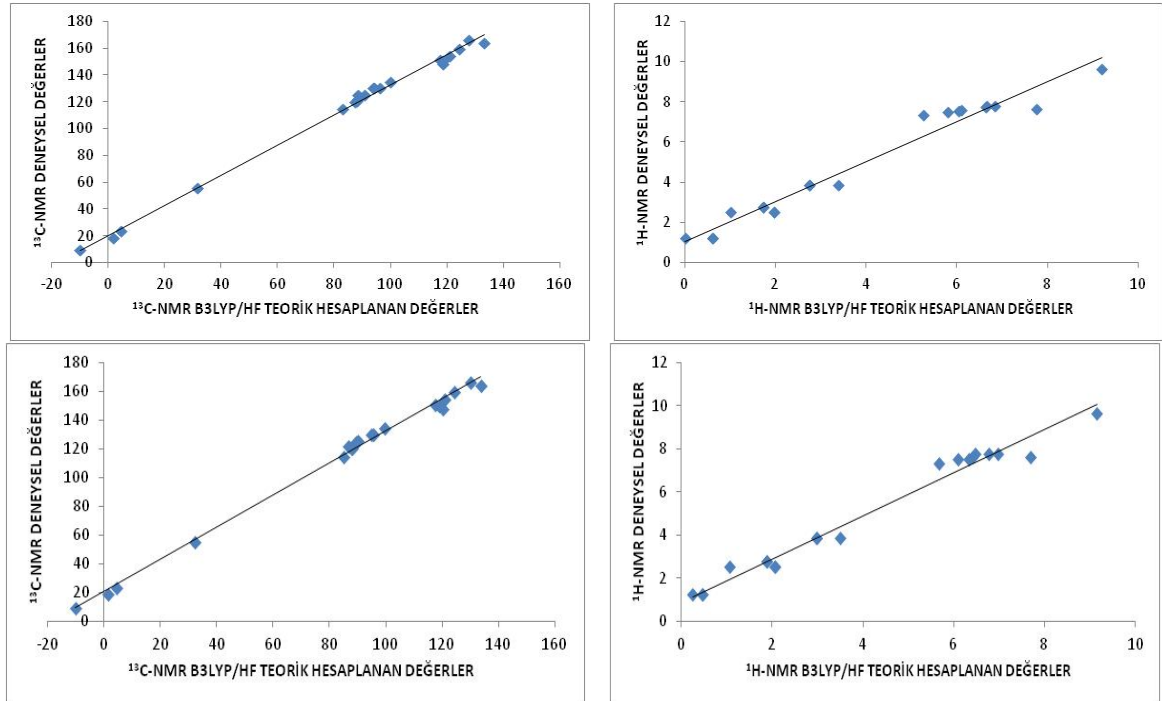
Ek Şekil 85. 186 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



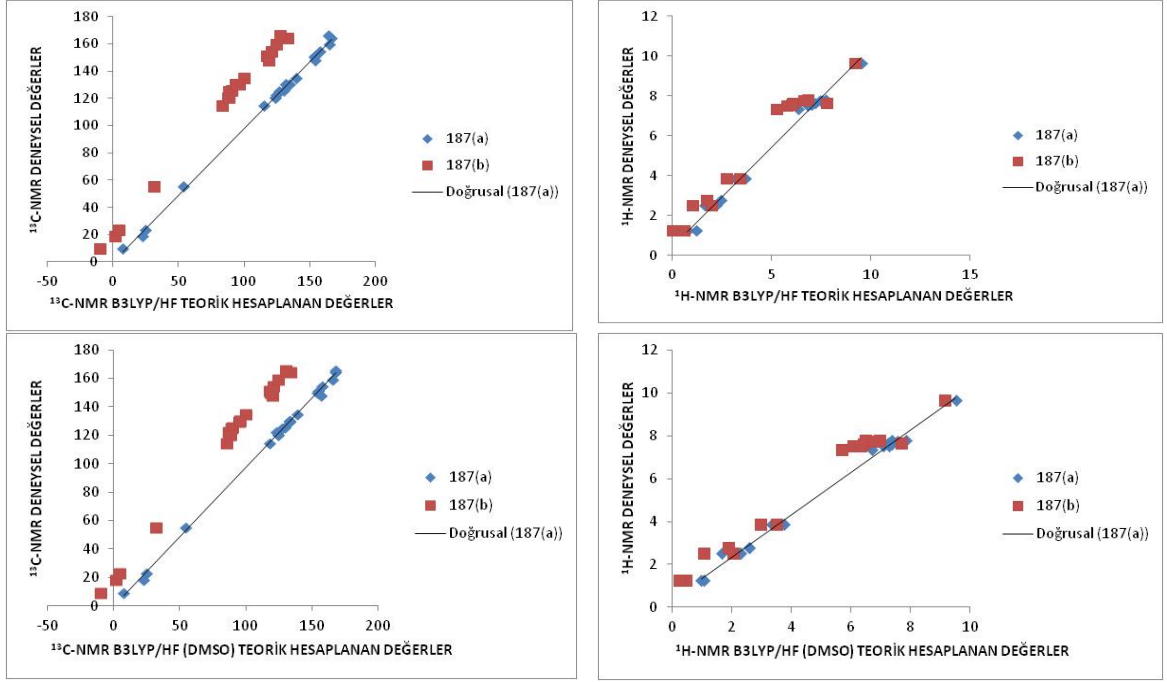
Ek Şekil 86. 186 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



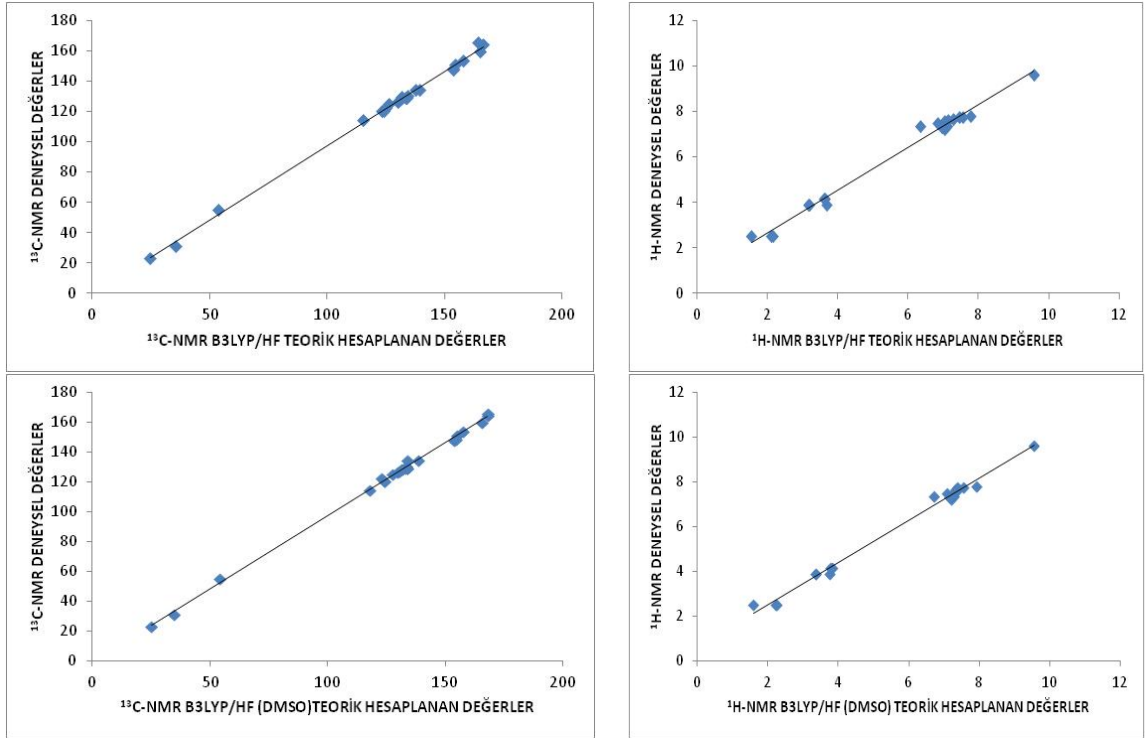
Ek Şekil 87. 187 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



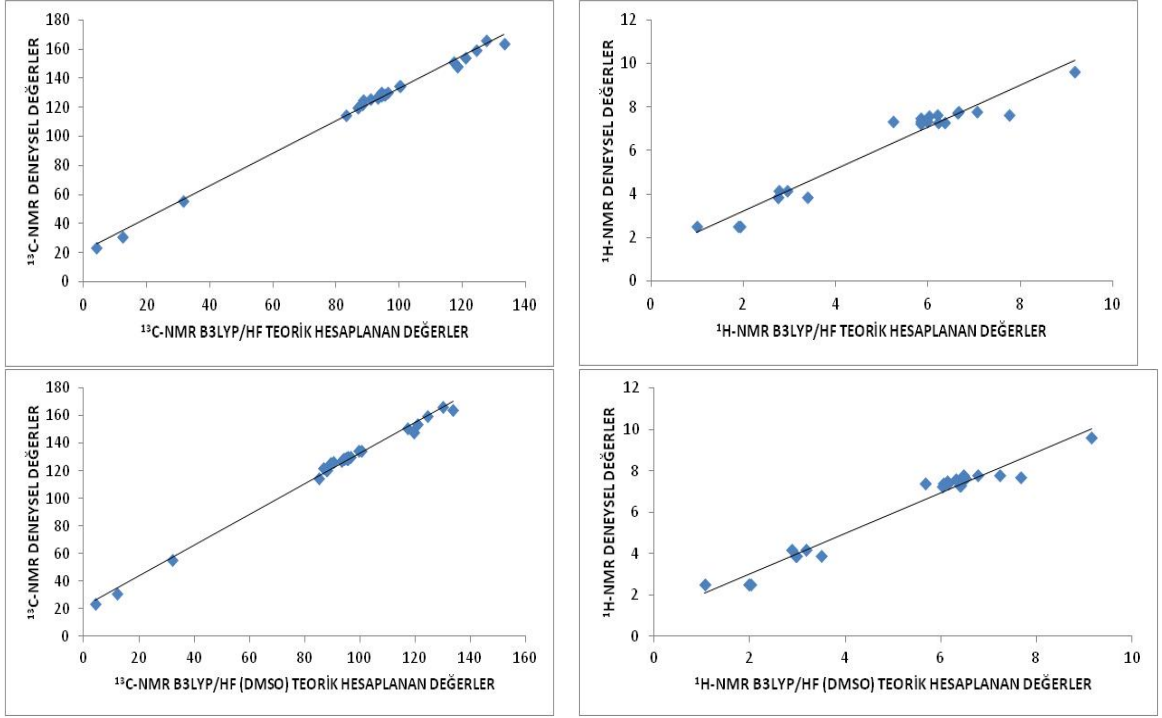
Ek Şekil 88. 187 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



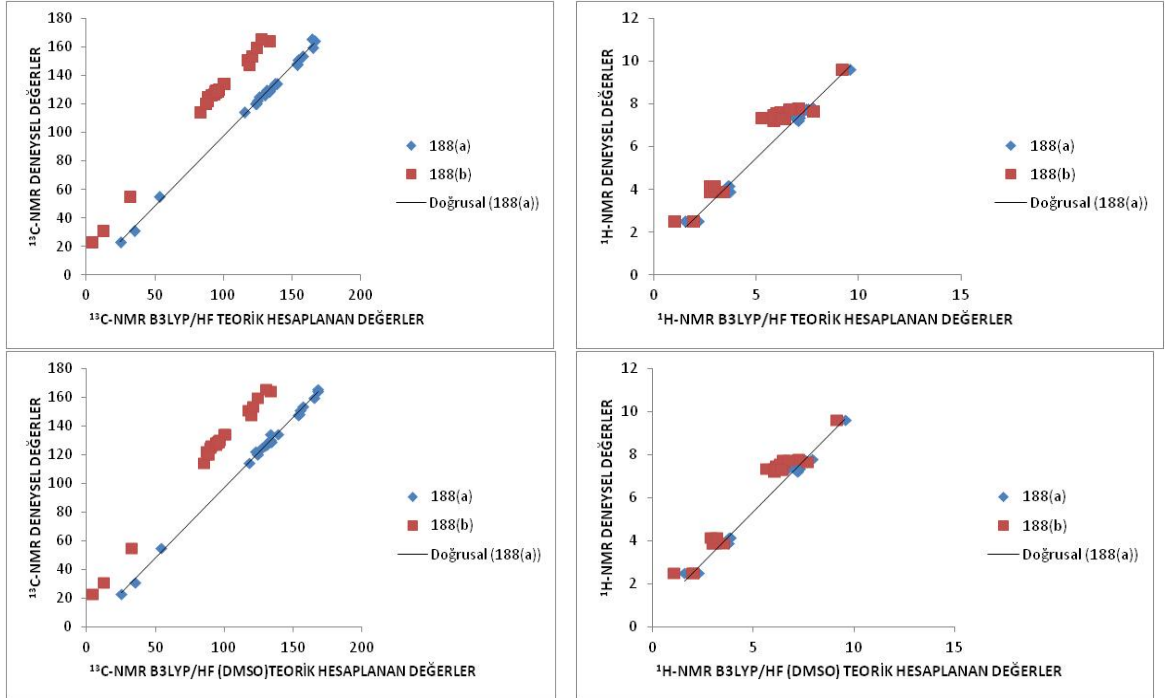
Ek Şekil 89. 187 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



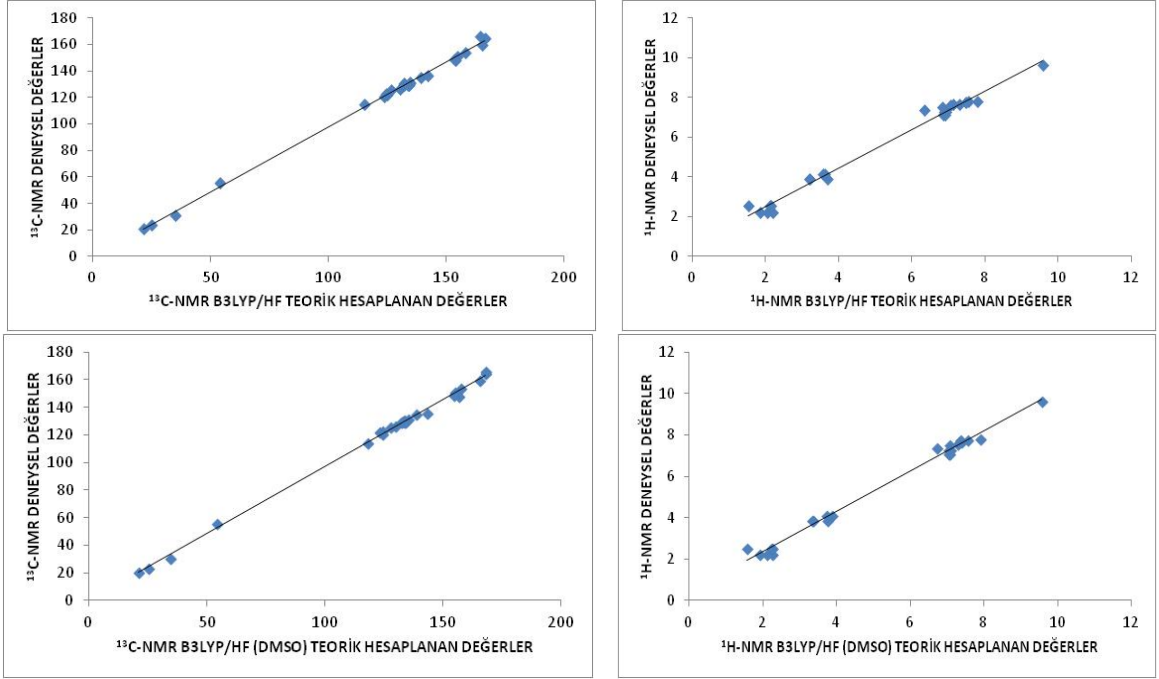
Ek Şekil 90. 188 Bileşiğinin 6-311G(d)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



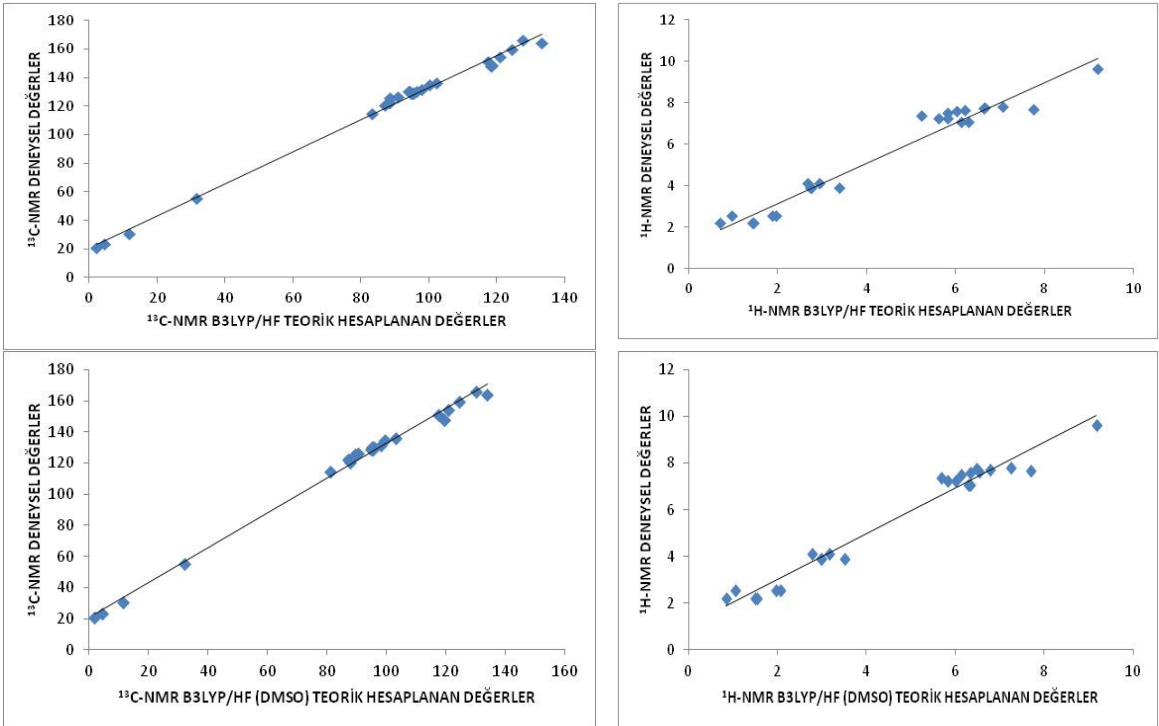
Ek Şekil 91. 188 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



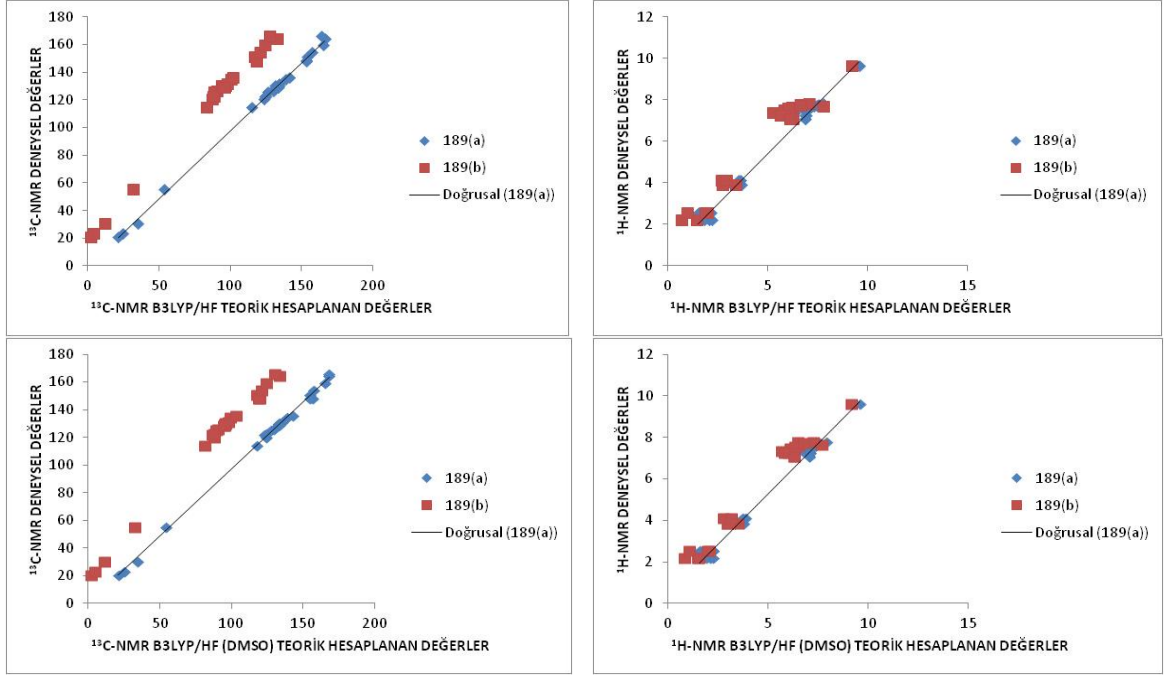
Ek Şekil 92. 188 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



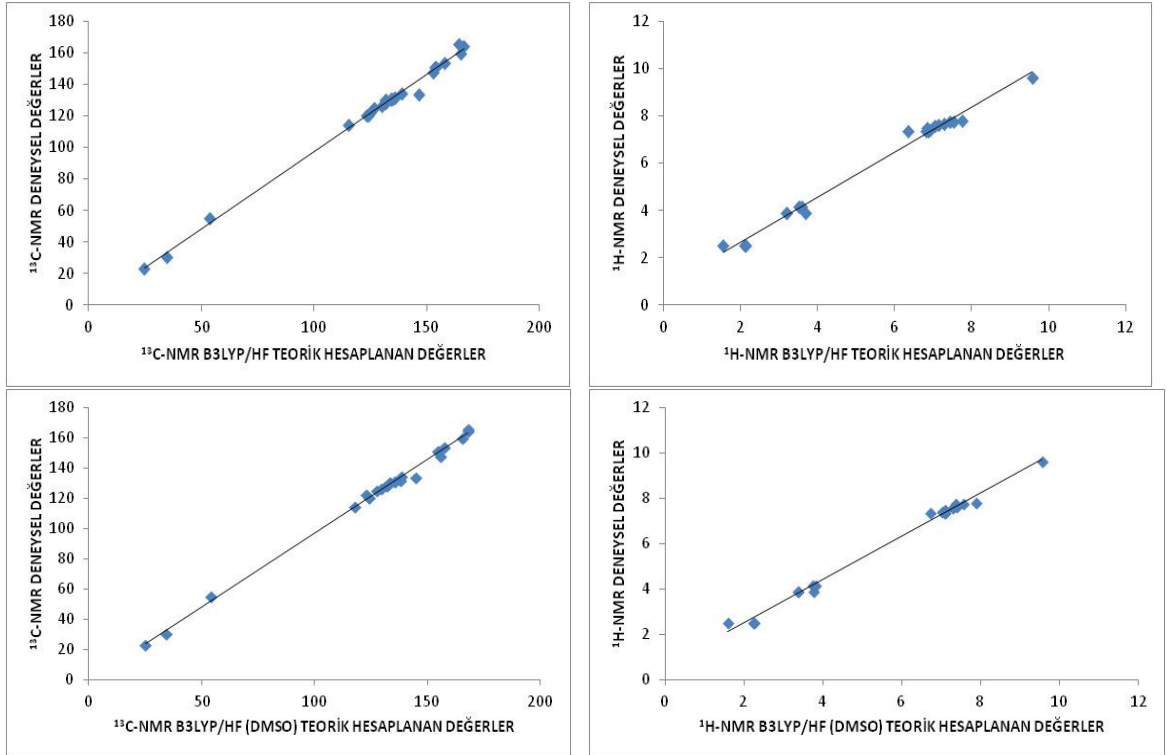
Ek Şekil 93. 189 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



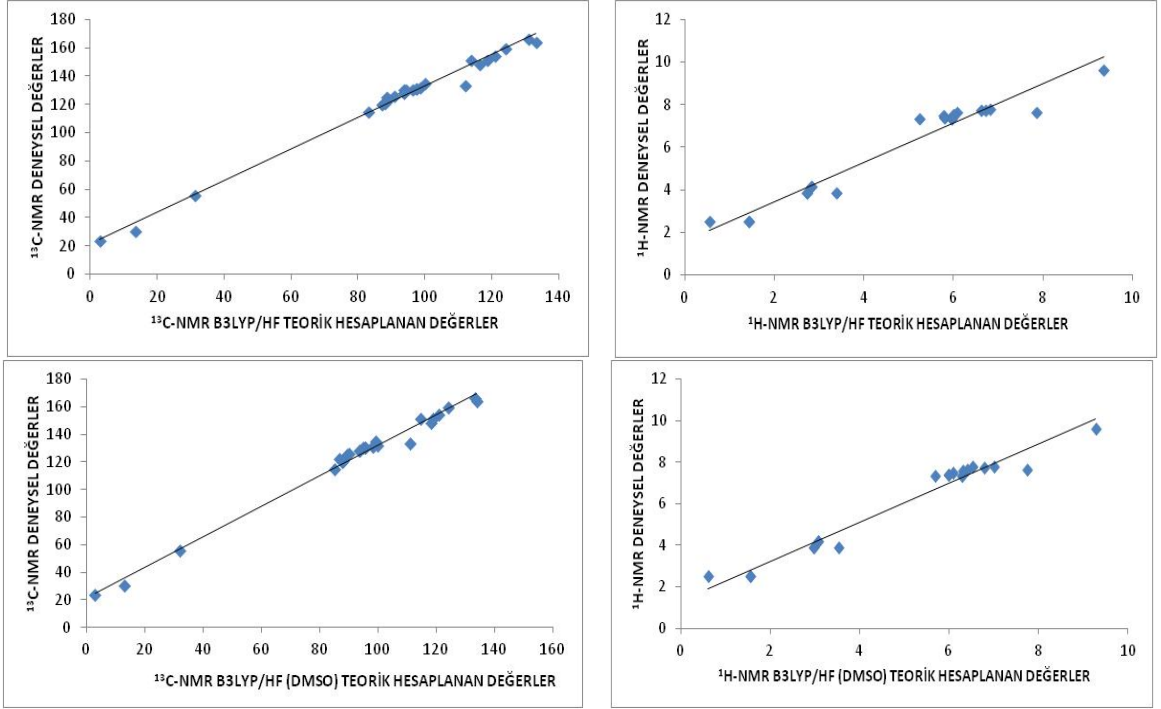
Ek Şekil 94. 189 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



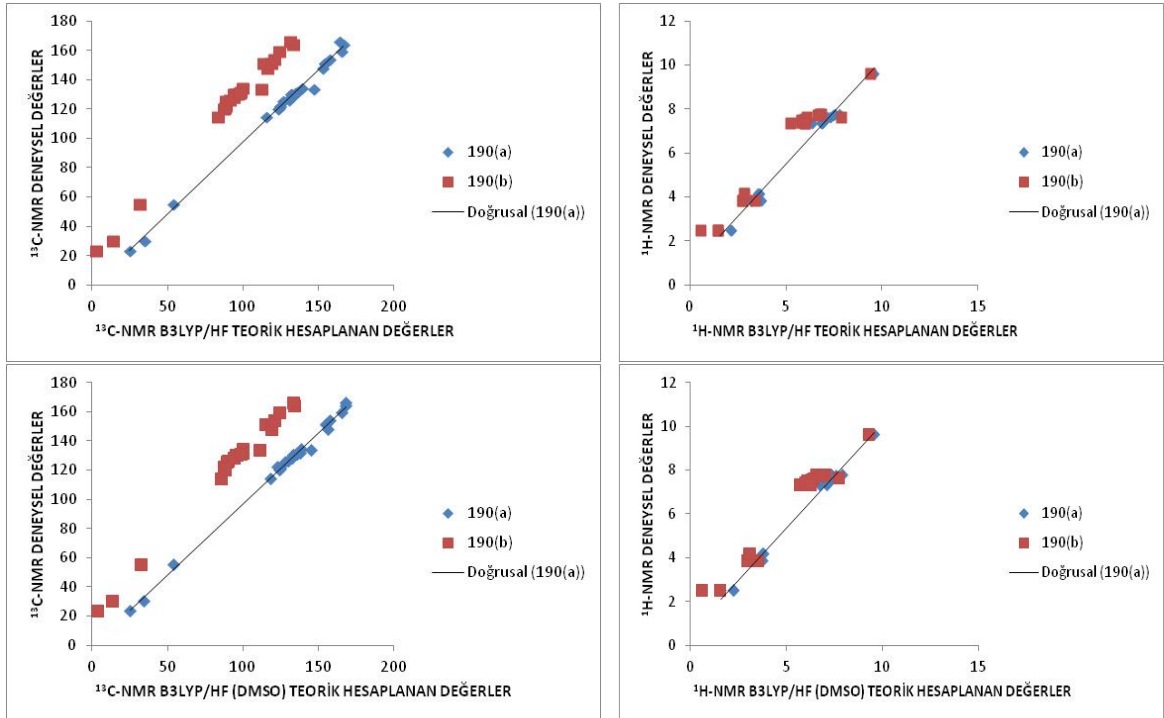
Ek Şekil 95. 189 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 96. 190 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 97. 190 Bileşiğinin 3-21G/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



Ek Şekil 98. 190 Bileşiğinin 6-311G(d)(a)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) ve 3-21G(b)/B3LYP, HF, B3LYP(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^{13}C - ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Hilal MEDETALİBEYOĞLU
Adresi : Kafkas Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü
Doğum Yeri : Kars/Arpaçay
Doğum Tarihi : 10.10.1983
Yabancı Dil : İngilizce

Eğitim Durumu

Lise : Cumhuriyet Lisesi (Kars)

Lisans : Kafkas Üniversitesi (Kars)

Yüksek Lisans: Kafkas Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Ana Bilim Dalı,
Organik Kimya Bilim Dalı

Çalıştığı Kurum ve Yıl : Kafkas Üniversitesi (2010 –)

Uluslararası Bilimsel Toplantılarda Sunulan ve Bildiri Kitabında Basılan Bildiriler:

1. Medetalibeyoğlu H. Yüksek H. Gürsoy-Kol Ö. “Antioxidant activities of some 4-[2-(4-nitrobenzoxy)-3-methoxy]-benzylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one derivatives”, 2nd International Conference on Organic Chemistry(GeoHet-2011), Tbilisi, Georgia, Book of Abstracts, P-71, (2011).

2. Medetalibeyoğlu H. Yüksek H. Gürsoy-Kol Ö. “*In-vitro* antioxidant activities of some novel 3-alkyl-4-[4-(4-methoxybenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones”, 10th International Symposium on Pharmaceutical Sciences (ISOPS-10) Ankara, Turkey, Book of Abstracts, P-46, (2012).

3. Medetalibeyođlu H. Yüksek H. “Study of spectral data of novel 1-acetyl-3-ethyl-4-[3-(3-methoxybenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one compound with Gaussian 09W program” The 22nd Iranian Seminar of Organic Chemistry, Tabriz, Iran, 19-21 August (2014).

4. Medetalibeyođlu H. Yüksek H. “A study on theoretical and experimental spectroscopic properties of new 3-(*p*-chlorobenzyl)-4-[3-(3-methoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one” MolChem2014 International Symposium on Molecular Chemistry, İstanbul, Turkey, P-88, (2014).

Ulusal Bilimsel Toplantılarda Sunulan ve Bildiri Kitaplarında Basılan Bildiriler:

1. Yüksek, H., **Medetalibeyođlu H.**, Ocak Z. “Bazı 4-[2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Türevlerinin PK_a Deđerlerinin Potansiyometrik Yöntemle Tayini”, 23. Ulusal Kimya Kongresi, Sivas, OP 084, (2009).

2. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H. “Bazı 3-Alkil(aril)4-[3-(3-metoksi-4-(*p*-toluensülfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Sentezi”, 23. Ulusal Kimya Kongresi, Sivas, OP 085, (2009).

3. Yüksek, H., **Medetalibeyođlu H.**, Gürsoy-Kol Ö., Akyıldırım O., Calapođlu M. “Bazı 3-Alkil(aril)4-[3-(3-metoksi-4-(*p*-toluensülfoniloksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin *in vitro* Antioksidan Özelliklerinin İncelenmesi” 24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak, OP 290, (2010).

4. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H. “Bazı Yeni 3-Alkil(Aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Sentezi ve Yapılarının Aydınlatılması” 24. Ulusal Kimya Kongresi, Zonguldak, OP 291, (2010).

5. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H. “Bazı Yeni 3-Alkil(Aril)-4-[4-(4-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Sentezi ve Asitlik Sabitlerinin Tayini” 25. Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, OP 163, (2011).

6. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H., Kayalar, M.T. “Gaussian 03W programı ile 3-etil-4-[2-(4-nitrobenzoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiginin spektral verilerinin incelenmesi”, Uluslararası Katılımlı XIII. Ulusal Spektroskopi Kongresi, Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Burdur, P-54, Sayfa 81, (2013).

7. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H., Alkan, M., Albayrak, Ö. “Bazı 3-Alkil(Aril)-4-[2-(4-nitrobenzoksi)-3-metoksibenzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on yeni türevlerinin biyolojik aktivitelerinin incelenmesi”, 6. Ulusal Veteriner Biyokimya ve Klinik Biyokimya Kongresi, Kafkas Üniversitesi, Kars, Sayfa 116, 117, (2013).

8. Medetalibeyođlu H., Yüksek, H. “Gaussian 09W program ile yeni 3-*p*-metoksibenzil-4-[3-metoksibenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiginin spektral verilerinin incelenmesi”, Uluslararası Katılımlı I. Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Van, Sayfa 32, (2014).

9. Gürsoy-Kol Ö., Yüksek, H., **Medetalibeyođlu H.** “B3LYP ve HF metodları kullanılarak 3-etil-4-[3-asetoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiginin spektroskopik özelliklerinin incelenmesi”, Uluslararası Katılımlı I. Ulusal Hesaplamalı Kimya Çalıştayı, Van, Sayfa 56, (2014).