



Makale / Research Paper

Fitalimid Fonksiyonel Grup İçeren Yeni Bir Benzimidazol Tuzunun Sentezlenmesi, Yapısal Özelliklerinin Spektroskopik ve Hesapsal Yöntemlerle İncelenmesi

Ahmet KUNDURACIOĞLU*

Pamukkale Üniversitesi, Tavas Meslek Yüksekokulu, Tavas Denizli Türkiye
akunduracioglu@pau.edu.tr

Received/Geliş: 12.05.2016

Revised/Düzeltilme: 03.06.2016

Accepted/Kabul: 09.06.2016

Özet: Yeni sentezlenen N-Heterosiklik Karben tuzu; 1,3-bis (N-(2-etil) fitalimid)-1H-benzimidazol-3-yum bromür, DMF (Dimetil Formamid)'in hem çözücü ve hem de baz olarak kullanıldığı bir reaksiyonla sentezlendi. Bileşiğin FT-IR ve NMR ölçümleri deneysel olarak alındı. SPARTAN 14 Hesapsal kimya paket programı kullanılarak kuantum kimyasal hesaplamalar yapıldı. Bağ uzunlukları ve açıları ile FT-IR ve NMR spektrumları hesaplandı. Hesaplanan ve deneysel spektrumlar karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: Benzimidazol, Hartree Fock, N-heterosiklik karben tuzları, SPARTAN

Synthesis, Analysis Structural Properties via Computational and Spectroscopic Methods for a Novel Benzimidazole Salt With Phthalimid Fonctional Group

Abstract: The new N-Heterocyclic carbene salt; 1,3-bis(N-(2-ethyl)phthalimid)-1H-benzimidazole-3-ium bromide has been synthesized in a reaction in which DMF (DimethylFormamide) was used as both base and as solvent. FT-IR and NMR spectra of the compound were taken experimentally. Quantum chemical calculations were carried on using SPARTAN 14 suit. Bond lengths and angles, FT-IR and NMR spectra has been calculated as well. The calculated and experimental results have been compared in figures.

Keywords: Benzimidazole, Hartree Fock, N-heterocyclic carbene salts, SPARTAN

1. Giriş

Günümüzün gelişen dünyasında her gün yeni ve yenilikçi malzemeler geliştirilmektedir. Özellikle “Yeşil Kimya” denilen, çevre dostu süreç ve malzemeler üzerine çalışmaları önceleyen anlayış, yeni tip katalizörler, hammaddeler ve çözücülere duyulan ilgiyi arttırmaktadır. Özellikle son kırk yıldır kimya bilimiyle ilgili tüm yenilikçi çalışmalar içinde N-heterosiklik karbenler (NHCl) özel bir alan oluşturmaktadır [1].

NHCl adlarından da anlaşılacağı üzere yapılarında “N” heteroatom bulunan halkalı karben bileşikleridir (şekil 1). İlk defa 1968 yılında Öfele ve Wanzlick'in birbirinden habersiz olarak metal

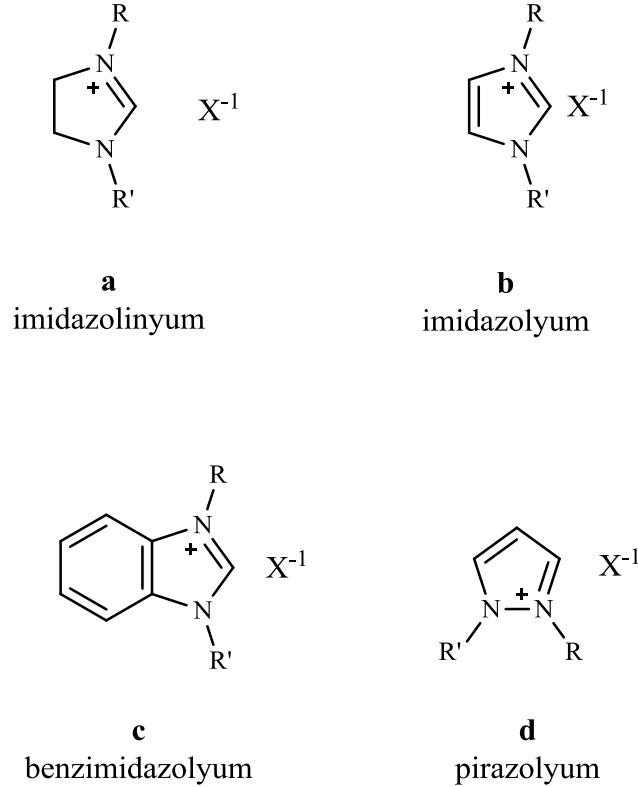
Bu makaleye atıf yapmak için

Kunduracioğlu, A., “Fitalimid Fonksiyonel Grup İçeren Yeni Bir Benzimidazol Tuzunun Sentezlenmesi, Yapısal Özelliklerinin Spektroskopik ve Hesapsal Yöntemlerle İncelenmesi” El-Cezeri Fen ve Mühendislik Dergisi 2016, 3(3);391-400.

How to cite this article

Kunduracioğlu, A., “Synthesis, Analysis Structural Properties via Computational and Spectroscopic Methods for a Novel Benzimidazole Salt With Phthalimid Fonctional Group” El-Cezeri Journal of Science and Engineering, 2016, 3(3);391-400.

komplekslerini de sentezlediği bu bileşikler zamanla değişik geçiş metalleriyle oluşturdukları komplekslerinin birçok alanda üstünlükleri nedeniyle popüler oldular [2]. Özellikle yeni katalizörler arayışında fosfinlere karşı alternatif bileşikler olarak kabul gördüler. Bu alanda üstünlüklerinin en önemli sebebi olarak geçiş metal karben komplekslerinin sigma donör ve pi akseptör özellikleri gösterilebilir [3,4]. Ayrıca karbenler fosfinlerin aksine havaya ve neme karşı hassas değildirler. Bu da onların uygulamalarda daha uzun ömürlü olmasını sağlar.

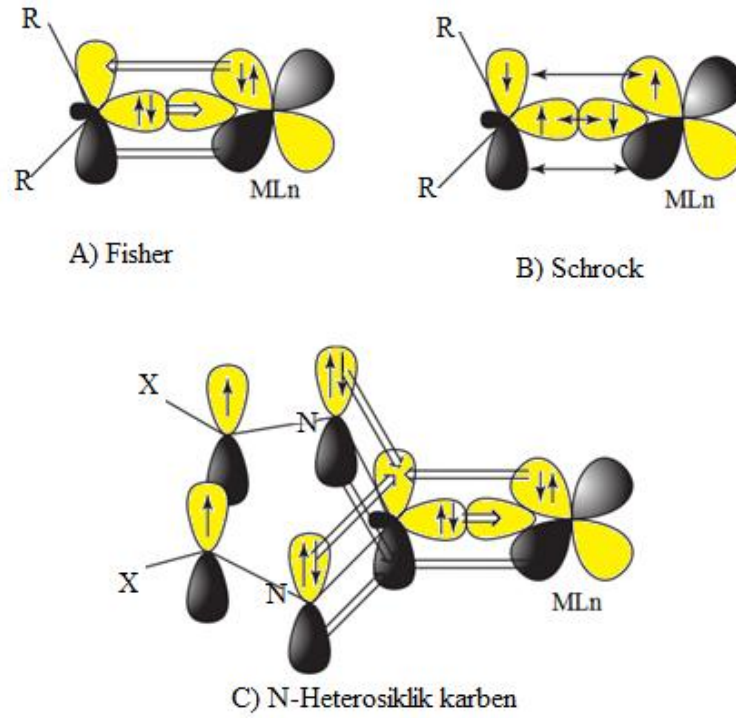


X= Cl, Br, I, BF₄, PF₆, CH₃COO, vb

R, R'= Alkil, Aril, vb.

Şekil 1. Yaygın karben tuzları

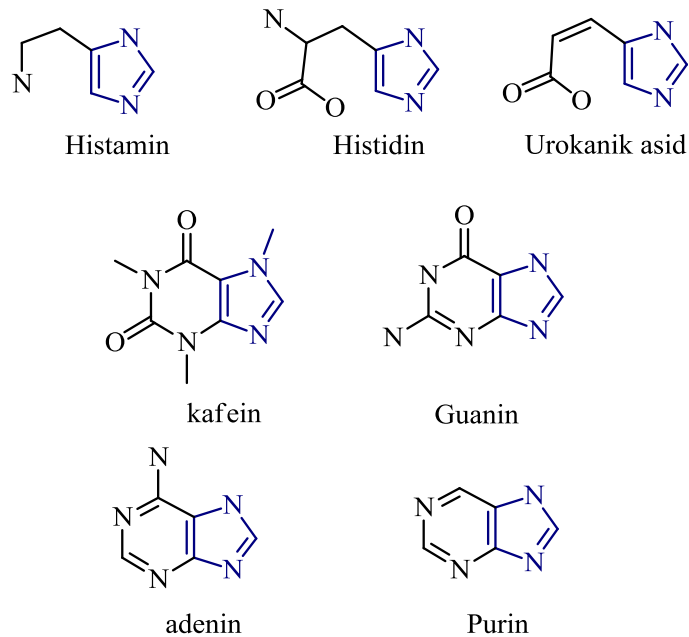
Karbenlerin özellikle Pd(II), Ru(II), Co(II) ve Rh(II) gibi geçiş metalleri ile kurdukları kompleks bileşiklerin katalitik etkinliği yaygın bir kullanım alanı doğurdu (şekil 2). İlk zamanlar sadece transmetalasyon amacıyla kullanılan Ag(I)NHC kompleksleri konusunda ise 2004 yılında W. Youngs ve ekibinin antimikrobiyal aktivite testlerinde başarılı sonuç alması üzerine yeni bir çığır açıldı [5,6]. Günümüzde ise antitümör aktivite de dâhil olmak üzere biyolojik aktivite yönüyle geniş bir araştırma alanı oluşmuştur [7]. 2007 yılından itibaren özellikle Peris ve Ghosh gibi araştırmacıların farklı alanlarda Ag(I)NHC komplekslerinin katalitik etkinliğini denemeleriyle beraber bu konudaki önyargılar da kırılmış ve daha ucuz, çevre dostu katalizör olarak NHCl'ler yeni bir yön ve ivme kazanmıştır. Günümüzde Ag(I)NHCl'erin polimerleşme, halkalı karbonat sentezi ve Hidrosililasyon gibi birçok reaksiyonda katalizör olarak kullanım alanları araştırılmakta ve uygulanmaktadır [8,9].



Şekil 2 Fischer (A), Schrock (B) ve N-Heterosiklik karben (C) bileşiklerinde bağlanma

Geçiş metal komplekslerinin bu kadar ilgi görmesi, araştırmacıları metallsiz NHC tuzlarını da araştırmaya teşvik etti. Özellikle antimikrobiyal etkinlikleri ve katalitik kullanımları ümit verici sonuçlar sunan karben tuzlarının ileri araştırmaları dünyanın dört yanından araştırmacıların artan ilgi ve çabalarıyla günden güne genişlemektedir [10].

NHC tuzlarının sentezinde imidazol ve benzimidazol türü çıkış maddeleri kullanılabildiği gibi halka kapatma reaksiyonları ile de NHC tuzları elde edilebilmektedir. Ayrıca Youngs ve ark. doğal bileşiklerin modifiye edilmesiyle de karben tuzları sentezlemiş ve bunların başta Ag(I) olmak üzere komplekslerini elde etmişlerdir (Şekil 3). Bu amaçla kullanılan doğal bileşikler arasında kafein, urokanik asid ve teofilin gibi yapılarında halkalı karben grubu bulunduran bileşikler yer alır [11].



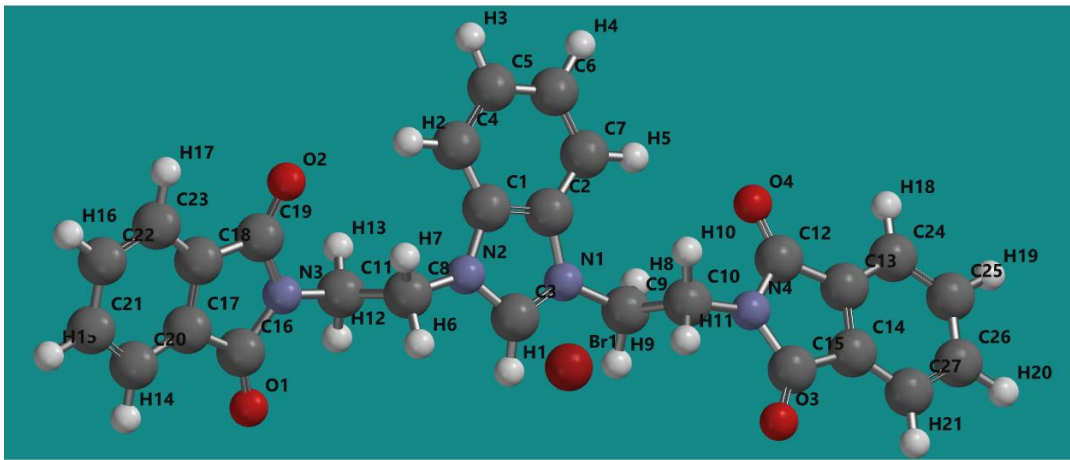
Şekil 3. Yapılarında karben grubu bulunan doğal bileşikler

Daha önceki bir çalışmamızda bir gümüş(I)NHC bileşiği olan Pentametilbenzil-3-"buthilbenzimidazol gümüş (I) bromür bileşiği üzerinde DFT temelinde hesapsal çalışmalar yapılmıştı [12]. Bu çalışmada ise yeni sentezlenen bir NHC tuzu üzerinde SPARTAN 14 kuantum kimya paketi kullanarak yine deneysel ve hesapsal çalışmalar gerçekleştirildi [13].

2. Deneysel Kısım

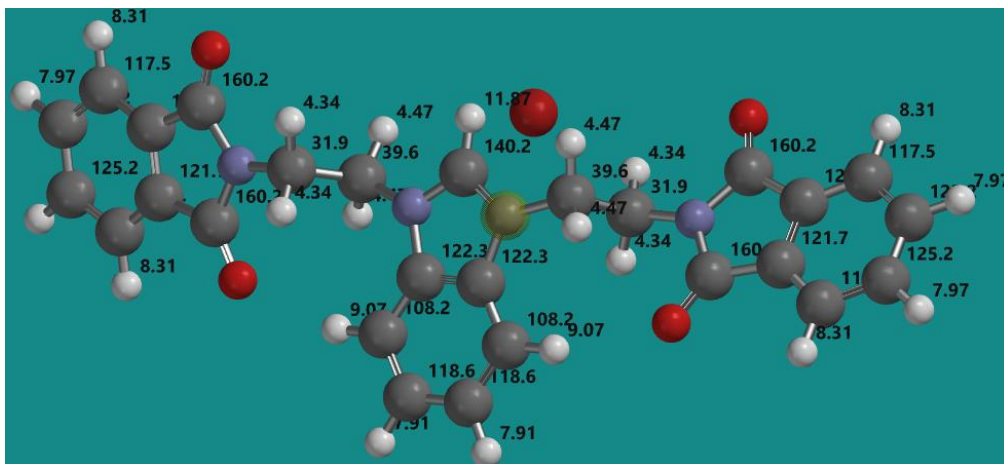
2.1 Materyal ve Metod

Bu çalışmada incelenen ve ilerleyen satırlarda BEFIB olarak kısaltılacak NHC tuzunun (şekil 4) sentezinde kullanılan tüm çıkış maddeleri, çözücüler ve diğer kimyasallar Sigma-Aldrich, Merck ve Alfa-Aesar gibi ticari tedarikçilerden satın alındı. Bu maddeler ileri saflaştırma yapılmadan alındıkları halleriyle kullanıldı. Kullanılan malzemeler, havaya ve neme hassas olmadıklarından özel korunma önlemleri alınmadan reaksiyonlar gerçekleştirildi. Tüm deneylerde "schlenck" tipi reaksiyon tüpleri kullanıldı. Sentezlerin ilerleyişi, renk değişimi ve çökelti oluşumu ile izlendi.



Şekil 4: BEFIB Bileşiğinin hesaplanan geometrik yapısı.

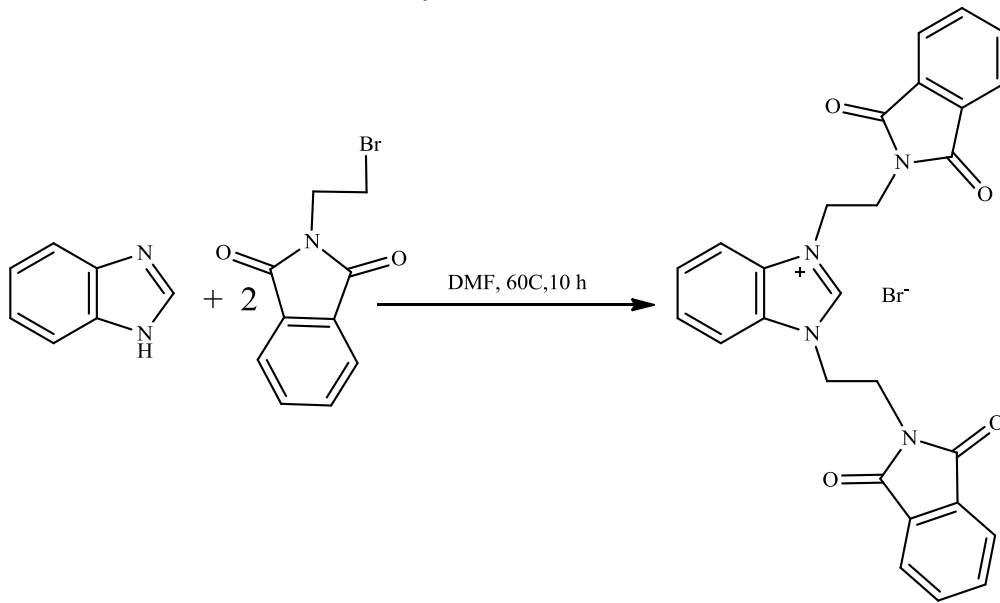
Erime noktası ölçümleri, laboratuvarımızdaki STUART Melting Point SMP30 cihazı ile, FT-IR ölçümleri Çankırı Karatekin Üniversitesinde bulunan *PERKIN ELMER SPECTRUM 100 FT-IR SPECTROMETER* Tipi FT-IR spektroskopi ünitesinde alındı. ^1H ve ^{13}C NMR ölçümleri İ.Y.T.E'de bulunan *Varian VNMRJ 400 Nükleer Manyetik Rezonans Spektrometresi* tipi NMR cihazı kullanılarak alındı. NMR ölçümlerinde TMS (tetra metil silan) iç standart olarak kullanıldı. Çözücü olarak dötero dimetil sülfoksit (d_6 -DMSO) kullanıldı. FT-IR ve NMR sonuçlarından seçilen bazı değerler Tablo-1'de verilmiştir. Ayrıca NMR verileri molekül şekli üzerinde sunulmuştur (Şekil 5)



Şekil 5. BEFIB bileşiği kimyasal kayma değerlerinin model üzerinde gösterimi.

2.2. 1,3-Bis (N-(2-Etil) Ftalimid)-1H-İmidazol-3-yum Bromür Tuzunun Sentezi

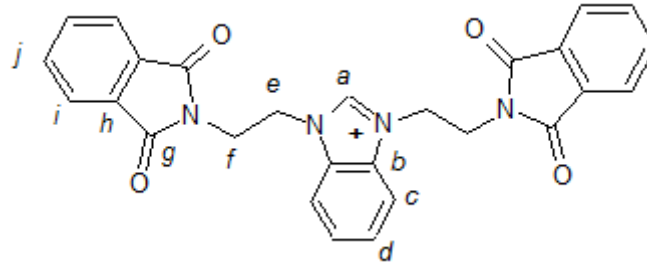
İmidazolyum / Benzimidazolyum simetrik tuzlarının sentezinde alışılmış yöntem olarak en çok göze çarpan KOH veya NaOH gibi kuvvetli bir bazın kullanıldığı kuvvetli baz yöntemidir. Bu yöntemde imidazol/Benzimidazolün asidik H atomu kuvvetli bazın etkisiyle ve yüksek sıcaklıkta gevşetilip yerine K^+ iyonunun geçmesi sağlanır. İkinci aşamada ise Alkil halojenür ile etkileşme sağlanarak K^+ iyonunun KX ($X= Cl, Br, I$) olarak çökertilmesiyle birlikte bu kısma alkil grubu geçirilmiş olur. Kullanılan Alkil halojenür bir eşdeğer olması halinde mono sübstütie imidazol bileşikleri elde edilir. Mono sübstütie imidazol bileşiğinin aynı ya da farklı bir alkil halojenürle etkileştirilmesinden ise imidazolyum halojenür tuzları sentezlenir. İki N'a da aynı sübstütientin bağlı olduğu bileşiklere simetrik NHC tuzları, farklı olduğu durumlara ise asimetrik NHC tuzları denir. Bu çalışmada ise hem zaman hem de ısı bakımından daha ekonomik olan DMF (N-N'Dimetilformamid) yöntemi kullanılmıştır (Şekil 6). Bu yöntemde literatürde daha az rastlanmakta ama temiz ve yüksek verimli ürün elde etmemizi sağlamaktadır. Tek dezavantajı ise asimetrik tuz veya mono sübstütie ürün eldesinde kullanışlı olmamasıdır.



Şekil 6. DMF Yöntemi ile 1,3-bis (N-(2-etil) ftalimid) İmidazol-3-yum bromür bileşiğinin(BEFIB) sentezi

Bu çalışmada benzimidazol (0,01 mol) 20 mL DMF içinde çözüldü. 20 dakika kadar 50°C sıcaklıktaki yağ banyosunda karıştırıldıktan sonra üzerine 2 eşdeğer (0,02 mol) N-(2-Bromoetil) phthalimide bileşiği eklendi. Reaksiyon karışımı gece boyunca aynı sıcaklıkta karıştırılmaya bırakıldı. Süre sonunda çözgenin fazlası manifold sisteminde vakum uygulanarak damıtıldı. Kalan kirlili sarı yoğun yağsı madde 3-4 defa hekzanla yıkandı son yıkamadan sonra kurutuldu. Olabildiğince az diklorometan ile tekrar çözülen madde, üzerine eklenen hekzanla çöktürüldü, süzüldü. Oluşan maddenin erime noktası 107.5-112°C olup %87 verimle elde edilmiştir. Elde edilen bileşiğe ait spektroskopik değerlerden başlıcaları şöyledir:

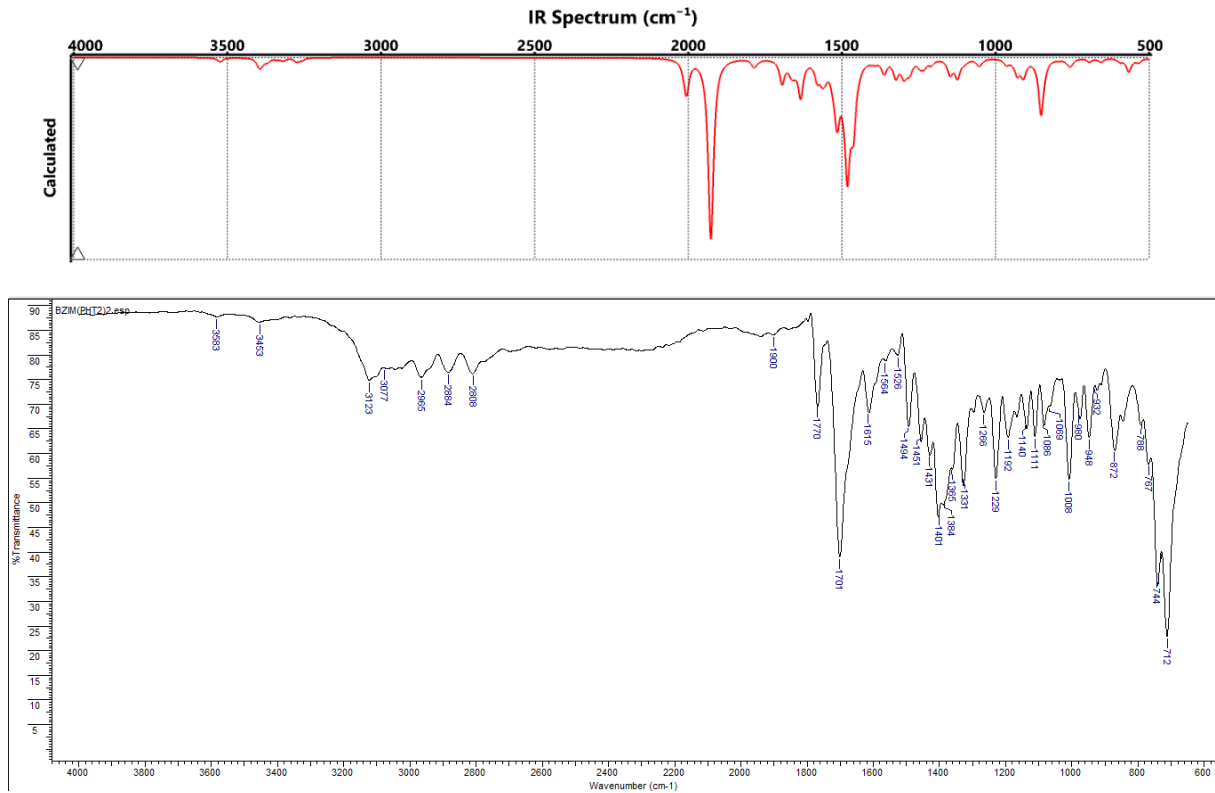
- 1H NMR δ (ppm) 9.89 (Asidik Hidrojen -Ckarben), 8.82-8.43 (c) 7.84-7.78 ve 7.66-7.62 (i) 7.35-7.33 (j) , 7.21(d), 4.78-4.56 (f), 3.97-3.70 (e)
- ^{13}C NMR δ (ppm) 135.09 (a), 131.79 – 110.73 (aromatik Cler), 39.99-30.41 (alifatik Cler)
- FT-IR (ν - cm^{-1}) 1701ve 1770 şiddetli pik yapıdaki karbomilleri, 3583 ve 3453 pikleri ftalimid gruplarındaki C – H gerilmelerini göstermektedir.



Şekil 7. Bileşiğin spektroskopik inceleme için etiketlenmesi

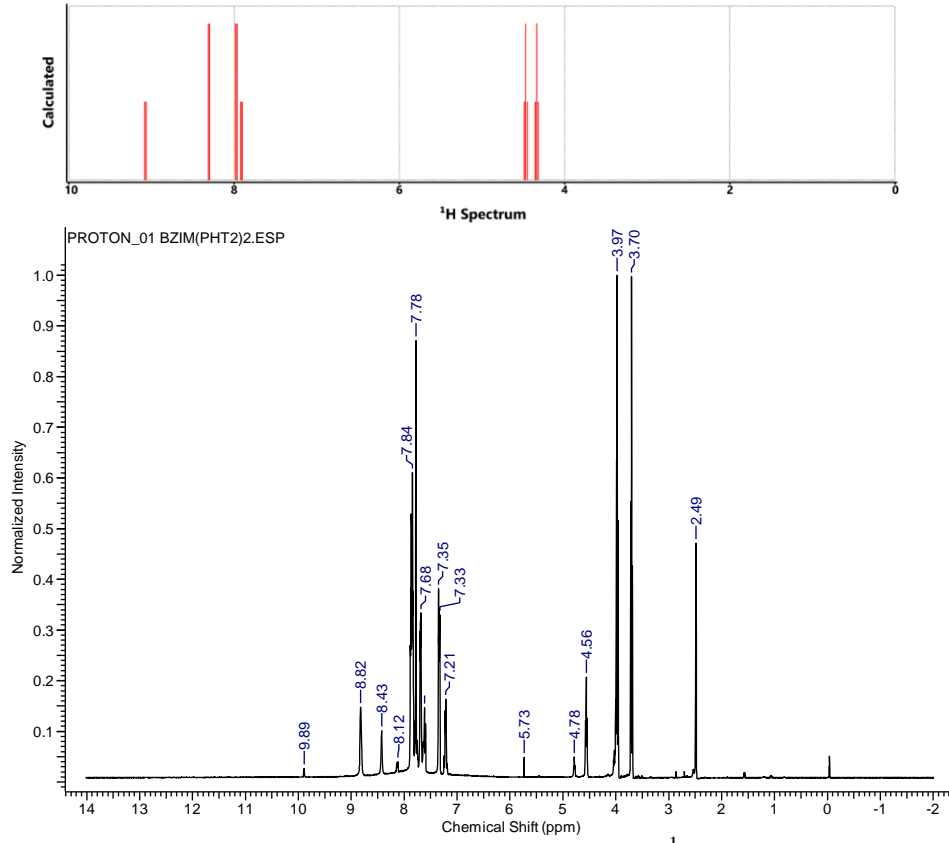
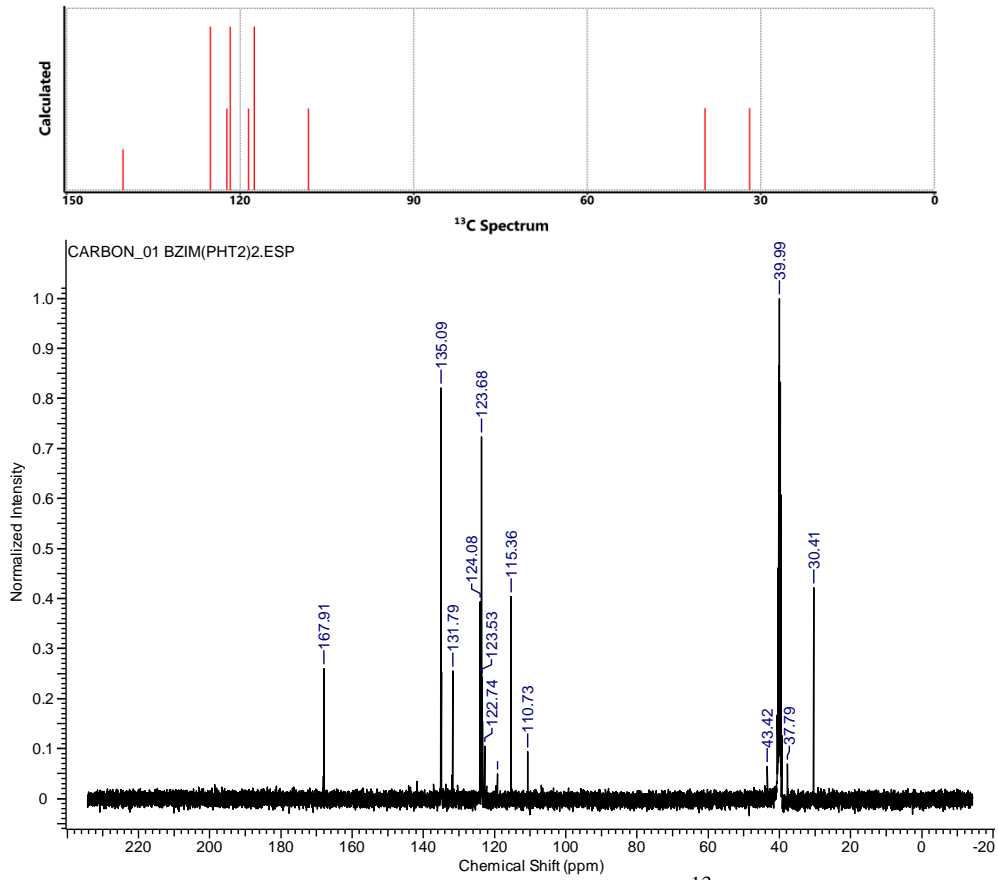
2.3. Hesapsal Çalışmalar

Yeni sentezlenen NHC tuzuna ait Hesapsal analiz çalışmaları için bu amaçla hazırlanmış SPARTAN 14 hesapsal kimya paket programı kullanıldı [13]. Aynı program başka araştırmacılar tarafından bazı organik maddelerin analizinde de kullanılmış ve başarılı sonuçlar alınmıştır[14-16]. İmidazol ve benzimidazol sınıfına ait pek çok madde, hesapsal ve spektroskopik çalışmalara konu olmuş, bu çok yönlü maddelere duyulan genel ilgi spektroskopi alanındaki çalışmaları da tetiklemiştir. Bu konuda birikim oluşturan çalışmalara diğer N-heterohalkalı bileşiklerde eklenince daha geniş bir çalışma alanı karşımıza çıkmaktadır[17-19].



Şekil 8: BEFIB Bileşiğinin hesaplanan ve deneysel FT-IR Spektrumu.

Temel düzey Enerji ve spektroskopik değerlerin hesabı için programda HF yöntemi ve 3-21G basis set ayarları kullanıldı [17-21]. FT-IR ve NMR spektrumları deneysel değerlerle karşılaştırılmak üzere hesaplatıldı ve grafiksel olarak elde edildi (Şekil 7,8,9). Bağ uzunlukları, titreşim spektroskopisi ve nmr ile ilgili teorik ve deneysel sonuçlar tablo 1, 2 ve 3'de gösterildi. Ayrıca tablo 4'te de HOMO-n ve LUMO+n grafiklerine yer verilmiştir.

Şekil 9: BEFIB bileşiğinin hesaplanan ve deneysel ^1H NMR spektrumlarıŞekil 10: BEFIB bileşiğinin hesaplanan ve deneysel ^{13}C NMR spektrumları

Tablo 1 : BEFIB bileşiğinin bağ açıları(°)

<i>Açı</i>	<i>Açı (°)</i>	<i>Açı</i>	<i>Açı (°)</i>
(C1,C4,H2)	121.81	(C14,C15,N4)	106.44
(C1,N2,C3)	109.38	(C14,C27,C26)	117.09
(C2,C1,N2)	106.24	(C15,N4,O3)	24.05
(C2,C7,C6)	116.06	(C18,C23,C22)	117.07
(C3,N1,C2)	109.26	(C19,C18,C17)	107.50
(C4,C1,C2)	122.25	(C19,O2,C18)	29.95
(C4,C5,H3)	119.11	(C21,C20,C17)	117.09
(C5,C4,C1)	116.03	(C22,C21,C20)	120.92
(C5,H3,C6)	34.71	(C23,C22,C21)	120.92
(C6,C5,C4)	121.74	(C25,C24,C13)	117.08
(C7,C6,C5)	121.78	(C27,C26,C25)	120.90
(C8,C11,N3)	111.91	(N1,C2,C1)	106.28
(C8,H6,H7)	36.56	(N1,C2,C7)	131.57
(C9,C10,N4)	111.62	(N2,C3,N1)	108.43
(C10,N1,C9)	34.37	(N2,C8,C11)	111.81
(C10,N4,C12)	123.48	(N3,C16,O1)	128.42
(C11,H13,H12)	36.16	(N3,C19,O2)	128.03
(C11,N3,C19)	123.34	(N4,C12,C13)	106.45
(C12,C13,C14)	107.41	(N4,C12,O4)	128.57
(C13,C14,C15)	107.45	(O4,C12,C13)	124.80

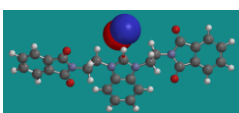
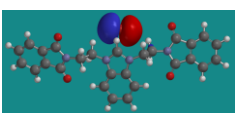
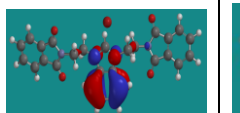
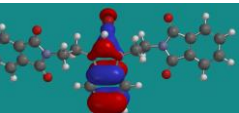
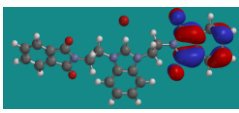
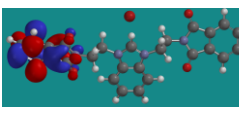
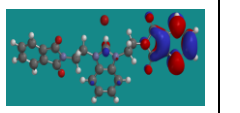
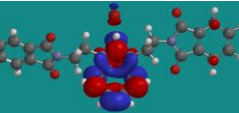
Tablo 2 BEFIB Bileşiğinin Bağ Uzunlukları

<i>Bağ</i>	<i>Uzunluk(Å)</i>	<i>Bağ</i>	<i>Uzunluk(Å)</i>	<i>Bağ</i>	<i>Uzunluk(Å)</i>
(C1,C4)	1.393	(C20,C17)	1.380	(C2,C1)	1.400
(C10,H10)	1.095	(C20,H14)	1.085	(C2,N1)	1.390
(C10,N4)	1.453	(C21,C20)	1.399	(C5,C6)	1.409
(C11,N3)	1.448	(C21,H15)	1.089	(C5,H3)	1.090
(C12,C13)	1.462	(C22,C21)	1.411	(C6,H4)	1.090
(C12,O4)	1.216	(C22,H16)	1.089	(C7,C2)	1.393
(C13,C24)	1.381	(C23,C22)	1.399	(C7,H5)	1.083
(C14,C15)	1.462	(C23,H17)	1.085	(C8,C11)	1.531
(C15,N4)	1.367	(C24,C25)	1.399	(C9,C10)	1.532
(C15,O3)	1.215	(C24,H18)	1.085	(C9,H8)	1.097
(C16,N3)	1.367	(C25,C26)	1.411	(N1,C3)	1.343
(C16,O1)	1.215	(C25,H19)	1.089	(N1,C9)	1.463
(C17,C16)	1.463	(C26,C27)	1.399	(N2,C1)	1.388
(C17,C18)	1.385	(C26,H20)	1.089	(N2,C8)	1.465
(C18,C23)	1.381	(C27,C14)	1.381	(N3,C19)	1.368
(C19,C18)	1.462	(C27,H21)	1.085	(N4,C12)	1.367
(C19,O2)	1.216	(C3,H1)	1.085		

Tablo 3: Dihedral Açılar

<i>Dihedral açısı</i>	<i>Açı (°)</i>	<i>Dihedral açısı</i>	<i>Açı (°)</i>
(C8,N2,C3,N1)	-174.95	(H7,C8,C11,H13)	74.28
(N2,C3,N1,C9)	178.26	(C23,C18,C17,C20)	0.04
(C3,N1,C2,C1)	-4.66	(C20,C21,C22,C23)	-0.04
(C2,C1,C4,C5)	-0.06	(C4,C5,C6,C7)	0.11
(C9,C10,N4,N1)	15.57	(C24,C25,C26,C27)	0.05
(H18,C24,C25,H19)	0.02	(C27,C14,C13,C24)	0.07
(O4,C12,C13,C24)	1.03	(C4,C1,C2,C7)	0.44
(C14,C15,O3,N4)	-179.46	(C19,C18,C17,C16)	-0.28
(N4,C12,C13,O4)	179.46	(N1,C2,C1,N2)	0.36
(H18,C24,C25,H19)	0.02	(C12,C13,C14,C15)	-0.04
(H20,C26,C27,H21)	0.05		

Tablo 4: Homo-n ve Lumo + n değerleri ve şekilleri

Molekül Orbitali	n			
	1	2	3	4
HOMO-n	 -7.3 eV	 -7.3 eV	 -9.4 eV	 -9.6 eV
LUMO+n	 +1.3 eV			

3. Sonuç

Bu çalışmada sentezlenen ve literatürde yeni olan bileşiğin spektroskopik ölçümleri hem deneysel, hem de hesapsal olarak bulundu. Bulunan değerler karşılaştırılarak aralarında önemli oranda uyum bulunduğu görüldü. SPARTAN XX sürümleri diğer ticari yazılımlara kıyasla literatürde daha az göze çarpan bir yazılım olmakla beraber gerek maddemizin fazla karmaşık olmaması gerekse güncel sayılabilecek bir sürümünü kullanmamızdan dolayı sonuçların tatmin edici olduğu söylenebilir. Elde edilen NHC tuzunun zamanla değişik metal kompleksleri de sentezlenebilir ve hem metalsiz hem de kompleks halinde bu bileşiklerin katalitik ve biyolojik etkinlikleri inceleme konusu olabilir.

Teşekkür

Bu çalışmamda maddi destekleri nedeniyle Pamukkale Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri (BAP) Koordinatörlüğüne teşekkür ederim. Çalışmada kullanılan SPARTAN 14 yazılımı HZL-2014-5 projesi kapsamında satın alınmıştır.

Kaynaklar

- 1- Herrmann, W.A., Kocher, C., “N-heterocyclic carbenes.”, *Angew. Chem. Int. Ed. Engi.*1997: 36, 2162-2187
- 2- Garrison, J. C., Youngs, W. J., “Ag(I) N-Heterocyclic Carbene Complexes: Synthesis, Structure, and Application”, *Chem. Rev.*, 2005: 105, 3978-4008
- 3- Díez-González S., Marion N. ve Nolan S.P., , “N-heterocyclic carbenes in late transition metal catalysis”, *Chemical Reviews*, , 2009, 109:3612-3676
- 4- Kumar, P., Thakur, A., Hong, X., Houk, K. N., Louie, J., “Ni(NHC)]-Catalyzed Cycloaddition of Diynes and Tropone: Apparent Enone Cycloaddition Involving an 8 π Insertion”, *J. Am. Chem. Soc.* , 2014 : 136 (51), 17844–17851
- 5- Kascatan-Nebioglu, A., Panzner, M. J., Tessier, C. A., Cannon, C.L. ve Youngs, W.J., "N-Heterocyclic carbene-silver complexes: A new class of antibiotics", *Coordination Chemistry Reviews*, 2007: 251, 884-895
- 6- Özdemir İ., Özcan, E. Ö., Günel S., Gürbüz N., “Synthesis and Antimicrobial Activity of Novel Ag-N-Heterocyclic Carbene Complexes”, *Molecules*, 2010, 15, 2499-2508
- 7- Haque, R. A., Budagumpi, S., Zulikha, H. Z., Hasanudin, N., Ahamed, M.B.K., Abdul Majid, A.M.S., “Silver(I)-N-heterocyclic carbene complexes of nitrile-functionalized imidazol-2-ylidene ligands as anticancer agents”, *Inorganic Chemistry Communications*,2014: 44, 128–133
- 8- Balcan, S., Balcan M., Çetinkaya, B.,” Poly(l-lactide) initiated by silver N-heterocyclic carbene complexes: synthesis, characterization and properties”, *Polymer Bulletin*,2013: 70, 12, 3475-3485
- 9- Taşcı, Z., Kunduracioğlu, A., Kani,İ., Çetinkaya,B., “A New Application Area for Ag-NHCs: CO₂ Fixation Catalyst”, *ChemCatChem*,2012: 4, 1–6
- 10- Türkmen H., Ceyhan N, Karabay Yavaşoğlu, U. N, Ozdemir G, ve Cetinkaya B.,”Synthesis and antimicrobial activities of hexahydroimidazo[1,5-a]pyridinium bromides with varying benzyl substituents.” *Eur J Med Chem.*2011: 46(7), 2895-2900.
- 11- Bertrand, B., Stefan, L., Pirrotta, M., Monchaud D., Bodio, E., Richard ,P., Le Gendre, P. Warmerdam, E., de Jager, M.H., Groothuis, G.M.M., Picquet, M., Casini ,A., “Caffeine-Based Gold(I) N-Heterocyclic Carbenes as Possible Anticancer Agents: Synthesis and Biological Properties” *Inorg. Chem.*2014: 53, 2296–2303
- 12- Kunduracioğlu, A., Tamer, Ö., Avcı, D., Kani, İ., Atalay, Y., Çetinkaya, B., “1-Pentamethylbenzyl-3-nbutylbenzimidazolesilver(I)bromide complex: Synthesis, characterization and DFT calculations”, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*,2014: 121, 35–45
- 13-Spartan 14, Wavefunction Inc. Irvine CA, USA, 2014
- 14- Dhandapani, A., Manivarman, S., Subashchandrabose, S., Saleem, H., ” Molecular structure and vibrational analysis on (E)-1-(3-methyl-2,6-diphenyl piperidin-4-ylidene) semicarbazide” *Journal of Molecular Structure*,2014: 1058, , 41-50
- 15- Dereli, Ö., Erdoğan, Y., Güllüoğlu M.T., “Study on molecular structure and vibrational spectra of (triphenylphosphoranylidene) acetaldehyde using DFT: A combined experimental and quantum chemical approach” *Journal of Molecular Structure*,2012: 1012, 105-112
- 16- Karakaş-Sarıkaya, E., Dereli, Ö., “Molecular structure and vibrational spectra of 7-Methoxy-4-methylcoumarin by density functional method”, *Journal of Molecular Structure*,2013: 1052, 25, 214-220
- 17- Sholl, D.S., Steckel, J. A., (Çev: Aydın, S., Körözlü, N.), “Yoğunluk fonksiyonel teorisi: Pratik bir Giriş”, Nobel, (2012)
- 18- Köksal, F., Köseoğlu, R., “Kuantum kimyası”, Nobel, (2012)
- 19- Köksal, F. Köseoğlu, R., “Spektroskopi ve lazerlere giriş”, Nobel, (2010)
- 20- Haken, H., Wolf, H.C.(Çev: Okur, İ.), “Molekül Fiziği ve Kuantum Kimyası”, Değişim, (2008)
- 21- Ramachandran, K.I., Deepa, G. ve Namboori, K. , “Computational Chemistry and Molecular Modeling Principles and Applications”, Springer, (2008)