

AKÜ FEMÜBİD 16 (2016) 031205 (561-568)  
DOI: 10.5578/fmbd.43447

AKU J. Sci. Eng. 16 (2016) 031205 (561-568)

Araştırma Makalesi / Research Article

## 4-siyano Grubu İçeren Schiff Bazı Bileşiklerin Sentezi Karakterizasyonu ve Teorik Hesaplamalar

Engin Yılmaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bitlis Eren Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Bitlis  
e-posta: eyilmaz111@gmail.com

Geliş Tarihi: 06.05.2016 ; Kabul Tarihi: 19.12.2016

### Özet

#### Anahtar kelimeler

Schiff Bazı; 4-siyano;  
Gaussian 09; Çözücü  
Etkisi

Bu çalışmada üç adet schiff bazı bileşik sentezlenmiştir. Sentezlenen bileşiklerin karakterizasyonları FT-IR, NMR ve Uv-görünür bölge spektroskopisi yöntemleri ile yapılmıştır. Sentezlenen bileşiklerin aseton, 1,4-dioksan ve dimetilsülfoksit çözücülerinde UV-görünür bölge içerisindeki davranışları incelendi. Çalışmanın son aşamasında ise bileşiklere ait teorik hesaplamalar Gaussian 09 yazılımı ile yapılmıştır.

## Synthesis Characterization Schiff Base Compounds Containing 4-Cyano Group and Theoretical Calculations

### Abstract

#### Keywords

Schiff Base; 4-Cyano;  
Gaussian 09; Solvent  
Effect

In this study, three schiff base compounds were synthesized. Characterizations of compounds were made IR, NMR and Uv-vis spectrometers methods. The behavior of the synthesized compounds were investigated in acetone, 1,4-dioxane and dimethylsulfoxide solvents the UV-visible region. Finally, theoretical calculations were made Gaussian 09 software.

© Afyon Kocatepe Üniversitesi

### 1. Giriş

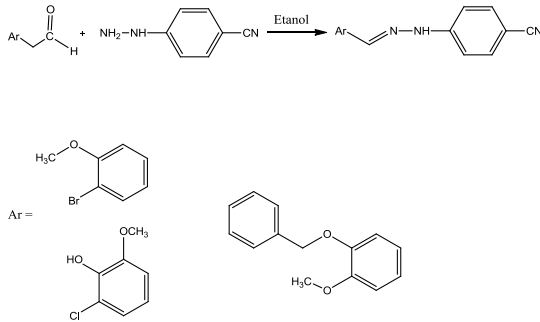
Schiff bazları genel olarak  $R-CH=N-R'$  formülüyle gösterilen bileşikler olup buradaki R ve R' ifadeleri aril veya alkil sübtütientlerini ifade etmektedir. Schiff bazları ve schiff bazı kompleksleri gerek sentezde gerekse medikal alanda geniş bir şekilde kullanılmaktadır (Çay, Köse et al. 2015, Gao, Lv et al. 2015, Pradeep Kumar, Tejaswi et al. 2015, Shakir, Abbasi et al. 2015, Xu, Mao et al. 2015, Abdel-Kader, El-Ansary et al. 2016, de Toledo, da Costa et al. 2016, Mahlooji, Behzad et al. 2016). Bu bileşik sınıfının genel kullanım alanları arasında ışık emisyon diyot (LED) (Taghi Sharbati, Soltani Rad et al. 2011, García-López, Muñoz-Flores et al. 2014, Panda, Roy et al. 2016) ve kemosensör özellikleri de vardır (Ghosh, Kumar et al. 2016, Wan, Shu et al. 2016, Wang, Ma et al. 2016). Bileşiklerin çözücü içindeki davranışlarını

incelemek için çeşitli spektral yöntemler kullanılmaktadır. Bu yöntemler arasında en yaygın kullanılanlardan biri de Uv- görünür bölge spektrofotometresi (UV-GB) olup schiff bazlarının enol-keto formlarını incelenmesinde yaygın bir şekilde kullanıldığı görülmektedir. Maddelerin çözücü içindeki davranışlarının bilinmesi, kimyasal reaksiyonlarda hangi ucun tepkimeye gireceğini tahmin etme konusunda oldukça faydalıdır. Literatürde maddelerin çözücü içindeki davranışlarının incelenmesi ile ilgili çok sayıda makale mevcuttur (Ghasemian, Kakanejadifard et al. 2014, Gandhimathi, Balakrishnan et al. 2016, Sıdır, Sıdır et al. 2016).

Bu çalışmada, üç adet schiff bazı sentezlendi. Bu bileşiklerin üç farklı çözücüdeki davranışı Uv-görünür bölge spektrofotometresi ile incelendi. Sentezlenen bu bileşiklere ait teorik hesaplamalar gaussian 09 programı ile yapıldı.

## 2. Materyal ve Metot

4-siyanofenil hidrazinhidroklorid, 4-benzoksi-3-metoksibenzaldehid, 3-kloro-4-hidroksi-5-metoksibenzaldehid ve 3-brom-4-metoksibenzaldehid bileşikleri Aldrich firmasından satın alındı. Sentezlenen bileşiklerin erime noktalarına Gallenkamp marka erime noktası tayin cihazı ile bakıldı. Sentezlenen maddelerin IR spektrumları Mattson 1000 Fourier transform-infrared (FT-IR) marka cihazı ile incelendi. FT-IR analizleri yapılırken bileşiklerin pellet hazırlamada KBr kullanıldı ve dalga boyu taraması 4000 ile 400  $\text{cm}^{-1}$  bölgesi arasında yapıldı.  $^1\text{H}$  ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumları Varian-Gemini 400 MHz marka spektrometre ile yapıldı. UV-görünür bölge spektrumları Perkin Elmer lambda 35 spectrum marka cihazı ile incelendi. Bileşiklere ait sentez şeması Şekil 1. de verilmiştir. Bileşiklere ait teorik hesaplamalar Gaussian 09 yazılımı ile yapıldı. Hesaplamalarda DFT 6-311(+(d,p)) metodu uygulandı. Elde edilen sonuçlar Gausview 5.0 görüntülendi (M.J.F. R. A. Gaussian 09).



Şekil 1. Bileşiklerin sentez şeması.

Sentezlenen bileşiklerin kimyasal yapıları Tablo 1 de verilmiştir.

Tablo 1. Çalışmada sentezlenen bileşiklerin kimyasal formülleri

Bileşikler	Kimyasal yapı
C-1	
C-2	
C-3	

### 2.1. Bileşiklerin sentezi

#### (Genel yöntem)

Aromatik aldehitten 25 mmol alınıp 20 mL mutlak etanol içerisinde çözüldü. Bu çözeltiliye 4-siyanofenilhidrazinhidroklorid bileşiğinin 20 mL mutlak etanol çözeltisi damla damla ilave edildi. Bu karışım 60-70 °C'de 3 saat boyunca karıştırılmaya bırakıldı. Reaksiyonun takibi karışımdan alınan örneklerin FT-IR spektroskopisi ile takip edildi. Oluşan katılar süzgeç kağıdında süzülür su ile yıkandı ve etanolde kristallendirildi.

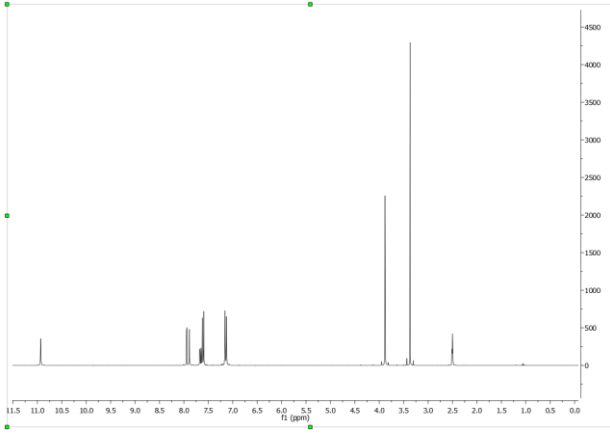
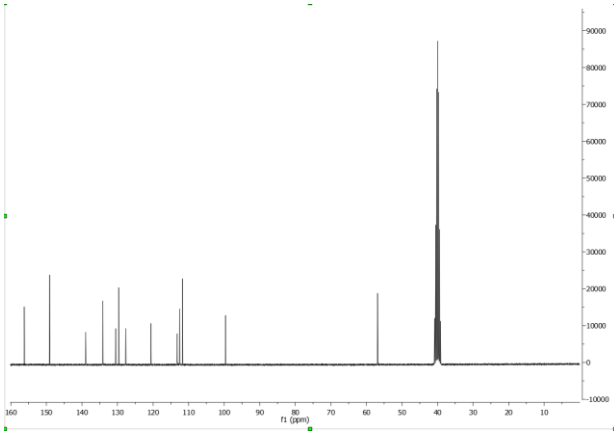
### 3. Bulgular

Sentezlenen bileşiklerin karakterizasyonları FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR  $^{13}\text{C}$ -NMR yöntemleri yapıldı. Aromatik aldehitlerde bulunan C=O grupları IR cihazında 1686-1710  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde pik verirler. Bu bölgedeki pikin kaybolması ayrıca 1600-1609  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde -CH=N- grubuna ait piklerin görülmesi tepkimenin istenilen yönde yürüdüğünü göstermektedir. Bileşiklere ait ayrıntılı spektral değerlendirmeler aşağıda yapılmıştır.

#### 3.1. 4-(2-(2-(3-brom-4-metoksifenil) etiliden) hidrazinil)benzonitril (C-1)

Turuncu kristal. Verim: % 50. E.n.: 188 °C, FT-IR (KBr,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3283 NH, 3155-3024 (aromatik C-H), 2978-2853 (alifatik C-H), 2211 ( $\text{—C}\equiv\text{N}$ ), 1609 (-C=N-).  $^1\text{H}$ -NMR ( $d_6$ -DMSO, TMS,  $\delta$  ppm): 3,4 (t, 3H, -OCH<sub>3</sub>), 3,9 (t, 2H, -CH<sub>2</sub>), 7,9 (t, 1H, N=CH-), 7,1-7,6 (m, 7H, Ar-H), 10,93 (s, 1H, NH).  $^{13}\text{C}$ -NMR: 156,8; 156,2; 149,1; 138,9; 134,1; 130,5; 129,7; 127,7; 120,6; 113,2; 112,5; 111,7; 99,6; 99,6; 56,9.

C-1 bileşiğine ait  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu Şekil 2 de  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu ise Şekil 3 de verilmiştir.

Şekil 2. C-1 bileşiğine ait <sup>1</sup>H-NMR spektrumuŞekil 3. C-1 bileşiğine ait <sup>13</sup>C-NMR spektrumu

### 3.2 4-(2-(2-(3-klor-4-hidroksi-5-metoksifenil)etiliden)hidrazinil)benzonitril (C-2)

Beyaz kristal. Verim: % 59. E.n.: 238 °C. FT-IR (KBr,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3420 OH, 3283 NH, 3155-3018 (aromatik C-H), 2973-2841 (alifatik C-H), 2202 (CN), 1601 (-C=N-). <sup>1</sup>H-NMR ( $d_6$ -DMSO, TMS,  $\delta$  ppm): 3,4 (t, 2H, -CH<sub>2</sub>), 3,9 (t, 3H, -OCH<sub>3</sub>), 7,1-7,6 (m, 6H, aromatik), 7,9 (t, 1H, -CH=N), 9,8 (t, 1H, OH), 10,9 (t, 1H, NH). <sup>13</sup>C-NMR: 149,4; 149,1; 156,9; 144,2; 139,7; 134,1; 127,2; 120,7; 120,7; 120,5; 112,5; 107,7; 99,5; 56,7.

### 3.3 4-(2-(2-(4(benzoksi)-3-metoksifenil)etiliden)hidrazinil)benzonitril (C-3)

Sarı kristal. Verim: % 72. E.n.: 172 °C. FT-IR (KBr,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3480 NH, 3261-3004 (aromatik C-H), 2961-2844 (alifatik C-H), 2213 ( $\text{—C}\equiv\text{N}$ ), 1600 (-C=N-). <sup>1</sup>H-NMR ( $d_6$ -DMSO, TMS,  $\delta$  ppm): 3,4 (t, 3H, -OCH<sub>3</sub>), 3,9 (t, 2H, -CH<sub>2</sub>-), 5,1 (t, 2H, OCH<sub>2</sub>) 7,1-7,6

(m, 9H, Ar-H), 7,9 (t, 1H, -CH=N), 10,8 (s, 1H, NH). <sup>13</sup>C-NMR: 149,9; 149,3; 149,2; 149,2; 149,2; 149,2; 140,8; 137,4; 134,1; 128,9; 128,6; 128,4; 128,3; 120,7; 120,7; 113,7; 112,4; 108,8; 99,3; 70,4; 56.

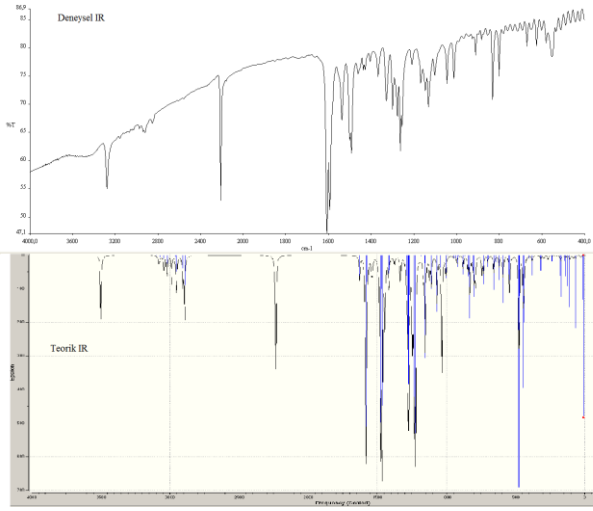
### 3.4 FT-IR spektrum değerlendirmesi

N-H gerilme vibrasyonları C-1 için 3283  $\text{cm}^{-1}$ , C-2 için 3283  $\text{cm}^{-1}$  ve C-3 için 3480  $\text{cm}^{-1}$  de gözlemlendi. Genel olarak N-H vibrasyonları 3500-3300  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde görülmektedir (Bellamy 1975). Teorik olarak bu vibrasyonlar, bileşikler için 3498  $\text{cm}^{-1}$ , 3373  $\text{cm}^{-1}$  ve 3482  $\text{cm}^{-1}$  (DFT) bölgesinde hesaplandı. C-2 bileşiğinde -OH fonksiyonel grubu bulunmaktadır. Bu vibrasyonlar 3420  $\text{cm}^{-1}$  de görüldü. Teorik olarak OH vibrasyonları 3620  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde hesaplandı. Aromatik C-H vibrasyonları, C-1 için 3155-3024  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde, C-2 için 3155-3018  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde ve C-3 için 3261-3018  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde görüldü. Teorik vibrasyonlar ise sırasıyla 3080-3042  $\text{cm}^{-1}$ , 3040  $\text{cm}^{-1}$  ve 3061  $\text{cm}^{-1}$  de görüldü. C-1 bileşiği için teorik alifatik vibrasyonlar (CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub> ve H-C=N-) 3018, 2986, 2951, 2905 ve 2892  $\text{cm}^{-1}$  bölgelerinde görüldü. Aynı bileşik için deneysel pikler 2978-2853  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde görüldü.

C-2 bileşiği için deneysel vibrasyonlar 2973-2841  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde görülürken, teorik pikler 3018, 2950, 2910, 2902 ve 2891  $\text{cm}^{-1}$  de görüldü. C-3 için teorik vibrasyonlar 3009, 2975, 2906  $\text{cm}^{-1}$  bölgesinde görüldü

Teorik CN titreşimleri sırasıyla 2234, 2230 ve 2231  $\text{cm}^{-1}$  bölgelerinde görülürken, deneysel titreşimler 2211, 2202 ve 2213  $\text{cm}^{-1}$  bölgelerinde gözlemlendi.

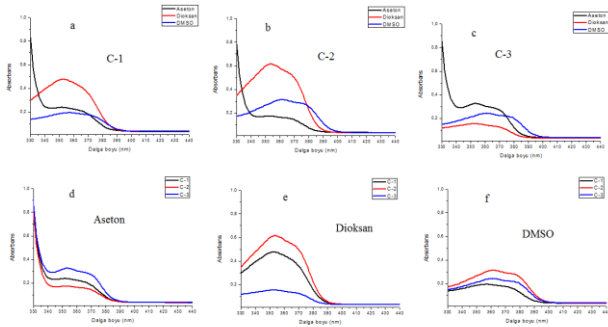
C=N titreşimleri 1609, 1601 ve 1600  $\text{cm}^{-1}$  bölgelerinde görülürken, teorik olarak bu pikler 1626, 1623 ve 1630  $\text{cm}^{-1}$  bölgelerinde görüldü. C-1 bileşiği için teorik ve deneysel IR spektrumu Şekil 4 de verilmiştir.



Şekil 4. C-1 bileşiğine ait teorik ve deneysel IR spektrumu.

### 3.5 UV-GB spektrum değerlendirmesi

Çalışmanın bu bölümünde bileşiklerin UV-GB spektrumları 3 farklı çözücüde incelendi. Bu çözücüler aseton, 1,4 dioksan ve DMSO dur. Bileşiklere ait absorpsiyon pikleri 330-390 nm aralığında görüldü. C-1 bileşiği için, aseton ve 1,4 dioksan çözücülerindeki  $\lambda_{\max}$  350 nm de görülürken DMSO çözücüsünde  $\lambda_{\max}$  370 nm de görüldü. Benzer durum C-2 ve C-3 bileşiğinde de görülmektedir. Maddelere ait Uv-görünür bölge spektrumları Şekil 5 de verilmiştir. Bileşiklere ait  $\lambda_{\max}$  değerleri Tablo 2. de verilmiştir.



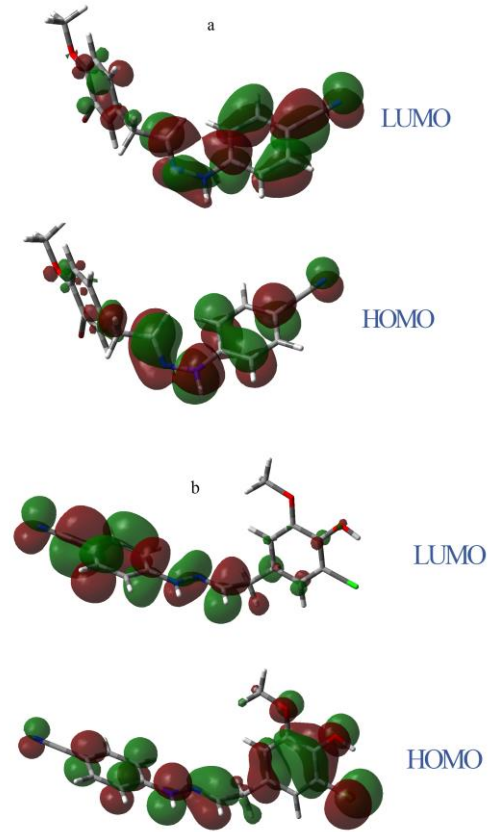
Şekil 5. Bileşiklere ait Uv görünür bölge spektrumları (a, b, c) sırasıyla C-1, C-2, C-3 bileşiklerinin farklı çözücülerdeki spektrumu (d) maddelerin asetondaki (e) dioksandaki (f) DMSO daki spektrumları

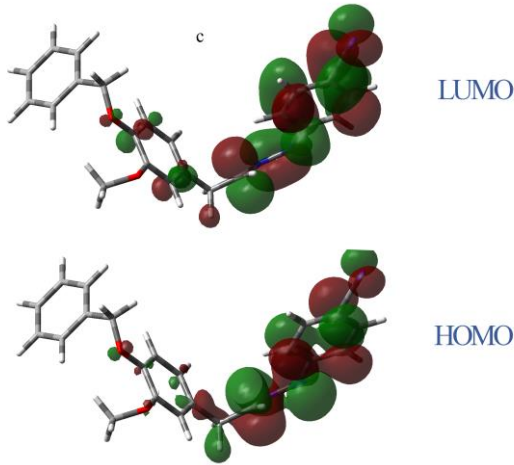
Tablo 2. Bileşiklerin Uv-görünür bölge spektrometresi ile elde edilen  $\lambda_{\max}$  değerleri

Çözücü	C-1 $\lambda_{\max}$	C-2 $\lambda_{\max}$	C-3 $\lambda_{\max}$
Aseton	352; 364	353;367	353; 366
1,4-Dioksan	353; 363	353;364	353; 368
DMSO	359;373	362;375	361; 374

### 3.6 Frontier moleküler orbital analizi ve global reaktivite tanımlayıcıları

HOMO ve LUMO enerjileri 6-311(++) (d,p) metodu kullanılarak hesaplandı. Hesaplanan HOMO, LUMO değerleri kullanılarak global reaktivite tanımlayıcıları hesaplandı. Bileşiklerin elektronegativiteleri ( $\chi$ ) =  $-(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2$  formülüne göre hesaplandı.





**Şekil 6.** HOMO-LUMO enerji diyagramları ((a) C-1 numaralı bileşik ((b) C-2 numaralı bileşik ve ((c) C-3 numaralı bileşik).

Kimyasal potansiyeller ( $\mu$ )=  $(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2$  formülüne göre hesaplandı.

Global sertlik ( $\eta$ )=  $(E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}})/2$  formülüne göre hesaplandı. Global yumuşaklık ( $S$ )=  $1/2\eta$  formülüne göre ve elektrofiliklik indeksi ( $\omega$ )= $\mu^2/2\eta$  formülüne göre hesaplandı (Parr and Pearson 1983, Pearson 1989, Parr, Von Szentpaly et al. 1999, Geerlings, De Proft et al. 2003, Chattaraj and Giri 2007). Global reaktivite tanımlayıcı değerleri Tablo 3. de verilmiştir.

**Tablo 3.** Bileşiklere ait hesaplanan global reaktivite tanımlayıcı değerleri

Madde	( $\chi$ )	( $\mu$ )	( $\eta$ )	( $S$ )	( $\omega$ )	Homo-lumo
C-1	6,31	-6,31	-1,46	-0,34	-29,16	-2,93
C-2	6,21	-6,21	-1,48	-0,34	-28,47	-2,95
C-3	6,16	-6,16	-1,48	-0,34	-28,02	-2,96

### 3.7 Natural bağ orbital analizi

NBO analizi, bileşik içinde ki bağlar arasında meydana gelen etkileşimleri göstermek amacıyla hesaplanır. Buradaki E2 değeri elektron alıcıları ve elektron vericileri arasındaki etkileşimleri

## 4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışmada üç adet schiff bazı sentezlenmiş ve karakterizasyonları spektral yöntemler kullanılarak yapılmıştır.

göstermektedir. Bu değer büyük olması gruplar arasındaki etkileşimin de büyük olduğunu gösterir.

C-1 bileşğinde, BD (2) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> -BD\*(2) C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub> arasındaki etkileşim 17,51 kJ mol<sup>-1</sup> olarak ve BD (2) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-BD\*(2) C<sub>4</sub>-C<sub>5</sub> arasındaki etkileşim 21,99 kJ mol<sup>-1</sup> olarak hesaplandı. Bu atomlar benzen halkası üzerinde bulunmaktadır. Ayrıca, BD (2) C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-BD\*(2) C<sub>34</sub>-N<sub>35</sub> arasındaki etkileşim 18,99 kJ mol<sup>-1</sup> olarak hesaplandı. Bu etkileşim ise CN grubu ile benzen halkası arasındaki etkileşimi göstermektedir. Azot atomu üzerinde bulunan ortaklaşmamış elektron çifti ile N=CH grubu arasında da bir etkileşim mevcut olup bu değer 14,10 kJ mol<sup>-1</sup> olarak hesaplandı. C-1 bileşiğine ait bazı enerji değerleri Tablo 4. de verilmiştir.

**Tablo 4.** C-1 bileşiğine ait NBO analizi

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	E(2) kcal/mol
BD C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	BD*(2) C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	17,51
BD (2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	BD*(2) C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	21,99
BD (2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	BD*(3) C <sub>34</sub> -N <sub>35</sub>	18,90
BD (2) C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	BD*(2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	24,34
BD (2) C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	BD*(2) C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	16,84
BD (2) C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	BD*(2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	17,17
BD (2) C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	BD*(2) C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	21,73
BD (1) C <sub>6</sub> -C <sub>34</sub>	BD*(1) C <sub>34</sub> -N <sub>35</sub>	7,87
BD (1) C <sub>14</sub> -C <sub>16</sub>	BD*(1) N <sub>11</sub> -N <sub>13</sub>	6,12
BD (2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	BD*(2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	20,93
BD (2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	BD*(2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	19,14
BD (2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	BD*(2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	17,42
BD (2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	BD*(2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	20,58
BD (2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	BD*(2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	20,71
BD (2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	BD*(2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	18,34
BD (3) C <sub>34</sub> -N <sub>35</sub>	BD*(2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	7,59
CR (1) N <sub>35</sub>	RY*(1) C <sub>34</sub>	7,06
LP (1) N <sub>11</sub>	BD*(2) C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	16,96
LP (1) N <sub>11</sub>	BD*(2) N <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	14,10
LP (1) N <sub>13</sub>	BD*(1) C <sub>14</sub> -H <sub>15</sub>	11,22
LP (3) Br <sub>28</sub>	BD*(2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	11,46
LP (1) O <sub>29</sub>	BD*(1) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	6,95
LP (2) O <sub>29</sub>	BD*(2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	29,09
LP (2) O <sub>29</sub>	BD*(1) C <sub>30</sub> -H <sub>31</sub>	6,07
LP (2) O <sub>29</sub>	BD*(1) C <sub>30</sub> -H <sub>33</sub>	6,07
LP (1) N <sub>35</sub>	RY*(1) C <sub>34</sub>	17,25
LP (1) N <sub>35</sub>	BD*(1) C <sub>6</sub> -C <sub>34</sub>	11,40
BD*(2) C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	BD*(3) C <sub>34</sub> -N <sub>35</sub>	21,47
BD*(2) N <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	BD*(2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	5,15
BD*(2) C <sub>21</sub> -C <sub>24</sub>	BD*(2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	270,61
BD*(2) C <sub>22</sub> -C <sub>26</sub>	BD*(2) C <sub>19</sub> -C <sub>20</sub>	211,14

Schiff bazlarına ait -N=C- titreşimleri FT-IR da sırasıyla 1609, 1601 ve 1600 cm<sup>-1</sup> bölgelerinde çıkması ayrıca <sup>1</sup>H-NMR spektrumunda sırasıyla 7,6 ppm 7,9 ppm ve 7,9 ppm de HC=N piklerin görülmesi ve <sup>13</sup>C-NMR cihazında da sırasıyla 156,8 ppm 149,9 ppm, 149,8 ppm de piklerin görülmesi bileşiklerin sentezlendiğini göstermektedir.

Deneysel ve teorik FT-IR verileri karşılaştırıldığında bazı sapmalar gözlemlenmiştir. Bu sapmaların olası sebeplerinden biri gaussian 09 programı ile yapılan hesaplamalarda tek molekül kullanılırken, deneysel verilerde moleküller arası etkileşim faktörünün göz önüne alınmaması olabilir. Olası sebeplerden bir diğeri ise deneysel verilerde çözücü molekül etkileşimi varken teorik hesaplamalarda bu faktör ihmal edilmiştir.

Sentezlenen bileşiklerin çözücü içerisindeki davranışları Uv-GB spektrofotometresi ile üç farklı çözücü kullanılarak yapılmıştır. Çalışmanın son kısmında ise bileşiklerin teorik hesaplamaları Gaussian 09 programı ile yapılmıştır.

Yapılan hesaplamalara göre HOMO ve LUMO enerji dağılımları C-1 ve C-3 bileşikleri için aynıdır. (Şekil 6.a ve Şekil 6.c). Şekil 6.c den de görüldüğü gibi C-2 bileşiği için, HOMO enerjisi -OH grubunun bağlı olduğu benzen halkası üzerinde yoğunlaşmışken, LUMO enerjisi -CN grubunun bağlı olduğu benzen halkası üzerinde yoğunlaşmıştır.

Global reaktivite tanımlayıcılarına ait hesaplanan değerler Tablo 3 de verilmiştir. Tablodan da görülebileceği gibi, C-1 bileşiğinin elektronegativitesi en yüksek, C-3 ki ise en düşük olarak hesaplandı. Yapılan hesaplamalarda C-1 bileşiğinin global sertliği -1,46; C-2 ve C-3 bileşiklerinin global sertlikleri ise 1,48 olarak bulundu.

## TEŞEKÜRLER

- Katkılarından dolayı Bitlis Eren Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi (BEBAP BEBAP 2014.09) ne ve Bilim ve Teknoloji Uygulama ve Araştırma Merkezi ne teşekkür ederim.

## Kaynaklar

- Abdel-Kader, N. S., El-Ansary A. L., El-Tayeb T. A. and Elnagdi M. M. F. (2016). "Synthesis and characterization of Schiff base complexes derived from cephradine: Fluorescence, photostability and photobiological applications." *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **321**: 223-237.
- Bellamy, L. J. (1975). *The IR Spectra of complex Molecules*. New York, John Wiley and Sons
- Chattaraj, P. K. and Giri S. (2007). "Stability, reactivity, and aromaticity of compounds of a multivalent superatom." *Journal of Physical Chemistry A* **111**(43): 11116-11121.
- Çay, S., Köse M., Tümer F., Gölcü A. and Tümer M. (2015). "SOD activity and DNA binding properties of a new symmetric porphyrin Schiff base ligand and its metal complexes." *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **151**: 821-838.
- de Toledo, T. A., da Costa R. C., da Silva L. E., Teixeira A. M. R., Lima V. N., Sena Jr D. M., Coutinho H. D. M., Freire P. T. C. and Pizani P. S. (2016). "Thermal and biological properties of the Schiff base N,N'-bis(salicylidene)-1,2-phenylenediamine, a potential adjuvant to antibiotic therapy." *Journal of Molecular Structure* **1115**: 105-108.
- Gandhimathi, S., Balakrishnan C., Venkataraman R. and Neelakantan M. A. (2016). "Crystal structure, solvatochromism and estimation of ground and excited state dipole moments of an allyl arm containing Schiff base: Experimental and theoretical calculations." *Journal of Molecular Liquids* **219**: 239-250.
- Gao, Z., M. Lv, Li Q. and Xu H. (2015). "Synthesis of heterocycle-attached methylidenebenzenesulfonohydrazones as antifungal agents." *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* **25**(22): 5092-5096.
- García-López, M. C., Muñoz-Flores B. M., Jiménez-Pérez V. M., Moggio I., Arias E., Chan-Navarro R. and Santillan R. (2014). "Synthesis and photophysical characterization of organotin compounds derived from Schiff bases for organic light emitting diodes." *Dyes and Pigments* **106**: 188-196.
- Geerlings, P., De Proft F. and Langenaeker W. (2003). "Conceptual density functional theory." *Chemical Reviews* **103**(5): 1793-1873.
- Ghasemian, M., Kakanejadifard A., Azarbani F., Zabardasti A. and Kakanejadifard S. (2014). "The triazine-based azo-azomethine dyes; spectroscopy, solvatochromism and biological properties of 2,2'-((2,2'-(6-methoxy-1,3,5-triazine-2,4-diyl)bis(oxy)bis(2,1-phenylene))bis(azan-1-yl-1-ylidene)bis(methan-1-yl-1-ylidene))bis(4-phenyldiazenyl)phenol." *Journal of Molecular Liquids* **195**: 35-39.
- Ghosh, P., Kumar N., Mukhopadhyay S. K. and Banerjee P. (2016). "Sensitive and fluorescent Schiff base chemosensor for pico molar level fluoride detection: In vitro study and mimic of logic gate function." *Sensors and Actuators B: Chemical* **224**: 899-906.
- M.J.F. R. A. Gaussian 09, G. W. T., H. B. Schlegel, G.E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- Mahlooji, N., Behzad M., Amiri Rudbari H., Bruno G. and Ghanbari B. (2016). "Unique examples of copper(II)/sodium(I) and nickel(II)/sodium(I) Schiff base complexes with bridging bis-bidentate Salen type ligand: Synthesis, crystal structures and antibacterial studies." *Inorganica Chimica Acta* **445**: 124-128.
- Panda, U., Roy S., Mallick D., Dalapati P., Biswas S., Manik N. B., Bhattacharyya A. and Sinha C. (2016). "Aggregation induced emission enhancement of pyrene-appended Schiff base luminophore and its photovoltaic effect." *Journal of Luminescence* **175**: 44-49.
- Parr, R. G. and Pearson R. G. (1983). "Absolute Hardness - Companion Parameter to Absolute Electronegativity." *Journal of the American Chemical Society* **105**(26): 7512-7516.

- Parr, R. G., Von Szentpaly L. and Liu S. B. (1999). "Electrophilicity index." *Journal of the American Chemical Society* **121**(9): 1922-1924.
- Pearson, R. G. (1989). "Absolute Electronegativity and Hardness - Applications to Organic-Chemistry." *Journal of Organic Chemistry* **54**(6): 1423-1430.
- Pradeep Kumar, M., Tejaswi S., Rambabu A., Kalalbandi V. K. A. and Shivaraj (2015). "Synthesis, crystal structure, DNA binding and cleavage studies of copper(II) complexes with isoxazole Schiff bases." *Polyhedron* **102**: 111-120.
- Shakir, M., Abbasi A., Faraz M. and Sherwani A. (2015). "Synthesis, characterization and cytotoxicity of rare earth metal ion complexes of N,N'-bis-(2-thiophenecarboxaldimine)-3,3'-diaminobenzidine, Schiff base ligand." *Journal of Molecular Structure* **1102**: 108-116.
- Sıdır, İ., Sıdır Y. G., Berber H. and Türkoğlu G. (2016). "Specific and non-specific interaction effect on the solvatochromism of some symmetric (2-hydroxybenzilydeamino)phenoxy Schiff base derivatives." *Journal of Molecular Liquids* **215**: 691-703.
- Taghi Sharbati, M., Soltani Rad M. N., Behrouz S., Gharavi A. and Emami F. (2011). "Near infrared organic light-emitting diodes based on acceptor-donor-acceptor (ADA) using novel conjugated isatin Schiff bases." *Journal of Luminescence* **131**(4): 553-558.
- Wan, L., Shu Q., Zhu J., Jin S., Chen N. Li, X. and Chen S. (2016). "A new multifunctional Schiff-based chemosensor for mask-free fluorimetric and colorimetric sensing of F<sup>-</sup> and CN<sup>-</sup>." *Talanta* **152**: 39-44.
- Wang, K., Ma L., Liu G., Cao D., Guan R. and Liu Z. (2016). "Two fluorescence turn-on coumarin Schiff's base chemosensors for cyanide anions." *Dyes and Pigments* **126**: 104-109.
- Xu, Z.-Q., Mao X.-J., Jia L., Xu J., Zhu T.-F., Cai H.-X., Bie H.-Y., Chen R.-H. and Ma T.-I. (2015). "Synthesis, characterization and anticancer activities of two lanthanide(III) complexes with a nicotinohydrazone ligand." *Journal of Molecular Structure* **1102**: 86-90.