

B3LYP ve HF Temel Setleri Kullanılarak Bazı 3-Alkil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on Bileşiklerinin Deneysel ve Teorik Özelliklerinin İncelenmesi

Haydar Yüksek¹, Gül Kotan^{2*}, Hilal Medetalibeyoğlu¹, Abdurrahman Gürbüz³, Muzaffer Alkan⁴

¹Kafkas Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Kars, hyukse61@gmail.com , hilalmedet@gmail.com

²Kafkas Üniversitesi, Kars MYO, Laboratuvar Teknolojisi Bölümü, Kars, gulkemer@hotmail.com

³Kafkas Üniversitesi, Atatürk Sağlık Hizmetleri MYO, Kars, abahgurbuz@hotmail.com

⁴Kafkas Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, İlköğretim Bölümü, Kars, muzafferalkan61@gmail.com

* İletişimden sorumlu yazar/ Corresponding author

Geliş / Received: 19 Kasım (November) 2016

Kabul / Accepted: 17 Şubat (February) 2017

DOI: 10.18466/cbayarfbe.302658

Özet

Bu çalışmada, beş adet 3-alkil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on bileşiğinin teorik özellikleri B3LYP/6-311G(d,p) ve HF/6-311G(d,p) temel setleri kullanılarak incelenmiştir. İlk olarak, her bir molekül B3LYP/6-311G(d,p) ve HF/6-311G(d,p) temel setleri kullanılarak optimize edilmiştir. Gaussian G09W paket programı kullanılarak GIAO metoduna göre moleküllerin ¹H-NMR ve ¹³C-NMR isotropik kayma değerleri hesaplanmıştır. IR verilerinin belirlenmesinde veda4f programı kullanılmıştır. İncelenen her bir molekülün iki farklı temel set ile IR (infrared) titreşim frekans değerleri gaz fazında hesaplanmış ve uygun uyum faktörleri ile çarpılmıştır. Elde edilen bu değerlere göre moleküllerin infrared spektrumları çizilmiştir. Bileşiklerin bağ uzunlukları, mulliken yükleri, en yüksek dolu moleküler orbital enerjisi (HOMO) ve en düşük boş moleküler orbital enerjisi (LUMO), dipol moment değerleri de hesaplanmıştır.

Anahtar Kelimeler – B3LYP/6-311, HF/6-311, 4,5-Dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on, Gaussian G09W, HOMO-LUMO, Veda4f.

The Investigation of Experimental and Theoretical Properties of Some 3-Alkyl-4-(2-acetoxy-3-methoxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Using B3LYP and HF Basis Sets

Abstract

In this study, theoretical properties of five 3-alkyl-4-(2-aceoxy-3-methoxybenzylidenamino)-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-ones were investigated using B3LYP and HF basis sets. Firstly, each molecule were optimized by using the B3LYP/6-311G(d,p) and HF/6-311G(d,p) basis sets. ¹H-NMR and ¹³C-NMR isotropic shift values of molecules were calculated by the method of GIAO using the program package Gaussian G09W. The veda4f program was used in defining IR data. IR (infrared) vibrational frequency values with two different basis set investigated of each molecule was calculated in gas phase and are multiplied by appropriate adjustment factors. Infrared spectra of molecules according to obtained these values are formed. Also, bond lengths, mulliken charges, the highest occupied molecular orbital (HOMO) energies and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energies, dipole moment values of these compounds were calculated.

Keywords – B3LYP/6-311, HF/6-311, 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one, Gaussian G09W, HOMO-LUMO, Veda4f.

1 Giriş

Hartree-Fock (HF) (Öz Uyumlu Alan Teorisi) atom yörüngelerinde hareket eden elektronların, bu hareketlerinin ayrıştırılması için kullanılan bir yöntemdir [1-3]. DFT Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, atom ve moleküllerin elektron yapılarını ve karşılıklı elektronların etkileşimini inceler [1, 3-5]. 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin spektroskopik (IR, NMR ve UV-vis) ve elektronik özellikleri Hartree-Fock (HF) ve yoğunluk fonksiyon teorisi (B3LYP) yöntemleri kullanılarak araştırılmıştır [6-9]. Çalışma için gerekli olan her bir bileşiğin teorik özellikleri B3LYP/6-311G(d,p) ve HF/6-311G(d,p) temel setleri kullanılarak incelenmiştir. İlk olarak teorik çalışmada, her bir molekül B3LYP/6-311G(d,p) ve HF/6-311G(d,p) temel setleri ile bilgisayar ortamında optimize edilmiştir [10]. Optimize gausview molekül şekilleri elde edildikten sonra, Gaussian G09W paket programı kullanılarak GIAO metoduna [11] göre her bir molekülün ¹³C ve ¹H-NMR isotropik kayma değerleri hesaplanmıştır. Elde edilen bu değerler ile deneysel değerler [12] mukayese edilerek aradaki fark değerleri bulunmuştur. Teorik olarak bulunan bu 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. Bundan başka incelenen her bir molekülün iki farklı set ile IR (infrared) absorpsiyon frekans değerleri gaz fazında hesaplanmış, bulunan değerler B3LYP/6-311G(d,p) için 0.9688 ve HF/6-311G(d,p) için 0.9059 uygun uyum faktörleri ile çarpılmıştır [13]. Teorik olarak elde edilen değerler, deneysel değerler [12] ile karşılaştırılarak infrared spektrumları çizilmiştir. Teorik IR verilerinin tanımlanması için veda4f [14] programı kullanılmıştır. Ayrıca moleküllerin bağ açıları, bağ uzunlukları, mulliken yükleri [15], en yüksek dolu molekül orbital enerjisi (HOMO) ve en düşük boş molekül orbital (LUMO) enerjileri [16] ve dipol moment değerleri hesaplanmıştır.

2 Materyal ve Metot

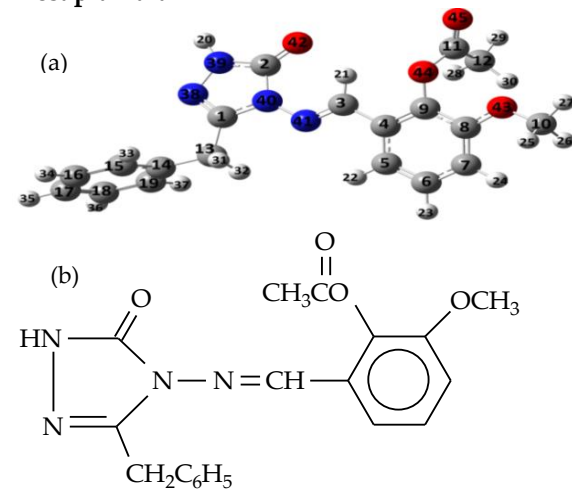
5 adet 4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevinin IR, ¹³C ve ¹H-NMR, UV-vis gibi spektroskopik özelliklerine bakılmış ve yapıları aydınlatılmıştır. ¹³C ve ¹H-NMR spektrumları Bruker 400 MHz spektrometre de, IR spektrumları Alpha-P Bruker

FT-IR Spektrometre de ölçülmüştür. Sonra moleküllerin ayrı ayrı optimize edilmiş geometrik şekilleri belirlenmiştir. 1-5 bileşiklerinin moleküler yapısı Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) yöntemleri ile 6-311G(d,p) temel seti kullanılarak optimize edilmiştir [10]. Elde edilen optimize yapılar kullanılmış ve moleküllerin diğer teorik hesaplamaları yapılmıştır. Bütün teorik hesaplamalar Gaussian 09W paket programında yapılmıştır [11]. Deneysel değerler ile hesaplanan teorik değerler mukayese edilerek uyumlu olduğu görülmüştür.

3 Bulgular

3.1 Teorik Hesaplamalar

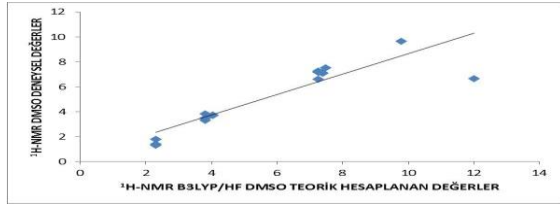
3.1.1 3-Benzil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (1) Bileşiğinin Teorik Hesaplamaları



Şekil 1. 1 Bileşiğinin optimize edilmiş moleküler yapısının gausview görünümü (a) ve kimyasal formülü (b)

Tablo 1. 1 Bileşiğinin deneysel ve teorik ¹³C ve ¹H-NMR (DMSO) kimyasal kayma değerleri (δ /ppm)

No	DFT	HF	No	Deneysel	DFT	HF	Fark DFT	Fark HF
C1	153,51	161,38	H20	12,01	6,65	7,13	5,36	4,88
C2	153,23	159,86	H21	9,79	9,65	10,10	0,14	-0,31
C3	147,32	159,04	H22	7,48	7,54	8,43	-0,06	-0,95
C4	132,14	136,86	H23	7,40	7,08	7,95	0,32	-0,55
C5	118,63	126,47	H24	7,26	6,63	7,46	0,63	-0,20
C6	129,69	138,01	H25	3,81	3,29	3,64	0,52	0,17
C7	116,21	122,77	H26	3,81	3,50	3,98	0,31	-0,17
C8	157,25	159,64	H27	3,81	3,82	4,21	-0,01	-0,40
C9	147,42	149,35	H28	2,30	1,30	1,84	1,00	0,46
C10	54,42	54,65	H29	2,30	1,81	2,10	0,49	0,20
C11	173,46	174,80	H30	2,30	1,40	2,01	0,90	0,29
C12	19,77	25,46	H31	4,05	3,72	4,21	0,33	-0,16
C13	34,83	35,71	H32	4,05	3,75	4,03	0,30	0,02
C14	139,60	144,99	H33	7,36	7,14	7,98	0,22	-0,62
C15	133,99	140,78	H34	7,24	7,25	8,01	-0,01	-0,77
C16	131,34	139,11	H35	7,28	7,17	7,93	0,11	-0,65
C17	130,38	137,65	H36	7,24	7,19	8,00	0,05	-0,76
C18	131,58	139,16	H37	7,36	7,13	7,94	0,23	-0,58
C19	133,79	140,80						

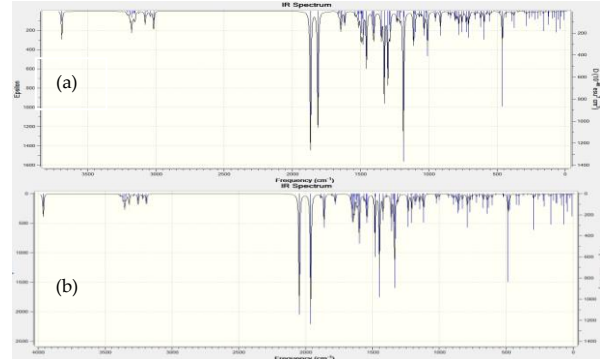


Şekil 2. 1 Bileşiğinin DFT/B3LYP/HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹H-NMR kimyasal kayma değerleri

Tablo 2. 1 Bileşiğinin Teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR Değerleri (cm⁻¹)

Titreşim Türleri	Titreşim Türleri		No	Titreşim Türleri		DFT	HF
	DFT	HF		DFT	HF		
1	τ CCCN(12), τ CNNC(41)	9	7	66	δ NNC(33)	995	1016
2	τ CNNC(16)	15	16	67	v CC(35), δ HCC(23), δ CCC(10)	1013	1034
3	τ CNNC(27), τ NNCC(10)	27	25	68	τ HCCO(48)	1029	1051
4	δ NCC(12), δ CCN(17)	30	31	69	v NN(35), v NC(10)	1055	1057
5	τ CCCN(28)	37	38	70	v OC(32), δ HCC(12)	1061	1064
6	τ COCC(38)	48	48	71	v CC(43), δ HCC(25)	1065	1081
7	τ COCC(14)	66	61	72	v OC(19), v CC(23), δ HCC(71)	1070	1086
8	δ CCN(12), δ CCC(11)	76	70	73	δ HCH(16), τ HCOC(46)	1138	1093
9	τ CNNC(11), τ CCNN(10), τ NNCC(13)	80	78	74	v OC(15), v CC(18), δ OCC(11), δ HCC(36), v OC(15), v CC(18), δ OCC(11), δ HCC(36), v CC(10), δ HCC(46)	1141	1110
10	δ OCC(11)	88	87	75	CC(18), δ OCC(11), δ HCC(36), v CC(10), δ HCC(46)	1141	1164
11	τ NNCC(13)	117	109	76	v CC(23), δ HCC(71)	1154	1165
12	δ CCC(10), δ CNN(15)	119	118	77	τ HCOC(24)	1162	1173
13	τ HCCO(33)	136	131	78	v CC(11), δ HCC(40), τ HCCC(26)	1165	1178
14	τ CNNC(14), τ CCNN(10)	153	150	79	v NN(13), v NC(15), δ HCC(12)	1174	1181
15	δ NCN(11), τ CCCN(12)	176	163	80	v CC(20), δ HCC(14), τ HCCC(12)	1175	1199
16	τ CCCN(18)	192	196	81	v OC(17)	1180	1203
17	τ CNNC(10), τ CCCN(25), τ HCOC(11), τ NNCC(17)	213	201	82	v OC(24)	1187	1209
18	δ CCC(11), τ CCCC(21)	224	228	83	v NN(13), δ NCN(12)	1234	1223
19	δ OCC(31), δ COC(20)	236	238	84	v CC(15), δ HCC(13), τ HCCC(10)	1239	1229
20	τ HCOC(38), τ NNCC(10)	256	255	85	v OC(17)	1250	1254
21	τ CNNC(32), τ NNCC(15), τ HNNC(23)	272	266	86	v NC(16), δ HCN(16), τ HCCC(25)	1276	1280
22	δ NCC(15)	284	283	87	v CC(56), δ HCC(10)	1292	1303
23	τ CCCN(15), τ CCNN(17)	299	306	88	v CC(27)	1296	1331
24	δ CCC(31), τ HCCC(13)	322	326	89	δ HCC(72)	1315	1333
25	δ OCC(10), δ COC(22)	333	334	90	δ HNN(22)	1348	1386
26	v OC(11), δ COC(11)	361	366	91	δ HCH(59)	1354	1390
27	δ CCO(24), τ CCNN(15)	376	382	92	δ HCN(14), δ HNN(50)	1360	1404
28	τ HCCC(17), τ CCCC(80)	399	407	93	v NC(18), δ HCN(18)	1401	1438
29	δ CCO(13), τ NCN(12), τ OCN(14)	418	426	94	δ HCC(14), δ HCH(25)	1425	1442
30	τ HNNC(52)	443	437	95	δ HCH(87), τ HCCO(14)	1432	1449
31	δ CCI(28)	459	467	96	δ HCH(87), τ HCCO(14)	1432	1452
32	τ CCCC(22), τ HCCC(10)	463	469	97	v CC(12), δ HCC(27)	1436	1454
33	δ OCN(14), δ CCC(14)	520	523	98	v CC(16), δ HCC(13), δ HCH(19)	1439	1458
34	τ CCCN(17)	533	546	99	δ HCH(30)	1444	1472

35	δ CCC(10)	543	546	100	δ HCH(41), τ HCOC(16)	1455	1475
36	τ HCCO(10)	554	570	101	δ HCC(20), δ HCH(10)	1457	1481
37	δ CCC(22), δ OCC(10)	571	579	102	δ HCH(40), τ HCOC(11)	1465	1486
39	δ COC(11)	597	605	104	v CC(28), v NC(11)	1554	1597
40	δ CCC(52)	614	612	105	v CC(30), δ CCC(12)	1572	1600
41	δ OCN(16), δ OCC(10)	620	631	106	v CC(27), v NC(11)	1577	1618
42	τ HNNC(16), τ NNCC(12)	636	650	107	v NC(41)	1583	1621
43	τ CCCC(21)	672	678	108	v CC(45), δ HCC(18)	1592	1675
44	τ CCCC(24), τ HCCC(34)	683	694	109	v NC(59)	1598	1697
45	τ HCCC(13)	698	712	110	v NC(11), v OC(41)	1743	1764
47	τ HCCC(25)	728	766	111	v CH(67)	2902	2869
48	v OC(11), v CC(15), τ HCCC(24)	750	769	112	v CH(98)	2925	2894
49	δ CNN(15)	763	775	113	v CH(59)	2946	2895
50	δ CNN(15)	775	787	114	v CH(98)	2950	2922
51	δ CNN(15)	776	805	115	v CH(53)	2961	2926
52	τ HCCC(16)	807	817	116	v CH(24)	3007	2956
53	τ HCCC(99)	815	837	117	v CH(46)	3032	2984
54	v NN(14), δ CCN(14), δ NCN(15)	822	849	118	v CH(82)	3035	2986
55	τ HCCC(69)	854	900	119	v CH(89)	3038	2992
56	v OC(15), δ CCC(11)	880	906	120	v CH(89)	3039	2996
57	τ HCCC(29)	887	916	121	v CH(49)	3047	3005
58	δ HCC(30), τ HCCC(32)	900	920	122	v CH(91)	3056	3015
59	v CC(18), v OC(22), δ CCC(11)	915	927	123	v CH(51)	3057	3015
60	τ HCCC(84), τ CCCC(12)	919	974	124	v CH(50)	3067	3026
61	τ HCCC(65)	928	977	125	v CH(26)	3076	3045
62	τ HCCC(36), τ CCCC(26)	948	982	126	v CH(51)	3084	3056
63	v CC(16), τ HCCO(15)	971	995	127	v CH(49)	3092	3073
64	τ HCNN(65)	980	1005	128	v NH(100)	3549	3562
65	v CC(32), δ CCC(43), τ HCNN(21)	982	1009				



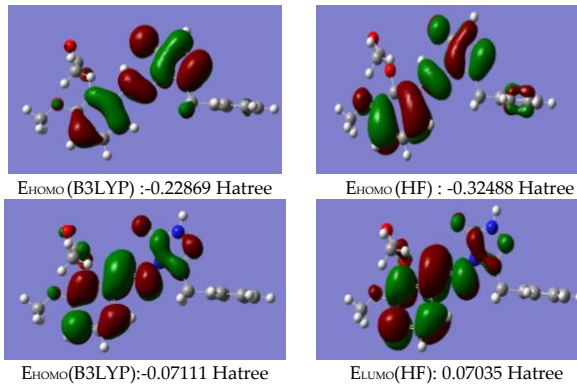
Şekil 3. 1 Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP (a) ve HF 6-311G(d,p) (b) IR spektrumları

Tablo 3. 1 Bileşiğinin teorik bağ uzunlukları

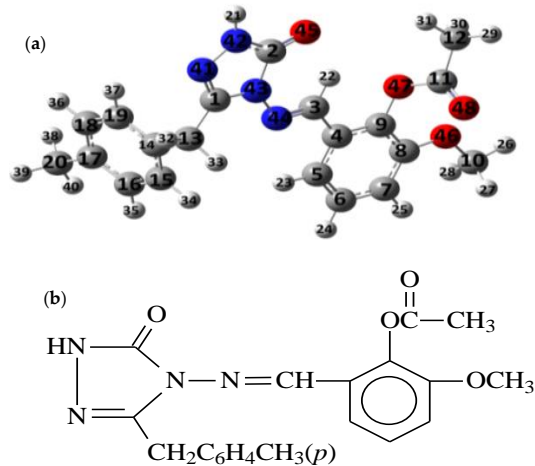
No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF	No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF
1	C(1)-N(38)	1.29	1.27	24	C(3)-H(21)	1.08	1.07
2	C(1)-N(40)	1.39	1.38	25	C(3)-C(4)	1.47	1.48
3	C(1)-C(13)	1.50	1.50	26	C(4)-C(5)	1.41	1.40
4	C(13)-H(31)	1.09	1.08	27	C(4)-C(9)	1.40	1.38
5	C(13)-H(32)	1.09	1.08	28	C(5)-H(22)	1.08	1.07
6	N(39)-C(2)	1.37	1.35	29	C(5)-C(6)	1.38	1.37
7	C(2)-O(42)	1.21	1.19	30	C(6)-H(23)	1.08	1.07
8	N(40)-C(2)	1.42	1.39	31	C(6)-C(7)	1.40	1.39
9	N(39)-H(20)	1.00	1.07	32	C(7)-H(24)	1.08	1.07
10	N(38)-N(39)	1.38	1.37	33	C(7)-C(8)	1.39	1.38
11	N(40)-N(41)	1.37	1.36	34	C(8)-O(43)	1.36	1.34
12	N(41)-C(3)	1.28	1.26	35	C(8)-C(9)	1.40	1.40
13	C(13)-C(14)	1.51	1.51	36	C(9)-O(44)	1.38	1.36
14	C(14)-C(15)	1.40	1.39	37	O(43)-C(10)	1.42	1.40
15	C(15)-H(33)	1.08	1.07	38	C(10)-H(25)	1.09	1.08
16	C(15)-C(16)	1.39	1.38	39	C(10)-H(26)	1.09	1.08
17	C(16)-H(34)	1.08	1.07	40	C(10)-H(27)	1.09	1.08
18	C(16)-H(17)	1.39	1.38	41	O(44)-C(11)	1.39	1.36
19	C(17)-H(35)	1.08	1.07	42	C(11)-O(45)	1.19	1.17
20	C(17)-C(18)	1.39	1.38	43	C(11)-C(12)	1.51	1.51
21	C(18)-H(36)	1.08	1.07	44	C(11)-H(28)	1.09	1.08
22	C(18)-C(19)	1.39	1.38	45	C(11)-H(29)	1.09	1.08
23	C(19)-H(37)	1.08	1.07				

Tablo 4. 1 Bileşiğinin atomlarının DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan mulliken yük değerleri

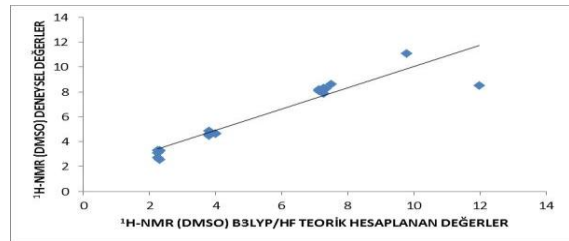
	DFT	HF	DFT	HF	DFT	HF		
C1	0,450	0,473	C16	-0,193	-0,078	H31	0,248	0,143
C2	0,581	0,719	C17	-0,188	-0,105	H32	0,248	0,143
C3	-0,037	0,269	C18	-0,192	-0,078	H33	0,188	0,087
C4	-0,034	-0,165	C19	-0,191	-0,080	H34	0,193	0,099
C5	-0,182	-0,062	H20	0,373	0,262	H35	0,192	0,098
C6	-0,188	-0,070	H21	0,278	0,181	H36	0,192	0,098
C7	-0,258	-0,128	H22	0,213	0,114	H37	0,187	0,085
C8	0,268	0,318	H23	0,199	0,105	N38	-0,185	-0,265
C9	0,110	0,151	H24	0,219	0,117	N39	-0,498	-0,378
C10	-0,464	-0,030	H25	0,240	0,097	N40	-0,372	-0,481
C11	0,414	0,490	H26	0,219	0,090	N41	-0,204	-0,267
C12	-0,758	-0,317	H27	0,211	0,125	O42	-0,381	-0,521
C13	-0,589	-0,136	H28	0,254	0,138	O43	-0,344	-0,483
C14	0,081	-0,095	H29	0,247	0,135	O44	-0,321	-0,547
C15	-0,184	-0,077	H30	0,242	0,127	O45	-0,282	-0,394

**Şekil 4. 1** Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

3.1.2 3-p-Metilbenzil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (2) Bileşiğinin Teorik Hesaplamaları

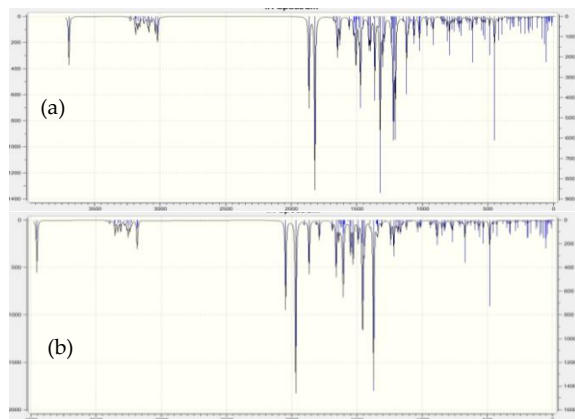
**Şekil 5. 2** Bileşiğinin optimize edilmiş moleküler yapısının Gaussview görünümü (a) ve kimyasal formülü (b)**Tablo 5. 2** Bileşiğinin deneysel ve teorik ¹³C ve ¹H-NMR (DMSO) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	DFT	HF	No	Deneysel	DFT	HF	Fark DFT	Fark HF
C1	152,43	147,26	H21	11,99	8,58	7,78	3,41	4,37
C2	152,81	146,56	H22	9,79	11,18	10,34	-1,39	11,73
C3	150,06	145,28	H23	7,49	8,70	8,32	-1,21	9,53
C4	133,06	124,77	H24	7,34	8,33	8,11	-0,99	9,10
C5	119,69	113,04	H25	7,28	7,95	7,65	-0,67	8,32
C6	130,35	124,38	H26	3,81	4,94	4,34	-1,13	5,47
C7	118,43	110,17	H27	3,81	4,53	3,73	-0,72	4,45
C8	155,30	145,49	H28	3,81	4,65	3,98	-0,84	4,82
C9	145,93	134,10	H29	2,31	2,60	2,75	-0,29	3,04
C10	61,32	46,07	H30	2,31	3,30	2,18	-0,99	3,17
C11	171,53	161,86	H31	2,31	3,35	2,79	-1,04	3,83
C12	28,48	18,06	H32	3,99	4,73	4,09	-0,74	4,83
C13	41,94	27,26	H33	3,99	4,73	4,12	-0,74	4,86
C14	137,55	128,10	H34	7,26	8,38	8,21	-1,12	9,33
C15	132,30	125,98	H35	7,12	8,17	7,92	-1,05	8,97
C16	132,42	124,82	H36	7,12	8,23	7,96	-1,11	9,07
C17	141,33	134,04	H37	7,26	8,35	8,06	-1,09	9,15
C18	132,35	125,28	H38	2,25	2,77	2,32	-0,52	2,84
C19	130,74	124,85	H39	2,25	3,36	2,71	-1,11	3,82
C20	29,77	16,97	H40	2,25	3,13	2,76	-0,88	3,64

**Şekil 6. 2** Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹H-NMR kimyasal kayma değerleri**Tablo 6. 2** Bileşiğinin Teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR Değerleri (cm⁻¹)

	Titreşim	DFT	HF	Titreşim	DFT	HF	
1	τ CNNC(24), τ CCN(12), τ CCN(12)	7	8	70	δ NNC(32)	1029	1056
2	τ CNNC(27)	13	13	71	δ HCH(16), τ HCCC(33)	1032	1057
3	τ HCCC(41), τ COCC(14)	27	23	72	δ HCH(11), τ HCCO(54)	1034	1063
4	τ HCCC(27), τ COCC(27)	28	28	73	v NC(11), v NN(35)	1061	1075
5	τ CCCC(45)	35	34	74	v CC(16), v OC(11), δ HCC(19)	1072	1079
6	τ CCN(10), τ CCCC(19), τ COCC(16)	38	36	75	v CC(10), v OC(45)	1085	1088
7	τ CCCC(28)	49	47	76	v CC(19), δ HCC(42)	1110	1103
8	τ COCC(33), τ CCOC(31)	53	51	77	δ HCH(25), τ HCOC(29)	1141	1124
9	δ CCN(20), τ CCOC(25)	66	66	78	δ HCC(41)	1163	1164
10	τ COCC(37)	83	81	79	v OC(24), τ HCOC(17)	1167	1164
11	δ OCC(12), τ OCC(12)	86	89	80	δ HCC(15)	1175	1179
12	τ HCCO(48)	106	110	81	δ HCC(36), τ HCCN(10)	1177	1183
13	τ HCCO(14)	110	114	82	v CC(19), δ HCC(13)	1182	1187
14	τ CNNC(11), τ COCC(12)	120	118	83	τ HCOC(10)	1183	1203
16	τ CCCC(13)	172	172	85	v CC(17)	1197	1216
18	δ NCN(10)	189	189	87	δ HCC(14)	1248	1223
19	τ HCOC(14), τ CCCC(30), τ NNCC(15)	210	205	88	δ HCC(18)	1262	1243
20	δ OCC(31), δ COC(19)	240	242	89	v CC(25), v OC(15)	1280	1269
21	τ HCOC(34), τ NNCC(11)	253	253	90	v CC(15), δ HCC(14), τ HCCN(24)	1288	1307
22	δ CCCC(39)	258	258	91	v CC(33), δ HCC(33)	1304	1319
23	τ CCCC(30)	291	293	92	v CC(16), δ HCN(16)	1320	1322
24	τ HNCC(10)	297	301	93	v CC(20), δ HCC(10), τ HCCN(21)	1326	1350
25	τ NNCC(12)	306	310	94	v NC(14), δ	1352	1385

				HNN(52)	
26	v OC(10), δ OCC(10), δ CCO(27)	319	319	95	δ HNN(14), δ HCN(16), δ HCH(30)
27	δ NCC(18), τ CCCC(12)	332	333	96	δ HCN(11), δ HCH(43)
28	δ OCC(13), δ COC(32)	343	346	97	δ HCH(89)
29	δ CCC(35)	366	366	98	v CC(20), δ HCC(24)
30	τ CCNN(23), τ OCCC(27)	380	389	99	v NC(19)
31	τ CCCC(57)	406	413	100	δ HCH(84)
32	δ OCN(17), δ NCN(16)	407	415	101	δ HCH(29)
33	τ HNNC(41)	435	438	102	δ HCH(53), τ HCCO(18)
34	τ HNNC(11), τ CCCC(29)	473	490	103	δ HCH(38), τ HCCO(25)
35	δ CCC(14), δ OCC(28)	504	509	104	δ HCH(48), τ HCCC(19)
36	τ CCNN(10), τ OCCC(12)	514	518	105	δ HCH(71), τ HCOC(14)
37	CC(13), τ CCCC(16)	519	527	106	v CC(14), δ HCH(15)
38	δ OCN(12), δ CCC(18)	531	540	107	δ HCH(40), τ HCCO(17)
39	δ CCC(14)	566	571	108	δ HCH(56), τ HCOC(11)
40	δ OCN(12), τ HCCO(12), τ ONNC(23)	571	589	109	δ HCC(20)
41	τ CCCC(29), τ OCCC(20)	586	601	110	δ HCC(46)
42	δ NCN(10)	600	610	111	v NC(10), v CC(31)
44	δ CCC(11)	637	640	113	v NC(43)
46	τ CCCC(11), τ NCNC(13)	681	696	115	v NC(12), v CC(32)
47	τ CCCC(13)	695	707	116	v NC(36), v CC(17)
48	τ ONNC(32)	700	725	117	v OC(39), v NC(12)
49	v CC(10), τ HCCC(14)	710	748	118	v OC(46)
51	τ HCCC(10)	751	770	120	v CH(78)
52	τ HCCC(43)	768	800	121	v CH(58)
53	δ CNN(16), τ HCCC(21)	787	806	122	v CH(85)
54	v OC(24)	807	818	123	v CH(52)
55	τ HCCC(13)	812	827	124	v CH(67)
56	v NN(11), δ NCN(21), δ CCN(17)	824	839	125	v CH(97)
57	v CC(14), τ HCCC(11)	828	849	126	v CH(73)
58	τ HCCC(60)	833	864	127	v CH(91)
59	τ HCCC(52)	862	913	128	v CH(48)
60	v OC(17), v CC(21)	889	918	129	v CH(76)
61	δ HCC(10), τ HCCN(29)	902	920	130	v CH(73)
62	τ HCCC(17), τ CCCC(10)	933	938	131	v CH(86)
63	v CC(15), v OC(19)	934	978	132	v CH(87)
64	τ HCCC(50)	941	986	133	v CH(87)
65	τ HCCC(69)	946	999	134	v CH(49)
66	δ HCH(14), τ HCCC(41)	982	1001	135	v CH(26)
67	v CC(10), τ HCCO(36)	989	1012	136	v CH(52)
68	τ HCNN(82)	994	1016	137	v CH(58)
69	δ HCC(11), δ CCC(44)	1008	1043	138	v NH(100)



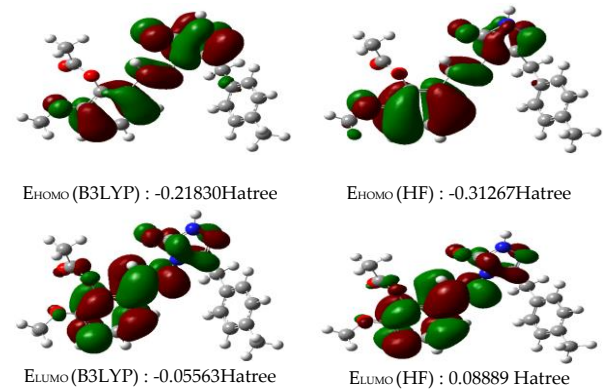
Şekil 7. 2 Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP (a) ve HF 6-311G(d,p) (b) IR spektrumları

Tablo 7. 2 Bileşiğinin teorik bağ uzunlukları

No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF	No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF
1	C(1)-N(41)	1.301	1.269	26	C(8)-C(9)	1.407	1.397
2	C(1)-N(43)	1.387	1.378	27	C(9)-O(47)	1.390	1.373
3	C(1)-H(13)	1.494	1.495	28	O(47)-C(11)	1.381	1.348
4	N(41)-N(42)	1.381	1.370	29	C(11)-O(48)	1.202	1.181
5	N(42)-H(21)	1.006	0.990	30	C(11)-C(12)	1.505	1.499
6	N(42)-C(2)	1.370	1.346	31	C(12)-H(29)	1.089	1.079
7	C(2)-O(45)	1.223	1.202	32	C(12)-H(30)	1.093	1.083
8	C(2)-N(43)	1.419	1.387	33	C(12)-H(31)	1.094	1.084
9	N(43)-N(44)	1.373	1.366	34	C(13)-H(32)	1.095	1.084
10	N(43)-C(3)	1.289	1.260	35	C(13)-H(33)	1.093	1.082
11	C(3)-H(22)	1.084	1.071	36	C(13)-C(14)	1.522	1.519
12	C(3)-C(4)	1.464	1.477	37	C(13)-C(15)	1.396	1.384
13	C(4)-C(5)	1.408	1.398	38	C(15)-H(34)	1.087	1.076
14	C(4)-C(9)	1.399	1.379	39	C(15)-C(16)	1.396	1.388
15	C(5)-H(23)	1.083	1.072	40	C(16)-H(35)	1.087	1.076
16	C(5)-C(6)	1.384	1.372	41	C(16)-C(17)	1.398	1.385
17	C(6)-H(24)	1.085	1.075	42	C(17)-C(20)	1.510	1.510
18	C(6)-C(7)	1.401	1.393	43	C(20)-H(38)	1.094	1.085
19	C(7)-H(25)	1.083	1.072	44	C(20)-H(39)	1.097	1.083
20	C(7)-C(8)	1.396	1.380	45	C(20)-H(40)	1.093	1.086
21	C(8)-O(46)	1.359	1.343	46	C(17)-C(18)	1.402	1.392
22	O(46)-C(10)	1.420	1.401	47	C(18)-H(36)	1.087	1.077
23	C(10)-H(26)	1.090	1.079	48	C(18)-C(19)	1.392	1.380
24	C(10)-H(27)	1.096	1.084	49	C(19)-H(37)	1.087	1.076
25	C(10)-H(28)	1.097	1.085	50	C(14)-C(19)	1.400	1.391

Tablo 8. 2 Bileşiğinin atomlarının DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan mulliken yük değerleri

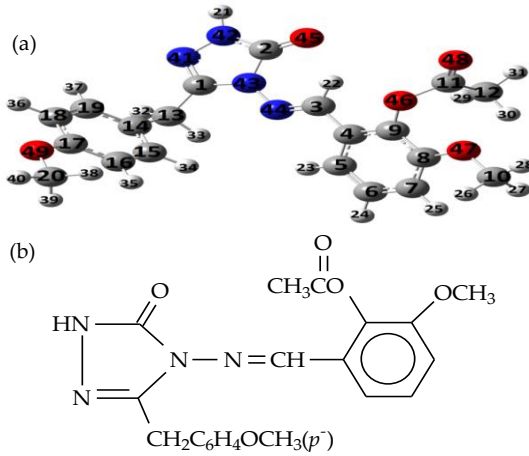
	DFT	HF		DFT	HF		DFT	HF
C1	0.544	0.620	C17	0.125	-0.007	H33	0.131	0.165
C2	0.819	1.055	C18	-0.117	-0.151	H34	0.081	0.146
C3	0.126	0.186	C19	-0.116	-0.137	H35	0.076	0.144
C4	0.071	-0.089	C20	-0.381	-0.342	H36	0.111	0.147
C5	-0.120	-0.137	H21	0.288	0.339	H37	0.096	0.167
C6	-0.092	-0.144	H22	0.166	0.240	H38	0.118	0.134
C7	-0.138	-0.204	H23	0.108	0.184	H39	0.125	0.122
C8	0.365	0.423	H24	0.090	0.157	H40	0.111	0.128
C9	0.250	0.347	H25	0.093	0.163	N41	-0.343	-0.353
C10	-0.081	-0.031	H26	0.113	0.144	N42	-0.436	-0.567
C11	0.592	0.750	H27	0.121	0.123	N43	-0.421	-0.633
C12	-0.394	-0.417	H28	0.129	0.114	N44	-0.321	-0.311
C13	-0.288	-0.260	H29	0.145	0.157	O45	-0.543	-0.659
C14	0.122	-0.027	H30	0.141	0.158	O46	-0.522	-0.667
C15	-0.123	-0.147	H31	0.164	0.172	O47	-0.534	-0.690
C16	-0.121	-0.161	H32	0.141	0.176	O48	-0.442	-0.540



Şekil 8. 2 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

3.1.3 3-p-Metoksibenzil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-

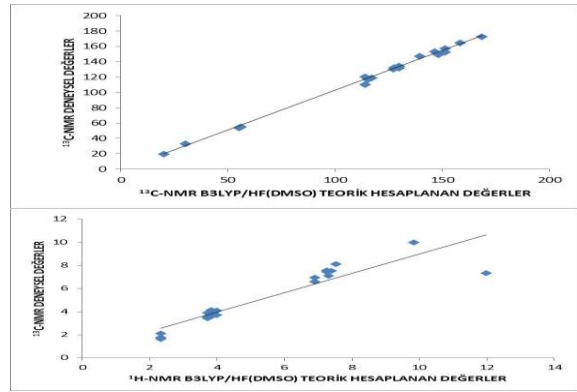
triazol-5-on (3) Bileşiğinin Teorik Hesaplamaları



Şekil 9. 3 Bileşiğinin optimize edilmiş moleküler yapısının Gaussview görünümü (a) ve kimyasal formülü (b)

Tablo 9. 3 Bileşiğinin deneysel ve teorik ¹³C ve ¹H-NMR (DMSO) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

	Deney.	DFT DMSO	HF DMSO	Fark DFT	Fark HF
C1	146,42	153,63	143,81	-7,21	2,61
C2	151,39	153,00	142,79	-1,61	8,6
C3	148,11	149,80	140,71	-1,69	7,4
C4	129,84	132,42	119,33	-2,58	10,51
C5	117,08	119,73	107,99	-2,65	9,09
C6	126,96	130,63	120,58	-3,67	6,38
C7	115,26	117,10	104,54	-1,84	10,72
C8	151,30	157,68	142,77	-6,38	8,53
C9	139,31	147,68	130,82	-8,37	8,49
C10	56,11	55,37	36,90	0,74	19,21
C11	168,38	173,33	158,33	-4,95	10,05
C12	20,06	20,39	17,50	-0,33	2,56
C13	30,23	33,70	30,13	-3,47	0,1
C14	127,44	132,74	123,26	-5,3	4,18
C15	129,76	135,13	125,11	-5,37	4,65
C16	113,86	110,85	114,00	3,01	-0,14
C17	158,09	164,77	151,03	-6,68	7,06
C18	113,86	120,74	114,58	-6,88	-0,72
C19	129,76	134,16	124,12	-4,4	5,64
C20	54,99	54,45	45,43	0,54	9,56
H21	11,99	7,35	7,34	4,64	4,65
H22	9,82	9,99	10,06	-0,17	-0,24
H23	7,53	8,12	8,37	-0,59	-0,84
H24	7,38	7,53	8,01	-0,15	-0,63
H25	7,30	7,09	7,41	0,21	-0,11
H26	3,83	3,61	3,82	0,22	0,1
H27	3,83	3,84	3,55	-0,01	0,28
H28	3,83	4,15	4,13	-0,32	-0,3
H29	2,33	1,76	2,62	0,57	-0,29
H30	2,33	2,12	2,07	0,21	0,26
H31	2,33	1,64	2,69	0,69	-0,36
H32	3,99	3,70	4,00	0,29	-0,01
H33	3,99	4,09	4,17	-0,1	-0,18
H34	7,25	7,58	8,22	-0,33	-0,97
H35	6,90	6,59	7,65	0,31	-0,75
H36	6,90	6,95	7,63	-0,05	-0,73
H37	7,25	7,47	8,08	-0,22	-0,83
H38	3,72	3,45	3,46	0,27	0,26
H39	3,72	3,54	4,00	0,18	-0,28
H40	3,72	3,92	3,50	-0,2	0,22

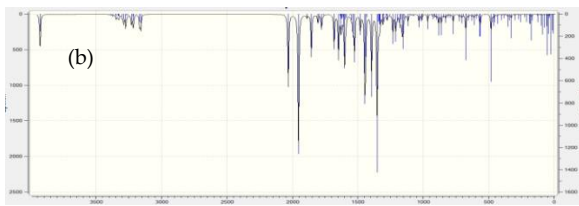
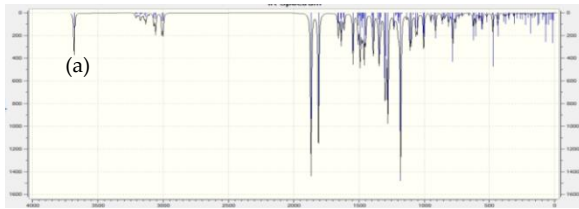


Şekil 10. 3 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³C- ve ¹H-NMR kimyasal kayma değerleri

Tablo 10. 3 Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR değerleri (cm⁻¹)

	Titreşim	DFT	HF	Titreşim	DFT	HF	
1	τ CNNC(35), τ CCNC(25), τ CNNC(17), τ CCNC(14), τ CCNC(15), τ CCCC(11), τ CCCC(74)	10	4	72	δ HCH(13), τ HCCO(43), τ ONNC(10)	1029	1053
2	τ COCC(13), τ CCOC(17)	14	11	73	v CC(13), v OC(71)	1031	1060
3	τ CCCC(12), τ CCNC(14), τ COCC(12), δ CCC(15), τ NNCC(12), τ CCCC(13)	22	22	74	v NC(12), v NN(35)	1051	1061
4	τ COCC(13), τ CCOC(17), δ CCN(13), τ CCOC(33)	34	29	75	v OC(31), δ HCC(13)	1065	1067
5	τ COCC(43), τ CNNC(11), τ CCNN(11), τ COCC(84), δ OCC(12), τ COCC(28), τ OCC(11)	40	36	76	v CC(17), v OC(20), δ HCC(14)	1074	1085
6	τ CNNC(10), τ NNCC(11), τ COCC(19)	46	37	77	v CC(14), δ HCC(45)	1098	1096
7	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	63	47	78	δ HCH(25), τ HCOC(25)	1135	1116
8	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	81	65	80	v OC(15), v CC(14)	1144	1156
9	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	85	81	81	δ HCC(48)	1157	1159
10	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	91	88	82	v CC(15), δ HCC(40)	1159	1161
11	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	117	95	83	δ HCC(20)	1165	1178
12	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	125	110	84	δ HCH(13), τ HCOC(22)	1168	1181
13	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	143	116	85	δ HCC(10)	1169	1187
14	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	152	150	86	v CC(19)	1176	1206
15	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	164	156	87	v NC(21), v NN(18), δ CCNN(10)	1182	1208
16	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	177	163	88	v OC(27)	1193	1212
17	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	195	171	89	v OC(12), δ HCC(11)	1238	1216
18	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	216	190	90	v OC(12), δ HCC(14)	1240	1225
19	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	222	203	91	v CC(24), δ CCC(11)	1252	1262
20	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	231	233	92	τ HCCN(41)	1259	1264
21	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	242	245	93	τ HCCN(13)	1290	1296
22	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	255	251	94	v CC(27), δ HCN(13)	1294	1306
23	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	281	271	95	v CC(20)	1303	1310
24	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	301	296	96	v NC(13), δ HNN(24), δ HCN(24)	1314	1342
25	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	334	319	98	δ HNN(47), δ HCN(15)	1350	1391
26	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	339	333	99	v CC(11), δ HCC(13)	1358	1403
27	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	343	345	100	v NC(12)	1404	1413
28	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	364	364	101	δ HCH(83)	1414	1438
29	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	378	392	102	δ HCH(35), τ HCOC(10)	1419	1444
30	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	412	413	103	δ HCH(30)	1423	1445
31	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	421	418	104	δ HCH(81)	1429	1449
32	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)	426	423	105	δ HCH(50), τ HCOC(13)	1432	1452
33	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)						
34	τ CNNC(10), τ CCNC(10), τ CCCC(12), τ NNCC(16)						

35	τ HNNC(29)	459	436	106	δ HCH(73), τ HCOC(13)	1439	1456
36	δ OCC(31)	465	510	107	δ HCH(30), τ HCOC(16)	1444	1461
37	τ HCCC(11), τ OCC(30)	505	513	108	δ HCH(71), τ HCOC(11)	1445	1468
38	δ CCC(24)	527	529	109	δ HCH(43)	1448	1474
39	τ CCCC(14), τ ONNC(12)	537	539	110	v CC(12), δ HCC(18), δ HCH(16)	1459	1476
40	δ OCC(10), δ COC(14)	540	554	111	δ HCC(36), δ CCC(13)	1460	1481
41	τ HCCO(10), τ ONNC(23)	559	570	112	v NC(12), v CC(23)	1463	1493
42	δ OCN(15)	563	592	113	v CC(23)	1497	1523
43	τ OCC(12), τ CCCC(10)	588	606	114	v NC(17), v CC(26)	1562	1596
46	v OC(12), δ CCC(19)	631	639	117	v OC(41), v NC(11)	1588	1636
48	τ NCNC(17)	684	698	119	v OC(48)	1608	1711
49	τ CCCC(11)	693	718	120	v CH(91)	1754	1770
50	v CC(25)	710	736	121	v CH(51)	1809	1840
51	τ ONNC(35)	722	751	122	v CH(50)	2906	2861
52	τ HCCC(20)	737	764	123	v CH(72)	2915	2870
53	τ HCCC(17)	756	781	124	v CH(98)	2961	2893
54	v CC(10)	760	799	125	v CH(25)	2962	2914
55	τ HCCC(20), τ OCC(32)	780	814	126	v CH(98)	2964	2915
56	δ CNN(16)	789	826	127	v CH(51)	2975	2927
57	τ HCCC(62)	799	830	128	v CH(46)	3010	2954
58	CC(25), δ CCC(11)	817	837	129	v CH(65)	3025	2960
59	NN(11), δ NCN(23), δ CCN(19)	823	849	130	v CH(57)	3035	2967
60	τ HCCC(19), τ OCC(10)	836	875	131	v CH(41)	3045	2981
61	τ HCCC(48)	868	907	132	v CH(38)	3058	2990
62	v OC(15), δ CCC(14)	885	914	133	v CH(49)	3068	3014
63	δ HCC(10), τ HCCN(33)	895	919	134	v CH(25)	3074	3015
64	τ HCCC(19)	918	935	135	v CH(40)	3078	3021
65	v CC(18), v OC(22)	920	973	136	v CH(39)	3090	3032
66	τ HCCC(57)	942	991	137	v CH(52)	3094	3034
67	τ HCCC(57)	948	997	138	v CH(50)	3106	3055
68	τ HCNN(41), τ HCCO(11)	972	1002	139	v CH(62)	3108	3067
69	τ HCNN(40), τ HCCO(12)	974	1011	140	v NH(100)	3113	3081
70	δ HCC(23), δ CCC(30)	996	1034	141		3567	3559
71	δ NNC(29)	1021	1046				



Şekil 11. 3 Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR spektrumları

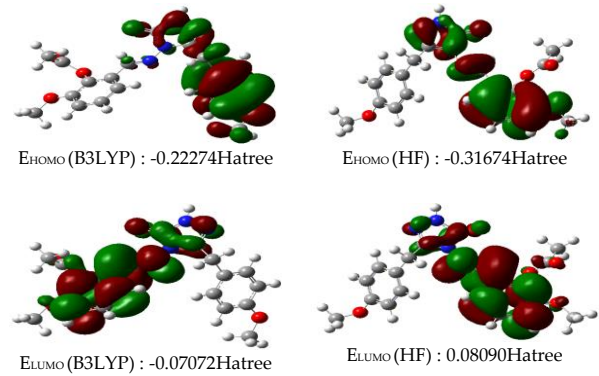
Tablo 11. 3 Bileşiğinin teorik bağ uzunlukları

No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF	No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF
1	C(1)-N(41)	1.296	1.267	26	C(8)-C(9)	1.409	1.397
2	C(1)-N(43)	1.389	1.378	27	C(9)-O(47)	1.380	1.371
3	C(1)-C(13)	1.494	1.495	28	O(47)-C(11)	1.392	1.349
4	N(41)-N(42)	1.380	1.368	29	C(11)-O(48)	1.192	1.174
5	N(42)-H(21)	1.005	0.990	30	C(11)-C(12)	1.508	1.499
6	N(42)-C(2)	1.368	1.346	31	C(12)-H(29)	1.091	1.084
7	C(2)-O(45)	1.214	1.196	32	C(12)-H(30)	1.091	1.083
8	C(2)-N(43)	1.422	1.389	33	C(12)-H(31)	1.087	1.079
9	N(43)-N(44)	1.368	1.365	34	C(13)-H(32)	1.092	1.083
10	N(44)-C(3)	1.285	1.257	35	C(13)-H(33)	1.091	1.081
11	C(3)-H(22)	1.083	1.071	36	C(13)-C(14)	1.521	1.520
12	C(3)-C(4)	1.466	1.477	37	C(14)-C(15)	1.391	1.385
13	C(4)-C(5)	1.406	1.398	38	C(15)-H(34)	1.084	1.075

14	C(4)-C(9)	1.399	1.378	39	C(15)-C(16)	1.396	1.385
15	C(5)-H(23)	1.081	1.071	40	C(16)-H(35)	1.081	1.075
16	C(5)-C(6)	1.381	1.369	41	C(16)-C(17)	1.395	1.381
17	C(6)-H(24)	1.083	1.074	42	C(17)-O(49)	1.363	1.360
18	C(6)-C(7)	1.398	1.393	43	C(20)-O(49)	1.420	1.405
19	C(7)-H(25)	1.081	1.072	44	C(20)-H(38)	1.095	1.087
20	C(7)-C(8)	1.392	1.378	45	C(20)-H(39)	1.095	1.080
21	C(8)-O(46)	1.360	1.341	46	C(20)-H(40)	1.088	1.086
22	O(46)-C(10)	1.423	1.400	47	C(17)-C(18)	1.401	1.385
23	C(10)-H(26)	1.094	1.085	48	C(18)-H(36)	1.083	1.075
24	C(10)-H(27)	1.095	1.085	49	C(18)-C(19)	1.384	1.381
25	C(10)-H(28)	1.088	1.079	50	C(19)-H(37)	1.085	1.076

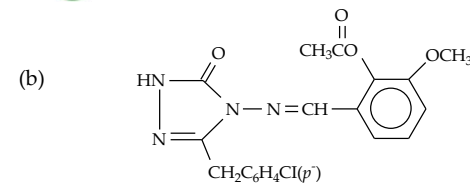
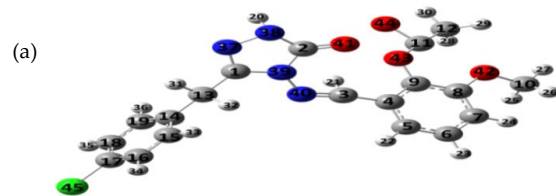
Tablo 12. 3 Bileşiğinin atomlarının DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan mulliken yük değerler

	DFT	HF		DFT	HF		DFT	HF
C1	0.385	0.482	C17	0.176	0.208	H33	0.142	0.138
C2	0.526	0.726	C18	-0.088	-0.082	H34	0.092	0.093
C3	0.161	0.242	C19	-0.038	-0.042	H35	0.102	0.103
C4	-0.147	-0.166	C20	-0.132	0.004	H36	0.103	0.105
C5	-0.028	-0.052	H21	0.251	0.260	H37	0.095	0.109
C6	-0.093	-0.079	H22	0.155	0.182	H38	0.112	0.076
C7	-0.104	-0.128	H23	0.105	0.116	H39	0.109	0.097
C8	0.213	0.307	H24	0.098	0.099	H40	0.129	0.077
C9	0.098	0.245	H25	0.112	0.113	N41	-0.220	-0.281
C10	-0.134	-0.028	H26	0.119	0.088	N42	-0.310	-0.379
C11	0.335	0.469	H27	0.113	0.098	N43	-0.382	-0.494
C12	-0.361	-0.250	H28	0.140	0.115	N44	-0.207	-0.260
C13	-0.198	-0.114	H29	0.140	0.123	O45	-0.381	-0.531
C14	-0.125	0.151	H30	0.145	0.125	O46	-0.356	-0.473
C15	-0.057	-0.067	H31	0.146	0.140	O47	-0.347	-0.501
C16	-0.138	-0.088	H32	0.148	0.150			



Şekil 12. 3 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

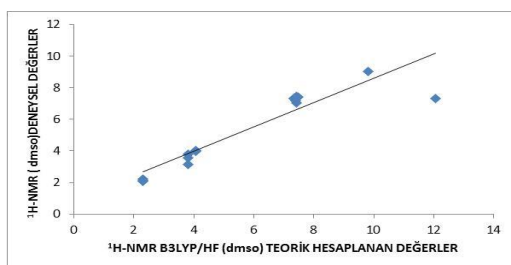
3.1.4 3-p-Klorobenzil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (4) Bileşiğinin Teorik Hesaplamaları



Şekil 13. 4 Bileşiğinin optimize edilmiş moleküler yapısının gaussview görünümü (a) ve kimyasal formülü (b)

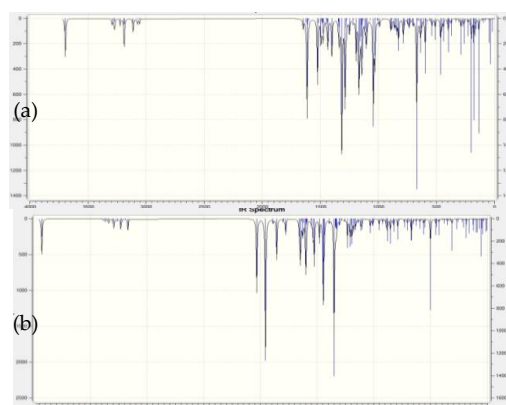
Tablo 13. 4 Bileşiğinin deneysel ve teorik ^{13}C ve ^1H -NMR (DMSO) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	DFT	HF	No	Deneysel	DFT	HF	Fark DFT	Fark HF
C1	150,83	160,92	H20	12,05	6,27	7,33	5,78	4,72
C2	145,16	160,16	H21	9,80	9,26	9,03	0,54	0,77
C3	142,14	158,54	H22	7,43	7,42	7,44	0,01	-0,01
C4	130,02	136,54	H23	7,41	7,32	7,02	0,09	0,39
C5	121,32	125,43	H24	7,48	8,95	7,41	-1,47	0,07
C6	132,16	138,08	H25	3,82	3,13	3,80	0,69	0,02
C7	118,11	122,16	H26	3,82	3,76	3,55	0,06	0,27
C8	154,32	160,29	H27	3,82	3,47	3,13	0,35	0,69
C9	140,56	148,54	H28	2,31	2,11	2,21	0,2	0,10
C10	52,78	54,45	H29	2,31	2,02	2,07	0,29	0,24
C11	164,16	175,79	H30	2,31	2,10	2,13	0,21	0,18
C12	24,65	26,23	H31	4,06	4,12	3,97	-0,06	0,09
C13	34,07	34,83	H32	4,06	3,98	4,01	0,08	0,05
C14	139,18	146,28	H33	7,40	7,16	7,18	0,22	0,22
C15	140,54	141,51	H34	7,34	7,21	7,30	0,13	0,04
C16	138,41	139,41	H35	7,34	7,22	7,30	0,12	0,04
C17	140,87	145,00	H36	7,40	7,01	7,38	0,39	0,02
C18	135,31	139,66						
C19	130,53	141,02						

**Şekil 14. 4** Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ^1H -NMR kimyasal kayma değerleri**Tablo 14. 4** Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR değerleri (cm^{-1})

	Titreşim	DFT	HF	Titreşim	DFT	HF
1	τ CCCC(29)	7	5	64	ν CC(12), δ NNC(23)	1133 1051
2	τ CCCC(53)	15	10	65	τ HCCO(53)	1137 1061
3	τ CCCC(13), τ CCNN(12), τ NCCN(11)	31	26	66	ν CC(38), δ HCC(10)	1137 1062
4	τ CCCC(22), τ COCC(14), τ CCCC(14)	37	31	67	ν CC(17), δ HCC(17)	1150 1067
5	τ COCC(27), τ CCOC(10)	55	37	68	ν CC(46), δ CLC(18)	1160 1081
6	δ CCC(16), τ COCC(18), τ CCCC(15)	58	43	69	ν NN(23)	1085 1086
7	τ COCC(20), τ CCOC(33)	64	50	70	ν CC(13), ν OC(35)	1180 1096
8	δ CNN(15), δ CCN(18), τ CCOC(27)	83	65	71	ν CC(25), ν OC(17)	1204 1117
9	τ COCC(26)	95	81	72	ν CC(11), δ HCC(17)	1217 1136
10	δ OCC(12)	113	88	73	δ HCH(23), τ HCOC(63)	1249 1161
11	τ CCCC(11), τ CCCC(11)	125	99	74	ν CC(23), δ HCC(54)	1258 1170
12	τ HCCO(25), τ CCCC(13)	131	111	75	ν NC(16), ν CC(13)	1263 1178
13	τ HCCO(39), τ CCCC(13)	136	115	76	δ HCC(17), τ HCOC(28)	1274 1182
14	δ CCN(11), τ CCCC(10)	171	148	77	ν CC(10), δ HCC(12), τ HCOC(14)	1290 1206
15	τ CCCC(17)	189	166	78	δ HCC(28)	1295 1207
16	δ CCCC(11)	211	189	79	δ HCC(12)	1298 1211
17	τ HCOC(15), τ CCCC(23), τ NCCN(17)	227	203	80	ν NC(14), ν OC(11)	1314 1215
18	δ CCCC(22)	262	235	81	ν OC(17), ν CC(10), δ HCH(11), δ OCC(12)	1344 1224
19	δ OCC(21), δ COC(18), δ CCCC(16)	281	245	82	ν CC(15), δ HCC(33)	1366 1262
20	τ HCOC(45)	290	251	83	δ CCCC(10), δ HCC(26), τ HCCC(15)	1396 1302

21	τ HNNC(18), τ NCCN(19), τ CCCC(12)	322	282	84	δ CCCC(10), δ HCC(26)	1400 1307
22	τ CCCC(12), τ CCCC(20)	334	293	85	ν CC(10), ν OC(16), δ HCC(13)	1431 1311
23	δ CC(17)	345	307	86	ν NN(11), δ HCN(11), τ HCCC(31)	1454 1342
24	δ CCN(16), δ CCCC(11)	366	324	87	ν NC(11), δ HCN(42)	1483 1382
25	δ OCC(18), δ COC(29)	383	344	88	δ HCH(62)	1496 1391
26	δ CCN(10), δ CCCC(20), τ HCCC(17)	419	362	89	δ HNN(62)	1311 1403
27	τ CCCC(14), τ OCC(19)	436	386	90	ν CC(24), δ HCC(15)	1534 1408
28	δ CCCC(13), τ CCCC(10)	453	407	91	δ HCH(34), τ HCCC(24)	1542 1438
29	δ CCCC(17), δ CCCC(11), δ NNC(11)	449	413	92	δ HCH(33), τ HCCC(24)	1544 1445
30	τ CCCC(70)	454	415	93	δ HCH(78)	1549 1446
31	δ CCCC(10), τ HNNC(43)	508	454	94	ν NC(13), δ HCH(17)	1552 1450
32	τ HCCC(18), τ CCCC(21), τ CCCC(22)	554	500	95	δ HCH(51)	1568 1456
33	δ CCCC(17), δ OCC(10)	565	510	96	δ HCH(48), τ HCOC(20)	1573 1468
34	τ CCCC(15)	578	529	97	δ HCH(41), τ HCOC(16)	1580 1476
35	δ OCC(10), δ CCCC(11)	560	540	98	δ HCC(16), δ HCH(15)	1594 1481
36	δ CCCC(12), τ ONNC(18)	640	590	99	δ HCC(10), δ HCH(13)	1599 1493
37	τ OCC(10)	657	606	100	δ HCC(18), δ CCCC(11)	1607 1501
38	τ CCCC(12)	658	608	101	ν CC(27)	1704 1594
39	δ CCCC(13)	677	626	102	ν CC(31)	1730 1610
40	δ CCCC(39)	681	631	103	ν CC(48), δ HCC(10)	1742 1623
41	ν CC(10), δ CCCC(10)	684	638	104	ν CC(32)	1792 1630
42	ν CC(10)	716	662	105	ν NC(41)	1828 1682
43	τ HCCC(12), τ CCCC(44), τ NCCN(10)	759	703	106	ν NC(46)	1892 1710
44	τ CCCC(12)	802	747	107	ν OC(35), ν NC(12)	1861 1772
45	τ HCCC(20)	812	752	108	ν OC(45)	1897 1841
46	τ ONNC(35)	835	775	109	ν CH(80)	2072 2870
47	τ HCCC(40)	856	799	110	ν CH(88)	3120 2893
48	δ CCCC(21)	861	805	111	ν CH(96)	3130 2919
49	ν NC(10), ν CC(12), δ CCCC(11), δ NNC(13)	870	809	112	ν CH(97)	3145 2928
50	τ OCC(10)	892	830	113	ν CH(93)	3168 2954
51	δ HCC(10), δ CCN(12)	900	835	114	ν CH(96)	3185 2965
52	τ HCCC(68)	917	849	115	ν CH(81)	3100 2982
53	δ CCCC(10), τ HCCC(31)	933	864	116	ν CH(88)	3226 2991
54	τ HCCC(39)	975	908	117	ν CH(62)	3231 3021
55	ν OC(12), ν CC(12)	978	912	118	ν CH(90)	3235 3022
56	δ HCC(14), τ HCCC(22)	995	918	119	ν CH(23)	3256 3027
57	ν OC(15), ν CC(14), δ CCCC(10)	1001	936	120	ν CH(52)	3259 3047
58	τ HCCC(28), τ CCCC(12)	1053	975	121	ν CH(68)	3265 3049
59	τ HCCC(56)	1066	992	122	ν CH(33)	3266 3055
60	τ HCCC(41), τ CCCC(12)	1071	999	123	ν CH(33)	3294 3066
61	δ CCCC(72)	1076	1002	124	ν CH(26)	3456 3083
62	τ HCCC(41)	1094	1011	125	ν NH(100)	3874 3558
63	τ HCCC(83)	1122	1032			

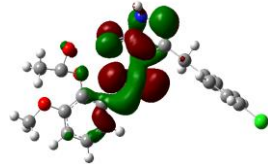
**Şekil 15. 4** Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP(a) ve HF 6-311G(d,p) (b) IR spektrumları

Tablo 15. 4 Bileşiğinin teorik bağ uzunlukları

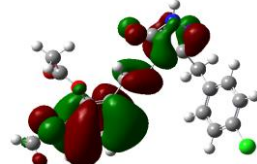
Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF		
1	C(1)-N(37)	1.382	1.266	25	C(10)-H(27)	1.072	1.079
2	C(1)-N(39)	1.391	1.378	26	C(8)-C(9)	1.401	1.398
3	C(1)-H(13)	1.532	1.495	27	C(9)-O(43)	1.431	1.371
4	N(37)-N(38)	1.432	1.368	28	O(43)-C(11)	1.429	1.350
5	N(38)-H(20)	1.002	0.990	29	C(11)-O(44)	1.410	1.174
6	N(38)-C(2)	1.399	1.346	30	C(11)-C(12)	1.546	1.498
7	C(2)-O(41)	1.244	1.195	31	C(12)-H(28)	1.073	1.083
8	C(2)-N(39)	1.393	1.389	32	C(12)-H(29)	1.073	1.079
9	N(39)-N(40)	1.401	1.366	33	C(12)-H(30)	1.070	1.084
10	N(40)-C(3)	1.305	1.257	34	C(13)-H(31)	1.076	1.082
11	C(3)-H(21)	1.078	1.070	35	C(13)-H(32)	1.076	1.081
12	C(3)-C(4)	1.541	1.476	36	C(13)-C(14)	1.544	1.520
13	C(4)-C(5)	1.397	1.398	37	C(14)-C(15)	1.394	1.385
14	C(4)-C(9)	1.403	1.378	38	C(15)-H(33)	1.097	1.074
15	C(5)-H(22)	1.096	1.071	39	C(15)-C(16)	1.394	1.386
16	C(5)-C(6)	1.390	1.369	40	C(16)-H(34)	1.097	1.073
17	C(6)-H(23)	1.097	1.074	41	C(16)-C(17)	1.394	1.378
18	C(6)-C(7)	1.391	1.394	42	C(17)-Cl(45)	1.760	1.745
19	C(7)-H(24)	1.095	1.072	43	C(17)-H(18)	1.393	1.382
20	C(7)-C(8)	1.396	1.377	44	C(18)-H(35)	1.097	1.073
21	C(8)-O(42)	1.424	1.340	45	C(18)-C(19)	1.394	1.381
22	O(42)-C(10)	1.431	1.401	46	C(19)-H(36)	1.097	1.076
23	C(10)-H(25)	1.073	1.085	47	C(14)-C(19)	1.384	1.390
24	C(10)-H(26)	1.073	1.085				

Tablo 16. 4 Bileşiğinin atomlarının DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan mulliken yük değerler

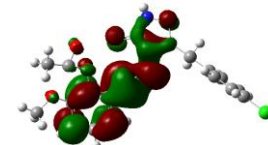
	DFT	HF		DFT	HF		DFT	HF
C1	0.283	0.488	C16	0.017	0.021	H31	0.163	0.154
C2	0.514	0.725	C17	-0.220	-0.271	H32	0.139	0.143
C3	0.096	0.356	C18	0.017	0.026	H33	0.102	0.103
C4	-0.111	-0.171	C19	-0.017	-0.043	H34	0.122	0.124
C5	-0.004	-0.055	H20	0.261	0.261	H35	0.119	0.127
C6	-0.102	-0.076	H21	0.110	0.182	H36	0.101	0.115
C7	-0.113	-0.128	H22	0.108	0.111	N37	-0.308	-0.279
C8	0.239	0.309	H23	0.103	0.100	N38	-0.288	-0.370
C9	0.144	0.244	H24	0.125	0.115	N39	-0.326	-0.494
C10	-0.136	-0.028	H25	0.128	0.089	N40	-0.211	-0.267
C11	0.318	0.469	H26	0.127	0.116	O41	-0.363	-0.529
C12	-0.176	-0.250	H27	0.135	0.099	O42	-0.425	-0.473
C13	-0.110	-0.127	H28	0.107	0.124	O43	-0.230	-0.501
C14	-0.143	-0.146	H29	0.121	0.126	O44	-0.449	-0.430
C15	-0.056	-0.066	H30	0.171	0.139	Cl45	-0.070	-0.103



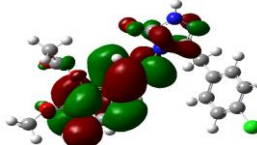
EHOMO (B3LYP) :-0.23209Hartree



EHOMO (HF) :-0.28692Hartree



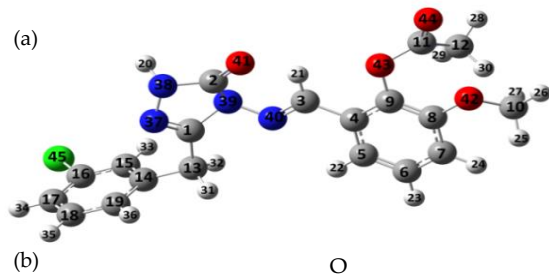
ELUMO (B3LYP) :-0.07394 Hartree



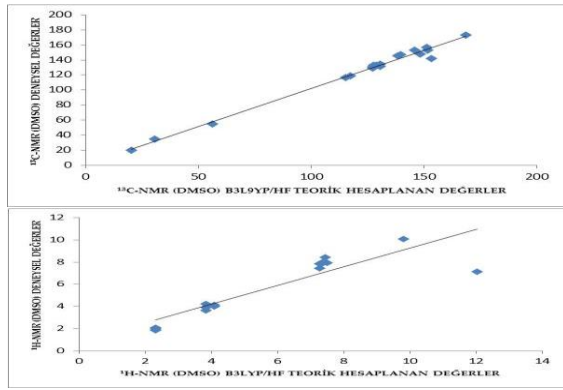
ELUMO (HF) :-1.7887Hartree

Şekil 16. 4 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri

3.1.5 3-*m*-Klorobenzil-4-(2-asetoksi-3-metoksibenzilidenamino)-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (5) Bileşiğinin Teorik Hesaplamaları

**Şekil 17. 5** Bileşiğinin optimize edilmiş moleküler yapısının GaussView görünümü (a) ve kimyasal formülü (b)**Tablo 17. 5** Bileşiğinin deneysel ve teorik ¹³C ve ¹H-NMR (DMSO) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

	Deny.	DFT DMSO	HF DMSO	Fark DFT	Fark HF
C1	145,65	152,92	160,77	-5,18	-7,27
C2	151,39	153,13	159,77	-0,54	-1,74
C3	148,12	147,73	159,51	0,51	0,39
C4	130,26	131,84	136,69	-2,66	-1,58
C5	117,03	118,57	126,51	-2,17	-1,54
C6	126,97	129,60	137,99	-0,60	-2,63
C7	115,32	116,34	122,86	1,94	-1,02
C8	151,26	157,15	159,59	-5,70	-5,89
C9	139,35	147,49	149,40	-9,72	-8,14
C10	56,11	54,51	54,66	2,25	1,60
C11	168,37	173,41	174,73	0,46	-5,04
C12	20,06	19,73	25,44	1,02	0,33
C13	30,59	34,59	35,38	-4,54	-4,00
C14	152,94	142,01	146,98	11,95	10,93
C15	130,26	134,11	141,12	-3,96	-3,85
C16	138,19	145,50	146,47	-8,76	-7,31
C17	126,97	130,95	138,14	-3,69	-3,98
C18	128,95	132,92	140,44	-2,82	-3,97
C19	127,59	132,94	140,41	-4,12	-5,35
H20	12,05	6,66	7,14	5,85	5,39
H21	9,82	9,64	10,08	0,04	0,18
H22	7,44	7,52	8,41	-0,02	-0,08
H23	7,50	7,08	7,95	0,70	0,42
H24	7,29	6,62	7,46	1,08	0,67
H25	3,83	3,81	3,64	0,08	0,02
H26	3,83	3,50	3,89	0,62	0,33
H27	3,83	3,29	4,21	0,70	0,54
H28	2,33	1,30	1,84	1,08	1,03
H29	2,33	1,82	2,10	0,75	0,51
H30	2,33	1,40	2,00	1,18	0,93
H31	4,09	3,65	4,15	0,63	0,44
H32	4,09	3,71	4,01	0,54	0,38
H33	7,29	6,91	7,86	0,53	0,38
H34	7,34	6,96	7,83	0,51	0,38
H35	7,36	7,12	7,96	0,48	0,24
H36	7,31	7,01	7,86	0,55	0,30
C19	127,59	132,94	140,41	-4,12	-5,35
H20	12,05	6,66	7,14	5,85	5,39

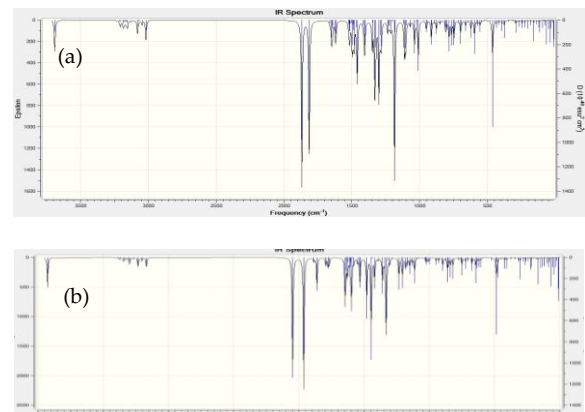


Şekil 18. 5 Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik ¹³C- ve ¹H-NMR kimyasal kayma değerleri

Tablo 18. 5 Bileşiğinin teorik DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) IR değerleri (cm⁻¹)

	Titreşim	DFT	HF	No	Titreşim	DFT	HF
1	τ CNNC(30), τ CCCC(20)	10	7	67	τ HCNN(78)	982	1015
2	τ CCCN(11), τ CNNC(26), τ CCCC(21)	13	10	68	δ NNC(33), τ HCNN(11)	998	1033
3	τ CNNC(23), τ CCCC(26), τ NNCC(11)	22	21	69	τ HCCO(48)	1029	1049
4	δ NCC(11), δ CCN(15)	29	26	70	v NN(32)	1056	1060
5	τ CCCN(24), τ CCCC(10)	37	38	71	v OC(21)	1061	1061
6	τ COCC(24), τ COCC(40)	48	47	72	v CC(12), δ HCC(17)	1062	1069
7	τ COCC(46), τ COCC(13)	64	61	73	v OC(20), v CC(20), δ HCC(14)	1069	1083
8	δ CCN(13), τ CCCC(22)	72	69	74	v CC(34), δ HCC(38)	1077	1090
9	τ CNNC(11), τ COCC(30), τ NNCC(12)	80	75	75	δ HCH(16), τ HCOC(43)	1138	1091
10	δ OCC(12), τ COCC(26), τ COCC(10)	90	86	76	v CC(12), v OC(14), τ HCOC(13)	1140	1108
11	δ NCC(10), τ NNCC(11)	109	104	77	δ HCC(61)	1151	1153
13	τ COCC(11), τ HCOC(30)	135	127	78	v CC(10), δ HCC(46)	1154	1163
14	τ CNNC(16)	152	148	79	HCOC(22)	1166	1172
15	δ NCN(12), τ CCCN(13)	174	161	80	v CC(12), δ HCC(36), τ HCCC(25)	1172	1184
16	τ CCCC(27), τ CCCCC(37)	178	184	81	v NC(14), v NN(12), δ HCC(13)	1175	1195
17	τ CCCN(20)	194	195	82	v CC(17), δ HCC(17), τ HCCC(12)	1182	1196
18	δ CCC(11), δ CCCC(17)	216	199	83	v OC(24)	1188	1205
19	τ CCCN(19), τ NNCC(13)	217	217	84	v NN(15), δ NCN(13)	1233	1209
20	δ CCC(19), δ CCCC(20), τ CCCC(10)	233	235	85	v CC(16), δ HCC(14)	1239	1221
21	δ OCC(33), δ COC(21)	238	236	86	v OC(17), v CC(10)	1250	1249
22	τ HCOC(40), τ NNCC(10)	259	251	87	v CC(30), δ HCC(20)	1272	1276
23	τ CNNC(23), τ NNCC(17), τ HNCC(21)	276	273	88	v CC(13), v NC(12), τ HCCC(26)	1279	1295
24	δ NCC(13)	285	284	89	v CC(26), δ HCC(56)	1293	1299
25	τ CCCN(14), τ CCNN(17)	301	306	90	v CC(27)	1297	1329
26	δ OCC(11), δ COC(22)	333	334	91	δ HCN(22), δ HNN(28), τ HCCC(16)	1350	1376
27	OC(11), δ COC(12)	361	365	92	δ HCH(59)	1354	1379
28	δ CCC(22), δ CCCC(33)	368	371	93	δ HCN(16), δ HNN(45)	1361	1393
29	δ COC(23), τ CCNN(14), τ COCC(14)	377	382	94	v NC(17), δ HCN(16)	1404	1419
30	v C(44), δ CCCC(44)	399	403	95	v CC(15), δ HCC(20), δ CCCC(16)	1411	1426

31	δ CCO(14), δ NCN(12), δ OCN(14)	418	426	96	δ HCC(13), δ HCH(25)	1426	1435
32	τ CCCC(32), τ CCCCC(12), τ CCCC(21)	428	435	97	δ HCH(53), τ HCCO(13)	1432	1441
33	τ HNCC(53), τ NCNC(12)	445	437	98	δ HCH(90)	1434	1443
34	δ OCC(35)	460	468	99	v CC(16), δ HCC(13), δ HCH(19)	1440	1446
35	δ CCC(10), τ CCCC(10), τ CCCCC(18)	500	506	100	δ HCH(30), τ HCCO(10)	1444	1458
36	δ CCC(16)	524	529	101	δ HCH(42), τ HCOC(15)	1455	1464
37	τ CCCN(18)	533	545	102	δ HCC(19), δ HCH(11)	1457	1468
38	δ OCN(10)	549	556	103	v CC(25), δ HCC(21)	1461	1474
39	τ ONNC(22), τ HCCO(10)	555	571	104	δ HCH(42), τ HCOC(11)	1466	1479
40	δ CCC(24), δ OCC(10)	573	579	105	v CC(29), v NC(11)	1555	1588
41	τ OCC(29), τ CCCC(11)	591	601	106	v CC(31), δ CCCC(13)	1559	1597
42	δ COC(11)	598	605	107	v CC(26), v NC(11)	1577	1612
43	δ OCN(15), δ OCC(10)	621	631	108	v NC(20), v CC(25)	1581	1615
44	τ HNCC(53), τ NCNC(40), τ NNCC(13)	635	648	109	v NC(24), v CC(28)	1585	1674
45	τ CCCC(44), τ HCCC(12)	664	672	110	v NC(59)	1598	1694
46	v CC(11), δ CCC(18), v C(15)	671	676	111	v NC(11), v OC(41)	1744	1764
48	τ ONNC(30)	715	735	112	v OC(49)	1796	1841
49	τ ONNC(10), τ HCCC(15)	719	754	113	v CH(67)	2902	2850
50	τ HCCC(21)	735	768	114	v CH(99)	2929	2879
51	v OC(11), v CC(15), τ HCCC(24)	753	774	115	v CH(60)	2946	2882
52	v NC(14), δ CN(30)	771	784	116	v CH(99)	2954	2907
53	τ HCCC(11), τ OCC(19)	776	804	117	v CH(53)	2962	2913
54	τ HCCC(17)	778	805	118	v CH(21)	3007	2943
55	v NN(13), δ NCN(21), δ CCN(19)	817	833	119	v CH(47)	3032	2965
56	δ CCCC(11), τ HCCC(11)	842	852	120	v CH(76)	3039	2972
57	τ HCCC(68)	855	899	121	v CH(51)	3047	2991
58	τ HCCC(46)	859	907	122	v CH(51)	3056	3002
59	τ HCCC(42)	877	909	123	v CH(78)	3063	3007
60	v OC(14), δ CCCC(11)	880	918	124	v CH(29)	3069	3015
61	δ HCC(26), τ HCCC(32), τ CCCC(10)	909	921	125	v CH(26)	3078	3027
62	v OC(22), v CC(18), δ CCCC(11)	915	926	126	v CH(51)	3083	3032
63	τ HCCC(64)	928	975	127	v CH(48)	3084	3041
64	τ HCCC(51)	934	988	128	v CH(48)	3091	3047
65	v CC(17), τ HCCO(15)	970	995	129	v NH(100)	3548	3532
66	v CC(24), δ CCCC(55)	979	999				



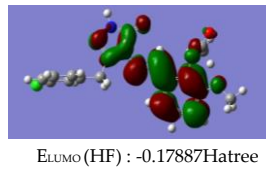
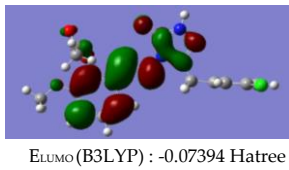
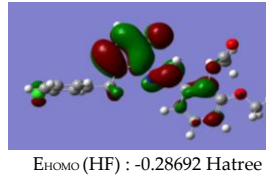
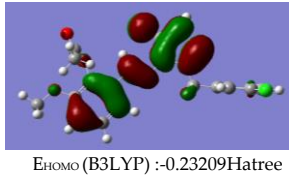
Şekil 19. 5 Bileşiğinin Teorik DFT/B3LYP(a) ve HF 6-311G(d,p) (b) IR Spektrumları

Tablo 19. 5 Bileşiğinin teorik bağ uzunlukları

No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF	No	Bağ Uz. (Å)	B3LYP	HF
1	C(1)-N(37)	1.29	1.27	23	C(19)-H(36)	1.08	1.07
2	C(1)-N(39)	1.39	1.38	24	C(3)-H(21)	1.08	1.07
3	C(1)-C(13)	1.50	1.50	25	C(3)-C(4)	1.47	1.48
4	C(13)-H(31)	1.09	1.08	26	C(4)-C(5)	1.41	1.40
5	C(13)-H(32)	1.09	1.08	27	C(4)-C(9)	1.40	1.38
6	N(38)-C(2)	1.37	1.35	28	C(5)-H(22)	1.08	1.07
7	C(2)-O(41)	1.21	1.19	29	C(5)-C(6)	1.38	1.37
8	N(39)-C(2)	1.42	1.39	30	C(6)-H(23)	1.08	1.07
9	N(38)-H(20)	1.00	1.07	31	C(6)-C(7)	1.40	1.39
10	N(37)-N(38)	1.38	1.37	32	C(7)-H(24)	1.08	1.07
11	N(39)-N(40)	1.37	1.36	33	C(7)-C(8)	1.39	1.38
12	N(40)-C(3)	1.28	1.26	34	C(8)-O(42)	1.36	1.34
13	C(13)-C(14)	1.51	1.51	35	C(8)-C(9)	1.40	1.40
14	C(14)-C(15)	1.40	1.39	36	C(9)-O(43)	1.38	1.36
15	C(15)-H(33)	1.08	1.07	37	O(42)-C(10)	1.42	1.40
16	C(15)-C(16)	1.39	1.38	38	C(10)-H(25)	1.09	1.08
17	C(16)-Cl(45)	1.76	1.74	39	C(10)-H(26)	1.09	1.08
18	C(16)-C(17)	1.39	1.38	40	C(10)-H(27)	1.09	1.08
19	C(17)-H(34)	1.08	1.07	41	O(44)-C(11)	1.39	1.36
20	C(17)-C(18)	1.39	1.38	42	C(11)-O(44)	1.19	1.17
21	C(18)-H(35)	1.08	1.07	43	C(11)-C(12)	1.51	1.51
22	C(18)-C(19)	1.39	1.38	44	C(11)-H(28)	1.09	1.08

Tablo 20. 5 Bileşiğinin atomlarının DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan mulliken yük değerler

	DFT	HF		DFT	HF		DFT	HF
C1	0.452	0.473	C16	-0.195	-0.178	H31	0.250	0.253
C2	0.581	0.719	C17	-0.111	-0.115	H32	0.250	0.254
C3	-0.033	0.057	C18	-0.169	-0.178	H33	0.218	0.222
C4	-0.037	-0.056	C19	-0.108	-0.102	H34	0.222	0.225
C5	-0.181	-0.146	H20	0.375	0.366	H35	0.202	0.203
C6	-0.180	-0.184	H21	0.278	0.256	H36	0.194	0.198
C7	-0.258	-0.235	H22	0.212	0.205	N37	-0.185	-0.196
C8	0.268	0.274	H23	0.200	0.203	N38	-0.497	-0.456
C9	0.112	0.113	H24	0.220	0.198	N39	-0.372	-0.379
C10	-0.464	-0.465	H25	0.219	0.213	N40	-0.206	-0.211
C11	0.414	0.418	H26	0.212	0.210	O41	-0.379	-0.357
C12	-0.757	-0.568	H27	0.240	0.241	O42	-0.344	-0.356
C13	-0.589	-0.396	H28	0.248	0.244	O43	-0.322	-0.346
C14	0.072	-0.095	H29	0.242	0.254	O44	-0.281	-0.295
C15	-0.178	-0.185	H30	0.254	0.236	C145	-0.080	-0.075

**Şekil 4. 5** Bileşiğinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan HOMO-LUMO enerjileri**Tablo 21. 1-5** Bileşiklerinin DFT/B3LYP ve HF 6-311G(d,p) yöntemlerine göre hesaplanan dipole moment değerleri

Dipol Moment	B3LYP (debye)				
	1	2	3	4	5
μ_x	0.6645	0.2575	-0.3232	5.7821	-0.3623
μ_y	-7.1710	3.4867	2.9766	5.4614	-7.2871
μ_z	3.0352	-1.5248	-0.6378	0.9794	0.8258
μ_{Toplam}	7.8152	3.8143	3.0613	8.0137	7.3427
	HF (debye)				
	1	2	3	4	5
μ_x	0.6289	0.3664	-1.7255	1.1718	-0.4405
μ_y	-8.5753	4.1051	-1.1982	-1.5374	-8.7198
μ_z	3.4944	-1.5566	-0.3327	0.6738	0.9939
μ_{Toplam}	9.2812	4.4056	2.1269	2.0471	8.7873

Tablo 22. 3-5 Bileşiklerinin DFT ve B3LYP/ HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış ^{13}C -NMR için bulunan R, standart hata, a ve b değerleri

Bileşik No	^{13}C -NMR		HF	
	B3LYP	5	3	5
R ²	0.9965	0.9948	0.9879	0.9877
S. hata	2.5596	4.2676	4.7946	4.6505
a	0.9607	0.9745	0.9969	0.9534
b	1.2509	0.5233	7.0619	-1.9546

Tablo 23. 1-5 Bileşiklerinin DFT/B3LYP ve HF(DMSO) metodlarına göre hesaplanmış 1H -NMR için bulunan R, standart hata, a ve b değerleri

Bileşik No	B3LYP (debye)				
	1	2	3	4	5
R ²	0.8007	0.8786	0.8363	0.8786	0.8051
S. hata	1.2607	1.0285	1.1049	1.0285	1.2784
a	0.9816	1.0269	1.0045	1.0269	1.0068
b	0.6994	-0.8729	0.2486	-0.8729	0.6738
Bileşik No	HF (debye)				
	1	2	3	4	5
R ²	0.7856	0.8557	0.8063	0.8557	0.7884
S. hata	1.3074	1.1212	1.2021	1.1212	1.3319
a	0.9230	0.9943	0.9645	0.9943	0.9405
b	0.4516	-0.1876	0.1540	-0.1876	0.4426

3 Sonuç ve Tartışma

Bileşiklerin R² değerleri arasında bireysel ilişki sırasıyla değerlendirildiğinde; B3LYP/6-311G(d,p)(DMSO) için 1H : 0.7856 ve HF/6-311G(d,p)(DMSO) için 1H : 0.997; B3LYP/6-311G(d,p)(DMSO) için ^{13}C : 0.9965, 1H : 0.8786 ve HF/6-311G(d,p)(DMSO) için ^{13}C : 0.9879, 1H : 0.8063; B3LYP/6-311G(d,p)(DMSO) için 1H : 0.8786 ve HF/6-311G(d,p)(DMSO) için 1H : 0.8557; B3LYP/6-311G(d,p)(DMSO) için ^{13}C : 0.9948, 1H : 0.8051 ve HF/6-311G(d,p)(DMSO) için ^{13}C : 0.9877, 1H : 0.7884 şeklinde bir ilişki olduğu görülmüştür. Teorik ve deneysel karbon ve proton kimyasal kayma oranları arasında a, b ve R² değerine göre doğrusal bir korelasyon gözlenmiştir. N-H protonları hariç incelenen tüm bileşikler için hesaplanan ve deneysel olarak elde edilen değerler arasında bir uyum görülmüştür. N-H protonu için elde edilen teorik değerler ile deneysel değer arasında yüksek bir fark ortaya çıkmıştır. Bunun nedeni 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on halkasındaki N-H protonunun asidik özellik taşıması gösterilebilir [17, 18]. Hesaplanan teorik IR frekans değerlerinde negatif değer yoktur. Bu sonuç bize bileşiklerin kararlı olduğunu göstermektedir. Ayrıca deneysel karbonil (C=O) piki 1769-1699 cm⁻¹ aralıklarında görülürken, teorik olarak karbonil (C=O) piki sırasıyla B3LYP metodunda 1795-1807 cm⁻¹ ve HF metodunda 1841-1853 cm⁻¹ aralıklarında görülmüştür. İncelenen bileşiklerin teorik olarak

bağ uzunluklarının deneysel verilerle uyumuna bakmak için, bileşiklerdeki C-1 ve/veya C-3'e bağlı fenil halkasını taşıyan sübstituentli bileşiklerin fenil halkalarındaki C-C bağ uzunlukları ile C-H bağ uzunluklarının, literatürden [19] alınan değerler ile kıyaslaması yapılmıştır. Teorik olarak C-C bağ uzunlukları ortalamaları B3LYP 6-311(d,p) temel setine göre 1.3948 Å ve HF 6-311(d,p) temel setine göre 1.3846 Å olarak bulunmuştur. Aynı bileşiklerin C-H bağ uzunlukları ortalamaları B3LYP 6-311(d,p) ve HF 6-311(d,p) temel setlerine göre sırasıyla 1.1049 Å ve 1.0932 Å olarak bulunmuştur. Sonuç olarak, B3LYP 6-311(d,p) temel setine göre elde edilen C-C bağ uzunlukları ile C-H bağ uzunluklarının teorik değerlerinin literatürle [19] uyumlu olduğu görülmüştür.

4 Referanslar

- [1] Apaydın, F. Magnetik Rezonans, Hacettepe Üniversitesi. 1991; 3, 6-8.
- [2] Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd. 1999; 26-38.
- [3] Haken, H.; Wolf, H.C. Atom ve Kuantum Fiziği, çeviri: Okur, İ., Değişim yayınları, 2000; 345-350.
- [4] Parr, R.G.; Yang, W. Density Functional Theory, Oxford University Press, 1989.
- [5] Bartolotti, L.J.; Flurchick, K.; An Introduction to Density Functional Theory, Rev. Comp. Chem., 1996; 7, 187-216.
- [6] Yüksek, H.; Gürsoy, Ö.; Çakmak, İ.; Alkan, M. Synthesis and GIAO NMR Calculation for Some New 4,5-Dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. Magnetic Resonance in Chemistry, 2005; 43; 585-587.
- [7] Yüksek, H.; Çakmak, İ.; Sadi, S.; Alkan, M. Synthesis and GIAO NMR Calculations for Some Novel 4-Heteroarylidenamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts, International Journal of Molecular Sciences, 2005; 6, 219-229.
- [8] 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-1H-1,2,4-triazol-5-one, Molecules Letters in Organic Chemistry, 2013; 10; 395-441.
- [9] Gökçe, H.; Akyıldırım, O.; Bahçeli, S.; Yüksek, H.; Gürsoy Kol, O. The 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Molecule Investigated by a Joint

Spectroscopic and Quantum Chemical Calculations. Journal of Molecular Structure, 2014; 1056-1057, 273-284.

- [10] 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. C.T. 2009.

- [11] Wolinski, K.; Hilton, J.F.; Pulay, P. J. Am. Chem. Soc., 1990; 112, 512.
- [12] Alkan, M.; Gürbüz, A. Bazı Yeni 1,2,4-Triazol Türevlerinin Sentezi ve Biyolojik Aktivitelerinin İncelenmesi, TUBİTAK Proje (107T633), 2009.
- [13] Merrick, J.P.; Moran, D.; Radom, L. An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. Journal of Physical Chemistry, 2007; 111 (45), 11683-11700.
- [14] Jamróz, M.H. Vibrational Energy Distribution Analysis: VEDA 4 program, Warsaw, 2004.
- [15] Mulliken, R.S. Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions, Journal of Chemical Physics, 1955; 23, 1833-1840.
- [16] Fukui, K. Role of Frontier Orbitals in Chemical Reactions, Science, 1982; pp. 747-754.
- [17] Yüksek, H. 3-Alkil(aril)-4-amino-4,5-dihidro-1,2,4-triazol-5-on'ların bazı reaksiyonlarının incelenmesi, KTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, 1992.
- [18] Bahçeci, Ş.; Yüksek, H.; Ocağ, Z.; Köksal, C.; Özdemir, M. Synthesis and non-aqueous medium titrations of some new 4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives, Acta Chimica Slovenica, 2002; 49, 783-794.
- [19] 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-1H-1,2,4-triazol-5-ones molecule, 2nd International Conference on Computation for Science and Technology, Niğde, Turkey, 2012; PP-18, July 9-11.