

**3-Metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on
Bileşğinin Spektroskopik Özelliklerinin Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi**

Songül ULUFER^{1*}, Özlem GÜRSOY-KOL¹, Haydar YÜKSEK¹,
Murat Tolga KAYALAR²

¹Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Kars

²Erzincan Üniversitesi Eğitim Fakültesi, Erzincan

Yayın Kodu: 7-2A

ÖZET: Bu çalışmada, 3-metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on bileşği B3LYP/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) temel setleri kullanılarak optimize edilmiştir. Bu optimize yapıdan yola çıkılarak 1H-NMR ve 13C-NMR kimyasal kayma değerleri GIAO metoduna göre Gaussian G09W paket programı kullanılarak gaz fazında hesaplanmıştır. Deneysel ve teorik olarak bulunan değerler $\delta_{exp}=a+b$. δ_{calc} . eşitliğine göre grafiğe geçirilmiş ve SigmaPlot programı kullanılarak a ve b sabitleri regresyon katsayısı ile standart hata değerleri bulunmuştur. Elde edilen sonuçlara göre teorik verilerin deneysel verilerle uyumlu oldukları görülmüştür. Çalışmanın teorik kısmında ayrıca, sentezlenen bileşğın IR frekans değerleri B3LYP ve HF metodlarının 6-311G(d) temel seti kullanılarak gaz fazında hesaplanmış, elde edilen değerler uygun uyum faktörleri ile çarpılmıştır. Hesaplanan IR verilerinin tanımlanmasında Veda4f programından yararlanılmıştır. Deneysel ve teorik olarak UV-vis değerleri etanollü ortamda hesaplanmış ve deneysel değerlerle mukayese edilmiştir. İlaveten, bu bileşğın bağ açıları, bağ uzunlukları, Mulliken yükleri, HOMO-LUMO enerjileri, dipol momentleri, toplam enerjileri, iyonlaşma potansiyeli ve elektron ilgisi aynı metodlar ve aynı set kullanılarak hesaplanmış ve tablolar halinde verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: 1,2,4-triazol-5-one, GIAO, B3LYP, HF, 6-311G(d)

Experimentally and Theoretically Investigation of Spectroscopic Properties of 3-Methyl-4-[3-(2-methylbenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Compound

ABSTRACT: In this study, 3-methyl-4-[3-(2-methylbenzoxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one compound was optimized by using the B3LYP/6311G (d) and HF/6311G (d) basis sets. ¹H-NMR and ¹³C-NMR chemical shift values according to the method GIAO by obtained optimized structure were calculated using Gaussian G09W computer program in gas phase. Experimental and theoretical values were inserted into the graphic according to equation of $\delta_{exp} = a + b \cdot \delta_{calc}$. The standard error values were found via Sigma Plot program with regression coefficient of a and b constants. According to obtained conclusions, theoretical and experimental values were seen to be compatible. In the theoretical part of the study, Also, The synthesized compound of values calculated IR frequencies using the same methods and the basic set were calculated in gas phase. Which, founded values are multiplied by appropriate adjustment factors. Veda4f program was used for theoretical identification of calculated IR data. Additionally, dipole moments, the HOMO-LUMO energy, total energy of the molecule, bond lengths and Mulliken charges from both methods were calculated.

Key Words: B3LYP, GIAO, HF, 1,2,4-triazol-5-one, 6-311G(d)

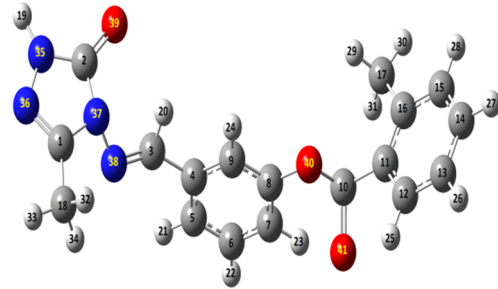
E-mail: sngulufer@gmail.com

1. Giriş

Deneysel çalışma yapmadan elde edilecek sonuçları önceden tahmin edebilmek veya deneysel çalışmaları desteklemek amacıyla bilgisayar destekli kuantum kimyasal hesaplamalar, moleküler modelleme programları kullanılarak yapılmaktadır. Bu tür hesaplamaların temelini kuantum mekaniği oluşturur. Kuantum teorisi ile bir molekülün bütün kimyasal özellikleri hesaplanabilir. Bu programlar moleküllerin moleküler yapısı, toplam enerji, dipol moment, optimize geometrisi, spektroskopik parametreler ($^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ ve IR titreşim frekansları) gibi özelliklerinin hesaplanacağı verimli programların oluşturulmasını sağlamaktır. Nitekim, 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin spektroskopik (IR ve NMR) ve elektronik özellikleri Hartree-Fock (HF) ve density functional theory (B3LYP) yöntemleri kullanılarak

araştırılmıştır (Yüksek ve ark., 2005a; Yüksek ve ark., 2005b; Gökçe ve ark., 2013; Gökçe ve ark., 2014).

Bu çalışmada, 3-metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (1) bileşiğinin B3LYP/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) temel setleri kullanılarak teorik spektroskopik özellikleri incelenerek bazı deneysel parametrelerle mukayese edilmiştir (Ulufur, 2014).



YÖNTEM

Bu çalışmada, moleküler mekanik, yarı-deneysel ve ab-initio yöntemlerini içeren, çok sayıda teori ve temel set seçeneğine sahip olan oldukça kapsamlı bir program olan Gaussian 09W paket programı kullanılmıştır (Frisch ve ark., 2009). Bu

program ile atom ve moleküllerin enerjileri hesaplanabilir, geometrik optimizasyonları yapılabilir ve enerjiye bağlı olan titreşim frekansları, kuvvet sabitleri ve dipol momentleri hesaplanabilir. Program potansiyel enerji yüzeyinde dolaşarak minimumlar, geçiş halleri ve tepkime güzergâhını tarayabilir, molekül dalga fonksiyonunun kararlılığını test edebilir. Ayrıca IR ve Raman spektrumları, termokimyasal özellikleri, bağ ve tepkime enerjileri, molekül orbitalleri, atom yükleri, çok kutuplu momentler, NMR ve manyetik duyarlılık titreşimsel şiddetleri, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjileri, kutuplanabilirlik ve hiperkutuplanma, elektrostatik potansiyel ve elektron yoğunluğu gibi pek çok özelliğin atomlar ve moleküller için hesaplanmasına olanak tanır. Tüm bu özellikler gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında hesaplanabilir (Frisch ve ark., 2009; Gümüş ve ark., 2015).

Ab-initio metotlar moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların tersine, ilgilenilen molekül için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fiziksel sabitler haricinde deneysel değerler kullanmadan Schrödinger dalga denkleminin yaklaşık bir çözümüne dayanır (Apaydın F, 1991; Jensen F, 1999). Ab-initio metotları olan Hartree-Fock ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi metotları moleküllerin yapılarının tayin edilmesi, spektroskopik, elektronik ve lineer olmayan optik özellikler gibi moleküler özellikleri araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmesidir (Apaydın, 1991).

BULGULAR

Geometrik Optimizasyon

Molekülün gaz fazında ve taban durumunda üç boyutta yaklaşık geometrisi GaussView 5.0 moleküler

görüntüleme programında (Dennington ve ark., 2009) çizilerek, Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) metodu kullanılarak, kutuplanma etkisini gidermek için eklenen polarize fonksiyonları içeren 6-311G(d) temel seti ile her elektron çiftinin tek bir yörüngede yer almaya zorlandığı sınırlandırılmış kapalı kabuk hesaplamaları ile geometri optimizasyonu yapılarak moleküldeki atomların uzay yerleşimleri ve uzay yapısı belirlendi (Gümüş ve ark., 2015). Böylece, bağ açıları (Tablo 1) teorik olarak hesaplanmıştır.

Tablo 1. 1 bileşiğinin B3LYP ve HF yöntemlerine göre hesaplanan bağ açıları ($^{\circ}$)

	Bağ Açılı	B3LYP	Hf		Bağ Açılı	B3LYP	Hf
1	C(1)-N(37)-C(2)	108,019	107,809	34	C(8)-C(9)-H(24)	120,724	120,758
2	C(1)-N(37)-N(38)	126,278	125,242	35	H(24)-C(9)-C(8)	118,807	119,590
3	N(38)-N(37)-C(1)	121,233	122,041	36	C(8)-O(40)-C(10)	120,094	119,859
4	N(37)-C(1)-N(36)	111,550	111,425	37	O(40)-C(10)-O(41)	122,345	122,201
5	N(37)-C(1)-C(18)	123,102	122,965	38	O(41)-C(10)-C(11)	126,492	125,985
6	C(18)-C(1)-N(36)	125,329	125,592	39	C(11)-C(10)-O(40)	111,163	111,814
7	C(1)-N(36)-N(35)	104,634	105,048	40	C(16)-C(11)-C(12)	119,995	120,120
8	N(36)-N(35)-C(2)	114,424	113,350	41	C(12)-C(11)-C(10)	119,541	119,093
9	N(36)-N(35)-(19)	120,042	120,099	42	C(10)-C(11)-C(16)	120,463	120,785
10	H(19)-N(45)-C(2)	124,800	124,580	43	C(11)-C(12)-C(13)	121,124	121,151
11	N(35)-C(2)-H(37)	100,927	101,669	44	C(13)-C(12)-H(25)	119,947	119,634
12	N(35)-C(2)-O(39)	130,621	130,089	45	H(25)-C(12)-C(11)	118,929	119,215
13	O(39)-C(2)-N(37)	128,451	128,240	46	C(12)-C(13)-C(14)	119,288	119,077
14	N(37)-N(38)-C(3)	119,705	118,037	47	C(14)-C(13)-H(26)	120,634	120,769
15	N(38)-C(3)-H(20)	111,003	112,813	48	H(26)-C(13)-C(12)	120,078	120,154
16	H(20)-C(3)-C(4)	113,964	115,252	49	C(13)-C(14)-C(15)	119,939	120,137
17	C(4)-C(3)-N(38)	134,940	131,907	50	C(15)-C(14)-H(27)	119,768	119,636
18	C(9)-C(4)-C(5)	118,682	119,715	51	H(27)-C(14)-C(13)	120,295	120,227

19	C(5)-C(4)-C(3)	124,457	122,209	52	C(14)-C(15)-C(16)	122,112	121,929
20	C(3)-C(4)-C(9)	116,639	117,923	53	C(16)-C(15)-H(34)	118,616	118,929
21	C(4)-C(5)-C(6)	120,130	119,890	54	C(16)-C(15)-H(28)	119,271	119,141
22	C(6)-C(5)-H(21)	119,486	119,761	55	C(15)-C(16)-C(11)	117,543	117,585
23	H(21)-C(5)-C(4)	120,374	120,346	56	C(11)-C(16)-C(17)	123,907	124,146
24	C(5)-C(6)-C(7)	121,064	120,449	57	C(17)-C(16)-C(15)	118,550	118,268
25	C(7)-C(6)-H(22)	119,318	119,690	58	C(16)-C(17)-H(30)	111,891	111,695
26	H(22)-C(6)-C(5)	119,615	118,860	59	H(30)-C(17)-H(29)	105,823	108,527
27	C(6)-C(7)-C(8)	118,726	119,157	60	H(29)-C(17)-H(31)	108,583	108,551
28	C(8)-C(7)-H(23)	120,371	119,563	61	H(31)-C(17)-C(16)	111,746	115,529
29	H(23)-C(7)-C(6)	120,900	121,280	62	C(1)-C(18)-H(32)	109,017	110,836
30	C(7)-C(8)-C(9)	120,894	121,123	63	C(1)-C(18)-H(33)	111,436	108,931
31	C(9)-C(8)-O(40)	116,735	120,347	64	H(33)-C(18)-H(34)	107,230	109,661
32	O(40)-C(8)-C(7)	122,281	118,467	65	H(34)-C(18)-H(32)	109,507	107,755
33	C(8)-C(9)-C(4)	120,461	119,649				

İnfrared Spektrum Analizi

3-Metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on (**1**) B3LYP ve HF yöntemlerine göre teorik titreşim frekansları gaz fazında hesaplanmıştır. Yapılan analiz sonucunda hesaplanan frekanslar içerisinde negatif frekansa rastlanmamıştır. Bu sonuç elde ettiğimiz yapının kararlı bir yapı olduğunu göstermektedir. B3LYP ve HF'ye göre elde edilen değerler kullanılarak teorik IR

spektrumları çizilmiş (Şekil 1) ve titreşim frekansları B3LYP/6-311G(d) için 0,9516 ve HF/6-311G(d) metodu için 0,9905 katsayıları ile çarpılmıştır (Merrick ve ark., 2007). Teorik IR spektral değerleriyle deneysel IR spektral değerleri (Gürsoy Kol ve Yüksek, 2010) mukayese edilmiştir.

Tablo 3. 1 Bileşiğinin deneysel ve seçilmiş teorik frekans değerleri ve titreşim türleri

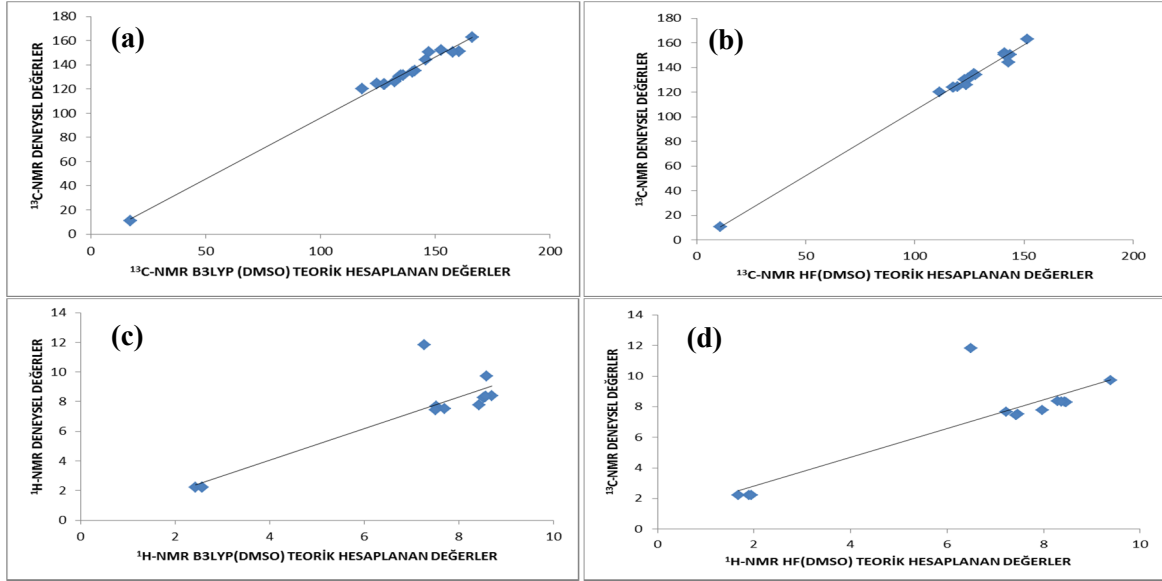
		B3LYP	HF
1	τ NCCC, τ COCC	12	8
2	τ CCCC, τ COCC, τ CCOC	15	12
3	δ OCC, τ CCCC, τ CCOC	27	24
4	τ CCCC, τ CNNC, τ COCC	40	32
5	τ CCCC, τ COCC, τ CCOC	43	43
6	δ OCC, τ NCNN	57	59
7	τ NCNN, τ CCCC	84	68
8	τ CCCC	127	125
9	τ CNNC	130	128
10	τ CNNC, τ NNCC	144	148
11	τ HCCN	163	167
12	δ CCC	174	168
13	δ CCO	188	198
14	τ HCCC, τ CCCC	194	211
15	τ CCCC	222	234
16	τ NCNN, τ CCCC	225	244
17	τ CCCC	230	248
18	δ CCN	255	260
19	τ HNNC, τ CNNC	290	301
20	δ OCC, τ CCCC	303	319
21	δ CCN	317	330
22	δ OCO, δ CCC	388	400
23	δ OCC, δ CCC	411	427
24	τ HCCC, τ CCCC	431	452
25	δ CCC, τ CCCC	436	455
26	δ CCC	452	464
27	τ HNNC, τ ONNC	457	469
28	τ OCNC, CCC	480	497
29	τ CCCC	494	521
30	τ CCCC, τ OCCC	501	527
31	δ OCN, δ CCC	553	567
32	ν CC, δ CCC	563	577
33	ν CC, ν NN, δ NCN	593	608
34	δ CCC	603	622
35	τ NNCC, δ CCC, τ OCCC	622	650
36	τ HNNC, τ NNCC, τ CNNC	656	687
37	δ CCC	677	699
38	τ HCCC, τ CCCC	688	708
39	τ OCOC	695	726

40	τ CCCC, τ OCOC	700	731
41	ν NN, δ CCC	723	756
42	τ ONNC	738	787
43	τ HCCC, τ OCOC	740	812
44	τ HCCC	781	814
45	ν NC, CNN	797	834
46	τ HCCC, τ CCCC, τ OCOC	802	841
47	ν CC, δ CCC	808	857
48	δ NCC, δ NNC	835	887
49	τ HCCC	849	904
50	τ HCCC	877	931
51	τ HCCC, τ HCNN	890	954
52	τ HCCC, τ OCCC	914	958
53	ν CC, δ CCC, τ HCNN	928	991
54	τ HCCC	955	1033
55	τ HCNN, τ HCCC	959	1034
56	τ HCCC	972	1038
57	τ HCCC, δ CCC	984	1042
58	δ HNC, δ HCH, δ HCCN	990	1045
59	ν CC, δ CCC	1008	1046
60	δ HCH, τ HCCC	1015	1062
61	ν OC, δ CCC	1047	1092
62	ν NC, ν NN, δ HCH, τ HCCC, τ CCCC	1058	1106
63	ν NC, ν NN, δ HCH, τ HCCC	1058	1112
64	HCH, τ HCCN	1068	1114
65	ν CC, δ HCC	1069	1127
66	ν NN, δ CCN, τ HCCN	1098	1135
67	ν CC, δ HCC	1109	1143
68	δ HCC	1151	1158
69	ν OC, δ HCC	1155	1162
70	ν NC, δ NN, NCN	1180	1191
71	ν CC, δ HCC	1185	1212
72	ν CC, δ HCC	1191	1242
73	ν CC	1213	1249
74	ν CC, ν OC	1229	1259
75	ν CC	1249	1269
76	ν CC, ν NN, δ NCN	1257	1314
77	ν CC, δ HCC	1305	1323
78	ν CC, δ HCC	1310	1357
79	ν CC	1324	1359
80	ν CC, δ HCC	1342	1378
81	ν NC, δ HNN, δ HCH	1385	1449

82	$\delta\text{HNN}, \delta\text{HCH}$	1398	1459
83	$\tau\text{HCNN}, \tau\text{HCCC}$	1410	1483
84	δHCH	1422	1484
85	$\nu\text{CC}, \delta\text{HNN}, \delta\text{HCH}$	1435	1504
86	$\nu\text{CC}, \delta\text{HCN}, \delta\text{HCC}$	1458	1514
87	$\nu\text{CC}, \delta\text{HCC}, \delta\text{HCH}$	1463	1519
88	$\delta\text{HCH}, \tau\text{HCCN}$	1475	1530
89	$\delta\text{HCH}, \tau\text{HCCC}$	1483	1543
90	$\delta\text{HCH}, \tau\text{HCCN}$	1488	1543
91	$\delta\text{HCH}, \tau\text{HCCC}$	1494	1549
92	$\delta\text{HCC}, \delta\text{HCH}, \delta\text{CCC}$	1509	1573
93	$\delta\text{HCC}, \delta\text{CCC}$	1514	1576
94	$\nu\text{CC}, \delta\text{CCC}$	1600	1674
95	$\nu\text{CC}, \delta\text{HCC}$	1609	1546
96	$\nu\text{CC}, \delta\text{HCC}$	1634	1570
97	$\nu\text{CC}, \delta\text{HCC}$	1634	1570
98	νNC	1638	1574
99	νNC	1664	1599
100	νOC	1777	1707
101	$\nu\text{OC}, \nu\text{NC}$	1809	1738
102	νCH	3018	2899
103	νCH	3021	2902
104	νCH	3069	2949
105	νCH	3079	2958
106	νCH	3087	2965
107	νCH	3093	2971
108	νCH	3115	2993
109	νCH	3133	3010
110	νCH	3147	3023
111	νCH	3152	3028
112	νCH	3157	3033
113	νCH	3159	3035
114	νCH	3187	3061
115	νCH	3191	3065
116	νCH	3195	3070
117	νNH	3657	3513

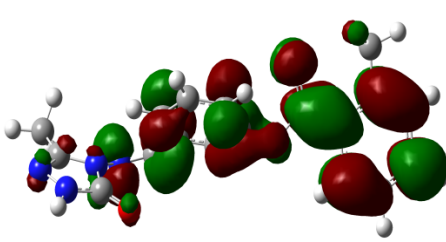
Tablo 4. 1 bileşiminin TMS'ye göre ^{13}C ve ^1H -NMR deneysel ve teorik (B3LYP (DMSO) ve HF (DMSO)) kimyasal kayma değerleri (δ/ppm)

No	Deneysel	DFT/6311d	Fark	HF/6311d	Fark
C1	144,82	149,58	-4,76	157,37	-12,55
C2	151,66	149,25	2,41	157,70	-6,04
C3	153,01	158,81	-5,80	171,98	-18,97
C4	135,68	139,62	-3,94	144,24	-8,56
C5	121,06	127,66	-6,60	132,55	-11,49
C6	128,57	130,60	-2,03	137,83	-9,26
C7	126,73	129,49	-2,76	133,94	-7,21
C8	151,50	156,86	-5,36	160,22	-8,72
C9	125,60	127,77	-2,17	136,07	-10,47
C10	165,66	167,50	-1,84	169,75	-4,09
C11	130,72	130,67	0,05	133,28	-2,56
C12	132,38	135,87	-3,49	145,62	-13,24
C13	126,19	128,44	-2,25	131,90	-5,71
C14	133,58	136,33	-2,75	145,93	-12,35
C15	131,36	134,69	-3,33	137,60	-6,24
C16	140,73	151,09	-10,36	158,63	-17,90
C17	21,76	24,80	-3,04	27,79	-6,03
C18	11,60	12,53	-0,93	18,03	-6,43
H19	11,86	6,05	5,81	5,71	6,15
H20	9,79	7,61	2,18	8,23	1,56
H21	7,78	7,10	0,68	7,27	0,51
H22	7,63	7,00	0,63	7,39	0,24
H23	7,79	7,05	0,74	7,30	0,49
H24	7,58	6,73	0,85	7,32	0,26
H25	8,13	8,20	-0,07	8,71	-0,58
H26	7,44	7,02	0,42	7,32	0,12
H27	7,48	7,14	0,34	7,70	-0,22
H28	7,41	6,94	0,47	7,26	0,15
H29	2,61	1,71	0,90	1,91	0,70
H30	2,61	2,54	0,07	2,75	-0,14
H31	2,61	2,75	-0,14	0,89	1,72
H32	2,29	1,69	0,60	1,91	0,38
H33	2,29	1,73	0,56	2,01	0,28
H34	2,29	2,08	0,21	2,26	0,03

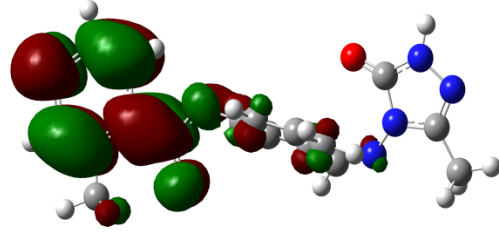


Şekil 3. 1 Bileşiğinin B3LYP(DMSO) ve HF(DMSO) yöntemleriyle deneysel ve teorik

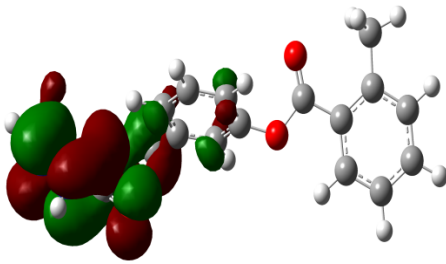
^{13}C -NMR ve ^1H -NMR kimyasal kayma değerlerinin karşılaştırılması



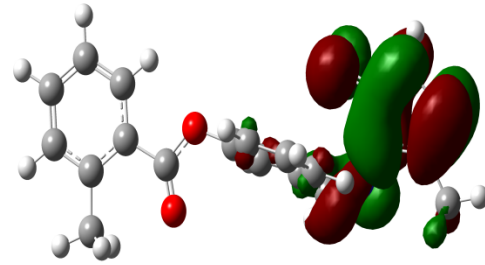
E_{LUMO} (B3LYP) : -0.19198 Hartree



E_{LUMO} (HF) : -0.18892 Hartree



E_{HOMO} (B3LYP) :-0.28033 Hartree



E_{HOMO} (HF) : -0.28500 Hartree

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

Tablo 5. 1 Bileşiğin atomlarının B3LYP ve HF'ye göre hesaplanan elektronik özellikleri

	B3LYP	HF
I; İyonlaşma Potansiyeli	0.28033 Hartree	0.28500 Hartree
A; Elektron İlgisi	0.19198 Hartree	0.18892 Hartree
η ; Moleküler Sertlik	0.04417 Hartree	0.04804 Hartree
S; Moleküler Yumuşaklık	11.32 Hartree	10.41 Hartree
χ ; elektronegatiflik	0.23616 Hartree	0.23696 Hartree
Toplam Enerji	-1298.06 a.u.	-1305.72 a.u.

SONUÇ

3-metil-4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on (**1**) bileşiğinin geometrik, spektroskopik ve elektronik özellikleri teorik olarak B3LYP/6-311G(d) ve HF/6-311G(d) method ve temel setleri kullanılarak incelenmiştir. Elde edilen minimum enerjili geometrik yapıdan, molekülün bağ uzunlukları ve bağ açıları belirlenmiştir. Molekülün optimize yapısı kullanılarak titreşim frekansları hesaplandı ve deneysel verilerle mukayese edildi. Yapılan geometri optimizasyonuna ¹H-NMR ve ¹³C-NMR kaymaları GIAO NMR yaklaşımı

kullanılarak hesaplanmış ve deneysel değerler ile mukayese edilerek iyi bir uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Daha sonra, molekül için öncü moleküler orbital enerjileri ve toplam enerjileri hesaplanmıştır. HOMO-LUMO enerji farklarına ve bu enerjilerden moleküler parametreler (I; İyonlaşma potansiyeli, A; elektron ilgisi, η ; moleküler sertlik, S; ve moleküler yumuşaklık ve χ ; elektronegatiflik) değerleri belirlenmiştir.

KAYNAKLAR

- Apaydın F 1991.** Magnetik Rezonans, Hacettepe Üniversitesi, 3; 6-8.
- Dennington R, Keith T, Millam J 2009.** GaussView, Version 5, Semichem Inc., Shawnee Mission KS.
- Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Scalmani G, Barone V, Mennucci B, Petersson GA, Nakatsuji H, Caricato M, Li X, Hratchian HP, Izmaylov AF, Bloino J, Zheng G, Sonnenberg JL, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Vreven T, Montgomery JA, Vreven T Jr, Peralta J E, Ogliaro F, Bearpark M, Heyd J J, Brothers E, Kudin N, Staroverov VN, Kobayashi R, Normand J, Raghavachari K, Rendell A, Burant J C, Iyengar SS, Tomasi J, Cossi M, Rega N, Millam JM, Klene M, Knox J E, Cross JB, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski W, Martin LR, Morokuma K, Zakrzewski VG, Voth GA, Salvador P, Dannenberg JJ, Dapprich S, Daniels AD, Farkas O, Foresman JB, Ortiz JV, Cioslowski J and Fox D J 2009.** Gaussian Inc., (Wallingford, CT).
- Gökçe H, Bahçeli S, Akyıldırım O, Yüksek H, Gürsoy Kol Ö (2013).** The Syntheses, Molecular Structures, Spectroscopic Properties (IR, Micro-Raman, NMR and UV-vis) and DFT Calculations of Antioxidant 3-alkyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Molecules. Letters in Organic Chemistry, 10; 395-441.
- Gökçe H, Akyıldırım O, Bahçeli S, Yüksek H, Gürsoy Kol O (2014).** The 1-acetyl-3-methyl-4-[3-methoxy-4-(4-methylbenzoxy)benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Molecule Investigated by a Joint Spectroscopic and Quantum Chemical

Calculations Journal of Molecular Structure, 1056-1057; 273-284. Shifts. Magnetic Resonance in Chemistry, 43; 585-587.

Jensen F 1999. Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd., 26-38.

Merrick JP, Moran D, Radom L 2007. An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. Journal of Physical Chemistry A, 111 (45); 11683-11700

Ulufur S 2014. “Bazı yeni 4-[3-(2-metilbenzoksi)-benzilidenamino]-4,5-dihidro-1*H*-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması ve bazı özelliklerinin incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kars.

Yüksek H, Gürsoy Ö, Çakmak İ, Alkan M (2005a). Synthesis and GIAO NMR Calculation for Some New 4,5-Dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical

Yüksek H, Çakmak İ, Sadi S, Alkan M (2005b). Synthesis and GIAO NMR Calculations for Some Novel 4-Heteroarylidenamino-4,5-dihydro-1*H*-1,2,4-triazol-5-one Derivatives: Comparison of Theoretical and Experimental ¹H and ¹³C Chemical Shifts. International Journal of Molecular Sciences, 6; 219-229.