

Fenilgliksim Molekülünün Titreşimlerinin Analizi*

Zahide TOSUN

Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Konya

Özet: Bu çalışmada fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen titreşim frekansları ile teorik olarak hesaplanmış titreşim frekanslarının uyumu incelenmiştir. Fenilgliksim molekülünün geometri optimizasyonu ve titreşim frekansı hesaplamaları *ab initio* metotları kullanılarak yapılmıştır. Teorik hesaplamalarda DFT-B3LYP metoduyla 6-311++G(d,p) ve 6-31 G(d) baz setleri, HF metoduyla 6-31 G(d) baz seti kullanılmıştır. DFT-B3LYP metoduyla kullanılan 6-311++G(d,p) baz setinin fenilgliksim molekülünün titreşim frekansı hesabında en iyi performansı sergilediği bulunmuştur.

Anahtar Kelimeler: Titreşim Spektroskopisi, Frekans hesaplamaları, *ab initio* metotları

Vibrational Analysis of Phenylglyoxime Molecule

Abstract: In this study, the agreement between the experimental and the calculated vibrational frequencies of phenylglyoxime molecule was investigated. The geometrical optimization and vibrational frequency calculations of this molecule were carried out by using *ab initio* methods. 6-31G(d) and 6-311++G(d,p) basis sets were used with DFT-B3LYP method and 6-31 G(d) basis set was used with HF method for theoretical calculations. It was found that DFT-B3LYP method with 6-311++G(d,p) basis set is the most successful procedure for vibrational frequency calculations of phenylglyoxime molecule.

Key Words: Vibrational spectroscopy, Frequency calculations, *ab initio* methods

Giriş

Infrared (IR) spektroskopisinde moleküllerdeki çeşitli bağların titreşim frekansları ölçülür ve moleküldeki fonksiyonel gruplar hakkında bilgi edinilebilir. Moleküllerin titreşim frekanslarını teorik olarak hesaplamak da mümkündür [1-8]. Fenilgliksim molekülü bir oksim bileşimidir. Oksimler aldehit ve ketonların hidroksilaminle reaksiyonları sonunda oluşan, yapısında karbon-azot çift bağı taşıyan bileşiklerdir. Oksimler şelat oluşturma, biyolojik olarak parçalanabilme, oksijen tutma özelliklerine sahip olup, bu bileşiklerin ve komplekslerinin endüstriyel alanda ve tıp alanında uygulamaları mevcuttur [9].

Bu çalışmada fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen titreşim frekansları ile çeşitli *ab initio* metotları kullanılarak hesaplanmış ve düzeltme çarpanları kullanılarak yeniden düzenlenmiş titreşim frekansları karşılaştırılmıştır. Sonuçta düzenlenmiş titreşim frekanslarının deneyle daha iyi uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

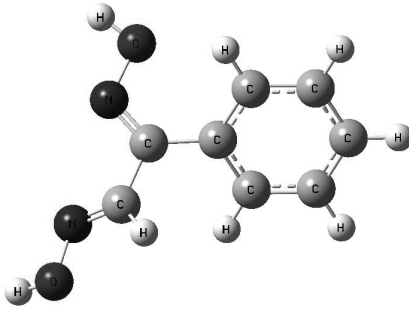
Materyal ve Metot

Bu çalışmada kullanılan numunelerin deneysel titreşim spektrumu S.Ü. Fen Fakültesi Kimya Bölümünde kurulu bulunan 4 cm^{-1} spektral çözünürlüğe sahip Perkin-Elmer Spektrum 100 FT-IR spektrometresinden alınmıştır. Numunenin önce nemi alınmış ve KBr kullanılarak çözünmüştür. Ardından disk haline getirilen numunenin $400\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$ aralığında titreşim spektrumu alınmıştır.

* Bu makale, Yüksek Lisans tezinin bir parçasıdır.
zahidetsn@selcuk.edu.tr

Geometri optimizasyonu moleküllerin kararlı halinin bilinmesini sağlar ve frekans hesaplamalarından önce molekülün muhakkak geometri optimizasyonu yapılmalıdır. Fenilgliksim molekülünün geometri optimizasyonu ve frekans hesaplamaları Gaussian 03 programı [10] yardımıyla *ab initio* metotlarından olan DFT(Density Functional Theory) ve HF (Hartree Fock) metotları kullanılarak yapılmıştır. HF metodu 6-31G(d) baz setiyle, DFT metodu ise 6-31G(d) ve 6-311++ G(d,p) baz setleriyle kullanılmıştır. Teorik hesaplamalarda kullanılan baz setinin sonlu oluşu ve titreşim hareketlerindeki anharmoniklik etkisinin göz ardı edilmesi nedeniyle teorik olarak hesaplanan frekanslar deneysel olarak ölçülen frekanslardan daha büyük çıkmaktadır. Bu nedenle ölçülen ve hesaplanan frekansların uyumu için SQM (Scaled Quantum Mechanical) metodu ve en küçük kareler yöntemi gibi başlıca yöntemler kullanılarak elde edilmiş olan düzeltme çarpanları kullanılır [11-14]. Bu çalışmada düzeltme çarpanları kaynak [14,15] den alınmıştır. Düzeltme çarpanlarının hesaplanan frekanslara getirdiği düzeltmenin incelenmesi amacıyla hem hesaplanan frekansların hemde düzenlenen frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslara göre grafikleri çizilmiştir.

Ayrıca düzenlenen frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslardan sapmaları hesaplanmış, bu sapmaların karelerinin toplamı hesaplama yapılan frekans sayısına bölünmüş ve karekökü alınarak ortalama karekök hataları (r_{rms}) bulunmuştur. Bu değerler vasıtasıyla kullanılan metotların performansı karşılaştırılmıştır.



Fenilgliksim molekülünün geometrik yapısı Şekil 1'de gösterilmiştir. Bu molekülün DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) ile hesaplanmış frekansları ve molekülün bu frekanslardaki titreşim hareketleri Tablo 1'de; teorik olarak hesaplanan frekanslar ve bu frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslardan sapması Tablo 2 ve Tablo 3'de verilmiştir.

Şekil 1. Fenilgliksim molekülünün geometrik yapısı

Tablo 1. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen frekansları ve DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) ile hesaplanmış frekanslarına karşılık gelen titreşim hareketleri.

i	$\bar{\nu}_i^a$ (cm^{-1})	$\bar{\nu}_i^b$ (cm^{-1})	$\bar{\nu}_i^c$ (cm^{-1})	Titreşim Hareketleri ^d
1		38	37	τ (CCCN)
2		82	80	τ (NCCN)
3		99	96	$\gamma_{halka} + \delta$ (CCC)
4		163	158	γ (NO)+ $\gamma_{halka} + \gamma$ (CC)
5		180	175	γ (CC)+ γ (CH) + δ (CCN)
6		222	215	γ (CC) + γ (NO) + τ (NCCN) + γ_{halka}
7		292	283	$\gamma_{halka} + \delta$ (CCC) + δ (CNO)
8		330	320	δ (CCC) + γ (CC) + τ (NCCN) + δ_{halka}
9		368	357	χ_w (NOH)+ γ (CN) + γ (CC)
10		411	399	γ_{halka}
11		427	414	$\gamma_{halka} + \gamma$ (OH)+ δ (CNO)
12		441	428	γ (OH) + δ (CCH)

Tablo 1'in devamı

i	$\bar{\nu}_i^a$ (cm ⁻¹)	$\bar{\nu}_i^b$ (cm ⁻¹)	$\bar{\nu}_i^c$ (cm ⁻¹)	Titreşim Hareketleri ^d
13	477	462	448	$\gamma(\text{OH}) + \gamma_{\text{halka}}$
14	492	482	468	$\gamma_{\text{halka}} + \gamma(\text{OH})$
15	548	558	541	$\gamma_{\text{halka}} + \delta(\text{CCC}) + \delta(\text{CNO})$
16	610	631	612	$\delta_{\text{halka}} + \nu_{\text{halka}}$
17	640	659	639	$\gamma_{\text{halka}} + \gamma(\text{CC}) + \gamma(\text{CN}) + \gamma(\text{OH})$
18	670	707	686	$\gamma(\text{CH}) + \gamma(\text{CC})$
19	713	725	703	$\delta_{\text{halka}} + \nu_{\text{halka}} + \nu(\text{CC}) + \delta(\text{CNO})$
20	760	786	762	$\gamma(\text{CH}) \gamma(\text{CC})$
21	806	814	790	$\delta_{\text{halka}} + \nu_{\text{halka}} + \delta(\text{CCH}) + \delta(\text{CNO}) + \delta(\text{CCN})$
22		857	831	$\gamma(\text{CH})$
23		939	911	$\gamma(\text{CH})$
24	941	955	926	$\gamma(\text{CH})$
25	953	977	948	$\nu(\text{NO}) + \gamma(\text{CH})$
26		990	960	$\gamma(\text{CH})$
27		1006	976	$\gamma(\text{CH})$
28	997	1013	983	$\nu_{\text{halka}} + \nu(\text{NO}) + \gamma(\text{CH})$
29		1017	986	$\delta_{\text{halka}} + \nu_{\text{halka}} + \nu(\text{NO})$
30		1050	1019	$\nu_{\text{halka}} + \delta(\text{CCH})$
31	1076	1100	1067	$\nu_{\text{halka}} + \delta(\text{CCH})$
32		1114	1081	$\nu_{\text{halka}} + \delta(\text{CCH}) + \delta(\text{NOH})$
33	1105	1185	1149	$\delta(\text{CCH})$
34		1209	1173	$\delta(\text{CCH})$
35		1264	1226	$\delta(\text{CCH}) + \delta_{\text{halka}} + \nu_{\text{halka}} + \nu(\text{CC})$
36	1262	1289	1250	$\delta(\text{NOH}) + \delta(\text{NCH}) + \delta(\text{CCH})$
37	1289	1327	1287	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}} + \delta(\text{NOH})$
38		1358	1317	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}} + \delta(\text{NOH})$
39		1380	1338	$\delta(\text{NOH}) + \delta(\text{CCH})$
40		1439	1396	$\nu(\text{CC}) + \delta(\text{CCH}) + \delta(\text{NOH}) + \delta(\text{NCH})$
41	1441	1479	1435	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}} + \delta(\text{NOH}) + \nu(\text{CC})$
42	1462	1525	1479	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}}$
43	1499	1617	1568	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}}$
44	1578	1640	1591	$\delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}} + \nu(\text{CC})$
45	1620	1644	1595	$\nu(\text{CN}) + \nu(\text{CC}) + \delta(\text{CCH}) + \nu_{\text{halka}}$
46		1704	1653	$\nu(\text{CN})$
47	2884	3105	3012	$\nu(\text{CH})$
48	3013	3164	3069	$\nu(\text{CH})$
49		3172	3077	$\nu(\text{CH})$
50	3060	3181	3086	$\nu(\text{CH})$
51		3191	3095	$\nu(\text{CH})$
52	3262	3218	3121	$\nu(\text{CH})$
53		3826	3711	$\nu(\text{CH})$
54	3708	3828	3713	$\nu(\text{OH})$

Gösterim: ν , simetrik gerilme; γ , düzlem dışı bükülme; τ , bükülme; δ , düzlemde makaslama hareketi; γ , düzlem dışı sallanma hareketi, ^a Deneysel olarak ölçülmüş frekanslar, ^b DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) ile hesaplanmış frekanslar, ^c DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) ile hesaplanmış ve 0,97 ile düzenlenmiş frekanslar

Tablo 2. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen titreşim frekanslarına karşılık gelen DFT-B3LYP/6-311++ G(d,p) ve DFT-B3LYP/ 6-31G(d) metot ve baz setleriyle hesaplanmış frekanslar ve hesaplanan frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslardan sapması.

i	Deneysel Frekanslar (cm^{-1})	DFT-B3LYP/6-311++ G(d,p)	0,97 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms	Deneysel Frekanslar (cm^{-1})	DFT-B3LYP/6-31 G(d)	0,97 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms
1		38	37		43,87		43	41		48,8
2		82	80				87	84		
3		99	96				101	97		
4		163	158				160	154		
5		180	175				186	179		
6		222	215				224	215		
7		292	283				296	285		
8		330	320				331	318		
9		368	357				359	345		
10		411	399				415	399		
11		427	414				427	411		
12		441	428				452	435		
13	477	462	448	-29		477	461	443	-34	
14	492	482	468	-24		492	483	464	-28	
15	548	558	541	-7		548	557	535	-13	
16	610	631	612	2		610	632	608	-2	
17	640	659	639	-1		640	659	634	-6	
18	670	707	686	16		670	711	684	14	
19	713	725	703	-10		713	725	697	-16	
20	760	786	762	2		760	789	759	-1	
21	806	814	790	-16		806	821	789	-17	
22		857	831				863	830		
23		939	911				941	905		
24	941	955	926	-15		941	961	924	-17	
25	953	977	948	-5			977	939		
26		990	960			953	997	959	6	
27		1006	976				1003	964		
28	997	1013	983	-14			1018	979		
29		1017	986			997	1035	995	-2	
30		1050	1019				1059	1018		
31	1076	1100	1067	-9		1076	1109	1066	-10	
32		1114	1081				1125	1082		

Tablo 2'nin devamı

i	Deneysel Frekanslar (cm^{-1})	DFT- B3LYP/ 6-311++ G(d,p)	0,97 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms	Deneysel Frekanslar (cm^{-1})	DFT- B3LYP/ 6-31 G(d)	0,97 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms
33	1105	1185	1149	44		1105	1195	1149	44	
34		1209	1173				1220	1173		
35		1264	1226				1277	1228		
36	1262	1289	1250	-12		1262	1311	1260	-2	
37	1289	1327	1287	-2	43,87	1289	1347	1295	6	48,8
38		1358	1317				1371	1318		
39		1380	1338				1408	1354		
40		1439	1396				1466	1409		
41	1441	1479	1435	-6		1441	1498	1440	-1	
42	1462	1525	1479	17		1462	1544	1484	22	
43	1499	1617	1568	69		1499	1636	1573	74	
44	1578	1640	1591	13			1654	1590		
45	1620	1644	1595	25		1578	1662	1598	20	
46		1704	1653			1620	1716	1650	30	
47	2884	3105	3012	128		2884	3137	3016	132	
48	3013	3164	3069	56		3013	3184	3061	48	
49		3172	3077				3192	3069		
50	3060	3181	3086	26		3060	3201	3077	17	
51		3191	3095				3211	3087		
52	3262	3218	3121	-141		3262	3248	3123	-139	
53		3826	3711				3749	3604		
54	3708	3828	3713	5		3708	3753	3608	-100	

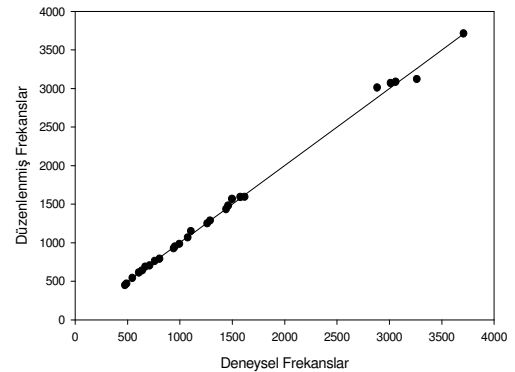
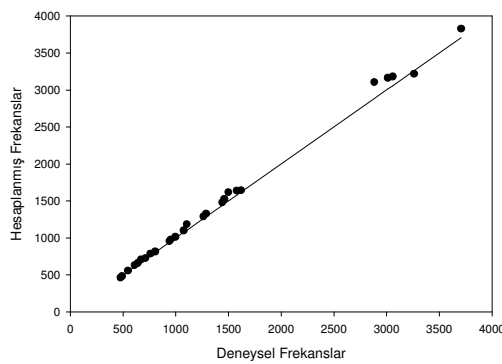
Tablo 3. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen titreşim frekanslarına karşılık gelen HF/6-31G(d) metot ve baz setiyle hesaplanmış frekanslar ve hesaplanan frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslardan sapması.

i	Deneysel Frekanslar (cm^{-1})	HF 6-31G(d)	0,8953 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms
1		44	39		52,13
2		76	68		
3		109	98		
4		182	163		
5		189	169		
6		242	217		
7		311	278		
8		354	317		
9		401	359		
10		415	372		
11		446	399		
12		453	406		
13	477	473	423	-54	
14	492	518	464	-28	
15	548	606	543	-5	
16	610	676	605	-5	
17	640	721	646	6	
18	670	776	695	25	
19	713	784	702	-11	
20	760	867	776	16	
21	806	903	808	2	
22		961	860		
23		1056	945		
24	941	1082	969	28	
25		1091	977		
26		1108	992		
27		1124	1006		
28		1130	1012		
29	953	1144	1024	71	
30	997	1174	1051	54	
31	1076	1186	1062	-14	
32		1211	1084		
33		1227	1099		
34	1105	1307	1170	65	
35		1334	1194		
36		1389	1244		
37	1262	1441	1290	28	
38		1480	1325		
39	1289	1545	1383	94	
40		1598	1431		

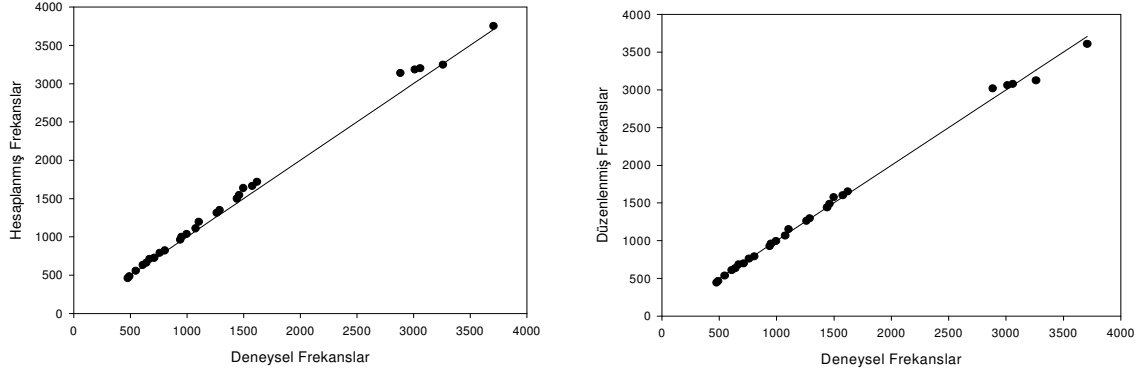
Tablo 3'ün devamı

i	DeneySEL Frekanslar(cm^{-1})	HF 6- 31G(d)	0,8953 ile düzenlenmiş	$\bar{\nu}_{düzen} - \bar{\nu}_{deney}$	rms
41	1441	1618	1449	8	
42	1462	1672	1497	35	
43	1499	1781	1595	96	
44	1578	1811	1621	43	
45		1926	1724		
46	1620	1953	1749	129	
47	2884	3339	2989	105	
48	3013	3358	3006	-7	
49		3368	3015		52,13
50	3060	3378	3024	-36	
51		3390	3035		
52	3262	3416	3058		
53		4124	3692		
54	3708	4126	3694	-14	

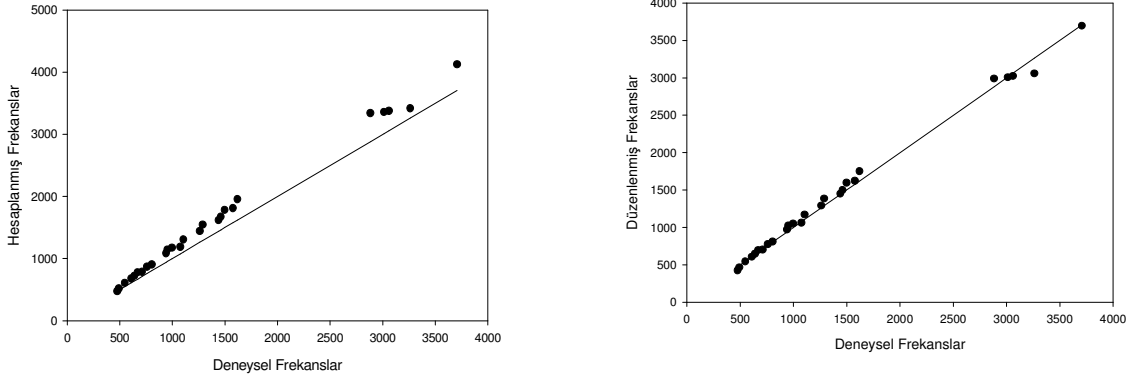
Fenilgliksim molekülünde 953 cm^{-1} 'deki N-O gerilme titreşimi teorik olarak hesaplanmış spektrumda 948 cm^{-1} , 959 cm^{-1} ve 1024 cm^{-1} 'de; 1289 cm^{-1} 'deki NOH makaslama titreşimi 1287 cm^{-1} , 1295 cm^{-1} ve 1383 cm^{-1} 'de; $1441\text{-}1578\text{ cm}^{-1}$ aralığındaki benzen halkasındaki C=C gerilme titreşimleri $1435\text{-}1591\text{ cm}^{-1}$, $1440\text{-}1598\text{ cm}^{-1}$ ve $1449\text{-}1621\text{ cm}^{-1}$ 'de; 1620 cm^{-1} 'deki C=N titreşimi 1595 cm^{-1} , 1650 cm^{-1} ve 1749 cm^{-1} 'de; 2884 cm^{-1} 'deki alifatik C-H titreşimi 3012 cm^{-1} , 3016 cm^{-1} ve 2989 cm^{-1} 'de gözlenmiştir.



Şekil 2. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen frekanslarının DFT B3LYP/6-311++G(d,p) ile hesaplanmış frekanslara karşı çizilen grafikleri.



Şekil 3. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen frekanslarının DFT-B3LYP/6-31G(d) ile hesaplanmış frekanslara karşı çizilen grafikleri.



Şekil 4. Fenilgliksim molekülünün deneysel olarak ölçülen frekanslarının HF /6-31G(d) ile hesaplanmış frekanslara karşı çizilen grafikleri.

Sonuçlar ve Tartışma

Hesaplanan titreşim frekanslarıyla deneysel olarak ölçülen frekansların uyumunda düzeltme çarpanlarının etkisini incelemek amacıyla hem ham frekansların hemde düzenlenmiş frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslara karşı grafikleri çizilmiş ve düzenlenmiş frekansların daha iyi sonuç verdiği bulunmuştur. Titreşim frekansı hesaplamalarında kullanılan metot ve baz setlerinin performansını incelemek amacıyla düzenlenmiş frekansların deneysel olarak ölçülen frekanslardan sapmalarının ortalama karekök hataları (rms) hesaplanmış ve fenilgliksim molekülü için 6-311++G(d,p) baz setiyle kullanılan DFT-B3LYP metodunun titreşim frekansı hesabında en iyi performansı sergilediği görülmüştür. Aynı zamanda frekans hesabında DFT metoduyla kullanılan 6-31G(d) baz seti HF metoduyla kullanılan 6-31 G(d) baz setinden daha iyi sonuçlar vermiştir. Bunun nedeni HF metodunun elektron korelasyon etkilerini içermemesidir. Hatta DFT-B3LYP metoduyla kullanılan 6-311++G(d,p) baz setiyle hesaplanan frekansların düzenlenmeden dahi kullanılabilceği çizilen grafiklerden (Şekil 2-4) görülebilir. Zaten bu metot ve baz seti için kullanılan düzeltme çarpanı 0,970 dir . Bu değer ise 1 e çok yakındır.

Kaynaklar

- [1] Pulay, P., Fogarasi, G., Zhou, X., Taylor, P.W., **Ab initio prediction of vibrational spectra: A database approach**, *Vib. Spectrosc.*, 1, 159-165 (1990)
- [2] Zhou X., Pulay P., Hargitai R., Stirling A., Mink J., **Complete assignment of vibrational spectra of 1,5-cyclooctadiene- a theoretical and experimental infrared and Raman study**, *Spectrochim. Acta, Part A*, 49, 257-270 (1993)
- [3] Dimitrova, Y., Tsenov, J.A., **Ab initio and DFT studies of the structure, stability and vibrational spectrum of the hydrogen-bonded (CH₃)₂O...HONO₂ complex**, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 683, 65- 70 (2004)
- [4] Dimitrova, Y., **Theoretical study of the structures, stability and vibrational spectra of the nitrous acid complexes with CH₄**, *Spectrochim. Acta Part A*, 60, 2163-2170 (2004)
- [5] Kalincsak, F., Pongor, G., **An experimental and theoretical study of vibrational spectra of picolinamide, nicotinamide, and isonicotinamide**, *Spectrochim. Acta Part A*, 58, 99-1011 (2002)
- [6] Ozel, A.E., Akyuz, S., **Vibrational Assignment, ab-initio Calculation and Normal Coordinate Analysis of 2,2'-Biquinoline**, *J. Struct. Chem.*, 46, 1077-1081 (2005)
- [7] Krishnakumar, V., Surumbarkuzhali, N., **Analysis of structure and vibrational spectra of 2,5-dihydroxybenzoic acid based on density functional theory calculations**, *J. Raman Spectrosc.*, 41, 473-478 (2009)
- [8] Kuznetsov, M. L., Dement'ev, A. I., Nazarov, A. **A. Theoretical analysis of the vibrational spectra and the nature of the coordination bond of platinum nitrile complexes**, *Russ J Inorg Chem*, 50, 731-739 (2005)
- [9] Singh, R.B., Garg, B.S., Singh, R.P., **Oximes as Spectrophotometric Reagents-A Review**, *Tetrahedron*, 26, 425-44 (1979)
- [10] Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Montgomery Jr., J.A., Vreven, T., Kudin, K.N., Burant, J.C., Millam, J.M., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Barone, V., Mennucci, B., Cossi, M., Scalmani, G., Rega, N., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Klene, M., Li, X., Knox, J.E., Hratchian, H.P., Cross, J.B., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A.J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J.W., Ayala, P.Y., Morokuma, K., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Zakrzewski, V.G., Dapprich, S., Daniels, A.D., Strain, M.C., Farkas, O., Malick, D.K., Rabuck, A.D., Raghavachari, K., Foresman, J.B., Ortiz, J.V., Cui, Q., Baboul, A.G., Clifford, S., Cioslowski, J., Stefanov, B.B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I., Martin, R.L., Fox, D.J., Keith, T., Al-Laham, M.A., Peng, C.Y., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Gill, P.M.W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M.W., Gonzalez, C., Pople, J.A., **Gaussian 03, Revision E.01**. Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA.(2003)
- [11] Ystenes, M., **Scaled quantum mechanical (SQM) vibrational analysis of monomeric silicon dioxide and its dimer 2,4-dioxo cyclodisiloxane Si₂O₄**, *Spectrochim. Acta, Part*, 50, 219-224 (1994)
- [12] Flament, J. P., Rougeau, N., Tadjeddine, M., **Vibrational frequencies of simple sulfur oxides: ab initio SQM and MCSCF calculations; comparison**, *Chem. Phys.*, 167, 53-60 (1992)
- [13] Ozel, A.E., Kecel, S. Akyuz, S., **Vibrational analysis and quantum chemical calculations of 2,2'- bipyridine Zinc(II) halide complexes**, *J. Mol. Struct.*, 834-836 ,548-554 (2007)

- [14] Scott A.P., Radom, L., **Harmonic Vibrational Frequencies: An Evaluation of Hartree–Fock, Møller–Plesset, Quadratic Configuration Interaction, Density Functional Theory, and Semiempirical Scale Factors**, J. Phys. Chem., 100 , 16502–16513 (1996)
- [15] Akalın, E., Yılmaz, A, Akyüz, S., **Vibrational Analysis of Isonicotinamide**, J. Mol. Struct., 744-747, 881-886 (2005)