



# Amin Grubu İçeren Oksim Temelli Bileşiğın Kuantum Kimyasal Hesaplanması ve Deneysel Sonuçlarla Karşılaştırma

Güvenç Görgülü<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Fen Bilgisi Eğitimi, Burdur, Turkey

(İlk Geliş Tarihi 17 Temmuz 2018 ve Kabul Tarihi 24 Ekim 2018)

(DOI: 10.31590/ejosat.444458)

## Özet

Sentezlenmiş ve karakterizasyonu yapılmış olan bifenilaminoketooksim (BAKO) bileşiğının DFT çalışmaları B3LYP fonksiyoneli 6-31G(d,p) seti kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmalar kapsamında titreşimsel dalgasayıları, izotropik kimyasal kaymalar (1H ve 13C-NMR), elektronik geçiş absorpsiyon dalgaboyları, öncül moleküler orbitaller (HOMO ve LUMO), moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) özellikleri ve potansiyel enerji yüzey taraması (PES) hesaplanmış ve grafikselleştirilmiştir. Teorik çalışmalardan elde edilen bilgiler molekülün ileri karakterizasyonu için kullanılmıştır. Ayrıca, bulunan değerler deneysel sonuçlarla karşılaştırılarak uyum içinde oldukları görülmüştür.

**Anahtar kelimeler:** Oksim, DFT, Kuantum Kimyasal Hesaplama.

## Quantum Chemical Calculations of an Amine Containing Oxime Based Compound and Comparison with Experimental Results

### Abstract

DFT studies were performed for a previously synthesized and characterized biphenylaminoketooxime (BAKO) compound. B3LYP functional was applied using 6-31G(d,p) basis set for DFT. In the frame of DFT studies; vibrational frequencies, isotropic chemical shifts (1H and 13C-NMR), electronic transition absorption wavelengths, frontier molecular orbitals (HOMO and LUMO), molecular electrostatic potentials (MEP) and potential energy surface (PES) map were calculated and plotted. Results obtained from the calculations were used for the further characterization of the molecules. In addition, calculated values were confirmed by comparing the experimental results, which are in accordance.

**Key words:** Oxime, DFT, Quantum Chemical Calculations

<sup>1</sup> Sorumlu Yazar: Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Fen Bilgisi Eğitimi, Burdur, Turkey, [guvencgorgulu@mehmetakif.edu.tr](mailto:guvencgorgulu@mehmetakif.edu.tr)

## 1. Giriş

Oksim içeren bileşikler koordinasyon kapasitelerine [Lokhande ve ark., 2012] kimya, farmakoloji, biyoloji, biyokimya ve çevre alanlardaki uygulamalarına bağlı olarak yaygın biçimde sentezlenmekte ve karakterize edilmektedir (Ashani ve ark., 2010; Premužić ve ark., 2017). Doğal bir enzim, vücutta dağılım sorunları ve solüsyondaki kararsızlığı sebebiyle, ilaç olarak kullanılmadığı için doğal bileşikleri taklit eden sentetik bileşikler dizayn edilerek araştırılmaktadır (Dede ve ark., 2009; Gürsoy ve Smieško 2017). Teknolojik gelişimin mümkün kıldığı kimyasal hesaplamalar kimyasal bileşiklerin karakterizasyonunda önemli bir yer tutmakta ve gelinen noktada deneysel çalışmalarla paralel sonuçlar ortaya koymaktadır. Kimyasal hesaplamalar, deneysel sonuçlarla mukayese edilebilmesinin yanında, bileşiğin moleküler ve elektronik yapısı ile ilgili deneysel olarak elde edemediğimiz önemli bilgileri de vermektedir (Kodikara ve ark., 2018).

Bu çalışmada, daha önce sentezlenmiş ve karakterize edilmiş olan aminoketooksim 2-(bifenil-4-il)-N'-hidroksi-N-(2-hidroksi-5-nitrofenil)-2-oksoasetimitamit bileşiğinin (Görgülü ve ark., 2018) kuantum kimyasal hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Moleküle ait DFT çalışmaları B3LYP fonksiyoneli ve 6-31G(d,p) seti ile gerçekleştirilmiştir. DFT çalışmaları kapsamında titreşimsel dalgasayıları, izotropik kimyasal kaymalar ( $^1\text{H}$  ve  $^{13}\text{C}$ -NMR), elektronik geçiş absorpsiyon dalgaboyları, öncül moleküler orbitaller (HOMO, LUMO), moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) özellikleri ve potansiyel enerji yüzey taramaları (PES) çalışılmıştır.

## 2. Materyal ve Metod

Bifenil içeren aminoketooksim bileşiği (BAKO) daha önce grubumuz tarafından sentezlenerek karakterize edilmiş original bir bileşiktir. Bu çalışmada kullanılan deneysel veriler önceki yayından alınmıştır (Görgülü ve ark., 2018).

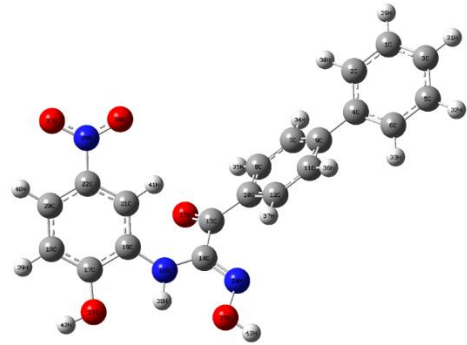
### 2.1. Kimyasal Hesaplamalar

Teorik çalışmalar için Gaussian 09, moleküllerin görselleştirilmesinde ise GaussView 5.0.9 paket programları kullanılmıştır (Frisch ve ark., 2009; Dennington ve ark., 2009). Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı (DFT) düzeyinde gerçekleştirilen geometri optimizasyon dosyaları diğer hesaplamaların giriş dosyası olarak programa tanıtılmıştır. Kimyasal hesaplamalarda Becke'nin üç parametrelili değişim fonksiyonu (B3) ile Lee–Yang–Parr korelasyon fonksiyonundan (LYP) oluşan B3LYP fonksiyoneli (Becke, 1988; Lee ve ark., 1988) ve 6-31G(d,p) temel seti kullanılmıştır. Minimum enerjili geometrik optimizasyonlar ve frekans hesaplamaları gaz fazında gerçekleştirilmiştir ve elde edilen verilerin deneysel verilerle uyumsuzluğu gidermek amacıyla 0,9627 düzeltme faktörü ile

çarpılmıştır (Merrick ve ark., 2007). UV-vis spektrumları ile HOMO ve LUMO enerjileri gibi elektronik özellikler TD-DFT (Zamana Bağlı-Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramı) Metodu B3LYP seviyesinde aynı temel set ile elde edilmiştir. Bileşiğin  $^1\text{H}$ - ve  $^{13}\text{C}$ -NMR hesaplamalarında GIAO metodu kullanılmıştır (Ditchfield, 1972; Wolinski ve ark., 1990)

## 3. Sonuçlar ve Tartışma

Bir aminoketooksim türevidir olan 2-(bifenil-4-il)-N'-hidroksi-N-(2-hidroksi-5-nitrofenil)-2-oksoasetimitamit bifenilden yola çıkılarak literatüre göre sentezlenmiştir (Görgülü ve ark., 2018). Molekülün optimizasyonu Yoğunluk Fonksiyoneli Kuramının B3LYP fonksiyoneli ve 6-31G(d,p) temel seti kullanılarak gaz fazında gerçekleştirilmiştir (Şekil 1).



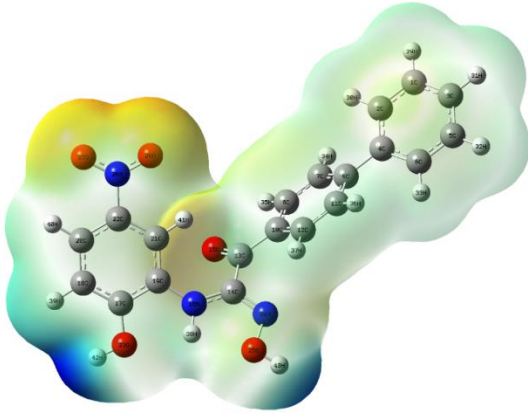
Şekil 1. BAKO bileşiğinin B3LYP fonksiyoneli ve 6-31G(d,p) temel seti kullanılarak gerçekleştirilmiş optimizasyonu

Molekülün bağ uzunlukları (Å), bağ açıları ( $^\circ$ ) ve dihedral açıları ( $^\circ$ ) Tablo 1'de verilmiştir. Bileşikteki en uzun bağı 1,517 Å ile alifatik karbonlar olan C13-C14 arasında bulunduğu, en kısa bağı ise yapıdaki karbonil grubunda bulunan C13-O15 atomları arasında kurulduğu görülmüştür (1,223 Å). Beklendiği gibi bileşikteki çift bağların tek bağlara oranla daha kısa olduğu gözlenmiştir. Bileşikteki hesaplanan bağ açıları incelendiğinde, atomların genellikle üçgen düzlem geometriyi tercih ettikleri ve bağ açılarının yaklaşık  $120^\circ$  olduğu belirlenmiştir. Bileşiğe ait en dar açının oksim grubunu oluşturan C14-N24-O25 atomları arasında yer aldığı görülmüştür. Dihedral açının  $0^\circ$  ve  $180^\circ$  ye yakın olması atomların aynı düzlemde bulunduğunu ifade etmektedir. Bifenil ve amin grubunda bulunan aromatik karbonlarla alifatik atomlar arasındaki dihedral açıların sırasıyla  $-15,7^\circ$  ve  $-20,3^\circ$  olduğu belirlenmiş olup bu molekül gruplarının yaklaşık olarak düzlemsel bir geometride olduğu söylenebilir.

Tablo 1. BAKO bileşiğinin B3LYP/6-31G(d,p) ile hesaplanmış bağ uzunlukları (Å), bağ açıları (°), dihedral açıları (°)

Bağ uzunlukları (Å)		Bağ açıları (°)		Dihedral Açıları (°)	
C4-C9	1,483	C12-C10-C13	123,9	C6-C4-C9-C11	37,1
C10-C13	1,486	C13-C14-N24	115,4	C12-C10-C13-C14	-15,7
C13-O15	1,223	C14-N24-O25	110,2	C21-C19-N16-C14	-20,3
C13-C14	1,517	O15-C13-C14	117,4		
C14-N24	1,297	C14-N16-C19	129,9		
N24-O25	1,413	C21-C19-N16	124,8		
C14-N16	1,373	C19-C17-O23	115,7		
N16-C19	1,395	C22-N26-O27	117,7		
C17-O23	1,364				
C22-N26	1,466				
N26-O27	1,233				

Bileşiklerin moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) diyagramları, kimyasal reaksiyonlardaki davranışlarını ve bağ polarlıklarını açıklamak için oldukça yararlıdır. Bu diyagramlarda kırmızı ve mavi bölgeler sırasıyla negatif ve pozitif alanları göstermektedir. BAKO bileşiğinin MEP diyagramı B3LYP/6-31G(d,p) ile hesaplanmış ve Şekil 2'de verilmiştir.

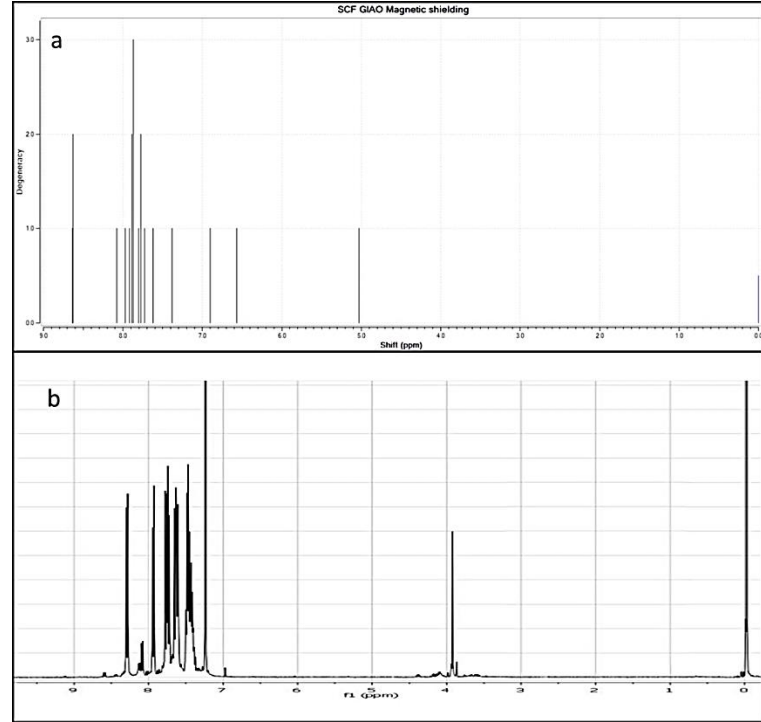


Şekil 2. BAKO bileşiğinin Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) diyagramı

Molekülün pozitif yük olarak en zengin olduğu bölge, fenolik oksijene bağlı protonun üzerinde bulunmaktadır. Diyagramdan, oksim protonunun üzerinde de pozitif yük olduğu görülmekle birlikte göreceli olarak fenolik protona nazaran daha azdır. Bu duruma fenol yapısında bulunan rezonans sebebiyle fenolik protonun daha asidik hale gelmesinin neden olduğu düşünülmektedir. Elektronegatifliği yüksek iki oksijen atomunun bulunduğu nitro grubu, molekülün en fazla negatif yük yoğunluğunun bulunduğu bölgeyi oluşturmaktadır.

Bileşiğin <sup>1</sup>H- ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumları B3LYP seviyesinde 6-31G(d,p) temel seti kullanarak ve çözücü olarak kloroform seçilerek hesaplanmış ve elde spektrumlar Şekil 3 ve 4'te deneysel spektrumlarla karşılaştırılmalı olarak verilmiştir. BAKO bileşiğinin oksim grubunda bulunan proton, deneysel <sup>1</sup>H-NMR spektrumunda 9,47 ppm'de tekli band olarak ortaya çıkarken bu band teorik hesaplamada daha yüksek bir alan olan 7,38 ppm'de gözlenmiştir. Oksim protonu alifatik zincir üzerinde bulunmakta ve teorik/deneysel karşılaştırmalarda en büyük fark bu protonda görülmüştür. Aromatik protonlara ait kimyasal

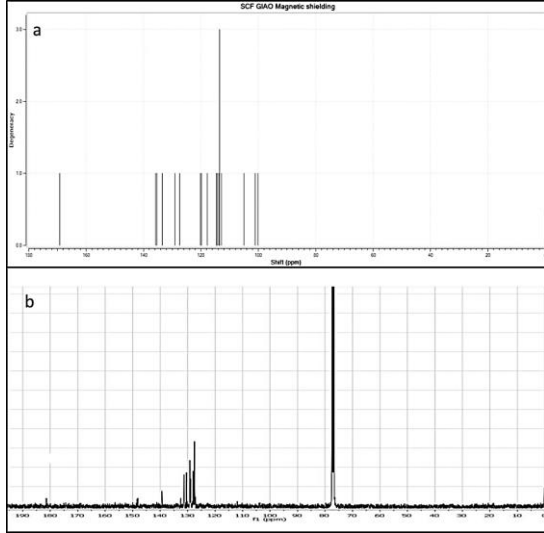
kayma değerlerinde ise teorik/deneysel sonuçlar arasında daha az bir fark gözlenmiştir.

Şekil 3. BAKO bileşiğine ait (a) hesaplanan, (b) deneysel <sup>1</sup>H-NMR spektrumları

Deneysel ve teorik sonuçlar açısından birbirleriyle en uyumlu kimyasal kayma değerleri, aromatik halkaya doğrudan bağlı fenolik proton için bulunmuştur (deneysel/teorik=6,74/6,57 ppm). NMR spektrumlarından elde edilen kimyasal kayma değerleri ise sırasıyla Tablo 2 ve 3'te görülmektedir.

Tablo 2. Bileşiğin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumlarındaki kimyasal kayma değerleri  $\delta(\text{ppm})$ 

$^1\text{H-NMR}$	O-H(oksım)	C-H(aromatik)	O-H(fenolik)	N-H
BAKO (Deneysel)	9,47 (s, 1H)	6,97-8,65 (m, 12H)	6,74 (s, 1H)	3,93 (s, 1H)
BAKO (Hesaplanan)	7,38	7,62-8,63	6,57	5,03

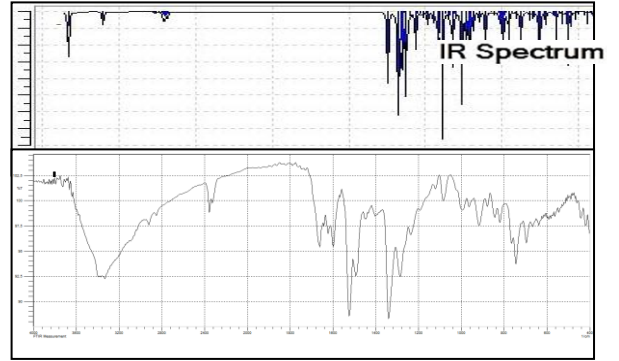
Şekil 4. BAKO bileşiğine ait (a) hesaplanan, (b) deneysel  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları

Bileşiğin deneysel ve hesaplanan  $^{13}\text{C-NMR}$  kimyasal kayma değerlerinde de birbirleriyle en uyumlu sonucun aromatik karbonlara ait olduğu görülmektedir. Alifatik halde bulunan oksim ve karbonil karbonlarına ait elde edilen deneysel ve teorik kimyasal kayma değerleri arasındaki fark, aromatik karbonlara göre daha yüksek bulunmuştur.

Tablo 3. Bileşiğin  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumlarındaki kimyasal kayma değerleri  $\delta(\text{ppm})$ 

$^{13}\text{C-NMR}$	C=O(karbonil)	C=N(oksım)	C(aromatik)
BAKO (Deneysel)	186,60	149,11	110,14-128,97
BAKO (Hesaplanan)	169,23	133,44	100,16-135,85

Bileşiğin FT-IR spektrumu aynı temel sette gaz fazında hesaplanmış ve elde edilen spektrum maddenin KBr ile alınmış spektrumu ile birlikte Şekil 5'te verilmiştir.



Şekil 5. BAKO bileşiğinin (a) hesaplanan, (b) deneysel FT-IR spektrumu

Bu spektrumlardan elde edilen karakteristik bandlar ise toplu olarak Tablo 4'de gösterilmiştir. Teorik olarak hesaplanan değerler, eğer belli bir ölçeklendirmeye tabi tutulmazsa, genellikle deneysel verilerden daha yüksek çıkmaktadır. Bu farklılığın sebebi olarak yapılan sistematik hatalar, bazı uyumsuzlukların hesaba katılmaması, kısmi de olsa hesaba dahil olan korelasyon enerjisinin hariç tutulabilmesi maliyetini düşürebilmek için temel setlere yerleştirilmiş varsayımlar olarak sıralanabilir. Deneysel verilerle olan bu uyumsuzluğu gidermek için elde edilen frekans değerleri 0,9627 düzeltme faktörü ile çarpılarak kullanılmıştır (Merrick ve ark., 2007). Tablo 4'teki değerler incelendiğinde, moleküldeki oksim grubunda yer alan O-H ve N-O bağlarına ait deneysel ve teorik gerilme titreşim değerlerinin (diğer gruplar göz önüne alındığında) çok yakın oldukları bulunmuştur. Deneysel ve teorik değerler arasındaki en büyük fark N-H ve fenolik O-H gruplarına ait sonuçlarda gözlenmiştir. Bu farkın ise N-H ve fenolik O-H gruplarının oluşturması muhtemel hidrojen bağlarından kaynaklandığı düşünülmektedir.

Tablo 4. BAKO bileşiğinin FT-IR spektrumundaki spesifik bandların frekans değerleri ( $\text{cm}^{-1}$ )

Bileşik	O-H (oksım)	O-H (fenol)	N-H	C=N	N-O	C-N
BAKO (Deneysel)	3083w	3597w	3327b	1604m	1395w	1523s
BAKO (Hesaplanan)	3083	3685	3466	1614	1393	1506

En yüksek enerjili dolu molekül orbitali (The highest occupied molecular orbital: HOMO) ve en düşük enerjili boş

molekül orbitali (The lowest unoccupied molecular orbital: LUMO) öncül moleküler orbitaller (frontier molecular orbitals:

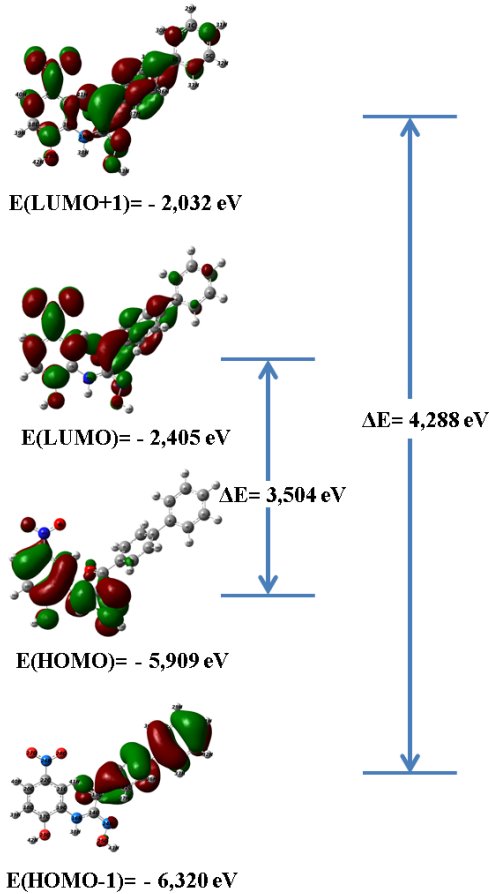
FMO) olarak adlandırılır. Moleküllerin kimyasal reaktivlik, kinetik kararlılık, polarize olabilmek, kimyasal sertlik ve yumuşaklık, aromatiklik ve elektronegatiflik gibi özellikleri

HOMO ve LUMO orbitalleri arasındaki enerji farklarının (gap) ölçülmesiyle tespit edilebilir (Eryılmaz ve ark., 2017).

Tablo 5. Deneysel ve hesaplanan elektron geçişleri, uyarılma enerjileri (eV), osilasyon güçleri (f) ve elektron geçişlerinde asıl katkıyı yapan orbitaller ve katkı yüzdeleri

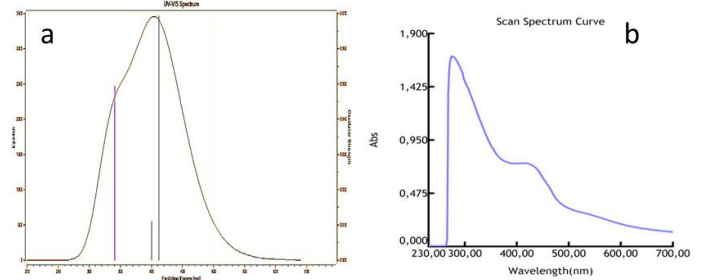
Elektron Geçişleri	Deneysel		Hesaplanan [B3LYP/6-31G(d,p)]			
	$\lambda$ (nm)	E (eV)	$\lambda$ (nm)	E (eV)	f	Öncü Elektron Geçişlerinde Asıl Katkı
$\pi \rightarrow \pi^*$ (benzen)	295	4,20	341	3,65	0,0495	H-1 $\rightarrow$ L (%96)
$\pi \rightarrow \pi^*$ (imin)	393	3,15	400	3,10	0,0111	H $\rightarrow$ L+1 (%94)
$n \rightarrow \pi^*$	431	2,88	412	3,01	0,0694	H $\rightarrow$ L (%94)

Bileşiğin HOMO ve LUMO orbitallerinin enerjileri için B3LYP fonksiyoneli ve 6-31G(d,p) temel seti kullanılmış ve aradaki enerji farkı +3,504 eV olarak bulunmuştur. Aradaki enerji farkı molekülün kararlı yapıda olduğunu göstermektedir. BAKO bileşiğinin HOMO orbitali molekülün daha aktif kısmı olan benzen, imin ve oksim gruplarında lokalize olurken, LUMO orbitali bu gruplara ek olarak bifenil üzerine de dağılmış durumdadır (Şekil 6).



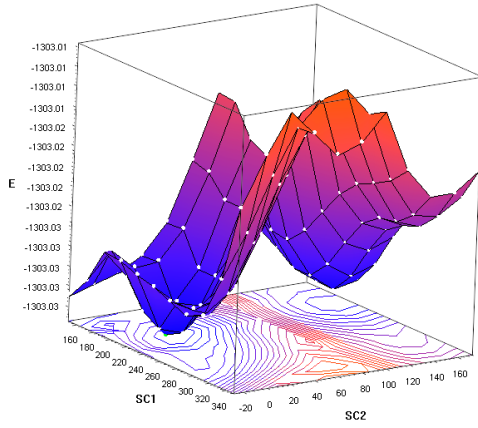
Şekil 6. HOMO ve LUMO orbitalleri için elde edilen moleküler orbital yüzeyleri ve enerji düzeyleri.

Bileşiğin etanolde alınan UV-vis spektrumunda 295, 393 ve 431 nm olmak üzere üç farklı band gözlenmiştir. Bu bandlar sırasıyla moleküldeki  $\pi \rightarrow \pi^*$  (benzen),  $\pi \rightarrow \pi^*$  (imin) ve  $n \rightarrow \pi^*$  geçişlerine aittir. Molekülün zamana bağlı yoğunluk fonksiyon teorisiyle (TD-DFT) yine aynı çözücünde hesaplanan UV-vis spektrumunda da osilasyon gücü (f) en küçük 0,0111 olan üç band elde edilmiştir (Şekil 7). Bileşikte en yüksek osilasyon gücüne sahip olan band  $n \rightarrow \pi^*$  geçişlerine ait, 412 nm'de şiddetli olarak gözlenenmiştir. Teorik olarak hesaplanan ve %94'lük katkıyla HOMO $\rightarrow$ LUMO arasındaki elektron aktarımına karşılık gelen bu geçişin enerji karşılığı 3,01 eV olarak hesaplanmıştır. Bileşiğin HOMO ve LUMO orbitalleri arasındaki enerji farkı +3,504 eV olarak bulunmuş olup bu değer bileşiğin UV-vis spektrumundaki geçişin enerji karşılığına yakındır. Ayrıca moleküle ait HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 orbitalleri arasındaki geçiş enerjisi 4,288 eV olarak bulunmuştur.



Şekil 7. BAKO bileşiğinin (a) hesaplanan, (b) deneysel UV-Vis absorpsiyon bantları

Potansiyel enerji yüzey diyagramları her bir molekülün enerji ve geometrisi arasındaki ilişkinin açıklanmasında değerli bilgiler vermektedir. Bileşiğin potansiyel enerji yüzey diyagramı yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak B3LYP seviyesinde ve 6-31G(d,p) temel seti ile C10-C13-C14-N16 ve C13-C14-C16-C19 dihedral açıların -180° ve +180° arasında 20°'lik aralıklarla taranarak gerçekleştirilmiştir (Şekil 8). BAKO molekülünün biri (E1) diğerinden (E2) daha düşük enerji düzeyinde bulunan iki tane minimum enerjiye sahip hali bulunmaktadır. E1'in enerji düzeyi -1303,04 a.u. (-35457,54 eV) iken E2'nin enerji düzeyi 1303,03 a.u. (-35457,27 eV) olarak hesaplanmıştır.



Current node [4,3] of 11x11. Molecule 36 of 121  
SC1 = 209.202, SC2 = 12.1221, E = -1303.04

Şekil 8. BAKO bileşiğinin Potansiyel Enerji Yüzey (PES) diyagramı

Bu çalışmada, grubumuz tarafından daha önce ligand olarak sentezlenmiş ve deneysel karakterizasyonu yapılmış olan 2-amino, 4-nitrofenol içeren bifenilketooksim bileşiğinin kuantum kimyasal hesaplamaları gerçekleştirilmiş ve moleküle ait atomik, elektronik, enerjetik, manyetik ve titreşimsel bilgiler deneysel sonuçlarla mukayese edilmiştir. Teorik veriler daha önce elde edilmiş olan deneysel sonuçlar ile oldukça uyumlu olup mevcut çalışma deneysel sonuçları teyit etmiştir. Deneysel sonuçlarla farklı çıkan sonuçların sebepleri açıklanmaya çalışılmıştır. Bunların başında molekülün atomik yapısından kaynaklı olarak bazı grupların yüksek elektronegatiflik içermesi teorik sonuçlarda sapmalara neden olabilmekte, kararlı gruplara ait teorik çalışmalardan daha tutarlı sonuçlar elde edilebilmektedir (Vivas-Reyes ve Aria, 2008). Yüksek elektronegatiflik diğer faktörlerle birlikte molekülün sertliğine katkı yapmakta, çalışmamızda olduğu gibi, molekül büyüdükçe deneysel ve teorik sonuçlar arasındaki korelasyon da azalmaktadır (Orsky ve Whitehead, 1987, Onoda ve ark., 2017).

## Kaynaklar

- Ashani Y., Silman I. 2010. Hydroxylamines and oximes: Biological properties and potential uses as therapeutic agents, John Wiley & Sons, Ltd.
- Becke A.D. 1988. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A* 38 (6), 3098-3100.
- Dede B., Karıpcın F., Cengiz M. 2009. Novel homo-and heteronuclear copper (II) complexes of tetradentate Schiff bases: Synthesis, characterization, solvent-extraction and catalase-like activity studies. *Journal of Hazardous Materials* 163 (2-3), 1148-1156.
- Ditchfield R. 1972. Molecular orbital theory of magnetic shielding and magnetic susceptibility. *The Journal of Chemical Physics* 56 (11), 5688-5691.
- Eryılmaz S., Gül M., İnkaya E. 2017. Synthesis, spectral characterization, theoretical analysis and antioxidant activities of aldol derivative isophorone structures. *Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi* 19 (3), 89-104.
- Gaussian 09, Revision, E.01. 2009. 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. Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.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 R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas Ö., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J., Gaussian Inc. Wallingford CT. Gaussian 09
- GaussView, Revision 5.0.9, Dennington R., Keith T.A., Millam J.M. 2009. Semichem Inc., Shawnee Mission, KS.
- Görgülü G., Çiçek B., Dede B. 2018. Synthesis and Characterization of a Novel Aminoketooxime Ligand and Enzymatic Efficiencies of Its Metal Complexes. *Acta Physica Polonica A* 133 (4), 244-249.
- Gürsoy O., Smieško M. 2017. Searching for bioactive conformations of drug-like ligands with current force fields: how good are we?. *Journal of Cheminformatics* 9 (1), 29.
- Kodikara M.S., Stranger R., Humphrey M.G. 2018. Computational studies of the nonlinear optical properties of organometallic complexes. *Coordination Chemistry Reviews* (In Press).
- Lee C., Yang W., Parr R.G. 1988. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B* 37 (2), 785-789.
- Lokhande R.S., Shevde P.P., Lele S.M. 2012. Analytical Method Development For Extractive Spectrophotometric Determination of Fe (II) as a Complex with bis [3-Hydroxyimino - 5- Methyl - Nmethyl]-2-imine (HIMMI). *RASAYAN Journal of Chemistry India* 5, 328-331.
- Merrick J.P., Moran D., Radom L. 2007. An evaluation of harmonic vibrational frequency scale factors, *Journal of Physical Chemistry A* 111, 11688-11700.
- Onoda J., Ondráček M., Jelinek P., Sugimoto Y. 2017. Electronegativity determination of individual surface atoms by atomic force microscopy. *Nature Communications* 8 (15155), 1-6.
- Orsky A.R., Whitehead M.A. 1987. Electronegativity in density functional theory: diatomic bond energies and hardness parameters." *Canadian Journal Of Chemistry* 65 (8), 1970-1979.
- Premužić D., Filarowski A., Holyńska M. 2017. Structure and properties of a new rigid tripodal oxime ligand. *Journal of Molecular Structure* 1136, 100-106.
- Vivas-Reyes R., Aria A. 2008. Evaluation of group electronegativities and hardness (softness) of group 14 elements and containing functional groups through density functional theory and correlation with NMR spectra data. *Eclética Química* 33 (3), 69-76.
- Wolinski K., Hinton J. F., Pulay P. 1990. Efficient implementation of the gauge-independent atomic orbital method for NMR chemical shift calculations. *Journal of The American Chemical Society* 112 (23), 8251-8260.