



Bazı Organik Elektrolüminesans 2-[3-(Metil/Etil/p-Metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dionlar'ın Yoğunluk Fonksiyon Teorisi ile Elektronik Özelliklerinin Belirlenmesi

Murat BEYTUR¹, Zeynep TURHAN², Haydar YÜKSEK³

Makalenin alanı: Kimya

Makale Bilgileri	Özet
Geliş Tarihi 05.12.2021	<p>Son zamanlarda bilim adamlarının ilgisini çeken 4,5-dihidro-1H-1,2,4-triazol-5-on türevlerinin potansiyel organik elektrolüminesans özellikleri tartışılmaktadır. Bu heterosiklik organik bileşiklerin elektronik özellikleri hesaplama yöntemleriyle incelenmiştir. Hesaplama işlemleri Windows işletim sistemlerinde çalışan yüksek performanslı sunucu sistemleri ile yapılmıştır. 2-[3-(metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dionların geometrileri GaussView 5.0 bilgisayar programı kullanılarak çizilmiştir. Teorik hesaplamalar Gaussian09W programı kullanılarak yapılmıştır. Daha sonra teorik hesaplamalarla optimize edilen moleküllerin HOMO-LUMO şekilleri elde edilmiştir. Her molekülün HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE) eV cinsinden hesaplanmıştır. Sonuçlar ilgili literatürden elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu çalışmada kullanılan DFT (Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi) yönteminin B3LYP 6-311G++(d,p) ve CAMB3LYP 6-311G++(d,p) temel set hesaplamalarından elde edilen teorik ve simülasyon sonuçlarına göre; HOMO-LUMO enerji farklılıkları incelendiğinde, çalışılan ilgili moleküller arasında optoelektronik özelliklere sahip olabilecek potansiyel moleküller olduğu belirlenmiştir. Bu yüzden, çalışmanın optoelektronik malzemelerin elde edilmesi açısından sentetik organik kimya prosedürlerine ışık tutması beklenmektedir. Organik elektronik cihazlar, optoelektronik özellikleri nedeniyle oldukça dikkat çekicidir. Bu cihazlar üç ana başlık altında incelenebilir. Bunlar organik ışık yayan diyot (OLED), organik ince film transistörler (OTFT) ve organik güneş pilleridir. Bu cihazlar genellikle birbiri üzerine yerleştirilmiş anot-organik malzeme-katot tabakaları şeklinde yapılandırılmıştır.</p>
Kabul Tarihi 29.12.2021	
Anahtar Kelimeler 1.2.4-Triazol-5-on Organik ışık yayan diyot Elektrolüminesans, Moleküller yoğunluk fonksiyonel teorisi.	

Article Info	Abstract
Received 05.12.2021	<p>The potential organic electroluminescent properties of 4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one derivatives that have recently attracted much of the scientists' interest is discussed. The electronic features of these heterocyclic organic compounds are examined with computational methods. The calculation operations were conducted with the high-performance server systems running on Windows operating systems. The geometries of the studied molecules were plotted using the GaussView 5.0 computer program. Theoretical calculations were conducted using the Gaussian09W program. Then, the HOMO-LUMO shapes of the molecules that were optimized with theoretical calculations were obtained. The HOMO-LUMO energy difference (ΔE) of each molecule was calculated in terms of eV. The results were compared with the values obtained from</p>
Accepted 29.12.2021	
Keywords 1,2,4-Triazol-5-one Organic light emitting diode	

¹ Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi- Kars; e-mail: muratbeytur83@gmail.com; ORCID: 0000-0002-7098-5592 (Sorumlu Yazar)

² Iğdır Üniversitesi Mühendislik Fakültesi- Iğdır; e-mail: zeynepilanturhan@hotmail.com; ORCID: 0000-0002-3587-2576

³ Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi- Kars; e-mail: hhigh61@gmail.com; ORCID: 0000-0003-1289-1800

Electroluminescent molecules Density functional theory	relevant literature. According to the theoretical and simulation results obtained from the B3LYP 6-311G++(d,p) and CAMB3LYP 6-311G++(d,p) basic set calculations of the DFT (Density Functional Theory) method used in this study; when the HOMO-LUMO energy differences were examined, it was determined that from among the studied candidate molecules, there were potential molecules that have/could have optoelectronic features. Therefore, it is expected that the study will shed light on synthetic organic chemistry procedures in terms obtaining optoelectronic materials. Organic electronic devices are quite remarkable due to their optoelectronic features. These devices can be examined under three main headings. These are organic light emitting diode (OLED), organic thin-film transistors (OTFT) and organic solar cells. These devices are usually structured in the form of anode-organic material-cathode layers placed on top of each other.
---	--

Giriş

Elektronik endüstrisi, dizüstü bilgisayarlar, akıllı telefonlar, kameralar ve televizyonlar gibi ürünlerle dünya çapında her yıl trilyonlarca doları hareket ettirmekten sorumlu olan küresel ticaretin en önemli yapıtaşdır. Tüm bu cihazlar, çipler veya mikroçipler olarak bilinen entegre devrelere dayanmaktadır. Bu bileşenler öncelikle inorganik yarı iletken malzemelerden üretildiği ve en önemli kimyasal elementin silikon olduğu bilinir. Ancak, son yıllarda Organik Elektronik olarak bilinen yeni bir araştırma bölümü ortaya çıkmaktadır. Bu teknolojiler arasındaki fark, organik diyotlar, transistörler ve sensörler gibi bazı bileşenlerin üretiminde inorganik malzemelerin yerini organik bileşiklerin almasıdır. Bu bileşiklerin ana avantajı mikroçipler ve hatta büyük esnekliğe sahip mikroişlemciler oluşturma olasılığıdır. Bir diğer önemli avantajı da, günümüzde Organik Işık Yayan Diyotlar (OLED) ekranların imalatı için kullanılan ışık yayan cihazlar yaratma yeteneğidir. Ancak, bu elektro-ışıldayan organik bileşiklerin birçoğu, ekranların imalatında uygulanmasını engelleyen geniş emisyon bantlarına sahiptir. Bu sorun, üç değerlikli nadir toprak iyonları içeren bileşiklerin kullanılmasıyla aşılabilir (Gallardo ve ark., 2011; Sabbatini ve ark., 1993). Organik ışık yayan cihazların (OLED'ler) ilk gösteriminden bu yana, OLED'leri düz panel ekranlarda ve katı hal aydınlatmalarında ticari uygulamalara getirmek için kapsamlı araştırmalar yapılmıştır (Wu ve ark., 2009).

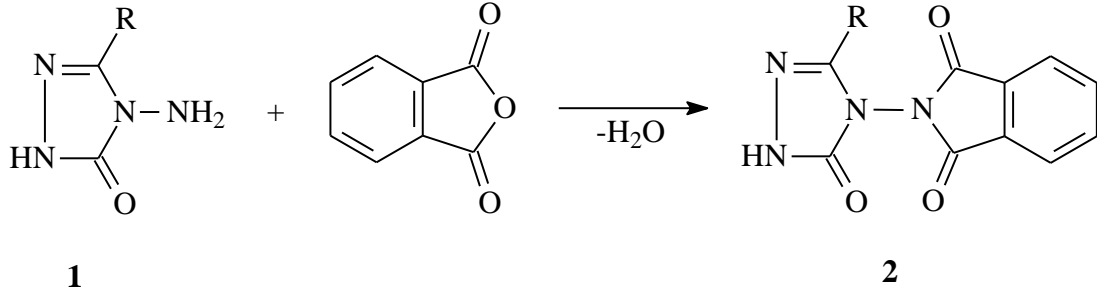
Organik elektronik cihazlar, optoelektronik özellikleri nedeniyle oldukça dikkat çekicidir. Bu cihazlar üç ana başlık altında incelenebilir. Bunlar; organik ışık yayan diyot (OLED), organik ince film transistörler (OTFT) ve organik güneş pilleri olarak sınıflandırılır. Bu cihazlar genellikle birbiri üzerine yerleştirilmiş anot-organik malzeme-katot tabakaları şeklinde yapılandırılmıştır. OLED'ler, bir elektrik akımı uygulandığında ince bir zar tabakasındaki organik moleküller aracılığıyla ışık üretebilen cihazlardır. İki metal arasına bir veya daha fazla organik yarı iletken tabaka yerleştirilerek hazırlanırlar. Hem anot hem de katot yarı geçirgen olabilir.

Elektrolüminesans sırasında ışık yayan cihaza OLED denir (Forrest, 2004; Malenfant ve ark., 2002).

Son zamanlarda heterosiklik bileşiklerle ilgili birçok literatür ortaya çıkmıştır (Bahçeci ve ark., 2016; Koç ve ark., 2020; Özbek ve ark., 2019; Öztürkkan ve ark., 2021; Öztürkkan Özbek ve ark., 2020; Sertçelik, Akbaba, ve ark., 2021; Sertçelik, Öztürkkan Özbek, ve ark., 2021; Turhan Irak & Beytur, 2019; Uğurlu & Beytur, 2020; Ulaş, 2021, 2020). Yeni heterosiklik organik bileşiklerin geliştirilmesi, chemical (Beytur & Avinca, 2021; Boy ve ark., 2021; Çiftçi ve ark., 2018; Kardas ve ark., 2016; Kotan ve ark., 2020; Turhan Irak & Beytur, 2019), iyonik veya biyolojik problemler (Beytur, 2020), kemosensörler (Wang ve ark., 2015), doğrusal olmayan optik malzemeler (Beytur ve ark., 2019; Guezguez ve ark., 2014), güneş pilleri için verimli yük taşıma ve/veya floresan malzemeler (Shirota & Kageyama, 2007), organik ışık yayan diyotlar (OLED) (Danel ve ark., 2015; Ulla ve ark., 2014; Zhang ve ark., 2015), düz panel ekranlar (Wang ve ark., 2004) ve aydınlatma teknolojileri (Sun ve ark., 2006; Zhao ve ark., 2017) gibi potansiyel floresan uygulamaları nedeniyle büyük ilgi görmüştür.

Günümüzde, Schiff bazları çok önemli organik bileşikler sınıfıdır çünkü sentezlenmeleri ve katalizörler (Gupta & Sutar, 2008), görsel pigment (Arun ve ark., 2010), kemosensör (Zhou ve ark., 2012) ve geniş bir biyolojik faaliyetler (Murthy ve ark., 2011) gibi sayısız uygulamalarla tasarlanmaları kolaydır.

Bu çalışmada kullanılan DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi) yönteminin B3LYP 6-31++G(d,p) temel seti hesaplamalarından elde edilen teorik ve simülasyon sonuçlarına göre; HOMO-LUMO enerji farklılıkları incelendiğinde, 2-[3-(metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H) arasından -il]-izoindolin-1,3-dion (Ikizler & Yüksek, 1996) moleküllerinin, optoelektronik özelliklere sahip olabilecek potansiyeli olduğu belirlendi. Bu nedenle çalışmanın optoelektronik malzemelerin elde edilmesi açısından sentetik organik kimya prosedürlerine ışık tutması beklenmektedir.



Şema 1: 2 Tipi bileşiğin sentez yöntemi; a) R= CH₃, b) R= CH₂CH₃, c) R= CH₂C₆H₄CH₃(*p*-)

Materyal ve Yöntem

Hesaplama Yöntemleri

Korozyon inhibitörlerinin belirlenmesinde deneysel yöntemler kadar hesaplamalı kimya yöntemleri de önemlidir. Deney yapılmadan bir inhibitörün aktivitesi bazı kuantum kimyasal verileri kullanılarak yorumlanabilir (Li ve ark., 2011). Kuantum kimyasal hesaplamaları ile organik bileşikler arasında korozyon önleyici gibi davranabilen bileşikler tasarlanabilmektedir. Korozyonla ilgili teorik çalışmalarda sıklıkla kullanılan kuantum kimyasal parametreleri atomik yükler, moleküler yörünge enerjileri ve enerji başlıkları altında toplanabilir (Karelson ve ark., 1996). Yani korozyon inhibitörlerinde moleküler aktivite, yapı ve yük gibi parametrelerin hesaplanması gerekmektedir. Molekülün olası yapısı, sterik engele veya inhibitörün metal solüsyon arayüzüne nasıl yaklaştığına biraz ışık tutabilir. Başka bir yaklaşımda, yörünge enerjilerinde ve yörünge enerjilerindeki farklılıklar, inhibitörün çevrede elektrokimyasal olarak nasıl davrandığını da gösterebilir.

Hesaplamalı kimyada ise moleküller, ab initio, yarı deneysel ve moleküler mekanik olmak üzere üç temel yöntemle göre hesaplanır. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) (Kohn & Sham, 1965), Hohenberg ve Kohn tarafından teorize edilen, son 20 yılda araştırmacılar tarafından en yaygın olarak kullanılan yöntemdir. DFT, bir molekülün toplam elektron enerjisinin, o molekülün elektron yoğunluğuna bağlı olarak bulunması ilkesine dayanır.

Gaz fazındaki ve temel durumdaki moleküllerin yaklaşık geometrisi GaussView5.0 (Dennington ve ark., 2009) moleküler görüntüleme yazılımında çizildi ve Gaussian09W software (Foresman & Frisch, 1996; Frisch ve ark., 2009) yazılımında hesaplandı. Yapıların elektronik özelliklerinin daha iyi belirlenebilmesi için elektron yoğunluğunu dikkate alan ve bu elektron yoğunluğu üzerinden istenilen verileri üreten DFT yöntemi kullanıldı. Ayrıca Gaussian09W yazılımında uygun hibrit fonksiyon B3LYP 6-311G++(d,p) ve CAMB3LYP 6-

311G++(d,p) (Becke, 1996) temel setleri kullanıldı. 2-[3-(Metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dion (Ikizler & Yüksek, 1996) bileşikleri optimize edildi ve yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesabı kullanılarak ve zamana bağlı DFT (TD-DFT) yöntemi kullanılarak enerji seviyelerinin (singlet ve triplet) yerleri hesaplandı. Teorik hesaplamalarla optimize edilen moleküllerin HOMO-LUMO şekilleri elde edildi. Her molekülün HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE) ve S1 ve T1 durumları arasındaki enerji boşluğu (ΔE_{ST}) eV cinsinden hesaplandı. Sonuçlar ilgili literatürden elde edilen değerlerle karşılaştırıldı. DFT ve TD-DFT yönteminin B3LYP/6-311G++(d,p) ve camB3LYP/6-311G++(d,p) temel set hesaplamalarından teorik ve simülasyon sonuçları elde edildi.

En Yüksek Dolu Moleküler Yörünge Enerjisi (E_{HOMO}) ve En Düşük Boş Moleküler Yörünge Enerjisinden (E_{LUMO}), tüm geometri için optimize edilmiş yapılardan elektronik yapı tanımlayıcıları olan LUMO-HOMO enerji boşluğu (ΔE_{gap}), mutlak sertlik (η), mutlak yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (μ), elektrofiliklik indeksi (ω), nükleofilik indeksi (ϵ) ve dipol momentini (μ) ve korozyon önleme aktivitesi ile ilişkili transfer edilen elektron fraksiyonu (ΔN) hesaplanmıştır.

Bulgular ve Tartışma

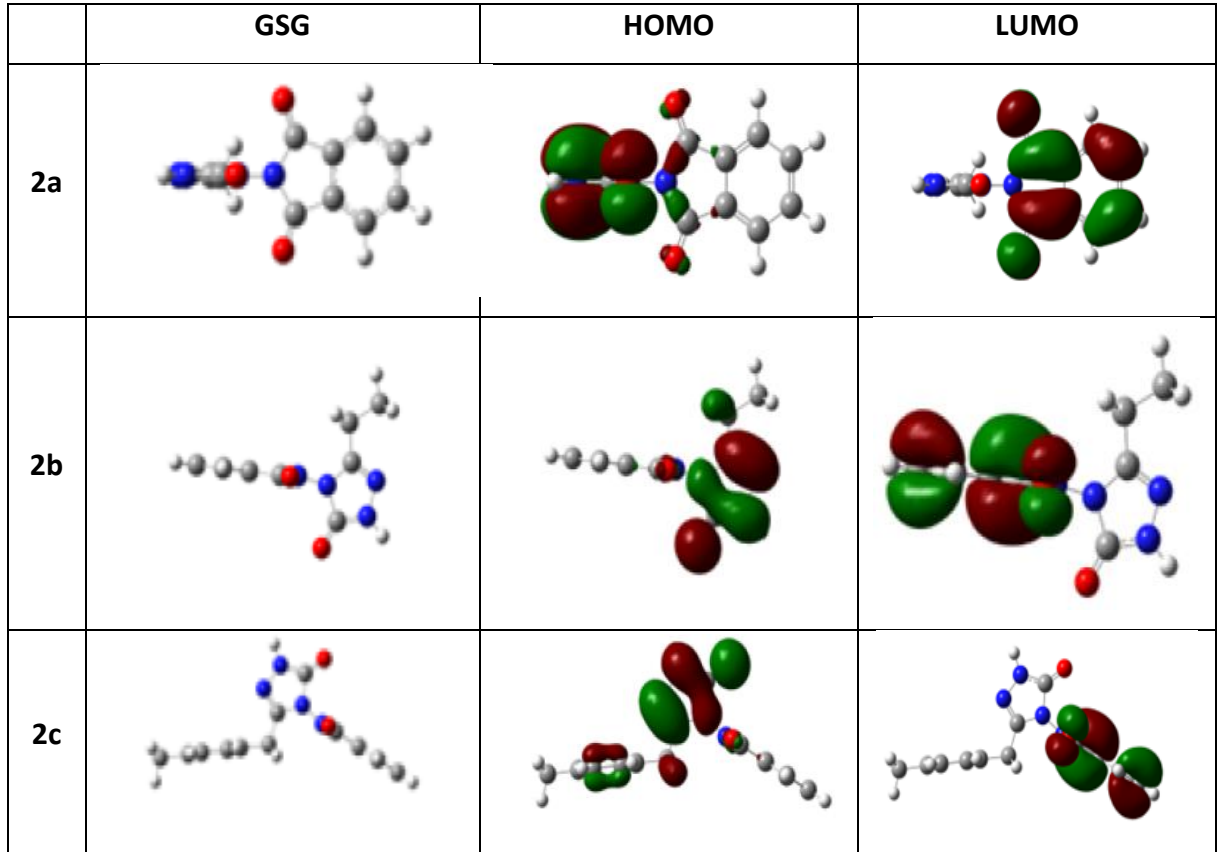
Geometrik Optimizasyon

Çalışılan tüm yapıların gaz fazı geometrisi optimizasyonları öncelikle MM2 yöntemi ve ardından yarı deneysel PM3 tutarlı moleküler orbital (SCFMO) yöntemi kullanılarak belirlendi. B3LYP/6-311G++(d,p) taban seti kullanılarak gelişmiş geometri optimizasyonları sağlandı. Her yapı için normal mod analizi, her üç hesaplama yönteminde de herhangi bir negatif frekansla sonuçlanmadı (Turhan Irak & Gumus, 2017).

Organik Elektrolüminesan Özellikleri

2-[3-(Metil/etil/p-metilbenzil)-5-okso-1H-1,2,4-triazol-4(5H)-il]-izoindolin-1,3-dionların (Ikizler & Yüksek, 1996) HOMO ve LUMO dağılımları, B3LYP 6-311++G(d,p) ve CAMB3LYP 6-311++G(d,p) temel setleri (Becke, 1996) kullanılarak yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) hesaplamaları ile belirlendi. Şekil 1'de gösterildiği gibi, Tüm bileşikler için, DFT/ B3LYP 6-311G++(d,p) 'ye göre, 2a, 2b ve 2c'nin hesaplanan HOMO/LUMO enerji seviyeleri sırasıyla $-6.62/-2.96$, $-7.46/-2.94$ ve $-6.56/-2.94$ eV olarak hesaplandı. Ayrıca, TD-DFT/6-311 G++(d,p)'ye göre 2a, 2b ve 2c'nin hesaplanan B3LYP / CAM-B3LYP enerji seviyeleri sırasıyla

0.033/0.112, 0.032/0.106 ve 0.029/0.099 eV olarak belirlendi. Moleküller hesaplanan ΔE ve ΔE_{ST} değerlerine göre değerlendirildi. Bir molekülün OLED olarak kullanılabilmesi için yarı iletken özellikler sergilemesi gerekir. Yarı iletken malzemelerin ΔE değeri 0,5 ila 4,0 eV arasındadır. 2a-c bileşiklerinin hesaplanan ΔE değerleri 4 eV'nin altındadır. İkinci olarak HOMO-LUMO yörünge bölgeleri incelenmiştir. HOMO-LUMO bölgeleri birbirinden ayrılmalıdır. Değeri 0,5 eV'den küçük olan moleküller aday moleküller olarak kabul edilir.



Şekil 1. Bileşiklerin (2a-c) temel durum geometrisi (GSG), HOMO ve LUMO görünümleri.

Tablo 1. Hesaplanan organik elektrominesans özelliklerinin sonuçları (Tüm veriler eV cinsindedir)

	R	DFT			TD-DFT (ΔE_{ST})	
		B3LYP/6-311G++(d,p)			B3LYP	CAM-B3LYP
		HOMO	LUMO	ΔE	6-311G++(d,p)	6-311G++(d,p)
2a	-CH ₃	-6,62	-2,96	3,66	0,033	0,112
2b	-CH ₂ CH ₃	-7,46	-2,94	4,52	0,032	0,106
2c	-CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃	-6,56	-2,94	3,62	0,029	0,099

Elektronik Parametreler

İncelenen moleküllerin Gauss çıktı dosyasından elde edilen elektronik yapıya bağlı 1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dion türevlerinin elektronik yapılarından türetilen parametreler En Yüksek Dolu Moleküler Yörünge Enerjisi (E_{HOMO}), En Düşük Boş Moleküler Yörünge Enerjisinden (E_{LUMO}) elde edilmiştir [43]. LUMO-HOMO enerji aralığı (ΔE_{gap}), mutlak sertlik (η), mutlak yumuşaklık (σ), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (Π), elektrofiliklik indeksi (ω), nükleofilik indeksi (ϵ) ve dipol momentin (μ) gibi elektronik özellikler incelenmiştir.

Koopman teoremine göre, herhangi bir kimyasal türün E_{HOMO} ve E_{LUMO} değerleri, iyonlaşma enerjisi ve elektron afinite (Koopmans, 1934; Sastri & Perumareddi, 1997), Enerji boşluğu (ΔE_{gap}) (Jesudason ve ark., 2009), mutlak sertlik (η) (Gökce & Bahçeli, 2011), mutlak yumuşaklık (σ) (Arivazhagan & Subhasini, 2012) elektronegatiflik (χ) ve kimyasal potansiyel (Π) (Masoud ve ark., 2012) değerleri ile ilişkilidir ve aşağıdaki şekilde hesaplanabilir. Elektrofiliklik indeksi (ω), verici ve alıcı arasındaki maksimum elektron akışından kaynaklanan enerji tükenmesinin bir ölçüsüdür (Kiyooka ve ark., 2013). Denklem 8'deki gibi verilmiştir. Yeni bir moleküler yapı tanımlayıcısı olan nükleofilik indeksi (ϵ) (Pearson, 1988) denklemdeki gibi hesaplanır.

$$I = -E_{HOMO} \quad (1)$$

$$A = -E_{LUMO} \quad (2)$$

$$\Delta E = (E_{LUMO} - E_{HOMO}) \quad (3)$$

$$\eta = (I - A) / 2 \quad (4)$$

$$\sigma = 1/\eta \quad (5)$$

$$\chi = (I + A) / 2 \quad (6)$$

$$P_i = -\chi \quad (7)$$

$$\omega = P_i^2 / 2\eta \quad (8)$$

$$\varepsilon = P_i \times \eta \quad (9)$$

Tablo 2. 1H-1,2,4-triazol-4(5H)-yl]-izoindolin-1,3-dion türevlerinin elektronik özellikleri (Tüm veriler eV cinsindedir).

Comp.	2a	2b	2c
Subst.	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ C ₆ H ₄ CH ₃
I	6.620	7.461	6.560
A	2.961	2.939	3.619
ΔE	3.660	4.422	2.941
σ	0.0025	0.0031	0.0020
χ	4.790	5.200	5.900
ε	4.0462	3.2744	5.0344
ω	0.0283	0.0413	0.0257
P_i	-4.790	-5.200	-5.900
η	1.830	2.261	1.471

Sonuç

Bu çalışmada, moleküller, hesaplanan ΔE ve ΔE_{ST} değerlerine göre değerlendirilmiştir. Bir molekülün OLED olarak kullanılabilmesi için yarı iletken özellikler sergilemesi gerekir. Yarı iletken malzemelerin ΔE değeri 0,5 ila 4,0 eV arasındadır. 2a ve 2c'nin hesaplanan ΔE değerleri 4 eV'nin altındadır. İkinci olarak HOMO-LUMO yörünge bölgeleri incelenmiştir. Moleküllerin HOMO-LUMO bölgeleri birbirinden belirlenmiştir. Son olarak, EST değeri 0,5 eV'den düşük olan moleküller, aday moleküller olarak kabul edilir. İncelenen bileşikler arasında, 2b bileşiği HOMO-LUMO enerjileri, ΔE ve ΔE_{ST} verileri olarak yarı iletkenlik özelliği açısından 2a ve 2c bileşiğinden daha iyi olduğu belirlenmiştir.

Kaynaklar

- Arivazhagan, M., & Subhasini, V. P. (2012). Quantum chemical studies on structure of 2-amino-5-nitropyrimidine. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 91, 402–410. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.02.018>
- Arun, V., Mathew, S., Robinson, P. P., Jose, M., Nampoori, V. P. N., & Yusuff, K. K. M. (2010). The tautomerism, solvatochromism and non-linear optical properties of fluorescent 3-hydroxyquinoxaline-2-carboxalidine-4-aminoantipyrine. *Dyes and Pigments*, 87(2), 149–157. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2010.03.012>
- Bahçeci, Yıldırım, N., Gürsoy-Kol, Manap, S., Beytur, M., & Yüksek, H. (2016). Synthesis, characterization and antioxidant properties of new 3-alkyl (Aryl)-4-(3-hydroxy-4-methoxy-benzylidenamino)-4,5-dihydro-1h-1,2,4-triazol-5-ones. *Rasayan Journal of Chemistry*, 9(3), 494–501.
- Becke, A. D. (1996). Density-functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact-exchange mixing. *Journal of Chemical Physics*, 104(3), 1040–1046. <https://doi.org/10.1063/1.470829>
- Beytur, M. (2020). Fabrication of Platinum Nanoparticle/Boron Nitride Quantum Dots/6-Methyl-2-(3-hydroxy-4-methoxybenzylidenamino)-benzothiazole (ILS) Nanocomposite For Electrocatalytic Oxidation of Methanol. *Journal of the Chilean Chemical Society*, 65(3), 4929–4933. <https://doi.org/10.4067/s0717-97072020000204929>
- Beytur, M., & Avinca, I. (2021). Molecular, Electronic, Nonlinear Optical and Spectroscopic Analysis of Heterocyclic 3-Substituted-4-(3-methyl-2-thienylmethyleneamino)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones: Experiment and DFT Calculations. *Heterocyclic Communications*, 27(1), 1–16. <https://doi.org/doi:10.1515/hc-2020-0118>
- Beytur, M., Turhan Irak, Z., Manap, S., & Yüksek, H. (2019). Synthesis, characterization and theoretical determination of corrosion inhibitor activities of some new 4,5-dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-one derivatives. *Heliyon*, 5(6). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01809>
- Boy, S., Türkan, F., Beytur, M., Aras, A., Akyıldırım, O., Karaman, H. S., & Yüksek, H. (2021). Synthesis, design, and assessment of novel morpholine-derived Mannich bases as multifunctional agents for the potential enzyme inhibitory properties including docking study. *Bioorganic Chemistry*, 107, 104524. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.104524>
- Çiftçi, E., Beytur, M., Calapoğlu, M., Gürsoy-Kol, Ö., Alkan, M., Toğay, A., Manap, S., & Yüksek, H. (2018). Synthesis, Characterization, Antioxidant and Antimicrobial Activities and DNA Damage of Some Novel 2-[3-alkyl (aryl)-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one-4-yl]-phenoxyacetic acids in Human Lymphocytes. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*, 9, 1760–1771.
- Danel, A., Chacaga, Ł., Uchacz, T., Pokladko-Kowar, M., Gondek, E., Karasiński, P., & Sahraoui, B. (2015). Solution processable double layer organic light emitting diodes (OLEDs) based on 6- N , N -arylsubstituted-1 H -pyrazolo[3,4- b]quinolines . *Advanced Device Materials*, 1(1), 17–22. <https://doi.org/10.1179/2055031614y.0000000004>
- Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). *GaussView, Version 5*, (Version 5).

- Foresman, J. B., & Frisch, A. (1996). *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods Gaussian* (2nd editio).
- Forrest, S. R. (2004). The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic. *Nature*, 428(6986), 911–918. <https://doi.org/10.1038/nature02498>
- 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., & Sonnenbe, D. J. (2009). *Gaussian 09* (Revision E).
- Gallardo, H., Conte, G., Bortoluzzi, A. J., Bechtold, I. H., Pereira, A., Quirino, W. G., Legnani, C., & Cremona, M. (2011). Synthesis, structural characterization, and photo and electroluminescence of a novel terbium(III) complex: {Tris(acetylacetonate) [1,2,5]thiadiazolo[3,4-f][1,10]phenanthroline}terbium(III). *Inorganica Chimica Acta*, 365(1), 152–158. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ica.2010.09.003>
- Gökce, H., & Bahçeli, S. (2011). A study on quantum chemical calculations of 3-, 4-nitrobenzaldehyde oximes. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 79(5), 1783–1793. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2011.05.057>
- Guezguez, I., Ayadi, A., Ordon, K., Iliopoulos, K., Branzea, D. G., Migalska-Zalas, A., Makowska-Janusik, M., El-Ghayoury, A., & Sahraoui, B. (2014). Zinc Induced a Dramatic Enhancement of the Nonlinear Optical Properties of an Azo-Based Iminopyridine Ligand. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(14), 7545–7553. <https://doi.org/10.1021/jp412204f>
- Gupta, K. C., & Sutar, A. (2008). Catalytic Activities of Schiff Base Transition Metal Complexes. *Coordination Chemistry Reviews*, 252, 1420–1450. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2007.09.005>
- Ikizler, A.A., & Yüksek, R. (1996). Reactions of ester ethoxycarbonylhydrazones with some amine type compounds. *Revue Roumaine de Chimie*, 41(7), 585–590.
- Jesudason, E. P., Sridhar, S. K., Malar, E. J. P., Shanmugapandiyam, P., Inayathullah, M., Arul, V., Selvaraj, D., & Jayakumar, R. (2009). Synthesis, pharmacological screening, quantum chemical and in vitro permeability studies of N-Mannich bases of benzimidazoles through bovine cornea. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 44(5), 2307–2312. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2008.03.043>
- Kardas, F., Manap, S., Gürsoy-Kol, Ö., Beytur, M., & Yüksek, H. (2016). Synthesis and antioxidant properties of some 3-Alkyl(Aryl)-4-[3-ethoxy-2-(4- toluenesulfonyloxy)-benzylidenamino]-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-ones. *Der Pharma Chemica*, 8(18), 274–281.
- Karelson, M., Lobanov, V. S., & Katritzky, A. R. (1996). Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies. *Chemical Reviews*, 96(3), 1027–1044. <https://doi.org/10.1021/cr950202r>
- Kiyooka, S., Kaneno, D., & Fujiyama, R. (2013). Parr's index to describe both electrophilicity and nucleophilicity. *Tetrahedron Letters*, 54, 339–342. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2012.11.039>
- Koç, E., Yüksek, H., Beytur, M., Akyildirim, O., Akçay, M., Beytur, C., Üniversitesi, K., Fakültesi, M. M., & Bölümü, B. (2020). *Araştırma Makalesi / Research Article Heterosiklik 4, 5-dihidro-1 H -1, 2, 4-triazol-5- on Türevinin Antioksidan Özelliğinin Erkek Ratlarda (Wistar albino) İn vivo Olarak Belirlenmesi In vivo Determination of Antioxidant Properties of Heterocyclic 4 . 9(2)*, 542–548.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 140(4A), A1133--A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

- Koopmans, T. (1934). Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den Einzelnen Elektronen Eines Atoms. *Physica*, 1(1), 104–113. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)90011-2](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90011-2)
- Kotan, G., Gökçe, H., Akyıldırım, O., Yüksek, H., Beytur, M., Manap, S., & Medetalibeyoğlu, H. (2020). Synthesis, Spectroscopic and Computational Analysis of 2-[(2-Sulfanyl-1H-benzo[d]imidazol-5-yl)iminomethyl]phenyl Naphthalene-2-sulfonate. *Russian Journal of Organic Chemistry*, 56(11), 1982–1994. <https://doi.org/10.1134/S1070428020110135>
- Li, X., Deng, S., & Fu, H. (2011). Three pyrazine derivatives as corrosion inhibitors for steel in 1.0M H₂SO₄ solution. *Corrosion Science*, 53, 3241–3247. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2011.05.068>
- Malenfant, P. R. L., Dimitrakopoulos, C. D., Gelorme, J. D., Kosbar, L. L., Graham, T. O., Curioni, A., & Andreoni, W. (2002). N-type organic thin-film transistor with high field-effect mobility based on a N,N'-dialkyl-3,4,9,10-perylene tetracarboxylic diimide derivative. *Applied Physics Letters*, 80(14), 2517–2519. <https://doi.org/10.1063/1.1467706>
- Masoud, M. S., Ali, A. E., Shaker, M. A., & Elsalala, G. S. (2012). Synthesis, computational, spectroscopic, thermal and antimicrobial activity studies on some metal-urate complexes. *Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 90, 93–108. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.01.028>
- Murthy, Y. L. N., Karthikeyan, N., Boddeti, G., Diwakar, B. S., & Singh, E. R. (2011). Design, synthesis and in vitro antibacterial activities of methyl-4-((substituted phenyl) [6H-indolo (2,3-b)quinoxalin-6-yl]methyl-amino) benzoate derivatives. *Chinese Chemical Letters*, 22(5), 567–570. <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2010.10.055>
- Özbek, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Uğurlu, G., Tonbul, A. M., Necefoğlu, H., & Hökelek, T. (2019). Synthesis and Crystallographic, Absorption and Emission Studies of 4-Pyridine Carboxamide of Zn(II) 4-Chlorophenylacetate. *Journal of Fluorescence*, 29(5), 1265–1275. <https://doi.org/10.1007/s10895-019-02440-x>
- Öztürkkan, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Necefoğlu, H., & Hökelek, T. (2021). Hirshfeld surface analysis, interaction energy calculations of metal (II)4-cyanobenzoate with nicotinamide/N,N'-diethylnicotinamide complexes. *Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry*, 8(1), 125–136. <https://doi.org/10.18596/jotcsa.824551>
- Öztürkkan Özbek, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Elmalı, A., & Şahin, E. (2020). The superiority of the classical synthesis compared to the hydrothermal synthesis upon the structural, optical absorption and fluorescent properties of new Cd(II) 3-fluorobenzoate complexes with Pyridine-3-carboxamide/Pyridine-3-carboxylate. *Inorganica Chimica Acta*, 509, 119694. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.119694>
- Pearson, R. G. (1988). Absolute electronegativity and hardness: application to inorganic chemistry. *Inorganic Chemistry*, 27(4), 734–740. <https://doi.org/10.1021/ic00277a030>
- Sabbatini, N., Guardigli, M., & Lehn, J.-M. (1993). Luminescent lanthanide complexes as photochemical supramolecular devices. *Coordination Chemistry Reviews*, 123(1), 201–228. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-8545\(93\)85056-A](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-8545(93)85056-A)
- Sastri, V. S., & Perumareddi, J. R. (1997). Molecular Orbital Theoretical Studies of Some Organic Corrosion Inhibitors. *Corrosion (Houston)*, 53(8), 617–622. <https://doi.org/10.5006/1.3290294>

- Sertçelik, M., Akbaba, G. B., & Öztürkkan, F. E. (2021). *Kobalt (II) ve Çinko (II) 4-Florobenzoatın 3-Hidroksipiridin Komplekslerinin Sentezi, Spektroskopik ve Sitotoksik Özellikleri. Ii*, 0–2.
- Sertçelik, M., Öztürkkan Özbek, F. E., Taslimi, P., Necefoglu, H., & Hökelek, T. (2021). Supramolecular complexes of Ni (II) and Co (II) 4-aminobenzoate with 3-cyanopyridine: Synthesis, spectroscopic characterization, crystal structure, and enzyme inhibitory properties. *Applied Organometallic Chemistry*, 35(5), 1–10. <https://doi.org/10.1002/aoc.6182>
- Shirota, Y., & Kageyama, H. (2007). Charge Carrier Transporting Molecular Materials and Their Applications in Devices. *Chemical Reviews*, 107(4), 953–1010. <https://doi.org/10.1021/cr050143+>
- Sun, Y., Giebink, N. C., Kanno, H., Ma, B., Thompson, M. E., & Forrest, S. R. (2006). Management of singlet and triplet excitons for efficient white organic light-emitting devices. *Nature*, 440(7086), 908–912. <https://doi.org/10.1038/nature04645>
- Turhan Irak, Z., & Beytur, M. (2019). Theoretical Study on The Investigation of Antioxidant Properties of Some 4-Benzylidenamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 9(1), 512–521. <https://doi.org/10.21597/jist.481990>
- Turhan Irak, Z., & Gumus, S. (2017). *Heterotricyclic Compounds Computational Study Click Reaction : 01(07)*, 80–89.
- Uğurlu, G., & Beytur, M. (2020). Theoretical studies on the structural, vibrational, conformational analysis and nonlinear optic property of 4-(methoxycarbonyl)-phenylboronic acid. *Indian Journal of Chemistry -Section A (IJC-A)*, 59(10), 1504–1512.
- Ulaş, Y. (2020). *Experimental and Theoretical Studies of 2- (naphthalen-1-yl (piperidin-1-yl) methyl) phenol Compound. Journal of the Chemical Society of Pakistan*, 42(06), 818–826.
- Ulaş, Y. (2021). Investigation of the relationship between the substituent and nonlinear optical properties in 2-(Phenyl ((4-Vinylphenyl)Amino) Methyl)phenol derivative compounds by DFT method. *Journal of the Chemical Society of Pakistan*, 43(3), 271–277.
- Ulla, H., Raveendra Kiran, M., Garudachari, B., Satyanarayan, M. N., Umesh, G., & Isloor, A. M. (2014). Blue emitting halogen–phenoxy substituted 1,8-naphthalimides for potential organic light emitting diode applications. *Optical Materials*, 37, 311–321. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.optmat.2014.06.016>
- Wang, G., Qin, J., Li, C.-R., & Yang, Z. (2015). A highly selective fluorescent probe for Al³⁺ based on quinoline derivative. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 150, 21–25. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.05.041>
- Wang, Y., Teng, F., Ma, C., Xu, Z., Hou, Y., Yang, S., Wang, Y., & Xu, X. (2004). Green to white to blue OLEDs by using PBD as a chromaticity-tuning layer. *Displays*, 25(5), 237–239. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.displa.2004.09.016>
- Wu, C., Djurovich, P., & Thompson, M. (2009). Study of Energy Transfer and Triplet Exciton Diffusion in Hole-Transporting Host Materials. *Advanced Functional Materials*, 19, 3157–3164. <https://doi.org/10.1002/adfm.200900357>
- Zhang, X., Guo, X., Chen, Y., Wang, J., Lei, Z., Lai, W., Fan, Q., & Huang, W. (2015). Highly efficient red

phosphorescent organic light-emitting devices based on solution-processed small molecular mixed-host. *Journal of Luminescence*, 161, 300–305. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2015.01.035>

Zhao, J., Wang, Z., Wang, R., Chi, Z., & Yu, J. (2017). Hybrid white organic light-emitting devices consisting of a non-doped thermally activated delayed fluorescent emitter and an ultrathin phosphorescent emitter. *Journal of Luminescence*, 184, 287–292. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2016.11.067>

Zhou, Y., Li, Z.-X., Zang, S.-Q., Zhu, Y.-Y., Zhang, H.-Y., Hou, H.-W., & Mak, T. C. W. (2012). A novel sensitive turn-on fluorescent Zn²⁺ chemosensor based on an easy to prepare C₃-symmetric Schiff-base derivative in 100% aqueous solution. *Organic Letters*, 14(5), 1214–1217. <https://doi.org/10.1021/ol2034417>