

(E)-2-((Fenilimino)metil) Fenol Molekülünün Teorik Olarak İncelenmesi

Erhan ÖZTÜRK¹

Zeynep TURHAN IRAK^{2*}

Selçuk GÜMÜŞ³

ÖZET: Bu çalışmada, (E)-2-((fenilimino)metil)fenol molekülünün 3D geometrisi ve elektronik yapısı hakkında bilgi edinmek için kuantum kimyasal hesaplamaları B3LYP/6-31++G(d,p) seviyesinde Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi kullanılarak taban durumunda hesaplandı. Optimize edilmiş moleküler yapının tek bağ etrafında dönerek toplam enerjinin taranmasıyla konformasyonları bulundu. En çok ve en az kararlı konformasyonların 3 boyutlu elektrostatik potansiyel haritaları çıkartıldı. Bu konformasyonel yapıların en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO), en düşük boş moleküler orbitallerin (LUMO) enerjileri, elektronik ve moleküler özellikleri hesaplandı. Ek olarak, lineer olmayan optik özellikleri (NLO) incelendi.

Anahtar kelimeler: (E)-2-((Fenilimino)metil)fenol, yoğunluk fonksiyonel teorisi, HOMO-LUMO enerjileri, elektronik özellikler, konformasyon

Theoretical Investigation of (E)-2-((Phenylimino)methyl)phenol Molecules

ABSTRACT: In this work, quantum chemical calculations were computed in the base state using Density Functional Theory at the level of B3LYP/6-31++G(d,p) to obtain information about the 3D geometry and electronic structure of the (E)-2- ((phenylimino)methyl)phenol molecule. Conformations were found by scanning the total energy by rotating around the single bond of the optimized molecular structure. Three-dimensional electrostatic potential maps of the most and least stable conformation were deduced. These conformational structures have calculated the highest filled molecular orbital (HOMO), lowest empty molecular orbitals (LUMO) energies, electronic and molecular properties. In addition, nonlinear optical properties (NLO) were investigated.

Keywords: (E)-2-((Phenylimino)methyl)phenol, density functional theory, HOMO-LUMO energies, electronic properties, conformation

¹ Erhan ÖZTÜRK (Orcid ID: 0000-0003-4006-2428), Iğdır Üniversitesi, Araştırma Laboratuvarı Uygulama ve Araştırma Merkezi, Iğdır, Türkiye

² Zeynep TURHAN IRAK (Orcid ID: 0000-0002-3587-2576), Iğdır Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Çevre Mühendisliği Bölümü, Iğdır, Türkiye

³ Selçuk GÜMÜŞ (Orcid ID: 0000-0002-8628-8943), Yüzcüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Van, Türkiye

*Sorumlu yazar/Corresponding Author: Zeynep TURHAN IRAK, zeynepilanturhan@hotmail.com

* Bu çalışmanın bir kısmı 26-27 Nisan 2018 tarihinde Ankara'da düzenlenen 1st International Eurasian Conference on Biological and Chemical Sciences (EurasianBioChem 2018) poster olarak sunulmuştur.

GİRİŞ

Teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin geometrik ve elektronik özellikleri gibi birçok özellik deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanmaya başlanabilmektedir. Günümüzde kullanılan teorik hesaplama yöntemleriyle, elde edilmiş ve/veya elde edilmemiş/edilememiş hatta gerçek koşullarda oluşamayacak bileşikler için bile kolayca uygulanabilmekte ve istenen sonuçlar alınabilmektedir. Bazı çalışmalarda deneysel yöntemden daha hassas ve güvenilir sonuçlar elde edilebilmektedir. Bilgisayarla yapılan teorik hesaplamalarda istenilen sonuçları almak oldukça kolaydır.

Gaussian 09W (Frisch ve ark., 2009) moleküler mekanik, yarı-denel ve ab initio yöntemleri içeren oldukça kapsamlı bir programdır. Her üç yöntem için de çok sayıda teori ve temel set seçeneğine sahiptir. Atom ve moleküllerin enerjileri hesaplanabilir, geometrik optimizasyonları yapılabilir, enerjiye bağlı olan titreşim frekansları, kuvvet sabitleri ve dipol momentleri hesaplanabilir. Program potansiyel enerji yüzeyinde dolaşarak minimumlar, geçiş halleri ve tepkime yolunu 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. Hesaplamalarda atom veya molekülün temel hali ya da uyarılmış hali kullanılabilir.

Bir molekülde sadece sigma bağı (tek bağ) etrafında dönmeler vardır. Sigma bağı etrafında grupların dönmesinden meydana gelen geçici molekül şekillerine molekülün konformasyonları

denir. Grupların sigma bağı etrafında dönmeleri sonucu molekülün uğradığı enerji değişiminin analizine ise konformasyon analizi denir. Moleküllerin farklı konformasyonları onların farklı özellikler göstermesine sebep olabilir. Örneğin bir biyomolekülün bir fonksiyonu için o molekülün belirli bir konformasyonda bulunması gerekir. Bu da genellikle düşük enerjili konformasyonlarıdır. Molekülün birden çok tek bağ merkezli dihedral açığa sahip olmasından dolayı bu bağlar etrafında serbest dönmeler olabileceğinden, bu tür esnek moleküllerin en kararlı durumunu bulmak için konformasyon analizi yapılarak oluşan konformasyonların enerji ve geometrileri tespit edilir. Konformasyon analizi yapmanın amacı, molekülün potansiyel enerji yüzeyi (3D) ya da potansiyel enerji eğrisini (2D) belirleyerek, molekülün minimum enerjiye sahip olduğu kararlı denge durumunu belirlemektir.

Modern hesaplamalı simülasyon metodlarının gelişmesiyle orbital, optiksel ve yapısal özellikler doğru bir şekilde hesaplanır (Zhou ve ark., 2013; Sebastian ve ark., 2013). Bu nedenle, moleküllerin, nano-malzemes ve yüzey alaşımlar gibi çeşitli formlardaki çeşitli malzemelerin fiziksel, kimyasal ve optik özellikleri gibi özellikler, deneysel çalışmalar olmadan tahmin edilebilir (Guo ve ark., 2010).

Maddelerin doğrusal olmayan optik (NLO) özellikleri iletişim teknolojisinde sinyal işleminde, optik düğmelerde ve optik bellek dizaynında önemli rol oynar (Zyss, 1994; Aggarwal ve ark., 2003). Moleküllerin NLO özellikleri molekül boyunca hareket eden delokalize π -elektronlarından ortaya çıkar. Konjugasyonun artması ve moleküle alıcı ve verici grupların katılması onun NLO özelliğinin değişmesine yol açar. Kuantum kimyasal hesaplamalar NLO özellikleri ile elektronik yapı arasındaki ilişkiyi tanımlamak için kullanılır.

Bu çalışmada Schiff bazlarının seçilme nedeni birçok alanda önemli derecede

kullanılabilen etkin bileşikler olmasıdır. Schiff bazlarının oldukça geniş çalışma alanları bulunmaktadır. Schiff bazları (azometin, iminler) ilaç ya da kauçuk katkı maddeleri üretimleri için yaygın olarak kullanılan organik ara ürünlerdir (Macho ve ark., 2004). Aynı zamanda Schiff bazları, boyarmaddelerin üretiminde özellikle tekstil endüstrisinde, plastik sanayinde, polimer üretiminde, analitik kimyada, sıvı kristal teknolojisinde, kozmetik ve ilaç üretiminde, korozyonun önlenmesinde ve elektronik endüstrisi gibi birçok alanda da kullanımı bulunmaktadır.

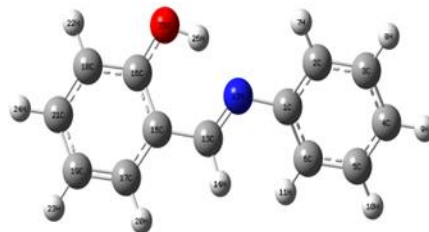
MATERYAL VE YÖNTEM

Hesaplamalar Gaussian 09W programında bulunan Becke'nin üç parametrelili enerji fonksiyoneli hibrid yaklaşımı (Becke, 1988) ile Lee-Yang ve Parr'ın korelasyon fonksiyoneli (Lee ve ark., 1998) oluşan B3LYP teorisi kullanılarak yapıldı. Hesaplamalarda, kutuplanma etkisini gidermek için eklenen polarize fonksiyonları ve bunun yanında uyarılmış, iyonik moleküllerde elektron yoğunluğunun molekülün temel durumuna göre daha dağılık olma durumunu modellemek için eklenen difüze fonksiyonları içeren 6-31++G(d,p) baz seti kullanıldı.

Hesaplamalar sonucunda, molekülün geometrik parametreleri, elektronik parametreleri (HOMO-LUMO enerjileri, HOMO-LUMO enerji farkı, moleküler sertlik (η) ve elektronegatiflik (χ)), doğrusal olmayan optik özellikleri (kutuplanabilirlik, hiperkutuplanabilirlik) ayrıca moleküler elektrostatik yüzey (MEP) haritaları belirlendi ve bu başlıklar altında sonuçlar değerlendirildi.

BULGULAR VE TARTIŞMA

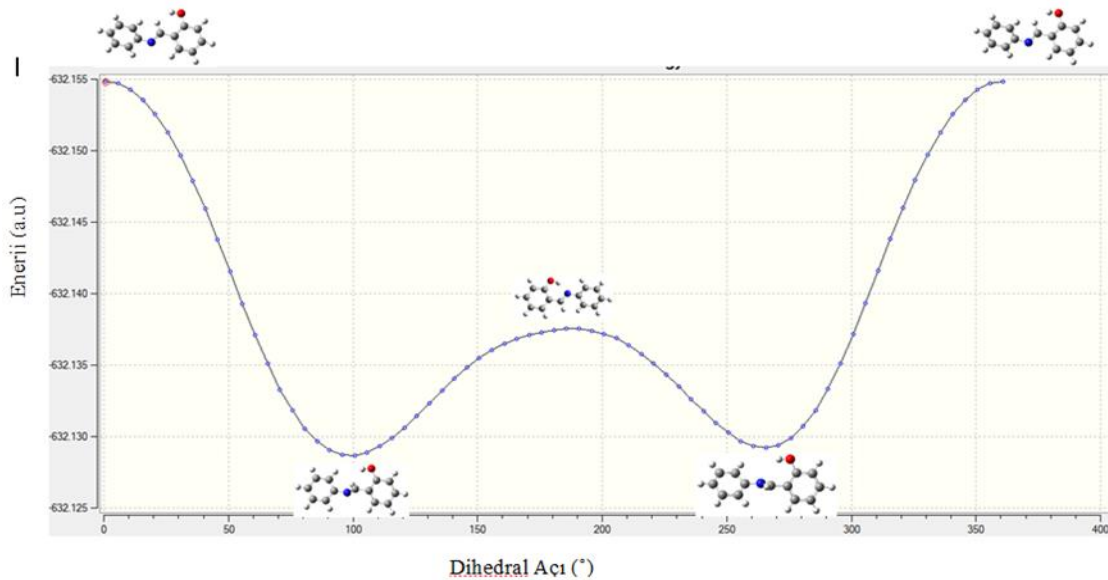
(E)-2-((Fenilimino)metil)fenol molekülünün üç boyutta yaklaşık geometrisi GaussView 5.0 moleküler görüntüleme programında (Dennington ve ark., 2009) çizilerek, moleküldeki atomların uzay yerleşimleri belirlendi. Yapıların gaz fazı geometri optimizasyonu öncelikle MM2 yöntemi ve PM3 kendi içinde tutarlı moleküler orbital metodu kullanılarak gerçekleştirildi. İleri geometri optimizasyonları ise HF ve B3LYP/6-31++G(d,p) düzeyinde yapıldı. Yapı için hesaplama metodlarının hiçbirisi negatif frekansa rastlanmaması optimizasyon işleminin doğruluğunu göstermiştir (Turhan Irak ve Gümüş, 2017). Şekil 1'de (E)-2-((fenilimino)metil)fenol'un teorik olarak hesaplanan geometrik yapısı atomların numaralandırılmış şekliyle verildi.



Şekil 1. (E)-2-((Fenilimino)metil)fenol molekülünün 3D yaklaşık geometrisi

Konformasyonel analiz bir organik yapıda olası rotasyonlardan kaynaklanan konformasyonların kararlılıklarının belirlenmesi, kararlı konformasyonların kararlılık sebeplerinin araştırılması ve molekül içi etkileşimlerin incelenmesi için sıkça kullanılan bir yöntemdir. (E)-2-((Fenilimino)metil)fenol molekülünde fenolik halka ile imin halkası arasındaki bağ serbest dönüğe sahiptir. Bu nedenle, bu bağ enerji değişiminin rotasyon yoluyla gözlemlenmesi için her adımda kendi etrafında 5 derece döndürülerek en kararlı geometri optimize edilmiş yapıyı elde etmek için

B3LYP/6-311++G(d,p) seviyesinde konformasyon analizine tabi tutuldu. Şekil 2' de, molekül için elde edilen enerji profili verildi. Dihedral açı-enerji grafiğinde minimum (kararlı) ve maksimum (kararsız) enerjili yapılar gösterildi. Grafiğe bakıldığında en kararsız yapı, fenolik halka ile imin halkasının hemen hemen dikey olarak hizalanmasında olduğunda gözlemlendi. Yaklaşık 180°'lik dihedral açıda enerji olarak olumlu bir yapıya neden olmuşsa da, en kararlı yapı dihedral açı 0° olduğunda elde edildi (Şekil 2).



Şekil 2. (E)-2-((Fenilimino)metil)fenol molekülünün fenolik halka ile imin halkası arasındaki tekli bağın etrafında dönmesiyle toplam enerjinin tarama grafiği

Optimizasyonu yapılan molekülün en kararlı ve en kararsız konformasyonları için HOMO-LUMO enerjileri, HOMO-LUMO enerji farkı ve doğrusal olmayan optik özellikleri tek nokta enerji hesabı yapılarak hesaplandı. Moleküler orbital teorisine göre; moleküller meydana gelirken atomlar gerekli bağ mesafesinde birbirlerine yaklaştıklarında molekül oluşmasını sağlayan atomik orbitaller karışarak moleküle ait orbitalleri oluşturur. Bu orbitaller moleküldeki elektronların bulunma olasılığının büyük olduğu

yerler olarak düşünülebilir (Fleming, 1976). HOMO enerjisi bu kimyasal reaksiyonlarda elektron verme eğilimi (π -donör), LUMO enerjisi ise elektron alma eğilimi (π -akseptör) olarak tanımlanır (Fukui, 1982).

MEP birim pozitif yük ile moleküler sistemin yük dağılımı arasındaki etkileşim enerjisi olarak tanımlanabilir. MEP haritası üzerinde en negatif potansiyel kırmızı renkle gösterilirken en pozitif potansiyel mavi renkle gösterilir (Cramer, 2004). Moleküller birbirine yaklaştığında her bir

molekülün MEP'inin, molekül etkileşimlerinde anahtar rol oynadığı göz önüne alındığında bir molekülün MEP'inin en negatif olduğu bölgeler elektrofilik atağa en yatkın bölgeyken; en pozitif olduğu bölgeler nükleofilik atağa en yatkın bölge olarak tanımlanabilir (Levine, 2000). Şekil 3'de

kararlı ve kararsız konformasyonel yapıların B3LYP/6-311++G(d,p) metodu ile hesaplanan HOMO-LUMO diyagramları ve MEP haritaları görülmektedir.

	GSG	HOMO	LUMO	MEP
1				
21				
38				
54				
73				

Şekil 3. Kararlı ve kararsız konformasyonel yapıların Temel Durum Geometrisi (GSG), HOMO-LUMO diyagramları ve MEP haritaları

Bu konformasyonel yapılar için MEP haritalarıyla molekül içi elektron dağılımı gösterilmiştir. Azot ve oksijen atomlarının birbirine yakın olduğu yapıların dihedral açı-enerji grafiğiyle uyumlu yani daha kararlı olduğunu görüldü.

HOMO-LUMO enerjileri, HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE), HOMO-LUMO enerjilerinden hesaplanan konformasyonel yapıların elektronegatiflik (χ), sertlik (η) ve yumuşaklık (σ) değerleri aşağıdaki eşitliklerle hesaplandı (Isin ve Karakus, 2015), ve Çizelge 1’de verildi.

$$\chi = -1/2 (E_{HOMO} + E_{LUMO}) \quad (1)$$

$$\eta = 1/2 (E_{LUMO} - E_{HOMO}) \quad (2)$$

$$\sigma = 1/\eta \quad (3)$$

Doğrusal olmayan optik özellikleri (NLO) hesaplanarak öngörmek için kutuplanabilirlik (α) ve hiperkutuplanabilirlik (β) değerlerinden

faydalanılır (Govindarajan ve ark., 2012). Organik tabanlı maddelerde optik özellikler kutuplanabilirlik ile tanımlanmaktadır. Hiperkutuplanabilirlik ise maddenin doğrusal olmayan optik özelliklerinin performansını etkileyen bir niceliktir (Leszczynski, 2006). Bir molekülün NLO özellik gösterebilmesi için kutuplanabilirlik, hiperkutuplanabilirlik ve dipol momentinin yüksek, HOMO-LUMO enerji farkının küçük olması istenir. Kutuplanabilirlik maksimum olduğunda HOMO-LUMO enerji farkı minimum; hiperkutuplanabilirlik maksimum olduğu noktada dipol moment de maksimum olmalıdır.

Doğrusal olmayan optik özellikler hesaplanırken; ortalama lineer kutuplanabilirlik için,

$$\alpha = 1/3(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (4)$$

ve toplam statik hiperkutuplanabilirlik için,

$$\beta = [(\beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{xzz})^2 + (\beta_{yyy} + \beta_{xxy} + \beta_{yzz})^2 + (\beta_{zzz} + \beta_{xxz} + \beta_{yyz})^2]^{1/2} \quad (5)$$

eşitlikleri kullanılmıştır. Çizelge 1’de gaz fazında molekülün kullanılarak hesaplanan

kutuplanabilirlik (α) ve hiperkutuplanabilirlik (β) değerleri verildi.

Çizelge 1. Gaz fazında moleküllerin DFT/B3LYP teori düzeyinde 6-311++G(d,p) temel seti kullanılarak hesaplanan toplam Enerji, HOMO-LUMO enerjileri, HOMO-LUMO enerjileri farkı, elektronik parametre ve NLO değerleri

	1	21	38	54	73
Toplam Enerji (a.u)	-632.1548602	-632.1286857	-632.1375639	-632.1292456	-632.1548602
μ (D)	2.3508	1.7028	0.6740	1.8521	2.3506
E_{HOMO} (eV)	-6.234	-6.505	-6.284	-6.483	-6.234
E_{LUMO} (eV)	-2.089	-1.722	-2.102	-1.713	-2.089
ΔE (eV)	4.145	4.783	4.182	4.770	4.145
χ (eV)	4.162	4.113	4.193	4.098	4.162
η (eV)	2.073	2.392	2.091	2.385	2.073
σ (eV)	0.4825	0.4182	0.4783	0.4193	0.4826
α ($\times 10^{-24}$ esu)	26.876	25.186	27.271	25.133	27.400
β ($\times 10^{-30}$ esu)	3.885	3.766	1.169	3.601	3.886

HOMO-LUMO bant aralığı önemli bir kararlılık indeksidir (Lewis at al.,1994). Büyük bir HOMO-LUMO boşluğu, kimyasal reaksiyonlarda düşük reaktivite anlamında olup, molekülün yüksek kararlılığını gösterir (Pearson, 1989; Zhou ve Parr, 1990). Çalışmada HOMO-LUMO arasındaki enerji farkı ($\Delta E = E_{LUMO} -$

E_{HOMO}) sırasıyla 4.145, 4.783, 4.182, 4.770 ve 4.145 eV olarak hesaplanmıştır (Çizelge 1). Mevcut yapılar için HOMO-LUMO enerji boşlukları nispeten yüksektir, bu da asit baz tipi reaksiyonlar yoluyla yapıların stabilitesini önerebilir.

Çalışmada HOMO-LUMO enerji farklarından hesaplanan sertlik ve yumuşaklık moleküler parametreleri de molekülün kararlılığının göstergesidir. Tüm yapıların yüksek sertlik düşük yumuşaklık değerlerine sahip olduğu yapılan hesaplamalar sonucunda bulundu.

Kararlı konformasyonel yapıların kutuplanabilirlik ve hiperkutuplanabilirlik değerlerine bakıldığında, kutuplanabilirlik yüksek olduğunda HOMO-LUMO enerji farkının düşük; hiperkutuplanabilirlik yüksek olduğunda dipol momentinde maksimum olduğu görülmüştür. Kararsız konformasyonel yapılarda ise HOMO-LUMO enerji farkının artması, dipol momentin azalmasıyla kutuplanabilirlik ve hiperkutuplanabilirlik değeri kararlı yapılara kıyasla düştüğü gözlemlendi.

SONUÇ

Bileşik, üç boyutlu geometrisi ve elektronik yapısı hakkında bilgi elde etmek için hesaplamalı olarak incelendi. Bileşiğin iki ana parçasını birleştiren bağ çevresinde yapılan konformasyon analiz, 0° dihedral açının, oksijen ve azot atomları için en uygun hizalama olduğunu gösterdi. Konformasyonel yapılar için MEP haritalarındaki yapı içi elektron dağılımına bakıldığında elektron çekici azot ve oksijenin birbirine yakın olduğu yapıların kararlı öte yandan bu atomların birbirinden uzaklaştığı konformasyonların kararsız olduğu gözlemlendi.

HOMO-LUMO arasındaki enerji farkları hem kararlı hem de kararsız konformasyonlarda yüksektir. Bu enerji aralığı ile molekülün tüm konformasyonel yapılarının yüksek kinetik kararlılığa ve düşük kimyasal reaktiviteye sahip olduğu da söylenebilir. Diğer taraftan hesaplanan elektronik parametrelere bakıldığında yüksek sertlik ve düşük yumuşaklık da yapıların kararlılığının diğer göstergesidir.

Doğrusal olmayan optik özellik gösteren bileşiklerde üre referans olarak kullanılmaktadır. Ürenin hiperkutuplanabilirlik değeri DFT/B3LYP teori düzeyinde 6-311++G(d,p)

temel setinde hesaplandı ve 0.766×10^{-30} esu olarak bulundu. İlgili molekülün tüm konformasyonel yapılarının üreden daha yüksek hiperkutuplanabilirlik değerine sahip olduğu görüldü.

KAYNAKLAR

- Aggarwal MD, Stephens J, Batra AK, Lal RB, 2003. Bulk Growth and Characterization of Semiorganic Nonlinear Optical Materials. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 5(3): 555- 562.
- Becke AD, 1988. Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior. *Physical Review A*, 38(6): 3098-3100.
- Cramer CJ, 2004. *Essentials of Computational Chemistry*. John Wiley and Sons, pp. 596, London.
- Denningto R, Keith T, Millam J, 2009. GaussView, Version 5. Semichem Inc., Shawnee Mission KS.
- Fleming I, 1976. *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*. Wiley Interscience, pp. 250, New York.
- 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 TJ, Peralta JE, Ogliaro F, Bearpark M, Heyd JJ, Brothers E, Kudin N, Staroverov VN, Kobayashi R, Normand J, Raghavachari K, Rendell A, Burant JC, Iyengar SS, Tomasi J, Cossi M, Rega N, Millam JM, Klene M, Knox JE, Cross J B, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli CJ, 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 DJ, 2009. Gaussian Inc., Wallingford, CT.
- Fukui K, 1982. Role of Frontier Orbitals in Chemical Reactions. *Science*, 218(4574): 747-754.
- Govindarajan M, Periandy S, Carthigayen K, 2012. FT-IR and FT-Raman Spectra, Thermo Dynamical Behavior, HOMO and LUMO, UV, NLO Properties, Computed Frequency Estimation Analysis and Electronic Structure Calculations on α -Bromotoluene. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 97: 411-422.
- Guo P, Ma R, Guo L, Yang L, Liu J, Zhang X, Pan X, Dai S, 2010. Theoretical Study on The Electronic Absorption Spectra and Molecular Orbitals of Ten Novel Ruthenium Sensitizers Derived From N3 And K8. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 29(3): 498-505.
- Insin DO, Karakus N, 2015. Quantum Chemical Study on The Inhibition Efficiencies of Some Sym-Triazines As Inhibitors for Mild Steel in Acidic Medium. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 50: 306-313.
- Lee C, Yang W, Parr RG, 1998. Development of The Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into A Functional of The Electron Density. *Physical Review B*, 37(2): 785-789.
- Leszczynski J, 2006. Non-Linear Optical Properties of Matter. Springer, Dordrecht, pp. 676, The Netherlands.
- Levine IN, 2000. Many-Electron Atoms. *Quantum chemistry*, pp. 739, Prentice-Hall Inc., New Jersey.
- Lewis DFV, Ioannides C, Parke DV, 1994. Interaction of A Series of Nitriles with The Alcohol-Inducible Isoform of P450: Computer Analysis of Structureactivity Relationships. *Xenobiotica*, 24: 401-408.
- Macho V, Králik M, Hudec J, Cingelova J, 2004. One Stage Preparation of Schiff's Bases from Nitroarenes Aldehydes and Carbon Monoxide at Presence of Water. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, 209(1-2): 69-73.
- Pearson RG, 1989. Absolute Electronegativity and Hardness: Applications to Organic Chemistry. *Journal of Organic Chemistry*, 54: 1423-1430.
- Sebastian S, Sylvestre S, Sundaraganesan N, Amalanathan M, Ayyapan S, Oudayakumar K, Karthikeyan B, 2013. Vibrational Spectra, Molecular Structure, Natural Bond Orbital, First Order Hyperpolarizability, TD-DFT and Thermodynamic Analysis of 4-Amino-3-Hydroxy-1-Naphthalenesulfonic Acid by DFT Approach. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 107: 167-178.
- Turhan Irak Z, Gumus S, 2017. Heterotricyclic Compounds via Click Reaction: A Computational Study. *Noble International Journal of Scientific Research*, 01 (07): 80-89.
- Zhou X, Cui J, Li ZH, Wang G, Liu Z, Zhou M, 2013. Carbonyl Bonding on Oxophilic Metal Centers: Infrared Photodissociation Spectroscopy of Mononuclear and Dinuclear Titanium Carbonyl Cation Complexes. *The Journal of Physical Chemistry A*, 117(7): 1514-1521.
- Zhou Z, Parr RG, 1990. Activation Hardness: New Index for Describing The Orientation of Electrophilic Aromatic Substitution. *Journal of the American Chemical Society*, 112: 5720-5724.
- Zyss J, 1994. *Molecular Non linear Optics: Materials, Physics and Devices* Academic Press. New York.