

PAPER DETAILS

TITLE: 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol Molekülünün Titresim Spektroskopisi ve Moleküler Yapısının Konformasyonel Kararlılığının ab initio Hartree-Fock ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile İncelenmesi

AUTHORS: Erol TASAL

PAGES: 1-19

ORIGINAL PDF URL: <https://dergipark.org.tr/tr/download/article-file/478164>

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol Molekülünün Titreşim Spektroskopisi ve Moleküler Yapısının Konformasyonel Kararlılığının *ab initio* Hartree-Fock ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile İncelenmesi

Erol Taşal ^{*a}

^aEskişehir Osmangazi Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 26480, Eskişehir, Türkiye

Öz

Bu çalışmada, 2-[(4-hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün titreşim spektroskopisi ve moleküler yapısının konformasyonel kararlılığı *ab initio* Hartree-Fock ve yoğunluk fonksiyoneli teorileri ile incelenmiştir. Azo aromatik moleküller, boya endüstrisinde sıvı kristaller için mükemmel foto düzenleme substratları, yüksek verimli foto kırılma ortamı, asit-baz, redoks ve metalkrom indikatörleri, optik aktuatörler, optik bilgi depolama ortamı olarak kullanıldıklarından dolayı yoğun olarak ilgi duyulan moleküllerdir. Azo boyalar aynı zamanda ultraviyole ışığa maruz kalan katalizörler olarak fotokatalitik reaksiyonlarda kullanılırlar.

Anahtar Kelimeler: YFT, HF, FT-IR, Termodinamik Parametreler

ab-initio Hartree-Fock and Density Functional Theory Investigations on The Conformational Stability, Molecular Structure and Vibrational Spectra of 2-[(4-Hydroxyphenyl)diazenyl]benzene-1,3,5-triol Molecule

Abstract

In this work, the vibrational spectroscopy and the conformational stability of the molecular structure of 2-[(4-hydroxyphenyl)diazenyl]benzene-1,3,5-triol molecule were investigated by *ab initio* Hartree-Fock and density functional theories. Azo aromatic molecules in the paint industry liquid crystals the perfect photo editing substrates, highly efficient photo-refractive medium, acid-base redox and metalchrome indicator, optical actuators, optical information storage medium used because they heavily interest are molecules. Azo dyes are also used in photocatalytic reactions as catalysts exposed to ultraviolet light.

Keywords: DFT, HF, FT-IR, Thermodynamic Parameters

* Corresponding author:
e-mail: eroltasal@gmail.com

Received: 12.10.2017

Accepted: 07.05.2018

Giriş

Cisimlerin renklendirilmesi boyamak kelimesiyle ifade edilir. Cisimlerin yüzeyinin ya dış tesirlerden korunması ya da güzel bir görünüm sağlaması için renkli hale getirilmesinde kullanılan maddelerde *boya* (İng. pigment, paint) denir. Konuşma dilinde çoğu kez boya ve boyar madde kelimelerini birbirinin yerine kullanırız. Bu iki sözcük eşanlamlı değildir. Boyalar bir bağlayıcı fırça ve boyama tabancaları ile uygulanır. Boyanan yüzey, yağın kuruması ile oldukça kalın yeni bir tabaka ile kaplanır. Bu işlem gerçekte bir boyama değil örtmedir. Genellikle boyalar anorganik yapıdadırlar. Ancak, organik yapıda da olabilirler. Uyguladıkları yüzeyde hiçbir değişiklik yapmazlar. Kazımakla yüzeyden büyük parçalar halinde uzaklaştırılabilirler [1-3].

Cisimleri (kumaş, elyaf vb.) renkli hale getirmede uygulanan maddelere ise *boyar madde* (İng. dye, dyestuff) denir. Ancak, her renk veren veya renkli olan madde boyar madde değildir. Genellikle çözeltiler veya süspansiyonlar halinde çeşitli boyama yöntemleriyle uygulanırlar. Bütün boyar maddeler organik bileşiklerdir. Boyanacak cisimler boyar madde ile devamlı ve dayanıklı bir şekilde birleşerek cismin yüzeyini yapı bakımından değiştirirler. Genellikle boyar

madde, cismin yüzeyi ile kimyasal veya fiziko-kimyasal bir ilişkiye girerek birleşmiştir. Boyanan yüzey kazıma, silme, yıkama gibi fiziksel işlemlerle başlangıçtaki renksiz durumunu alamaz [1].

Azo boyar maddeleri sınıfı en büyük organik boyar madde sınıfıdır. Bunların yapılarında kromofor grup olan azo ($-N=N-$) grubu ile karakterize edilirler [2]. Azoaromatik moleküller optik aktivatörler, redoks ve metalkrom indikatör, asit-baz, yüksek verimli fotorefraktif ortam, sıvı kristaller için mükemmel foto işaretleme substratı olarak boyar madde endüstrisindeki uygulamalarından dolayı önemli ölçüde dikkat çeken moleküllerdir. Azo boyalar UV ışığa maruz bırakılarak foto-katalitik reaksiyonlarda katalizör olarak da kullanılmaktadır [4]. Günümüze kadar çok sayıda yapısında azo grubu bulunan tek kristaller sentezlenmiş ve sentezlenmeye devam etmektedir [5-9].

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün üç boyuttaki yaklaşık geometrisi GaussView programında çizilerek Gaussian03 paket programında giriş verileri olarak kullanılmıştır. Bu program yardımıyla molekülün kararlı haldeki bağ uzunlukları, bağ açıları ve infrared titreşimleri

yoğunluk fonksiyoneli teorisi ve *ab initio* Hartree-Fock teorisi kullanılarak gaz fazında hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda değişik fonksiyoneller ve baz setleri kullanılmıştır.

Materyal ve Yöntem

Moleküler Optimizasyon ve Termodinamik Parametreler

Bu çalışmada, 2-[(4-hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün infrared spektrumu $4000-400\text{ cm}^{-1}$ bölgesinde Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Laboratuvarında bulunan Mattson 1000 FT-IR Spektrometresi kullanılarak katı fazda kaydedilmiştir. Spektrum incelenerek, bileşiğin olabilecek mümkün yapıları tartışılmış ve elde edilen titreşim frekansları deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır.

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün katıhal FT-IR spektrumu, Mattson 1000 FT-IR Spektrometresi kullanılarak KBr tekniğiyle $4000-400\text{ cm}^{-1}$ bölgesi arasında kaydedilmiştir.

Hesaplamaların ilk adımı olarak, 2-[(4-hidroksifenil)diazenil]benzen 1,3,5-triol molekülünün konformasyonel analizinin en kararlı konformer yapısı elde edildi. Moleküllerin potansiyel enerji

eğrileri HF/3-21G temel seti kullanılarak D1 (C2-C3-O15-H22), D2 (C1-C6-N7-N8), D3 (N7-N8-C9-C10), D4 (C11-C10-O16-H20), D5 (C11-C12-O18-H21) ve D6 (C13-C14-O17-H19) dihedral açılarının serbest döndürülmesiyle elde edilmiştir. Bu yapıların geometrik parametreleri *ab initio* HF/3-21G metodu kullanılarak optimize edilmiştir. Düşük enerjili konformerler D1-6 dihedral açılarının potansiyel dönmeleri HF/3-21G temel setiyle elde edilmiştir. Elde edilen her bir konformasyonel imajiner frekansın yokluğu ve potansiyel enerji yüzeylerindeki minimum noktalarının uyum içinde olduğu doğrulanmıştır [10].

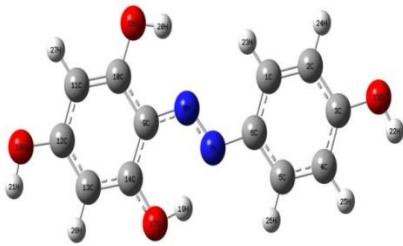
2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün moleküler geometrisi için en düşük enerjili konformer, HF ve YFT (B3LYP) metodlarının her biri için, 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), 6-31++G(d,p), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p) ve 6-311++G(d,p) temel setleri kullanılarak yeniden optimize edilmiştir. Her bir normal mod üzerine yansıyan iç koordinatların relatif ağırlıklarının yüzdesi Gaussian 03W programıyla hesaplanmıştır [11,12].

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün atomik yük, moleküler kutuplanabilirlik ve dipol moment hesaplamaları gibi bazı moleküler özellikler, HF ve YFT (B3LYP) metodları

ve 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), 6-31++G(d,p), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p) ve 6-311++G(d,p) temel setleri kullanılarak yapılmıştır [13,14].

2-[(4-Hidroksifenil) diazenil] benzen-1,3,5-triol Molekülünün Konformasyonel Kararlılığı

2-[(4-Hidroksifenil) diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün B3LYP/6-311++G(d,p) metoduyla optimize edilmiş yapısı ve atom numaraları Şekil 1'de gösterilmiştir. 2-[(4-hidroksifenil) diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün konformasyonel kararlılığına etki eden altı tane zincir grubu vardır. Bu zincirler 2-[(4-hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülü için D1, D2, D3, D4, D5 ve D6 dihedral açıları molekülünün konformasyonel esnekliği ile ilgili olan açılardır.

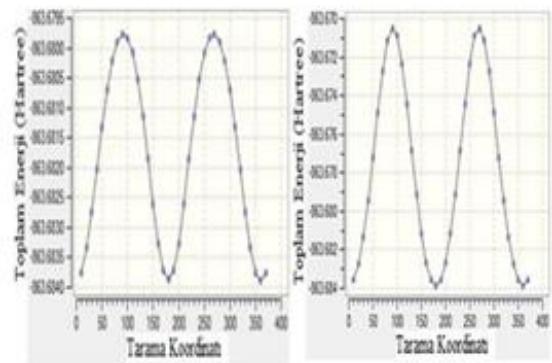


Şekil 1. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün B3LYP/ 6-311++G(d,p) metoduyla optimize edilmiş yapısı ve atom numaraları

Bu 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]

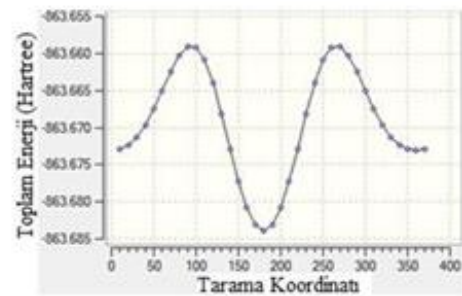
benzen-1,3,5-triol molekülünün farklı konformasyonlarının olası durumları D1-6'ya bağlıdır. Molekülün her bir dihedral için üç koordinat sistemi mevcuttur. Böylece $3^6=729$ tane olası konformer elde edilebilir [15].

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün konformerlerini elde etmek için dihedral açıların tarama prosedürü D1-6 dihedral açıların her bir sabit değerlerinde uygulanarak, diğer bütün geometrik parametreleri HF/3-21G metoduyla optimize edilmiştir. D1-6 dönme koordinatlarının değişimi 10° 'lik adımlarla 0° 'den 360° 'ye kadar hesaplanmıştır ve Şekil 2'de gösterilmiştir.

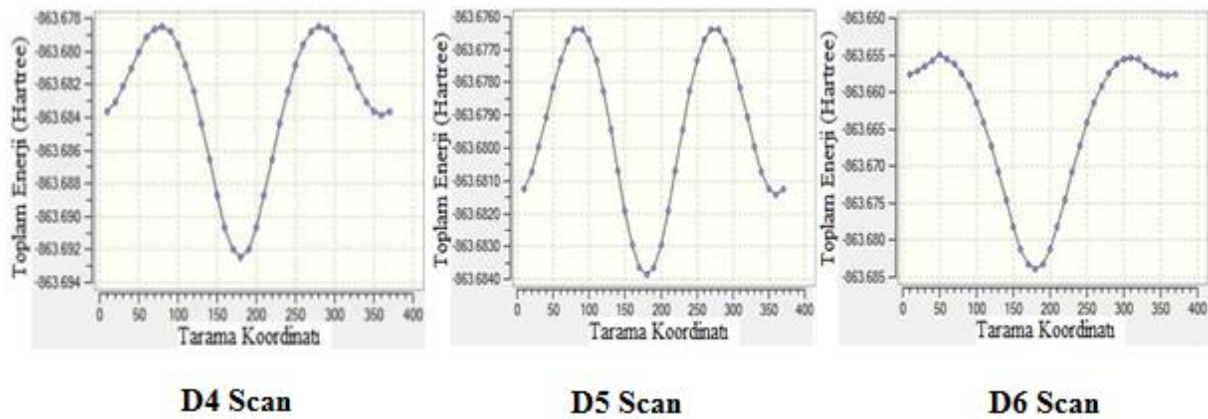


D1 Scan

D2 Scan

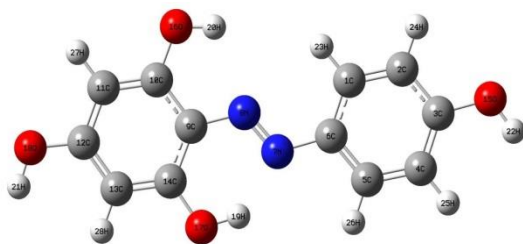


D3 Scan

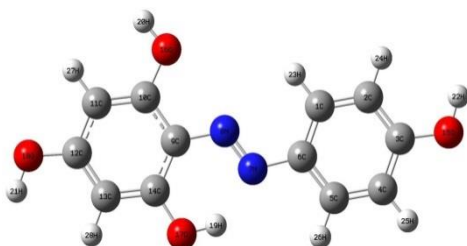


Şekil 2. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülü için HF/3-21G metoduyla hesaplanan D1-6 dihedral açılarının dönme enerji eğrileri

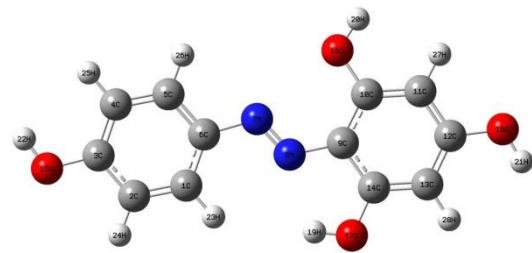
Konformerlerin HF/3-21G metoduyla optimize edilmiş geometrileri Şekil 3’de gösterilmiş ve gaz fazı relatif enerjileri, karakteristik dönme açıları, bazı relatif termodinamik parametreleri ve dipol momentleri Tablo 1’de listelenmiştir. K_1 konformerlerinin en kararlı form olduğu açıktır. Böylece çalışmada moleküllerin bu formu üzerine odaklanarak moleküler yapı ve titreşim spektrumlarının tayinleri yapılmıştır.



K_1



K_2



K_3

Şekil 3. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün HF/3-21G ile optimize edilmiş 3 konformerinin geometrik yapısı

Tablo 1. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün en kararlı konformerlerinin HF/3-21G metoduyla hesaplanan, karakteristik ve relatif termodinamik verileri

Konformerler	K_1	K_2	K_3
D1	-180	0	180
D2	0	0	0
D3	180	180	0
D4	180	0	0
D5	180	180	-180
D6	-180	180	180
E_T (Hartree)	-863.692462	-863.683899	-863.673095
ΔE (kcal/mol)	0.00	5.37	12.15

μ (Debye)	4.14	2.34	1.90
---------------	------	------	------

2-[(4-Hidroksifenil) diazenil] benzen-1,3,5-triol Molekülünün Moleküler Yapısı

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün şematik gösterimi ve B3LYP/6-311++G(d,p) metoduyla optimize edilmiş yapısı gösterilmiştir (Şekil 1). Molekülün *ab initio* HF ve YFT (B3LYP) metodları ve 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), 6-31++G(d,p), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p) ve 6-311++G(d,p) temel setleriyle optimize edilmiş bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açıları ise Tablo 2'de verilmiştir. Molekülünün bağ uzunluklarının, bağ açılarının ve dihedral açılarının geometrik optimizasyonu, simetri sınırlandırması olmadan optimize edilmiştir. Optimize edilmiş moleküler yapı teorik olarak elde edilen sonuçlara göre incelenmiş ve yorumlanmıştır. Tablo 2.a-b'de bulunan YFT (B3LYP) metoduyla hesaplanmış bağ açıları ve dihedral açılar HF metoduyla uyum içindedir fakat HF metoduyla hesaplanan bağ uzunluklarının, YFT (B3LYP) metoduyla hesaplanan bağ uzunluklarından daha kısa olduğu görülmüştür. Yapıdaki N=N bağ uzunluğu

E_T toplam enerji, ΔE ; relatif enerji

önceki çalışmalarda 1.260(2) Å [5], 1.2553(17) Å [6], 1.264(2) Å [7], 1.238(5) Å [8], 1.250 Å [9] ve 1.255(5) Å [16] olarak rapor edilmiştir. Molekülün YFT/6-311+G(d,p) baz setiyle yapılan hesaplamasında N7-N8 bağ uzunluğu diğer baz setleriyle yapılan hesaplamalara göre literatürle daha uyumlu olduğu ve HF/6-311++G(d,p) ile yapılan teorik hesaplamasının diğer baz setleriyle yapılan teorik hesaplamalara göre literatürdeki deneysel N=N bağı uzunluğuyla daha uyumlu olduğu görülmüştür. Yapıdaki fenil halkasının C6 atomu ile bağ yapan N7 atomu arasındaki bağ uzunluğu YFT ve HF metodunda uygulanan baz setleriyle sırasıyla 1.406-1.419 Å ve 1.415-1.417 Å aralığında hesaplanmıştır. Literatürde ise C-N bağ uzunluğu 1.413(2) Å [5], 1.4176(18) Å [6], 1.411(2) Å [7], 1.427(2) Å [8], 1.416(2) Å [9], 1.410(7) Å [16], 1.40476 Å [17], 1.392 Å [18] ve 1.40736 Å [19] olarak rapor edilmiştir. Deneysel ve teorik değerlerdeki farklılık teorik değerlerin gaz halde izole moleküller için, deneysel değerlerin ise katı haldeki moleküller için elde edilmesidir.

Tablo 2.a. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün YFT yöntemiyle hesaplanan bağ uzunlukları(Å), bağ ve dihedral açıları (°)

Parametreler	YFT					
	6-31G(d,p)	6-31+G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311G(d,p)	6-311+G(d,p)	6-311++G(d,p)
Bağ uzunluğu (Å)						
O15-C3	1.364	1.394	1.362	1.366	1.37	1.362
C6-N7	1.407	1.407	1.406	1.408	1.419	1.406
N7-N8	1.272	1.272	1.273	1.277	1.248	1.279

N8-C9	1.375	1.375	1.374	1.376	1.395	1.374
C10-O16	1.349	1.349	1.346	1.352	1.356	1.348
C12-O18	1.36	1.359	1.357	1.362	1.362	1.358
C14-O17	1.339	1.339	1.336	1.342	1.348	1.338
r<C-C>	1.400	1.400	1.400	1.403	1.385	1.403
r<C-H>	1.083	1.083	1.083	1.085	1.069	1.085
Bağ açısı (°)						
O15-C3-C4	122.9	122.9	123	122.9	123.4	122.9
C5-C6-N7	116.2	116.2	116.3	116.1	116.6	116.2
N7-C6-C1	124.9	124.9	124.9	124.9	124.4	124.9
C2-C3-O15	117.2	117.2	117.3	117.1	117	117.2
C6-N7-N8	117.1	117.1	117	117	117.4	116.9
N7-N8-C9	117.7	117.7	117.7	117.5	119.2	117.4
N8-C9-C10	115.3	115.3	115.2	115.4	115.2	115.1
C9-C10-O16	119.3	119.3	119.2	119.4	120	119.1
O16-C10-C11	119.4	119.4	119.7	119.3	119.2	119.8
C11-C12-O18	116.4	116.4	116.4	116.3	116.8	116.4
O18-C12-C13	121.4	121.4	121.5	121.4	122	121.4
C13-C14-O17	119.4	119.4	119.5	119.5	118.5	119.7
O17-C14-C9	120.7	120.7	120.7	120.5	121.9	120.6
C14-C9-N8	126.1	126.1	126.0	126.0	125.5	126.0
θ<C-C-C>	120.0	120.0	120.0	120.0	120.0	120.0
Dihedral açı (°)						
O15-C3-C4-C5	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	180.0	-180.0
C4-C5-C6-N7	180.0	180.0	-180.0	180.0	-180.0	180.0
N7-C6-C1-C2	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	180.0	-180.0
C1-C2-C3-O15	180.0	-180.0	-180.0	180.0	-180.0	180.0
C5-C6-N7-N8	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
N8-N7-C6-C1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
C6-N7-N8-C9	-180.0	-180.0	180.0	-180.0	180.0	-180.0
N7-N8-C9-C10	-180.0	180.0	180.0	-180.0	180.0	180.0
N8-C9-C10-C11	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	-180.0
N8-C9-C10-O16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
O16-C10-C11-C12	180.0	180.0	-180.0	180.0	-180.0	-180.0
C10-C11-C12-O18	-180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
O18-C12-C13-C14	-180.0	-180.0	180.0	-180.0	-180.0	180.0
C12-C13-C14-O17	180.0	180.0	-180.0	180.0	-180.0	-180.0
O17-C14-C9-N8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
O17-C14-C9-C10	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	180.0	180.0
C14-C9-C10-O16	180.0	180.0	180.0	180.0	-180.0	180.0
C13-C14-C9-N8	-180.0	-180.0	180.0	-180.0	-180.0	180.0
C14-C9-N8-N7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
φ<C-C-C-C>	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Tablo 2.b. 2-[(4-Hidroksifenil)diazetil]benzen-1,3,5-triol molekülünün HF yöntemiyle hesaplanan bağ uzunlukları(Å), bağ ve dihedral açıları (°)

Parametreler	HF					
	6-31G(d,p)	6-31+G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311G(d,p)	6-311+G(d,p)	6-311++G(d,p)
Bağ uzunluğu (Å)						
O15-C3	1.346	1.346	1.346	1.348	1.348	1.347
C6-N7	1.417	1.417	1.416	1.417	1.417	1.415
N7-N8	1.222	1.222	1.222	1.226	1.226	1.227
N8-C9	1.394	1.394	1.394	1.394	1.394	1.393
C10-O16	1.333	1.333	1.332	1.334	1.334	1.333
C12-O18	1.339	1.339	1.338	1.34	1.34	1.339
C14-O17	1.326	1.326	1.325	1.328	1.328	1.326
r<C-C>	1.389	1.389	1.388	1.390	1.390	1.389
r<C-H>	1.074	1.074	1.074	1.074	1.074	1.074
Bağ açısı (°)						
O15-C3-C4	122.8	122.8	122.9	122.8	122.8	122.8
C5-C6-N7	116.1	116.1	116.2	116.1	116.1	116.1
N7-C6-C1	124.8	124.8	124.8	124.8	124.8	124.9
C2-C3-O15	117.3	117.3	117.3	117.2	117.2	117.3
C6-N7-N8	117.1	117.1	117.1	117.0	117.0	117.0
N7-N8-C9	118.9	118.9	118.9	118.9	118.9	118.9
N8-C9-C10	115.1	115.1	115.1	115.1	115.1	115.0
C9-C10-O16	120.3	120.3	120.3	120.3	120.3	120.2
O16-C10-C11	118.0	118.0	118.1	118.0	118.0	118.2
C11-C12-O18	116.9	116.9	116.9	116.9	116.9	116.9
O18-C12-C13	121.3	121.3	121.3	121.3	121.3	121.3
C13-C14-O17	117.6	117.6	117.6	117.5	117.5	117.6
O17-C14-C9	122.2	122.2	122.2	122.2	122.2	122.2
C14-C9-N8	126.5	126.5	126.5	126.6	126.6	126.5
θ<C-C-C>	120.0	120.0	120.0	120.0	120.0	120.0
Dihedral açı (°)						
O15-C3-C4-C5	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0
C4-C5-C6-N7	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0
N7-C6-C1-C2	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	180.0	-180.0
C1-C2-C3-O15	180.0	-180.0	180.0	-180.0	-180.0	-180.0
C5-C6-N7-N8	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
N8-N7-C6-C1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
C6-N7-N8-C9	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
N7-N8-C9-C10	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
N8-C9-C10-C11	180.0	180.0	180.0	-180.0	-180.0	180.0
N8-C9-C10-O16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
O16-C10-C11-C12	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0
C10-C11-C12-O18	180.0	180.0	-180.0	-180.0	-180.0	180.0
O18-C12-C13-C14	-180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
C12-C13-C14-O17	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0	-180.0
O17-C14-C9-N8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
O17-C14-C9-C10	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
C14-C9-C10-O16	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0	180.0
C13-C14-C9-N8	-180.0	-180.0	-180.0	180.0	180.0	-180.0
C14-C9-N8-N7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

$\phi<C-C-C-C>$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
-----------------	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Molekülün bazı termodinamik düzeltme enerjisi vb.) Tablo 3.a-b’de parametre değerleri (örneğin sıfır-noktası listelenmiştir. titreşim enerjisi, E_{HOMO} , E_{LUMO} , termal

Tablo 3.a. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün YFT yöntemiyle hesaplanan bazı termodinamik parametre değerleri

Termodinamik parametreler	YFT 6-11++G(d,p)	YFT 6-311+G(d,p)	YFT 6-311G(d,p)	YFT 6-31++G(d,p)	B3LYP 6-31+G(d,p)	B3LYP 6-31G(d,p)
Toplam enerji (a.u.)	-873.919	-873.919	-873.898	-873.724	-873.724	-873.684
Sıfır-noktası (kJ mol ⁻¹)	544.4	544.9	546.5	546.5	546.7	548.8
Enerjinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	584.1	584.5	585.7	585.8	586	587.8
Entalpinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	586.6	586.9	588.2	588.3	588.5	590.3
Gibbs serbest enerjisinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	429.4	430.3	432.2	432.1	433.3	436.1
Cv (Isı kapasitesi) (J mol ⁻¹ K ⁻¹)						
Toplam	250.8	250.3	248.7	249.5	249.2	247.8
Ötelenme	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47
Dönme	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47
Titreşim	225.9	225.3	223.7	224.5	224.3	222.8
S (Entropi) Cal/Mol-Kelvin						
Toplam	527.1	525.3	523	524.2	520.4	517.1
Ötelenme	177.4	177.4	177.4	177.4	177.4	177.4
Dönme	140.1	140.1	140.1	140.1	140.1	140.1
Titreşim	209.6	207.8	205.5	206.6	202.8	199.6
E_{HOMO} (eV)	-6.075	-6.075	-5.883	-6.019	-6.02	-5.649
E_{LUMO} (eV)	-2.489	-2.489	-2.258	-2.418	-2.419	-1.995
$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$ (eV)	3.586	3.586	3.625	3.601	3.601	3.654
Dipol Moment (D)	3.323	3.322	3.235	3.334	3.337	3.226

Tablo 3.b. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün HF yöntemiyle hesaplanan bazı termodinamik parametre değerleri

Termodinamik parametreler	HF 6-11G++(d,p)	HF 6-11G+(d,p)	HF 6-11G(d,p)	HF 6-31G++(d,p)	HF 6-31G+(d,p)	HF 6-31G(d,p)
Toplam enerji (a.u.)	-868.774	-868.774	-868.758	-868.599	-868.6	-868.574
Sıfır-noktası (kJ mol ⁻¹)	586.9	587.1	588.9	589.6	589.9	592.3
Enerjinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	622.1	622.3	623.7	624.6	624.8	629.3

Entalpinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	624.6	624.8	626.2	627	627.3	631.8
Gibbs serbest enerjisinin termal düzeltmesi (kJ mol ⁻¹)	481.2	481.5	483.8	484.1	484.5	479.2
Cv (Isı kapasitesi) (J mol ⁻¹ K ⁻¹)						
Toplam	228.2	229.9	226.4	227.1	226.8	233.5
Ötellenme	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47
Dönme	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47	12.47
Titreşim	203.3	203.1	201.4	202.2	201.8	208.6
S (Entropi) Cal/Mol-Kelvin						
Toplam	480.9	480.7	477.8	479.4	479	511.8
Ötellenme	177.4	177.4	177.4	177.4	177.4	177.4
Dönme	140	140	140	140	140	140
Titreşim	163.5	163.3	160.4	162	161.6	194.4
EHOMO (eV)	-8.087	-8.088	-7.981	-8.069	-8.07	-7.871
ELUMO (eV)	0.857	1.138	1.399	0.888	1.183	1.578
Eg=ELUMO - HOMO (eV)	8.944	9.226	9.38	8.957	9.254	9.449
Dipol Moment (D)	3.704	3.705	3.655	3.729	3.731	3.689

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol Molekülünün Diğer Moleküler Özellikleri

2-[(4-Hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülünün dipol moment ve enerji değerleri hesaplanıp Tablo 4’de gösterilmiştir. Dipol moment, moleküler yük dağılımını yansıtır ve üç boyutlu bir vektör olarak verilir. Bundan dolayı molekül içindeki yük hareketini şekille açıklamak için kullanılabilir.

Mulliken yük yoğunluğu dağılımları her bir atomun elektron popülasyonu belirlenerek hesaplanmıştır. Çeşitli metotlar ve temel setler kullanılarak hesaplanan Mulliken yük yoğunluklarının

değerleri Tablo 4’de listelenmiştir. Sonuçların daha iyi anlaşılabilmesi için grafiksel gösterimi Şekil 4’de gösterilmiştir. Atomların Mulliken yük yoğunluğu birçok farklı temel setlerle hesaplanmıştır.

Tablo 4’deki sonuçlar ve ilgili şekiller yük yoğunluğu dağılımının farklı temel setlere bağlı değiştiğini gösterir. Temel setlerdeki yük yoğunluğu değişim sebebi kutuplanabilirliktir. Tüm metodlar ve temel setlerin atomik yük yoğunluklarının hesaplamaları göz önüne alınırsa, 2-[(4-hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülü için; C5, N7, N8, O15, O17, ve O18 atomlarının donör (verici), negatif yüklü olduğu söylenebilir. C14 atomu ise akseptör (alıcı), pozitif yüklüdür.

Tablo 4. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün farklı metod ve temel setlerde hesaplanan atomik yük yoğunlukları

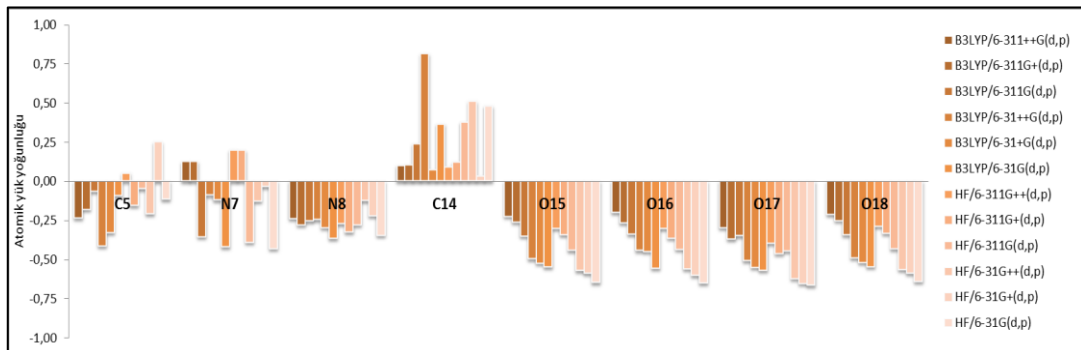
Temel Setler	C5	N7	N8	C14	O15	O16	O17	O18
YFT/6-311++G(d,p)	-0.237	0.125	-0.239	0.101	-0.225	-0.2	-0.298	-0.213
YFT/6-311+G(d,p)	-0.181	0.126	-0.28	0.105	-0.262	-0.267	-0.371	-0.252
YFT/6-311G(d,p)	-0.065	-0.356	-0.256	0.24	-0.351	-0.34	-0.35	-0.345
YFT/6-31++G(d,p)	-0.415	-0.09	-0.247	0.815	-0.498	-0.444	-0.509	-0.491
YFT/6-31+G(d,p)	-0.33	-0.121	-0.298	0.071	-0.525	-0.45	-0.552	-0.521
YFT/6-31G(d,p)	-0.095	-0.421	-0.367	0.366	-0.55	-0.558	0.571	-0.548
HF/6-311++G(d,p)	0.052	0.2	-0.274	0.09	-0.303	-0.304	-0.398	-0.288
HF/6-311+G(d,p)	-0.156	0.198	-0.327	0.123	-0.343	-0.364	-0.465	-0.334
HF/6-311G(d,p)	-0.05	-0.392	-0.281	0.378	-0.444	-0.437	-0.447	-0.434
HF/6-31G++(d,p)	-0.21	-0.128	-0.126	0.511	-0.573	-0.562	-0.624	-0.567
HF/6-31G+(d,p)	0.251	-0.035	-0.222	0.032	-0.59	-0.604	-0.655	-0.59
HF/6-31G(d,p)	-0.117	-0.432	-0.347	0.482	-0.649	-0.653	-0.667	-0.643

Elektronların dağılımı hakkında bilgi edinmenin bir başka yolu dipol kutuplanabilirliğini hesaplamaktır. Bir molekülün elektrik alana maruz kalması şeklindeki değişiklik kutuplanabilirlik ile belirlenir. Kutuplanabilirlik molekül sisteminin yük yoğunluğu ve elektronik dağılımı gibi özelliklerinin bir ölçüsü olduğundan, moleküler optik ve spektroskopide kullanılan özenli bir

niceliktir. Bu çalışmanın amaçlarından biri de molekülün moleküler kutuplanabilirliği üzerindeki metodların ve temel setlerin etkisini incelemektir.

Denklem 1’de α ikinci dereceden bir rank tensörüdür ve $\langle \alpha \rangle$ dipol kutuplanabilirlik diye adlandırılır.

$$\langle \alpha \rangle = \frac{1}{3} (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (1)$$

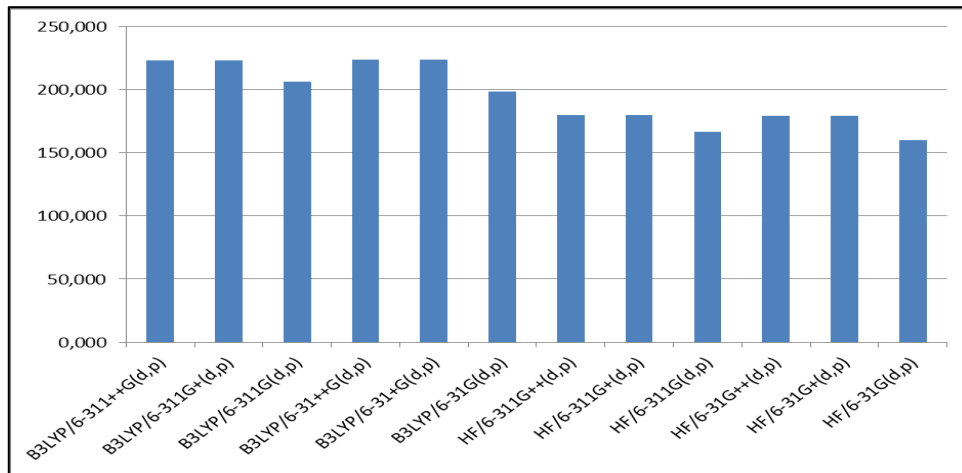
**Şekil 4.** 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün B3LYP ve HF metodlarının farklı temel setlerine göre atomik yük yoğunluklarındaki değişimi

Tablo 5’de birçok metod ve temel setle hesaplanan kutuplanabilirlik değerleri vardır. Şekil 5’den de görüleceği gibi en büyük dipol kutuplanabilirlik; 2-[(4-

hidroksifenil)diazenil] benzen-1,3,5-triol molekülü için ise (223.921 Hartree) B3LYP/6-31++G(d,p) metoduyla hesaplanmıştır.

Tablo 5. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülü için hesaplanan kutuplanabilirlikler (Hartree)

Temel Setler	α_{xx}	α_{xy}	α_{yy}	α_{xz}	α_{yz}	α_{zz}	$\langle\alpha\rangle$
YFT/6-311++G(d,p)	406.198	-2.641	174.949	0.001	0	88.010	223.052
YFT/6-311+G(d,p)	406.102	-2.644	174.873	0.001	0	87.863	222.946
YFT/6-311G(d,p)	391.050	-2.861	163.388	0	-0.001	64.744	206.394
YFT/6-31++G(d,p)	407.650	-2.616	175.948	0	-0.001	88.164	223.921
YFT/6-31+G(d,p)	407.510	2.611	175.891	0.001	0	87.759	223.720
YFT/6-31G(d,p)	383.635	-2.860	157.958	0	-0.001	52.803	198.132
HF/6-311++G(d,p)	295.369	-6.020	158.333	0	-0.001	85.196	179.633
HF/6-311+G(d,p)	295.325	6.023	158.287	0	0.001	85.041	179.551
HF/6-311G(d,p)	285.817	-5.990	149.319	0	-0.001	63.972	166.369
HF/6-31++G(d,p)	294.765	6.029	158.056	0	0.001	84.651	179.157
HF/6-31+G(d,p)	294.725	6.029	158.032	0	0.001	84.266	179.008
HF/6-31G(d,p)	281.674	-5.912	144.984	0	-0.001	52.354	159.671



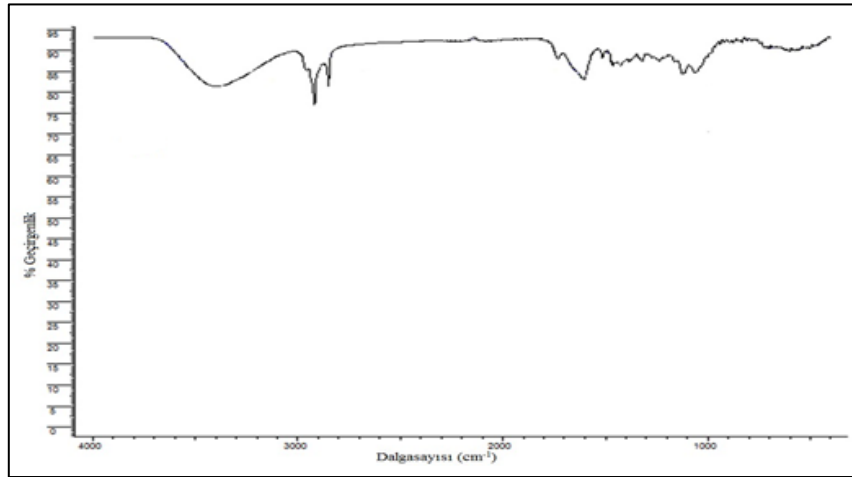
Şekil 5. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün hesaplanan kutuplanabilirliklerinin farklı metodlara göre karşılaştırılması

2-[(4-Hidroksifenil) diazenil] benzen-1,3,5-triol Molekülünün Titreşim Spektrumunun Belirlenmesi

Molekülün gözlemlenen titreşim frekansları ve analiz temel bandlar ve kombine FT-IR bandları vasıtasıyla incelendi ve tartışıldı ve molekülün FT-IR spektrumu Şekil 6’da gösterilmiştir.

Molekülün farklı metotlar kullanılarak hesaplanan, gözlemlenen frekansları, mutlak ve relatif şiddetleri ve olası titreşimler Tablo 6.a-b’de gösterilmiştir. Teorik hesaplamalar molekülün gaz fazına aittir ve deneysel sonuçlar katı-hal spektrumuna aittir. Farklı metodlar ve temel setlerle hesaplanan

titreşim frekansları deneysel verilerle karşılaştırıldı ve deneysel değerlerle uyum içinde olduğu görüldü. Teorik olarak FT-IR spektrumunda hesaplanan bazı bandlar deneysel spektrumda görülmemiştir [20-22].



Şekil 6. 2-[(4-Hidroksifenil)diazene]benzen-1,3,5-triol molekülünün FT-IR spektrumu

Tablo 6.a. 2-[(4-Hidroksifenil)diazene]benzen-1,3,5-triol molekülünün deneysel ve bazı setlerinde YFT metoduyla hesaplanan FT-IR şiddetleri (cm^{-1})

Deneysel	YFT (B3LYP)											
	6-311++G(d,p)		6-311+G(d,p)		6-311G(d,p)		6-31++G(d,p)		6-31+G(d,p)		6-31G(d,p)	
	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.
3832, vw	3831	129	3831	129	3828	117	3824	120	3824	121	3820	96
3780, vw	3828	148	3828	148	3825	133	3822	143	3821	142	3817	112
	3677	97	3677	97	3666	93	3678	87	3678	88	3655	83
3374, s	3219	1	3219	1	3220	1	3239	0	3238	0	3243	0
	3214	1	3214	1	3215	1	3232	2	3231	2	3232	3
	3193	211	3191	72	3191	30	3209	6	3209	6	3210	7
	3191	3	3190	80	3189	35	3206	4	3205	4	3207	5
	3188	26	3188	89	3187	166	3198	10	3197	10	3198	11
	3179	2	3179	1	3178	1	3174	23	3174	23	3173	26
3039, w	3157	26	3157	26	3155	29	3143	232	3143	232	3128	208
1733, m	1685	696	1685	696	1691	658	1692	727	1692	727	1705	668
	1647	190	1647	190	1652	169	1656	200	1656	202	1667	171
	1626	248	1626	248	1630	261	1632	241	1632	240	1642	269
1605, s	1621	115	1621	115	1623	105	1628	119	1628	120	1635	100
1560, w	1549	92	1549	91	1557	77	1555	88	1555	88	1570	61

	1537	59	1537	59	1543	66	1544	55	1544	54	1558	70
1514, m	1528	93	1528	94	1533	79	1535	94	1535	93	1547	72
1491, w	1487	27	1487	27	1492	21	1495	36	1495	36	1503	13
1463, m	1461	55	1461	55	1465	49	1469	41	1469	41	1478	19
1428, m	1448	120	1449	119	1457	154	1453	121	1453	121	1469	183
1384, m	1399	41	1399	41	1411	55	1408	53	1408	54	1427	82
	1368	106	1368	107	1372	132	1379	104	1379	104	1387	134
	1346	243	1346	244	1353	248	1357	274	1357	273	1370	255
1321, m	1333	24	1333	23	1333	28	1336	5	1336	5	1341	9
	1309	409	1310	411	1317	408	1315	410	1315	412	1329	462
1292, w	1288	178	1288	178	1300	149	1296	159	1297	160	1316	105
1273, m	1277	45	1277	44	1283	34	1282	39	1282	38	1294	24
	1245	206	1245	207	1255	206	1245	232	1245	233	1264	242
1236, m	1226	65	1226	65	1229	60	1233	50	1233	50	1240	45
	1195	17	1195	17	1201	24	1200	12	1200	12	1213	13
	1188	242	1188	241	1196	275	1185	192	1185	193	1198	261
1165, m	1171	127	1171	128	1172	311	1175	147	1175	147	1180	374
	1167	316	1167	317	1171	77	1171	329	1171	327	1179	25
	1123	24	1123	24	1123	22	1125	26	1125	26	1129	22
	1105	35	1105	35	1111	24	1110	28	1110	28	1121	15
	1018	0	1018	0	1018	0	1019	2	1019	2	1021	1
	1015	3	1015	3	1016	1	1018	1	1018	1	1020	0
985, w	970	0	977	0	977	0	968	0	974	0	973	0
940, w	937	4	945	2	945	4	942	3	947	2	944	3
	934	5	934	5	935	5	935	5	935	5	939	5
877, vw	860	88	864	88	861	100	881	72	885	70	867	90
853, vw	854	2	854	2	856	1	856	2	856	2	860	1
846, vw	844	25	848	27	849	15	846	44	849	47	851	23
	823	22	831	19	812	11	827	27	833	22	821	16
810, vw	808	6	811	7	809	6	812	6	814	8	814	7
791, vw	799	30	799	30	801	27	801	28	801	28	803	24
	788	54	797	54	781	64	795	52	799	53	784	53
729, w	723	0	727	0	739	1	732	0	722	0	728	3
707, w	703	1	708	1	724	1	702	2	702	0	709	0
	664	9	664	9	665	9	663	10	663	10	665	9
	645	0	650	0	657	3	647	1	649	1	659	15
642, w	644	12	644	12	645	12	643	13	643	13	645	12
	610	21	614	18	628	67	616	54	617	45	631	77
	609	0	609	0	610	0	610	0	610	0	614	10
605, w	600	7	600	7	609	31	600	7	604	55	612	0
582, w	583	82	585	86	601	6	596	45	600	7	602	6
528, w	533	13	534	14	540	14	535	14	536	16	543	5
516, w	519	26	519	26	519	24	518	27	518	27	518	24
506, w	502	3	502	3	503	3	501	3	501	3	504	3
470, w	468	73	468	73	468	68	467	69	467	69	468	61
	437	1	438	0	441	0	439	0	441	0	441	0
416, vw	416	0	417	0	421	0	418	0	420	0	421	2
405, vw	404	28	404	28	405	26	404	28	404	29	409	109

372	21	372	25	401	102	391	103	391	105	406	27
372	2	372	2	379	8	375	9	376	7	381	27
365	89	366	86	374	2	370	2	370	2	374	2
343	10	343	10	362	106	351	112	351	112	372	95
325	107	326	109	344	9	343	10	343	10	345	10
261	1	263	1	273	0	268	0	268	0	275	0
234	2	234	2	235	2	233	2	234	2	236	2
230	2	230	2	231	2	232	3	232	3	233	3
207	1	207	1	208	1	209	1	208	1	211	1
197	0	197	0	198	0	196	1	196	1	198	1
185	0	186	0	190	0	187	0	186	0	191	0
94	0	94	0	95	0	95	0	95	0	97	0
67	1	67	1	68	1	66	1	66	1	68	1
39	1	39	1	39	1	40	1	40	1	40	1
9	0	11	0	10	0	11	0	17	0	19	0

Tablo 6.b. 2-[(4-Hidroksifenil)diazenil]benzen-1,3,5-triol molekülünün deneysel ve bazı baz setlerinde HF metoduyla hesaplanan FT-IR şiddetleri (cm^{-1})

Deneysel	HF											
	6-311++G(d,p)		6-311+G(d,p)		6-311G(d,p)		6-31++G(d,p)		6-31+G(d,p)		6-31G(d,p)	
	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.	FT-IR	Int.
3832, vw	4184	153	4184	153	4183	143	4189	151	4189	151	4193	134
3780, vw	4180	161	4180	161	4179	152	4185	160	4185	160	4190	142
	4133	165	4133	165	4132	158	4139	158	4140	158	4141	150
3374, s	3964	231	3964	231	3964	226	3973	224	3973	224	3972	217
	3381	3	3381	3	3383	3	3405	0	3405	0	3409	0
	3381	0	3381	0	3382	1	3404	3	3404	3	3403	4
	3353	5	3353	5	3353	5	3376	5	3376	5	3377	6
	3350	6	3350	6	3351	8	3372	6	3372	6	3372	8
	3341	7	3341	7	3341	8	3364	7	3364	7	3366	8
3039, w	3317	25	3318	25	3317	28	3340	25	3340	25	3339	28
1733, m	1843	47	1843	47	1848	42	1850	40	1850	40	1857	56
	1802	953	1802	953	1807	894	1810	953	1810	954	1820	828
	1791	155	1791	155	1795	185	1799	180	1799	179	1808	239
1605, s	1771	112	1771	111	1775	90	1778	64	1778	64	1787	68
1560, w	1767	256	1767	257	1771	270	1773	314	1773	315	1781	292
	1672	250	1672	250	1676	254	1681	239	1681	239	1689	231
1514, m	1656	4	1656	4	1661	5	1663	8	1663	8	1673	11
1491, w	1641	142	1641	142	1647	135	1649	133	1649	133	1661	124
1463, m	1586	17	1586	17	1590	22	1593	15	1593	15	1602	21
1428, m	1525	136	1525	136	1533	149	1530	145	1530	145	1546	165
1384, m	1499	116	1499	116	1509	118	1499	125	1499	125	1514	145
	1451	51	1451	51	1453	65	1456	44	1456	44	1460	61
1321, m	1399	331	1399	334	1407	323	1403	526	1403	512	1415	432
	1393	250	1393	248	1400	237	1401	23	1401	39	1412	95

1292, w	1382	36	1382	36	1385	39	1392	32	1392	31	1397	34
1273, m	1359	49	1359	49	1365	83	1364	28	1364	28	1372	72
	1354	99	1354	99	1360	127	1358	80	1358	80	1366	121
1236, m	1336	202	1336	203	1343	169	1335	281	1335	282	1347	259
	1304	30	1305	30	1309	39	1310	18	1310	18	1318	26
	1285	135	1286	135	1288	123	1293	122	1293	121	1300	109
1165, m	1266	97	1266	97	1266	96	1271	96	1271	96	1274	97
	1235	196	1235	196	1239	191	1241	232	1241	232	1247	222
	1221	154	1222	153	1226	155	1231	154	1231	154	1236	156
	1188	27	1188	28	1190	27	1197	22	1197	22	1201	20
	1180	10	1180	10	1183	8	1188	8	1188	8	1194	5
	1095	0	1095	0	1096	0	1100	0	1100	0	1103	0
985, w	1093	0	1093	0	1095	0	1098	0	1098	0	1101	0
940, w	1086	0	1091	0	1094	0	1093	0	1097	0	1099	0
	1053	1	1056	1	1062	2	1061	1	1065	1	1071	1
877, vw	995	11	995	11	997	11	998	10	998	10	1002	11
853, vw	940	76	941	77	944	76	940	83	944	87	948	79
846, vw	911	3	911	40	912	3	915	3	916	42	918	3
	907	13	911	3	909	10	911	17	915		915	12
810, vw	905	37	908	8	899	30	909	37	913	9	913	41
791, vw	881	57	887	57	880	94	883	70	891	70	887	90
	848	22	848	22	848	21	851	21	851	21	853	19
729, w	807	2	809	3	825	4	810	6	810	6	814	17
707, w	782	0	777	0	795	0	772	0	774	0	791	1
	727	20	730	21	735	15	733	59	735	51	737	43
	716	53	718	52	724	37	716	18	719	25	727	25
	710	9	710	9	711	9	711	9	711	9	713	9
642, w	690	13	690	13	692	13	692	14	692	14	694	14
	681	34	684	32	690	48	679	32	682	28	690	45
	653	0	653	0	653	0	655	0	655	0	657	0
605, w	639	3	639	3	640	3	641	3	641	3	642	3
582, w	95	37	595	37	600	33	594	37	595	38	601	21
528, w	562	25	562	25	562	23	563	25	563	25	563	23
516, w	529	6	529	6	547	102	540	98	544	103	561	115
506, w	517	98	521	100	530	6	529	6	529	6	531	7
470, w	499	59	499	59	500	57	500	58	500	58	501	54
	487	3	488	2	492	1	488	1	489	0	493	1
416, vw	456	0	456	0	61	0	457	0	459	0	462	0
405, vw	433	33	433	33	433	32	433	33	433	33	435	33
	399	1	399	1	403	3	399	1	399	1	404	50
	394	0	394	0	401	1	396	8	397	5	402	1
	370	11	370	11	390	119	384	116	384	119	397	86
	366	121	366	123	371	10	370	11	370	11	371	10
	300	122	300	123	327	127	318	128	318	129	337	140
	260	3	261	3	272	2	265	3	266	2	274	2
	251	2	251	2	252	2	252	2	252	2	253	2
	242	0	244	0	251	2	248	1	248	1	253	2
	229	5	229	5	230	3	230	4	231	4	232	3

205	0	205	0	209	0	206	0	207	0	210	0
205	0	205	0	206	0	206	0	206	0	207	0
96	0	96	0	98	0	96	0	97	0	99	0
70	1	71	1	71	1	71	1	71	1	72	1
43	0	43	0	43	0	43	0	43	0	43	0
-13	0	-12	0	-7	0	-12	0	-9	0	8	0

Bulgular ve Sonuçlar

2-[(4-Hidroksifenil)diazetil] benzen-1,3,5-triol molekülünün titreşimleri FT-IR spektrumuyla belirlenmiştir. Çoğu kararlı konformerin kararlı geometrisi HF/3-21G metoduyla bulunmuştur. Hiçbir simetriye bağlı kalmadan geometrik parametreler, titreşim frekansları ve bazı moleküler özellikler YFT(B3LYP) ve HF metodları ile hesaplanmıştır. Deneysel verilerle teorik veriler kıyaslandığı zaman YFT(B3LYP) metodunda HF metoduna göre çok daha iyi sonuçlar verdiği görülür.

Molekülün FT-IR spektrumu incelendiğinde --N=N-- gerilme titreşim piki 1384 cm^{-1} de gözlenir. Bu pikin düşük alanda gelmesinin nedeni molekülde mezomerik elektron itici özelliği olan --OH grubunun bulunmasından kaynaklanabilir.

Halkalardaki --OH gruplarına ait geniş bir band halinde ortaya çıkmış ve 2917.5 cm^{-1} deki aromatik C–H gruplarının spektrumuyla örtüşerek $2917.5\text{--}3382\text{ cm}^{-1}$ e kadar geniş bir pik görülmektedir. 1604 ve 1472.5 cm^{-1} deki pikler fenil halkalarının olduğunu gösteren piklerdir. Molekülde

geometrik yapılarından dolayı K₁ konformerlerinin daha kararlı oldukları görülmektedir.

Yapılan hesaplamalar sonucunda en büyük dipol kutuplanabilirlik 2-[(4-hidroksifenil)diazetil] benzen-1,3,5-triol molekülü için 223.921 Hartree olarak B3LYP/6-31++G(d,p) metoduyla hesaplanmıştır.

Kaynaklar

- [1] Başer İ, İnancı Y. 1990. Boyar madde Kimyası. Marmara Üniversitesi: Teknik Eğitim Fakültesi, Marmara Üniversitesi Yayınları s. 75.
- [2] Zollinger H. 1991. Color chemistry: Synthesis, properties and applications of organic dyes and pigments. 2nd ed. V. p. 43.
- [3] Boyd SN. In: Clark GL. (ed.) 1961. The encyclopedia of chemistry. Asia Publishing House, p. 325.
- [4] Rau H. 1990. In J. K. Rabek Editor, Photochemistry and Photophysics, Vol II. (Boca Raton, Florida: CRC Press. p. 396.

[5] Ersanlı CC, Albayrak Ç, Odabaşoğlu M, Thone C, Erdönmez A. 2004. 4-[(2-Chlorophenyl)diazenyl]-6-methoxy-2-[[tris(hydroxy-methyl)methyl]aminomethylene]cyclohexa-3,5-dien-1(2H)-one, *Acta Cryst. C60*, o133-o135.

[6] Ersanlı CC, Odabaşoğlu M, Albayrak Ç, Erdönmez A. 2004. 6-Methoxy-5-(phenyldiazenyl)salicylaldehy de, *Acta Cryst. E60*, o230-o231.

[7] Ersanlı CC, Albayrak Ç, Odabaşoğlu M, Kazak C. 2005. (Z)-6-[[1,3-Dihydroxy-2-(hydroxymethyl) pro-pan -2-ylamino] methylene}-2-methoxy-4-[(E)-[3-(trifluoromethyl)phenyl] diazenyl] cyclohexa-2,4-dienone, *Acta Cryst. E61*, o4051-o4053.

[8] Ersanlı CC, Albayrak Ç, Odabaşoğlu M, Büyükgüngör O. 2005. (Z)-4-[(E)-(4-Butylphenyl) diazenyl] -6-[[1,3-dihydroxy-2- (hydroxymethyl) pro-pan-2-ylamino] methylene}-2-methoxy-cyclohexa-2,4-dienone, *Acta Cryst. E61*, o4139-o4141.

[9] Ersanlı CC, Albayrak Ç, Odabaşoğlu M, Büyükgüngör O. 2006. (Z)-6-[[1,3-Dihydroxy-2-(hydroxymethyl) propan-2-ylamino]methylene}-2-methoxy-4-[(E)- o- tolyldiazenyl]- cyclohexa - 2,4 - dienone, *Acta Cryst. C62*, o483-o485.

[10] Kumalar M. 2009. 7-Asetoksi-6-(2,3-dibromopropil)-4,8-di-metilkumarin ve kumarin 481 moleküllerinin infrared

titreşim spektroskopisi ve NMR çalışmaları, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora tezi, s. 134.

[11] Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Chesseman JR, Montgomery JA Jr, Vreven T, Kudin KN, Burant JC, Milliam JM, Iyengar SS, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M, Scalmani G, Rega N, Petersson GA, 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 JE, Hratchian HP, Cross JB, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski JW, Ayala PY, Morokuma K, Voth GA, Salvador P, Dannenberg JJ, Zakrzewski VG, Dapprich S, Daniels AD, Strain MC, Farkas O, Malick DK, Rabuck AD, Raghavachari K, Foresman JB, Ortiz JV, Cui Q, Baboul AG, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov BB, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin RL, Fox DJ, Keith T, Al-Laham MA, Peng CY, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill PMW, Johnson B, Chen W, Wong MW, Gonzalez C and Pople JA. 2003. Gaussian 03W (Revision B.04). Gaussian Inc. Pittsburgh PA.

[12] Foresman JB, Frish EM. 1996. Exploring chemistry with electronic structure methods. USA Froyen P. *Acta*

Chemica Scandinavica. Gaussian Inc. p. 25, 983, 2781.

[13] Bloch SC. 1997. Classical and quantum harmonic oscillators. John Wiley and Sons Inc. New York. p. 132.

[14] Dimoglo A, Kandemirli F. 2005. Moleküler orbital teorisinin prensipleri ve uygulamaları. Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Kocaeli Üniversitesi, Türkiye. s. 14.

[15] Taşal E, Sıdır İ, Yadigar G, Kumalar M. 2010. Journal of molecular structure, 964: 134-151.

[16] Ağar E, Özgür A, Köroğlu A, Gümüş S, Kazak C. 2015. Synthesis, molecular structure, FT-IR, FT-Raman and XRD spectroscopic investigations of (E)-1-(5-((4-bromophenyl)diazenyl)-2-hydroxyphenyl)nethanone: A comparative DFT study, J. Mol. Struct., 1098, 84-91.

[17] Tekin F, Kalfa Ö, Koşar B, Ersanlı CC. 2015. 3-Hidroksi-6-[(4-hidroksifenilamino)metilen]siklohekza-2,4-diyenon'ın Kuantum Kimyasal Hesaplamaları Üzerine Bir Çalışma, Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, Özel Sayı, 51-64.

[18] Ersanlı CC, Koşar B. 2015. Investigation of Physical and Chemical Properties of 2-[(2-Hydroxy-4-nitrophenyl)aminomethylene]-cyclohexa-3,5-dien-1 (2 H)-one by DFT Method, Dumlupınar

Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, Özel Sayı, 109-126.

[19] Kalfa Ö, Tekin F, Koşar B, Ersanlı CC. 2015. 2-Hidroksi-6-[(4-hidroksifenilamino)metilen]siklohekza-2, 4-diyenon'ın Kuantum Kimyasal Hesaplamaları Üzerine Bir Çalışma, Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, Özel Sayı, 127-138.

[20] Ertan N. 2000. Synthesis of some hetarylazopyrazolone dyes and solvents effects on their absorption spectra, dyes and pigments, 44(1): 41-48.

[21] Kumar GS. 1993. Azo functional polymers: Functional group approach in macromolecular design. Technomic Publishing Company Inc. Lancaster: Basel. p. 96.

[22] Kumar GS. 1992. Azo functional polymers. Technomic Publishing Company Inc. Lancaster: Basel. p. 211.