

**T.C  
FIRAT ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TRİAZOL VE SİKLOBÜTAN HALKASI İÇEREN SÜLFANİL BİLEŞİKLERİNİN  
SENTEZİ, DENEYSEL VE TEORİK KARAKTERİZASYONU**

**DOKTORA TEZİ**

**Cahit ÖREK**

**121117201**

**Anabilim Dalı: Kimya**

**Programı: Organik Kimya**

**Danışman: Prof. Dr. Metin KOPARIR**

**Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: NİSAN 2018**

**NİSAN-2018**

**T.C  
FIRAT ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TRİAZOL VE SIKLOBÜTAN HALKASI İÇEREN SÜLFANİL BİLEŞİKLERİNİN  
SENTEZİ, DENEYSEL VE TEORİK KARAKTERİZASYONU**

**DOKTORA TEZİ**

**Cahit ÖREK**

**121117201**

**Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : Nisan 2018**

**Tezin Savunulduğu Tarih : 6 Nisan 2018**

**Tez Danışmanı :  
Diğer Jüri Üyeleri :**

**Prof. Dr. Metin KOPARIR  
Prof. Dr. Ahmet CANSIZ  
Prof. Dr. Sinan AKPINAR  
Prof. Dr. Ahmet ÇETİN  
Dr. Öğrt. Üyesi Kamiran SARAC**

**NİSAN-2018**

## ÖNSÖZ

Günümüzde 1,2,4-triazol ve türevleri göstermiş oldukları geniş kapsamlı özelliklerinden dolayı birçok uygulama alanına sahip olmuştur. Dünyanın birçok yerinde bilim insanları bir taraftan yeni 1,2,4-triazol türevleri sentezlerken diğer taraftan bu molekülerin yeni özellikleri keşfedilip literatüre kazandırmaktadırlar. Bu tez çalışmalarında da 1,2,4-triazol ve 1,2,4-triazollerin sülfanil türevleri sentezlenmiş deneysel ve teorik olarak karakterize edilmiştir. Bu yapıların özellikle ilaç etken maddesi olarak kullanılmasından ötürü sentezlediğimiz bu bileşiklerin disiplinler arası birçok uygulamaya konu olacağını düşünmekteyiz.

Bu çalışmanın, seçiminde, planlanmasında ve yürütülmesinde bana her konuda yardımcı olan, çalışmalarım süresince benden her türlü anlayış ve ilgiyi esirgemeyen, bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım, bilim adamı sıfatı ve kişiliğiyle her zaman kendime örnek alacağım değerli hocam Sayın Prof. Dr. Metin KOPARIR' a sonsuz saygı ve şükranlarımı sunarım.

Çalışmalarım süresince ilgi ve desteğini gördüğüm saygıdeğer hocalarım Prof. Dr. Ahmet CANSIZ, Prof. Dr. Sinan AKPINAR, Prof. Dr. Niyazi BULUT, Prof. Dr. Ahmet ÇETİN, Yrd. Doç. Dr. Kamiran SARAC ve tez çalışmamda emeği geçen, dostluklarını esirgemeyen kıymetli arkadaşlarım Abdurrazak SÖYLEMEZ ve M. Fatih CANSIZ' a teşekkür ederim.

Beni büyük fedakârlıklara katlanarak bugünlere getiren, her türlü kararımın dolayı destek veren ve yanımda olan aileme teşekkürü bir borç bilirim.

Cahit ÖREK

Nisan—2018

# İÇİNDEKİLER

|                                                       |            |
|-------------------------------------------------------|------------|
| <b>ÖNSÖZ</b>                                          | <b>i</b>   |
| <b>İÇİNDEKİLER</b>                                    | <b>ii</b>  |
| <b>ÖZET</b>                                           | <b>ix</b>  |
| <b>SUMMARY</b>                                        | <b>x</b>   |
| <b>ŞEKİLLER LİSTESİ</b>                               | <b>xi</b>  |
| <b>TABLolar LİSTESİ</b>                               | <b>xix</b> |
| <b>SEMBOLLER LİSTESİ</b>                              | <b>xx</b>  |
| <b>1 GİRİŞ</b>                                        | <b>1</b>   |
| <b>1.1 1,2,4-Triazoller</b>                           | <b>2</b>   |
| <b>1.2 1,2,4-Triazol-5-tiyonların Elde Edilişleri</b> | <b>4</b>   |
| 1.2.1 Tiyosemikarbazit ve türevlerinden               | 4          |
| 1.2.2 Ditiyokarbazik Asit Tuzlarından                 | 6          |
| 1.2.3 Diğer Yöntemler                                 | 7          |
| <b>1.3 Triazollerin Özellikleri</b>                   | <b>10</b>  |
| 1.3.1 Asitlik ve bazlık                               | 10         |
| 1.3.2 Reaktivitesi                                    | 10         |
| <b>1.4 Siklobütan ve Türevleri</b>                    | <b>12</b>  |
| 1.4.1 Siklobütanda stereoizomerlik                    | 12         |
| 1.4.2 Siklobütanın Elde Reaksiyonları                 | 13         |
| 1.4.3 Siklobütanın Spektroskopik Özellikleri          | 14         |
| 1.4.4 Literatürde Siklobütan Türevlerinin Önemi       | 15         |
| <b>1.5 Elektronik Yapı Yöntemleri</b>                 | <b>16</b>  |
| 1.5.1 Schrödinger Denklemi                            | 18         |
| 1.5.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı                      | 19         |
| 1.5.3 Varyasyon Teoremi                               | 21         |
| 1.5.4 Atomik Orbitalerin Doğrusal Kombinasyonu (LCAO) | 22         |
| 1.5.5 Hartree-Fock Alan Teorisi, HF-SCF Yöntemi       | 23         |

|            |                                                                                                                 |           |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1.6</b> | <b><i>Ab Initio</i> Yöntemler</b>                                                                               | <b>24</b> |
| 1.6.1      | Atomik Orbitaler                                                                                                | 25        |
| <b>1.7</b> | <b>Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT)</b>                                           | <b>27</b> |
| 1.7.1      | B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi                                                                       | 30        |
| <b>1.8</b> | <b>Temel Setler</b>                                                                                             | <b>32</b> |
| <b>2.</b>  | <b>MATERYAL VE METOT</b>                                                                                        | <b>35</b> |
| <b>2.1</b> | <b>Kullanılan Araç ve Gereçler</b>                                                                              | <b>35</b> |
| <b>2.2</b> | <b>Kullanılan Kimyasal Maddeler</b>                                                                             | <b>35</b> |
| 2.2.1      | Reaktifler                                                                                                      | 35        |
| 2.2.2      | Çözücüler                                                                                                       | 36        |
| <b>2.3</b> | <b>DeneySEL Kısım</b>                                                                                           | <b>36</b> |
| 2.3.1      | 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Sentezi (1a)                                   | 36        |
| 2.3.2      | 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Sentezi (1b)                                  | 37        |
| 2.3.3      | 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1c)                              | 37        |
| 2.3.4      | 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1d)                                  | 38        |
| 2.3.5      | 4-(p-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1e)                              | 39        |
| 2.3.6      | 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1f)                                      | 40        |
| 2.3.7      | 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1g)                                     | 41        |
| 2.3.8      | 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1h)                                     | 41        |
| 2.3.9      | 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1i)                                    | 42        |
| 2.3.10     | 4-(p-tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1j)                                | 43        |
| 2.3.11     | 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1k)                                     | 43        |
| 2.3.12     | 4-allil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1l)                                    | 44        |
| 2.3.13     | 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1m)                                    | 45        |
| 2.3.14     | 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1n)                                   | 46        |
| 2.3.15     | 4-(p-tollil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1o)                               | 46        |
| 2.3.16     | 4-etil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1p)                                    | 47        |
| 2.3.17     | 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1r)                                   | 48        |
| 2.3.18     | 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1s)                                   | 49        |
| 2.3.19     | 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1t)                                  | 50        |
| 2.3.20     | 4-(p-tollil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1u)                              | 50        |
| 2.3.21     | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobüt-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2a) | 51        |

|        |                                                                                                                                           |    |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.3.22 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2b)               | 52 |
| 2.3.23 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2c)          | 53 |
| 2.3.24 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2d)               | 53 |
| 2.3.25 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2e) | 54 |
| 2.3.26 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2f)                  | 55 |
| 2.3.27 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2g)                 | 56 |
| 2.3.28 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2h)                 | 56 |
| 2.3.29 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2i)                | 57 |
| 2.3.30 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2j)   | 58 |
| 2.3.31 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2k)                 | 59 |
| 2.3.32 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2l)                | 59 |
| 2.3.33 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2m)                | 60 |
| 2.3.34 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2n)               | 61 |
| 2.3.35 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2o)  | 62 |
| 2.3.36 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2p)                | 62 |
| 2.3.37 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2r)               | 63 |
| 2.3.38 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2s)               | 64 |
| 2.3.39 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2t)              | 65 |

|        |                                                                                                                                           |    |
|--------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.3.40 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2u) | 65 |
| 2.4    | Hesaplama Detayları                                                                                                                       | 66 |
| 3      | <b>BULGULAR</b>                                                                                                                           | 68 |
| 3.1    | 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1a)                                           | 68 |
| 3.2    | 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1b)                                          | 70 |
| 3.3    | 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1c)                                     | 72 |
| 3.4    | 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1d)                                         | 73 |
| 3.5    | 4-( <i>p</i> -tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1e)                             | 75 |
| 3.6    | 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1f)                                              | 77 |
| 3.7    | 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1g)                                             | 79 |
| 3.8    | 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1h)                                             | 81 |
| 3.9    | 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1i)                                            | 83 |
| 3.10   | 4-( <i>p</i> -tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1j)                               | 85 |
| 3.11   | 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1k)                                             | 87 |
| 3.12   | 4-allil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1l)                                            | 89 |
| 3.13   | 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1m)                                            | 91 |

|      |                                                                                                                                                       |     |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.14 | 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1n)                                                       | 93  |
| 3.15 | 4-( <i>p</i> -tollil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1o)                                          | 95  |
| 3.16 | 4-etil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1p)                                                        | 97  |
| 3.17 | 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1r)                                                       | 99  |
| 3.18 | 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1s)                                                       | 101 |
| 3.19 | 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1t)                                                      | 103 |
| 3.20 | 4-( <i>p</i> -tollil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1u)                                         | 105 |
| 3.21 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2a)                | 108 |
| 3.22 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2b)               | 113 |
| 3.23 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2c)          | 115 |
| 3.24 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2d)              | 117 |
| 3.25 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2e) | 119 |
| 3.26 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2f)                  | 121 |
| 3.27 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2g)                 | 123 |

|      |                                                                                                                                                      |     |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.28 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2h)                | 126 |
| 3.29 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2i)               | 131 |
| 3.30 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2j)  | 133 |
| 3.31 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2k)                | 135 |
| 3.32 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2l)               | 137 |
| 3.33 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2m)               | 140 |
| 3.34 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2n)              | 142 |
| 3.35 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2o) | 147 |
| 3.36 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-etil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2p)                  | 150 |
| 3.37 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2r)                 | 152 |
| 3.38 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2s)                 | 155 |
| 3.39 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2t)                | 157 |
| 3.40 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-( <i>p</i> -tollil)-4 <i>H</i> -1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2u)   | 160 |
| 4    | <b>SONUÇLAR VE TARTIŞMA</b>                                                                                                                          | 165 |
| 4.1  | Sentezlenen 1,2,4-triazol Bileşiklerinin Reaksiyon Analizi                                                                                           | 165 |

|                          |                                                                                  |            |
|--------------------------|----------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.2                      | Triazol ve siklobütan Halkası İçeren Sülfanil Bileşiklerinin Reaksiyon Analizi _ | 167        |
| 4.3                      | Sentezlenen Bileşiklerin FT-IR Analizi _____                                     | 168        |
| 4.4                      | Sentezlenen Bileşiklerin <sup>1</sup> H-NMR Analizi _____                        | 171        |
| 4.5                      | Sentezlenen Moleküllerin Teorik Hesaplamalar ile İncelenmesi. _____              | 181        |
| <b>REFERANSLAR</b> _____ |                                                                                  | <b>183</b> |
| <b>ÖZGEÇMİŞ</b> _____    |                                                                                  | <b>189</b> |



## ÖZET

### TRIAZOL VE SİKLOBÜTAN HALKASI İÇEREN SÜLFANİL BİLEŞİKLERİNİN SENTEZİ, DENEYSEL VE TEORİK KARAKTERİZASYONU

İki aşamalı olarak planlan bu tez çalışmasının ilk adımında, dört farklı karboksilik asit hidrazit ile beş farklı izotiyosiyanat türevi etkileştirilerek toplamda yirmi adet tiyosemikarbazit elde edilmiştir. Reaksiyon ortamına sonradan KOH ilave edilerek; aril, allil, etil ve benzil sübstitüed 1,2,4-triazoller elde edilmiştir.

Çalışmanın ikinci adımında, ilk basamakta elde edilen 3,4,5-trisübstitüed 1,2,4-triazoller  $K_2CO_3$  içeren kuru aseton içinde 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil-siklobütil)-etanon ile etkileştirilerek siklobütan halkası içeren 3,4,5-trisübstitüed 1,2,4-triazol sülfanil bileşiklerine dönüştürülmüştür.

Sentezlenen bu bileşikler deneysel olarak FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR, TGA/TDA ve UV-VIS yöntemleri ile karakterize edilmiştir. Deneysel karakterizasyon çalışmaların yanında, moleküller Gaussian paket programı ve DFT metodu kullanılarak cc-PVDZ temel seti seviyesinde teorik olarak da karakterize edilmiştir. Yapılan çalışmalar sonucunda oluşturulan korelasyon grafiklerinden deneysel ve hesaplanan değerlerin uyum içerisinde oldukları görülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** 1,2,4-triazol, siklobütan, sülfanil bileşikleri, ab initio, DFT, B3LYP

## SUMMARY

### SYNTHESIS OF SULPHANYL COMPOUNDS CONTAINING TRIAZOLE AND CYCLOBUTANE RING AND THEIR EXPERIMENTAL AND THEORETICAL CHARACTERISTICS

In the first step of this thesis, which is planned in two stages, twenty thiosemicarbazides were obtained in total by the interaction of four different carboxylic acid hydrazides with five different isothiocyanate derivatives. KOH was subsequently added to the reaction medium to obtain aryl, allyl, ethyl and benzyl substituted 1,2,4-triazoles.

In the second step of the work, the 3,4,5-trisubstituted 1,2,4-triazoles obtained in the first step were reacted with 2-chloro-1-(3-methyl-3-mesitylcyclobutyl) in dry acetone containing  $K_2CO_3$  to give cyclobutane ring-, 3,4,5-trisubstituted 1,2,4-triazole sulfanyl compounds.

These synthesized compounds were characterized experimentally by FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR, TGA/TDA and UV-VIS methods. In addition to experimental characterization studies, molecules were also theoretically characterized at the cc-PVDZ level using the Gaussian software package in combination with the DFT method. As a result of the studies performed here, it was seen that the correlation graphs obtained show that the experimental and calculated values are in harmony.

**Keywords:** 1,2,4-triazoles, cyclobutane, sulpanyl compounds, ab initio, DFT, B3LYP

## ŞEKİLLER LİSTESİ

|             |                                                                                                                                                            |    |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Şekil 1.1.1 | 1,2,4-Triazol halkası oluşum reaksiyonu. _____                                                                                                             | 2  |
| Şekil 1.1.2 | Pellizzari reaksiyonun mekanizması. _____                                                                                                                  | 3  |
| Şekil 1.1.3 | Einhorn-Brunner reaksiyonu ile 1,2,4-triazol oluşumu. _____                                                                                                | 3  |
| Şekil 1.1.4 | Einhorn-Brunner reaksiyonun mekanizması _____                                                                                                              | 4  |
| Şekil 1.2.1 | Ditiyokarbazik asit tuzlarından 4-amino-5-alkil-1,2,4-triazol-3-iyon sentezi. _____                                                                        | 6  |
| Şekil 1.2.2 | 5-fenil-4H-1,2,4-triazol türevlerinin 3-arilditiyokarbazik asit tuzlarından sentezi. _____                                                                 | 6  |
| Şekil 1.2.3 | Reid ve Heindel prosedürüne göre 4-amino-5-alkil-3-merkapto-4H-1,2,4-triazol' ün elde reaksiyonu. _____                                                    | 7  |
| Şekil 1.2.4 | 1,3-difenil-5-n-alkil-1H-1,2,4-triazol'ün elde reaksiyonu. _____                                                                                           | 8  |
| Şekil 1.2.5 | Hidrazon ve alifatik aminlerin reaksiyonu sonucu 1,3,5-trisübstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerinin oluşum reaksiyonu. _____                                  | 8  |
| Şekil 1.2.6 | Hidrazon ve alifatik aminlerin reaksiyonu sonucu 1,3,5-trisübstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerinin oluşum mekanizması (SET= single-electron-transfer). _____ | 9  |
| Şekil 1.2.7 | 1,3,5-trisübstitüe-1,2,4-triazol türevlerinin karboksilik asit, pirimer amidin ve monosübstitüe hidrazinlerinlerden elde reaksiyonu. _____                 | 9  |
| Şekil 1.3.1 | 1,2,4-Triazollerin proton alma ve proton verme durumları. _____                                                                                            | 10 |
| Şekil 1.4.1 | Siklobütan molekülünün kelebek konformasyonları. _____                                                                                                     | 12 |
| Şekil 1.4.2 | Wurtz yöntemi ile 1,4-dihalobütanlardan siklobütan eldesi. _____                                                                                           | 13 |
| Şekil 1.4.3 | Katalitik hidrojenlenme yolu ile siklobütenden siklobutan eldesi. _____                                                                                    | 13 |
| Şekil 1.4.4 | Fotokimyasal olarak siklobütanın [2+2] siklokatılma reaksiyonuyla oluşumu. _____                                                                           | 14 |
| Şekil 1.4.5 | Siklobütanın oluşumu sırasında etilen moleküllerinin geometrisi. _____                                                                                     | 14 |
| Şekil 1.4.6 | Siklobütan karboksilik asitin, malon esteri ve trimetilen bromürden sentezi. _____                                                                         | 15 |
| Şekil 2.3.1 | 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon' un (1a) oluşum reaksiyonu. _____                                                              | 36 |
| Şekil 2.3.2 | 4-allil-5-(2-tiyenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon' un (1b) oluşum reaksiyonu. _____                                                                | 37 |
| Şekil 2.3.3 | 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1c) oluşum reaksiyonu. _____                                                         | 38 |
| Şekil 2.3.4 | 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1d) oluşum reaksiyonu. _____                                                             | 39 |
| Şekil 2.3.5 | 4-(p-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1e) oluşum reaksiyonu. _____                                                         | 40 |
| Şekil 2.3.6 | 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1f) oluşum reaksiyonu. _____                                                                 | 40 |
| Şekil 2.3.7 | 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1g) oluşum reaksiyonu. _____                                                                | 41 |
| Şekil 2.3.8 | 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1h) oluşum reaksiyonu. _____                                                                | 42 |
| Şekil 2.3.9 | 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-iyon'un (1i) oluşum reaksiyonu. _____                                                               | 42 |

|              |                                                                                                                                         |    |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Şekil 2.3.10 | 4-(p-tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1j) oluşum reaksiyonu.                                             | 43 |
| Şekil 2.3.11 | 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1k) oluşum reaksiyonu.                                                  | 44 |
| Şekil 2.3.12 | 4-allil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1l) oluşum reaksiyonu.                                                 | 45 |
| Şekil 2.3.13 | 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1m) oluşum reaksiyonu.                                                 | 45 |
| Şekil 2.3.14 | 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1n) oluşum reaksiyonu.                                                | 46 |
| Şekil 2.3.15 | 4-(p-tollil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1o) oluşum reaksiyonu.                                            | 47 |
| Şekil 2.3.16 | 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1p) oluşum reaksiyonu.                                                | 48 |
| Şekil 2.3.17 | 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1r) oluşum reaksiyonu.                                                | 49 |
| Şekil 2.3.18 | 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1s) oluşum reaksiyonu.                                                | 49 |
| Şekil 2.3.19 | 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1t) oluşum reaksiyonu.                                               | 50 |
| Şekil 2.3.20 | 4-(p-tollil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1u) oluşum reaksiyonu.                                           | 51 |
| Şekil 2.3.21 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' un (2a) oluşum reaksiyonu.        | 52 |
| Şekil 2.3.22 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2b) oluşum reaksiyonu.      | 52 |
| Şekil 2.3.23 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2c) oluşum reaksiyonu. | 53 |
| Şekil 2.3.24 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2d) oluşum reaksiyonu.      | 54 |
| Şekil 2.3.25 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2e) oluşum reaksiyonu. | 55 |
| Şekil 2.3.26 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2f) oluşum reaksiyonu.         | 55 |
| Şekil 2.3.27 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2g) oluşum reaksiyonu.        | 56 |
| Şekil 2.3.28 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2h) oluşum reaksiyonu.        | 57 |

|              |                                                                                                                                               |    |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Şekil 2.3.29 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2i) oluşum reaksiyonu. _____       | 58 |
| Şekil 2.3.30 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2j) oluşum reaksiyonu. _____   | 58 |
| Şekil 2.3.31 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2k) oluşum reaksiyonu. _____        | 59 |
| Şekil 2.3.32 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2l) oluşum reaksiyonu. _____       | 60 |
| Şekil 2.3.33 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2m) oluşum reaksiyonu. _____       | 61 |
| Şekil 2.3.34 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2n) oluşum reaksiyonu. _____      | 61 |
| Şekil 2.3.35 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2o) oluşum reaksiyonu. _____  | 62 |
| Şekil 2.3.36 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2p) oluşum reaksiyonu. _____       | 63 |
| Şekil 2.3.37 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2r) oluşum reaksiyonu. _____      | 64 |
| Şekil 2.3.38 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2s) oluşum reaksiyonu. _____      | 64 |
| Şekil 2.3.39 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2t) oluşum reaksiyonu. _____     | 65 |
| Şekil 2.3.40 | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2u) oluşum reaksiyonu. _____ | 66 |
| Şekil 3.1.1  | 1a molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                       | 68 |
| Şekil 3.1.2  | 1a molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                          | 69 |
| Şekil 3.1.3  | 1a molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                         | 69 |
| Şekil 3.2.1  | 1b molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                       | 70 |
| Şekil 3.2.2  | 1b molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                          | 71 |
| Şekil 3.2.3  | 1c molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                         | 71 |
| Şekil 3.3.1  | 1c molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                       | 72 |
| Şekil 3.3.2  | 1c molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                          | 73 |
| Şekil 3.4.1  | 1d molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                       | 74 |
| Şekil 3.4.2  | 1d molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                          | 74 |
| Şekil 3.4.3  | 1d molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                         | 75 |
| Şekil 3.5.1  | 1e molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                       | 76 |

|              |                                                  |     |
|--------------|--------------------------------------------------|-----|
| Şekil 3.5.2  | 1e molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 76  |
| Şekil 3.5.3  | 1e molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 77  |
| Şekil 3.6.1  | 1f molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 78  |
| Şekil 3.6.2  | 1f molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 78  |
| Şekil 3.6.3  | 1f molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 79  |
| Şekil 3.7.1  | 1g molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 80  |
| Şekil 3.7.2  | 1g molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 80  |
| Şekil 3.7.3  | 1g molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 81  |
| Şekil 3.8.1  | 1h molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 82  |
| Şekil 3.8.2  | 1h molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 82  |
| Şekil 3.8.3  | 1h molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 83  |
| Şekil 3.9.1  | 1i molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 84  |
| Şekil 3.9.2  | 1i molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 84  |
| Şekil 3.9.3  | 1i molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 85  |
| Şekil 3.10.1 | 1j molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 86  |
| Şekil 3.10.2 | 1j molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 86  |
| Şekil 3.10.3 | 1j molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 87  |
| Şekil 3.11.1 | 1k molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 88  |
| Şekil 3.11.2 | 1k molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 88  |
| Şekil 3.11.3 | 1k molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 89  |
| Şekil 3.12.1 | 1l molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 90  |
| Şekil 3.12.2 | 1l molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 90  |
| Şekil 3.12.3 | 1l molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 91  |
| Şekil 3.13.1 | 1m molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 92  |
| Şekil 3.13.2 | 1m molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 92  |
| Şekil 3.13.3 | 1m molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 93  |
| Şekil 3.14.1 | 1n molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 94  |
| Şekil 3.14.2 | 1n molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 94  |
| Şekil 3.14.3 | 1n molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 95  |
| Şekil 3.15.1 | 1o molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 96  |
| Şekil 3.15.2 | 1o molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 96  |
| Şekil 3.15.3 | 1o molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 97  |
| Şekil 3.16.1 | 1p molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 98  |
| Şekil 3.16.2 | 1p molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.    | 98  |
| Şekil 3.16.3 | 1p molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. | 99  |
| Şekil 3.17.1 | 1r molekülü' nün FT-IR spektrumu.                | 100 |

|              |                                                                                    |     |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Şekil 3.17.2 | 1r molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 100 |
| Şekil 3.17.3 | 1r molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 101 |
| Şekil 3.18.1 | 1s molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 102 |
| Şekil 3.18.2 | 1s molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 102 |
| Şekil 3.18.3 | 1s molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 103 |
| Şekil 3.19.1 | 1t molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 104 |
| Şekil 3.19.2 | 1t molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 104 |
| Şekil 3.19.3 | 1t molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 105 |
| Şekil 3.20.1 | 1u molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 106 |
| Şekil 3.20.2 | 1u molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 106 |
| Şekil 3.20.3 | 1u molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 107 |
| Şekil 3.21.1 | 2a molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b). _____                    | 108 |
| Şekil 3.21.2 | 2a molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b) _____             | 108 |
| Şekil 3.21.3 | 2a molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 109 |
| Şekil 3.21.4 | 2a molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 109 |
| Şekil 3.21.5 | 2a molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b) ____ | 112 |
| Şekil 3.21.6 | 2a molekülün termogravimetrik analiz sonucu. _____                                 | 112 |
| Şekil 3.22.1 | 2b molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 113 |
| Şekil 3.22.2 | 2b molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 114 |
| Şekil 3.22.3 | 2b molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 114 |
| Şekil 3.23.1 | 2c molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 116 |
| Şekil 3.23.2 | 2c molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 116 |
| Şekil 3.23.3 | 2c molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 117 |
| Şekil 3.24.1 | 2d molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 118 |
| Şekil 3.24.2 | 2d molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 118 |
| Şekil 3.24.3 | 2d molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 119 |
| Şekil 3.25.1 | 2e molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 120 |
| Şekil 3.25.2 | 2e molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 120 |
| Şekil 3.25.3 | 2e molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 121 |
| Şekil 3.26.1 | 2f molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 122 |
| Şekil 3.26.2 | 2f molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 122 |
| Şekil 3.26.3 | 2f molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 123 |
| Şekil 3.27.1 | 2g molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 124 |
| Şekil 3.27.2 | 2g molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 124 |
| Şekil 3.27.3 | 2g molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 125 |
| Şekil 3.28.1 | 2h molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b). _____                    | 126 |

|              |                                                                                    |     |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Şekil 3.28.2 | 2h molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b) _____             | 126 |
| Şekil 3.28.3 | 2h molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 127 |
| Şekil 3.28.4 | 2h molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 127 |
| Şekil 3.28.5 | 2h molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b) ____ | 130 |
| Şekil 3.28.6 | 2h molekülün termogravimetrik analiz sonucu. _____                                 | 130 |
| Şekil 3.29.1 | 2i molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 131 |
| Şekil 3.29.2 | 2i molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 132 |
| Şekil 3.29.3 | 2i molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 132 |
| Şekil 3.30.1 | 2j molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 134 |
| Şekil 3.30.2 | 2j molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 134 |
| Şekil 3.30.3 | 2j molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 135 |
| Şekil 3.31.1 | 2k molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 136 |
| Şekil 3.31.2 | 2k molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 136 |
| Şekil 3.31.3 | 2k molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 137 |
| Şekil 3.32.1 | 2l molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 138 |
| Şekil 3.32.2 | 2l molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 138 |
| Şekil 3.32.3 | 2l molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 139 |
| Şekil 3.33.1 | 2m molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 140 |
| Şekil 3.33.2 | 2m molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 141 |
| Şekil 3.33.3 | 2m molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 141 |
| Şekil 3.34.1 | 2n molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b). _____                    | 142 |
| Şekil 3.34.2 | 2n molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b) _____             | 143 |
| Şekil 3.34.3 | 2n molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 143 |
| Şekil 3.34.4 | 2n molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 144 |
| Şekil 3.34.5 | 2n molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b) ____ | 146 |
| Şekil 3.34.6 | 2h molekülün termogravimetrik analiz sonucu. _____                                 | 147 |
| Şekil 3.35.1 | 2o molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 148 |
| Şekil 3.35.2 | 2o molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 148 |
| Şekil 3.35.3 | 2o molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 149 |
| Şekil 3.36.1 | 2p molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 150 |
| Şekil 3.36.2 | 2p molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 151 |
| Şekil 3.36.3 | 2p molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 151 |
| Şekil 3.37.1 | 2r molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                            | 153 |
| Şekil 3.37.2 | 2r molekülü' nün $^1\text{H}$ -NMR spektrumu. _____                                | 153 |
| Şekil 3.37.3 | 2r molekülü' nün $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu. _____                             | 154 |
| Şekil 3.37.4 | 2r molekülün termogravimetrik analiz sonucu. _____                                 | 154 |

|              |                                                                                                                                                                                 |     |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Şekil 3.38.1 | 2s molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                                                         | 156 |
| Şekil 3.38.2 | 2s molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                                                            | 156 |
| Şekil 3.38.3 | 2s molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                                                           | 157 |
| Şekil 3.39.1 | 2t molekülü' nün FT-IR spektrumu. _____                                                                                                                                         | 158 |
| Şekil 3.39.2 | 2t molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                                                            | 158 |
| Şekil 3.39.3 | 2t molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                                                           | 159 |
| Şekil 3.40.1 | 2u molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b). _____                                                                                                                 | 160 |
| Şekil 3.40.2 | 2u molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b) _____                                                                                                          | 160 |
| Şekil 3.40.3 | 2u molekülü' nün <sup>1</sup> H-NMR spektrumu. _____                                                                                                                            | 161 |
| Şekil 3.40.4 | 2u molekülü' nün <sup>13</sup> C-NMR spektrumu. _____                                                                                                                           | 161 |
| Şekil 3.40.5 | 2u molekülün termogravimetrik analiz sonucu. _____                                                                                                                              | 164 |
| Şekil 3.40.6 | 2u molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b) ____                                                                                              | 164 |
| Şekil 4.1.   | Tiyosemikarbazit türevlerinin reaksiyon elde mekanizması. _____                                                                                                                 | 165 |
| Şekil 4.2.   | Tiyosemikarbazit türevlerinin tautomerleri _____                                                                                                                                | 166 |
| Şekil 4.3    | 4,5-disüstitüe-1,2,4-triazol-3-tiyon türevleri oluşumuna ait genel mekanizma. _____                                                                                             | 166 |
| Şekil 4.4    | 4,5-disüstitüe-1,2,4-triazol türevlerinin tiyol-tiyon tautomerleri. _____                                                                                                       | 167 |
| Şekil 4.5:   | Triazol ve siklobütan halkası içeren sülfanil bileşiklerinin oluşumuna ait genel reaksiyon mekanizması. _____                                                                   | 168 |
| Şekil 4.6.   | İzonikotinik asit hidrazite ait FT-IR spektrumunda C=O gerilme titreşimine ait pikin gösterimi                                                                                  | 169 |
| Şekil 4.7.   | 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un N-C=S ve C-N-C titreşim frekansları. _____                                                                      | 169 |
| Şekil 4.8.   | 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütıl-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon a ait FTIR spektrumunda yapıya özgü karakteristik piklerin gösterimi. _____ | 170 |
| Şekil 4.9    | 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon molekülüne ait <sup>1</sup> H-NMR spektrumunda SH/NH pikinin gösterimi. _____                                      | 171 |
| Şekil 4.10   | Etil grubuna ait hidrojen piklerinin <sup>1</sup> H-NMR spektrumunda gösterilişi. _____                                                                                         | 172 |
| Şekil 4.11   | Allil grubuna ait protonların <sup>1</sup> H-NMR spektrumundaki görüntüleri. _____                                                                                              | 173 |
| Şekil 4.12   | Fenil grubuna ait protonların <sup>1</sup> H-NMR spektrumundaki görünümü. _____                                                                                                 | 174 |
| Şekil 4.13   | p-Tollil grubuna ait hidrojenlerin verdiği sinyallerin <sup>1</sup> H-NMR spektrumunda görünümü. _____                                                                          | 175 |
| Şekil 4.14   | Benzil grubuna ait hidrojenlerin <sup>1</sup> HNMR spektrumu. _____                                                                                                             | 175 |
| Şekil 4.15   | 2-Furanil' e ait hidrojenlerin vermiş olduğu sinyallerin <sup>1</sup> H-NMR spektrumundaki görünümü. _____                                                                      | 176 |
| Şekil 4.16   | 2-Tiyofenil halkasına ait protonların vermiş olduğu sinyallerin <sup>1</sup> -HNMR spektrumundaki görünümü. _____                                                               | 177 |
| Şekil 4.17   | 4-pridinil halkasına ait hidrojenlerin vermiş olduğu sinyallerin <sup>1</sup> H-NMR spektrumundaki görünümü. _____                                                              | 178 |

|                                                                                                                                                                                                                                        |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Şekil 4.18 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-<br>etanon bileşiğinde bazı karakteristik piklerin <sup>1</sup> H-NMR spektrumunda gösterilişi. ____                      | 179 |
| Şekil 4.19 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-<br>etanon molekülündeki karakteristik bazı piklerin <sup>1</sup> H-NMR spektrumunda gösterilişi. ____                    | 180 |
| Şekil 4.20 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon<br>molekülü için deneysel ve hesaplanan <sup>13</sup> C-NMR değerlerinin uyumunu gösteren<br>korelasyon grafiği. _____ | 181 |
| Şekil 4.21 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon<br>molekülü için deneysel ve hesaplanan <sup>1</sup> H-NMR değerlerinin uyumunu gösteren<br>korelasyon grafiği. _____  | 182 |
| Şekil 4.22 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon<br>molekülü için deneysel ve hesaplanan FTIR değerlerinin uyumunu gösteren korelasyon<br>grafiği. _____                | 182 |

## TABLÖLAR LİSTESİ

|              |                                                                                   |     |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tablo 3.21.1 | 2a molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri. __ | 110 |
| Tablo 3.21.2 | 2a molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları. _____  | 111 |
| Tablo 3.28.1 | 2h molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri. __ | 128 |
| Tablo 3.28.2 | 2h molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları. _____  | 129 |
| Tablo 3.34.1 | 2n molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları. _____  | 145 |
| Tablo 3.34.2 | 2n molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri. __ | 146 |
| Tablo 3.40.1 | 2u molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri. __ | 162 |
| Tablo 3.40.2 | 2u molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları. _____  | 163 |



## SEMBOLLER LİSTESİ

|                   |                                                 |
|-------------------|-------------------------------------------------|
| B3LYP             | Becke tipi 3 parametrelili Lee Yang Parr modeli |
| HF                | Hartre-Fock                                     |
| DFT               | Yoğunluk Fonksiyonu Kuramı                      |
| SCF               | Öz Uyumlu Alan                                  |
| R                 | Raman                                           |
| IR                | Infrared                                        |
| DMSO              | Dimetil Sülfoksit                               |
| CDCl <sub>3</sub> | <i>d</i> -Kloroform+                            |
| DMF               | Dimetil Formamid                                |
| CCl <sub>4</sub>  | Karbontetraklorür                               |
| NMR               | Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi        |

# 1 GİRİŞ

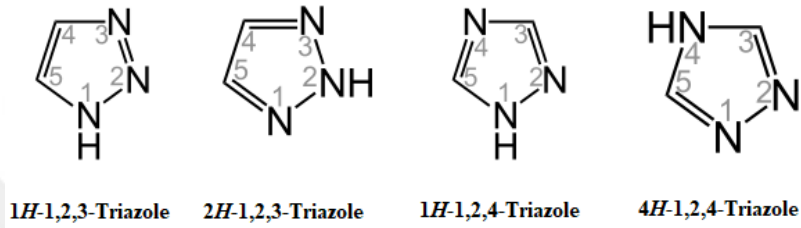
Triazol bileşiklerinin, ilaç etken maddesi, tarım ilacı, yapay akseptör, çok moleküllü ligand oluşturabilme vb. [1,2] gibi potansiyel uygulama alanlarına sahip olması bu maddeleri son derece cazip bir araştırma alanı haline getirmiştir. Triazol halkası, üç azot atomu ile aromatik özelliğe sahip oldukça önemli beş üyeli bir heterosiklik bileşik ve elektron açısından zengin bir sistemdir. Triazol türevlerinin koordinasyon bağı, iyon-dipol, kation- $\pi$ ,  $\pi$ - $\pi$ , van der-Waals kuvvetleri, hidrofobik etki gibi zayıf etkileşimler üzerinden biyolojik sistemdeki çeşitli enzim ve reseptörlerle kolayca bağ yapabilmesi bu bileşiklerin geniş bir alanda biyolojik etki göstermesini sağlamıştır [2–4]. Öte yandan triazol bileşiklerinin diğer spesifik bir özelliği de çok moleküllü yapılar oluşturabilmesidir [5,6]. Bu sayede özellikle çok moleküllü yeni ilaçların geliştirilmesi [7–10] bakımından triazol bileşiklerine özel bir önem verilmektedir. Ayrıca, triazol halkası çift fonksiyonlu ilaç molekülleri üretmek için ve farklı farmakofor parçalarını birleştirmek için de cazip bir bağlayıcı olarak da kullanılabilir. Böylece biyolojik olarak aktif ve işlevsel çeşitli moleküller geliştirmek için uygun ve verimli bir yol sağlamış olur.

1,2,4-triazollerin sülfanil türevleri çok yönlü biyolojik aktivite sergilemektedir. Bunlara örnek olarak diüretik, nöroleptik [11], antitüberküloz [12,13], antimikrobik [14], antiflojistik [15], antiarterit [16], antimikotik, [17] anti-HIV [18] verilebilir. Bunun yanında sübtitüe sülfanil-1,2,4-triazoller uygulama alanı olarak tarım ve sanayide [19,20], farklı donör merkezleri ile metal iyonlarını koordine edebilen kompleks oluşturucu maddeler olarak [21,22] ve organik sentezlerde öncüller olarak da kullanım alanı bulmuşlardır.

Bu tez çalışmasında bir dizi 1,2,4-triazol ve 1,2,4-triazollerin sülfanil türevleri literatürdeki metotlara uygun olarak sentezlenmiştir. Sentezlenen bu bileşikler deneysel olarak FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR, TGA/TDA ve UV-VIS yöntemleri ile karakterize edilmiştir. Deneysel çalışmaların yanında, moleküller Gaussian [23] paket programı ve DFT [24] metodu kullanılarak teorik olarak da karakterize edilmiştir. Yapılan çalışmalar sonucunda deneysel ve hesaplanan değerlerin uyum içinde oldukları görülmüştür.

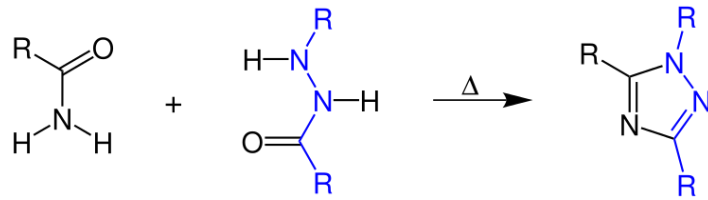
## 1.1 1,2,4-Triazoller

Beş üyeli bir halkada üç azot atomu içeren sistem “triazasiklopentadien” veya kısaca triazol olarak bilinir. Üç azot atomunun göreceli pozisyonuna göre farklı iki izomer grubu vardır. Bu izomerlerin her birinde hidrojenin bağlı olduğu azot atomuna göre farklı iki tautomer bulunur.

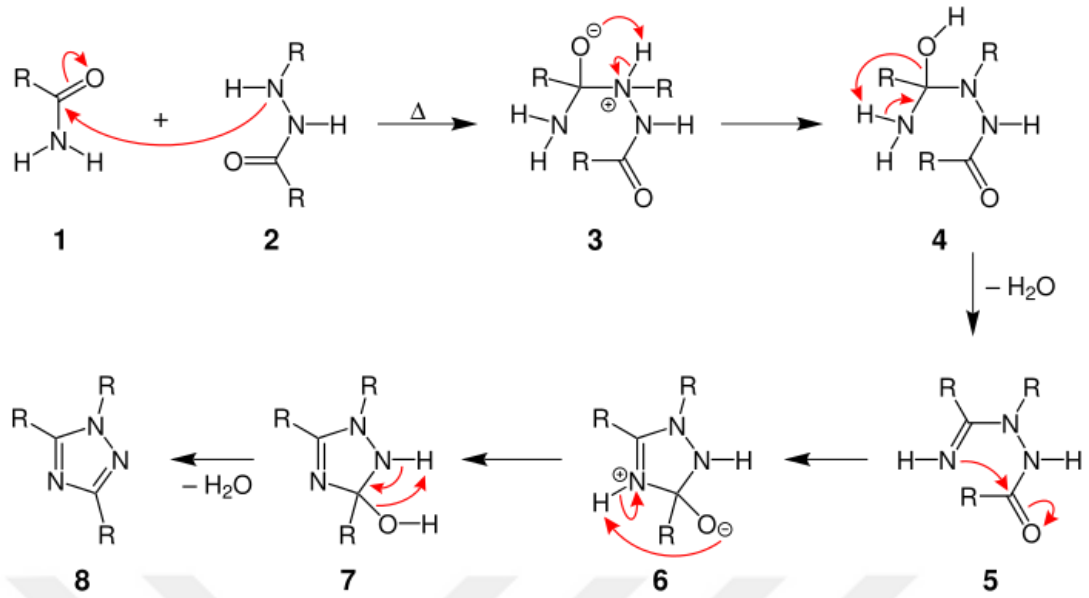


Aromatik karakterde olan bu halkalarda hidrojen taşıyan azot atomlarının elektronik durumu, piroldeki azot atomunun elektronik durumunun aynısıdır. Diğer azot atomlarının elektronik durumu ise diazollerdeki hidrojen taşımayan azot atomlarının durumu gibidir [25]

Triazol halkası üzerine ilk çalışmalar, 1885 yılında Bladin ve Pelizzari’nin hidrazin ve formamidi reaksiyona sokarak ana halkayı sentezlemeleriyle başlamıştır [26] Oluşum reaksiyonu Şekil 1.1.1 de mekanizması ise Şekil 1.1.2 de gösterilmiştir.

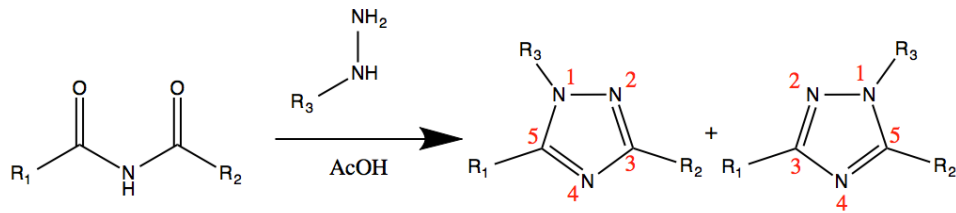


Şekil 1.1.1 1,2,4-Triazol halkası oluşum reaksiyonu.

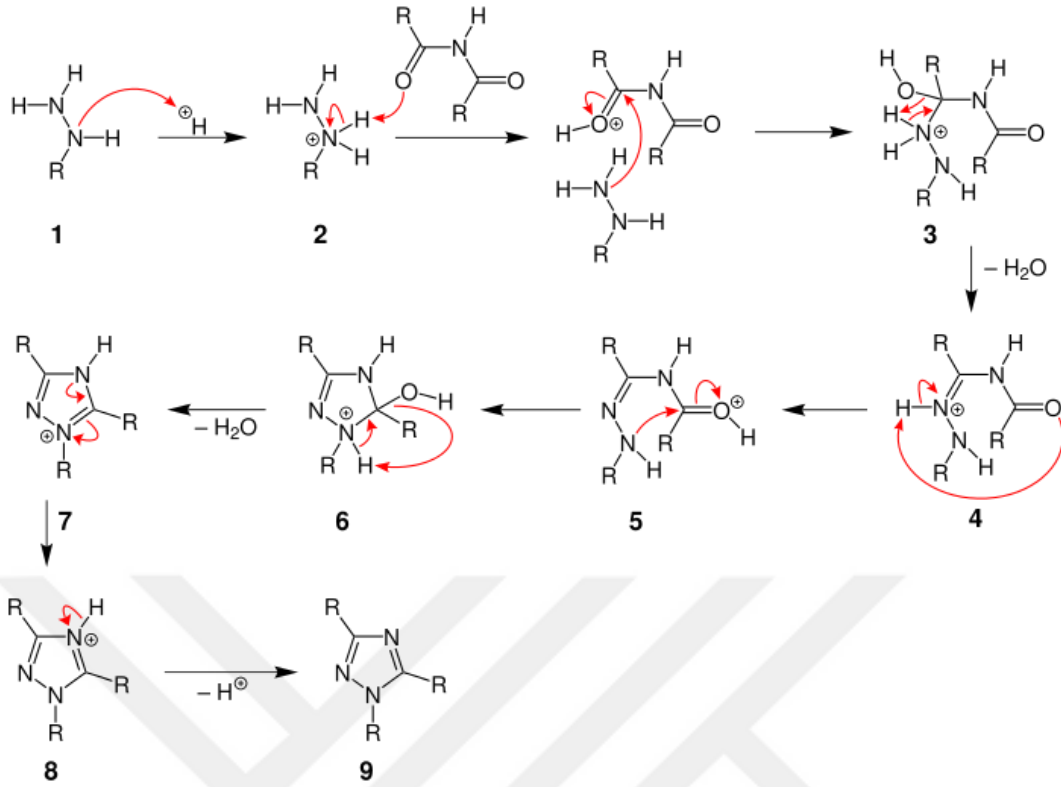


Şekil 1.1.2 Pellizzari reaksiyonun mekanizması.

Bu reaksiyonda, verimin düşük ve değişken olması nedeniyle 1,2,4-triazol sentezi için farklı yöntemler denenmiştir. 1914 yılında kimyager Karl Brunner çeşitli imid ve hidrazinleri reaksiyona sokarak sübtitüe 1,2,4-triazol türevlerini başarılı şekilde sentezlemiştir. Bu reaksiyon Einhorn-Brunner reaksiyona olarak bilinmektedir [27–31] Oluşum reaksiyonu Şekil 1.1.3 de mekanizması ise Şekil 1.1.4 de gösterilmiştir.



Şekil 1.1.3 Einhorn-Brunner reaksiyonu ile 1,2,4-triazol oluşumu.

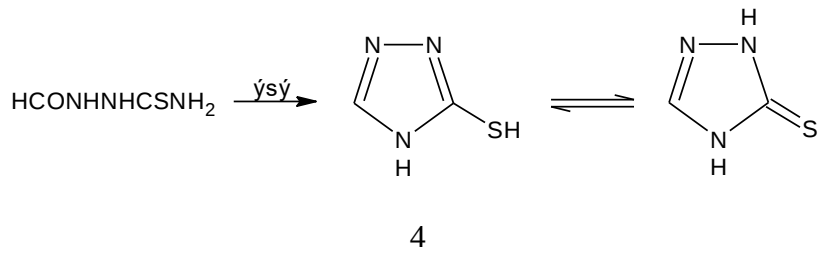


Şekil 1.1.4 Einhorn-Brunner reaksiyonun mekanizması

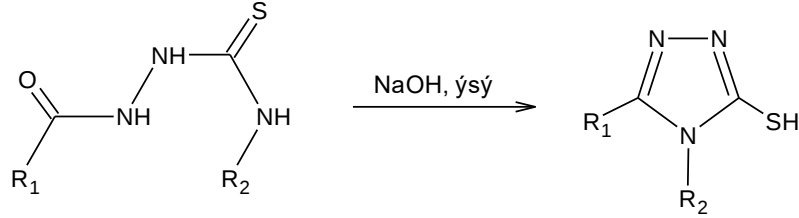
## 1.2 1,2,4-Triazol-5-tiyonların Elde Edilişleri

### 1.2.1 Tiyosemikarbazit ve türevlerinden

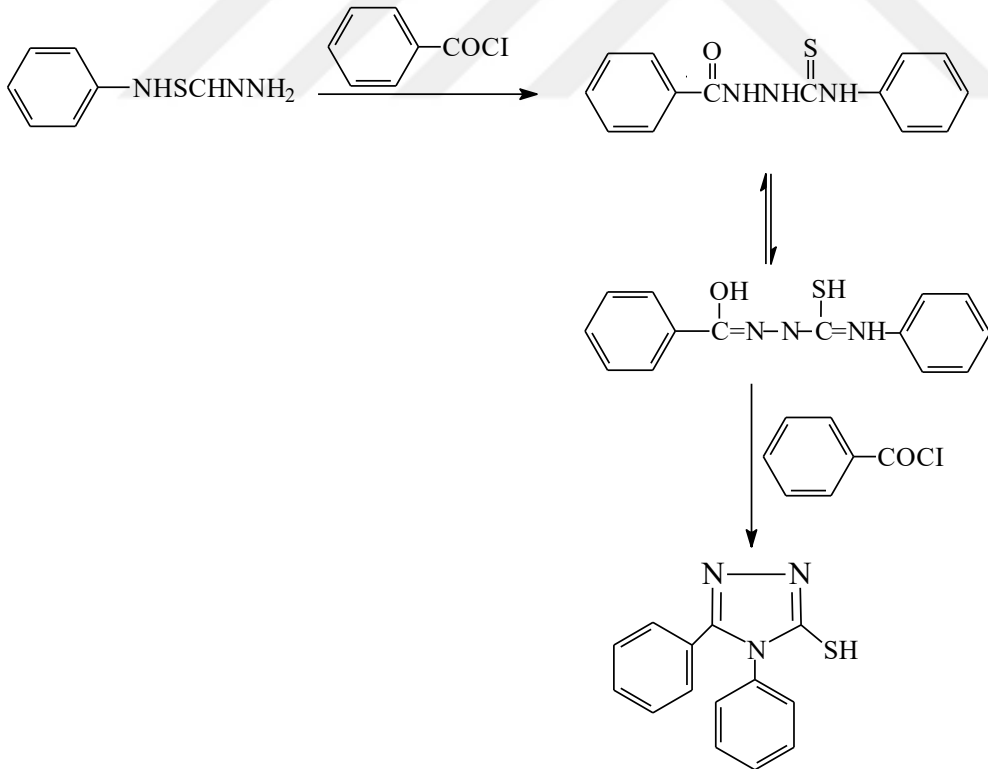
1896 yılında, 1,2,4-Triazol-5-tiyon ilk kez Freund tarafından 1-formil-3-tiyosemikarbazidin kuru kuruya  $190\text{ }^\circ\text{C}$ 'de ısıtılmasıyla elde edilmiştir [32]



1,2,4-Triazol-5-tiyonların sentezi için en yaygın kullanılan yöntemlerin başında açılhidrazinlerin, süstitüe izosiyanatlar ile verdiği 1-açıl-4-süstitüe-3-tiyosemikarbazitlerin alkali ortamda halkalaşması gelir [33–36]

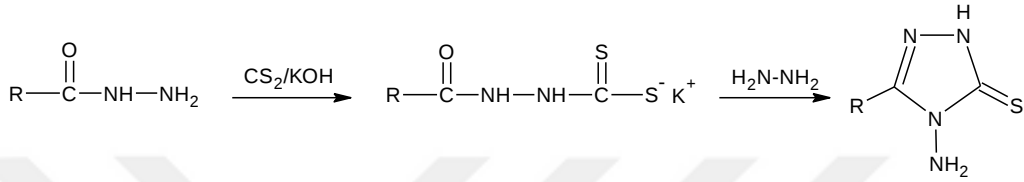


4-Süstitüe-3-tiyosemikarbazit türevleri karboksilli asit klorürleri ile açillenmesi sonucu 4,5-disüstitüe-1,2,4-triazol-3-tiyonlar elde edilir [37,38].



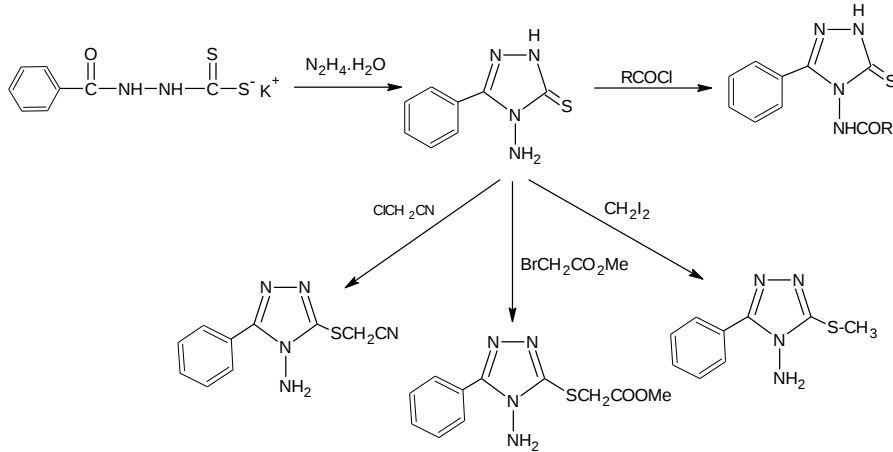
### 1.2.2 Ditiyokarbazik Asit Tuzlarından

Açilhidrazinlerin oda sıcaklığında, bazik ortamda alkol içerisinde karbon sülfür ile etkileşmesinden oluşan ditiyokarbazat tuzunun hidrazinle reaksiyonu sonucu Şekil 1.5.’deki 4-amino-5-alkil-1,2,4-triazol-3-tiyon sentezlenmiştir [39]. Reaksiyon Şekil 1.2.1 deki gibidir.



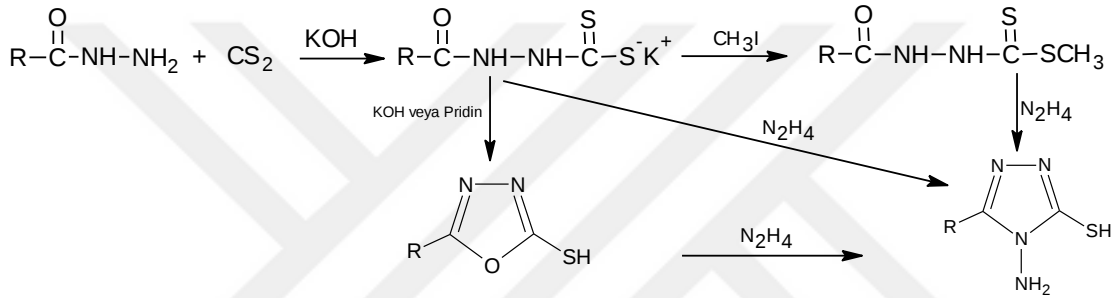
Şekil 1.2.1 Ditiyokarbazik asit tuzlarından 4-amino-5-alkil-1,2,4-triazol-3tiyon sentezi.

Eweiss ve ark., yaptığı bir çalışmada, 3-arilditiyokarbazat tuzunu hidrazin hidrat ile Reid ve Heindel [40] prosedörüne göre etkileştirip 4-amino-5-fenil-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon türevlerini elde etmiş ve bunu metil bromasetat, asit klörür, metilen iyodid ve kloroasetonitril ile reaksiyona sokarak Şekil 1.2.2’ de gösterilen 5-fenil-4H-1,2,4-triazol türevlerini %60-70 verimle sentezlemiştir [41,42].



Şekil 1.2.2 5-fenil-4H-1,2,4-triazol türevlerinin 3-arilditiyokarbazik asit tuzlarından sentezi.

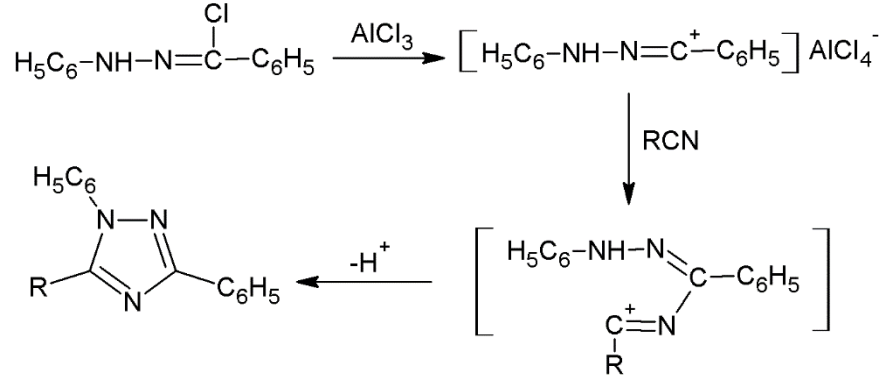
Reid ve Heindel prosedürne göre karboksilik asit hidrazitler, etanolik KOH içerisinde CS<sub>2</sub> ile reaksiyona girerek yüksek verimle potasyum 3-aroilditiyokarbazat tuzlarını verirler. Oluşan bu tuz, piridin veya susuz KOH beraberinde halka kapanması gerçekleştirilerek 5-aril-2-merkapt-1,3,4-oksadiazol bileşiğini oluşturur. Oluşan bileşik aşırı NH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> ile etkileştirilerek Şekil 1.2.3’ deki 4-amino-5-alkil-3-merkapt-4H-1,2,4-triazol elde edilir [43]. Bununla beraber 3-aroilditiyokarbazat tuzu metil iyodürle etkileştirildikten sonra oluşan dithiokarbazat, hidrazin ile reaksiyona sokulursa halka kapanma reaksiyonu sonucu 4-amino-5-alkil-3-merkapt-4H-1,2,4-triazol’u verir.



**Şekil 1.2.3** Reid ve Heindel prosedürüne göre 4-amino-5-alkil-3-merkapt-4H-1,2,4-triazol’ ün elde reaksiyonu.

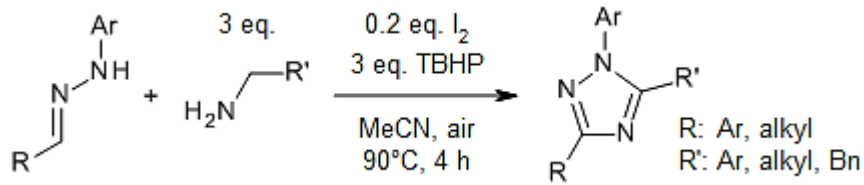
### 1.2.3 Diğer Yöntemler

1974 yılında Conde ve ark. siyano bileşiği ve alimünyum kloridi kuru o-diklorbenzen içerisinde karıştırmış ve bu karışıma fenil benzhidrazidoil klorür ekleyerek 120-130° de 20 dakika ısıtmıştır. Daha sonra bu karışım soğutulmuş seyreltik sodyum hidroksit ile bazik hale getirildikten sonra etil asetat ile ekstraksiyon edilmiştir. Organik kısım seyreltik hidroklorik asit ve su ile yıkanarak 1,2,4-triazol bileşiği elde edilmiştir. İlgili reaksiyon şeması Şekil 1.2.4’deki gibidir [44].



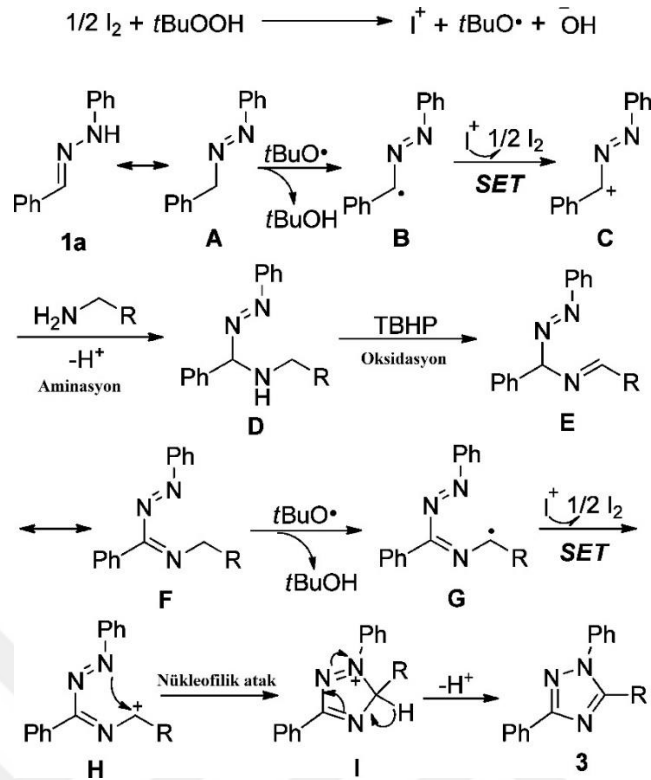
**Şekil 1.2.4** 1,3-difenil-5-n-alkil-1*H*-1,2,4-triazol'ün elde reaksiyonu.

Hidrazon ve alifatik aminlerin aerobik oksidatif koşullara altında reaksiyonu. 1,3,5-trisüstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerini verir. Reaksiyon şeması Şekil 1.2.5 ve mekanizması Şekil 1.2.6 da verilmiştir



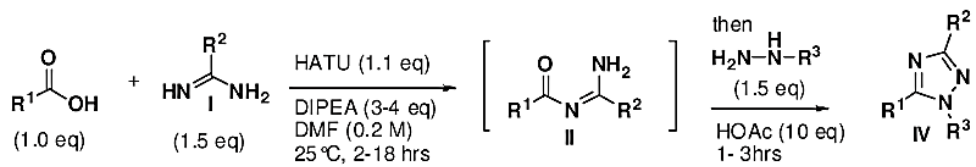
**Şekil 1.2.5** Hidrazon ve alifatik aminlerin reaksiyonu sonucu 1,3,5-trisüstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerinin oluşum reaksiyonu.

Reaksiyon hidrazon ve aminin, iyodür ve tert-bütill hidroperoksit (TBHP) katalizörlüğünde 90° C de etkileşmesiyle meydana gelir. Verim kullanılan hidrazon ve aminin türüne bağlı olarak %34 ile %92 arasında değişmektedir.



**Şekil 1.2.6** Hidrazon ve alifatik aminlerin reaksiyonu sonucu 1,3,5-trisüstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerinin oluşum mekanizması (SET= single-electron-transfer).

Castenedo ve ark. 2010 yılında yayınladıkları bir çalışmada 1,3,5-trisüstitüe-1,2,4-triazol türevlerini karboksilik asit, pirimer amidin ve monosüstitüe hidrazinlerin reaksiyonu sonucu elde etmeyi başarmışlardır [45]. Reaksiyon Şekil 1.2.7 deki gibidir.

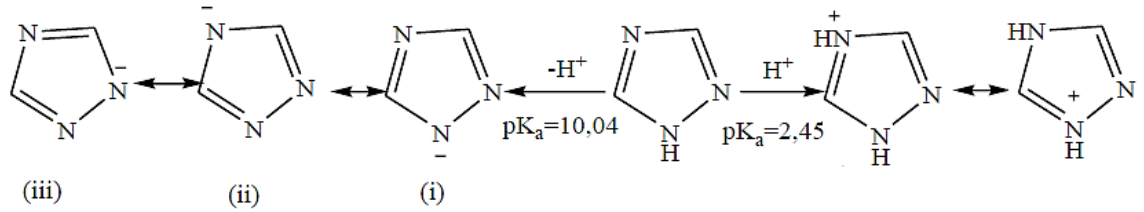


**Şekil 1.2.7** 1,3,5-trisüstitüe-1,2,4-triazol türevlerinin karboksilik asit, pirimer amidin ve monosüstitüe hidrazinlerinlerden elde reaksiyonu.

### 1.3 Triazollerin Özellikleri

#### 1.3.1 Asitlik ve bazlık

1,2,4-Triazol bileşikleri zayıf asit özellik göstermekle beraber (proton verme için  $pK_a=10,04$ ) 1,2,3-triazollerden daha baziktir (proton alma için  $pK_a=2,45$ ). 1,2,4-triazolün bazik özelliği imidazolyum tipi katyonun mezomerik olarak kararlı kılınmasından kaynaklanır. (Şekil 1.3.1).

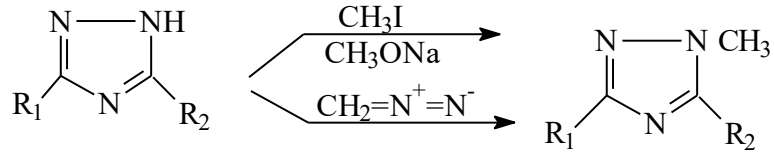


Şekil 1.3.1 1,2,4-Triazollerin proton alma ve proton verme durumları.

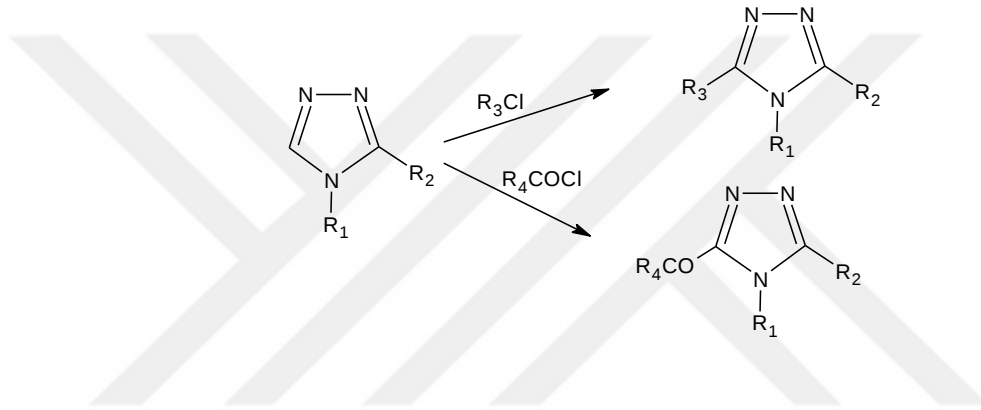
#### 1.3.2 Reaktivitesi

1,2,4-triazoller, aromatik özelliklerinde ve stabilliklerinde 1,2,3-triazollere benzerler. Oksitleyiciler yan zinciri oksitler, halkayı parçalayamazlar. Triazoller,  $KMnO_4$ ,  $CrO_3$ , vs. gibi oksidanlara karşı genellikle dayanıklı bileşiklerdir, ancak redükleyicilere karşı hassastır. Azot atomundaki hidrojen metaller ile yer değiştirir.

1 numaralı konumda hidrojen taşıyan triazoller, alkali ortamda alkil halojenürler veya diazometan ile alkillenirler.



Diğer taraftan 3,4-disübstitüe-1,2,4-triazoller alkil halojenürlerle beş numaralı konumlarından alkillenirken, açıl klorürle açilleniirler.

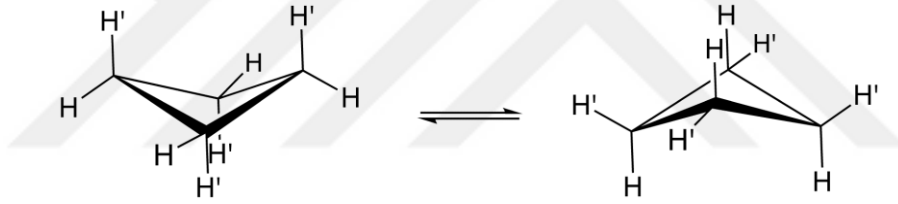


3- ve 5-Sübstitüe türevlerinin hazırlanması halkanın bu konumlarından sübstitüsyon ile de mümkündür. Triazoller kolaylıkla halojenlenebilirler, Halojenlenmiş ürünlerden *N*-Cl, *N*-Br ve *N*-I-1,2,4-triazol türevleri ilginçtir. Çünkü azot ile halojen arasındaki bağ kolaylıkla koparılabilir ve yer değıştirme reaksiyonu verebilir.

1,2,4-triazoller, nitrolama, sülfolama ve Friedel-Crafts alkillendirme ve açillendirmesi gibi asidik koşulları gerektiren elektrofilik sübstitüsyon reaksiyonlarını vermezler. Ancak formaldehit ile 130 °C'de 3-hidroksimetil-1,2,4-triazoller oluşturlar.

## 1.4 Siklobütan ve Türevleri

Siklobütan,  $(C_2H_4)_2$  kapalı formülüne sahip alisiklik bir bileşiktir, apolar olduğu için molekülleri arasında yalnızca Van der Waals etkileşimleri mevcuttur. Oda sıcaklığında renksiz ve yanıcı bir gaz olmakla beraber suda çözünmez. Kaynama noktası 12 ve Erime noktası  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ ' dir. Siklobütanın kendisi hiçbir ticari veya biyolojik anlam taşımamaktadır, ancak daha karmaşık türevleri biyoloji ve biyoteknolojide oldukça önem arz eder. Siklobütan' daki dört karbon atomu aynı düzlemde değildir, halka tipik olarak katlanmış veya buruşmuş bir konformasyondadır. Karbon atomlarından her biri, diğer üç karbon atomunun oluşturduğu düzlemle  $25^{\circ}$  lik açı yapar. Böylece her bir karbon atomunun sebep olduğu itici kuvvet minimuma iner. Bu konformasyon aynı zamanda “kelebek” konformasyonu olarak da bilinir. (Şekil 1.4.1)



Şekil 1.4.1 Siklobütan molekülünün kelebek konformasyonları.

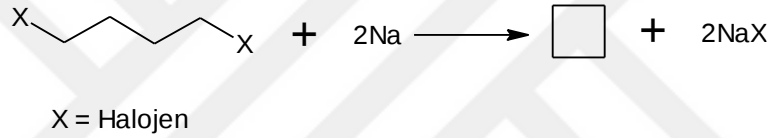
### 1.4.1 Siklobütanda stereoizomerlik

Siklobütanda halkadan dolayı karbonların kendi eksenine etrafında dönmeleri engellenmiştir. Bunun sonucu olarak da geometrik izomeri oluşmuştur.

Siklobütanda geometrik izomerin oluşması için en az iki grup olması gerekir. Bu durumda siklobütanın daha çok -cis izomerleri oluşur. Siklobütana üç grup bağlandığında ise asimetrik karbon atomu oluşur ve optik izomeri görülür.

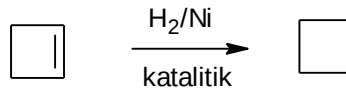
#### 1.4.2 Siklobütanın Elde Reaksiyonları

Siklobütan eldesi için en uygun yol 1,4-dihalobütan'la yapılan Wurtz yöntemidir. Bu yöntemle Şekil 1.4.2 deki gibi siklobütan türevlerini de elde etmek mümkündür. Bu yöntemde verim düşüktür, seyreltik hekzan veya pentanlı çözeltiler kullanılarak verim artırılabilir [46].



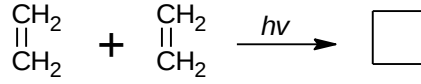
**Şekil 1.4.2** Wurtz yöntemi ile 1,4-dihalobütanlardan siklobütan eldesi.

Siklobütenin katalitik hidrojenlenmesi ile siklobütan oluşur. Reaksiyonun ilk aşamasında nikel üzerine hidrojen gazı gönderilir ve metalin etkisiyle H-H sigma bağı açılarak metal-H bağı oluşur. Sonraki aşamada siklobüten metal üzerine gönderilir ve pi bağları metal ile etkileşerek ve siklobütan oluşur. (Şekil 1.4.3) Oluşan siklobütan metalin yüzeyinden uzaklaşır. Reaksiyon 180 °C de gerçekleşir.

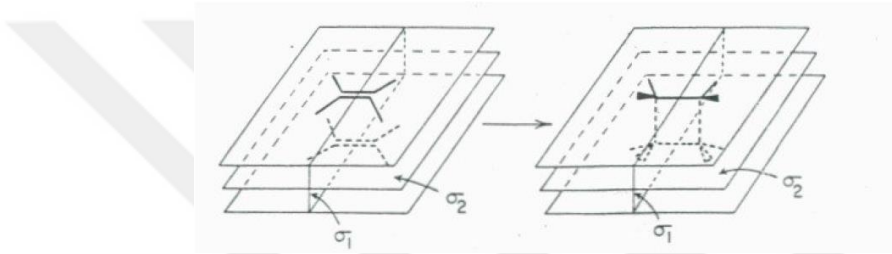


**Şekil 1.4.3** Katalitik hidrojenlenme yolu ile siklobütenden siklobutan eldesi.

Siklo katılma reaksiyonları bir tür Diels-Alder reaksiyon'u olup ışık etkisiyle siklobütan oluşabilir [47]. Reaksiyonun oluşu Şekil 1.4.4 mekanizması ise Şekil 1.4.5 deki gibidir.



**Şekil 1.4.4** Fotokimyasal olarak siklobütanın [2+2] siklokatalıma reaksiyonuyla oluşumu.



**Şekil 1.4.5** Siklobütanın oluşumu sırasında etilen moleküllerinin geometrisi.

Siklobütanlar, düz zincirli alkanlar gibi radikalik halojenlenme reaksiyonu verirler. Paladyum katalizörlüğünde hidrojenin siklobütanı etkilemesi sonucu halka açılır ve bütan oluşur. Siklobütan soğukta HI ve  $\text{KMnO}_4$ 'a karşı dayanıklı olup parçalanma reaksiyonu vermezler.

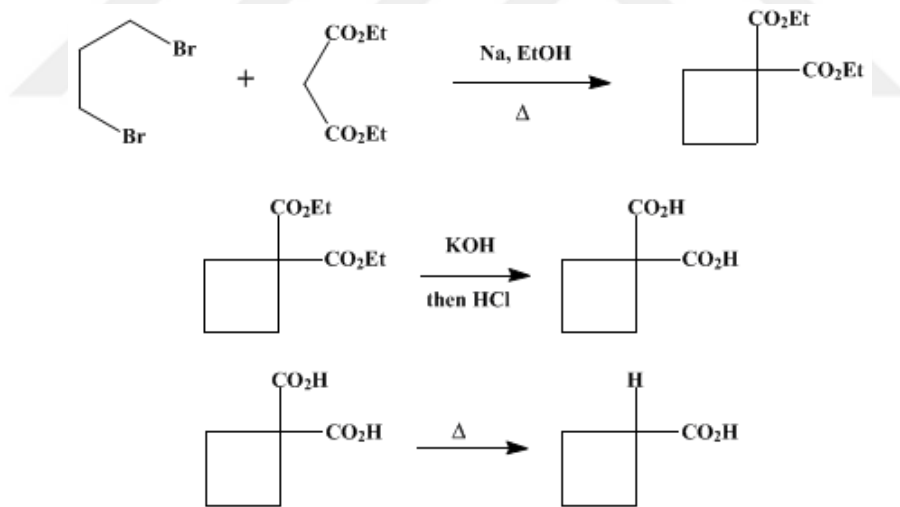
### 1.4.3 Siklobütanın Spektroskopik Özellikleri

1,3-süstitüe siklobütan türevlerinde -cis durumundaki dihedral açı -trans durumundan daha küçüktür. Dihedral açı, -cis protonlarında  $30^\circ$  iken, -trans durumunda bu açı  $140^\circ$  dir.

Dihedral açının -cis konumunda küçük olması, atomların elektron bulutları arasında kuvvetli bir itme kuvveti meydana getirecek ve bu protonların  $^1\text{H-NMR}$  spektrumunda daha yüksek alanda veya daha düşük ppm değerlerinde çıkmasına neden olacaktır. Siklobütanın  $^1\text{H-NMR}$  pikleri, yapıya bağlı olan grupların değişimine göre 2-3 ppm aralığında çıkmaktadır. FT-IR spektrumunda ise bu protonların pikleri  $2980\text{-}2900\text{ cm}^{-1}$ 'de C-H gerilme titreşimleri olarak çıkar.  $1325\text{ cm}^{-1}$ 'de ise C-H eğilme piki çıkmaktadır [48].

#### 1.4.4 Literatürde Siklobütan Türevlerinin Önemi

Siklobütan türevlerine verilebilecek ilk örnek siklobütan karboksilik asittir. 1887 yılında William Perkin bir seri reaksiyon sonucu aşağıda gösterildiği gibi siklobütan karboksilik asiti elde etmeyi başarmıştır [49]. (Şekil 1.4.6)



**Şekil 1.4.6** Siklobütan karboksilik asitin, malon esteri ve trimetilen bromürden sentezi.

Bu reaksiyon iki kademeli bir reaksiyondur. İkinci kademede intramoleküler bir reaksiyondur. Malonik asit esteri hidroliz olunca malonik asite dönüşür. Genel olarak dikarboksilik asitler yüksek sıcaklıklarda kararlı değildirler. 150-200 °C' de 1 mol CO<sub>2</sub> kaybederek monokarboksilik asite dönüşürler.

Literatürde siklobütan türevlerinin sentezinde iki önemli özellik söz konusudur. Birincisi genel olarak çıkış maddesi olarak malon esterlerinin kullanılması ikincisi olarak ise siklobütan türevi olarak siklobütan karboksilik asit türevlerinin sentezidir.

## 1.5 Elektronik Yapı Yöntemleri

Elektronik yapı yöntemlerinin temel amacı çok elektronlu sistemlerin elektronik yapılarını belirlemektir. Elektronik yapı belirleme yöntemleri, kuantum mekaniğinin temel ilkelerini kullanarak atom ve moleküle ilişkin enerji ve diğer parametreleri Schrödinger denklemini çözerek elde eder.

Temel olarak elektronik yapı yöntemleri, moleküler orbitalleri atomik orbitallerin doğrusal kombinasyonu olarak ifade ederek, çeşitli seküler determinant sistemleri kurarlar. Bu determinantlı sistemleri birçok integral ifadesinden oluşur. Bu seküler determinantlar çeşitli yaklaşımlar uygulanarak çözülür ve sistemlerin dalga fonksiyonları belirlenir [50].

Az sayıda elektron içeren sistemler için bile bu hesapların yapılabilmesi ve sonuçların alınması işlemi oldukça zordur. Bu sebeple elektronik yapı yöntemlerinde çözüm yapılırken bazı fizikokimyasal ve matematiksel yaklaşımlardan yararlanılır. Uygulanan bu yaklaşımlar ile, sistemin elektronik dalga fonksiyonu ve elektronik enerjisi hesaplanır. Elde edilen bu bilgilere dayalı olarak sistemin tüm fiziksel ve kimyasal bilgilerini elde etmek mümkün hale gelir.

Bu hesaplamalar yapılırken aşağıdaki sıra takip edilir:

- i) Sistemin Hamilton operatörü yazılır ve Schrödinger denklemi kurulur.
- ii) Dalga fonksiyonu için uygun bir matematiksel fonksiyon seçilir ve bu fonksiyonun değişken parametreleri bulunur.
- iii) Parametrelerdeki değişkenlere göre molekülün enerjisi için

$$E = \frac{\int \Psi^* H \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (1.1)$$

eşitliğinin minimum değeri hesaplanır. Bu eşitlikte;

H: Hamilton Operatörü

$\psi$  : Moleküler dalga fonksiyonu

$\psi^*$  : Dalga fonksiyonunun eşlenik kompleksidir [51].

Elektronik Yapı Hesaplamaları, günümüzde kullanıldığı hali ile üç ana bölüme ayrılabilir.

1. Ab initio yöntemler
2. Fonksiyonel yoğunluk yöntemi
3. Yarı ampirik yöntemler

Çok yüksek sayıda atom veya molekülün yapısını belirleyebilmek amacı ile yarı ampirik yöntemler geliştirilmiştir. Bu metotlar bazı yaklaşımlar uygulanarak Hamilton operatörünün sadeleştirilmiş şeklini kullanırlar. Yarı ampirik yöntemleri uygulamak için deneysel bulgulara dayalı bazı parametrelere ihtiyaç duyulur. Her iki yöntemin de temel amacı elektronik dalga fonksiyonu ve elektronik enerjinin hesaplanmasıdır. Daha sonra bu ifadelerle bağlı olarak sistemin tüm fiziksel ve kimyasal durumları ile ilgili bilgi elde edilebilir. Örneğin karalı bir sistemin en düşük enerjisi bu sistemin temel konumundaki (ground state) yapısına karşılık gelir. Böylece moleküldeki mevcut tüm bağların uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açılarını hesaplamak mümkün hale gelir.

### 1.5.1 Schrödinger Denklemi

Kuantum mekaniksel hesaplamalarda, sistemlerin konumları dalga fonksiyonu ile gösterilir. Dalga fonksiyonu; sistemin koordinatlarına ve zamana bağlı olan bir fonksiyondur. Potansiyel enerji zamana göre değişmediğinden dalga fonksiyonu koordinatlara ve zamana bağlı olan iki ayrı fonksiyonun çarpımı olarak yazılabilir. Bunun sonucunda Schrödinger denklemi iki ayrı parçaya ayrılmış olur [52]. Kimyasal hesaplamalarda odak nokta, zamandan bağımsız olan olaylardır ve bu nedenle zamandan bağımsız Schrödinger denklemi kullanılır. Schrödinger denkleminin özdeğerleri değişik durağan hallere karşılık gelir [53].

Kuantum mekaniğinin temeli olan Schrödinger denklemi;

$$H\psi = E\psi \quad (1.2)$$

şeklinde yazılabilir. Bu eşitlikte; H, Hamilton operatörü; E, sistemin toplam enerjisi;  $\psi$ , dalga fonksiyonunu göstermektedir. Hamilton operatörü sistemin toplam enerji operatörüdür. E, sabit bir değer olup Hamilton operatörünün özdeğeridir. Dalga fonksiyonu ise Hamilton operatörünün öz fonksiyonudur. Moleküler sistemin Hamilton operatörü, elektronların ve çekirdeklerin kinetik enerji operatörleri, molekülde yer alan tüm yüklü tanecikler arasındaki elektrostatik etkileşimler, çekirdeklerin ve elektronların spin ve orbital hareketlerinden kaynaklanan manyetik momentler arasındaki etkileşimleri içerir. Bu nedenle, moleküler orbital hesaplamaları yapılırken moleküle ait olan Hamilton operatörünün tamamı kullanılmaz. İleride açıklanacak olan bazı yaklaşımların kullanımı ile çekirdeklere ait olan kinetik enerji operatörleri ihmal edilir ve manyetik etkileşimlerin olmadığı kabul edilir. Sonuçta, molekülün elektronik enerjisi E'ye karşılık gelen Hamilton operatörü;

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla^2 - \sum_{\mu=1}^N \sum_{i=1}^n (Z_{\mu} / r_{\mu i}) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n 1 / r_{ij} \quad (1.3)$$

şeklini alır [53]. Bu eşitlikte i ve j altlıkları n tane elektron için,  $\mu$  ise N tane çekirdek için kullanılmıştır. Eşitlik (3.13)'deki birinci terim elektronların kinetik enerjisini, ikinci terim çekirdekler ile elektronlar arasındaki Coulomb çekme enerjisini, üçüncü terim ise elektronlar arasındaki itme enerjisini göstermektedir. Diğer taraftan çekirdekler arasındaki itme enerjisi bu eşitliğe konulmamıştır. Çekirdekler arasında itme enerjisi;

$$V_{nn} = \sum_{\mu=1}^{N-1} \sum_{\gamma=\mu+1}^N (Z_{\mu} Z_{\gamma} / r_{\mu\gamma}) \quad (1.4)$$

dir. Bu eşitlikte;

$V_{nn}$ : Çekirdek - çekirdek itme enerjisini,

Z: Çekirdeklerin atom numarasını,

r: Çekirdekler arası uzaklığı

göstermektedir. Moleküldeki toplam çekirdek sayısı N'dir.  $\mu$ ,  $\gamma$  altlıkları çekirdekler için kullanılmıştır.

## 1.5.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Kuantum mekaniği prensipleri ile molekülün yapısı açıklanırken, molekülü oluşturan atomların enerjileri ayrı ayrı hesaplanır. Daha sonra molekülün enerjisi bulunur.

Molekölün enerjisi, atomların enerjilerinin toplamından küçükse molekül dayanıklıdır. İki enerji arasındaki fark moleküldeki bağ kuvvetinin bir ölçüsüdür. Fakat en basit molekül için bile kuantum mekaniği prensipleri kullanılarak hesapların yapılması ve sonuçların elde edilmesi çok zordur. Bu nedenle moleküler eşitliklerin yazılışında “Born-Oppenheimer Yaklaşımı” kullanılır.

Kuantum mekaniksel yarı - ampirik yöntemler ve *ab initio* yöntemlerin her ikisi de Born- Oppenheimer yaklaşımına dayanır. Hesaplamaların kolaylaşması açısından Born- Oppenheimer yaklaşımı büyük önem taşır. Elektronlar ve çekirdekler arasındaki kütle farkı göz önünde bulundurulduğunda, elektronlar çekirdeklere oranla çok daha hafiftir. Elektronların çekirdeklere göre çok büyük bir hızla hareket etmeleri Born-Oppenheimer yaklaşımının dayanak noktasını oluşturur. Born-Oppenheimer yaklaşımına göre, Schrödinger denklemini molekülde bulunan tüm tanecikler için çözmek yerine, çekirdekleri sabit noktalarda kabul ederek, sadece çekirdeklerin bu belirli yerlerinden doğan etki alanı içindeki elektronlar için çözmek yeterlidir [54].

Moleküler orbital dalga fonksiyonu nükleer ve elektronik dalga fonksiyonunun çarpımı olarak;

$$\psi = \psi_N \cdot \psi_e \quad (1.5)$$

yazılabilir. Burada  $\psi_N$ , çekirdeklerin hareketini gösteren nükleer dalga fonksiyonu ve  $\psi_e$ , elektronların hareketini gösteren elektronik dalga fonksiyonudur. Born-Oppenheimer yaklaşımına göre, çekirdekler elektronlardan daha ağırdır ve bu nedenle hareketleri çok yavaştır. Çekirdeklerin hareketleri elektronların hareketleri yanında ihmal edilebilir. Ve molekülün dalga fonksiyonu olarak  $\psi_e$  kullanılabilir. Born-Oppenheimer yaklaşımının kullanılması ile molekülün enerjisi;

$$E = \int \psi^* H \psi \cdot d\tau \quad (1.6)$$

ile gösterilir. Bu eşitlikte;  $\psi$ , moleküldeki tüm elektronların hareketlerini gösteren dalga fonksiyonu;  $H$ , çekirdeğin etki alanı içinde hareket etmekte olan elektronların toplam enerji operatörüdür.

Daha sonra çekirdeklerin yerleri değiştirilerek aynı hesaplamalar tekrar edilebilir ve bu şekilde molekülün potansiyel enerji yüzeyi elde edilebilir. Born-Oppenheimer yaklaşımının güvenilirliği ekterm haller için az olup, normal haldeki moleküller için iyidir.

### 1.5.3 Varyasyon Teoremi

Bu teorem molekülün gerçek dalga fonksiyonu yerine uygun olan yaklaşık bir fonksiyonun kullanılmasını sağlar. Schrödinger denkleminin özelliğinden dolayı, Eşitlik (1.6)'da  $\psi$  yerine yaklaşık bir dalga fonksiyonu kullanılır ise (1.7) eşitliğindeki integralin değeri molekülün normal halindeki enerjisinden daima daha büyük olur.

$$\int \Phi^* H \Phi d\tau > E_0 \text{ 'dır.} \quad (1.7)$$

Burada,

$\Phi$ : Elektronların hareketini gösteren yaklaşık dalga fonksiyonu,

$E_0$ : Molekülün temel halindeki mümkün olan en düşük enerjisi

dir. Bu eşitlik “Varyasyon Teoremi” olarak bilinir. Varyasyon teoremi ile molekülün dalga fonksiyonu ve molekülün enerjisi kolaylıkla hesaplanabilir. İntegralin minimum değeri molekülün enerjisinden biraz daha yüksektir, fakat gerçek değerine oldukça yakın bir değerdir. Varyasyon teoremi ile moleküler orbital dalga fonksiyonu ve molekülün enerjisi hesaplanır. Bu teorem ile moleküler orbital hesaplamalarında molekül bir bütün olarak

düşünülür ve atomik orbitallerin kullanılması ile moleküler orbital ve moleküler enerji seviyeleri hesaplanır [55].

#### 1.5.4 Atomik Orbitallerin Doğrusal Kombinasyonu (LCAO)

LCAO "Atomik Orbitallerin Doğrusal Kombinasyonu" yöntemi; moleküllerin gerçek dalga fonksiyonları yerine kullanılabilecek uygun bir dalga fonksiyonu yazmak için kullanılan en yaygın yöntemdir. Buna göre, bir molekülde bulunan çekirdekler birbirlerinden çok uzak mesafelerde iseler kovalent bağları oluşturan elektronların atomik orbitallerde bulundukları kabul edilir. Bu nedenle, LCAO metodunda molekülün dalga fonksiyonu, kendisini oluşturan atomların dalga fonksiyonlarının toplamı olarak yazılabilir [51].

$$\psi = C_1\chi_1 + C_2\chi_2 + C_3\chi_3 + \dots + C_n\chi_n \quad (1.8)$$

Bu eşitlikte;

$\psi$ : Moleküler dalga fonksiyonu

$\chi_1, \chi_2, \chi_3, \dots, \chi_n$  : Atomik orbital dalga fonksiyonları

$C_1, C_2, C_3, \dots, C_n$ : Dalga fonksiyonunun katsayıları

Bu eşitlikte gerçek dalga fonksiyonuna en yakın dalga fonksiyonunun bulunması için  $C_1, C_2, \dots, C_n$ , katsayılarının uygun şekilde belirlenmesi gerekir. Molekülün temel haldeki enerjisi minimumu minimum yapacak şekilde belirlenir. Bunun için de önce molekülün enerjisi hesaplanır.  $m$  değerindedir. Bu nedenle, dalga fonksiyonunun katsayıları enerjiyi Molekülün Schrödinger denklemi (1.2) eşitliğinde olduğu gibidir. Bu eşitliğin her iki tarafı  $\psi$  ile çarpılır,  $-\infty, +\infty$  arasında integral alınır ve enerji,  $E$  çözülür ise;

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \quad (1.9)$$

olduğu bulunur. Moleküler orbital dalga fonksiyonu  $\psi$ 'nin (1.8) eşitliğindeki karşılığı yerine konulup gerekli düzenlemeler yapıldıktan sonra, elde edilen denklemler homojen bir denklem sistemi oluştururlar. Bu denklemleri sağlayan E değeri, katsayı determinantı sıfıra eşitlenerek bulunur.

### 1.5.5 Hartree-Fock Alan Teorisi, HF-SCF Yöntemi

Yarı-ampirik kuantum mekaniksel yöntemlerin ve ab initio yöntemlerin çoğunun temel noktası Hartree-Fock (HF) alan yöntemidir. Bu yöntem ilk defa D.R. Hartree tarafından ortaya sürülmüş ve sonrasında V. Fock ve J.C. Slater tarafından geliştirilmiştir [56].

Moleküler orbital enerji hesaplamalarını zorlaştıran kısım elektron-elektron itme enerjisinin varlığıdır. Bu enerji iki elektronun birbirine uzaklığı olan  $r_{ij}$ 'ye bağlıdır. Hartree-Fock alan kuramının dayandığı temel yaklaşımlardan biri, moleküldeki bir elektronun, diğer tüm elektron ve çekirdeklerin etkilerinden kaynaklanan enerjinin, ortalaması kadar enerjiye sahip bir küresel alan içinde hareket ettiğidir. Bu yaklaşım temel alınarak Schrödinger denkleminin çözümü sadece bu elektron ve ortalama potansiyel enerji için yapılır. Bu çözümde, kürenin ihtiva ettiği toplam elektrik yükünün elektronun konumuna bağlı olduğu, elektron ve çekirdek arasındaki mesafe değiştikçe bu yükünde değişeceği öngörülür. Bu yaklaşım uygulanırken, diğer tüm elektronların dalga fonksiyonlarının bilindiği varsayılır. Ancak gerçekte bu doğru olmadığından, hesaplamalar yapılırken dalga fonksiyonlarının yaklaşık şekillerinden başlatılır. Schrödinger denklemi sadece bu elektron için hesaplanır ve moleküldeki bütün elektronlar için aynı işlem

tekrarlanır. İlk hesaplama aşamasının sonuna gelindiğinde moleküldeki bütün elektronlar için geliştirilmiş dalga fonksiyonları elde edilir. Bu dalga fonksiyonlar kullanılarak ortalama bir potansiyel enerji hesaplanır ve ardından ikinci hesaplama basamağına geçilir. Hesaplamalar, bir basamağın bitiminde elde edilen geliştirilmiş dalga fonksiyonları, basamağın başlangıcındaki dalga fonksiyonları ile aynı oluncaya dek devam ettirilir.

## 1.6 *Ab Initio* Yöntemler

Ab initio yöntemler, moleküler mekanik ve yarı-ampirik yöntemlerin aksine deneysel parametrelerden hiçbir şekilde yararlanmazlar. Bunun yerine tamamen kuantum mekaniği ilkelerini kullanırlar. Ab initio kelime anlamı olarak, başlangıçtan gelen, başlangıçtan itibaren demektir. Ab initio yöntemler, yalnızca üç temel sabit kullanırlar. Bunlar ışık hızı, elektron ve çekirdeklerin kütleleri ve Planck sabitidir [54].

Ab initio yöntemlerle Schrödinger denklemi çözülürken, sadece matematiksel yaklaşımlar kullanılır. Yöntemin güvenilirliği dalga fonksiyonu için seçilen temele bağlıdır. Ab initio yöntemler sayesinde binlerce integral olabildiğince verimli bir şekilde hesaplanır. Bu şekilde, LCAO'larda kullanılan moleküler orbitaller, Gauss orbitallerinin doğrusal kombinasyonları olarak ifade edilir. Gauss Tipi Orbitallerin (GTO) gerçek orbitallere üstünlükleri, iki Gauss fonksiyonunun çarpımının, katkıda bulunan iki fonksiyonun merkezinin arasında yer alan başka bir Gauss fonksiyonu olmasıdır [50].

### 1.6.1 Atomik Orbitaler

Moleküldeki her bir elektronun moleküler orbital fonksiyonu, atomik orbital fonksiyonlarının lineer kombinasyonu sonucu oluşturulmuştur. Atomik orbitallerin bir diğer adı da baz fonksiyonlarıdır. Molekülde her atoma bir grup baz fonksiyonları karşılık getirilmiş ve baz fonksiyonları oluşturulmuştur [53].

#### 1.6.1.1 Slater tipi atomik orbitaller (STO)

Slater tipi orbitaller genelde iki atomlu moleküllerde kullanılır. Küresel simetriye sahip orbitalleri ifade eder. Yani Hidrojen atomu ve diğer tek elektronlu iyon atomlar için Schrödinger eşitliğinin çözümüyle elde edilen fonksiyonlar kullanarak bu orbitaller oluşturulmuştur.

$$\psi_{\zeta,n,l,m}(r, \theta, \varphi) = NY_{l,m}(\theta, \varphi)r^{n-1}e^{-\zeta r} \quad (1.10)$$

N normalizasyon sabitidir.  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  hidrojene benzer yapıdaki tek elektronlu bir atomik sistem için küresel harmoniği belirtir.  $\zeta$  terimi, verilen atomik orbital tipi (s,p,d,f...) için bir sabiti gösterir, n, l, m terimleri kuantum sayılarıdır. Bu atomik orbital hidrojen atomunun orbitaline benzer bir yapıdadır.

Slater tipi orbitaller küresel simetrik elektron dağılımına sahip atomik orbitalleri tanımlamada oldukça başarılıdır ancak eksensel simetrideki elektron dağılımına sahip moleküler orbitallerin oluşturulmasında yetersiz kalmaktadır. Bunun yerine bu yetersizlikleri karşılayan Gaussian Tipi Atomik Orbitaler (GTO) kullanılmaya başlanmıştır.

### 1.6.1.2 Gaussian tipi atomik orbitaller (GTO)

Gaussian tipi orbitaller eksenel simetrideki elektron dağılımına sahip moleküler orbitallerin oluşturulmasında kullanılmaktadır. “Ab- initio” metodların kullanıldığı hesaplamalarda bu atomik fonksiyonlar kullanılır. Gaussian tipi orbitaller, primitif gaussian fonksiyonlarından oluşmaktadır. Primitif Gaussian fonksiyonunun genel formu aşağıdaki gibidir.

$$g_{ijk}(r_i - r_e) = (x_1 - x_e)^i \cdot (y_1 - y_e)^j \cdot (z_1 - z_e)^k e^{-\alpha(r_1 - r_e)^2} \quad (1.11)$$

$i, j, k$  pozitif tam sayılardır.  $x_c, y_c, z_c$  terimleri koordinat sisteminin merkezi koordinatlarını,  $x_1, y_1, z_1$  terimleri elektronun kartezyen koordinatlarını gösterir. Primitif Gaussian fonksiyonları,  $i, j, k$  tam sayılarına göre isimlendirilirler.

$i + j + k = 0$  ise s - tipi Gaussian,

$i + j + k = 1$  ise p – tipi Gaussian

$i + j + k = 2$  ise d – tipi Gaussian

s, p, d, f terimleri s, p, d, f atomik orbitallerin tanımında kullanılan uygun simetri özelliğine sahip primitif Gaussian fonksiyonlarını göstermektedir.

Gaussian fonksiyonları, primitif Gaussian fonksiyonlarının lineer kombinasyonu sonucu oluşturulmaktadır. Eğer baz fonksiyonu tek bir primitif Gaussian fonksiyonundan oluşuyorsa *sıkıştırılmamış baz fonksiyonu*, birden çok primitive Gaussian fonksiyonundan oluşuyorsa *sıkıştırılmış baz fonksiyonu* denir.

$$\chi_i = \sum_p d_{ip} g_p \quad (1.12)$$

Bu tür fonksiyonlara sıkıştırılmış Gaussian fonksiyonları denir. Primitif Gaussian setlerinden oluşmuş bir sıkıştırılmış Gaussian fonksiyonu yukarıdaki bağıntıdaki gibidir.  $d_{ip}$  terimi verilen set için sabit katsayıları,  $g_p$  ise verilen set içindeki primitive Gaussian fonksiyonlardan birisini gösterir.  $\chi_i$  sıkıştırılmış Gaussian fonksiyonların lineer kombinasyonu ile atomik orbitaller oluşturulabilir.

$$\psi_j = \sum_i C_{ji} \chi_i \quad (1.13)$$

## 1.7 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory, DFT)

Moleküler sistemlerin temel durum özelliklerini belirlemede kullanılan geleneksel yaklaşımlardan olan yarı-deneysel (semi-empirical) ve *ab-initio* metotlarına alternatif olarak ortaya atılan DFT, 1970'lerde dah çok katı hal hesaplamalarında kullanılan popüler bir metottu. DFT yöntemi kuantum kimyasında 1990'lara kadar yeterince doğru bir yöntem olarak kabul edilmemiştir. Günümüzde ise DFT hem katı hal hesaplamalarında hem de kuantum kimyası uygulamalarında yaygın bir şekilde kullanılan bir yöntemdir. Ancak bu metot molekülün yalnızca temel durum (ground-state) özelliklerini hesaplarken, uyarılmış hallerdeki (excited-state) özelliklerini hesaplamakta yetersiz kalmıştır. Bununla beraber, özellikle çok atomdan oluşan moleküller üzerinde genişletilmiş temel setler ile kesin hesaplamalar yapmama zorluğu gibi bazı sınırlamalara sahiptir.

Karşılıklı elektron etkileşimlerini de hesaba katan DFT' nin popüleritesinin giderek artmasının sebeplerinden biri daha az hesaplama kaynağı ve süresi gerektirmesidir. Ayrıca,

d-bloğu metallerini içeren sistemler için DFT, yapılan HF hesaplamalarından deneysel verilerle daha uyumlu sonuçlar verir.

DFT teorisi, 1920'lerdeki Thomas Fermi Dirac ve 1950'lerdeki Slater'ın çalışmaları gibi kuantum mekanik çalışmalardan çıkartılan metotlara dayanır. Gecen kırk yıl üzerinde popüleritesinde büyüme olan HF metodunun alternatifi olan DFT, 1964 de Hohenberg ve Walter Khon tarafından ileri sürülen teori [57] üzerine inşa edilmiştir. Bu teoriye göre temel haldeki elektronik enerji, tamamen elektron yoğunluğu ile belirlenebilir. Diğer bir ifadeyle sistemin elektron yoğunluğu ile enerjisi arasında birebir ilişki vardır.

Dalga fonksiyonu yaklaşımında  $N$  tane elektron ihtiva eden bir sistemde her bir elektron için 3 tane olmak üzere (spini de katarsak 4)  $3N$  tane koordinat vardır. Elektron yoğunluğu ise  $N-1$  tane koordinat üzerinden integrali alınmış dalga fonksiyonunun karesidir. Diğer taraftan yoğunluk sistemdeki elektron sayısından bağımsız olarak sadece 3 koordinata bağlı düşünülebilir.

Dalga fonksiyonunun karmaşıklığı elektron sayısı ile artarken elektron yoğunluğu sistemin büyüklüğünden bağımsız olarak aynı sayıda değişkene bağlıdır. Farklı yoğunlukların farklı temel hal enerjileri verdiği ispatlanmasına rağmen tek problem bu iki niceliği birbirine bağlayacak fonksiyoneldir. Dolayısıyla DFT metotlarının amacı elektron yoğunluğunu enerji ile ilişkilendirecek fonksiyoneller üretmektir [58,59]. Burada terim olarak fonksiyon ve fonksiyonelin arasındaki farka dikkat etmek gerekir. Fonksiyon değişkenler setinden sayı üreten bir reçete iken fonksiyonel değişkenlere bağlı fonksiyondan sayı üreten reçetedir. Böylece dalga fonksiyonu ve elektron yoğunluğu fonksiyon iken enerji dalga fonksiyonuna veya elektron yoğunluğuna bağlı fonksiyoneldir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) moleküler orbitallerdeki elektron gazının yoğunluğunun elektron korelasyonuna uydurulması için bir yoldur [60]. Sistemin temel haldeki özellikleri yük yoğunluğunun fonksiyonlarıdır. Böylece  $p$  elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak toplam elektronik enerjiyi yazabiliriz.

Kohn ve Sham çalışmalarında elektronik enerjinin birkaç kısma ayrılabilceğini göstermişlerdir [61].

$$E = E^T + E^V + E^J + E^{XC} \quad (1.14)$$

$E^T$  elektronların hareketinden doğan kinetik enerji terimi,  $E^V$ , çekirdek çiftleri arasındaki itmeyi ve çekirdek-elektron arasındaki çekimi ifade eden potansiyel enerji terimidir.  $E^J$ , elektron-elektron itme terimidir (elektron yoğunluğunun Coulomb etkileşim terimi).  $E^{XC}$  exchange corelasyon terimi geriye kalan elektron-elektron etkileşimlerini içerir.

Çekirdek-çekirdek itmesi dışındaki tüm terimler  $p$  elektron yoğunluğunun bir fonksiyonudur.  $E^J$  aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E^J = \frac{1}{2} \iint \rho(\vec{r}_1) (\Delta r_{12})^{-1} \rho(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.15)$$

$E^T + E^V + E^J$ ,  $p$  yük dağılımının klasik enerji ifadesine uyar.  $E^{XC}$  “Exchange corelasyon terimi” kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun antisimetrik olmasından doğan Exchange enerjisi ve tek tek elektron hareketlerindeki dinamik korelasyondan oluşur.

Hohenberg ve Kohn,  $E^{XC}$  ’nin  $p$  elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu gibi ifade edilebileceğini göstermişlerdir.  $E^{XC}$  yalnızca spin yoğunluklarının ve bu spinlerin mümkün gradyentlerini içeren bir integral gibi yazılabilir.

$$E^{XC}(\rho) = \int f(\rho_\alpha(\vec{r}), \rho_\beta(\vec{r}), \nabla \rho_\alpha(\vec{r}), \nabla \rho_\beta(\vec{r})) d^3\vec{r} \quad (1.16)$$

$\rho_\alpha$ ,  $\alpha$  spin yoğunluğu,  $\rho_\beta$ ,  $\beta$  spin yoğunluğu,  $p_\beta$  elektron yoğunluğudur.  $E^{XC}$  genelde iki kısma ayrılır. Bunlar aynı spin etkileşimlerini gösteren “Exchange” ve karşıt spin etkileşimlerini gösteren “correlation” kısımlarıdır.

$$E^{xc}(\rho) = E^x(\rho) + E^c(\rho) \quad (1.17)$$

Buradaki üç terim de  $p$  elektron yoğunluğunun fonksiyonlarıdır. Exchange ve correlation kısımları da “Local fonksiyonlar” ve “Gradient-corrected fonksiyonlar” olmak üzere ikiye ayrılır. *Local fonksiyonlar*, yalnızca  $p$  elektron yoğunluğuna bağlı olan fonksiyonlardır. *Gradient-corrected fonksiyonlar*,  $p$  elektron yoğunluğuna ve  $\nabla p$  gradyentine bağlı fonksiyonlardır. Maddelerin özellikleri onları oluşturan moleküllerin özelliklerine, moleküllerin özellikleri (fiziksel ve kimyasal) de yapılarında bulundurdıkları atomlar ve atomları bir arada tutan kimyasal bağlara dayanmaktadır. Bir molekülün yapı ve özellikleri belirlenerek onun kimyasal reaksiyon yeteneği ve oluşturduğu maddenin özellikleri hakkında bilgi elde edilir. Bu nedenle moleküllerin yapısının belirlenmesi ve yapı ile özellik arasındaki ilişkilerin araştırılması önemlidir.

### 1.7.1 B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Dalga mekaniğinin temellerine dayanan Hartree-Fock (HF) teorisi kinetik enerji için uygun bir ifade verirken elektronlar arasındaki değiş-tokuş enerjisi için iyi sonuçlar veremediğinden korelasyon enerjileri hesaplanamaz. Yoğunluk fonksiyonelleri teorisi (DFT) ise elektronların değiş-tokuş ve korelasyon enerjilerini daha iyi hesaplar. Tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT metotları yerine, bu metotların her birinin enerji ifadeleri, toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılarak karma (melez) metotlar geliştirilmiştir. Bu metotlar bağ uzunlukları, toplam elektronik enerji ve iyonizasyon enerjileri gibi birçok ifadeyi saf HF ve DFT modellerden daha iyi hesaplayabilmektedir.

Literatürde en sık karşılaşılan enerji fonksiyonelleri, kinetik enerji fonksiyonelleri (TF27, H28, ...), değiş tokuş enerji fonksiyonelleri (D30, F30, ...) ve korelasyon enerji fonksiyonelleri (LYP,VWN,...) gibi enerji fonksiyonelleridir. Bir melez metot oluşturularak tüm bu enerji ifadeleri birleştirilir ve yeni bir enerji ifadesi elde edilebilir.

Becke, deęiş tokuş ve korelasyon enerjisi ifadesi (XC) için ařaęıdaki gibi karma bir modeli ortaya ıkarmıřtır.

$$E_{karma}^{XC} = c_{HF} E_{HF}^X + c_{DFT} E_{DFT}^{XC} \quad (1.18)$$

Becke'nin önerdięi melez modeller B3LYP ve BLYP metotlarıdır. Bu melez modellerden en iyi sonu verenlerin bařında; LYP korelasyon enerjili ü parametrelili Becke melez metodu olan B3LYP'dir. Bu modeldeki deęiş-tokuř ve korelasyon enerji ifadesi;

$$E_{B3LYP}^{XC} = E_{LDA}^X + c_0 (E_{HF}^X - E_{LDA}^X) + c_1 \Delta E_{B88}^X + E_{VWN3}^C + c_2 (E_{LYP}^C - E_{VWN3}^C) \quad (1.19)$$

řeklinde verilmektedir. Burada  $c_0$ ,  $c_1$  ve  $c_2$  ile gösterilen katsayılar deneysel deęerlerden türetilmiř sabitlerdir ve deęerleri sırası ile 0,2, 0,7 ve 0,8'dir. Böylece B3LYP melez modelinde bir molekülün sahip olduęu toplam elektronik enerji ifadesi;

$$E_{B3LYP} = E_V + E_J + E_{B3LYP}^{XC} \quad (1.20)$$

řeklinde ifade edilir [62]. Özellikle vurgulamak gerekir ki deęiş tokuş ve korelasyon enerjileri ile ilgili ifadelerin tam olmaması nedeniyle bu enerjiler ile ilgili olarak DFT modelinde atomik ve moleküler sistemlerde daha iyi sonu verecek fonksiyoneller ile ilgili alıřmalar literatürde yoğun olarak devam etmektedir.

## 1.8 Temel Setler

Ab initio hesaplamalarda Slater tipi orbitaller Gauss tipi fonksiyonlarla değiştirilir. Bir Gauss tipi fonksiyon  $e^{-\alpha r^2}$  şeklindedir. ab initio hesaplamalarda ise kullanılan temel setler; x, y ve z koordinatlarının belli üstleri ile  $e^{-\alpha r^2}$  çarpılmasından oluşurlar.

$$x^a y^b z^c \exp(-\alpha r^2) \quad (1.21)$$

$\alpha$  Gauss fonksiyonunun yayılımını gösterir.  $\alpha$  büyük ise yayılım çok fazla değildir. Küçük bir  $\alpha$  değeri ise fonksiyonun büyük ölçüde yayıldığını gösterir.

Kuantum mekaniğinde Gauss fonksiyonlarının kullanılma nedeni iki Gauss fonksiyonu çarpımı yerine iki fonksiyonun merkezlerini birleştiren doğru üzerinde bulunan bir tane Gauss fonksiyonu ile gösterilmesindendir.

Bir minimum temel set, her atomdaki dolu olan tüm orbitalleri göstermek için gerekli olan sayıda fonksiyonu içeren bir settir. Genelde minimum temel set, kabuktaki tüm atomik orbitalleri içerir. Örneğin H ve He için bir tane s tipi fonksiyon yeterlidir. Li'dan Ne'ya kadar 1s, 2s ve 2p fonksiyonlarının kullanılması gerekir.

STO-3G minimum bir temel settir ve her orbital n tane Gauss fonksiyonu içerir. Her Slater orbitalini göstermek için en az 3 Gauss fonksiyonuna ihtiyaç olduğu bulunmuştur. STO-3G temel seti mutlak minimumdur. Gerçekte STO-3G temel seti ile daha yüksek minimum settler kullanılarak yapılan hesap sonuçları arasında daha küçük farklar vardır. Fakat H bağı içeren moleküllerde STO-3G'nin kullanılması çok daha iyi sonuçlar verir.

Minimum temel set kullanmanın doğuracağı ilk eksiklik, bir periyodun sonunda bulunan atomlar için problemlili olmasından kaynaklanır. Bu atomlar periyodun başında bulunan atomlar ile aynı sayıda temel fonksiyon içerirler. Halbuki, periyodun sonunda bulunan atomların çok daha fazla sayıda elektronları vardır.

İkinci problem; her atomik orbital için tek bir temel setin kullanılmasıdır. Bundan dolayı tüm hesaplama boyunca radyal üstler değişmeden aynı kalır. Bu da moleküler çevreye bağlı olarak molekülün genişlemesi veya küçülmesine engel olur. Molekülün çevre ile etkileşimi belirsizdir.

Üçüncü eksiklik ise; minimum temel setin elektronik dağılımın küresel olmayışını tanımlayamayışıdır. Minimum temel setlerin kullanımında ortaya çıkan bu problemler, valens elektronlarını tanımlayan fonksiyon sayısının iki katını almakla ortadan kaldırılabılır. İç kabuklar için tek bir fonksiyon tanımlanır. Bunun ardındaki gerçek çekirdek orbitallerinin valens orbitallerinden farklı olarak kimyasal özellikleri etkilememesidir. Bu tür temel setler için kullanılan sembol 3-21G'dir ve ayrılmış (split) valens çift zeta temel seti olarak adlandırılır. Bu temel sette çekirdek orbitalleri üç Gauss orbitali ile tanımlanır. Valens elektronları için de yine üç Gauss fonksiyonu kullanılır. Bunlardan bir tanesi yayılmış (difüz) kısım için, iki tanesi de geriye kalan kısım içindir. Temel fonksiyonların sayısını arttırmak bu modeli çok fazla geliştirmemiştir. Şimdiye kadar kullanılan temel setlerin tamamında, atom çekirdek merkezlerinin etrafında olan fonksiyonlar kullanılmıştır. Ayrılmış valens temel setlerinin kullanımı ise yük dağılımlarını büyük ölçüde düzeltmiştir. Molekülde bulunan bir atomun yük dağılımı izole atomdan farklıdır. Örneğin izole bir H atomundaki elektron bulutu simetriktir.

Fakat H başka bir molekülde bulunduğu anda elektronlar diğer çekirdekler tarafından çekilirler. Bu bozulma p tipi karakterin izole atomun 1s tipi orbitali ile karışması şeklinde düşünülür. Bunun sonucunda da sp hibridi meydana gelir. Aynı şekilde boş olan d orbitalleri de p orbitallerinin simetrisini bozar. Bu problemi çözmek için temel setlere polarizasyon fonksiyonları eklenir. Polarizasyon fonksiyonları yüksek açısız kuantum sayılarına sahiptir. Bu nedenle bunlar H için p orbitallerine birinci ve ikinci satır elementleri için de d orbitallerine karşılık gelirler. Polarizasyon temel fonksiyonları \* ile gösterilir. 6-31 G\*, 6-31 G temel setinin ağır atomlara ait polarizasyon fonksiyonları için kullanılacağını gösterir. İki yıldız (G\*\*)’ın kullanılması H ve He için de p fonksiyonlarının kullanılacağını gösterir. 6-31 G\*\* Hidrojenin köprü vazifesi yaptığı durumlar için çok gereklidir. Ayrıca kısmi polarizasyonu olan temel setler de geliştirilmiştir. 3-21G\* temel

seti, 3-21 G temel setindeki Gauss fonksiyonları ile aynı fonksiyonlara sahiptir (iç kabuk üç fonksiyon, valens elektronları için iki tane sıkıştırılmış fonksiyon ve bir tane de yayılmış sıkıştırılmış fonksiyon). Bu Temel set bu nedenle ikinci satır elementlerini içeren moleküllerdeki d orbital etkilerini hesaba katar. Birinci satır elementleri için belirli bir polarizasyon fonksiyonu yoktur. Şu ana kadar kullanılmakta olan temel setlerin en büyük problemi anyon gibi veya ortaklanmamış elektron çifti içeren moleküllerde görülmektedir. Bu taneciklerde çekirdeklerden uzakta, oldukça yüksek bir elektron yoğunluğu vardır. Bu eksikliği gidermek için oldukça yüksek yayılmış fonksiyonlar temel sete eklenebilir. Bunlarda bir + işaretinin konulması ile belirlenir. Bu durumda 3-21+G temel seti ilave bir tek yayılmış s ve p tipi Gauss fonksiyonu içerdiğini göstermektedir. İki tane ++ ağır atomlar için olduğu gibi H için de yayılmış fonksiyonların hesaba katılmasını sağlar. 6-311 + G (3df, 3pd) temel seti tek bir çekirdek ve üç tane de valens elektronları için fonksiyon kullanır. Ayrıca tüm atomlar için yayılmış fonksiyonlara sahiptir. 3df ve 3pd üç seri d fonksiyonu ve bir seri f fonksiyonunu göstermektedir. Sonra gelen sembol 3 seri p fonksiyonu ve bir seri Hidrojen atomu için d fonksiyonu anlamına gelmektedir.

## 2. MATERYAL VE METOT

### 2.1 Kullanılan Araç ve Gereçler

- Cam malzeme olarak; çeşitli ebatlarda balonlar, soğutucular, damlatma hunileri, ayırma hunileri, huniler, beherler, erlenmayerler, büretler, kılcal borular ve deney tüpleri
- Tartımlar için elektronik terazi: Chyo J.L.180
- IR spektrumları için Perkin ElmerSpectrumOne FT-IR spektrofotometre
- <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarının alınması için Bruker 400 MHz NMR spektrometre
- <sup>13</sup>C-NMR spektrumlarının alınması için Bruker 400 MHz NMR spektrometre
- DSC ölçümleri için HITACHI-DSC7020
- TGA ölçümleri için HITACHI-STA7300
- UV-VIS ölçümleri için Shimadzu UV Pharmaspec 1700
- Kurutma işlemi için Memmert M50 model etüv
- Erime noktası tayin cihazı (Gallenkamp)
- Magnetik ve mekanik karıştırıcılar
- 100 ve 360°C'lik termometreler
- Otomatik pipetler
- Desikatör

### 2.2 Kullanılan Kimyasal Maddeler

#### 2.2.1 Reaktifler

Tiyofen-2-karbohidrazit, furan-2-karbohidrazit, pridin-4-karbohidrazit, 2-florobenzohidrazit, potasyum karbonat, potasyum hidroksit, hidroklorik asit, etil izotiyosiyanat, allil izotiyosiyanat, fenil izotiyosiyanat, 4-bromofenil izotiyosiyanat benzil izotiyosiyanat, p-tollil izotiyosiyanat, 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon.

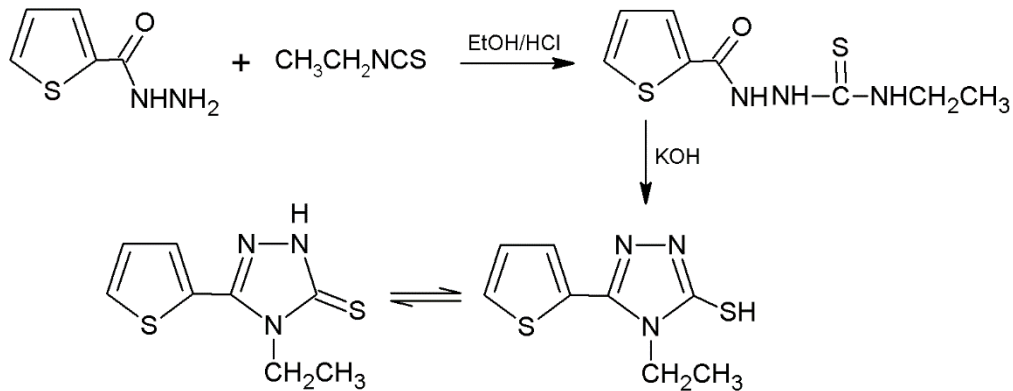
## 2.2.2 Çözücüler

Etil alkol, asetonitril, dietileter, aseton, dioksan, metanol, DMF, DMSO, CCl<sub>4</sub>, kloroform ve NMR spektrumları için DMSO-d<sub>6</sub>, CDCl<sub>3</sub>.

## 2.3 Deneysel Kısım

### 2.3.1 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Sentezi (1a)

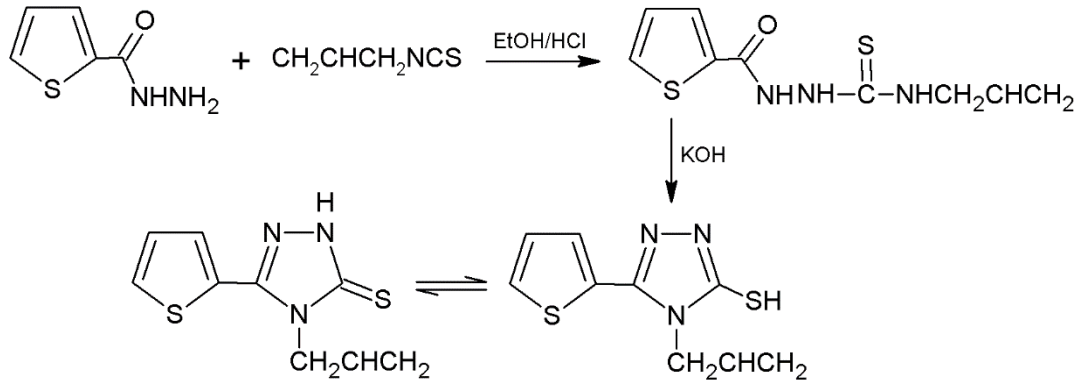
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol tiyofen-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol etil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.1.' de verilmiştir. Verim %65.



**Şekil 2.3.1** 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un (1a) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.2 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Sentezi (1b)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol tiyofen-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol allil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.2' de verilmiştir. Verim %60.

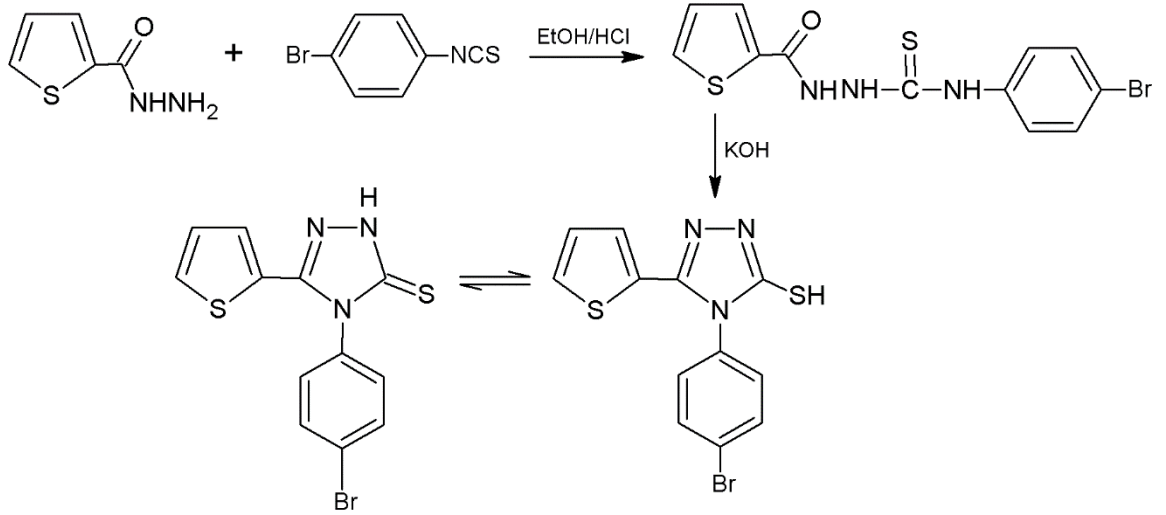


Şekil 2.3.2 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un (1b) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.3 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1c)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol tiyofen-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol 4-bromofenil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı

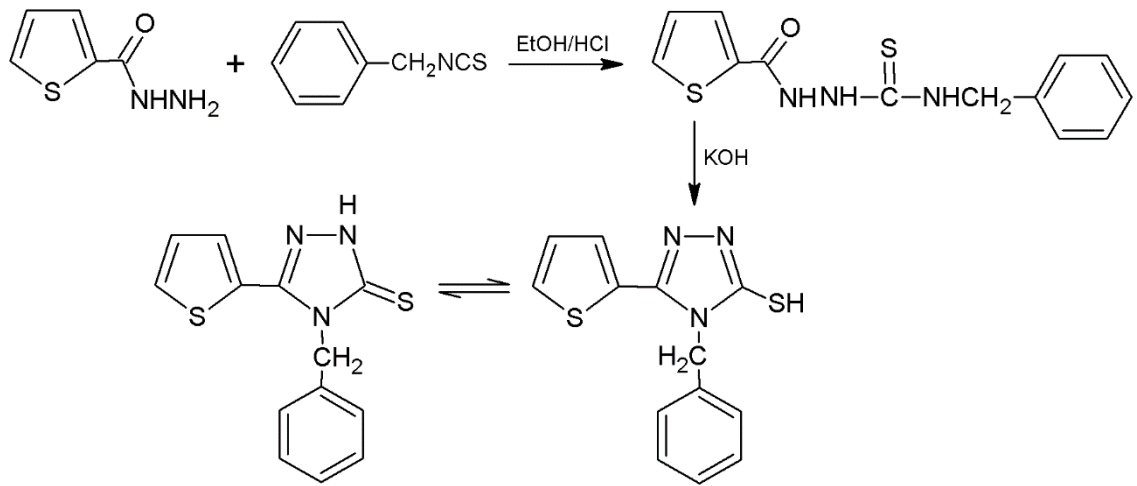
süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.3' de verilmiştir. Verim %70.



**Şekil 2.3.3** 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1c) oluşum reaksiyonu.

#### 2.3.4 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1d)

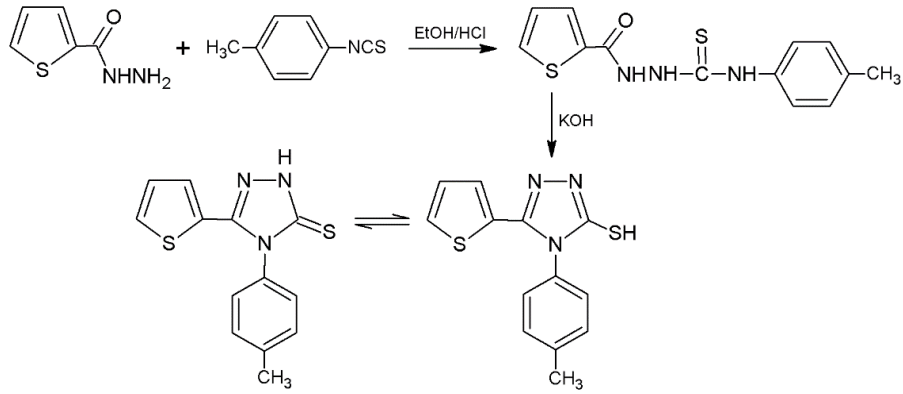
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol tiyofen-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol benzil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.4' de verilmiştir. Verim %75.



**Şekil 2.3.4** 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1d) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.5 4-(*p*-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1e)

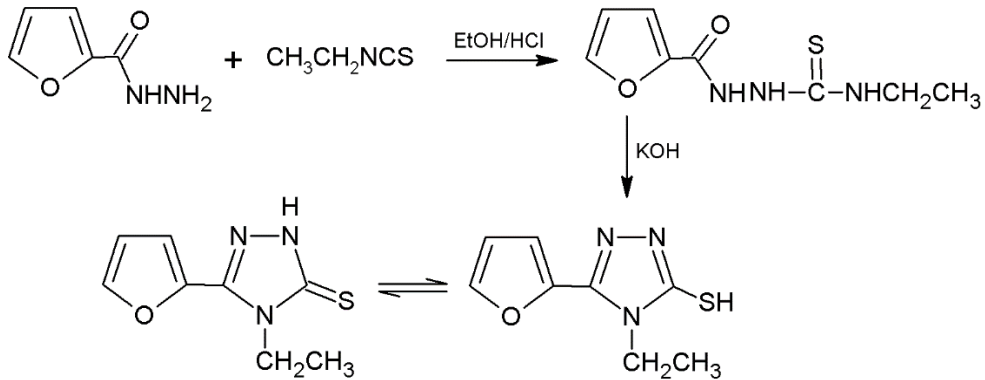
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol tiyofen-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol *p*-tollil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.5' de verilmiştir. Verim %68.



**Şekil 2.3.5** 4-(*p*-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1e) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.6 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1f)

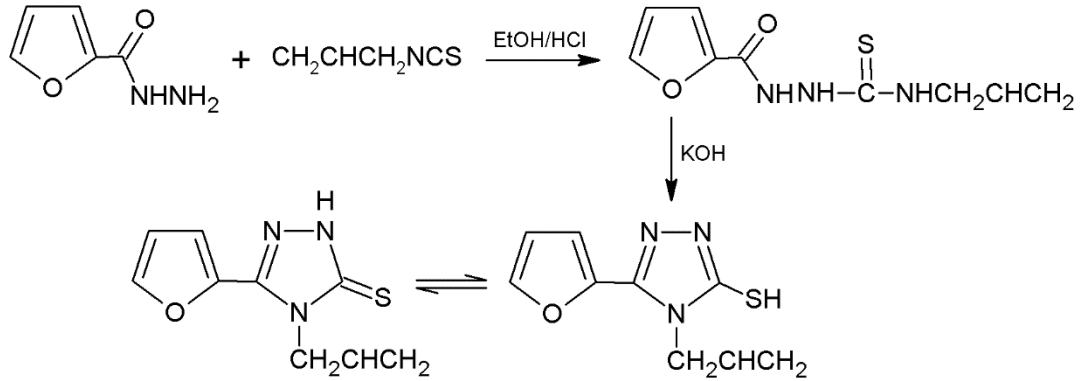
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol furan-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol etil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.6' da verilmiştir. Verim %72.



**Şekil 2.3.6** 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1f) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.7 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1g)

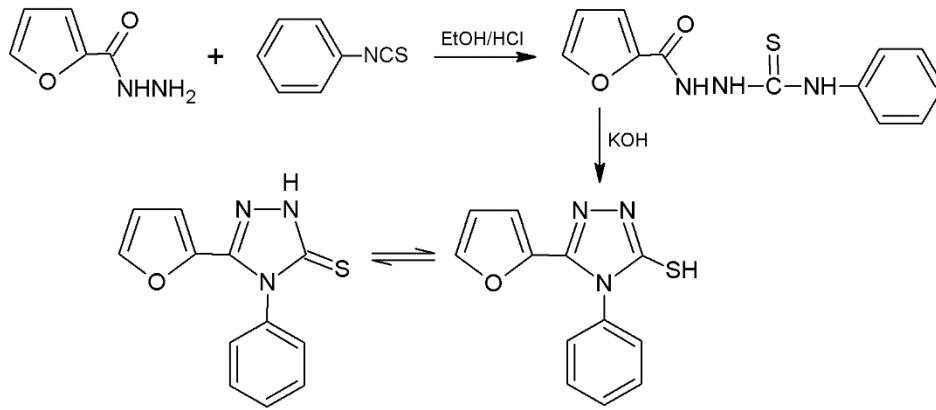
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol furan-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol allil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.7' de verilmiştir. Verim %64.



Şekil 2.3.7 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1g) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.8 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1h)

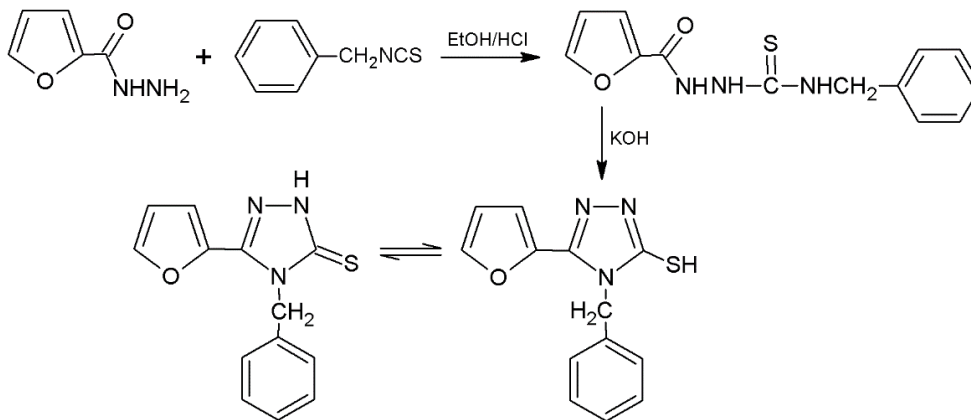
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol furan-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol fenil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.8' de verilmiştir. Verim %60.



**Şekil 2.3.8** 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1h) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.9 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1i)

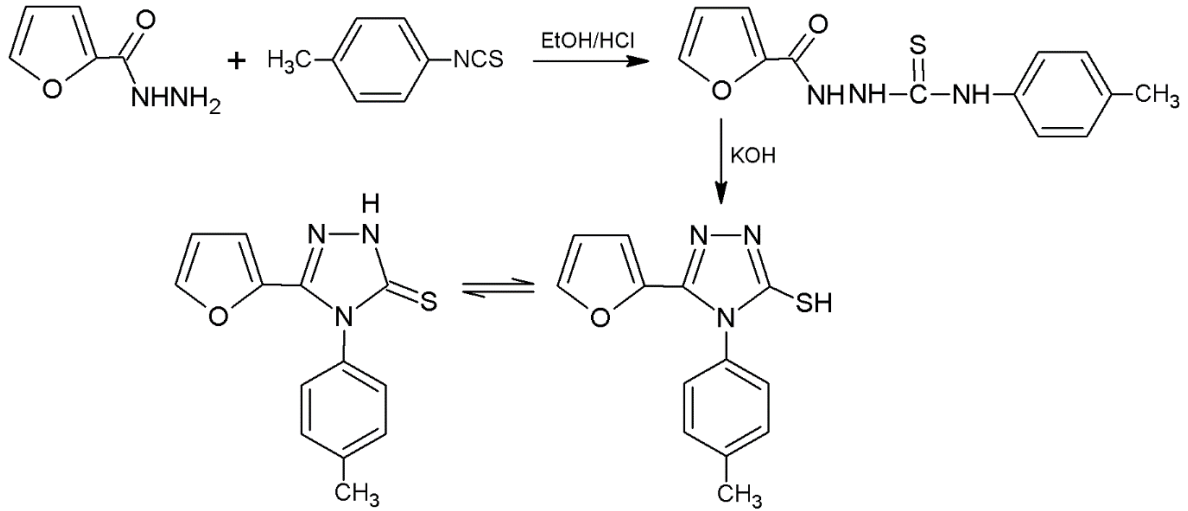
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol furan-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol benzil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.9' da verilmiştir. Verim %72.



**Şekil 2.3.9** 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1i) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.10 4-(*p*-tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1j)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol furan-2-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol *p*-tollil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.10' da verilmiştir. Verim %75.

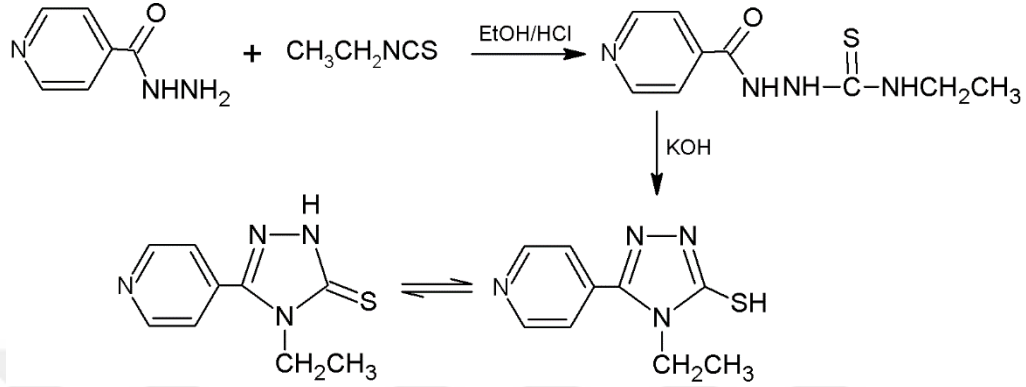


Şekil 2.3.10 4-(*p*-tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1j) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.11 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1k)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol pridin-4-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol etil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı

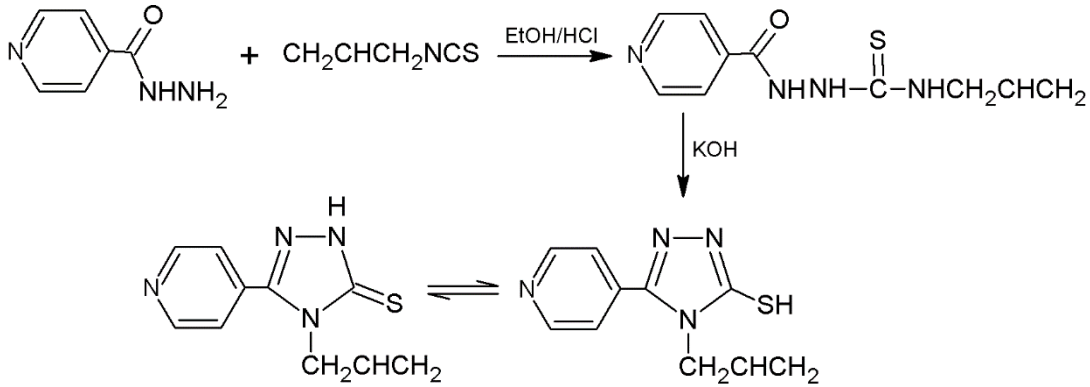
süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.11’ da verilmiştir. Verim %70.



Şekil 2.3.11 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon’un (1k) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.12 4-allil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon’un Sentezi (1l)

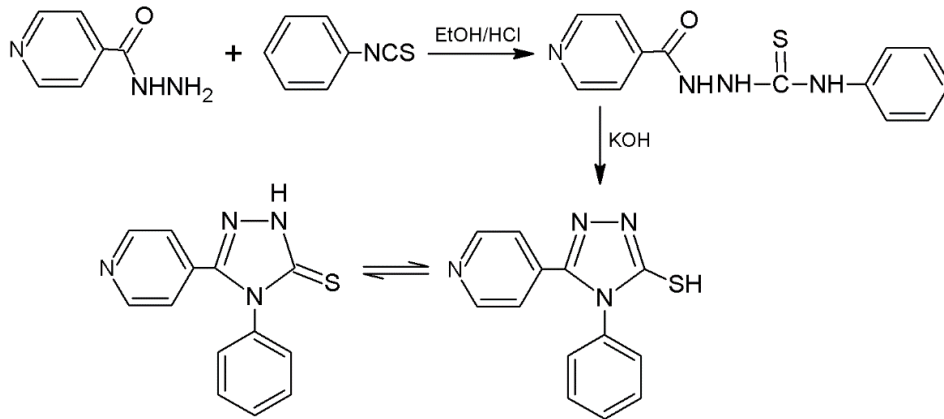
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol pridin-4-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol allil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.12’ da verilmiştir. Verim %61.



**Şekil 2.3.12** 4-allyl-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1l) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.13 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1m)

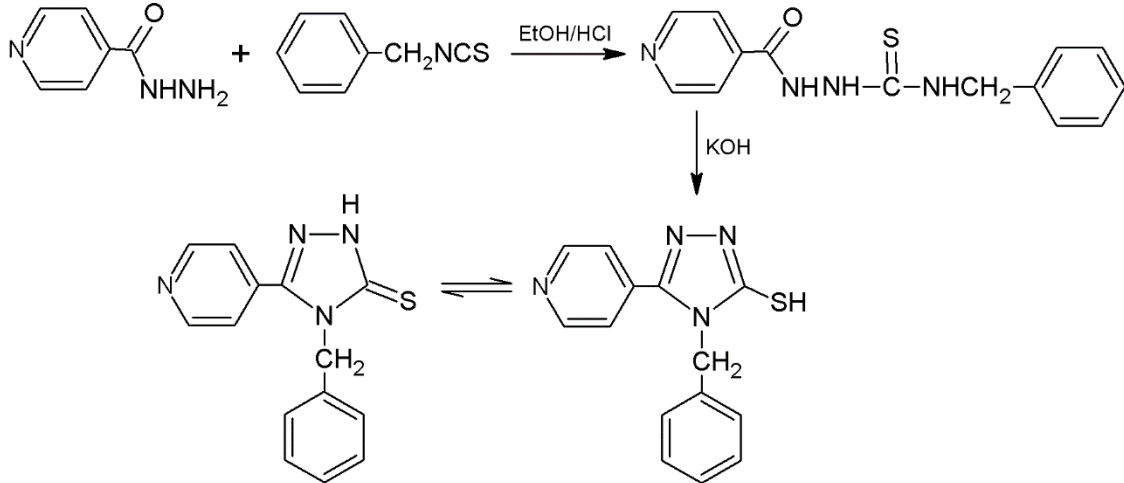
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol pridin-4-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol fenil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.13' da verilmiştir. Verim %68.



**Şekil 2.3.13** 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1m) oluşum reaksiyonu.

#### 2.3.14 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1n)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol pridin-4-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol benzil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.14' da verilmiştir. Verim %73.

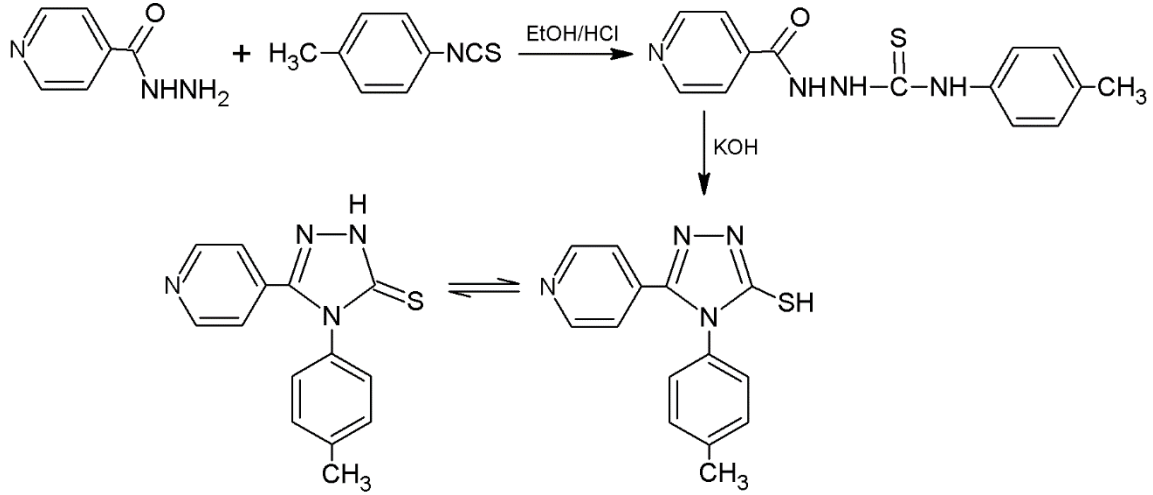


Şekil 2.3.14 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1n) oluşum reaksiyonu.

#### 2.3.15 4-(p-tollil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1o)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol pridin-4-karbohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol *p*-tollil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı

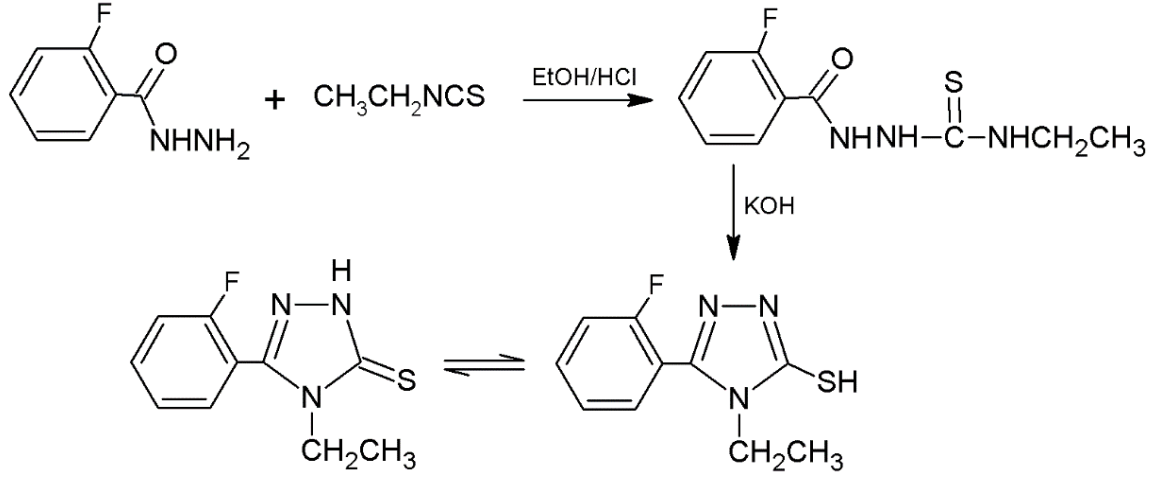
süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.15’ da verilmiştir. Verim %66.



**Şekil 2.3.15** 4-(*p*-tollil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihydro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon’un (1o) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.16 4-etil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon’un Sentezi (1p)

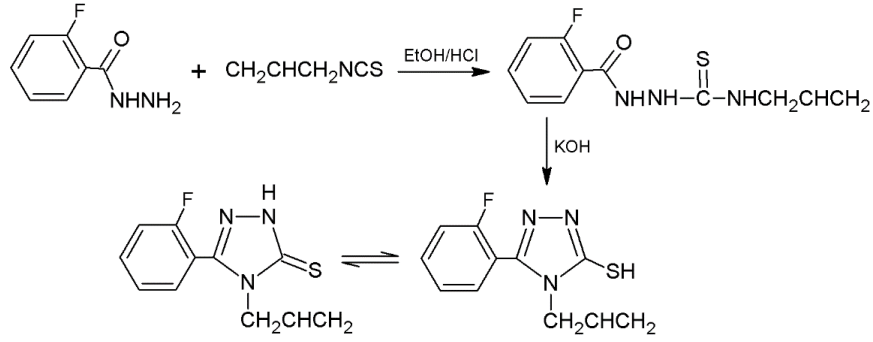
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol 2-florobenzohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol etil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.16’ da verilmiştir. Verim %68.



**Şekil 2.3.16** 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1p) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.17 4-allil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1r)

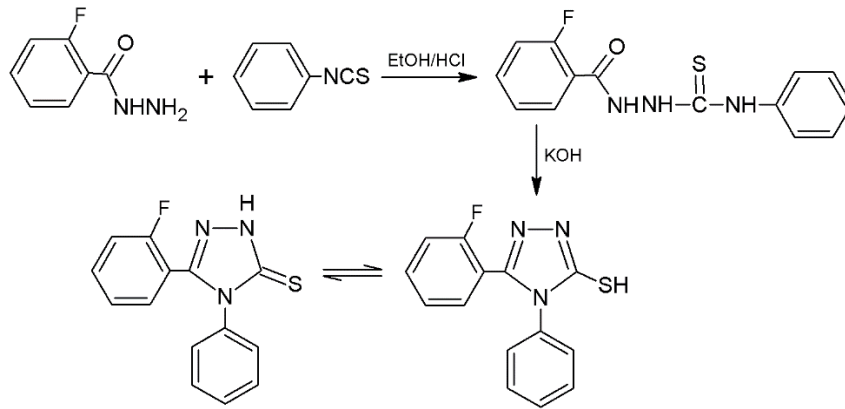
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol 2-florobenzohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol allil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.17' da verilmiştir. Verim %65.



**Şekil 2.3.17** 4-allyl-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tyon'un (1r) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.18 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tyon'un Sentezi (1s)

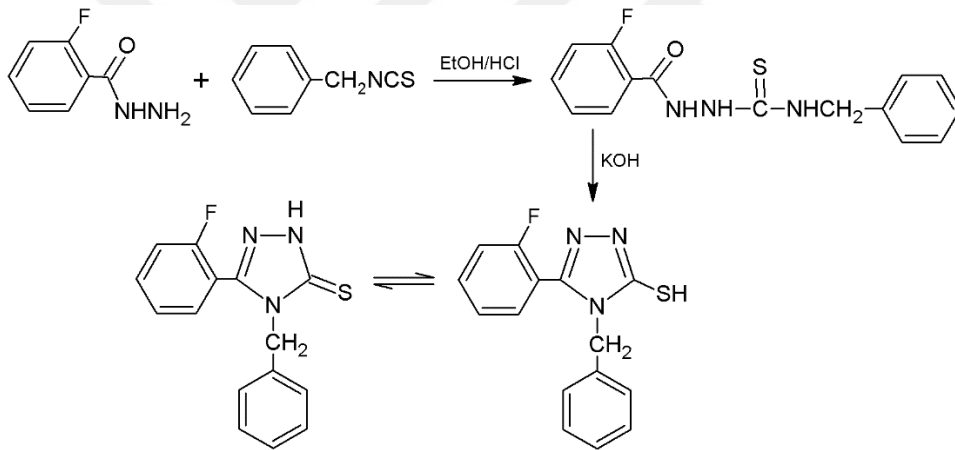
İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol 2-florobenzohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol fenil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.18' da verilmiştir. Verim %72.



**Şekil 2.3.18** 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tyon'un (1s) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.19 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1t)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol 2-florobenzohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol fenil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.19' da verilmiştir. Verim %75.

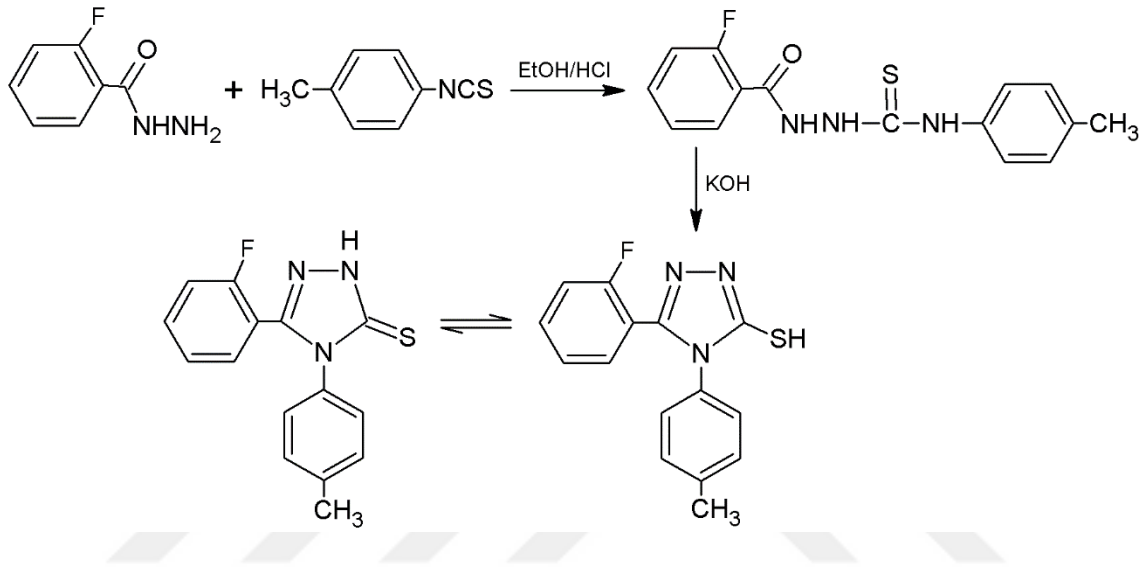


Şekil 2.3.19 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un (1t) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.20 4-(p-tollil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Sentezi (1u)

İki ağızlı 100 ml lik reaksiyon balonu, termometre, geri soğutucu ve manyetik balık kullanılarak reaksiyon düzeneği hazırlandı. Reaksiyon balonuna 10 mmol 2-florobenzohidrazit ve 50 ml mutlak etil alkol eklendi. Reflaks süreci başladıktan sonra üzerine 10 mmol *p*-tollil izotiyosiyanat eklendi. Yaklaşık 4 saat sonra reaksiyon balonunda

katı tiyosemikarbazit oluşmaya başladı. Katı üzerine 15 mmol KOH eklendi ve çözünme başladı. 6 saat sonra reaksiyon durdurularak HCl ile pH 3-4 arasına getirildi. Oluşan katı süzülüp buzlu suyla yıkandı ve alkol-su karışımında kristallendirildi. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.20’ de verilmiştir. Verim % 70.

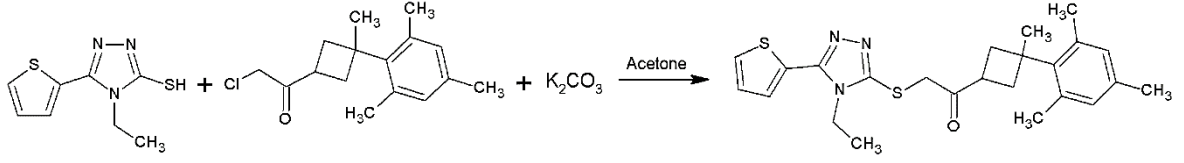


**Şekil 2.3.20** 4-(*p*-tolil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon’un (1u) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.21 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2a)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.530 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.423 gr) 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-

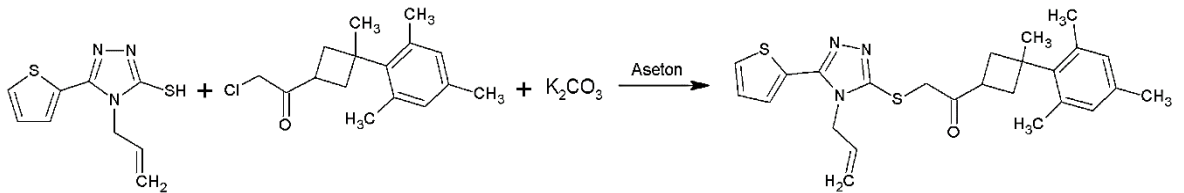
NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.21’ de verilmiştir. Verim % 55.



**Şekil 2.3.21** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon’ un (2a) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.22 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2b)

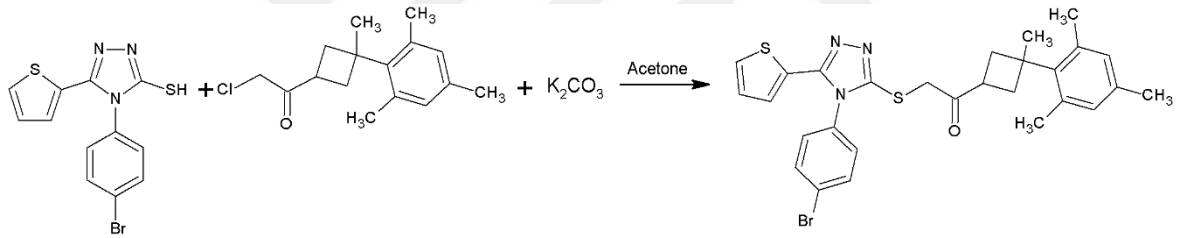
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $\text{K}_2\text{CO}_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.530 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.446 gr) 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.22’ de verilmiştir. Verim % 51.



**Şekil 2.3.22** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il]sülfanil]-etanon’ nun (2b) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.23 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2c)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.530 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.518 gr) 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözöcünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşun katı buzlu su ile yıkanarak süzölüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.23' de verilmiştir. Verim % 60.

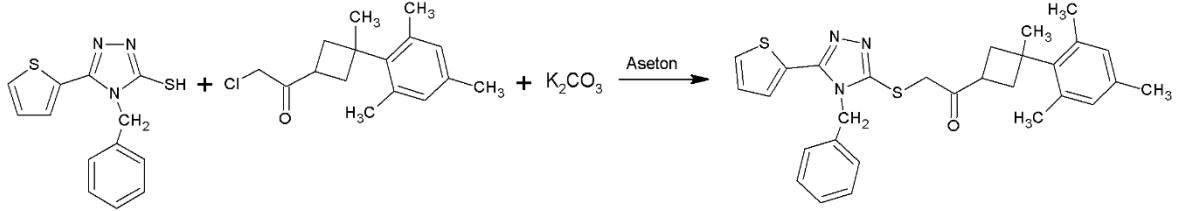


Şekil 2.3.23 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2c) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.24 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2d)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.546 gr) 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözöcünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşun katı buzlu su ile yıkanarak süzölüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol

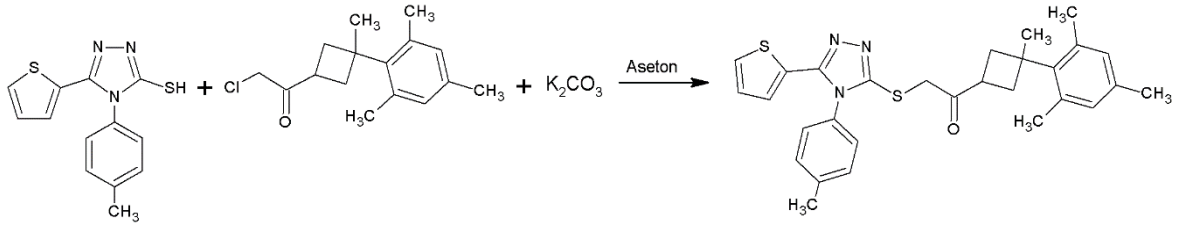
içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.24’ de verilmiştir. Verim % 62.



**Şekil 2.3.24** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon’ nun (2d) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.25 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-(*p*-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2e)

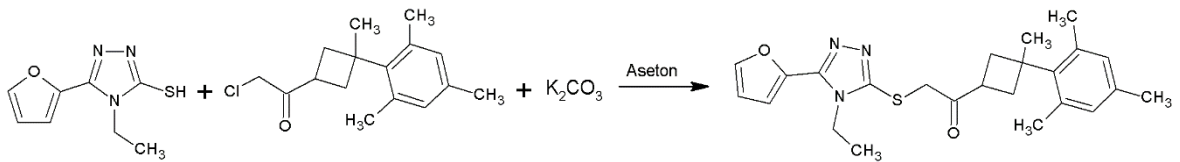
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.546 gr) 4-(*p*-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.25’ de verilmiştir. Verim % 60.



**Şekil 2.3.25** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2e) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.26 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2f)

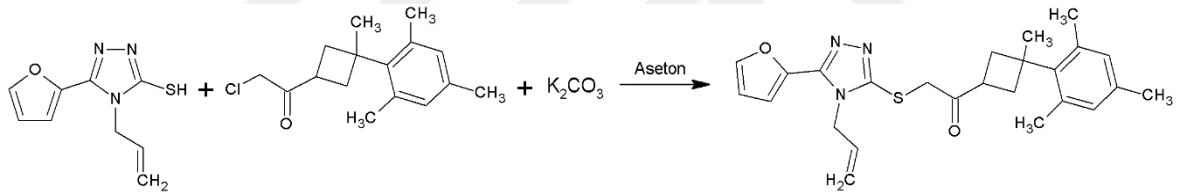
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.390 gr) 4-etil-5-(furan-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.26' de verilmiştir. Verim % 60.



**Şekil 2.3.26** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2f) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.27 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2g)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.414 gr) 4-allil-5-(furan-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.27' de verilmiştir. Verim % 65.

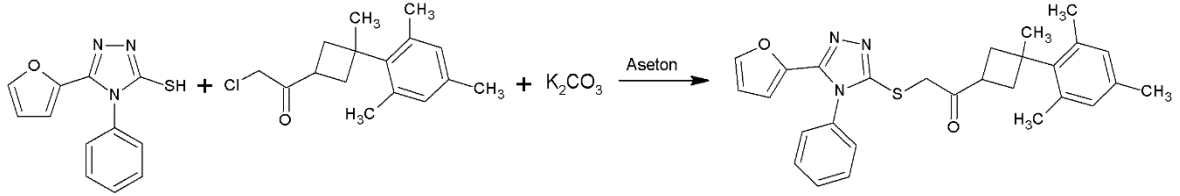


Şekil 2.3.27 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2g) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.28 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2h)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.486 gr) 4-fenil-5-(furan-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol

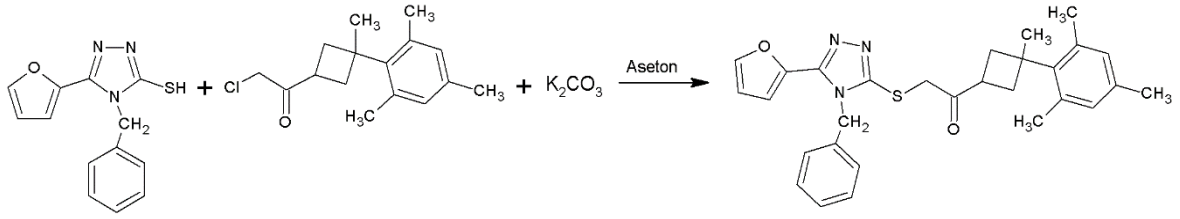
içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.28’ de verilmiştir. Verim % 61.



**Şekil 2.3.28** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon’ nun (2h) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.29 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2i)

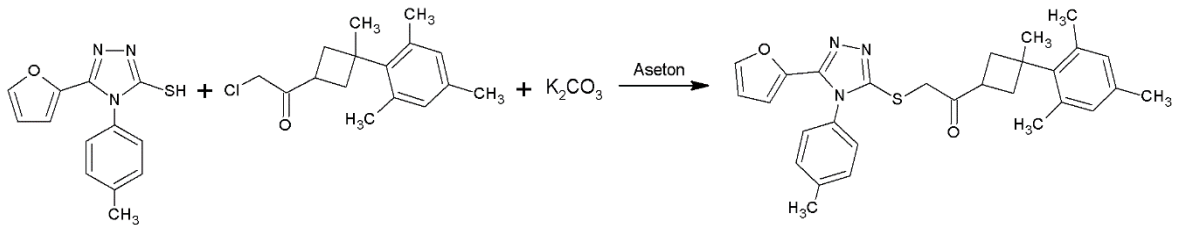
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $\text{K}_2\text{CO}_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.514 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.514 gr) 4-benzil-5-(furan-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR,  $^{13}\text{C}$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.29’ de verilmiştir. Verim % 58.



**Şekil 2.3.29** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2i) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.30 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-(*p*-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2j)

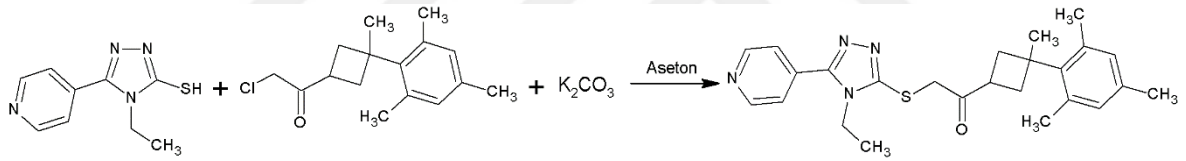
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.514 gr) 4-(*p*-tollil)-5-(furan-2-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözöcünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzölüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.30' de verilmiştir. Verim % 65.



**Şekil 2.3.30** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-(*p*-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2j) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.31 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2k)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.412 gr) 4-etil-5-(piridin-4-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.31' de verilmiştir. Verim % 60.

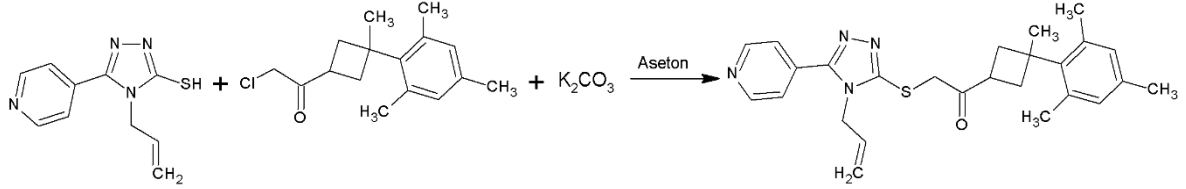


**Şekil 2.3.31** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2k) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.32 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pridin-4-il)-4-allyl-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2l)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.436 gr) 4-allyl-5-(piridin-4-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol

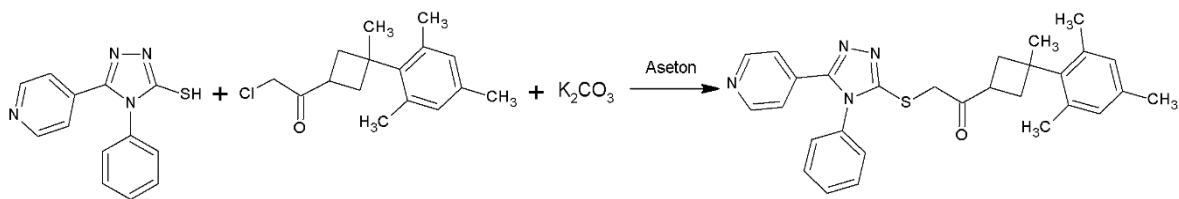
içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.32’ de verilmiştir. Verim % 62.



**Şekil 2.3.32** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon’ nun (2l) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.33 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2m)

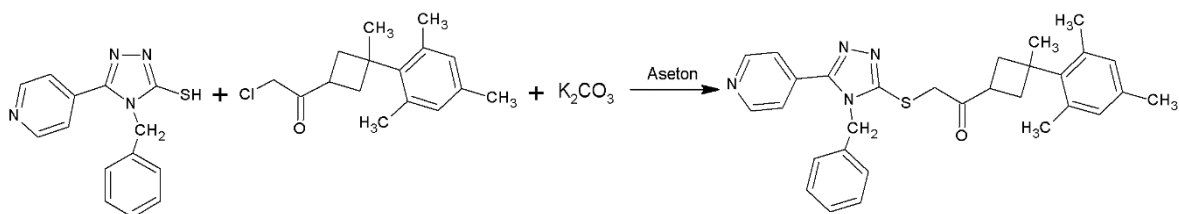
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.508 gr) 4-fenil-5-(pidin-4-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.33’ de verilmiştir. Verim % 68.



**Şekil 2.3.33** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2m) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.34 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2n)

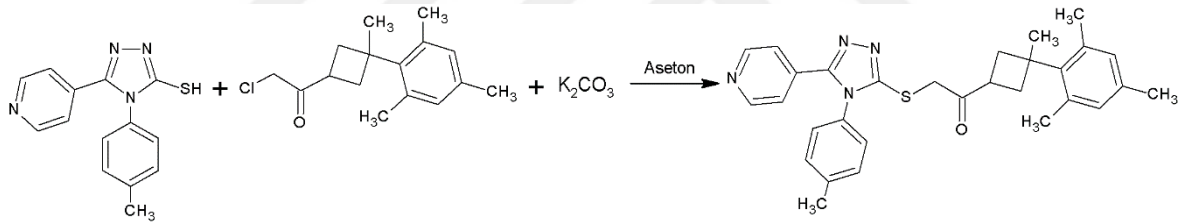
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.536 gr) 4-benzil-5-(pidin-4-il)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.34' de verilmiştir. Verim % 63.



**Şekil 2.3.34** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2n) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.35 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pidin-4-il)-4-(*p*-tolil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2o)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.536 gr) 4-(*p*-tolil)-5-(pidin-4-il)-4*H*-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzölüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.35' de verilmiştir. Verim % 58.

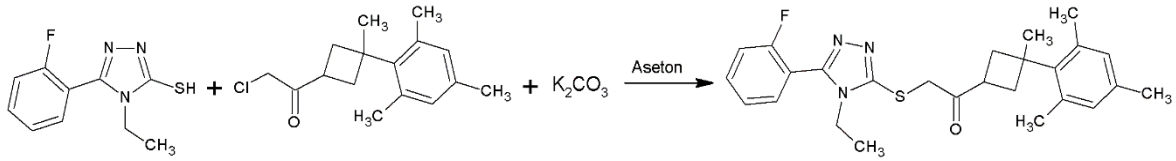


Şekil 2.3.35 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(pidin-4-il)-4-(*p*-tolil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2o) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.36 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-etil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2p)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.446 gr) 4-etil-5-(2-florofenil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı.

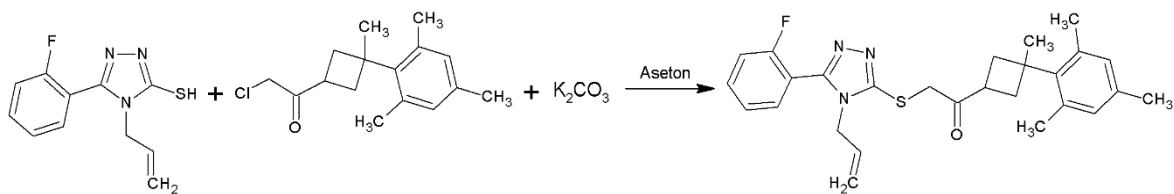
Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.36’ de verilmiştir. Verim % 62.



**Şekil 2.3.36** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon’ nun (2p) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.37 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2r)

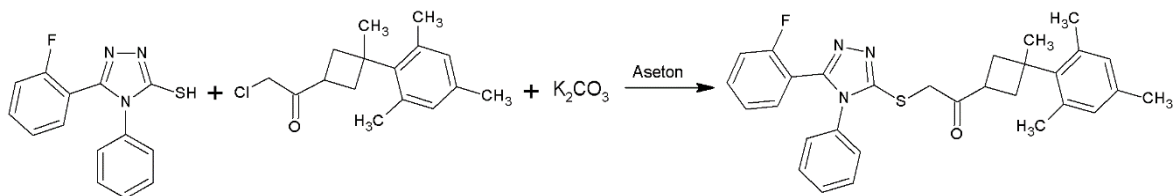
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.470 gr) 4-allil-5-(2-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.37’ de verilmiştir. Verim % 64.



**Şekil 2.3.37** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2r) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.38 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2s)

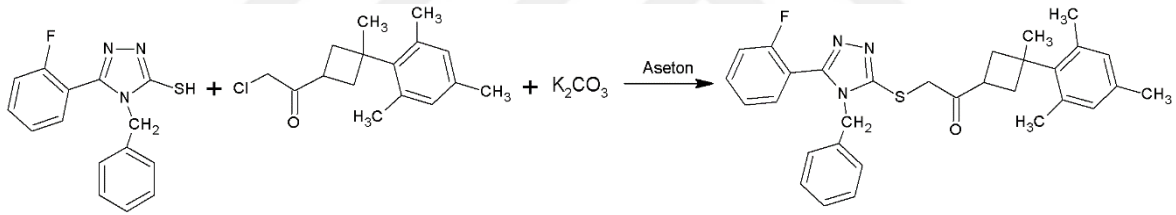
Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözüldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütül) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözülmüş olan 2 mmol (0.542 gr) 4-fenil-5-(2-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözücünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.38' de verilmiştir. Verim % 68.



**Şekil 2.3.38** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2s) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.39 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2t)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.570 gr) 4-benzil-5-(2-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözöcünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzölüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.39' de verilmiştir. Verim % 65.

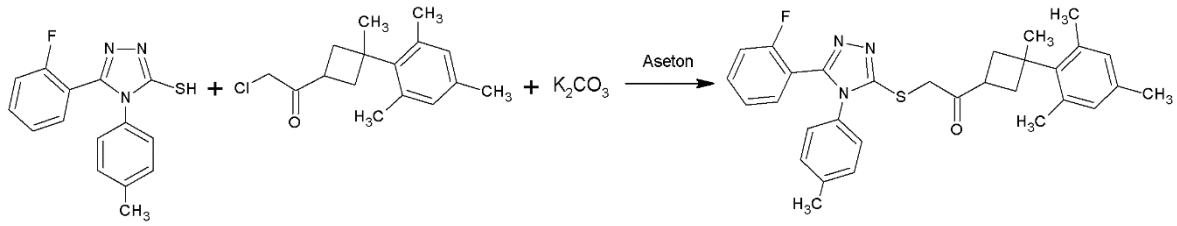


Şekil 2.3.39 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2t) oluşum reaksiyonu.

### 2.3.40 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Sentezi (2u)

Oda şartlarında, 2 mmol (0.276 gr)  $K_2CO_3$  30 ml kuru aseton içerisinde çözöldü. Bu çözeltiye 2 mmol (0.546 gr) 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil siklobütil) etanon ilave edilerek oda koşullarında çözünmesi sağlandı. Daha sonra bu çözeltiye 10 ml kuru aseton içerisinde çözölmüş olan 2 mmol (0.570 gr) 4-(p-tollil)-5-(2-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3-tiyol çözeltisi damla damla ilave edilip 6 saat oda şartlarında manyetik karıştırıcı ile karıştırıldı. Çözöcünün fazlası düşük basınç altında evaporatör ile ortamdan uzaklaştırıldıktan sonra

oluşan katı buzlu su ile yıkanarak süzülüp kurutuldu. Elde edilen madde etil alkol içerisinde kristallendirilerek saflaştırılması sağlandı. Elde edilen ürünün yapısı FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR teknikleri ile aydınlatıldı. Ürünün genel elde reaksiyonu Şekil 2.3.40' de verilmiştir. Verim % 61.



**Şekil 2.3.40** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-(p-tollil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon' nun (2u) oluşum reaksiyonu.

## 2.4 Hesaplama Detayları

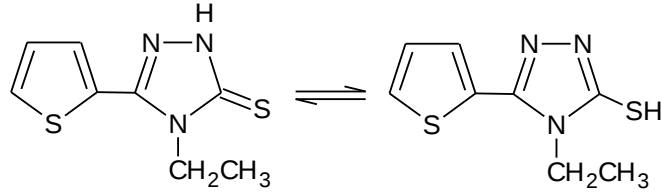
Tez çalışmasındaki seçilen moleküllere ait teorik hesaplamalar Gaussian 09W [23] paket programı ve yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) [24] kullanılarak yapılmıştır. Yapılan DFT hesaplamalarında, Becke' in değiş-tokuş, Lee, Yang ve Parr' ın korelasyon terimlerini barındıran üç parametrelili hibrit değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneli olan B3LYP fonksiyoneli kullanılmıştır. Temel set olarak, orta derecede büyüklüğe sahip moleküller için iyi bir geometri ve anlamlı enerji değerleri vermesi nedeni ile en çok tercih edilen baz setlerinden biri olan cc-pVDZ [63,64] temel seti seçilmiştir. Teorik yapısı incelenen moleküllerin minimum enerjili durumuna ait konformasyonu tespit etmek amacıyla geometri optimizasyon işlemi yapılmıştır. Hesaplama işlemleri için gerekli olan girdi dosyalarını oluşturmak ve hesaplar sonucunda elde edilen çıktı dosyalarını görselleştirmek amacı GaussView [65] programından yararlanılmıştır. Deneysel olarak elde edilen FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR ve UV-VIS spektrumları, teorik olarak hesaplanan sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Moleküllerin <sup>1</sup>H ve <sup>13</sup>C NMR kimyasal kayma hesapları GIAO [66] metodu kullanılarak DMSO çözücü ortamında yapılmıştır. Titreşim frekanslarını elde etmek için yapılan hesaplamalar, vakum ortamında ve 0.970 [53]

ölçeklendirilmesi ile yapılmıştır. UV-VIS hesaplamaları için zamana bağlı yoğunluk fonksiyonel teorisi (TD-DFT) [67,68] kullanılmış ve çözücü olarak etanol seçilmiştir. NMR ve UV-VIS hesaplamalarında çözücü modeli olarak IEF-PCM [69,70] modeli seçilmiştir.

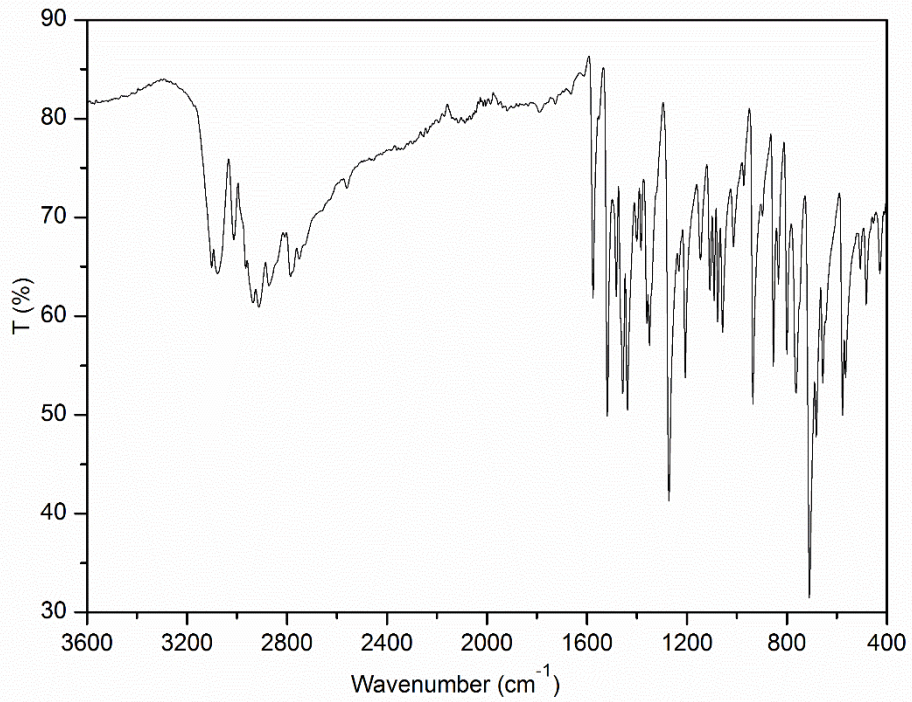


### 3 BULGULAR

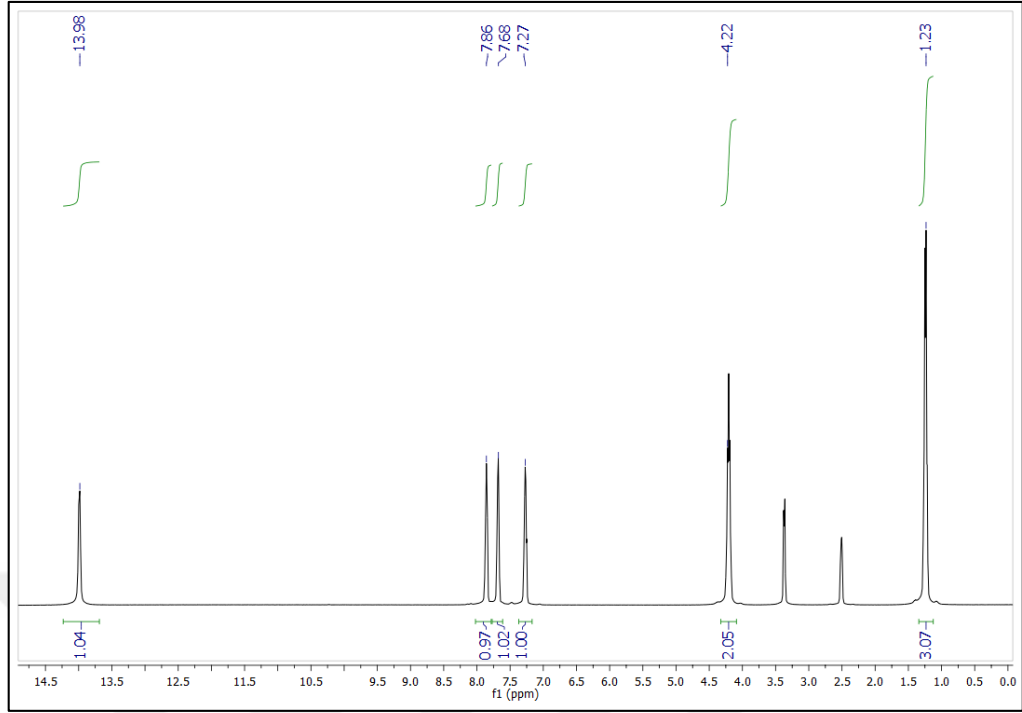
#### 3.1 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1a)



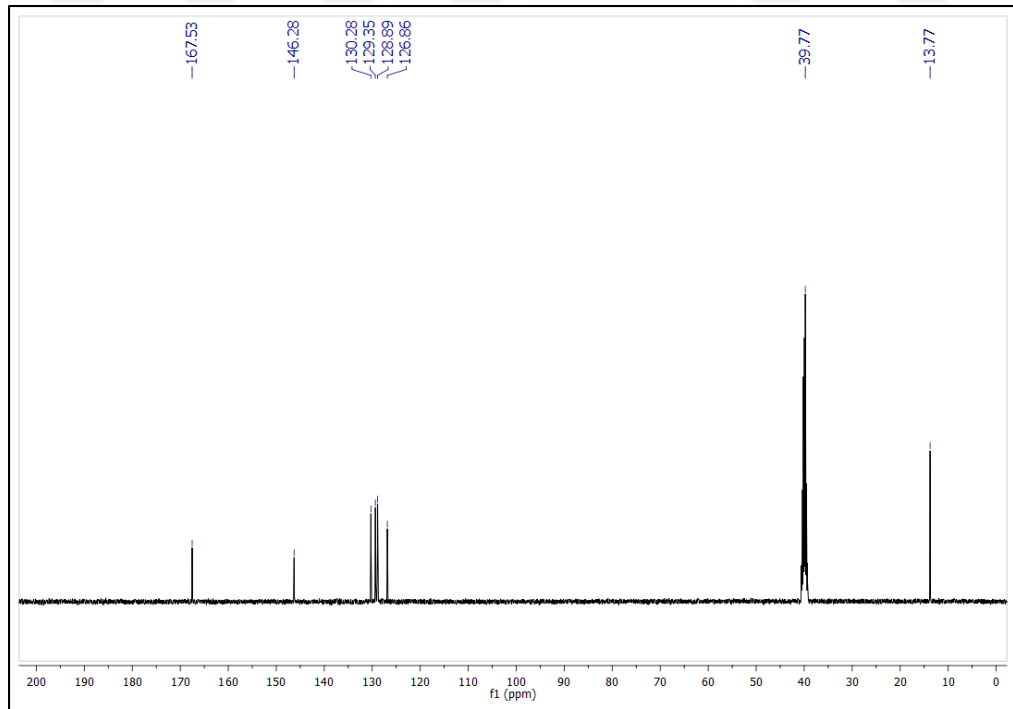
**1a** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.1.1, Şekil 3.1.2 ve Şekil 3.1.3'de verilmiştir.



**Şekil 3.1.1** 1a molekülü' nün FT-IR spektrumu.



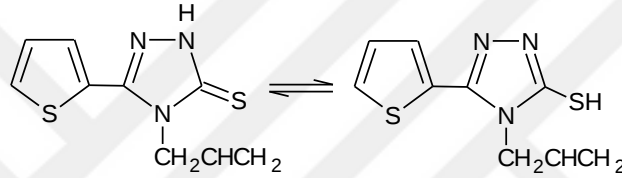
Şekil 3.1.2 1a molekülü' nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



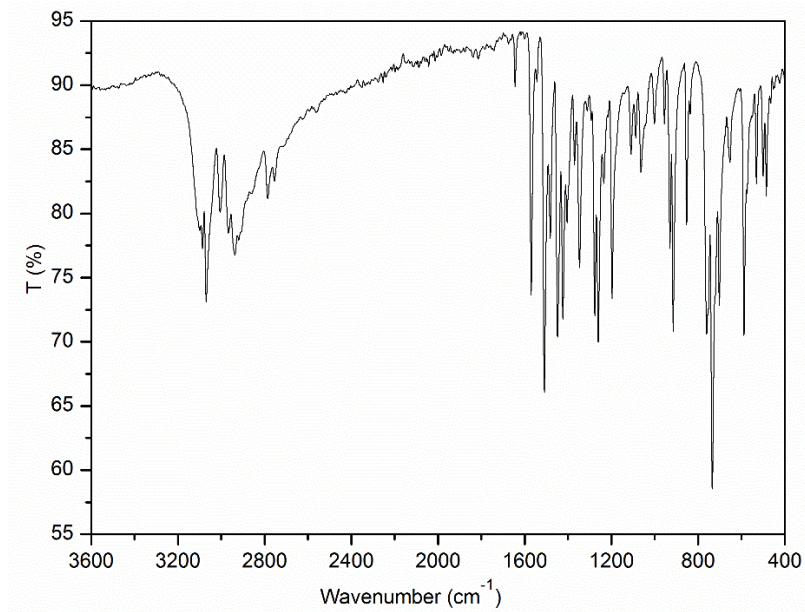
Şekil 3.1.3 1a molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 256-257 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>,  $\nu$ ):** 3072-3107 (Ar-H), 2870-2960 (C-H), 1574 (C=N), 1267 (C=S), 713 (C-S-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 1.23 (t, 3H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.2 Hz), 4.22 (q, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.2 Hz), 7.27 (dd, 1H, Ar-H,  $J$  = 4.0, 4.8 Hz), 7.68 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 3.2 Hz) 7.86 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 4.8 Hz), 13.98 (s, 1H, SH); **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 13.7, 39.7, 126.8, 128.9, 129.3, 130.3, 146.3, 167.5. **Molekül Ağırlığı:** 211 (C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>S<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 45.47; H, 4.29; N, 19.89; S, 30.35; **deneysel**, C, 45.43; H, 4.26; N, 19.90; S, 30.33.

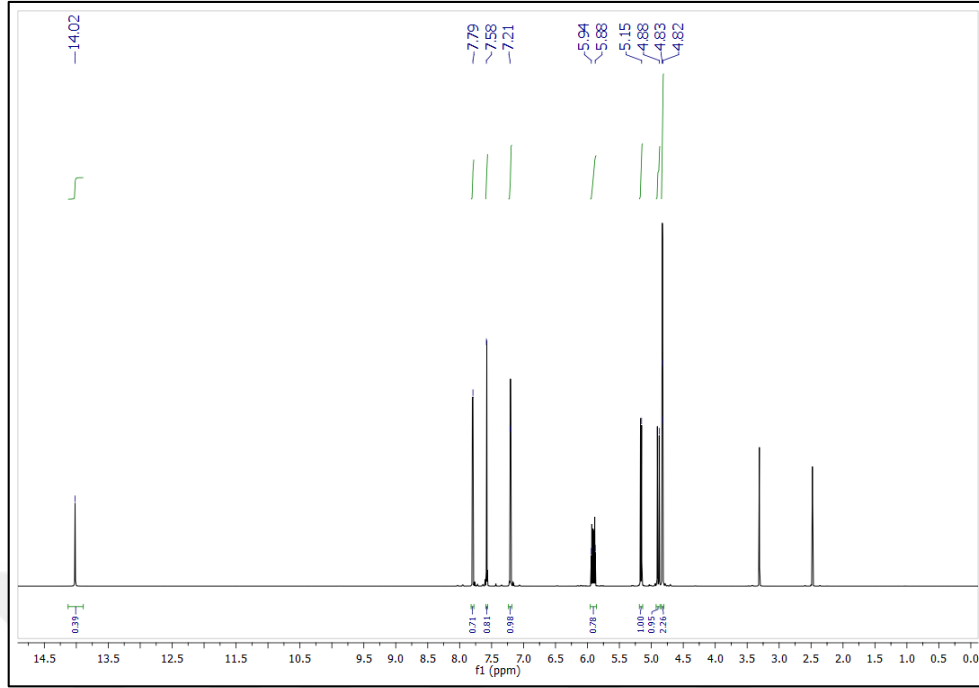
### 3.2 4-allil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1b)



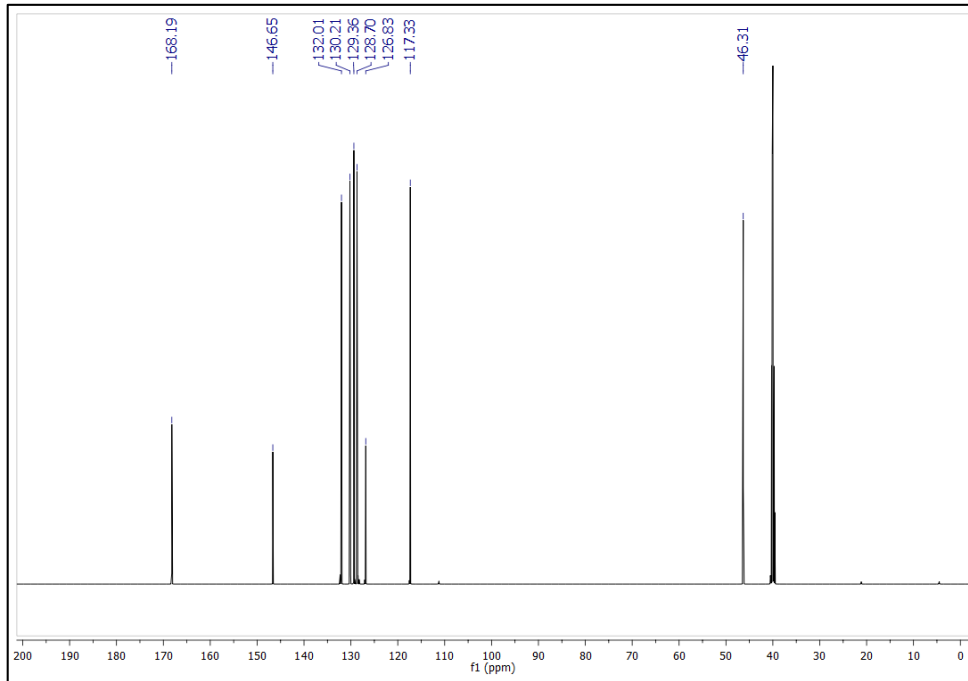
**1b** molekülünün FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.2.1, Şekil 3.2.2 ve Şekil 3.2.3'de verilmiştir.



**Şekil 3.2.1** 1b molekülü' nün FT-IR spektrumu.



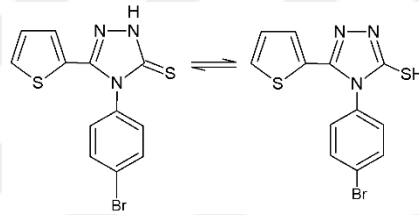
Şekil 3.2.2 1b molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



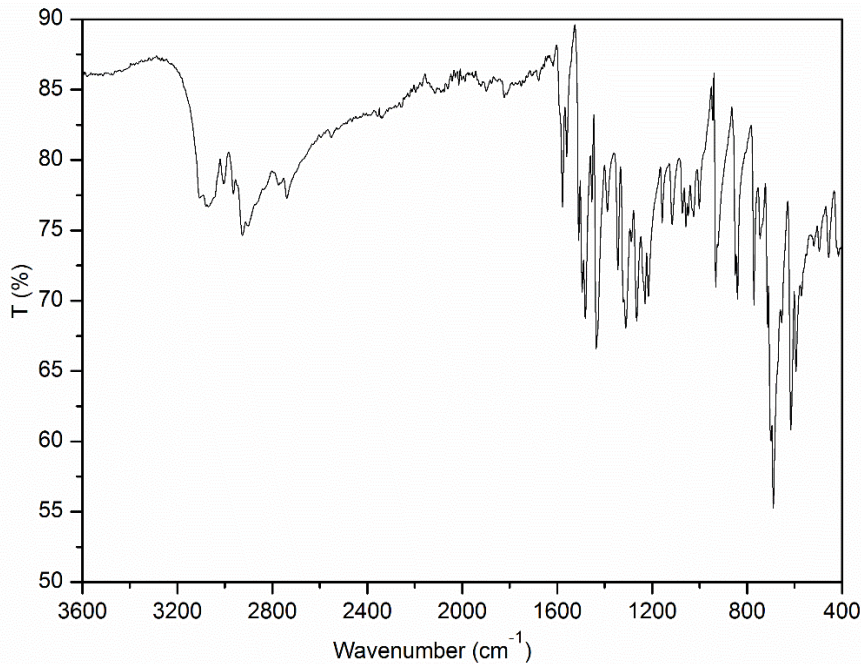
Şekil 3.2.3 1c molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 157-158 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 3072-3102 (Ar-H), 2914-2967 (C-H), 1567 (C=N), 1252 (C=S), 728 (C-S-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 4.82 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 4.89 (d, 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans) *J* = 17.4 Hz), 5.16 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>, *J*<sub>cis</sub> = 10.5 Hz), 5.87-5.95 (ddt, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>, *J*<sub>trans</sub> = 17.4 Hz, *J*<sub>cis</sub> = 10.5 Hz *J*<sub>CH2</sub> = 3.7 Hz), 7.21 (t, 1H, Ar-H, *J* = 4.0, 4.8 Hz), 7.58 (d, 1H, Ar-H, *J* = 3.7 Hz) 7.80 (d, 1H, Ar-H, *J* = 5.3 Hz), 13.98 (s, 1H, SH); **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 46.3, 117.3, 126.8, 128.7, 129.3, 130.2, 132.0, 146.3, 168.2. **Molekül Ağırlığı:** 223 (C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>S<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 48.40; H, 4.06; N, 18.82; S, 28.72; **deneysel,** C, 45.38; H, 4.09; N, 18.80; S, 28.74.

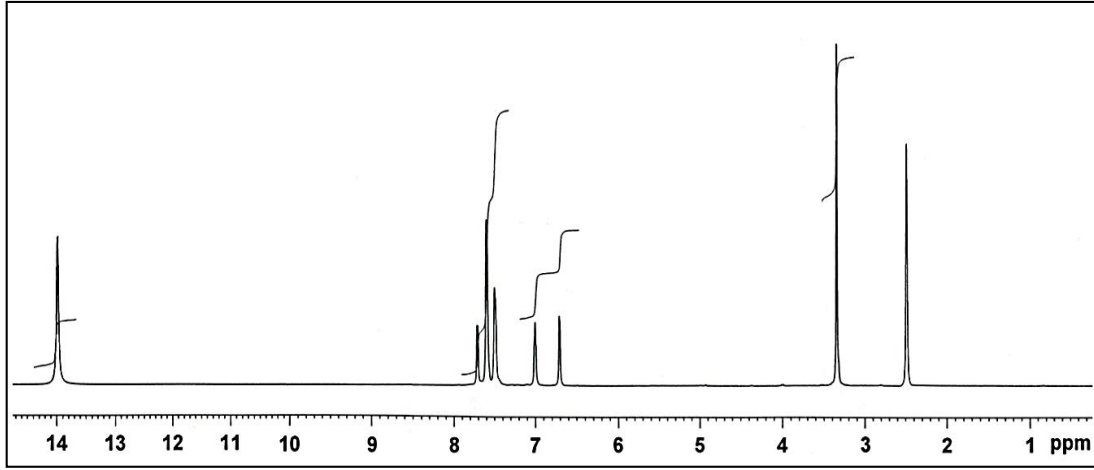
### 3.3 4-bromofenil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un Karakterizasyonu (1c)



**1c** molekülünün FT-IR, ve <sup>1</sup>H-NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.3.1 ve Şekil 3.3.2'de verilmiştir.



**Şekil 3.3.1** 1c molekülü' nün FT-IR spektrumu.



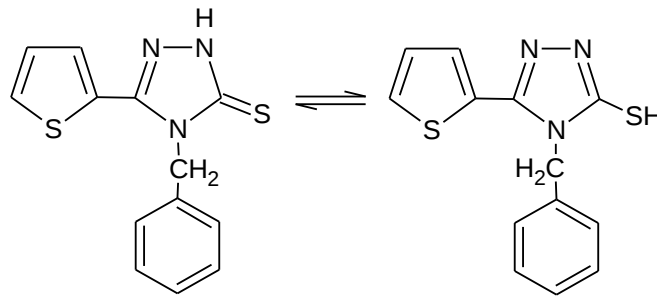
Şekil 3.3.2 1c molekülü' nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 164-165 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3038-3105 (Ar-H), 1574 (C=N), 1259 (C=S), 683 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 6.66-7.70 (7H, Ar-H), 13.98 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 126.6, 128.1, 129.2, 129.4, 130.1, 130.3, 130.6, 135.0, 144.7, 169.6. **Molekül Ağırlığı:** 338 ( $\text{C}_{12}\text{H}_8\text{BrN}_3\text{S}_2$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 42.62; H, 2.38; N, 12.42; S, 18.96; **deneysel,** C, 42.32; H, 2.18; N, 12.62; S, 18.66.

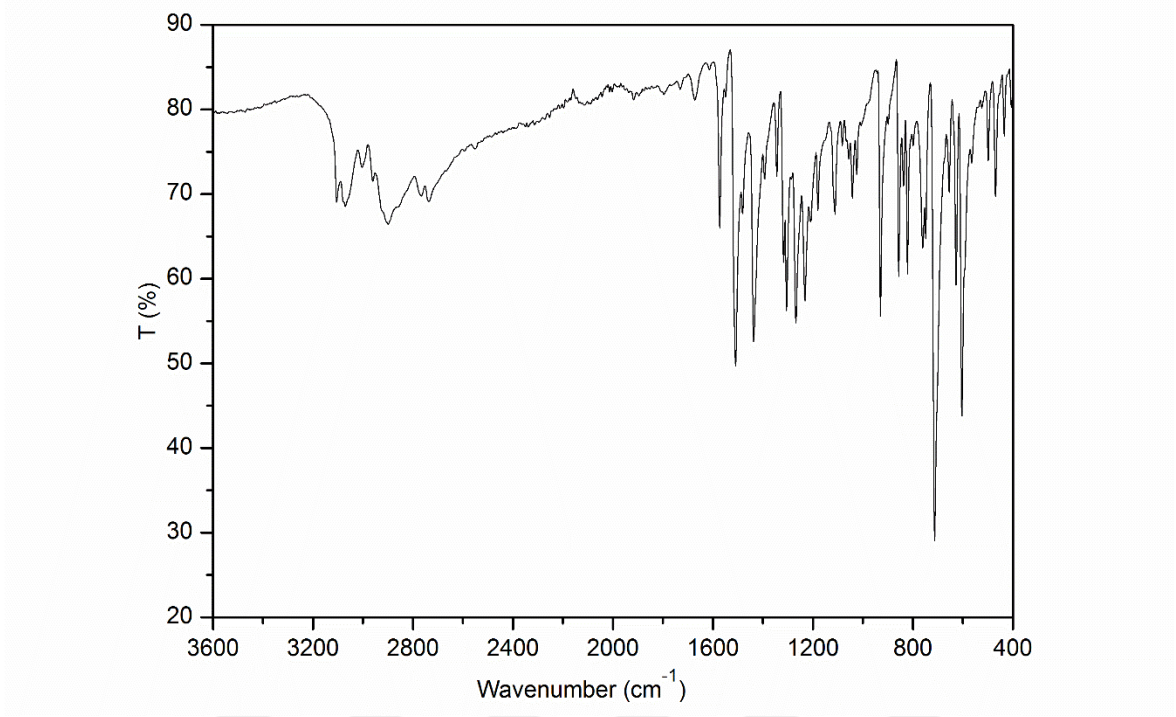
### 3.4 4-benzil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'

un

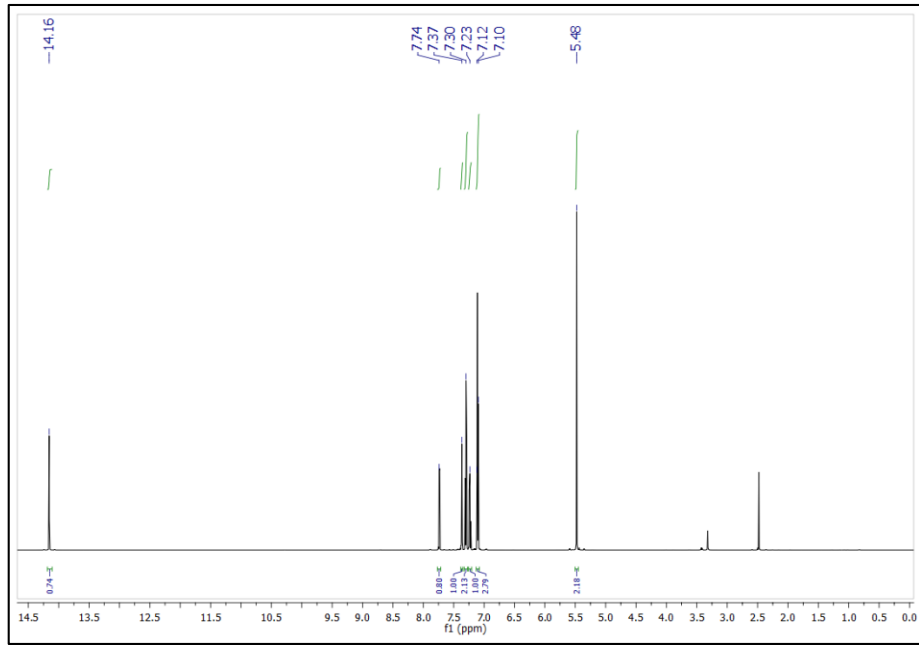
#### Karakterizasyonu (1d)



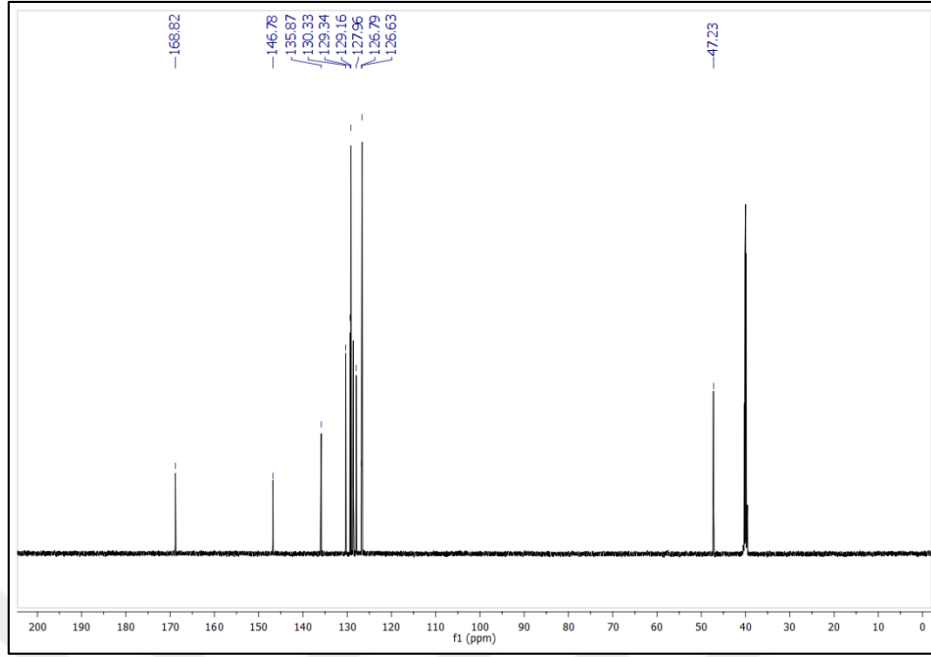
**1d** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.4.1, Şekil 3.4.2 ve Şekil 3.4.3’de verilmiştir.



Şekil 3.4.1 1d molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



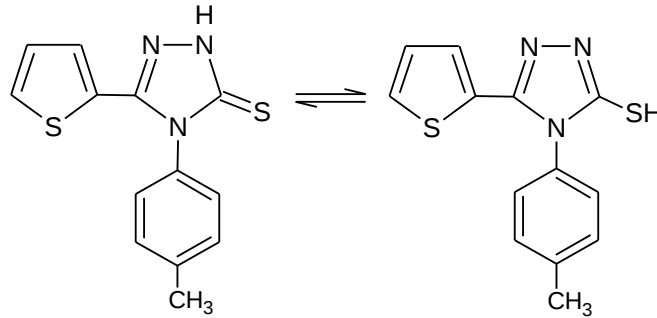
Şekil 3.4.2 1d molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



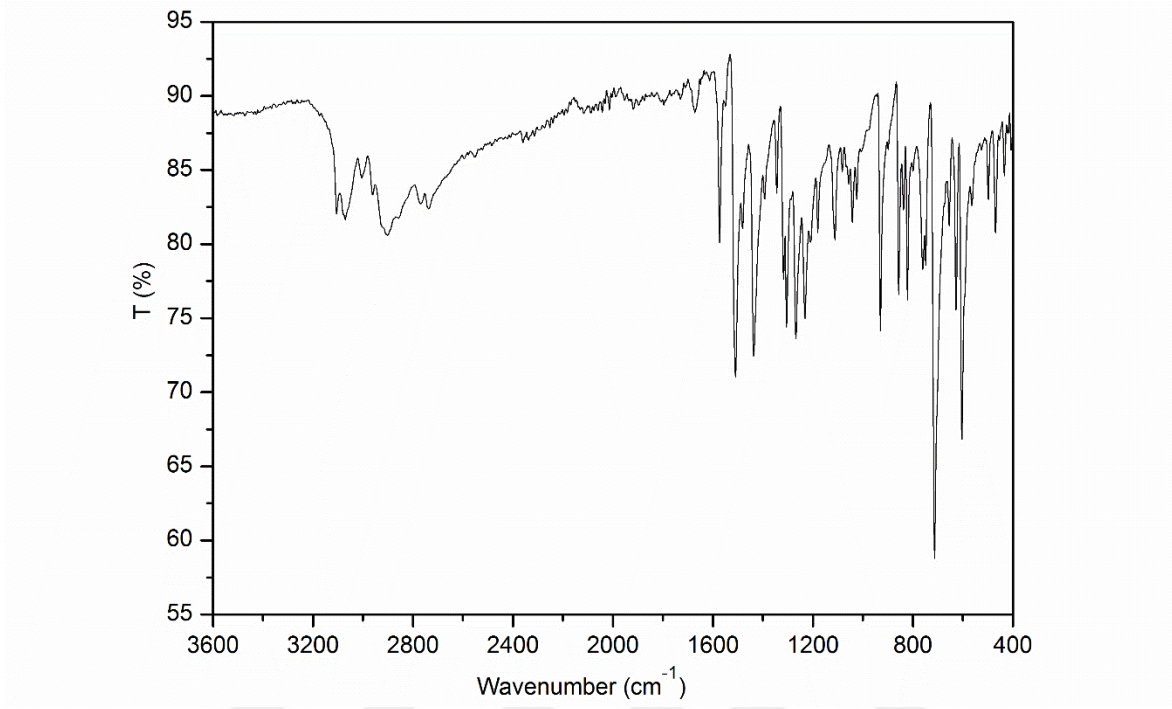
Şekil 3.4.3 1d molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 145-147 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3064-3102 (Ar-H), 2854-2967 (C-H), 1574 (C=N), 1274 (C=S), 705 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 5. 48 (s, 2H, N- $\text{CH}_2$ - $\text{C}_6\text{H}_5$ ), 7.10-7.74 (8H, Ar-H), 14.16 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 47.2, 126.6, 127.9, 129.1, 129.3, 130.3, 135.8, 146.7.0, 168.2. **Molekül Ağırlığı:** 273 ( $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S}_2$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 57.12; H, 4.06; N, 15.37; S, 23.46; **deneysel,** C, 57.02; H, 4.15; N, 15.07; S, 23.21.

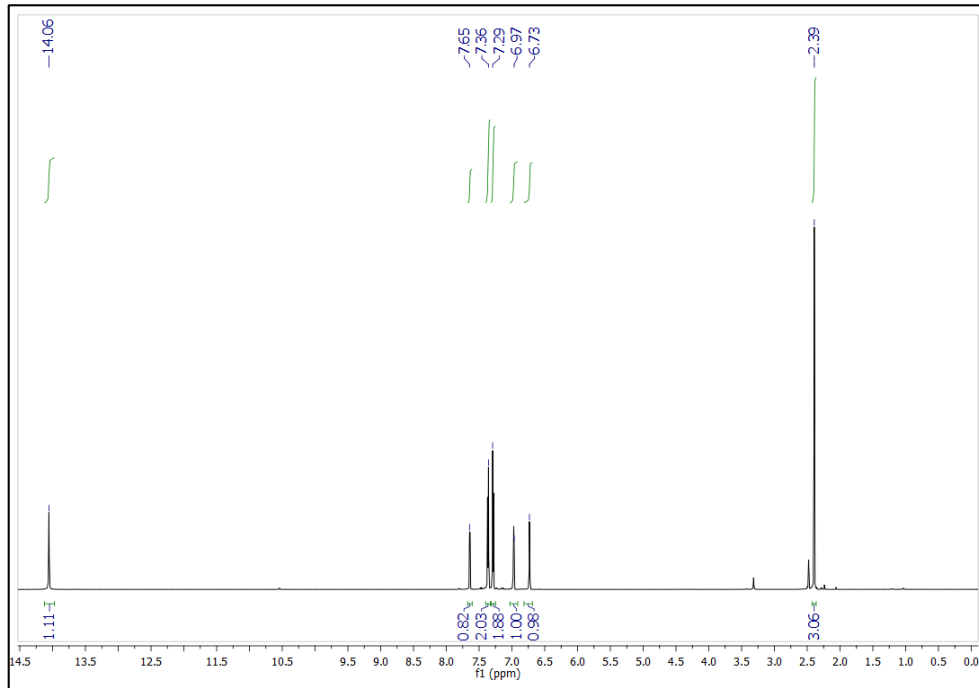
### 3.5 4-(*p*-tollil)-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1e)



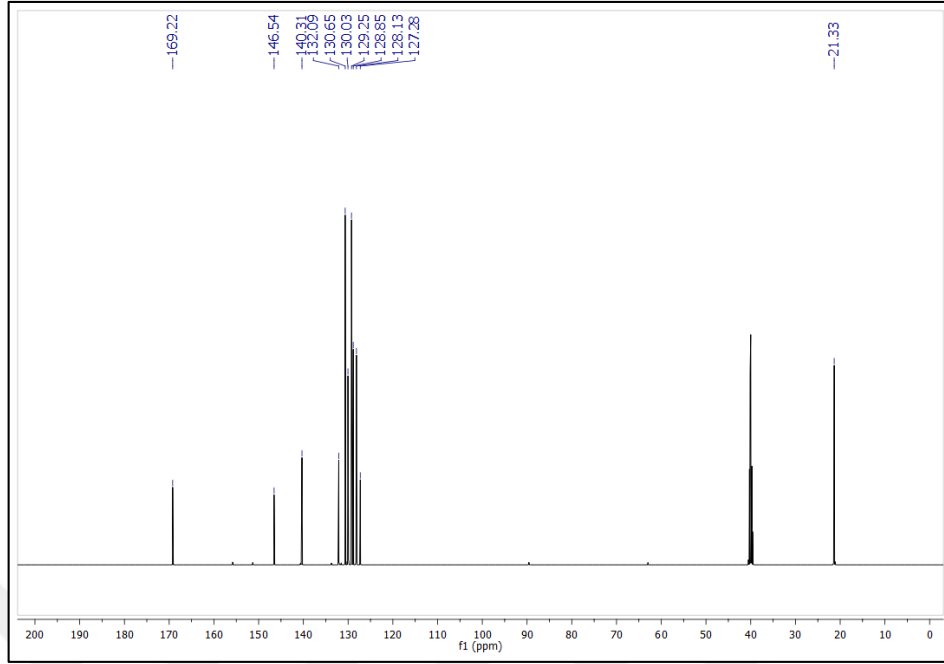
**1e** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.5.1, Şekil 3.5.2 ve Şekil 3.5.3’de verilmiştir.



Şekil 3.5.1 **1e** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



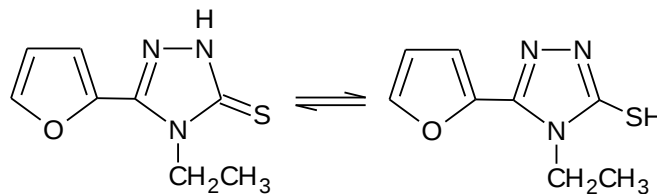
Şekil 3.5.2 **1e** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



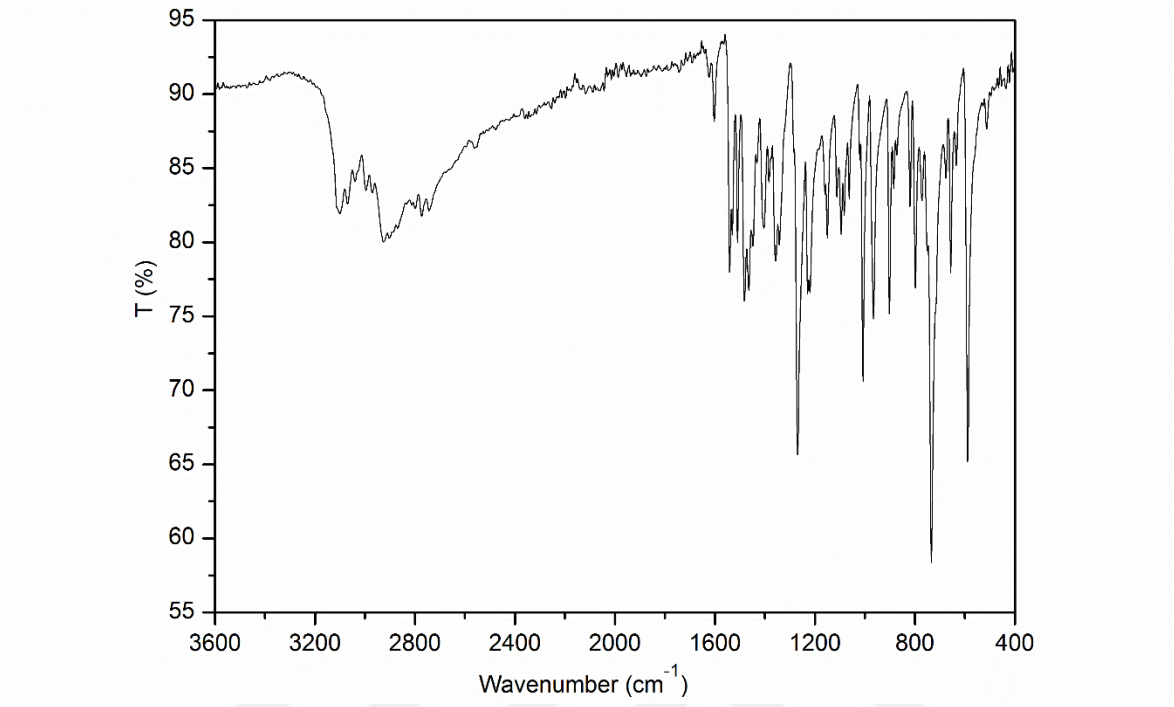
Şekil 3.5.3 1e molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 155-157 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3068-3105 (Ar-H), 2859-2963 (C-H), 1570 (C=N), 1263 (C=S), 709 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 2.39 (s, 3H,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3$ ), 6.73 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.7$  Hz), 6.97 (t, 1H, Ar-H,  $J = 4.0$  Hz), 7.29 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.2$  Hz), 7.36 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.2$  Hz) 7.64 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.0$  Hz), 14.06 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 21.3, 127.3, 128.1, 128.8, 129.2, 130.03, 130.65 140.3, 146.5, 169.2. **Molekül Ağırlığı:** 273 ( $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{S}_2$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 57.12; H, 4.06; N, 15.37; S, 23.46; **deneysel,** C, 57.20; H, 4.15; N, 15.10; S, 23.33.

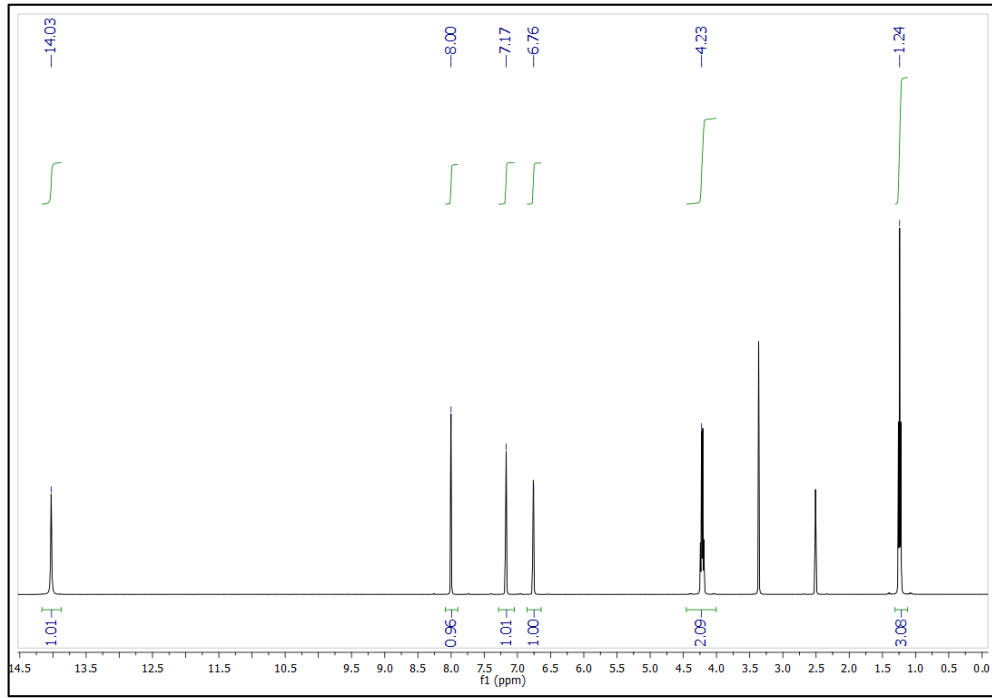
### 3.6 4-etil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1f)



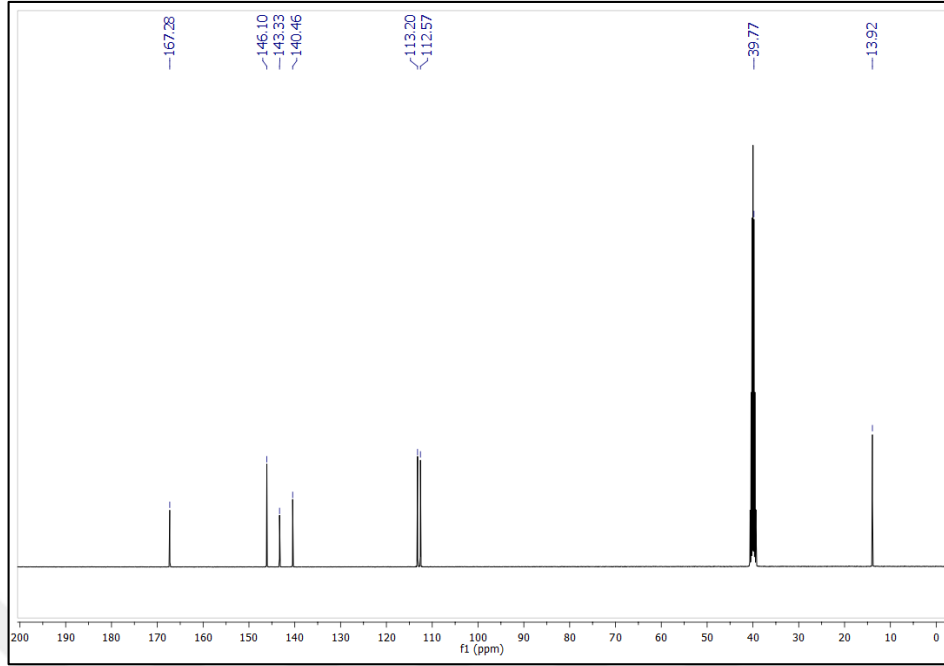
**1f** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.6.1, Şekil 3.6.2 ve Şekil 3.6.3’de verilmiştir.



Şekil 3.6.1 1f molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



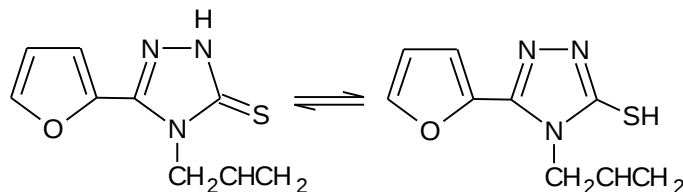
Şekil 3.6.2 1f molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



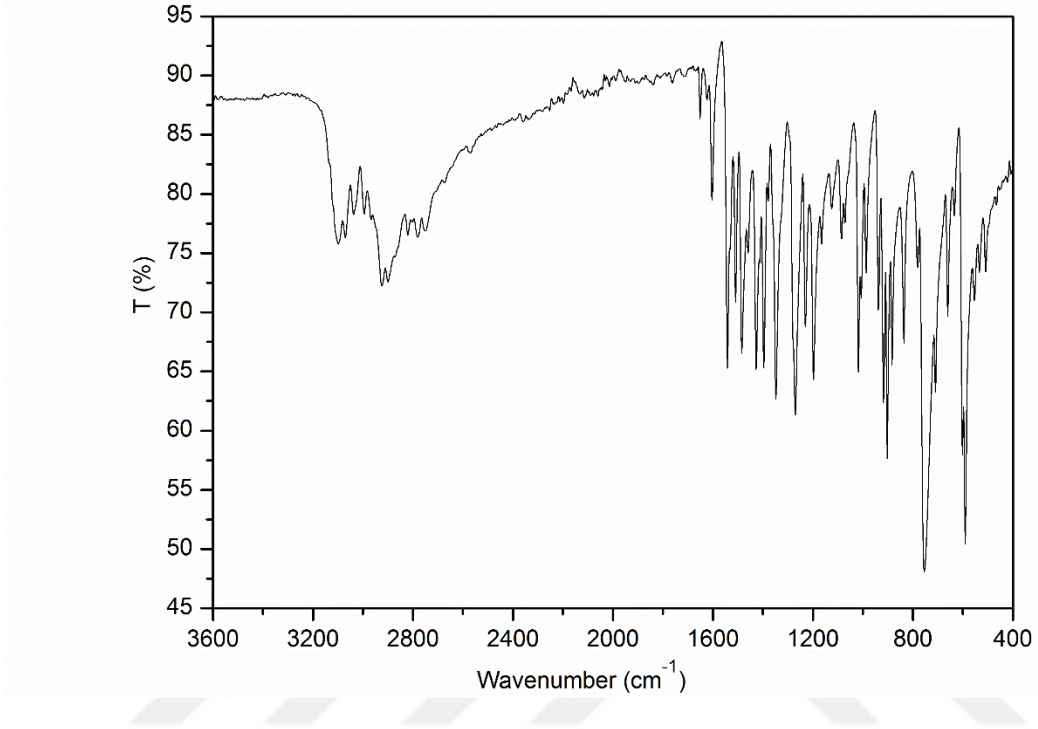
Şekil 3.6.3 1f molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 260-262 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3064-3102 (Ar-H), 2854-2929 (C-H), 1604 (C=N), 1217 (C-O-C), 1535, 1260, 1052, 964 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.24 (t, 3H, N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 7.1 Hz), 4.22 (q, 2H, -N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 7.1 Hz), 6.76 (dd, 1H, Ar-H), 7.17 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 3.5 Hz) 8.00 (d, 1H, Ar-H), 14.03 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 13.9, 39.7, 112.5, 113.2, 140.4, 143.3, 146.1, 167.2. **Molekül Ağırlığı:** 195 ( $\text{C}_8\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 49.21; H, 4.65; N, 21.52; S, 16.42; **deneysel**, C, 49.43; H, 4.50; N, 21.71; S, 16.33.

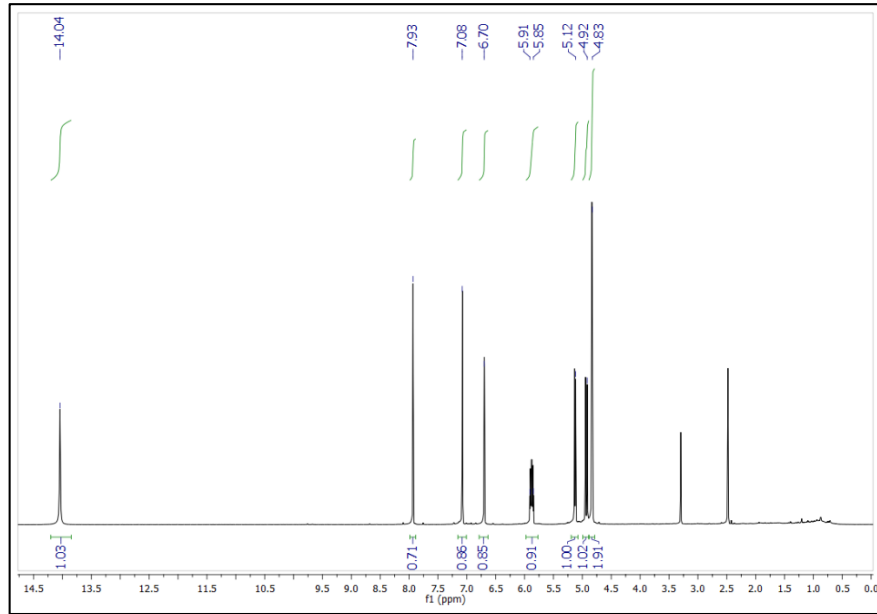
### 3.7 4-allil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1g)



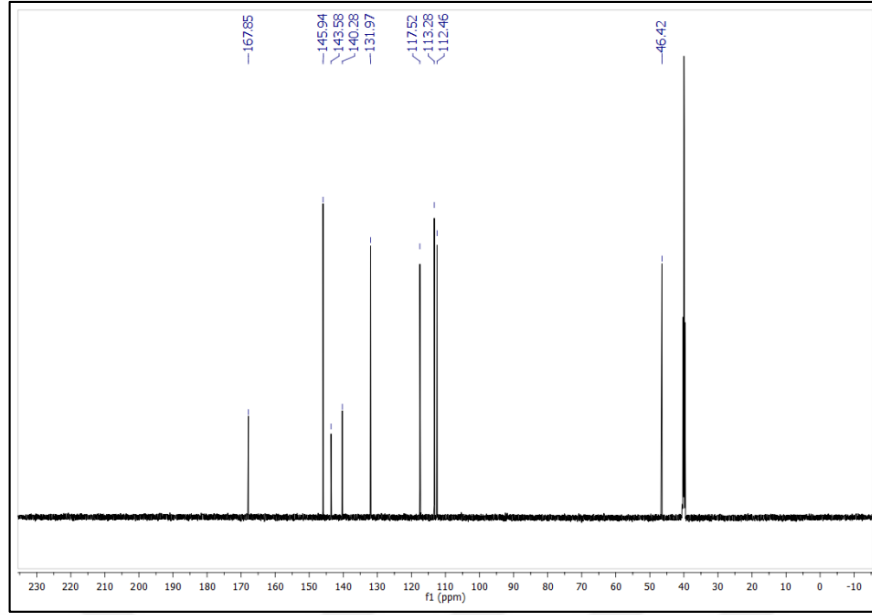
**1g** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.7.1, Şekil 3.7.2 ve Şekil 3.7.3’de verilmiştir.



Şekil 3.7.1 1g molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



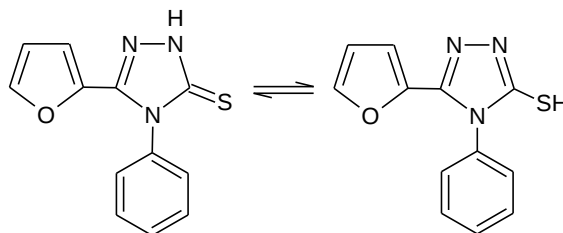
Şekil 3.7.2 1g molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



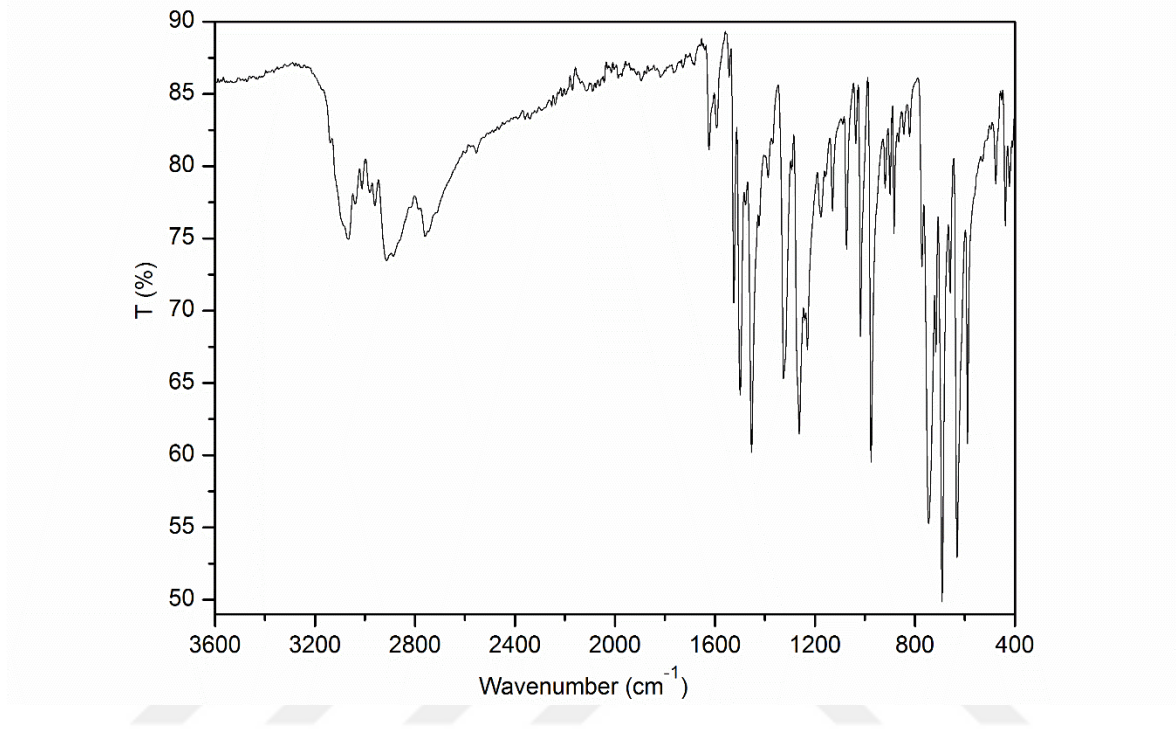
Şekil 3.7.3 1g molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 254-255 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3001-3098 (Ar-H), 2821-2925 (C-H), 1608 (C=N), 1233 (C-O-C), 1539, 1263, 1015, 986 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 4.82 (m, 2H, -N- $\underline{\text{CH}_2}$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ ), 4.93 (d, 1H, -N- $\underline{\text{CH}_2}$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ (trans)  $J = 17.3$  Hz), 5.13 (d, 1H, N- $\underline{\text{CH}_2}$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ ,  $J_{\text{cis}} = 10.5$  Hz), 5.87-5.91 (ddt, 1H, N- $\underline{\text{CH}_2}$ - $\underline{\text{CH}}$ - $\underline{\text{CH}_2}$ ,  $J_{\text{trans}} = 17.4$  Hz,  $J_{\text{cis}} = 10.5$  Hz  $J_{\text{CH}_2} = 3.7$  Hz), 6.70 (t, 1H, Ar-H), 7.08 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.5$  Hz) 7.93 (d, 1H, Ar-H), 13.98 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 46.4, 112.4, 113.3, 117.5, 131.9, 140.2, 143.5, 145.9, 167.8. **Molekül Ağırlığı:** 207 ( $\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 52.16; H, 4.38; N, 20.27; S, 15.47; **deneyisel**, C, 52.06; H, 4.51; N, 20.32; S, 15.55.

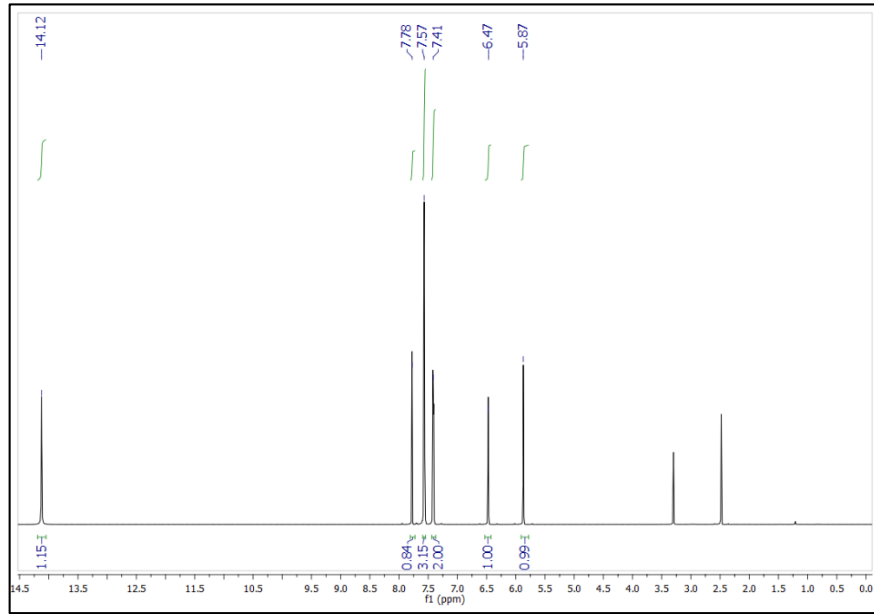
### 3.8 4-fenil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1h)



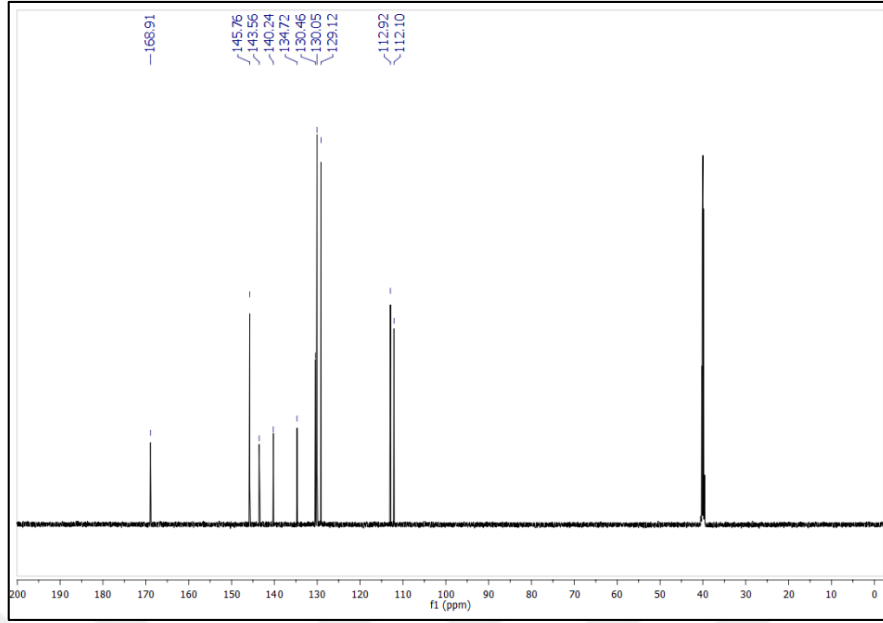
**1h** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.8.1, Şekil 3.8.2 ve Şekil 3.8.3’de verilmiştir.



Şekil 3.8.1 1h molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



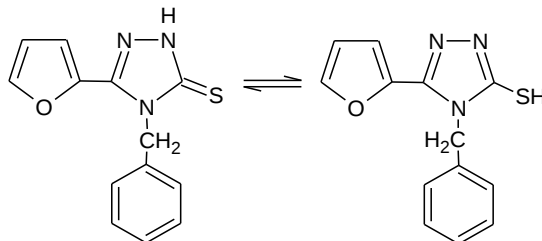
Şekil 3.8.2 1h molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



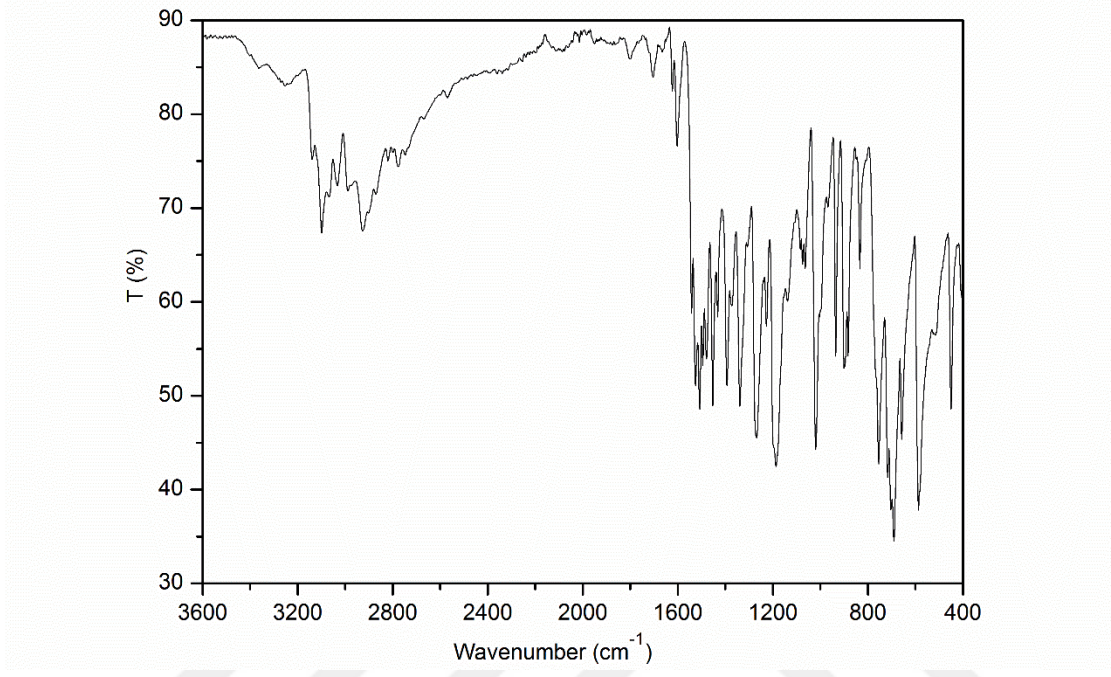
Şekil 3.8.3 1h molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 210-212 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3038-3136 (Ar-H), 1628 (C=N), 1226 (C-O-C), 1529, 1259, 1072, 975 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 5.87 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.5$  Hz), 6.47 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 3.5$  Hz,  $J = 1.7$  Hz) 7.41 (m, 2H, Ar-H), 7.57 (m, 3H, Ar-H), 7.78 (d, 1H, Ar-H,  $J = 1.7$  Hz) 14.12 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 112.1, 112.9, 129.1, 130.0, 130.4, 134.7, 140.2, 143.5, 145.7, 168.9. **Molekül Ağırlığı:** 243 ( $\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 59.24; H, 3.73; N, 17.27; S, 13.18; **deneysel,** C, 59.04; H, 3.80; N, 17.21; S, 13.25.

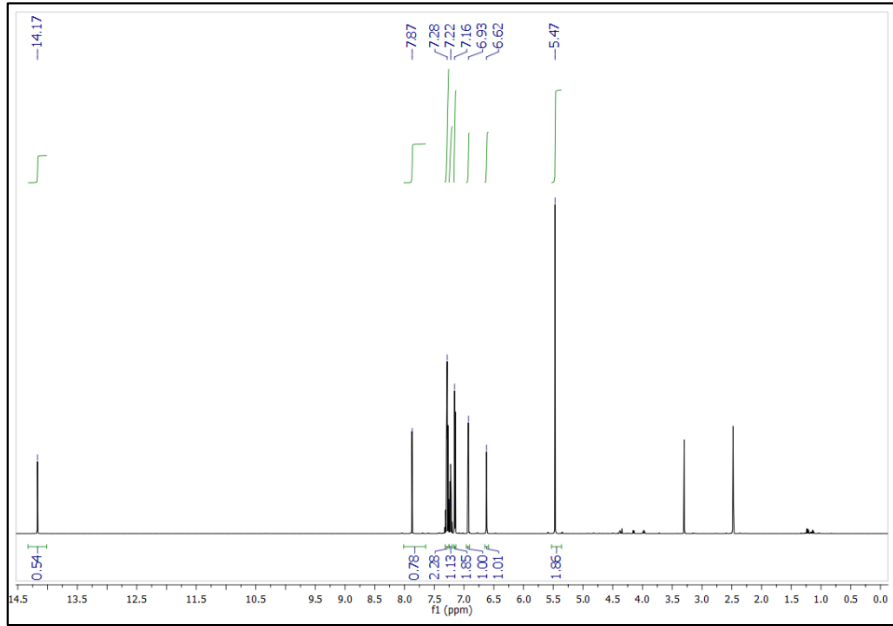
### 3.9 4-benzil-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1i)



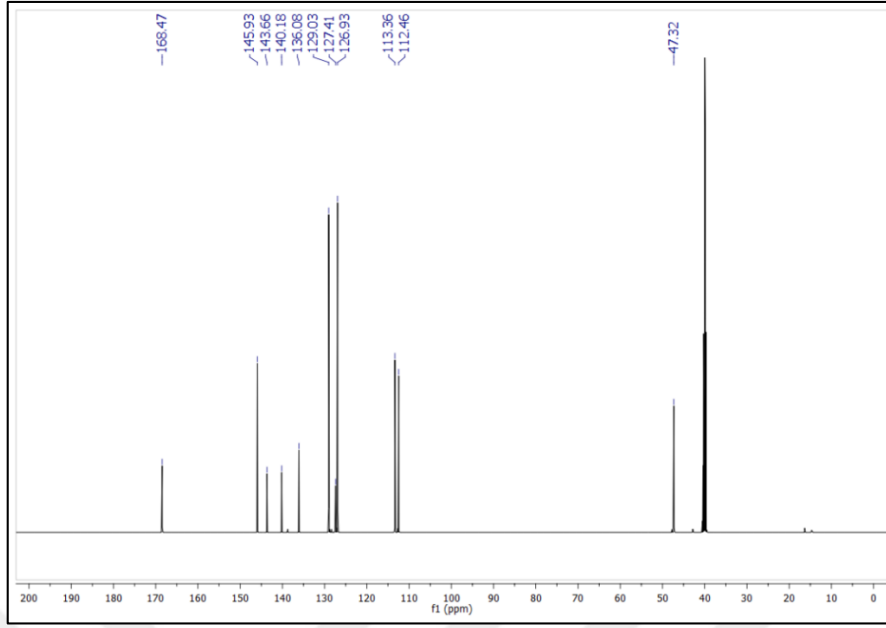
**1i** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.9.1, Şekil 3.9.2 ve Şekil 3.9.3’de verilmiştir.



Şekil 3.9.1 1i molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



Şekil 3.9.2 1i molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.

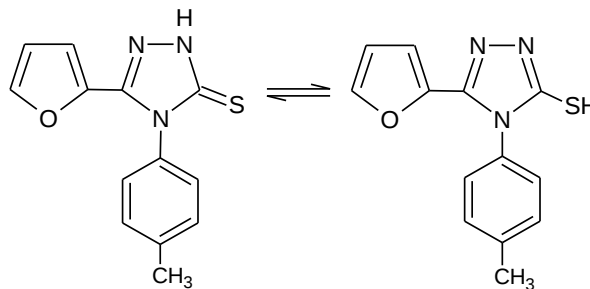


Şekil 3.9.3 1j molekülü'nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

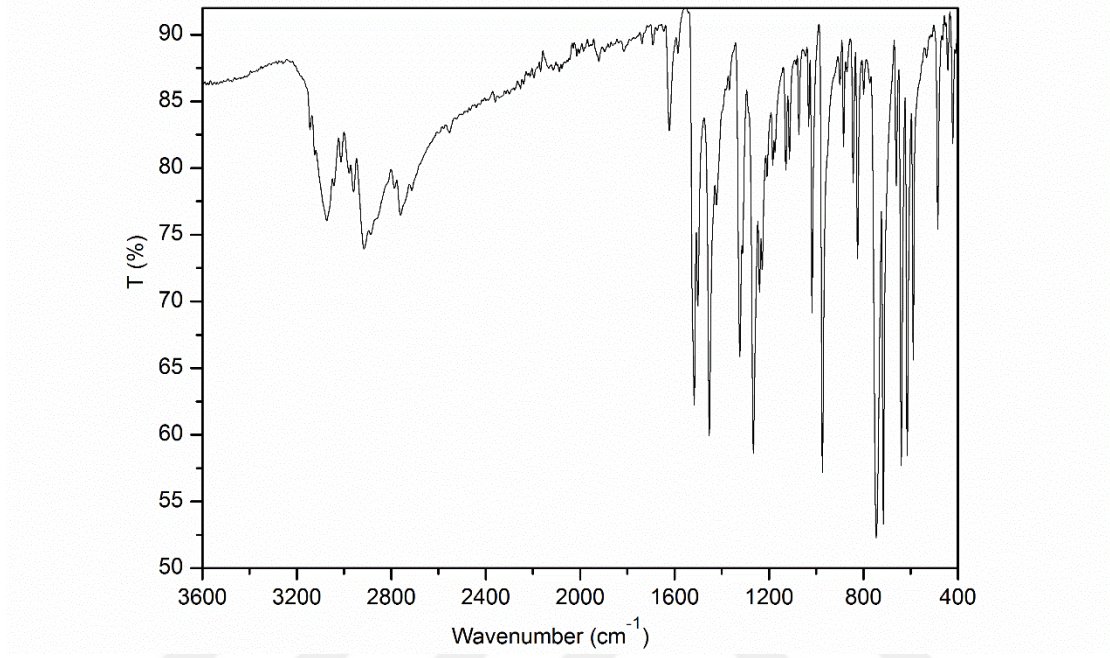
**Erime noktası:** 201-203 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3030-3145 (Ar-H), 2840-2986 (C-H), 1599 (C=N), 1274 (C-O-C), 1549, 1226, 1024, 971 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 5.47 (s, 2H, N- $\text{CH}_2$ -C $_6$ H $_5$ ), 6.62 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 3.7$  Hz,  $J = 1.9$  Hz) 6.93 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.7$  Hz) 7.16-7.28 (m, 5H, Ar-H), 7.87 (d, 1H, Ar-H,  $J = 2.2$  Hz) 14.17 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 47.32, 112.4, 113.3, 126.9, 127.4, 129.0, 136.0, 140.1, 143.6, 145.9, 168.4. **Molekül Ağırlığı:** 257 (C $_{13}$ H $_{11}$ N $_3$ OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 60.68; H, 4.31; N, 16.33; S, 12.46; **deneysel**, C, 60.75; H, 4.20; N, 16.27; S, 12.53.

### 3.10 4-(*p*-tollil)-5-(furan-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un

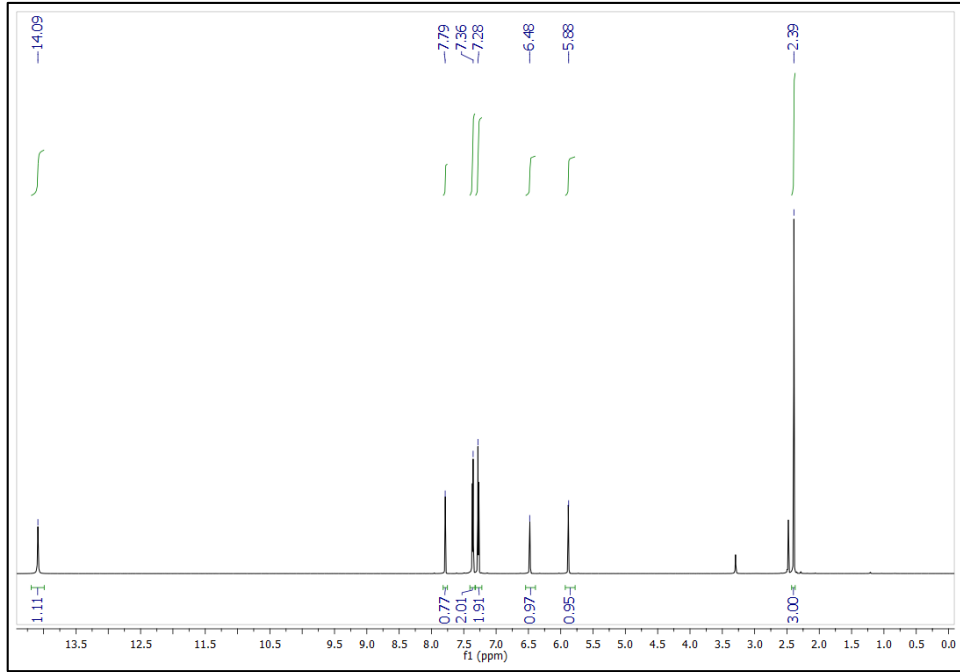
#### Karakterizasyonu (1j)



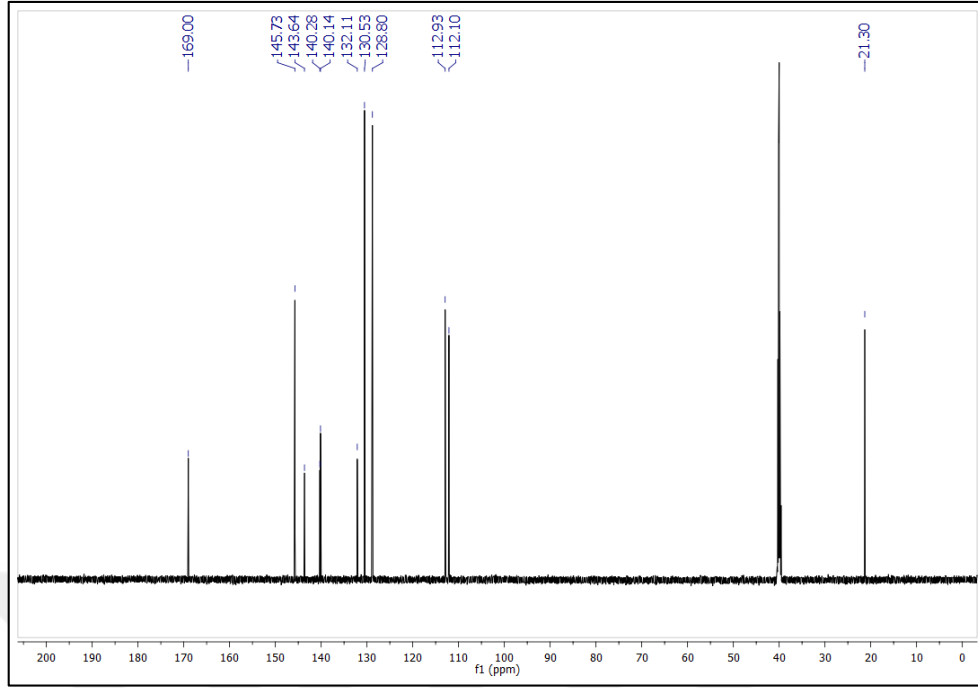
**1j** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.10.1, Şekil 3.10.2 ve Şekil 3.10.3’de verilmiştir.



Şekil 3.10.1 1j molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



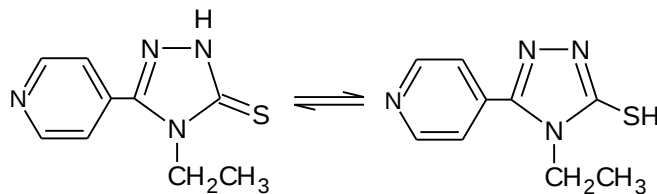
Şekil 3.10.2 1j molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



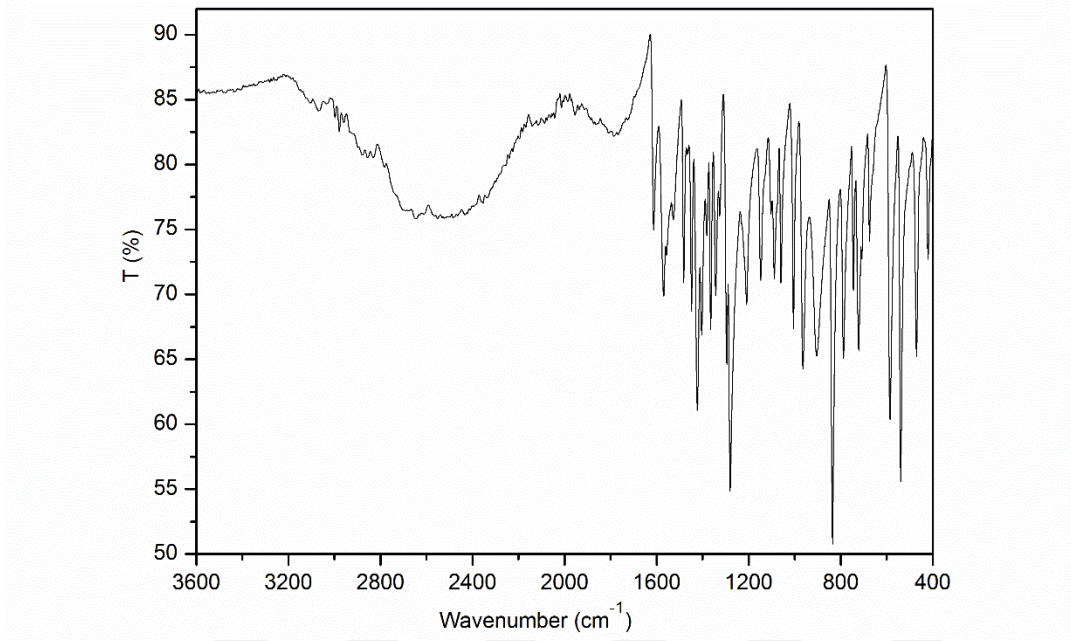
Şekil 3.10.3 1j molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 257-258 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3043-3147 (Ar-H), 2847-2975 (C-H), 1623 (C=N), 1265 (C-O-C), 1516, 1226, 1017, 979 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 2.39 (s, 3H,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3$ ), 5.88 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.6$  Hz), 6.48 (m, 1H, Ar-H), 7.27 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.1$  Hz), 7.36 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.1$  Hz) 7.64 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.0$  Hz), 14.09 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 21.3, 112.1, 112.9, 128.8, 130.5, 132.1, 140.14 140.28, 143.6, 145.7 169.0. **Molekül Ağırlığı:** 257 ( $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{OS}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 60.68; H, 4.31; N, 16.33; S, 12.46; **deneysel**, C, 60.60; H, 4.43; N, 16.45; S, 12.61.

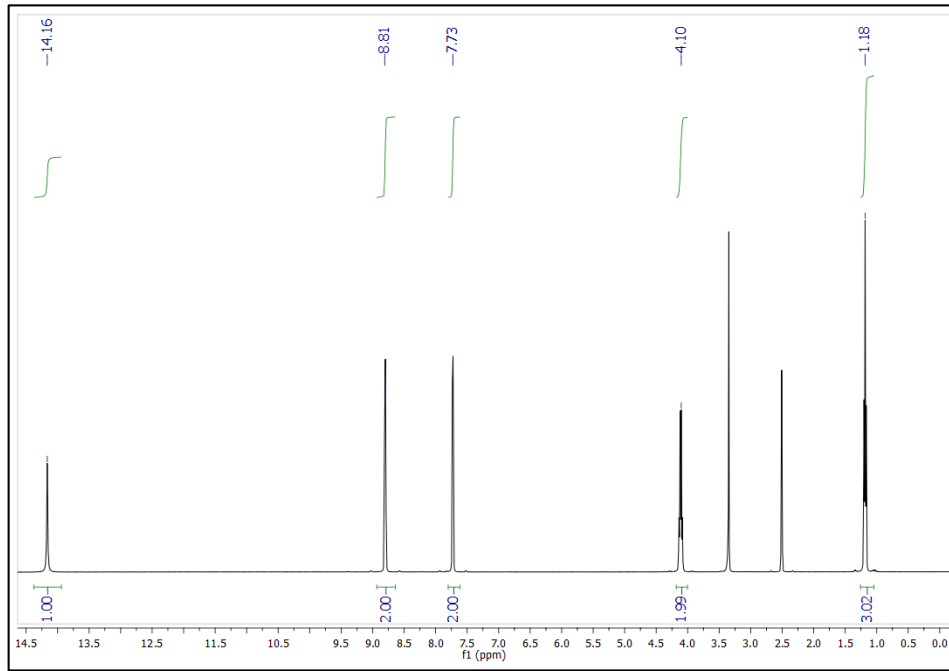
### 3.11 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1k)



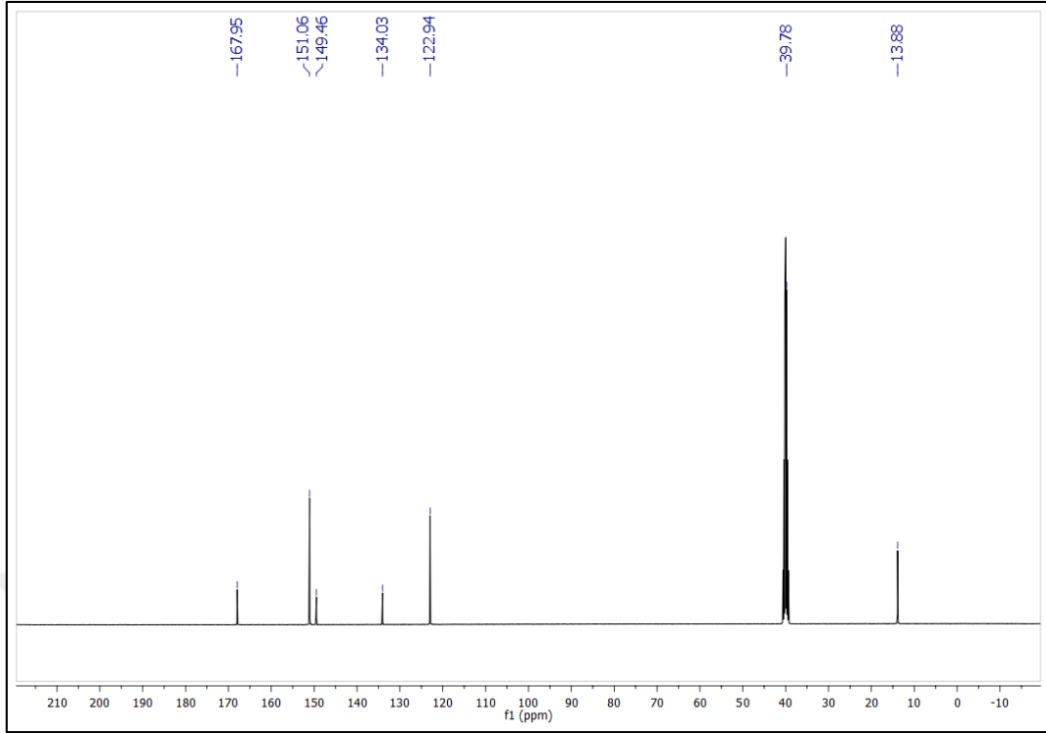
**1k** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.11.1, Şekil 3.11.2 ve Şekil 3.11.3’de verilmiştir.



Şekil 3.11.1 1k molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



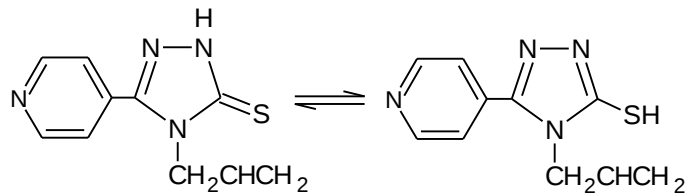
Şekil 3.11.2 1k molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



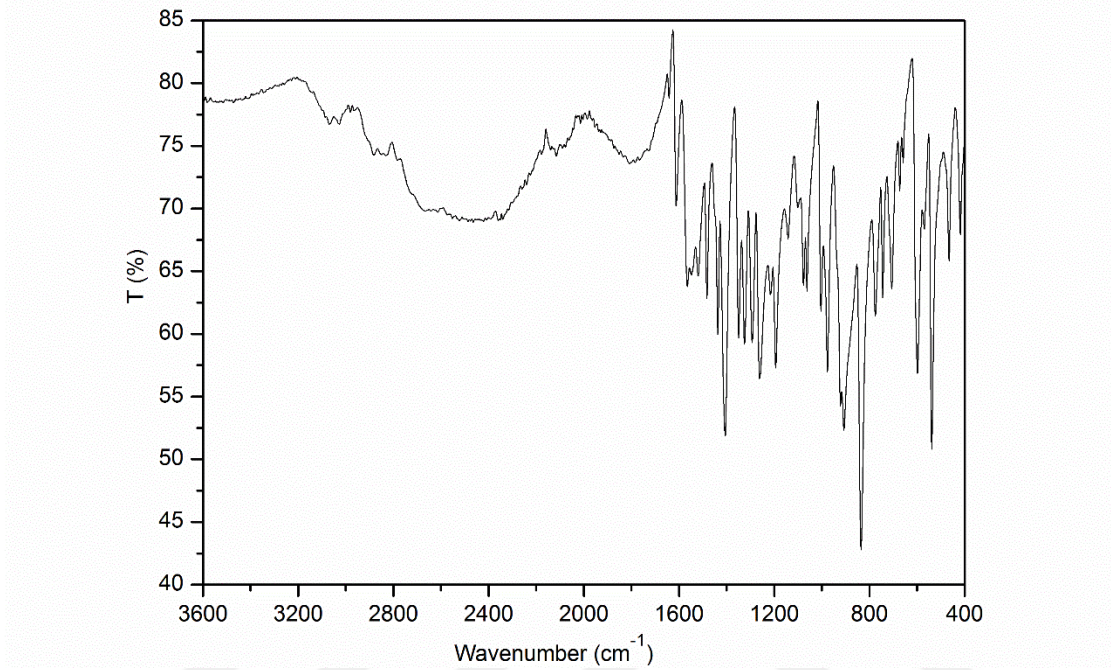
Şekil 3.11.3 1k molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 254-256 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3035-3154 (Ar-H), 2825-2997 (C-H), 1611 (C=N), 1567, 1274, 1057, 960 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.18 (t, 3H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.1 Hz), 4.11 (q, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.1 Hz), 7.73 (m, 2H, Ar-H), 8.81 (m, 2H, Ar-H), 14.16 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 13.8, 39.7, 112.5, 122.9, 134.0, 149.4, 151.0, 167.9. **Molekül Ağırlığı:** 206 (C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 52.41; H, 4.89; N, 27.16; S, 15.55; **deneysel**, C, 52.61; H, 4.60; N, 27.30; S, 15.45.

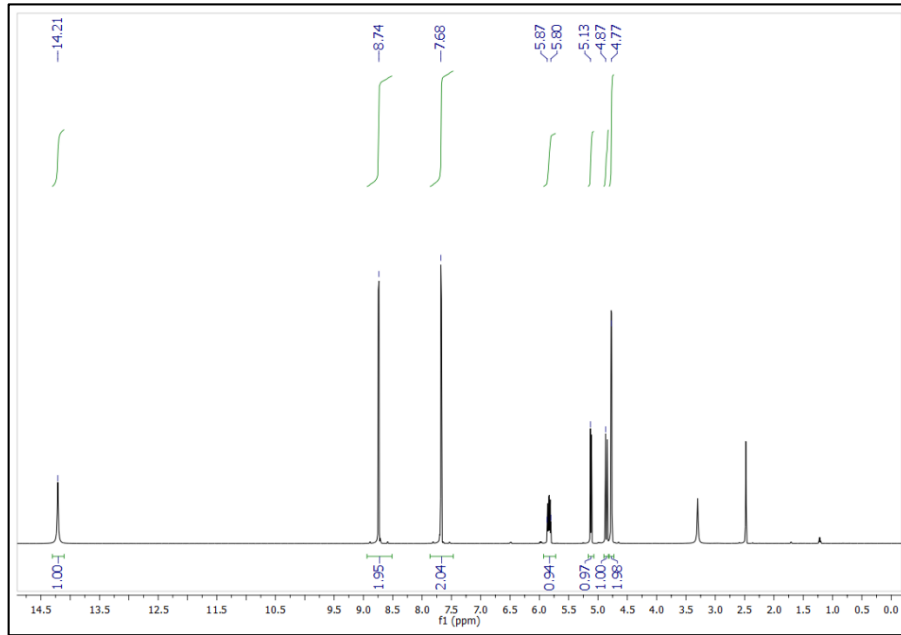
### 3.12 4-allyl-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1l)



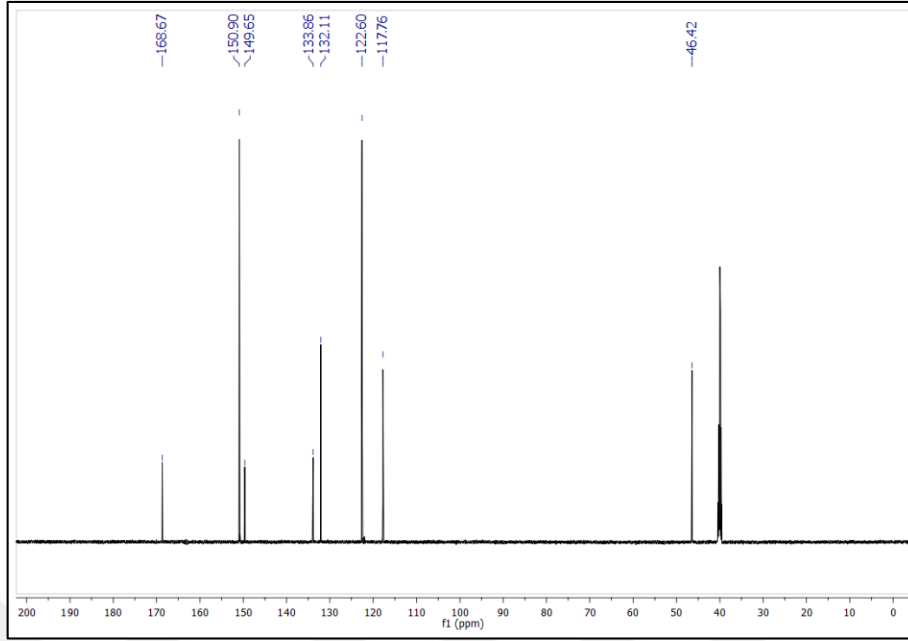
**11** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.12.1, Şekil 3.12.2 ve Şekil 3.12.3’de verilmiştir.



Şekil 3.12.1 11 molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



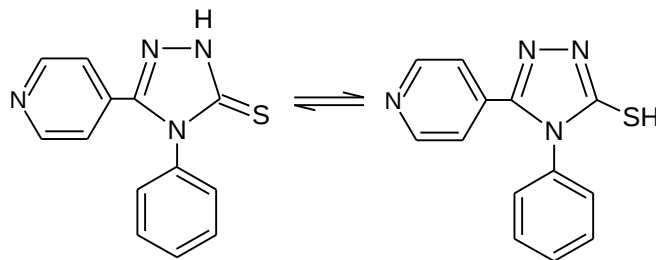
Şekil 3.12.2 11 molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



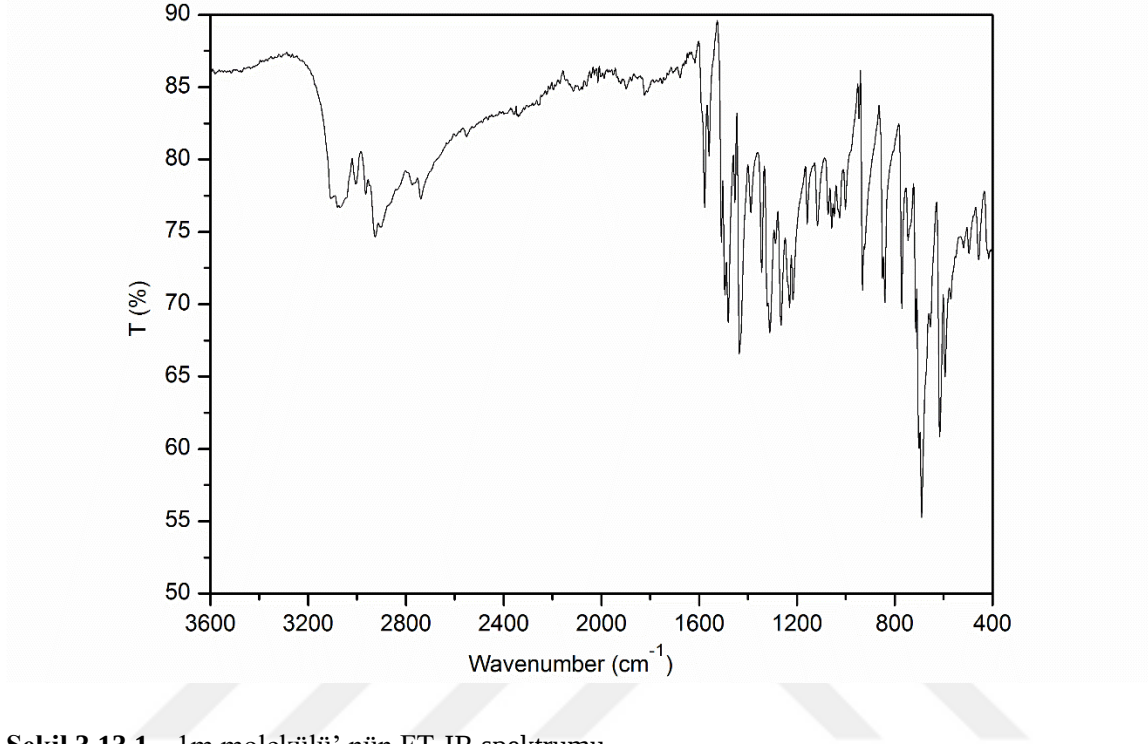
Şekil 3.12.3 1l molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 222-224 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3027-3102 (Ar-H), 2825-2975 (C-H), 1611 (C=N), 1559, 1267, 1057, 975 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 4.77 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 4.86 (d, 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans)  $J$  =17.3 Hz), 5.13 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>,  $J_{\text{cis}}$  = 10.5 Hz), 5.80-5.87 (ddt, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>,  $J_{\text{trans}}$  = 17.4 Hz,  $J_{\text{cis}}$  = 10.5 Hz  $J_{\text{CH}_2}$  = 4.9 Hz), 7.67 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 5.9 Hz), 8.67 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 5.9 Hz), 14.21 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 46.4, 117.6, 122.6, 132.1, 133.8, 149.6, 150.9, 167.8. **Molekül Ağırlığı:** 218 ( $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_4\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 55.02; H, 4.62; N, 25.67; S, 14.69; **deneysel,** C, 55.22; H, 4.51; N, 25.81; S, 14.59.

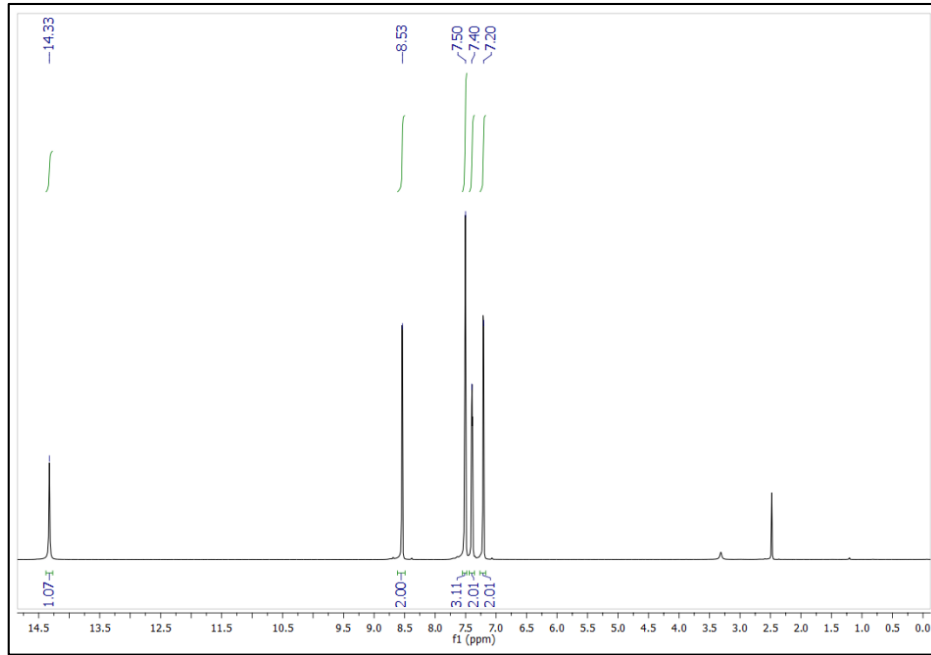
### 3.13 4-fenil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1m)



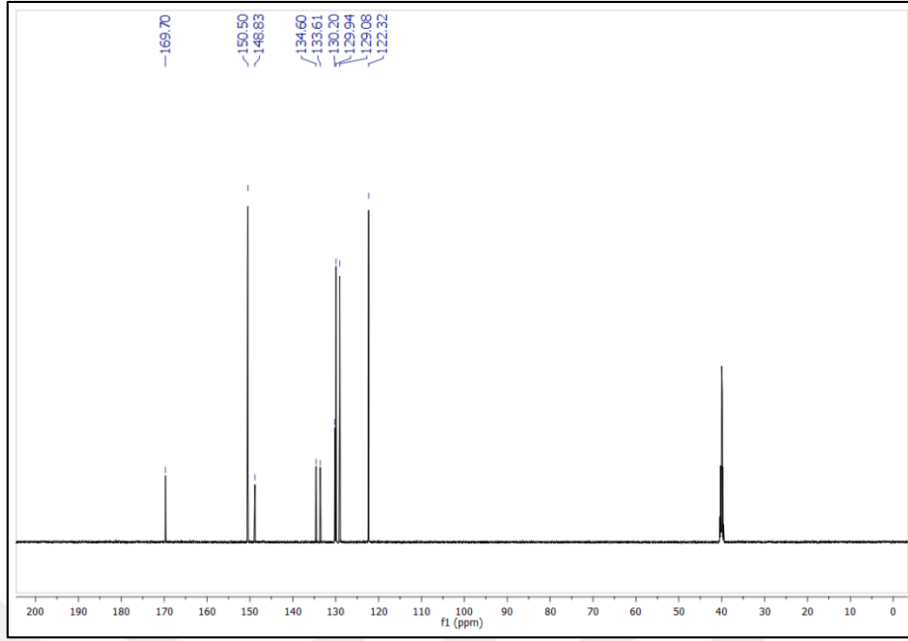
**1m** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.13.1, Şekil 3.13.2 ve Şekil 3.13.3’de verilmiştir.



Şekil 3.13.1 1m molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



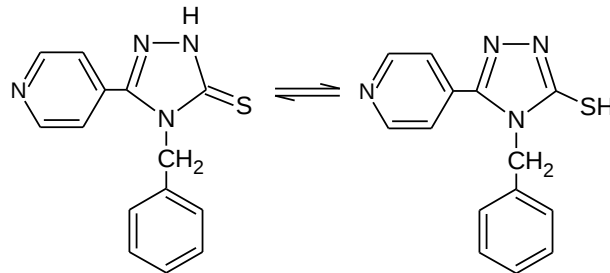
Şekil 3.13.2 1m molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



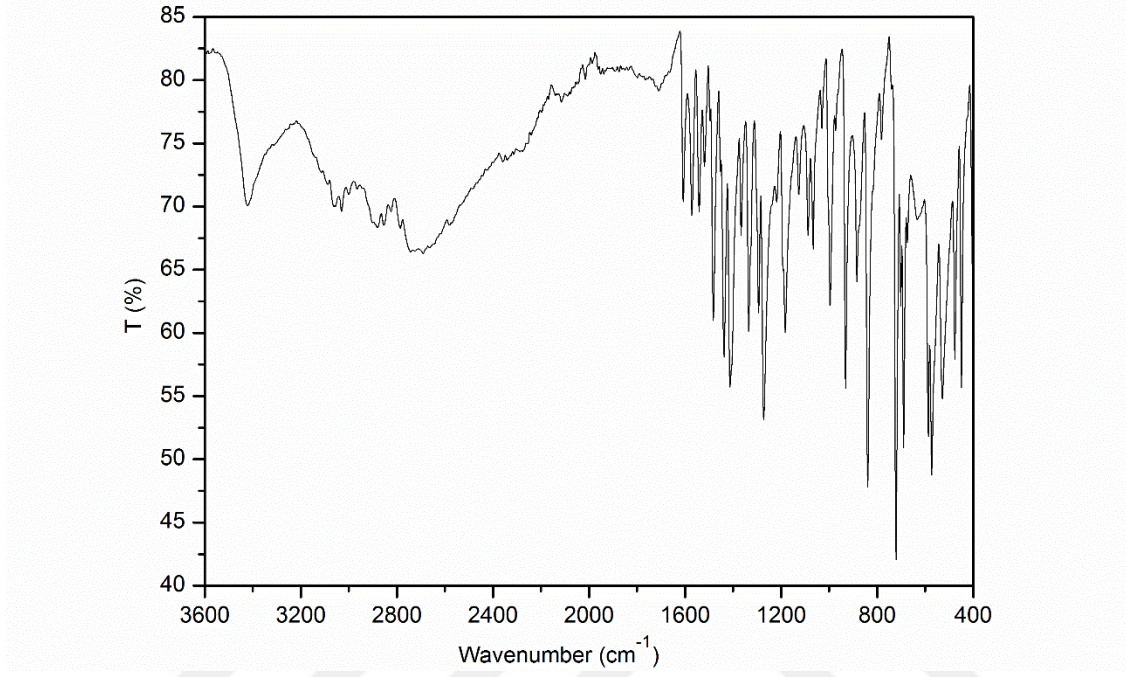
Şekil 3.13.3 1m molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 297-298 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3004-3102 (Ar-H), 1574 (C=N), 1516, 1268, 1059, 931 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 7.21 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.5$  Hz), 7.36-7.44 (m, 2H, Ar-H) 7.52-7.48 (m, 3H, Ar-H), 7.57 (m, 3H, Ar-H), 8.54 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.5$  Hz) 14.33 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 122.3, 129.0, 129.9, 130.2, 133.6, 134.6, 148.8, 150.5, 169.7. **Molekül Ağırlığı:** 243 ( $\text{C}_{13}\text{H}_{10}\text{N}_4\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 61.40; H, 3.96; N, 22.03; S, 12.61; **deneysel**, C, 61.20; H, 3.89; N, 22.12; S, 12.55.

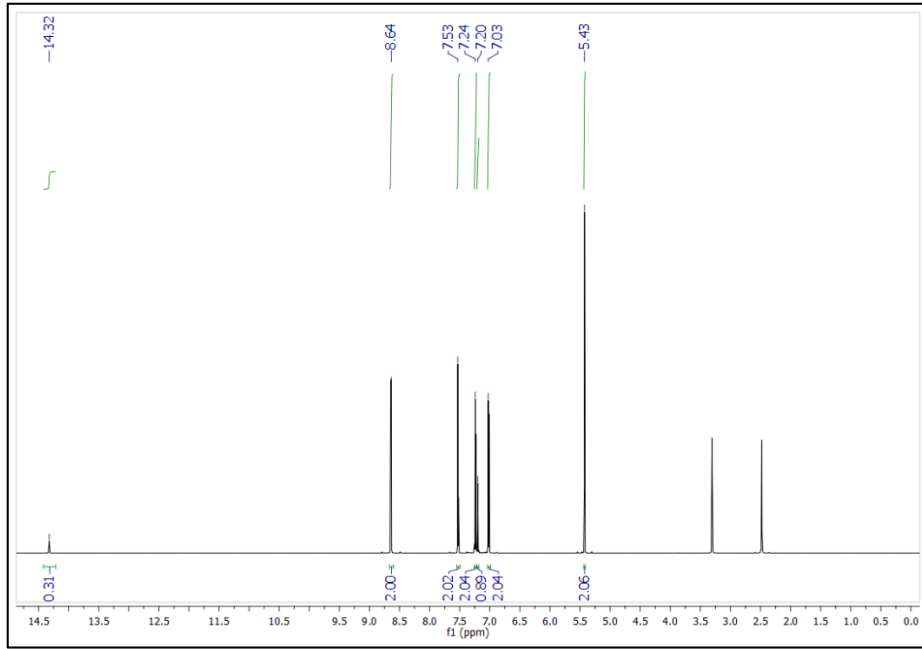
### 3.14 4-benzil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1n)



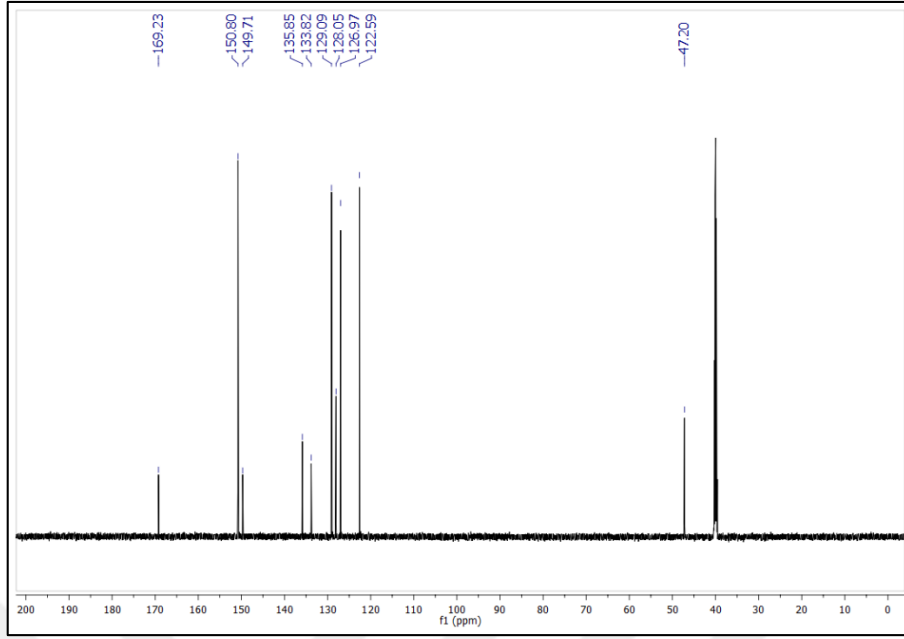
**1n** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.14.1, Şekil 3.14.2 ve Şekil 3.14.3’de verilmiştir.



Şekil 3.14.1 1n molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



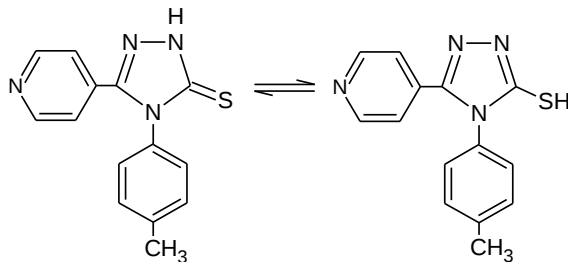
Şekil 3.14.2 1n molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



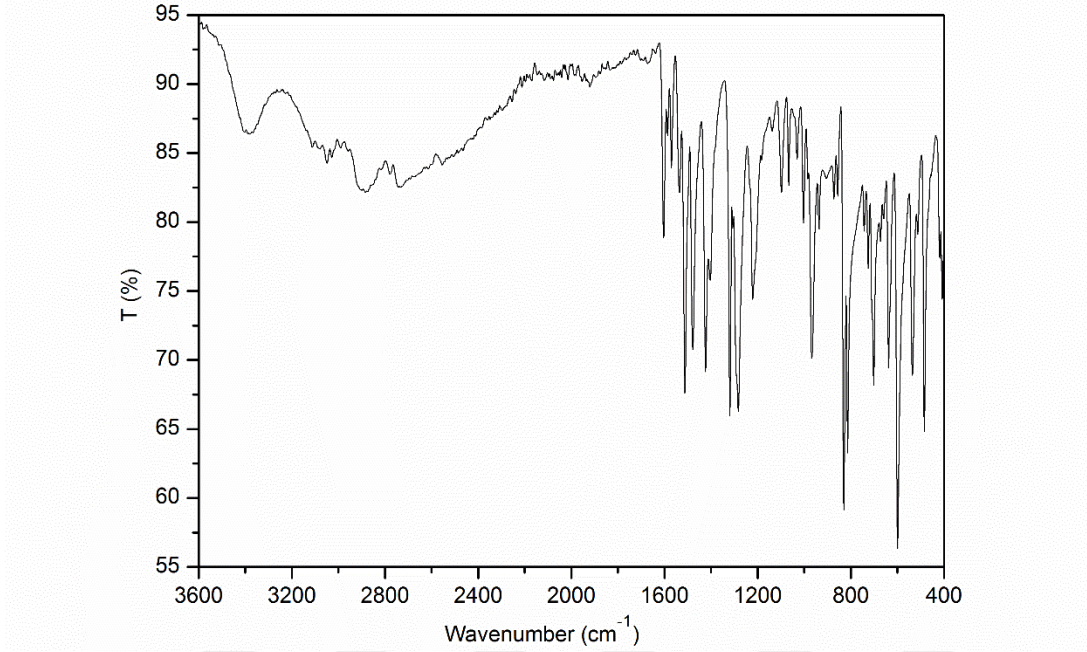
Şekil 3.14.3 1n molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 273-274 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3424 (N-H), 3019-3109 (Ar-H), 2825-2960 (C-H), 1611 (C=N), 1575, 1276, 1066, 999 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 5.43 (s, 2H, N- $\text{CH}_2$ - $\text{C}_6\text{H}_5$ ), 7.02 (d, 2H, Ar-H,  $J = 7.4$  Hz), 7.18–7.25 (m, 3H, Ar-H) 7.53 (d, 2H, Ar-H,  $J = 5.9$  Hz), 8.64 (d, 2H, Ar-H,  $J = 5.9$  Hz) 14.32 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 47.20, 122.6, 126.9, 128.0, 129.0, 133.8, 135.8, 149.7, 150.8, 169.2, **Molekül Ağırlığı:** 268 ( $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 62.66; H, 4.51; N, 20.88; S, 11.95; **deneysel,** C, 62.59; H, 4.32; N, 20.93; S, 11.87.

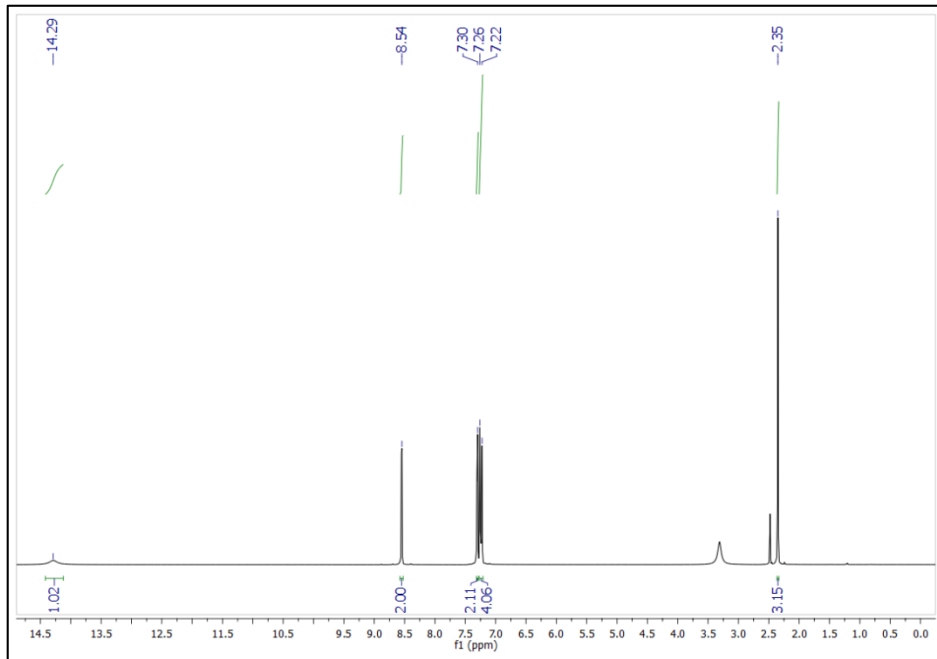
### 3.15 4-(*p*-tolil)-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1o)



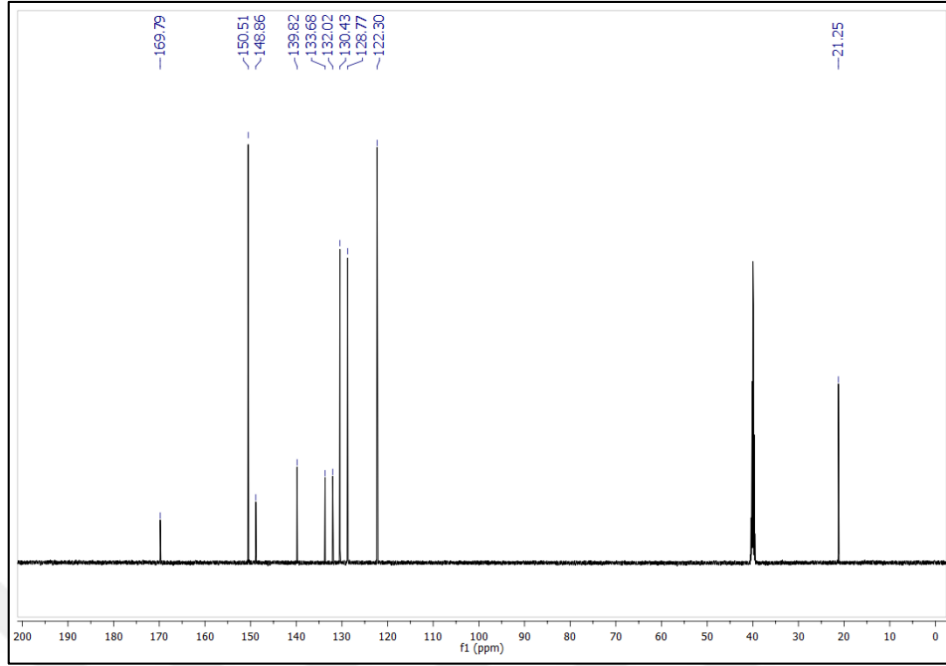
**1o** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.15.1, Şekil 3.15.2 ve Şekil 3.15.3’de verilmiştir.



Şekil 3.15.1 1o molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



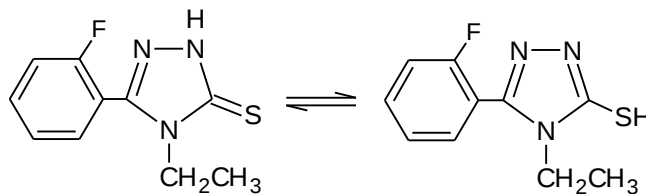
Şekil 3.15.2 1o molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



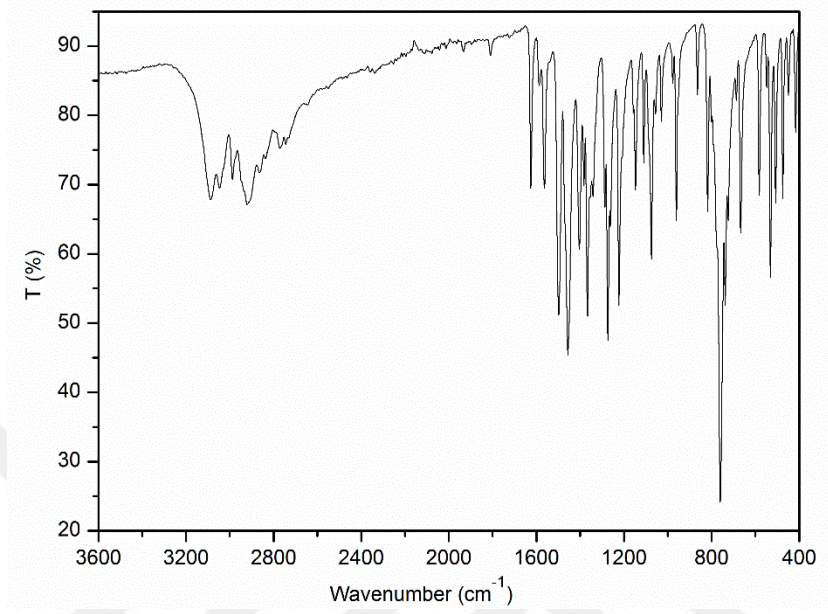
Şekil 3.15.3 1o molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 273-274 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3386 (N-H), 3026-3111 (Ar-H), 2817-2960 (C-H), 1607 (C=N), 1567, 1222, 1027, 960 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 2.35 (s, 3H,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3$ ), 7.23 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.8$  Hz), 7.25 (d, 1H, Ar-H,  $J = 8.1$  Hz), 7.30 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.0$  Hz), 8.55 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.8$  Hz), 14.29 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 21.2, 122.3, 128.7, 130.4, 132.0, 133.7, 139.8 148.9, 150.5, 169.8. **Molekül Ağırlığı:** 268 ( $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 62.66; H, 4.51; N, 20.88; S, 11.95; **deneysel**, C, 62.60; H, 4.63; N, 20.75; S, 11.80.

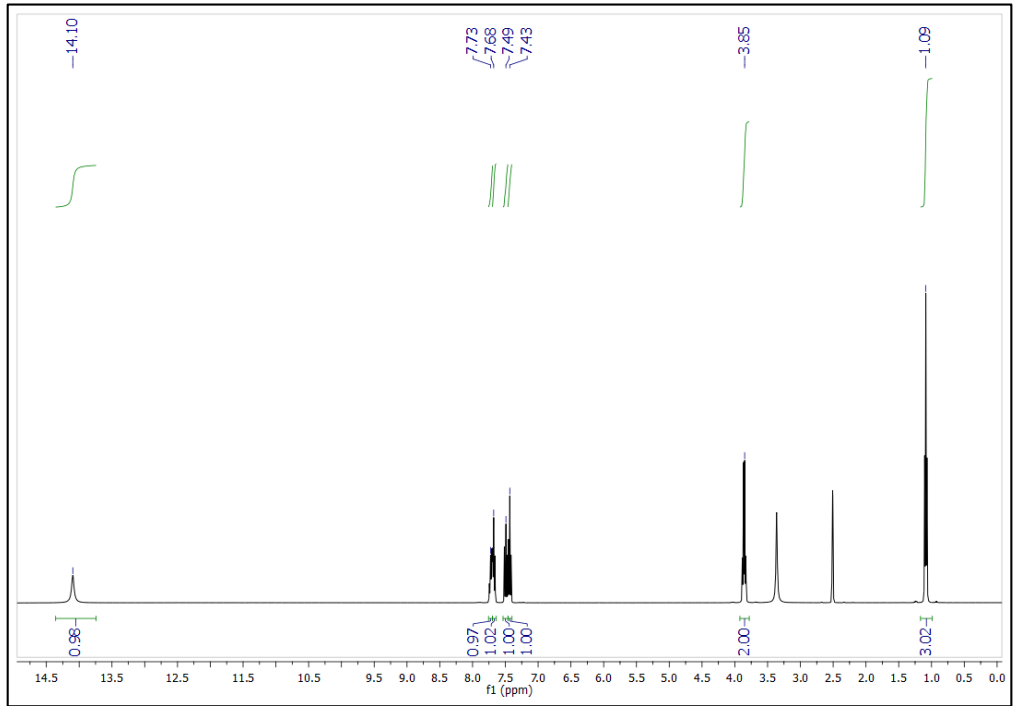
### 3.16 4-etil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1p)



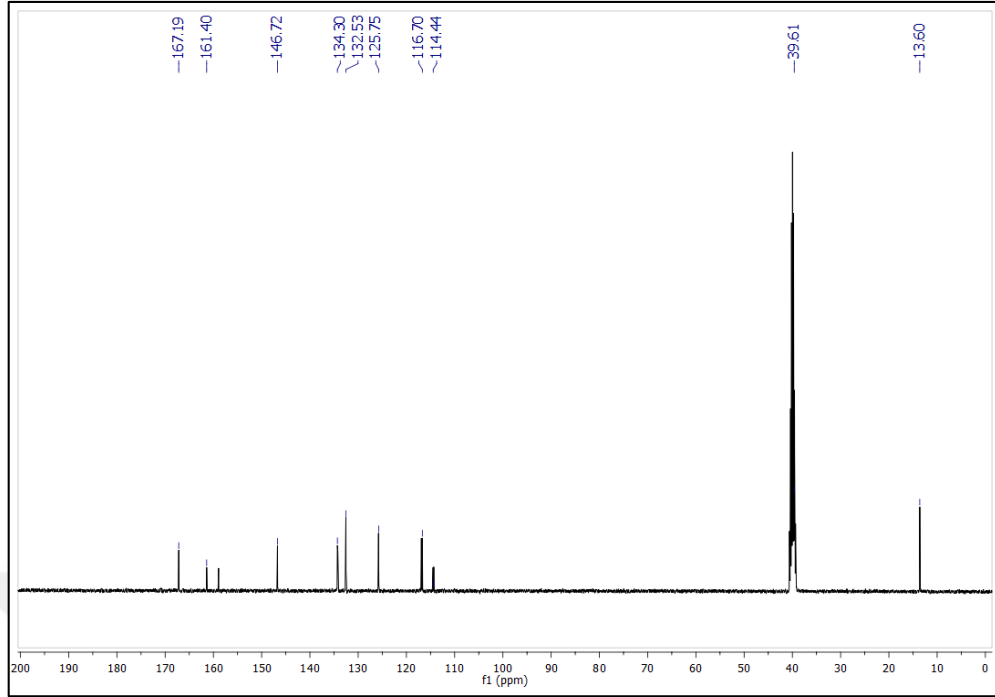
**1p** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.16.1, Şekil 3.16.2 ve Şekil 3.16.3’de verilmiştir.



Şekil 3.16.1 1p molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



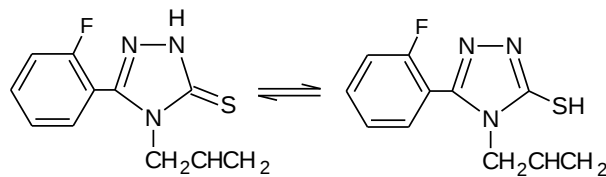
Şekil 3.16.2 1p molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



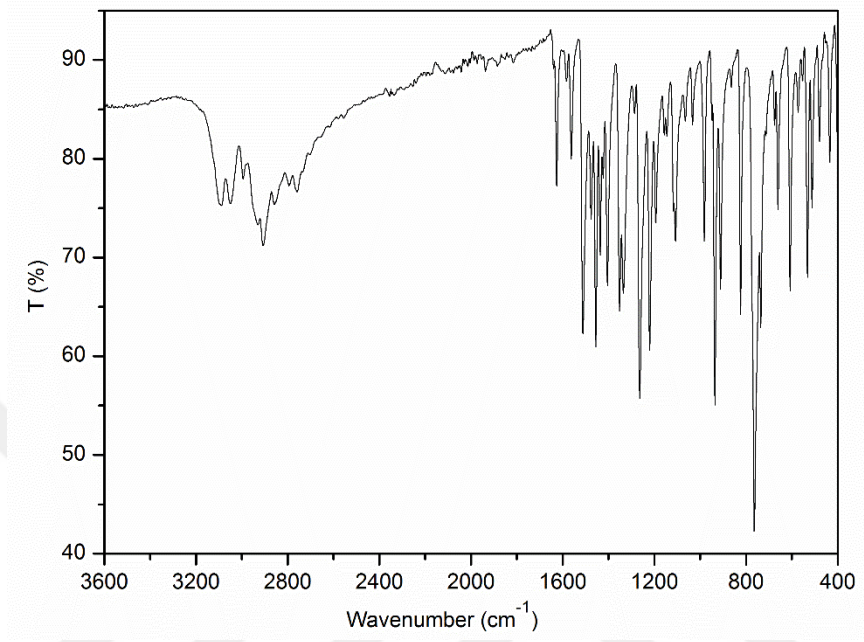
Şekil 3.16.3 1p molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 193-194 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3050-3100 (Ar-H), 2860-2984 (C-H), 1623 (C=N), 1227 (C-F), 1563, 1263, 1031, 964 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.09 (t, 3H, N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 7.1 Hz), 3.86 (q, 2H, -N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 7.1 Hz), 7.43 (t, 1H, Ar-H,  $J$  = 7.5 Hz), 7.49 (t, 1H, Ar-H,  $J$  = 7.5 Hz), 7.70 (dt, 2H, Ar-H,  $J$  = 7.3 Hz,  $J$  = 19.7 Hz), 14.10 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 13.6, 39.6, 114.4, 116.7, 125.7, 132.5, 134.3, 146.7, 161.4, 167.2. **Molekül Ağırlığı:** 223 (C $_{10}$ H $_{10}$ FN $_3$ S). **Elementel analiz (teorik):** C, 53.79; H, 4.51; N, 18.82; S, 14.36; **deneysel**, C, 53.70; H, 4.45; N, 18.85; S, 14.40.

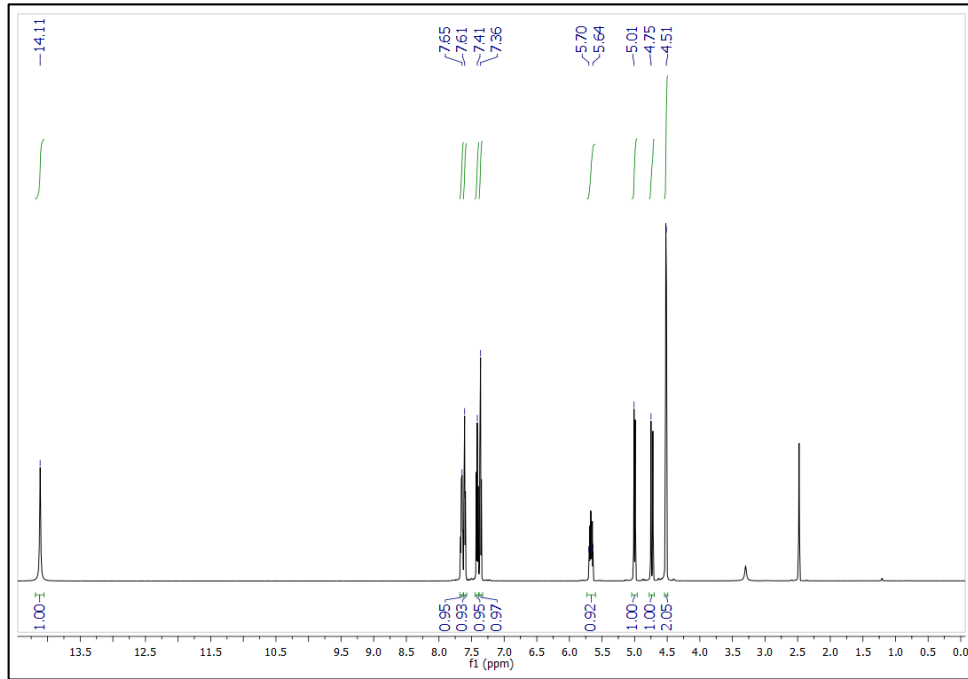
### 3.17 4-allyl-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1r)



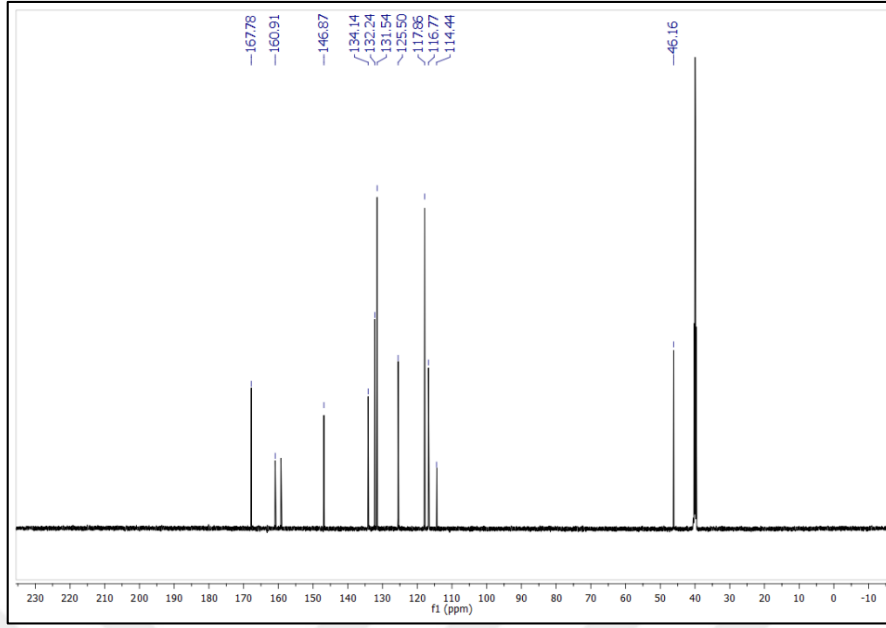
**1r** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.17.1, Şekil 3.17.2 ve Şekil 3.17.3’de verilmiştir.



Şekil 3.17.1 **1r** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



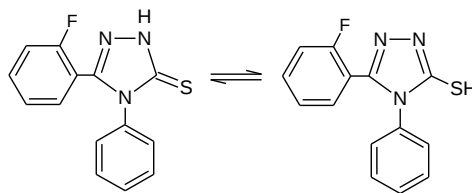
Şekil 3.17.2 **1r** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



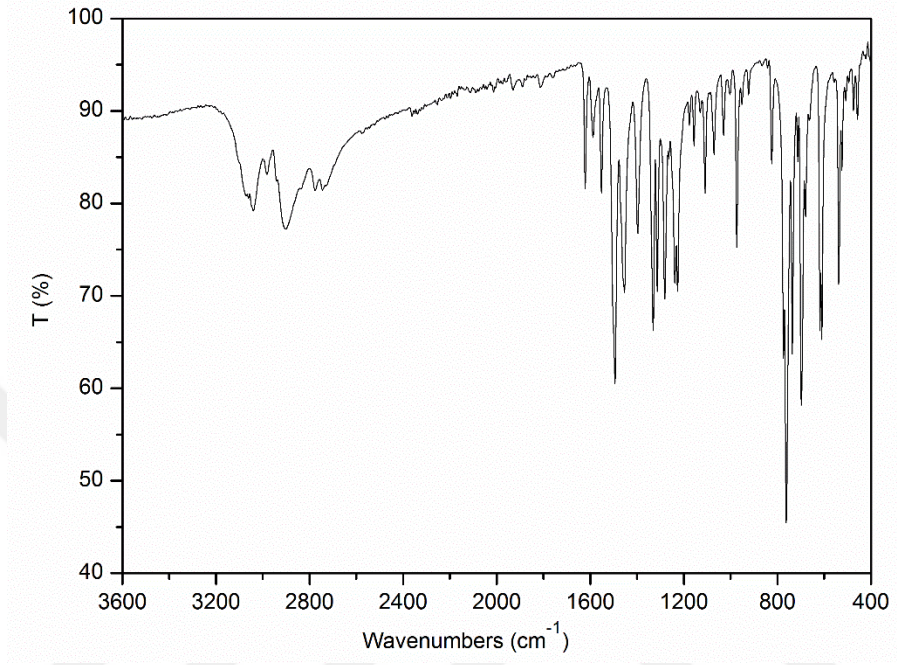
Şekil 3.17.3 1r molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 202-204 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3053-3098 (Ar-H), 2852-2992 (C-H), 1630 (C=N), 1226 (C-F), 1562, 1264, 1035, 979 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 4.52 (d, 2H, -N- $\underline{\text{CH}_2}$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ ,  $J = 5.0$  Hz), 4.73 (d, 1H, -N-CH $_2$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ (trans)  $J = 17.2$  Hz), 5.00 (d, 1H, N-CH $_2$ -CH- $\underline{\text{CH}_2}$ ,  $J_{\text{cis}} = 9.7$  Hz), 5.64-5.70 (ddt, 1H, N-CH $_2$ - $\underline{\text{CH}}$ -CH $_2$ ,  $J_{\text{trans}} = 17.2$  Hz,  $J_{\text{cis}} = 9.7$  Hz  $J_{\text{CH}_2} = 5.0$  Hz), 7.36 (t, 1H, Ar-H,  $J = 7.6$  Hz), 7.41 (t, 1H, Ar-H,  $J = 9.3$  Hz), 7.61 (t, 1H, Ar-H,  $J = 7.3$  Hz), 7.65 (d, 1H, Ar-H,  $J = 13.3$  Hz,  $J = 6.6$  Hz) 14.11 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 46.2, 114.4, 116.8, 117.9, 125.5, 131.5 132.2, 134.1, 146.9, 160.9, 167.8. **Molekül Ağırlığı:** 235 ( $\text{C}_{11}\text{H}_{10}\text{FN}_3\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 56.15; H, 4.28; N, 17.86; S, 13.63; **deneysel**, C, 56.23; H, 4.25; N, 17.82; S, 13.70.

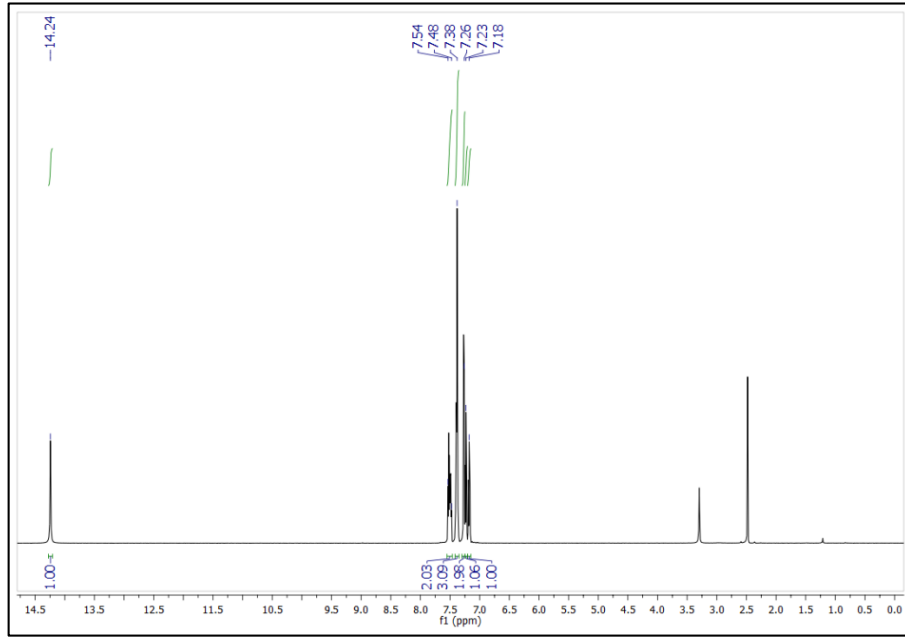
### 3.18 4-fenil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1s)



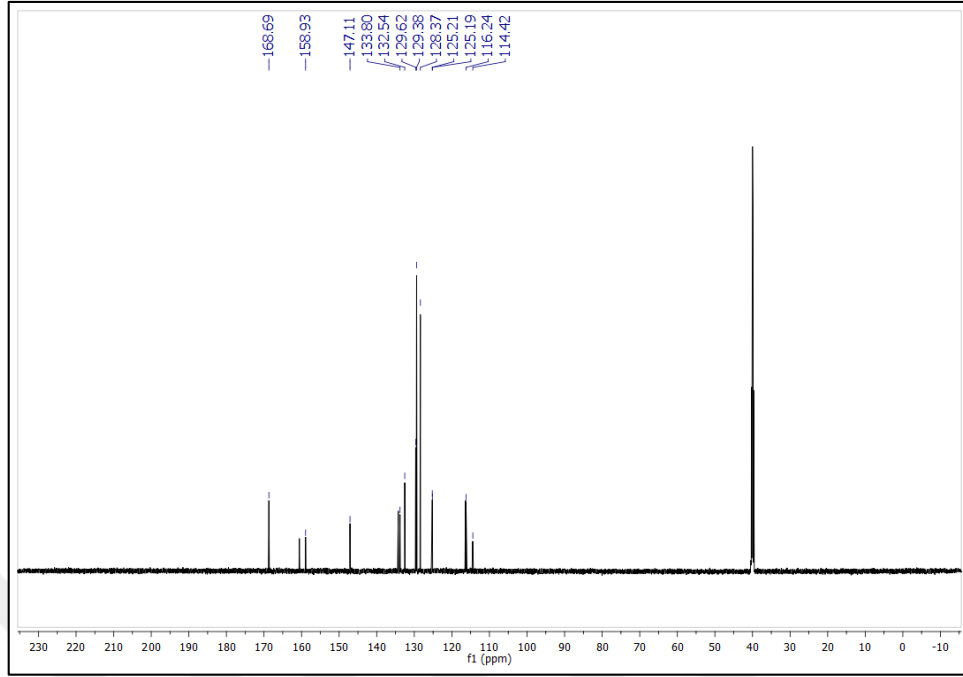
1s molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.18.1, Şekil 3.18.2 ve Şekil 3.18.3’de verilmiştir.



Şekil 3.18.1 1s molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



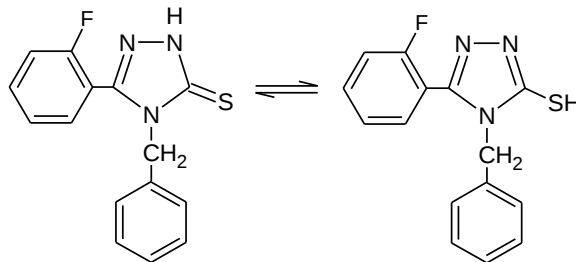
Şekil 3.18.2 1s molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



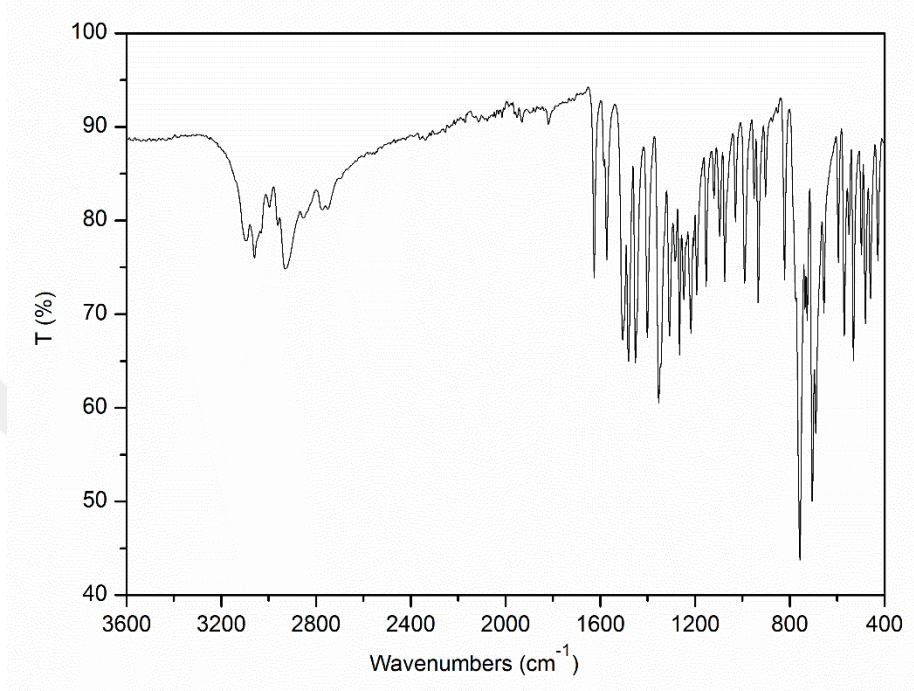
Şekil 3.18.3 1s molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 111-112 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2987-3088 (Ar-H), 1623 (C=N), 1226 (C-F), 1548, 1278, 1076, 971 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 7.18 (t, 1H, Ar-H,  $J = 9.2$  Hz), 7.23 (t, 1H, Ar-H,  $J = 7.6$  Hz), 7.27 (d, 2H, Ar-H,  $J = 7.4$  Hz), 7.36-7.40 (m, 3H, Ar-H) 7.48-7.54 (m, 2H, Ar-H), 14.24 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 114.4, 116.2, 125.2, 128.3, 129.3, 129.6, 132.5, 134.8, 147.1, 158.9, 168.7. **Molekül Ağırlığı:** 271 ( $\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{FN}_3\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 61.98; H, 3.72; N, 15.49; S, 11.82; **deneysel,** C, 61.70; H, 3.60; N, 15.55; S, 11.90.

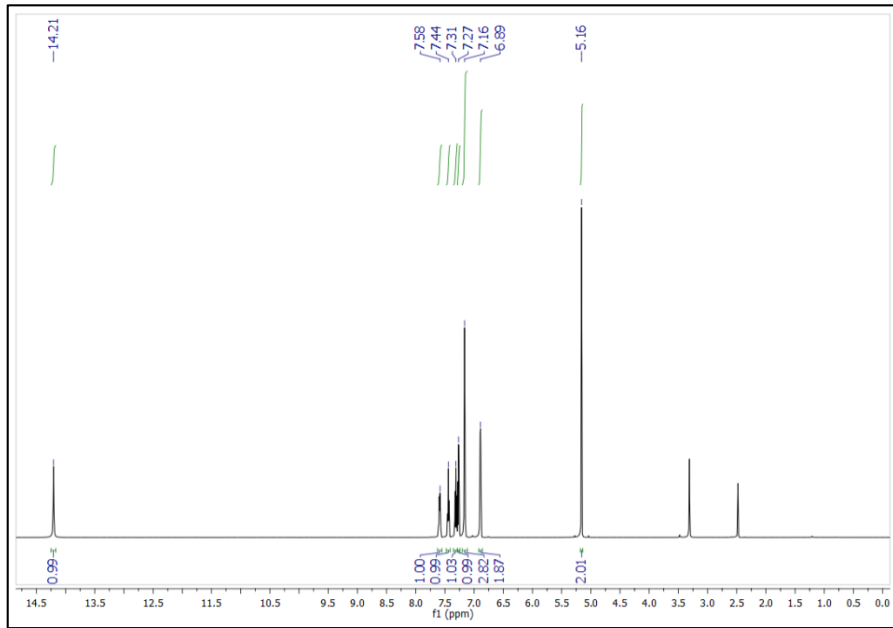
### 3.19 4-benzil-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1t)



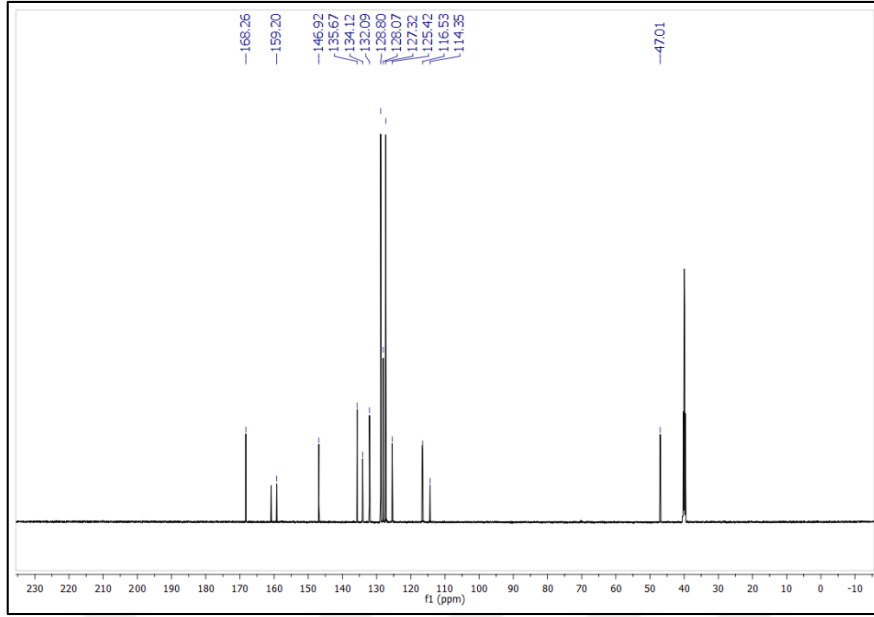
**1t** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.19.1, Şekil 3.19.2 ve Şekil 3.19.3’de verilmiştir.



**Şekil 3.19.1** 1t molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



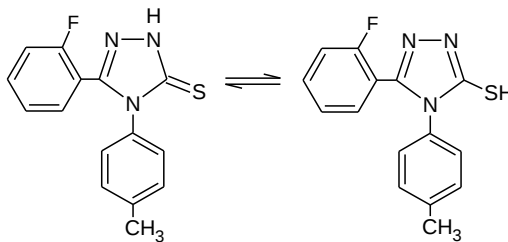
**Şekil 3.19.2** 1t molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



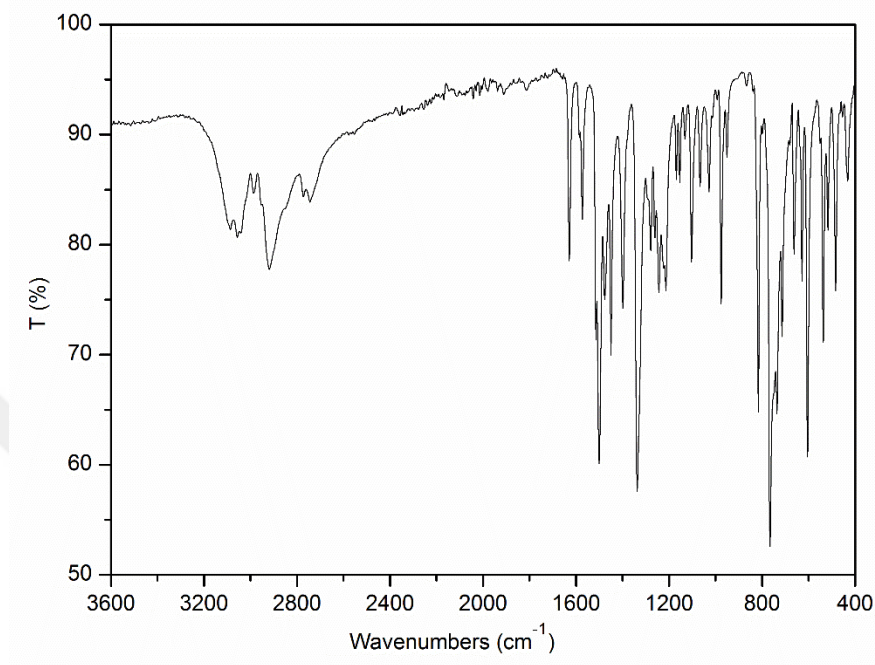
Şekil 3.19.3 1t molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 223-224 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3035-3103 (Ar-H), 2922-2998 (C-H), 1626 (C=N), 1241 (C-F) 1574, 1268, 1074, 990 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 5.16 (s, 2H, N- $\text{CH}_2$ - $\text{C}_6\text{H}_5$ ), 6.88-6.90 (m, 2H, Ar-H), 7.15–7.17 (m, 3H, Ar-H) 7.27 (t, 2H, Ar-H,  $J=7.6$  Hz), 7.31 (t, 1H, Ar-H,  $J = 9.2$  Hz), 7.44 (t, 1H, Ar-H,  $J = 7.3$  Hz), 7.59 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 14.1$  Hz,  $J = 7.0$  Hz), 14.21 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{DMSO-d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 47.0, 114.4, 116.5, 125.4, 127.3, 128.0, 128.8, 132.0, 134.1, 135.7, 146.9, 159.2, 168.3, **Molekül Ağırlığı:** 285 ( $\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{FN}_3\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 63.14; H, 4.24; N, 14.73; S, 11.24; **deneyisel,** C, 63.25; H, 4.20; N, 14.80; S, 11.40.

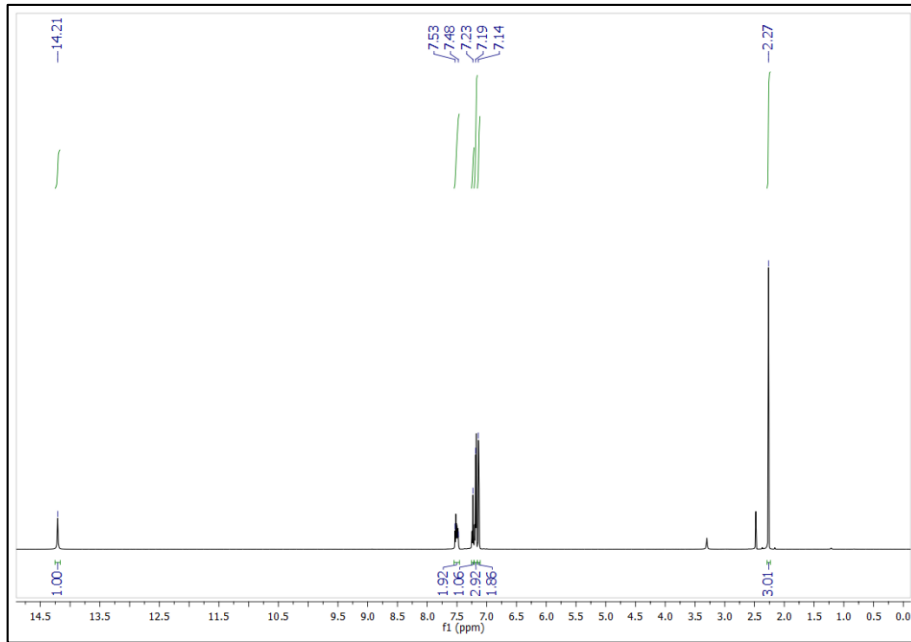
### 3.20 4-(*p*-tolil)-5-(2-florofenil)-2,4-dihidro-3*H*-1,2,4-triazol-3-tiyon'un Karakterizasyonu (1u)



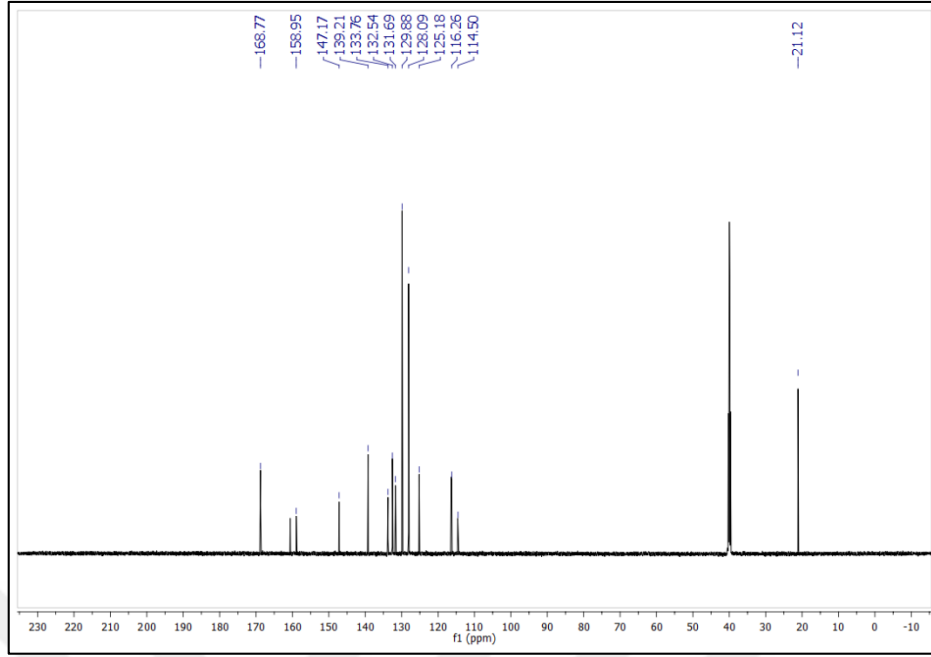
**1u** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.20.1, Şekil 3.20.2 ve Şekil 3.20.3’de verilmiştir.



Şekil 3.20.1 **1u** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



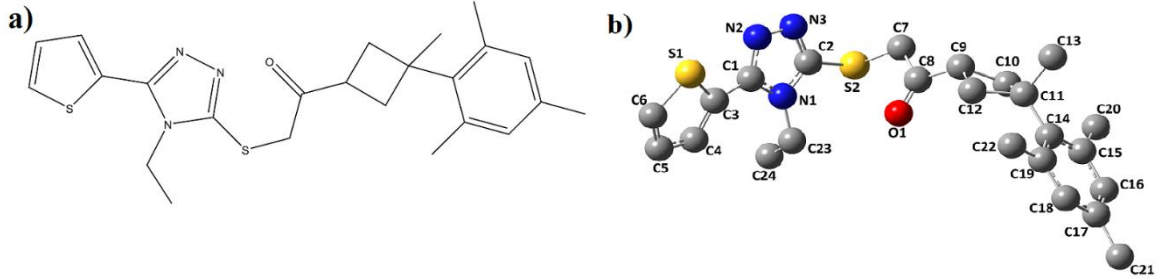
Şekil 3.20.2 **1u** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



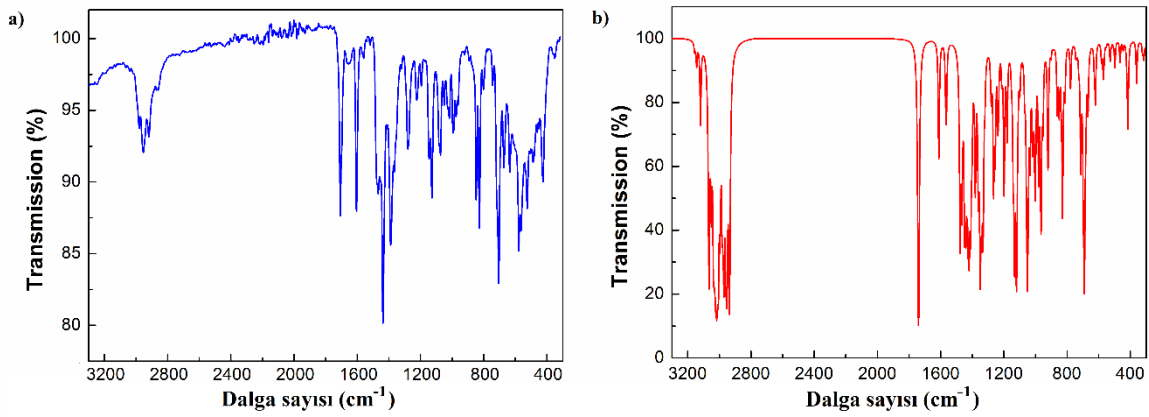
Şekil 3.20.3 1u molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 235-236 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 3042-3087 (Ar-H), 2922-2987 (C-H), 1626 (C=N), 1237 (C-F), 1575, 1246, 1030, 976 (N-C=S, I, II, III ve IV amit bantları );  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 2.27 (s, 3H,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_3$ ), 7.12–7.14 (m, 2H, Ar-H), 7.17–7.19 (m, 3H, Ar-H), 7.23 (t, 1H, Ar-H,  $J = 7.6$  Hz), 7.47-7.53 (m, 2H, Ar-H), 14.21 (s, 1H, SH);  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 21.1, 122.3, 114.5, 116.7, 125.2, 128.1, 129.9, 131.7, 132.5, 133.8, 139.2, 147.2, 158.9, 168.8. **Molekül Ağırlığı:** 285 ( $\text{C}_{15}\text{H}_{12}\text{FN}_3\text{S}$ ). **Elementel analiz (teorik):** C, 63.14; H, 4.24; N, 17.73; S, 11.24; **deneysel,** C, 63.25; H, 4.40; N, 17.61; S, 11.30.

**3.21 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il]sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2a)**



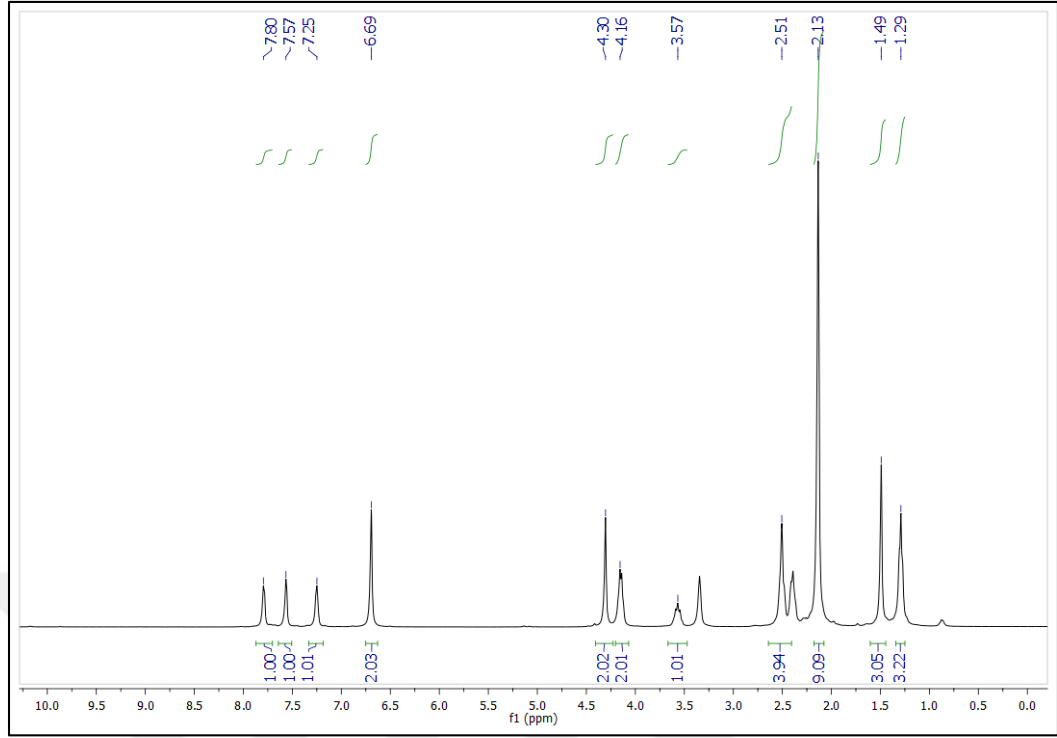
**Şekil 3.21.1** 2a molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b).



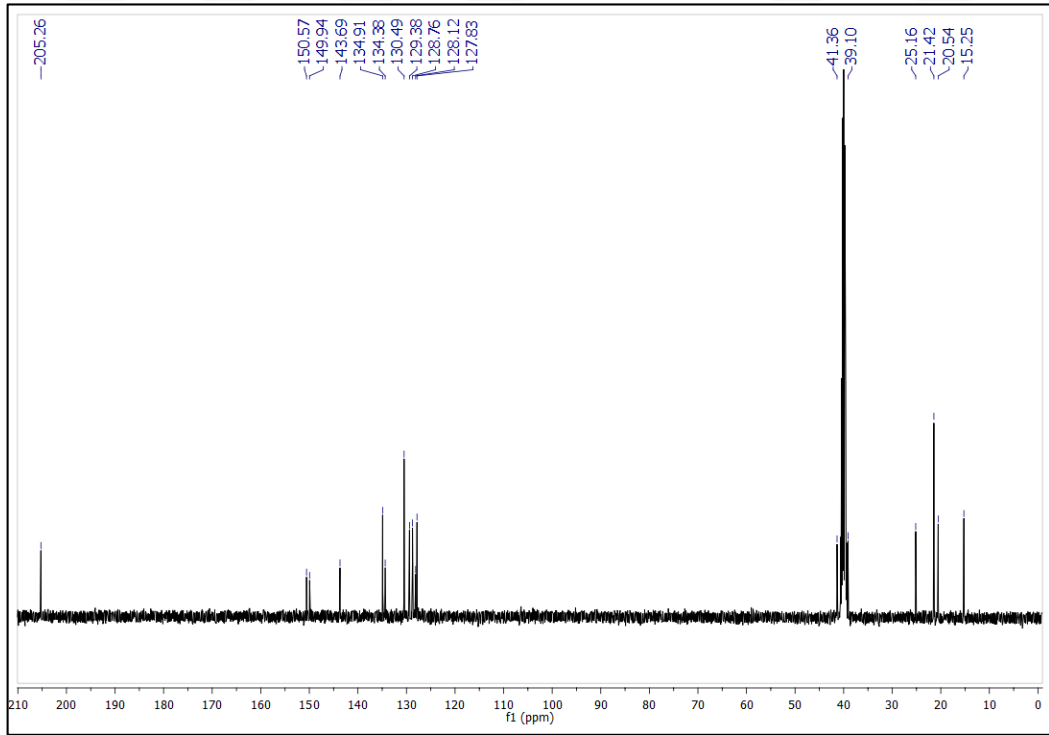
**Şekil 3.21.2** 2a molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b)

Şekil 3.21.1 de **2a** molekülün iki ve üç boyuttaki gösterimleri verilmiştir. Üç boyuttaki gösterimde başlangıç geometrisi Gaussview programı ile çizilmiş ve B3LYP/cc-pVDZ yaklaşımı ile molekülün enerjisinin minimum olduğu optimize yapı elde edilmiştir. Şekil 3.21.2 de molekülün deneysel FT-IR ve hesaplamalar sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulan simüle IR spektrumu verilmiştir. Simüle spektrumun eldesinde B3LYP/cc-pVDZ yöntemi kullanılmış ve elde edilen değerler 0.9701 ile çarpılarak ölçeklendirilmiştir.

Molekülün deneysel olarak elde edilen  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumları şekil 3.21.3 ve 3.21.4 de verilmiştir.



Şekil 3.21.3 2a molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



Şekil 3.21.4 2a molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 118.6 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 2925-3030 (Ar-H), 2920-2942 (C-H), 1712 (C=O), 1480 (C=N), 1126 (N-N), 1011 (C-S), 795 (C-S-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 1.29 (t, 3H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>, *J* = 5.9 Hz), 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.13 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.40-2.60 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.57 (p, 1H, -CH- (siklobütan), *J* = 8.80 Hz), 4.16 (q, 2H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>, *J* = 7.2 Hz), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.69 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.25 (dd, 1H, Ar-H, *J* = 4.0, 4.8 Hz), 7.57 (d, 1H, Ar-H, *J* = 3.2 Hz), 7.80 (d, 1H, Ar-H, *J* = 4.8 Hz), **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 15.2, 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.4, 127.8, 128.1, 128.8, 129.3, 130.5, 134.4, 134.9, 143.7, 149.9, 150.6, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 439.6 (C<sub>24</sub>H<sub>29</sub>N<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 62.96; H, 6.49; N, 9.18; S, 14.01; **deneysel,** C, 62.85; H, 6.61; N, 9.30; S, 14.20.

**Tablo 3.21.1** 2a molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri.

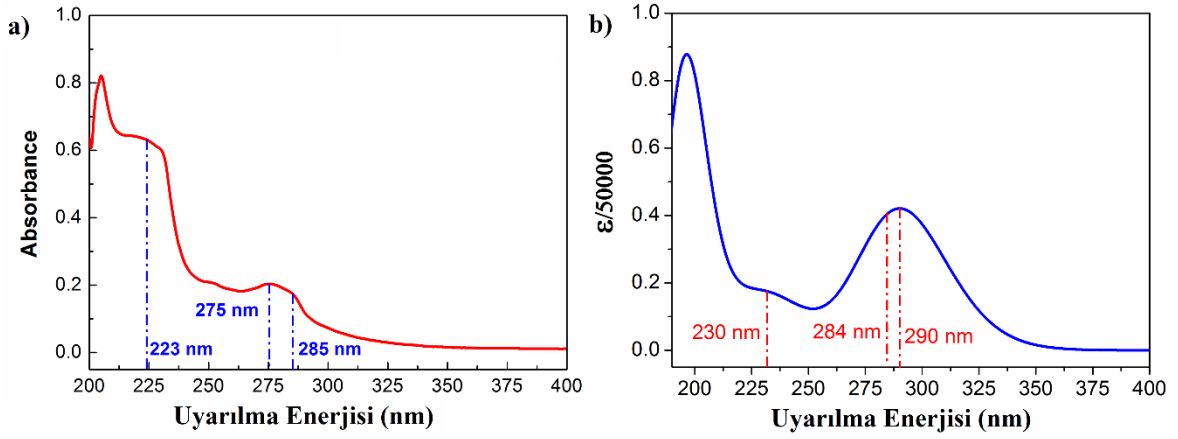
| Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ | Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ |
|------|------------------------------------|-----------------------------|------|------------------------------------|-----------------------------|
| C1   | 149.9                              | 141.1                       | C21  | 12.8                               | 12.1                        |
| C2   | 150.6                              | 145.9                       | C22  | 15.2                               | 13.9                        |
| C3   | 134.9                              | 128.3                       | C23  | 35.2                               | 33.6                        |
| C4   | 119.1                              | 112.9                       | C24  | 9.2                                | 8.3                         |
| C5   | 127.9                              | 115.6                       | H4   | 7.57                               | 7.75                        |
| C6   | 129.4                              | 123.4                       | H5   | 7.26                               | 7.59                        |
| C7   | 41.3                               | 44.9                        | H6   | 7.81                               | 7.90                        |
| C8   | 205.3                              | 197.9                       | H7   | 4.15                               | 4.46 <sup>a</sup>           |
| C9   | 40.3                               | 32.3                        | H9   | 3.58                               | 3.56                        |
| C10  | 41.34                              | 36.8                        | H10  | 2.74                               | 2.83 <sup>a</sup>           |
| C11  | 40.5                               | 36.2                        | H12  | 2.51                               | 2.28 <sup>a</sup>           |
| C12  | 32.3                               | 29.2                        | H13  | 1.50                               | 1.92 <sup>a</sup>           |
| C13  | 15.2                               | 15.8                        | H16  | 6.71                               | 7.19                        |
| C14  | 143.7                              | 134.9                       | H18  | 6.71                               | 7.22                        |
| C15  | 134.4                              | 126.9                       | H20  | 2.52                               | 2.50 <sup>a</sup>           |
| C16  | 129.4                              | 119.4                       | H21  | 2.52                               | 2.66 <sup>a</sup>           |
| C17  | 130.5                              | 126.2                       | H22  | 2.52                               | 2.58 <sup>a</sup>           |
| C18  | 128.8                              | 119.3                       | H23  | 4.32                               | 5.10 <sup>a</sup>           |
| C19  | 134.9                              | 127.2                       | H24  | 1.63                               | 1.97 <sup>a</sup>           |
| C20  | 15.1                               | 13.7                        |      |                                    |                             |

\* Ortalama

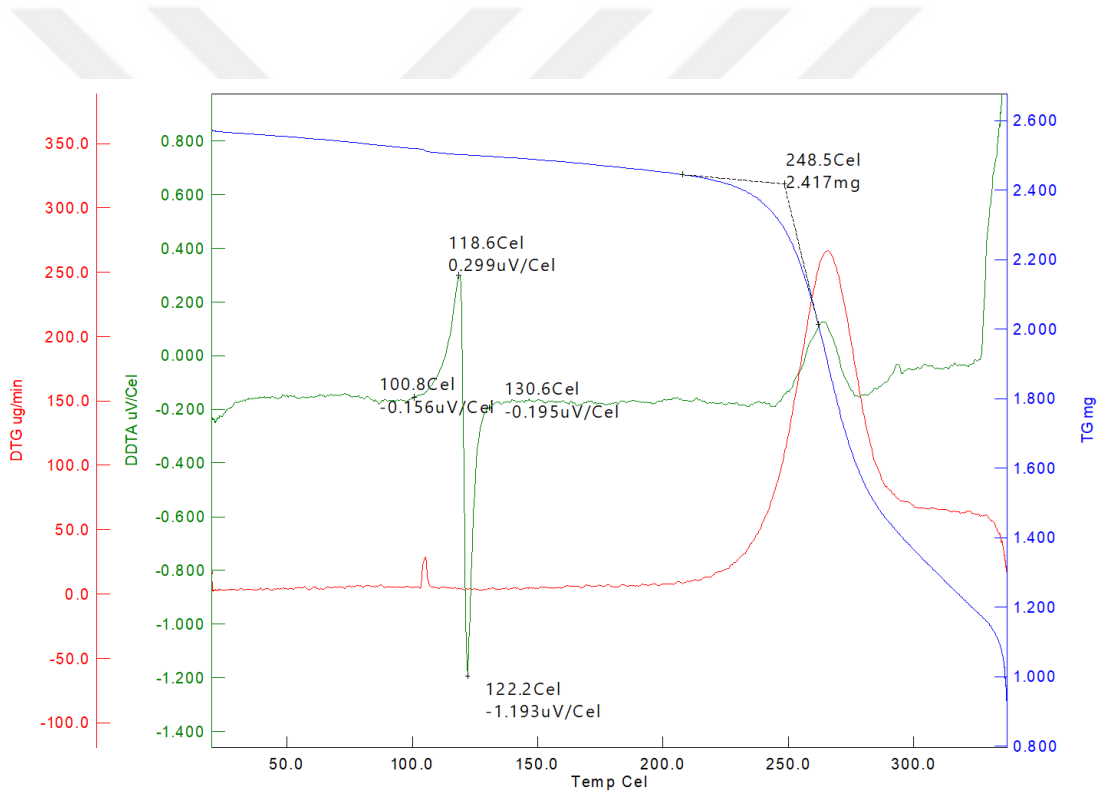
**Tablo 3.21.2** 2a molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları.

| Titreşim Modları                                   | Deneysel | B3LYP/cc-pVDZ |
|----------------------------------------------------|----------|---------------|
| $\nu_s(\text{C-H})$ R1                             | 3030     | 3155          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                          | -        | 3142          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                          | 3020     | 3118          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R2                             | 3000     | 3066          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R2                          | -        | 3064          |
| $\nu_{as}(\text{C-H2})$ R3                         | 2975     | 3050          |
| $\nu_{as}(\text{C-H2})$ R4                         | 2960     | 3049          |
| $\nu_{as}(\text{C-H2})$ ethanon                    | 2942     | 3009          |
| $\nu_s(\text{C-H3})$ R4                            | 2925     | 2996          |
| $\nu_{as}(\text{C-H2})$ R3                         | -        | 2976          |
| $\nu_s(\text{C-H2})$ R3                            | -        | 2970          |
| $\nu_s(\text{C-H2})$ ethanon                       | 2920     | 2959          |
| $\nu_s(\text{C-H3})$ R2                            | -        | 2951          |
| $\nu_s(\text{C-H3})$ R3                            | -        | 2937          |
| $\nu_s(\text{C=O})$                                | 1712     | 1739          |
| $\nu(\text{C=C})$ R2                               | 1635     | 1611          |
| $\nu(\text{C=C})$ R1                               | 1597     | 1562          |
| $\nu(\text{C=N})$ triazol + $\nu(\text{C=C})$ R1   | 1480     | 1541          |
| $\omega(\text{C-H3})$ R2 + $\gamma(\text{C-H})$ R2 | 1475     | 1464          |
| $\alpha(\text{C-H2})$ R4                           | 1457     | 1448          |
| $\alpha(\text{C-H2})$ R3                           | 1445     | 1434          |
| $\alpha(\text{C-H3})$ R2                           | 1432     | 1427          |
| $\omega(\text{C-H3})$ R2                           | 1394     | 1363          |
| $\gamma(\text{C-H})$ R1                            | 1202     | 1198          |
| $\nu(\text{N-N})$                                  | 1126     | 1097          |
| $\nu(\text{C-C})$ R4                               | 1075     | 1050          |
| $\nu(\text{C-S})$ R1                               | 1011     | 920           |
| $\beta(\text{C-H})$ R1                             | 986      | 890           |
| $\beta(\text{C-H})$ R2                             | 973      | 865           |
| $\beta(\text{C-H})$ R3                             | 948      | 850           |
| $\nu(\text{C-S-C})$                                | 795      | 725           |

$\nu$ , gerilme;  $\alpha$ , makaslama;  $\gamma$ , sallanma;  $\omega$ , dalgalanma; s, simetrik; as, asimetrik;  
 $\beta$ , burkulma;  $\delta$ , düzlem dışı burkulma R1; tiyen halkası; R2; mezitilen halkası;  
R3; siklobütan halkası; R4; etil grubu.



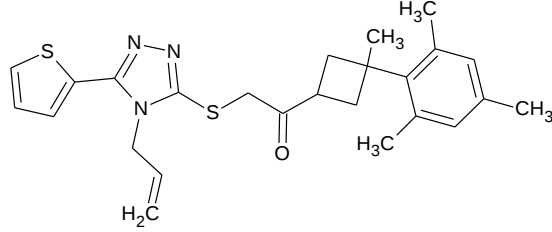
Şekil 3.21.5 2a molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b)



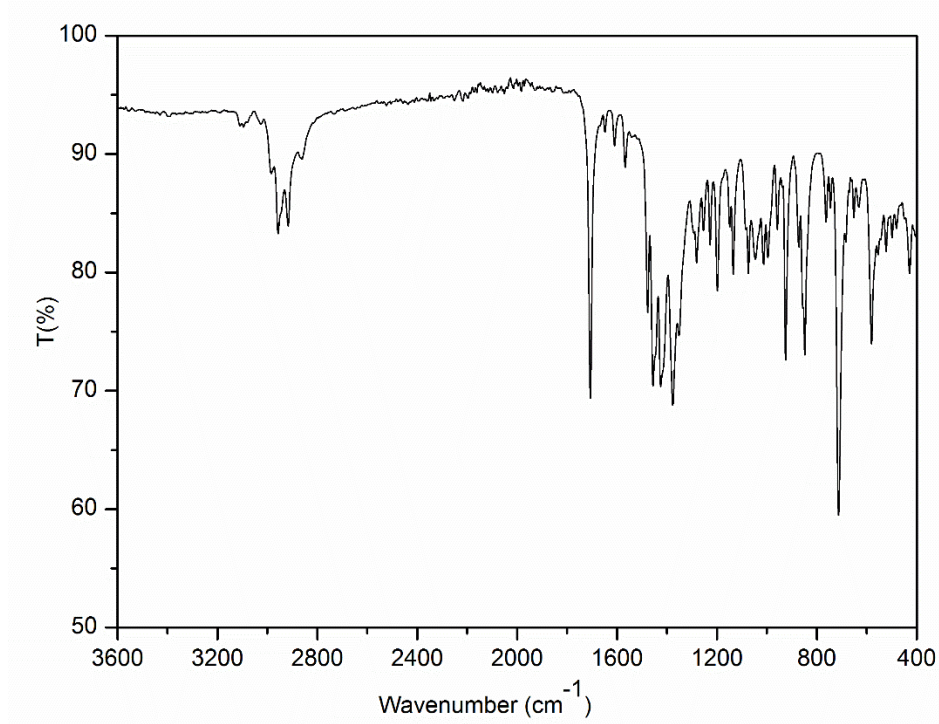
Şekil 3.21.6 2a molekülünün termogravimetrik analiz sonucu.

Şekil 3.21.5 te görüldüğü üzere **2a** molekülünün başlıca üç tane absorbands piki bulunmaktadır. Yapılan hesaplamalar sonucunda 285 nm deki pikin HOMO→LUMO geçişine ait olduğu bulunmuştur. Şekil 3.21.6 incelendiğinde 2a molekülünün 118.6 °C de eridiği ve 248.5 °C de bozunduğu görülmektedir.

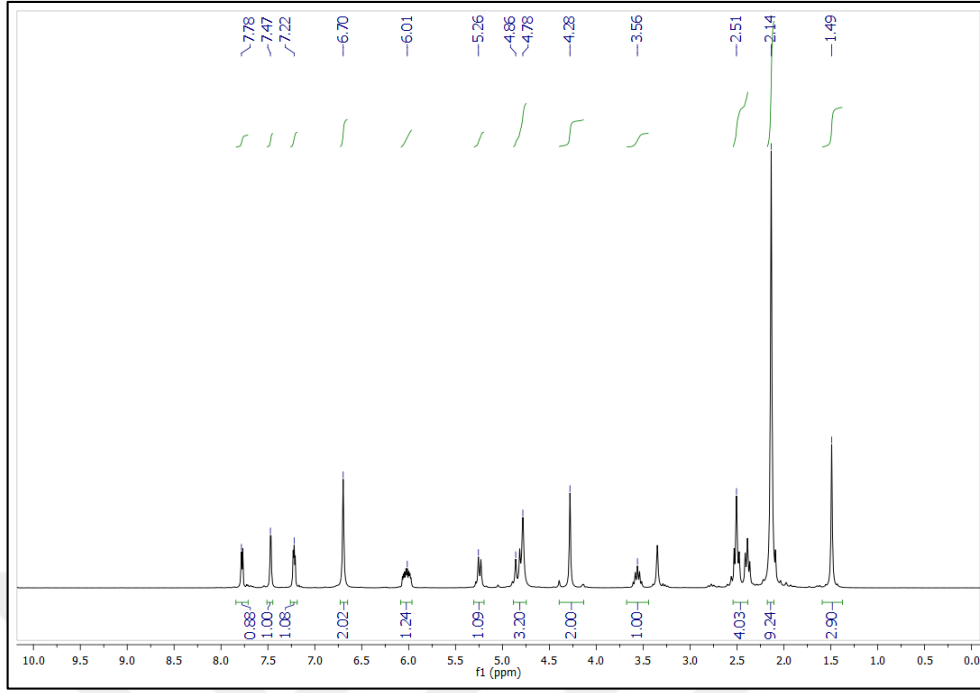
**3.22 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2b)**



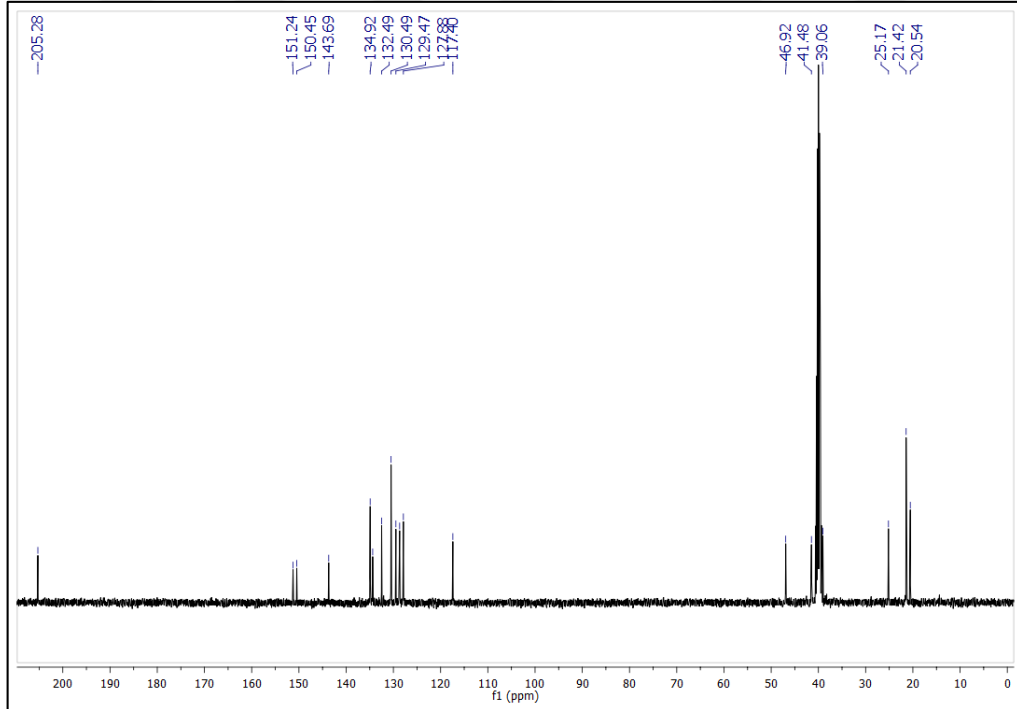
**2b** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.22.1, Şekil 3.22.2 ve Şekil 3.22.3’de verilmiştir.



**Şekil 3.22.1** 2b molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



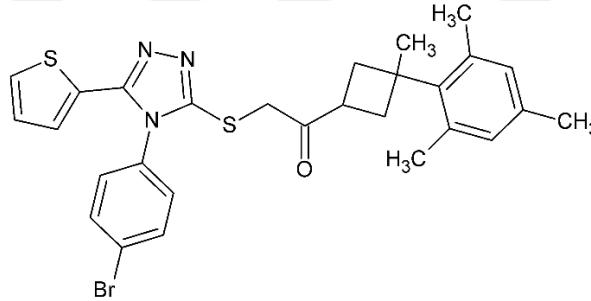
Şekil 3.22.2 2b molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



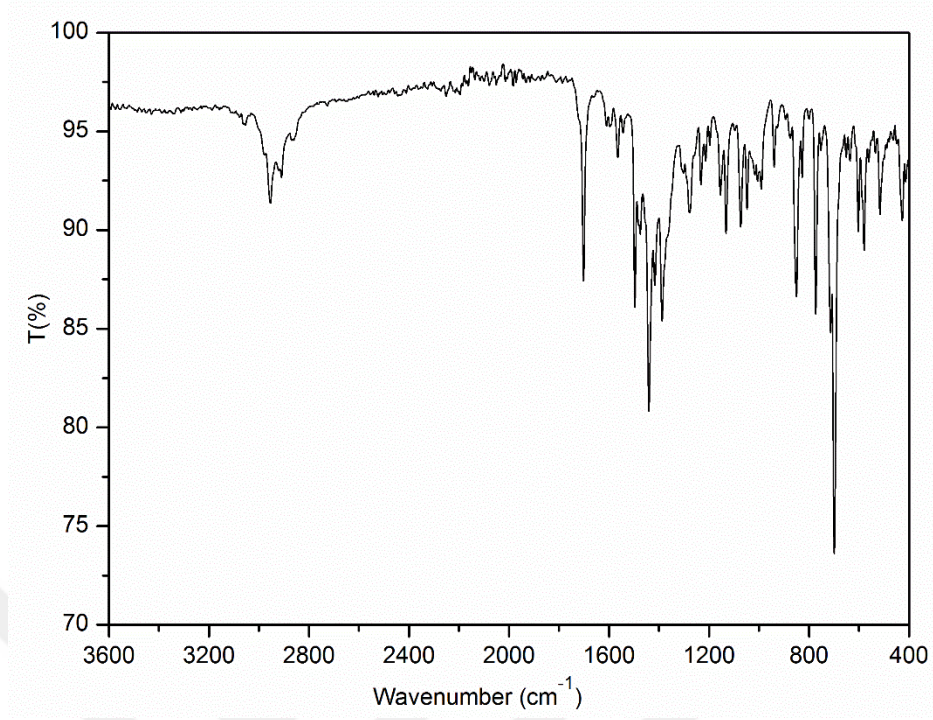
Şekil 3.22.3 2b molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 110-112 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>,  $\nu$ ):** 2950-3035 (Ar-H), 2862-2914 (C-H), 1709 (C=O), 1475 (C=N), 1132 (N-N), 1014 (C-S), 760 (C-S-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.38-2.53 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.56 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.78$  Hz), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 4.78-4.86 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), ve 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans)), 5.24 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>,  $J_{cis} = 10.6$  Hz), 5.97-6.06 (m, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 6.70 (s, 2H, Ar-H), 7.22 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 2.5, 5.4$  Hz), 7.47 (d, 1H, Ar-H,  $J = 2.5$  Hz) 7.78 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.4$  Hz), **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.4, 46.9, 117.4, 127.9, 130.5, 132.5, 134.9, 143.7, 150.5, 151.2, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 451.6 (C<sub>25</sub>H<sub>29</sub>N<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 66.48; H, 6.47; N, 9.30; S, 14.20; **deneysel,** C, 66.55; H, 6.40; N, 9.40; S, 14.35.

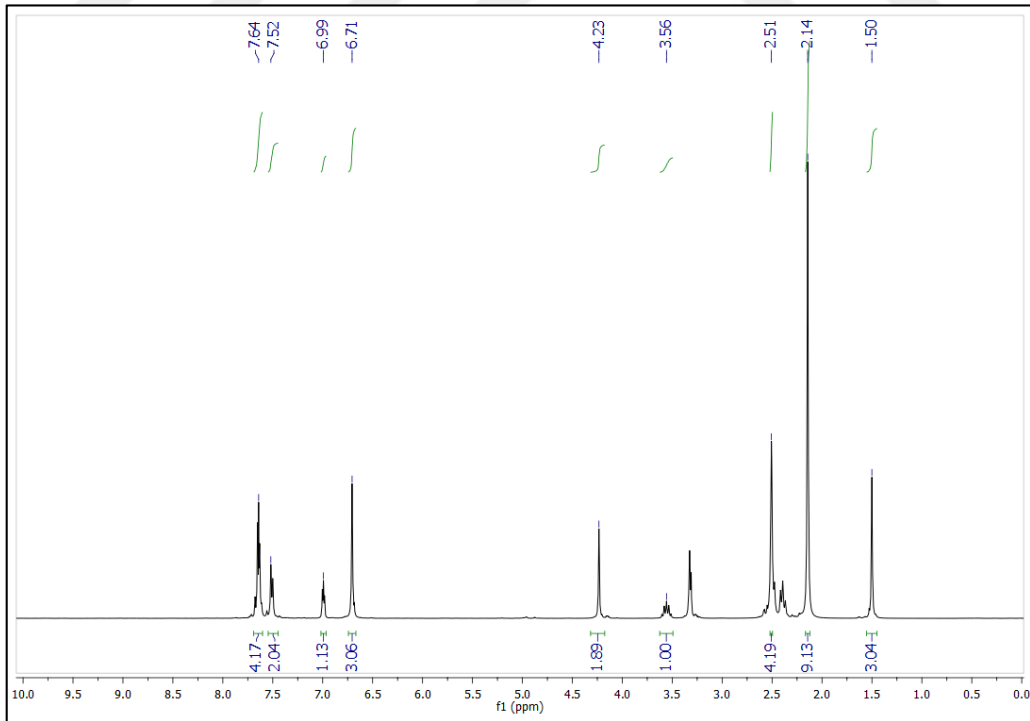
### 3.23 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütıl-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-bromofenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2c)



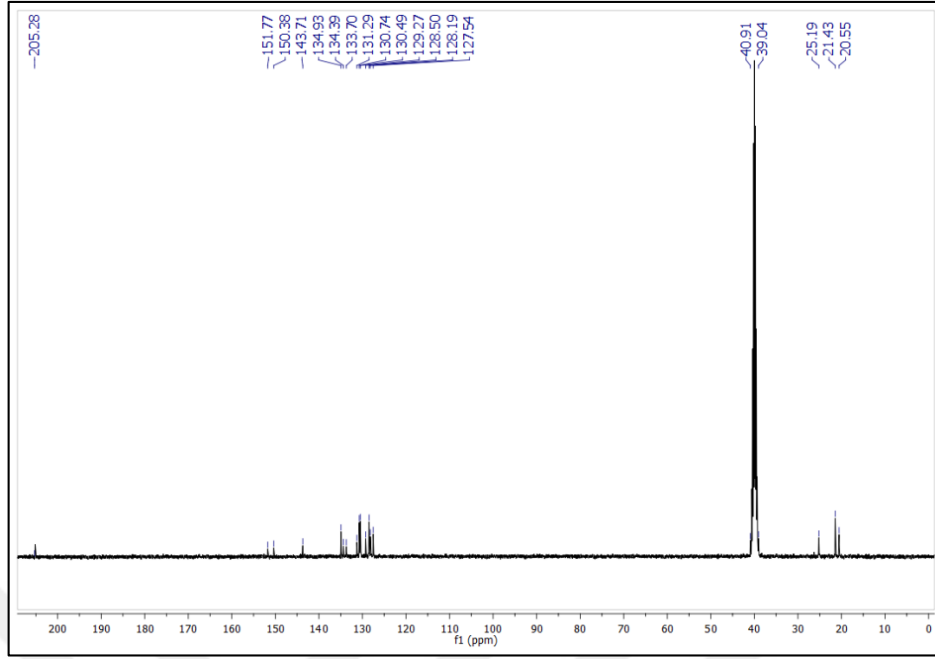
**2c** molekülünün FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.23.1, Şekil 3.23.2 ve Şekil 3.23.3'de verilmiştir.



Şekil 3.23.1 2c molekülü' nün FT-IR spektrumu.



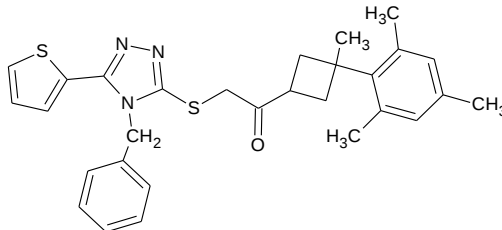
Şekil 3.23.2 2c molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



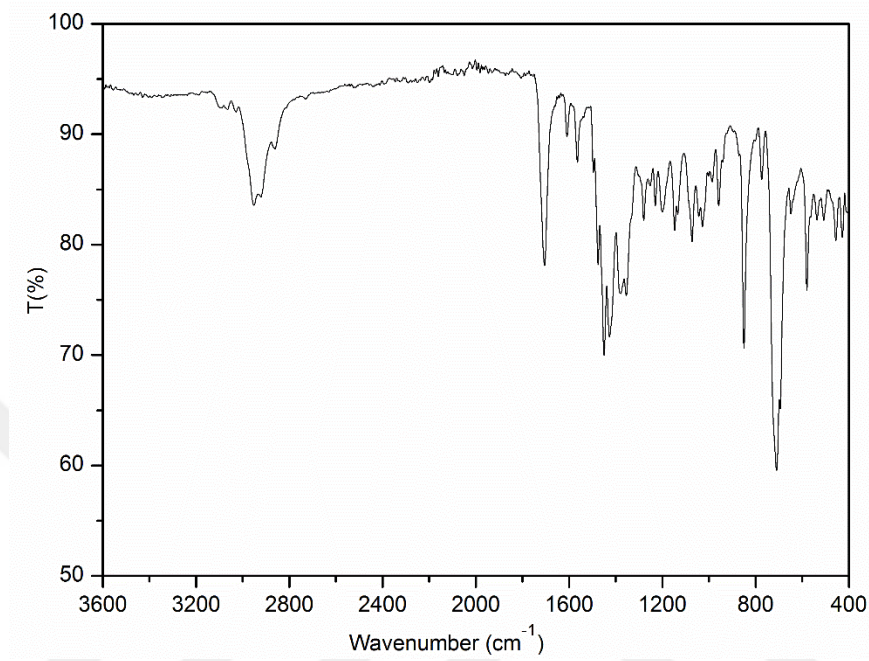
Şekil 3.23.3 2c molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 102-104 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2956-3061 (Ar-H), 2868-2911 (C-H), 1698 (C=O), 1497 (C=N), 1130 (N-N), 1048 (C-S), 776 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.47-2.54 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.56 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.81$  Hz ), 4.23 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.68-6.70 (m, 3H, Ar-H), 6.99 (m, 1H, Ar-H), 7.50-7.52 (m, 2H, Ar-H), 7.61-7.68 (m, 3H, Ar-H)  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 40.9, 127.5, 128.2, 128.5, 129.3, 130.5, 130.7, 131.3, 133.7, 134.9, 143.7, 150.4, 151.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 566.6 (C<sub>28</sub>H<sub>28</sub>BrN<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 59.36; H, 4.98; N, 7.42; S, 11.3; **deneyisel,** C, 59.80; H, 4.90; N, 7.75; S, 11.30.

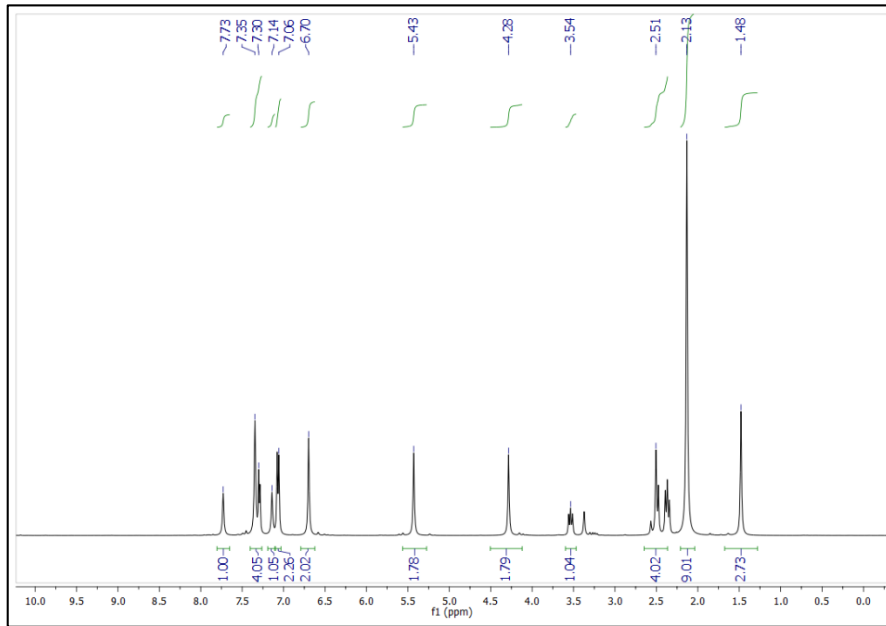
### 3.24 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il]sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2d)



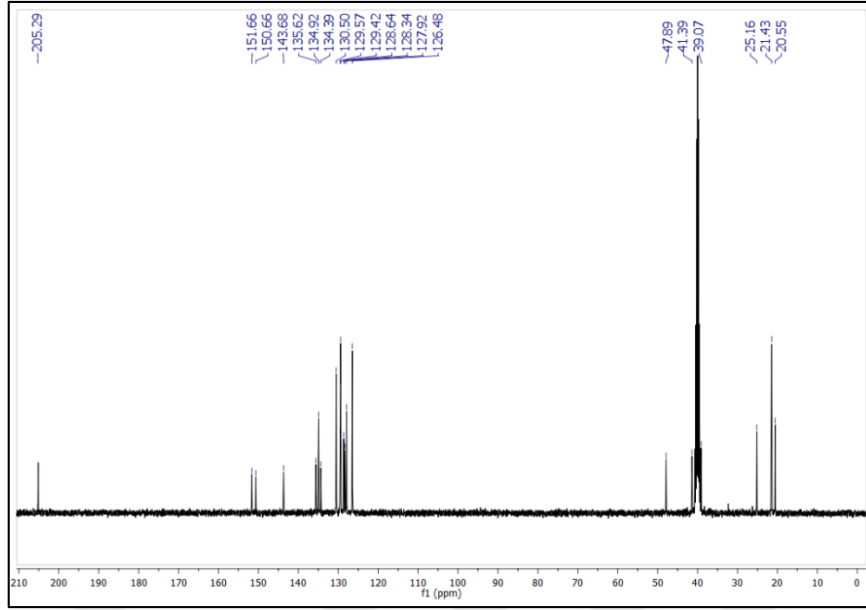
**2d** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.24.1, Şekil 3.24.2 ve Şekil 3.24.3’de verilmiştir.



Şekil 3.24.1 2d molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



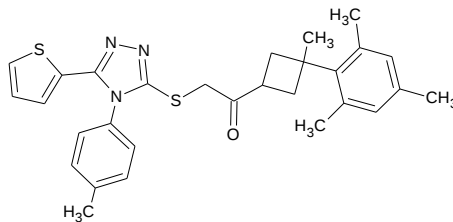
Şekil 3.24.2 2d molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



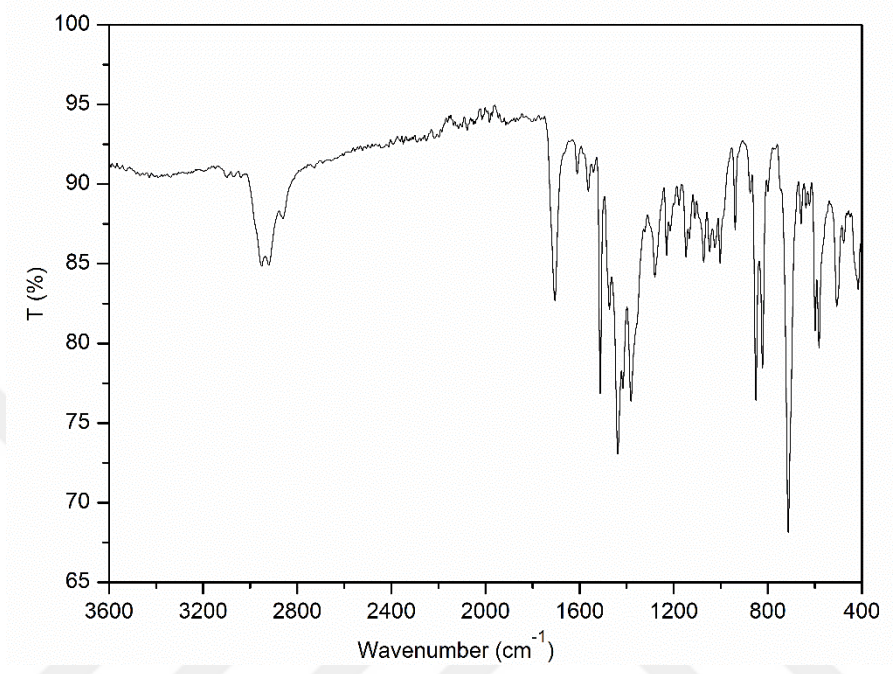
Şekil 3.24.3 2d molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 92-94 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2955-3091 (Ar-H), 2866-2918 (C-H), 1707 (C=O), 1473 (C=N), 1129 (N-N), 1024 (C-S), 777 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.48 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.13 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.37-2.57 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.54 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.77$  Hz), 4.28 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 5.43 (s, 2H, N-CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), 6.70 (s, 2H, Ar-H), 7.07 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.1$  Hz), 7.14 (s, H, Ar-H), 7.28-7.35 (m, 4H, Ar-H), 7.73 (s, 1H, Ar-H)  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 41.4, 47.9, 126.5, 127.9, 128.3, 128.6, 129.4, 129.6, 130.5, 134.4, 134.9, 135.6, 143.7, 150.4, 151.7, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 501.7 (C<sub>29</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.43; H, 6.23; N, 8.38; S, 12.78; **deneysel,** C, 69.50; H, 6.30; N, 8.50; S, 12.50.

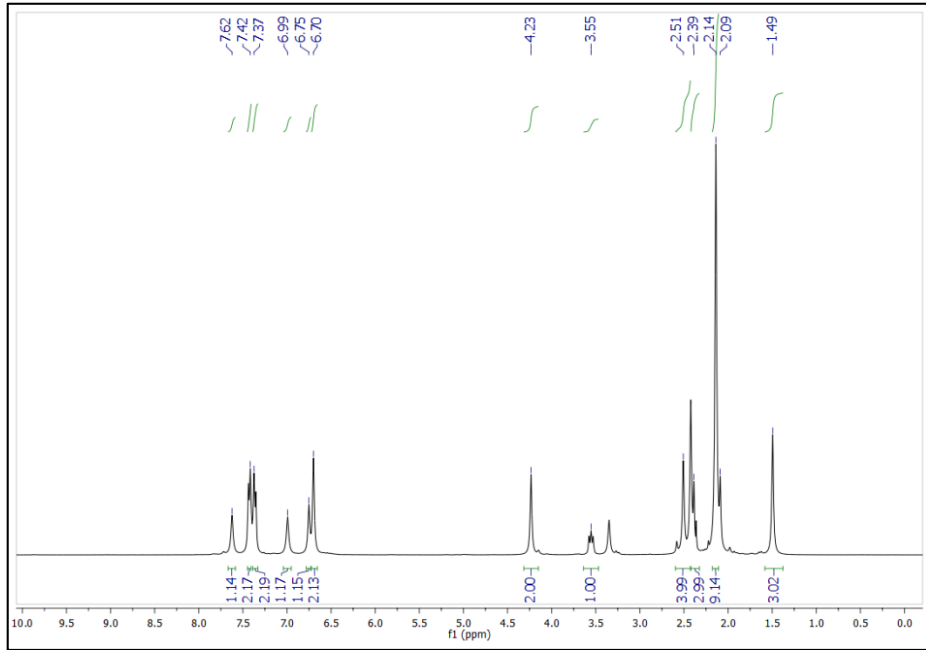
### 3.25 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-(*p*-tolil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2e)



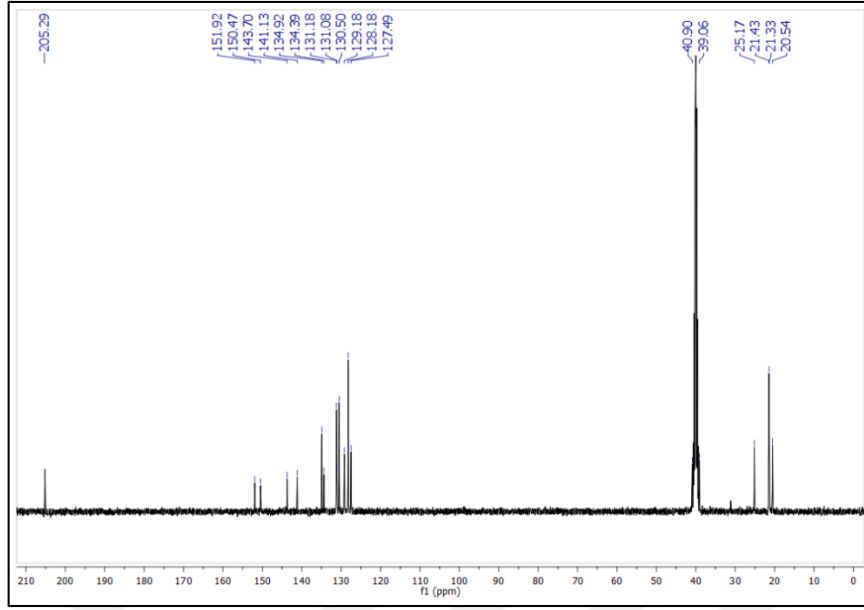
**2e** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.25.1, Şekil 3.25.2 ve Şekil 3.25.3’de verilmiştir.



Şekil 3.25.1 **2e** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



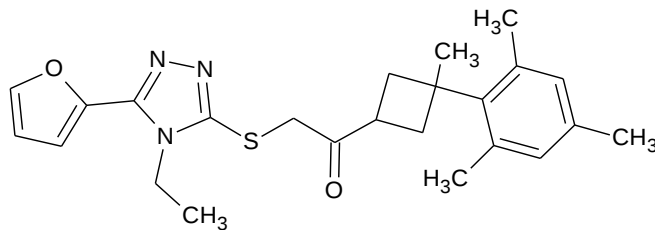
Şekil 3.25.2 **2e** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



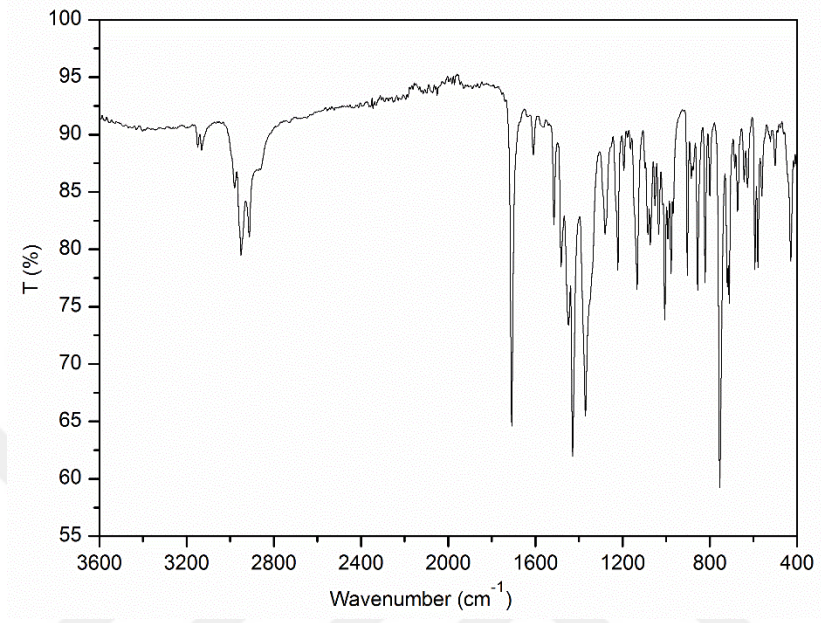
Şekil 3.25.3 2e molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 121-123 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2947-3030 (Ar-H), 2859-2926 (C-H), 1707 (C=O), 1474 (C=N), 1143 (N-N), 1025 (C-S), 716 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.39 (s, 3H, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-CH<sub>3</sub>), 2.43-2.58 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.55 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.60$  Hz), 4.23 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.70 (s, 2H, Ar-H), 6.75 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.7$  Hz), 6.99 (t, 1H, Ar-H,  $J = 4.0$  Hz), 7.36 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.3$  Hz), 7.43 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.5$  Hz), 7.62 (d, 1H, Ar-H,  $J = 5.0$  Hz).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.3, 21.4, 25.2, 39.0, 40.9, 127.5, 128.2, 129.2, 130.5, 131.1, 131.2, 134.4, 134.9, 141.1, 143.7, 150.5, 151.9, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 501.7 (C<sub>29</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.43; H, 6.23; N, 8.38; S, 12.78; **deneyisel,** C, 69.20; H, 6.35; N, 8.25; S, 12.85.

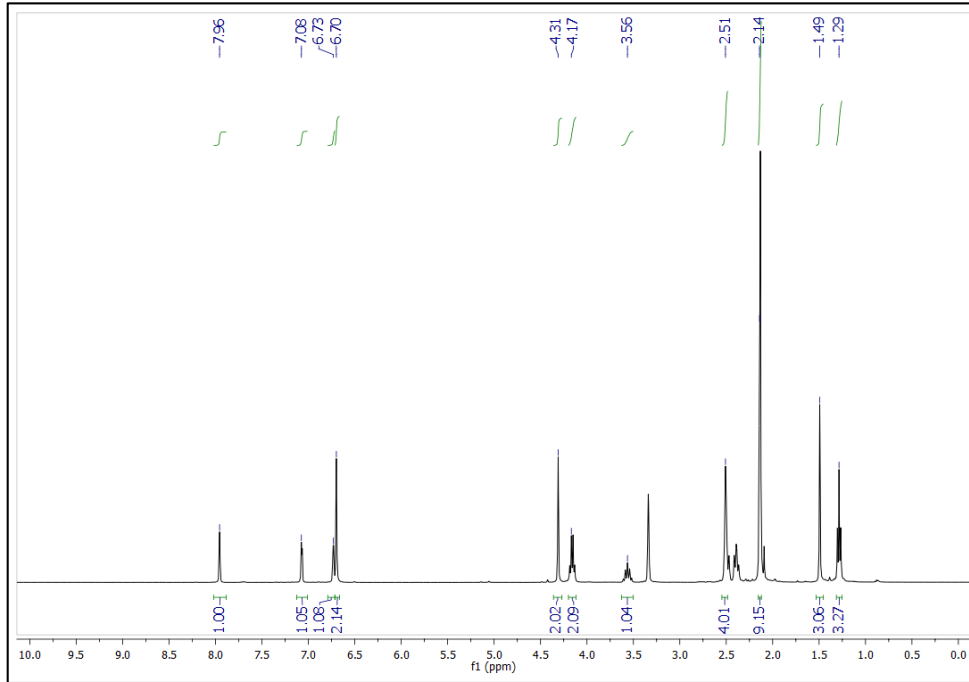
### 3.26 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2f)



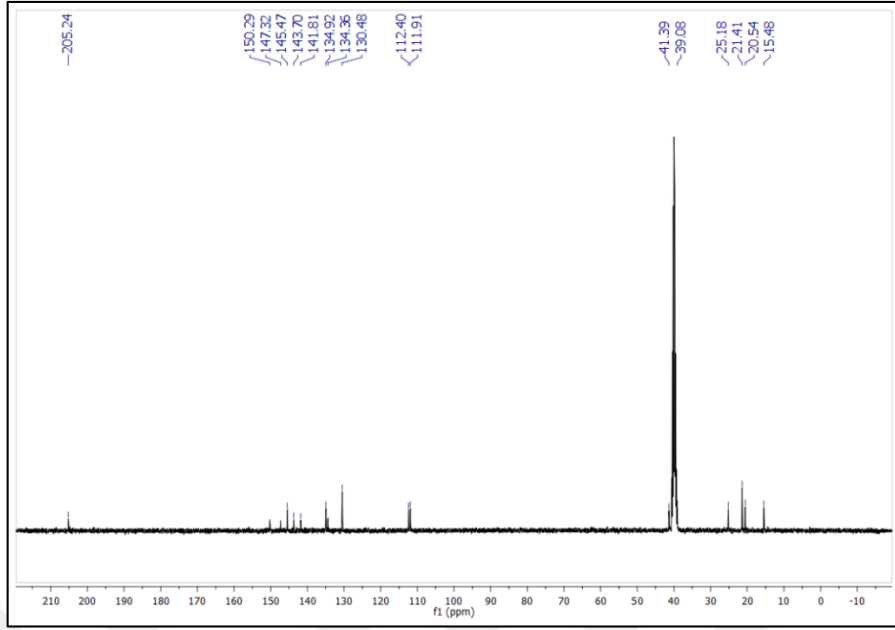
**2f** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.26.1, Şekil 3.26.2 ve Şekil 3.26.3’de verilmiştir.



Şekil 3.26.1 **2f** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



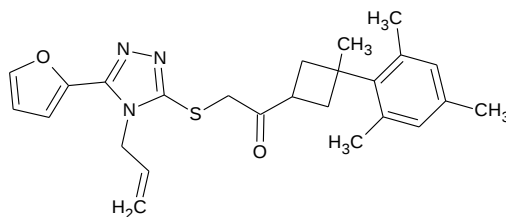
Şekil 3.26.2 **2f** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



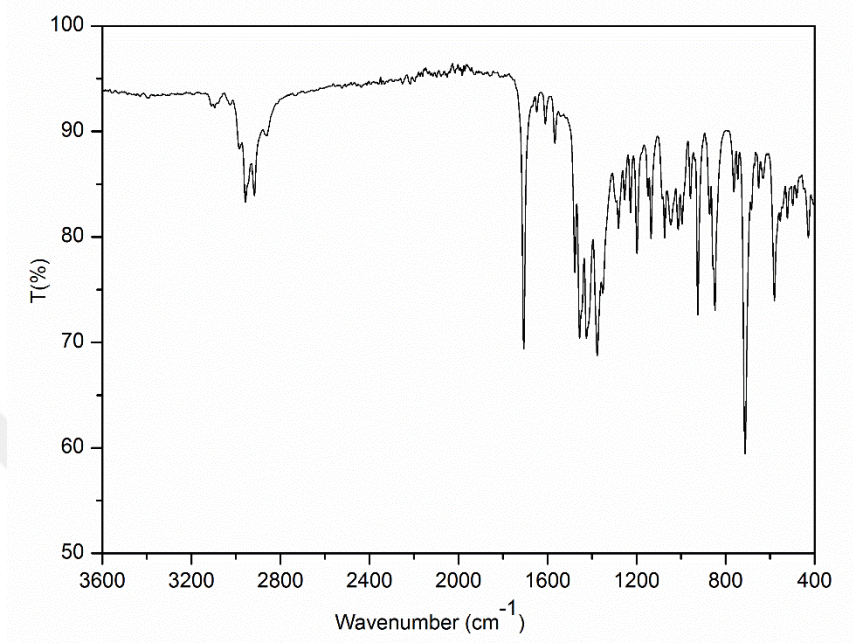
Şekil 3.26.3 2f molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 108-110 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2975-3145 (Ar-H), 2911-2956 (C-H), 1705 (C=O), 1488 (C=N), 1226 (C-O-C), 1129 (N-N), 1001 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.29 (t, 3H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.2 Hz), 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.47-2.51 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.57 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J$  = 9.10 Hz), 4.16 (q, 2H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>,  $J$  = 7.1 Hz), 4.31 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 6.73 (dd, 1H, Ar-H,  $J$  = 3.3 Hz,  $J$  = 1.5 Hz), 7.07 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 3.3 Hz), 7.96 (d, 1H, Ar-H,  $J$  = 1.5 Hz),  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 15.5, 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.4, 111.9, 112.4, 130.5, 134.4, 134.9, 141.8, 143.7, 145.5, 147.3, 150.6, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 423.6 (C<sub>24</sub>H<sub>29</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 68.05; H, 6.90; N, 9.92; S, 7.57; **deneysel**, C, 68.15; H, 6.71; N, 9.85; S, 7.65.

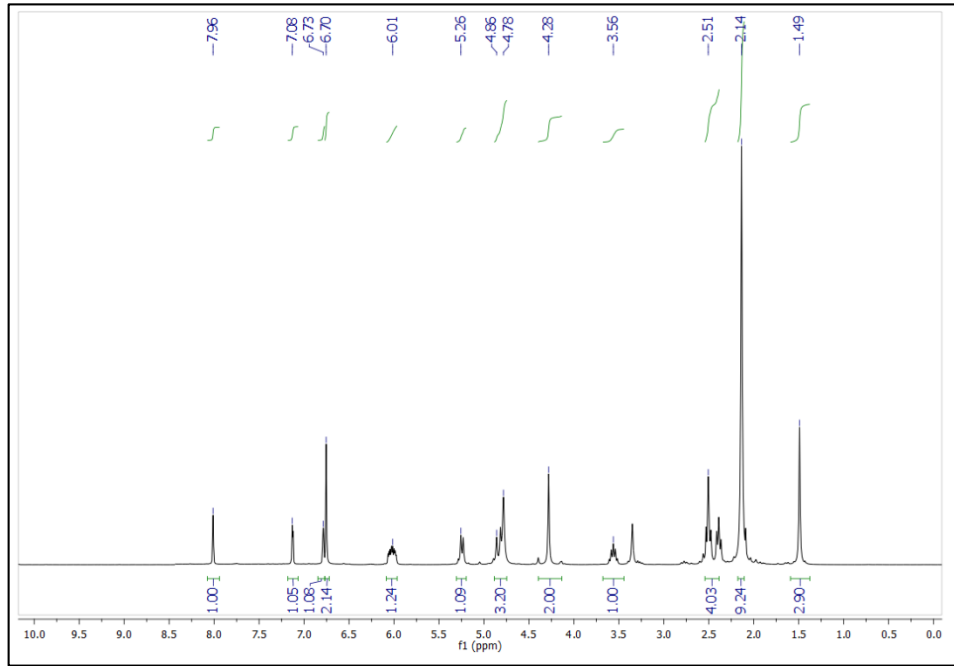
### 3.27 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2g)



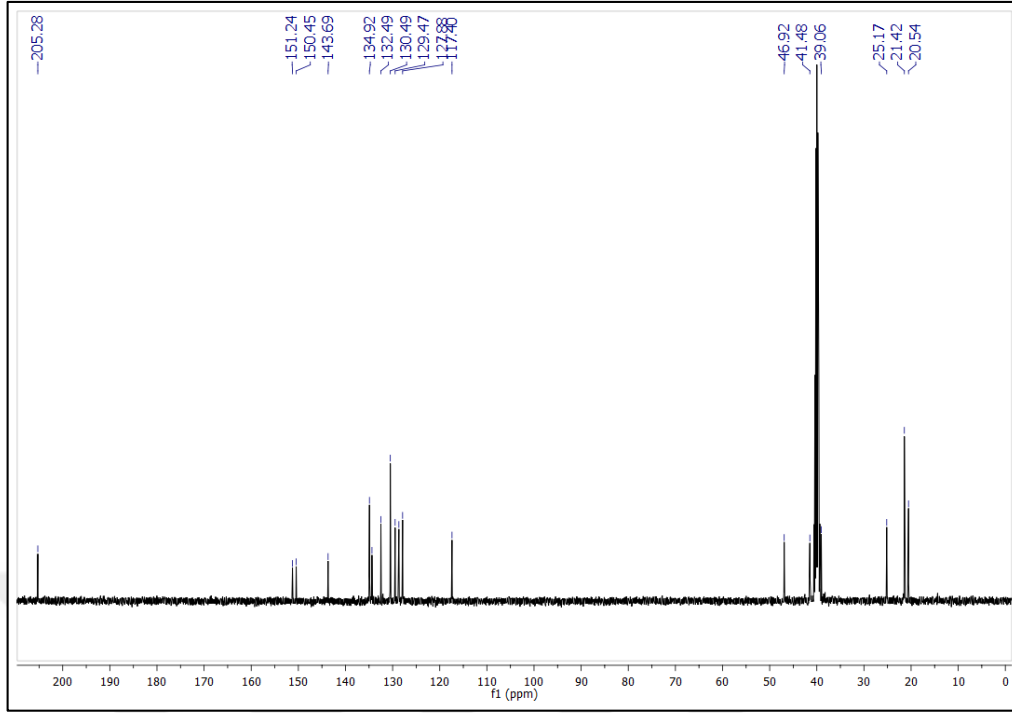
**2g** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.27.1, Şekil 3.27.2 ve Şekil 3.27.3’de verilmiştir.



Şekil 3.27.1 **2g** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



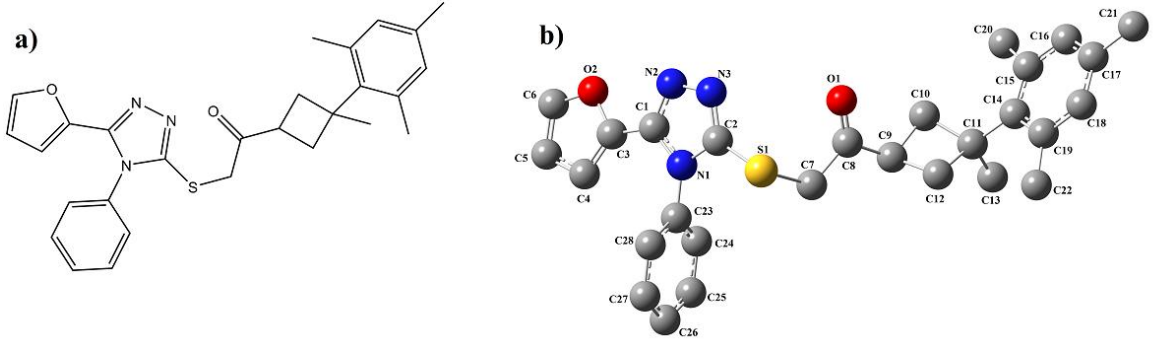
Şekil 3.27.2 **2g** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



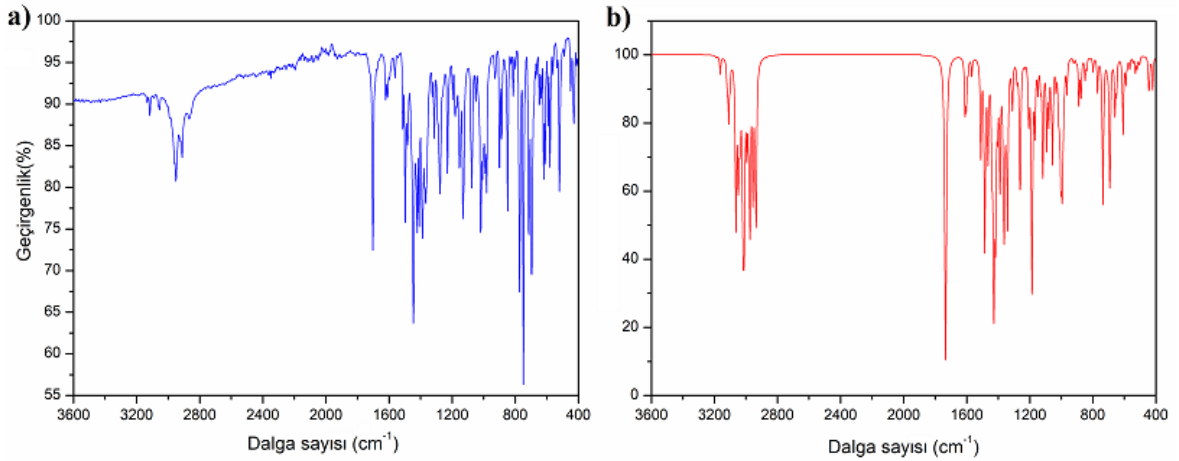
Şekil 3.27.3 2g molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 115-117 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2950-3035 (Ar-H), 2862-2914 (C-H), 1709 (C=O), 1475 (C=N), 1132 (N-N), 1014 (C-S), 760 (C-S-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.38-2.53 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.56 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.78$  Hz), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 4.78-4.86 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), ve 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans)), 5.24 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>,  $J_{\text{cis}} = 10.6$  Hz), 5.97-6.06 (m, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), -, 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 6.73 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 3.5$  Hz,  $J = 1.8$  Hz), 7.07 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.5$  Hz) 7.96 (d, 1H, Ar-H,  $J = 1.8$  Hz),  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.4, 46.9, 117.4, 127.9, 130.5, 132.5, 134.9, 143.7, 150.5, 151.2, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 435.6 (C<sub>25</sub>H<sub>29</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 68.93; H, 6.71; N, 9.65; S, 7.36; **deneysel**, C, 68.90; H, 6.75; N, 9.60; S, 7.30.

**3.28 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(furan-2-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il]sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2h)**



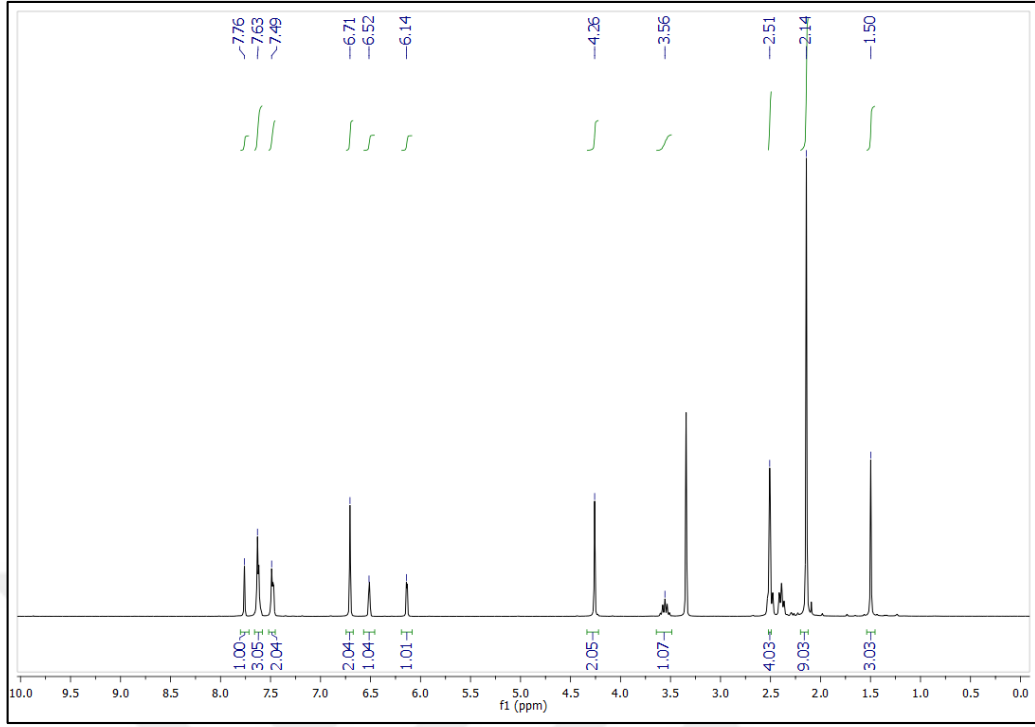
**Şekil 3.28.1** 2h molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b).



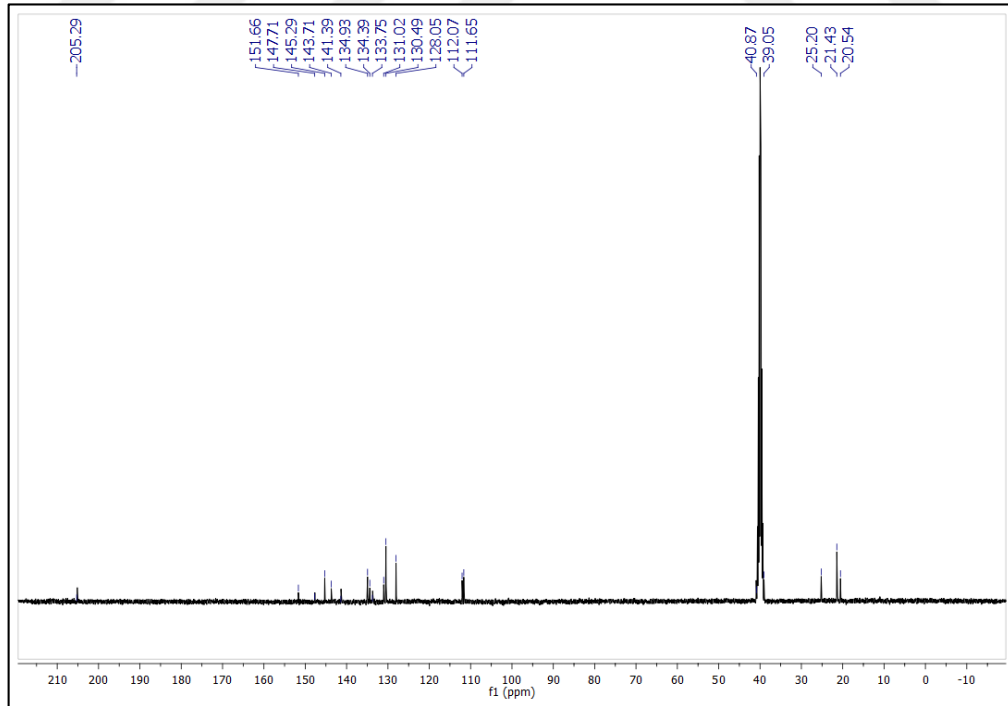
**Şekil 3.28.2** 2h molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b)

Şekil 3.28.1 de **2h** molekülün iki ve üç boyuttaki gösterimleri verilmiştir. Üç boyuttaki gösterimde başlangıç geometrisi Gaussview programı ile çizilmiş ve B3LYP/cc-pVDZ yaklaşımı ile molekülün enerjisinin minimum olduğu optimize yapı elde edilmiştir. Şekil 3.28.2 de molekülün deneysel FT-IR ve hesaplamalar sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulan simüle IR spektrumu verilmiştir.

Molekülün deneysel olarak elde edilen  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumları Şekil 3.28.3 ve 3.28.4 de verilmiştir.



Şekil 3.28.3 2h molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



Şekil 3.28.4 2h molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 172 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>,  $\nu$ ):** 2953-3117 (Ar-H), 2862-2937 (C-H), 1703 (C=O), 1499 (C=N), 1125 (N-N), 1072 (C-S), 773 (C-O-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.47-2.52 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.56 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 9.10$  Hz ), 4.26 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.14 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.2$  Hz), 6.51 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 3.2$  Hz  $J = 1.5$  Hz), 6.71 (s, 2H, Ar-H, (mezitilen)), 7.47-7.49 (m, 2H, Ar-H), 7.59-7.63 (m, 3H, Ar-H), 7.76 (d, 1H, Ar-H,  $J = 1.5$  Hz) **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 40.9, 111.6, 112.1, 128.0, 130.5, 131.0, 133.8, 134.4, 134.9, 141.4, 143.7, 145.3, 147.7, 151.6, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 471.6 (C<sub>28</sub>H<sub>29</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 71.31; H, 6.20; N, 8.91; S, 6.80; **deneysel,** C, 71.51; H, 6.45; N, 8.75; S, 6.89.

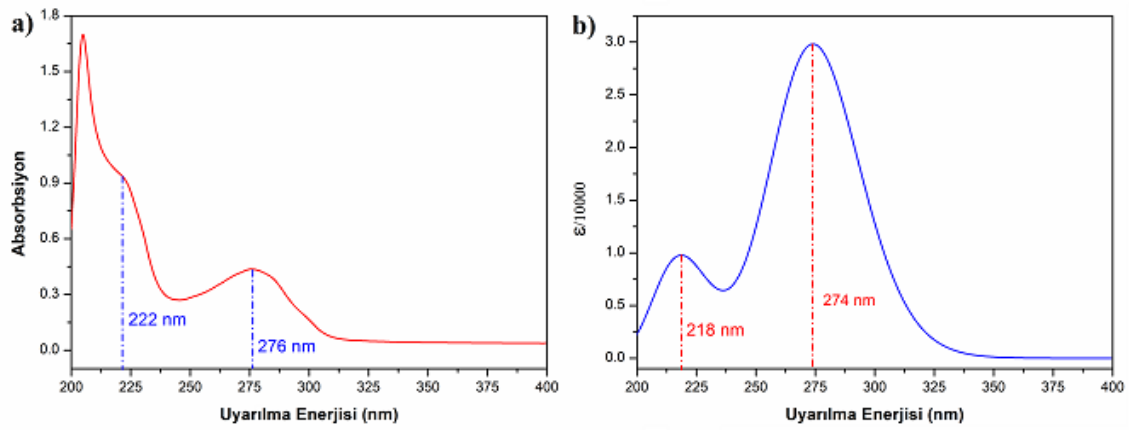
**Tablo 3.28.1** 2h molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri.

| Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ | Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ |
|------|------------------------------------|-----------------------------|------|------------------------------------|-----------------------------|
| C1   | 147.7                              | 157.6                       | C24  | 131.0                              | 135.3                       |
| C2   | 151.6                              | 161.4                       | C25  | 128.0                              | 138.0                       |
| C3   | 143.7                              | 149.9                       | C26  | 130.5                              | 137.9                       |
| C4   | 111.6                              | 119.3                       | C27  | 128.0                              | 136.7                       |
| C5   | 112.1                              | 119.0                       | H4   | 6.14                               | 6.01                        |
| C6   | 145.3                              | 150.1                       | H5   | 6.85                               | 6.51                        |
| C7   | 39                                 | 58.9                        | H6   | 8.03                               | 7.76                        |
| C8   | 205.3                              | 211.9                       | H7   | 4.26                               | 3.80 <sup>a</sup>           |
| C9   | 40.9                               | 49.70                       | H9   | 3.56                               | 3.42                        |
| C10  | 40.9                               | 45.5                        | H10  | 2.52                               | 2.75 <sup>a</sup>           |
| C11  | 40.9                               | 53.8                        | H12  | 2.52                               | 2.35 <sup>a</sup>           |
| C12  | 40.9                               | 53.9                        | H13  | 1.54                               | 1.90                        |
| C13  | 25.2                               | 33.5                        | H16  | 6.71                               | 7.28                        |
| C14  | 147.7                              | 152.5                       | H18  | 6.71                               | 7.24                        |
| C15  | 134.9                              | 144.8                       | H20  | 2.14                               | 2.60 <sup>a</sup>           |
| C16  | 134.4                              | 136.9                       | H21  | 2.14                               | 2.75 <sup>a</sup>           |
| C17  | 133.8                              | 143.7                       | H22  | 2.14                               | 2.55 <sup>a</sup>           |
| C18  | 134.4                              | 136.9                       | H24  | 7.61                               | 7.82                        |
| C19  | 134.9                              | 144.5                       | H25  | 7.48                               | 8.21                        |
| C20  | 20.5                               | 31.5                        | H26  | 7.61                               | 8.29                        |
| C21  | 21.4                               | 29.7                        | H27  | 7.48                               | 8.25                        |
| C22  | 20.5                               | 31.3                        | H28  | 7.61                               | 7.84                        |
| C23  | 141.4                              | 143.2                       |      |                                    |                             |

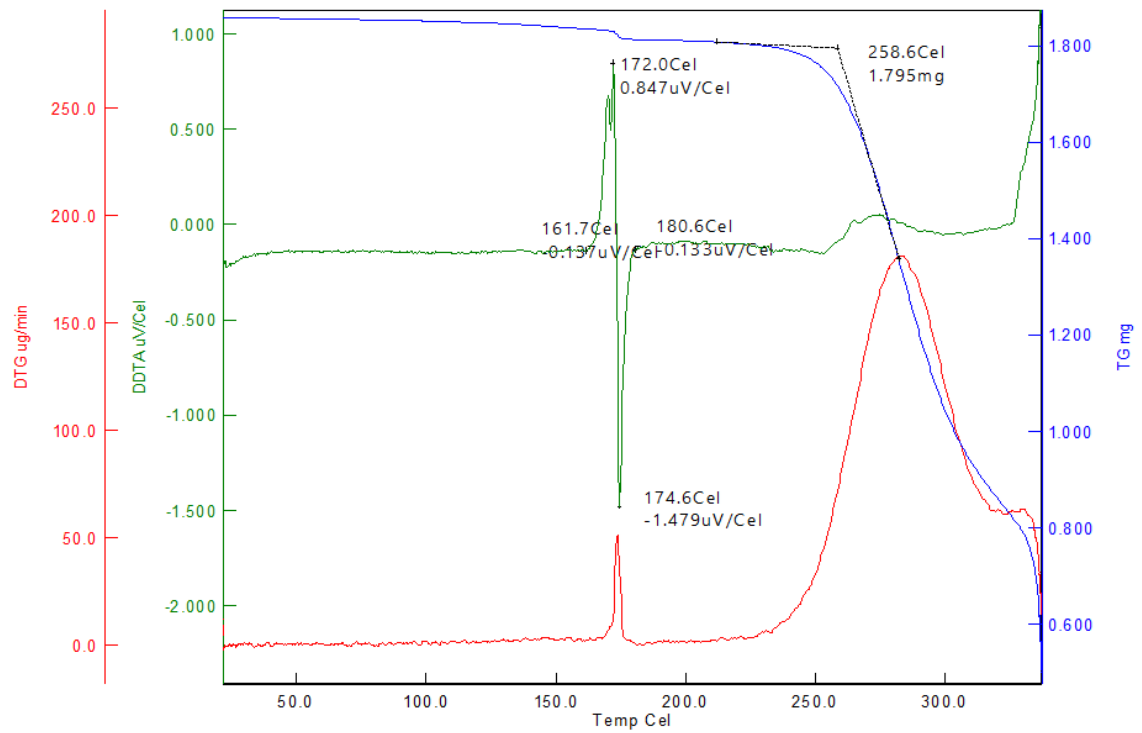
**Tablo 3.28.2** 2h molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları.

| Titreşim Modları                                    | Deneysel | B3LYP/cc-pVDZ |
|-----------------------------------------------------|----------|---------------|
| $\nu_s(\text{C-H})$ R1                              | 3117     | 3162          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | -        | 3142          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | 3100     | 3109          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R2                              | 3000     | 3057          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R2                           | -        | 3050          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | 2937     | 3050          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R4                           | 2920     | 3049          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ ethanon                    | -        | 3012          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R4                              | 2940     | 2967          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | -        | 2957          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ R3                            | -        | 2945          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ ethanon                       | 2862     | 2930          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R2                            | -        | 2930          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R3                            | -        | 2929          |
| $\nu_s(\text{C=O})$                                 | 1703     | 1731          |
| $\nu(\text{C=C})$ R2                                | 1626     | 1612          |
| $\nu(\text{C=C})$ R1                                | 1559     | 1568          |
| $\nu(\text{C=N})$ triazol + $\nu(\text{C=C})$ R1    | 1492     | 1485          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2 + $\gamma(\text{C-H})$ R2 | 1476     | 1465          |
| $\alpha(\text{C-H})$ R4                             | 1457     | 1427          |
| $\alpha(\text{C-H}_2)$ R3                           | 1447     | 1413          |
| $\alpha(\text{C-H}_3)$ R2                           | 1417     | 1405          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2                           | 1386     | 1385          |
| $\gamma(\text{C-H})$ R1                             | 1222     | 1184          |
| $\nu(\text{N-N})$                                   | 1126     | 1115          |
| $\nu(\text{C-C})$ R4                                | 1075     | 1055          |
| $\nu(\text{C-O})$ R1                                | 1011     | 996           |
| $\beta(\text{C-H})$ R1                              | 986      | 964           |
| $\beta(\text{C-H})$ R2                              | 975      | 885           |
| $\beta(\text{C-H})$ R3                              | 948      | 850           |
| $\nu(\text{C-O-C})$                                 | 773      | 735           |

$\nu$ , gerilme;  $\alpha$ , makaslama;  $\gamma$ , sallanma;  $\omega$ , dalgalanma; s, simetrik; as, asimetrik;  
 $\beta$ , burkulma;  $\delta$ , düzlem dışı burkulma R1; furan halkası; R2; mezitilen halkası;  
R3; siklobütan halkası; R4; fenil grubu.



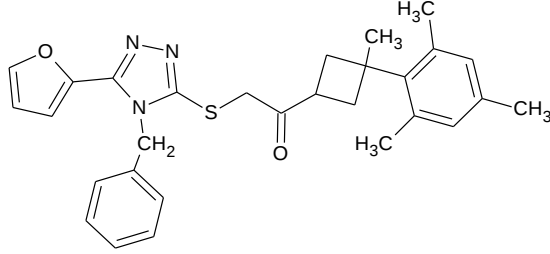
Şekil 3.28.5 2h molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b)



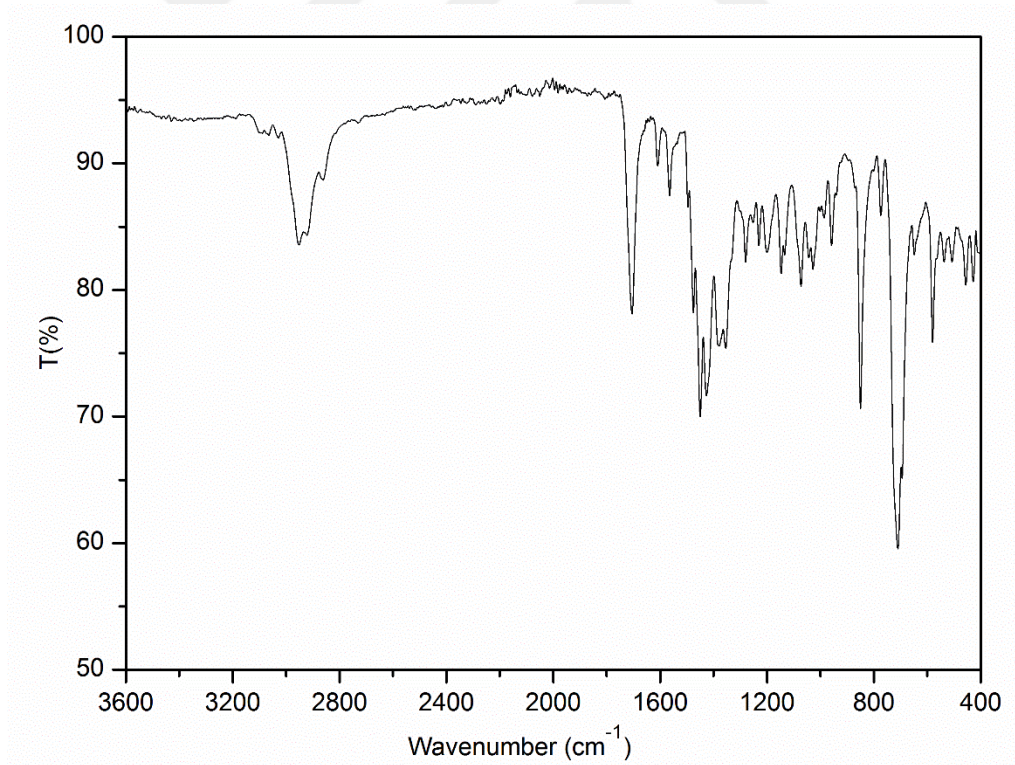
Şekil 3.28.6 2h molekülünün termogravimetrik analiz sonucu.

Şekil 3.28.5 te görüldüğü üzere **2h** molekülünün başlıca iki tane absorbans piki bulunmaktadır. Yapılan hesaplamalar sonucunda 276 nm deki pikin HOMO→LUMO geçişine ait olduğu bulunmuştur. Şekil 3.28.6 incelendiğinde **2h** molekülünün 172 °C de eridiği ve 258.6 °C de bozunduğu görülmektedir.

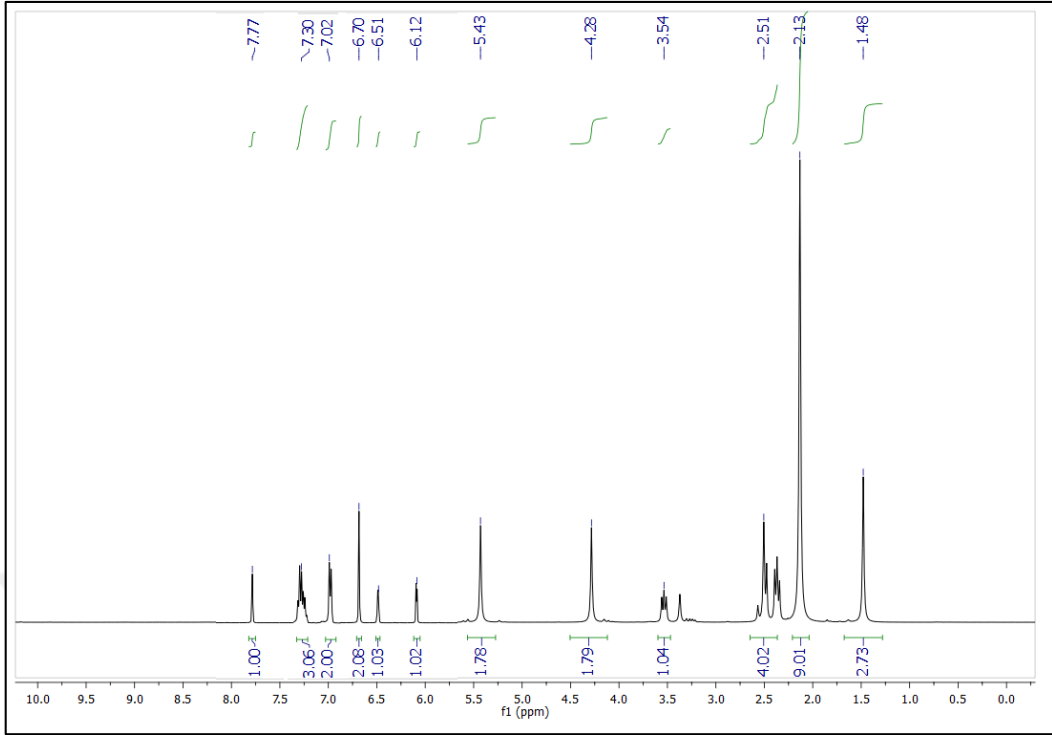
**3.29 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2i)**



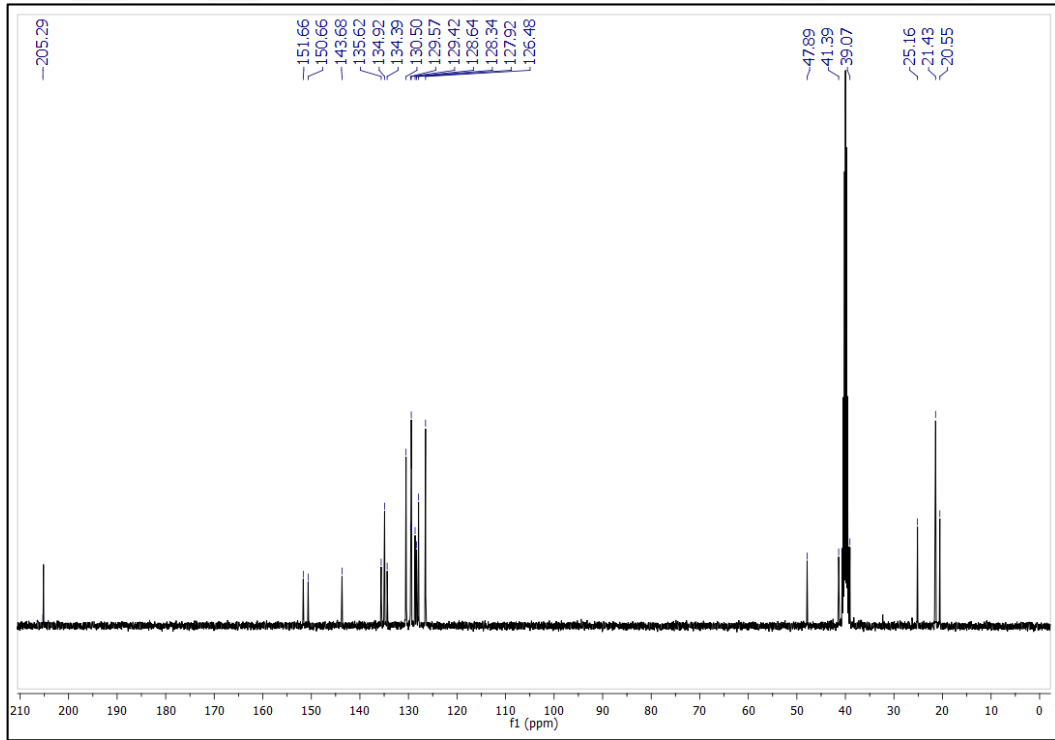
**2i** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.29.1, Şekil 3.29.2 ve Şekil 3.29.3'de verilmiştir.



**Şekil 3.29.1** 2i molekülü' nün FT-IR spektrumu.



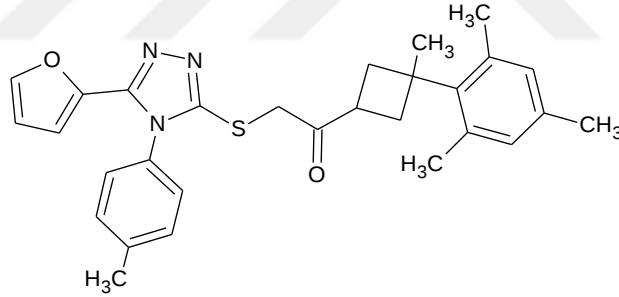
Şekil 3.29.2 2i molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



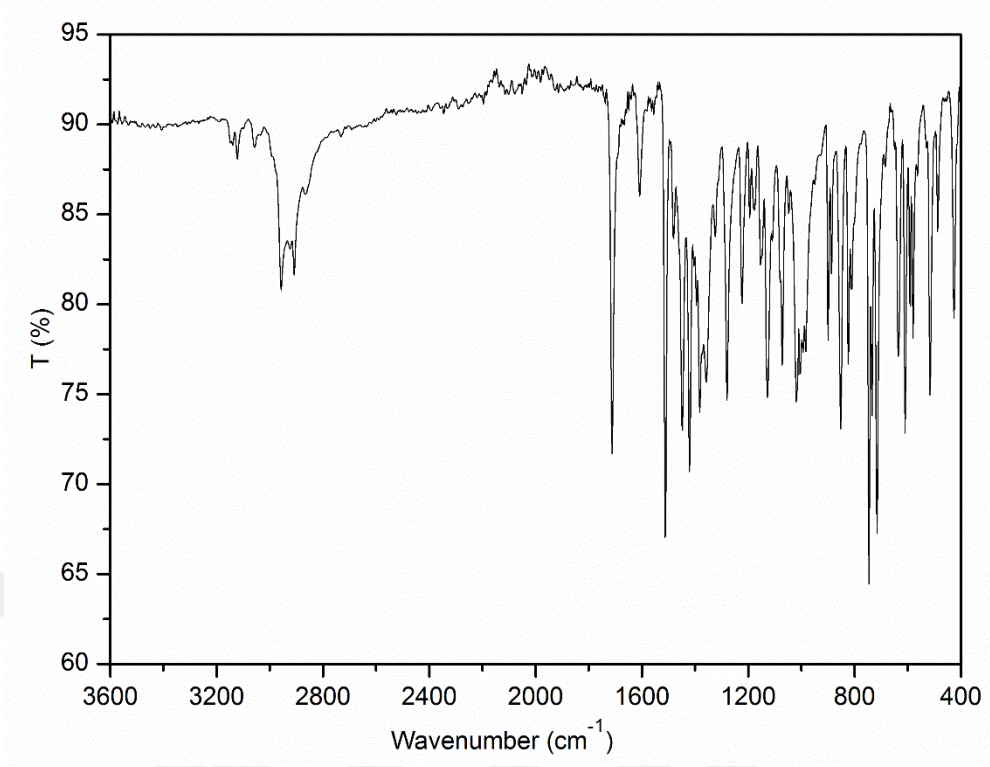
Şekil 3.29.3 2i molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 152-154 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 2950-3100 (Ar-H), 2860-2910 (C-H), 1705 (C=O), 1465 (C=N), 1125 (N-N), 1024 (C-S), 777 (C-O-C); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 1.48 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.13 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.45-2.55 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.54 (p, 1H, -CH- (siklobütan), *J* = 9.05 Hz ), 4.28 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 5.43 (s, 2H, N-CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), 6.12 (d, 1H, Ar-H, *J* = 3.5 Hz), 6.51 (dd, 1H, Ar-H, *J* = 3.5 Hz *J* = 1.8 Hz), 6.70 (s, 2H, Ar-H), 7.00-7.04 (m, 2H, Ar-H), 7.26-7.34 (m, 3H, Ar-H), 7.77 (d, 1H, Ar-H, *J* = 1.8 Hz) **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 41.4, 47.9, 126.5, 127.9, 128.3, 128.6, 129.4, 129.6, 130.5, 134.4, 134.9, 135.6, 143.7, 150.4, 151.7, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 485.7 (C<sub>29</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 71.72; H, 6.43; N, 8.65; S, 6.60; **deneysel,** C, 71.60; H, 6.50; N, 8.70; S, 6.65.

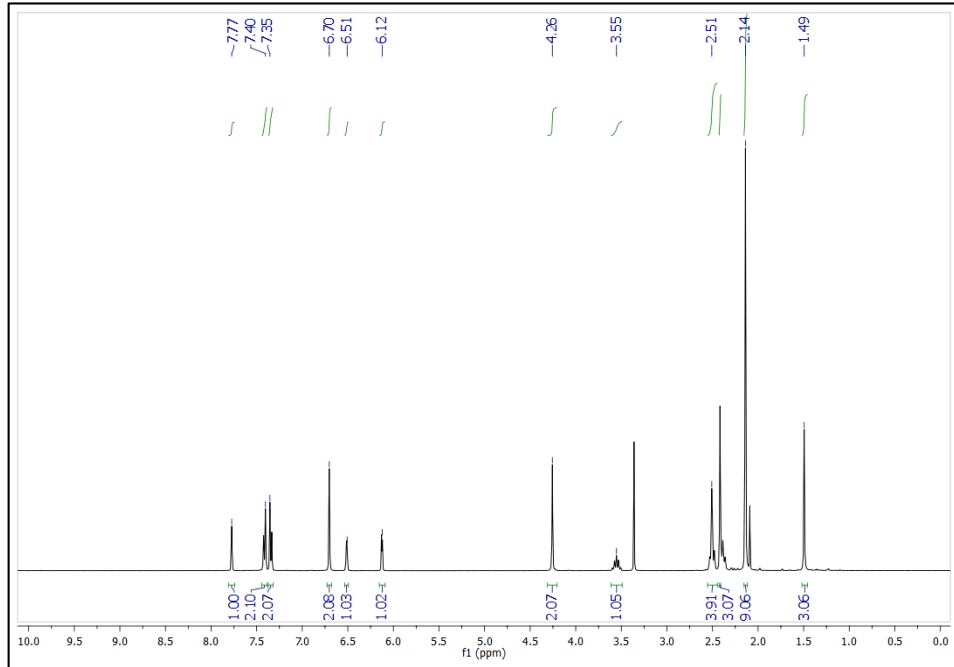
### 3.30 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütıl-2-[[5-(furan-2-il)-4-(*p*-tollil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2j)



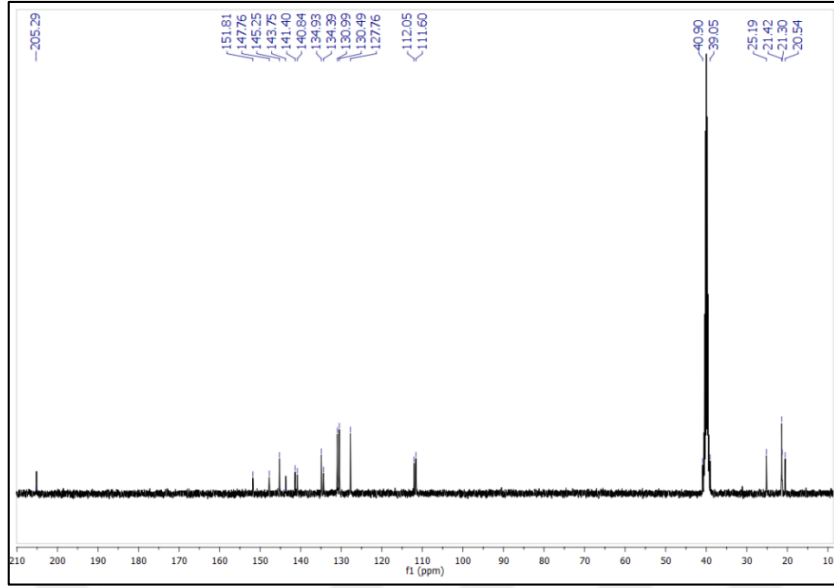
**2j** molekülünün FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.30.1, Şekil 3.30.2 ve Şekil 3.30.3'de verilmiştir.



Şekil 3.30.1 2j molekülü' nün FT-IR spektrumu.



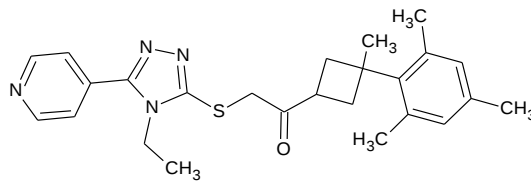
Şekil 3.30.2 2j molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



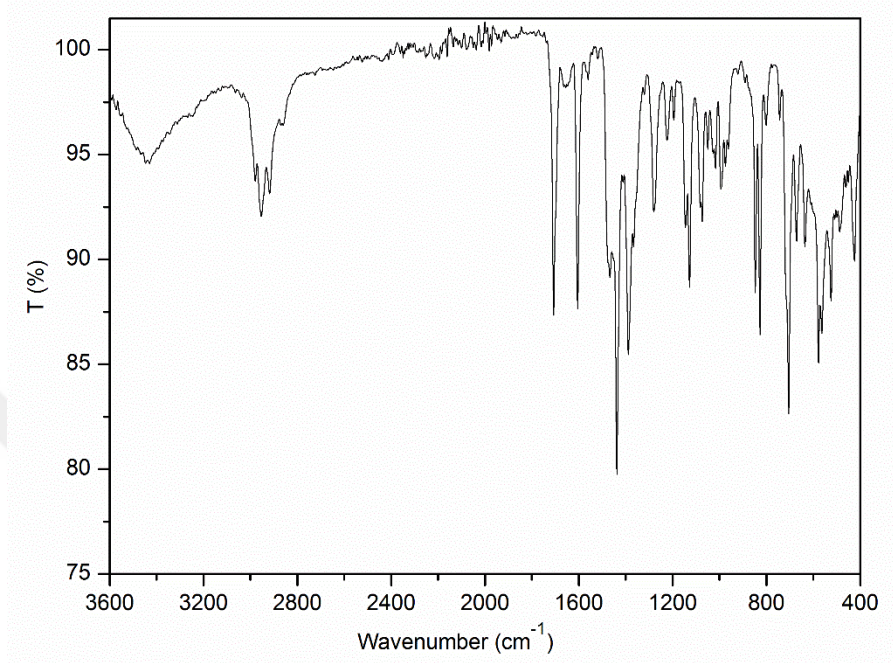
Şekil 3.30.3 2j molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 168-170 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2961-3147 (Ar-H), 2863-2931 (C-H), 1709 (C=O), 1476 (C=N), 1125 (N-N), 1019 (C-S), 742 (C-O-C);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.42 (s, 3H, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-CH<sub>3</sub>), 2.47-2.53 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.55 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 9.20$  Hz ), 4.26 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.13 (d, 1H, Ar-H,  $J = 3.4$  Hz), 6.51 (dd, 1H, Ar-H,  $J = 3.2$  Hz  $J = 1.6$  Hz) 6.70 (s, 2H, Ar-H), 7.34 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.2$  Hz, (*p*-tollil)), 7.41 (d, 2H, Ar-H,  $J = 8.2$  Hz, (*p*-tollil)), 7.77 (d, 1H, Ar-H,  $J = 1.6$  Hz).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.3, 21.4, 25.2, 39.0, 40.9, 111.6, 112.1, 127.5, 130.5, 131.1, 134.4, 134.9, 140.8, 141.4, 143.7, 145.3, 147.8, 151.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 485.7 (C<sub>29</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S). **Elementel analiz (teorik):** C, 71.72; H, 6.43; N, 8.65; S, 6.60; **deneysel**, C, 71.80; H, 6.40; N, 8.61; S, 6.53.

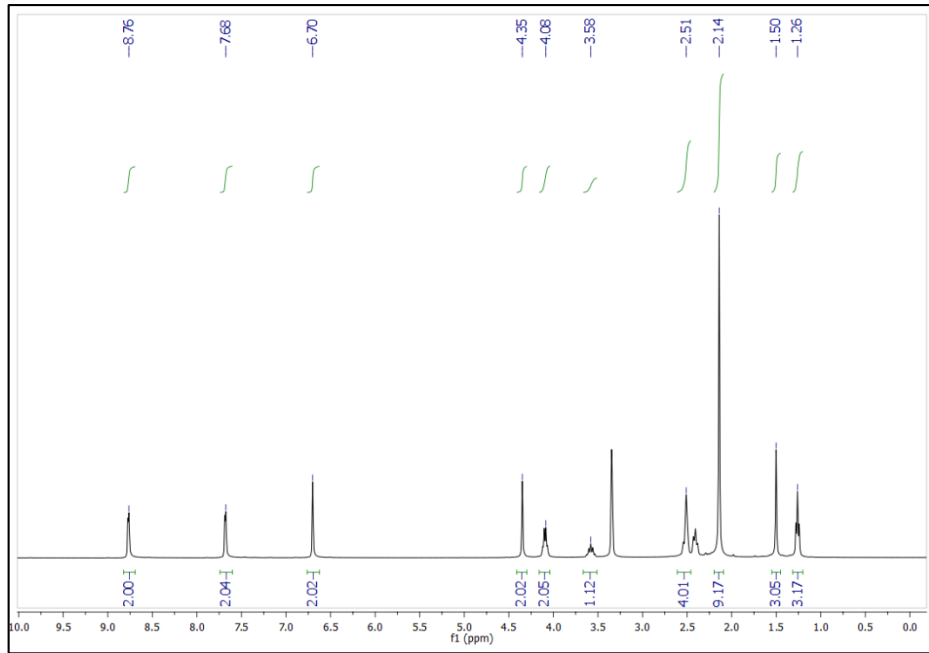
### 3.31 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2k)



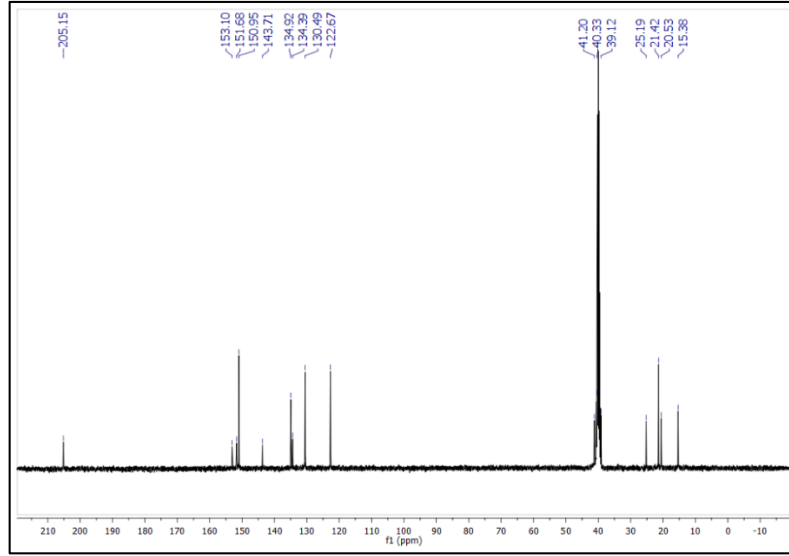
**2k** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.31.1, Şekil 3.31.2 ve Şekil 3.31.3’de verilmiştir.



**Şekil 3.31.1** 2k molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



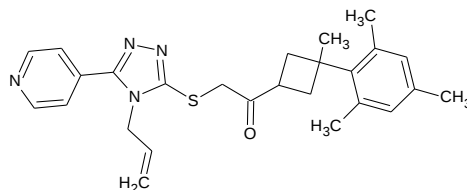
**Şekil 3.31.2** 2k molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



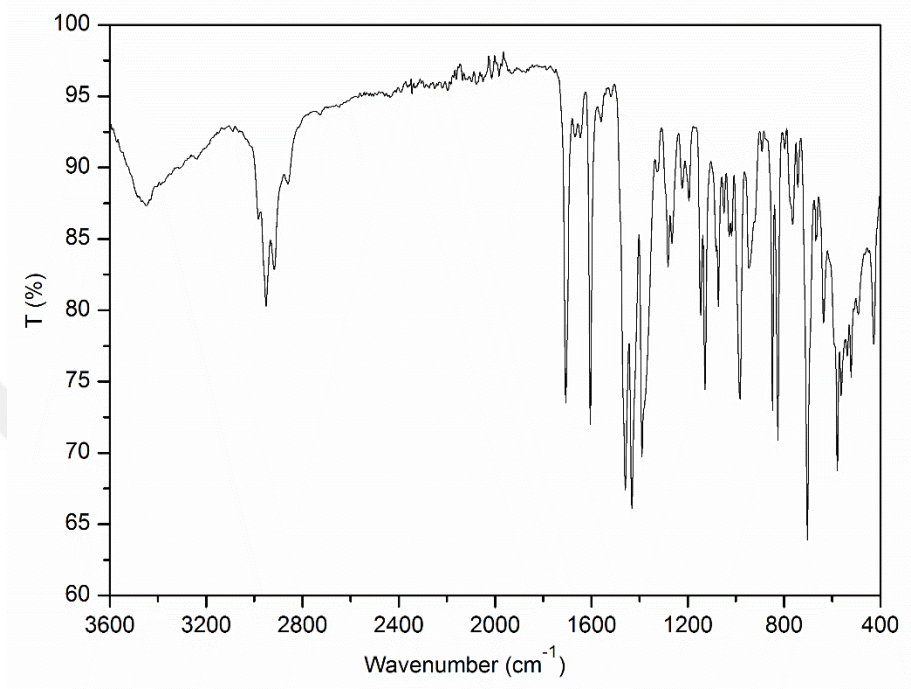
Şekil 3.31.3 2k molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 150-152 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2945-2982 (Ar-H), 2870-2930 (C-H), 1701 (C=O), 1432 (C=C), 1386 (C=N), 1125 (C-N), 1042 (N-N), 713 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.26 (t, 3H, N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 7.1 Hz), 1.50 (s, 3H, -CH $_3$  (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH $_3$  (mezitilen)), 2.42-2.54 (m, 4H, -CH $_2$ - (siklobütan)), 3.58 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J$  = 8.80 Hz), 4.09 (q, 2H, N-CH $_2$ -CH $_3$ ,  $J$  = 6.9 Hz), 4.35 (s, 2H, S-CH $_2$ -), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.68 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.5 Hz, C=CH aromatik (piridin)), 8.76 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.4 Hz, N=CH aromatik (piridin)).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 15.4, 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 40.3, 41.2, 122.7, 130.5, 134.4, 143.7, 150.6, 151.7, 153.1, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 434.6 (C $_{25}$ H $_{30}$ N $_4$ OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.09; H, 6.96; N, 12.89; S, 7.38; **deneysel,** C, 69.01; H, 6.90; N, 12.85; S, 7.45.

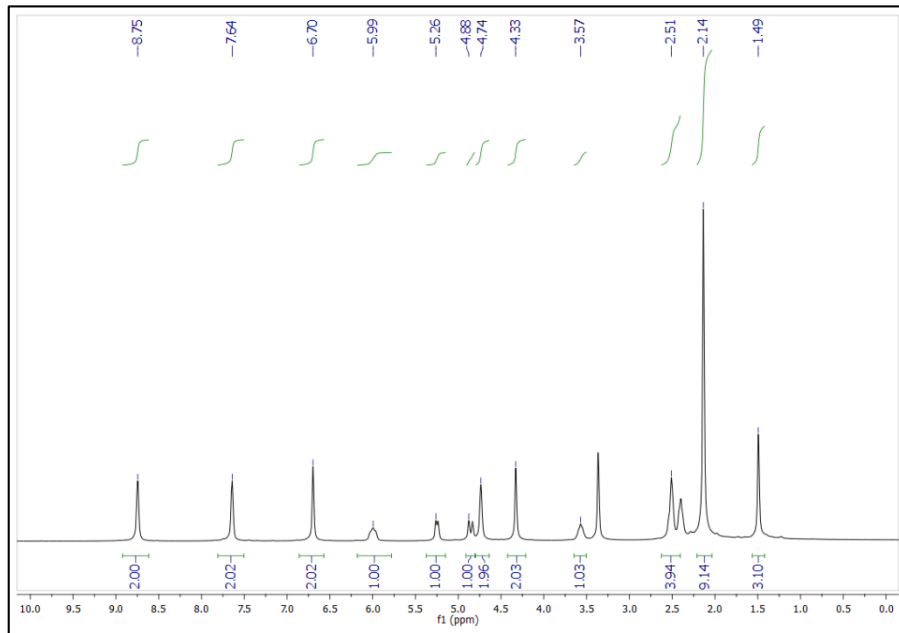
### 3.32 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pidin-4-il)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2l)



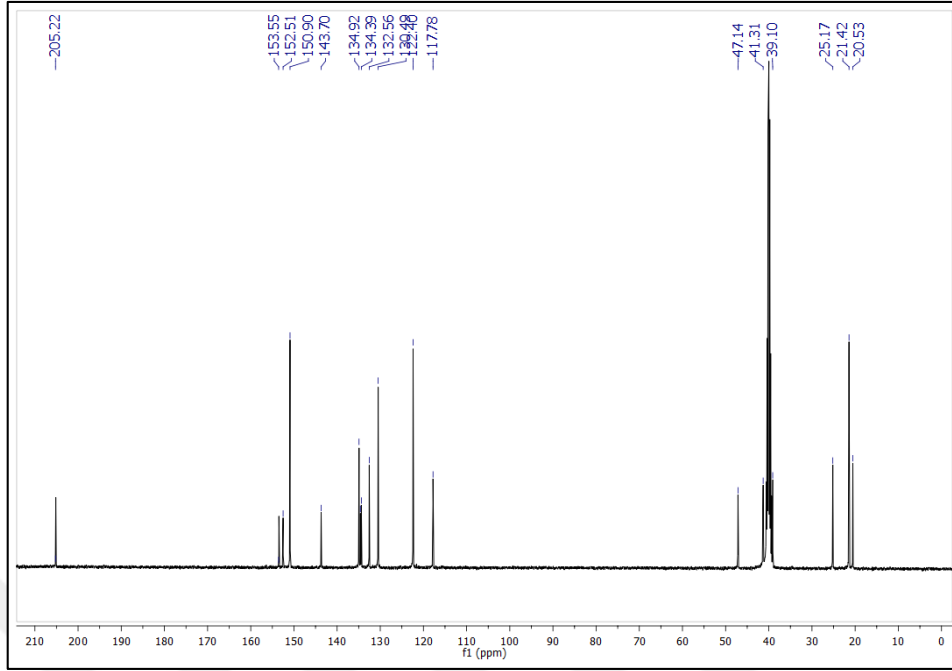
**2l** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.32.1, Şekil 3.32.2 ve Şekil 3.32.3’de verilmiştir.



Şekil 3.32.1 2l molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



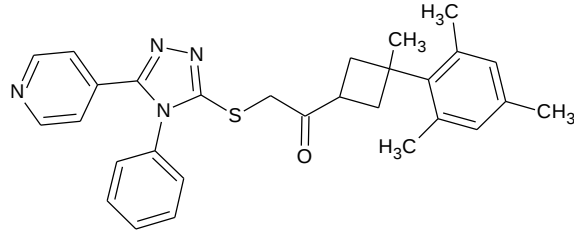
Şekil 3.32.2 2l molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



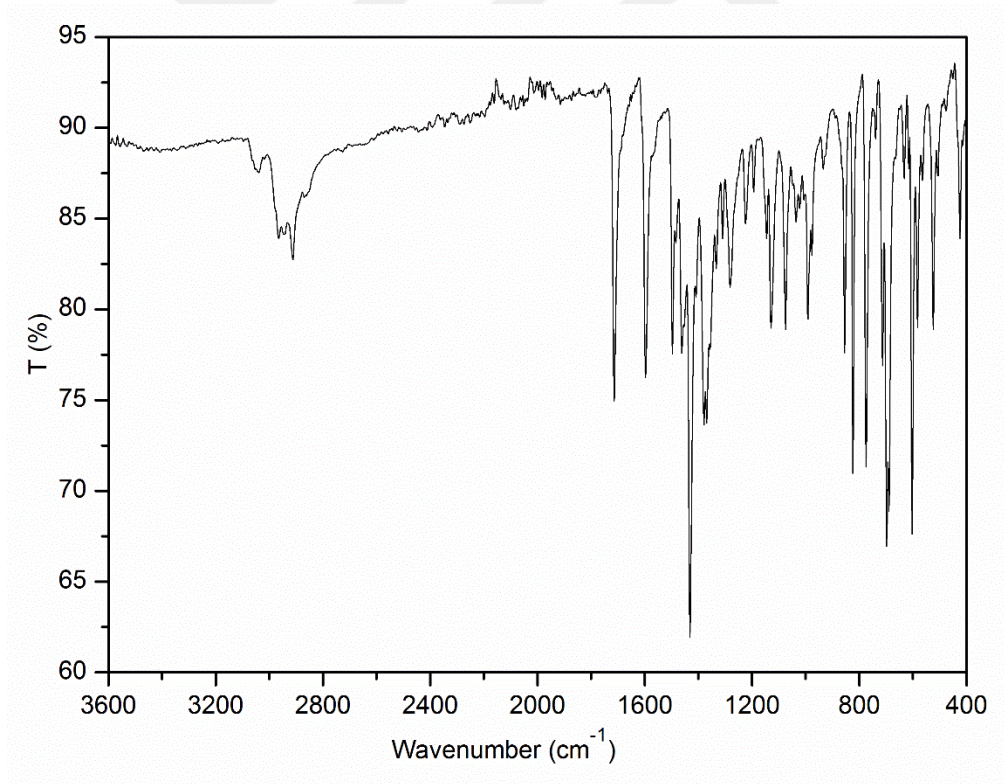
Şekil 3.32.3 2l molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 115-117 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2950-2990 (Ar-H), 2862-2914 (C-H), 1710 (C=O), 1435 (C=C), 1395 (C=N), 1126 (C-N), 1013 (N-N), 705 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.39-2.50 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.57 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.70$  Hz), 4.33 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 4.74 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 4.86 (d, 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans)  $J = 17.2$  Hz), 5.25 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>,  $J_{\text{cis}} = 9.8$  Hz), 5.96-6.02 (m, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.64 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.2$  Hz, C=CH aromatik (piridin)), 8.75 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.4$  Hz, N=CH aromatik (piridin)).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.3, 47.1, 117.7, 122.4, 130.4, 132.6, 134.4, 134.9, 143.7, 150.9, 152.5, 153.6, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 446.6 (C<sub>25</sub>H<sub>30</sub>N<sub>4</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.92; H, 6.77; N, 12.54; S, 7.18; **deneysel,** C, 69.85; H, 6.72; N, 12.50; S, 7.25.

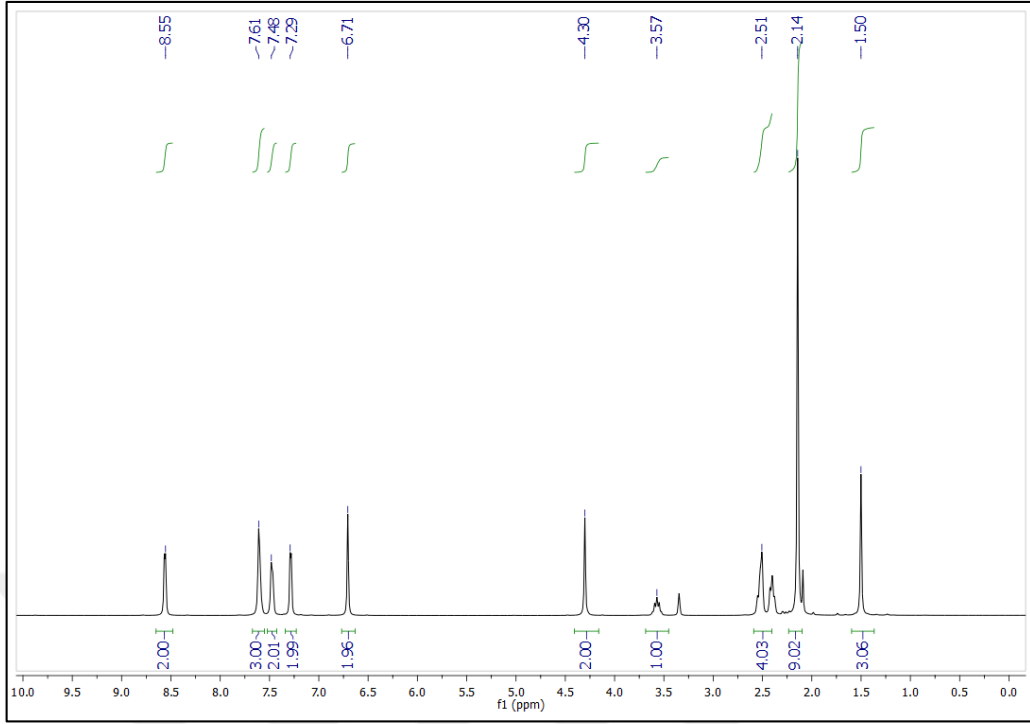
**3.33 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-{[5-(pridin-4-il)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil}-etanon'un Karakterizasyonu (2m)**



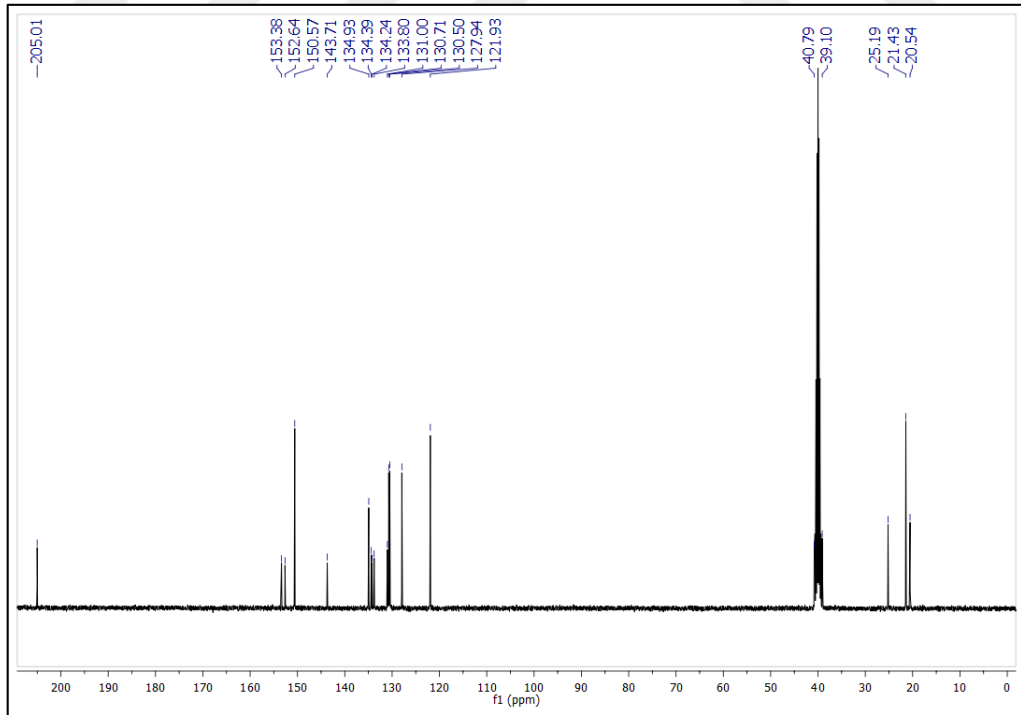
**2m** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.33.1, Şekil 3.33.2 ve Şekil 3.33.3'de verilmiştir.



**Şekil 3.33.1** 2m molekülü' nün FT-IR spektrumu.



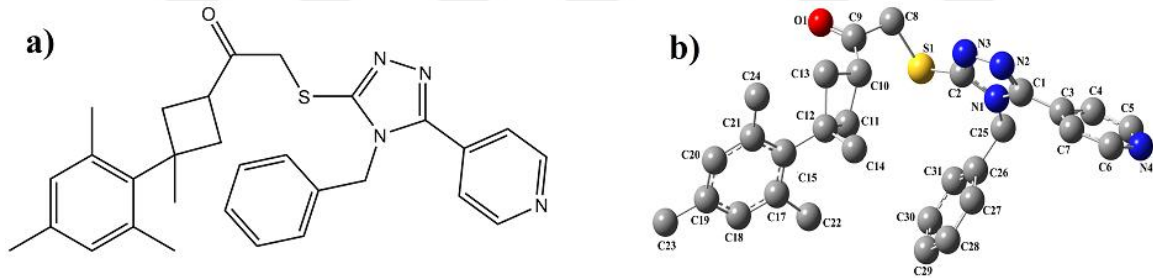
Şekil 3.33.2 2m molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



Şekil 3.33.3 2m molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 145-147 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>,  $\nu$ ):** 2941-3046 (Ar-H), 2863-2937 (C-H), 1709 (C=O), 1432 (C=C), 1334 (C=N), 1125 (C-N), 1035 (N-N), 699 (C-S); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.40-2.55 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.57 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J$  = 8.60 Hz), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.71 (s, 2H, Ar-H, (mezitilen)), 7.29 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.4 Hz, C=CH aromatik (piridin)) 7.46-7.48 (m, 2H, Ar-H), 7.59-7.63 (m, 3H, Ar-H), 8.55 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.4 Hz, N=CH aromatik (piridin)). **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 40.8, 121.9, 127.9, 130.5, 130.7, 131.0, 133.8, 134.2, 134.4, 134.9, 143.7, 150.6, 152.6, 153.4, 205.0. **Molekül Ağırlığı:** 482.6 (C<sub>29</sub>H<sub>30</sub>N<sub>4</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.17; H, 6.27; N, 11.61; S, 6.64; **deneyisel**, C, 72.25; H, 6.32; N, 11.55; S, 6.57.

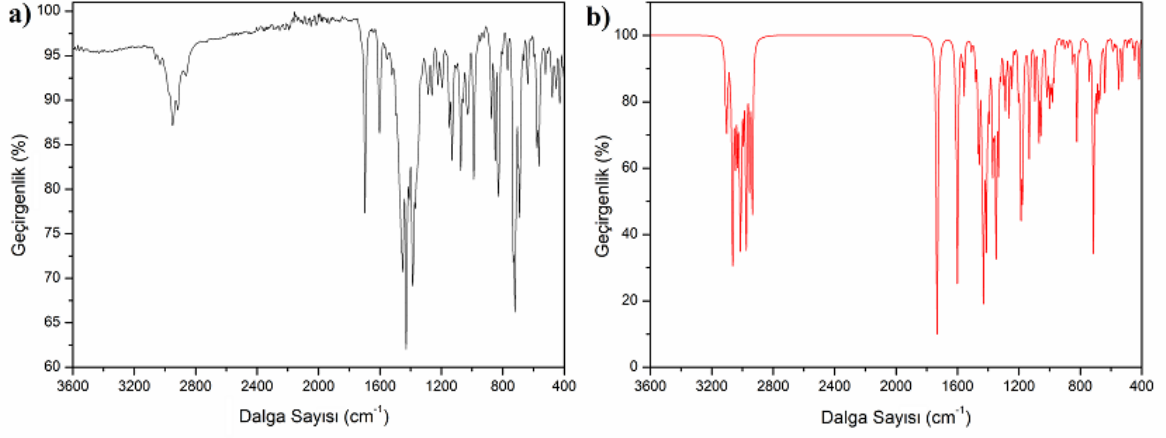
### 3.34 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(piridin-4-il)-4-benzil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il]sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2n)



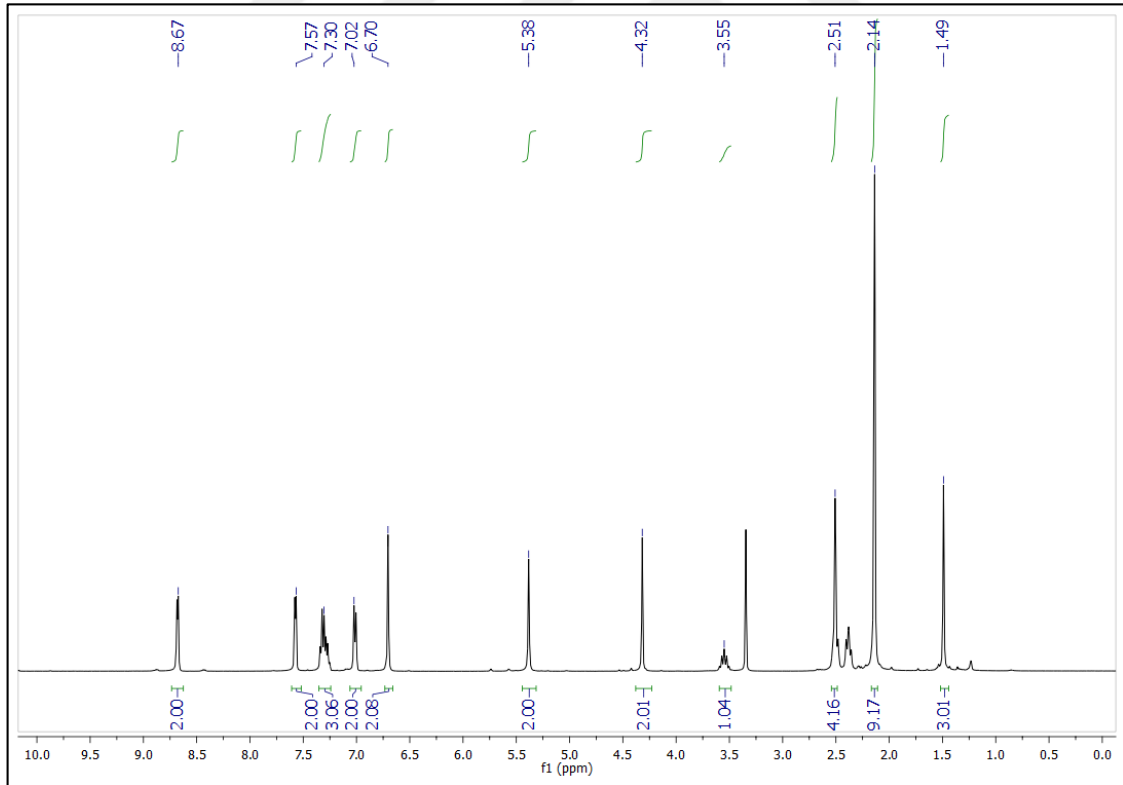
**Şekil 3.34.1** 2n molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b).

Şekil 3.34.1 de **2n** molekülün iki ve üç boyuttaki gösterimleri verilmiştir. Üç boyuttaki gösterimde başlangıç geometrisi Gaussview programı ile çizilmiş ve B3LYP/cc-pVDZ yaklaşımı ile molekülün enerjisinin minimum olduğu optimize yapı elde edilmiştir. Şekil 3.34.2 de molekülün deneyisel FT-IR ve hesaplamalar sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulan simüle IR spektrumu verilmiştir. Simüle spektrumun eldesinde B3LYP/cc-pVDZ yöntemi kullanılmış ve elde edilen değerler 0.9712 ile çarpılarak ölçeklendirilmiştir.

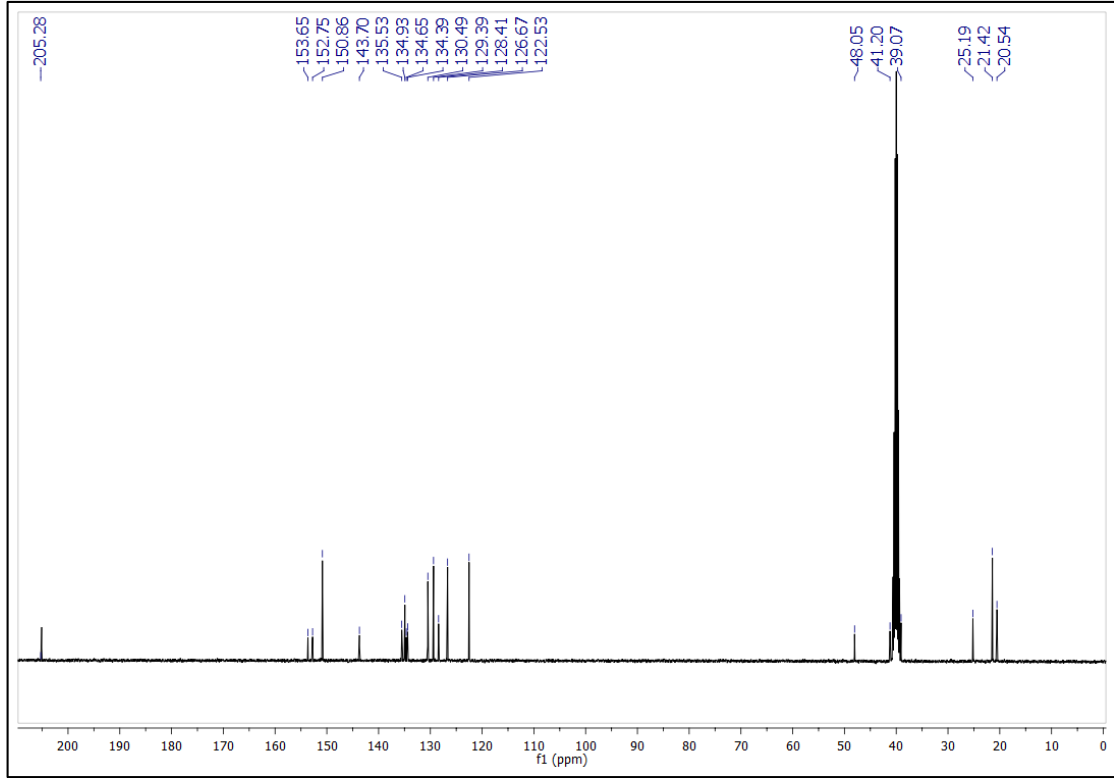
Molekölün deneysel olarak elde edilen  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumları şekil 3.34.3 ve 3.34.4 de verilmiştir.



Şekil 3.34.2 2n molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b)



Şekil 3.34.3 2n molekülü' nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



Şekil 3.34.4 2n molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 120.9 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2969-3042 (Ar-H), 2854-2945 (C-H), 1716 (C=O), 1423 (C=C), 1363 (C=N), 1117 (C-N), 1036 (N-N), 698 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.48-2.55 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.55 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J$  = 8.80 Hz ), 4.32 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 5.38 (s, 2H, N-CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), 6.70 (s, 2H, Ar-H, (mezitilen)), 7.00-7.02 (m, 2H, Ar-H), 7.25-7.34 (m, 3H, Ar-H), 7.57 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.8 Hz, C=CH aromatik (piridin)), 8.68 (d, 2H, Ar-H,  $J$  = 4.8 Hz, N=CH aromatik (piridin)).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.0, 41.2, 48.1, 122.5, 126.7, 128.4, 129.4, 130.5, 134.4, 134.7, 134.9, 135.5, 143.7, 150.9, 152.8, 153.7, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 496.7 (C<sub>30</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.55; H, 6.49; N, 11.28; S, 6.46; **deneysel**, C, 72.40; H, 6.55; N, 11.35; S, 6.55.

**Tablo 3.34.1** 2n molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları.

| Titreşim Modları                                    | Deneysel | B3LYP/cc-pVDZ |
|-----------------------------------------------------|----------|---------------|
| $\nu_s(\text{C-H})$ R1                              | 3042     | 3119          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | -        | 3100          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | 3025     | 3090          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R2                              | 3012     | 3085          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R2                           | -        | 3078          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R4                              | 2989     | 3072          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R4                           | 2969     | 3065          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ ethanon                    | -        | 3055          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | 2945     | 3028          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | -        | 3010          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ R3                            | 2923     | 2985          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ ethanon                       | 2874     | 2973          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R2                            | -        | 2950          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R3                            | 2854     | 2930          |
| $\nu_s(\text{C=O})$                                 | 1716     | 1784          |
| $\nu(\text{C=C})$ R2                                | 1423     | 1585          |
| $\nu(\text{C=C})$ R1                                | -        | 1565          |
| $\nu(\text{C=N})$ triazol + $\nu(\text{C=C})$ R1    | 1363     | 1455          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2 + $\gamma(\text{C-H})$ R2 | -        | 1420          |
| $\alpha(\text{C-H})$ R4                             | 1375     | 1405          |
| $\alpha(\text{C-H}_2)$ R3                           | -        | 1380          |
| $\alpha(\text{C-H}_3)$ R2                           | -        | 1370          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2                           | 1320     | 1355          |
| $\gamma(\text{C-H})$ R1                             | -        | 1182          |
| $\nu(\text{N-N})$                                   | 1036     | 1090          |
| $\nu(\text{C-C})$ R4                                | -        | 989           |
| $\beta(\text{C-H})$ R1                              | 920      | 964           |
| $\beta(\text{C-H})$ R2                              | -        | 885           |
| $\beta(\text{C-H})$ R3                              | -        | 850           |
| $\nu(\text{C-S})$                                   | 698      | 740           |

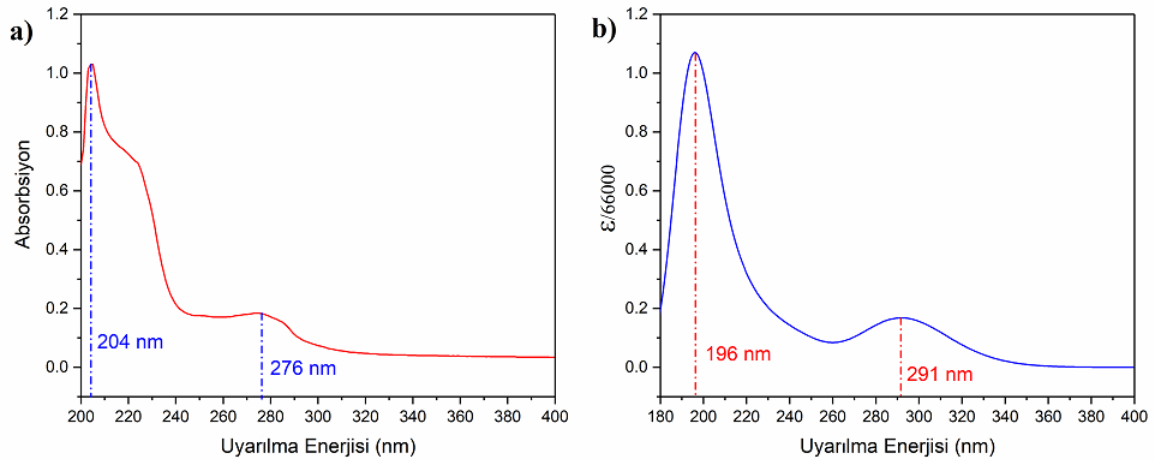
$\nu$ , gerilme;  $\alpha$ , makaslama;  $\gamma$ , sallanma;  $\omega$ , dalgalanma; s, simetrik; as, asimetrik;

$\beta$ , burkulma;  $\delta$ , düzlem dışı burkulma R1; piridin halkası; R2; mezitilen halkası;

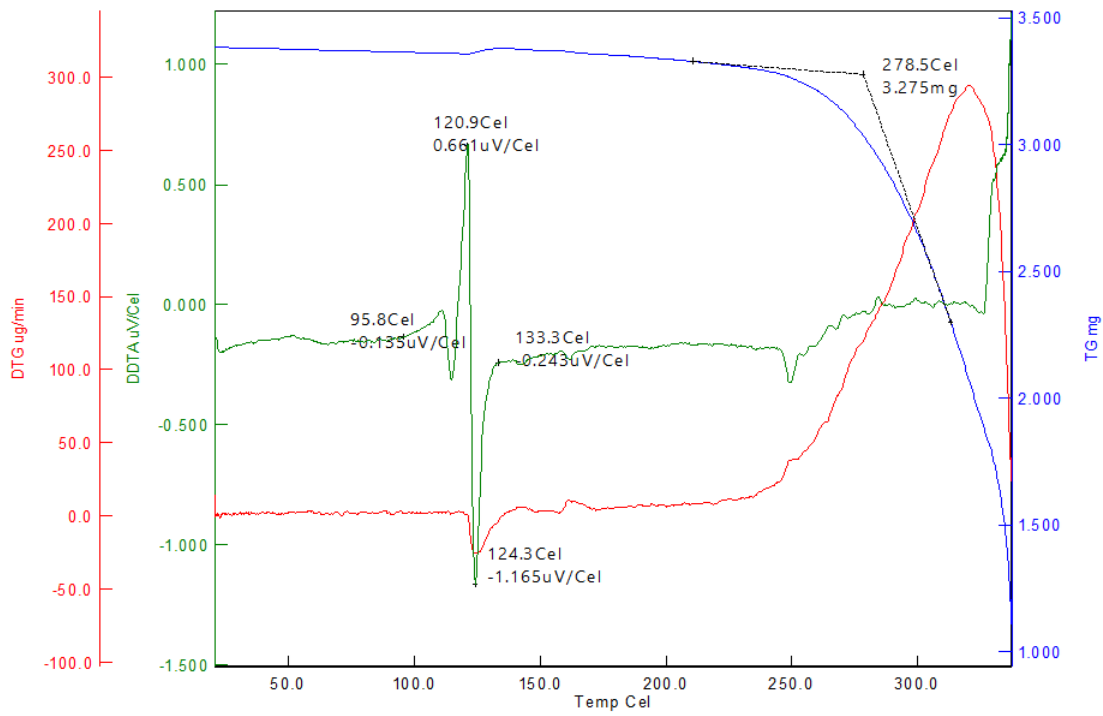
R3; siklobütan halkası; R4; fenil grubu.

**Tablo 3.34.2** 2n molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri.

| Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ | Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ |
|------|------------------------------------|-----------------------------|------|------------------------------------|-----------------------------|
| C1   | 152.8                              | 164.4                       | C27  | 134.40                             | 136.10                      |
| C2   | 153.7                              | 166.1                       | C28  | 134.70                             | 135.80                      |
| C3   | 143.7                              | 149.9                       | C29  | 135.50                             | 135.50                      |
| C4   | 122.5                              | 119.3                       | C30  | 134.90                             | 136.40                      |
| C5   | 150.9                              | 157.1                       | C31  | 134.40                             | 133.50                      |
| C6   | 150.9                              | 158.1                       | H4   | 7.57                               | 7.86                        |
| C7   | 122.5                              | 58.9                        | H5   | 8.68                               | 9.32                        |
| C8   | 41.2                               | 53.3                        | H6   | 8.68                               | 9.41                        |
| C9   | 205.3                              | 216.8                       | H7   | 7.57                               | 8.31                        |
| C10  | 39.1                               | 48.2                        | H8   | 4.32                               | 4.10 <sup>a</sup>           |
| C11  | 39.1                               | 46.8                        | H10  | 3.55                               | 4.08                        |
| C12  | 39.1                               | 53.9                        | H11  | 2.52                               | 2.30 <sup>a</sup>           |
| C13  | 39.1                               | 56.1                        | H13  | 2.52                               | 2.30 <sup>a</sup>           |
| C14  | 25.2                               | 33.2                        | H14  | 1.49                               | 1.76 <sup>a</sup>           |
| C15  | 130.5                              | 152.6                       | H18  | 6.71                               | 7.19                        |
| C17  | 129.4                              | 144.5                       | H20  | 6.71                               | 7.15                        |
| C18  | 128.4                              | 136.7                       | H22  | 2.14                               | 2.35 <sup>a</sup>           |
| C19  | 126.7                              | 143.6                       | H23  | 2.14                               | 2.70 <sup>a</sup>           |
| C20  | 128.4                              | 136.8                       | H24  | 2.14                               | 2.65 <sup>a</sup>           |
| C21  | 129.4                              | 144.7                       | H25  | 5.38                               | 5.63 <sup>a</sup>           |
| C22  | 20.5                               | 31.5                        | H27  | 7.31                               | 7.32                        |
| C23  | 21.4                               | 29.7                        | H28  | 7.01                               | 7.78                        |
| C24  | 20.5                               | 31.2                        | H29  | 7.31                               | 7.82                        |
| C25  | 48.1                               | 57.1                        | H30  | 7.01                               | 7.88                        |
| C26  | 143.7                              | 143.3                       | H31  | 7.31                               | 7.91                        |



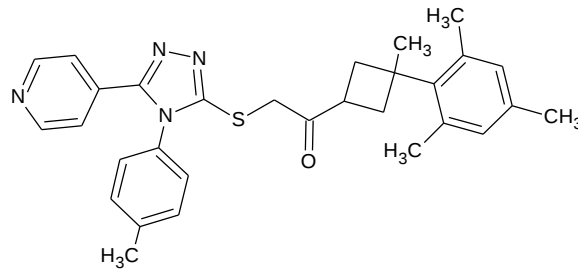
**Şekil 3.34.5** 2n molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b)



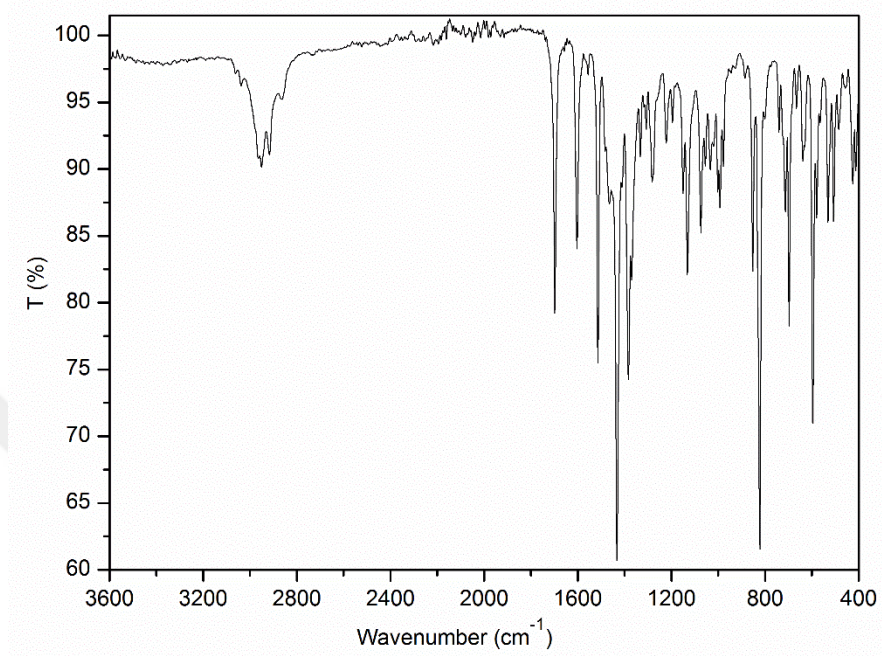
Şekil 3.34.6 2n molekülün termogravimetrik analiz sonucu.

Şekil 3.34.5 te görüldüğü üzere **2n** molekülünün başlıca iki tane absorbands piki bulunmaktadır. Yapılan hesaplamalar sonucunda 276 nm deki pikin HOMO→LUMO geçişine ait olduğu bulunmuştur. Şekil 3.34.6 incelendiğinde **2n** molekülünün 120.9 °C de eridiği ve 278.5 °C de bozunduğu görülmektedir.

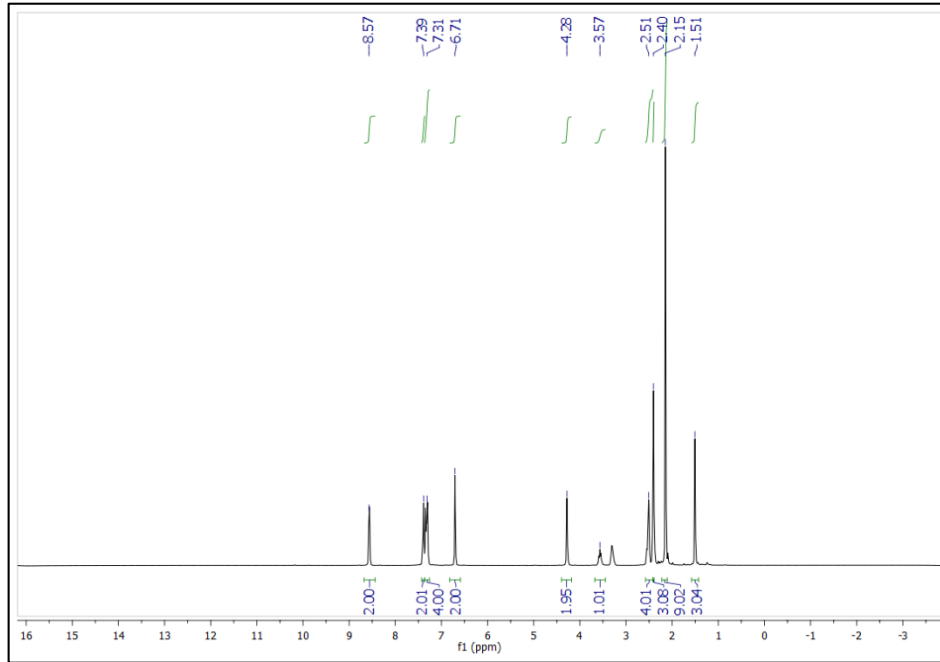
### 3.35 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-(*p*-tollil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon'un Karakterizasyonu (2o)



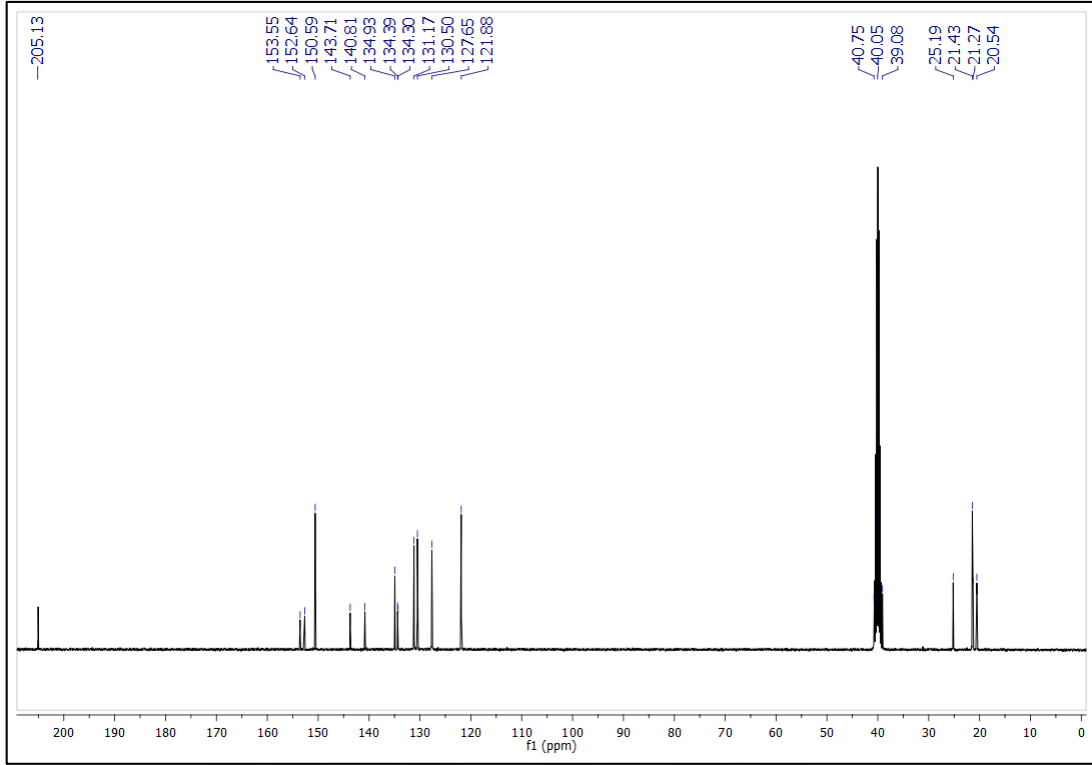
**2o** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.35.1, Şekil 3.35.2 ve Şekil 3.35.3’de verilmiştir.



Şekil 3.35.1 **2o** molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



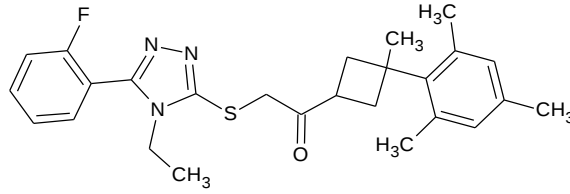
Şekil 3.35.2 **2o** molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



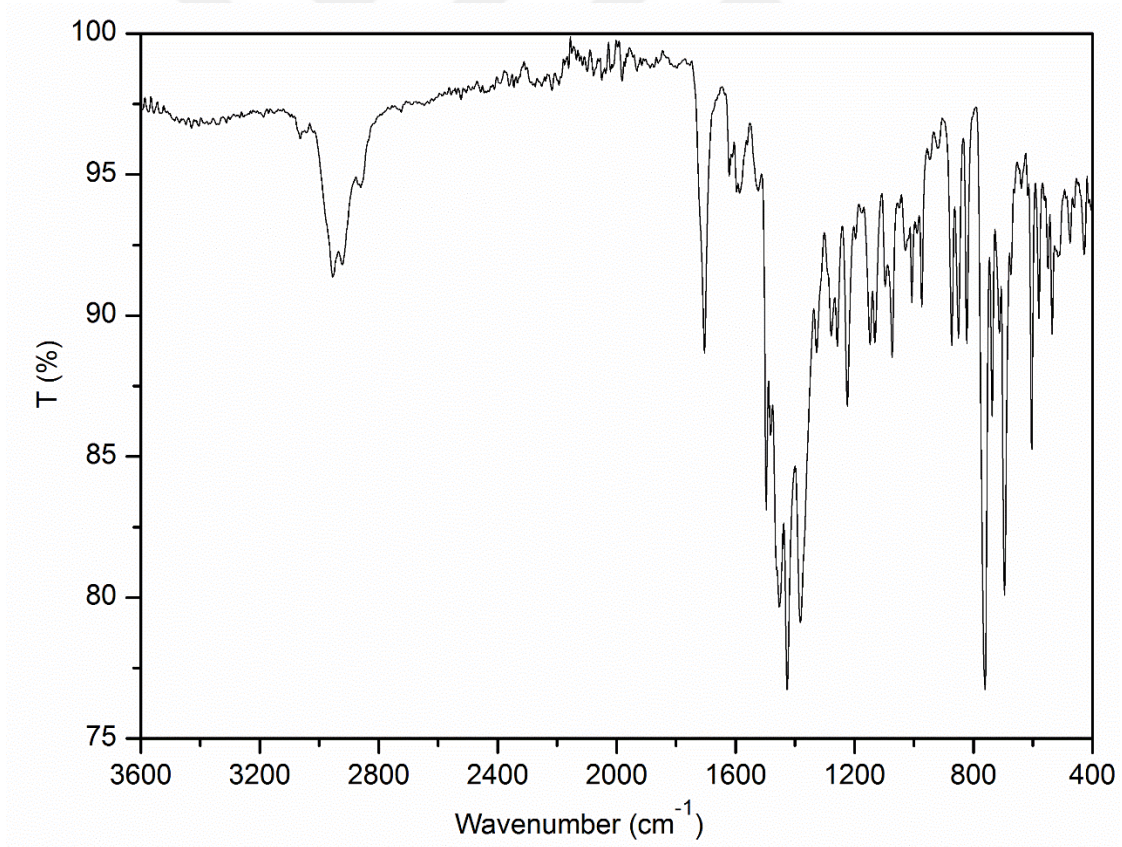
Şekil 3.35.3 2o molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 145-147 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2947-3043 (Ar-H), 2865-2918 (C-H), 1694 (C=O), 1428 (C=C), 1333 (C=N), 1121 (C-N), 1035 (N-N), 694 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.51 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.15 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.40 (s, 3H, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-CH<sub>3</sub>), 2.42-2.56 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.57 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.70$  Hz), 4.28 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.71 (s, 2H, Ar-H, (mezitilen)), 7.31 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.7$  Hz, C=CH aromatik (piridin)), 7.32-7.40 (m, 4H, Ar-H), 8.57 (d, 2H, Ar-H,  $J = 4.5$  Hz, N=CH aromatik (piridin)).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.3, 21.4, 25.2, 39.0, 40.0, 40.8, 121.9, 127.7, 130.5, 131.2, 134.3, 134.4, 134.9, 140.8, 143.7, 150.6, 152.6, 153.4, 205.1. **Molekül Ağırlığı:** 496.6 (C<sub>30</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.55; H, 6.49; N, 11.28; S, 6.46; **deneysel**, C, 72.40; H, 6.55; N, 11.40; S, 6.39.

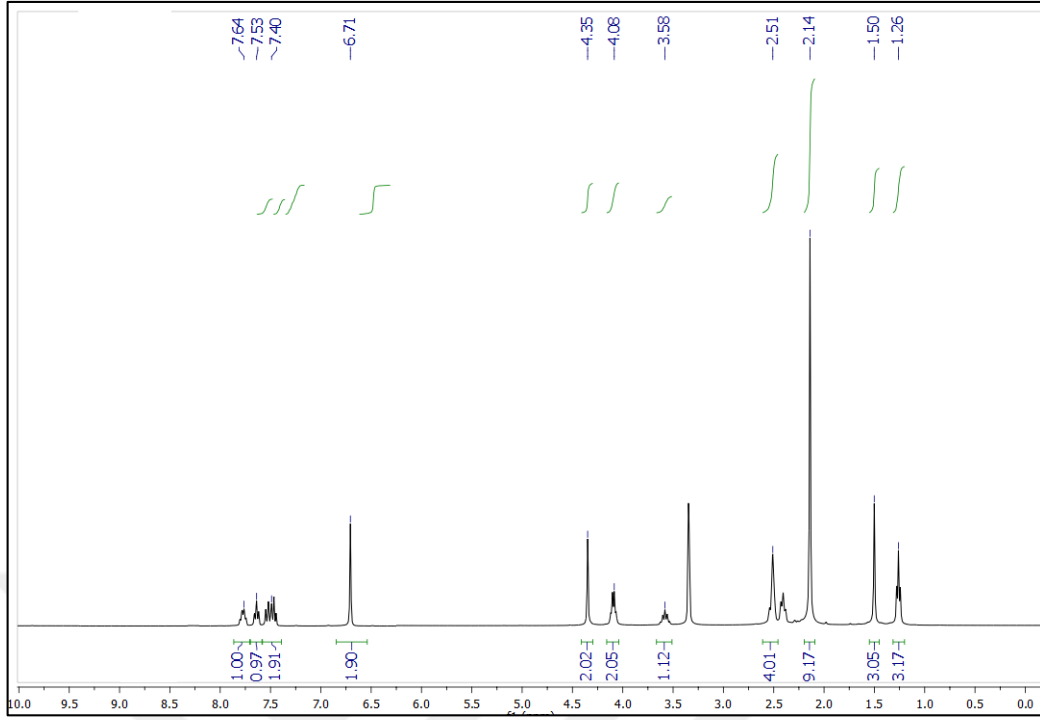
**3.36 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-{[5-(2-florofenil)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil}-etanon Karakterizasyonu (2p)**



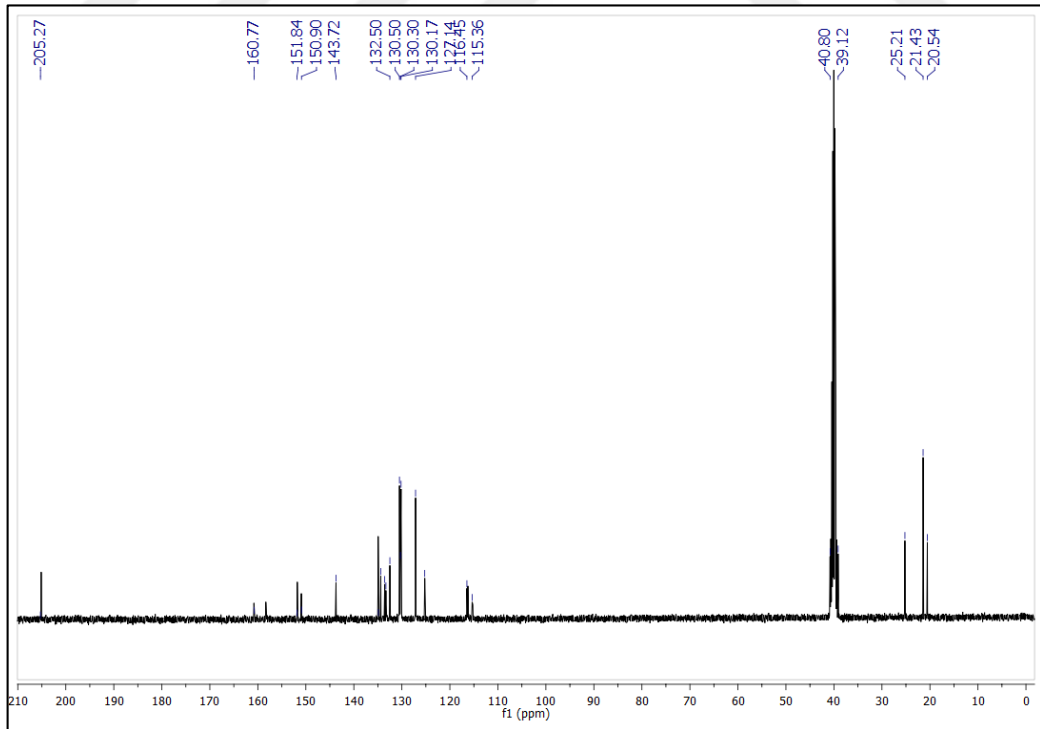
**2p** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.36.1, Şekil 3.36.2 ve Şekil 3.36.3’de verilmiştir.



**Şekil 3.36.1** 2p molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



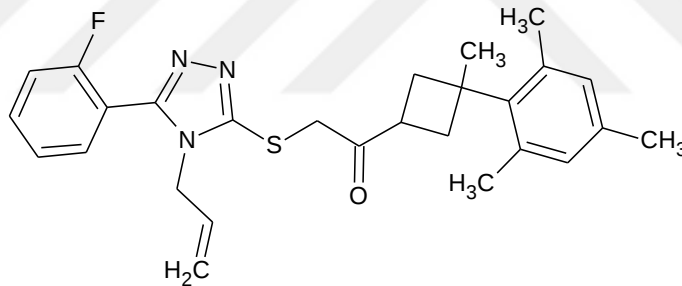
Şekil 3.36.2 2p molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



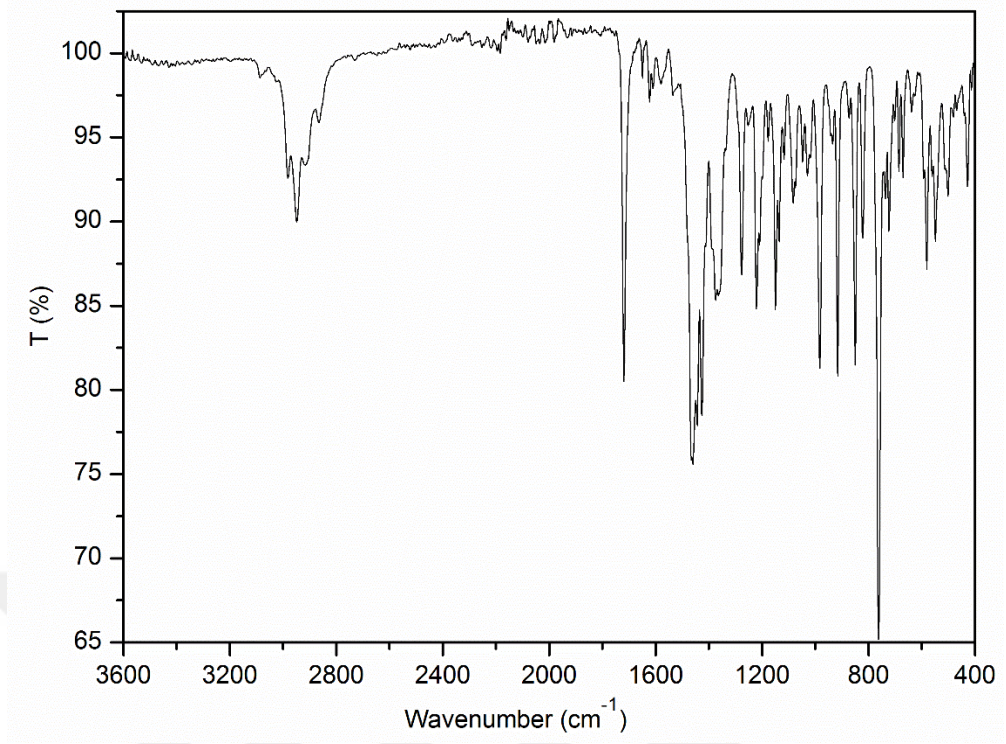
Şekil 3.36.3 2p molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 150-152 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 2980-3083 (Ar-H), 2861-2942 (C-H), 1720 (C=O), 1454 (C=C), 1372 (C=N), 1224 (C-F), 1024 (N-N), 720 (C-S); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 1.26 (t, 3H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>, *J* = 7.1 Hz), 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.42-2.54 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.58 (p, 1H, -CH- (siklobütan), *J* = 8.80 Hz), 4.09 (q, 2H, N-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>, *J* = 6.9 Hz), 4.35 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.36-7.45 (m, 2H, Ar-H), 7.51-7.54 (m, 1H, Ar-H), 7.62-7.68 (m, 2H, Ar-H). **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 15.4, 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 40.3, 41.2, 115.4, 116.5, 127.1, 130.2, 130.3, 130.5, 132.5, 143.7, 150.9, 151.8, 150.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 451.6 (C<sub>26</sub>H<sub>30</sub>FN<sub>3</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.15; H, 6.70; N, 9.30; S, 7.10; **deneysel,** C, 69.01; H, 6.90; N, 9.42; S, 7.25.

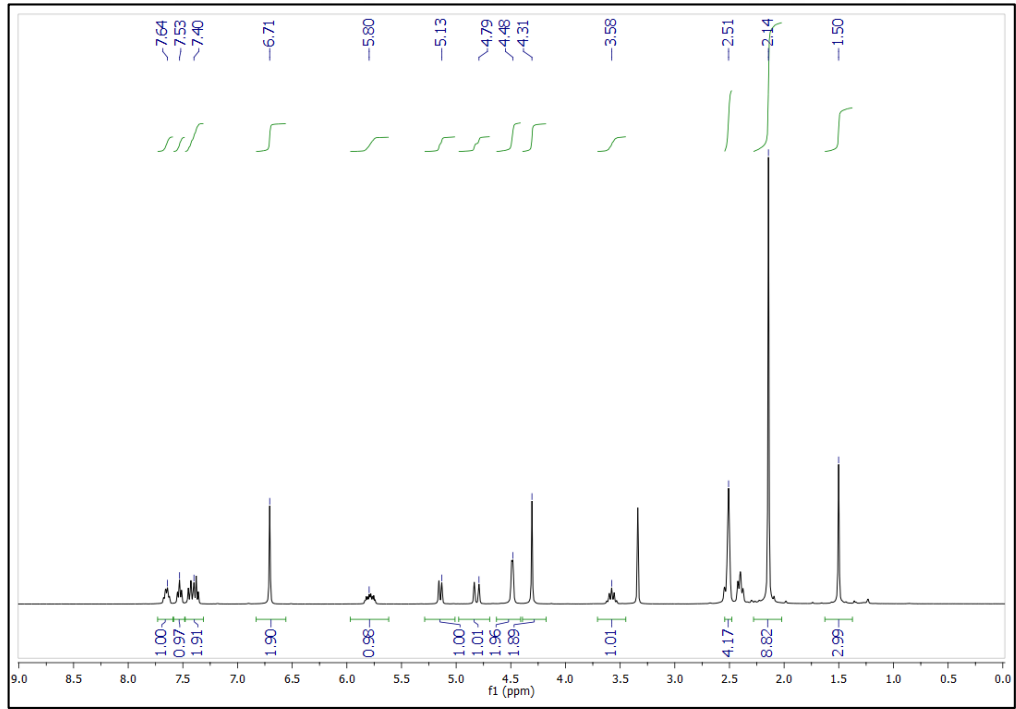
### 3.37 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-allil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2r)



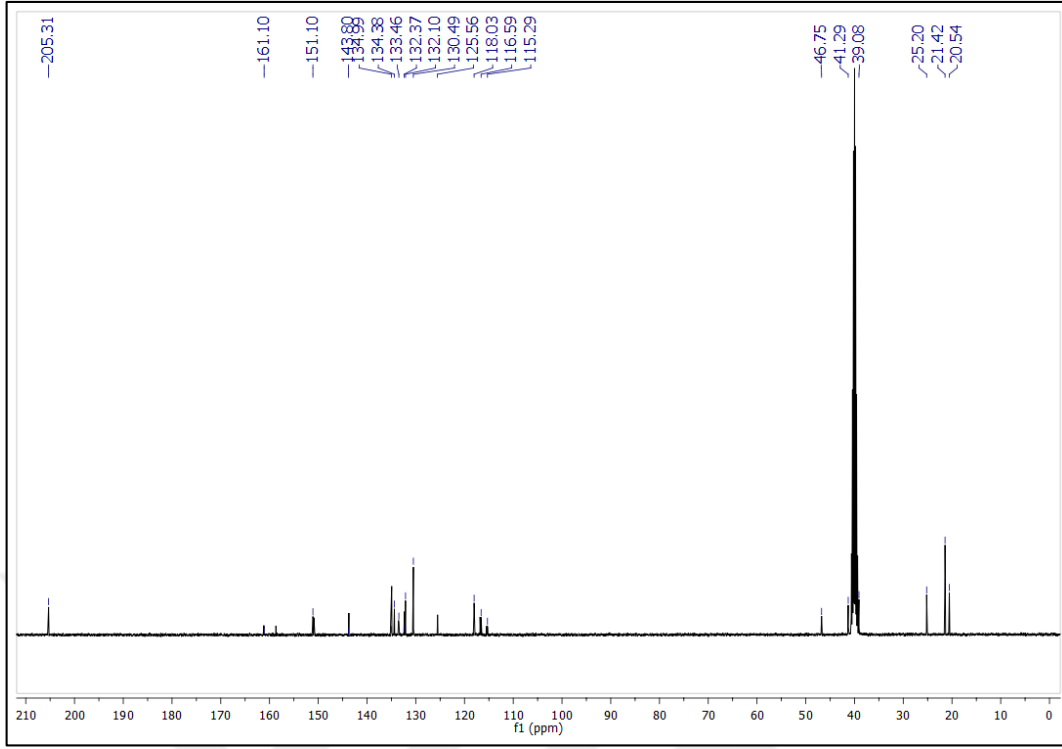
**2r** molekülünün FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR ve TGA spektrumu sırasıyla Şekil 3.37.1, Şekil 3.37.2, Şekil 3.37.3' ve 3.37.4' de verilmiştir.



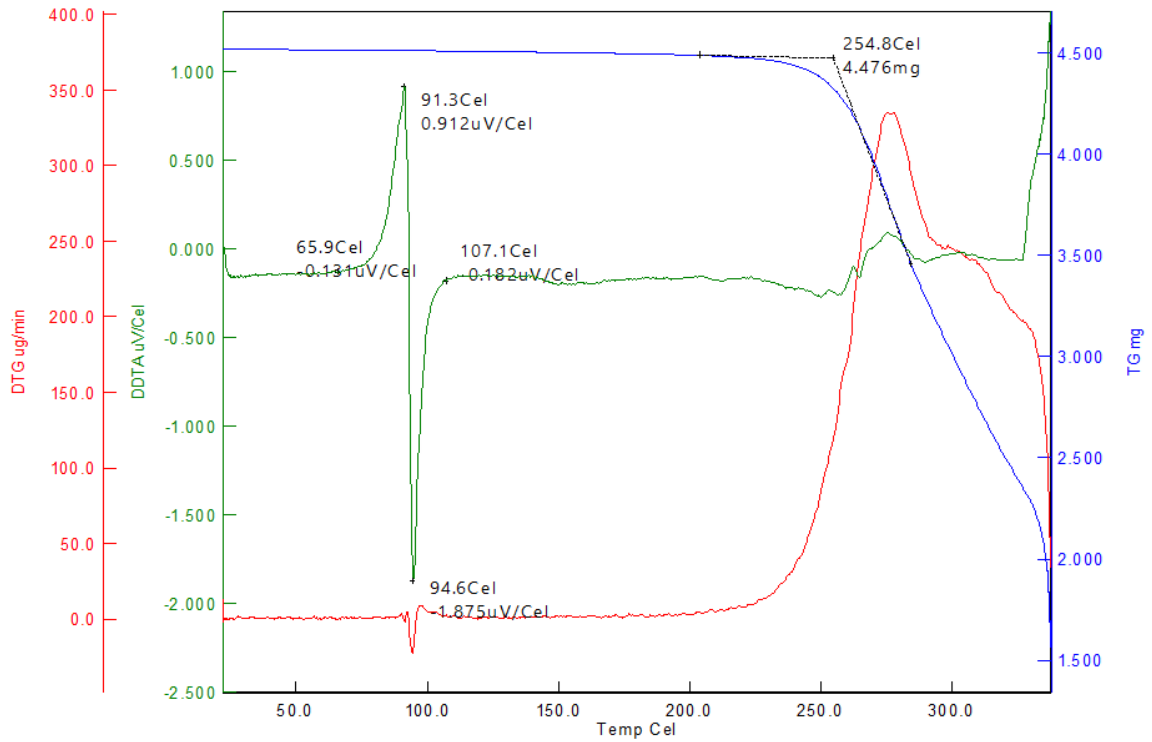
Şekil 3.37.1 2r molekülü' nün FT-IR spektrumu.



Şekil 3.37.2 2r molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



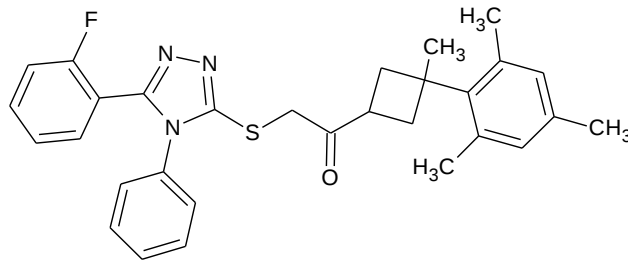
Şekil 3.37.3 2r molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.



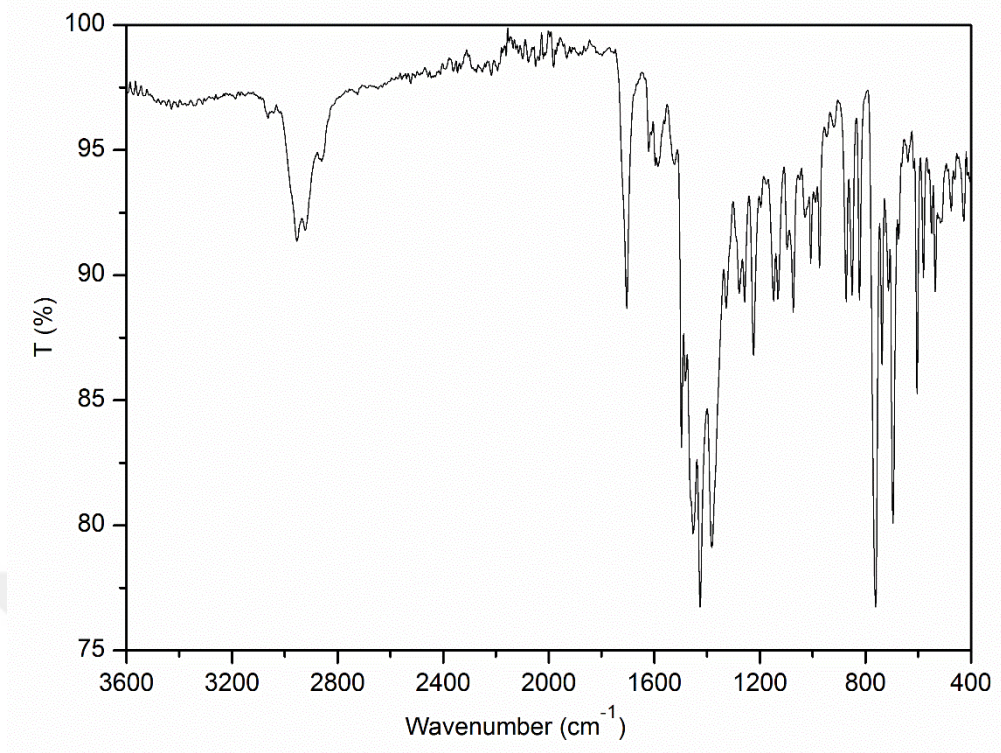
Şekil 3.37.4 2r molekülün termogravimetrik analiz sonucu.

**Erime noktası:** 91.3 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 2975-3080 (Ar-H), 2855-2945 (C-H), 1715 (C=O), 1440 (C=C), 1380 (C=N), 1217 (C-F), 1012 (N-N), 732 (C-S); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.46-2.54 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.58 (p, 1H, -CH- (siklobütan), *J* = 9.00 Hz), 4.31 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 4.44-4.52 (m, 2H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 4.81 (d, 1H, -N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>(trans) *J* = 17.2 Hz), 5.25 (d, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>, *J*<sub>cis</sub> = 10.4 Hz), 5.74-5.83 (m, 1H, N-CH<sub>2</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.36-7.45 (m, 2H, Ar-H), 7.53 (t, 1H, Ar-H, *J* = 7.3 Hz), 7.65 (dd, 2H, Ar-H, *J*<sub>1</sub> = 13.7 Hz, *J*<sub>2</sub> = 7.2 Hz). **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 41.3, 46.8, 115.3, 116.6, 118.0, 125.6, 130.5, 132.1, 132.4, 133.5, 134.4, 134.9, 143.8, 151.1, 161.1, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 463.6 (C<sub>27</sub>H<sub>30</sub>FN<sub>3</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 69.95; H, 6.52; N, 9.06; S, 6.92; **deneysel**, C, 69.81; H, 6.44; N, 9.15; S, 6.83.

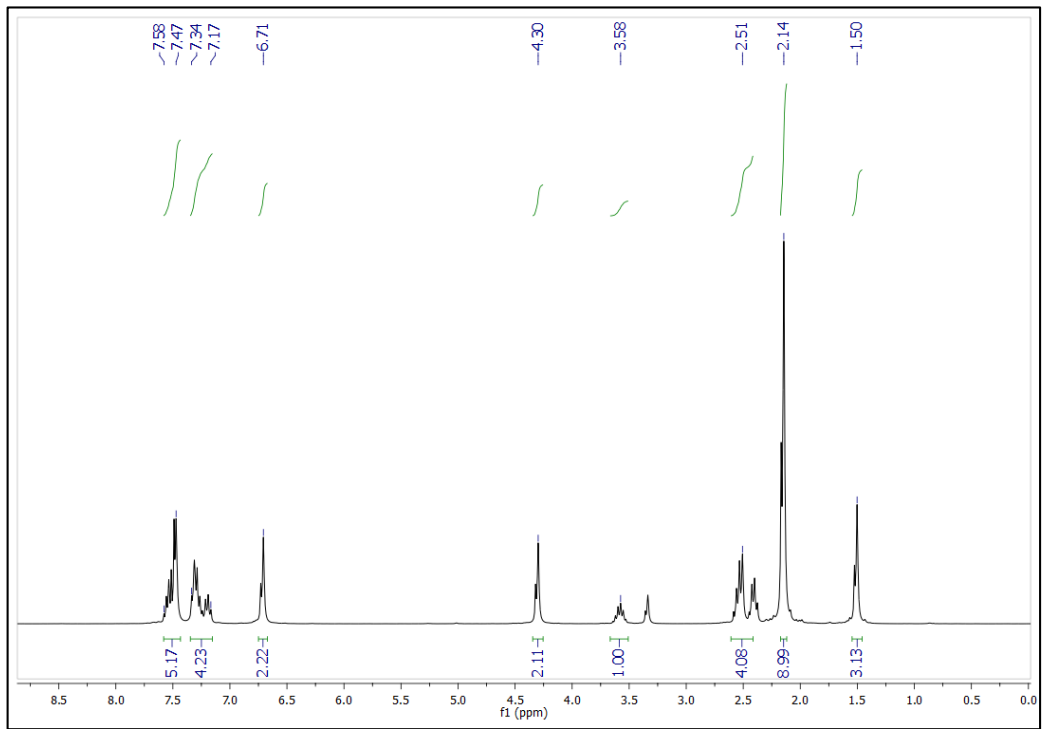
### 3.38 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-fenil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2s)



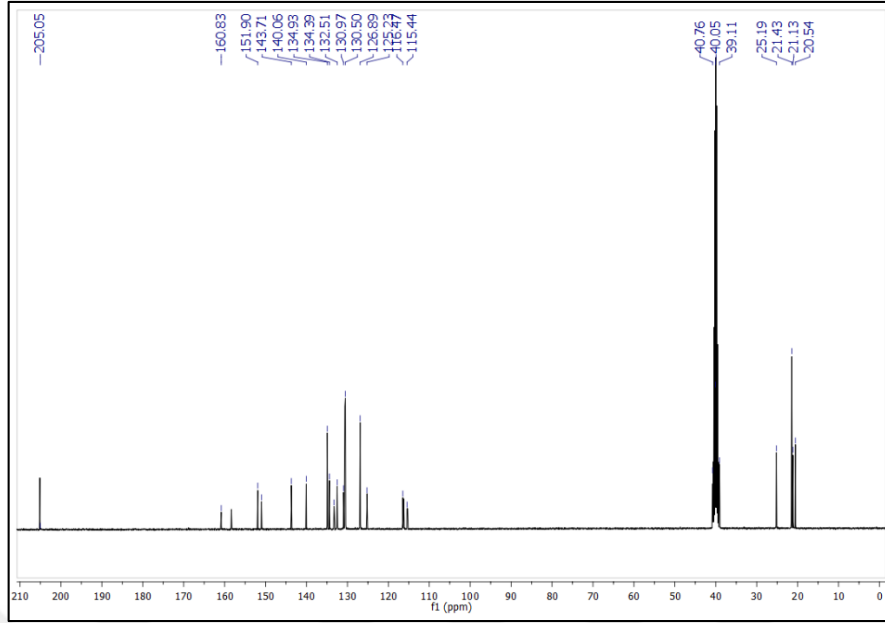
**2s** molekülünün FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.38.1, Şekil 3.38.2 ve Şekil 3.38.3’ de verilmiştir.



Şekil 3.38.1 2s molekülü' nün FT-IR spektrumu.



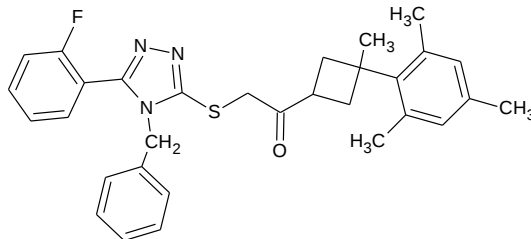
Şekil 3.38.2 2s molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



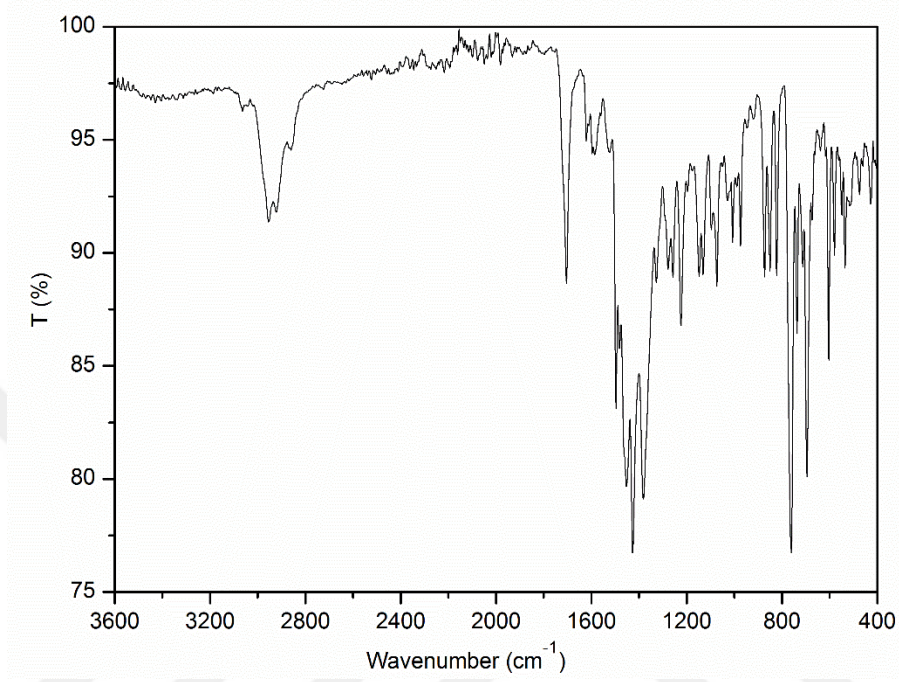
Şekil 3.38.3 2s molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 101 - 103 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2951-3059 (Ar-H), 2861-2920 (C-H), 1705 (C=O), 1426 (C=C), 1329 (C=N), 1224 (C-F), 1009 (N-N), 759 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.42-2.58 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.58 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J$  = 8.90 Hz ), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.71 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.17-7.34 (m, 4H, Ar-H), 7.47-7.58 (m, 5H, Ar-H).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $d_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 40.8, 115.4, 116.5, 127.1, 130.2, 130.3, 130.5, 132.5, 143.7, 150.9, 151.8, 160.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 499.6 (C<sub>30</sub>H<sub>30</sub>FN<sub>3</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.12; H, 6.05; N, 8.41; S, 6.42; **deneyisel**, C, 72.25; H, 6.21; N, 8.32; S, 6.50.

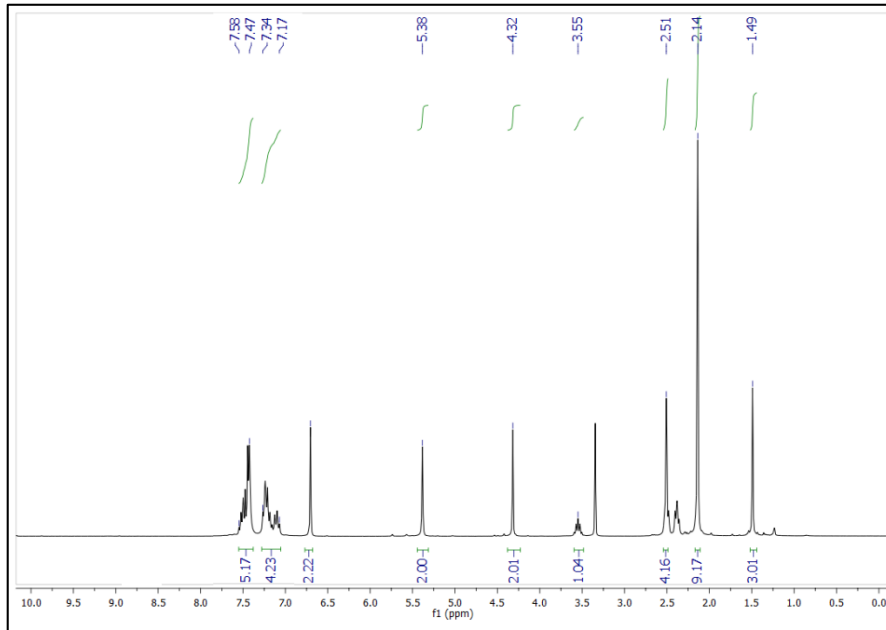
### 3.39 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(2-florofenil)-4-benzil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2t)



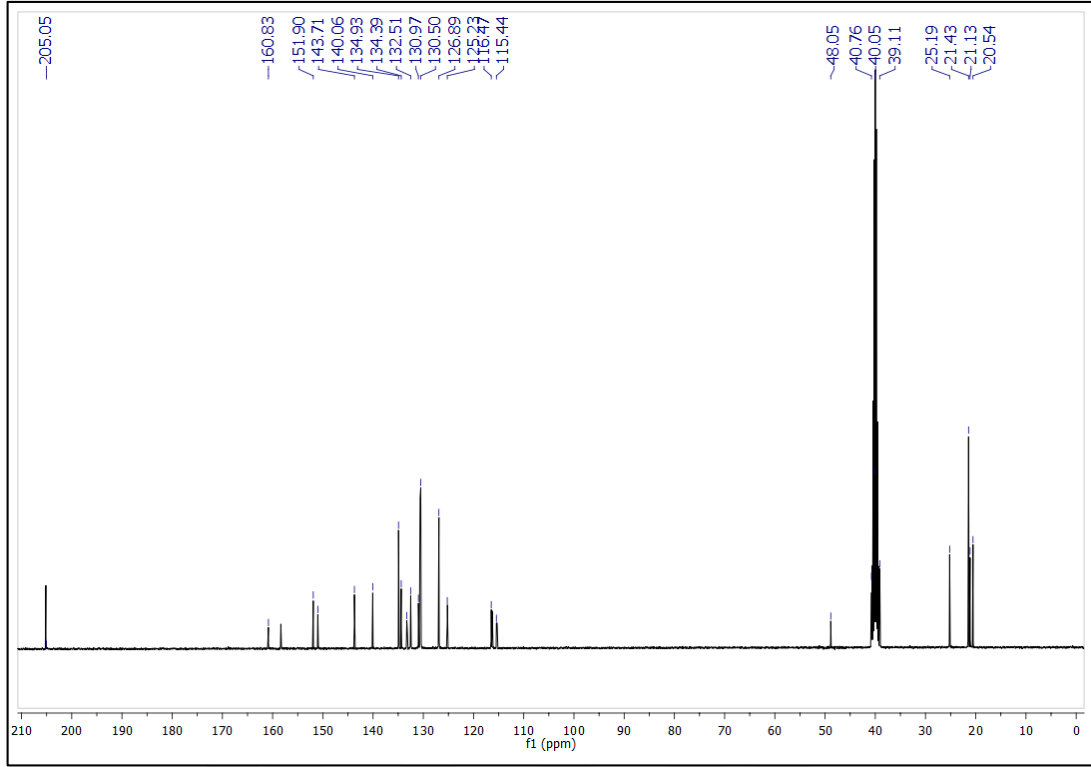
**2t** molekülünün FT-IR,  $^1\text{H}$ -NMR ve  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu sırasıyla Şekil 3.39.1, Şekil 3.39.2 ve Şekil 3.39.3’ de verilmiştir.



**Şekil 3.39.1** 2t molekülü’ nün FT-IR spektrumu.



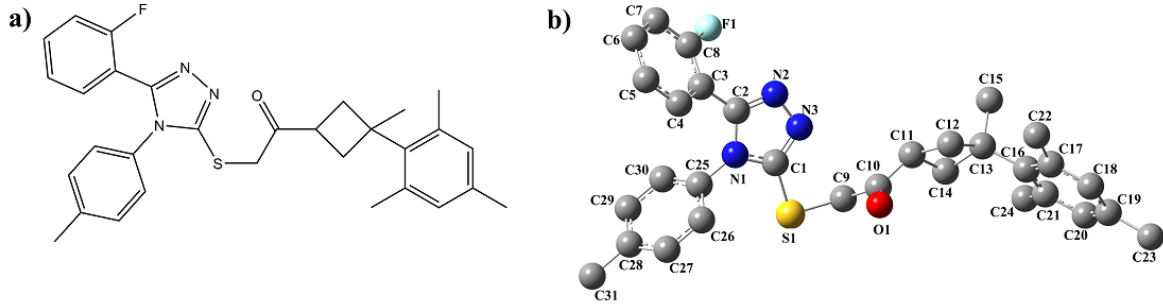
**Şekil 3.39.2** 2t molekülü’ nün  $^1\text{H}$ -NMR spektrumu.



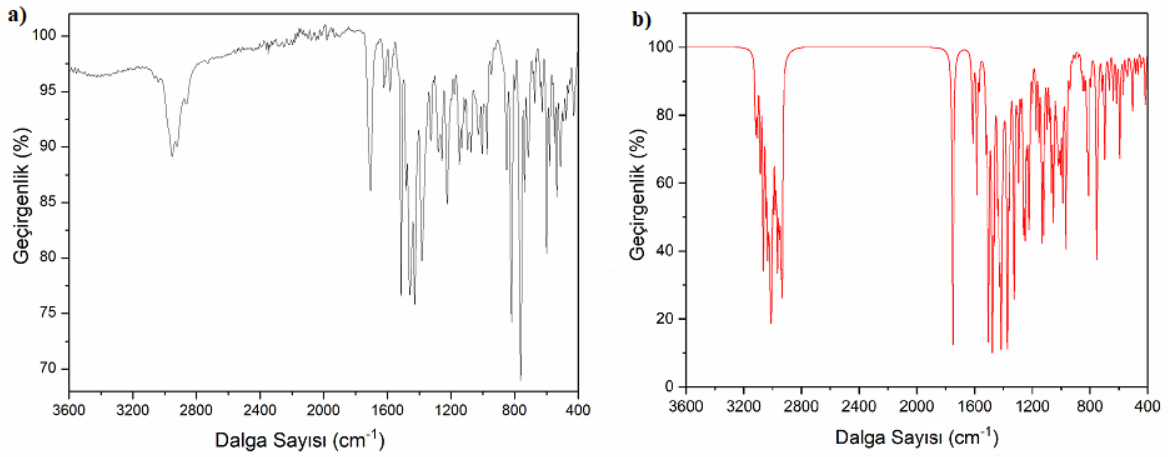
Şekil 3.39.3 2t molekülü' nün  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 85-87 °C; **FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\nu$ ):** 2950-3065 (Ar-H), 2866-2925 (C-H), 1715 (C=O), 1434 (C=C), 1321 (C=N), 1220 (C-F), 1018 (N-N), 761 (C-S);  **$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 1.49 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.51-2.57 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.55 (p, 1H, -CH- (siklobütan),  $J = 8.70$  Hz), 4.32 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 5.38 (s, 2H, N-CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), 6.71 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.17-7.34 (m, 4H, Ar-H), 7.47-7.58 (m, 5H, Ar-H).  **$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz, DMSO- $\text{d}_6$ ,  $\delta$ , ppm):** 20.5, 21.4, 25.2, 39.1, 40.0, 40.8, 48.1 115.4, 116.5, 125.2, 126.9, 130.5, 130.9, 132.5, 134.4, 134.9, 140.0, 143.7, 151.9, 160.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 513.6 (C<sub>31</sub>H<sub>32</sub>FN<sub>3</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.48; H, 6.28; N, 8.18; S, 6.24; **deneysel,** C, 72.52; H, 6.35; N, 8.15; S, 6.30.

### 3.40 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütil-2-[[5-(2-florofenil)-4-(*p*-tollil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon Karakterizasyonu (2u)



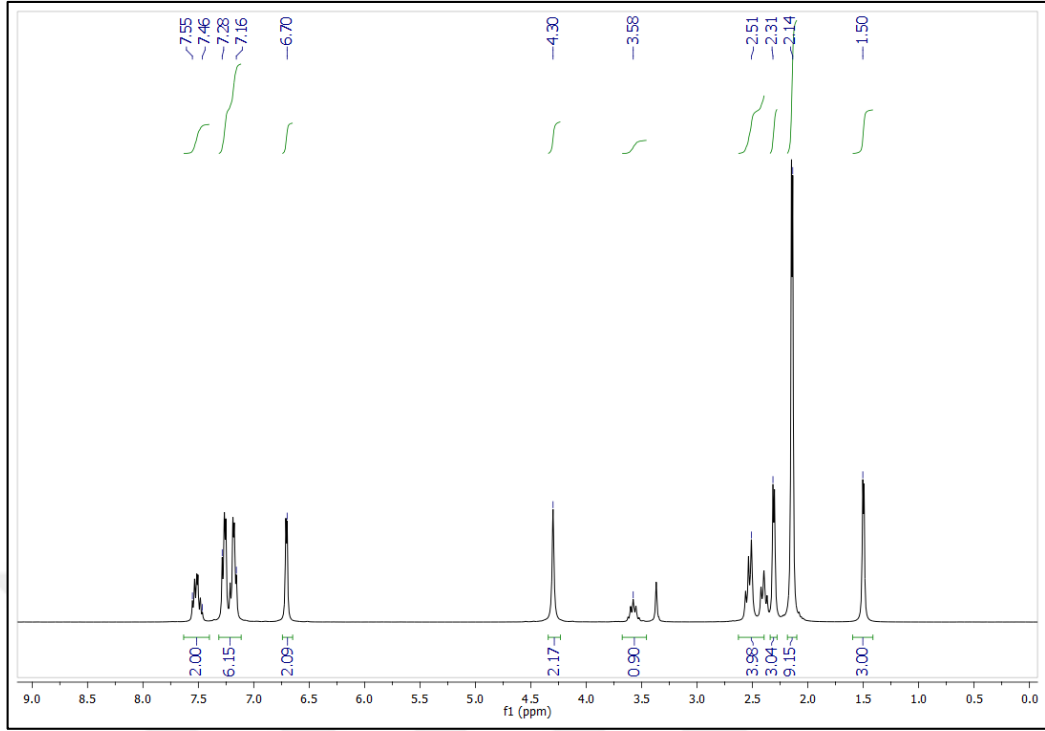
Şekil 3.40.1 2u molekülün iki boyutlu (a) ve üç boyutlu gösterimi (b).



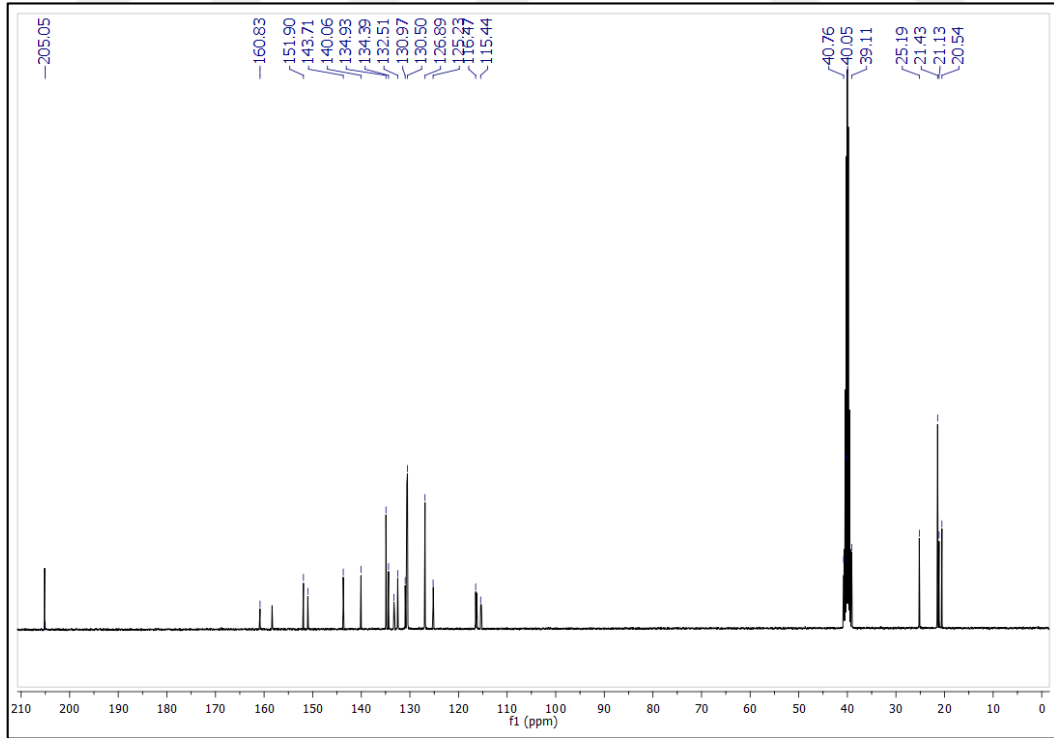
Şekil 3.40.2 2u molekülünün deneysel FT-IR (a) ve hesaplanan IR spektrumu (b)

Şekil 3.40.1 de **2u** molekülün iki ve üç boyuttaki gösterimleri verilmiştir. Üç boyuttaki gösterimde başlangıç geometrisi Gaussview programı ile çizilmiş ve B3LYP/cc-pVDZ yaklaşımı ile molekülün enerjisinin minimum olduğu optimize yapı elde edilmiştir. Şekil 3.40.2 de molekülün deneysel FT-IR ve hesaplamalar sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulan simüle IR spektrumu verilmiştir.

Molekülün deneysel olarak elde edilen <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR spektrumları şekil 3.41.3 ve 3.42.4 de verilmiştir.



Şekil 3.40.3 2u molekülü' nün <sup>1</sup>H-NMR spektrumu.



Şekil 3.40.4 2u molekülü' nün <sup>13</sup>C-NMR spektrumu.

**Erime noktası:** 62.8 °C; **FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>, v):** 2959-3068 (Ar-H), 2861-2919 (C-H), 1705 (C=O), 1454 (C=C), 1324 (C=N), 1221 (C-F), 1028 (N-N), 762 (C-S); **<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 1.50 (s, 3H, -CH<sub>3</sub> (siklobütan)), 2.14 (s, 9H, -CH<sub>3</sub> (mezitilen)), 2.31 (s, 3H, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-CH<sub>3</sub>), 2.40-2.56 (m, 4H, -CH<sub>2</sub>- (siklobütan)), 3.58 (p, 1H, -CH- (siklobütan), *J* = 8.90 Hz ), 4.30 (s, 2H, S-CH<sub>2</sub>-), 6.70 (s, 2H, Ar-H (mezitilen)), 7.15-7.28 (m, 6H, Ar-H), 7.46-7.55 (m, 2H, Ar-H). **<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ, ppm):** 20.5, 21.1, 21.4, 25.2, 39.1, 40.0, 40.8, 115.4, 116.5, 125.2, 126.9, 130.5, 130.9, 132.5, 134.4, 134.9, 140.0, 143.7, 151.9, 160.8, 205.3. **Molekül Ağırlığı:** 513.6 (C<sub>31</sub>H<sub>32</sub>FN<sub>3</sub>OS). **Elementel analiz (teorik):** C, 72.48; H, 6.28; N, 8.18; S, 6.24; **deneysel**, C, 72.40; H, 6.21; N, 8.29; S, 6.19.

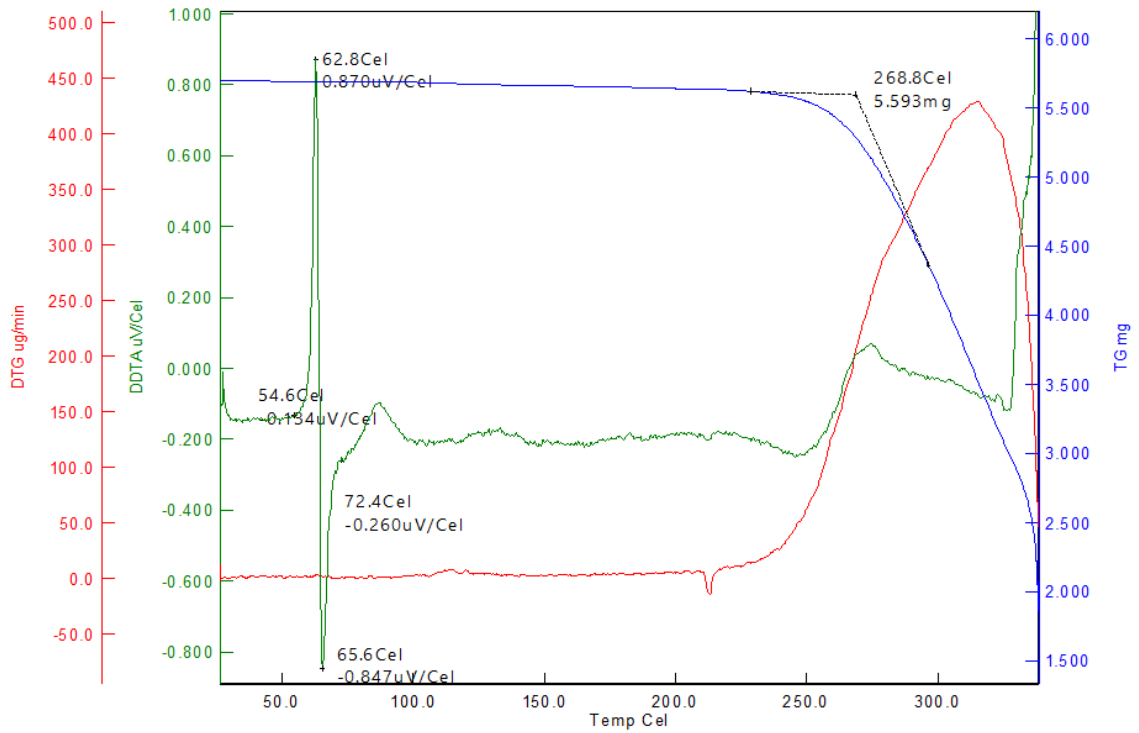
**Tablo 3.40.1** 2u molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış kimyasal kayma değerleri.

| Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ | Atom | Deneysel<br>(DMSO-d <sub>6</sub> ) | Hesaplanan<br>B3LYP/cc-pVDZ |
|------|------------------------------------|-----------------------------|------|------------------------------------|-----------------------------|
| C1   | 151.9                              | 159.6                       | C26  | 132.50                             | 134.90                      |
| C2   | 143.7                              | 165.9                       | C27  | 130.50                             | 137.60                      |
| C3   | 116.5                              | 125.1                       | C28  | 126.90                             | 150.50                      |
| C4   | 126.9                              | 138.1                       | C29  | 132.50                             | 137.70                      |
| C5   | 126.9                              | 130.4                       | C30  | 130.50                             | 134.80                      |
| C6   | 130.5                              | 138.4                       | C31  | 25.20                              | 30.30                       |
| C7   | 116.5                              | 123.8                       | H4   | 7.21                               | 7.28                        |
| C8   | 160.8                              | 168.8                       | H5   | 7.21                               | 7.41                        |
| C9   | 40.1                               | 52.7                        | H6   | 7.51                               | 7.84                        |
| C10  | 205.3                              | 215.1                       | H7   | 7.51                               | 7.58                        |
| C11  | 39.1                               | 52.3                        | H9   | 4.30                               | 4.20 <sup>a</sup>           |
| C12  | 39.1                               | 46.4                        | H11  | 3.58                               | 4.00                        |
| C13  | 39.1                               | 54.2                        | H12  | 2.48                               | 2.96 <sup>a</sup>           |
| C14  | 39.1                               | 51.9                        | H14  | 2.48                               | 2.92 <sup>a</sup>           |
| C15  | 25.2                               | 33.7                        | H15  | 1.50                               | 2.07 <sup>a</sup>           |
| C16  | 140                                | 152.6                       | H18  | 6.70                               | 7.23                        |
| C17  | 140.1                              | 144.9                       | H20  | 6.70                               | 7.24                        |
| C18  | 134.9                              | 136.8                       | H22  | 2.14                               | 2.64 <sup>a</sup>           |
| C19  | 132.5                              | 143.7                       | H23  | 2.14                               | 2.69 <sup>a</sup>           |
| C20  | 134.4                              | 136.8                       | H24  | 2.14                               | 2.65 <sup>a</sup>           |
| C21  | 134.9                              | 144.6                       | H26  | 7.21                               | 7.24                        |
| C22  | 20.5                               | 31.6                        | H27  | 7.21                               | 7.65                        |
| C23  | 21.1                               | 29.8                        | H29  | 7.21                               | 7.99                        |
| C24  | 21.4                               | 31.4                        | H30  | 7.21                               | 7.96                        |
| C25  | 134.9                              | 139.1                       | H31  | 2.31                               | 2.95 <sup>a</sup>           |

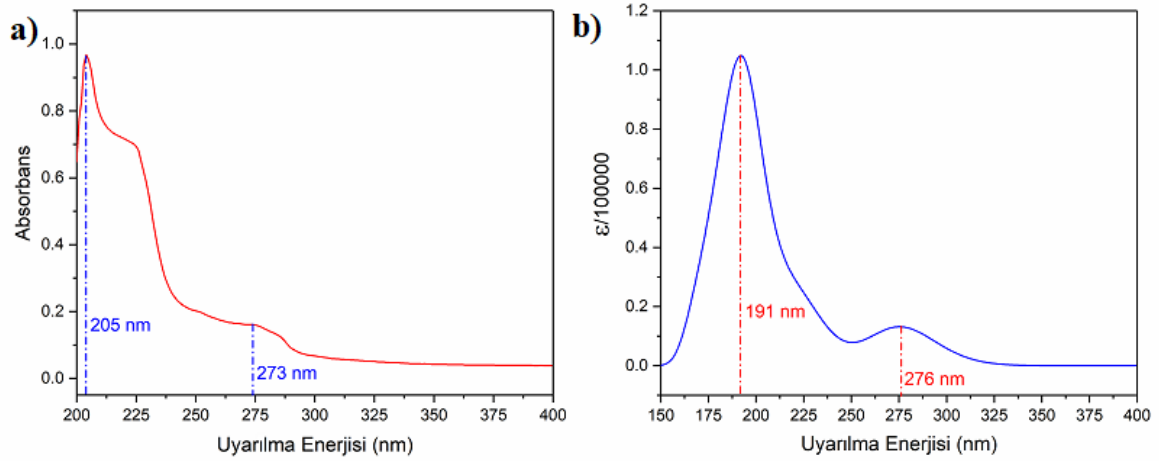
**Tablo 3.40.2** 2u molekülünün deneysel ve teorik olarak hesaplanmış titreşim frekansları.

| Titreşim Modları                                    | Deneysel | B3LYP/cc-pVDZ |
|-----------------------------------------------------|----------|---------------|
| $\nu_s(\text{C-H})$ R1                              | 3068     | 3124          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | -        | 3105          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R1                           | 3045     | 3092          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R2                              | 3021     | 3082          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R2                           | -        | 3075          |
| $\nu_s(\text{C-H})$ R4                              | 2970     | 3068          |
| $\nu_{as}(\text{C-H})$ R4                           | 2959     | 3062          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ ethanon                    | 2919     | 3045          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | 2905     | 3011          |
| $\nu_{as}(\text{C-H}_2)$ R3                         | -        | 2985          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ R3                            | 2885     | 2974          |
| $\nu_s(\text{C-H}_2)$ ethanon                       | 2870     | 2956          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R2                            | -        | 2941          |
| $\nu_s(\text{C-H}_3)$ R3                            | 2861     | 2933          |
| $\nu_s(\text{C=O})$                                 | 1705     | 1731          |
| $\nu(\text{C=C})$ R2                                | 1451     | 1615          |
| $\nu(\text{C=C})$ R1                                | -        | 1562          |
| $\nu(\text{C=N})$ triazol + $\nu(\text{C=C})$ R1    | 1324     | 1517          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2 + $\gamma(\text{C-H})$ R2 | -        | 1501          |
| $\alpha(\text{C-H})$ R4                             | -        | 1429          |
| $\alpha(\text{C-H}_2)$ R3                           | -        | 1380          |
| $\alpha(\text{C-H}_3)$ R2                           | -        | 1357          |
| $\omega(\text{C-H}_3)$ R2                           | 1305     | 1321          |
| $\gamma(\text{C-H})$ R1                             | -        | 1186          |
| $\nu(\text{N-N})$                                   | 1028     | 1074          |
| $\nu(\text{C-C})$ R4                                | -        | 965           |
| $\beta(\text{C-H})$ R1                              | 920      | 945           |
| $\beta(\text{C-H})$ R2                              | -        | 881           |
| $\beta(\text{C-H})$ R3                              | -        | 820           |
| $\nu(\text{C-S})$                                   | 762      | 768           |

$\nu$ , gerilme;  $\alpha$ , makaslama;  $\gamma$ , sallanma;  $\omega$ , dalgalanma; s, simetrik; as, asimetrik;  
 $\beta$ , burkulma;  $\delta$ , düzlem dışı burkulma R1; 2-florofenil halkası; R2; mezitilen halka  
R3; siklobütan halkası; R4; p-tollil halkası.



Şekil 3.40.5 2u molekülün termogravimetrik analiz sonucu.



Şekil 3.40.6 2u molekülünün deneysel (a) ve teorik olarak hesaplanmış UV-VIS spektrumu (b)

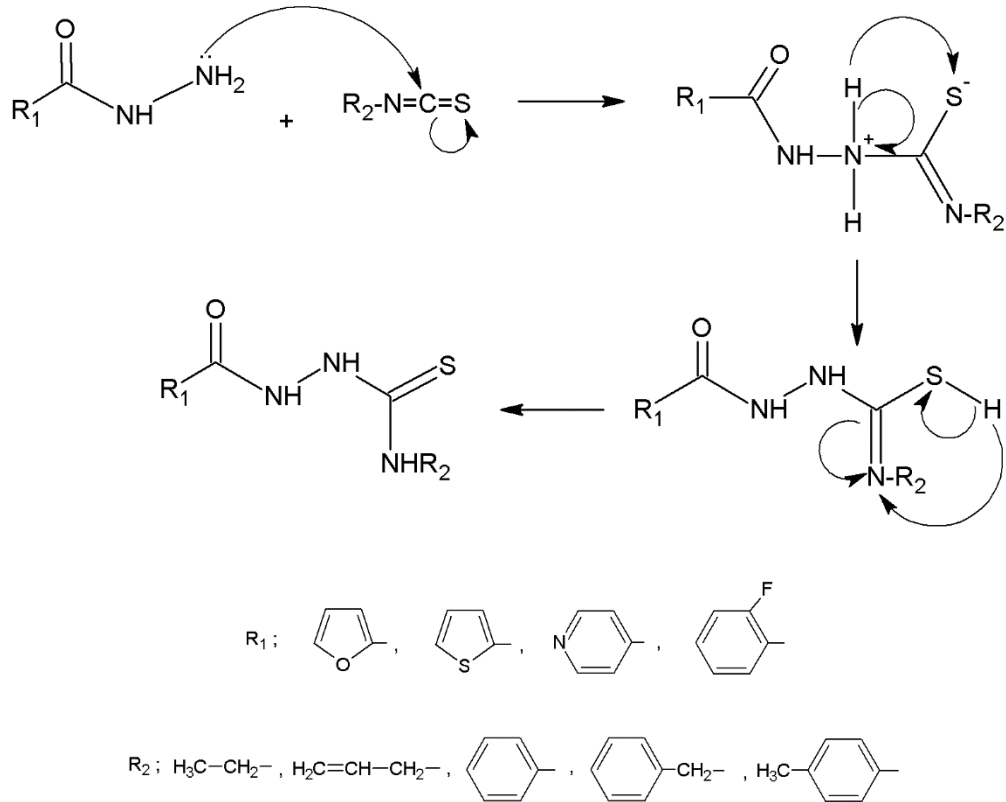
Şekil 3.40.5 te görüldüğü üzere **2u** molekülünün başlıca iki tane absorbans piki bulunmaktadır. Yapılan hesaplamalar sonucunda 273 nm deki pikin HOMO→LUMO geçişine ait olduğu bulunmuştur. Şekil 3.34.6 incelendiğinde **2u** molekülünün 62.8 °C de eridiği ve 268.8 °C de bozunduğu görülmektedir.

## 4 SONUÇLAR VE TARTIŞMA

### 4.1 Sentezlenen 1,2,4-triazol Bileşiklerinin Reaksiyon Analizi

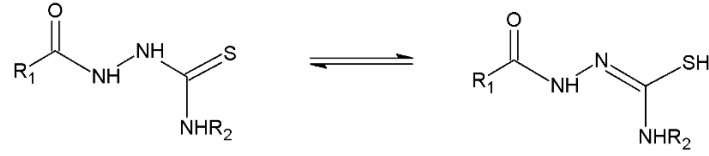
Çalışmanın ilk kısmında, dört farklı karboksilik asit hidrazit ile beş farklı izotiyosiyanat türevi etkileştirilerek toplamda yirmi adet tiyosemikarbazit elde edilmiştir. Reaksiyon ortamına sonradan KOH ilave edilerek; alifatik, aromatik ve alillik sübstitüe 1,2,4-triazoller elde edilmiştir.

Karboksilik asit hidrazit türevleri, sübstitüe izotiyosiyanatlar ile nükleofilik sübstitüsyon reaksiyonu vererek, yüksek verimde (% 70-90) tiyosemikarbazit türevlerini oluştururlar. Tiyosemikarbazit türevlerinin elde reaksiyon mekanizmaları Şekil.4.1.' de verilmiştir.



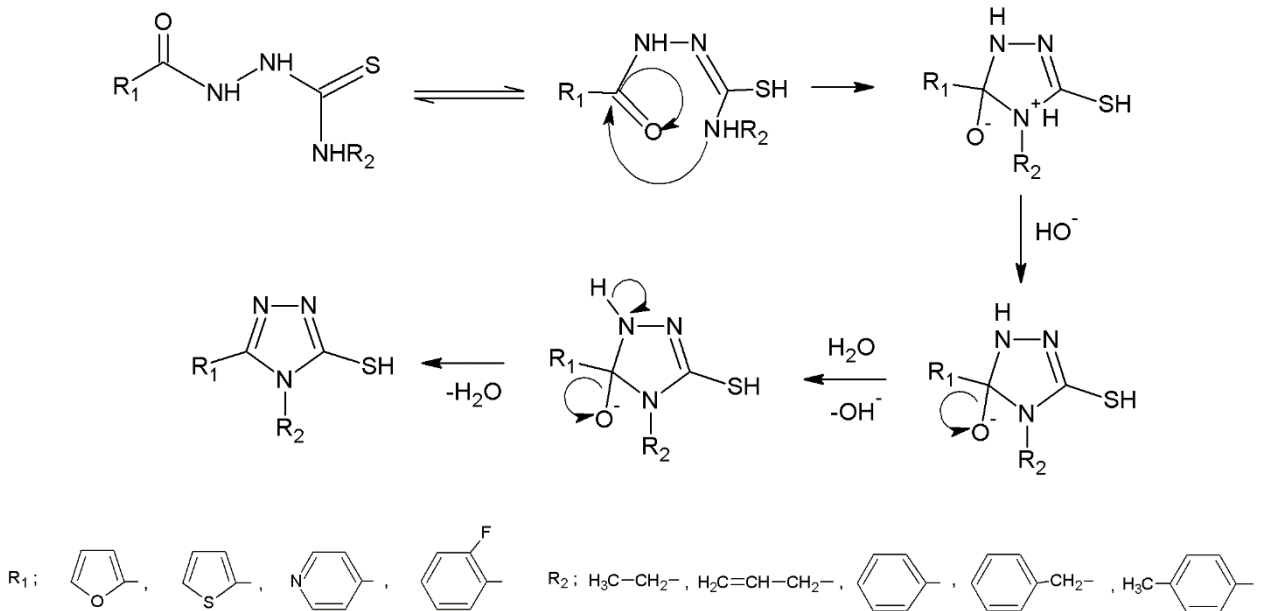
Şekil 4.1. Tiyosemikarbazit türevlerinin reaksiyon elde mekanizması.

Oluşan bu tiyosemikarbazitler tiyol-tiyon tautomer özelliği göstermektedir. Reaksiyon sonucunda oluşan tiyosemikarbazitlerin tautomerleri Şekil 4.2 de gösterilmiştir.



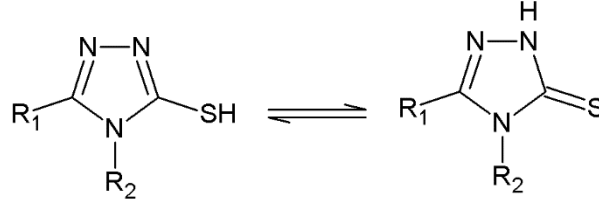
**Şekil 4.2.** Tiyosemikarbazit türevlerinin tautomerleri

Bazik ortamdaki tiyosemikarbazitin 4 numaralı azot atomundaki bağ yapmayan elektronların, tiyosemikarbazitin 1 numaralı açıl karboniline atağı ile halka kapanma reaksiyonu olmakta ve yapıdan bir mol su ayrılarak 3,4,5-disübstütüe-1,2,4-triazol-3-tiyon türevleri oluşmaktadır. Reaksiyon mekanizması Şekil.4.3.' de verilmiştir.



**Şekil 4.3** 4,5-disübstütüe-1,2,4-triazol-3-tiyon türevleri oluşumuna ait genel mekanizma.

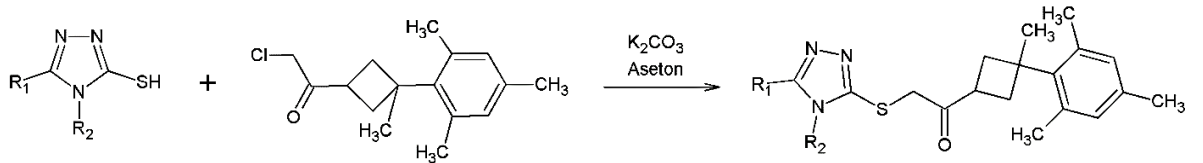
Reaksiyon sonucunda oluşan 4,5-disübstitüe-1,2,4-triazol türevleri de tiyol-tiyon tautomer özelliği göstermektedir. Reaksiyon sonucunda oluşan 4,5-disübstitüe-1,2,4-triazol türevlerine ait tautomerler Şekil 4.4 de gösterilmiştir.



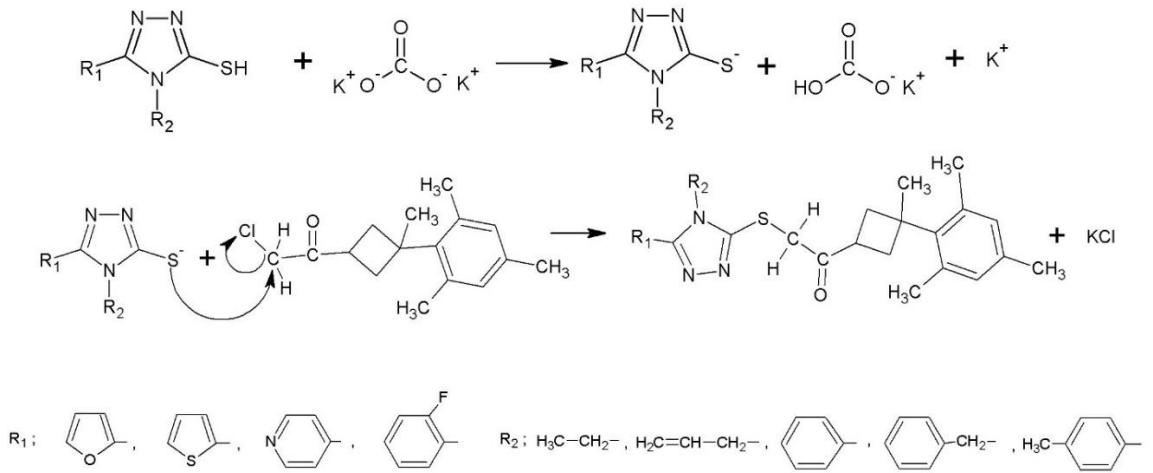
**Şekil 4.4** 4,5-disübstitüe-1,2,4-triazol türevlerinin tiyol-tiyon tautomerleri.

#### 4.2 Triazol ve siklobütan Halkası İçeren Sülfanil Bileşiklerinin Reaksiyon Analizi

İlk basamakta elde edilen 3,4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazoller  $K_2CO_3$  içeren kuru aseton içinde 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil-siklobütül)-etanon ile etkileştirilerek siklobütan halkası içeren 4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazol sülfanil bileşiklerine dönüştürülmüştür.



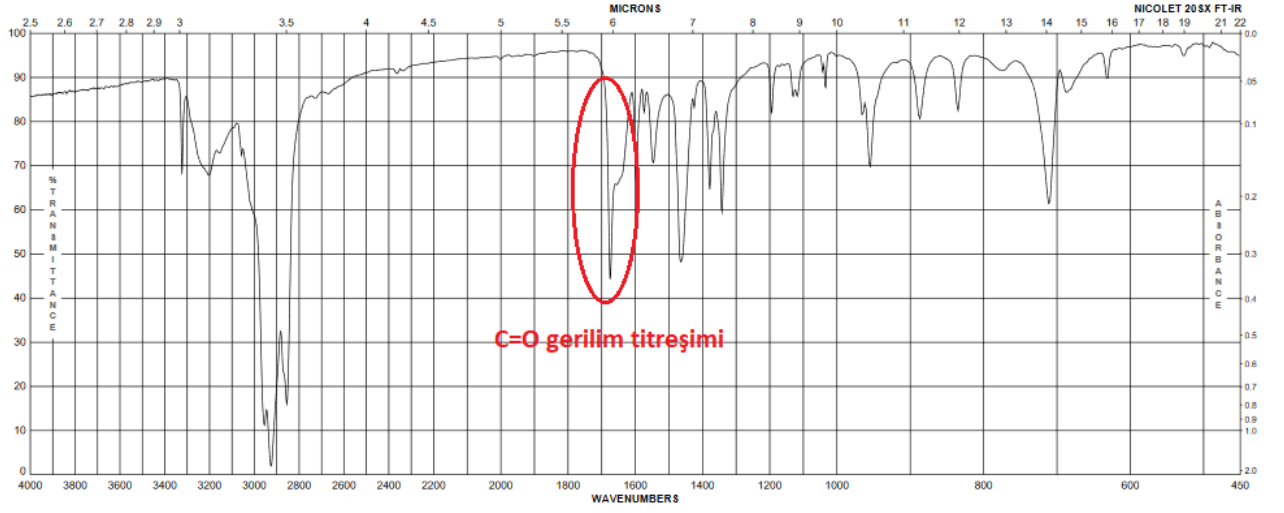
3,4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazoller  $K_2CO_3$  varlığında  $S_N2$  reaksiyon mekanizması üzerinden 2-kloro-1-(3-metil-3-mezitil-siklobütül)-etanon ile reaksiyona girerek triazol ve siklobütan halkası içeren sülfanil bileşiklerini %50-65 lik bir verimle oluştururlar. Reaksiyon mekanizması Şekil 4.5 de verilmiştir.



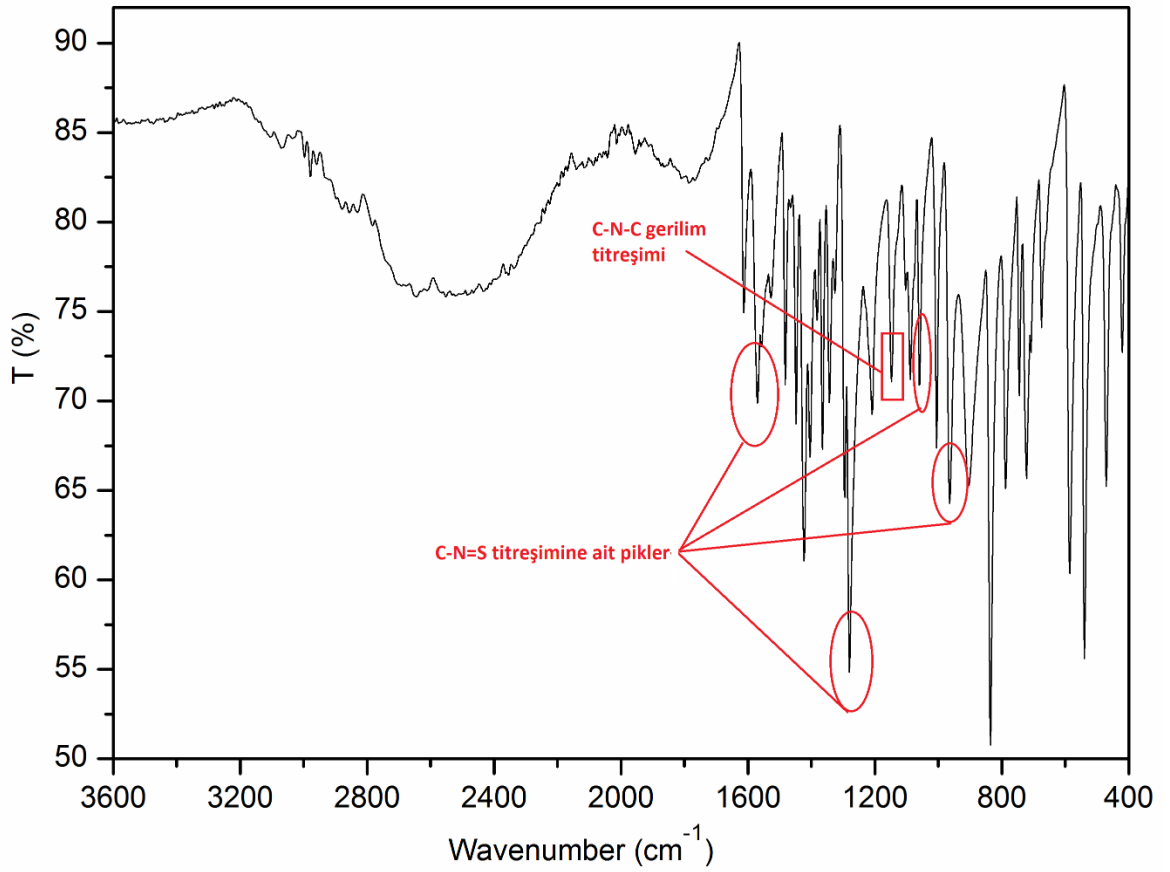
**Şekil 4.5:** Triazol ve siklobütan halkası içeren sülfanil bileşiklerinin oluşumuna ait genel reaksiyon mekanizması.

### 4.3 Sentezlenen Bileşiklerin FT-IR Analizi

Sentezlenen 3,4,5-trisüstitüe 1,2,4-triazollerin FT-IR spektrumları incelendiğinde karboksilik asit hidrazit türevlerinde  $1650\text{-}1690\text{ cm}^{-1}$  arasında görülen  $\text{C=O}$  gerilim titreşiminin kaybolduğu görülmüştür. Bu pikin yerine  $1574$ ,  $1268$ ,  $1074$  ve  $990\text{ cm}^{-1}$  de  $\text{N-C=S}$  pikleri ve  $1150\text{ cm}^{-1}$  dolaylarında ise  $\text{C-N-C}$  gerilim pikinin olduğu görülmüştür. Şekil 4.6 da izonikotinic asit hidrazite ait FT-IR spektrumunda  $\text{C=O}$  pikinin konumu gösterilmiştir. 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un  $\text{N-C=S}$  ve  $\text{C-N-C}$  titreşim frekansları ise Şekil 4.7 de belirtilmiştir. Bu karakteristik piklere ek olarak  $3050\text{-}3106\text{ cm}^{-1}$  arasında aromatik ve alilik  $\text{C-H}$ ,  $2850\text{-}2963\text{ cm}^{-1}$  arasında alifatik  $\text{C-H}$ ,  $1570\text{ cm}^{-1}$  dolaylarında  $\text{C=N}$ ,  $1263\text{ cm}^{-1}$  civarlarında  $\text{C=S}$  gerilim pikileri ve  $850\text{-}964\text{ cm}^{-1}$  arasında  $\text{C-H}$  burkulma pikleri 3,4,5-trisüstitüe 1,2,4-triazol türevlerinde görülmektedir.

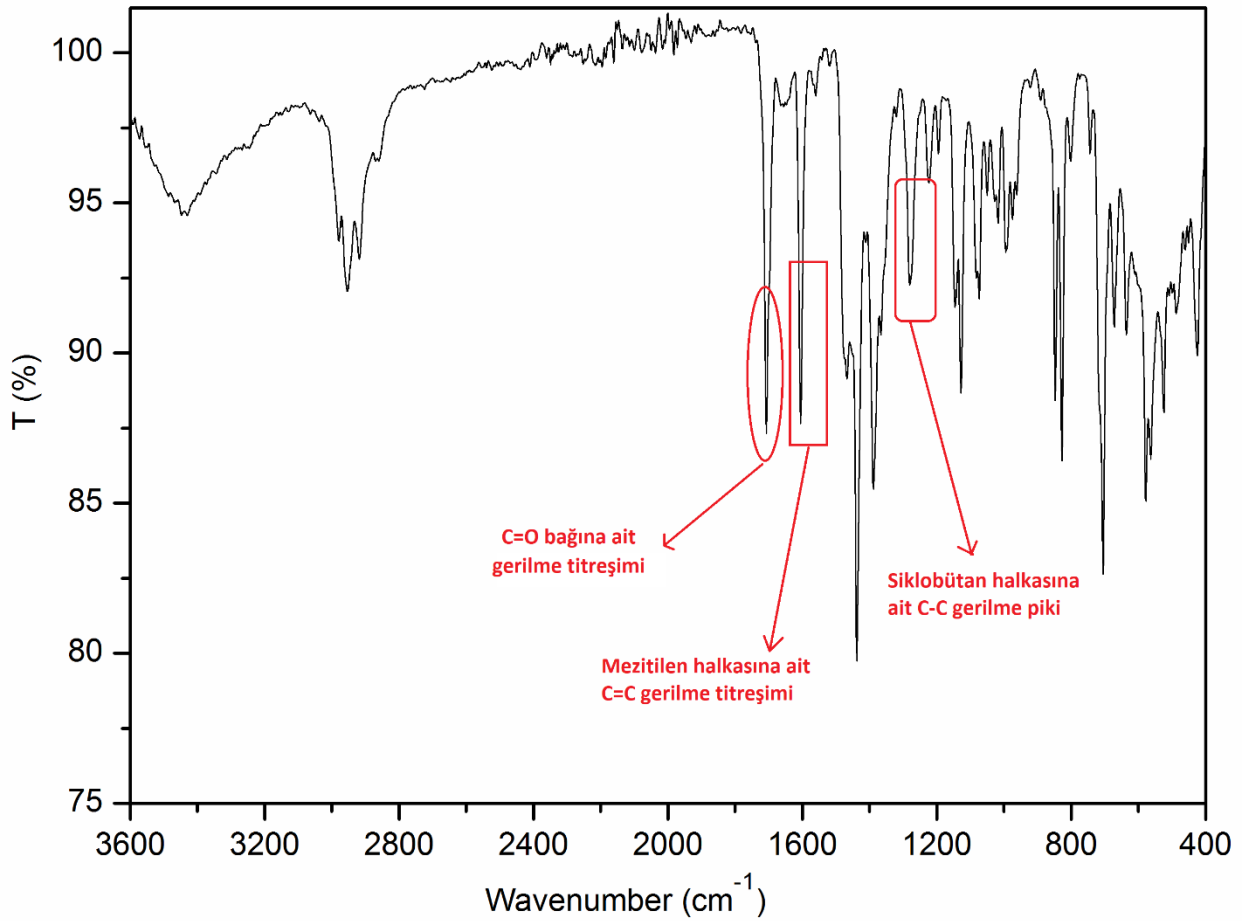


**Şekil 4.6.** İzonikotinik asit hidrazite ait FT-IR spektrumunda C=O gerilme titreşimine ait pikin gösterimi



**Şekil 4.7.** 4-etil-5-(pridin-4-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon' un N-C=S ve C-N-C titreşim frekansları.

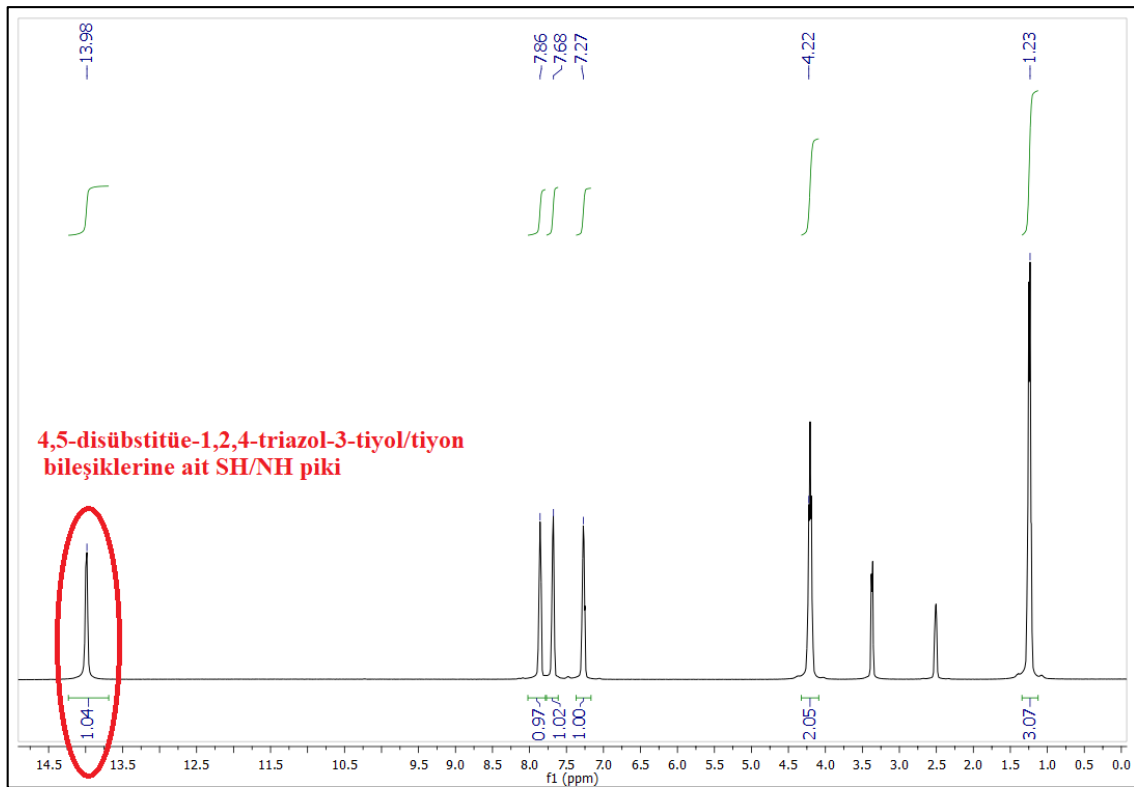
Çalışmanın ikinci basamağında elde edilen siklobütan halkası içeren 3,4,5-trisüstitüe 1,2,4-triazol sülfanil bileşiğinde en karakteristik piki C=O pikidir. C=O gerilme titreşimi sentezlenen bileşiklerde  $1700-1710\text{ cm}^{-1}$  aralığında çıkmaktadır. Yine yapıya özgü olan C-S-C gerime piki yaklaşık olarak  $720\text{ cm}^{-1}$  dolaylarında çıkmaktadır. Bu piklerin yanında  $2950-3100\text{ cm}^{-1}$  dolaylarında Ar-H,  $2860-2920\text{ cm}^{-1}$  dolaylarında alifatik C-H, siklobütan halkasına ait C-C gerilme pikleri  $1160\text{ cm}^{-1}$  ve mesitil halkasına ait C=C gerilme pikleri  $1600\text{ cm}^{-1}$  civarında çıkmaktadır. Yapıya ait karakteristik piklerin gösterimi Şekil 4.8 de belirtilmiştir.



**Şekil 4.8.** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(pridin-4-il)-4-etil-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon a ait FTIR spektrumunda yapıya özgü karakteristik piklerin gösterimi.

#### 4.4 Sentezlenen Bileşiklerin $^1\text{H}$ -NMR Analizi

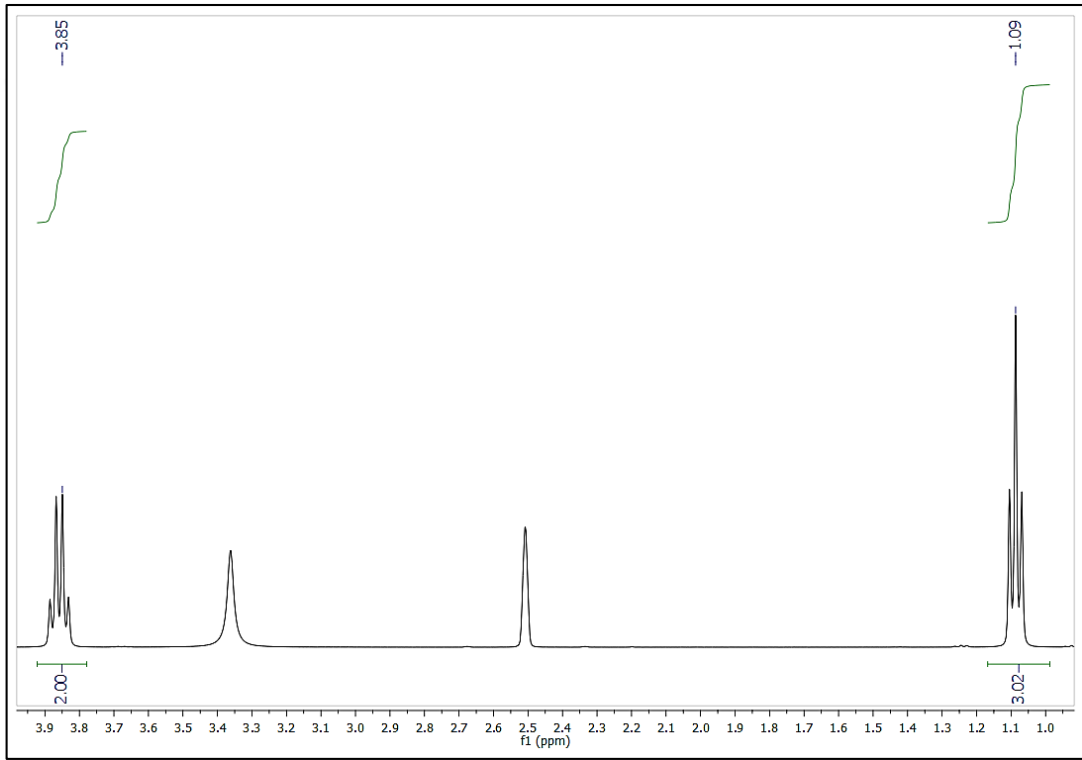
Sentezlenen 3,4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazollerin en karakteristik piki 13.98-14.21ppm aralığında ve singlet olarak görülen SH/NH pikidir.  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki bu pik şekil 4.9 da görülmektedir.



**Şekil 4.9** 4-etil-5-(tiyofen-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiyon molekülüne ait  $^1\text{H}$ -NMR spektrumunda SH/NH pikinin gösterimi.

SH/NH a ait bu karakteristik pikin yanında 1,2,4-triazol halkasına bağlı sübstitüyentlerinde bazı karakteristik pikleri bulunmaktadır. Bu sübstitüyentlerin ilk örneği etil fragmentidir. 4- konumunda bulunan  $\text{N-CH}_2\text{-CH}_3$  ün  $-\text{CH}_2-$  protonlarının 3.85 ile 4.23 ppm aralığında kuvartet pikler verdiği görülmüştür. Bu kuvartet piklerin etkileşme sabiti yaklaşık olarak 7.1 Hz dir. Aynı şekilde  $-\text{CH}_3-$  piklerinin ise 1.09-1.24 ppm aralığında

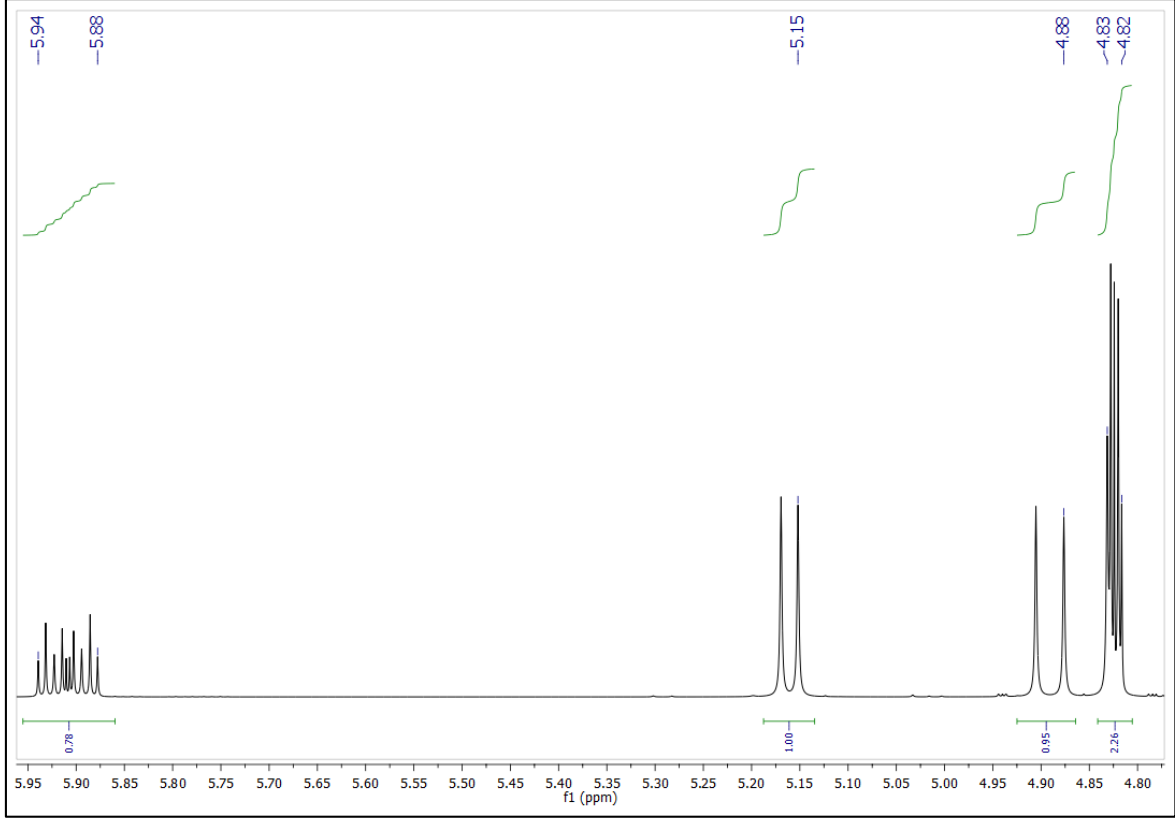
triplet pikler verdiği görülmüştür. Bu triplet piklere ait etkileşme sabitleri ise yaklaşık olarak 7.1 Hz dir. Etil grubuna ait karbonların  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumundaki yerleri ise yaklaşık olarak  $\text{CH}_3$  için 9.2  $\text{CH}_2$  için ise 35.2 ppm dir. Azot atomuna yakın olan karbonun ve hidrojenin düşük alanda çıkmasının sebebi azot atomun yüksek elektronegativitesidir. Böylece elektron yük yoğunluğu bu atomlarda azot atomuna doğru kaymış ve bu atomların daha düşük elektrik alanında rezonans olmasını sağlamıştır. Etil grubunun  $^1\text{H}$ -NMR pikleri Şekil 4.10 gösterilmiştir.



**Şekil 4.10** Etil grubuna ait hidrojen piklerinin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumunda gösterilişi.

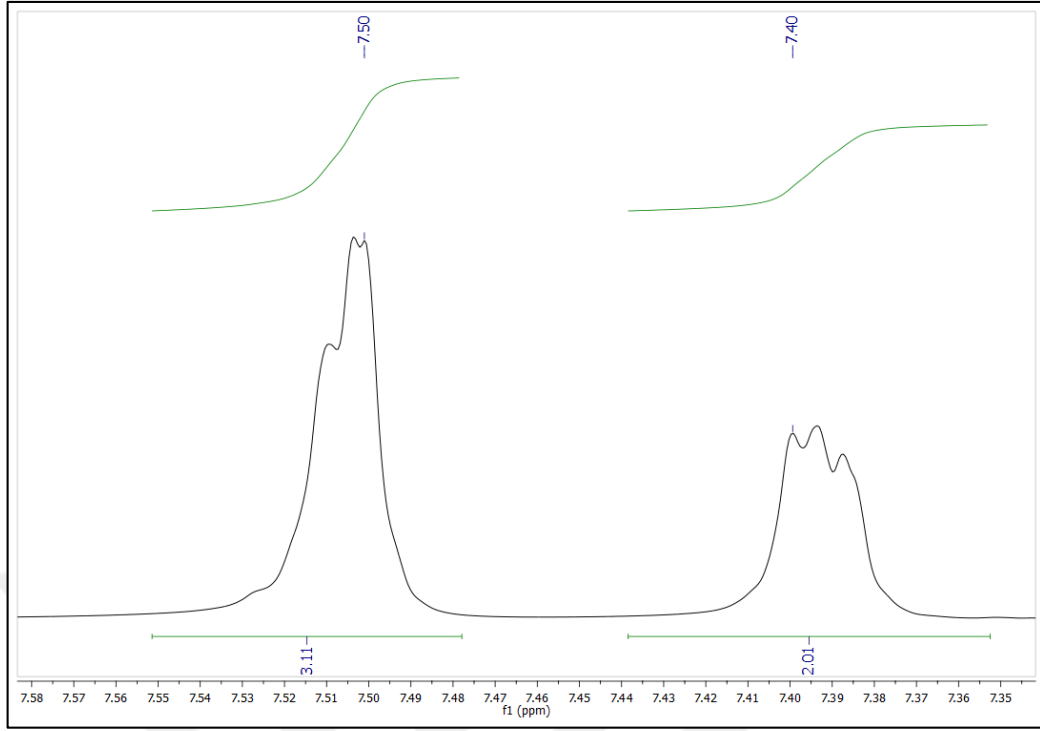
Diğer bir süstitüent olan allil grubunun  $-\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$  azot atomuna komşu olan protonları ( $\text{N}-\text{CH}_2-$ ) 4.52-4.82 ppm aralığında multipler olarak pik vermiştir.  $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$  protonu ise çift bağdan dolayı dubletin-dubletin-tripleti (ddt) olarak 5.64-5.95 ppm aralığında sinyal vermiştir. Etkileşme sabitleri yaklaşık olarak *-cis* konumundaki proton ile 10.5 Hz, *-trans* konumundaki proton ile 17.4 Hz ve  $-\text{CH}_2$  protonları ile 3.7 Hz

dir.  $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$  protonlarından *-trans* olan 4.73-4.89 ppm aralığında dublet olarak *-cis* konumunda olan ise 5.00-5.16 ppm aralığında yine dublet olarak pik vermiştir. Allil grubuna ait piklerin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki gösterilişi Şekil 4.11 deki gibidir.



**Şekil 4.11** Allil grubuna ait protonların  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki görüntüleri.

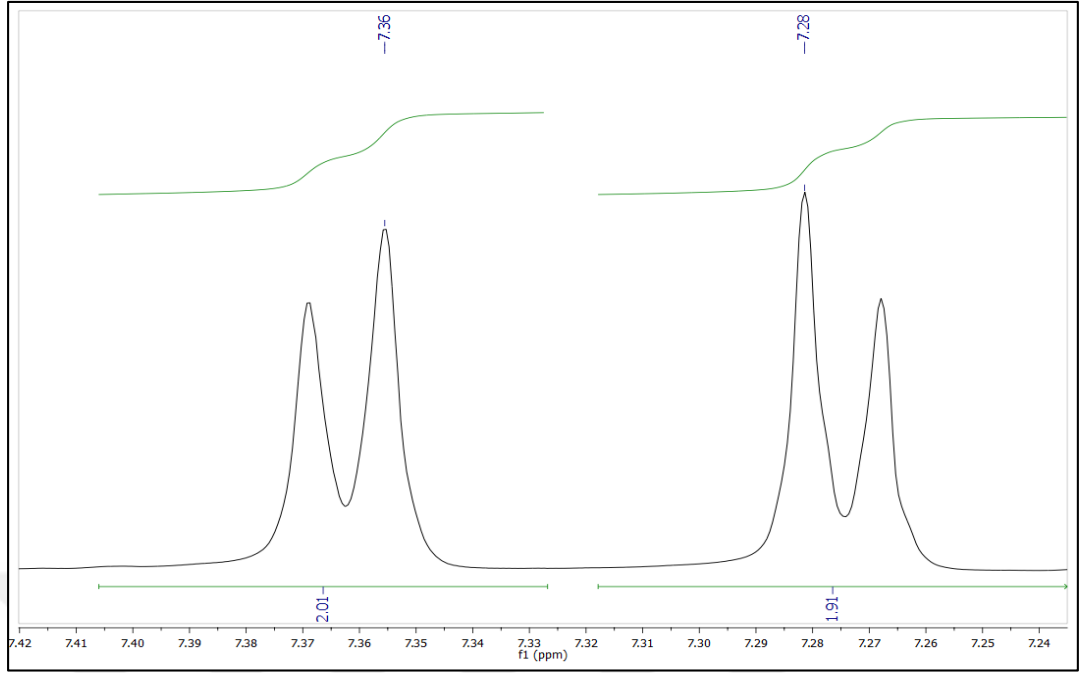
Fenil grubuna ait protonlarda *-orto* ve *-para* konumunda olanlar yapıya bağlı olarak 7.38-7.57 ppm aralığında sinyal verirken *-meta* konumunda hidrojenler ise 7.26-7.41 ppm aralığında sinyal vermektedir. Fenil grubunda üç ve dört bağ üzerinden bir çok etkileşim olduğundan yarılmalar net olarak gözlenememiştir. Fenil grubuna ait sinyallerin gösterilişi Şekil 4.12 de verilmiştir.



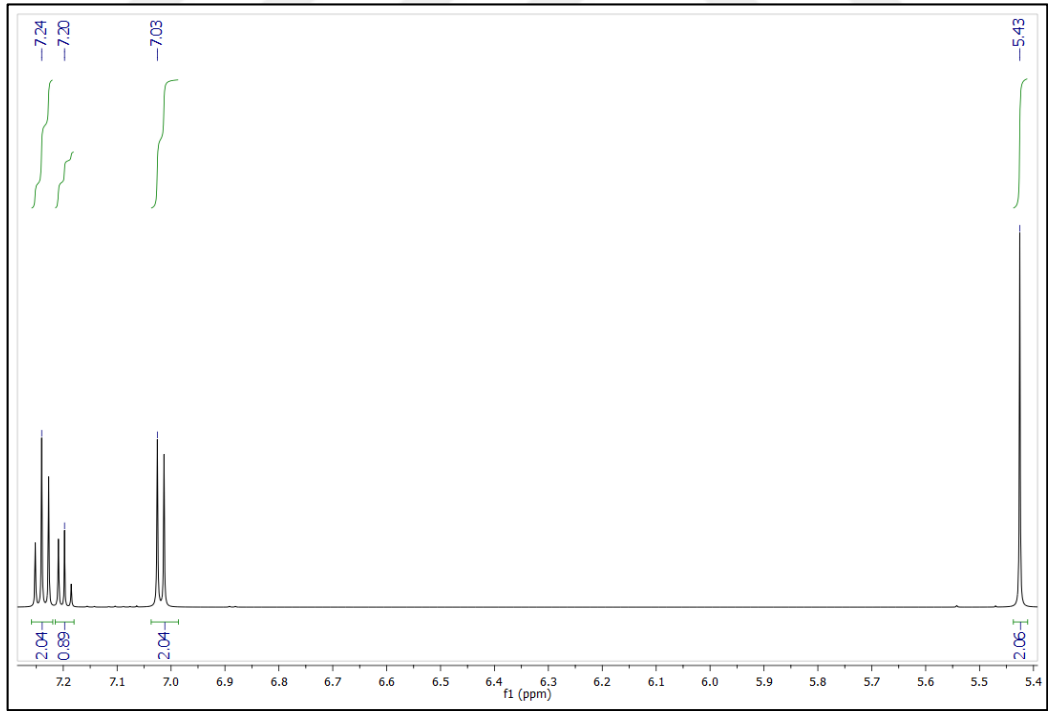
Şekil 4.12 Fenil grubuna ait protonların  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki görünüşleri.

Diğer bir sübstitüent olan *p*-tolil grubundaki hidrojenlerden –*orto* konumdakiler 7.36 ppm dolaylarında dublet olarak rezonansa gelirken, –*meta* konumundaki protonlar 7.28 ppm dolaylarında yine dublet olarak sinyal vermiştir. Etkileşme sabiti yaklaşık olarak 8.07 Hz olarak bulunmuştur. *p*-tolil grubuna ait sinyallerin gösterimi Şekil 4.13 de gösterilmiştir.

Benzil grubu hidrojenlerinin  $^1\text{H}$ -NMR yorumlaması yapılırken alifatik  $\text{N}-\underline{\text{CH}_2}$ -Ph hidrojenleri ve aromatik hidrojenler iki ayrı grupta değerlendirilebilir. Alifatik protonların hem elektronegativitesi yüksek olan azot atomuna komşu olması hemde aromatik fenil grubuna komşu olmasından ötürü diğer alifatik protonlara göre oldukça düşük alanda rezonansa gelerek 5.16-5.47 ppm aralığında singlet olarak sinyal vermiştir. Benzil grubunun aromatik hidrojenlerinden –*meta* konumundakiler 6.88-7.05 aralığında dublet olarak sinyal vermiştir. Etkileşim sabiti yaklaşık olarak 7.44 Hz dir. –*para* konumundaki proton 7.20 ppm dolaylarında triplet olarak sinyal vermiş ve etkileşim sabiti 7.1 Hz olarak bulunmuştur. –*orto* konumundaki hidrojenler ise 7.24 ppm civarında triplet olarak sinyal vermiş ve etkileşim sabiti 7.44 Hz olarak hesaplanmıştır. Benzil grubuna ait protonların  $^1\text{H}$ NMR spektrumu Şekil 4.14 verilmiştir.

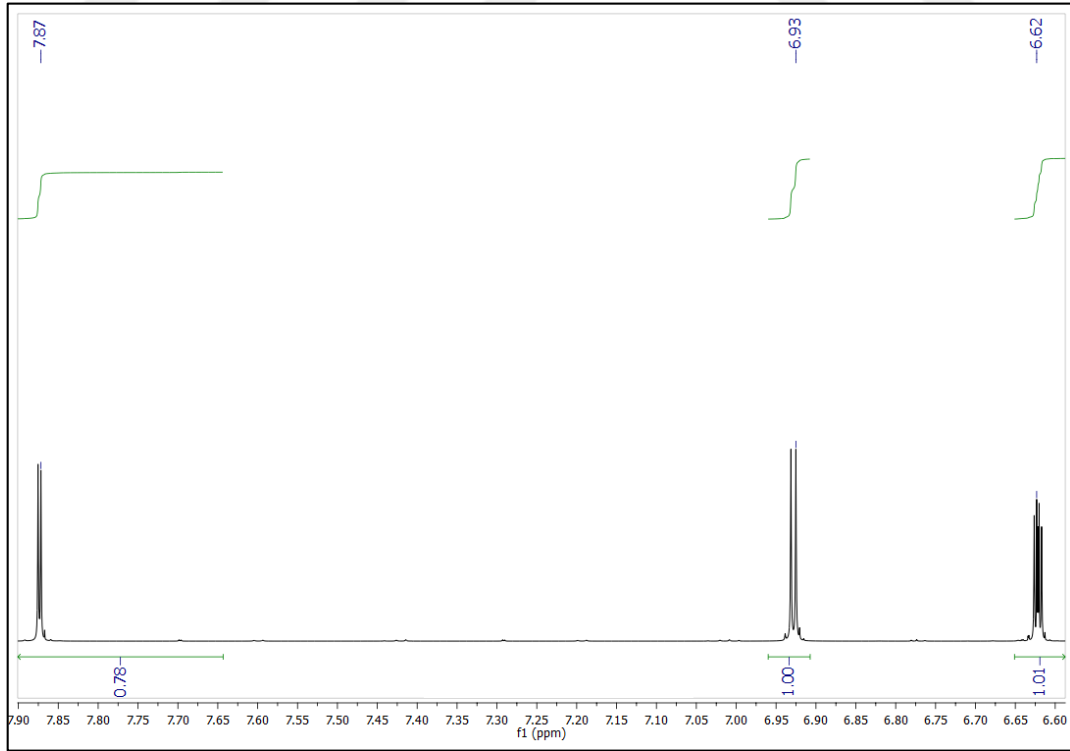


Şekil 4.13 *p*-Tollil grubuna ait hidrojenlerin verdiği sinyallerin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumunda görünümü.



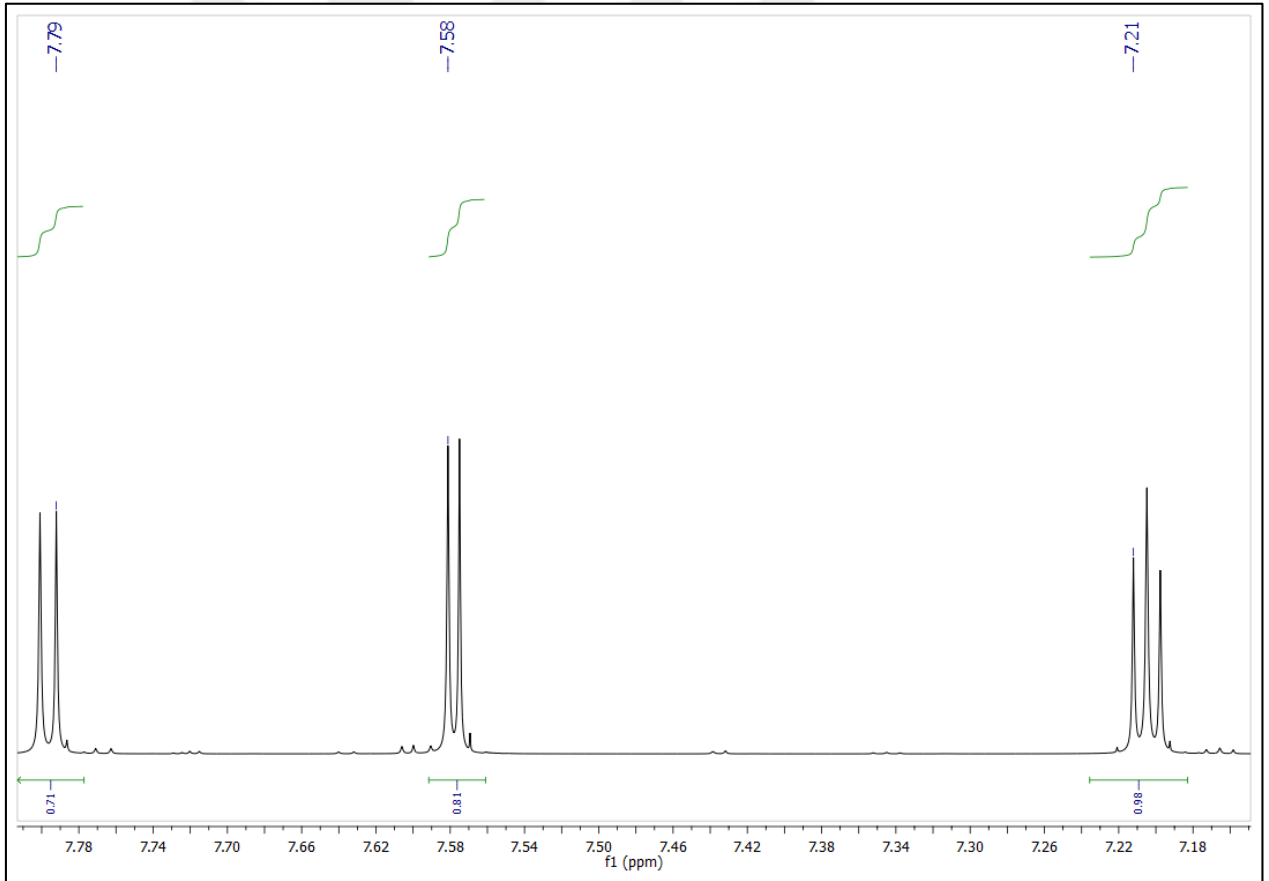
Şekil 4.14 Benzil grubuna ait hidrojenlerin  $^1\text{H}$ NMR spektrumu.

1,2,4-triazol halkasına 5- konumundan baęlı olan 2-furanil grubunun  $^1\text{H}$ -NMR spektrumunda üç adet sinyali bulunmaktadır. Furan halkası beş üyeli bir aromatik gruptur. Halka da altı adet  $\pi$  elektronu bulunması için oksijen atomu üzerindeki iki adet ortaklanmamış elektronu halkaya verir ve aromatiklik sağlanmış olur. Ancak halkaya verilen bu elektron, halka üzerinde bulunan hidrojenlerin daha yüksek alanda rezonansa gelmesine neden olur. Alfa ( $\alpha$ ) konumundaki hidrojen indüktif etkiden dolayı daha düşük alanda rezonans olurken  $\beta$  konumundaki hidrojenler mezomerik etki nedeniyle daha yüksek alanda sinyal verirler. 5- konumundaki ( $\alpha$  hidrojeni) 7.80-8.00 ppm civarında dublet olarak sinyal verir ve 4- konumundaki proton ile etkileşme sabiti yaklaşık olarak 2.17 Hz olarak bulunmuştur. 4- konumundaki proton 6.60-6.70 ppm dolaylarında dubletin dubleti olarak sinyal vermiştir. 4- konumundaki bu proton  $\alpha$  konumundaki hidrojenle 2.17 Hz ve üç konumundaki protonla ise 1.76 Hz ile etkileşmiştir. Üç numaralı konumunda bulunan hidrojen ise 4- numaralı konumda bulunan proton 1.76 Hz lik bir etkileşimle 7.15 ppm de dublet olarak sinyal vermiştir. furan-2-il halkasındaki protonların vermiş olduğu bu sinyaller Şekil 4.15 de gösterilmiştir.



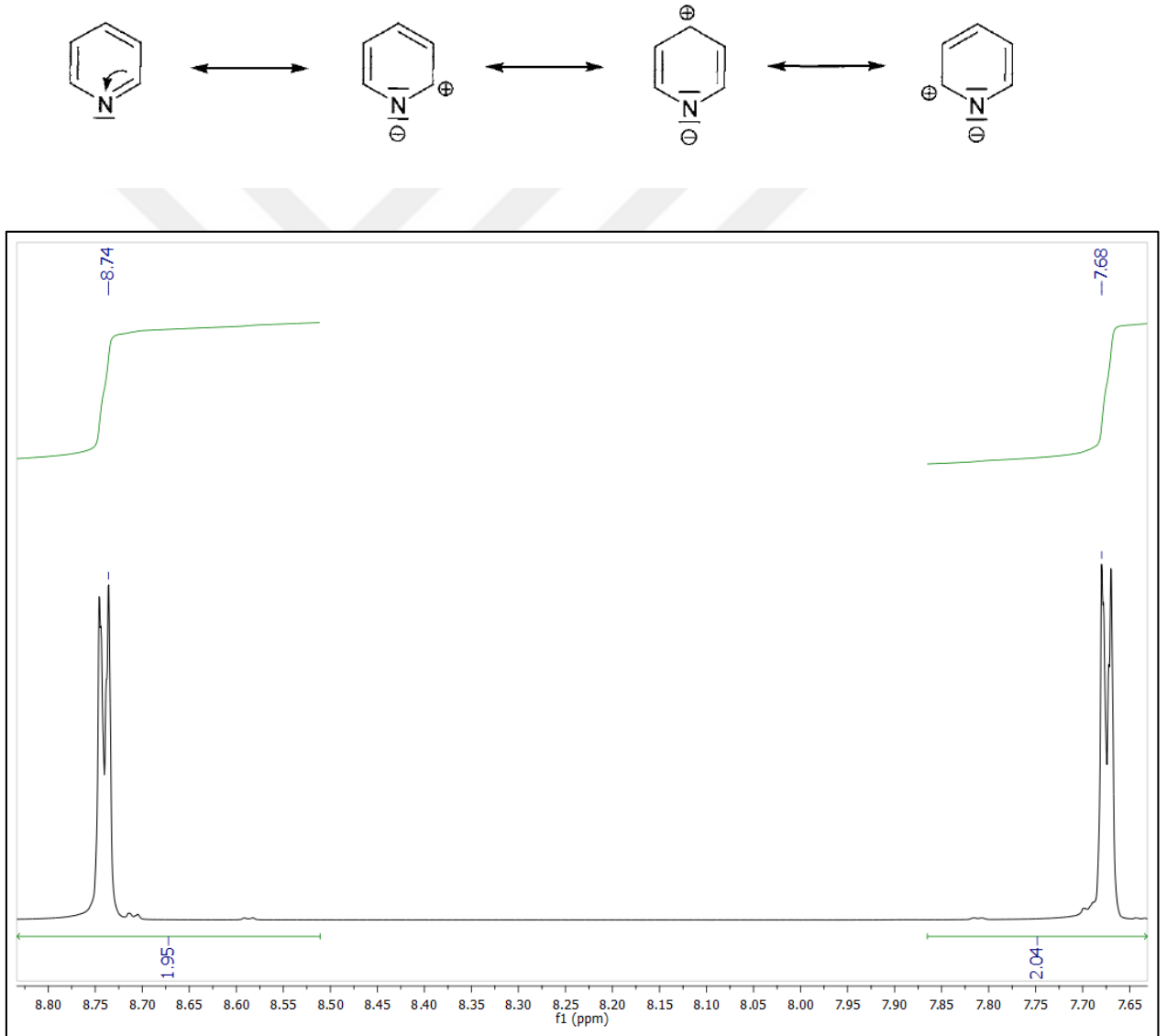
**Şekil 4.15** 2-Furanil' a ait hidrojenlerin vermiş olduğu sinyallerin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki görünümü.

5- konumundan triazol halkasına bağı olan diğ er bir sü bstitü ent 2-tiyofenil halkasıdır. Tiyofendeki aromatiklik durumu furan halkası ile aynıdır. Alfa ( $\alpha$ ) konumundaki hidrojen kükürt atomunun indüktif etkisinden dolayı diğ er iki protona göre daha düşük alanda rezonansa gelerek 7-65-7.75 ppm dolaylarında dublet olarak sinyal vermiştir. furan-2-il halkasındaki  $\alpha$  hidrojenine göre daha yüksek alanda çıkmasının sebebi oksijen atomunun kükürt atomundan daha elektronegatif olmasıdır. tiyofen-2-il halkasında bulunan  $\alpha$  hidrojenin 4- konumundaki  $\beta$  hidrojeni ile olan etkileşmesi 5.0 Hz dir. 3- konumunda bulunan hidrojen ise 4- konumundaki hidrojen ile 3.72 Hz lik bir etkileşimle 7.50 ppm dolaylarında dublet olarak pik vermiştir. 4- konumundaki proton  $\alpha$  konumundaki ve 3- konumundaki hidrojen ile etkileşerek 7.20 ppm dolaylarında sinyal vermiştir. tiyofen-2-il halkasındaki hidrojenlerin vermiş olduđu sinyaller Ş ekil 4.16 da verilmiştir.



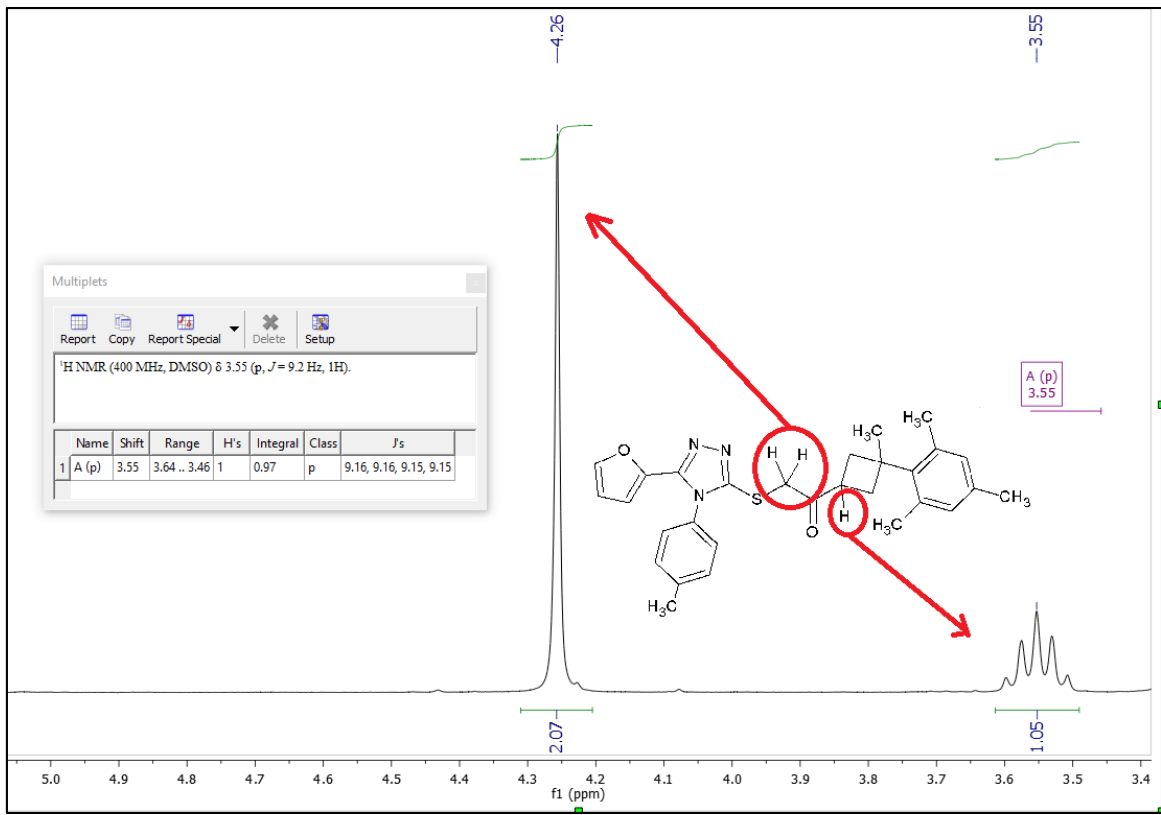
**Ş ekil 4.16** 2-Tiyofenil halkasına ait protonların vermiş olduđu sinyallerin <sup>1</sup>H-NMR spektrumundaki görünümü.

*pridin-4-il* halkası 1,2,4- triazol halkasına 5- konumundan bağlı olan diğer bir sübstütüentdir. Pridin halkasının rezonans yapısından dolayı  $\alpha$  konumundaki hidrojenleri  $\beta$  konumundaki hidrojenlerine göre daha düşük rezonansa gelir. Alfa ( $\alpha$ ) konumundaki hidrojenler  $\beta$  konumundaki hidrojenleri ile 4.9 Hz de etkileşerek 8.60-8.80 ppm dolaylatında dublet olarak pik verirler. Beta ( $\beta$ ) konumundaki hidrojenler ise  $\alpha$  konumundaki protonlar ile 5.9 Hz de etkileşerek 7.65-7.75 ppm civarlarında sinyal verirler. Bu sinyaller Şekil 4.17 de gösterilmiştir.



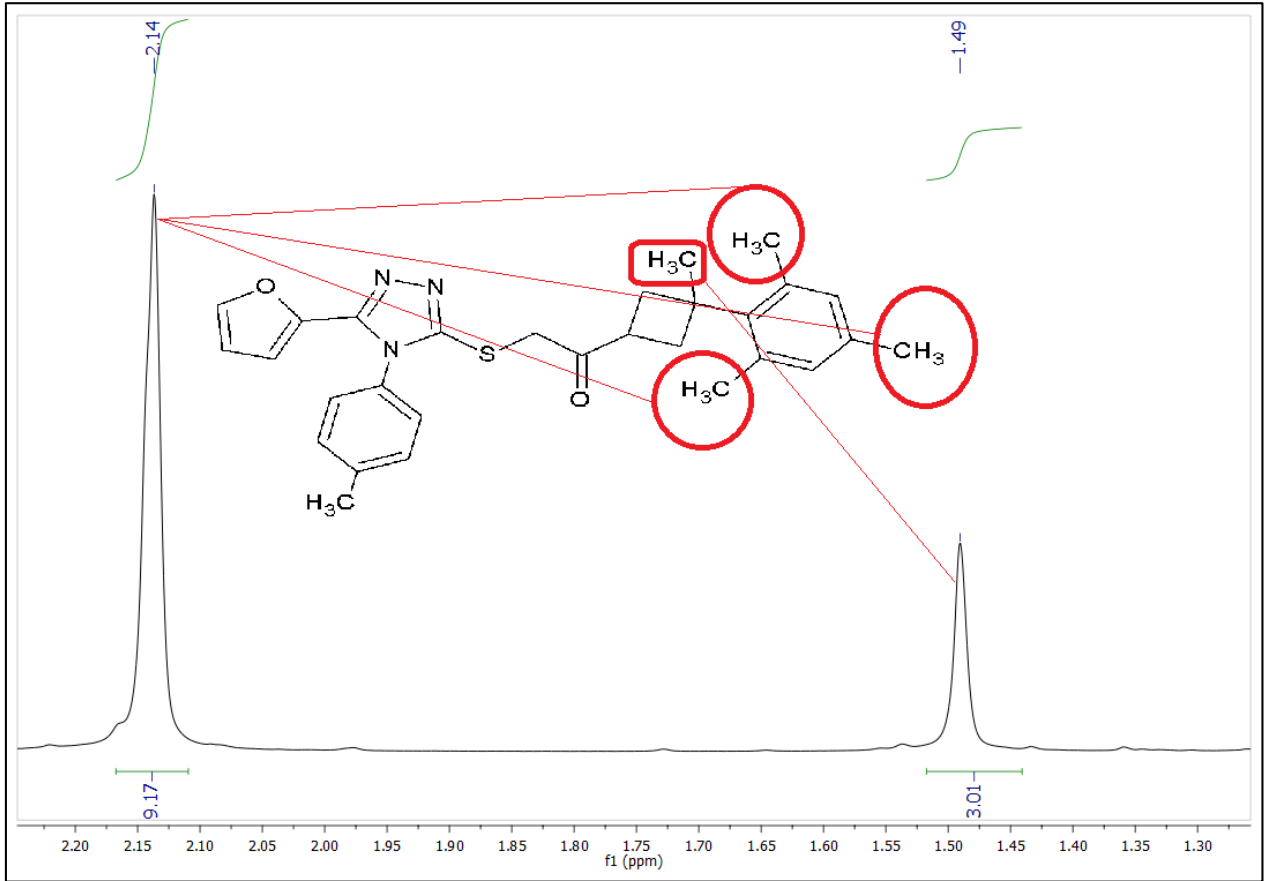
**Şekil 4.17** 4-Pridinil halkasına ait hidrojenlerin vermiş olduğu sinyallerin <sup>1</sup>H-NMR spektrumundaki görünümü.

Çalışmanın ikinci basamağında elde edilen siklobütan halkası içeren 3,4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazol sülfanil bileşiğinin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumundaki en karakteristik piklerinden biri -S-CH<sub>2</sub>-CO fragmentindeki protonlardır. Bu hidrojenler yaklaşık olarak 4.25 ppm civarında singlet olarak sinyal vermektedir. Siklobütan halkasında pentet olarak sinyal veren tek hidrojenle yine bu yapılarıdaki karakteristik piklerden biridir. Siklobütan halkasındaki 4 hidrojenle etkileşen bu protonun etkileşme sabiti yaklaşık olarak 9.10 Hz dir ve 3.55 ppm dolaylarında sinyal vermektedir. Bu iki protona ait sinyaller Şekil 4.18 de verilmiştir.



**Şekil 4.18** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-(*p*-tolil)-4H-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil}-etanon bileşiğinde bazı karakteristik piklerin  $^1\text{H}$ -NMR spektrumunda gösterilişi.

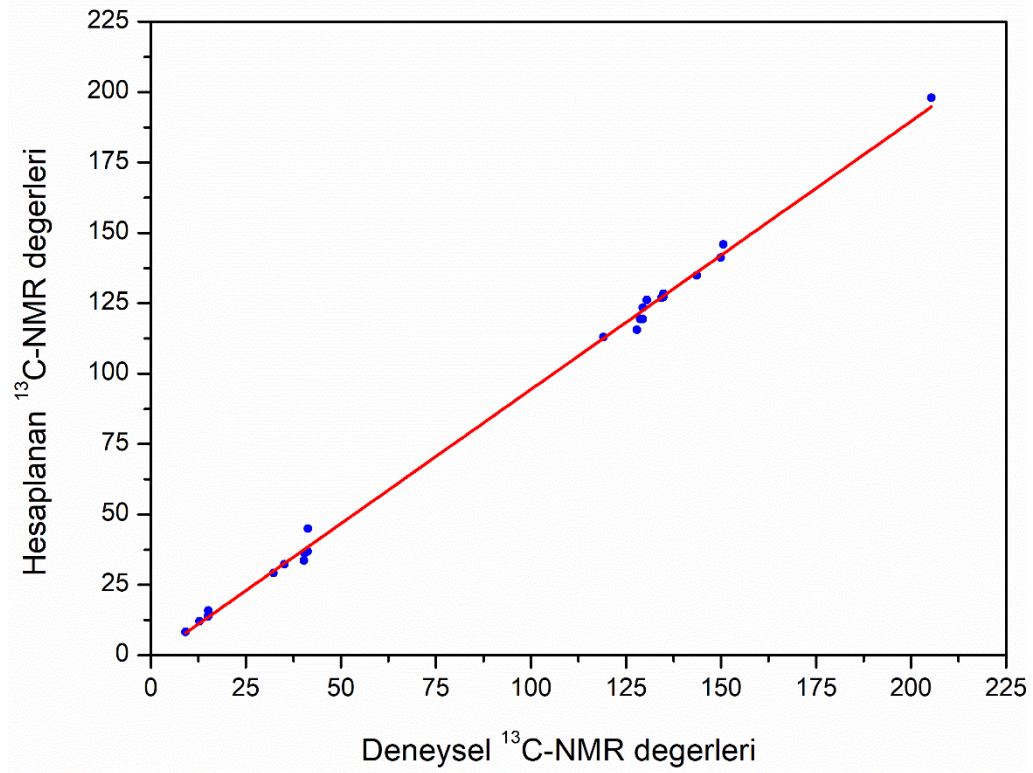
3,4,5-trisübstitüe 1,2,4-triazol sülfanil bileşiklerindeki karakteristik piklerden biri de mezitilen halkasındaki dokuz adet  $-CH_3$  protonun vermiş olduğu sinyaldir. Bu sinyal yaklaşık olarak 2.14 ppm de singlet olarak çıkmış ve dokuz hidrojeninde eşdeğer olduğu görülmüştür. Siklobütan halkasındaki  $-CH_3$  sinyali ise 1.50 ppm dolaylarında singlet olarak çıkmıştır. Siklobütan halkasındaki 4 adet hidrojen ise  $-cis$  ve  $-trans$  olarak ayrı ayrı rezonans olduğundan yarılmalar net olarak gözlenememiş ve bu dört protonun multiplet olarak 2.45-2.55 ppm aralığında sinyal verdiği görülmüştür. Yukarıda bahsedilen sinyaller Şekil 4.19 da verilmiştir.



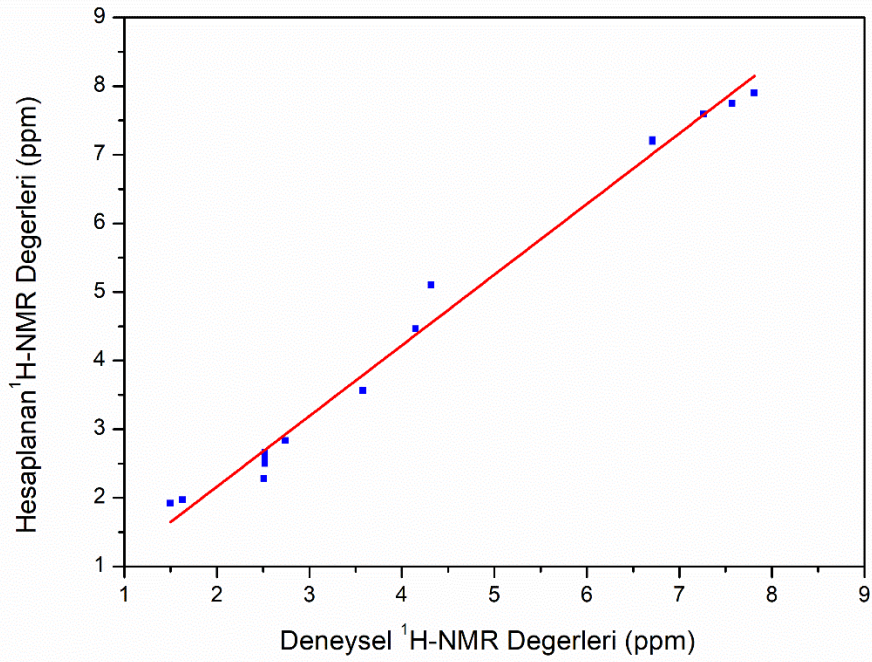
**Şekil 4.19** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(furan-2-il)-4-(*p*-tolil)-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon molekülündeki karakteristik bazı piklerin  $^1H$ -NMR spektrumunda gösterilişi.

#### 4.5 Sentezlenen Moleküllerin Teorik Hesaplamalar ile İncelenmesi.

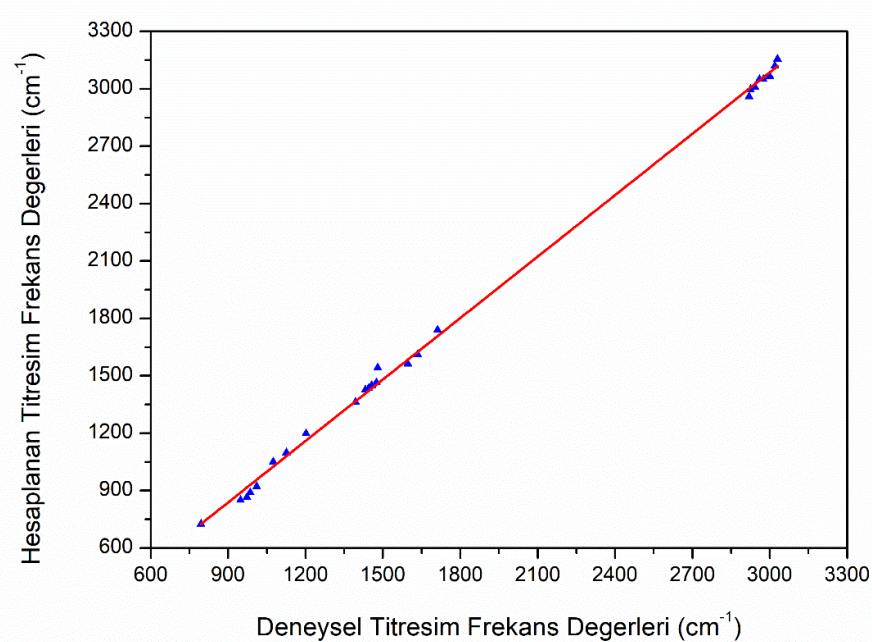
Sentezlenen bazı moleküllerin yapılarının daha ayrıntı şekilde aydınlatılması için bazı teorik hesaplamalar yapılmıştır. Bu çalışmalar kapsamında molekülün üç boyutlu geometrisi, titreşim frekansları,  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  NMR spektrumları ve UV-VIS grafikleri Gaussian paket programı ve DFT yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Yapılan bu tüm hesaplamalar sonucunda elde edilen deneysel ve teorik bulguların uyum içerisinde olduğu görülmüştür. Aşağıda verilen Şekil 4.20, 4.21 ve 4.22’ de NMR ve titreşim frekanslarının uyumluluğunu göstermek için korelasyon grafikleri çizilmiştir.



**Şekil 4.20** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-[[5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil]-etanon molekülü için deneysel ve hesaplanan  $^{13}\text{C}$ -NMR değerlerinin uyumunu gösteren korelasyon grafiği.



**Şekil 4.21** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-([5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil}-etanon molekülü için deneySEL ve hesaplanan  $^1\text{H-NMR}$  değerlerinin uyumunu gösteren korelasyon grafiğı.



**Şekil 4.22** 1-(3-Metil-3-mezitil)-siklobütül-2-([5-(tiyofen-2-il)-4-etil-4*H*-1,2,4-triazol-3-il] sülfanil}-etanon molekülü için deneySEL ve hesaplanan FTIR değerlerinin uyumunu gösteren korelasyon grafiğı.

## REFERANSLAR

- [1] X. Bai, C. Zhou, J. Mi, Research and application of triazoles., *Huaxue Yanjiu Yu Yingyong*. 19 (2007) 721–729.
- [2] C.-H. Zhou, Y. Wang, Recent Researches in Triazole Compounds as Medicinal Drugs, *Curr. Med. Chem.* 19 (2012) 239–280. doi:10.2174/092986712803414213.
- [3] J. Mi, J. Wu, C. Zhou, Progress in anti-tumor agents: triazoles., *Huaxi Yaoxue Zazhi*. 23 (2008) 84–86.
- [4] G. Küçükgülzel, P. Çikla-Süzgün, Recent advances bioactive 1,2,4-triazole-3-thiones, *Eur. J. Med. Chem.* 97 (2015) 830–870. doi:10.1016/j.ejmech.2014.11.033.
- [5] K. Liu, W. Shi, P. Cheng, The coordination chemistry of Zn(ii), Cd(ii) and Hg(ii) complexes with 1,2,4-triazole derivatives, *Dalt. Trans.* 40 (2011) 8475. doi:10.1039/c0dt01578d.
- [6] E. Rodríguez-Fernández, J.L. Manzano, J.J. Benito, R. Hermosa, E. Monte, J.J. Criado, Thiourea, triazole and thiadiazine compounds and their metal complexes as antifungal agents, *J. Inorg. Biochem.* 99 (2005) 1558–1572. doi:10.1016/j.jinorgbio.2005.05.004.
- [7] C.H. Zhou, Y.Y. Zhang, C.Y. Yan, K. Wan, L.L. Gan, Y. Shi, Recent researches in metal supramolecular complexes as anticancer agents, *Anticancer Agents Med Chem.* 10 (2010) 371–395. doi:BSP/ACAMC/E-Pub/ 00074 [pii].
- [8] C. Zhou, L. Gan, Y. Zhang, F. Zhang, G. Wang, L. Jin, R. Geng, Review on supermolecules as chemical drugs, *Sci. China, Ser. B Chem.* 52 (2009) 415–458. doi:10.1007/s11426-009-0103-2.
- [9] A.C. Castro, M.P. Johansson, G. Merino, M. Swart, Chemical bonding in supermolecular flowers, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14 (2012) 14905. doi:10.1039/c2cp42045g.
- [10] A.G. Kaplaushenko, V. V Parchenko, A.I. Panasenko, E.G. Knysh, Study of physicochemical and biological properties of ylidenehydrazides of 2-(5-R-4-R1-1,2,4-triazole-3-thio)acetic acids., *Farmatsevtichnii Zhurnal (Kiev, Ukr.* (2009) 120–124.
- [11] B. V Trzhtsinskaya, A.Y. ALEKSANDROVA, Y. V APAKINA, T.I. Vinogradova, R.A. Shchegoleva, A. V Afonin, SYNTHESIS AND TUBERCULOSTATIC ACTIVITY OF 1, 2, 4-TRIAZOLE-3-THIONE DERIVATIVES, *Khimiko-Farmatsevticheskii Zhurnal*. 25 (1991) 25–27.
- [12] I. Mir, M.T. Siddiqui, A. Comrie, Antituberculosis agents—I, *Tetrahedron*. 26

- (1970) 5235–5238. doi:10.1016/S0040-4020(01)98732-0.
- [13] S. Ersan, S. Nacak, R. Berkem, Synthesis and antimicrobial activity of n-[( $\alpha$ -methyl)benzylidene]-(3-substituted-1,2,4-triazol-5-yl-thio) acetohydrazides, *Farmaco*. 53 (1998) 773–776. doi:10.1016/S0014-827X(98)00095-0.
- [14] B.I. Buzykin, E. V. Mironova, V.N. Nabiullin, N.M. Azancheev, L. V. Avvakumova, I.K. Rizvanov, A.T. Gubaidullin, I.A. Litvinov, V. V. Syakaev, Tautomerism of aza cycles: II. Synthesis and structure of 5-substituted 3-(2-hydroxyethylsulfanyl)-1H-1,2,4-triazoles and their salts. Preference of the 1H,4H-1,2,4-triazolium tautomers, *Russ. J. Gen. Chem.* 78 (2008) 461–479. doi:10.1134/S1070363208030225.
- [15] G. Szilágyi, T. Somorai, É. Bozó, J. Langó, G. Nagy, J. Reiter, J. Janáky, F. Andrási, Preparation and antiarthritic activity of new 1,5-diaryl-3-alkylthio-1H-1,2,4-triazoles and corresponding sulfoxides and sulfones, *Eur. J. Med. Chem.* 25 (1990) 95–101. doi:10.1016/0223-5234(90)90015-U.
- [16] A. Maliszewska-Guz, M. Wujec, M. Pitucha, M. Dobosz, A. Chodkowska, E. Jagiełło-Wójtowicz, L. Mazur, A.E. Koziół, Cyclization of 1-[(4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)sulfanyl]-acetyl thiosemicarbazides to 1,2,4-triazole and 1,3,4-thiadiazole derivatives and their pharmacological properties, *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 70 (2005). doi:10.1135/cccc20050051.
- [17] A.A. El-Barbary, A.Z. Abou-El-Ezz, A.A. Abdel-Kader, M. El-Daly, C. Nielsen, Synthesis of some new 4-amino-1,2,4-triazole derivatives as potential anti-HIV and anti-HBV, *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* 179 (2004) 1497–1508. doi:10.1080/10426500490463989.
- [18] A.R. Katritzky, C.W. Rees, *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, 2009. doi:10.1016/C2009-0-15932-9.
- [19] R. Dua<sup>1</sup>, R. Dua, S. Shrivastava, S.K. Sonwane, S.K. Srivastava, Pharmacological Significance of Synthetic Heterocycles Scaffold: A Review, *Adv. Biol. Res. (Rennes)*. 5 (2011) 120–144.
- [20] A. Katritzky, C. Ramsden, J. Joule, V. Zhdankin, *Handbook of Heterocyclic Chemistry*, 2010. doi:10.1016/C2009-0-05547-0.
- [21] F. Bentiss, M. Lagrenée, M. Traisnel, B. Mernari, H. Elattari, A simple one step synthesis of new 3,5-disubstituted-4-amino-1,2,4-triazoles, *J. Heterocycl. Chem.* 36 (1999) 149–152. doi:10.1002/jhet.5570360123.
- [22] B.L. Chenard, C.A. Lipinski, B.W. Dominy, E.E. Mena, R.T. Ronau, G.C. Butterfield, L.C. Marinovic, M. Pagnozzi, T.W. Butler, T. Tsang, A Unified Approach to Systematic Isosteric Substitution for Acidic Groups and Application to NMDA Antagonists Related to 2-Amino-7-Phosphonoheptanoate, *J. Med. Chem.* 33

- (1990) 1077–1083. doi:10.1021/jm00165a030.
- [23] M.J. Frisch, W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, Gaussian 09, Revision B.01; Gaussian, 2010. doi:111.
  - [24] G. Vignale, M. Rasolt, Density-functional theory in strong magnetic fields, *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987) 2360–2363. doi:10.1103/PhysRevLett.59.2360.
  - [25] J.C. Greever, Organic Chemistry, Fifth Edition (Fessenden, Ralph J.; Fessenden, Joan S.), *J. Chem. Educ.* 72 (1995) A151. doi:10.1021/ed072pA151.2.
  - [26] J.A. Bladin, Ueber von Dicyanphenylhydrazin abgeleitete Verbindungen, *Berichte Der Dtsch. Chem. Gesellschaft.* 18 (1885) 1544–1551. doi:10.1002/cber.188501801335.
  - [27] K. Brunner, Eine neue Darstellungsweise von Triazolen, *Monatshefte For Chemie.* 36 (1915) 509–534. doi:10.1007/BF01524682.
  - [28] M.R. Atkinson, J.B. Polya, Triazoles. Part II. N-substitution of some 1 : 2 : 4-triazoles, *J. Chem. Soc.* (1954) 141. doi:10.1039/jr9540000141.
  - [29] K.T. Potts, The Chemistry of 1,2,4-Triazoles., *Chem. Rev.* 61 (1961) 87–127. doi:10.1021/cr60210a001.
  - [30] V. Klimešová, L. Zahajská, K. Waisser, J. Kaustová, U. Möllmann, Synthesis and antimycobacterial activity of 1,2,4-triazole 3-benzylsulfanyl derivatives, *Farm.* 59 (2004) 279–288. doi:10.1016/j.farmac.2004.01.006.
  - [31] C.B. Vicentini, M. Manfrini, A.C. Veronese, M. Guarneri, Synthesis of 4-(pyrazol-5-yl)-1,2,4-triazole-3-thiones, *J. Heterocycl. Chem.* 35 (1998) 29–32. doi:10.1002/jhet.5570350106.
  - [32] E. Palaska, G. Şahin, P. Kelicen, N.T. Durlu, G. Altinok, Synthesis and anti-inflammatory activity of 1-acylthiosemicarbazides, 1,3,4-oxadiazoles, 1,3,4-thiadiazoles and 1,2,4-triazole-3-thiones, *Farm.* 57 (2002) 101–107. doi:10.1016/S0014-827X(01)01176-4.
  - [33] A. Varvaresou, T. Siatra-Papastaikoudi, A. Tsotinis, A. Tsantili-Kakoulidou, A. Vamvakides, Synthesis, lipophilicity and biological evaluation of indole-containing derivatives of 1,3,4-thiadiazole and 1,2,4-triazole, *Farm.* 53 (1998) 320–326. doi:10.1016/S0014-827X(98)00024-X.
  - [34] K. Raman, H.K. Singh, S.K. Salzman, S.S. Parmar, Substituted Thiosemicarbazides and Corresponding Cycloized 1,3,4-Oxadiazoles and Their Anti-inflammatory Activity, *J. Pharm. Sci.* 82 (1993) 167–169. doi:10.1002/jps.2600820210.

- [35] M. Koparır, A. Cansız, A. Demirdağ, Synthesis of Some New 4,5-Substituted-4H-1,2,4-triazole-3-thiol Derivatives, *Molecules*. 9 (2004) 204–212. doi:10.3390/90400204.
- [36] A. Cansiz, C. Orek, M. Koparır, P. Koparır, A. Cetin, 4-Allyl-5-pyridin-4-yl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazole-3-thione: Synthesis, experimental and theoretical characterization, *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 91 (2012). doi:10.1016/j.saa.2012.01.027.
- [37] M. Koparır, C. Orek, N.O. Alayunt, A.E. Parlak, P. Koparır, K. Sarac, S.D. Dastan, N. Cankaya, Synthesis, Structure Investigation, Spectral Characteristics and Biological Activitie of 4-Benzyl-3-(2-Hydroxyphenyl)-1H-1, 2, 4-Triazole-5 (4H)-Thione, *Commun. Comput. Chem.* 1 (2013) 244–268.
- [38] M. Koparır, A. Çetin, A. Cansız, 5-Furan-2yl[1,3,4]oxadiazole-2-thiol, 5-Furan-2yl-4H [1,2,4] triazole-3-thiol and Their Thiol-Thione Tautomerism, *Molecules*. 10 (2005) 475–480. doi:10.3390/10020475.
- [39] S. Öztürk, M. Akkurt, A. Cansız, M. Koparır, M. Şekerci, F.W. Heinemann, 4-(4-Chlorophenyl)-3-(furan-2-yl)-1 H -1,2,4-triazole-5(4 H )-thione, *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Reports Online*. 60 (2004) o425–o427. doi:10.1107/S1600536804003721.
- [40] N.D. HEINDEL, J.R. REID, ChemInform Abstract: THE SYNTHESIS OF 3-R-7-(CARBOMETHOXYMETHYLENE)-7H-1,2,4-TRIAZOLO(3,4,-B)-1,3,4-THIADIAZIN-6-ONES, *Chem. Informationsd.* 12 (1981). doi:10.1002/chin.198137226.
- [41] B.S. Holla, A. D'Souza, B. Kalluraya, Synthesis of some 2,5-diaryloxymethyl-1,2,4-triazolo[3,4-b]-1,3,4-thiadiazoles, *J. Indian Chem. Soc.* 68 (1991) 250–251.
- [42] N.F. Eweiss, A.A. Bahajaj, Synthesis of heterocycles. Part VII Synthesis and antimicrobial activity of some 7 H-s -triazolo[3,4- b ][1,3,4]thiadiazine and s -triazolo[3,4- b ][1,3,4]thiadiazole derivatives, *J. Heterocycl. Chem.* 24 (1987) 1173–1182. doi:10.1002/jhet.5570240448.
- [43] N.D. Heindel, J.R. Reid, 4-Amino-3-mercapto-4 H -1,2,4-triazoles and propargyl aldehydes: A new route to 3- R -8-aryl-1,2,4-triazolo[3,4- b ]-1,3,4-thiadiazepines, *J. Heterocycl. Chem.* 17 (1980) 1087–1088. doi:10.1002/jhet.5570170547.
- [44] S. Conde, C. Corral, R. Madroñero, Synthesis and properties of 1H-1,2,4-benzotriazepines, *Tetrahedron*. 30 (1974) 195–200. doi:10.1016/S0040-4020(01)97235-7.
- [45] G.M. Castanedo, P.S. Seng, N. Blaquiere, S. Trapp, S.T. Staben, Rapid Synthesis of 1,3,5-Substituted 1,2,4-Triazoles from Carboxylic Acids, Amidines, and Hydrazines, *J. Org. Chem.* 76 (2011) 1177–1179. doi:10.1021/jo1023393.

- [46] R. Hoffmann, R.B. Davidson, The Valence Orbitals of Cyclobutane, *J. Am. Chem. Soc.* 93 (1971) 5699–5705. doi:10.1021/ja00751a021.
- [47] T.W.G. Solomons, C.B. Fryhle, Organic Chemistry, *Org. Chem.* 37 (2011) 1170. doi:10.1126/science.267.5194.117.
- [48] P. Crews, J. Rodriquez, M. Jaspars, R.J. Crews, Organic structure analysis, (1998).
- [49] T. Rosen, Perkin Reaction, in: *Compr. Org. Synth.*, 1883: pp. 395–408. doi:10.1016/B978-0-08-052349-1.00034-2.
- [50] P. Atkins, J. Paula, Physical chemistry, 2006. doi:10.1039/C1CS15191F.
- [51] I.N. LEVINE, Quantum Chemistry, 2014. doi:10.1007/978-4-431-54825-6.
- [52] I.M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation, *Rev. Mod. Phys.* 86 (2014). doi:10.1103/RevModPhys.86.153.
- [53] J.B. Foresman, Æ. Frisch, Exploring Chemistry with electronic structure methods (2nd ed.), Pittsburgh, PA Gaussian Inc. (1996) 266, 278–283.
- [54] J.P. Lowe, K.A. Peterson, Quantum chemistry, 2006. [http://courses.chem.psu.edu/chem408/reading/old/ME\\_atoms\\_Levine\\_11.pdf](http://courses.chem.psu.edu/chem408/reading/old/ME_atoms_Levine_11.pdf).
- [55] V. Termath, Quantum Mechanics in Chemistry, *Zeitschrift Für Phys. Chemie.* 205 (1998) 135–135. doi:10.1524/zpch.1998.205.Part\_1.135.
- [56] P.W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 2011. <http://www.citeulike.org/user/atreju/article/3390344>.
- [57] P. Hohenberg, W. Kohn, The Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 136 (1964) B864. doi:10.1103/PhysRevB.7.1912.
- [58] R.G. Parr, W. Yang, Density functional approach to the frontier-electron theory of chemical reactivity, *J. Am. Chem. Soc.* 106 (1984) 4049–4050. doi:10.1021/ja00326a036.
- [59] N.M. Harrison, An Introduction to Density Functional Theory, *Technology.* 2 (1995) 1–26. doi:10.1016/S1380-7323(05)80031-7.
- [60] A.R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2001. doi:qd480.l43 2001.
- [61] A.D. Becke, Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 5648–5652. doi:10.1063/1.464913.
- [62] C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry Theories and Models, 2004. doi:10.1021/ci010445m.

- [63] D.E. Woon, T.H. Dunning, Gaussian-Basis Sets for Use in Correlated Molecular Calculations .3. the Atoms Aluminum Through Argon, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 1358–1371. doi:10.1063/1.464303.
- [64] R.A. Kendall, T.H. Dunning, R.J. Harrison, Electron affinities of the first-row atoms revisited. Systematic basis sets and wave functions, *J. Chem. Phys.* 96 (1992) 6796–6806. doi:10.1063/1.462569.
- [65] R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 5., Semichem Inc. , Shawnee Mission. KS. (2009) Semichem Inc.
- [66] C.J. JAMESON, A.C. DEDIOS, ABINITIO CALCULATIONS OF THE INTERMOLECULAR CHEMICAL-SHIFT IN NUCLEAR-MAGNETIC-RESONANCE IN THE GAS-PHASE AND FOR ADSORBED SPECIES, *J. Chem. Phys.* 97 (1992) 417–434. doi:10.1063/1.463586.
- [67] E. Runge, E.K.U. Gross, Density-functional theory for time-dependent systems, *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 997–1000. doi:10.1103/PhysRevLett.52.997.
- [68] R.E. Stratmann, G.E. Scuseria, M.J. Frisch, An Efficient Implementation of Time-Dependent Density-Functional Theory for the Calculation of Excitation Energies of Large Molecules, *J. Chem. Phys.* 109 (1998) 8218–8224. doi:10.1063/1.477483.
- [69] S. Miertuš, E. Scrocco, J. Tomasi, Electrostatic interaction of a solute with a continuum. A direct utilizaion of AB initio molecular potentials for the prevision of solvent effects, *Chem. Phys.* 55 (1981) 117–129. doi:10.1016/0301-0104(81)85090-2.
- [70] W. a Seitz, D.J. Klein, G.E. Hite, Elemental Carbon Cages, *J. Am. Chem. Soc.* 110 (1988) 1113–1127. doi:10.1021/ja00212a020.

## ÖZGEÇMİŞ

1985 tarihinde Elazığ' ın Baskil ilçesinde doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Elazığ'da tamamladı. 2007 yılında İnönü Üniversitesi Eğitim Fakültesi Kimya Öğretmenliği Bölümü'nde lisans öğrenimini tamamladı.

2012 yılında Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nde tezli yüksek lisans programından, *bazı aril-alkil diaminofosfinik asit türevlerinin sentezi ve karakterizasyonu* başlıklı tezi ile yüksek lisans eğitimini tamamladı. 2012 yılının güz döneminde Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Bölümü, Organik Kimya programında doktora programına başladı. Doktora öğrenimi devam ederken 2014 yılında Fırat Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Atom ve Molekül Fiziği programında yüksek lisans programına başladı. Mart 2015 ten beri Kastamonu Üniversitesi, Merkezi Araştırma Laboratuvarında Uzman olarak görev yapmaktadır.