

## 2-Amino-6-(N-İzopropil) Amidinbenzotiyazol Hidroklorik (C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S) Molekülünün Geometrik, Elektronik Ve Spektroskopik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi

Selim KAYA<sup>1\*</sup>, Salih Mustafa KARABIDAK<sup>1</sup>, Uğur ÇEVİK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Gümüşhane Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Gümüşhane

<sup>2</sup>Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Fakültesi, Trabzon

[selimkaya@gumushane.edu.tr](mailto:selimkaya@gumushane.edu.tr)

### ÖZET

Bu çalışmada Gaussian 03W ve GaussView 3.0 paket programları kullanılarak farklı yapıda benzotiyazol Schiff bazları içeren 2-Amino-6-(N-izopropil) Amidinbenzotiyazol Hidroklorik (C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S) molekülünün elektronik ve spektroskopik özellikleri teorik olarak incelendi.

C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S moleküler yapısı taban halde HF ve B3LYP ve BLYP metotları ile 6-31G, 6-31G<sup>+</sup>, 6-31G<sup>++</sup> ve 6-31G<sup>++</sup>(d,p) temel setleri kullanıldı. Moleküllerin kararlı yapıları bulundu ve yapısal parametreleri bağ uzunlukları, bağ açıları hesaplandı. Bu molekülün, infrared titreşim frekans değerleri ve <sup>1</sup>H ve <sup>13</sup>C NMR kimyasal kayma değerleri teorik olarak elde edildi. Elde edilen teorik değerler, deneysel verilerle karşılaştırıldı. Ayrıca en yüksek dolu molekül orbital enerjileri (εHOMO, eV), en düşük boş molekül orbital enerjileri (εLUMO, eV) denge durumunda HF ve DFT-B3LYP ve DFT-BLYP metotları ile 6-31G, 6-31G<sup>+</sup>, 6-31G<sup>++</sup> ve 6-31G<sup>++</sup>(d,p) temel setleri kullanılarak 12 farklı temel sette incelendi. Bu enerjiler dikkate alınarak sertlik (η) ve elektronegatiflik (χ) parametreleri hesaplandı. Elde edilen teorik sonuçlar ile deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, hesaplanan sonuçların deneysel sonuçlar ile iyi uyumlu oldukları görüldü.

**Anahtar Kelimeler:** C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S, Titreşim İşaretleme, IR spektrumları, B3LYP, BLYP, HF, <sup>1</sup>H ve <sup>13</sup>C, IR, Yapı Analizi,

### The Theoretical Investigation Of Geometrical, Electronic And Spectroscopic Properties OF 2-Amino-6-(N-Isopropyl) Amidinobenzothiazole Hydrochloride (C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S) Molecule

#### ABSTRACT

In this study electronic and spectroscopic property of some Schiff bases 2-amino-6-(n-isopropyl) amidinobenzothiazole hydrochloride (C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S) molecule has been investigated by using gauss-view and gaussian 03w, revision 2004 e01, gaussian, inc., wallingford ct. package program.

The molecular structures of C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S molecule at ground state have been found by HF, B3LYP and BLYP methods. The stable states of the molecule have been found by using geometrical optimization and the bond length and bond angles were calculated by using 6-31G, 6-31G<sup>+</sup>, 6-31G<sup>++</sup> and 6-31G<sup>++</sup>(d,p) basic sets. The infrared vibration frequencies and <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR chemical shift values of these molecules were theoretically calculated. Obtained theoretical values were compared with experimental data. The most probable full molecular orbital energy states (εHOMO, eV), the least probable empty orbital molecular orbital energy states ((εLUMO, eV) have been investigated using HF and B3LYP and BLYP methods with 6-31G, 6-31G<sup>+</sup>, 6-31G<sup>++</sup> and 6-31G<sup>++</sup>(d,p) basic sets at 12 different sets at stable state. The hardness (η) and electro negativity (χ) parameters were determined taking into account these energy values. It was observed that theoretical and experimental values were in a good agreement.

**Key Words:** C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>S, Vibration Labeling, IR Spectrums, B3LYP, BLYP, HF, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C, Structure Analysis