

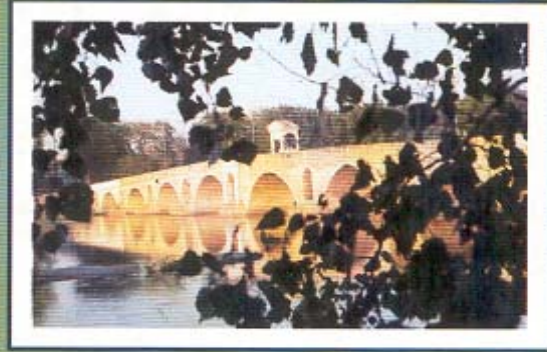
KİMYA 98



12. ULUSAL
KİMYA KONGRESİ



7-11 Eylül 1998
EDİRNE



Trakya Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi
Kimya Bölümü

S-0202

**p-TOLUIDİNO-p-KLOROFENİGLİOKSİM LİGANTI VE Nİ KOMPLEKSİNİN
TİTREŞİM SPEKTRUMLARININ NORMAL KOORDİNAT ANALİZİ YÖNTEMİYLE
AYDINLATILMASI VE KUVVET ALANLARI**

Hakan ARSLAN*, Talat ÖZPOZAN**

* Niğde Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 51100 Niğde

**Erciyes Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 38039 Kayseri

Bu çalışmada p-Toluidino-p-klorofeniglioksim (TKFG) bileşiği ile bu bileşiğin Ni ile yaptığı ML_2 tipindeki (M: Nikel, L: TKFG) kompleksinin FTIR spektrumları elde edildi. Floresans nedeniyle raman sinyalleri görülemeyen bileşiklere ait titreşim spektrumları SPSIM (Spectrum SIMulation) paket programı¹ yardımıyla hesaplandı ve bilinmeyen bantlar simülasyon yöntemi ile aydınlatılmaya çalışıldı.

Bileşiklerin geometrisi, her bir bağın bağ uzunluğu, bağ açısı ve kuvvet sabiti^{2,3,4,5,6,7} gibi veriler kullanılarak frekanslar, atom yarıçapları, elektronegatiflikler kullanılarak da IR ve Raman aktiflikleri hesaplandı. Bileşiklere ait nokta grubu simetrisi üzerinden Normal Koordinat Analizleri yapıldı.

Hesaplamalarda Wilson'un GF Matris Metodu⁸ temel alan programlarda bileşikler için Değerlik Kuvvet Alanları (Valance Force Field) kuvvet sabiti türü olarak seçildi. İncelenen bileşiklerinin titreşim spektrumlarının hesaplanmasında asetonoksim klorobenzen, toluen, benzoik asit, N-benzilidenanilin bileşiklerinin ve Ni-bis-glioksim kompleksinin kuvvet sabitinden faydalanıldı.

Teorik incelenen moleküllere ait titreşim spektrumları ile yine bu moleküllerin deneysel spektrumları karşılaştırıldı. Her bir bileşiğe ait spektrumdaki bantlardan kayma gösteren birkaç deneysel frekanslar kullanılarak iterasyon yöntemiyle yaklaştırılarak yeni kuvvet alanları geliştirildi. Teorik hesaplanan spektrumlar yardımıyla, deneysel (gözlenen) Titreşim Spektrumlarındaki tüm bantlar yorumlanarak sonuçların kaynak literatürler ışığında geçerliliği tartışıldı.

Kaynaklar

1. P. Fisher, D. Bougard, Bschrader (1989) SPSIM Spektren Simulation, Universitat Essen, FRG (1989)
2. Z. Meic, G. Baranovic, T. Suste, J. Mol. Struct., 298(1993), 163-171
3. Y. Kim, K. Machida, Spectrochim. Acta, 42A(1986), 881-889
4. G. Keresztury, S. Holly, M. Inche, J. Mol. Struct., 114(1984), 183-186
5. A. Bigatto, V. Galasso, and G. De Alti, Spectrochim. Acta, 27A(1971), 1659-1670
6. C. La Lau, R.G. Synder, Spectrochim. Acta, 27A(1971), 2073-2088
7. H. Böhlig, M Nather, J. Fruwert und G. Geiser, Z. Phys. Chemie (Leipzig), 257(1976),4,634-640
8. Wilson, Decius, Cross-Molecular Vibrations, Davor Publ. Nevyork, 1980