



XIX. ULUSAL KİMYA KONGRESİ

30 Eylül - 4 Ekim 2005, Kuşadası



Kimya 2005 BİLDİRİ ÖZETLERİ



EBİLTEM

Kimya Bölümü

Ege Üniversitesi
Fen Fakültesi



TÜBİTAK

Biyokimya Bölümü

BENZOİLTİYOÜRE TÜREVİ BİLEŞİKLERİNİN TİTREŞİM SPEKTRUMLARININ NORMAL KOORDİNAT ANALİZİ YARDIMI İLE AYDINLATILMASI

*Gün Binzet, Tuncay Yeşilkaynak, Fatih Mehmet Emen, Doğan Aykaç, Hakan Arslan
ve Nevzat Külçü*

Mersin Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 33343-Mersin, Türkiye

Bu çalışmada daha önceden sentezlenen ve yapıları aydınlatılan *N,N*-di-*n*-propil-*N'*-2-klorobenzoiltiyöüre ve *N,N*-difenil-*N'*-2-klorobenzoiltiyöüre [1] bileşiklerinin titreşim spektrumları ölçülüp, elde edilen titreşim spektrumları SPSIM (SPectrum SIMultation) paket programı [2] yardımıyla hesaplandı ve bilinmeyen bandlar simulasyon yöntemiyle aydınlatılmaya çalışıldı.

Titreşim frekansları; bağ uzunlukları, açıları ve kuvvet sabitleri kullanılarak hesaplanırken, IR ve Raman aktiflikleri ise atom yarıçapları ve elektronegatiflikleri kullanılarak hesaplandı. Hesaplamalarda değerlik kuvvet alanları (Valence Force Field) kuvvet sabiti türü olarak seçildi ve Wilson'un GF Matris Metodu'nu [3] temel alan SPSIM paket programı ile gerçekleştirildi. Bileşiklere ait Normal Koordinat Analizleri nokta grubu simetrisi üzerinden yapıldı.

Teorik olarak hesaplanan titreşim spektrumları ile aynı molekülün deneysel spektrumları karşılaştırıldı ve iterasyon yöntemiyle bazı uyumsuzluk gösteren bandlara ait kuvvet sabitleri fit edilerek her bir bileşiğe ait kuvvet alanları geliştirildi. Teorik olarak hesaplanan spektrumlar yardımı ile, deneysel titreşim spektrumlarındaki tüm bandlar tanımlandı ve sonuçların geçerliliği tartışıldı. Aynı zamanda, incelenen her iki tür tiyöüre türevi için elde edilen, titreşim spektrumu ve kuvvet alanları verileri birbirleri ile karşılaştırıldı.

Kaynaklar

1. G.Binzet, H.Arslan, U.Flörke, N.Külçü ve N.Duran, *Acta Chimica Slovenica*, **2005**, incelemede.
2. P.Fisher, D.Bougard, B.Schrader, SPSIM Spektren Simulation, Universitat Essen, FRG, **1989**.
3. D.Wilson, Cross-Molecular Vibrations, Davor Publ. NewYork, **1980**.