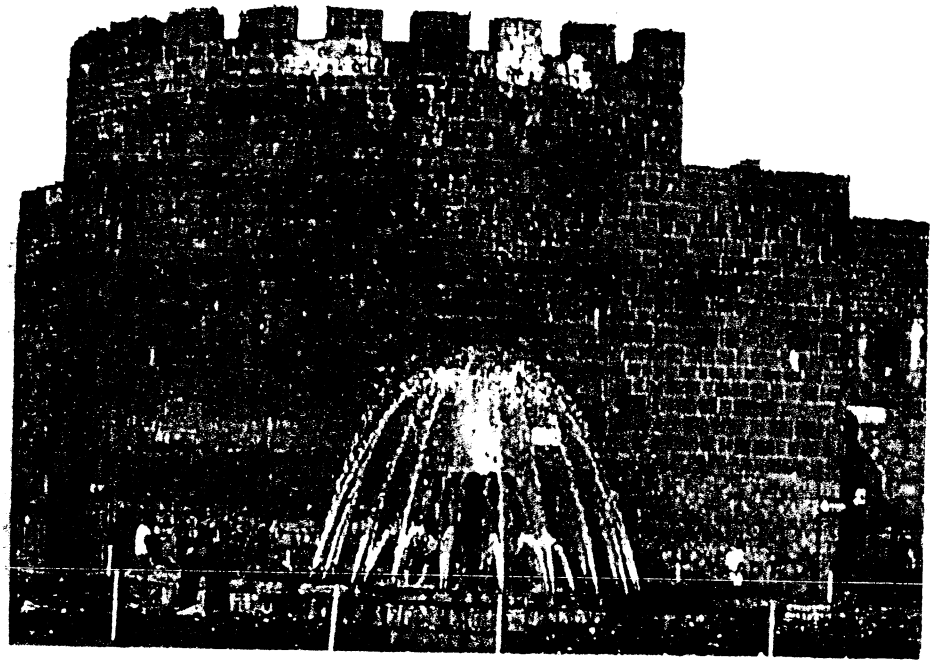
XIV. ULUSAL
KİMYA KONGRESİ



10-15 Eylül 2000
DİYARBAKIR

Dicle Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi
Kimya Bölümü

AROMATİK ALKOLLERDE VE p-FLOROFENOLDE HİDROJEN BAĞI

Hasan GENÇ[1], Bahman Y.SULTANLI[2], A.N.ŞNULİN[3], İsmayıl A.ALİYEV[1,2]

[1]Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Van
[2]M.E. Resulzade adına Bakü Devlet Üniversitesi, Kimya Fakültesi, Bakü
[3]Az. İlmler Ak. M.F. Nağıyev adına Kimya Teknolojisinin Teorik Problemleri Enstitüsü, Bakü

IR spektroskopi yöntemiyle 1,1-difenilmetanol, -1- etanol, -1- propanol ve p-floro-fenolün çeşitli bazlarla ve assosiye hallerinde oluşturduğu H-kompleksleri; aynı zamanda fenil-, metilfenil-, etilfenilbenzilkarbinollerin sıcaklığa, yapılarına ve CCl_4 'deki konsantrasyonlarına bağlı H-kompleksleri öğrenilerek, bu komplekslerde ν_{OH} kayması ile bandın yarımeninin değişmesi arasındaki karşılıklı ilgi incelenmiştir. Röntgenstrüktür analiz yöntemi ile ilk defa 1,1- difenil-1-etanol ve -1- propanol 'ün kristalik ve moleküler yapısı incelenmiştir.

Aromatik alkollerin ve p-florofenolün H-komplekslerinde yapı, ν_{OH}'ın frekansı ve bandın eninin değişmesi önemli derecede bazın cinsine bağlıdır. $\Delta\nu_{OH}$ pikinin frekansının kaymasına bağlı olarak H-kompleksin hesaplanan oluşum enerjisi, kolorimetrik yöntemlerle bulunan enerjiye uygundur. İncelenmiş H-komplekslerin ν_{OH} frekanslarının kayması ile bandın yarıeni arasındaki ilişki, H-kompleksler için mevcut olan ν_{OH}'ın kayması ile genişlemesi arasındaki ilişkiyi bir kez daha ispatlamaktadır. 1,1-Difenil-1-etanol 'ün -OH grupları ile H-bağı oluşturması, $\bar{4}$ ekseni etrafında toplanmış ($P\bar{4}2_1C$), organik kristalik bileşikler için karakteristik olmayan, siklik tetramerler şeklinde kristalik yapılar oluşturur. 1,1-Difenil-1-propanolün yapısında molekül içi OH...π (fenil halkasının π-elektronları) H-bağlarının oluştuğu görülmüştür. Aromatik alkollerde konsantrasyonun, sıcaklığın ve alkil radikallerinin değişmesi ile H- bağlarının yapılarının belli derecede değiştiği gözlenmiştir.

İlk kez inert seyreltik çözeltide (CCl_4) 1,1-difenil-1-propanolde molekül içi OH...π H-bağlarının kırılması gözlenmiş ve kalitatif olarak izah edilmiştir.

Katı fenil- ve metilfenilbenzilkarbinolün 20°C de polimerler şeklinde assosiye olduğu belirlenmiştir. Fakat bu sıcaklıkta sıvı olan etilbenzilkarbinolde OH...π ve OH...OH dimer tipli H-bağları oluşmuştur.

Alkilbenzilfenilkarbinollerin seyreltik CCl_4 çözeltilerinde alkil radikalleri büyüdükçe OH...π molekül içi H-bağı oluşturan -OH gruplarının sayısı daha fazla olur. Alkil radikallerinin büyümesi ile moleküller arası OH...OH H-bağlarının düzeni arasında bir ilginin olduğu ve bunun alkil radikalinin büyümesi ile azaldığı gözlenmiştir.