



# XVII. ULUSAL KİMYA KONGRESİ

8-11 EYLÜL 2003 İstanbul



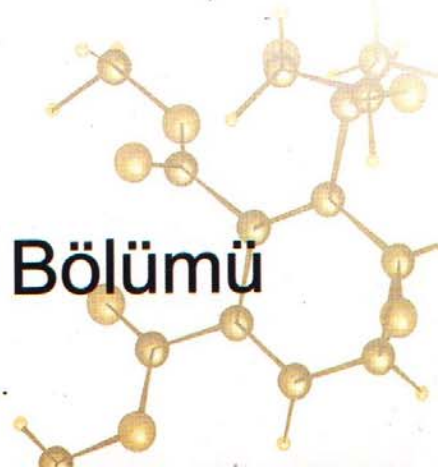
## KİMYA 2003 BİLDİRİ ÖZETLERİ

550. YIL

İstanbul Üniversitesi  
Mühendislik Fakültesi **Kimya Bölümü**



*Türkiye Kimya Derneği koordinatörlüğünde...*



**TERMAL BOZUNMA REAKSIYONLARININ  
KİNETİK PARAMETRELERİN HESAPLANMASINDA KULLANILAN  
YÖNTEMLERİN KARŞILAŞTIRILMASI**

F.M. Emen , E. Kayhan, H.Arslan ve N. Külçü

Mersin Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü,  
Anorganik Kimya Anabilim Dalı, 33000, Mersin

Bu çalışmada bozunma tepkimelerinin kinetik incelenmesinde kullanılan Horowitz & Metzger, Coats & Redfern ve Broido kinetik yöntemlerinin sonuçları, tiyöüre türevi ligand ve metal kompleksleriörneğinde karşılaştırılmış ve elde edilen sonuçlar yorumlanmıştır [1-3].

Ligand ve komplekslerin termal verilerinin elde edilmesinde Shimadzu marka DT-40 model simultan DTA/TG sistemi kullanıldı. Termal bozunma basamaklarındaki ara ürünlerin tanısı kütle spektrometrisi ile termal bozunma reaksiyonlarının son ürünlerinin tanısı ise x-ışınları toz difraksiyonu yöntemi ile gerçekleştirildi. Bileşiklerin kinetik parametreleri bu çalışmada geliştirilen yazılım programı ile hesaplandı.

Termal bozunma reaksiyonlarının tepkime mertebesi ( $n$ ), aktivasyon enerjisi ( $E^*$ ), aktivasyon entropisi ( $\Delta S^*$ ) ve önüstel faktör ( $A$ ) gibi kinetik parametreleri Broido kinetik yöntemi kullanılarak hesaplandı ve sonuçları Coats-Redfern ve Horowitz-Metzger yöntemleriyle hesaplanan sonuçlarla karşılaştırıldı [4-6].  $N,N$ -dimetil- $N'$ -(2-klorobenzoil)tiyöüre ligandı için elde edilen kinetik veriler aşağıdaki tabloda karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tablo.  $N,N$ -dimetil- $N'$ -(2-klorobenzoil)tiyöüre bileşiği için farklı kinetik yöntemlerle elde edilen bazı kinetik parametreler ( $n=1.000$ ).

Parametreler	Coats-Redfern Metodu	Horowitz-Metzger Metodu	Broido Metodu
$E^*$ (kJ/mol)	14.23	17.22	18.40
$\Delta S^*$ (j/mol.K)	-269.0	-266.2	-164.1
$A$ (1/sn)	0.09	0.12	0.01
$r$	0.9831	0.9918	0.9409

### Kaynaklar

- 1.A. Broido, *Journal of Polymer Science*, 7 (1969) 1761.
- 2.A. W. Coats, J. P. Redfern, *Nature*, 201 (1964) 68.
- 3.H. H. Horowitz, G. Metzger, *Anal. Chem.*, 35 (1963) 1464.
- 4.F. M. Emen, *Yüksek Lisans Tezi*, Mersin Üniversitesi, Mersin, (2002).
- 5.H. Arslan, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 66 (2001) 399.
- 6.G. Avşar, *Yüksek Lisans Tezi*, Mersin Üniversitesi, Mersin, (1999).