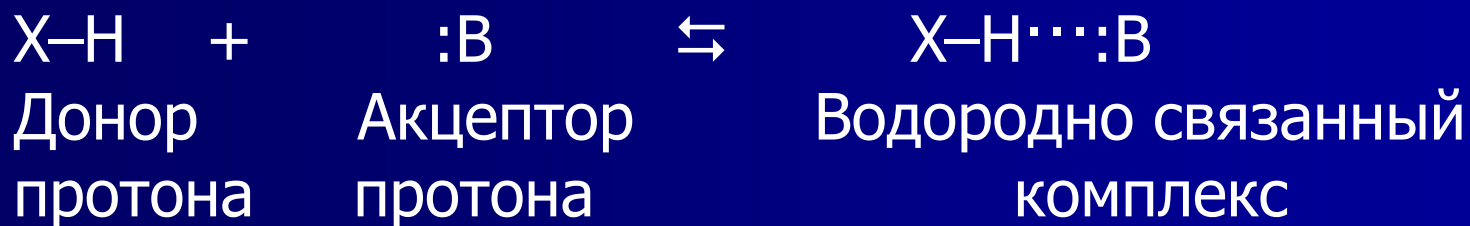


СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЙ УЧЕБНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР МГУ ИМ.  
ЛОМОНОСОВА ШКОЛА-ИНТЕРНАТ ИМ. А. Н. КОЛМОГорова

# Определение фактора кислотности метанола с использованием метода ИК-спектроскопии

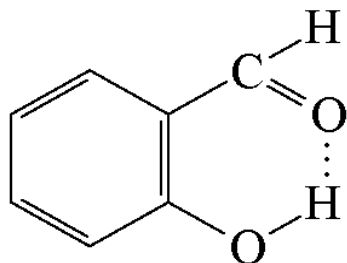
Выполнила:  
Шенаева Элина Грантовна,  
ученица 11"М" СУНЦ МГУ  
Научный руководитель:  
Осипова Елена Сергеевна,  
аспирант ИНЭОС РАН

# Водородные связи в веществах

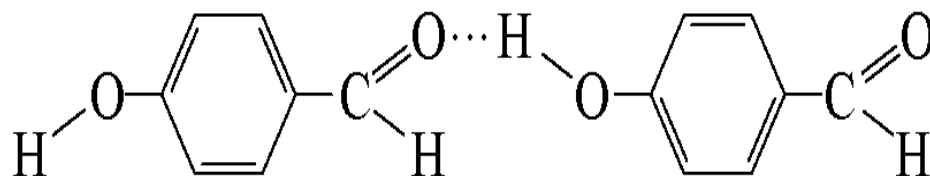


H – водород

X и V: – электроотрицательные элементы (F, O, N, реже S, P, Cl)

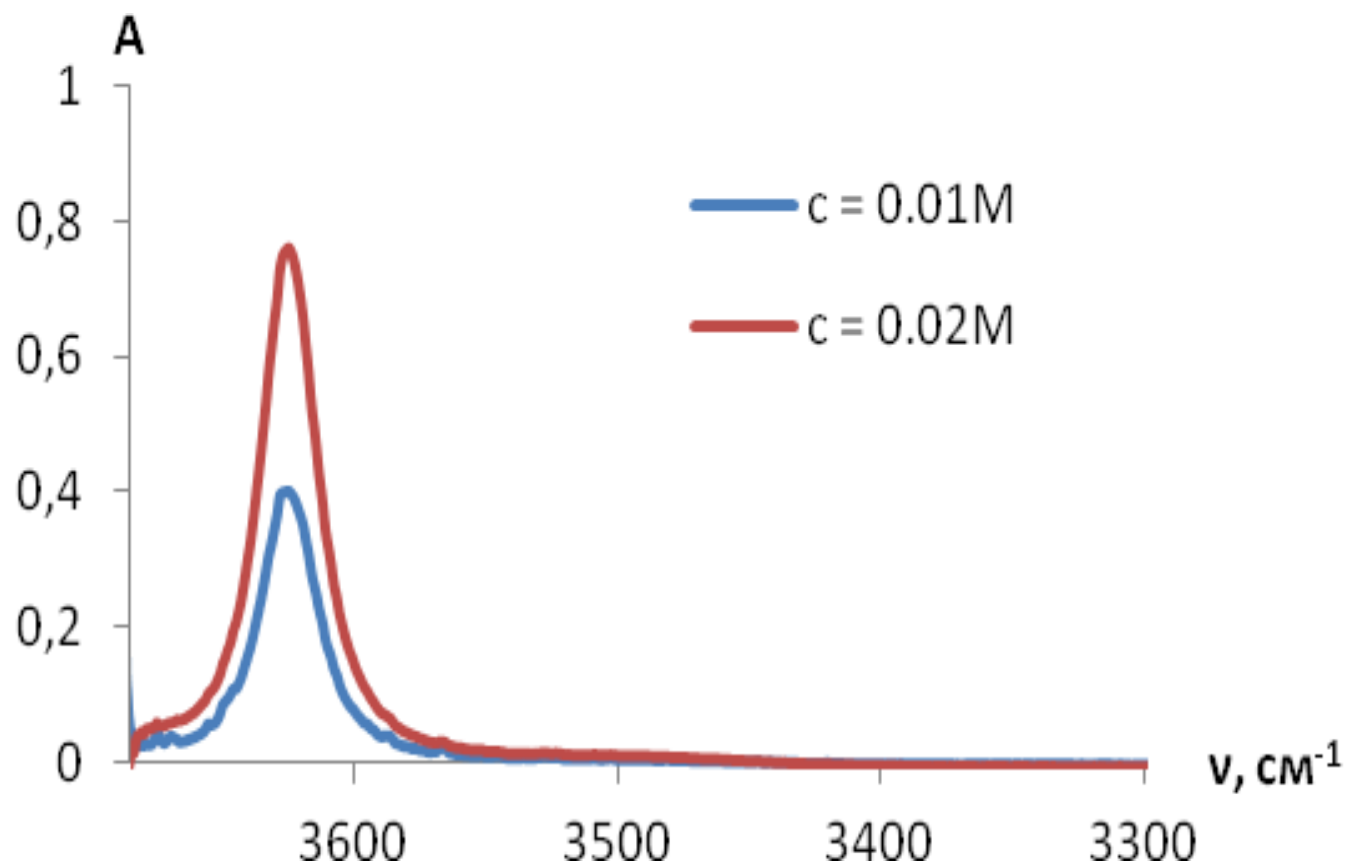


Внутримолекулярная H-связь  
в салициловом альдегиде



Межмолекулярная водородная связь  
в парагидроксибензальдегиде

# Изучение водородных связей в метаноле методом инфракрасной спектроскопии





## **Связывание метанола с триэтиламином**

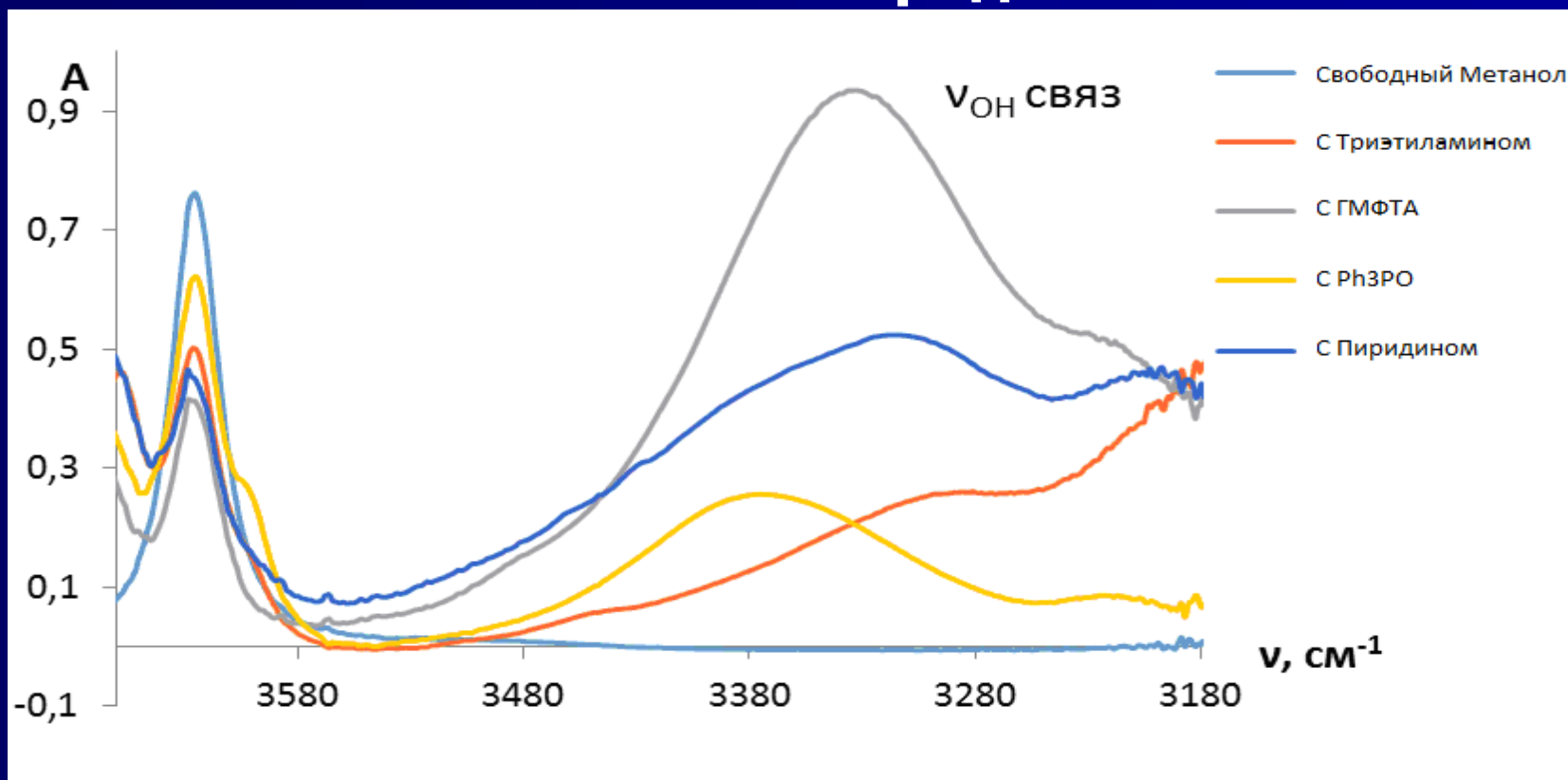


## **Связывание метанола с ГМФТА**



## **Связывание метанола с трифенилфосфиноксидом**

## Связывание метанола с пиридином



ИК-спектры метанола ( $c = 0,02M$ ) и метанола с добавлением оснований

	$E_j$	$\Delta\nu$	$\Delta H$
$\text{Et}_3\text{N}$	1,7	336	5,72
ГМФТА	1,53	307	5,38
$\text{Ph}_3\text{PO}$	1,35	250	4,64
$\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$	1,49	292	5,19

Таблица 1. Факторы основности ( $E_j$ ) для выбранных нами оснований, известные из литературы, а также полученные экспериментально значения смещений ( $\Delta\nu$ ) и энтальпий ( $\Delta H$ ) для каждого основания.

$$\Delta\nu = \nu_{\text{СВОБ}} - \nu_{\text{СВЯЗ}}$$

# Расчет фактора кислотности метанола

Правило факторов Иогансена:

$$H^{\circ} = \Delta H_{11} * P_i * E_j$$

$\Delta H_{11}$  – энтальпия стандартной реакции между диэтиловым эфиром и фенолом. В растворителе хлористом метиле = - 4,6 ккал/моль

$E_j$  - фактор основности акцептора протонов

$P_i$  - фактор кислотности донора протонов

**Эмпирическое уравнение Иогансена:**

$$-\Delta H = \frac{18\Delta v}{720 + \Delta v}$$

$\Delta v$  – это разница между  $v_{\text{своб}}$  и  $v_{\text{связ}}$

$$\Delta v = v_{\text{своб}} - v_{\text{связ}}$$

## Выводы

1. Исследовано взаимодействие метанола с рядом оснований-акцепторов протона и определена энтальпия образования водородной связи.
2. Определено более точное значение фактора кислотности метанола  $P_i = 0,75$ .