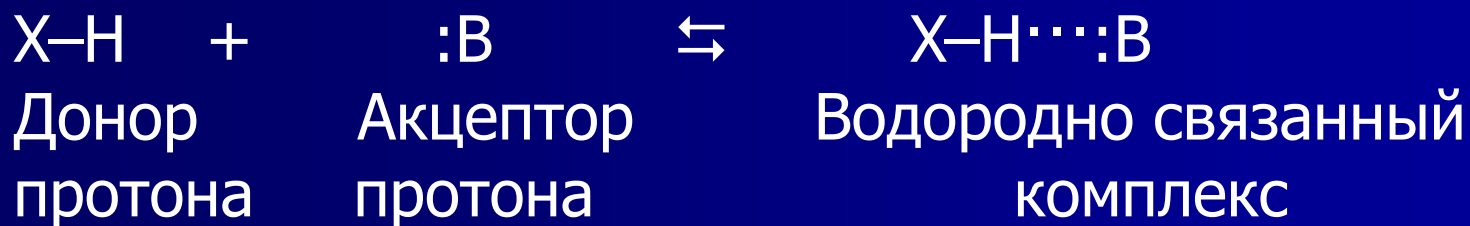


СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЙ УЧЕБНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР МГУ ИМ.
ЛОМОНОСОВА ШКОЛА-ИНТЕРНАТ ИМ. А. Н. КОЛМОГорова

Определение фактора кислотности метанола с использованием метода ИК-спектроскопии

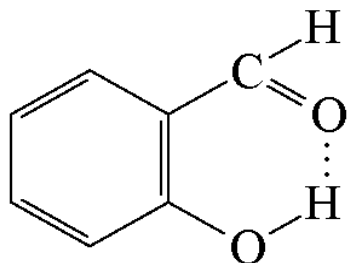
Выполнила:
Шенаева Элина Грантовна,
ученица 11"М" СУНЦ МГУ
Научный руководитель:
Осипова Елена Сергеевна,
аспирант ИНЭОС РАН

Водородные связи в веществах

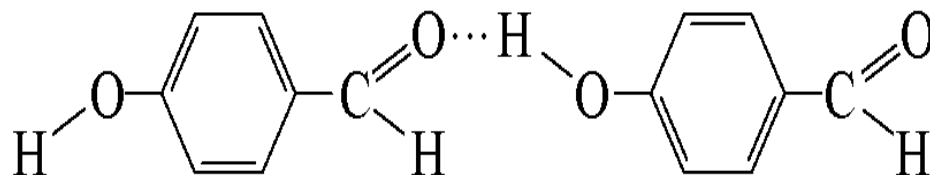


H – водород

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

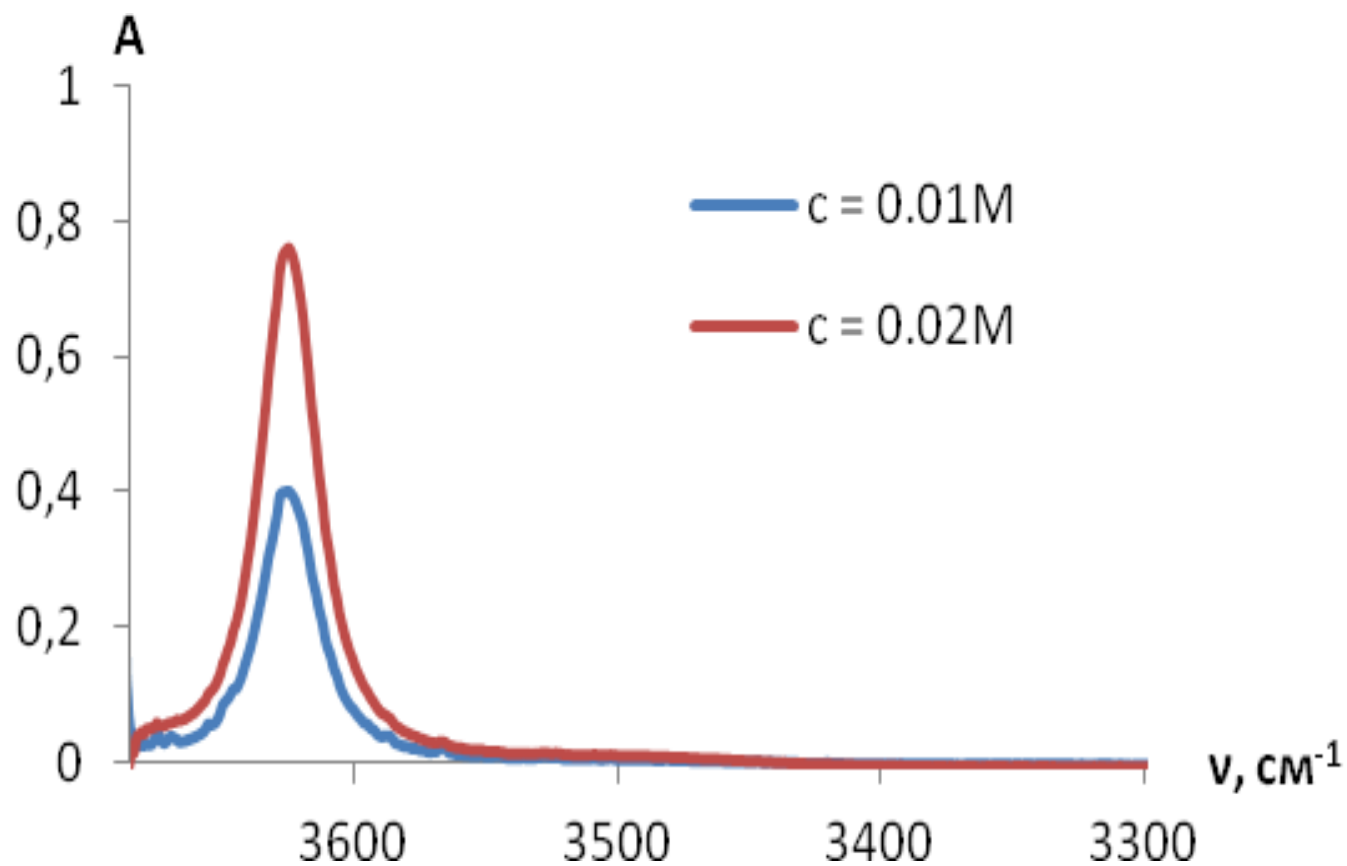


Внутримолекулярная H-связь
в салициловом альдегиде



Межмолекулярная водородная связь
в парагидроксибензальдегиде

Изучение водородных связей в метаноле методом инфракрасной спектроскопии





Связывание метанола с триэтиламином

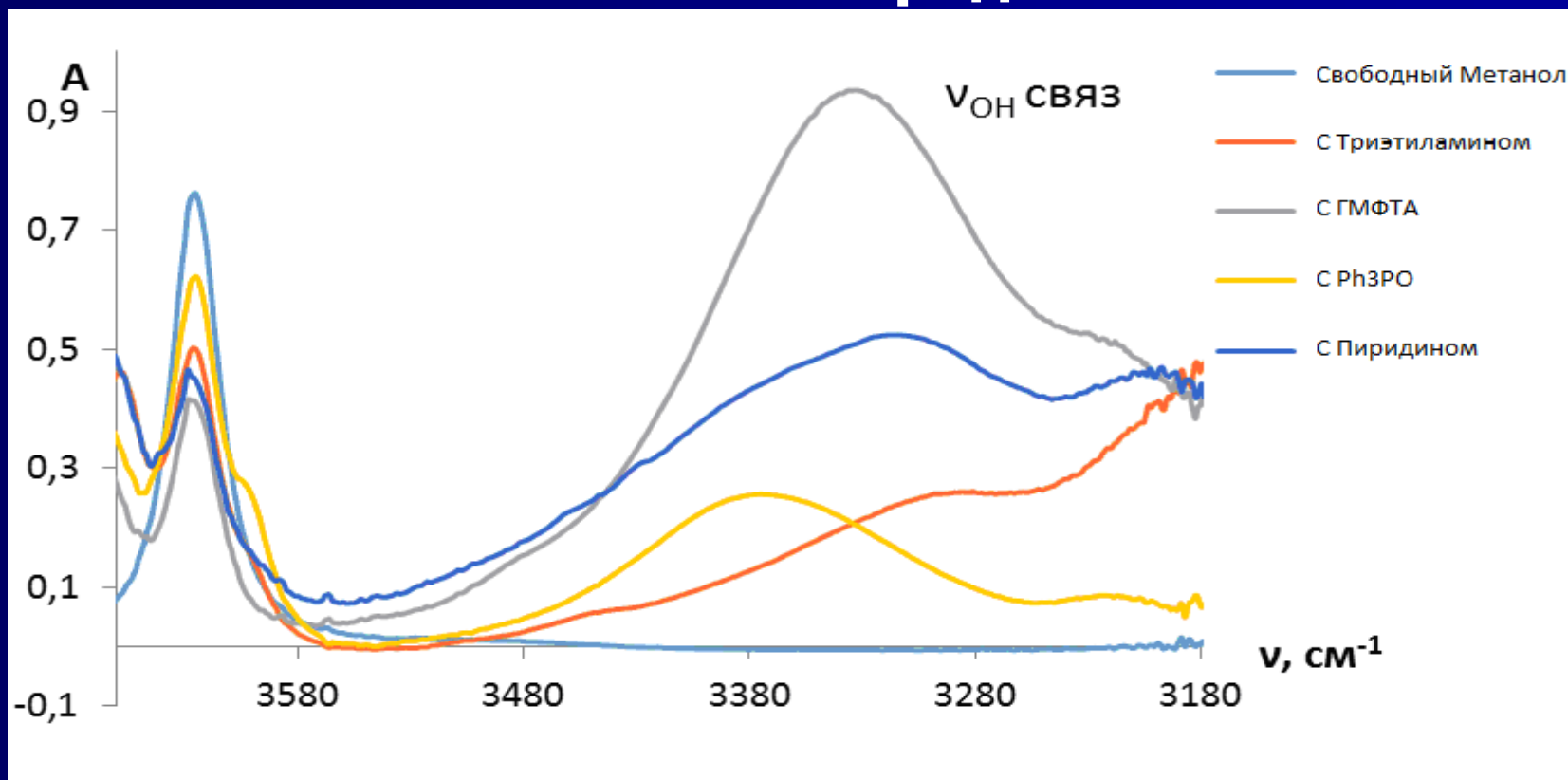


Связывание метанола с ГМФТА



Связывание метанола с трифенилфосфиноксидом

Связывание метанола с пиридином



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

	E_j	$\Delta\nu$	ΔH
Et_3N	1,7	336	5,72
ГМФТА	1,53	307	5,38
Ph_3PO	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 (ΔH) для каждого основания.

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

Расчет фактора кислотности метанола

Правило факторов Иогансена:

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

ΔH_{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:

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

Δv – 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 $P_i = 0,75$.