

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНСТАНТ ОБРАЗОВАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЙ Н-СВЯЗИ ПО ДАННЫМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Н.У. Муллоев¹, Н.Л. Лаврик², Ж.О. Юсупова¹, Н.А. Маджидов¹

¹Таджикский национальный университет, г. Душанбе, Таджикистан

²Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Предлагается экспериментальный метод определения эффективности образования межмолекулярной водородной связи с помощью определения константы образования Н-комплекса (K). Суть эксперимента по определению величины K состоит в том, что для одной исходной концентрации донора протона нужно зарегистрировать изменение величины оптической плотности на длине волны поглощения мономеров и изменение величины оптической плотности комплексов ИК-полос поглощения при двух концентрациях акцептора протонов. Этот подход апробирован на примере взаимодействия бутилового спирта (донор протона) с 4-хлорметил-1.3-диоксоланом (акцептор протона). Полученная величина константы равновесия составила 72.2 M^{-1} . Установлено, что предложенный метод определения величины K может быть использован не только в ИК-, но и в УФ-видимой спектроскопии.

Ключевые слова: ИК-спектры, константа равновесия, межмолекулярная Н-связь, бутиловый спирт, 1.3-диоксолан.

Введение

Практическое применение сложных молекулярных систем в конденсированном состоянии в различных областях науки и практики зачастую зависит от их донорно-акцепторной способности, которая определяет их реакционную способность и, в частности, способность образовывать межмолекулярные Н-связи. Образование комплексов посредством водородной связи определяет многие физические и химические свойства веществ в конденсированном состоянии. Именно эффективностью образования Н-связей обуславливается ее важная роль во многих биологических и химических процессах [1–3]. В связи с этим изучение эффективности образования Н-связи имеет не только научное, но и практическое значение.

Одним из важнейших параметров, который определяет эффективность образования межмолекулярной Н-связи (кроме определения величины энергии ее образования), является константа равновесия (K) процесса образования Н-комплекса. Величина K может служить количественной характеристикой эффективности донорно-акцепторного взаимодействия [3, 4].

В данной работе предлагается метод определения константы образования Н-комплекса K по данным ИК-спектроскопии. Предлагаемый метод демонстрируется на примере взаимодействия 4-хлорметил-1.3-диоксолана (акцептор протона) и бутилового спирта (донор протона).

Следует отметить, что среди веществ, способных к образованию водородных связей, особое место занимают гетероциклические соединения, играющие важную роль во многих биологических объектах и являющиеся фрагментами аминокислот, нуклеиновых кислот, различных витаминов, ферментов и которые широко применяются в фармацевтике, медицине и различных технологических процессах. В частности, производные 1.3-диоксоланов используются в качестве эффективных ингибиторов, антиоксидантов, реагентов для тонкого органического синтеза, для получения биологически активных соединений и обладают гипотензивной, противосудорожной активностью, а также антигистаминным эффектом [5–7].

Описание метода определения константы равновесия

В растворе спирта с диоксоланом в нейтральном растворителе имеет место реакция:



где A – спирт; B – диоксолан; x – Н-комплекс спирт – диоксолан; K – константа равновесия при образовании Н-комплекса. Здесь и далее предполагается, что имеет место образование Н-комплекса спирт – диоксолан в соотношении 1:1.

Определим для реакции (1) константу равновесия K как

$$K = \frac{[x]}{([A_0] - [x])([B_0] - [x])}, \quad (2)$$

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>