

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. К настоящему времени учение о водородной связи (Н-связи) представляет собой крупную главу химической науки. Само понятие и термин «водородная связь» были введены еще в 1920 г. (В.Латимер и Р.Радебуш). С тех пор исследованы Н-связи в громадном количестве веществ. Исключительно важно участие Н-связей в некоторых технологических процессах, таких как адсорбция и экстракция. Они оказывают влияние на многие химические реакции, например, их образование может предшествовать переносу протона от одной молекулы к другой.

Распад гидропероксидов является одной из важнейших стадий процесса окисления углеводов. На кинетику процесса оказывают существенное влияние Н-связи в растворах гидропероксидов, которые приводят к появлению само- и гетеро-ассоциатов. Актуально изучение термодинамики водородных связей гидропероксидов.

Большую роль в изучении Н-связи сыграла ИК спектроскопия поглощения, возможности которой продолжают развиваться, что в значительной степени обусловлено использованием Фурье-ИК спектроскопии и компьютерной обработкой эксперимента с приложением факторного анализа (ФА). Кроме того, развитие спектроскопии позволяет получать такую информацию о спектральных параметрах, которая может быть использована для разработки теоретических представлений о природе межмолекулярных взаимодействий.

Важную роль в исследованиях строения и свойств молекул играют методы квантовой химии. Использование метода ИК-спектроскопии в сочетании с развиваемыми методами обработки экспериментальных данных и квантово-химическими расчетами позволяет получить более полную информацию о свойствах Н-связей.

Целью работы является получение и анализ термодинамических параметров водородных связей в само- и гетероассоциатах гидропероксидов кумола (ГПК) и третичного бутила (ГПТБ) на основе исследования ИК-Фурье спектров с применением факторного анализа в сочетании с квантово-химическими расчетами ассоциатов.

Научная новизна и выносимые на защиту положения.

Методом ИК спектроскопии с приложением факторного анализа определены термодинамические параметры Н-связей в линейных фрагментах $O-H\cdots O$, $O-H\cdots N$. В качестве акцептора протона использовались ацетон, ацетофенон и ацетонитрил. На основе проведенных квантово-химических расчетов оценены относительные величины энтальпий Н-связей различных