کاربرد یک مدل اصلاح شده برای بررسی خود تجمعی متانول واتانول در تتراکلرید کربن با استفاده از اسپکتروسکوپی NMR

لیلا پاپی ودکترحمید مدرس

ایران, تهران, خیابان حافظ ٤٢٤, دانشگاه امیرکبیر, دانشکده مهندسی شیمی،

تلفن:٦٤٥٤٤٣١٧٦- ٠٢١فاکس:٦٤٠٥٨٤٧-٠٢١

First Author E-Mail:P٨٠١٤١٠٣@cic.aut.ac.ir

چکیده

خواص ترمودینامیک پیوند هیدروژنی محلولهای شامل سیستم دوتایی الکلها(متانول و اتانول) در حلال تتراکلرید کربن برای دماهای۳۰۸, ۳۲۸, ۳۱۸و ۳۳۸ کلوین توسط اسپکتروسکوپی رزونانس مغناطیسی هسته [NMR] بررسی شده است .

یک مد ل اصلاح شده برپایه دو مدل تجمع بدون مبادله گرما وتجمع ثابت تعادل تغییر پذیر برای بردازش داده های اسپکتروسکوپی بکار می رود. ضرایب فعالیت γ وخواص فزونی ترمودینامیک (G^E,H^E) تجمع الکلها توسط این مدل اصلاح شده محاسبه می شود ونتایج با داده های اندازه گیری فشار بخار مقایسه می شود. محاسبه تغییرات نسبی جابجایی شیمیایی در محلولهای غیر قطبی و تعیین پیوند هیدروژنی بدون استفاده از داده های ویژه NMR امکان پذیر است.

واژه های کلیدی: پیوند هیدروژنی; اسپکتروسکوپی (NMR); ثابت تجمع; مدل AA ; مدل AVEC

مقدمه

سالیان زیادی است که با استفاده از اطلاعات طیف سنجی بر روی بر هم کنش شیمیایی وفیزیکی حلال - حل شونده مطالعه میشود. نتیجه این مطالعات مدلهای بیشماری است که برای تعیین خواص ترمود ینامیک از آن استفاده می شود. بر هم کنشها بین حلال و حل شونده می تواند ازنوع تجمع یا حلال پوشی باشد که این بستگی به نوع حلال دارد در ترکیبات غیر قطبی این بر هم کنش ازنوع خود تجمعی می باشد. کمپلکس تشکیل شده در محلولها می تواند خطی (ساختار باز) - حلقوی (ساختار بسته) باشد که بر حسب نوع حلال موقعیتهای جذ ب متفاوتی در مطالعات اسپکتروسکوپی دارد. [١] روشهای متفاوتی برای ارزیابی پیوند هید روژنی بر هم کنشها و تشکیل گونه های پلیمری موجود است از جمله: پراکند گی نوترون [٢-٣-٤] , پراش اشعه x[٥-٦], اسپکتروسکوپی IR[٧-٨] و سایر روشها.

اسپکتروسکوپی رزونانس مغناطیس هسته (NMR) یک روش طیف سنجی اصلی است. گاتوسکی (Gutowsky) وسایک (Saike) [٩] نشان دادند که جابجایی شیمیایی مشاهده شده برای کمپلکس تشکیل شده, δ_0, میانگین وزنی جابجایی شیمیایی پروتون آ زاد است که فاکتورهای کسر وزنی از کل پروتونها پیوند هید روژنی در حال تعادل می باشد.