

## Корреляционные взаимосвязи коэффициентов распределения фенолов и нафтолов

Коренман Я.И., Суханов П.Т.

Воронежская государственная технологическая академия, г. Воронеж

[korenman@vgta.vrn.ru](mailto:korenman@vgta.vrn.ru)

Количественные характеристики межфазного распределения органических соединений обусловлены многими факторами, неоднозначно действующими в конкретной системе в зависимости от свойств распределяемого вещества и экстрагента. Разнохарактерные заместители в молекуле распределяемого соединения при экстракции из водных растворов изменяют гидрофобно-гидрофильные параметры соединения и соответственно коэффициенты распределения  $D$ . Между коэффициентами  $D$  эталонного и замещенного соединений имеется взаимосвязь, обусловленная единым механизмом распределения, в частности, однохарактерными взаимодействиями экстрагируемого соединения и растворителя.

Для установления корреляционных зависимостей применено уравнение, аналогичное уравнению Гаммета, связывающее коэффициенты распределения эталонного вещества ( $D_0$ ), его замещенного ( $D_x$ ):

$$\lg D_x = \sigma \cdot \lg D_0 + \pi,$$

параметры  $\sigma$  и  $\pi$  зависят от природы распределяемого соединения и экстрагента.

Объекты данного исследования относятся к одному классу веществ, что не исключает значительных различий в физико-химических свойствах отдельных соединений. Установлено, что введение в молекулу распределяемых соединений дополнительных функциональных групп приводит к практически одинаковому изменению коэффициентов распределения. Установленные корреляции позволяют прогнозировать коэффициенты  $D$  замещенных соединений и изомеров по известным величинам  $D$  эталонного вещества с погрешностью не более 5 %.

Наибольшие коэффициенты корреляции ( $r^2$ ) установлены для взаимосвязей в рядах нафтолы – нафтолсульфоокислоты – нитрозонафтолы или моно- – ди- – трихлорфенолы,  $r^2 = 0,95 - 0,97$ . С применением пакета программ Statistika-6.0 установлена множественная корреляция между  $\lg D$  фенолов, нафтолов и свойствами органических растворителей: поляризуемостью (функция показателя преломления), полярностью, плотностью энергии когезии, основностью (по Коппелю-Пальму,  $B$ ) и электрофильностью (по Райхардту,  $E_T$ ). Введены новые дескрипторы: поверхностное натяжение – учитывает массоперенос распределяемого соединения через границу раздела фаз растворителей и универсальный параметр – коэффициент распределения растворителя между октанолом и водой ( $\lg D_{ок}$  – параметр гидрофобности растворителя).

Во всех системах наибольший вклад в значение функции ( $\lg D$ ) оказывают параметры, по которым оценивают неспецифическую сольватацию (полярность и поляризуемость). Параметры электрофильности и растворимости, межфазное поверхностное натяжение вносят меньший вклад в величины  $\lg D$  и относятся к корректирующим переменным. Вклад дескриптора  $\lg D_{ок}$  для большинства соединений значим (0,1 – 0,5) и является в основном понижающей величиной.

Разработанная статистическая модель экстракции надежно (вероятность 95 %) прогнозирует распределение фенолов и нафтолов в системах с гидрофобными растворителями ( $r^2_{\min} = 0,90$ ).