

ДОСЛІДЖЕННЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ РІВНОВАГ РЕАГЕНТІВ ТРОПЕОЛІНОВОГО РЯДУ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

Денис Снігур, Надія Хрїстова, Олександр Чеботарьов,

Дмитро Барбалат, Анна Ніколау

Кафедра аналітичної хімії,

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

вул. Дворянська 2, 65082 Одеса, Україна

e-mail: denis270892@yandex.ru

Реагенти тропеолінового ряду (тропеолін О, тропеолін ОО і тропеолін ООО) широко застосовуються в хімічному аналізі як кислотно-основні індикатори та аналітичні реагенти. Незважаючи на широке застосування тропеолінів їх фізико-хімічні характеристики мало вивчені. Дані про кислотно-основні властивості тропеолінів, величини констант іонізації (**pK**) їх функціональних груп розрізнені або взагалі відсутні.

Виходячи з викладеного вище мета даної роботи полягає в детальному вивченні кислотно-основних характеристик реагентів тропеолінового ряду методом хімічної кольориметрії (**МХК**) в широкому діапазоні кислотності середовища (pH 1÷13).

На основі масиву отриманих експериментальних даних обчислені кольориметричні функції питомої та повної відмінності кольору розчинів тропеолінів та розраховані відповідні величини pK (таблиця). З метою перевірки правильності отриманих результатів pK визначали спектрофотометрично (**СФМ**) та прогнозували методами QSPR-аналізу, виходячи з структур реагентів із оптимізованою геометрією.

Таблиця

Константи іонізації тропеолінів у водних розчинах (n=3, P=0,95)

Реагент	Метод	pK _{N=N-}	pK ₁	pK ₂
*Тропеолін О	МХК	0,5±0,1	6,5±0,1	12,0±0,2
	СФМ	0,6±0,1	6,3±0,2	12,1±0,1
	QSPR	0,23	8,54	12,02
**Тропеолін ОО	МХК	0,8±0,1	2,0±0,1	-
	СФМ	0,9±0,2	2,1±0,1	-
	QSPR	0,84	1,29	-
***Тропеолін ООО	МХК	2,0±0,1	8,5±0,1	-
	СФМ	2,2±0,1	8,3±0,1	-
	QSPR	-	11,8	-

*pK₁ та pK₂ відповідають дисоціації n- та o-ОН груп тропеоліну О;

** pK₁ відповідає іонізації –NH групи тропеоліну ОО;

*** pK₁ відповідає дисоціації o-ОН групи тропеоліну ООО