

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АНИОНА НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ И НЕКОТОРЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛЕЙ 6,7-ДИГИДРОКСИ-4-МЕТИЛ-2-ФЕНИЛХРОМЕНИЛИЯ

© 2020 г. Д. А. Барбалат, А. Н. Чеботарев, Д. В. Снигур*

*Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова,
ул. Дворянская 2, Одесса, 65082 Украина
e-mail: 270892denis@gmail.com

Поступило в Редакцию 17 сентября 2019 г.
После доработки 17 сентября 2019 г.
Принято к печати 20 сентября 2019 г.

Изучено влияние природы анионов (Cl^- , Br^- , I^- , ClO_4^- , PF_6^-) на физико-химические свойства солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия: растворимость, сольватохромия и спектральные характеристики. Определены основные спектрофотометрические характеристики и отмечено, что молярный коэффициент поглощения возрастает при переходе к полярным растворителям. Установлено, что наибольшим молярным коэффициентом поглощения обладает гексафторфосфат, что обусловлено его слабокоординирующим влиянием и способствует более эффективной сольватации органического катиона.

Ключевые слова: 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилий, спектрофотометрия, ИК спектроскопия, растворимость, сольватохромия

DOI: 10.31857/S0044460X2004006X

Органические аналитические реагенты представляют большой класс синтетических соединений, которые используются для определения, разделения и концентрирования как органических веществ, так и неорганических ионов. Важным аспектом исследования органических реагентов является изучение их физико-химических, кислотно-основных свойств и спектральных характеристик [1]. Среди них особое положение занимают именно спектральные свойства: спектрофотометрические, люминесцентные и сольватохромные. Последние связаны с взаимодействием молекул растворителя, которые различаются дипольным моментом, с хромофорными группами растворенного вещества [2]. К тому же в растворителях разной природы, отличающихся физико-химическими свойствами, возможны изменения спектрофотометрических характеристик равновесных форм красителя, вызванные не только сольватохромией, но и таутомерией [3–5].

В свою очередь, значительный интерес вызывают производные кислородсодержащих гетероциклических соединений – орто-диоксихроменолы. Среди последних наиболее изучены комплексообразующие свойства производных 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия по отношению к ионам поливалентных металлов и разработаны методики для их прямого или экстракционно-спектрофотометрического определения [6, 7]. Следует отметить, что работы по изучению данных соединений немногочисленны и посвящены их кислотно-основным свойствам [8] или особенностям синтеза [9, 10].

Цель данной работы заключается в изучении влияния природы анионов Cl^- , Br^- , I^- , ClO_4^- , PF_6^- на спектральные характеристики, растворимость и сольватохромия солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия.

Одним из существенно важных параметров, который следует учитывать при рациональном

Таблица 1. Растворимость солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия в некоторых растворителях

Анион	Растворимость, ммоль/л			
	вода	метанол	этанол	ацетонитрил
Хлорид	0.55	180.31	13.53	1.21
Бромид	0.50	179.28	7.69	0.92
Иодид	0.16	53.13	5.45	2.21
Перхлорат	0.10	33.01	4.84	12.65
Гексафторфосфат	0.07	14.75	3.62	9.33

выборе реагента для прямого или экстракционного- (сорбционно) спектрофотометрического определения ионов металлов является растворимость этого реагента и соответствующего комплексного соединения. Результаты ВЭЖХ-определения растворимости исследуемых соединений приведены в табл. 1. Как видно из приведенных данных, среди исследованного ряда растворителей, соли 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия растворяются лучше в метаноле и хуже всего в воде. Следует отметить, что в воде, метаноле и этаноле (96%) наблюдается практически линейное уменьшение растворимости ($R^2 = 0.95, 0.94, 0.85$) в ряду противоионов Cl^- , Br^- , I^- , ClO_4^- , PF_6^- , т. е. с увеличением радиуса аниона ($r = 181, 196, 220, 240, 242$ пм соответственно) [11, 12].

Представлялось интересным изучить влияние природы аниона на спектральные свойства дигидроксихроменолов. Так, в ИК спектрах уширенной полосой проявляются валентные колебания ОН-групп при $3270\text{--}3460\text{ см}^{-1}$, полоса валентных колебаний связей С–Н находится при $2900\text{--}3080\text{ см}^{-1}$. Наблюдаются также характеристические полосы при $1623\text{--}630\text{ см}^{-1}$ (выражена в ИК спектре) и $1596\text{--}1602\text{ см}^{-1}$ (интенсивна в спектре КР), соответствующие колебаниям связей С–О и С–С бензопирилиевого цикла [13, 14]. Также имеется характерная полоса скелетных колебаний бензольного кольца около 1000 см^{-1} , средней интенсивности в КР и низкой в ИК спектрах. Интересно отметить, что в ИК спектрах заметно влияние анионов на соотношение интенсивности полос колебаний С–О и С–С бензопирилиевого цикла: в ряду от Cl^- до PF_6^- с увеличением радиуса аниона интенсивность полосы при $1623\text{--}1630\text{ см}^{-1}$ уменьшается относительно полосы при $1596\text{--}1602\text{ см}^{-1}$. Этот эффект может быть связан с изменением локализации заряда в пирилиевом цикле, а следовательно, и полярности бензопирилиевого

катиона, что, в свою очередь, сказывается на растворимости соответствующих солей.

При изучении электронных спектров поглощения солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия отмечено, что на положение и интенсивность полос поглощения влияет не только природа растворителя (сольватохромия), но и природа аниона-противоиона. По результатам проведенных исследований и соответствующих расчетов построены зависимости значений логарифма молярного коэффициента светопоглощения от эмпирического параметра полярности растворителей Димрота–Райхардта $E_T(30)$ [15]. Величины молярных коэффициентов поглощения и положения максимумов поглощения для всех изученных солей обобщены в табл. 2. Анализ полученных результатов позволяет заключить, что величины логарифмов молярных коэффициентов светопоглощения в растворителях различной природы практически линейно возрастают с увеличением их параметра полярности $E_T(30)$ для всех исследуемых солей ($R^2 = 0.80\text{--}0.90$).

Согласно данным, приведенным в табл. 2, можно заключить, что в растворах спиртов в подавляющем большинстве случаев наблюдается батохромный сдвиг по сравнению с водным раствором на $2\text{--}15$ нм, однако для изопропанольных растворов регистрируется гипсохромный сдвиг на $5\text{--}20$ нм. Природа аниона существенно не влияет на положение максимума поглощения, а соответствующая величина $\Delta\lambda$ не превышает 14 нм при переходе от одной соли 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия к другой. Молярный коэффициент поглощения больше в полярных протонных растворителях (вода и спирты), чем в апротонных растворителях. В ряду анионов наибольшим молярным коэффициентом поглощения обладает гексафторфосфат 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия, что, вероятно, обусловлено слабокоординиру-

Таблица 2. Спектральные характеристики растворов солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия в различных растворителях

Растворитель		Cl ⁻		Br ⁻		I ⁻		ClO ₄ ⁻		PF ₆ ⁻	
		λ, нм	ε × 10 ⁻⁴	λ, нм	ε × 10 ⁻⁴	λ, нм	ε × 10 ⁻⁴	λ, нм	ε × 10 ⁻⁴	λ, нм	ε × 10 ⁻⁴
Полярные протонные	Вода	460	2.32	459	2.63	460	2.62	459	2.24	459	3.26
	Метанол	470	2.31	462	2.55	454	2.42	469	2.09	461	2.90
	Этанол	470	2.14	462	2.33	466	2.36	464	2.04	471	2.90
	Изопропанол	444	2.66	455	2.35	457	2.39	455	1.96	440	3.93
	<i>n</i> -Пропанол	473	2.13	471	2.48	470	2.39	469	2.07	471	3.06
	<i>n</i> -Бутанол	472	2.02	469	2.39	471	2.38	469	2.09	470	2.98
	Изоамиловый спирт	473	2.08	471	2.37	471	2.38	471	2.02	466	2.88
Полярные апротонные	ТГФ	460	1.74	446	2.34	456	1.99	438	1.79	447	2.63
	Диоксан	462	1.69	462	2.31	464	2.16	459	1.54	458	2.58
	Ацетонитрил	466	1.79	464	2.31	454	2.14	465	1.74	461	2.58
	Ацетон	460	1.81	455	2.34	442	2.13	448	1.86	452	2.56
	Этилацетат	461	1.80	456	2.19	451	2.11	451	1.66	458	2.60
	Бутилацетат	460	1.73	455	2.23	458	1.97	454	1.63	459	2.44

ющим влиянием данного аниона и способствует более эффективной сольватации 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилиевого катиона.

Таким образом, изучено влияние природы аниона на физико-химические свойства солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия. Найдены корреляции, устанавливающие связь между термодинамическими радиусами анионов и растворимостью в полярных протонных растворителях, а также характеристическими полосами в колебательных спектрах. Отмечено влияние сольватации протонными и апротонными полярными растворителями на положение максимумов светопоглощения солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия. Установлены зависимости значений логарифма молярного коэффициента светопоглощения солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия от эмпирического параметра полярности растворителей Димрота–Райхардта $E_T(30)$.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Соли (хлорид, бромид, перхлорат) 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия получали путем конденсации пирогаллола А с бензоилацетоном в ледяной уксусной кислоте при непосредственном введении соответствующей кислоты в реакционную массу или обменной реакцией хлорида 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия

с образованием менее растворимой соли (иодид, гексафторфосфат). Все реактивы соответствовали квалификации ЧДА и выше.

Идентификацию и определение чистоты продуктов реакции проводили методом ВЭЖХ с использованием хроматографа Infinity 1260 с масс-детектором 6530 Accurate Mass Q-TOF (Agilent Technologies, США) и диоднолучным УФ детектором. Время удерживания катиона 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия вне зависимости от аниона составляет 3.25 ± 0.05 мин. Чистота синтезированных продуктов по внутренней нормировке составляет не менее 99.0%. В масс-спектрах (ионизация двойным электроспреем при атмосферном давлении в положительном поле) присутствует пик с m/z 253.20 ± 0.05 , вычислено для катиона 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия $C_{16}H_{13}O_3^+$: $253.27 [M^+]$. Ионизацию в отрицательном поле использовали для детектирования анионов (кроме Cl⁻, значение m/z которого не достигает рабочего диапазона масс-детектора 50–3000 Да).

ИК спектры зарегистрированы с помощью ИК спектрометра FT-IR-8400S (Shimadzu) методом нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) на приставке Quest Specac в диапазоне $400\text{--}4000 \text{ см}^{-1}$ с коррекцией базовой линии. Спектры комбинационного рассеяния получали на

приборе DXR Raman Microscope Thermo Scientific с лазером 780 нм в рабочем интервале прибора 100–3500 см⁻¹ и коррекцией базовой линии, а также подавлением флуоресценции. Спектры КР не удалось зафиксировать для хлорида и гексафторфосфата, поскольку флуоресценция перекрывает полезный сигнал в их спектрах. Спектры ¹H и ¹³C ЯМР получены на спектрометре Bruker Avance III (400 МГц) в ДМСО-*d*₆.

Растворимость солей 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия изучали методом ВЭЖХ с УФ детектированием при $\lambda = 260$ нм. В качестве растворителей были взяты деионизированная вода, метанол, этанол (96%) и ацетонитрил. Для построения градуировочного графика готовили растворы хлорида 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия в ацетонитриле с концентрациями 0,2, 0,4, 0,6, 1,0, 2,0, 3,0, 6,0, 9,0, 12,0 ммоль/л. Объем введения – 1 мкл. В этом диапазоне график зависимости концентрации 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия от площади пика на хроматограмме является прямолинейным и имеет $R^2 = 0,999$. В 5 колб емкостью 5 мл вносили по 0,1 г хлорида, бромида, иодида, перхлората, гексафторфосфата 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия и прибавляли 4,0–4,5 мл воды. Смесь перемешивали и после полного растворения прибавляли небольшими порциями по 0,05 г еще соли для получения нерастворенного осадка и насыщенного раствора соли 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия над ним. Полученную смесь оставляли на 2 ч до установления равновесия, затем собирали насыщенный раствор шприцем, фильтровали шприцевым фильтром с тefлоновой мембраной и размером пор 2 мкм и хроматографировали. Аналогично изучена растворимость в метаноле и этаноле. Заколы варьировали так, чтобы сигнал попадал в середину градуировочного графика. Далее по данным ВЭЖХ-УФ рассчитывали молярную концентрацию насыщенного раствора с учетом объема введения.

Сольватохромию изучали по аналогии с процедурой, описанной в работе [16]. В градуированные пробирки с притертыми пробками вносили по 0,1 мл 1×10^{-3} моль/л метанольного раствора соответствующей соли 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия и 5 мл органического раствори-

теля, перемешивали и регистрировали спектры поглощения на спектрофотометре СФ-56 (ОКБ «ЛОМО-Спектр», Россия) в диапазоне длин волн 380–780 нм в термостатированных при 25°C кварцевых кюветках ($l = 1$ см).

Перхлорат 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия. К смеси пирогаллола А (2,52 г, 10 ммоль) и бензоилацетона (1,62 г, 10 ммоль) в 10 мл ледяной уксусной кислоты прибавляли 6 мл 50%-ной хлорной кислоты (40 ммоль HClO₄). Реакционную смесь кипятили в течение 30 мин. После охлаждения до комнатной температуры светло-коричневый кристаллический осадок отфильтровывали на фильтре Шотта под вакуумом и промывали дистиллированной водой (3×5 мл). Выход 70%. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3426,5 (O–H), 3070,2 (C–H, Ar), 1626,0. 1602,2 (C–O, C–C, Het), 1579,1, 1509,0, 1489,7, 1463,7, 1444,9, 1410,3, 1371,3, 1343,5, 1297,0, 1271,0, 1218,4, 1173,5, 1092,4. 1052,1 (Cl–O), 997,9 (C–C, Ph), 896,0, 868,9, 854,0, 780,8, 762,0, 738,5, 681,9, 663,4, 618,5, 517,6, 473,0. Спектр КР, ν , см⁻¹: 1625,9. 1596,7 (C–O, C–C, Het), 1532,0, 1508,5, 1466,2, 1425,7, 1379,5, 1342,9, 1240,9, 1194,9, 1168,8, 1001,5 (C–C, Ph), 898,2, 526,2. Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 2,91 с (3H, CH₃), 7,48–7,49 д (2H, Ar, $J = 4,64$ Гц), 7,70–7,79 м (3H, Ar), 8,38–8,40 д (2H, Het, $J = 7,43$ Гц), 8,47 с (1H, Het). Спектр ЯМР ¹³C (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 20,72 (CH₃), 103,18, 107,11, 114,71, 120,82, 128,53, 129,88, 130,26, 134,84, 150,53, 154,65, 162,43, 164,48, 165,38. Масс-спектр (ESI⁻), m/z : 99,66 (вычислено для ClO₄⁻: 99,45).

Хлорид 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия. Через раствор пирогаллола А (2,52 г, 10 ммоль) и бензоилацетона (1,62 г, 10 ммоль) в 10 мл ледяной уксусной кислоты пропускали ток сухого хлороводорода при комнатной температуре в течение 30–40 мин, затем еще 3 часа при нагревании на кипящей водяной бане. Реакционную массу выливали в 100 мл смеси воды со льдом. Светло-коричневый осадок отфильтровывали на фильтре Шотта под вакуумом и промывали диизопропиловым эфиром. Выход 55%. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3355,9 (O–H), 2903,0 (C–H, Ar), 2611,7 (C–H, Alk), 1625,0. 1597,2 (C–O, C–C, Het), 1578,5, 1554,6, 1525,1, 1490,8, 1410,4, 1368,3, 1294,8, 1253,8, 1214,9, 1214,9, 1201,4, 1201,4, 997,8 (C–C, Ph),

896.4, 850.4, 780.8, 763.1, 732.2, 705.6, 680.2, 660.4, 620.2, 554.8, 526.1, 502.9, 472.1.

Бромид 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия. К раствору пирогаллола А (2.52 г, 10 ммоль) и бензоилацетона (1.62 г, 10 ммоль) в 10 мл ледяной уксусной кислоты прибавляли 8 мл 40%-ной бромистоводородной кислоты (60 ммоль HBr). Реакционную смесь кипятили 30 мин, затем отфильтровывали светло-коричневый кристаллический осадок на фильтре Шотта под вакуумом и промывали несколькими порциями воды. Выход 50%. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3404.7, 3375.5 (O–H), 3043.4 (C–H, Ar), 2641.5 (C–H, Alk), 1624.3, 1595.6 (C–O, C–C, Het), 1580.3, 1556.3, 1522.0, 1489.3, 1407.1, 1382.6, 1367.1, 1295.5, 1252.3, 1238.8, 1216.4, 1195.6, 1158.3, 1100.5, 1081.0, 1034.0, 997.4 (C–C, Ph), 895.9, 849.3, 780.4, 762.6, 727.6, 694.9, 677.8, 661.2, 622.0, 553.4, 525.0, 514.1, 470.7. Спектр КР, ν , см^{-1} : 1630.2, 1596.9 (C–O, C–C, Het), 1527.8, 1508.9, 1468.0, 1427.2, 1383.8, 1369.1, 1322.9, 1291.5, 1255.2, 1238.3, 1185.1, 1159.0, 1083.4, 1000.5 (C–C, Ph), 898.0, 764.2, 708.6, 679.1, 617.9, 529.1. Масс-спектр (ESI⁻), m/z : 78.90, 80.90 [вычислено для Br⁻: 78.92 (⁷⁹Br), 80.92 (⁸¹Br)].

Иодид 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия. Хлорид 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия (2.9 г, 10 ммоль) растворяли в 60 мл кипящей водно-этанольной смеси (30:70), затем прибавляли 10 г (65 ммоль) иодида натрия. Через 20 мин наблюдалось образование осадка. Смесь оставляли на воздухе на 24 ч, затем отфильтровывали красно-коричневый осадок на фильтре Шотта под вакуумом и промывали несколькими порциями воды. Выход 60%. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3278.2 (O–H), 3038.6 (C–H, Ar), 1624.2, 1595.8 (C–O, C–C, Het), 1510.6, 1490.0, 1461.9, 1444.2, 1408.9, 1347.5, 1297.4, 1269.2, 1216.4, 1190.1, 1156.6, 1103.6, 1079.2, 1058.9, 1021.1, 996.2 (C–C, Ph), 895.7, 858.9, 782.5, 761.0, 736.7, 680.9, 662.3, 619.3, 516.1, 472.7. Спектр КР, ν , см^{-1} : 1620.0, 1596.1 (C–O, C–C, Het), 1539.7, 1508.6, 1465.4, 1425.6, 1380.1, 1343.9, 1274.2, 1237.7, 999.6 (C–C, Ph), 897.1, 527.4. Масс-спектр (ESI⁻), m/z : 127.12 (вычислено для I⁻: 126.90).

Гексафторфосфат 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилбензопирилия. Хлорид 6,7-дигидрокси-4-метил-2-фенилхроменилия (2.9 г, 10 ммоль)

растворяли в 60 мл кипящей водно-этанольной смеси (30:70), затем прибавляли гексафторфосфат аммония (7 г, 43 ммоль). Через 20 мин наблюдалось образование осадка. Смесь оставляли на воздухе на 24 ч, затем отфильтровывали красный осадок на фильтре Шотта под вакуумом и промывали несколькими порциями воды. Выход 70%. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3457.1 (O–H), 3078.4 (C–H, Ar), 2980.9 (C–H, Alk), 1629.3, 1596.4 (C–C, C–O, Het), 1574.7, 1531.3, 1505.5, 1490.6, 1403.6, 1371.1, 1342.8, 1256.1, 1227.1, 1204.8, 1103.5, 1079.3, 1027.3, 999.3 (C–C, Ph), 928.3, 877.3, 825.2 (P–F), 768.6, 702.1, 679.4, 658.2, 629.3, 554.0, 516.6, 471.4. Масс-спектр (ESI⁻), m/z : 144.93 (вычислено для PF₆⁻: 144.97).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саввин С.Б., Штыков С.Н., Михайлова А.В. // Усп. хим. 2006. Т. 75. № 4. С. 380; Savvin S.B., Shlykov S.N., Mikhailova A.V. // Russ. Chem. Rev. 2006. Vol. 75. N 4. P. 341. doi 10.1070/RC2006v075n04AVEN001189
2. Фиалков Ю.А. Растворитель как средство управления химическим процессом. Л.: Химия, 1990. 240 с.
3. Саввин С.Б., Кузин Э.Л. Электронные спектры и структура органических реагентов. М: Наука, 1974. 277 с.
4. Sabnis R. W. Handbook of acid-base indicators. Boca Raton: CRC Press, 2008. P. 416.
5. Чеботарев А.Н., Снигур Д.В., Жукова Ю.П., Бевзюк Е.В., Базель Я.Р. // ЖОХ. 2017. Т.87. Вып. 2. С. 216; Chebotarev A.N., Snigur D.V., Zhukova Yu.P., Bevziuk K.V., Studenyak Ya.I., Bazel Ya.R. // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 2. P. 196. doi 10.1134/S1070363217020074
6. Чеботарёв А.Н., Снигур Д.В., Барбалат Д.А., Плюта К.В., Койчева А.С. // Вопр. химии и хим. технологии. 2017. Т. 1. Вып. 110. С. 36.
7. Snigur D.V., Chebotarev A.N., Dubovyiy V.P., Barbalat D.A., Bevziuk K.V. // Microchem. J. 2018. Vol. 142. P. 273. doi 10.1016/j.microc.2018.07.010
8. Снигур Д.В., Чеботарев А.Н., Бевзюк Е.В. // Вестн. МГУ. Сер. Химия. 2017. Т. 58. Вып. 4. С. 193;

- Snigur D.V., Chebotarev A.N., Bevziuk K.V.* // Moscow Univ. Chem. Bull. 2017. Vol. 72. N 4. P. 187. doi 10.3103/S0027131417040095
9. *Hassner A., Stumer C.*, Organic Syntheses Based on Name Reactions. Amsterdam: Pergamon – Elsevier Science, 2002. P. 17.
10. *Kuznetsov E.V., Shcherbakova I.V., Balaban A.T.* // Adv. Heterocycl. Chem. 1990. Vol. 50. P. 157. doi 10.1016/S0065-2725(08)60063-X
11. *Shannon R.D.* // Acta Crystallogr. (A). 1976. Vol. 32. N 5. P. 751. doi 10.1107/s0567739476001551
12. *Simoes M.C., Hughes, K.J., Ingham, D.B., Ma L., Pourkashanian M.* // Inorg. Chem. 2017. Vol. 56. N 13. P. 7566. doi 10.1021/acs.inorgchem.7b01205
13. *Deligeorgiev T.G., Nikolov P., Tyutyulkov N.* // Z. Naturforsch. 1987. Vol. 42a. P. 43.
14. *Balaban A.T., Mateescu D., Elia M.* // Tetrahedron. 1962. Vol. 18. N 10. P. 1083. doi 10.1016/S0040-4020(01)99274-9
15. *Reichardt C.* // Pure Appl. Chem. 2008. Vol. 80. P. N 7. P. 1415. doi 10.1351/pac200880071415
16. *Bevziuk K., Chebotarev A., Fizer M., Klochkova A., Pliuta K., Snigur D.* // J. Chem. Sci. 2018. Vol. 130. N 2. Art.12. doi 10.1007/s12039-017-1411-2

Anion Nature Effect on Spectral and Some Physico-Chemical Properties of 6,7-Dihydroxy-4-methyl-2-phenylchromenylium Salts

D. A. Barbalat, A. N. Chebotarev, and D. V. Snigur*

I. I. Mechnikov Odessa National University, Odessa, 65082 Ukraine
*e-mail: 270892denis@gmail.com

Received September 17, 2019; revised September 17, 2019; accepted September 20, 2019

The influence of the anions nature on the physico-chemical properties (solubility, solvatochromism and spectral characteristics) of 6,7-dihydroxy-4-methyl-2-phenylchromenylium salts was studied. The main spectrophotometric characteristics were determined. It was noted that the molar absorptivity is higher in more polar solvents. It was found that the highest molar absorptivity was observed for hexafluorophosphate, which is due to the weakly coordinating effect of this anion and contributes to more efficient solvation of the organic cation.

Keywords: 6,7-dihydroxy-4-methyl-2-phenylchromenylium, spectrophotometry, IR spectroscopy, solubility, solvatochromism