

УДК 544.35

**РАСТВОРИМОСТЬ И СОЛЬВАТАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАДИАЗОЛА В СИСТЕМЕ ВОДА-ЭТАНОЛ**

© 2011 О. Н. Лукавенко, С. В. Ельцов

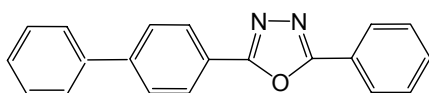
Определена растворимость люминофоров 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазола (BPD) и 2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадиазола (NND) в бинарных смесях воды с этанолом при 298.15 К. Проведен многопараметрический корреляционный анализ зависимости растворимости BPD и NND от параметров полярности среды в смешанных растворителях. Найдены уравнения, описывающие зависимость растворимости люминофоров от свойств растворителя. Проведен сравнительный анализ корреляционных зависимостей растворимости BPD и NND с ранее полученными зависимостями для 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3-оксазола (BPO), 2-α-нафтил-5-фенил-1,3-оксазола (NPO), 2,5-дифенил-1,3-оксазола (PPO) и 1,4-бис(5-фенилоксазоллил-2) бензола (p-POPOP). Установлено, что изменение растворимости люминофоров при изменении состава смешанного растворителя определяется энергией образования полости.

**Ключевые слова:** оксадиазол, растворимость, сольватация, параметры полярности, энергия образования полости, Ван-дер-ваальсов объем молекул.

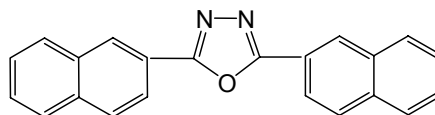
**Введение**

На сегодняшний день создан ряд моделей, позволяющих проводить оценку растворимости вещества в различных растворителях. Все они тем или иным способом учитывают свойства растворяемого вещества и растворителя, а также энергетику их взаимодействия [1-7].

Настоящая работа посвящена изучению растворимости люминофоров 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазола (BPD) и 2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадиазола (NND) в системе смешанных растворителей вода-этанол и является продолжением исследований, проведенных ранее [8-10]. Целью исследования является выявление закономерностей влияния природы и состава смешанного растворителя вода-этанол на растворимость оксадиазолов BPD и NND. Формулы исследованных соединений приведены на рис.1.



2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3,4-оксадиазол, BPD



2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадиазол, NND

**Рис. 1.** Формулы исследованных соединений.**Экспериментальная часть**

BPD и NND были синтезированы и очищены Е. Н. Обуховой в институте Монокристаллов НАНУ. Эти реактивы мы использовали без последующей очистки.

Растворимость определялась методом изотермического насыщения [8,11]. Для приготовления водно-органических смесей использовали бидистиллированную воду, растворы готовили весовым методом. Этиловый спирт очищали по стандартной методике [12]. Концентрации насыщенных растворов определяли спектрофотометрически. Спектры поглощения снимали на спектрофотометре СФ-46 в интервале длин волн 295-310 нм для определения растворимости BPD и 310-320 нм - для NND.

Исследование состава твердой фазы, которая находится в равновесии с насыщенными растворами люминофоров, проведено В. Д. Паникарской (институт Монокристаллов НАНУ) методом термогравиметрии на термоаналитической системе Mettler TA 3000. Установлено, что в исследуемых системах кристаллосольваты не образуются.

### Результаты и их обсуждение

Концентрации насыщенных растворов BPD и NND (в шкале мольных долей) в системе вода-этанол при 298.15 К приведены в таблице 1. Там же приведены энергии Гиббса растворения ( $\Delta G_S$ ), рассчитанные по уравнению:

$$\Delta G_S = -RT \ln x, \quad (1)$$

где  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – абсолютная температура,  $x$  – мольная доля растворенного вещества в насыщенном растворе.

Растворимость изученных люминофоров возрастает с увеличением содержания этанола в смешанном растворителе. Сравнение энергий Гиббса растворения BPD и NND с данными для 2-(4-бифенил)-5-фенил-1,3-оксазола (BPO), 2- $\alpha$ -нафтил-5-фенил-1,3-оксазола (NPO), 2,5-дифенил-1,3-оксазола (PPO) и 1,4-бис(5-фенилоксазоллил-2) бензола (p-POPOP) [8-10] показывает, что величины  $\Delta G_S$  исследованных соединений располагаются выше значений энергий Гиббса растворения для BPO, NPO, PPO и ниже значений энергий Гиббса для p-POPOP.

В соответствии с принципом линейности свободных энергий, энергия сольватации растворенного вещества может быть представлена как сумма произведений значений параметров полярности растворителя на коэффициенты пропорциональности, показывающие вклад данного свойства. Наиболее часто используемыми для описания растворимости неэлектролитов являются уравнения Камлета–Тафта и Коппеля–Пальма [13,14]. Уравнение Коппеля–Пальма в применении к описанию процесса растворения одного вещества в нескольких растворителях имеет вид:

$$\Delta G_S = \Delta G_{S_0} + A_1 \delta_H^2 + A_2 E + A_3 \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} + A_4 \frac{\varepsilon - 1}{2\varepsilon + 1} + A_5 B, \quad (2)$$

где  $\Delta G_{S_0}$  – энергия Гиббса растворения исследуемого соединения в инертном растворителе;

$\delta_H^2$  – квадрат параметра растворимости Гильдебранда;  $E$  – параметр, описывающий электрофильность растворителя;  $n$  и  $\varepsilon$  – показатель преломления и диэлектрическая проницаемость растворителя, соответственно;  $B$  – параметр, характеризующий нуклеофильность растворителя;  $A_1 \dots A_5$  – коэффициенты пропорциональности.

**Таблица 1.** Концентрация ( $x$ , шкала мольных долей) оксадиазолов в насыщенных растворах и энергии Гиббса растворения в системе вода-этанол при 298.15 К.

Мольная доля этанола	NND		BPD	
	$x$	$\Delta G_S$ , кДж/моль	$x$	$\Delta G_S$ , кДж/моль
0	$2.8 \cdot 10^{-9}$	48.82	$2.9 \cdot 10^{-9}$	48.70
0.05	$4.5 \cdot 10^{-9}$	47.64	$7.7 \cdot 10^{-9}$	46.310
0.10	$1.2 \cdot 10^{-8}$	45.21	$3.4 \cdot 10^{-8}$	42.63
0.20	$2.6 \cdot 10^{-7}$	37.59	$1.35 \cdot 10^{-6}$	33.50
0.30	$1.94 \cdot 10^{-6}$	32.61	$9.50 \cdot 10^{-6}$	28.67
0.40	$6.58 \cdot 10^{-6}$	29.58	$2.77 \cdot 10^{-5}$	26.01
0.50	$1.47 \cdot 10^{-5}$	27.58	$5.44 \cdot 10^{-5}$	24.34
0.60	$2.55 \cdot 10^{-5}$	26.22	$9.97 \cdot 10^{-5}$	22.84
0.70	$4.09 \cdot 10^{-5}$	25.05	$1.49 \cdot 10^{-4}$	21.85
0.80	$5.61 \cdot 10^{-5}$	24.26	$2.0 \cdot 10^{-4}$	21.11
0.90	$5.94 \cdot 10^{-5}$	24.12	$2.3 \cdot 10^{-4}$	20.77
1.00	$5.97 \cdot 10^{-5}$	24.11	$2.3 \cdot 10^{-4}$	20.77

В уравнении (2) слагаемое  $A_1 \delta_H^2$  характеризует энергию, необходимую для образования полости в растворителе для принятия молекулы растворенного вещества, слагаемые  $A_3 \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2}$

и  $A_4 \frac{\varepsilon - 1}{2\varepsilon + 1}$  характеризуют способность растворителя к неспецифическим взаимодействиям с растворенным веществом, а величины  $A_2E$  и  $A_5B$  – к их донорно-акцепторному взаимодействию. В ряде частных случаев это уравнение достаточно хорошо описывает зависимость растворимости различных веществ, а анализ величин вкладов параметров полярности растворителя позволяет делать выводы о процессах, протекающих в растворе [8, 13-17].

Для выявления параметров полярности растворителя, определяющих зависимость растворимости оксазолов от состава смешанного растворителя, был проведен анализ зависимости энергии Гиббса растворения от параметров растворителя по уравнению (2), с различным числом параметров полярности. В качестве параметра, описывающего электрофильность растворителя, нами был использован нормализованный параметр Райхардта ( $E_T^N$ ). Параметры нуклеофильности растворителя в корреляционные уравнения не включались, так как оксазолы не являются акцепторами электронной пары при образовании межмолекулярных связей с молекулами растворителя. Изменение числа параметров полярности растворителя, используемых в корреляции, достигалось приравниванием одного или нескольких коэффициентов пропорциональности ( $A_1 - A_4$ ) нулю, что приводило к исключению из рассмотрения вклада в изменение растворимости свойства растворителя, описываемого данным коэффициентом. Физико-химические параметры смесей вода-этанол при  $T = 298.15$  К, необходимые для проведения корреляционного анализа, взяты из нашей работы [8].

Результаты расчетов для растворимости BPD и NND по корреляционному уравнению (2) представлены в таблице 2. При трактовке результатов многопараметрического корреляционного анализа учитывали, что в зависимостях  $\Delta G_S$  от  $\delta_H^2$  коэффициент  $A_1$  должен быть положительным, в то время как коэффициент  $A_2$  должен быть отрицательным для растворения веществ, не являющихся акцепторами электронных пар, коэффициенты  $A_3$  и  $A_4$  могут иметь любой знак [8, 10].

**Таблица 2.** Результаты обработки данных по растворимости BPD и NND в системе вода-этанол по корреляционному уравнению (2) с различным числом независимых параметров\*.

Люминофор	$\Delta G_{So}$	$A_1 \cdot 10^2$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$R^{**}$
BPD	6±2	2.0±0.2	0	0	0	0.94
BPD*	1.9±1.2	2.5±0.1	0	0	0	0.98
NND	11±2	1.9±0.2	0	0	0	0.92
NND*	6±1	2.4±0.1	0	0	0	0.98
BPD+NND	9±2	1.9±0.1	0	0	0	0.91
BPD	-41±4	0	93±5	0	0	0.97
NND	-31±5	0	84±6	0	0	0.95
BPD	-77±20	-1.6±0.9	164±39	0	0	0.98
NND	-69 ± 27	-1.6±1.2	157±53	0	0	0.96
BPD	23±82	0.4±0.6	0	-1004±416	460±158	0.97
BPD*	105±38	1.7±0.3	0	-632±188	92±91	0.99
NND	-41±95	0.3±0.7	0	-809±513	513±182	0.96
NND*	48±52	1.7±0.5	0	-401±253	109±127	0.98
BPD+NND	-9±76	0.3±0.6	0	-906±382	487±146	0.94
BPD	-41±89	0	55±37	-453±551	266±204	0.98
NND	-97±107	0	49±45	-318±660	340±245	0.96
BPD	-88 ± 94	-1.3 ± 1.1	134 ± 72	-184 ± 573	148 ± 218	0.98
NND	-141±1118	-1.2±1.3	120±91	-75±719	233±274	0.97

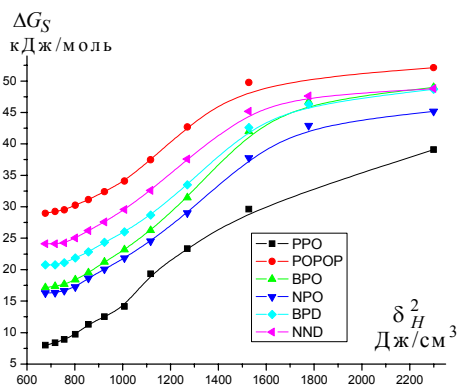
\*– при проведении корреляционного анализа использовались данные по растворимости оксазолов в системе вода-этанол без учета точки, соответствующей воде;

\*\*–  $R$  – коэффициент корреляции.

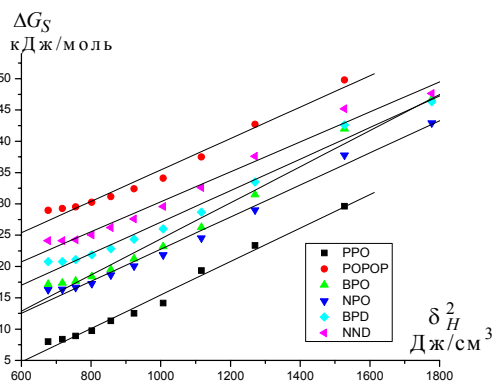
Из данных таблицы 2 следует, что во всех уравнениях, содержащих слагаемое  $A_2 E_T^N$ , коэффициент  $A_2$  больше нуля, поэтому вышеуказанным требованиям к знаку коэффициентов они не отвечают. Таким образом, для рассмотрения остается всего лишь два корреляционных уравнения: уравнение, содержащее только слагаемое  $A_1 \delta_H^2$ , и уравнение, содержащее слагаемые  $A_1 \delta_H^2$ ,  $A_3 \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2}$  и  $A_4 \frac{\varepsilon - 1}{2\varepsilon + 1}$ . Коэффициенты корреляции для этих уравнений примерно одинаковы, но второе уравнение дает доверительные интервалы для  $A_1$ ,  $A_3$  и  $A_4$ , превышающие саму величину коэффициентов, поэтому предпочтение следует отдать первому уравнению, так как оно содержит меньшее число параметров. Следовательно, изменение растворимости люминофоров определяется энергией образования полости, а энергия Гиббса растворения может быть описана однопараметрическим уравнением

$$\Delta G_S = \Delta G_{S_0} + A_1 \delta_H^2. \quad (3)$$

На рис. 2 представлены зависимости  $\Delta G_S$  оксадиазолов от  $\delta_H^2$  растворителя в бинарной системе вода–этанол, полученные в данной работе, и величины для оксазолов, взятые из наших работ [8-10]. В целом эти зависимости близки к линейным (коэффициент корреляции  $R$  не менее 0.94), однако на графиках хорошо заметно, что точки, соответствующие растворению каждого из люминофоров в воде, заметно отклоняются от линейности. Исключение из расчета по уравнению (3) точек, соответствующих растворению оксадиазолов BPD и NND в воде, заметно повышает коэффициент корреляции (табл. 2). Это характерно и для растворимости изученных нами ранее оксазолов. На рис. 3 приведены графики зависимости энергии Гиббса растворения люминофоров от  $\delta_H^2$  растворителя, причем на графике показаны все экспериментальные точки за исключением воды. Изображенные на рис. 3 прямые проведены в соответствии с уравнением (3). Данные зависимости характеризуются очень высоким коэффициентом корреляции (не менее 0.98) и практически одинаковыми значениями коэффициента  $A_1$ : для процесса растворения PPO он равен 0.027, РОРОР – 0.025, ВРО – 0.029, NPO – 0.026, BPD – 0.025, NND – 0.024.



**Рис. 2.** Зависимость энергии Гиббса растворения люминофоров от квадрата параметра Гильдебранда растворителя (на графике показаны все экспериментальные точки, которые соединены сглаживающей линией).



**Рис. 3.** Зависимость энергии Гиббса растворения люминофоров от  $\delta_H^2$  растворителя (на графике показаны все экспериментальные точки за исключением растворения в воде; прямые проведены в соответствии с уравнением (3)).

Не смотря на близость значений коэффициентов  $A_1$  в уравнении (3), наблюдаемую при растворении различных люминофоров, обработка объединенных данных по растворимости двух люминофоров BPD и NND приводит к заметному снижению коэффициента корреляции

(табл. 2). Это может быть объяснено тем, что величины  $\Delta G_{S_0}$ , соответствующие растворению в инертном растворителе, являются индивидуальными константами каждого люминофора, зависящими от объема их молекул.

Значительное отклонение от линейной зависимости, наблюдаемое для точек, соответствующих растворению люминофоров в воде (рис. 2), по нашему мнению, может быть связано с избирательной сольватацией молекул люминофоров органическим компонентом смешанного растворителя.

Энергия Гиббса образования полости в растворителе может быть оценена по уравнению [9]:

$$\Delta G_{cav} = b\delta_H^2 V, \quad (4)$$

где  $V$  – Ван-дер-ваальсов объем молекул растворенного вещества,  $b$  – коэффициент пропорциональности.

Если основной вклад в изменение растворимости вещества при замене растворителя вносит энергия образования полости, то энергия Гиббса растворения разных веществ в одном растворителе является линейной функцией от объема их молекул [9]:

$$\Delta G_S = \alpha + \beta\delta_H^2 V, \quad (5)$$

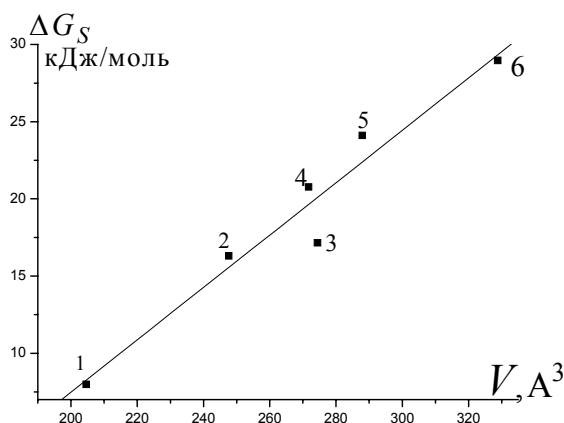
где  $\alpha$  и  $\beta$  – коэффициенты пропорциональности.

Для проведения анализа данных по растворимости люминофоров по уравнению (5) необходимы значения их Ван-дер-ваальсовых объемов. Величины  $V$  молекул BPD и NND рассчитаны нами по аддитивной схеме с использованием инкрементов объемов атомов, приведенных в статье [18]. Объем фенильного радикала, вычисленный таким методом, составляет  $75.1 \text{ \AA}^3$ , объем бифенильного радикала –  $144.9 \text{ \AA}^3$ , объем нафтильного радикала –  $118.1 \text{ \AA}^3$ , объем оксадиазольного бирадикала –  $51.72 \text{ \AA}^3$ . Ван-дер-ваальсов объем молекул BPD и NND составляет  $271.72 \text{ \AA}^3$  и  $287.92 \text{ \AA}^3$ , соответственно. Объемы молекул PPO и p-POPOP, NPO и BPO, рассчитанные нами аналогичным способом, взяты из статьи [9]. Они составляют  $204.61 \text{ \AA}^3$  и  $328.82 \text{ \AA}^3$ ,  $247.61 \text{ \AA}^3$  и  $274.41 \text{ \AA}^3$ , соответственно.

На рис. 4 представлена зависимость энергии Гиббса растворения люминофоров в этаноле от Ван-дер-ваальсова объема их молекул. Уравнение имеет вид:

$$\Delta G_S = -26 \pm 5 + (0.17 \pm 0.02)V.$$

Эта зависимость практически линейна (коэффициент корреляции 0.97), что свидетельствует о выполнении уравнения (5) и является подтверждением того, что растворимость изученных нами люминофоров определяется энергией образования полости.



**Рис. 4.** Зависимость энергии Гиббса растворения люминофоров в этаноле от Ван-дер-ваальсова объема их молекул. 1 – PPO, 2 – NPO, 3 – BPO, 4 – BPD, 5 – NND, 6 – p-POPOP.

Таким образом, установлено, что для всех исследованных люминофоров (BPD, NND, NPO, ВРО, РРО и р-РОРОР) зависимость их растворимости от состава смешанного растворителя вода-этанол хорошо описывается однопараметрическим уравнением, которое учитывает только параметр Гильдебранда растворителя.

### Литература

1. Kamlet M.J., Abboud J.L.M., Taft R.W. *Progr. Phys. Org. Chem.* 1981. Vol.13. P.485-630.
2. Kamlet M.J., Doherty R.M., Abboud J-L.M., Abraham M.H., Taft R.W. *Chemtech.* 1986. Vol.16. No.9. P.566-576.
3. Abraham M.H., Grellier P.L., Abboud J-L.M., Doherty R.M., Taft R.W. *Can. J. Chem.* 1988. Vol.66. P.2673-2686.
4. Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2002. Vol.31, No.4. P.293-303.
5. Charlton A.K., Daniels C.R., Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2003. Vol.32, No.12. P.1087-1102.
6. Hoover K.R., Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2005. Vol.34. No.10. P.1121-1133.
7. Stovall D.M., Acree W.E., Abraham M.H. *Fluid Phase Equil.* 2005. Vol.232. P.113-121.
8. Лукавенко О.Н., Ельцов С.В., Паникарская В.Д. *Вісник ХНУ.* 2007. Хімія. Вип. 15(38). №770. С.285-295
9. Лукавенко О.Н., Ельцов С.В. *Вісник ХНУ.* 2008. Хімія. Вип.16(39). №820. С.311-316.
10. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Grigorovich A.V., Mchedlov-Petrosyan N.O. *J. Mol. Liq.,* 2009. Vol.145, No.3. P.167-172.
11. Ельцов С.В., Дорошенко А.О., Бондарев Н.В. *Журнал Общей Химии.* 1998. Т.68. Вып.3. С.375-378.
12. Вайсбергер А., Проскауэр Э., Риддик Дж., Тупс Э. *Органические растворители: физические свойства и методы очистки.* / Под ред. А. Вайсбергера. М. 1958. 519 с.
13. Katritzky A.R., Fara D.C., Yang H., Tamm K. *Chem. Rev.* 2004. Vol.104. No.1. P.175-198.
14. Фиалков Ю.Я. *Растворитель как средство управления химическим процессом.* Л.: Химия. 1990. 240 с.
15. Макитра Р.Г., Пириг Я.Н. *Журнал общей химии.* 1986. Т.56. Вып.12. С.2657-2660.
16. Макитра Р.Г., Пириг Я.Н. *Журнал общей химии.* 1986. Т.56. Вып.3. С.657-665.
17. Макитра Р.Г., Медяна Г.Г., Пальчикова Е.Я. *Журнал неорганической химии.* 2004. Т.49. №11. С.1918-1920.
18. Кузьмин В.С., Кацер С.Б. *Известия АН СССР. Сер. Хим.* 1992. №4. С.922-931.

### References

1. Kamlet M.J., Abboud J.L.M., Taft R.W. *Progr. Phys. Org. Chem.* 1981. Vol.13. P.485-630.
2. Kamlet M.J., Doherty R.M., Abboud J-L.M., Abraham M.H., Taft R.W. *Chemtech.* 1986. Vol.16. No.9. P.566-576.
3. Abraham M.H., Grellier P.L., Abboud J-L.M., Doherty R.M., Taft R.W. *Can. J. Chem.* 1988. Vol.66. P.2673-2686.
4. Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2002. Vol.31, No.4. P.293-303.
5. Charlton A.K., Daniels C.R., Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2003. Vol.32, No.12. P.1087-1102.
6. Hoover K.R., Acree W.E., Abraham M.H. *J. Sol. Chem.* 2005. Vol.34. No.10. P.1121-1133.
7. Stovall D.M., Acree W.E., Abraham M.H. *Fluid Phase Equil.* 2005. Vol.232. P.113-121.
8. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Panikarskaya V.D. *Visn. Hark. nac. univ.* 2007. Ser. Him. issue 15(38). №770. P.285-295. [in Russian]
9. Lukavenko O.N., Eltsov S.V. *Visn. Hark. nac. univ.* 2008. Ser. Him. issue 16(39). №820. P.311-316. [in Russian]

10. Lukavenko O.N., Eltsov S.V., Grigorovich A.V., Mchedlov-Petrosyan N.O. J. Mol. Liq., 2009. Vol.145, No.3. P.167-172.
11. Eltsov S.V., Doroshenko A.O., Bondarev N.V. Zh. Obsh. Khim. 1998. T.68. No3. P.375-378. [in Russian]
12. Weissberger A., Proskawer E., Riddick J., Toops E. Organic solvents: physical properties and purification methods. / A. Weissberger, Ed. Moscow. 1958.
13. Katritzky A.R., Fara D.C., Yang H., Tamm K. Chem. Rev. 2004. Vol.104. No.1. P.175-198.
14. Fialkov Yu.Ya. Solvent as a tool for chemical process control, Khimiya, Leningrad, 1990. [in Russian]
15. Makitra R.G., Pirig Ya.N. Zh. Obsh. Khim. 1986. T.56. №12. P.2657-2660. [in Russian]
16. Makitra R.G., Pirig Ya.N., Zh. Obsh. Khim. 1986. T.56. №3. P.657-665. [in Russian]
17. Makitra R.G., Medjana G.G., Pal'chikova E.Ya. Zh. Neorg. Khim.. 2004. T.49. №11. P.1918-1920. [in Russian]
18. Kuzmin V.S., Kacer S.B. Izv. AN SSSR. Ser. Him. 1992. №4. P.922-931. [in Russian]

*Поступила в редакцию 9 августа 2011 г.*

О. М. Лукавенко, С. В. Ельцов. Розчинність та сольватація похідних оксадіазолу у системі вода-етанол.

Визначена розчинність люмінофорів 2-(4-біфеніл)-5-феніл-1,3,4-оксадіазола (BPD) та 2,5-ди-(β-нафтил)-1,3,4-оксадіазола (NND) в бінарних сумішах води з етанолом при 298.15 К. Проведено багатопараметричний кореляційний аналіз залежності розчинності BPD та NND від параметрів полярності змішаних розчинників. Знайдено рівняння, які описують залежність розчинності люмінофорів від властивостей розчинника. Проведено порівняльний аналіз кореляційних залежностей розчинності BPD та NND з залежностями, які знайдені раніше для 2-(4-біфеніл)-5-феніл-1,3-оксазола (BPO), 2-α-нафтил-5-феніл-1,3-оксазола (NPO), 2,5-діфеніл-1,3-оксазола (PPO) та 1,4-біс(5-фенілоксазоліл-2) бензола (p-POPOP). Встановлено, що зміна розчинності люмінофорів при зміні складу змішаного розчинника визначається енергією утворення порожнини.

**Ключові слова:** оксадіазол, розчинність, сольватація, параметри полярності, енергія утворення порожнини, Ван-дер-ваальсов об'єм молекули.

O. N. Lukavenko, S. V. Eltsov. Solubility and solvation of oxadiazole derivatives in mixed water-ethanol solvent system.

The solubility of 2-(4-diphenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole (BPD) and 2,5-di-(β-naphthyl)-1,3,4-oxadiazole (NND) luminophores have been determined in mixed water-ethanol solvents at 298.15 K. The multiple parameter correlation analysis of the solubility dependence on the solvent polarity parameters has been carried out. Equations that well describe the dependence of luminophores solubilities on the parameters of solvent polarity have been found. The multiple parameter correlations of solubility dependence for BPD and NND have been compared with that previously obtained for the 2-(4-diphenyl)-5-phenyl-1,3-oxazole (BPO), 2-α-naphthyl-5-phenyl-1,3-oxazole (NPO), 2,5-diphenyl-1,3-oxazole (PPO) and 1,4-bis(5-phenyl-oxazolyl-2)benzene (p-POPOP). The energy of cavity formation is shown to be the principal parameter that determines the change in luminophores solubility when the solvent composition is changed.

**Key words:** oxadiazole, solubility, solvation, solvent polarity parameters, energy of cavity formation, van-der-Waals volume of molecule.

Kharkov University Bulletin. 2011. № 976. Chemical Series. Issue 20(43).