

**ОСОБЕННОСТИ СОЛЬВАТАЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ КИСЛОТ
В СРЕДЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО
ДИОКСИДА УГЛЕРОДА¹**

Одинцова Е.Г., Гурина Д.Л.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново

oeg@isc-ras.ru

Пара-гидроксibenзойная, галловая и протокатеховая кислоты, выделяемые из растительного сырья, представляют один из наиболее широко распространенных классов природных соединений и обладают биологически активными свойствами широкого спектра действия. В настоящее время развиваются методики их обработки и экстракции из растительного сырья в среде сверхкритического диоксида углерода (СК CO₂). Поскольку растворимость данных соединений в чистом СК CO₂ довольно низка, для ее повышения используют добавки небольших количеств полярных соразтворителей, как правило, низкомолекулярных спиртов.

В настоящей работе исследовалось влияние строения выбранных биоактивных соединений, природы и концентрации соразтворителя (метанола) на процесс сольватации в среде СК CO₂. Моделирование проводили при температуре 323 К и плотности 785 кг/м³, соответствующей давлению 20 МПа методом классической молекулярной динамики в программном пакете Gromacs-5.0.7. Моделируемая ячейка содержала 1, 3 или 5 молекул растворенного вещества, около 10600 молекул растворителя, из которых 3% , 6% или 10% составляли молекулы соразтворителя. Были рассчитаны структурно-динамические характеристики систем, такие как функции радиального распределения, средние числа водородной связи, доли молекул, связанных определенным числом ВС с соразтворителем, получены распределения локальной мольной доли соразтворителя вокруг молекул фенольных кислот.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-33-00126