

苯系物 Lewis 酸碱性定量及其应用^{*}

冯 流 韩朔睽 王连生^{**}

赵元慧

(南京大学环境科学与工程系, 南京, 210093)

(东北师范大学环境科学系, 长春, 130024)

摘 要

本文以正丁醚/水和环己烷/水分配系数的对数差值 A 作为酸性指数, 以氯仿/水和四氯化碳/水分配系数的对数差值 B 作为碱性指数来度量苯系物的 Lewis 酸碱性, 阐明 A 、 B 两指数的物理意义, 并表征其相互作用的 Lewis 酸、碱间的分子作用力的大小. 定量分析其与 Kamlet 等人提出的溶剂化显色参数 π^* , α , β 间的关系, 研究了各种分子间力对酸、碱性的相对贡献, 氢键的贡献是主要的, 其次是偶极作用的贡献, 色散力引起的贡献很小以至可以忽略不计. 比较研究显示该酸碱参数能够有效的代替溶剂化参数用于 LSER 研究之中.

关键词: Lewis 酸度, Lewis 碱度, 分配系数, 溶剂化显色参数.

Lewis 酸碱理论创立以来, 其酸碱性的定量研究大多由于理论复杂、方法繁琐而受到限制, 在环境上应用较少. Gutmann 等曾利用热力学和 ^{31}P -NMR 的方法测定部分有机物的酸碱性^[1], Kamlet 等也曾提出一套系统的溶剂化显色参数来度量有机溶剂的酸碱性, 并将其用于估算化合物的溶解行为^[2,3], EL Tayar 等人曾利用分配系数的方法间接测定部分物质的氢键给体酸度和氢键受体碱度^[4], 国内汪小江等^[5]亦作过类似工作.

众所周知, 分配系数包含三方面的贡献, 即反映溶质分子在溶剂中挤出一个可以容纳自己的空穴所需要的能量的窝穴项, 以及反映溶质溶剂分子间因极性和氢键作用所放出能量的偶极项和氢键作用项, 根据 EL Tayar 等人的研究^[6], 对于结构相似的一系列化合物, 其不同溶剂体系中分配时, 窝穴项的贡献是相近的, 分配系数的差别主要取决于偶极项和氢键作用项的不同, 即溶质与溶剂间相互作用程度的不同. Lewis 酸碱分子轨道理论认为^[1], Lewis 酸碱间的相互作用力包括各种不同程度的电子供给, 从基本上为零(弱分子间力和理想化的离子缔合)一直到一个或多个电子从给体完全传递到受体都是可能的, 因此, 可以认为这种溶质/溶剂相互作用是一种广义上的 Lewis 酸碱作用. 相互作用的两种物质, 一种为 Lewis 酸, 一种为 Lewis 碱, 其酸、碱性的强弱可通过两种物质间相互作用的强弱来区分, 即相对于同一种参比物 (Lewis 碱或酸), 与之相互作用越强的另一物质的 (Lewis 酸或碱) 的酸 (或碱) 性就越强, 反之就弱. 据此选择一种强的 Lewis 酸 (或碱) 和一种极性相似的近中性溶剂, 根据其分配系数的对数差值即可来度量溶质的碱 (或酸) 性.

* 本文为国家自然科学基金资助项目; ** 通讯联系人.

根据上面的分析, 酸、碱性测定的关键在于参比体系的选择. 从文献可以得知正丁醚和环己烷的极性均很小, 而且具有相似的色散性质, 唯一的差别是正丁醚有一个带孤对电子的氧原子而具有 Lewis 碱性, 环己烷则无碱性, 因而它们被选为碱性参比体系. 基于同样的理由, 氯仿和四氯化碳两种溶剂的性质相似, 差别在于氯仿有微弱的极性和较强的酸性, 因而分别被选作参比酸和中性参比物. 定义酸性 A 、碱性 B 如下:

$$A = \lg K_{bw} - \lg K_{cw} \quad (1)$$

$$B = \lg K_{chw} - \lg K_{tw} \quad (2)$$

式中, K_{bw} , K_{cw} , K_{chw} , K_{tw} 分别为正丁醚/水、环己烷/水、氯仿/水、四氯化碳/水的分配系数.

实 验 部 分

1. 仪器和试剂

751 紫外/可见分光光度计 (上海分析仪器厂), THZ-82 型恒温振荡器 (江苏太兴医疗器械厂).

所用的 5 种有机溶剂和无机试剂均为分析纯, 59 种样品的纯度均在化学纯以上.

2. 分配系数的测定

各种样品分别用正丁醚、环己烷、氯仿、四氯化碳配成一定浓度的溶液, 移取 1ml 上述样品溶液于 10ml 具塞离心管中, 非极性样品加入 9.00ml 蒸馏水与有机相混合, 极性样品加入 9.00ml $0.01\text{mol} \cdot \text{l}^{-1}$ 盐酸或 $0.01\text{mol} \cdot \text{l}^{-1}$ 氢氧化钠溶液以抑制样品的电离, 将离心管置于恒温振荡器内于 25°C 恒温振荡 3h 使达平衡, 离心分离两相, 移去有机相, 测定水相样品的浓度, 根据下式计算分配系数.

$$K = \frac{C_o V_o - C_w V_w}{C_w V_o} \quad (3)$$

式中, K 为分配系数, C_o 为有机相中溶质初始浓度, C_w 指平衡时水相中溶质浓度, V_o , V_w 分别为有机相和水相体积.

3. 水溶解度的测定

取自文献 [7].

结 果 与 讨 论

对 59 种苯系化合物的四种溶剂/水分配系数进行测定, 根据式 (1), (2) 计算各种物质的酸性 A 和碱性 B , 结果列于表 1.

表 1 59 种化合物的酸碱性指数测定值和溶剂化显色参数值

Table 1 The observed acidity & basicity and their solvatochromic parameters of 59 compounds

序号	化 合 物	酸性 A	碱性 B	α	β	π^*
1	氯苯	0.10	0.06	0	0.07	0.71
2	溴苯	0.08	0.08	0	0.06	0.79
3	对二氯苯	0.14	0.05	0	0.03	0.70
4	邻二氯苯	0.13	0.05	0	0.04	0.80
5	间二氯苯	0.13	0.05	0	0.03	0.75
6	对氯甲苯	0.07	0.06	0	0.08	0.67
7	邻氯甲苯	0.08	0.09	0	0.08	0.67
8	对溴氯苯	0.10	0.06	0	0.02	0.77
9	苯	0.04	0.12	0	0.10	0.59
10	甲苯	0.04	0.12	0	0.11	0.55
11	邻二甲苯	0.05	0.12	0	0.12	0.51
12	间二甲苯	0.06	0.11	0	0.12	0.47
13	对二甲苯	0.06	0.10	0	0.12	0.53
14	乙苯	0.04	0.12	0	0.11	0.55
15	苯甲醛	0.32	0.70	0	0.44	0.92
16	对氯苯甲醛	0.30	0.63	0	0.42	0.92
17	2, 4-二氯苯甲醛	0.35	0.67	0	0.38	0.92
18	对硝基苯甲醛	0.44	0.79	0	0.32	1.01
19	苯乙酮	0.46	0.78	0.04	0.49	0.90
20	对甲苯乙酮	0.42	0.80	0.06	0.51	0.86
21	对氯苯乙酮	0.49	0.75	0.06	0.46	0.90
22	对氨基苯乙酮	1.28	1.50	—	—	—
23	硝基苯	0.31	0.55	0	0.39	1.01
24	对二硝基苯	0.34	0.86	0	0.55	0.99
25	间二硝基苯	0.43	0.90	0	0.55	1.02
26	邻二硝基苯	0.48	0.94	0	0.55	1.04
27	对碘硝基苯	0.28	0.50	0	0.26	1.06
28	间氯硝基苯	0.30	0.52	0	0.26	1.04
29	对氯硝基苯	0.34	0.55	0	0.26	1.02
30	2, 4-二硝基氯苯	0.45	0.86	0	0.51	1.05
31	2, 6-二硝基甲苯	0.40	0.90	0	0.56	1.02
32	对硝基甲苯	0.25	0.51	0	0.31	0.97
33	邻硝基甲苯	0.28	0.55	0	0.31	0.97
34	间硝基甲苯	0.31	0.48	0	0.31	0.97
35	苯酚	1.96	0.98	0.61	0.33	0.72
36	邻甲酚	1.70	0.96	0.56	0.34	0.69
37	2, 4-二氯酚	2.27	0.93	0.78	0.18	0.77
38	2, 4-二硝基酚	2.87	1.75	0.92	0.40	1.19
39	间苯二酚	4.61	2.15	—	—	—
40	对苯二酚	4.49	2.39	—	—	—
41	邻苯二酚	3.64	2.04	—	—	—
42	对硝基酚	2.69	1.38	0.92	0.40	1.17
43	对氨基酚	3.16	1.98	1.00	0.37	0.72
44	邻氨基酚	2.97	1.70	1.00	0.37	0.72
45	间氨基酚	3.12	1.90	1.00	0.37	0.72

续表 1

序号	化 合 物	酸性 A	碱性 B	α	β	π^*
46	对氯酚	2.04	0.92	0.69	0.23	0.72
47	邻氯酚	2.10	0.96	0.69	0.28	0.72
48	苯胺	0.96	0.94	0.26	0.50	0.73
49	对甲苯胺	0.90	0.89	0.26	0.51	0.69
50	对氯苯胺	1.06	0.78	0.31	0.40	0.73
51	邻苯二胺	1.70	1.53	—	—	—
52	对硝基苯胺	1.80	1.26	0.48	0.47	1.45
53	间硝基苯胺	1.43	1.10	0.34	0.50	1.13
54	2,4-二硝基苯胺	1.59	1.32	—	—	—
55	对溴苯胺	1.03	0.86	0.31	0.40	0.79
56	2,5-二氯苯胺	1.12	0.73	—	—	—
57	2,6-二氯苯胺	1.07	0.68	—	—	—
58	邻氯对硝基苯胺	1.54	1.15	—	—	—
59	3,4-二氯苯胺	1.09	0.86	—	—	—

注: 1) α , β , π^* 值取自文献 [2, 3]。2) 两表中化合物的序号相同。

1. 酸性 A 和碱性 B 物理意义及其与文献值的比较

本文研究的是一类相互作用力为分子间力的弱 Lewis 酸、碱的酸、碱性。苯系物正是这样一类物质。Lewis 酸(碱)性的大小取决于其与参比碱(酸)的分子间作用力的强弱。芳烃类和氯代苯类是质子惰性物质, 其与参比物间的相互作用为偶极-偶极, 偶极-诱导偶极作用和色散力, 作用力很弱, 因而 Lewis 酸、碱性很小; 酚类、硝基苯类、苯甲醛、苯乙酮类和苯胺类物质, 由于具有能够形成氢键的功能基团, 使得其与参比物间的相互作用力由于氢键作用而大大增强, 因而显示较强的 Lewis 酸、碱性, 如苯酚类的强 Lewis 酸性, 苯胺类的强 Lewis 碱性和氨基酚、硝基酚的强 Lewis 酸性和碱性。另外, 由于本文提出的酸性、碱性是一种相对概念, 它是相对于参比物来说的, 对能够形成氢键的物质, 就是指其给出质子或接受质子的能力强于参比物, 它所表示的是不同化合物在同一有机相中的相对强度。同一化合物, 当其具有不同性质的功能基团时, 相对不同的参比物, 其既可能作为 Lewis 酸也可能作为 Lewis 碱, 这可以来解释为什么酚类具有较强的 Lewis 碱性以及苯胺类具有一定的 Lewis 酸性(见表 1)。从表 1 中找出一些典型化合物, 比较它们的酸碱性, 可得到如下的强弱顺序:

酸性: 苯酚 > 苯胺 > 苯乙酮 > 苯甲醛 > 硝基苯 > 氯苯 > 苯

碱性: 苯胺 $\approx$ 苯酚 > 苯乙酮 > 苯甲醛 $\approx$ 硝基苯 > 苯 > 氯苯

与其它方法得到的结论相比, 这样的定性规律是正确的。

酸性参数 A , 碱性参数 B 分别与溶剂化显色参数 π^* , α , β 进行多元线性回归分析得到如下方程式:

$$A = -0.21 + 0.41\pi^* + 2.75\alpha + 0.32\beta \quad (n=45, r=0.996, s=0.05) \quad (4)$$

$$B = -0.23 + 0.34\pi^* + 0.86\alpha + 1.34\beta \quad (n=49, r=0.991, s=0.06) \quad (5)$$

式中, n 为参与回归的样本数, r 为相关系数, s 为标准偏差。

该相关方程很好地表征了各种分子间力对苯系物 Lewis 酸、碱性的贡献程度, 这可以从各变量的回归系数上反映出来. 由于我们所选择的参比酸和参比碱并非绝对的 Lewis 酸和 Lewis 碱, 其同时亦具有很微弱的 Lewis 碱性和 Lewis 酸性, 而且在溶剂/水体系中有有机相中溶解的极少的水会改变有机溶剂的氢键能力, 进而改变其 Lewis 酸碱性, 因此在测定化合物的酸性时, 参比碱亦可同时作为氢键给体 (Lewis 酸) 与化合物作用, 只是这部分的贡献很小而可以忽略不计, 因而不影响酸性测定的可靠性. 在测定化合物的碱性时也存在类似的情形. 这些都在式 (4), (5) 中反映出来了.

从以上分析可以看出, 虽然该方法是在近似基础上产生的, 但其结果仍然具有相当的可靠性, 至于个别化合物的酸碱性排列次序不太相同, 也是允许的, Thomea 就曾指出不同的作者用不同方法测定的结果往往存在着差异^[8].

2. 酸碱性参数与溶剂化显色参数的比较

根据 Kamlet 等人提出并发展起来的线性溶剂化能相关理论 (LSER), 窝穴项以溶质的分子体积 V (摩尔体积 V 或范德华摩尔体积 V_1) 表征; 反映溶质溶剂分子间因偶极-偶极、偶极-诱导偶极作用放出能量的偶极/极化项, 以溶质的偶极/极化度 π^* 来表征; 以及反映溶质溶剂间因氢键作用所放出能量的氢键作用项, 以溶质的氢键给体酸度 α 和氢键受体碱度 β 表征. 即:

$$XYZ = XYZ_0 + mV/100 + s\pi^* + a\alpha + b\beta \quad (6)$$

式中, XYZ 为与溶质溶剂间相互作用有关的性质参数, XYZ_0 为常数, m, s, a, b 是用来表示各部分贡献大小的回归系数, 选择 $V/100$ 是为了使所有变量的数量级保持一致. 该方程在估算有机物的辛醇-水分配系数、溶解度等理化参数^[3,5]方面取得很大成功. 本文用此方法分析得到:

$$\begin{aligned} \lg K_{ow} &= 5.29V_1/100 - 0.73\pi^* - 3.77\beta + 0.45 \\ (n=45, r=0.985, s=0.124) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \lg S_w &= -5.85V_1/100 + 0.43\pi^* + 1.92\alpha + 3.17\beta - 0.011(\text{mp}-25) + 0.56 \\ (n=41, r=0.983, s=0.158) \end{aligned} \quad (8)$$

式中, $0.011(\text{mp}-25)$ 为 25 °C 时固体化合物相对于熔点增加的校正项.

在此用本文提出的酸碱性参数代替 Kamlet 等人提出的溶剂化显色参数进行分析, 多元统计结果如下:

$$\begin{aligned} \lg K_{ow} &= 5.06V_1/100 + 0.92A - 3.01B + 0.03 \\ (n=45, r=0.980, s=0.150) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \lg S_w &= -5.93V_1/100 + 2.19B - 0.011(\text{mp}-25) + 0.95 \\ (n=41, r=0.973, s=0.201) \end{aligned} \quad (10)$$

同上, 式中 $0.011(\text{mp}-25)$ 为校正项.

分别比较两种参数得到的结果,我们可以发现,与 Kemlet 等人提出的溶剂化显色参数相比,该酸碱参数在估算辛醇-水分配系数和水溶解度时,尽管相关性略有减小和略大的标准方差,其与这两种理化参数间仍呈现显著相关。

相对于辛醇来说,水具有强的氢键给予能力,较弱的氢键接受能力,即水的 Lewis 酸性比辛醇强,而 Lewis 碱性比辛醇弱,因而增大溶质的 Lewis 酸性或减小溶质的 Lewis 碱性,将有利于溶质进入水相之中,辛醇-水分配系数将减小,反之则增大。另外,在考虑水相中的溶解度时,水虽然也可作为 Lewis 碱,但其碱性很弱以至这种贡献很小而可以忽略不计。式 (9) 和 (10) 很好的表现出这些结论。

综上所述,我们提出的酸碱参数能够很好的代替溶剂化显色参数用于 LSER 之中,式 (9) 中偶极项的贡献很小而被忽略,对于固体溶质辛醇-水分配系数的估算有利,因为它们的偶极/极化度参数往往难以获得。根据两种参数估算的辛醇-水分配系数和水溶解度值列于表 2 中。

表 2 59 种化合物的辛醇/水分配系数,水溶解度 ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$) 和熔点值

Table 2 The logarithm of octanol-water partition coefficients and water solubility, and melt point for 59 compounds

No	$\lg K_{ow}$			$\lg S_w$			mp
	Obs.	eq (7)	eq (10)	Obs.	eq (8)	eq (10)	
1	2.84	2.75	2.80	-2.36	-2.37	-45.0	
2	2.99	2.95	3.02	-2.54	-2.55	-2.58	-30.6
3	3.38	3.38	3.41	-3.33	-3.26	-3.25	53.0
4	3.39	3.27	3.40	-3.03	-2.89	-2.92	-17.5
5	3.38	3.34	3.40	-3.03	-2.94	-2.92	-21.8
6	3.33	3.26	3.35	—	-2.86	-2.95	7.5
7	3.38	3.25	3.27	—	-2.86	-2.88	-34.0
8	3.53	3.59	3.56	-3.63	-3.67	-3.62	67.4
9	2.14	3.59	2.15	-1.64	-1.73	-1.70	5.5
10	2.69	2.77	2.71	-2.25	-2.31	-2.30	-95.0
11	3.14	3.18	3.11	-2.72	-2.76	-2.77	-27.1
12	3.20	3.21	3.15	-2.72	-2.77	-2.79	-53.6
13	3.14	3.16	3.18	-2.73	-2.75	-2.81	13.2
14	3.17	3.31	3.19	-2.80	-2.90	-2.86	-93.9
15	1.48	1.33	1.29	-1.21	-1.19	-1.11	-26.0
16	1.82	1.88	1.94	-2.10	-2.02	-2.05	47.5
17	2.56	2.47	2.32	—	—	—	—
18	1.65	1.58	1.75	-1.81	-1.98	-2.07	106.5
19	1.58	1.60	1.60	-1.34	-1.45	-1.43	19.7
20	2.19	2.07	2.00	-1.97	-1.97	-2.00	28.0
21	2.35	2.19	2.18	-2.06	-2.03	-2.03	20.0
22	0.41	—	0.48	—	—	-1.12	106.0
23	1.85	1.92	1.98	-1.81	-1.74	-1.69	5.7
24	1.46	1.75	1.66	-3.33	-3.38	-3.37	173.5
25	1.58	1.61	1.62	-2.45	-2.50	-2.47	89.6
26	1.49	1.54	1.55	-2.74	-2.66	-2.59	118.0

续表 2

No	lgK _{ow}			lgS _w			mp
	Obs.	eq (7)	eq (9)	Obs.	eq (8)	eq (10)	
27	2.94	2.99	2.89	—	-4.47	-4.38	171.5
28	2.46	2.48	2.39	-2.45	-2.56	-2.40	44.4
29	2.41	2.48	2.34	-2.85	-2.98	-2.77	83.5
30	2.18	2.29	2.41	-2.66	-2.68	-2.72	53.4
31	2.15	2.20	2.09	-2.70	-2.74	-2.68	66.0
32	2.45	2.43	2.42	-2.39	-2.58	-2.55	51.3
33	2.30	2.43	2.33	-2.32	-2.30	-2.17	-10.6
34	2.45	2.43	2.56	-2.44	-2.30	-2.32	15.5
35	1.48	1.52	1.48	-0.05	-0.21	-0.17	41.0
36	1.97	2.02	1.92	-0.64	-0.74	-0.76	30.0
37	3.06	3.00	2.95	-1.56	-1.44	-1.48	45.0
38	1.54	—	1.53	—	—	-1.01	111.6
39	0.78	—	0.74	—	—	1.28	110.0
40	0.59	—	0.48	—	—	0.72	170.5
41	0.85	—	0.78	—	—	0.79	105.0
42	1.91	1.98	1.84	—	-1.26	-1.13	114.0
43	0.04	—	0.05	—	—	0.61	122.5
44	0.62	—	0.71	-0.81	—	-0.52	170.0
45	0.17	—	0.19	—	—	-0.19	184.0
46	2.44	2.37	2.37	-0.68	-0.92	-0.99	43.0
47	2.20	2.11	2.25	-0.69	-0.53	-0.66	7.0
48	0.90	1.01	0.93	-0.41	-0.32	-0.32	-6.2
49	1.40	1.48	1.52	-1.16	-1.06	-1.23	45.0
50	1.83	1.63	1.96	-1.52	-1.37	-1.72	71.0
51	0.15	—	0.19	—	—	-0.30	102.0
52	1.39	1.48	1.45	-2.24	-1.91	-1.80	147.5
53	1.37	1.46	1.59	-2.14	-1.75	-1.76	111.8
54	1.88	—	1.76	—	—	-2.80	176.0
55	2.06	2.05	1.91	-1.74	-1.74	-1.74	66.4
56	2.55	—	2.62	—	—	—	—
57	2.64	—	2.72	—	—	—	—
58	2.04	—	1.99	—	—	—	—
59	2.69	—	2.80	-3.25	—	-2.52	71.0

参 考 文 献

- [1] 沈宏康, 1983. 有机酸碱, 高等教育出版社, 北京, P 126—191
- [2] Kamlet M J et al., 1983. Linear Solvation Energy Relationships, 23. A Comprehensive Collection of the Solvatochromic Parameters, π^* , α , and β , and Some Methods for Simplifying the Generalized Solvatochromic Equation. *J. Org. Chem.*, **48**: 2877—87
- [3] Kamlet M J et al., 1988. Linear Solvation Energy Relationships. 46. An Improved Equation for Correlation and Prediction of Organic Nonelectrolytes. *J. Phys. Chem.*, **92**: 5244—55
- [4] El Tayar N et al., 1992. Polar Intermolecular Interactions Encoded in Partition Coefficients: An Indirect Estimation of Hydrogen-Bond Parameters of Polyfunctional Solutes. *J. Phys. Chem.*, **96**: 1455—9

- [5] 汪小江等, 1992. 一种测定有机物的 Lewis 酸碱性的新方法. 科学通报, **37** (11) : 993—5
- [6] EL Tayar N et al., 1991. Partitioning of Solutes in Different Solvent Systems; The Contribution of Hydrogen-Bonding Capacity and Polarity. *J. Pharm. Sci.*, **80** : 590—8
- [7] Hondgman C D, Weast R C, Selby S M, 1959—1960. Handbook of Chemistry and Physics. Chemical Rubber Publishing. Co. 11st Edition
- [8] Thomas E R, Eckert C A., 1984. Prediction of Limiting Activity Coefficients by a Modified Separation of Cohesive Energy Density and UNIFAC. *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*, **23** : 194

1995 年 2 月 24 日收到.

A NEW QUANTIATIVE PARAMETER OF THE LEWIS ACIDITY AND BASICITY OF BENZENE AND ITS DERIVATIVES

Feng Liu Han Shuokui Wang Liansheng

(Department of Environmental and Engineering, Nanjing University, Nanjing, 210093)

Zhao Yuanhui

(Department of Environmental Sciences, North-east Normal University, Changchun, 130024)

ABSTRACT

A new approach to the quantification of the Lewis acidity and basicity of benzene and its derivatives was presented in this paper. The logarithm difference values of partition coefficients of the compounds in butyl ester/water and in cyclohexane/water system were used for the measurement of the Lewis acidity, while the logarithm difference values of partition coefficients in trichloromethane/water and tetrachloromethane/water system were used for the measurement of the lewis basicity. The physical meaning of the parameters A and B was then interpreted, which expressed the interaction magnitude of molecular force between Lewis acid and Lewis base. By means of quantitative analysis with the solvatochromic parameters π^* , α , β , it is found that there is a good correlation between them, which showed clearly the relative contribution of various molecular forces to Lewis acidity and basicity, that hydrogen bonding play a major contribution for Lewis acidity and basicity, while the inductive force is minor, and the contribution of dispersion is so small that can be neglected. Comparing with solvatochromic parameters, it is found that these parameters can be used in LSER research successfully.

Keywords: Lewis acidity, Lewis basicity, partition coefficient, solvatochromic parameter.