

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 544.3+544.18

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.008

## МАРШРУТЫ ДИССОЦИИ ТРИГИДРОКСИБЕНЗОЛОВ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И УФ-ИССЛЕДОВАНИЯ

Сергей Геннадьевич Мамылов<sup>1</sup>, Игорь Олегович Ломовский<sup>2</sup>, Олег Иванович Ломовский<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup> Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН), Кутателадзе, 18, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>1</sup>mamylov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2858-0441>

<sup>2</sup>lomovsky@solid.nsc.ru <https://orcid.org/0000-0001-8269-033X>

<sup>3</sup>lomov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7043-1357>

**Аннотация.** Интерес к поведению флавоноидов в растворе обусловлен различными причинами. Диссоциативные свойства флавоноидов, как представителей класса полифенолов, осложнены протеканием независимых процессов диссоциации гидроксильных групп в различных положениях углеродного скелета. Экспериментальные методы исследования диссоциации показывают обобщенную картину, скрывая отдельные стадии и не выявляя различных маршрутов диссоциации.

В работе рассматривается моделирование диссоциативных свойств флавоноидов редуцированными аналогами – трехатомными фенолами (тригидроксибензолами, трифенолами). Выбор обусловлен тем, что, только начиная с трифенолов в ряду многоатомных фенолов в молекуле интересующих соединений появляется структурная изомерия. При введении в раствор щелочей, происходит образование анионов с отличающимися константами диссоциации. Изменяются и такие характеристики, как спектры поглощения (УФ-спектры). Набор продуктов диссоциации свидетельствует о существовании различных маршрутов диссоциации с проявлением усредненных констант диссоциации

Квантово-химическое моделирование проводилось в программном комплексе Гауссиан-09, V3LYP/6-311+G\*\*, TDDFT, влияние среды растворителя – модель РСМ. УФ-спектроскопическое исследование проводилось на спектрофотометре СФ-200, диапазон длин волн 190-600 нм, кварцевая кювета 10 мм. Рабочая концентрация трифенола  $C = 5 \cdot 10^{-5}$  М. Исследование основано на оригинальном программном обеспечении: описание экспериментальных УФ-спектров модельными проводилась по методу МНК.

Результаты исследования для флороглюцина показывают соответствие этапов образования анионов и последовательности реакций ионизации флороглюцина; наблюдаемые стадии диссоциации пирогаллола и гидроксигидрохинона описывают совокупность внутренних процессов ионизации и взаимопревращения различных анионных форм названных трифенолов.

Показана множественность маршрутов диссоциации трифенолов, приведены оценки их влияния.

**Ключевые слова:** тригидроксибензолы (трифенолы), квантово-химическое моделирование спектров поглощения, маршруты диссоциации.

**Благодарности:** работа выполнена в рамках ГосЗадания ИХТТМ СО РАН, проект No. 126021217270-5. Работа выполнена с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН.

---

**Для цитирования:** Мамылов С.Г., Ломовский И.О., Ломовский О.И. Маршруты диссоциации тригидроксибензолов: Квантово-химическое и УФ-исследования // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 2. С. 219-225. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.008.

---

Original article

**DISSOCIATION ROUTES OF TRIHYDROXYBENZENES:  
QUANTUM CHEMICAL AND UV RESEARCHES****Sergey G. Mamylov<sup>1</sup>, Igor O. Lomovsky<sup>2</sup>, Oleg I. Lomovsky<sup>3</sup>**<sup>1,2,3</sup> Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Kutateladze Str., 18, Novosibirsk, 630128, Russia<sup>1</sup>mamylov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2858-0441><sup>2</sup>lomovsky@solid.nsc.ru <https://orcid.org/0000-0001-8269-033X><sup>3</sup>lomov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7043-1357>

**Abstract.** The interest in the behavior of flavonoids in solution is due to various reasons. The dissociative properties of flavonoids, as representatives of the polyphenol class, are complicated by the occurrence of independent dissociation processes of hydroxyl groups in various positions of the carbon skeleton. Experimental methods of dissociation research show a generalized picture, hiding individual stages and not revealing different dissociation routes. The paper considers the modeling of dissociative properties of flavonoids by reduced analogues – triatomic phenols (trihydroxybenzenes, triphenols). The choice is due to the fact that it is only starting from triphenols in the series of polyatomic phenols that a structural isomerism appears in the molecule of the compounds of interest. When alkalis are introduced into the solution, anions with different dissociation constants are formed. Characteristics such as absorption spectra (UV spectra) are also changing. The set of dissociation products indicates the existence of various dissociation routes with the manifestation of averaged dissociation constants. Quantum chemical modeling was carried out in the Gaussian-09 software package, B3LYP/6-311+G\*\*, TDDFT, influence of the solvent medium – PCM model. UV spectroscopic examination was performed on an SF-200 spectrophotometer, wavelength range 190-600 nm, quartz cuvette 10 mm. The working concentration of triphenol C = 5\*10<sup>-5</sup> M. The study is based on the original software: the description of experimental UV spectra with model ones was carried out using the LSM method. The results of the study for phloroglucin show the correspondence of the stages of anion formation and the sequence of ionization reactions of phloroglucin; the observed stages of dissociation of pyrogallol and hydroxyhydroquinone describe a set of internal processes of ionization and interconversion of various anionic forms of the named triphenols. It was shown the multiplicity of triphenol dissociation routes.

**Keywords:** trihydroxybenzenes (triphenols), quantum chemical modeling of absorption spectra, dissociation routes.

**Acknowledgements:** The work was supported by Project of ISSCM SB RAS No. 126021217270-5.

This study was conducted using the resources of the General-Purpose Computing Center “Siberian Supercomputer Center,” Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SB RAS.

**For citation:** Mamylov S.G., Lomovsky I.O., Lomovsky O.I. (2026). Dissociation routes of trihydroxybenzenes: quantum chemical and UV researches. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(2), 219-225. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.008.

**Введение**

Одним из способов увеличения растворимости и биологической активности флавоноидов является твердофазное механохимическое активирование с твердыми щелочами. Некоторые свойства флавоноидов ярче проявляются в жидкой среде, в водных растворах. Флавоноид выступает в роли слабой многоосновной кислоты [1]. Диссоциативные свойства характеризуются константами диссоциации. Для многоосновных кислот рассматривается ступенчатая последовательная диссоциация, когда последующая группа диссоциирует после предыдущей. Флавоноиды имеют несколько гидрок-

сильных групп, которые могут характеризоваться близкими значениями констант диссоциации [2]. Возникает вопрос, какая из этих групп, или их комбинация, описывает определенный этап диссоциации.

Поведение флавоноида в растворе удобно моделировать его редуцированным аналогом, сохраняющим его диссоциативные свойства. Такими аналогами могут выступать многоатомные фенолы. В ряду многоатомных фенолов структурная формула объекта представлена одним бензольным кольцом с расположенными на нем гидроксильными группами. Ни начальный член ряда фенол (одна гидроксильная группа), ни дифенольные соединения (с двумя

гидроксильными группами) не обладают структурной изомерией. Только начиная с трифенолов (тригидроксибензолов, трехатомных фенолов) возможно образование структурных изомеров. В этом случае, диссоциирующие гидроксильные группы образуют различающиеся последовательности образования анионов (маршруты диссоциации), с различающимися константами на каждой стадии. Стоит учитывать, что даже для сравнительно небольшого числа диссоциирующих групп следует ожидать заметного числа анионных форм фенольного соединения. В последующих химических реакциях различные формы могут приводить к продуктам различного химического строения.

Зная тип аниона и его количество в равновесном растворе, можно установить маршруты диссоциации трифенолов. Такое исследование возможно при идентификации анионов физико-химическим методом, чувствительным к изменению структурной формулы, например, применением УФ-спектроскопии. Сложность такого подхода заключается в том, что нередко для целевых соединений (флавоноидов, трифенолов) неизвестны УФ-спектры индивидуальных анионных форм.

Цель настоящей работы – исследование потенциальных маршрутов реакции диссоциации тригидроксибензолов с привлечением анализа кислотно-основного равновесия в растворе, квантово-химического моделирования и УФ-спектроскопии различных ионных форм исследуемых соединений.

### Методология

Квантово-химическое моделирование спектров проводилось в программном комплексе Гауссиан-09[3], B3LYP/6-311+G\*\*, TDDFT, влияние среды растворителя – модель PCM.

УФ-спектроскопическое исследование проводилось на спектрофотометре СФ-200, в диапазоне длин волн 190-600 нм, кварцевая кювета 10 мм. Все растворы готовились с применением обезгаженной воды (продувка азотом), рабочие растворы получались разбавлением приготовленного из навески исходного раствора трифенола  $C=1.0 \cdot 10^{-3}$  М и титрованного раствора щелочи  $C=2.5 \cdot 10^{-2}$  М. Объем аликвоты трифенола составлял 250 мкл, объем добавляемой щелочи составлял 0, 10, 20, 30 мкл. Общий объем доводился до 5 мл.

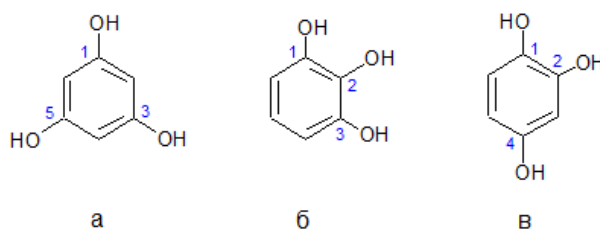
Рабочая концентрация трифенола  $C = 5 \cdot 10^{-5}$  М. По обозначенной схеме на моль трифенола

приходилось 0 (молекулярная форма), 1, 2, 3 моля щелочи (анионные формы).

Исследование основано на оригинальном программном обеспечении. Обработка экспериментальных и полученных с помощью квантово-химического моделирования УФ-спектров проводилась по методу МНК.

### Результаты и обсуждение

Объекты исследования тригидроксибензолы (трифенолы) флороглюцин, пирогаллол, гидроксигидрохинон с одинаковой брутто-формулой  $C_6H_3(OH)_3$  (рис.1).



**Рис.1** Структурные формулы трифенолов флороглюцина (а), пирогаллола (б), гидроксигидрохинона (в).

**Fig.1** Triphenols structural formula: phloroglucinol (a), pyrogallol (б), hydroxyhydroquinone (в).

Структурная изомерия функциональных групп в анионах трифенолов проявляется как варьирование положения аниона гидроксильной группы  $-O^-$  на углеродном скелете бензольного кольца.

Введем условные обозначения различных производных трифенолов:

- fl, pg, hh – молекулярные формы флороглюцина, пирогаллола, гидроксигидрохинона;
- fla1, fla2, fla3 и др. – одно-, двух-, трехзарядные анионы без указания местоположения диссоциированной гидроксильной группы;
- fl1a1, fl3a1, fl5a1 - диссоциирующая гидроксильная группа находится на 1, 3, 5 атомах углерода бензольного кольца структурной формулы соединения, для флороглюцина все эти положения равноценны, возможен 1 вариант; fl1a1 - однозарядный анион; соответственно, fl13a2 – двухзарядные (1 вариант); fl135a3 – трехзарядные (1 вариант) анионы;

- для однозарядных анионов пирогаллола возможны 2 варианта (pg1a1, pg2a1), двухзарядные pg12a2, 13a2 (2 варианта) и трехзарядный pg123a3 (1 вариант);
- в случае гидроксигидрохинона возможны три варианта однозарядных ионов (hh1a1, hh2a1, hh4a1), три варианта двухзарядных (hh12a2, hh14a2, hh24a2) и один вариант трехзарядный (hh124a3).

Последовательная диссоциация флороглюцина с константами диссоциации  $K$  запишется:

$$f1 \frac{K_1}{-H^+} > f1a1 \frac{K_2}{-H^+} > f1a2 \frac{K_3}{-H^+} > f1a3$$

Ввиду отсутствия структурных изомеров, для флороглюцина можно записать единственный маршрут диссоциации:

$$f1 \frac{K_1^1}{-H^+} > f11a1 \frac{K_2^3}{-H^+} > f113a2 \frac{K_3^5}{-H^+} > f1135a3 \quad (1)$$

Здесь верхний индекс константы диссоциации указывает на положение диссоциирующей гидроксильной группы на углеродном скелете (рис. 1а).

Для расчета УФ-спектра по закону Бугера-Ламберта-Бэра необходимо знать количество возможных форм - молекулярной и всех анионных. Равновесное содержание форм в растворе находится решением системы нелинейных уравнений, связывающей концентрации, константы диссоциации, материальный баланс по компонентам и принцип электронейтральности. Решение аналогичной системы для трехосновной слабой кислоты приведено в [4].

Для трифенолов в литературе нет устоявшихся полных наборов констант диссоциации  $pK_1$ - $pK_3$ , осложняющим фактором может быть заметное окисление анионных форм и т.д. [например, 5]. Учитывая это, по методике [4] были определены константы диссоциации для флороглюцина:  $pK_1=9.79$ ,  $pK_2=11.21$ . Значения констант диссоциации тригидроксibenзолов взяты из [6-7]: пирогаллол,  $pK_1=9.05$ ,  $pK_2=11.19$ ; гидроксигидрохинон,  $pK_1=9.08$ ,  $pK_2=11.82$ .

Литературных данных о величине  $pK_3$  в рассматриваемых условиях обнаружить не удалось. Предполагаемое высокое значение величины  $pK_3$  делает невозможным ее определение в водной среде. Для принципиальной оценки влияния третьей степени диссоциации были выбраны правдоподобные величины  $pK_3$ , на две единицы больше, чем величина  $pK_2$ .

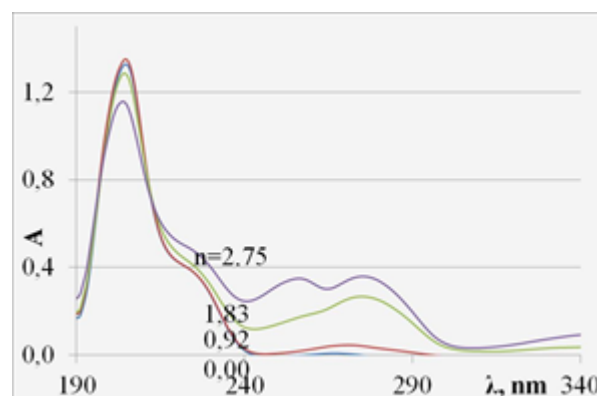
Расчет относительного мольного содержания молекулярной (a0) и анионных (a1-a3) форм флороглюцина приведен в табл.1. Следует отметить, что эти содержания примерно одинаковы для всех трифенолов в связи с близостью значений их констант диссоциации. Также, для всех трифенолов величина a3 пренебрежимо мала.

**Табл.1** Расчетные значения мольных долей молекулярной и анионных форм флороглюцина, n-число молей щелочи на моль трифенола.

**Table 1** Calculated values of the mole fractions of molecular (a0) and anionic forms (a1-a3) of phloroglucinol, n is the number of moles of alkali per mole of triphenol.

система\ анион	a0	a1	a2	a3
n=0	0,999	0,001	0,000	0,000
n=1	0,660	0,333	0,007	0,000
n=2	0,460	0,518	0,022	0,000
n=3	0,340	0,617	0,043	0,000

На рис.2 приведены экспериментальные спектры поглощения флороглюцина при добавлении различного количества щелочи на моль трифенола (n). Аналогичные изменения спектров поглощения при добавлении щелочи отмечаются и для других членов ряда - пирогаллола и гидроксигидрохинона.



**Рис.2** Спектры поглощения растворов при добавлении щелочи к флороглюцину, моль/моль.

**Fig.2** Absorbance spectra of solutions under adding of alkaline to phloroglucinol, mol/mol.

В процедуре обработки спектров на каждой длине волны по закону Бугера-Ламберта-Бэра рассчитывалась оптическая плотность моделируемого спектра. Коэффициенты молярного по-

глощения были взяты из спектров отдельных анионных форм, полученных в квантово-химическом моделировании, концентрации каждой анионной формы определялись их мольным содержанием. Параметр минимизации  $S$  в методе МНК находился как сумма квадратов отклонений (невязка) между значениями оптической плотности экспериментального и моделируемого спектров. Проводился синтез спектров поглощения из пар спектров анионов (например,  $pg1a1$  и  $pg2a1$ ) с оценкой их вклада в виде молярной доли одно-, двух- и трехзарядных анионов.

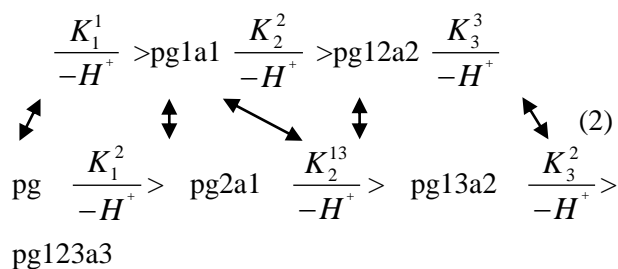
В отличие от флороглюцина с единственным маршрутом диссоциации, пирогаллол при диссоциации демонстрирует несколько вариантов. В случае диссоциации без добавления щелочи  $n=0,00$  содержание молекулярной формы подавляющее, варьирование анионных форм не влияет на параметр  $S$ .

При введении в систему одного моля щелочи  $n=0,98$ , выбор единственного маршрута диссоциации затруднен в связи с близостью полученных значений МНК:  $S(pg1a1)=0,85$ , для второго положения  $S(pg2a1)=0,90$ ,  $\Delta S=0,05$ . Оценки позволяют считать значимыми модели при  $\Delta S > 0,02$ .

Для решения вопроса выбора маршрута рассматривается параллельная диссоциация по нескольким маршрутам. Минимальное значение параметра  $S$  наблюдается при рассмотрении ситуации с параллельной диссоциацией  $S(pg1a1+pg2a1)=0,83$ . При этом доли образующихся иона  $a(pg1a1)=0,69$ ,  $a(pg2a1)=0,31$  от общего числа однозарядных ионов. Содержанием двухзарядных анионов можно пренебречь (аналогично табл.1).

При росте параметра до  $n=1,96$  становится заметным содержание двухзарядных анионов. Предпочтительной является первичная диссоциация в  $pg2a1$ ,  $\Delta S=0,10$ . В дальнейшем, происходит образование аниона с двумя диссоциировавшими крайними группами (положения 1 и 3 рис.1б). При росте объема добавляемой щелочи до значения  $n=2,94$  вышеприведенная ситуация проявляется еще более отчетливо,  $\Delta S=0,08$ . Для перехода  $pg2a1$  в анион  $pg13a2$ , можно сделать вывод о внутреннем равновесии однозарядного иона  $pg2a1$  с формой  $pg1a1$ .

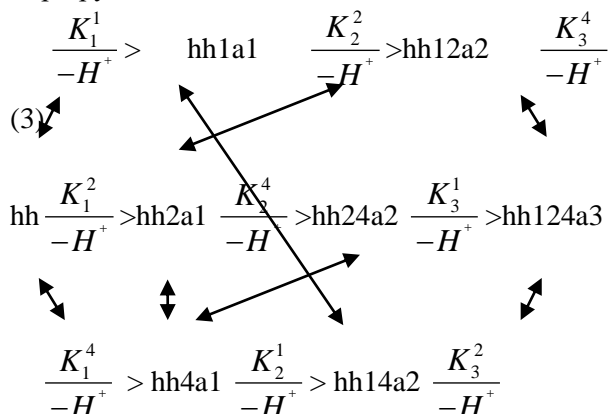
Для пирогаллола можно записать маршруты диссоциации:



Здесь  $K_2^{13}$  обозначена сложная константа диссоциации по второй ступени с перегруппировкой анионного заряда. Предпочтительная схема выглядит как  $pg \rightarrow pg2a1 \rightarrow pg13a2 \rightarrow pg123a3$ .

В растворе гидроксигидрохинона без добавления щелочи спектр поглощения описывается спектром молекулярной формы с  $S=0,84$ . Диссоциация гидроксигидрохинона сопровождается образованием большего числа анионных форм на каждом этапе добавления щелочи. Для  $n=0,93$  лучший вариант описания экспериментального спектра подразумевает наличие молекулярной формы и появление аниона  $hh4a1$ , при этом  $S=0,91$ , либо равную смесь  $hh2a1+hh4a1$   $S=0,92$ . Можно сделать вывод о доминирующей диссоциации с образованием  $hh4a1$ . Влияние двухзарядных анионных форм на общий спектр мало. При дальнейшем увеличении добавленной щелочи  $n=1,87$  также наблюдаются однозарядные анионы  $hh2a1$ ,  $hh4a1$  (в соотношении 3:7) и появляются двухвалентные  $hh14a2$ . Дальнейший рост  $n=2,80$  не изменяет общей картины: присутствуют молекулярная форма  $hh$ , однозарядные анионы  $hh2a1$ ,  $hh4a1$  (в примерно таком же соотношении, см. выше) и двухзарядный  $hh14a2$ ,  $S=2,22$ . Интересно отметить, что диссоциация на первой стадии не приводит к появлению анионной формы  $hh1a1$ , тогда как вторичная диссоциация не генерирует двухзарядного аниона из взаимно-предпочтительных положений первичной диссоциации.

Для гидроксигидрохинона можно записать маршруты диссоциации:



Получившаяся схема сложнее таковой для пирогаллола. Предпочтительным является нижний по схеме маршрут  $\text{hh} \rightarrow \text{hh4a1} \rightarrow \text{hh14a2} \rightarrow \text{hh124a3}$ . Возможно, образующийся  $\text{hh2a1}$  трансформируется в  $\text{hh4a1}$ .

Вопросы соотношения частных (локальных) констант с результирующей константой для каждой ступени диссоциации заслуживают отдельного внимания. В [8] эти константы упоминаются как «микроскопические». В источнике отмечается, что для тщательного рассмотрения системы с микроскопическими константами ионизации применимы спектральные методы.

Рассмотренный комплексный подход диссоциации трифенолов позволяет рассчитывать, обнаруживать и оценивать количественно структурные изомерные формы как продукты диссоциации. На этой основе предлагаются предпочтительные маршруты диссоциации трифенолов.

### Выводы

- Тригидроксibenзола (трифенолы) первыми в ряду многоатомных гидроксibenзолов (фенолов) могут обладать структурной изомерией анионов;
- Приведено квантово-химическое моделирование УФ-спектров возможных анионов трифенолов;
- Решением систем кислотно-основного равновесия с известными константами диссоциации рассчитаны концентрации и доли анионных форм в растворах трифенолов при добавлении определенных количеств щелочи;
- Получены экспериментальные УФ-спектры растворов трифенолов с известными количествами добавляемой щелочи;

- Программным способом определен вклад каждой анионной формы всех трифенолов в экспериментальные УФ-спектры;

- Рассмотрены возможные маршруты диссоциации трифенолов. Предложены маршруты, описывающие наблюдаемые экспериментальные УФ-спектры:

- флороглоцин, не имеющий структурных изомеров, диссоциирует единственным образом  $\text{fl} \rightarrow \text{fl1a1} \rightarrow \text{fl13a2} \rightarrow \text{fl135a3}$ ;
- предпочтительные маршруты диссоциации пирогаллола  $\text{pg} \rightarrow \text{pg2a1} \rightarrow \text{pg13a2} \rightarrow \text{pg123a3}$ ;
- для гидроксигидрохинона  $\text{hh} \rightarrow \text{hh4a1} \rightarrow \text{hh14a2} \rightarrow \text{hh124a3}$ .

### Список литературы

1. Георгиевский В. П., Рыбаченко А. И., Казаков А. Л., Физико-химические и аналитические характеристики флавоноидных соединений Ростов: Изд-во РГУ. 1988. 144 с.
2. Танганов Б.Б. Взаимодействия в растворах электролитов: моделирование сольватационных процессов, равновесий в растворах полиэлектролитов и математическое прогнозирование свойств химических систем М.: Академия Естествознания, 2009, 141 с. 14.
3. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
4. Мамылов С.Г., Ломовский И.О., Ломовский О.И. Константы диссоциации кверцетина. Кривые титрования // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2024. Т.21. №1. С.44–49. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.005.
5. Зенкевич И. Г., Гущина С. В. О причинах и устранении невоспроизводимости констант диссоциации кверцетина // *Успехи современного естествознания*. 2009. № 9. С. 10–14.
6. Pyrogallol [Электронный ресурс] / Официальный сайт <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1057#section=Dissociation-Constants> Дата обращения 31.07.2024
7. Hydroxyhydroquinone [Электронный ресурс] / Официальный сайт <https://pubchem>.

ncbi.nlm.nih.gov/compound/10787#section=Experimental-Properties Дата обращения 31.07.2024

8. Лайтинен Г.А., Харрис В.Е. Химический анализ. М.: Химия. 1979. 624 с.

### **Информация об авторах**

*С.Г. Мамылов — кандидат химических наук, научный сотрудник ИХТТМ СОРАН*

*И.О. Ломовский — кандидат химических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией ИХТТМ СОРАН,*

*О.И. Ломовский — доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник ИХТТМ СОРАН*

### **References**

1. Georgievsky V.P., Rybachenko A.I., Kazakov A.L. Fiziko-khimicheskie i analiticheskie kharakteristiki flavonoidnykh soedineniy Rostov: Izd.RGU. 1988. 144p.

2. Tanganov B.B. Vzaimodeystviya v rastvorakh elektrolytov: modelirovanie solvatatsionnykh processov... М.: Akademiya Estastvoznaniya, 2009, 141 p..

3. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

4. Mamylov, S. G., Lomovsky, I. O. & Lomovsky, O. I. (2024). Dissociation constants of

quercetin. Titration curves. // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 21(1), 44–49. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.005.

5. Zenkevich I.G., Gushchina S.V. On the reasons and removal of irreproducibility of dissociation constants of quercetin // Uspehi sovremennogo estestvoznania. 2009. N9. P.10-14

6. Pyrogallol / Official site <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1057#section=Dissociation-Constants> date 31.07.2024

7. Hydroxyhydroquinone / Official site [https://pubchem.](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/10787#section=Experimental-Properties)

[ncbi.nlm.nih.gov/compound/10787#section=Experimental-Properties](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/10787#section=Experimental-Properties) date 31.07.2024

8. Laitinen H.A., Harris W.E.. Khimicheskiy analiz. М.: Khimiya. 1979. 624 p.

### **Information about the authors**

*S.G. Mamylov - Candidate of Chemical Sciences, Researcher, ISSCM SB RAS*

*I.O. Lomovsky - Candidate of Chemical Sciences, Senior Researcher, Head of Laboratory, ISSCM SB RAS*

*O.I. Lomovsky - Doctor of Chemical Sciences, Professor, Chief Researcher, ISSCM SB RAS.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 05.03.2026; одобрена после рецензирования 25.05.2026; принята к публикации 01.06.2026.

The article was received by the editorial board on 05 Mar. 2026; approved after reviewing 25 May 2026; accepted for publication 01 Jun. 2026.