

УДК 543.432: 543.645.6

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СПОСОБА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЕНОЛОВ ПО ЦВЕТНЫМ РЕАКЦИЯМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЦИФРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

**О.Б. Рудаков¹, Л.В. Рудакова², И.Г. Кудухова¹, П.А. Головинский¹,
Е.А. Хорохордина¹, Е.Н. Грошев³**

¹Кафедра физики и химии.

Воронежский государственный архитектурно-строительный университет.
Ул. 20-летия Октября, 86. г. Воронеж, 394006. Россия
robi57@mail.ru

²Кафедра фармацевтической химии и фармацевтической технологии.

Воронежская государственная медицинская академия.
Ул. Студенческая, 10. г. Воронеж, 394000. Россия
vodoley65@mail.ru

³Кафедра химии и процессов горения.

Воронежский институт государственной противопожарной службы МЧС
Ул. Краснознаменная, 231. г. Воронеж, 394052. Россия
chemistry@vgasu.vrn.ru

Поступила в редакцию 5 сентября 2012 г.

Предложен способ цветометрического определения фенолов с применением цифрового фотоаппарата, регистрирующего аналитический сигнал в виде электронного изображения. В качестве интегрального показателя использованы геометрические параметры диаграмм, построенных в полярных координатах, на которых отложены результаты измерений величин интенсивности цветовых компонент в цветовой модели RGB, полученных после параллельного проведения двух цветных реакций.

Ключевые слова: цифровая цветометрия, цветные реакции, фенолы, интегральный показатель.

Рудаков Олег Борисович – доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой физики и химии Воронежского государственного архитектурно-строительного университета.

Область научных интересов: аналитическая химия органических соединений, хроматографические и оптические методы анализа.

Автор 250 публикаций.

Рудакова Людмила Васильевна – кандидат химических наук, доцент кафедры фармацевтической химии и фармацевтической технологии Воронежской государственной медицинской академии.

Область научных интересов: аналитическая химия биологически активных веществ, оптические и хроматографические методы анализа.

Автор 100 публикаций.

Кудухова Инга Гайозовна – аспирант третьего года обучения кафедры физики и химии Воронежского государственного архитектурно-строительного университета.

Область научных интересов: анализ фармацевтических препаратов и пищевых продуктов с применением мультисенсорных систем.

Автор 15 публикаций.

Головинский Павел Абрамович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики и химии Воронежского государственного архитектурно-строительного университета.

Область научных интересов: теоретическая физика, материаловедение, теория сложных систем, искусственные нейронные сети.

Автор 200 публикаций.

Хорохордина Елена Алексеевна – кандидат химических наук, доцент кафедры физики и химии Воронежского государственного архитектурно-строительного университета.

Область научных интересов: аналитическая химия и жидкостная экстракция фенольных соединений, экология.

Автор 25 публикаций.

Грошев Евгений Николаевич – начальник учебной пожарной части Воронежского института государственной противопожарной службы МЧС.

Научные интересы: противопожарная и экологическая безопасность в строительстве.

Автор 10 публикаций.

Количественная оценка экологической безопасности органических материалов, используемых в промышленном и гражданском строительстве, в мебельной, текстильной, фармацевтической, пищевой и других отраслях промышленности является одной из актуальных задач. В указанных областях применения фенолы и их производные используются как мономеры, антисептики, стабилизаторы и антиоксиданты. Наиболее селективным методом контроля фенолов является ВЭЖХ, для экспрессного контроля применяют ТСХ [1-3]. В ряде случаев, когда не требуется селективного покомпонентного определения, суммарное содержание фенолов (фенольный индекс) контролируют спектрофотометрическим методом [1, 2]. В настоящее время все более широкое применение в контроле качества продукции, обладающей определенной цветностью или меняющей цвет в зависимости от качества или сроков хранения (эксплуатации), находит альтернативный спектрофотометрическому цветометрический метод, в котором аналитическим сигналом служит электронное изображение, полученное с использованием цифрового устройства (фотоаппарат, сканер и др.) [4-14]. Теоретическое обоснование и методология применения цифровых технологий в цветометрических измерениях представлены в [7, 8, 12-14]. Для компьютерной обработки электронного изображения применяют разные цветовые модели, но чаще всего – трехкомпонентную модель *RGB*. Система *RGB* является аддитивной, цвета представляются сложением основных цветов с чёрным цветом (0, 0, 0). Базисный белый цвет оценивается как $F_W = (255, 255, 255)$, модельный красный цвет – $F_R = (255, 0, 0)$, зелёный – $F_G = (0, 255, 0)$, синий – $F_B = (0, 0, 255)$, жёлтый – $F_Y = (255, 255, 0)$. Электронные изображения обрабатывают с помощью графических редакторов (Adobe Photoshop, Photo-paint и др.), компьютерных денситометров (входят в состав программного обеспечения специализированных приборов), «колорпикеров» (средства определения цветовых параметров пикселя) и универсальных математических пакетов, обладающих возможностью работы с цифровым изображением (MatLab, MathCAD).

Известен ряд цветных реакций для качественного и количественного определения фенолов,

которые применяют в аналитической практике и в диагностике материалов [3]. Цифровые технологии дают дополнительные возможности в эффективном применении цветных реакций в аналитической химии, в том числе для определения фенолов в водных растворах.

Целью данной работы является разработка способа определения содержания индивидуальных фенолов или суммарного содержания их смеси в водных растворах на основе анализа оцифрованных изображений растворов после проведения 2 цветных реакций.

Экспериментальная часть

В качестве хромогенных реакций использовали реакцию азосочетания фенолов с хромогенным агентом, полученным диазотированием *пара*-нитроанилина (реакция 1), и реакцию с $FeCl_3$ (реакция 2) [2]. Для регистрации видеосигнала использовали цифровую фотокамеру (ЦФК) Nikon D3000, установленную в специальном боксе, позволяющем стандартизировать условия освещения [6]. Кювету, заполненную исследуемым раствором, помещали в бокс и регистрировали изображение. Для уменьшения нежелательных засветок внутренняя поверхность бокса имела матовую черную окраску. Для освещения бокса использовали 2 галогеновые лампы общей мощностью 80 Вт. Условия съемки: формат сохранения графической информации – JPEG, размер изображения – 1 мегапиксель, вспышка – отключена, светочувствительность – 100 ISO или «Авто», параметры баланса белого – «Лампа накаливания».

Объектами исследования выбрали фенол, *орто*-, *мета*-, *пара*-крезолы, *орто*-, *мета*-, *пара*-дигидроксибензолы и *орто*-*трет*-бутилфенол (х.ч., Мерк). Для компьютерной обработки цифрового изображения применили графический редактор Adobe Photoshop (версия CS3). Обобщенные цветометрические данные представили в виде лепестковых диаграмм с 6 осями в полярных координатах (ЛД), отражающими значения интенсивности (F_i) цветовых координат в модели *RGB* в одинаковой последовательности $R_1, G_1, B_1, R_2, G_2, B_2$, где индекс 1 и 2 относятся к одной из цветных реакций. ЛД строили в оболочке электронных таблиц Micro-

soft Excel (или в оболочке MathCAD, в которой реализованы алгоритмы расчета геометрических размеров ЛД). Фрактальность ЛД рассчитывали в программе Fractal 2.

Результаты и их обсуждение

В качестве рабочей гипотезы исследования исходили из того, что соотношение интенсивностей цветных компонент может существенно отличаться при проведении одной и той же цветной реакции, но с разными по строению фенолами. Вторая цветная реакция даст дополнительный набор отличающихся между собой цветометрических данных, что может позволить в совокупности получить значимые для идентификации различия в наборе параметров, обобщенных в виде ЛД. Такой подход реализован в технокимическом контроле и идентификации жиров [7], где ЛД использовали в качестве интегрального показателя и контрольных карт, фиксирующих хроматографические и другие данные об анализируемом образце. Ожидалось также, что геометрические параметры ЛД будут закономерно изменяться не только в зависимости от строения фенола, но и от его концентрации.

В табл. 1 приведены величины $F(R, G, B)$, полученные для двух цветных реакций 8 фенолов, взятых приблизительно при одинаковых концентра-

циях, выраженных в г/л. Размерности концентраций «масса/объем» приняты для экотоксикантов в СанПиН 2.1.4.1074-01. «Питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. Контроль качества», а так же для компонентов растворов лекарственных средств в фармакопейных статьях.

В табл. 2 даны результаты расчетов геометрических параметров ЛД. На рис. 1 построены ЛД по данным табл. 1. Как видно из рис. 1, ЛД образуют индивидуальный профиль («визуальный отпечаток»), характерный для каждого фенола, который количественно можно охарактеризовать геометрическими параметрами ЛД – площадью (S), периметром (P), соотношением корня квадратного из площади к периметру [$(\sqrt{S}) / P$], фрактальностью (D) и коэффициентом близости векторных массивов ϵ [15].

Площадь и периметр ЛД в случае одинаковой концентрации можно рассматривать как фактор, учитывающий реакционную способность и структуру соединения. Чем меньше эти параметры, тем темнее полученная окраска раствора, тем количественнее прошла цветная реакция, или сильнее хромофорный эффект, который будет зависеть от баланса мезомерного и индуктивного эффектов в окрашенном комплексе. Так, если у дигидроксiben-

Таблица 1

Значения $F(R, G, B)$ для цветной реакции 1 и 2

Соединение	C , г/л	R_1	G_1	B_1	R_2	G_2	B_2
Фенол	0.186	164	142	36	158	131	45
<i>орто</i> -Крезол	0.171	174	118	22	184	158	65
<i>мета</i> -Крезол	0.160	141	62	10	184	175	128
<i>пара</i> -Крезол	0.148	110	97	26	184	175	137
<i>орто</i> -Дигироксибензол	0.168	164	85	0	143	146	71
<i>мета</i> -Дигироксибензол	0.166	136	101	5	114	101	45
<i>пара</i> -Дигироксибензол	0.183	123	113	61	130	113	50
<i>орто-трет</i> -Бутилфенол	0.161	164	151	98	159	176	166

Таблица 2

Геометрические параметры цветометрической ЛД для разных фенолов

Соединение	H	C_M ммоль/л	S	P	$(\sqrt{S}) / P$	D	ϵ
<i>мета</i> -Дигироксибензол	0.80	1.51	19050	623	0.222	1.67	0.260
<i>пара</i> -Дигироксибензол	0.56	1.67	27250	657	0.251	1.78	0.215
<i>орто</i> -Дигироксибензол	0.91	1.59	27940	740	0.226	1.81	0.248
Фенол	1.64	1.98	36270	813	0.234	1.82	0
<i>мета</i> -Крезол	2.00	1.48	32370	775	0.232	1.66	0.430
<i>пара</i> -Крезол	2.13	1.37	33010	778	0.234	1.27	0.302
<i>орто</i> -Крезол	2.13	1.58	39820	866	0.230	1.41	0.170
<i>орто-трет</i> -Бутилфенол	3.35	1.07	53260	894	0.258	1.66	0.472

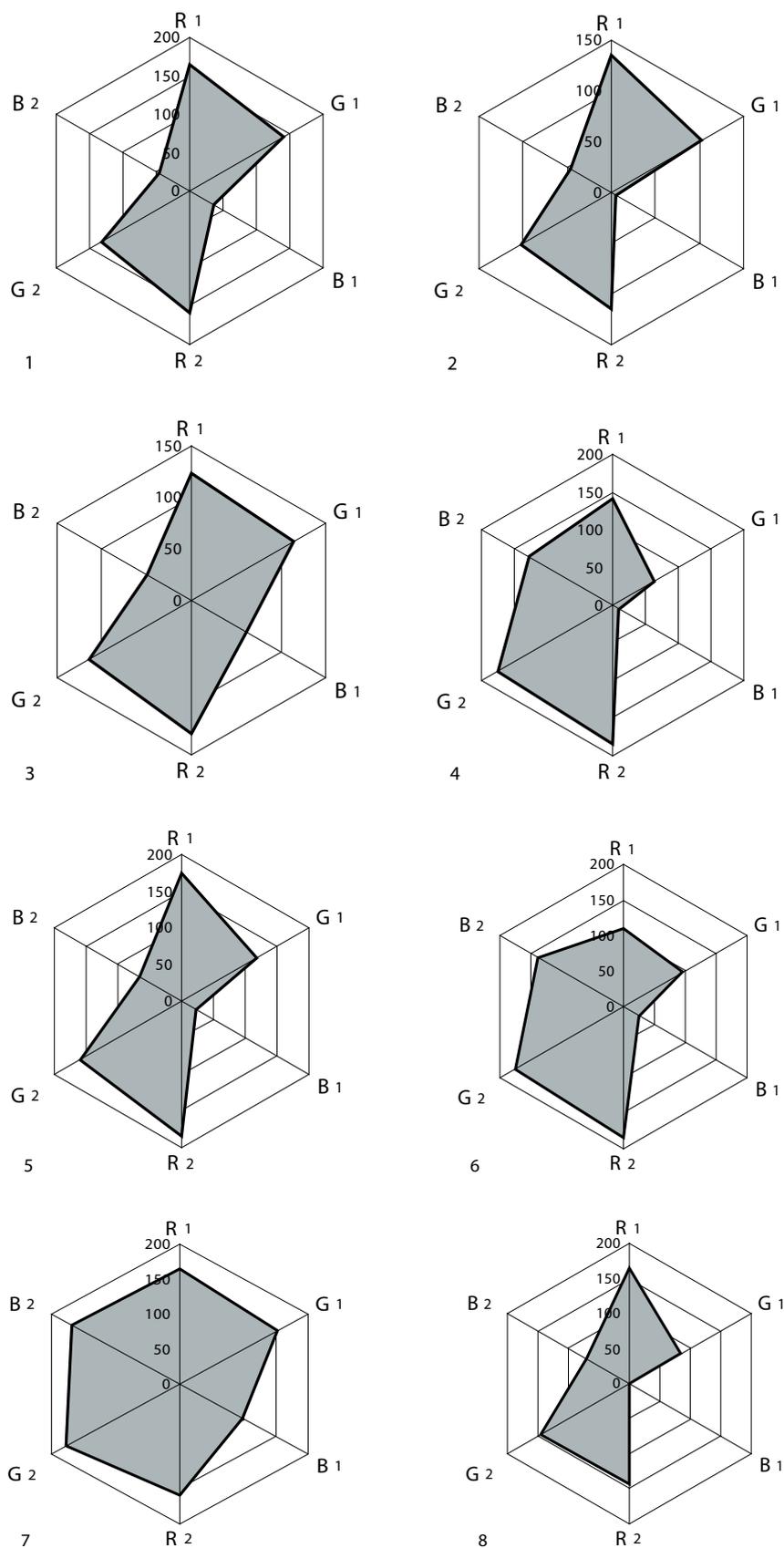


Рис. 1. ЛД различных фенольных соединений: 1 – фенол, 2 – *мета*-дигидроксибензол, 3 – *пара*-дигидроксибензол, 4 – *мета*-крезол, 5 – *орто*-крезол, 6 – *пара*-крезол, 7 – *орто-трет*-бутилфенол, 8 – *орто*-дигидроксибензол; $1.5 \leq C \leq 1.9$ г/л

золов две группы -ОН, они обе будут реагировать с хромогенным реагентом. Алкильные заместители, особенно с разветвленным углеродным скелетом, в орто-положении могут стерически затруднять цветную реакцию, даже группа -ОН в орто-положении, образуя водородную связь с соседней группой -ОН, может препятствовать целевой реакции. Величины $(\sqrt{S})/P$, D и коэффициента ε в меньшей степени должны зависеть от концентрации аналита и в большей степени характеризовать индивидуальность профиля фигуры [15-17] (табл. 2). Для лучшего понимания взаимосвязи интенсивности цветной реакции и структуры фенола, концентрации в табл. 2 приведены в ммоль/л.

Рассмотрим подробнее коэффициент близости векторных массивов ε . Распознавание образов – важная задача искусственного интеллекта. Одним из направлений для решения данного класса задач являются искусственные нейронные сети, состоящие из совокупности соединенных между собой нейронов. Основные типы искусственных нейронных сетей, применяемых в настоящее время, используют статическую модель нейрона. Несмотря на значительные успехи, вопросы эффективного обучения нейронных сетей и увеличения их быстрой действия далеки от окончательного решения. Особенно это сказывается в задачах по распознаванию образов.

Главной математической операцией, определяющей результат срабатывания отдельного нейрона, является вычисление скалярного произведения. Распознавание должно быть инвариантно по отношению к положению тела в пространстве. На комплексной плоскости этому соответствуют преобразования векторов

$$y' = \lambda e^{i\chi} y + \eta. \quad (1)$$

При подготовке данных для распознавания образов выделяют контуры, соответствующие резким перепадам яркости и представляют их множеством n точек на плоскости с помощью набора комплексных чисел $a = \{a_i\}, i = 1, 2, \dots, n$. Для сравнения образов a и b их необходимо привести к системе центра масс, а затем произвести нормировку:

$$a_i \mapsto a_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_j, \mapsto \frac{a_i}{\max_j |a_j|},$$

$$b_i \mapsto b_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n b_j, \mapsto \frac{b_i}{\max_j |b_j|}. \quad (2)$$

a – эталонный образ, b – образ для сравнения. После выполнения преобразования (2) они могут отличаться углом поворота χ_0 . Если коэффициенты эталонного вектора a рассматривать как комплексные веса входов когерентного нейрона, а коэффициенты точного образа b как значения

сигналов на входах, то аргумент u передаточной функции примет вид:

$$u = \cos(\chi - \chi_0) \sum_{i=1}^n A_i B_i. \quad (3)$$

Величина u является действительной и достигает максимального значения при $\chi = \chi_0$. Для близких образов существует χ , при котором изображение с заданной точностью совпадает с эталонным. Когерентный нейрон обеспечивает прямую техническую реализацию распознавания образов.

Если данные представлены с помощью 6 различных параметров, сведенных в ЛД, то общий метод распознавания упрощается, поскольку оси диаграммы фиксированы. В этом случае вращение при идентификации исключается, а все данные кодируются одним шестимерным действительным вектором $a = (a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6)$. Сравнение с другим набором данных, представленным вектором $b = (b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6)$ осуществляется на основе скалярного произведения $(a, b) = \sum a_i b_i$. Если векторы a и b совпадают, то $(a-b, a-b) = 0$, а мерой погрешности может служить относительная величина, которая была обозначена как коэффициент близости векторных массивов:

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{(a-b, a-b)}{(a, a)}}. \quad (4)$$

Таким образом, задача идентификации сводится к поиску эталонной диаграммы, характеризуемой вектором b , для которого вектор образца a дает наименьшую величину ε .

В табл. 2 геометрические параметры ЛД отсортированы по величине гидрофобности фенолов H , которая равна логарифму распределения фенола между n -октанолом и водой [2]. На рис. 2 представлена гистограмма, из которой виден достаточно четкий тренд – чем выше гидрофобность фенола, тем больше площадь и периметр ЛД. Минимальные размеры ЛД имеют дигидроксибензолы, сказывается наличие двух гидроксильных групп, причем орто-дигидроксибензол больше похож на фенол, он дает менее темную окраску, что подтверждает предположение о понижении реакционной способности ОН-группы в орто-положении. ЛД пара- и мета-крезола слабо отличаются друг от друга, а вот орто-крезол и орто-трет-бутилфенол, действительно, дают наиболее бледное окрашивание растворов, что легко объяснимо стерическим эффектом заместителя. На параметры ЛД орто-трет-бутилфенола сказывается и сравнительно низкая концентрация, выраженная в ммоль/л.

Сопоставление параметров $(\sqrt{S})/P$, D и ε для ЛД разных фенолов показало, что величина $(\sqrt{S})/P$ наименее чувствительна к природе аналита, форма фигур ЛД так же не слишком сложна, чтобы эффективно применять фрактальность D . Более избирательной оказалась величина ε .

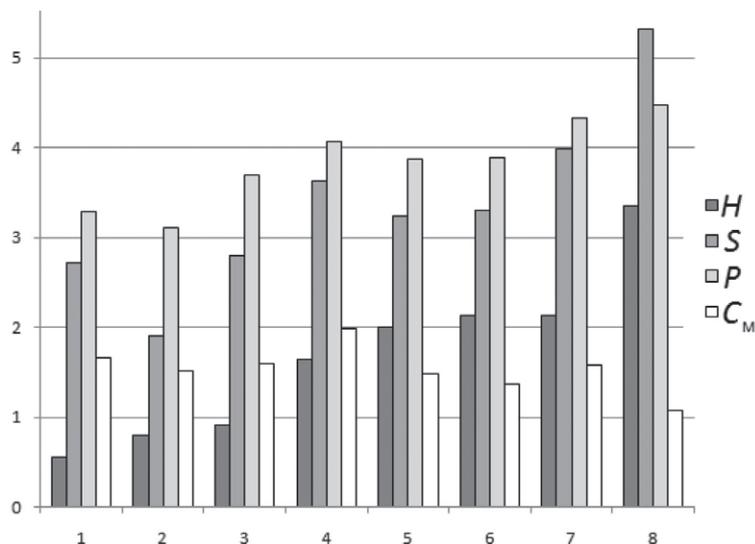


Рис. 2. Гистограмма, демонстрирующая изменения геометрических параметров ЛД ($S \times 10^{-4}$ и $P \times 0.5 \times 10^{-2}$) в зависимости от гидрофобности фенолов (H) при концентрациях C_m , ммоль/л: 1 – пара-дигироксибензол; 2 – мета-дигироксибензол; 3 – орто-дигироксибензол; 4 – фенол; 5 – мета-крезол; 6 – пара-крезол; 7 – орто-крезол; 8 – орто-трет-бутилфенол

В качестве эталонной фигуры выбрали ЛД фенола, поэтому для нее $\epsilon = 0$. Если исходить из того, что наибольшая визуальная похожесть проявляется в меньшем значении коэффициента ϵ , логично, что наибольшие отличия в цветных тестах проявляются между фенолом и орто-трет-бутилфенолом, у которого фенольный гидроксил испытывает максимальное стерическое экранирование объемным орто-заместителем. Но наиболее важный вывод заключается в том, что цветные реакции фенольных соединений из-за отличия в строении приводят не к идентичным, а различным параметрам цветности, и коэффициент ϵ количественно характеризует эти отличия.

На рис. 3 приведены цветометрические ЛД, полученные для разных концентраций фенолов, $C = 0.014-0.2$ г/л. Рассмотрим возможность применения геометрических параметров ЛД для количественного определения содержания фенолов цветометрическим методом по итогам регистрации параметров RGB двух цветных реакций. Найдено, что в диапазоне $C = 0.014-0.2$ г/л имеет место практически линейное уменьшение площадей и периметров ЛД за счет тенденций $F_i(255, 255, 255) \rightarrow F_i(0, 0, 0)$. С увеличением концентрации в 10 раз и соответственным расширением диапазона зависимости $C = f(S)$ и $C = f(P)$ становятся нелинейными. Градуировочные уравнения $S = a + bC$ и $P = a + bC$ представлены в табл. 3. Предел

Таблица 3

Градуировочные зависимости площади S и периметра P ЛД от концентрации C для различных фенольных соединений ($n = 5, \alpha = 0.05$)

Соединение	Уравнение	R	S_r
Фенол	$S = (-50060 \pm 3350) C + (27620 \pm 390)$	0.988	2914
	$P = (-672 \pm 5) C + (811 \pm 40)$	0.990	4.3
мета-Дигироксибензол	$S = (-215468 \pm 12180) C + (54500 \pm 1260)$	0.987	10596
	$P = (-1557 \pm 86) C + (913 \pm 10)$	0.987	74.8
пара-Дигироксибензол	$S = (-234700 \pm 3490) C + (69880 \pm 410)$	0.999	3036
	$P = (-2084 \pm 32) C + (1034 \pm 4)$	0.999	27.8
мета-Крезол	$S = (-95240 \pm 10700) C + (48690 \pm 1250)$	0.953	9309
	$P = (-833 \pm 71) C + (932 \pm 8)$	0.975	61.7
орто-Крезол	$S = (-208100 \pm 11600) C + (78660 \pm 1350)$	0.987	10092
	$P = (-1008 \pm 64) C + (1060 \pm 7)$	0.984	55.7
пара-Крезол	$S = (-272150 \pm 4070) C + (82580 \pm 470)$	0.999	3540
	$P = (-1796 \pm 18) C + (1110 \pm 5)$	0.999	15.7
орто-трет-Бутилфенол	$S = (-106300 \pm 2040) C + (72790 \pm 240)$	0.998	1774
	$P = (-472 \pm 14) C + (1029 \pm 2)$	0.998	12.2
орто-Дигироксибензол	$S = (-239400 \pm 5870) C + (70650 \pm 680)$	0.997	5106
	$P = (-1533 \pm 43) C + (1012 \pm 5)$	0.996	37.4

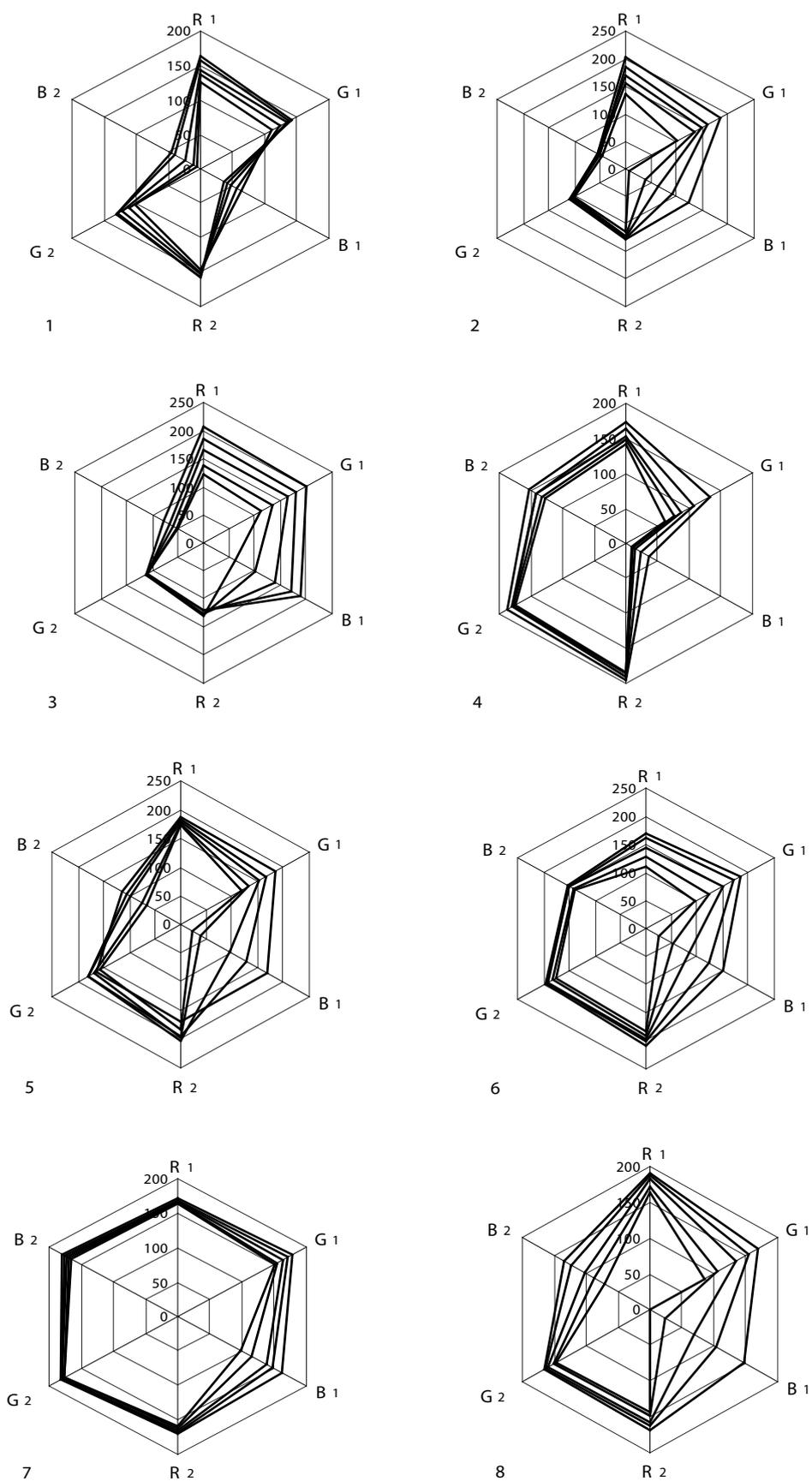


Рис. 3. Зависимость профиля ЛД от концентрации фенольных соединений: 1 – фенол, 2 – *мета*-дигидроксибензол, 3 – *пара*-дигидроксибензол, 4 – *мета*-крезол, 5 – *орто*-крезол, 6 – *пара*-крезол, 7 – *орто*-*трет*-бутилфенол, 8 – *орто*-дигидроксибензол; диапазон $C = 0.014-0.2$ г/л

Таблица 4

Результаты определения концентраций цветометрическим способом

Вещество	Введено, г/л	Найдено	
		C(S), г/л	C(P), г/л
<i>орто</i> -Крезол	0.080	0.082 ± 0.003	0.077 ± 0.002
<i>мета</i> -Крезол	0.085	0.091 ± 0.002	0.088 ± 0.001
<i>пара</i> -Дигиросибензол	0.091	0.092 ± 0.004	0.090 ± 0.003

обнаружения $C_{\min} = 0.005-0.010$ г/л. Среднее время единичного анализа – 15 мин. Для того, чтобы проводить цветометрические определения фенолов на уровне ПДК, необходима дополнительная стадия в пробоподготовке – концентрирование методом либо жидкостно-жидкостной, либо твердофазной экстракции [2]. Правильность цветометрического способа определения фенолов проверили методом «введено-найденно» (табл. 4).

Зачастую сточные воды, смывы, различные материалы содержат смеси свободных фенолов, в которых варьируется соотношение определенного набора аналитов. В связи с этим проанализировали зависимость цветометрических характеристик от суммарной концентрации и соотношения отдельных компонентов для модельных смесей,

состоящих из крезолов: модельная смесь 1: *орто*-, *мета*- и *пара*-крезол в соотношении 1:1:1; модельная смесь 2: *орто*-, *мета*- и *пара*-крезол в соотношении 1:1:4; модельная смесь 3: *орто*-, *мета*- и *пара*-крезол в соотношении 1:4:1. На рис. 4 представлены ЛД для этих смесей крезолов; диапазон суммарной концентрации $C = 0.015-0.16$ г/л. В табл. 5 и 6 – результаты построения градуировок и проверки способа на правильность. Видно, что смесь 1, включающая повышенное содержание *орто*-крезола, несколько отличается от смесей 2 и 3 по параметрам градуировки в связи со структурными особенностями *орто*-крезола, вместе с тем коэффициент близости векторных массивов ϵ для $C = 0.15$ г/л при попарном сравнении смесей находится в диапазоне 0.120-0.203, что говорит

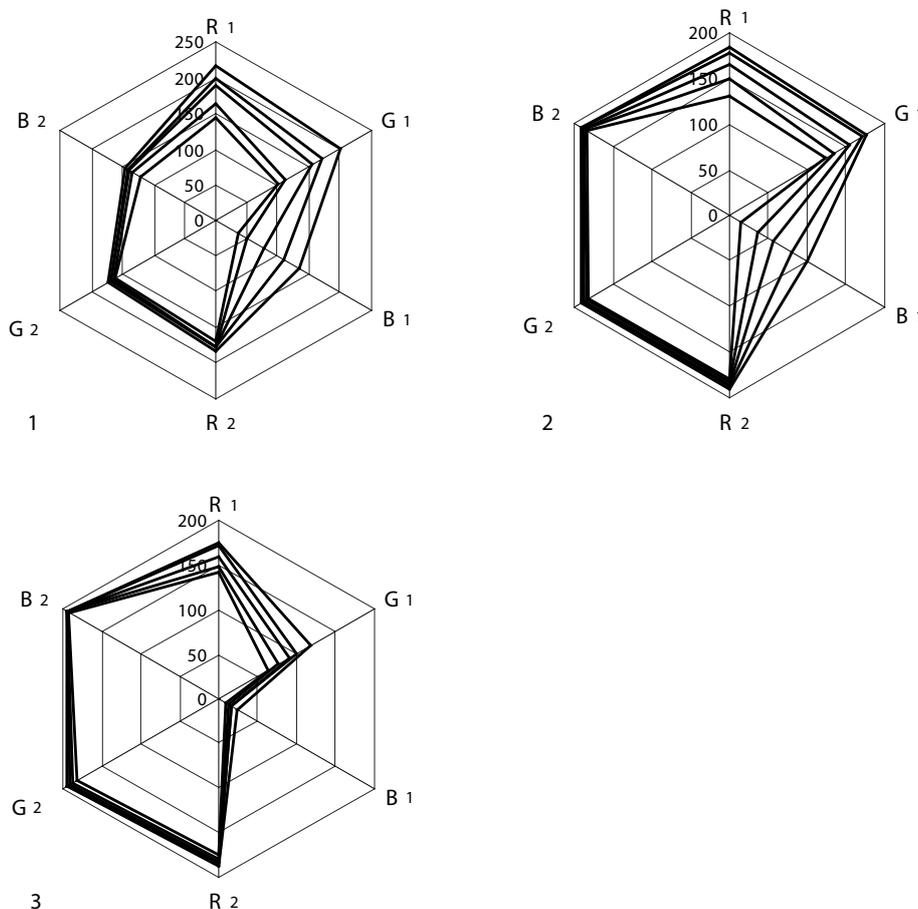


Рис. 4. ЛД модельных смесей 1, 2 и 3 крезолов при различных концентрациях

Таблица 5

Градуировочные зависимости площади S и периметра ЛД от концентрации C для модельных смесей фенолов ($n = 5$, $\alpha = 0.95$)

Модельная смесь	Уравнение	R	S_r
1	$S = (-242580 \pm 5840) C + (72270 \pm 680)$	0.997	5080
	$P = (-1607 \pm 32) C + (1030 \pm 4)$	0.998	27.8
2	$S = (-81550 \pm 1410) C + (47850 \pm 165)$	0.998	1227
	$P = (-845 \pm 7) C + (930 \pm 4)$	0.999	6.1
3	$S = (-51150 \pm 2790) C + (37800 \pm 320)$	0.988	2427
	$P = (-813 \pm 34) C + (830 \pm 5)$	0.993	29.6

Таблица 6

Результаты определения суммарной концентрации смеси крезолов цветометрическим методом с использованием площади (S) и периметра (P) ЛД, полученных по результатам измерения параметров цветности двух цветных реакций ($n = 5$; $P = 0.95$)

Модельная смесь	Введено, г/л	Найдено	
		$C(S)$, г/л	$C(P)$, г/л
1	0.10	0.10 ± 0.011	0.11 ± 0.007
2	0.10	0.11 ± 0.005	0.10 ± 0.010
3	0.10	0.08 ± 0.006	0.09 ± 0.008

об их незначительном качественном различии. Для каждой смеси сохраняется высокая степень аппроксимации концентрационных зависимостей, построенных по величине площади или периметра ЛД, а значит предложенный способ пригоден для определения фенольного индекса в диапазоне $C = 0.015-0.16$ г/л.

Выводы

Разработанный цветометрический способ качественного и количественного анализа растворов индивидуальных фенолов или их суммы реализуется на сравнительно недорогом оборудовании, имеет более высокую информативность, чем визуальные тесты с применением одной цветной реакции. В качестве эффективного интегрального показателя могут быть использованы геометрические параметры диаграмм, построенных в полярных координатах, на которых отложены результаты измерений величин интенсивности цветовых компонент в цветовой модели RGB, полученных после параллельного проведения двух цветных реакций.

ЛИТЕРАТУРА

1. Подолина Е.А., Грошев Е.Н., Рудаков О.Б. Экстракционно-инструментальные способы определения фенолов в конденсированных средах // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13, № 1. С. 72-79.
2. Хорохордина Е.А., Подолина Е.А., Рудаков О.Б. Жидкостная экстракция смешанными растворителями // Применение в химическом анализе фенолов / Саарбрюккен, LAP Lambert Academic Publishing. 2012. 240 с.

3. Thin-Layer Chromatography. Reagents and Detection Methods. / Jork H. et [al.]. VCN: New York, 1990. V.1. 497 p.
4. Цветометрические методики определения цветного числа растительных масел / В.В. Хрипушин и [др.] // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2008. № 5. С. 9-12.
5. Применение сканерметрии в контроле качества отделочных материалов / О.В. Байдичева и [др.] // Научный вестник ВГАСУ. Серия: Физико-химические проблемы строительного материаловедения. Вып. 1. 2008. С. 100-105.
6. Определение цветности воды с использованием цифровых технологий / О.В. Байдичева и [др.] // Безопасность жизнедеятельности. 2009. № 1. С. 23-25.
7. Технохимический контроль жиров и жирозаменителей / О.Б. Рудаков и [др.]. С.-П.: Лань, 2011. 576 с.
8. Дмитриенко С.Г., Апяри В.В. Пенополиуретаны. Сорбционные свойства и применение в химическом анализе. М.: КРАСАНД, 2010. 264 с.
9. Automated evaluation of food colour by means of multivariate image analysis coupled to a wavelet-based classification algorithm / A. Antonelli et [al.] // Analytica Chimica Acta. 2004. P. 3-13.
10. Soldat D.J., Barak Ph., Lepore B.J. Microscale Colorimetric Analysis Using a Desktop Scanner and Automated Digital Image Analysis // J. Chem. Educ. 2009. V. 86, № 5. P. 617-620.
11. Visual and Colorimetric Lithium Ion Sensing Based on Digital Color Analysis / E. Hirayama et [al.] // Anal. Chem. 2000. V. 72, № 3. P. 465-474.
12. Иванов В.М., Кузнецова О.В. Химическая цветометрия: возможности метода, области

- применения и перспективы // Успехи химии. 2001. Т. 70. № 5. С. 411-428.
13. Зяблов А.Н., Жиброва Ю.А., Селеменев В.Ф. Цифровая обработка изображений. Достоинства и недостатки // Сорбцион. и хроматограф. процессы. 2006. Т. 6, № 6. С. 1424-1429.
14. Байдичева О.В., Рудакова Л.В., **Рудаков О.Б.** Применение цифровых технологий в цветных тестах биологически активных веществ // Бутлеровские сообщения. 2008. Т. 13. № 2. С. 50-61.
15. Головинский П.А. Когерентный нейрон и распознавание образов // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2005. № 9. С. 115-117.
16. Мультисенсорный микрофотографический способ определения воды в водно-спиртовых смесях / И.Г. Кудухова и [др.] // Вода: химия и экология. 2011. № 12. С. 89-93.
17. Анализ водно-спиртовых растворов способом микрофотографической регистрации эффектов набухания сорбционно-активных полимерных гранул / Л.В. Рудакова и [др.] // Производство спирта и ликероводочных изделий. 2012. № 2. С. 24-26.

IMPROVED METHOD FOR DETERMINATION OF PHENOLS BY COLOR REACTION USING DIGITAL TECHNOLOGIES

**O.B. Rudakov¹, L.V. Rudakova², I.G. Kudukhova¹, P.A. Golovinskiy¹,
E.A. Khorohordina¹, E.N. Groshev³**

¹ Department of physics and chemistry of Voronezh state university of architecture and civil engineering

394006, Voronezh, str. 20-letya Oktyabrya, 84
chemistry@vgasu.vrn.ru

² Department of pharmaceutical chemistry of Voronezh state medical academy

394000, Voronezh, Student's str., 10
vodoley65@mail.ru

Department of chemistry and combustion processes of Voronezh Institute of the State Fire Service
Emergency

394052, Voronezh, Red Banner str., 231

A method of colorimetric determination of phenols using a digital camera which records the analytical signal as an electronic image is proposed. As an integral indicator are used the geometric parameters of the diagrams constructed in polar coordinates, which recorded the results of measurements of the intensity values of color components in the color models RGB obtained by two color reactions.

Key words: digital colorimeter, color reaction, phenols, integral index.