

УДК 541.13

**РАСТВОРИМОСТЬ БЕНЗОАТА КАЛИЯ И ГОМОАССОЦИАЦИЯ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ В АЦЕТОНЕ, СОДЕРЖАЩЕМ 5 МОЛЬНЫХ ПРОЦЕНТОВ ДМСО****С.Т. Гога, Ю.В. Холин, Н.В. Ефимова, Ю.В. Исаенко\*, Н.О. Мчедлов-Петросян**

На основании данных о влиянии добавок бензойной кислоты (НА) на растворимость бензоата калия (КА) при 25°C в ацетоне, содержащем 5 мольных процентов ДМСО, проведен поиск адекватной модели, описывающей равновесия в диапазоне начальных концентраций кислоты 0.015–0.50 моль/л. С использованием программы CLINP получены следующие оценки параметров равновесий. Показатель произведения растворимости КА:  $pK_{sp} = 8.38$  ( $s = 0.18$ ); логарифм константы образования продукта гомоассоциации – комплексного аниона  $HA_2^-$ :  $\log K_{HA_2}^f = 4.14$  ( $s = 0.21$ ); логарифм константы образования димера кислоты  $(HA)_2$ :  $\log K_{dim} = 0.73$  ( $s = 0.37$ ). В расчётах использовалось определённое ранее значение  $pK_a$  бензойной кислоты, равное 14.03.

**Ключевые слова:** бензоат калия бензойная кислота, ацетон, диметилсульфоксид, растворимость, произведение растворимости, гомоассоциация, димеризация.

**Введение**

В серии предыдущих работ [1–4] были исследованы ионные равновесия в ацетоне, содержащем 5 мольных % ДМСО. Оба этих растворителя относятся к так называемым полярным, не являющимся донором водородной связи (полярные НДВС-растворители). При этом ацетон является протофобным (катионофобным), а ДМСО – прототфильным (катионофильным) [5]. Поэтому следовые количества воды, так или иначе попадающие в буферные системы в ацетоновых растворах в экспериментальных условиях, приводят к гидратации ионов водорода. В результате такой пересольватации протона в ацетоне возникает система, в которой ион лиония представляет смесь сольватов протонов неопределённого состава. В то же время, с учётом заметной основности ДМСО, превышающей основность воды [6], вышеупомянутая система представляет собой ацетоновую среду, в которой ион  $H^+$  сольватирован молекулами диметилсульфоксида.

В наших цитированных работах выше [1–4] при помощи кондуктометрического, потенциометрического и спектрофотометрического методов определены константы диссоциации ряда солей и кислот, а также значения  $pa_{H^+}^*$  серии буферных кислот. Вместе с тем, обнаружилось, что процессы гомоассоциации, т.е. образование комплексов кислоты с её анионом,  $HA_2^-$ , типичные для полярных НДВС-растворителей (или, иначе, полярных «апротонных») [5,7], в рассматриваемом растворителе протекают с более сложной стехиометрией. Поэтому было поставлено специальное исследование с использованием стандартного для таких случаев приёма: определения растворимости соли органической кислоты в присутствии различных концентраций этой же кислоты [7]. В качестве кислоты была выбрана бензойная, в качестве соли: бензоат калия.

**Экспериментальная часть**

Ацетон, диметилсульфоксид, бензойную кислоту и бензоат калия готовили к работе как описано в [1,3,4].

Растворимость бензоата калия в присутствии бензойной кислоты определяли методом изотермического насыщения в условиях термостатирования при температуре 25 °С (точность термостатирования 0.2 °С). Для каждой концентрации бензойной кислоты насыщение растворов проводили параллельно в четырех герметично закрытых пробирках. В пробирки вносили бен-

\* Колледж Национального фармацевтического университета

© Гога С.Т., Холин Ю.В., Ефимова Н.В.,  
Исаенко Ю.В., Мчедлов-Петросян Н.О., 2017

[goga@karazin.ua](mailto:goga@karazin.ua)

зоат калия и добавляли раствор бензойной кислоты, после этого пробирки помещали в воздушный термостат. После трех часов перемешивания содержимого пробирок производилось отстаивание в течение двух часов. Специальные опыты показали, что такого промежутка времени достаточно для установления равновесия. Концентрацию насыщенных растворов бензоата калия определяли по концентрации иона калия, перешедшего в раствор, методом атомно-абсорбционной фотометрии.

Измерение содержания калия проводили на атомно-абсорбционном спектрофотометре Selmi C115МП при длине волны 765 нм. Градуировка проводилась по водным растворам.

### Результаты и обсуждение

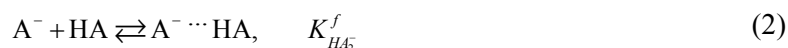
Результаты определения растворимости представлены в Таблице 1. Рост растворимости соли по мере увеличения начальной концентрации кислоты очевиден.

**Таблица 1.** Зависимость концентрации калия в насыщенном растворе от начальной концентрации бензойной кислоты (экспериментальные данные)

$c(\text{HBz}), \text{ моль/л}$	$c(\text{K}^+), \text{ моль/л}$	$c(\text{HBz}), \text{ моль/л}$	$c(\text{K}^+), \text{ моль/л}$
0	$(6.5 \pm 0.3) \cdot 10^{-5}$	$9.00 \cdot 10^{-2}$	$(2.02 \pm 0.03) \cdot 10^{-3}$
$1.50 \cdot 10^{-2}$	$(7.9 \pm 1.2) \cdot 10^{-4}$	$1.00 \cdot 10^{-1}$	$(2.05 \pm 0.04) \cdot 10^{-3}$
$2.00 \cdot 10^{-2}$	$(6.9 \pm 0.6) \cdot 10^{-4}$	$1.50 \cdot 10^{-1}$	$(1.77 \pm 0.03) \cdot 10^{-3}$
$2.50 \cdot 10^{-2}$	$(1.5 \pm 0.4) \cdot 10^{-3}$	$2.00 \cdot 10^{-1}$	$(2.49 \pm 0.11) \cdot 10^{-3}$
$3.00 \cdot 10^{-2}$	$(1.54 \pm 0.17) \cdot 10^{-3}$	$2.50 \cdot 10^{-1}$	$(1.99 \pm 0.02) \cdot 10^{-3}$
$4.00 \cdot 10^{-2}$	$(1.83 \pm 0.16) \cdot 10^{-3}$	$3.00 \cdot 10^{-1}$	$(2.92 \pm 0.21) \cdot 10^{-3}$
$5.00 \cdot 10^{-2}$	$(1.55 \pm 0.17) \cdot 10^{-3}$	$3.50 \cdot 10^{-1}$	$(2.71 \pm 0.11) \cdot 10^{-3}$
$6.00 \cdot 10^{-2}$	$(1.93 \pm 0.14) \cdot 10^{-3}$	$4.00 \cdot 10^{-1}$	$(3.30 \pm 0.11) \cdot 10^{-3}$
$7.00 \cdot 10^{-2}$	$(2.14 \pm 0.24) \cdot 10^{-3}$	$4.50 \cdot 10^{-1}$	$(2.59 \pm 0.22) \cdot 10^{-3}$
$8.00 \cdot 10^{-2}$	$(2.14 \pm 0.19) \cdot 10^{-3}$	$5.00 \cdot 10^{-1}$	$(3.75 \pm 0.02) \cdot 10^{-3}$

Обработка результатов проводилась при помощи программы CLINP [8]. Необходимое в расчётах термодинамическое значение  $pK_a$  бензойной кислоты, равное 14.03, было определено ранее [4]. Коэффициенты активности ионов рассчитывали по уравнению Дебая–Хюккеля; относительная диэлектрическая проницаемость данного смешанного растворителя составляет 22.19 при 25°C [4]. Значение растворимости бензоата калия без добавок бензойной кислоты определялось нами многократно и составило  $6.47 \cdot 10^{-5}$  моль/л ( $\pm 5\%$ ). Отсюда показатель произведения растворимости этой соли в ацетоне, содержащем 5 мольн. % ДМСО, составил  $pK_{sp} = 8.38$  ( $s = 0.18$ ).

Далее, была предпринята попытка интерпретировать увеличение растворимости путём введения в рассмотрение второго равновесия (модель I):

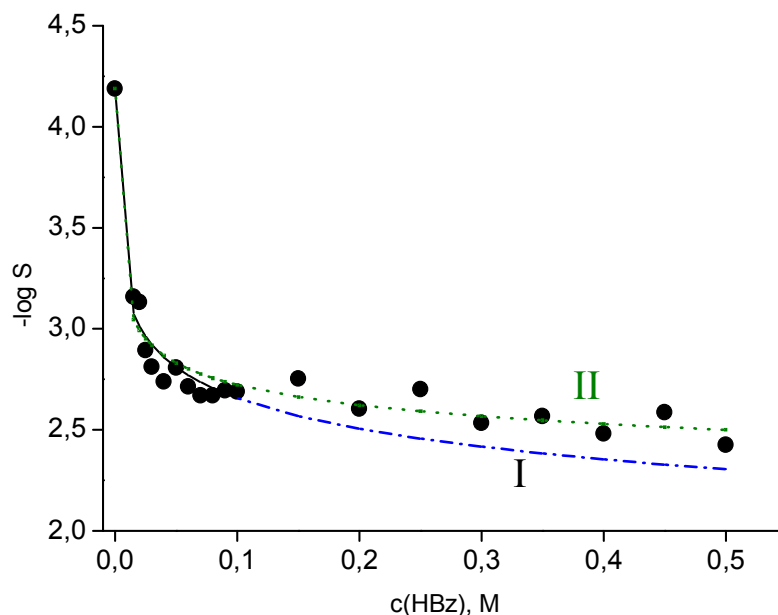


(при этом экспериментальная точка для концентрации кислоты 0.02 моль/л была отброшена как промах). При обработке данных при малых концентрациях бензойной кислоты,  $c \leq 0.1$  моль/л, такая модель неплохо описывает эксперимент (рис. 1). При оценке относительных стандартных отклонений равновесных концентраций иона  $\text{K}^+$  15%, модель адекватна эксперименту:  $\chi^2_{\text{экс}} = 14.4$ , что меньше критического значения для 10 степеней свободы  $\chi^2_{\text{крит}} = 18.3$ . Рассчитанные оценки параметров:  $pK_{sp} = 8.38$  ( $s = 0.16$ ),  $\log K_{\text{HA}_2}^f = 4.07$  ( $s = 0.16$ ).

Но прогнозирование результатов при более высоких концентрациях показывает наличие систематических отклонений рассчитанных значений растворимости от измеренных. На рис. 1 представлены аппроксимация моделью значений логарифма растворимости, измеренных при  $c \leq 0.1$  моль/л, и прогноз растворимости при более высоких  $c$ .

Поэтому была проведена обработка зависимости растворимости бензоата калия от концентрации бензойной кислоты в интервале начальных концентраций HA для всего эксперимен-

тально изученного интервала ( $0 \leq c \leq 0.5$  моль/л). Были испробованы различные схемы равновесий; наиболее удачной оказалась модель, отличающаяся от предыдущей учётом димеризации кислоты (модель II), поскольку прогноз по модели I даёт завышенные оценки растворимости при высоких концентрациях кислоты:



**Рисунок 1.** Зависимость растворимости КА (S) от  $c(\text{HA})$ . Точки – экспериментальные значения. I – расчет по модели I ( $c(\text{HBz}) \leq 0.1$  моль/л – аппроксимация,  $c(\text{HBz}) > 0.1$  моль/л – прогноз), II – аппроксимация измеренных значений растворимости моделью II.

Модель адекватна эксперименту при оценке относительных стандартных отклонений равновесных концентраций ионов  $\text{K}^+$  15%:  $\chi^2_{\text{эксп}} = 27.2$ , что меньше критического значения для 17 степеней свободы  $\chi^2_{\text{крит}} = 27.6$ .

Рассчитанные оценки параметров таковы:  $pK_{\text{sp}} = 8.38$  ( $s = 0.18$ ),  $\log K_{\text{HA}_2}^f = 4.14$  ( $s = 0.21$ ),  $\log K_{\text{dim}} = 0.73$  ( $s = 0.37$ ). Равновесные концентрации реагентов в растворах приведены в табл. 2.

**Таблица 2.** Равновесные концентрации реагентов (моль/л)

$c(\text{HBz})$	Молекулярные и ионные формы					
	HBz	$\text{Bz}^-$	$\text{H}^+$	$\text{K}^+$	$\text{HBz}_2^-$	$(\text{HBz})_2$
0	0	$6.46 \cdot 10^{-5}$	0	$6.46 \cdot 10^{-5}$	0	0
$1.50 \cdot 10^{-2}$	$1.18 \cdot 10^{-2}$	$4.65 \cdot 10^{-6}$	$2.37 \cdot 10^{-11}$	$8.99 \cdot 10^{-3}$	$8.94 \cdot 10^{-4}$	$1.14 \cdot 10^{-3}$
$2.00 \cdot 10^{-2}$	$1.52 \cdot 10^{-2}$	$4.10 \cdot 10^{-6}$	$3.46 \cdot 10^{-11}$	$1.02 \cdot 10^{-3}$	$1.02 \cdot 10^{-3}$	$1.89 \cdot 10^{-3}$
$2.50 \cdot 10^{-2}$	$1.84 \cdot 10^{-2}$	$3.73 \cdot 10^{-6}$	$4.60 \cdot 10^{-11}$	$1.12 \cdot 10^{-3}$	$1.12 \cdot 10^{-3}$	$2.75 \cdot 10^{-3}$
$3.00 \cdot 10^{-2}$	$2.14 \cdot 10^{-2}$	$3.46 \cdot 10^{-6}$	$5.76 \cdot 10^{-11}$	$1.21 \cdot 10^{-3}$	$1.20 \cdot 10^{-3}$	$3.72 \cdot 10^{-3}$
$4.00 \cdot 10^{-2}$	$2.69 \cdot 10^{-2}$	$3.09 \cdot 10^{-6}$	$8.12 \cdot 10^{-11}$	$1.35 \cdot 10^{-3}$	$1.35 \cdot 10^{-3}$	$5.89 \cdot 10^{-3}$
$5.00 \cdot 10^{-2}$	$3.19 \cdot 10^{-2}$	$2.83 \cdot 10^{-6}$	$1.05 \cdot 10^{-10}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$8.30 \cdot 10^{-3}$
$6.00 \cdot 10^{-2}$	$3.66 \cdot 10^{-2}$	$2.65 \cdot 10^{-6}$	$1.29 \cdot 10^{-10}$	$1.58 \cdot 10^{-3}$	$1.58 \cdot 10^{-3}$	$1.09 \cdot 10^{-2}$
$7.00 \cdot 10^{-2}$	$4.10 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-6}$	$1.53 \cdot 10^{-10}$	$1.67 \cdot 10^{-3}$	$1.67 \cdot 10^{-3}$	$1.37 \cdot 10^{-2}$
$8.00 \cdot 10^{-2}$	$4.51 \cdot 10^{-2}$	$2.38 \cdot 10^{-6}$	$1.77 \cdot 10^{-10}$	$1.75 \cdot 10^{-3}$	$1.75 \cdot 10^{-3}$	$1.66 \cdot 10^{-2}$
$9.00 \cdot 10^{-2}$	$4.90 \cdot 10^{-2}$	$2.29 \cdot 10^{-6}$	$2.00 \cdot 10^{-10}$	$1.83 \cdot 10^{-3}$	$1.82 \cdot 10^{-3}$	$1.96 \cdot 10^{-2}$
$1.00 \cdot 10^{-1}$	$5.27 \cdot 10^{-2}$	$2.20 \cdot 10^{-6}$	$2.23 \cdot 10^{-10}$	$1.90 \cdot 10^{-3}$	$1.89 \cdot 10^{-3}$	$2.27 \cdot 10^{-2}$
$1.50 \cdot 10^{-1}$	$6.94 \cdot 10^{-2}$	$1.92 \cdot 10^{-6}$	$3.37 \cdot 10^{-10}$	$2.17 \cdot 10^{-3}$	$2.17 \cdot 10^{-3}$	$3.92 \cdot 10^{-2}$

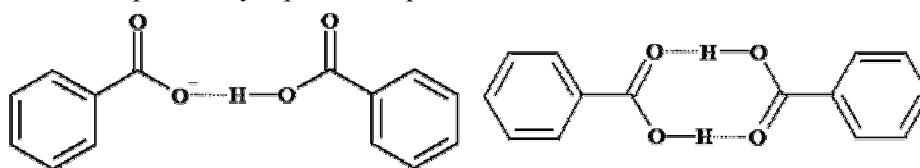
Продолжение таблицы 2.

$2.00 \cdot 10^{-1}$	$8.36 \cdot 10^{-2}$	$1.75 \cdot 10^{-6}$	$4.46 \cdot 10^{-10}$	$2.39 \cdot 10^{-3}$	$2.38 \cdot 10^{-3}$	$5.70 \cdot 10^{-2}$
$2.50 \cdot 10^{-1}$	9.63E-02	$1.63 \cdot 10^{-6}$	$5.51 \cdot 10^{-10}$	$2.56 \cdot 10^{-3}$	$2.56 \cdot 10^{-3}$	$7.56 \cdot 10^{-2}$
$3.00 \cdot 10^{-1}$	$1.08 \cdot 10^{-1}$	$1.54 \cdot 10^{-6}$	$6.52 \cdot 10^{-10}$	$2.71 \cdot 10^{-3}$	$2.71 \cdot 10^{-3}$	$9.47 \cdot 10^{-2}$
$3.50 \cdot 10^{-1}$	$1.18 \cdot 10^{-1}$	$1.47 \cdot 10^{-6}$	$7.51 \cdot 10^{-10}$	$2.84 \cdot 10^{-3}$	$2.84 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{-1}$
$4.00 \cdot 10^{-1}$	$1.28 \cdot 10^{-1}$	$1.41 \cdot 10^{-6}$	$8.47 \cdot 10^{-10}$	$2.96 \cdot 10^{-3}$	$2.95 \cdot 10^{-3}$	$1.34 \cdot 10^{-1}$
$4.50 \cdot 10^{-1}$	$1.38 \cdot 10^{-1}$	$1.36 \cdot 10^{-6}$	$9.42 \cdot 10^{-10}$	$3.06 \cdot 10^{-3}$	$3.06 \cdot 10^{-3}$	$1.55 \cdot 10^{-1}$

Сравнение логарифмов растворимости, вычисленных по моделям I и II и измеренных концентраций ионов  $K^+$ , приведено на рис. 1.

Далее, были испытаны модели, учитывающие образование частиц  $(HA)_2A^-$ , а также ионных ассоциатов анионов с ионами калия. Однако дальнейшее усложнение схемы равновесий не позволяет добиться лучшего описания экспериментальных данных.

Таким образом, в достаточно широком интервале начальных концентраций бензойной кислоты образуются лишь две комплексные частицы,  $HA_2^-$  и  $(HA)_2$ , причём в обоих случаях логично предположить решающую роль водородных связей:



В таблице 3 найденное нами значение  $K_{HA_2}^f$  сопоставлено с литературными данными из обзорной статьи Кольтгофа [5].

 Таблица 3. Значения  $K_{HA_2}^f$  для бензойной кислоты в НДВС-растворителях

Растворитель	Относительная диэлектрическая проницаемость [9]	$K_{HA_2}^f$ , л/моль
Диметилсульфоксид [5]	46.45	$\sim 6 \cdot 10^1$
<i>N,N</i> -Диметилформамид [5]	36.71	$2.5 \cdot 10^2$
Ацетонитрил [5]	35.94	$4 \cdot 10^3$
Ацетон с 5 мольн. % ДМСО	22.19 [4]	$1.4 \cdot 10^4$

Согласно существующим представлениям, движущей силой гомоассоциации является дефицит водородных связей в НДВС-растворителе; в результате сольватация аниона кислоты происходит путём ассоциации с молекулами самой кислоты [5]. Но катионофильность диметилформамида и особенно диметилсульфоксида приводит к тому, что молекулы этих растворителей конкурируют с анионами  $A^-$  за взаимодействие с молекулами  $HA$ . В результате гомоассоциация ослабляется.

Ацетон хотя и относится, как и ацетонитрил, к протофобным растворителям, но всё же несколько более основен, судя по донорным числам Гутмана и значениям протонного сродства [2]. Более высокое значение  $K_{HA_2}^f$  в случае исследованного нами растворителя, содержащего ещё и добавку основного диметилсульфоксида, мы объясняем существенно более низким значением относительной диэлектрической проницаемости, что в целом должно способствовать процессам ассоциации ионов и молекул.

### Литература

1. Ionic equilibria of tetramethylammonium 2,4-dinitrophenolate, tetraethylammonium picrate, and sodium salicylate in acetone–DMSO mixed solvent (mol. ratio 95 : 5). Conductance and ion association / D. Yu. Filatov, S. T. Goga, V. G. Panchenko, N. O. Mchedlov–Petrossyan // Вісник Харківського національного університету. – 2007. – Вип. 15 (38), № 770. – С. 263–267.

2. Кислотно-основное равновесие в смеси протопобного и протопфильного полярных НДВС–растворителей: сольватация протона диметилсульфоксидом в ацетоне / Н. О. Мchedlov-Петросян, Д. Ю. Філатов, С. Т. Гога, А. В. Лебедь // Доповіди Національної академії наук України. – 2008. – № 9. – С. 119–123.
3. Ионные равновесия пикриновой кислоты, хлороводорода и бензоата калия в смеси ацетона с ДМСО (мольное соотношение 95 : 5) / Д. Ю. Филатов, С. Т. Гога, А. В. Лебедь, П. В. Ефимов, Н. О. Мchedlov-Петросян // Вісник Харківського національного університету. – 2008. – Вип. 16 (39), № 820. – С. 262–267.
4. Ionic equilibrium in mixtures of protophobic and protophilic polar non-hydrogen bond donor solvents: Acids, salts, and indicators in acetone containing 5 mol % DMSO / N. O. Mchedlov-Petrossyan, D. Yu. Filatov, S. T. Goga and A. V. Lebed // J. Phys. Org. Chem. – 2010. – 23, No. 5. – P. 418–430.
5. Kolthoff I. M. Acid-Base Equilibria in Dipolar Aprotic Solvents / Anal. Chem. 1974. – 46, No. 13. – P. 1992–2003.
6. Kolthoff I. M., Ikeda S. Polarographic and acid properties of thorium perchlorate in acetonitrile // J. Phys. Chem. – 1961. – 65, No 6. – P. 1020–1026.
7. I. M. Kolthoff, M. K. Chantooni, S. Bhowmik Acid-Base Properties of Mono- and Dinitrophenols in Acetonitrile // J. Amer. Chem. Soc. – 1966. – 88, no. 23. – P. 5430-5439.
8. D. Konyaev, S. Myerniy, Y. Kholin, CLINP Program, <http://www-chemo.univer.kharkov.ua/kholin/clinp.html>.
9. C. Reichardt, T. Welton / Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH. - 2011. - 692 p.

#### References

1. D. Yu. Filatov, S. T. Goga, V. G. Panchenko, N. O. Mchedlov-Petrossyan // Vi'snik Harki'vs'kogo naci'on'al'nogo uni'versitetu. – 2007. – Vol. 15 (38), N 770. – P. 263–267.
2. N. O. Mchedlov-Petrossyan, D. YU. Fi'latov, S. T. Goga, A. V. Lebed' // Dopovi'di' Naci'on'al'noi` akademi'i` nauk Ukraї`ni. – 2008. – N 9. – P. 119–123. (Rus.)
3. D. YU. Filatov, S. T. Goga, A. V. Lebed', P. V. Efimov, N. O. Mchedlov-Petrossyan // Vi'snik Harki'vs'kogo naci'on'al'nogo uni'versitetu. – 2008. – Vol. 16 (39), N 820. – P. 262–267. (Rus.)
4. N. O. Mchedlov-Petrossyan, D. Yu. Filatov, S. T. Goga and A. V. Lebed // J. Phys. Org. Chem. – 2010. – Vol. 23, N 5. – P. 418–430.
5. Kolthoff I. M. / Anal. Chem. 1974. – Vol. 46, N 13. – P. 1992–2003.
6. Kolthoff I. M., Ikeda S. // J. Phys. Chem. – 1961. – Vol. 65, N 6. – P. 1020–1026.
7. I. M. Kolthoff, M. K. Chantooni, S. Bhowmik // J. Amer. Chem. Soc. – 1966. – Vol. 88, N. 23. – P. 5430-5439.
8. D. Konyaev, S. Myerniy, Y. Kholin, CLINP Program, <http://www-chemo.univer.kharkov.ua/kholin/clinp.html>.
9. C. Reichardt, T. Welton / Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. – Weinheim: Wiley-VCH. – 2011. – 692 p.

*Поступила до редакції 2 листопада 2017 р.*

С.Т. Гога, Ю.В. Холин, Н.В. Ефимова, Ю.В. Исаенко, М.О. Мchedlov-Петросян. Розчинність бензоату калію і гомоасоціація бензойної кислоти в ацетоні, що містить 5 мольних відсотків ДМСО.

На підставі даних про вплив добавок бензойної кислоти (НА) на розчинність бензоату калію (КА) при 25°C в ацетоні, що містить 5 мольних відсотків ДМСО, проведено пошук адекватної моделі, яка описує рівноваги в діапазоні початкових концентрацій кислоти 0.015 – 0.50 моль/л. З використанням програми CLINP отримані наступні оцінки параметрів рівноваг. Показник добутку розчинності КА:  $pK_{sp} = 8.38$  ( $s = 0.18$ ); логарифм константи утворення продукту гомоасоціації - комплексного аніону  $HA_2^-$ :  $\log K_{HA_2}^f = 4.14$  ( $s = 0.21$ ); логарифм константи утворення димера кислоти  $(HA)_2$ :

$\log K_{\text{dim}} = 0.73$  ( $s = 0.37$ ). У розрахунках використовувалося знайдене раніше значення  $pK_a$  бензойної кислоти, що дорівнює 14.03.

**Ключові слова:** бензоат калію, бензойна кислота, ацетон, диметилсульфоксид, розчинність, добуток розчинності, гомоасоціація, димеризація.

S.T. Goga, Yu.V. Kholin, N.V. Efimova, Yu.V. Isaenko, N.O. Mchedlov-Petrosyan. Solubility of potassium benzoate and homoassociation of benzoic acid in acetone containing 5 mole percent DMSO.

The solubility of potassium benzoate was studied in a mixed solvent acetone–DMSO, molar ratio 95 : 5, at 25°C without and with addition of benzoic acid (0.015 to 0.50 mol L<sup>-1</sup>). In search for an adequate equilibrium model for fitting the experimental data, the CLINP program was applied. Following values of equilibrium constants were estimated: the indices of the solubility product for KA,  $pK_{\text{sp}} = 8.38$  ( $s = 0.18$ ); the logarithm of the formation constant of HA<sub>2</sub><sup>-</sup>,  $\log K_{\text{HA}_2}^f = 4.14$  ( $s = 0.21$ ); the logarithm of the dimerization constant of benzoic acid, (HA)<sub>2</sub>:  $\log K_{\text{dim}} = 0.73$  ( $s = 0.37$ ). The  $pK_a = 14.03$  value of benzoic acid in this solvent, determined and reported previously, was used in the calculations.

**Keywords:** potassium benzoate, benzoic acid, acetone, dimethylsulfoxide, solubility, solubility product, homoassociation, dimerization.

Kharkov University Bulletin. Chemical Series. Issue 29 (52), 2017