

Взаимосвязь «строение – свойство» в ряду производных хинолина

© Капитонов Александр Владиславович, Колосова Елена Александровна,
Курбатова*⁺ Светлана Викторовна

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева.
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Факс: +7 (846) 334-54-17. E-mail: curbatsv@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топология, топологические индексы, индексы связанности, вырождение топологических индексов, гетероатомы, гетероциклы, фактор удерживания, обращенно-фазовая жидкостная хроматография, взаимосвязь строение – свойство.

Аннотация

Приведены результаты сравнительного анализа взаимосвязи физико-химических и топологических характеристик производных хинолина. Исследованы закономерности изменения физико-химических параметров производных хинолина. Показано, что различия в физико-химических параметрах этих соединений определяются, главным образом, природой и положением заместителей и функциональных групп в основном хинолиновом фрагменте. Рассчитаны значения индексов связанности с нулевого по пятый порядок для производных хинолина. Показано, что значения индексов связанности исследованных соединений уменьшаются по мере увеличения их порядка, что соответствует закономерностям изменения топологических индексов других гетероциклических соединений.

Исследована взаимосвязь между значениями индексов связанности и физико-химическими характеристиками этих соединений. Показано, что значения топологических индексов, как и физико-химические параметры производных хинолина, определяются, прежде всего, природой и положением функциональных групп и заместителей в основном гетероциклическом фрагменте. Показана симбатность в изменении значений индексов связанности, объема и поляризуемости молекул исследованных соединений, при этом соединения с максимальными значениями физико-химических параметров, как правило, характеризуются максимальными значениями индексов связанности всех порядков. Показано, что уровень соответствующих корреляций определяется значением порядка использованных индексов связанности и типом коррелируемого параметра.

На основании данных литературы показано, что высокоэффективная жидкостная хроматография является перспективным методом исследования соотношений структура – свойство с использованием корреляций между сорбционными и физико-химическими параметрами веществ, поэтому в работе изучено влияние топологии на удерживание производных хинолина в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии на октадецилсиликагеле и сверхсшитом полистироле. На основании полученных корреляционных зависимостей установлено, что наибольшее влияние топологии сказывается при реализации сорбционного механизма удерживания как на октадецилсиликагеле, так и на сверхсшитом полистироле. В то же время активная роль элюента в хроматографической системе, способствующая «разворачиванию» молекул сорбатов относительно поверхности сорбента, снижает роль топологического фактора в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии, на основании чего высказано предположение о том, что для получения сорбционно-структурных корреляций с прогностическими целями следует использовать данные по удерживанию этих веществ при минимальной концентрации органического компонента в элюенте.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Взаимосвязь «строение – свойство» в ряду производных хинолина. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.81. №1. С.27-37. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-1-27

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Взаимосвязь «строение – свойство» в ряду производных хинолина. *Бутлеровские сообщения А*. 2025. Т.10. №1. Id.4. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-1-27/ROI-jbc-RA/25-10-1-4

The output for citing the English online version of the article:

Alexander V. Kapitonov, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova. Relationship "structure - property" in a series of quinoline derivatives. *Butlerov Communications A*. 2025. Vol.10. No.1. Id.4. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-1-27/ROI-jbc-A/25-10-1-4