

Сравнительный анализ сорбционно-структурных корреляций производных хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]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, производные хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина, фактор удерживания, обращенно-фазовая жидкостная хроматография, взаимосвязь строение – свойство.

Аннотация

Приведены результаты исследования особенностей топологии производных хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина. Строение выбранных объектов исследования отличается природой и положением заместителей в положениях 2, 4 и 6 хинолинового ядра, степенью насыщенности гетероцикла и характером модификации конденсированной ароматической системы, что способствует реализации разного рода межмолекулярных взаимодействий. Для установления взаимосвязи между строением молекул и их свойствами, в том числе хроматографическим удерживанием, в качестве дескрипторов молекулярной структуры выбраны топологические индексы – индексы связанности и индексы Винера, которые коррелируют с различными физико-химическими характеристиками и свойствами молекул, что позволяет использовать их для идентификации и прогностических целей.

Рассчитаны значения индексов связанности с нулевого по четвёртый порядок и индексов Винера для 22 веществ. Показано, что значения топологических индексов закономерно возрастают при переходе от производных хинолина к производным пиридазино[4,5-с]хинолина, что отражает соответствующее увеличение объёма молекул. Установлено, что индексы связанности, в отличие от индекса Винера, способны различать структурные аналоги с ароматическим и насыщенным пиридиновым кольцом. Значения индексов уменьшаются по мере увеличения их порядка, что соответствует закономерностям изменения топологических индексов других гетероциклических соединений. Анализ инкрементов индексов связанности продемонстрировал аддитивность топологических вкладов заместителей, при этом вклады метоксигруппы и пиридазинового фрагмента практически совпадают в различных структурных рядах. Изучена взаимосвязь между значениями топологических индексов и физико-химическими характеристиками исследованных соединений.

Исследовано влияние топологии молекул на их удерживание в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии на октадецилсиликагеле. Показано, что линейная корреляция между удерживанием и отдельными топологическими индексами для совокупности соединений трёх структурных рядов практически отсутствует.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Сравнительный анализ сорбционно-структурных корреляций производных хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина. *Бутлеровские сообщения*. 2026. Т.87. №8. С.18-29. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Сравнительный анализ сорбционно-структурных корреляций производных хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина. *Бутлеровские сообщения* А. 2026. Т.14. №3. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18/ROI-jbc-A/26-14-3-10 (Russian)

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

Alexander V. Kapitonov, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova. Comparative analysis of sorption-structural correlations of quinoline, tetrahydroquinoline and pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives. *Butlerov Communications* A. 2026. Vol.14. No.3. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18/ROI-jbc-A/26-14-3-10

Литература

- [1] R. Kaliszan. QSRR: quantitative structure-(chromatographic) retention relationships. *Chem. Rev.* **2007**. Vol.107. No.7. P.3212-3246. DOI: 10.1021/cr068412z
- [2] C. Lu, W. Guo, C. Yin. Quantitative structure-retention relationship study of the gas chromatographic retention indices of saturated esters on different stationary phases using novel topological indices. *Analytica Chimica Acta*. **2006**. Vol.561. No.1-2. P.96-102. DOI: 10.1016/j.aca.2005.12.058
- [3] M. Hakimi-nezhaad, M. Ghorbani. Differences between Wiener and modified Wiener indices. *Journ. Mathem. Nanoscience*. **2014**. Vol.4. No.1. P.19-25. DOI: 10.22061/jmns.2014.479
- [4] B. Testa, L. B. Kier. The concept of molecular structure in structure-activity relationship studies and drug design. *Medicinal Research Reviews*. **1991**. Vol.11. No.1. P.35-48. DOI: 10.1002/med.2610110104
- [5] A. Ali, N. Trinajstić. A novel/old modification of the first Zagreb index. *Molecular Informatics*. **2018**. Vol.37. No.6-7. P.1800008. DOI: 10.1002/minf.201800008
- [6] Химические приложения топологии и теории графов. Под ред. Р. Кинга. Москва: Мир. **1987**. 568с. [Chemical applications of topology and graph theory. Ed. R. King. Moscow: Mir. **1987**. 568p. (Russian)]
- [7] Маткина З.О., Некрасова Н.А., Савченкова А.С., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Особенности топологии производных 4-амино- и -карбоксихинолинов. *Бутлеровские сообщения*. **2017**. Т.52. №11. С.26-34. ROI: jbc-01/17-52-11-26 [Z.O. Matkina, N.A. Nekrasova, A.S. Savchenkova, S.V. Kurbatova, M.N. Zemtsova. Topology features of the 4-amino- and -carboxyquinolines derivatives. *Butlerov Communications*. **2017**. Vol.52. No.11. P.26-34. ROI: jbc-01/17-52-11-26 (Russian)]
- [8] Рыжкин С.А., Капитонов А.В., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Сорбция производных 1,2,3,4-тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина в условиях ОФ ВЭЖХ. *Журнал физической химии*. **2024**. Т.98. №10. С.132-140. [S.A. Ryzhkin, A.V. Kapitonov, S.V. Kurbatova, M.N. Zemtsova. Sorption of 1,2,3,4-tetrahydroquinoline and pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives under conditions of reversed-phase high-performance liquid chromatography. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. **2024**. Vol.98. №10. P.2346-2354. DOI: 10.1134/S0036024424701516 (Russian)]
- [9] Капитонов А.В., Рыжкин С.А., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Влияние строения производных пиридазино[4,5-с]хинолина и хинолина на их сорбцию на октадецилсиликагеле. *Журнал физической химии*. **2025**. Т.99. №9. С.1403-1410. [Kapitonov A.V., Ryzhkin S.A., Kurbatova S.V., Zemtsova M.N. Effect of the structures of pyridazino[4,5-c]quinoline and quinoline derivatives on their sorption by octadecyl silica gel. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. **2025**. Vol.99. No.8. P.1903-1910. DOI: 10.1134/S0036024425701316 (Russian)]
- [10] J.A. Joule, K. Mills. Heterocyclic Chemistry. 5th ed. A John Wiley & Sons, Ltd., Publication. **2010**. 689p.
- [11] M. Randić. Novel shape descriptors for molecular graphs. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2001**. Vol.41. No.3. P.607-613. DOI: 10.1021/ci0001031
- [12] N. Shrestha. Detecting multicollinearity in regression analysis. *American Journal of Applied Mathematics and Statistics*. **2020**. Vol.8. No.2. P.39-42. DOI: 10.12691/ajams-8-2-1
- [13] J. L. Mokrosz. Topological Indices in Correlation Analysis. Part 1. Comparison of Molecular Shape with Molecular Connectivity for Some Hydrocarbons. *Quantitative Structure-Activity Relationships*. **1989**. Vol.8. No.4. P.305-309. DOI: 10.1002/qsar.19890080407
- [14] Джабиева С.А., Курбатова С.В., Колосова Е.А. Влияние топологии молекул производных бензотриазола на их хроматографическое удерживание в условиях ОФ ВЭЖХ. *Журнал структурной химии*. **2017**. Т.58. №3. С.480-489. DOI: 10.15372/JSC20170305
- [15] M. Jaroniec. Partition and displacement models in reversed-phase liquid chromatography with mixed eluents. *Journal of Chromatography A*. **1993**. Vol.656. No.1-2. P.37-50. DOI: 10.1016/0021-9673(93)80796-B
- [16] Доломатов М.Ю., Аубекеров Т.М., Коледин О.С., Ковалева Э.А., Ахтямова К.Р., Вагапова Э.В. Модель QSPR для прогноза динамической вязкости арен по топологическим характеристикам молекул. *Бутлеровские сообщения*. **2020**. Т.62. №6. С.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/20-62-6-1 [M.Y. Dolomatov, T.M. Aubekero, O.S. Koledin, E.A. Kovaleva, K.R. Akhtyamova, E.V. Vagapova. QSPR model for the forecast of dynamic viscosity of arenas by the topological characteristics of molecules. *Butlerov Communications*. **2020**. Vol.62. No.6. P.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/20-62-6-1 (Russian)]
- [17] Alexander V. Kapitonov, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova. Comparative analysis of sorption-structural correlations of quinoline, tetrahydroquinoline and pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives. *Butlerov Communications A*. **2026**. Vol.14. No.3. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18/ROI-jbc-A/26-14-3-10
- [18] Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Сравнительный анализ сорбционно-структурных корреляций производных хинолина, тетрагидрохинолина и пиридазино[4,5-с]хинолина. *Бутлеровские сообщения A*. **2026**. Т.14. №3. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18/ROI-jbc-A/26-14-3-10 (Russian)

The English version of the article has been published in the international edition of the journal

Butlerov Communications A
Advances in Organic Chemistry & Technologies

The Reference Object Identifier – ROI-jbc-A/26-14-3-10

The Digital Object Identifier – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-18/ROI-jbc-A/26-14-3-10

Comparative analysis of sorption-structural correlations of quinoline, tetrahydroquinoline and pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives

Alexander V. Kapitonov, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova*[†]

*Department of Physical Chemistry and Chromatography. Samara National Research University.
Acad. Pavlov St., 1. Samara, 443011. Russia. Fax: +7 (846) 334-54-17. E-mail: curbatsv@gmail.com*

*Supervising author; [†]Corresponding author

Keywords: topology, topological indices, connectivity indices, degeneration of topological indices, heteroatoms, heterocycles, retention factor, reversed-phase liquid chromatography, structure-property relationship.

Abstract

The results of the topological features study of quinoline, tetrahydroquinoline, and pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives are presented. The structures of the selected study objects differ in the nature and position of the substituents at positions 2, 4, and 6 of the quinoline ring, the degree of saturation of the heterocycle, and the nature of the modification of the condensed aromatic system, which facilitates various types of intermolecular interactions. To establish the relationship between the structure of molecules and their properties, including chromatographic retention, topological indices – connectivity indices and Wiener indices – were selected as molecular structure descriptors. These indices correlate with various physicochemical characteristics and properties of molecules, enabling their use for identification and prognostic purposes.

Connectivity indices from zero to fourth order and Wiener indices were calculated for 22 substances. It was shown that the values of topological indices increase consistently upon moving from quinoline derivatives to pyridazino[4,5-c]quinoline derivatives, reflecting a corresponding increase in molecular volume. It was established that the connectivity indices, unlike the Wiener index, are capable of distinguishing structural analogs with an aromatic and saturated pyridine ring. Index values decrease with increasing order, which is consistent with the patterns of change in the topological indices of other heterocyclic compounds. Analysis of connectivity index increments demonstrated the additivity of the topological contributions of the substituents, with the contributions of the methoxy group and the pyridazine fragment virtually identical across different structural series. The relationship between the values of topological indices and the physicochemical characteristics of the studied compounds was studied.

The influence of molecular topology on their retention under reversed-phase high-performance liquid chromatography on octadecyl silica gel was investigated. It is shown that the linear correlation between retention and individual topological indices for a set of compounds of three structural series is practically absent.