

Влияние состава элюента на сорбцию производных хинолина в условиях ОФ ВЭЖХ на октадецилсиликагеле

© Капитонов¹ Александр Владиславович, Курбатова^{1*+} Светлана Викторовна, Земцова² Маргарита Николаевна, Гудкова² Маргарита Михайловна

¹ Кафедра физической химии и хроматографии. 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

² Кафедра органической химии. Самарский государственный технический университет. ул. Куйбышева, 153. г. Самара, 443010. Россия. Факс: + 7 (846) 332-21-22.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: модели удерживания, состав подвижной фазы, октадецилсиликагель, производные хинолина, фактор удерживания, обращенно-фазовая высокоэффективная жидкостная хроматография, модели Снайдера – Сочевинского, модель Скотта – Кучеры.

Аннотация

В работе исследовано влияние состава водно-ацетонитрильного элюента на удерживание трёх структурно близких производных хинолина, содержащих фрагмент 3Н-1,3,4-оксадиазол-2-тиона, в условиях обращенно-фазной высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ) на октадецилсиликагеле. Показано, что удерживание производных хинолина имеет смешанный характер: наряду с классическим гидрофобным взаимодействием существенное влияние на удерживание оказывают специфические взаимодействия с компонентами подвижной фазы. Установлено, что характер зависимости удерживания от концентрации органического модификатора определяется не только гидрофобностью молекул, но и природой заместителей в хинолиновом ядре, их способностью к образованию водородных связей и сольватации в подвижной фазе. Показано, что полярные функциональные группы (в частности, гидроксильная) резко снижают взаимодействие сорбата со стационарной фазой при высоком содержании ацетонитрила (>50%), в то время как при пониженной концентрации органического модификатора наблюдается значительный рост удерживания за счёт усиления гидрофобного эффекта. Количественный анализ с использованием уравнений Снайдера – Сочевинского и Скотта – Кучеры подтвердил, что поведение соединений в хроматографической системе обусловлено комплексным вкладом геометрических, термодинамических и сольватационных факторов. На основании полученных корреляционных зависимостей установлено, что модели Снайдера – Сочевинского и Скотта – Кучеры обеспечивают оптимальные результаты аппроксимации зависимости удерживания исследованных производных хинолина на октадецилсиликагеле от концентрации модификатора, обеспечивая оптимальный баланс высоких коэффициентов корреляции и физически обоснованной интерпретации параметров для описания удерживания производных хинолина. Таким образом, показано, что варьирование состава элюента позволяет целенаправленно управлять селективностью и эффективностью разделения структурных аналогов хинолина, что имеет практическое значение для разработки методик количественного анализа фармацевтических препаратов и контроля окружающей среды.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Капитонов А.В., Курбатова С.В., Земцова М.Н., Гудкова М.М. Влияние состава элюента на сорбцию производных хинолина в условиях ОФ ВЭЖХ на октадецилсиликагеле. *Бутлеровские сообщения*. 2026. Т.87. №8. С.30-40. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Капитонов А.В., Курбатова С.В., Земцова М.Н., Гудкова М.М. Влияние состава элюента на сорбцию производных хинолина в условиях ОФ ВЭЖХ на октадецилсиликагеле. *Бутлеровские сообщения А*. 2026. Т.14. №3. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30/ROI-jbc-A/26-14-3-11 (Russian)

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

Alexander V. Kapitonov, Svetlana V. Kurbatova, Margarita N. Zemtsova, Margarita M. Gudkova. The influence of the eluent composition on the sorption of quinoline derivatives under RP HPLC conditions on octadecyl silica gel. *Butlerov Communications A*. 2026. Vol.14. No.3. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30/ROI-jbc-A/26-14-3-11

Литература

- [1] E. Soczewiński. Mechanistic molecular model of liquid–solid chromatography: Retention–eluent composition relationships. *Journal of Chromatography A*. **2002**. Vol.965. No.1-2. P.9-116. DOI: 10.1016/S0021-9673(01)01278-X
- [2] E. Soczewiński, C.A. Wachtmeister. The relation between the composition of certain ternary two-phase solvent systems and RM values. *Journal of Chromatography A*. **1962**. Vol.7. P.311-320. DOI: 10.1016/S0021-9673(01)86422-0
- [3] L.R. Snyder. The linear-solvent-strength model of gradient elution. *Advances in Chromatography*. CRC Press. **2021**. P.115-187. DOI: 10.1201/9781003210313-4
- [4] P. Jandera, J. Churáček, J. Čáslavský Liquid chromatography on unmodified and modified Spheron gels III. Phenolic compounds. *Chromatographia*. **1981**. Vol.14. No.2. P.100-106. DOI: 10.1007/BF02279520.
- [5] C. Lepont, A.D. Gunatillaka. Retention characteristics of porous graphitic carbon in reversed-phase liquid chromatography with methanol–water mobile phases. *Analyst*. **2001**. Vol.126. No.8. P.1318-1325. DOI: 10.1039/b102719k
- [6] B.R. Saifutdinov, A.K. Buryak. Thermodynamic characteristics and selectivity of the liquid-phase adsorption of aromatic compounds on hypercrosslinked polystyrene networks with ultimate-high crosslinking densities by data of liquid chromatography. *Int. J. Mol. Sci.* **2024**. Vol.25. Art.1551. DOI:10.3390/ijms25031551
- [7] S. Bocian, B. Buszewski. Residual silanols at reversed-phase silica in HPLC—a contribution for a better understanding. *Journal of Separation Science*. **2012**. Vol.35. No.10-11. P.1191-1200. DOI: 10.1002/jssc.201200055
- [8] F. Gritti, G. Guiochon. Effect of the density of the C18 surface coverage on the adsorption mechanism of a cationic compound and on the silanol activity of the stationary phase in reversed phase liquid chromatography. *Journal of Chromatography A*. **2006**. Vol.1132. No.1-2. P.51-66. DOI: 10.1016/j.chroma.2006.07.002
- [9] B.R. Saifutdinov. The effect of the nature of binary water–organic solvents on thermodynamic characteristics of adsorption of aromatic compounds on hyper-cross-linked polystyrene. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. **2016**. Vol.52. No.6. P.979-985. DOI: 10.1134/S2070205116060162
- [10] K. Jerie, A. Baranowski, S. Koziol, *et al.* Structure of water–acetonitrile solutions from acoustic and positron annihilation measurements. *Chem. Phys.* **2005**. Vol. 309. P.277-282. DOI: 10.1016/j.chemphys.2004.09.015.
- [11] O.O. Ajani, K.T. Iyaye, O.T. Ademosun. Recent advances in chemistry and therapeutic potential of functionalized quinoline motifs—a review. *RSC Advances*. **2022**. Vol.12. No.29. P.18594-18614. DOI: 10.1039/d2ra02896d
- [12] 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 [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. (Russian)].
- [13] Хуснутдинова А.Р., Капитонов А.В., Рыжкин С.А., Курбатова С.В. Сорбция производных хинолина на октадецилсиликагеле в условиях жидкостной хроматографии. *Бутлеровские сообщения*. **2023**. Т.75. №9. С.1-11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-75-9-1 [Albina R. Khusnutdinova, Alexander V. Kapitonov, Semyon A. Ryzhkin, Margarita N. Zemtsova, Svetlana V. Kurbatov. Sorption of quinoline derivatives on octadecyl silica gel under liquid chromatography conditions. *Butlerov Communications A*. **2023**. Vol.6. No.3. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-A/23-6-3-8 (Russian)].
- [14] Лисичкин Г.В., Фадеев А.Ю., Сердан А.А. и др. Химия привитых поверхностных соединений. Под ред. Г.В. Лисичкина. Москва: ФИЗМАТЛИТ. **2003**. 592с. [G.V. Lisichkin, A.Yu., Fadeev, A.A. Serdan, *et al.* Chemistry of grafted surface compounds. Ed. G.V. Lisichkin. Moscow: FIZMATLIT. **2003**. 592 p.]
- [15] Пономарев Ф.В., Долгонос А.М. Теоретическое описание трех основных механизмов удерживания в обращенно-фазовой ВЭЖХ на примере молекул нафталина, урацила и фенола. *Сорбционные и хроматографические процессы*. **2018**. Т.18. №5. С.646-658. DOI: 10.17308/sorpchrom.2018.18/591 [F.V. Ponomarev, A.M. Dolgonosov. Theoretical description of three main retention mechanisms in reversed-phase HPLC using the example of naphthalene, uracil and phenol molecules. *Sorption and chromatographic processes*. **2018**. Vol.18. No.5. P. 646-658. DOI: 10.17308/sorpchrom.2018.18/591 (Russian).]
- [16] K.H. Row. Comparison of retention models for the dependence of retention factors on mobile phase composition in reversed-phase high-performance liquid chromatography. *Journal of Chromatography A*. **1998**. Vol.797. No.1-2. P.23-31.
- [17] A. Steinhoff, A. Hölzel, U. Tallarek. Mobile-phase contributions to analyte retention and selectivity in reversed-phase liquid chromatography: 2. Solute-specific effects. *J. Phys. Chem.* **2025**. Vol.129. P.6401-6418. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c01697
- [18] Ядрова А.А., Шафигулин Р.В., Буланова А.В. Изучение влияния состава и природы элюента на сорбцию бензимидазола и его производных на сверхсшитом полистироле методом ВЭЖХ. *Бутлеровские*

- Полная исследовательская публикация** Капитонов А.В., Курбатова С.В., Земцова М.Н., Гудкова М.М. *сообщения*. **2019**. Т.58. №5. С.75-80. ROI: jbc-01/19-58-5-75 [Anastasia A. Yadrova, Roman V. Shafigulin, Andzhela V. Bulanova. Study the effect of eluent composition on benzimidazole and its derivatives retention on hypercrosslinked polystyrene. *Butlerov Communications*. **2019**. Vol.58. No.5. P.75-80. ROI: jbc-01/19-58-5-75 (Russian)]
- [19] Alexander V. Kapitonov, Svetlana V. Kurbatova, Margarita N. Zemtsova, Margarita M. Gudkova. The influence of the eluent composition on the sorption of quinoline derivatives under RP HPLC conditions on octadecyl silica gel. *Butlerov Communications A*. **2026**. Vol.14. No.3. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30/ROI-jbc-A/26-14-3-11 (Russian).
- [20] Капитонов А.В., Курбатова С.В., Земцова М.Н., Гудкова М.М. Влияние состава элюента на сорбцию производных хинолина в условиях ОФ ВЭЖХ на октадецилсиликагеле. *Бутлеровские сообщения A*. **2026**. Т.14. №3. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30/ROI-jbc-A/26-14-3-11)

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/26-14-3-11

The Digital Object Identifier – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-30/ROI-jbc-A/26-14-3-11

The influence of the eluent composition on the sorption of quinoline derivatives under RP HPLC conditions on octadecyl silica gel

Alexander V. Kapitonov,¹ Svetlana V. Kurbatova,^{1,*+}

Margarita N. Zemtsova,² Margarita M. Gudkova²

¹ 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

² Department of Organic Chemistry. Samara State Technical University. Kuibysheva St., 153. Samara, 443010. Russia. Fax: +7 (846) 332-21-22.

*Supervising author; +Corresponding author

Keywords: retention models, mobile phase composition, octadecyl silica gel, quinoline derivatives, retention factor, reversed-phase high-performance liquid chromatography, Snyder – Sochevinsky model, Scott – Kucera model.

Abstract

This study investigated the effect of the aqueous acetonitrile eluent composition on the retention of three structurally related quinoline derivatives containing the 3H-1,3,4-oxadiazole-2-thione moiety under reversed-phase high-performance liquid chromatography (RP HPLC) conditions on octadecyl silica gel. It was demonstrated that the retention of quinoline derivatives has a mixed nature: in addition to classical hydrophobic interactions, specific interactions with mobile phase components significantly influence retention. It was established that the nature of the retention dependence on the concentration of the organic modifier is determined not only by the hydrophobicity of the molecules but also by the nature of the substituents in the quinoline core, their ability to form hydrogen bonds and undergo solvation in the mobile phase. Polar functional groups (particularly hydroxyl) were shown to significantly reduce the interaction of the sorbate with the stationary phase at high acetonitrile contents (>50%), while at reduced organic modifier concentrations, a significant increase in retention was observed due to an enhanced hydrophobic effect. Quantitative analysis using the Snyder-Sochevinsky and Scott-Kuchera equations confirmed that the behavior of compounds in a chromatographic system is determined by the complex contribution of geometric, thermodynamic, and solvation factors. Based on the obtained correlation dependences, it was established that the Snyder-Sochevinsky and Scott-Kuchera models provide optimal results for approximating the retention dependence of the studied quinoline derivatives on octadecyl silica gel on the modifier concentration, ensuring an optimal balance of high correlation coefficients and a physically sound interpretation of the parameters for describing the retention of quinoline derivatives. Thus, it has been shown that varying the composition of the eluent allows for targeted control of the selectivity and efficiency of separation of structural analogues of quinoline, which is of practical importance for the development of methods for the quantitative analysis of pharmaceuticals and environmental monitoring.