

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 6-9-4-26 Подраздел: Квантовая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 543.544.5.068.7:544.032.76. Поступила в редакцию 28 декабря 2006 г.

Квантово-химический расчет селективности для нормально-фазовой ВЭЖХ на примере соединений с кратными связями

© Григорьев Андрей Михайлович,¹ Рудакова Людмила Васильевна²
и Рудаков Олег Борисович^{3*+}

¹ Лаборатория готовых лекарственных форм и физ.-хим. методов анализа. ФГУП «Белгородский государственный НИИ технологий медицинской промышленности». Ул. Мичурина, 39а. г. Белгород, 308002. Россия. Тел.: (910) 323-60-74. E-mail: chrzond@bel.ru

² Кафедра фармацевтической, токсикологической и аналитической химии. Воронежская государственная медицинская академия. Ул. Студенческая, 10. г. Воронеж, 394000. Россия. Тел.: (473) 208185. E-mail: robi@ytmail.ru

³ Кафедра химии. Воронежский государственный архитектурно-строительный университет. Ул. 20-летия Октября, 84. г. Воронеж, 394006. Россия. Тел.: (4732) 36-93-50. E-mail: robi@ytmail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нормально-фазовая высокоэффективная жидкостная хроматография, водородная связь, метод АМ1, базисные функции STO-3G и 6-31G*, непредельные третичные спирты, халконы, полиеновые соединения, конформации, селективность, линейная корреляция.

Аннотация

На примере непредельных третичных спиртов, халконов, полиеновых соединений показано, что селективность, наблюдаемая в условиях нормально-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии, может быть оценена на основании квантово-химического расчета структурных характеристик молекул сорбатов и модельных водородных связей между ними и поверхностью сорбента без привлечения измеряемых физико-химических характеристик и инкрементных моделей. Получена линейная корреляция между конформационными характеристиками геометрических изомеров и селективностью.