

Влияние топологии молекул на сорбцию производных бензотриазола на поверхности гиперкарба и сверхсшитого полистирола

© Джабиева Сара Али кызы, Муздина Кристина Александровна,

Курбатова*⁺ Светлана Викторовна и Колосова Елена Александровна

Кафедра физической химии и хроматографии. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. Ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия.

E-mail: curbatsv@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топология, топологические индексы, индексы Рандича, бензотриазолы, корреляции, фактор удерживания, сверхсшитый полистирол, пористый графитированный углерод.

Аннотация

Исследовано хроматографическое удерживание производных бензотриазола в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии из водноацетонитрильных растворов на поверхности сверхсшитого полистирола и пористого графитированного углерода (гиперкарба). Высказано предположение о возможной роли топологии молекул сорбатов при их сорбции на плоской поверхности указанных сорбентов. Для установления влияния топологии на хроматографическое удерживание рассчитаны значения топологических индексов (индексов связанности, или индексов Рандича, а также индексов Винера) для 16 производных бензотриазола. Расчет индексов Винера осуществлен разными способами – по известным уравнениям, а также с использованием реальных длин связей в молекулах и с помощью компьютерной программы. Проанализированы закономерности изменения топологических индексов с изменением строения молекул производных бензотриазола. Продемонстрировано уменьшение значений индексов связанности с ростом их порядка, вызванное геометрической и топологической удаленностью атомов друг от друга при возрастании порядка связанности установлено, что для изомерных соединений индексы связанности оказываются вырожденными, однако с ростом порядка топологического индекса вырождение снимается, увеличивая, таким образом, дискриминирующую способность индексов связанности к изомерам производных бензотриазола.

Квантовохимически рассчитаны физико-химические характеристики этих соединений, определяющие удерживание в условиях обращеннофазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (поляризуемость, объем, площадь поверхности, дипольный момент). Исследована взаимосвязь между этими физико-химическими параметрами и топологическими индексами. Показана симбатность в изменении топологических индексов и размерных характеристик молекул – объема и площади поверхности. Исследованы корреляции между топологическими индексами и значениями фактора удерживания исследованных соединений на сверхсшитом полистироле и гиперкарбе. Получены значения корреляционных коэффициентов соответствующих уравнений. и установлена взаимосвязь между физико-химическими свойствами, топологическими и хроматографическими характеристиками некоторых производных бензотриазола. Показано, что уровень корреляций определяется порядком использованных индексов связанности, типом коррелируемого параметра и составом элюента, использованного в хроматографической системе.