

Особенности топологии производных 4-амино- и -карбоксихинолинов

© Матькина¹ Злата Олеговна, Некрасова¹ Надежда Андреевна,
Савченкова¹ Анна Сергеевна, Земцова² Маргарита Николаевна
и Курбатова^{1*+} Светлана Викторовна

¹ Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева,
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. E-mail: curbatsv@gmail.com

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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топология, топологические индексы, индексы связанности, индексы Винера, 4-аминохинолин, 4-карбоксихинолин, обращенно-фазовая высокоэффективная жидкостная хроматография, пористый графитированный углерод, сверхсшитый полистирол.

Аннотация

Приведены результаты исследования особенностей топологии производных 4-амино- и 4-карбоксихинолинов. Строение выбранных объектов исследования отличается природой функциональной группы и заместителей в положениях 2 и 6, что способствует реализации разнообразных видов межмолекулярных взаимодействий. Для установления взаимосвязи между строением и свойствами, в том числе хроматографическим удерживанием в качестве дескрипторов молекулярной структуры выбраны топологические индексы (индексы связанности и индексы Винера), которые, как известно, коррелируют с различными физико-химическими характеристиками и свойствами молекул, что позволяет использовать их для идентификации и прогностических целей.

Рассчитаны значения индексов связанности и индексов Винера для 15 производных хинолина. Показано, что для исследованных соединений значения топологических индексов изменяются в сравнительно широких пределах. При этом увеличение количества атомов в молекуле сопровождается ростом значений индексов, а замена атомов углерода на гетероатомы – уменьшением соответствующих величин. Изучена взаимосвязь между топологическими и электронными характеристиками производных хинолина. Установлено, что топологические индексы хорошо коррелируют с размерными физико-химическими характеристиками производных хинолина, однако, уровень таких корреляций оказывается различным для разных индексов, ИС разных порядков и определяется, прежде всего, строением молекул аналитов. Выяснено, что максимальные значения коэффициента регрессии соответствуют корреляциям между поляризуемостью, площадью поверхности, объемом молекул производных хинолина и ИС нулевого порядка (${}^0\chi$). Повышение порядка ИС приводит к существенному снижению значения корреляционного коэффициента. Исследовано влияние топологии молекул этих соединений на их удерживание в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии при использовании неполярных сорбентов различной химической природы. Продемонстрировано, что наиболее существенным оказывается влияние топологии молекул на удерживание плоской поверхностью пористого графитированного углерода. На основании хорошего уровня таких корреляций высказано предположение о прогностических возможностях полученных зависимостей, которые могут быть использованы для предсказания удерживания производных хинолина.