

Сорбционные и топологические характеристики производных таурина

© Тырина Екатерина Владимировна и Курбатова*⁺ Светлана Викторовна

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: количественные соотношения «структура – свойство», производные таурина, высокоэффективная жидкостная хроматография, сверхсшитый полистирол, пористый графитированный углерод, октадецилсиликагель, водноацетонитрильный раствор, топологические индексы.

Аннотация

Приведены результаты исследования производных таурина методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с использованием в качестве элюента смеси вода – ацетонитрил и неполярных сорбентов различной химической природы (октадецилсиликагель, сверхсшитый полистирол, пористый графитированный углерод) в рамках установления количественных соотношений «структура – свойство» и «структура – хроматографическое удерживание». Отмечено, что установление количественных соотношений “структура – свойство” создает предпосылки прогнозирования многих практически значимых свойств и, таким образом, формирует основу для создания новейших материалов заданной структуры с нужным комплексом свойств. Выбор в качестве объектов исследования производных таурина обусловлен их широким использованием в качестве лекарственных препаратов, в то же время отмечено, что физико-химические свойства этих соединений изучены в недостаточной степени, мало данных о хроматографическом поведении этих соединений. В работе исследовано влияние строения молекул производных таурина на хроматографическое удерживание в условиях обращено-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. Показано влияние природы заместителей, связанных с сульфогруппой в молекулах производных таурина, определяющее в конечном итоге особенности их хроматографического поведения. Исследовано влияние природы сорбента на удерживание этих веществ. В целом для исследованных производных таурина значения фактора удерживания оказались минимальными при сорбции на ОДС и существенно увеличивались при переходе к ССПС и ПГУ. При этом отмечена симбатность в изменении значений фактора удерживания, поляризуемости и объема, характерная для всех использованных сорбентов. Рассчитаны топологические индексы производных таурина, показана их тесная взаимосвязь с физико-химическими параметрами молекул исследованных веществ.