

## Влияние природы растворителя на физико-химические характеристики производных хинолина

© Щербаков<sup>1</sup> Владимир Вадимович, Курбатова<sup>1\*+</sup> Светлана Викторовна  
и Земцова<sup>2</sup> Маргарита Николаевна

<sup>1</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева.  
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. E-mail: [curbatsv@gmail.com](mailto:curbatsv@gmail.com)

<sup>2</sup> Самарский государственный технический университет  
ул. Куйбышева, 153. г. Самара, 443010. Россия.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** производные хинолина, водноорганические растворы, энергия сольватации, дипольный момент, площадь полярной поверхности молекул, зависимость свойств от природы растворителя.

### Аннотация

Исследовано влияние природы растворителя на некоторые физико-химические параметры молекул производных хинолина. Отмечено, что разнообразие межмолекулярных взаимодействий, возникающих между растворенным веществом и растворителем и часто сопровождаемых явлениями сольватации, ассоциации и т.п., приводит к разнообразным структурным и энергетическим изменениям в подобных системах и усложняющим их описание. К наиболее актуальным проблемам растворов отнесены вопросы, связанные с растворимостью и биодоступностью биологически активных соединений и лекарственных препаратов, исследованием их способности к растворению, проницаемости биологических барьеров, адресной доставке и тому подобное, а также проблемы, связанные с исследованием сорбции органических соединений из водноорганических элюентов, например, в условиях жидкостной хроматографии.

В качестве объектов исследования в работе использованы производные хинолина (4-карбокси- и 4-аминохинолина), известные как потенциальные лекарственные препараты с разнообразными видами фармакологического действия. С помощью квантово-химических расчетов определены значения дипольного момента amino- и карбоксипроизводных хинолина, проведено сопоставление данных, полученных для вакуума и в среде растворителей различной химической природы. Установлено существенное влияние полярности растворителя на величины дипольного момента растворенных в данных растворителях производных хинолина. Рассчитаны значения энергии сольватации производных хинолина в растворителях различной химической природы. Показано, что изменение величины энергии сольватации определяется как строением молекул производных хинолина, так и полярностью растворителя. Установлено нелинейное изменение величины энергии сольватации с изменением полярности растворителя. Проведено сопоставление значений площади полярной поверхности молекул производных хинолина в растворителях различной химической природы. Установлено, что площадь полярной поверхности исследованных соединений с изменением природы растворителя меняется незначительно.