

Сравнительный анализ удерживания производных хинолина различного строения в ОФ ВЭЖХ

© Холин¹ Андрей Юрьевич, Курбатова^{1*+} Светлана Викторовна
и Земцова² Маргарита Николаевна

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: производные хинолина, обращеннофазовая высокоэффективная жидкостная хроматография, октадецилсиликагель, влияние строения молекул и физико-химических параметров на удерживание.

Аннотация

Приведены результаты исследования влияния строения и физико-химических параметров производных хинолина различного строения на их удерживание в условиях обращеннофазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. Показано, что поскольку установление взаимосвязи структуры вещества с его свойствами до настоящего времени остается одной из наиболее важных проблем современной химии и материаловедения, весьма удобным и эффективным методом получения необходимой для этого информации является хроматография. Для установления взаимосвязи между строением и сорбционными характеристиками веществ используют, с одной стороны, параметры электронной структуры молекул сорбатов, их гидрофобные свойства, квантовохимические, топологические и другие физико-химические характеристики органических соединений, а также различные компьютерные программы и методы компьютерного моделирования, позволяющие анализировать и сопоставлять многочисленные данные по хроматографическому удерживанию соединений разнообразной химической природы, с другой. При этом для окончательных выводов о возможности применения получаемых зависимостей и корреляций для оценки и прогнозирования свойств новых соединений необходима значительная выборка соединений различного состава, с использованием которой получают соответствующие зависимости «структура – свойство».

К настоящему времени известны справочники и компьютерные базы данных по хроматографическому удерживанию органических соединений, содержащие информацию о достаточно большом числе объектов. Однако, эти базы, как правило, содержат информацию преимущественно об удерживании соединений в условиях газовой хроматографии. Соответствующие библиотеки и базы данных для жидкостной хроматографии практически отсутствуют, что, в первую очередь, связано с разнообразием жидкостнохроматографических систем, отличающихся как природой и составом неподвижных фаз и элюентов, так и условиями хроматографирования. Для условий жидкостной хроматографии возможность применения подобных схем осложнена существованием большего числа взаимодействий в хроматографической системе, обусловленных, прежде всего, присутствием активного элюента.

В работе показано, что подходящими моделями для этих целей являются гетероциклические соединения, особенностью которых является возможность модификации их свойств путем варьирования структуры в широких пределах. В работе исследовано влияние наличия гетероатомов, изменение положения одного и того же гетероатома в основном гетероциклическом фрагменте, наличие разнообразных по природе функциональных групп и заместителей на хроматографическое удерживание в условиях ОФ ВЭЖХ.