

## Влияние топологических и физико-химических параметров на удерживание производных бензимидазола в условиях газовой хроматографии

© Холин Андрей Юрьевич, Колосова Елена Александровна,  
Курбатова\*<sup>+</sup> Светлана Викторовна

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева.  
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Факс: +7 (846) 334-54-17. E-mail: curbatsv@gmail.com

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** газовая хроматография, индексы удерживания, неполярные неподвижные фазы, топологические индексы, индексы связанности, вырождение топологических индексов, гетероатомы, производные бензимидазола.

### Аннотация

Приведены результаты исследования хроматографического удерживания 15 новых производных бензимидазола в условиях газовой хроматографии с использованием кварцевой капиллярной колонки с неподвижной фазой HP 5MS (метилсилоксан, содержащий 5% фенильных радикалов). Рассчитаны значения логарифмических индексов удерживания этих соединений для данной неподвижной фазы, индексы связанности (индексы Рэндича) четырех порядков, а также некоторые физико-химические характеристики. Проанализировано изменение этих параметров в зависимости от строения молекул исследованных соединений. Установлен аномальный вклад метильной группы в удерживание, определяемый ее положением в бензимидазольном ядре и наличием иных функциональных групп в молекуле.

Показано, что основой для реализации прогностических возможностей газовой хроматографии при оценке удерживания азотистых гетероциклов является использование сорбционно-структурных корреляций. При этом корреляции подобного рода обусловлены пропорциональностью характеристик удерживания свободным энергиям взаимодействия сорбатов с сорбентами или неподвижными фазами. Показано, что физико-химическая природа корреляции величин удерживания с физико-химическими параметрами, по сути, представляет собой пропорциональность структурных вкладов сорбционного взаимодействия соответствующим изменениям внутренних энергий молекул сорбатов при вариациях их структуры. Этот же принцип лежит в основе применения в подобных корреляциях логарифмических индексов удерживания (индексов Ковача).

Обосновано существование корреляционных соотношений между индексами удерживания и топологическими параметрами производных бензимидазола. Установлено отсутствие строгой линейной зависимости величин индексов удерживания от значений мольного объема и поляризуемости молекул исследованных соединений при общей симбатности их изменения, что обусловлено проявлением межмолекулярных взаимодействий, дополнительных к дисперсионным. Показано, что уровень полученных корреляций оказывается различным в зависимости от коррелируемых параметров.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Холин А.Ю., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Влияние топологических и физико-химических параметров на удерживание производных бензимидазола в условиях газовой хроматографии. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.71. №7. С.41-50. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-7-41

или

Andrey Yu. Kholin, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova. Relationships between topological and physicochemical parameters of aromatic heterocycles. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.71. No.7. P.41-50. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-7-41 (Russian)