

Сравнительный топологический анализ ароматических гетероциклических соединений

© Дудукин Антон Алексеевич, Филатова Мария Витальевна,
Колосова Елена Александровна, Курбатова*⁺ 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; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топология, топологические индексы, индексы связанности, вырождение топологических индексов, гетероатомы, гетероциклы, фактор удерживания, обращенно-фазовая жидкостная хроматография, взаимосвязь строение – свойство.

Аннотация

Приведены результаты сравнительного анализа взаимосвязи топологических, физико-химических и сорбционных характеристик 47 производных азотистых ароматических гетероциклов. Для установления взаимосвязи между строением и свойствами этих соединений в качестве дескрипторов молекулярной структуры выбраны топологические индексы – индексы связанности пяти порядков, 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 с нулевого по пятый порядок для 47 производных 1,2,4-триазола, бензотриазола, 1,2,4-триазина и хинолина. Исследована взаимосвязь между значениями индексов связанности разных порядков и физико-химическими характеристиками этих соединений. Показано, что значения топологических индексов определяются как геометрическими и электронными параметрами молекул, так и природой гетероцикла, наличием и положением функциональных групп и заместителей в основном гетероциклическом фрагменте.

Показана симбатность в изменении значений индексов связанности, объема и поляризуемости молекул всех исследованных соединений вне зависимости от природы гетероцикла – соединения с максимальными значениями физико-химических параметров, как правило, характеризуются максимальными значениями индексов связанности всех порядков. При этом уровень соответствующих корреляций определяется значением порядка использованных индексов связанности и типом коррелируемого параметра. Проиллюстрирована дискриминирующая способность индексов связанности по отношению к разным классам соединений. Установлено отсутствие вырождения индексов связанности для различных классов гетероциклов при наличии вырождения некоторых индексов, преимущественно низших порядков, внутри отдельного класса гетероциклов.

Исследована взаимосвязь между значениями индексов связанности и фактора удерживания исследованных гетероциклических соединений на сверхсшитом полистироле в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии. Показаны существенные отклонения от линейной зависимости для исследованной таксономической группы гетероциклов и, таким образом, отсутствие строгой пропорциональности, что, вероятно, является следствием взаимодействия этих веществ с компонентами полярного элюента. Высказано предположение о том, что для получения уравнений соответствующих зависимостей с прогностическими целями необходимо в качестве дескрипторов этих уравнений использовать совокупность параметров, характеризующих различные аспекты геометрической и электронной структуры молекул, включая топологические индексы.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Дудукин А.А., Филатова М.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Сравнительный топологический анализ ароматических гетероциклических соединений. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.74. №6. С.63-74. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-6-63

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Дудукин А.А., Филатова М.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Сравнительный топологический анализ ароматических гетероциклических соединений. *Бутлеровские сообщения В*. 2023. Vol.5. No.2. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RB/23-5-2-12.