

## Влияние строения ароматических гетероциклов на их удерживание в высокоэффективной жидкостной хроматографии

© Чекулаев Михаил Владимирович, Алексеев Никита Кириллович,  
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:** высокоэффективная жидкостная хроматография, ароматические гетероциклы, производные 1,2,4-триазола, 1,2,4-триазина, бензотриазола, бензимидазола, фактор удерживания, взаимосвязь строение – свойство.

### Аннотация

Приведены параметры удерживания 40 производных 1,2,4-триазола, 1,2,4-триазина, бензотриазола и бензимидазола в условиях обращённо-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. В качестве неподвижной фазы использован октадецилированный силикагель, в качестве подвижной фазы – смесь воды и ацетонитрила в различных объёмных соотношениях.

Исследовано влияние на удерживание таких физико-химических параметров молекул, как объём, площадь поверхности, дипольный момент, поляризуемость и липофильность, рассчитанных с использованием компьютерной программы *HyperChem* версии 8.0 полуэмпирическим методом РМЗ с полной оптимизацией геометрии молекул. Поскольку основным типом взаимодействия молекул сорбата с неподвижной фазой в обращённо-фазовом варианте жидкостной хроматографии являются дисперсионные взаимодействия, основными параметрами, характеризующими эти взаимодействия, являются объём молекулы, поляризуемость и липофильность. Величина дипольного момента при этом определяет возможность взаимодействия молекул сорбата с компонентами полярного элюента. В работе показано, что в целом значения фактора удерживания исследованных соединений закономерно изменяются с изменением этих физико-химических величин. При этом в рядах близких по структуре веществ удерживание, как правило, возрастает с увеличением поляризуемости, объёма и липофильности. Присутствие различного числа атомов азота в молекулах исследованных веществ, а также наличие других гетероатомов приводит к нарушению подобной симбатности в изменении удерживания и физико-химических параметров для широкого круга исследованных соединений вследствие различного участия молекул разного строения во взаимодействиях с полярными компонентами элюента. Так, при переходе от производных триазола к производным триазина вместе с увеличением липофильности, поляризуемости и объёма молекул возрастает и дипольный момент, что существенно изменяет удерживание. Увеличение числа фенильных радикалов в молекулах соединений приводит к возрастанию всех параметров соответствующих молекул, и, таким образом, к значительному увеличению фактора удерживания вне зависимости от природы основного ароматического фрагмента. Таким образом, в целом корреляция между поляризуемостью, липофильностью, объёмом молекул и значениями фактора удерживания для широкой таксономической группы исследованных веществ не может быть аппроксимирована линейной зависимостью.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Чекулаев М.В., Алексеев Н.К., Курбатова С.В. Влияние строения ароматических гетероциклов на их удерживание в высокоэффективной жидкостной хроматографии. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №7. С.1-11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-1

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Чекулаев М.В., Алексеев Н.К., Курбатова С.В. Влияние строения ароматических гетероциклов на их удерживание в высокоэффективной жидкостной хроматографии. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.1. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-1/ROI-jbc-RA/24-8-3-1

### The output for citing the English online version of the article:

Mikhail V. Chekulaev, Nikita K. Alekseev, Svetlana V. Kurbatova. Influence of aromatic heterocycles structure for their retention in high-performance liquid chromatography. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.1. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-1/ROI-jbc-A/24-8-3-1