

**ВЗАИМОСВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО УДЕРЖИВАНИЯ
ОКСАДИАЗОЛИЛПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА**

А.В. Капитонов, С.В. Курбатова

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, Россия
alex_kapitonov90@mail.ru*

Исследована взаимосвязь между строением 1,3,4-оксадиазолилпроизводных хинолина и их хроматографическим удерживанием в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ) на октадецилсиликагеле из водно-ацетонитрильных растворов. Объектами исследования явились производные хинолина, содержащие оксадиазольный фрагмент в положении 4 хинолинового ядра, и заместители различной химической природы в положениях 2 и 6. Методом РМЗ была проведена оптимизация геометрии молекул оксадиазолсодержащих производных хинолина.

Анализ рассчитанных значений физико-химических параметров молекул показал, что переход от хинолина к его производным приводит к возрастанию всех физико-химических параметров сорбатов, за исключением липофильности и дипольного момента вещества с фрагментом 1,3,4-оксадиазол-2-тиона вместо 1,3,4-оксадиазола в положении 4, для которого эти значения оказываются меньшими, чем у хинолина, вероятно, за счет присутствия дополнительных атомов серы в заместителях в положениях 2 и 4. Влияние этих параметров на удерживание приводит к существенным различиям в значениях k аналитов в зависимости от природы заместителя в основном хинолиновом фрагменте, при этом диапазон изменения фактора удерживания лежит в пределах 0,11 - 11,73. В целом значения фактора удерживания этих соединений оказываются не соответствующими изменению их физико-химических характеристик.

Так, значения фактора удерживания веществ с метилом, гидроксилом или тиенилом в положении 2 оказываются меньшими не только по сравнению с незамещенным хинолином, но и по сравнению с удерживанием веществ, содержащих в этом положении пиридил, хлор- или фторфенил, метоксифенил, в то время как у 2-(2-циклопропил-6-бромхинолин-4-ил)-1,3,4-оксадиазола величина k резко возрастает. Также было установлено отсутствие прямой корреляции между параметрами, ответственными за дисперсионные взаимодействия с неполярным сорбентом (V , $\log P$, a) и удерживанием исследованных соединений при определяющей роли природы заместителей в положении 2 и наличия дополнительных гетероатомов: неполярные группы и поляризуемые атомы (Br) усиливают дисперсионные взаимодействия, полярные группы (OH) и гетероатомы (S) способствуют сольватации молекул сорбатов в объеме элюента [1].

Таким образом, хроматографическое поведение оксадиазолилпроизводных хинолина определяется комплексным взаимодействием стереохимических факторов (угол отклонения оксадиазола и заместителей от основного ядра) и физико-химических параметров (липофильность, площадь проекции, наличие гетероатомов).

Библиографические ссылки

1. Pagliara, A. Structural properties governing retention mechanisms on RP-HPLC stationary phases used for lipophilicity measurements / A. Pagliara, E. Khamis // J. Liq. Chrom. – 1995. – Vol. 18. – №. 9. – P. 1721-1745.