

ЗАВИСИМОСТЬ УДЕРЖИВАНИЯ ЦИКЛОАЛКИЛТИОФЕНОВ ОТ СТРОЕНИЯ ИХ МОЛЕКУЛ В УСЛОВИЯХ ОФ ВЭЖХ

Н.С. Емельянова, С.В. Курбатова, Б.Р. Сайфутдинов

ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»

443011 г. Самара, ул. Академика Павлова, д. 1. E-mail: emelyanova_ns@mail.ru

Циклоалкилтиофены представляют значительный теоретический и практический интерес как жидкокристаллические материалы, обладающие люминофорными свойствами [1, 2]. В связи с этим актуальной является задача разделения, полупрепаративного выделения и анализа сложных смесей впервые синтезированных циклоалкилтиофенов методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ).

Цель настоящей работы – изучение влияния строения молекул некоторых циклоалкилтиофенов на их удерживание в обращенно-фазовой (ОФ) ВЭЖХ.

Объектами исследования были 24 впервые синтезированных фенил-, циклопентенил-, циклогексенил-, гидроксид-, формил- и нитрил-циклоалкилтиофенов с общими формулами, представленными на рис. 1.



Рис. 1. Общие формулы исследованных циклоалкилтиофенов.

Эксперимент выполняли на жидкостном хроматографе “ProStar VARIAN INC.” с УФ-спектрофотометрическим детектором. В качестве сорбента использовали коммерческий модифицированный кремнезем Диасфер-110-С₁₆ с размером частиц 5 мкм, удельной поверхностью 310 м²/г. Элюирование проводили водно-ацетонитрильными смесями в изократическом режиме, расход подвижной фазы составлял 0.5 мл/мин.

Рассчитаны значения фактора удерживания, константы Генри адсорбции и разности дифференциальных молярных энергий сорбции Гиббса исследованных циклоалкилтиофенов в ОФ ВЭЖХ. Показано влияние типа и положения заместителя в тиофеновом цикле и числа тиофеновых циклов в молекуле сорбата на величины удерживания этих соединений. Проанализированы сорбционно-структурные корреляции в ряду циклоалкилтиофенов, получены зависимости параметров удерживания от дескрипторов молекулярной структуры исследованных веществ: ван-дер-ваальсового объема молекул, липофильности, площади поверхности, дипольного момента, а также топологических индексов.

Литература

1. Джоуль Дж., Миллс К. Химия гетероциклических соединений. М.: Мир, 2004. 728 с.
2. Demus D., Goodby J., Gray G., Spiess H.-W., Vill V. Handbook of liquid crystals. Weinheim, Wiley-VCH, 1998. V. 2A. 490 p.

Работа выполнена в рамках проекта № 02.740.11.0650 ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009-2013 гг.