

МЕХАНИЗМЫ СОРБЦИИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА В УСЛОВИЯХ ОФ ВЭЖХ

С.В. Прокопов, С.В. Курбатова

*Самарский государственный университет, кафедра общей химии и хроматографии,
г. Самара, 443011 Ул.Акад.Павлова, 1, Факс 846-3345417, e-mail curbatsv@ssu.samara.ru*

До настоящего времени актуальной задачей высокоэффективной жидкостной хроматографии остается выяснение механизмов удерживания сорбатов при различных условиях и установление влияния на сорбционный процесс различных параметров хроматографической системы. Решение этих задач позволит прогнозировать удерживание аналитов различной химической природы (в том числе впервые синтезированных) в зависимости от использованных условий хроматографирования в ВЭЖХ. В литературе представлены разнообразные полуэмпирические адсорбционные модели, устанавливающие зависимость между удерживанием сорбатов и составом бинарной подвижной фазы с приемлемой точностью.

Нами изучено хроматографическое поведение некоторых впервые синтезированных производных адамантана – амидразонов и триазолов – при различных составах водно-ацетонитрильной подвижной фазы. Полученные данные проанализированы с помощью адсорбционно-вытеснительных моделей Снайдера - Сочевинского, Скотта - Кучеры, квазихимических моделей Эльтекова и Ланина - Никитина. Обсуждены границы применимости этих моделей для исследованных хроматографических систем, а также возможные причины отклонений полученных экспериментальных данных от зависимостей, представленных в преречисленных моделях. Установлено, что хроматографическое поведение исследованных нами производных адамантана наилучшим образом может быть описано посредством квазихимической вытеснительной модели Ланина – Никитина, учитывающей влияние процессов ассоциации и сольватации в подвижной фазе на удерживание. При использовании уравнения Скотта - Кучеры наблюдается заметное отклонение от линейности при высоких (90% по объему) значениях концентрации органического модификатора в подвижной фазе.

Применение уравнения Снайдера - Сочевинского для анализа экспериментально полученных зависимостей позволило оценить количество молекул элюента, вытесняемых молекулами сорбатов с поверхности неподвижной фазы при сорбции. На основании сопоставления этих характеристик с данными, рассчитанными квантово-химическим методом, были сделаны предположения о преимущественной ориентации молекул исследованных соединений относительно поверхности неподвижной фазы во время сорбции. Оценена доля поверхности молекул сорбатов, принимающей участие в процессе сорбции. Выводы, сделанные на основании проведенного эксперимента, согласуются с представлениями сольвофобной теории Хорвата, а также с полученными ранее данными о преимущественном вкладе адамантанового каркаса в удерживание производных адамантана в ОФ ВЭЖХ.

Работа выполнена при поддержке проекта 02.740.11.0650» ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.