

УДК 539

**ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» В РЯДУ
АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ¹**Карасева И.Н., Курбатова С.В.

*Самарский университет
443011, г. Самара, ул. Ак. Павлова, д. 1
e-mail: irkaraseva@inbox.ru*

Исследование корреляционных зависимостей между структурой и свойствами соединений различной природы до настоящего времени остается одной из фундаментальных задач современных химии и материаловедения. Решение этой задачи базируется на создании и использовании значительных массивов данных о структуре и свойствах самых разнообразных классов химических соединений. Нами исследована взаимосвязь между строением, физико-химическими параметрами и сорбционными характеристиками производных 1,2,4-триазины, 1,2,4-триазола и 1,3-бензоксазола, имеющих важные с практической точки зрения свойства. С помощью квантовохимических расчетов определены значения поляризуемости, липофильности, дипольного момента и энергии сольватации 24 новых представителей класса азотистых гетероциклов. Показано влияние этих параметров на сорбционные характеристики, экспериментально полученные нами при исследовании сорбции указанных производных из водноацетонитрильных растворов на неполярных сорбентах различной химической природы – октадецилсиликагеле, сверхсшитом полистироле и пористом графитированном углероде – в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии. Установлены влияние стереохимии молекул сорбатов, особенностей сольватации в смеси вода – ацетонитрил, а также роль π -взаимодействий и «эффекта полярного» удерживания в сорбции данных веществ указанными сорбентами.

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках Госзадания, грант № 4.5883.2017/8.9