



## ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

Научная статья

УДК 543.544

doi: 10.17308/sorpchrom.2023.23/11320

### Оценка параметров липофильности производных 3,5-ди-трет-бутилпирокатехина методом ВЭЖХ с обращенной фазой

Татьяна Ивановна Куликова<sup>✉</sup>,

Ольга Владимировна Кузнецова, Максим Вячеславович Арсеньев

Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия,

kulik@iomc.ras.ru<sup>✉</sup>

**Аннотация.** Липофильность является одним из важных параметров, оказывающих влияние на биологическую активность соединений. На практике этот параметр оценивают с помощью коэффициента распределения ( $\log P$ ) соединения между неполярной фазой (н-октанол) и водой. Основным методом экспериментального определения  $\log P$  является метод встряхивания колбы. Однако, в случае плохой растворимости исследуемых соединений в воде определение  $\log P$  прямым методом затруднено, что связано со сложностью точного определения слишком низких концентраций. В этом случае для оценки  $\log P$  успешно применяют непрямые методы, в том числе жидкостную хроматографию. С помощью обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии в работе определена липофильность 12 новых производных 3,5-ди-трет-бутилпирокатехина. В качестве подвижной фазы была использована смесь метанол-вода, а в качестве адсорбента Separon Si C18. Известно, что производные пирокатехина обладают широким набором биологической активности, в последние годы, в частности, большое количество исследований посвящено изучению их антиоксидантных свойств. Для каждого производного 3,5-ди-трет-бутилпирокатехина (1-12) установлена линейная зависимость между фактором удерживания  $lgk$  и объемной долей органического модификатора  $\varphi$  в подвижной фазе. Экстраполяцией удерживания к  $\varphi = 0$  с помощью линейных зависимостей оценены значения  $lgk_0$  и рассчитаны параметры  $\log P$ . Обнаружено, что большинство изученных производных 3,5-ди-трет-бутилпирокатехинов имеют коэффициент распределения октанол/вода  $\log P$  в интервале от 6 до 8. Для соединений 1, 3 и 4 значения  $\log P$  оказались близкими к 4, что позволяет их рассматривать в качестве перспективных для дальнейшего изучения антиоксидантной активности. Дополнительно была проведена оценка параметров липофильности  $\log P$  производных 3,5-ди-трет-бутилпирокатехина (1-12) с помощью расчетных методов Kowwin и Molinspiration. Сопоставление экспериментальных и расчетных величин  $\log P$  показало хорошую сходимость результатов, при этом для большинства соединений наиболее близкие экспериментальные и расчетные значения показал метод Molinspiration (отклонение не превысило 10%).

**Ключевые слова:** липофильность, высокоэффективная жидкостная хроматография, обращенная фаза, стерически-затрудненные производные пирокатехина, параметры удерживания.

**Благодарности:** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках государственного задания, а также с использованием оборудования центра коллективного пользования «Аналитический центр ИМХ РАН» при поддержке гранта «Обеспечение развития материально-технической инфраструктуры центров коллективного пользования научным оборудованием» (Уникальный идентификатор RF---2296.61321X0017, Номер Соглашения 075-15-2021-670)

**Для цитирования:** Куликова Т.И., Кузнецова О.В., Арсеньев М.В. Оценка параметров липофильности производных 3,5-ди-трет-бутилпирокатехина методом ВЭЖХ с обращенной фазой // Сорбционные и хроматографические процессы. 2023. Т. 23, № 3. С. 405-412. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2023.23/11320>



Original article

## Estimation of lipophilicity parameters of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol by reverse phase HPLC

Tatyana I. Kulikova<sup>✉</sup>, Olga V. Kuznetsova, Maxim V. Arseniev

G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russian Federation, kulik@iomc.ras.ru<sup>✉</sup>

**Abstract.** Lipophilicity is one of the important parameters influencing the biological activity of compounds. In practice, this parameter is estimated using the distribution coefficient ( $\log P$ ) of the compound between the non-polar phase (*n*-octanol) and water. The main method of experimental determination of  $\log P$  is the shaking flask method. However, in the case of the poor solubility of the studied compounds in water, the determination of  $\log P$  using direct method is complicated, due to the difficulty of accurate determination of too low concentrations. In this case, indirect methods, including liquid chromatography, are successfully used for the estimation of  $\log P$ . The lipophilicity of 12 new derivatives of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol was determined using reverse-phase high-performance liquid chromatography. A methanol-water mixture was used as the mobile phase, and Separon Si C18 was used as the adsorbent. It is known that pyrocatechol derivatives have a wide range of biological activity; recently a large number of studies have been devoted to the investigation of their antioxidant properties. For each derivative of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol (1-12) a linear relationship between the retention factor  $\lg k$  and volume fraction of organic modifier  $\varphi$  in the mobile phase was established. By extrapolation of the retention to  $\varphi=0$  using linear dependences, the  $\lg k_0$  values were estimated and  $\log P$  parameters were calculated. It was found that most of the studied derivatives of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechols have an octanol/water distribution coefficient  $\log P$  in the range from 6 to 8. For compounds 1, 3, and 4  $\log P$  values turned out to be close to 4, which allows them to be considered as being promising for further study of antioxidant activity. Additionally, lipophilicity parameters  $\log P$  of derivatives of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol (1-12) were evaluated using the Kowwin and Molinspiration calculation methods. Comparison of experimental and calculated  $\log P$  values showed good convergence of the results, while for most compounds the closest experimental and calculated values were shown by the Molinspiration method (the deviation did not exceed 10%).

**Keywords:** lipophilicity, high performance liquid chromatography, reversed phase, sterically hindered pyrocatechol derivatives, retention parameters.

**Acknowledgments:** the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state order, studies were carried out using equipment of Shared Knowledge Centre "Analytical Centre of the G. A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry, Russian Academy of Sciences" with the support of the grant "Provision of the development of the facilities of centres for the collective use of scientific equipment" (Unique identifier RF ----2296.61321X0017, Agreement Number 075-15-2021-670)

**For citation:** Kulikova T.I., Kuznetsova O.V., Arseniev M.V. Estimation of lipophilicity parameters of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol by reverse phase HPLC. *Sorbtsionnye i khromatograficheskie protsessy*. 2023. 23(3): 405-412. (In Russ.). <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2023.23/11320>

### Введение

Одним из ключевых дескрипторов с четкой физико-химической интерпретацией, который активно используется для построения корреляционных соотношений «структура – свойство», является липофильность. Липофильность описывает распределение молекул растворенного

вещества между водой и несмешивающимся органическим растворителем (в подавляющем большинстве случаев рассматривается *n*-октанол). Количественно липофильность выражается в виде десятичного логарифма коэффициента распределения ( $\log P$ ) [1]. Экспериментальные методы определения липофильности делятся на прямые и косвенные [2-4]. В прямых экспериментальных



методах коэффициент распределения получают непосредственно из отношения равновесных концентраций соединения, распределенного между водной и органической фазами. Однако, эти методы имеют ряд недостатков, например, ограниченный диапазон применения, неустойчивость растворенных веществ, наличие межмолекулярной ассоциации [2]. Для устранения этих недостатков были разработаны не прямые экспериментальные методы оценки  $\log P$  с использованием корреляций, как правило, между коэффициентом удерживания соединения и его коэффициентом распределения. В качестве непрямого метода экспериментального определения липофильности активно привлекается высокоэффективная жидкостная хроматография с обращенной фазой (ОФ-ВЭЖХ) благодаря своей универсальности [2, 4-6]. Как правило, режим хроматографии с обращенной фазой используется для имитации октанола. Из широкого диапазона доступных стационарных фаз для оценки липофильности рекомендуется силикагель с привитыми C18-группами.

Известно [7-9], что пирокатехины демонстрируют высокую биологическую активность, проявляют антимикробные и антибактериальные свойства, выступают в качестве противоопухолевых и противовоспалительных агентов. Кроме того, производные 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина представляют собой интересные объекты для изучения с точки зрения гидрофобных, электронных и стерических свойств, а также водородных связей. Поскольку исследуемые в работе соединения имеют плохую растворимость в воде, определение  $\log P$  прямым методом затруднено. В связи с этим целью настоящей работы являлось определение параметра липофильности производных 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина методом обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии; а также установление основных закономерностей

влияния структуры на липофильность исследуемых соединений.

### Экспериментальная часть

Синтез соединений 1, 4-9, 11 и 12 (таблица 1) проводили по методике, описанной в работе [10], синтез соединений 2, 3 и 10 описан в работах [11-13], соответственно. Достоверность химического строения 1-12 подтверждена  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектрами. Исследования проводили на жидкостном хроматографе Knauer (Германия) со спектрофотометрическим детектором при длине волны ( $\lambda$ ) 254 nm. Стальная разделительная колонка размером 100x6 мм была заполнена сорбентом *Separon Si C18* («Tessek», Чехия), размер частиц 10  $\mu\text{m}$ . В качестве элюента использовались смеси метанол – вода в соотношениях 80:20, 85:15, 90:10 (об.%). Расход элюента составлял 1.5 см<sup>3</sup>/мин. Для определения мертвого объема хроматографической системы применяли нитрит натрия. Все измерения проводили при комнатной температуре. В качестве стандартов использовали коммерчески доступные реагенты: бензол, дифенилкетон, дифениламин, нафталин, дифенил, дибензил, дифенилацетилен, флуорен, антрацен, 1,4-ди-*трет*-бутилбензол, *n*-гексилбензол, диэтилбензол, гексаметилбензол [14]. Все использованные соединения имели квалификацию ч.д.а. или х.ч.

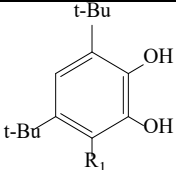
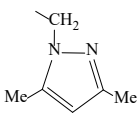
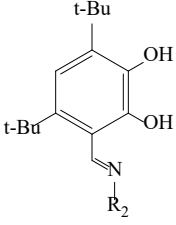
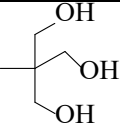
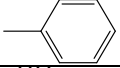
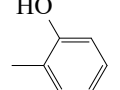
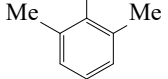
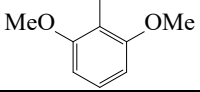
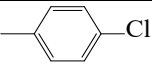
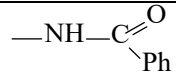
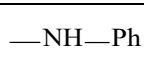
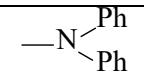
Факторы удерживания сорбатов рассчитывали по формуле (1):

$$k = \frac{t_R - t_M}{t_M}, \quad (1)$$

где  $t_R$  – время удерживания анализируемого вещества;  $t_M$  – мертвое время удерживания (время удерживания несорбирующегося вещества).

Хроматограммы обрабатывали с помощью программы МультиХром (версия 1.5). Статистический анализ и расчет параметров  $\log P$  для соединений 1-12 выполнены с помощью стандартного пакета программ «Statgraphics Plus». Расчеты

Таблица 1. Структуры производных 3,5-ди-*tert*-бутилпирокатехина 1-12  
 Table 1. Structures of 3,5-di-*tert*-butylpyrocatechol derivatives 1-12

Структура	№	R	Название
	1	H	3,5-ди- <i>tert</i> -бутилфенил-1,2-диол
	2		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-((3,5-диметил-1Н-пиразол-1-ил)метил)фенил-1,2-диол
	3	CH <sub>3</sub>	4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-((метилимино)метил)фенил-1,2-диол
	4		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-(((1,3-дигидрокси-2-(гидроксиметил)пропан-2-ил)имино)метил)фенил-1,2-диол
	5		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-((фенилимино)метил)фенил-1,2-диол
	6		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-(((2-гидроксифенил)имино)метил)фенил-1,2-диол
	7		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-(((2,6-диметилфенил)имино)метил)фенил-1,2-диол
	8		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-(((2,6-диметоксифенил)имино)метил)фенил-1,2-диол
	9		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-(((4-хлорфенил)имино)метил)фенил-1,2-диол
	10		N'-(4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-2,3-дигидроксибензилиден)бензогидразид
	11		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-((2-фенилгидразоно)метил)фенил-1,2-диол
	12		4,6-ди- <i>tert</i> -бутил-3-((2,2-дифенилгидразоно)метил)фенил-1,2-диол

выполнены методом наименьших квадратов на доверительном уровне 95%. Значения  $\log P$  используемых в работе стандартных веществ взяты из литературы [15]. Для прогнозирования коэффициентов разделения октанола/воды ( $\log P$ ) были использованы для метода: метод KOWWIN [16] и Molinspiration [17].

### Обсуждение результатов

В ограниченном диапазоне составов двухкомпонентной подвижной фазы обращенно-фазового варианта ВЭЖХ с хорошим приближением выполняется линейная зависимость (2), которая связывает десятичный логарифм коэффици-

ента удерживания  $\lg k$  сорбата с объемной долей  $\varphi$  органического модификатора в подвижной фазе:

$$\lg k = \lg k_0 - S\varphi, \quad (2)$$

где  $S$  – константа, специфичная для органического модификатора на рассматриваемой стационарной фазе;  $k_0$  – коэффициент удерживания, экстраполированный к чистому водному элюенту и отражающий характер распределения аналита при измерениях прямым методом «встряхиваемой колбы». Уравнение (2) является наиболее распространенным подходом к определению  $\lg k_0$  путем оценки значений  $\lg k$  с использованием различных процентных долей органического растворителя в подвижной фазе с последующей



Таблица 2. Коэффициенты распределения *n*-октанол/вода  $\log P$  и экспериментальные значения фактора удерживания  $\lg k_0$  стандартных веществ

Table 2. The *n*-octanol/water partition coefficient  $\log P$  and experimental retention factor  $\lg k_0$  for standard compounds

Соединение	$\lg k_0$	$\log P^a$	$r^2$
бензол	1.74	2.48	0.9944
дифениламин	2.73	3.40	0.9984
дифенилкетон	2.38	3.18	0.9991
нафталин	2.77	3.37	0.9987
дифенил	3.39	3.98	0.9979
дифенилацетилен	4.01	4.58	0.9985
дибензил	4.21	4.79	0.9975
ди-этилбензол	3.96	4.58	0.9984
флуорен	3.59	4.18	0.9983
антрацен	3.87	4.45	0.9982
<i>n</i> -гексилбензол	5.18	5.67	0.9995
гексаметилбензол	4.47	5.11	0.9985
1,4-ди- <i>трет</i> -бутилбензол	5.57	5.81	0.9984

Примечание. <sup>a</sup> Данные взяты из литературы [15].

экстраполяцией к 100%-ому водному элюенту [2].

Для выбранных стандартных веществ и серии исследуемых в работе пирокатахинов 1-12 при трех концентрациях метанола в воде ( $\varphi$ ) экспериментально определены значения  $\lg k$  и построены линейные зависимости для оценки значений  $\lg k_0$  (при  $\varphi=0$ ) для каждого соединения. Полученные результаты представлены в таблицах 2 и 3. Уравнение (2) хорошо описывает удерживание во всем исследованном диапазоне объемных долей для обеих серий, квадраты коэффициентов корреляции линейных регрессий  $r^2 \geq 0.996$  (табл. 2-3).

На большом количестве примеров показано [18], что с хорошим приближением в изократическом режиме параметр  $\log P$  линейно связан с  $\lg k_0$ :

$$\log P = a \lg k_0 + b, \quad (3)$$

где  $a$  и  $b$  – коэффициенты линейной регрессии. Выполнение линейной зависимости (3) также подтверждается для серии стандартных веществ с известными параметрами  $\log P$  (табл. 2):

$$\begin{aligned} \log P &= 0.90 \lg k_0 + 0.96 \quad (4) \\ S_a &= 0.02; S_b = 0.08; \\ S_Y &= 0.080; r^2 = 0.994; n = 13, \end{aligned}$$

где  $S_a$ ,  $S_b$  – стандартные отклонения коэффициентов  $a$  и  $b$ ;  $S_Y$  – стандартная ошибка аппроксимации;  $r$  – коэффициент корреляции;  $n$  – объем выборки.

Линейная регрессия (4) использована для вычисления неизвестных ранее значений  $\log P$  соединений 1-12 (табл. 3). Из табл. 3, следует, что в соответствии с наличием гидрофобных групп большинство изученных соединений, проанализированных на колонке C18, продемонстрировали ожидаемое удерживание и значительную гидрофобность (экспериментальные значения  $\log P > 5$ ), и только три соединения (1, 3 и 4) имеют значения  $\log P$  близкие к 4. Для соединений с объемными арильными группами в структуре фрагмента  $R$  (табл. 3) характерно сильное неспецифическое взаимодействие с неполярной неподвижной фазой, большие времена удерживания и коэффициент распределения октанол/вода в диапазоне 6÷8. Наибольшую липофильность продемонстрировало соединение 12 ( $\log P = 8.27$ ). Соединение 4 имеет наименьшее значение  $\log P$  в исследуемой серии пирокатахинов, что может быть объяснено наличием в молекуле трех гидроксильных групп, образующих

Таблица 3. Факторы удерживания  $lg k_0$  и коэффициенты распределения н-октанол/вода  $log P$  производных 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина 1-12

Table 3. The factor retention  $lg k_0$  and n-octanol/water partition coefficient  $log P$  for 3,5-di-*tret*-butylpyrocatechol derivatives 1-12

№ п/п	$r^2$	$lg k_0$	$log P_{эксн}$	$log P_{выч}$ Kowwin	$log P_{выч}$ Molinspiration
1	0.9994	3.93	4.50	4.85	4.54
2	0.9956	5.63	6.03	6.27	5.18
3	0.9984	4.00	4.56	4.56	5.36
4	0.9998	3.88	4.45	2.93	3.52
5	0.9994	6.65	6.95	6.06	7.06
6	1.0000	6.27	6.61	5.58	6.79
7	0.9967	7.77	7.96	7.15	7.86
8	0.9999	6.67	6.97	6.22	7.08
9	0.9973	7.43	7.65	6.70	7.74
10	0.9992	5.65	6.05	6.36	6.69
11	0.9980	6.03	6.39	7.06	8.30
12	0.9970	8.12	8.27	9.27	8.56

сильные водородные связи с полярной подвижной фазой.

Для прогнозирования параметра липофильности  $log P$  производных 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина дополнительно в работе были привлечены компьютерные методы. Рассчитанные значения  $log P_{выч}$  для соединений 1-12 приведены в табл. 3. Как следует из данных таблицы наилучшую сходимость экспериментальных и расчетных значений параметров  $log P$  показал метод Molinspiration [17], отклонение расчета от эксперимента для подавляющего числа соединений не превышает 10%. При этом метод Molinspiration дает, как правило, завышенные значения  $log P$  относительно значений, полученных с помощью метода ВЭЖХ. В случае метода KOWWIN [16] наблюдается удовлетворительная сходимость экспериментальных и расчетных значений, отклонение составляет 10-13%, наибольшее отклонение наблюдается для соединений 6 (16%) и 4 (34%), что связано, вероятно, с учетом сильных межмолекулярных взаимодействий гидроксильных групп в структурном фрагменте

$R$ , имеющих место при взаимодействии с подвижной фазой в ОФ ВЭЖХ (табл. 3).

### Заключение

Таким образом, впервые проведена оценка липофильности 12 производных 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина и определены коэффициенты распределения октанол/вода с помощью обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. Установлено, что изученные соединения имеют высокие значения параметра  $log P$ . Традиционный метод определения коэффициента распределения октанол/вода (метод «встряхивания колбы») в данном случае является неподходящим методом из-за крайне плохой растворимости исследуемых соединений в воде. Непрямой метод, такой как ОФ ВЭЖХ, позволяет экспериментально оценить липофильность производных 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина, имеющих значения  $log P$  больше 5. Экспериментальные данные сопоставлены с расчетными коэффициентами распределения октанол-вода, которые были определены с помощью прогнозных методов с учетом химической структуры.



### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые

### Список литературы/References

1. Arnott J.A.; Planey S.L. The influence of lipophilicity in drug discovery and design, *Expert Opin. Drug Discov.*, 2012; 7(10): 863-875. <https://doi.org/10.1517/17460441.2012.714363>

2. Soares J.X., Santos A., Fernandes C., Pinto M.M.M. Liquid chromatography on the different methods for the determination of lipophilicity: an essential analytical tool in medicinal chemistry, *Chemosensors*, 2022; 10(8): 340-380. <https://doi.org/10.3390/chemosensors10080340>

3. Sangster, J.M. Octanol-water partition coefficients: fundamentals and physical chemistry. Wiley series in solution chemistry. Chichester, Wiley, 1997, vol 2, p 170.

4. Camurri G., Zaramella A. High-throughput liquid chromatography/mass spectrometry method for the determination of the chromatographic hydrophobicity index, *Anal. Chem.*, 2001; 73(15): 3716-3722. <https://doi.org/10.1021/ac001388j>

5. Nikitin Yu.S., Petrova R.S. Experimental methods in adsorption and molecular chromatography. Moscow, Moscow State University Publ., 2nd edition, 1990. 316 p. (In Russ.)

6. Xuan X., Xu L., Li L., Gao C., Li N. Determination of drug lipophilicity by phosphatidylcholine-modified microemulsion high-performance liquid chromatography. *Int. J. Pharm.*, 2015; 490(1-2): 258-264. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2015.05.019>

7. Dechy-Cabaret O., Martin-Vaca B., Bourissou D. Controlled ring-opening polymerization of lactide and glycolide, *Chem.Rev.*, 2004; 104(12): 6147-6176. <https://doi.org/10.1021/cr040002s>

8. Smolyaninov I.V., Burmistrova D.A., Arsenyev M.V., Polovinkina M.A., Pomortseva N.P., Fukin G.K., Poddel'sky A.I., Berberova N.T. Synthesis and antioxidant

могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

activity of new catechol thioethers with the methylene linker, *Molecules*, 2022; 27(10): 3169-3190. <https://doi.org/10.3390/molecules27103169>

9. Candido Júnior J.R., Romeiro L.A.S., Marinho E.S., Monteiro N.K.V., de Lima-Neto P. Antioxidant activity of eugenol and its acetyl and nitroderivatives: the role of quinone intermediates – a DFT approach of DPPH test, *J. Mol. Model.*, 2022; 28(5): 133-147. <https://doi.org/10.1007/s00894-022-05120-z>

10. Arsenyev M.V. New functionalized o-benzoquinones and poly-o-benzoquinones as precursors for polymer metal complexes and materials based on them. Diss. cand. chem. nauk. Nizhny Novgorod, 2014. Available at: <https://diss.unn.ru/files/2014/423/diss-Arsenev-423.pdf> (accessed 16 February 2023) (In Russ.)

11. Poddel'sky A.I., Arsenyev M.V., Astafeva T.V., Chesnokov S.A., Fukin G.K., Abakumov G.A. New sterically hindered 6th-substituted 3,5-di-tert-butylcatechols/o-quinones with additional functional groups and their triphenylantimony(V) catecholates, *J. Organomet. Chem.*, 2017; 835: 17-24. <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2017.02.035>

12. Astafeva T., Arsenyev M., Rumyantsev R., Poddel'sky A., Fukin G., Cherkasov V. Imine-Based Catechols and o-Benzoquinones: Synthesis, Structure and Features of Redox Behaviour, *ACS Omega*, 2020; 5(35): 22179-22191. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c02277>

13. Arsenyev M.V., Khamaletdinova N.M., Baranov E.V., Chesnokov S.A., Cherkasov V.K. Synthesis, structures, and properties of new sterically hindered hydrazine-based catecholaldimines, *Russ. Chem. Bull.*, 2016; 7: 1805-1813. <https://doi.org/10.1007/s11172-016-1514-9>



14. GOST 32474-2013. Testing of chemicals of environmental hazard. //Moscow: Standardinform, 2014. Available at: <https://files.stroy-inf.ru/Data2/1/4293773/4293773041.pdf> (accessed 28 February 2023). (In Russ.)

15. Mackay D., Shiu W-Y, Ma K-C, Lee S.C. Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Available at: <https://rushim.ru/books/spravochniki/mackay1.pdf> (accessed 16 February 2023)

16. Meylan W.M., Howard P.H. Atom/fragment contribution method for es-

timating octanol-water partition coefficients, *J. Pharm Sci.*, 1995; 84(1): 83-92. <https://doi.org/10.1002/jps.2600840120>

17. Interactive logP calculator. Available at: <https://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties> (accessed 16 February 2023)

18. Braumann T. Determination of hydrophobic parameters by reversed-phase liquid chromatography: theory, experimental techniques, and application in studies on quantitative structure-activity relationships, *J. Chromatogr. A.*, 1986; 373: 191-225. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(00\)80213-7](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(00)80213-7)

### Информация об авторах / Information about the authors

**Т.И. Куликова** – к.х.н., научный сотрудник лаборатории физико-химических исследований, Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия

**О.В. Кузнецова** – д.х.н., ведущий научный сотрудник лаборатории физико-химических исследований, Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия

**М.В. Арсеньев** – к.х.н., старший научный сотрудник лаборатории фотополимеризации и полимерных материалов, Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия

**T.I. Kulikova** – Ph.D (chemistry), researcher, Laboratory of physical and chemical research, G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russian Federation, e-mail: [kulik@iomc.ras.ru](mailto:kulik@iomc.ras.ru), <https://orcid.org/0000-0002-8397-0146>

**O.V. Kuznetsova** – Dr.Sci. (chemistry), Leading researcher Laboratory of physical and chemical research, G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russian Federation, e-mail: [olga@iomc.ras.ru](mailto:olga@iomc.ras.ru), <https://orcid.org/0000-0002-6244-2440>

**M.V. Arsenyev** – Ph.D (chemistry), Senior Researcher, Laboratory of photopolymerization and polymer materials, G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russian Federation, e-mail: [mars@iomc.ras.ru](mailto:mars@iomc.ras.ru), <https://orcid.org/0000-0001-5275-8241>

Статья поступила в редакцию 10.03.2023; одобрена после рецензирования 21.04.2023; принята к публикации 22.04.2023.

The article was submitted 10.03.2023; approved after reviewing 21.04.2023; accepted for publication 22.04.2023.