



ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

Научная статья

УДК 543.544

doi: 10.17308/sorpchrom.2023.23/11723

Влияние строения производных хинолина на их сорбцию на сверхсшитом полистироле

**Семён Андреевич Рыжкин¹,
Александр Владиславович Капитонов¹, Елена Евгеньевна Финкельштейн¹,
Светлана Викторовна Курбатова^{1✉}, Маргарита Николаевна Земцова²**

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Самара, Россия, curbatsv@gmail.com[✉]

²Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Аннотация. Статья посвящена изучению хроматографического поведения производных хинолина и тетрагидрохинолина. Цель работы заключалась в исследовании закономерностей сорбции этих соединений из водно-ацетонитрильных растворов на сверхсшитом полистироле методом обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии. Рассчитаны значения объема, поляризуемости, липофильности и дипольного момента молекул производных хинолина, которые существенно зависят от природы и положения функциональных групп и заместителей в основном ядре. Установлено, что появление функциональных групп и заместителей приводит к увеличению объема и поляризуемости молекул производных хинолина по сравнению с незамещенным хинолином и метилхинолином, а липофильность и дипольный момент при этом изменяются в зависимости от природы заместителя и его положения в основном фрагменте. Получены зависимости сорбционных характеристик от строения и физико-химических свойств сорбатов. Показано, что в соответствии с закономерностями обращенно-фазового варианта жидкостной хроматографии удерживание веществ изменяется симбатно изменению характеристик молекул, ответственных за дисперсионные взаимодействия. При этом присутствие в молекулах атомов галогенов, фенильных радикалов и других заместителей, способных к π -взаимодействиям с поверхностью сверхсшитого полистирола, приводит к значительному возрастанию удерживания, а наличие карбоксильной группы или карбоксиалкилов, склонных к взаимодействию с полярным элементом, существенно ослабляет удерживание. Появление в молекулах сложноэфирной группы в целом значительно увеличивает объем, поляризуемость и липофильность соответствующих производных, но практически не влияет на удерживание, в связи с чем высказано предположение о том, что присутствие карбонильного атома кислорода, способного взаимодействовать с полярными компонентами элюента, нивелирует влияние физико-химических факторов, определяющих сорбцию этих веществ за счет дисперсионных взаимодействий.

Таким образом, несмотря на симбатность в изменении физико-химических параметров исследованных соединений и их удерживания, строгая пропорциональность при этом отсутствует, поскольку, с одной стороны, удерживание сорбатов осуществляется в соответствии с изменением их физико-химических параметров, а с другой стороны, определяется склонностью молекул этих соединений к конкурентным взаимодействиям с компонентами подвижной фазы.

Представленные результаты работы могут быть полезны при разработке и оптимизации методик анализа аналогичных по структуре соединений, а также для развития теории сорбции полифункциональных соединений из многокомпонентных растворов и установлению взаимосвязи между характеристиками сорбции, другими физико-химическими параметрами и структурой молекул.

Ключевые слова: ОФ ВЭЖХ, сорбция, производные хинолина и 1,2,3,4-тетрагидрохинолина, сверхсшитый полистирол, соотношения «структура-свойство».

Для цитирования: Рыжкин С.А., Капитонов А.В., Финкельштейн Е.Е., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Влияние строения производных хинолина на их сорбцию на сверхсшитом полистироле // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2023. Т. 23, № 5. С. 887-897. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2023.23/11723>

Original article

Influence of the structure of quinoline derivatives on their sorption on hypercrosslinked polystyrene

Semen A. Ryzhkin¹, Alexander V. Kapitonov¹, Elena E. Finkelshtein¹,
Svetlana V. Kurbatova¹✉, Margarita N. Zemtsova²

¹Korolev Samara National Research University, Samara, Russia, curbatsv@gmail.com✉

²Samara State Technical University, Samara, Russia

Abstract. The article is devoted to the study of the chromatographic behaviour of quinoline and tetrahydroquinoline derivatives. The purpose of the study was to investigate the patterns of sorption of these compounds from aqueous-acetonitrile solutions on hyper-cross-linked polystyrene using reverse-phase high-performance liquid chromatography. The volume, polarizability, lipophilicity, and dipole moment of molecules of quinoline derivatives were calculated, which significantly depended on the nature and position of functional groups and substituents in the main nucleus. It has been established that the appearance of functional groups and substituents leads to an increase in the volume and polarizability of the molecules of quinoline derivatives compared to unsubstituted quinoline and methylquinoline, while the lipophilicity and dipole moment change depending on the nature of the substituent and its position in the main fragment. The dependences of sorption characteristics on the structure and physicochemical properties of sorbates were obtained. It has been shown that, in accordance with the laws of the reversed-phase version of liquid chromatography, the retention of substances changes symbatically with the change in the characteristics of the molecules responsible for dispersion interactions. In this case, the presence in the molecules of halogen atoms, phenyl radicals and other substituents capable of π -interactions with the surface of hyper-cross-linked polystyrene led to a significant increase in retention, and the presence of a carboxyl group or carboxyalkyls prone to interaction with the polar eluent significantly weakens retention. The appearance of an ester group in sorbate molecules generally significantly increased the volume, polarizability and lipophilicity of the corresponding derivatives, but had virtually no effect on retention, and therefore it was suggested that the presence of a carbonyl oxygen atom, capable of interacting with the polar components of the eluent, neutralizes the effect of physical-chemical factors that determine the sorption of these substances due to dispersion interactions.

Thus, despite the symmetry in changes in the physicochemical parameters of the studied compounds and their retention, there was no strict proportionality, since, on the one hand, the retention of sorbates was carried out in accordance with the change in their physicochemical parameters, and on the other hand, it was determined by the tendency molecules of these compounds to competitive interactions with the components of the mobile phase.

The presented results of the study can be useful in the development and optimization of methods for analysing compounds with similar structures, as well as for developing the theory of sorption of polyfunctional compounds from multicomponent solutions and establishing the relationship between sorption characteristics, other physicochemical parameters and the structure of molecules.

Keywords: RP HPLC, sorption, quinoline and 1,2,3,4-tetrahydroquinoline derivatives, hypercrosslinked polystyrene, structure-property relationships.

For citation: Ryzhkin S.A., Kapitonov A.V., Finkelshtein E.E., Kurbatova S.V., Zemtsova M.N. Influence of the structure of quinoline derivatives on their sorption on hypercrosslinked polystyrene. *Sorbtsionnye i khromatograficheskie protsessy*. 2023. 23(5): 887-897. (In Russ.). <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2023.23/11723>

Введение

Химия гетероциклических соединений является одним из наиболее динамично развивающихся направлений различных отраслей химии и фармакогнозии, прежде всего, в связи огромной ролью гетероциклов в процессах жизнедеятельно-

сти живых организмов. Известно, что гетероциклы участвуют в реализации механизмов дыхания, действия центральной нервной системы, во многих ферментативных процессах, играют существенную роль в передаче наследственных признаков и т.п. [1]. Гетероциклические фрагменты входят в состав многих высокоэффективных лекарственных препаратов, а



также красителей, термостойких полимеров, аналитических реагентов и многих других практически важных материалов [2, 3]. Среди гетероциклических соединений особое место занимают производные хинолина и тетрагидрохинолина, высокая биологическая активность которых уже давно реализуется в широко используемых лекарственных препаратах (энтеро-септол, плазмохин, 5-НОК, ципрофлоксацин и многие другие) [2]. Кроме того, высокая реакционная способность и разнообразие химических превращений делает производные хинолина удобными конструкционными блоками для синтеза различных биологически активных структур. В этом отношении большой интерес представляют соединения, в которых ароматическое кольцо конденсировано с насыщенным гетероциклом, при этом в подобных системах возникают структурные деформации, приводящие к искажениям геометрии молекулы и, таким образом, к изменению многих характеристики этих веществ и проявлению особенностей их химического поведения [4].

Одним из ключевых моментов в создании новых полезных соединений с практически важными свойствами является разработка методов их синтеза, анализ промежуточных и конечных продуктов с целью оптимизации условий синтеза, а также исследование структуры новых веществ и ее влияния на проявляемые физико-химические свойства. Использование для этих целей варианта жидкостной хроматографии с ее возможностью применять разнообразные сочетания сорбентов и элюентов различной химической природы позволяют реализовывать различные виды специфических и неспецифических взаимодействий в хроматографической системе.

С этой точки зрения весьма эффективным сорбентом является сверхсшитый полистирол (ССПС), к основным особенностям которого относят высокую механическую прочность, химическую ста-

бильность, лёгкость регенерации, устойчивость к агрессивным средам, совместимость с неполярными и полярными органическими растворителями, а также значительный вклад в механизм удерживания π -взаимодействий, высокую селективность разделения изомеров различных органических соединений и многие другие [5]. Исследованию адсорбционных свойств сверхсшитых полистиролов при их использовании в условиях жидкостной хроматографии посвящено значительное число публикаций [6-8]. В литературе отмечено, что особая роль этого сорбента среди традиционных кремнеземных, углеродных и полимерных адсорбентов в селективной адсорбции в жидкостной хроматографии обусловлена его высокой селективностью по отношению к соединениям с электронодефицитными или электроноизбыточными ароматическими фрагментами, кратными связями, вакантными d-орбиталями или неподеленными парами электронов, проявляемой за счет π - π - и π -d- взаимодействий адсорбат-адсорбент [7]. Таким образом, сравнительно высокая степень дelokализации π -электронов, характерная для производных хинолина и связанная с взаимодействием электронов циклической структуры и неподеленных пар электронов гетероатомов, делает эти вещества интересными объектами для исследования их сорбции на ССПС.

В связи с изложенным целью настоящей работы явилось исследование влияния строения производных хинолина на их хроматографическое удерживание на поверхности ССПС в условиях жидкостной хроматографии.

Экспериментальная часть

Хроматографический анализ проводили на жидкостном хроматографе Милхром А02 с УФ-спектрометрическим детектором, при длине волны 254 нм. В качестве сорбента использовали монодисперсный сверхсшитый полистирол со степенью сшивки 150%; размер частиц

3.2 мкм; размеры колонки 150×3 мм. Сорбент на основе сверхсшитого полистирола синтезирован и упакован в колонку в лаборатории стереохимии сорбционных процессов ИНЭОС РАН.

Элюирование осуществляли в изократическом режиме. В качестве подвижной фазы использовали смесь ацетонитрил – вода с объемным содержанием ацетонитрила 80%. Объемная скорость потока элюента составляла 500 мкл/мин. Для приготовления подвижных фаз использовали тридистиллированную воду и ацетонитрил марки HPLC-gradient grade (Panreac, Испания); дегазирование осуществляли воздействием на приготовленные водно-ацетонитрильные смеси ультразвука с помощью установки марки УЗДН-2Т.

Пробу сорбата готовили растворением кристаллического вещества в соответствующей подвижной фазе. Удерживание исследованных соединений характеризовали величиной фактора удерживания (k), рассчитанного по формуле:

$$k = \frac{t_R - t_M}{t_M},$$

где t_R – время удерживания исследуемого вещества, t_M – время удерживания несорбирующегося вещества (нитрит натрия).

В качестве объектов исследования были выбраны производные хинолина, формулы которых приведены в таблице. Синтез соединений осуществляли по методикам, приведенным в [9]. Значения мольного объема (V), поляризуемости (α), липофильности ($\log P$) и дипольного момента (μ) рассчитывали с использованием библиотеки RdKit [10].

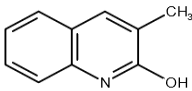
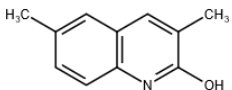
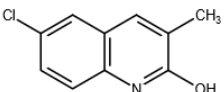
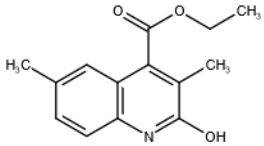
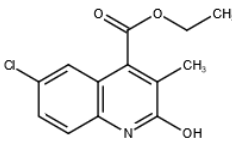
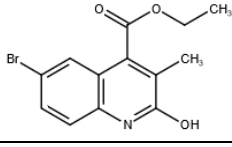
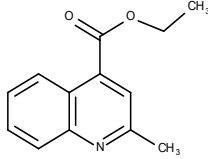
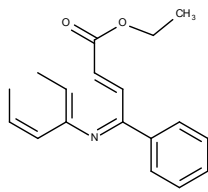
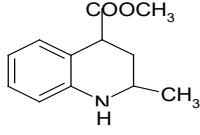
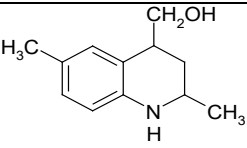
Обсуждение результатов

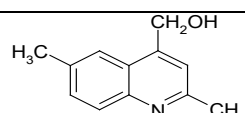
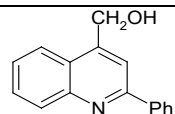
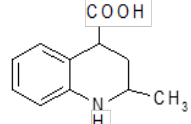
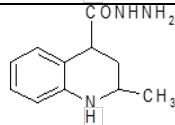
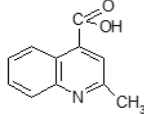
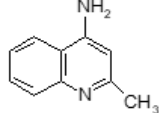
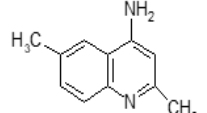
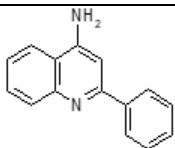
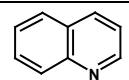
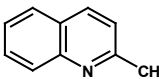
Оценить возможность участия молекул сорбатов в тех или иных межмолекулярных взаимодействиях (ММВ) в хроматографической системе можно на основании сопоставления дескрипторов, характеризующих эти взаимодействия. В

случае обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ), как известно, в качестве таких параметров рассматривают обычно объем и поляризуемость молекул, характеризующие величину дисперсионных взаимодействий, липофильность, определяющую величину сольвофобных сил, и дипольный момент, величина которого определяет способность молекул к индукционным и диполь-дипольным взаимодействиям с полярным элюентом [11]. Как правило, использование корреляций между перечисленными параметрами и сорбционными характеристиками молекул сорбатов позволяет во многих случаях интерпретировать особенности механизмов сорбции соединений и прогнозировать их хроматографическое удерживание [12, 13].

Особенности строения производных хинолина, обусловленные перераспределением электронной плотности в молекулах, достаточно полно представлены в литературе [1, 14, 15]. Отметим лишь, что использованные нами производные хинолина являются полифункциональными соединениями, в структуре которых присутствуют различные сорбционно-активные центры, способные участвовать в различных типах ММВ и, соответственно, вносить существенный вклад в удерживание. При этом известно, что для атомов углерода в положениях 2 и 4 хинолинового ядра характерна пониженная электронная плотность, способствующая их реакционной способности и делающая их чувствительными к влиянию заместителей, поэтому наличие заместителей именно в этих положениях способно заметно усиливать или уменьшать основность атома азота хинолинового кольца и, таким образом, оказывать влияние на характер межмолекулярных взаимодействий соответствующих соединений с компонентами хроматографической системы. Следует заметить, что и в целом

Таблица. Физико-химические параметры производных хинолина
 Table. Physicochemical parameters of quinoline derivatives

№	Формула	log P	V, Å ³	α, Å ³	μ, D	k
1		2.25	154	21.7	3.49	1.47
2		2.55	172	23.6	3.47	2.02
3		2.90	169	23.7	3.53	2.78
4		2.73	242	26.8	2.60	1.88
5		3.07	239	26.9	2.23	2.76
6		3.18	247	27.6	2.25	3.46
7		2.72	217	24.3	1.22	2.06
8		4.07	271	32.2	1.43	7.27
9		2.15	232	26.1	3.17	4.56
10		2.28	229	26.6	2.07	3.28

11		2.34	216	27.7	3.07	9.52
12		3.39	246	28.1	2.71	11.07
13		2.06	201	21.9	2.41	0.03
14		0.96	236	23.2	2.32	1.62
15		2.24	194	25.3	1.18	0.40
16		2.13	161	19.3	2.55	1.50
17		2.43	158	20.9	2.75	13.39
18		3.48	197	25.9	3.35	26.30
19		2.23	108	15.9	1.84	1.24
20		2.54	122	17.6	1.64	1.36

отрицательный и положительный индуктивный или мезомерный эффекты заместителей в структуре молекул, приводящие к смещению электронной плотности в основном хинолиновом фрагменте, будут способствовать изменению сорбционных характеристик соответствующих производных хинолина. Несмотря на то, что в тетрагидрохинолинах мезомерные эффекты возможны лишь при замещении в бензольном кольце, а также при наличии некоторых заместителей в положении 2, их влияние на характеристики удерживания также может быть вполне существенным [1, 14].

Проиллюстрировать влияние электронных и других структурных факторов на хроматографическое поведение производных хинолина можно следующими примерами. Из полученных нами данных следует, что появление функциональных групп и заместителей приводит к увеличению объема и поляризуемости молекул производных хинолина по сравнению с незамещенным хинолином и метилхинолином, а липофильность и дипольный момент при этом изменяются в зависимости от природы заместителя и его положения в основном фрагменте. Так, значения ди-



польного момента производных хинолина лежат в диапазоне 1.18-3.53 D, в то время как для незамещенного хинолина эта величина составляет 1.84 D, при этом величина липофильности изменяется в пределах 0.96-4.07 (у хинолина $\log P=2.23$). Для тетрагидрохинолинов, алкил- и карбоксипроизводных хинолина липофильность оказывается меньшей или сопоставимой со значениями этого параметра для хинолина, а появление фенильного радикала или карбоксиалкила приводит к ее возрастанию. Значения характеристик удерживания при этом могут варьировать в значительно более широких пределах. Так, для соединений **1-3** появление метила в положении 6, а затем его замена на атом хлора лишь незначительно изменяет величины объема и поляризуемости, поскольку положение 6 в производных хинолина не задействовано в резонансе и практически не оказывает существенного влияния на распределение электронной плотности в молекуле. Значения фактора удерживания при этом лежат в диапазоне 1.47-2.78. Аналогичная картина наблюдается для веществ **4-6**, в которых в положении 6 метил замещается на атом хлора, а затем атом брома. Чуть большей оказывается разница в липофильности этих соединений, что в результате приводит к заметным различиям в удерживании – диапазон изменения значений фактора удерживания для этих соединений составляет 1.88-3.46. В то же время изменение природы заместителя в положении 2, участвующем в резонансе хинолиновой структуры, способствует более значительным изменениям. Так, при замене метильного радикала (вещества **7** и **16**) на фенильный (вещества **8** и **18**) все параметры фенилпроизводных резко возрастают, соответственно увеличивая и удерживание. Однако несопоставимо большее увеличение значений фактора удерживания от 2.06 и 1.50 у метилпроизводных до 7.27 и 26.3 фенилпроизводных соответственно, вероятно, является также следствием дополнительного вклада в удерживание п-

взаимодействий фенильного радикала с поверхностью ССПС. Вклад подобных взаимодействий, как известно, оказывается весьма существенным при сорбции на ССПС веществ, содержащих ароматические фрагменты и заместители с вакантными d-орбиталями или неподеленными электронными парами [16]. Помимо приведенного примера, уже отмеченное несколько большее возрастание значения фактора удерживания 6-хлор-3-метилхинолин-2-ола (вещество **3**) по сравнению с удерживанием веществ **1, 2** с близкими значениями всех физико-химических параметров или аналогичный рост удерживания веществ **5** и **6** по сравнению с веществом **4** может быть обусловлено дополнительным вкладом специфических взаимодействий атома галогена с поверхностью сверхсшитого полистирола.

Природа функциональной группы также может быть причиной нарушения симбатности в изменении физико-химических характеристик и удерживания производных хинолина. Так, появление в молекулах сорбатов сложноэфирной группы в целом значительно увеличивает объем, поляризуемость и липофильность соответствующих производных, но практически не влияет на удерживание, что следует из сопоставления соответствующих данных, например, для пар веществ **2** и **4**, **3** и **5**. Можно предположить, что присутствие карбонильного атома кислорода, способного взаимодействовать с полярными компонентами элюента нивелирует влияние физико-химических факторов, определяющих сорбцию этих веществ за счет дисперсионных взаимодействий. В ряду веществ **8, 18, 12**, содержащих фенил в положении 2 хинолинового фрагмента, и гидроксиметил-, аминогруппу или карбоксиэтил в положении 4 соответствующих молекул, значения липофильности уменьшаются, при этом поляризуемость оказывается минимальной у вещества **18**, а дипольный момент – у

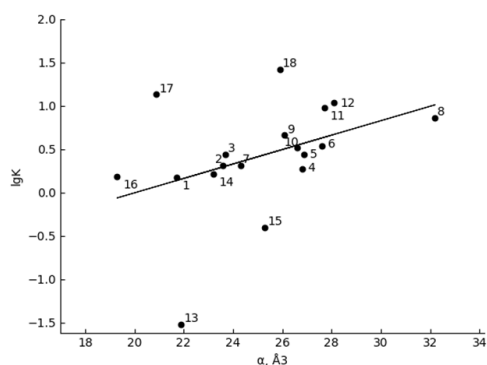


Рис. 1. Зависимость фактора удерживания исследованных соединений от поляризуемости молекул
Fig. 1. Dependence of the retention factor of the studied compounds on the polarizability of molecules

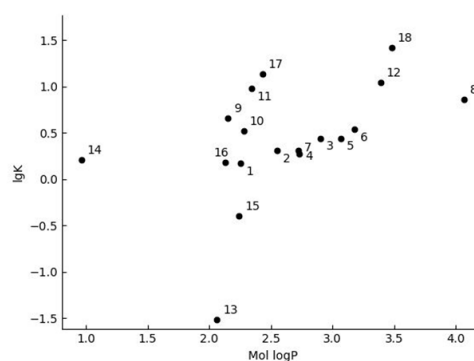


Рис. 2. Зависимость фактора удерживания исследованных соединений от липофильности молекул
Fig. 2. Dependence of the retention factor of the studied compounds on the lipophilicity of the molecules

вещества **8**, в то время как значения фактора удерживания при этом возрастают в последовательности **8**, **12**, **18**. Вероятно, для вещества **8** при хроматографировании преобладающую роль играют взаимодействия карбонильного атома кислорода с компонентами подвижной фазы, несмотря на меньшее значение дипольного момента этого соединения. Сочетание дополнительного атома азота аминокруппы и фенильного радикала в аминокпроизводном **18** значительно увеличивает вклад π -взаимодействий этих молекул с поверхностью ССПС, что приводит к особенно значительному возрастанию значения фактора удерживания ($k=26.3$). Подтверждением данного предположения могут служить значения фактора удерживания для веществ аналогичного строения. Так, для вещества **16** с метильным радикалом в положении 2 фактор удерживания $k=1.50$, для вещества **8** с карбоксиэтилом в положении 4 вместо аминокруппы $k=7.27$.

Иллюстрацией к высказанным предположениям могут служить так же графики, приведенные на рис. 1 и 2. На графике зависимости удерживания от поляризуемости отклоняются от линии тренда точки, соответствующие веществам с карбокси-

и аминокруппами. Расположение этих точек по разные стороны линии тренда косвенно характеризует уже отмеченные особенности этих функциональных групп, приводящих к ослаблению удерживания карбоксипроизводных и его возрастанию для аминокпроизводных. Зависимость удерживания исследованных соединений от липофильности (рис.2) оказывается несколько иной, при этом условно можно выделить две линии тренда, соответствующие веществам, более склонным к взаимодействию с компонентами подвижной фазы (вещества **1-8**), либо способным к взаимодействиям с сорбентом, дополнительным к дисперсионным.

Таким образом, несмотря на симбатность в изменении физико-химических параметров исследованных соединений и их удерживания, строгая пропорциональность при этом отсутствует, поскольку, с одной стороны, удерживание сорбатов осуществляется в соответствии с изменением их физико-химических параметров, а с другой стороны, определяется склонностью молекул этих соединений к конкурентным взаимодействиям с компонентами подвижной фазы. Очевидно, что существенное влияние на удерживание ис-



следованных соединений будет оказывать природа сорбента и состав подвижной фазы, исследование которого составит предмет наших дальнейших исследований.

Заключение

Таким образом, можно заключить, что в целом исследованные производные хинолина и тетрагидрохинолина подчиняются основным закономерностям удерживания в условиях обращеннофазового варианта жидкостной хроматографии, а различия в их сорбируемости при сопоставимых значениях параметров, характеризующих дисперсионные взаимодействия, свидетельствуют либо о наличии взаимодействий с сорбентом, дополнительных к дисперсионным и определяемых структурой сорбатов, либо о преимущественном взаимодействии молекул сорбата с полярными компонентами

Список литературы

1. Joule. J.A., Mills K. Heterocyclic Chemistry. 5th ed.; A John Wiley & Sons, Ltd., Publication, 2010. 689 p.
2. Солдатенков А.Т., Колядина Н.М., Шендрик И.В. Основы органической химии лекарственных веществ. М.: Химия. 2001. 192.с.
3. Кузнецов Д.Н., Кобраков К.И., Ручкина А.Г., Станкевич Г.С. Биологически активные синтетические органические красители // *Известия вузов. Химия и химическая технология*. 2017. Т. 60. Вып. 1. С. 4-33.
4. Nekrasova N.A., Kurbatova S.V. Quantitative structure–chromatographic retention correlations of quinoline derivatives // *Journal of Chromatography A*. 2017. Vol. 1492. P. 55-60.
5. Davankov V.A., Sychov C.S. Piyin M.M., Sochilina K.O. Hypercrosslinked polystyrene as a novel type of high-performance liquid chromatography column packing material: mechanisms of retention // *Journal of Chromatography A*. 2003. Vol. 987. P. 67-75.

элюента, ослабляющем удерживание. Кроме того, в молекулах исследованных соединений присутствуют атомы азота гетероцикла, а также заместители и функциональные группы, результирующее совместное влияние которых может различным образом сказываться на взаимодействии молекул сорбата с сорбентом и элюентом. Очевидно, что накопление подобных данных об особенностях удерживания ароматических гетероциклов будет способствовать успешному решению проблемы установления взаимосвязи между их строением и удерживанием.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

6. Tsyurupa M.P., Davankov V.A. Porous structure of hypercrosslinked polystyrene: state-of-the-art mini-review. *Reactive and functional polymers*. 2006. Vol. 66. P. 768-779.
7. Сайфутдинов Б.Р., Даванков В.А., Ильин М.М. Термодинамические характеристики адсорбции 1,3,4-оксадиазолов и 1,2,4,5-тетразинов из метанольных и водно-метанольных растворов на сверхсшитом полистироле // *Журнал физической химии*. 2017. Т. 91, № 3. С. 539-543.
8. Сайфутдинов Б.Р. Влияние природы бинарных водно-органических растворителей на термодинамические характеристики адсорбции ароматических соединений на сверхсшитом полистироле // *Физикохимия поверхности и защита материалов*. 2016. Т. 52, № 6. С. 586-592.
9. Земцова М.Н., Головки Ю.А., Грузд Ю.А., Кулемина С.В., М.Р. Баймуратов Синтез конденсированных гетероциклических систем на основе 2-арил-1,2,3,4-тетрагидрохинолинов // *Журнал органической химии*. 2021. Т.57, № 5. С. 728-736.
10. RDKit: Open-source cheminformatics. <http://www.rdkit.org>. n.d.



11. Шатц В.Д., Сахартова О.В. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Зинатне. Рига, 1988. 390 с.

12. Heberger K. Quantitative structure-(chromatographic) retention relationships // *Journal of Chromatography A*. 2007. Vol. 1158. P. 273-305.

13. Kaliszan R. Quantitative Structure-Retention Relationships (QSRRs) in Chromatography, Elsevier Inc., 2015.

14. Рыжкин С.А., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Особенности сорбции производных хинолина в условиях жидкостной хроматографии // *Журнал физической химии*, 2022. Т. 96, № 10. С. 1506-1512.

15. Савченкова А.С., Курбатова С.В., Земцова М.Н. Особенности сорбции некоторых производных хинолина из водноацетонитрильных растворов в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2014. Т.14, № 3. С.468-476.

16. Sychov C.S., Ilyin M.M., Davankov V.A., Sochilina K.O. Elucidation of retention mechanisms on hypercrosslinked polystyrene used as column packing material for high-performance liquid chromatography // *Journal of Chromatography A*. 2004. Vol. 1030(1-2). P. 17-24.

References

1. Anaya-Esparza L.M., de la Mora Z.V., Vázquez-Paulino O. et al., Bell Peppers (*Capsicum annum* L.) Losses and Wastes: Source for Food and Pharmaceutical Applications. *Molecules*, 2021; 26: 5341. <https://doi.org/10.3390/molecules26175341>

2. Lemos V.C., Reimer J.J., Wormit A., Color for Life: Biosynthesis and Distribution of Phenolic Compounds in Pepper (*Capsicum annum*). *Agriculture*, 2019; 9: 81. <https://doi.org/10.3390/agriculture9040081>

3. Lang Y.-Q., Yanagawa S., Sasanuma T. Orange Fruit Color in *Capsicum* due to Deletion of Capsanthin-capsorubin Synthesis Gene. *Breeding Sci.*, 2004; 54: 33-39. <https://doi.org/10.1270/jsbbs.54.33>

4. Arimboor R., Natarajan R.B., Menon K.R., Red pepper (*Capsicum annum*) carotenoids as a source of natural food colors: analysis and stability – a review. *J. Food Sci. Technol.*, 2015; 52: 1258-1271. <https://doi.org/10.1007/s13197-014-1260-7>

5. Hassan N.V., Yusof N.A., Yahaya A.E., Carotenoids of *Capsicum* Fruits: Pigment Profile and Health-Promoting Functional Attributes. *Antioxidants*, 2019; 8: 469. <https://doi.org/10.3390/antiox8100469>

6. Carpentier S., Knaus M., Suh M., Associations between Lutein, Zeaxanthin, and Age-Related Macular Degeneration: An Overview. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 2009; 49: 313-326. <https://doi.org/10.1080/10408390802066979>

7. Deineka V.I., Sorokopudov V.N., Deineka L.A. Flowers of marigold (*Tagetes*) species as a source of xanthophylls. *Pharm. Chem. J.*, 2007; 41: 540-542. <https://doi.org/10.1007/s11094-008-0007-z>

8. Deineka V.I., Sorokopudov V.N., Deineka L.A. et al., Studies of *Physalis alkekengi* L. fruits as a source of xanthophylls. *Pharm. Chem. J.*, 2008; 42: 87-88. <https://doi.org/10.1007/s11094-008-0065-2>

9. Guzman I., Hamby S., Romero J. Variability of carotenoid biosynthesis in orange colored *Capsicum* spp. *Plant Sci.*, 2010; 179: 49-59. <https://doi.org/10.1016/j.plantsci.2010.04.014>

10. Wall M.M., Waddell C.A., Bosland P.W. Variation in β -Carotene and Total Carotenoid Content in Fruits of *Capsicum*. *Hort. Sci.*, 2001; 36: 746-749. <https://doi.org/10.21273/HORTSCI.36.4.746>

11. Sajilata M.G., Singhal R.S., Kama M.Y. The Carotenoid Pigment Zeaxanthin—A Review. *Compr. Rev. Food Sci. Food Safety*, 2008; 7: 29-49. <https://doi.org/10.1111/j.1541-4337.2007.00028.x>

12. Zeb A., Murkovic M. Thin-layer chromatographic analysis of carotenoids in plant and animal samples *J. Planar Chromat.*, 2000; 2: 94-103. <https://doi.org/10.1556/JPC.23.2010.2.1>

13. Bunea A., Socaciu C., Pintea A. Xanthophyll Esters in Fruits and Vegetables.



Not. Bot. Horti. Agrobi., 2014; 42: 310-324.
<https://doi.org/10.15835/nbha4229700>

14. Wu L., Huang X., Shi K., Tan R. Bioavailability comparison of free and esterified lutein for layer hens. *Braz. J. Poultry*

Sci., 2009; 11: 95-98. <https://doi.org/10.1590/S1516-635X2009000200004>

15. Zenkevich I.G. Application of recurrent relationships in chromatography, *J. Chemometrics*, 2009; 23: 179-187.
<https://doi.org/10.1002/cem.1214>

Информация об авторах / Information about the authors

С.А. Рыжкин – аспирант кафедры физической химии и хроматографии Самарского университета, Самара, Россия

А.В. Капитонов – студент, кафедра физической химии и хроматографии Самарского университета, Самара, Россия

Е.Е. Финкельштейн – доцент кафедры физической химии и хроматографии Самарского университета Самара, Россия

С.В. Курбатова – д.х.н., профессор кафедры физической химии и хроматографии Самарского университета, Самара, Россия

М.Н. Земцова – к.х.н., доцент кафедры органической химии Самарского государственного технического университета (СамГТУ), Самара, Россия

S.A. Ryzhkin – post-graduate student the department of physical chemistry and chromatography, Samara University, Samara, Russia

A.V. Kapitonov – graduate student, the department of physical chemistry and chromatography, Samara University, Samara, Russia

E.E. Finkelstein – associate prof., Samara University, Samara, Russia

S.V. Kurbatova – professor of the department of physical chemistry and chromatography, PhD, professor, Samara University, Samara, Russia, E-mail: curbatsv@gmail.com

M.N. Zemtsova – Ph.D. (chemistry), associate prof., docent of Organic Chemistry Department, Samara State Technical University, Samara, Russia

Статья поступила в редакцию 19.04.2023; одобрена после рецензирования 28.07.2023; принята к публикации 02.08.2023.

The article was submitted 19.04.2023; approved after reviewing 28.07.2023; accepted for publication 02.08.2023.