

ИСПИТИВАЊЕ РЕТЕНЦИОНОГ ПОНАШАЊА ЛИГАНАДА ИМИДАЗОЛИНСКИХ И СЕРОТОНИНСКИХ РЕЦЕПТОРА У ТЛС И HPLC УСЛОВИМА

Аутор: Јована Јоксимовић

e-mail: jovana.joksimovic99@gmail.com

Ментори: доц. др Јелена Савић, маг. фарм. Дарија Обрадовић

Катедра за фармацеутску хемију, Фармацеутски факултет Универзитета у Београду

Увод: Лиганди имидазолинских и серотонинских рецептора основним или споредним механизмима постижу ефекат на централни нервни систем (CNS). Њихово ретенционо понашање је испитано применом хроматографије на танком слоју (TLC) и високоефикасне течне хроматографије (HPLC), у условима хидрофилних интеракција (HILIC). Студијама молекулске динамике је утврђено да се ретенциони механизам у вода/ацетонитрил и метанол/ацетонитрил HILIC системима разликује, тако да се може очекивати и другачије ретенционо понашање испитиваних једињења.

Циљ рада: Дефинисање ретенционих карактеристика лиганада и имидазолинских и серотонинских рецептора у HILIC-TLC и HILIC-HPLC системима.

Материјал и методе: Ретенционо понашање десет лиганада је испитано на аминок стационарној фази и различитим мобилним фазама, смешама: *i*) ацетонитрила и воде, *ii*) ацетонитрила и метанола. Модел расподеле и вишеструка линеарна регресиона анализа (MLR) су примењени за карактеризацију ретенционог процеса.

Резултати: Код липофилнијих једињења је уочена линеарна ретенција у метанол/ацетонитрил и нелинеарна у вода/ацетонитрил системима, док је у случају поларнијих једињења обрнуто. Модел расподеле је показао успешну применљивост за описивање ретенционог понашања. Показано је да липофилност (MLOGP2, MLOGP) и садржај угљеникових атома у молекулу (%C) утичу на ретенционо понашање у метанол/ацетонитрил, док карактеристике хетероцикла (RCI) и број незасићених веза (nMB) утичу на ретенцију у вода/ацетонитрил системима.

Закључак: Ретенционо понашање у HILIC системима зависи од врсте модификатора мобилне фазе, као и од структурних карактеристика испитиваних једињења. Хидрофобне карактеристике преводе ретенцију у метанол/ацетонитрил, док у вода/ацетонитрил условима доминира утицај геометријских карактеристика испитиваних једињења.

Кључне речи: лиганди имидазолинских рецептора; лиганди серотонинских рецептора; хидрофилне интеракције; HPLC; TLC

INVESTIGATION OF THE RETENTION BEHAVIOR OF IMIDAZOLINE AND SEROTONIN RECEPTOR LIGANDS IN TLC AND HPLC SYSTEMS

Author: Jovana Joksimović

e-mail: jovana.joksimovic99@gmail.com

Mentors: Assist. Prof. Jelena Savić, RA Darija Obradović

Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy University of Belgrade

Introduction: Imidazoline and serotonin receptor ligands have an effect on the central nervous system (CNS) by basic or secondary mechanisms and produce different therapeutic effects. Their retention behavior was examined using thin layer chromatography (TLC) and high performance liquid chromatography (HPLC) under the hydrophilic interaction conditions (HILIC).

The study of molecular dynamics has shown that retention mechanisms in water/acetonitrile and methanol/acetonitrile HILIC systems differ, therefore different retention behavior of these ligands can be expected as well.

The Aim: Defining the retention characteristics of imidazoline and serotonin receptor ligands in HILIC-TLC and HILIC-HPLC conditions.

Material and Methods: Retention behavior of ten ligands was investigated on the amino stationary phase and different mobile phases composed of: *i*) acetonitrile and water, *ii*) acetonitrile and methanol. The partition model and multiple linear regression analysis (MLR) were used to define the characteristics of the retention behavior.

Results: For the lipophilic compounds, the linear retention dominates in methanol/acetonitrile, and the non-linear in water/acetonitrile systems, while for the polar compounds is reversed. The partition model has shown successful applicability in the description of the retention behavior. It was obtained that lipophilicity (MLOGP2, MLOGP) and the percentage of carbon atoms in the molecule (%C) affect the retention behavior in methanol/acetonitrile, while the characteristics of heterocyclic ring (RCI) and the number of multiple bonds (nMB) have the influence on the retention in water/acetonitrile system.

Conclusion: The retention behavior in the HILIC systems depends on the type of mobile phase modifier and the structural characteristics of the tested compounds. The hydrophobic characteristics dominantly govern retention in the methanol/acetonitrile system, while in the water/acetonitrile system the influence of geometric characteristics of the tested compounds prevails.

Keywords: imidazoline receptor ligands; serotonin receptor ligands; hydrophilic interactions; TLC; HPLC