

Связь вращательного момента инерции молекулы с хроматографическим временем удерживания в ряду алканов. Новые индексы удерживания.

© Борисевич^{1,2} Игорь Сергеевич, Виноградова¹ Анастасия Константиновна, Пожидаев²⁺ Виктор Михайлович и Офицеров^{1*} Евгений Николаевич

¹ Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru

² Курчатовский Комплекс НБИКС-природоподобных технологий. Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”. пл. Академика Курчатова, 1. г. Москва, 123182. Россия. Тел.: (499) 196-71-00. E-mail: pojidaev2006@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: газовая хроматография, момент инерции вращательного движения, время удерживания, индекс удерживания, индекс Ковача, хроматографический индекс I_J , свойства четных и нечетных рядов алканов.

Аннотация

Ранее было показано, что причиной осцилляции физико-химических свойств и разбиения на четные и нечетные группы в гомологических рядах органических соединений является энергия вращательного движения, определяемая структурой молекулы и температурой. В свою очередь, структура органического соединения численно может быть описана или выражена через момент инерции вращательного движения. Логично было предположить, что должна быть корреляционная зависимость между временем удерживания и моментом инерции вращательного движения. С целью установления взаимосвязи вращательного момента инерции со временем хроматографического удерживания экспериментально была проанализирована смесь алканов нормального строения (C_6 - C_{17}) и построены соответствующие графики, подтверждающие сделанные предположения. Предложен новый хроматографический индекс I_J , имеющий преимущества перед индексом Ковача (I_K), так как он исходно учитывает разбиение гомологов на четные и нечетные.

Необходимо отметить, что значения указанного индекса взяты не из хроматографических данных, а выведены путем пересчета через моменты инерции вращательного движения относительно продольной оси x .

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
I_J	108	283	361	493	580	702	791	916	1000	1122	1212	1327	1419	1531	1641
I_K	200	300	400	500	600	700	800	900	1000	1100	1200	1300	1400	1500	1600

Здесь n – число атомов углерода в соответствующем алкане.

Как видно из рядов значений индексов, нами для удобства соотнесения со значениями индексов Ковача значение хроматографического индекса для декана принималось равным 10000, то есть, как и у Ковача. Обращает на себя внимание отклонение значений для первых членов гомологического ряда.