

## Прогнозирование физико-химических параметров веществ с использованием вращательного момента инерции и рекуррентных отношений

© Борисевич<sup>1,2</sup> Игорь Сергеевич, Пожидаев<sup>2</sup> Виктор Михайлович, Крыщенко<sup>1</sup> Юрий Константинович и Офицеров<sup>1\*†</sup> Евгений Николаевич

<sup>1</sup> 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, igo09volga@gmail.com

<sup>2</sup> 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:** момент инерции вращательного движения, индекс удерживания, индекс Ковача, индекс Винера.

### Аннотация

Перед учеными в науке всегда стояла проблема в прогнозировании физико-химических параметров веществ, в частности, членов гомологических рядов. Часто бывает, что данные для ряда соединений гомологического ряда могут просто отсутствовать. Одной из важнейших характеристик гомологов является температура кипения. Эта величина напрямую связана в газовой хроматографии со временем удерживания, однако невозможно создать одинаковые температурные условия для хроматографирования всех соединений. С другой стороны по некоторым свойствам, например, по температуре плавления, члены ряда делятся на два подряда – четный и нечетный. Фазовые переходы связаны с потерей или приобретением одной из степеней свободы. Анализ хроматограмм показал, что по времени удерживания нет разделения ряда на четные и нечетные, что свидетельствует об отсутствии адсорбции адсорбата с потерей вращательной степени свободы. На основании этого исследована возможность прогнозирования данных параметров с использованием момента инерции вращательного движения и рекуррентных соотношений, введенных в хроматографию И. Зенкевичем.