

## **Возможности использования аддитивных расчетов для прогнозирования параметров удерживания органических веществ в газовой хроматографии**

Лещев С.М., Каплин А.В., Винарский В.А.  
Белорусский государственный университет, г. Минск  
[gargorot@tut.by](mailto:gargorot@tut.by)

В работе рассмотрена принципиальная возможность использования принципа аддитивности энергии Гиббса распределения в виде его простейшего варианта – метода инкрементов групп для описания процессов межфазного распределения органических веществ в газовой хроматографии. В частности найдено, что параметры удерживания веществ простого строения, в молекулах которых отсутствуют выраженные эффекты внутримолекулярных взаимодействий, могут быть адекватно описаны и прогнозированы на основе метода инкрементов групп.

На основании констант распределения веществ между газовой и неподвижной фазами рассчитаны величины инкрементов метильной, метиленовой и функциональных групп в логарифм времени удерживания для различных классов органических веществ: предельных и непредельных алифатических углеводородов, ароматических углеводородов, нормальных алифатических спиртов, простых и сложных эфиров, алкил- и арилгалогенидов, альдегидов, кетонов, карбоновых кислот, аминов, нитрилов и нитросоединений. Определено влияние характера неподвижной фазы и температуры колонки на величины инкрементов групп. Установлено, что с ростом полярности неподвижной фазы величины инкрементов полярных групп возрастают, инкременты метильной и метиленовой группы изменяются незначительно, а с ростом температуры инкременты всех групп уменьшаются. Зависимость величин инкрементов групп от температуры имеет линейный характер. Показана возможность предсказания параметров удерживания органических веществ в насадочной газо-жидкостной хроматографии на основании их структуры, с привлечением аддитивных расчетов. Найдено, что точность прогнозирования времен удерживания веществ простого строения составляет 5-10%.

Выявлены и интерпретированы случаи существенных отклонений определяемых экспериментально параметров удерживания от расчетных значений.