

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АДДИТИВНЫХ ИНДЕКСОВ УДЕРЖИВАНИЯ

А. Ю. Рудецкая (МГУ имени А. А. Кулешова)

Науч. рук. *В. А. Лысова*,

канд. техн. наук, доцент

Концепция представления параметров удерживания в интерполяционной форме индексов удерживания активно используется в хроматографии на протяжении более 50 лет [1, с. 414]. Она позволяет заменить прямое сравнение идентифицируемых аналитических веществ с образцами индивидуальных соединений, сопоставляя экспериментально определенные параметры удерживания с эталонными значениями индексов удерживания. Для этого необходимы современные компьютерные базы данных, содержащие информацию о значительном количестве объектов.

Среди множества известных принципов оценки индексов удерживания при решении практических задач целесообразно использовать наиболее простые и доступные методы, такие как аддитивные схемы, основанные на принципе аддитивности свободных энергий взаимодействия сорбата и неподвижной фазы.

Применение этих схем подразумевает, что идентификация еще не охарактеризованных органических соединений может основываться на данных о более простых гомологах или лучше изученных изомерах.

При переходе от простейших к более сложным гомологам количество изомеров увеличивается, в то время как доля соединений, для которых имеются аналитические параметры и физико-химические константы, значительно уменьшается.

Термин «аддитивная схема» не подразумевает единого алгоритма для оценки индексов удерживания и может быть реализован различными способами. С одной стороны, это является преимуществом, так как открывает множество возможностей, но с другой стороны, создает проблему выбора наиболее подходящих методов для решения конкретных задач [2, с. 610].

Литература

1. **Babushok, V. I.** Development of a database of gas chromatographic retention properties of organic compounds / V.I. Babushok et al. // J. Chromatogr. – 2007. – V. 1157. – P. 414-421.
2. **Столяров, Б. В.** Практическая газовая и жидкостная хроматография / Б.В. Столяров с соавт. – СПб: Изд. СПб ун-та, 2002. – 610 с.