چکیده

در این پژوهش، از مطالعات رابطه کمی ساختار- بازداری (QSRR) برای مدل‌سازی هم‌زمان و پیش‌بینی شاخص بازداری گروهی از الکل‌های اشباع بر روی ستون‌های کروماتوگرافی گازی با قطبیت متفاوت استفاده شد. سری داده‌ها، شامل ۱٤۱ مقدار شاخص بازداری بر روی شش ستون کروماتوگرافی SE-30، OV-3، OV-7، OV-11، OV-17 و OV-25 بودند. مدل‌سازی QSRR، به وسیله تکنیک رگرسیون خطی چندگانه مبتنی بر روش انتخاب متغیر گام به گام و تنها با ترکیب توصیف‌کننده‌های توپولوژیکی و پارامتر قطبیت مک رینولدز به عنوان معیاری از قطبیت ستون های کروماتوگرافی انجام گردید. بهترین مدل رگرسیونی ایجاد شده، شامل چهار توصیف کننده بود و آماره‌های R^2، خطای استاندارد و نسبت فیشر برای آن، به ترتیب برابر با ۰/۹۹٤، ۹/۸۳۱ و ٥٤٦۸/٤ به دست آمدند. متغیرهای وارد شده در مدل، شامل توصیف‌کننده‌های توپولوژیکی مبتنی بر نوع اتم AI(>C<) و AI(-OH)، شاخص توپولوژیکی مرتبه اول رندیک ($^1\chi$) و پارامتر قطبیت مک رینولدز بودند. کیفیت مدل، به روش اعتبارسنجی خارجی مورد بررسی قرار گرفت و خطاهای استاندارد پیش‌بینی و کالیبراسیون به ترتیب در گستره ۱۰/۷۱٥- ۸/۰٥٦ و ۸/۳۰۹- ۷/٤٥٤ به دست آمدند. صحت پیش‌بینی مقادیر شاخص بازداری، به روش گرافیکی نیز مورد تأیید قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان دادند که توصیف-کننده‌های توپولوژیکی مورد استفاده در این پژوهش، از کارایی بالایی جهت مدل‌سازی هم‌زمان شاخص بازداری الکل‌های اشباع بر روی ستون‌های کروماتوگرافی گازی مختلف برخوردار می‌باشند.

واژگان کلیدی: رابطه کمی ساختار - بازداری، کروماتوگرافی گازی، رگرسیون خطی چندگانه، توصیف‌کننده-های توپولوژیکی مبتنی بر نوع اتم، شاخص مرتبه اول رندیک