

کاربرد توصیف کننده های توپولوژیکی در مطالعه رابطه کمی ساختار-شاخص بازداری

سپهر رحمانی*، 148،

1396-11-11

چکیده در این پژوهش، از مطالعات رابطه کمی ساختار- بازداری (QSRR) برای مدل-سازی هم-زمان و پیش-بینی شاخص بازداری گروهی از الکلهای- اشباع بر روی ستون-های کروماتوگرافی گازی با قطبیت متفاوت استفاده شد. سری داده-ها، شامل 141 مقدار شاخص بازداری بر روی شش ستون کروماتوگرافی 30-SE، 3-OV، 7-OV، 11-OV، 17-OV و 25-OV بودند. مدل-سازی QSRR، به وسیله تکنیک رگرسیون خطی چند-گانه مبتنی بر روش انتخاب متغیر گام به گام و تنها با ترکیب توصیف-کننده های 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 آماره های R2، خطای استاندارد و نسبت فیشر برای آن، به ترتیب برابر با 0/994، 9/831 و 4/5468 به دست آمدند. متغیرهای وارد شده در مدل، شامل توصیف-کننده های توپولوژیکی مبتنی بر نوع اتم AI(>C

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

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)