

- 1) Постоянная дисперсионного взаимодействия C - эта константа может быть представлена в форме суммы инкрементов взаимодействия атомов i -го сорта одной молекулы с атомами k -го сорта другой молекулы:

$$C = \sum_{ik} C_{ik}$$

- 2) Инкремент определяется достаточно точно из экспериментов по адсорбции углеводородов на графите, и из этих работ следует, что $\sqrt{C_C} = 1,14$.
- 3) Под обратным прогнозированием понимается нахождение соединений, которые будут иметь заданные V_k, A, T_k, M .
- 4) Изомер октана. C_8H_{18} :

$$V_k = 468,8 \frac{\text{см}^3}{\text{МОЛЬ}}, A = 1,639$$
$$\sqrt{C} = \sum_i \sqrt{C_i} = 8 * 1,14 + 18 * 0,41 = 16,5$$
$$T_k = \left(\frac{0,6443 * 16,5 * 10^3}{468,8} \right)^2 = 514,2 \text{ K}$$