

Nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás módszer optimalizálása Microsoft Excel felhasználásával

Optimizing a high performance liquid chromatography separation with Microsoft Excel

drd. SZEREDAI Bettina-Dóra, dr. MUNTEAN Norbert¹, dr. TÓTÓS Róbert

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és vegyészmérnöki Kar, Fizikai-kémia Tanszék
400 028 Kolozsvár (Cluj), Románia, str. Arany János nr. 11
Tel: +40-(0)264--593833; Fax: +40-(0)264-590818; www.chem.ubbcluj.ro; ¹email: mtnorbi@gmail.com

ABSTRACT

The aim of this study was to write a program in Microsoft Excel which is capable to simulate a isocratic separation performed with an high performance liquid chromatography (HPLC). Optimization of a HPLC separation was hindered under laboratory conditions, however, with an HPLC simulator experiments can be designed to predict the practical conditions of optimization procedure.

In our research, a complete separation of a four-component mixture was performed by determining the relationship between solvent composition and retention factors. The use of Excel spreadsheets facilitates the transparency of the analysis of the data needed to develop the method.

KIVONAT

A kutatásunk célja egy olyan Microsoft Excel program megírása volt, amely képes az eluenserősség hatását szimulálni egy izokratikus folyadékkromatográfiás eljárás során. Fontos volt számunkra, hogy egy olyan optimális eluens összetételt állapítsunk meg a szoftver segítségével, ahol mind a felbontás, mind a teljes futási idő megfelelő, ezáltal lecsökkenteni a kísérletek számát.

A modellezés alapja egy empirikus képlet amely kapcsolatot teremt az alkalmazott eluens szerves oldószer aránya és az adott komponens retenciós faktora között, amely kapcsolatot teremt a retenciós faktor logaritmus és az eluens összetétele között.

A retenciós faktorból és a holtidőből retenciós időt tudunk számolni, amelyet fel tudunk használni a Gaussian típusú detektor jel megalkotásához, és abban az esetben, ha változtatjuk az eluenserősséget a kromatogram változni fog, így meg tudjuk állapítani azt az összetételt, ahol a felbontás számunkra megfelelő

Kulcsszavak: HPLC, eluenserősség, HPLC szimuláció, Microsoft Excel