



# Nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás módszer optimalizálása Microsoft Excel felhasználásával.

drd. SZEREDAI Bettina-Dóra, dr. MUNTEAN Norbert<sup>1</sup>, dr. TÓTÓS Róbert

Babeş -Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, 400028 Kolozsvár, Románia, Arany János utca 11 szám, <sup>1</sup>mtnorbi@chem.ubbcluj.ro

A kutatásunk célja egy olyan Microsoft Excel program megírása volt, amely képes az eluenserősség hatását szimulálni egy izokratikus folyadékkromatográfiás eljárás során.

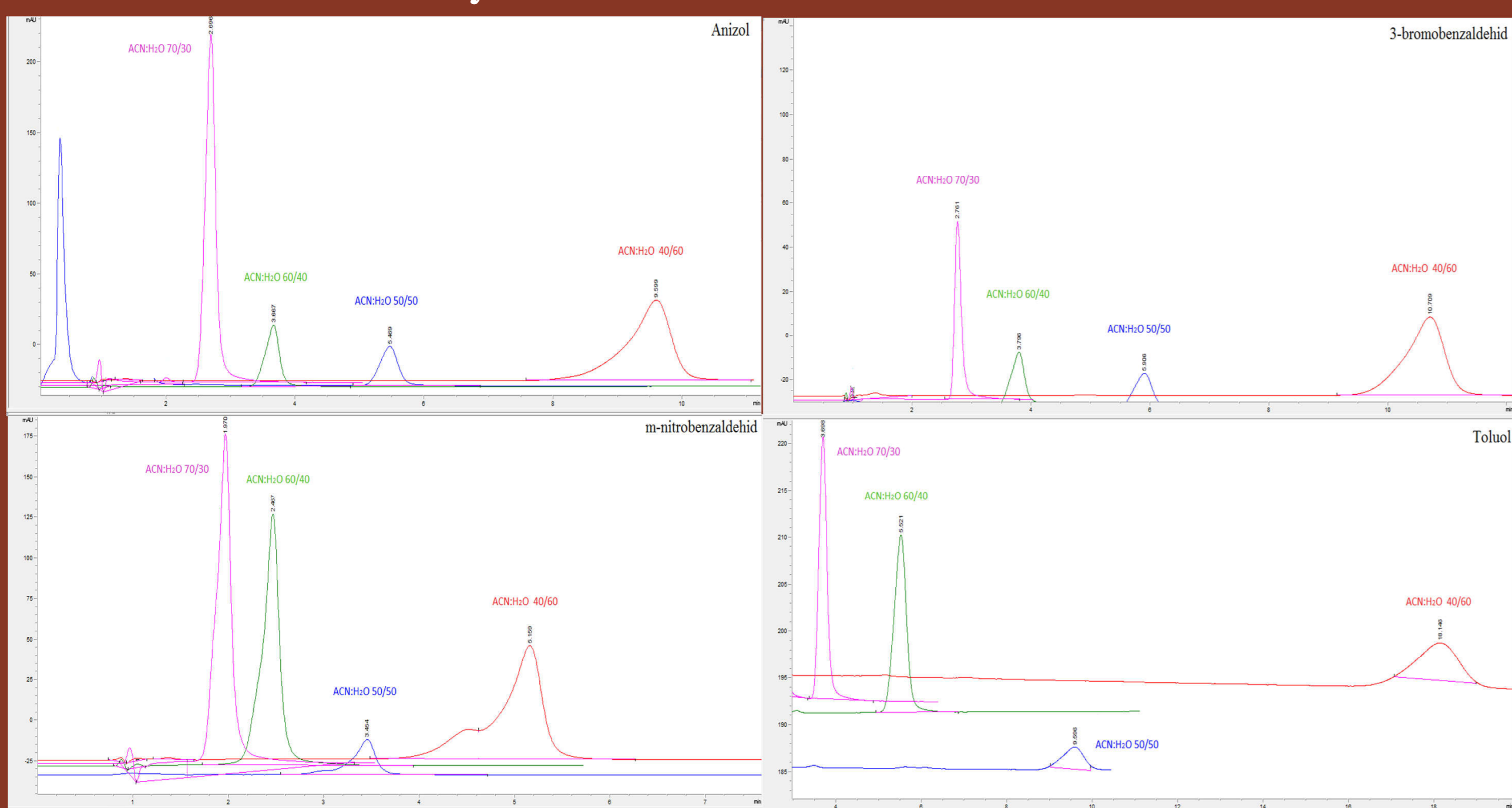
A modellezés alapja egy empirikus képlet amely kapcsolatot teremt az alkalmazott eluens szerves oldószer aránya ( $\Phi$ ) és az adott komponens retenciós faktora között ( $k$ ).

$$\log k = \log k_w - S\Phi$$

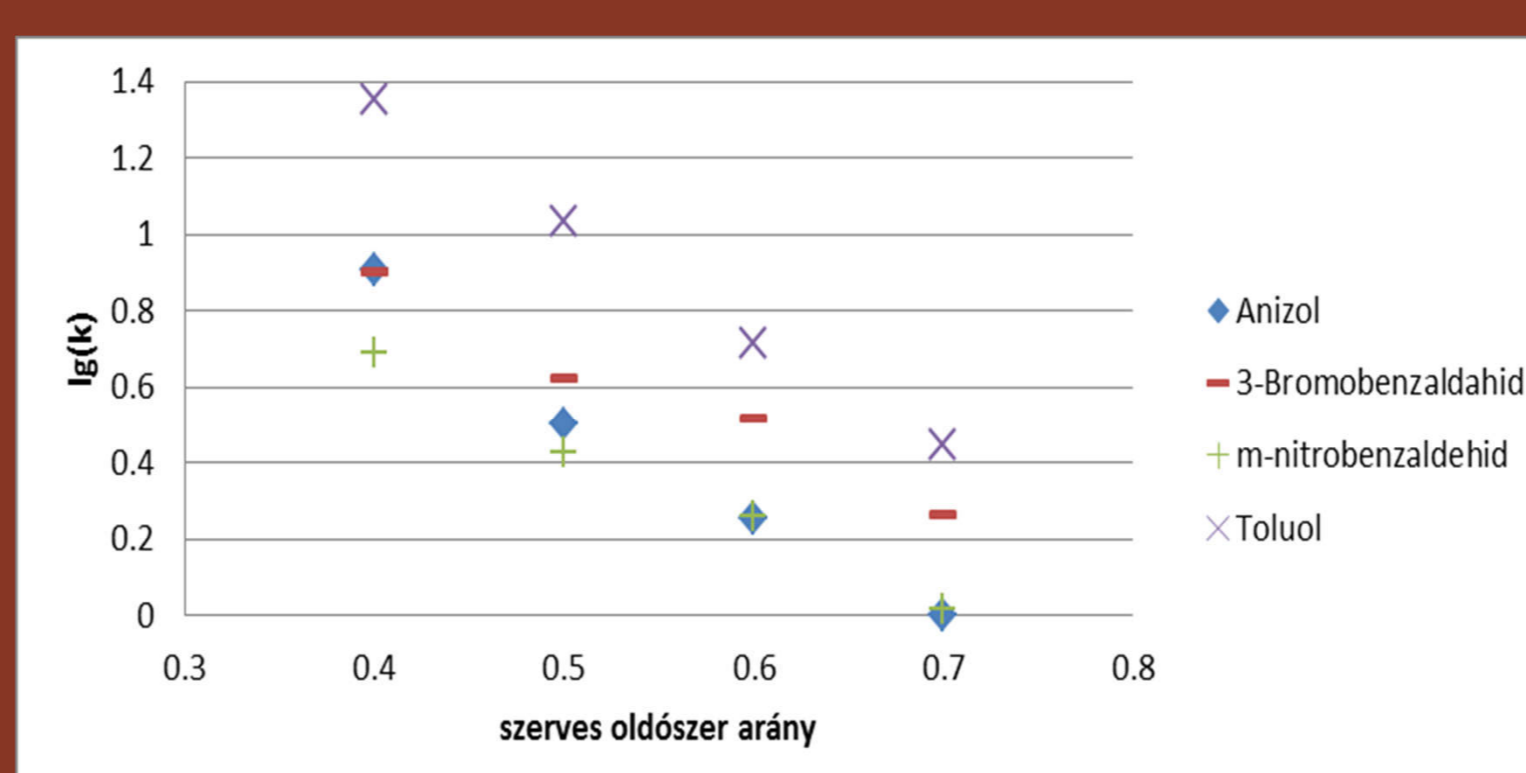
A retenciós faktorból és a holtidőből retenciós időt tudunk számolni, amelyet fel tudunk használni a Gaussian típusú detektor jel megalkotásához, és abban az esetben, ha változtatjuk az eluenserősséget a kromatogram változni fog, így meg tudjuk állapítani azt az összetételt, ahol a felbontás számunkra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

## Szimulációs paraméterek meghatározása

Négy anyag kromatogramját határoztuk meg, négy különböző szerves oldószer aránya mellett.



A kromatogramokból meghatározzuk a retenciós időt és a holtidőt, ezeket használjuk fel a retenciós faktor kiszámításához.

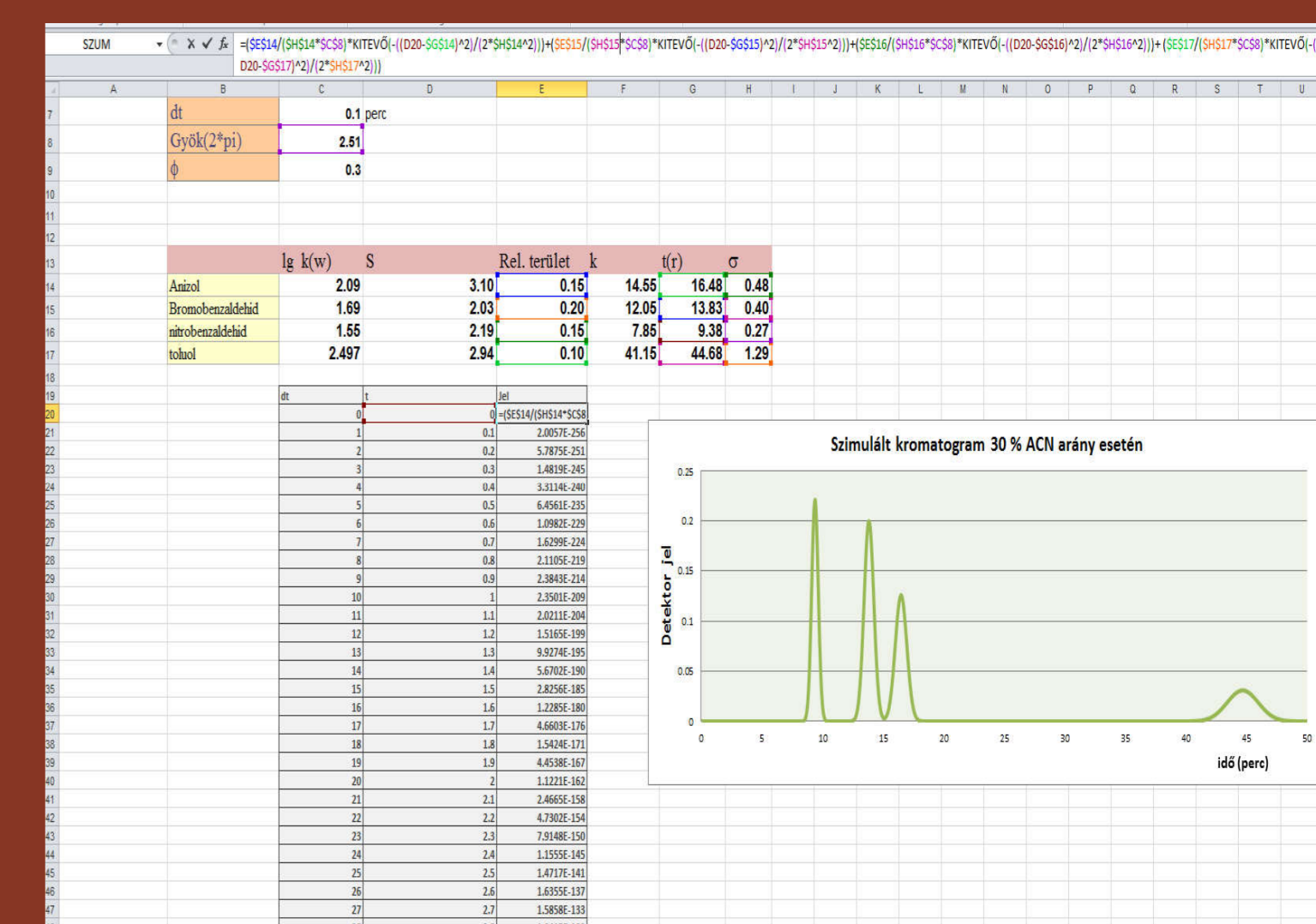
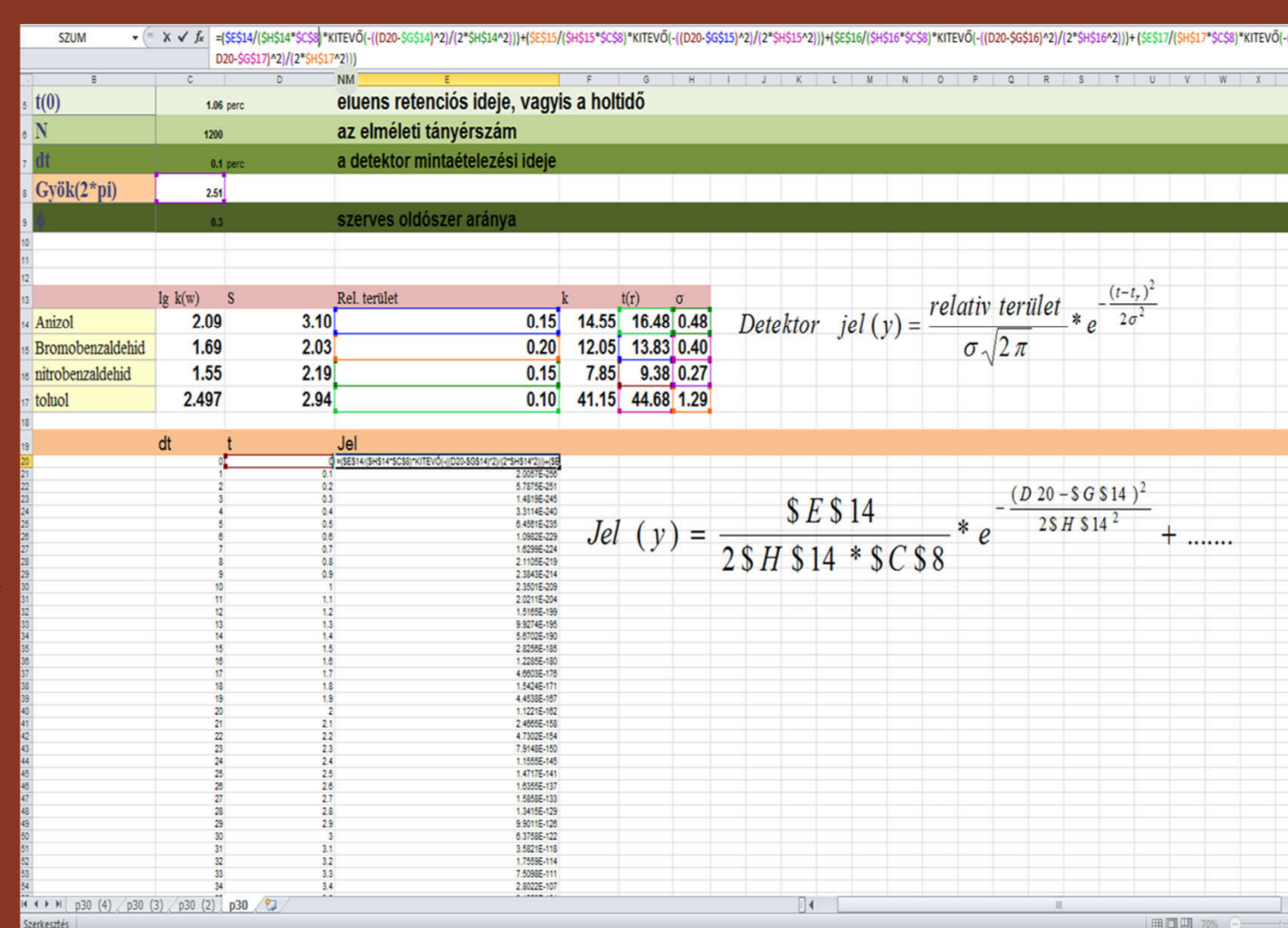
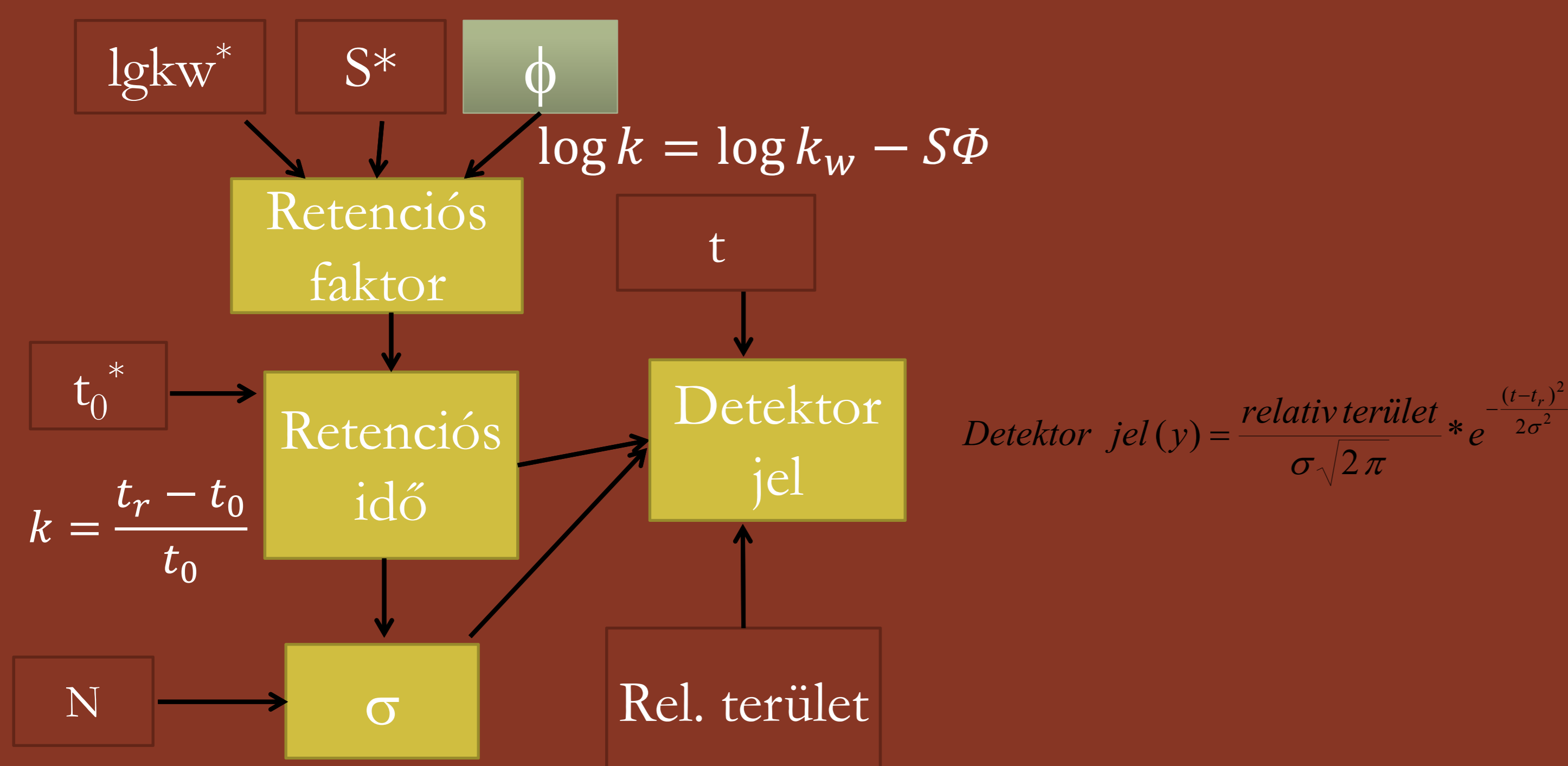


Anyag neve	Merekség S	Metszet lg(k <sub>w</sub> )	R <sup>2</sup>
anizol	3.095	2.091	0,982
BBA	2.033	1.694	0,975
NBA	2.19	1.552	0,993
toluol	2.942	2.497	0,999

A mért retenciós faktorok logaritmusai a szerves oldószer arányának függvényében

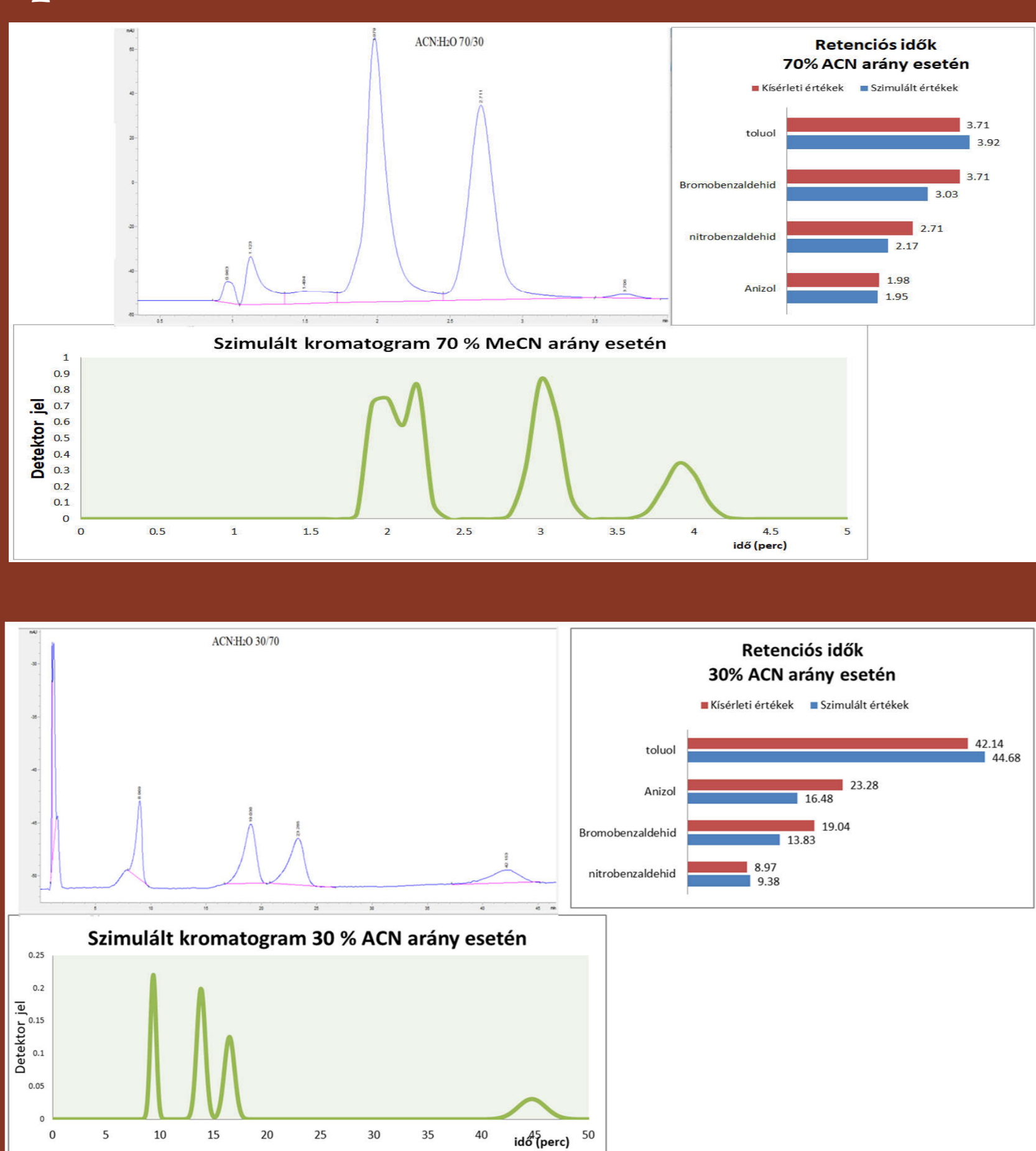
A szimulációhoz szükséges merekség és metszet értékei

## Microsoft Excel program felépítése



\*kísérletek során meghatározott paraméter

## Négy komponensű elegy elválasztásának optimalizálása



## Következtetések

- A retenciós faktor logaritmusai és a szerves oldószer aránya között lineáris kapcsolat van a vizsgált komponensek esetén
- Megfelelő optimalizálás után sikerült elválasztani a keveréket
- Az elkészített program jól használható elválasztás optimalizálásához
- A szimulált és kísérleti retenciós idő értékek között jó egyezés van
- Nagy eluenserősség mellett mért retenciós idők eltérnek a szimulált értékektől => az empirikus képlet csak bizonyos eluenserősség tartományban működik megfelelően

## Referenciák

- R. A. Shalliker, S. Kayillo, G. R. Dennis, Journal of Chemical Education, (2008), vol. 85, issue 9, p. 1265-1268
- Daniel Abate-Pella, Dwight R. Stoll, Peter W. Carr, Paul G. Boswell, LC GC Solution for separation scientists, (2015), vol. 33, issue 3, p. 200-207