

Автоматизація розрахунків хроматографічних величин утримування при ідентифікації ароматичних речовин

І.М. Силка, Н.Е. Фролова

Національний університет харчових технологій

При аналізі різних класів речовин, в тому числі ароматичних, широко використовують хроматографічний аналіз. Хроматографія — метод розділення, аналізу і дослідження сумішей речовин [1]. Найважливіші характеристики хроматограми: час утримування $t_{y_{TP}}$, утримуваний об'єм та індекс утримування – відображають природу речовин, їх здатність до сорбції на матеріалі нерухомої фази і є засобом ідентифікації речовини.

Сьогодні в світовій літературі існують спеціальні бази по індексах утримування (індекс Ковача), які призначені для роботи з пакетами комп'ютерних розрахункових програм приладу. Для коректного використання такими базами даних необхідно забезпечувати повну відповідність усіх умов проведення аналізу. Часто в умовах лабораторії доступ до таких баз даних є не можливий.

У науковій літературі широко обговорюється і пропонуються шляхи і методи встановлення хроматографічних величин утримування [3]. Індекс утримування або, як його називають, індекс Ковача (ІК) за своєю природою є величиною експериментального визначення.

ІК – це логарифмічна форма інтерполяційної характеристики утримування, що дорівнює числу атомів вуглецю в молекулі n-алкану помноженому на коефіцієнт, який дорівнює 100. ІК мало залежить від умов роботи хроматографа та визначаються логарифмічною інтерполяцією між часами утримування двох n-алканів за формулою

$$IK = 100z + 100 \frac{\lg t_{y_{TP}i} - \lg t'_{y_{TP}z}}{\lg t_{y_{TP}(z+1)} - \lg t_{y_{TP}z}} \quad (1)$$

де $t_{y_{TP}z}$ – виправлений час утримування n-алкану з z атомами вуглецю; $t_{y_{TP}(z+1)}$ – виправлений час утримування n-алкану з z+1 атомами вуглецю; $t_{y_{TP}i}$ – виправлений час утримування досліджуваної речовини (компонента). При цьому потрібно дотримуватися умови: $t_{y_{TP}z} < t_{y_{TP}i} < t_{y_{TP}(z+1)}$.

З огляду на складні та тривалі розрахунки в середовищі інструментальної системи Visual Basic було розроблено комп'ютерну програму, яка заснована на математичному моделюванні методу газової хроматографії та призначена для ідентифікації компонентів у ході хроматографічного аналізу складу сумішей ароматичних речовин (АР).

На рис. 1 представлена блок-схема проведення наукових досліджень із розроблення програмного забезпечення розрахунку індексів утримання для ідентифікації компонентів ефірних олій, фракцій, ароматизаторів, тобто ароматичних речовин.

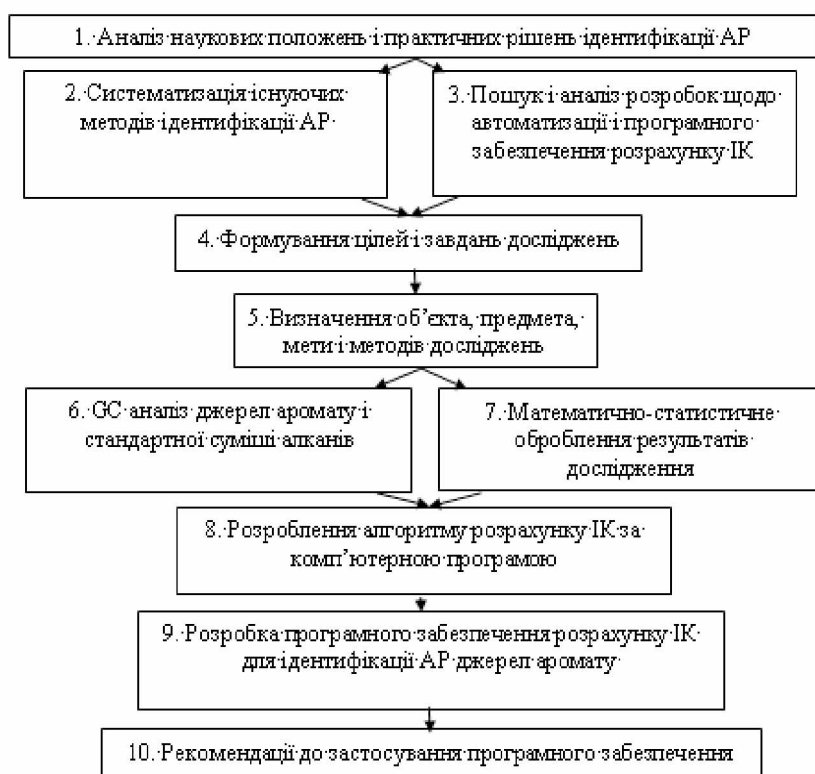


Рис. 1. Блок-схема послідовності наукових досліджень при розробці комп'ютерної програми

Вихідні дані для програми являють собою параметри утримування, що характеризують нерухому фазу, паспортні характеристики та параметри роботи вузлів хроматографа. Програма проводить розрахунок індексу Ковача за часом виходу піку компонента, що дозволяє провести ідентифікацію речовини за існуючими довідниками [4].

Запропоновані нами підходи встановлення значень індексів утримування не можуть повністю замінити існуючі методи визначення. Однак проведені дослідження цілком можна використовувати не тільки при вивченні АР, а й при ідентифікації компонентів інших сумішей речовин аналізованих методами газової хроматографії.

Література

1. Шайдулина Г.М. Хромато-масс-спектрометрический анализ при производстве ароматообразующих композиций с использованием эфирных масел / Г.М. Шайдулина // Пищевая промышленность. – 2005. – № 5. – С.16–19.
2. Хайвер К. Высокоэффективная газовая хроматография / Хайвер К. – М.: Мир, 1993. – 283 с.
3. Прудковский А. Инструмент для оценки индекса Ковача по времени удерживания вещества в газовой хроматографии / А.Г. Прудковский, А.М. Долгонос // Журнал аналитической химии. – 2008, – № 9. – С.935-940.
4. Богословський Ю.Н. Справочник хроматографических величин удерживания / Богословський Ю.Н., Анваер Б.И., Вигдергауз М.С. – М.: Стандарты, 1988. – 320 с.