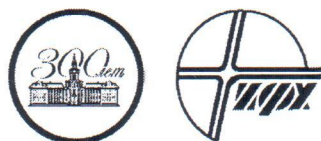


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Российская академия наук
Отделение химии и наук о материалах
Научный Совет РАН по физической химии
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской академии наук



ДЕВЯТЫЙ ВСЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ И
ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
«КИНЕТИКА И ДИНАМИКА СОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ»,
ПРИУРОЧЕННЫЕ К 150-ЛЕТИЮ
СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ М.С. ЦВЕТА

30 ОКТЯБРЯ – 03 НОЯБРЯ, 2022

г. СОЧИ

УДК 54
ББК 24.5
Ф503

Утверждено к печати Федеральным государственным бюджетным
учреждением науки Институтом физической химии и электрохимии
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук

К413 Кинетика и динамика сорбционных процессов. Девятый всероссийский симпозиум и школа-конференция молодых ученых, приуроченные к 150-летию со дня рождения М.С. Цвета, 30 октября – 3 ноября, 2022, Сочи, Россия. *Сборник трудов симпозиума.* — М.: ИФХЭ РАН, 2022. — 180 с.

ISBN 978-5-00202-186-4

В сборнике представлены материалы Девятого всероссийского симпозиума и школы-конференции молодых ученых «Кинетика и динамика сорбционных процессов».

Сборник включает тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов, а также публикации по следующим направлениям: физико-химические основы сорбционных процессов; приборные разработки; отечественные методические и программные решения в области сорбционных процессов; новейшие достижения в сочетании хроматографических методов и масс-спектрометрии и других объектов исследований; история хроматографии к 150-летию со дня рождения М.С. Цвета (круглый стол); заседание, посвященное памяти доктора химических наук Вадима Александровича Даванкова; круглый стол по изданию книги «Хроматография в России, СССР и РФ».

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Для широкого круга химиков, физиков, экологов, специалистов научно-исследовательских групп, организаций, аспирантов и студентов.

ISBN 978-5-00202-186-4

© Авторы научных статей, 2022
© «ИФХЭ РАН», 2022

УДК 543.544.5:068.7

ОСОБЕННОСТИ ЗАВИСИМОСТИ ИНДЕКСОВ УДЕРЖИВАНИЯ АНАЛИТОВ В ОФ ВЭЖХ ОТ СОДЕРЖАНИЯ ОРГАНИЧЕСКОГО КОМПОНЕНТА ЭЛЮЕНТА

Зенкевич И.Г., Деруиш А., Никитина Д.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
Университетский просп., 26, Санкт-Петербург 198504, Россия
E-mail: izenkevich@yandex.ru*

Показано, что коэффициенты dRI/dC , характеризующие зависимость индексов удерживания в ОФ ВЭЖХ от содержания органического растворителя в составе элюента, коррелируют с гомологическими инкрементами факторов гидрофобности ($i_{\log P}$) и гомологическими инкрементами индексов удерживания (i_{RI}) аналитов.

The coefficient dRI/dC characterizes the dependence of retention indices (RI) on the content of organic solvent in an eluent. The correlation of these coefficients with homologous increments of hydrophobicity factors ($i_{\log P}$) and homologous increments of retention indices (i_{RI}) has been revealed and discussed.

Температурная зависимость (dRI/dT) является одной из важных особенностей газохроматографических индексов удерживания. В обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ) известен ее аналог: зависимость индексов от содержания органического растворителя в составе элюента, dRI/dC . Значения таких коэффициентов варьируют от -6 до +5 ед. индекса на 1% изменения содержания органического растворителя (метанола) в составе элюента. Большинство факторов, влияющих на dRI/dT в ГХ известны, а характеристика закономерностей вариаций dRI/dC в ОФ ВЭЖХ является целью настоящей работы.

В качестве некоторого «стандартного» уровня корреляции переменных в ОФ ВЭЖХ целесообразно рассмотреть известную зависимость RI от факторов гидрофобности аналитов ($RI = a \log P + b$); ее график для 22 различных соединений приведен на Рис. 1 ($R = 0.942$). Однако, в отличие от самих RI, параметры dRI/dC не коррелируют со значениями $\log P$ (Рис. 2). Из других хроматографических переменных представляют интерес такие величины как гомологические инкременты факторов гидрофобности ($i_{\log P}$) и гомологические инкременты индексов удерживания (i_{RI}):

$$i_{\log P} = \log P - x \Delta \log P(\text{CH}_2) \quad (1)$$

$$i_{RI} \approx RI - 100x \quad (2)$$

где $x = \text{int}(M/14)$, M – молекулярное массовое число аналита, $\Delta \log P = 0.54 \pm 0.07$. Значения i_X – инварианты гомологических рядов, не зависящие от свойств конкретных гомологов.

Коэффициенты корреляции регрессий [$dRI/dC = a(i_{\log P}) + b$; 0.942] (Рис. 3) [$dRI/dC = a(i_{RI}) + b$; 0.934] (Рис. 4) близки к величине R для зависимости $RI = a \log P + b$ (Рис. 1).

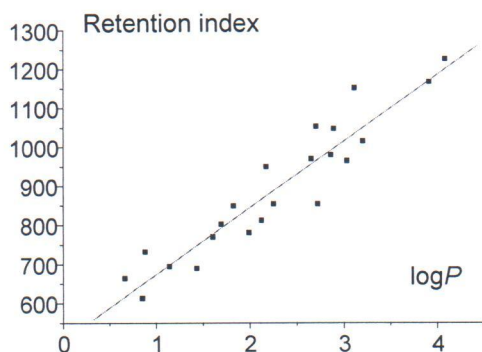


Рис. 1. Зависимость RI (элюент метанол - вода) от факторов гидрофобности ($\log P$); параметры линейной регрессии: $a = 171 \pm 14$, $b = 503 \pm 33$, $R = 0.942$, $S_0 = 59$.

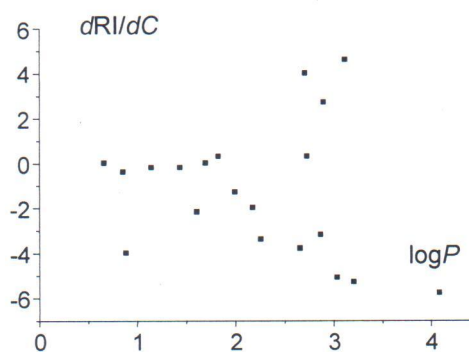


Рис. 2. Зависимость dRI/dC от факторов гидрофобности ($\log P$). Корреляция отсутствует.

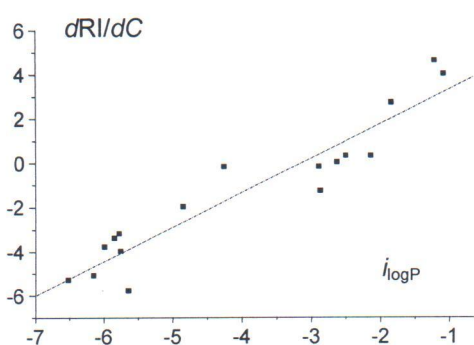


Рис. 3. Зависимость dRI/dC от гомологических инкрементов факторов гидрофобности ($i_{\log P}$); параметры уравнения линейной регрессии: $a = 1.55 \pm 0.14$, $b = 4.9 \pm 0.6$, $R = 0.942$, $S_0 = 1.1$.

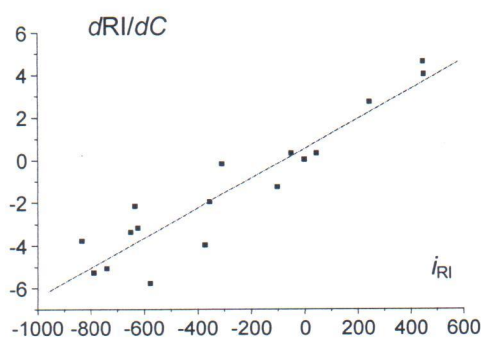


Рис. 4. Зависимость dRI/dC от гомологических инкрементов индексов удерживания (i_{RI}); параметры уравнения линейной регрессии: $a = (7.0 \pm 0.7) \times 10^{-3}$, $b = 0.5 \pm 0.3$, $R = 0.934$, $S_0 = 1.2$.

Все обсуждаемые корреляции предварительно были выявлены для выборки меньшего объема [1]. Таким образом, параметры зависимостей индексов удерживания в ОФ ВЭЖХ от содержания органического растворителя (метанола) в элюенте, dRI/dC , определяются не свойствами конкретных аналитов, а наличием определенных функциональных групп и особенностей структуры молекул. Обсуждаются причины усложнения зависимостей $RI = f(C)$ для элюентов, содержащих ацетонитрил.

Благодарность

Хроматографические данные с использованием метанола в качестве компонента элюента получены в Ресурсном центре «Методы анализа состава вещества» Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета.

Литература

1. Зенкевич И.Г., Дерушии А. // Аналитика и контроль. 2022. Т. 26. № 1. С. 41-48.