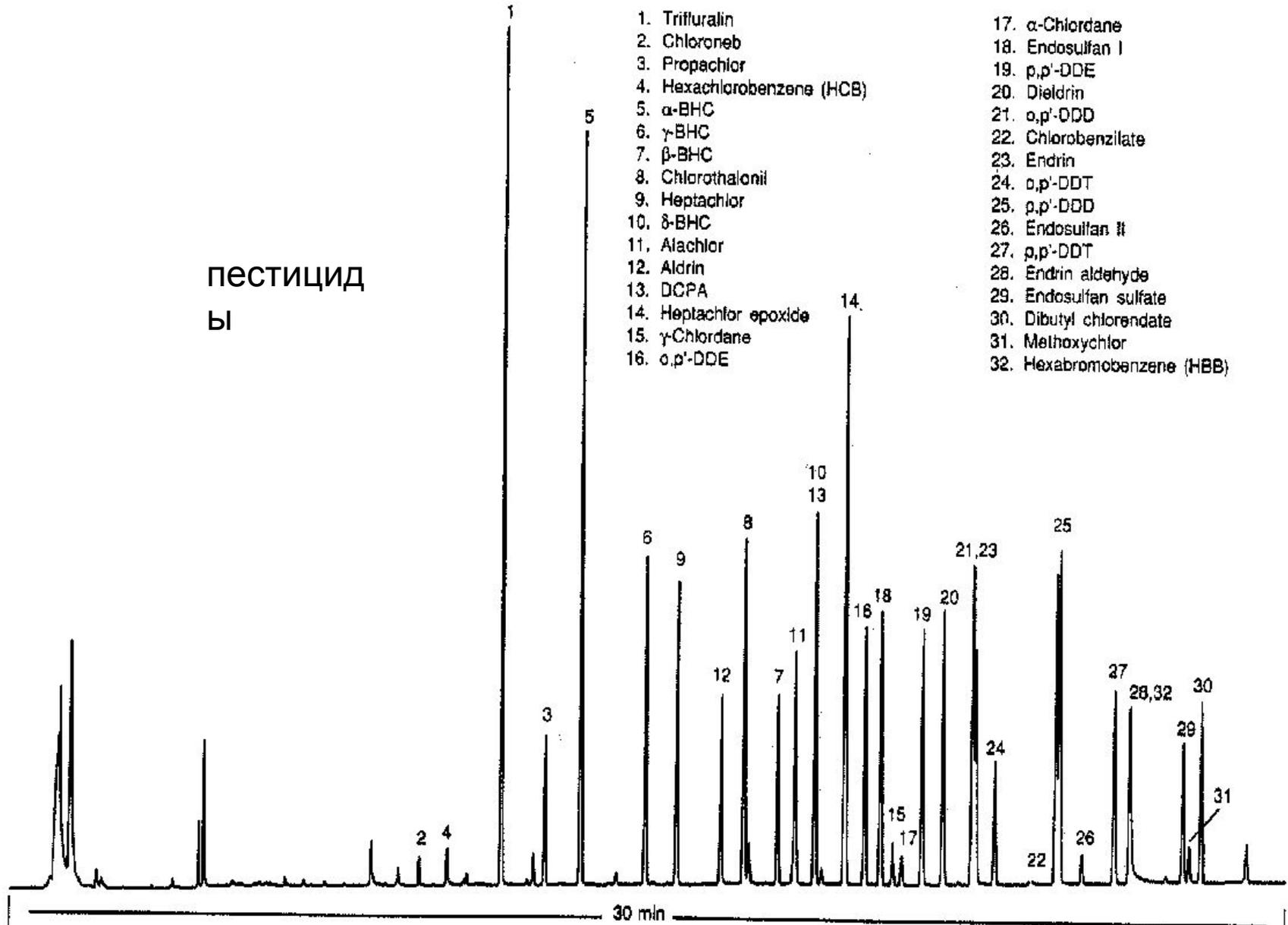


Хроматограмма

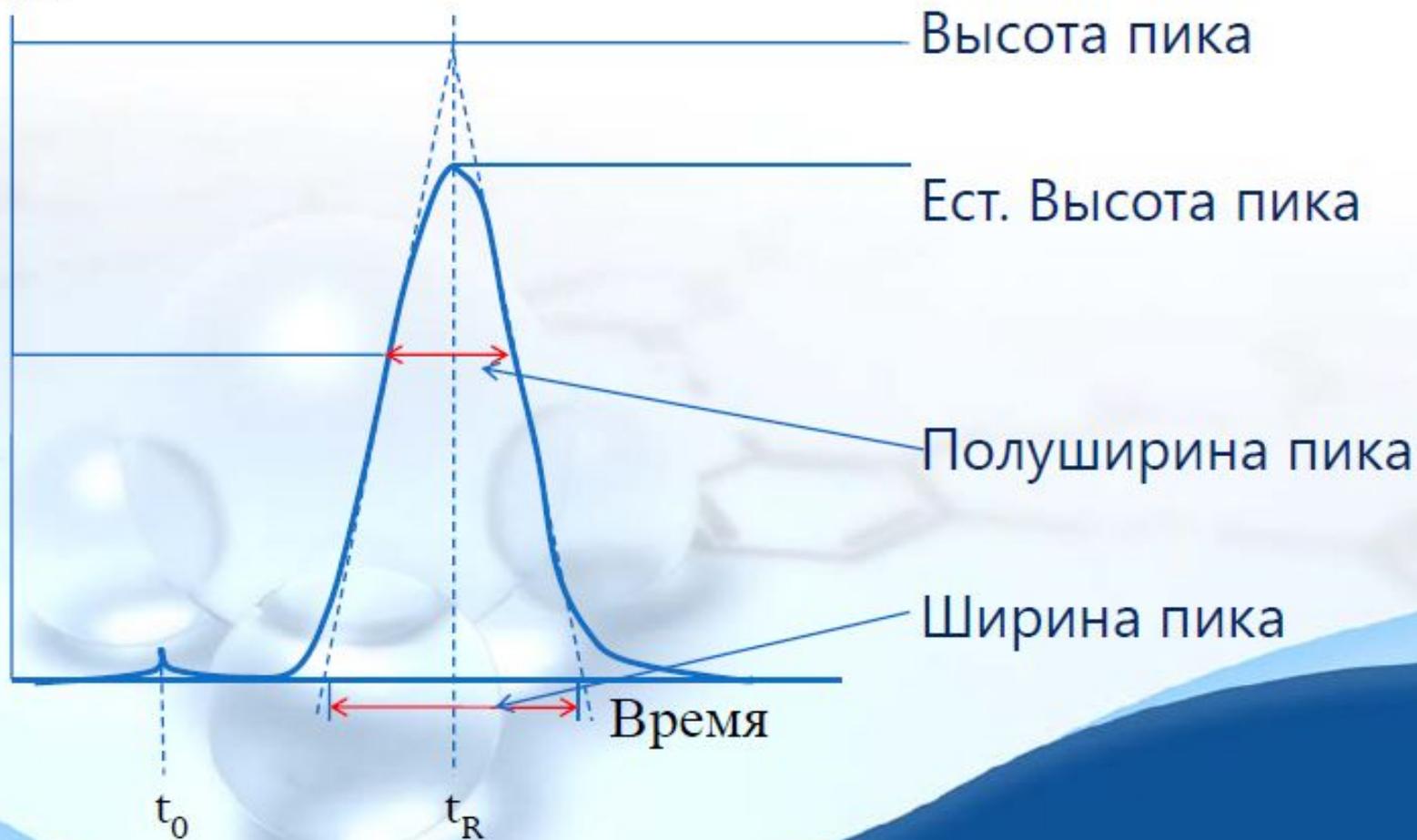
пестициды

1. Trifluralin
2. Chloroneb
3. Propachlor
4. Hexachlorobenzene (HCB)
5. α -BHC
6. γ -BHC
7. β -BHC
8. Chlorothalonil
9. Heptachlor
10. δ -BHC
11. Alachlor
12. Aldrin
13. DCPA
14. Heptachlor epoxide
15. γ -Chlordane
16. *o,p'*-DDE
17. α -Chlordane
18. Endosulfan I
19. *p,p'*-DDE
20. Dieldrin
21. *o,p'*-DDD
22. Chlorobenzilate
23. Endrin
24. *o,p'*-DDT
25. *p,p'*-DDD
26. Endosulfan II
27. *p,p'*-DDT
28. Endrin aldehyde
29. Endosulfan sulfate
30. Dibutyl chlorendate
31. Methoxychlor
32. Hexabromobenzene (HBB)



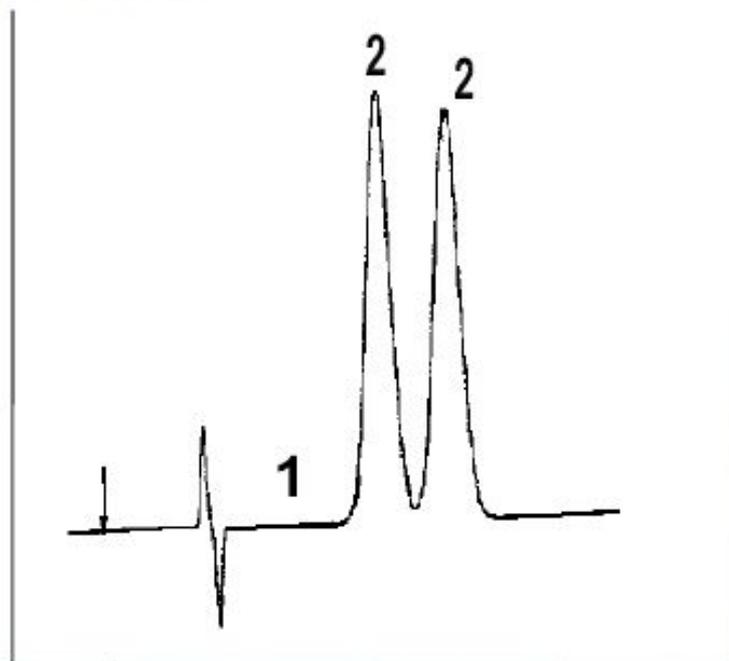
Хроматографический пик

Сигнал



Хроматограмма

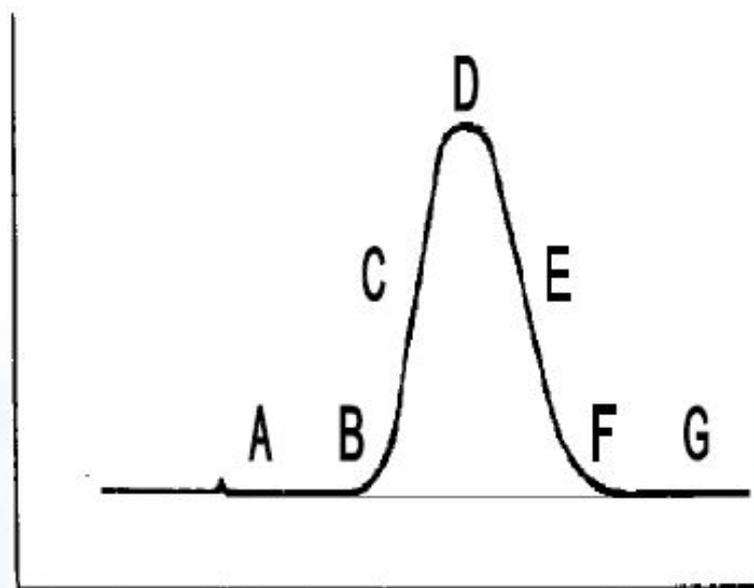
Сигнал



Время

1 - базовая линия
(«нулевая» линия);
2 - хроматографический пик

Сигнал



Время

линия АВ - базовая (нулевая) линия
линия ВСD - передний фронт пика
D - вершина пика
линия DEF - задний фронт (тыл, хвост) пика
линия FG - базовая (нулевая) линия

Параметры удерживания

В газовой
хроматографии

 t_R

время
удерживания

 $V_R = t_R \omega$

удерживаемый
объём

ω – скорость газа-
носителя

$$\omega = \omega_{\text{эксп}} \cdot \frac{T}{T_{\text{комн}}} \left(1 - \frac{p_{\text{воды}}}{p_{\text{атм}}} \right)$$

Параметры удерживания

В жидкостной
хроматографии

 t_R

время
удерживания

$$K' = t'_R / t_0$$

фактор
ёмкости

Параметры удерживания

В тонкослойной
хроматографии

$$R_f = \frac{l_x}{l_f - l_0} \quad \text{фактор удерживания}$$

l_x - расстояние, пройденное концентрационной зоной анализируемого вещества

l_f - расстояние до фронта растворителя

l_0 - расстояние от конца хроматографической пластинки до старта анализа

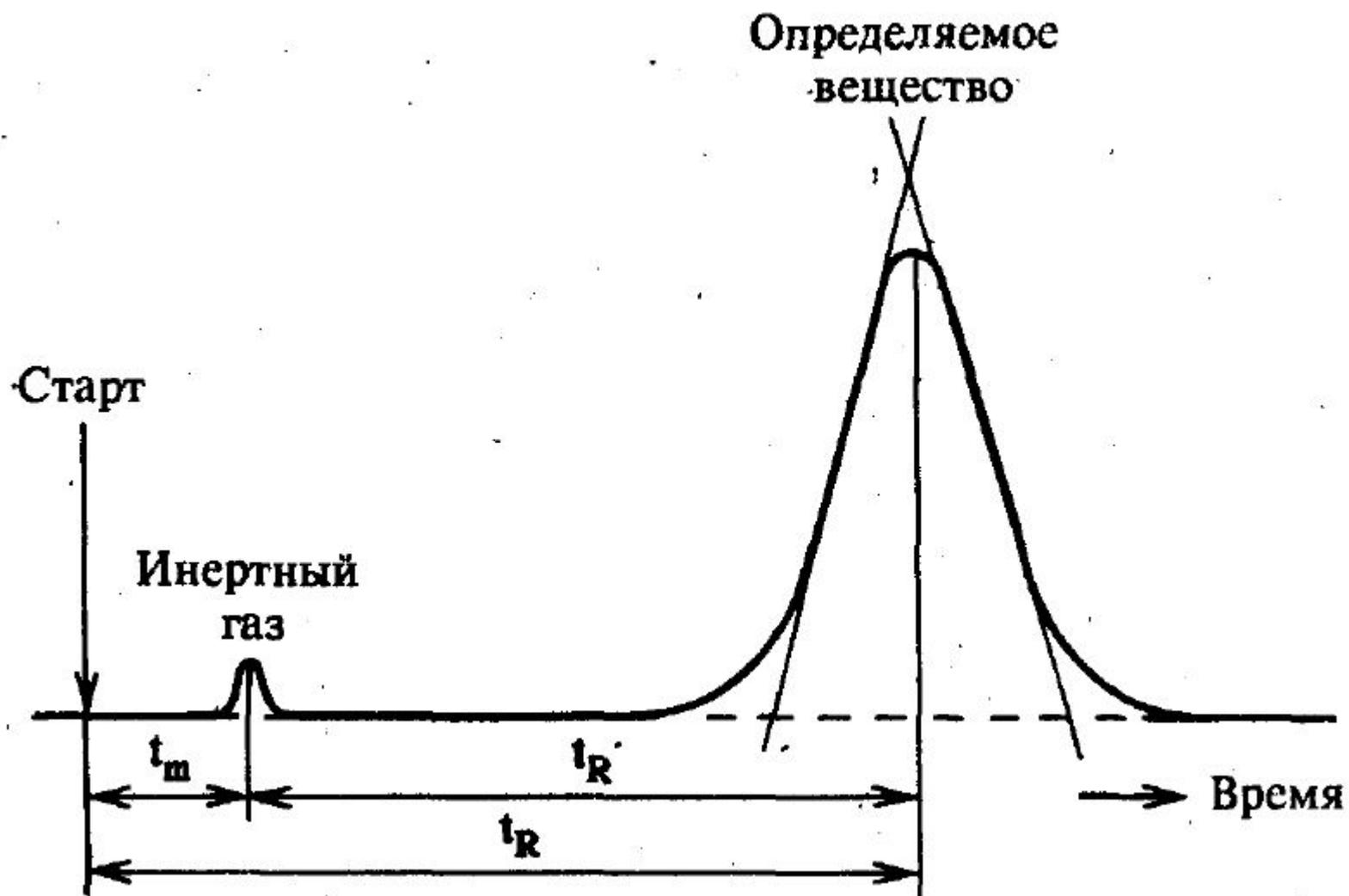
Поправка на мёртвый объём КОЛОНКИ

$$t'_R = t_R - t_m$$

приведённое время
удерживания

$$V'_R = V_R - V_m$$

приведённый удерживаемый
объём



Поправка на сжимаемость газа-носителя

$$t_R = jt'_R$$

исправленное время
удерживания

$$V_R'' = jV_R'$$

исправленный удерживаемый
объём

j – коэффициент Джеймса-Мартина

$$j = \frac{3 (P/P_0)^2 - 1}{2 (P/P_0)^3 - 1}$$

Удельный удерживаемый объём

$$V_g = \frac{V_R''}{m}$$

$$V_S = \frac{V_R''}{S}$$

$$V_S = K_{1,c}$$

Относительные параметры удерживания

$$t_{OTH} = \frac{t'_R}{t_{R,CT}} \quad V_{R,OTH} = \frac{V'_R}{V_{R,CT}}$$

Индексы удерживания Ковача

Стандарты: n-алканы,

Два алкана:

1 – элюируется до анализируемого
вещества

2 – после

т.е. $t''_{R,n} < t''_{R,X} < t''_{R,n+1}$

$$I = 100 \frac{\lg t''_{R,X} - \lg t''_{R,n}}{\lg t''_{R,n+1} - \lg t''_{R,n}} + 100n$$

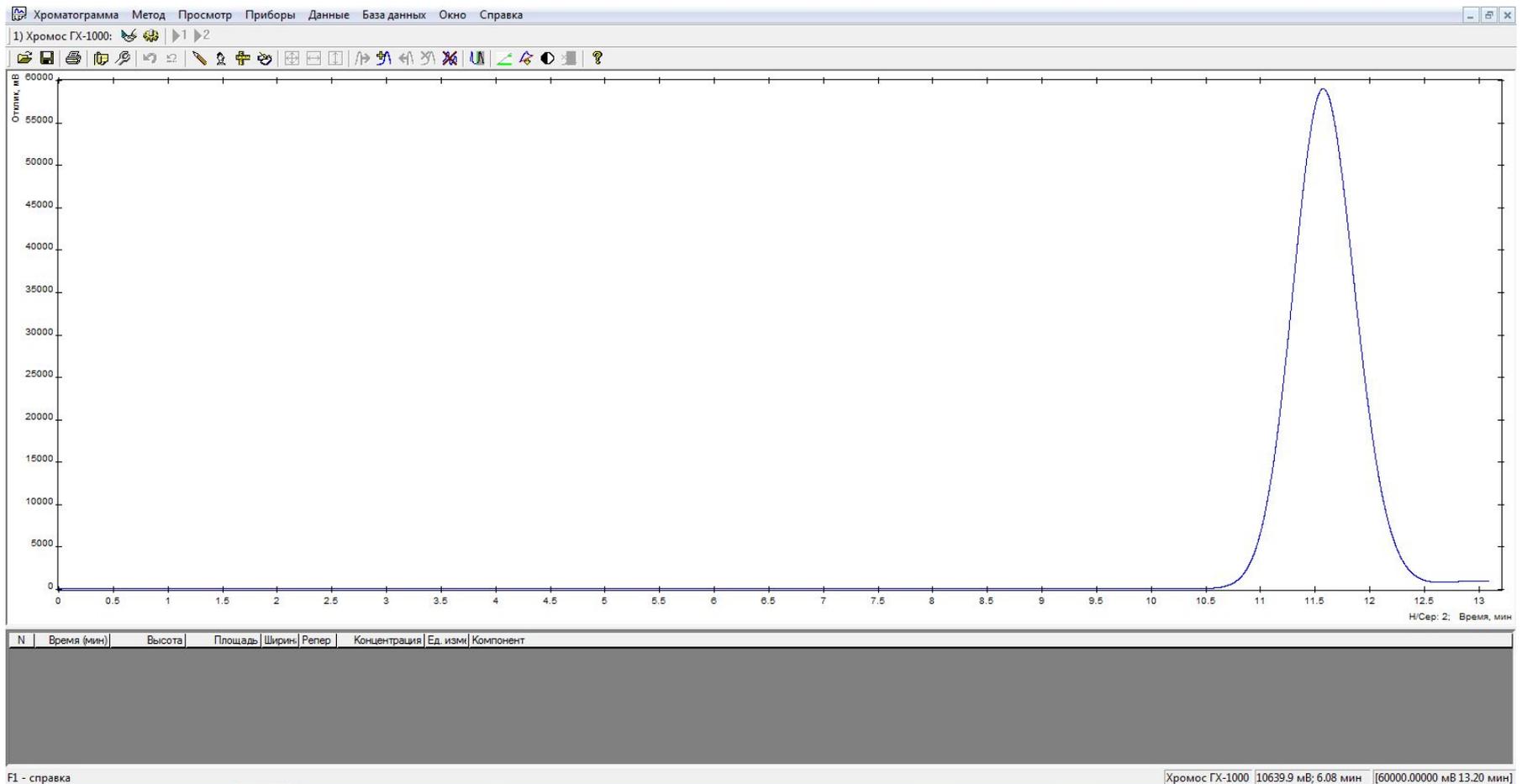
Свойства индексов удерживания Ковача

1. при переходе от одного члена гомологического ряда к другому в любом гомологическом ряду I удерживания увеличиваются примерно на 100 единиц
2. для неполярных НФ разность ΔI двух изомерных соединений приблизительно равно $\Delta I \cong 5 \Delta T_{кип}$
3. вещества, близкие по строению при введении в их молекулу одинаковых функциональных групп увеличивают удерживания на одно и то же значение
4. Разность двух веществ, полученные на одной и той же НФ отражает влияние функциональной группы
5. Индексы удерживания н-углеводородов всегда постоянны на всех фазах.
6. Индексы удерживания какого-то вещества, определенные на разных неполярных НФ близки
7. в гомологических рядах введение CH_3 группы повышает I на 100 единиц.

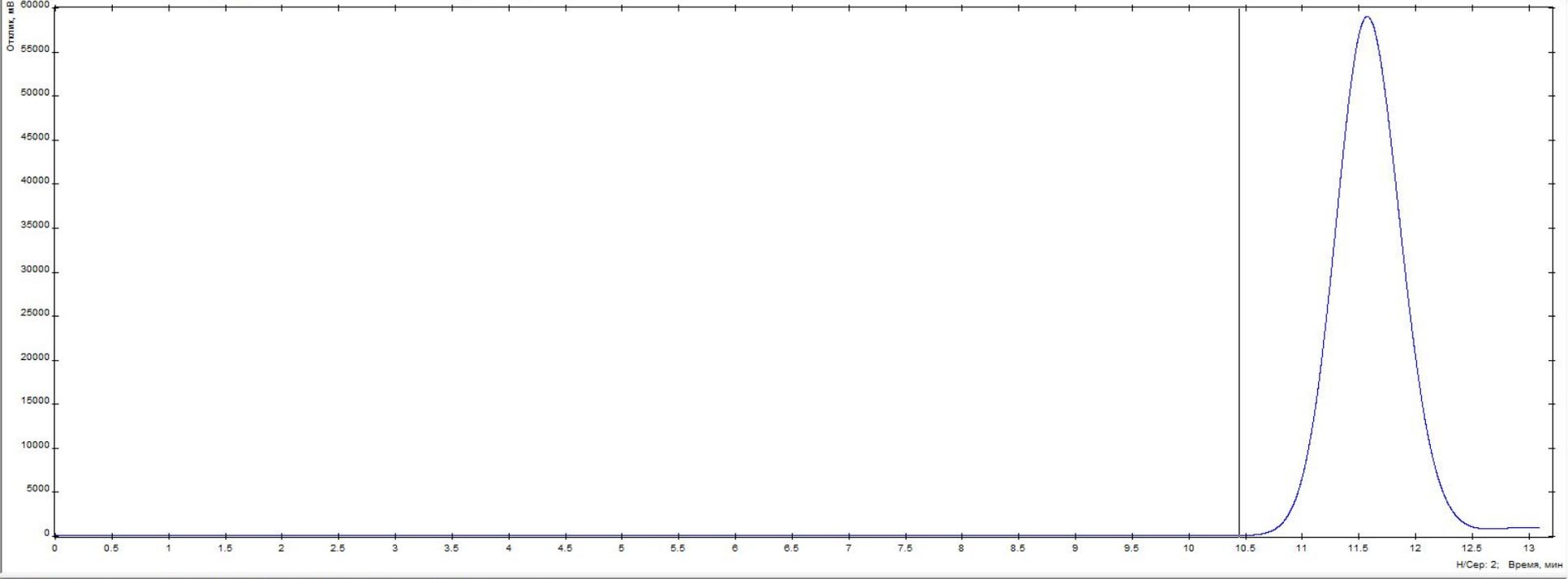
Схема качественного анализа

1. Введение пробы известного вещества
2. Определение его времени удерживания
3. Занесение в базу данных компьютера значения времени удерживания
4. Введение пробы неизвестного вещества

Качественный анализ в программе Хромос

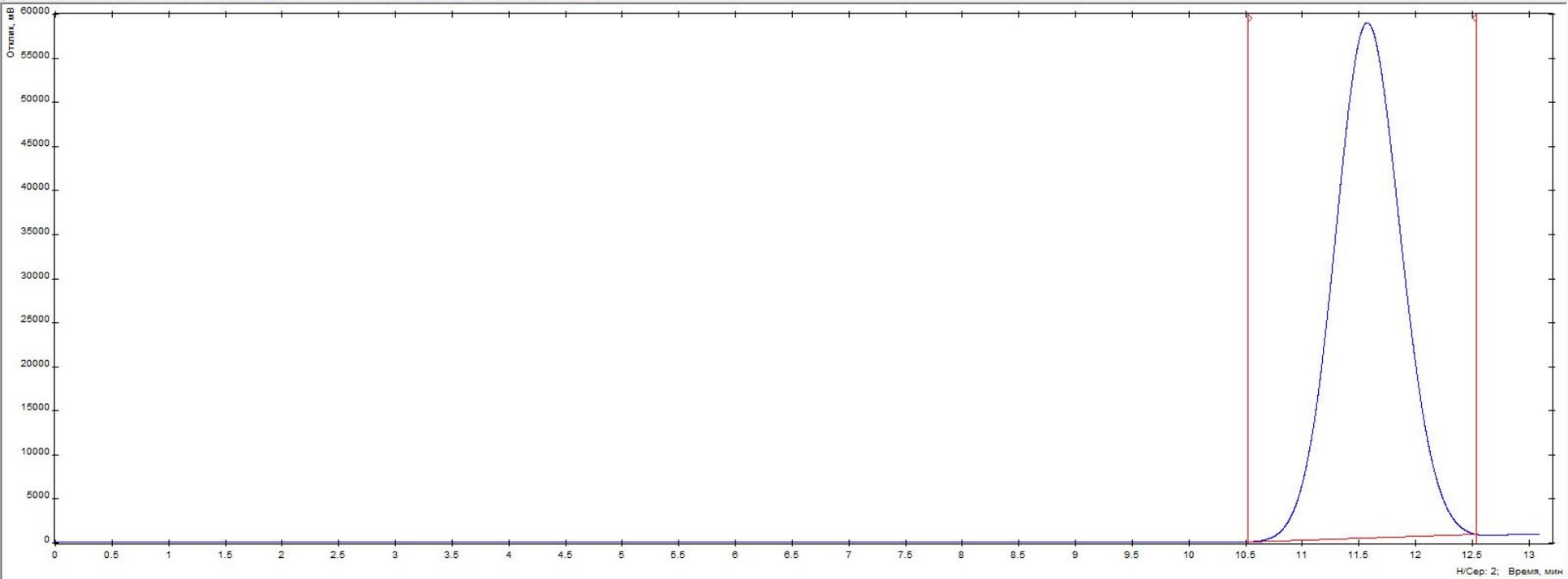


1) Хромос GX-1000: ▶1 ▶2

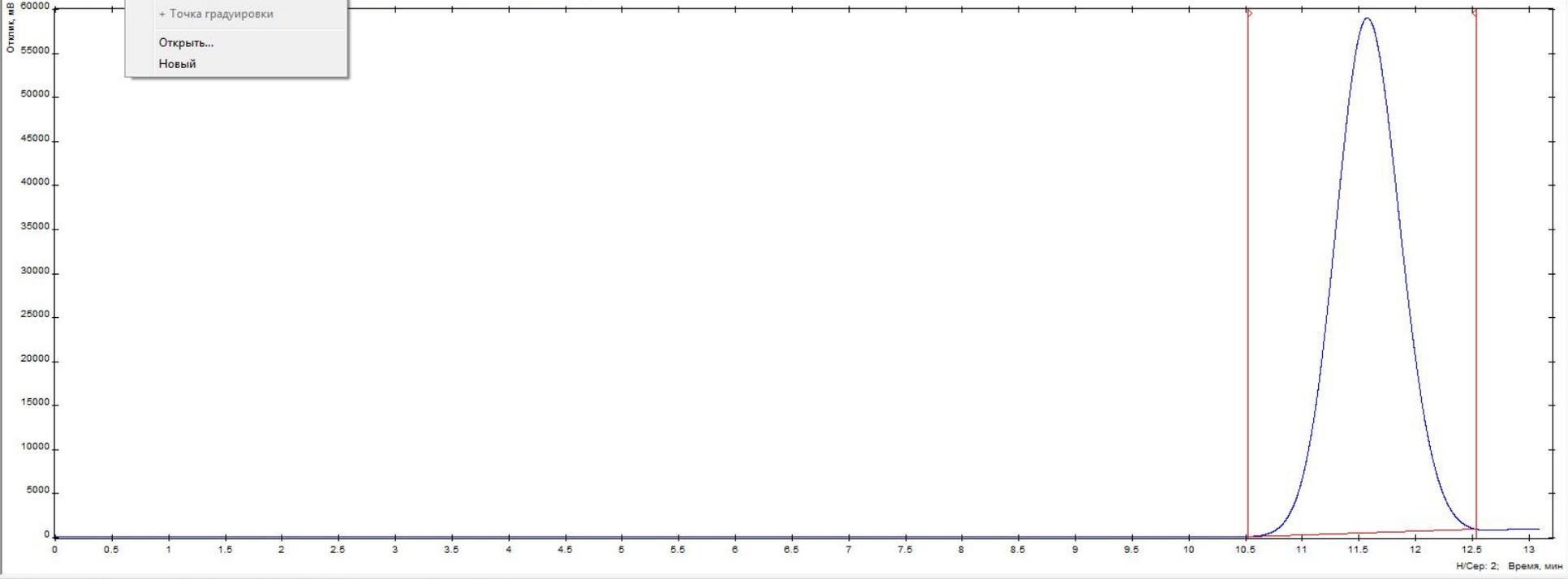


N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент

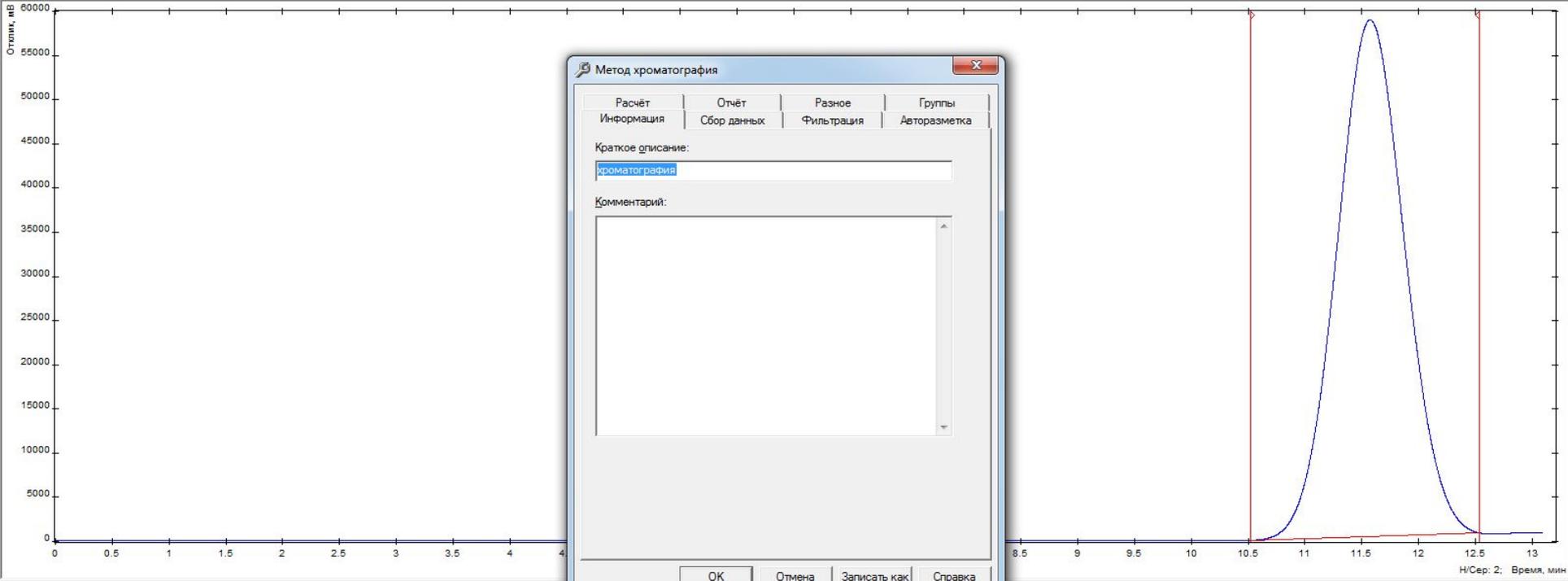
1) Хромос GX-1000:



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		

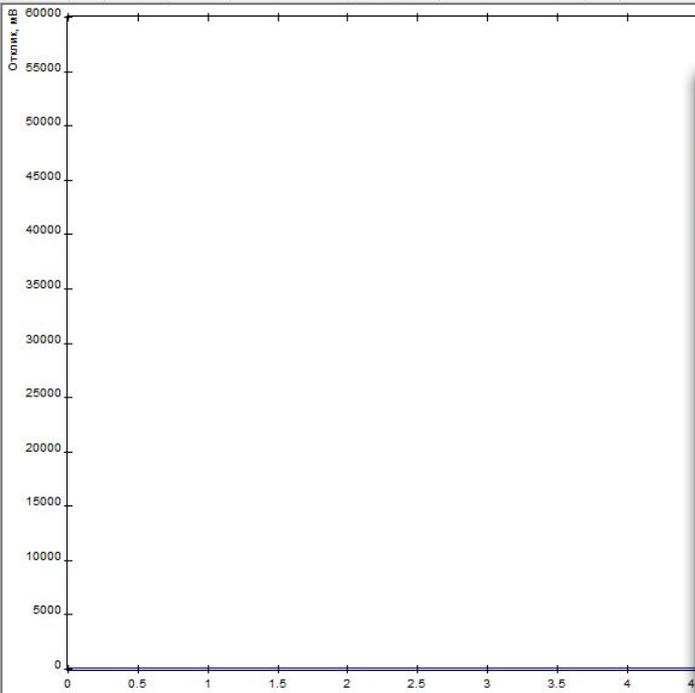


N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		

1) Хромос GX-1000:



Метод хроматография

Информация | Сбор данных | Фильтрация | Авторазметка
 Расчёт | Отчёт | Разное | Группы

Метод расчёта
 Простая нормировка

Модификации
 Нормировка только на идентифицированные
 Вычислять основное вещество как 100 - примеси
 Основное вещество

Отклик: Площадь | Стандарт:

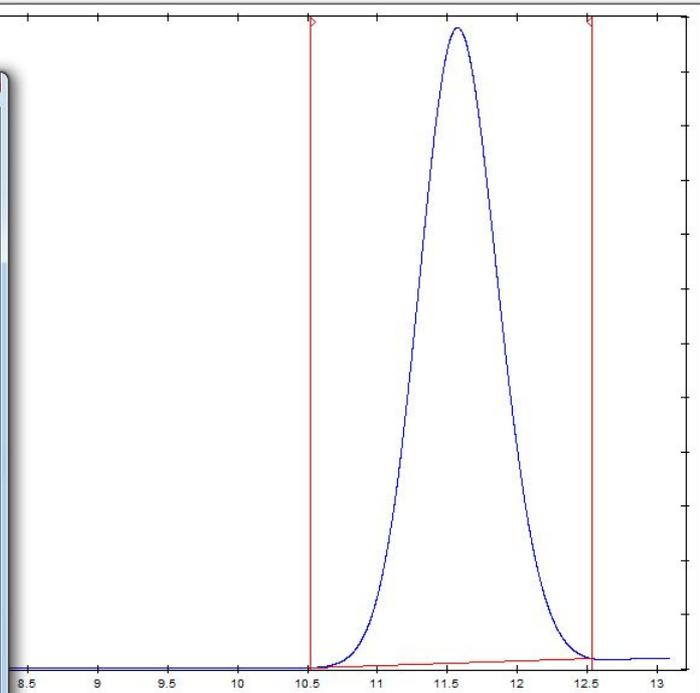
Идентификация по: времени | Тм: 0
 Идентификация реперных по: Высоте

Компоненты: Градуировочных хроматограмм: 0

N	Название	Время, мин	Окно	Рефер	Индекс

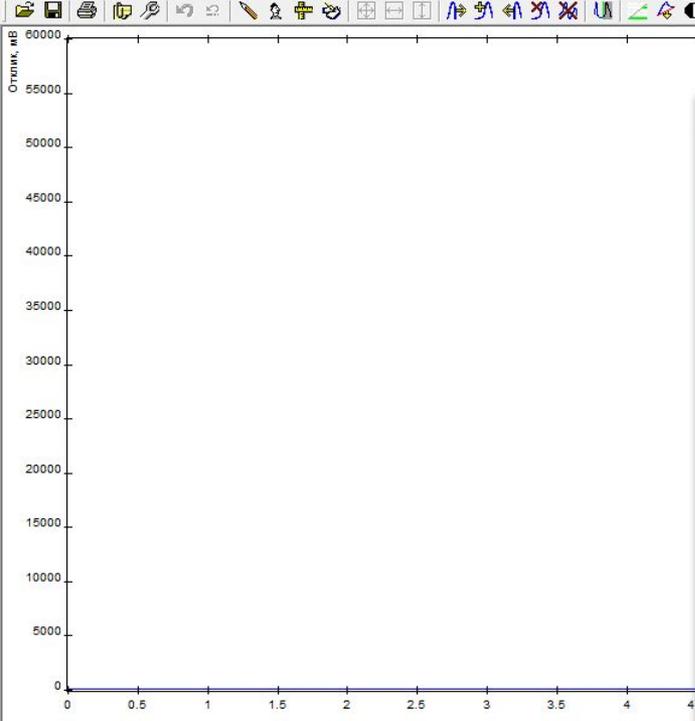
Градировочная

OK | Отмена | Записать как | Справка



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Рефер	Концентрация	Ед. изм	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		

1) Хромос GX-1000: >1 >2



Метод хроматография

Информация | Сбор данных | Фильтрация | Авторазметка
Расчёт | Отчёт | Разное | Группы

Метод расчёта
Простая нормировка

Модификации
 Нормировка только на идентифицированные
 Вычислять основное вещество как 100 - примеси

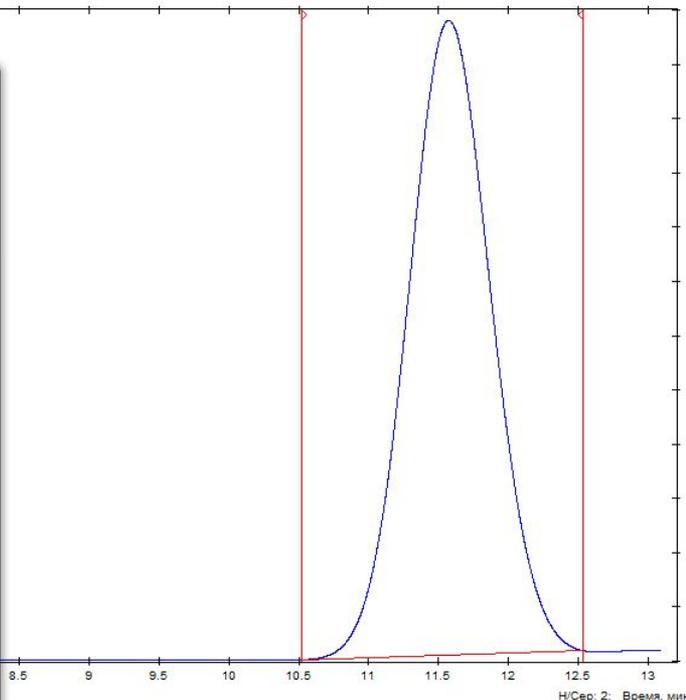
Отклик
Идентификация
Идентификация
Компоненты

Компонент

N	Название	Время, мин	Окно	Рефер	Индекс
1		0	1	Нет	100

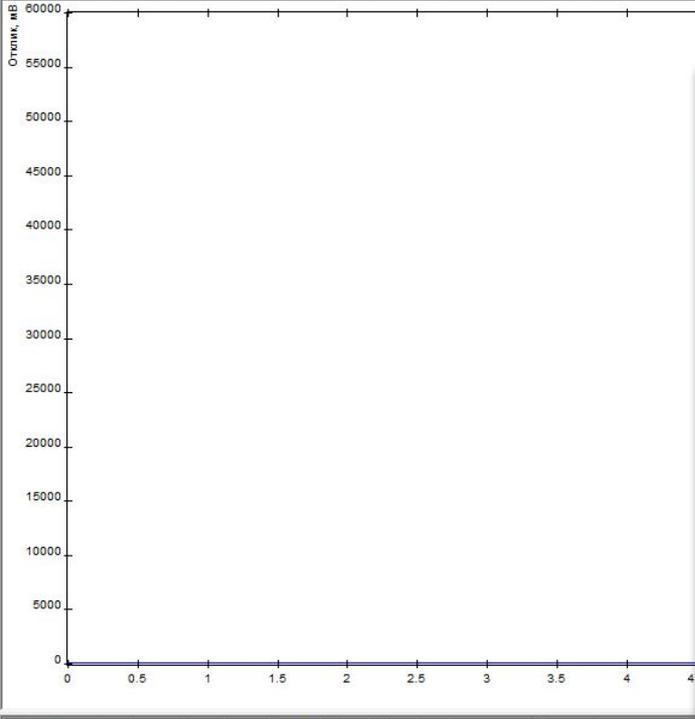
Градировка

OK Отмена Записать как Справка



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Рефер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		

1) Хромос GX-1000:



Метод хроматография

Информация | Сбор данных | Фильтрация | Авторазметка
 Расчёт | Отчёт | Разное | Группы

Метод расчёта
 Простая нормировка

Модификации
 Нормировка только на идентифицированные
 Вычислять основное вещество как 100 - примеси

Отклик
 Идентификация
 Идентификация

Компонент

Компонент

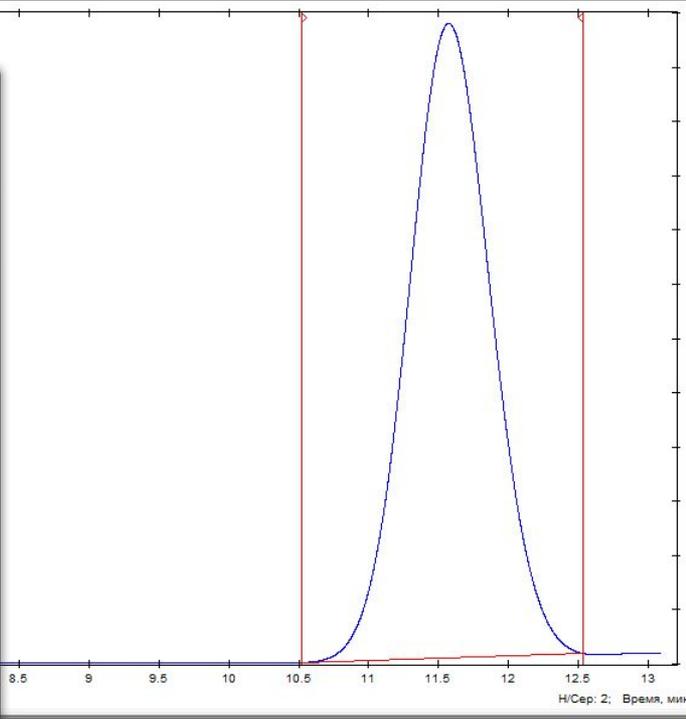
ИЗООКТАН

OK Отмена

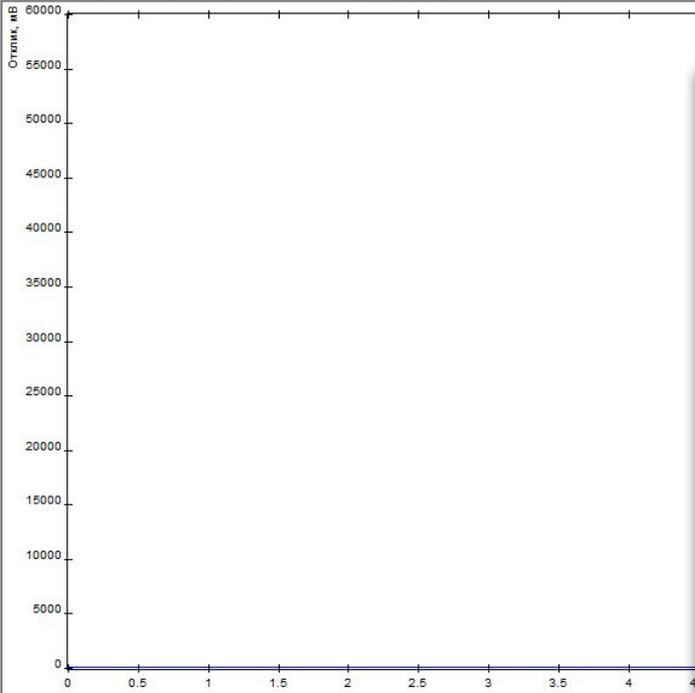
N	Название	Время, мин	Окно	Репер	Индекс
1		0	1	Нет	100

+ × ×× Градуировка

OK Отмена Записать как Справка



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширина	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		



Метод хроматография

Информация | Сбор данных | Фильтрация | Авторазметка
 Расчёт | Отчёт | Разное | Группы

Метод расчёта
 Простая нормировка

Модификации
 Нормировка только на идентифицированные
 Вычислять основное вещество как 100 - примеси
 Основное вещество

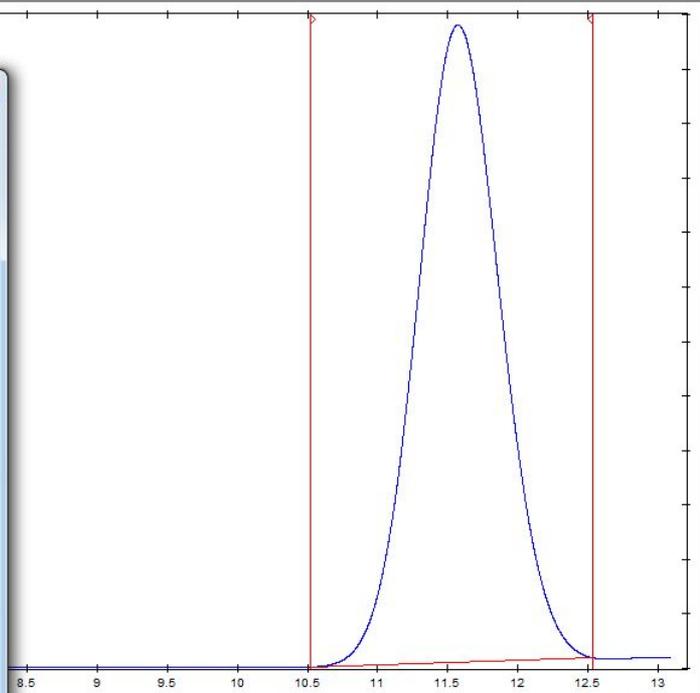
Отклик: Площадь | Стандарт

Идентификация по: времени | Тм: 0
 Идентификация реперных по: Высоте

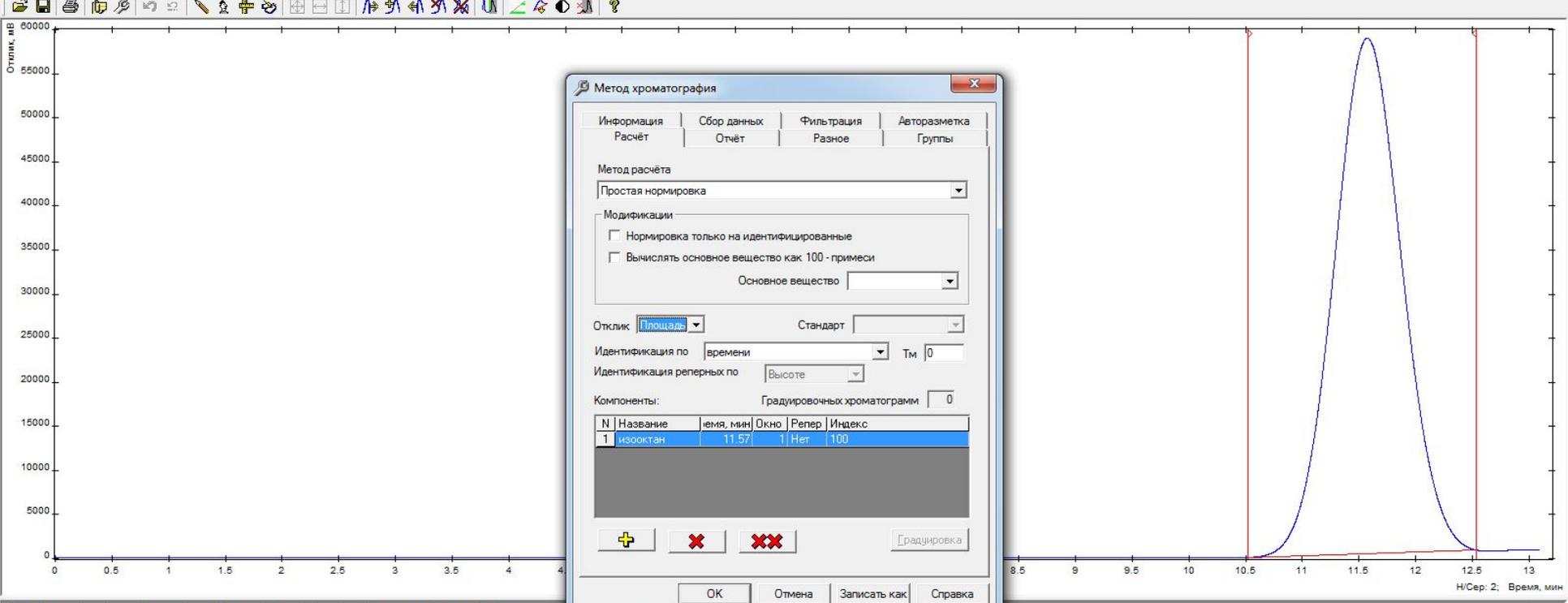
Компоненты: Градуировочных хроматограмм: 0

N	Название	время, мин	Окно	Репер	Индекс
1	Изооктан	0	1	Нет	100

Buttons: +, -, X, XX, Градуировка, OK, Отмена, Записать как, Справка



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		



Метод хроматография

Информация | Сбор данных | Фильтрация | Авторазметка
 Расчёт | Отчёт | Разное | Группы

Метод расчёта: Простая нормировка

Модификации:
 Нормировка только на идентифицированные
 Вычислять основное вещество как 100 - примеси
 Основное вещество: [Dropdown]

Отклик: Площадь | Стандарт: [Dropdown]

Идентификация по: времени | Тм: 0
 Идентификация реперных по: Высоте

Компоненты: Градуировочных хроматограмм: 0

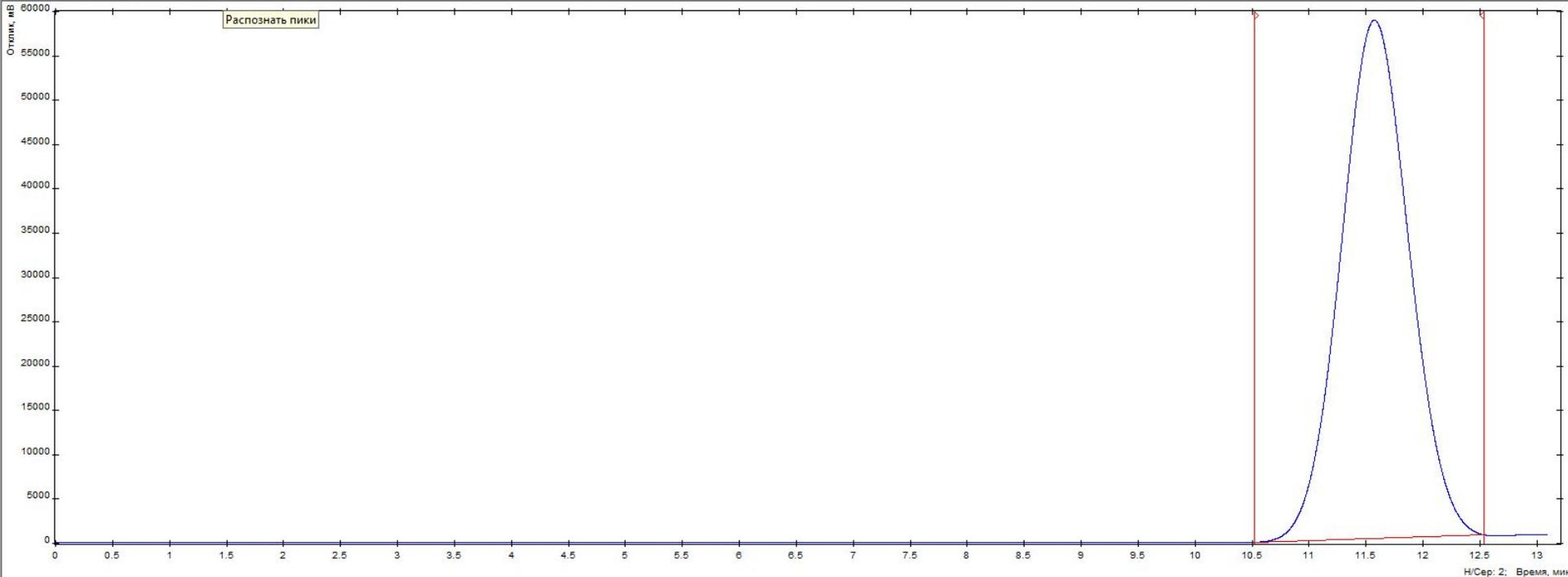
N	Название	Время, мин	Окно	Репер	Индекс
1	изооктан	11.57	1	Нет	100

[+] [X] [XX] [Градуировка]

OK | Отмена | Записать как | Справка

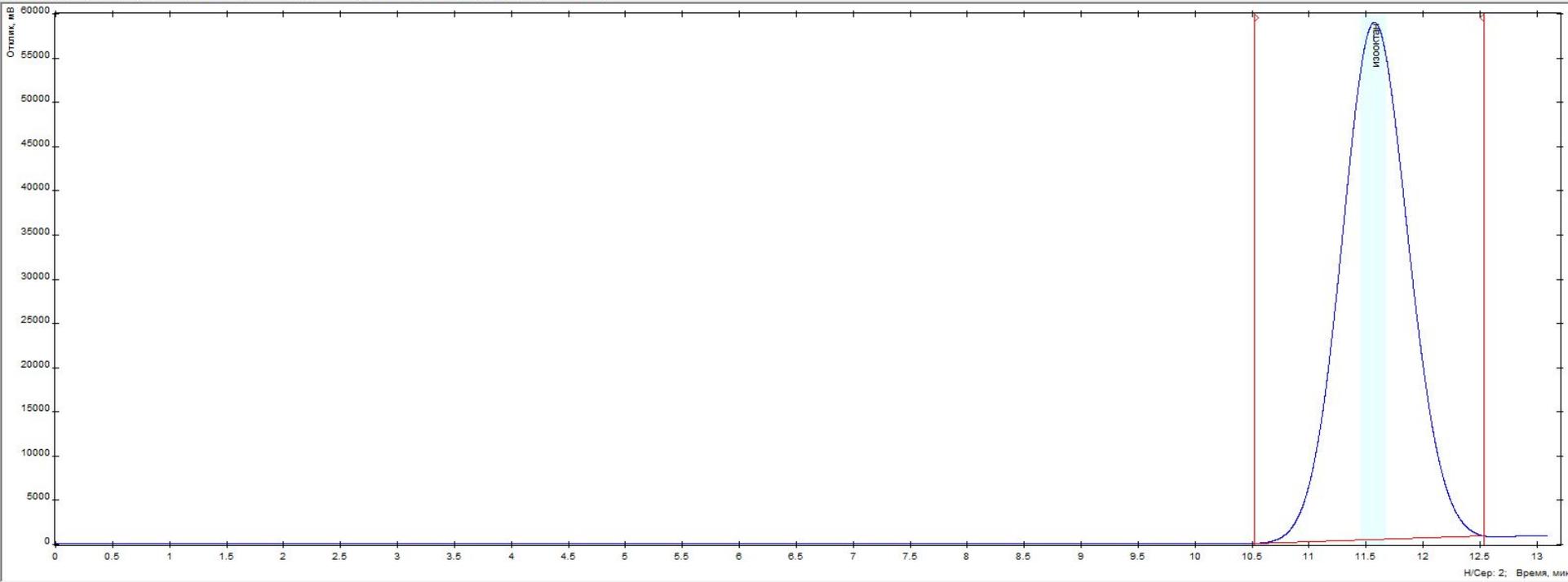
N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		

1) Хромос GX-1000: ▶1 ▶2

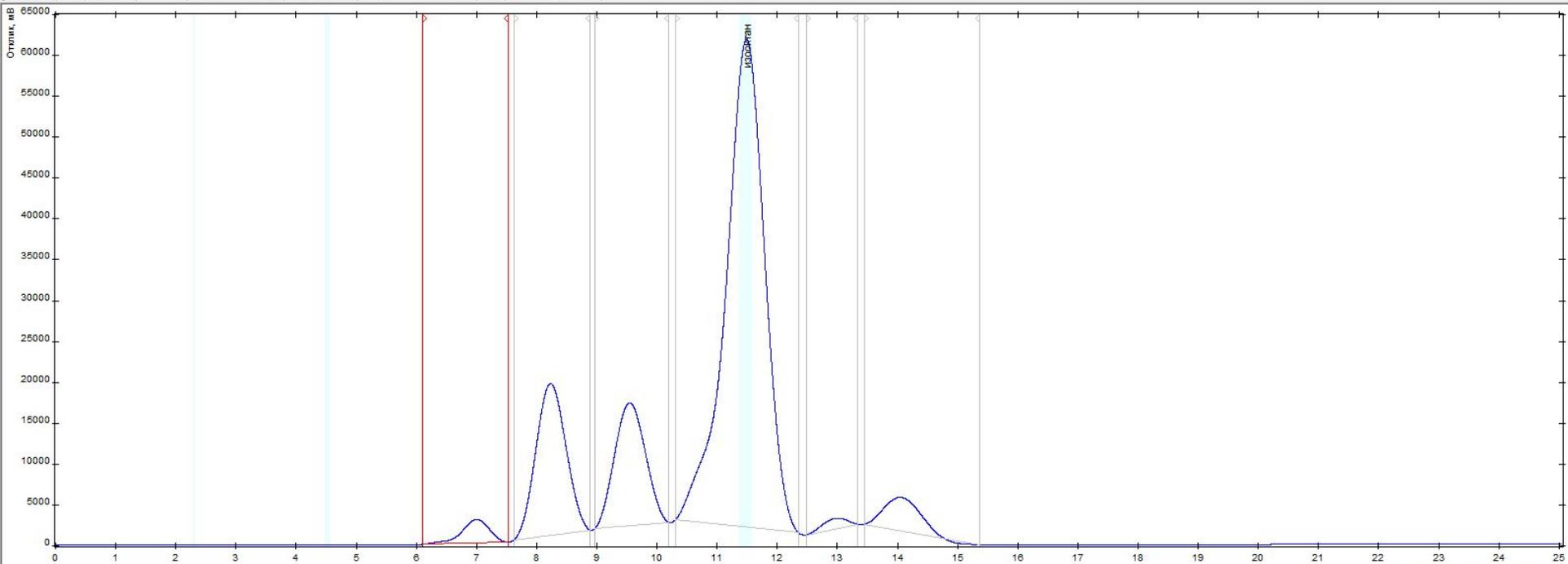


Н/Сер: 2; Время, мин

N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		



N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	11.572	58475.017	40896.409	2.014	Нет	100.000		ИЗООКТАН



полюс проба №2; Н/Сер: 2; Время, мин

N	Время (мин)	Высота	Площадь	Ширин	Репер	Концентрация	Ед. изм.	Компонент
1	6.999	2872.366	1527.548	1.424	Нет	2.203		
2	8.229	18550.098	10712.052	1.260	Нет	15.446		
3	9.545	15021.562	8912.286	1.227	Нет	12.851		
4	11.491	59726.994	44859.101	2.045	Да	64.682		изооктан
5	12.950	1271.114	593.248	0.851	Нет	0.855		
6	14.073	4073.007	2749.065	1.915	Нет	3.964		