

Separação de picos cromatográficos por método computacional

Daniely X. Soares(PG)^{1*}, Roy E. Bruns(PQ)¹, Ieda S. Scarminio(PQ)², Marcia C. Breitreitz(PG)¹, Carlos A. P. Da Câmara(PQ)², Isabel C. S. F. Jardim(PQ)¹

*daniely.soares@iqm.unicamp.br

¹Universidade Estadual de Campinas(UNICAMP)

²Universidade Estadual de Londrina(UEL)

Palavras Chave: cromatografia, misturas, método computacional

Introdução

Um problema de interesse contínuo em cromatografia líquida é o desenvolvimento de procedimentos práticos para otimizar processos de separação. O estado da arte em separações de picos em cromatografia líquida inclui a utilização de modelos estatísticos obtidos de resultados de planejamentos de experimentos para descrever como os sinais analíticos se comportam como função das condições cromatográficas como composição da fase móvel, tipo e temperatura da coluna, fluxo da fase móvel entre outras. Existem poucos métodos disponíveis para otimizar varias respostas cromatográficas simultaneamente. Entre eles a sobreposição de superfícies de respostas e o método de desejabilidade de Derringer e Suich são os mais úteis. Tendo em vista as vantagens em fazer modelagem estatística usando tempos de retenção propomos um método de otimização por simulação dos comportamentos de picos cromatográficos com mudanças nas condições cromatográficas.

Resultados e Discussão

Através do ponteiro do “mouse” foi escolhido um conjunto de condições dentro do domínio experimental já investigado por planejamento de experimentos, Figura 1. Os valores das condições cromatográficas foram substituídos nos modelos estatísticos onde os tempos de retenção de todos os picos cromatográficos de interesse foram calculados. Estes tempos de retenção foram exibidos graficamente na tela do computador, figura 2. Misturas de sete compostos neutros e onze agrotóxicos foram separados pela metodologia.

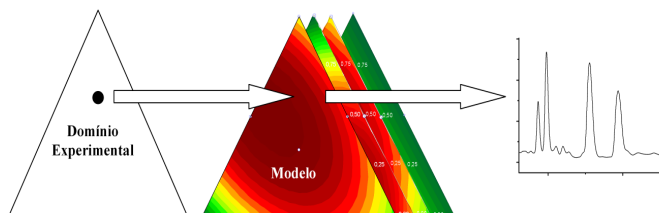


Figura 1- Esquema do programa de otimização multiresposta. Um ponto do domínio experimental

será fornecido ao módulo de modelos que calculará os tempos de eluição dos picos.

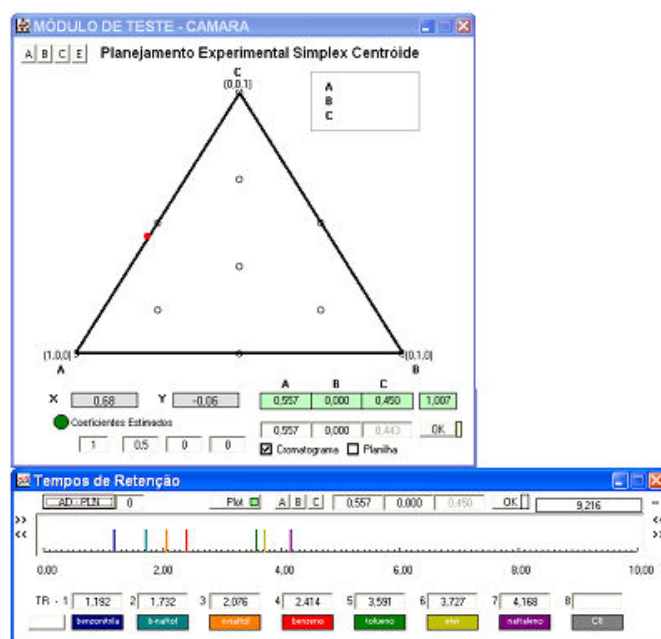


Figura 2. Separação cromatográfica por método computacional.

Conclusões

O programa de simulação se mostrou eficiente nas separações dos picos da mistura e especialmente na separação de sistemas com inversão de picos, que são dificilmente separados por métodos atualmente usados.

Agradecimentos

Agradecimentos para CAPES, CNPq e FAPESP

¹BREITKREITZ, M. C., JARDIM, I. C. S. F., BRUNS, R. E., J.Chromatogr. A, 1216(2009)1439.

²Abdul-Wahab, S.A.; Bakheit, C.S.; Al-Alawi, S.M, Environmental Modelling & Software, 20(2005) 1263.