

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

ХРОМАТОГРАФИЯ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ. ТЕРМИНОЛОГИЯ

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» в качестве учебного словаря для обучающихся по основным образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки 04.03.01 Химия, 04.04.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Составители: *В. А. Даванков,*
Л. А. Онучак

САМАРА
Издательство Самарского университета
2022

УДК 543.54(035)

ББК 24.58я3

X941

Составители: *В. А. Даванков, Л. А. Онучак*

Рецензенты: д-р хим. наук, проф. А. К. Буряк,
д-р хим. наук, доц. Д. В. Пушкин

X941 **Хроматография. Основные понятия. Терминология:**
учебный словарь / сост.: *В.А. Даванков, Л.А. Онучак.* – Самара:
Издательство Самарского университета, 2022. – 68 с.

ISBN 978-5-7883-1855-4

Рассмотрены основные понятия хроматографии, её терминология. Представлена классификация её различных вариантов, характеристики удерживания и разделения, а также физико-химические (термодинамические) величины, характеризующие межфазное равновесие и их связь с хроматографическим удерживанием. В отдельную группу выделили электрофорез (который, строго говоря, не относится к хроматографическим процессам), а также комбинированные электрохроматографические методы.

Предназначен для обучающихся по направлениям подготовки 04.03.01 Химия (бакалавриат), 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (специалитет), 04.04.01 Химия (магистратура), 1.4. Химические науки (аспирантура).

Подготовлено на кафедре физической химии и хроматографии.

УДК 543.54(035)

ББК 24.58я3

ISBN 978-5-7883-1855-4

© Самарский университет, 2022

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Введение | 4 |
| I. Общие понятия хроматографии | 5 |
| II. Классификация методов хроматографии | 8 |
| 2.1. По агрегатному состоянию фаз хроматографической системы | 8 |
| 2.2. По способу перемещения сорбата | 11 |
| 2.3. По конфигурации разделяющей системы | 13 |
| 2.4. По относительной полярности подвижной и неподвижной фаз | 16 |
| 2.5. По механизму разделения вещества | 17 |
| 2.6. По цели | 22 |
| 2.7. По химическому превращению сорбата | 23 |
| 2.8. По способу детектирования | 24 |
| 2.9. Электрофорез и электрохроматографические методы | 25 |
| III. Характеристики колонки и сорбента | 29 |
| IV. Параметры, необходимые для описания динамики хроматографического процесса | 33 |
| V. Хроматограмма и хроматографические параметры | 39 |
| VI. Параметры, характеризующие разделение веществ | 49 |
| VII. Хроматографические параметры в эксклюзионной жидкостной хроматографии | 52 |
| VIII. Приложение «Термодинамические параметры, характеризующие межфазное распределение в условиях газовой хроматографии» | 57 |
| Библиографический список | 66 |

ВВЕДЕНИЕ

Предлагаемая терминология в области хроматографии подготовлена с использованием двух нормативных документов – Хроматография. Основные понятия. Терминология / Под ред. В.А. Даванкова. Серия «Сборники научно-нормативной терминологии». М. Вып. 114., Комитет научной терминологии РАН, 1997 и рекомендации ИЮПАК «Nomenclature for Chromatography» // Pure & Appl. Chem. 1993. V. 65. № 4. P. 819-872.

Отсутствующие в этих документах физико-химические (термодинамические) величины, характеризующие межфазное распределение в условиях газовой хроматографии, представлены в соответствии с обозначениями и подходами, принятыми в отечественной литературе (А. В. Киселёв. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии. М.: Высшая школа, 1986. 360 с.; А. А. Лопаткин Теоретические основы физической адсорбции. М.: Изд-во МГУ. 1983. 344 с.; О. М. Полторак. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991. 320 с.).

Авторы выражают благодарность доктору химических наук, профессору А. А. Карцовой и доктору химических наук, профессору А. А. Курганову за помощь в редактировании разделов (II, (2.9)) и (VII) соответственно, а также аспиранту Ю. В. Мартиной за помощь в оформлении пособия.

1. ОБЩИЕ ПОНЯТИЯ ХРОМАТОГРАФИИ

- 1. ХРОМАТОГРАФИЯ**
CHROMATOGRAPHY
- 1) *наука* о межмолекулярных взаимодействиях и переносе молекул или частиц в системе несмешивающихся и движущихся относительно друг друга фаз;
 - 2) *процесс* дифференцированного многократного перераспределения веществ или частиц между несмешивающимися и движущимися относительно друг друга фазами, приводящий к обособлению концентрационных зон индивидуальных компонентов исходных смесей этих веществ или частиц;
 - 3) *метод* разделения смесей веществ или частиц, основанный на различии в скоростях их перемещения в системе несмешивающихся и движущихся относительно друг друга фаз.

- 2. ХРОМАТОГРАФИЧЕСКАЯ СИСТЕМА**
CHROMATOGRAPHIC SYSTEM
- совокупность несмешивающихся и движущихся относительно друг друга фаз с развитой межфазной границей (поверхностью).

- 3. ПОДВИЖНАЯ ФАЗА**
MOBILE PHASE
- поток жидкости, флюида или газа, перемещающий компоненты разделяемой смеси вдоль неподвижной фазы.

Примечание: для обеспечения хроматографического процесса подвижная фаза должна смачивать поверхность неподвижной фазы и сольватировать компоненты разделяемой смеси.

| | |
|------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>4. НЕПОДВИЖНАЯ ФАЗА STATIONARY PHASE</p> | <p>твердый сорбент или несмешивающаяся с подвижной фазой жидкость, на которых осуществляется дифференцированное удерживание и разделение компонентов смеси.</p> |
| <p>5. СОРБЕНТ (SORBENT)</p> | <p>твердое вещество, жидкость или их смеси, способные поглощать или удерживать газы, пары или растворенные вещества и используемые в хроматографии в качестве неподвижной фазы.</p> |
| <p>6. АДСОРБЕНТ ADSORBENT</p> | <p>твердый сорбент, концентрирующий на своей поверхности газы, пары или растворенные вещества.</p> |
| <p>7. АБСОРБЕНТ ABSORBENT</p> | <p>твердый или жидкий сорбент, растворяющий в своем объеме газы, пары или компоненты жидких смесей.</p> |
| <p>8. СОРБАТ SORBATE</p> | <p>вещество, поглощаемое сорбентом, (в хроматографии – компонент разделяемой смеси, удерживаемый сорбентом аналит).</p> |
| <p>9. ЭЛЮЭНТ ELUENT</p> | <p>жидкость, флюид или газ, используемые в качестве подвижной фазы.</p> |
| <p>10. ЭЛЮАТ EFFLUENT</p> | <p>выходящий из колонки поток подвижной фазы с компонентами разделяемой смеси веществ.</p> |
| <p>11. КОЛОНКА COLUMN</p> | <p>трубка, в объеме которой осуществляется хроматографическое разделение смеси веществ.</p> |

**12. НАПОЛНЕННАЯ
КОЛОНКА**
PACKED COLUMN

колонка, наполненная сорбентом.

Примечание: если сорбент синтезирован непосредственно в объеме колонки и представляет собой непрерывный пористый материал, колонку называют монолитной.

13. ПОЛАЯ КОЛОНКА
OPEN COLUMN

капиллярная колонка, в которой сорбент нанесен на внутреннюю поверхность.

**14. ХРОМАТО-
ГРАММА**
CHROMATOGRAM

записанная во времени функция концентрации определяемых веществ в подвижной фазе на выходе из колонки.

Примечание: хроматограммой также называют наглядное изображение результатов разделения компонентов исходной смеси в планарной хроматографической системе (в тонком слое сорбента, на бумаге и т.д.).

II. КЛАССИФИКАЦИЯ МЕТОДОВ ХРОМАТОГРАФИИ

2.1. ПО АГРЕГАТНОМУ СОСТОЯНИЮ ФАЗ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

- | | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 15. ГАЗОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ GAS CHROMATOGRAPHY | хроматографический метод, в котором подвижной фазой является газ или пар. |
| 16. ГАЗО- АДСОРБЦИОННАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ (ГАЗО-ТВЕРДОФАЗНАЯ) GAS-SOLID CHROMATOGRAPHY | хроматографический метод, в котором подвижной фазой служит газ или пар, а неподвижной – твердый адсорбент. |
| 17. ГАЗО-ЖИДКОСТНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ GAS-LIQUID CHROMATOGRAPHY | хроматографический метод, в котором подвижной фазой служит газ или пар, а неподвижной – жидкость, нанесенная на твердый носитель или на стенки колонки. |
| 18. ГАЗО-МЕЗОФАЗНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ GAS-MESOPHASE CHROMATOGRAPHY | хроматографический метод, в котором подвижной фазой служит газ или пар, а неподвижной – вещество в жидкокристаллическом состоянии (мезофаза). |
| 19. ЖИДКОСТНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ LIQUID CHROMATOGRAPHY | хроматографический метод, в котором подвижной фазой является жидкость |

**20. ЖИДКОСТНО-
АДСОРБЦИОННАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
(ЖИДКОСТНО-
ТВЕРДОФАЗНАЯ)
LIQUID-SOLID
CHROMATOGRAPHY**

хроматографический метод, в котором подвижной фазой служит жидкость, а неподвижной – твердый адсорбент.

**21. ЖИДКОСТНО-
ЖИДКОСТНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
LIQUID-LIQUID
CHROMATOGRAPHY**

хроматографический метод, в котором подвижной и неподвижной фазами служат несмешивающиеся друг с другом жидкости, причем неподвижная фаза нанесена на твердый носитель или на стенки колонки.

**22. ПРОТИВОТОЧНАЯ
ЖИДКОСТНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
COUNTER-CURRENT
LIQUID
CHROMATOGRAPHY**

жидкостно-жидкостная хроматография, основанная на распределении веществ между двумя движущимися относительно друг друга несмешивающимися жидкостями.

Примечание: Разновидностью противоточной хроматографии является пенная хроматография, в которой в противоположных направлениях перемещаются раствор поверхностно-активного вещества и пена, образуемая им и потоком газа.

**23. МИЦЕЛЛЯРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
MICELLAR
CHROMATOGRAPHY**

жидкостная хроматография, в которой в качестве подвижной фазы служит раствор поверхностно-активного вещества с концентрацией выше критической концентрации мицеллообразования.

**24. СВЕРХ-
КРИТИЧЕСКАЯ
ФЛЮИДНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
SUPERCRITICAL
FLUID
CHROMATOGRAPHY**

хроматографический метод, в котором подвижной фазой является вещество, находящееся в сверхкритическом (или субкритическом) состоянии (флюид).

**25. ПОЛИФАЗНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
POLYPHASE
CHROMATOGRAPHY**

хроматографический метод, в котором в качестве подвижной и/или неподвижной фаз используются гетерогенные системы, в том числе коллоидные.

Примечание: Разновидностями полифазной хроматографии являются полифазная жидкостная хроматография, в которой в качестве подвижной фазы используется эмульсия (эмульсионная хроматография) или суспензия, и полифазная газовая хроматография, в которой в качестве неподвижной фазы используются суспензии, золи.

2.2. ПО СПОСОБУ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ СОРБАТА

26. ВЫТЕСНИТЕЛЬНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ DISPLACEMENT CHROMATOGRAPHY

хроматографический метод, в котором смесь веществ периодически вводится в поток подвижной фазы и вытесняется затем из колонки с помощью вещества (вытеснителя), десорбирующего все слабее удерживаемые компоненты смеси, причем в итоге смесь разделяется на примыкающие друг к другу зоны индивидуальных компонентов, выходящих в порядке увеличения их сорбируемости.

27. ФРОНТАЛЬНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ FRONTAL CHROMATOGRAPHY

хроматографический метод, в котором смесь веществ непрерывно вводится с подвижной фазой и разделяется в колонке на примыкающие друг к другу зоны с последовательно увеличивающимся числом компонентов, выходящих в порядке увеличения их сорбируемости.

28. ЭЛЮЕНТНАЯ (ЭЛЮТИВНАЯ, ПРОЯВИТЕЛЬНАЯ) ХРОМАТОГРАФИЯ ELUTION CHROMATOGRAPHY

хроматографический метод, в котором смесь веществ периодически вводится в поток подвижной фазы и разделяется в колонке на зоны компонентов, выходящих отдельно друг от друга в порядке увеличения их сорбируемости.

**29. ИЗОКРАТИЧЕСКАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
ISOCRATIC
CHROMATOGRAPHY**

элюентная хроматография, при которой состав подвижной фазы сохраняется постоянным на протяжении всего процесса разделения компонентов.

**30. ГРАДИЕНТНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
GRADIENT
CHROMATOGRAPHY**

элюентная хроматография, при которой состав смешанной подвижной фазы в процессе разделения компонентов изменяют по заданному закону.

**31. ХРОМАТОГРАФИЯ С
ПРОГРАММИРОВАНИЕМ
ТЕМПЕРАТУРЫ
PROGRAMMED-
TEMPERATURE
CHROMATOGRAPHY**

элюентная хроматография, при которой температуру колонки в процессе разделения компонентов изменяют по заданному закону.

**32. ХРОМАТОГРАФИЯ С
ПРОГРАММИРОВАНИЕМ
ДАВЛЕНИЯ
PROGRAMMED-PRESSURE
CHROMATOGRAPHY**

элюентная хроматография, при которой давление подвижной фазы в процессе разделения компонентов изменяют по заданному закону.

2.3. ПО КОНФИГУРАЦИИ РАЗДЕЛЯЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

**33. ПЛАНАРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
PLANAR
CHROMATOGRAPHY

способ хроматографии, в котором процессы разделения смеси веществ осуществляются в плоском слое сорбента.

**34. БУМАЖНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
PAPER
CHROMATOGRAPHY

планарная хроматография, в которой в качестве сорбента используют специальную бумагу.

**35. ТОНКОСЛОЙНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
THIN LAYER
CHROMATOGRAPHY

способ хроматографии, в котором процессы разделения смеси веществ осуществляются в тонких слоях сорбента (нанесенного на инертную твердую подложку) или в пленках пористого полимерного материала.

**36. КОЛОНОЧНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
COLUMN
CHROMATOGRAPHY

способ хроматографии, в котором процессы разделения смеси веществ осуществляются в колонке.

**37. МИКРОКОЛОНОЧНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**

жидкостная хроматография, в которой используются колонки с внутренним диаметром менее 2 мм.

**38. КАПИЛЛЯРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**

колоночная хроматография, в которой используются капилляры с внутренним диаметром менее 0,5 мм для жидкостной хроматографии, менее 1 мм – для газовой хроматографии.

**39. ПОЛИКАПИЛЛЯРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**

колоночная хроматография, в которой процесс разделения веществ одновременно осуществляется в пучке параллельно расположенных капилляров.

**40. ЦИРКУЛЯЦИОННАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
CIRCULATION
CHROMATOGRAPHY**

способ хроматографии, при котором разделяемая смесь веществ циркулирует с потоком подвижной фазы через одну и ту же хроматографическую колонку или систему колонок.

**41. МНОГОКОЛОНОЧНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
MULTI-COLUMN
CHROMATOGRAPHY**

способ хроматографии, при котором разделяемая смесь веществ пропускается через две (или более) последовательно соединенные колонки с неподвижными фазами различной химической природы.

**42. МУЛЬТИ-
ХРОМАТОГРАФИЯ
MULTICHROMATOGRAPHY**

неоднократно повторяемая хроматография в системе из двух колонок с неподвижными фазами одинаковой или различной химической природы, при которой селективность системы варьируют путем изменения по заданному закону физических условий разделения (давление подвижной фазы, температура) в одной или двух колонках.

**43. МНОГОМЕРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
MULTIDIMENSIONAL
CHROMATOGRAPHY**

способ хроматографии, при котором смесь веществ разделяется вначале в одних условиях, а затем отдельные фракции элюата подвергаются дальнейшему разделению в других условиях или в иных хроматографических системах.

**44. ПЕРКОЛЯЦИОННАЯ
(ПЕРФУЗИОННАЯ)
ХРОМАТОГРАФИЯ
PERCOLATION
(PERFUSION)
CHROMATOGRAPHY**

хроматография, при которой поток подвижной фазы осуществляется через поры твердого сорбента, а не между частицами сорбента.

2.4. ПО ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ПОЛЯРНОСТИ ПОДВИЖНОЙ И НЕПОДВИЖНОЙ ФАЗ

45. НОРМАЛЬНО- ФАЗОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ

NORMAL-PHASE

CHROMATOGRAPHY

жидкостная хроматография, в которой неподвижная фаза более полярна, чем подвижная.

46. ОБРАЩЕННО- ФАЗОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ

REVERSED-PHASE

CHROMATOGRAPHY

жидкостная хроматография, в которой неподвижная фаза менее полярна, чем подвижная.

2.5. ПО МЕХАНИЗМУ РАЗДЕЛЕНИЯ ВЕЩЕСТВА

47. АДСОРБЦИОННАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ ADSORPTION CHROMATOGRAPHY

хроматография, в которой неподвижной фазой служит твердый адсорбент и разделение смеси веществ происходит в результате различия в константах адсорбции веществ.

48. РАСПРЕДЕЛИ- ТЕЛЬНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ PARTITION CHROMATOGRAPHY

хроматография, в которой неподвижной фазой служит жидкий или твердый сорбент и разделение смеси веществ происходит в результате различия в константах распределения веществ между подвижной и неподвижной фазами.

49. ЭКСКЛЮЗИОННАЯ (СИТОВАЯ) ХРОМАТОГРАФИЯ SIZE-EXCLUSION CHROMATOGRAPHY

жидкостная хроматография, в которой неподвижной фазой служит пористое тело или гель и разделение смеси неудаерживаемых неподвижной фазой веществ происходит только в результате различия в размерах молекул этих веществ и/или их форме и способности проникать в поры неподвижной фазы.

Примечание: метод, в котором неподвижной фазой служит гель, называется гелепроникающей хроматографией.

**50. АФФИННАЯ
(БИОСПЕЦИФИЧЕСКАЯ)
ХРОМАТОГРАФИЯ**
AFFINITY (BIOSPECIFIC)
CHROMATOGRAPHY

жидкостная хроматография, в которой разделение смеси биологически активных веществ происходит за счет различия в их биоспецифическом взаимодействии с комплементарными сорбционными центрами неподвижной фазы.

**51. ЛИГАНДОБМЕННАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
LIGAND EXCHANGE
CHROMATOGRAPHY

хроматография, в которой неподвижная и/или подвижная фаза содержат комплексообразующий ион металла и разделение смеси веществ происходит за счет различия в константах образования комплекса и/или коэффициентов распределения комплексов между подвижной и неподвижной фазами.

**52. ИОНООБМЕННАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ**
ION-EXCHANGE
CHROMATOGRAPHY

жидкостная хроматография, в которой неподвижной фазой служит катионит или анионит и разделение смеси ионизированных веществ происходит в результате различия в их константах ионного обмена.

**53. ИОННАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
ION CHROMATOGRAPHY**

Аналитическая высокоэффективная ионообменная хроматография на сорбентах малой обменной емкости и с высокочувствительным детектированием.

Примечание: В наиболее распространенном варианте ионной хроматографии на первой стадии проводят разделение смеси компонентов в разбавленном растворе кислоты (основания), а затем удаляют избыток кислоты (основания) в элюате с целью повышения чувствительности определения разделенных ионов кондуктометрическим детектором. Распространение получил также метод с непрямым фотометрическим детектированием в УФ-активном разбавленном элюенте.

**54. ИОН-ПАРНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
ION-PAIR
CHROMATOGRAPHY**

жидкостная хроматография, в которой подвижная фаза содержит сорбируемое ионогенное вещество (ион-парный реагент) и разделение смеси веществ происходит за счет различия в способности веществ к образованию ионных пар и/или в коэффициентах распределения ионных пар между подвижной и неподвижной фазами.

**55. ГИДРО-
ДИНАМИЧЕСКАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
HYDRODINAMIC
CHROMATOGRAPHY**

жидкостная хроматография, в которой роль неподвижной фазы играют стенки колонки (канала) и разделение смеси макромолекул или частиц происходит вследствие различия скоростей протекания подвижной фазы вдоль оси канала и у его стенок, а также за счет распределения разделяемых частиц по сечению канала в соответствии с их размерами.

**56. ФРАКЦИОНИ-
РОВАНИЕ
В ПОПЕРЕЧНОМ
ПОЛЕ СИЛ
FIELD-FLOW
FRACTIONATION**

жидкостная хроматография, в которой роль неподвижной фазы играют стенки колонки (канала) и разделение смеси макромолекул или частиц происходит вследствие различия скоростей протекания подвижной фазы вдоль оси канала и у его стенок, а также за счет распределения разделяемых частиц по сечению канала в соответствии с их размерами и поведением в приложенном в поперечном направлении поле (гравитационном, магнитном и др.).

**57. ГИДРОФОБНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
HYDROPHOBIC-
INTERACTION
CHROMATOGRAPHY**

жидкостная хроматография на неполярных сорбентах, в которой в качестве подвижной фазы используются водные или водно-органические буферные растворы и разделение смеси веществ происходит в результате различия в их взаимодействии с гидрофобными группами сорбента в условиях убывающего градиента солей в элюенте.

**58. ГИДРОФИЛЬНАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
HYDROPHILIC-
INTERACTION
CHROMATOGRAPHY
(HILIC)**

жидкостная хроматография на полярных сорбентах, в которой в качестве подвижной фазы используются водно-органические растворы и разделение смеси происходит в результате различия в их взаимодействии с полярными группами сорбента в условиях убывающего градиента органического модификатора в элюенте.

**59. ЭНАНТИО-
СЕЛЕКТИВНАЯ
(ХИРАЛЬНАЯ)
ХРОМАТОГРАФИЯ
ENANTIOSELECTIVE
(CHIRAL)
CHROMATOGRAPHY**

хроматография, в которой разделение энантиомеров происходит за счет энантиоселективности их взаимодействия с хиральными компонентами (хиральными селекторами) неподвижной и/или подвижной фазы.

**60. КРИТИЧЕСКАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ
(ХРОМАТОГРАФИЯ
В КРИТИЧЕСКИХ
УСЛОВИЯХ)
CRITICAL
CHROMATOGRAPHY**

жидкостная хроматография олигомеров или полимеров в таких условиях (состав смешанного элюента, температура, природа и пористая структура сорбента), когда адсорбционные взаимодействия с сорбентом компенсированы эксклюзивными эффектами, так что удерживание макромолекул определяется не их размером, а наличием специфических (например, концевых) функциональных групп или топологией молекулы (циклы, разветвления).

2.6. ПО ЦЕЛИ

- 61. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ**
ANALYTICAL CHROMATOGRAPHY
- хроматография, используемая для качественного анализа смеси и/или количественного определения отдельных компонентов смеси.
- 62. ПРЕПАРАТИВНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ**
PREPARATIVE CHROMATOGRAPHY
- хроматография, используемая для выделения чистых компонентов или фракций из смеси.
- 63. ОБРАЩЕННАЯ ГАЗОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ**
INVERSED GAS CHROMATOGRAPHY
- газовая хроматография, используемая для исследования структуры и свойств неподвижной фазы.
- 64. ОБРАЩЕННАЯ СИТОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ**
INVERSED SIZE EXCLUSION CHROMATOGRAPHY
- эксклюзионная хроматография, используемая для исследования пористой структуры сорбента.

2.7. ПО ХИМИЧЕСКОМУ ПРЕВРАЩЕНИЮ СОРБАТА

65. РЕАКЦИОННАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ REACTIVE CHROMATOGRAPHY

хроматографический метод, при котором разделяемые соединения подвергаются в хроматографической системе химическим превращениям, включая перевод в производные, до или после хроматографической колонки.

66. ПИРОЛИТИЧЕСКАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ PYROLYSIS-GAS CHROMATOGRAPHY

реакционная газовая хроматография, при которой исследуемый образец подвергается пиролизу перед хроматографической колонкой.

67. ОСАДОЧНАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ RECIPITATION CHROMATOGRAPHY

реакционная планарная хроматография, при которой разделяемые соединения образуют с компонентами элюента труднорастворимые осадки, располагающиеся на поверхности сорбента в порядке увеличения их произведений растворимости.

2.8. ПО СПОСОБУ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ

**68. РАДИО-
ХРОМАТОГРАФИЯ
RADIO
CHROMATOGRAPHY**

хроматографический метод, сочетающий разделение компонентов смеси с детектированием веществ по их радиоактивности.

**69. ХРОМАТО-МАСС-
СПЕКТРОМЕТРИЯ
CHROMATOGRAPHY-
MASS
SPECTROMETRY**

хроматографический метод, сочетающий разделение компонентов смеси с масс-спектрометрическим детектированием разделенных веществ.

**70. ХРОМАТОГРАФИЯ С
НЕПРЯМЫМ
ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ
CHROMATGRAPHY
WITH
INDIRECT DETECTION**

хроматографический метод с использованием элюента, дающего постоянный отклик детектора, который ослабевает при прохождении через детектор разделенных веществ, не дающих такого отклика.

2.9. ЭЛЕКТРОФОРЕЗ И ЭЛЕКТРОХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

- 71. ЭЛЕКТРОФОРЕЗ
ELECTROPHORESIS** движение заряженных частиц в буферном растворе электролита под действием приложенного электрического поля.
- 72. КАПИЛЛЯРНЫЙ
ЗОННЫЙ
ЭЛЕКТРОФОРЕЗ, (КЗЭ)
CAPILLARY ZONE
ELECTROPHORESIS, (CZE)** метод разделения заряженных частиц, реализуемый под действием электрического поля в кварцевых капиллярах, заполненных фоновым электролитом и основанный исключительно на различии в электрофоретических подвижностях аналитов.
- 73. ГЕЛЬ-
ЭЛЕКТРОФОРЕЗ
GEL-ELECTROPHORESIS** электрофорез, в котором смесь заряженных макромолекул разделяется в результате различия в их заряде, размере и скорости миграции через гель (или раствор нейтрального полимера), помещенный в электрическое поле.
- 74. ИЗОТАХОФОРЕЗ
ISOTACHOPHORESIS** электрофорез, в котором в капилляр перед разделяемой смесью помещают ведущий (лидирующий) электролит с повышенной электропроводностью, а после нее – концевой (терминальный) электролит с пониженной электропроводностью, причем под воздействием электрического поля смесь разделяется на примыкающие друг к другу сконцентрированные зоны индивидуальных компонентов, выходящих в порядке понижения их электрофоретической подвижности.

**75. ИЗОЭЛЕКТРО-
ФОКУСИРОВАНИЕ**
ISOELECTRIC FOCUSING

метод разделения в электрическом поле смеси амфотерных соединений, основанный на их распределении вдоль колонки с градиентом рН в соответствии с их изоэлектрическими точками.

Примечание: Электрофорез, изотахофорез и изоэлектрофокусирование не являются хроматографическими методами, т.к. используемые в них разделяющие системы состоят только из одной фазы – фонового электролита (или геля), а за разделение аналитов ответственны только различия в их поведении в электрическом поле.

**76. ЭЛЕКТРО-
КИНЕТИЧЕСКАЯ
ХРОМАТОГРАФИЯ, (ЭКХ)**
ELECTROKINETIC
CHROMATOGRAPHY (ЕКХ)

метод разделения как заряженных, так и нейтральных аналитов, сочетающий принципы электрофореза и жидкостной хроматографии, в котором в качестве побудителя движения подвижной фазы и ионов используется электрическое поле; фоновый электролит содержит диспергированную псевдостационарную фазу (мицеллы, коллоидные частицы, микрочастицы полиэлектролита, наногубки), а разделение аналитов происходит за счет различий в их электрофоретических подвижностях и взаимодействия с псевдостационарной фазой.

Примечание: в соответствии с природой псевдостационарной фазы различают мицеллярную (МЭКХ) и микроэмульсионную (МЭЭКХ) электрокинетическую хроматографию.

**77. КАПИЛЛЯРНАЯ
ЭЛЕКТРО-
ХРОМАТОГРАФИЯ (КЭХ)
CAPILLARY
ELECTROCHROMATOGRA-
PHY, (CEC)**

метод разделения как заряженных, так и нейтральных аналитов, сочетающий принципы электрофореза и жидкостной хроматографии, в котором используются капилляры, заполненные или модифицированные неподвижной (стационарной) фазой.

**78. ЭЛЕКТРО-
ОСМОТИЧЕСКИЙ
ПОТОК (ЭОП)
ELECTROOSMOTIC FLOW,
EOF**

течение жидкости под действием приложенного электрического поля, вызванное движением противоионов, образующихся при диссоциации ионогенных групп, закрепленных на стенках капилляра или на частицах ионообменного сорбента.

Примечание: Скорость электроосмотического потока, пропорциональна напряженности электрического поля, потенциалу поверхностного заряда капилляра, диэлектрической проницаемости фонового электролита и обратно пропорциональна его вязкости.

**79. ЭЛЕКТРО-
ФОРЕТИЧЕСКАЯ
ПОДВИЖНОСТЬ,
ELECTROPHORETIC
MOBILITY**

скорость движения заряженной частицы относительно жидкой фазы под действием приложенного электрического поля.

Примечание: Электрофоретическая подвижность иона пропорциональна напряженности электрического поля, заряду иона и обратно пропорциональна его размеру и вязкости фонового электролита.

**80. ФОНОВЫЙ
ЭЛЕКТРОЛИТ, ФЭ
BACKGROUND
ELECTROLYTE, BGE**

буферный раствор электролита, служащий средой для разделения аналитов в электрофорезе и/или заполняющий капилляр в электрохроматографических системах.

**81. ВРЕМЯ МИГРАЦИИ
MIGRATION TIME**

время, необходимое аналиту для прохождения им эффективной длины капилляра от точки ввода пробы (начала капилляра) до точки детектирования.

Примечание: Время миграции заряженных веществ в КЭ определяется собственной электрофоретической подвижностью (μ) и скоростью электроосмотического потока (U).

III. ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЛОНКИ И СОРБЕНТА

82. **ДИАМЕТР КОЛОНКИ, d_c**
COLUMN DIAMETER

внутренний диаметр цилиндрической трубки (колонки).

83. **ДЛИНА КОЛОНКИ, L**
COLUMN LENGTH

часть длины трубки, которая содержит сорбент.

84. **ПЛОЩАДЬ СЕЧЕНИЯ КОЛОНКИ, A_c**
CROSS-SECTIONAL AREA OF THE COLUMN

площадь внутреннего сечения цилиндрической трубки (колонки).

$$A_c = \pi \left(\frac{d_c}{2} \right)^2$$

85. **ОБЪЁМ КОЛОНКИ, V_c**
COLUMN VOLUME

часть объёма трубки (колонки), которая содержит сорбент.

86. **СВОБОДНЫЙ ОБЪЁМ КОЛОНКИ, ОБЪЁМ ПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ, V_o**
HOLD-UP VOLUME

часть объёма колонки, не занятая сорбентом и доступная для подвижной фазы.

Примечание: V_o характеризует объём подвижной фазы в колонке, который складывается из объёма межгранульного пространства и объёма пор сорбента, доступных для предельно малых молекул подвижной фазы.

В жидкостной хроматографии

$$V_o = V_L.$$

В газовой хроматографии

$$V_o = V_G = V_M \cdot j_3^2,$$

где V_M – мёртвый объём,

j_3^2 – коэффициент Джеймса и Мартина (см. разделы IV и V).

**87. ПОРИСТОСТЬ
КОЛОНКИ, ε**
COLUMN POROSITY

безразмерная величина, равная отношению свободного объёма колонки к объёму колонки

$$\varepsilon = \frac{V_o}{V_c}.$$

**88. СВОБОДНОЕ
СЕЧЕНИЕ
КОЛОНКИ, A_M**
FREE CROSS-SECTIONAL
AREA OF THE COLUMN

часть площади сечения колонки, доступная для подвижной фазы

$$A_M = \varepsilon \cdot A_c$$

Примечание: для полых незаполненной капиллярной колонки величина свободного сечения рассчитывается из её геометрических размеров с учетом толщины плёнки неподвижной фазы d_f :

$$A_M = \pi \left(\frac{d_c - d_f}{2} \right)^2$$

Для наполненной колонки

$$A_M = A_G = \frac{V_G}{L} = \frac{F_c \cdot t_M \cdot j_3^2}{L}$$

(см. разделы IV и V).

**89. ОБЪЁМ
НЕПОДВИЖНОЙ
ФАЗЫ, V_S
STATIONARY PHASE
VOLUME**

суммарный объем находящегося в колонке твердого или жидкого адсорбента, доступный для молекул сорбата предельно малых размеров.

Примечание: в газо-жидкостной хроматографии $V_S = V_L$, где V_L - объем неподвижной жидкой фазы.

**90. ДОЛЯ ОБЪЕМА
КОЛОНКИ,
ЗАНИМАЕМАЯ
НЕПОДВИЖНОЙ
ЖИДКОЙ ФАЗОЙ, ε_1
THE RATIO OF THE
VOLUME OF THE LIQUID
STATIONARY PHASE TO
THAT OF THE COLUMN
VOLUME**

в газо-жидкостной хроматографии:

$$\varepsilon_1 = \frac{V_L}{V_C}$$

**91. ТОЛЩИНА ПЛЁНКИ
НЕПОДВИЖНОЙ
ЖИДКОЙ ФАЗЫ, d_f
LIQUID PHASE FILM
THICKNESS**

толщина плёнки неподвижной жидкой фазы на внутренней поверхности поллой капиллярной колонки или на гранулах и поверхности пор твёрдого носителя.

**92. ДИАМЕТР ЗЕРНА
СОРБЕНТА, d_p
PARTICLE DIAMETER**

средний диаметр частиц сорбента.

**93. МАССА
НЕПОДВИЖНОЙ
ФАЗЫ, W_s**
MASS (WEIGHT) OF THE
STATIONARE PHASE

масса неподвижной фазы в колонке.
Примечание: в газо-адсорбционной хроматографии $W_s = W_a$, где W_a – масса адсорбента в колонке; в газо-жидкостной хроматографии имеется в виду только неподвижная жидкая фаза и $W_s = W_L$, где W_L – масса неподвижной жидкой фазы.

$$W_L = V_L \cdot \rho_L,$$

ρ_L – плотность неподвижной жидкой фазы при температуре колонки.

**94. МАССА ТВЁРДОГО
НОСИТЕЛЯ, W_{SS}**
MASS OF THE SOLID
SUPPORT

масса твёрдого носителя в колонке, на который наносится неподвижная жидкая фаза.

**95. ПРОЦЕНТ ПРОПИТКИ
ТВЁРДОГО НОСИТЕЛЯ,
MASS RATIO OF THE
STATIONARY PHASE TO
THE SOLID SUPPORT**

выраженное в процентах отношение массы неподвижной жидкой фазы к массе твердого носителя в колонке

$$\Pi = \frac{W_L}{W_{SS}} \cdot 100\%$$

**96. ФАЗОВОЕ
ОТНОШЕНИЕ, β**
PHASE RATIO

отношение объёма подвижной фазы к объёму неподвижной фазы в колонке

$$\beta = \frac{V_o}{V_s},$$

причём в газовой хроматографии

$$V_o = V_G = V_M \cdot j_3^2.$$

IV. ПАРАМЕТРЫ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДИНАМИКИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

97. КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ В НЕПОДВИЖНОЙ ФАЗЕ (D_S ИЛИ D_L , см²/с)
DIFFUSION COEFFICIENT IN THE STATIONARY PHASE

величина, характеризующая скорость миграции сорбата в неподвижной фазе и численно равная его потоку в сорбенте при единичном градиенте концентрации.

Примечание: в распределительной газожидкостной хроматографии D_L .

98. КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ В ПОДВИЖНОЙ ФАЗЕ (D_M ИЛИ D_G)
DIFFUSION COEFFICIENT IN THE MOBILE PHASE

величина, характеризующая скорость миграции сорбата в подвижной фазе и численно равная его потоку в подвижной фазе при единичном градиенте концентрации.

Примечание: в газовой хроматографии D_G , в жидкостной хроматографии D_M .

99. ЭФФЕКТИВНЫЙ (брутто) КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ ИЛИ КОЭФФИЦИЕНТ ДИСПЕРСИИ, D_{eff}
APPARENT DIFFUSION COEFFICIENT

величина, характеризующая скорость установления межфазного равновесия в колонке и охватывающая все процессы, способствующие уширению хроматографического пика. Связана с дисперсией ширины пика соотношением:

$$\sigma^2 = 2D_{eff} \cdot t_R,$$

и с высотой, эквивалентной теоретической тарелке, соотношением:

$$H = \frac{2D_{eff}}{u},$$

где u линейная скорость подвижной фазы в колонке.

**100. ВЯЗКОСТЬ
ПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ, η**
VISCOSITY OF THE
MOBILE PHASE

динамическая вязкость жидкой подвижной фазы или газовой подвижной фазы (коэффициент пропорциональности между сдвиговым напряжением и скоростью сдвига в законе Ньютона).

**101. ДАВЛЕНИЕ
НА ВХОДЕ
В КОЛОНКУ, P_i**
INLET PRESSURE

величина давления подвижной фазы на входе в колонку.

**102. ДАВЛЕНИЕ НА
ВЫХОДЕ ИЗ
КОЛОНКИ, P_o**
OUTLET PRESSURE

величина давления подвижной фазы на выходе из колонки, которое, в частности может быть равно атмосферному давлению P_a .

**103. ПЕРЕПАД
ДАВЛЕНИЯ
В КОЛОНКЕ, ΔP**
PRESSURE DROP

падение давления подвижной фазы в колонке

$$\Delta P = P_i - P_o$$

**104. КОЭФФИЦИЕНТ
ДЖЕЙМСА И
МАТИНА, j_3^2**
COMPRESSIBILITY
CORRECTION FACTOR

в газовой хроматографии отношение давления P_o газа на выходе из колонки к усреднённой (по длине колонки) величине давления \bar{P}_x в колонке:

$$j_3^2 = \frac{P_o}{\bar{P}_x}$$

Примечание: коэффициент j_3^2 показывает эффективную степень компрессии газа-носителя в колонке по сравнению с тем объёмом, который он занимает на выходе из колонки (при давлении P_0), и поэтому называется также «фактором коррекции на сжимаемость подвижной газовой фазы». Коэффициент j_3^2 вычисляют по формуле:

$$j_3^2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{\left(\frac{P_i}{P_0}\right)^2 - 1}{\left(\frac{P_i}{P_0}\right)^3 - 1}$$

**105. ОБЪЁМНАЯ
СКОРОСТЬ ЭЛЮЭНТА
НА ВЫХОДЕ ИЗ
КОЛОНКИ ПРИ
ТЕМПЕРАТУРЕ T_c
КОЛОНКИ И
ДАВЛЕНИИ P_0 , F_c
MOBILE PHASE FLOW
RATE AT COLUMN
OUTLET at T_c , P_0**

объемная скорость элюэнта на выходе из колонки при температуре T_c колонки и давлении P_0

Примечание: в газовой хроматографии, если давление на выходе из колонки P_0 равно атмосферному P_a , то величину F_c можно обозначать как F_{P_a, T_c} .

В случае измерения объёмов (скорости) газа-носителя с помощью пенного измерителя при атмосферном давлении P_a газ-носитель разбавляется парами воды и принимает комнатную температуру T_a . Поэтому в расчётах объёмов (скоростей) газа-носителя необходимо учитывать изменение температуры

газа, а также вносить поправочный коэффициент

$$\xi = \frac{(P_a - P_w)}{P_a},$$

где P_w – давление паров воды при комнатной температуре T_a ,

$$F_c = F_{P_a, T_c} = F_{P_a, T_a} \cdot \frac{T_c}{T_a} \cdot \left(\frac{P_a - P_w}{P_a} \right),$$

где F_{P_a, T_a} – объёмная скорость газа-носителя, измеренная с помощью пенного измерителя (расходомера) при атмосферном давлении P_a и комнатной температуре T_a (в условиях, когда колонка находится при температуре T_c).

106. ОБЪЁМНАЯ СКОРОСТЬ ГАЗА-НОСИТЕЛЯ В КОЛОНКЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ T_c КОЛОНКИ И В СЕЧЕНИИ, В КОТОРОМ ДАВЛЕНИЕ ГАЗА-НОСИТЕЛЯ РАВНО УСРЕДНЕННОМУ ПО ДЛИНЕ КОЛОНКИ ДАВЛЕНИЮ $P_x, F_{\bar{P}_x, T_c}$

объёмная скорость газа-носителя, приведенная к температуре колонки и усредненному по длине колонки давлению

$$F_{\bar{P}_x, T_c} = F_c \cdot j_3^2$$

**107. ЛИНЕЙНАЯ
СКОРОСТЬ
ПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ, u
LINEAR MOBILE-PHASE
VELOCITY**

линейная скорость перемещения подвижной фазы внутри колонки.

Примечание: в жидкостной хроматографии u рассчитывается как отношение объёмной скорости к свободному сечению колонки:

$$u = \frac{F_C}{A_M} = \frac{F_C}{\varepsilon A_C},$$

либо по формуле:

$$u = \frac{L}{t_M}$$

где t_M – мёртвое время (см. раздел V).

**108. ЛИНЕЙНАЯ
СКОРОСТЬ ГАЗА-
НОСИТЕЛЯ НА ВЫХОДЕ
ИЗ КОЛОНКИ ПРИ
ТЕМПЕРАТУРЕ
КОЛОНКИ T_c , u_o
LINEAR CARRIER GAS
VELOCITY AT COLUMN
OUTLET**

в газовой хроматографии линейная скорость газа-носителя при температуре колонки и давлении P_0 на выходе из колонки:

$$u_o = \frac{F_C}{A_G} = \frac{F_C}{\varepsilon A_C}$$

**109. СРЕДНЯЯ ПО
ВРЕМЕНИ
ПРЕБЫВАНИЯ
ВЕЩЕСТВА В КОЛОНКЕ
СКОРОСТЬ ГАЗА-
НОСИТЕЛЯ, \bar{u}_t
AVERAGE LINEAR
CARRIER GAS VELOCITY**

линейная скорость газа-носителя в колонке, усредненная по времени пребывания сорбата в колонке

$$\bar{u}_o = u_o \cdot j^2,$$

Примечание: на практике эта скорость определяется по формуле:

$$\bar{u}_t = L/t_M$$

причём среднее (по длине колонки) давление газа-носителя \bar{P}_x и средняя (по времени пребывания вещества в колонке) скорость газа-носителя \bar{u}_t устанавливаются в одном и том же сечении колонки.

V. ХРОМАТОГРАММА И ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ

- 110. НУЛЕВАЯ (БАЗОВАЯ) ЛИНИЯ ХРОМАТОГРАММЫ**
BASELINE
- участок хроматограммы, соответствующий нулевой концентрации анализируемых веществ в элюате.
- 111. ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЙ ПИК**
CHROMATOGRAPHY PEAK
- участок хроматограммы, соответствующий выходу определяемого вещества из хроматографической колонки.
- 112. ОСНОВАНИЕ ПИКА**
PEAK BASE
- продолжение нулевой линии, соединяющее начало и конец хроматографического пика.
- 113. ВЫСОТА ПИКА, h**
PEAK HEIGHT
- расстояние от максимума пика до его основания, измеренное вдоль оси отклика детектора.
- 114. ШИРИНА ПИКА У ОСНОВАНИЯ, w_b , τ_b , ω_b**
PEAK WIDTH AT BASE
- отрезок основания пика в единицах длины, отсекаемый двумя касательными, проведёнными в точках перегибов восходящей и нисходящей ветвей хроматографического пика (τ_b – то же, выраженное в единицах времени, ω_b – то же, выраженное в единицах объёма).

**115. ШИРИНА ПИКА
НА ПОЛУВЫСОТЕ,**

w_h, τ_h, ω_h

**PEAK WIDTH AT
HALF-HEIGHT**

отсекаемый пиком отрезок линии, проведённой параллельно основанию пика на середине его высоты (τ_h – то же, выраженное в единицах времени, ω_h – то же, выраженное в единицах объёма).

**116. ПЛОЩАДЬ ПИКА, A
PEAK AREA**

площадь хроматограммы, заключённая между пиком и его основанием.

**117. МЁРТВОЕ ВРЕМЯ, t_m
HOLD-UP TIME**

время пребывания несорбирующегося вещества в хроматографической колонке.

Примечание: на практике время измеряют от момента ввода пробы несорбирующегося вещества в хроматограф до момента регистрации максимума сигнала детектора. Оно включает не только мертвое время, но и время прохождения веществом внеколоночных объемов (узла ввода пробы, детектора и соединяющих их с колонкой коммуникаций). Измеренное таким образом время называют «полное или брутто мертвое время».

**118. МЁРТВЫЙ ОБЪЁМ,
 V_m
HOLD-UP VOLUME**

объём подвижной фазы внутри хроматографической колонки.

Примечание: 1) На практике измеряют объем между точкой ввода несорбирующей пробы и точкой её обнаружения.

Измеренный таким способом объем называют «полный или брутто мертвый объем». Кроме мёртвого объёма он включает в себя объёмы устройства ввода пробы и детектора, а также объёмы коммуникаций между ними и колонкой. 2) В газовой хроматографии мёртвый объём рассчитывают по формуле:

$$V_M = t_M \cdot F_C$$

где $F_C = F_{P_a} \tau_c$, когда давление на выходе из колонки равно атмосферному P_a . Эта величина превышает величину свободного объема колонки. Она становится равной ей после умножения V_M на фактор j_3^2 , т.е. расчета «исправленного мертвого объема»

$$V_M^o = V_M \cdot j_3^2 = V_o \quad \text{см. раздел III)}$$

**119. ВРЕМЯ
УДЕРЖИВАНИЯ
ВЕЩЕСТВА, t_R
TOTAL RETENTION TIME**

время пребывания исследуемого вещества в хроматографической колонке.

Примечание: на практике время удерживания определяют от момента ввода пробы вещества в хроматограф до момента регистрации максимума сигнала детектора.

**120. ОБЪЁМ
УДЕРЖИВАНИЯ
ВЕЩЕСТВА
(УДЕРЖИВАЕМЫЙ
ОБЪЁМ ВЕЩЕСТВА), V_R
TOTAL RETENTION
VOLUME**

объём подвижной фазы, затрачиваемый на элюирование пробы вещества.

Примечание: в газовой хроматографии объём удерживания вещества рассчитывают для температуры колонки и давления на выходе из колонки по формуле:

$$V_R = t_R \cdot F_c$$

**121. ИСПРАВЛЕННЫЙ
(СКОРРЕКТИРОВАННЫЙ)
УДЕРЖИВАЕМЫЙ
ОБЪЁМ, V_R^o
CORRECTED
RETENTION VOLUME**

в газовой хроматографии удерживаемый объём вещества с поправкой на сжимаемость газовой фазы

$$V_R^o = V_R \cdot j^2$$

**122. ПРИВЕДЁННОЕ
ВРЕМЯ УДЕРЖИВАНИЯ,
 t'_R
ADJUSTED RETENTION
TIME**

время удерживания вещества за вычетом мёртвого времени:

$$t'_R = t_R - t_M$$

**123. ПРИВЕДЁННЫЙ
ОБЪЁМ**

УДЕРЖИВАНИЯ, V'_R
ADJUSTED RETENTION
VOLUME

объем удерживания вещества за вычетом мёртвого объёма:

$$V'_R = V_R - V_M$$

Примечание: в газовой хроматографии приведенному объёму соответствует температура колонки и давление на выходе из колонки.

**124. ЧИСТЫЙ ОБЪЁМ
УДЕРЖИВАНИЯ**

**(ЭФФЕКТИВНЫЙ
УДЕРЖИВАЕМЫЙ
ОБЪЁМ), V_N**
NET RETENTION VOLUME

в газовой хроматографии приведённый объём удерживания вещества при усреднённом по длине колонки давлении \bar{P}_x газа и температуре T_c колонки:

$$V_N = V'_R \cdot j_3^2$$

**125. УДЕЛЬНЫЙ ОБЪЁМ
УДЕРЖИВАНИЯ**

**(УДЕЛЬНЫЙ
УДЕРЖИВАЕМЫЙ
ОБЪЁМ), V_g^T, V_s^T, V_v^T**
SPECIFIC RETENTION
VOLUME

в газовой хроматографии чистый объём удерживания, отнесённый к единице массы W_s или объёму V_s неподвижной фазы, или площади поверхности адсорбента A_s (при усреднённом по длине колонки давлении \bar{P}_x и температуре колонки T_c):

$$V_g^T = \frac{V'_R \cdot j_3^2}{W_s} = \frac{V_N}{W_s}$$

$$V_v^T = \frac{V'_R \cdot j_3^2}{V_s} = \frac{V_N}{V_s}$$

$$V_s^T = \frac{V'_R \cdot j_3^2}{A_s} = \frac{V_N}{A_s}$$

**126. ФАКТОР
ЗАДЕРЖКИ, R_f
RETARDATION FACTOR**

в планарной хроматографии отношение расстояния, пройденного центром зоны вещества, к расстоянию, пройденному фронтом подвижной фазы:

$$R_f = \frac{b}{a}$$

**127. ФАКТОР
УДЕРЖИВАНИЯ, k
RETENTION FACTOR**

безразмерная величина, равная отношению времени пребывания молекул вещества в неподвижной фазе ко времени пребывания молекул вещества в подвижной фазе:

$$k = \frac{t'_R}{t'_M} = \frac{V'_R}{V'_M}$$

Примечание: в газо-жидкостной хроматографии фактор удерживания определяется константой распределения K_c вещества между неподвижной и подвижной фазами (см. раздел VI):

$$k = K_c \cdot \frac{V_L}{V_G}$$

или

$$k = K_c / \beta.$$

**128. ОТНОСИТЕЛЬНОЕ
УДЕРЖИВАНИЕ, r
RELATIVE RETENTION**

безразмерная величина, равная отношению приведённого объёма (времени) удерживания определяемого вещества к приведённому объёму (времени) удерживания вещества, взятого для сравнения и хроматографируемого в идентичных условиях:

$$r = \frac{t'_R}{t'_{st}} = \frac{V'_R}{V'_{st}} = \frac{k_R}{k_{st}}$$

129. ИНДЕКС
УДЕРЖИВАНИЯ
КОВАЧА, *I*
KOVATS' RETENTION
INDEX

безразмерный параметр, характеризующий относительное удерживание вещества в масштабе логарифмической шкалы удерживания *n*-алканов, хроматографируемых в идентичных изотермических условиях:

$$I = 100 \cdot \frac{\lg V'_{R,x} - \lg V'_{R,z}}{\lg V'_{R,x+1} - \lg V'_{R,z}} + 100z$$

$$= 100 \cdot \frac{\lg t'_{R,x} - \lg t'_{R,z}}{\lg t'_{R,x+1} - \lg t'_{R,z}} + 100z$$

где *z* и *z+I* – число атомов углерода в *n*-алканах, между которыми элюируется вещество;

$$V'_{R}, V'_{R,z}, V'_{R,z+1}, t'_{R,x}, t'_{R,z}, t'_{R,z+1} -$$

приведённые объёмы и приведённые времена удерживания определяемого вещества и двух *n*-алканов, между которыми оно элюируется.

Примечания: индекс *I* равен интерполированному числу (умноженному на 100) атомов углерода гипотетического *n*-алкана, который элюировался бы с тем же объёмом удерживания V'_R , с которым элюируется определяемое вещество.

**130. ЛИНЕЙНЫЙ
ИНДЕКС
УДЕРЖИВАНИЯ
ВИГДЕРГАУЗА, J
VIGDERGAUS LINEAR
RETENTION INDEX**

безразмерный параметр, характеризующий относительное удерживание вещества в масштабе линейной шкалы удерживания n -алканов, хроматографируемых в идентичных изотермических условиях:

$$J = \frac{t_{R_x} - t_{R_z}}{t_{R_{z+1}} - t_{R_z}} + z$$

$t_{R_x}, t_{R_z}, t_{R_{z+1}}$ – времена удерживания определяемого вещества и двух n -алканов, между которыми оно элюируется.

**131. ИНДЕКС
УДЕРЖИВАНИЯ
ВАН-ДЕН-ДООЛА И
КРАТЦА, I^T
VAN-DEN-DOOL AND
KRATZ
RETENTION INDEX**

безразмерный параметр, характеризующий относительное удерживание вещества в масштабе шкалы удерживания n -алканов, хроматографируемых в условиях линейного программирования температуры:

$$I^T = 100 \cdot \frac{T_R - T_z}{T_{z+1} - T_z} + 100z$$

$$I^T = 100 \cdot \frac{t_R - t_z}{t_{z+1} - t_z} + 100z$$

где $T_R, T_z, T_{z+1}, t_R, t_z$ и t_{z+1} – температуры удерживания и времена удерживания определяемого вещества и двух n -алканов, между которыми оно элюируется.

**132. ЭФФЕКТИВНОСТЬ
КОЛОНКИ**
COLUMN EFFICIENCY

характеристика качества колонки, определяемая числом теоретических тарелок и высотой теоретической тарелки для выбранного вещества.

**133. ЧИСЛО
ТЕОРЕТИЧЕСКИХ
ТАРЕЛОК, N**
PLATE NUMBER

величина, характеризующая качество колонки и рассчитываемая по параметрам удерживания выбранного вещества по формулам:

$$N = 16 \left(\frac{l_R}{w_b} \right)^2 = 5.545 \left(\frac{l_R}{w_h} \right)^2$$

$$N = 16 \left(\frac{t_R}{\tau_b} \right)^2 = 5.545 \left(\frac{t_R}{\tau_h} \right)^2$$

$$N = 16 \left(\frac{V_R}{\omega_b} \right)^2 = 5.545 \left(\frac{V_R}{\omega_h} \right)^2$$

Примечание: l_R – отрезок на хроматограмме с момента ввода пробы до времени выхода максимума пика сорбата.

**134. ВЫСОТА,
ЭКВИВАЛЕНТНАЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ТАРЕЛКЕ, H**
PLATE HEIGHT
EQUIVALENT TO ONE
THEORETICAL PLATE

величина, характеризующая качество колонки и рассчитываемая как отношение длины колонки к числу теоретических тарелок:

$$H = \frac{L}{N}$$

**135. ЭФФЕКТИВНОЕ
ЧИСЛО
ТЕОРЕТИЧЕСКИХ
ТАРЕЛОК, N_{eff}
EFFECTIVE PLATE
NUMBER**

величина, характеризующая качество колонки и рассчитываемая по параметрам удерживания выбранного вещества по формулам:

$$N_{eff} = 16 \left(\frac{V'_R}{\omega_b} \right)^2 = 5.545 \left(\frac{V'_R}{\omega_h} \right)^2 = 5.545 \left(\frac{t'_R}{\tau_h} \right)^2$$

Примечание: эффективное число теоретических тарелок и число теоретических тарелок связаны соотношением:

$$N = N_{eff} \cdot \left[\frac{k + 1}{k} \right]^2$$

где k – фактор удерживания.

**136. ПРИВЕДЁННАЯ
ВЫСОТА
ТАРЕЛКИ, h
REDUCED PLATE HEIGHT**

отношение высоты, эквивалентной теоретической тарелке, к диаметру зерна сорбента d_p

$$h = \frac{H}{d_p}$$

VI. ПАРАМЕТРЫ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ВЕЩЕСТВ

137. ФАКТОР РАЗДЕЛЕНИЯ, $\alpha_{A/B}$ SEPARATION FACTOR

безразмерная величина, характеризующая разделительную способность колонки по отношению к веществам A и B и численно равная отношению факторов удерживания или приведённых времён удерживания этих веществ

$$\alpha_{\frac{A}{B}} = \frac{k_A}{k_B} = \frac{t'_{R,A}}{t'_{R,B}},$$

обычно $k_A > k_B$.

138. РАЗРЕШЕНИЕ ПИКОВ, R_S PEAK RESOLUTION

расстояние между максимумами выбранных соседних пиков, делённое на полусумму их ширин у основания или сумму ширин на полувысоте (выраженные в одних и тех же единицах измерения):

$$R_S = \frac{t_{R,2} - t_{R,1}}{\frac{\tau_{b,2} + \tau_{b,1}}{2}}$$

или

$$R_S = \frac{t_{R,2} - t_{R,1}}{(\tau_{h,2} + \tau_{h,1})}$$

**139. ЧИСЛО
РАЗДЕЛЕНИЙ, SN
SEPARATION NUMBER**

величина, характеризующая разделительную способность колонки и соответствующая возможному количеству полностью разделенных пиков между двумя следующими друг за другом n -алканами с числом атомов углерода z и $(z+1)$:

$$SN = \frac{t_{R(z+1)} - t_{R(z)}}{\tau_{k(z)} + \tau_{k(z+1)}} - 1$$

Примечание: в немецкой научной литературе используется символ TZ (Trennzahl).

**140. КРИТЕРИЙ
РАЗДЕЛЕНИЯ ДЛЯ
НЕПОЛНОСТЬЮ
РАЗДЕЛЕННЫХ
ПИКОВ, ψ**

отношение разности высоты меньшего пика h и высоты минимума между пиками h_{min} к высоте h :

$$\psi = \frac{(h - h_{min})}{h}$$

**141. КРИТЕРИЙ
РАВНОМЕРНОСТИ
ХРОМАТОГРАММЫ, Δ**

безразмерный критерий, характеризующий равномерность разделения многокомпонентных смесей и изменяющийся от 0 до 1 (оптимум):

$$\bar{\Delta} = \frac{n_k \cdot \tau_b \cdot R_S}{t}$$

где n_k – число пиков на хроматограмме, τ_b – ширина наиболее узкого пика у основания, R_S – разрешение пиков для наилучшим образом разделяемой пары, t – продолжительность анализа (время удерживания последнего компонента).

**142. КОЭФФИЦИЕНТ
БЫСТРОДЕЙСТВИЯ, λ**

обобщённый критерий, характеризующий как качество, так и скорость разделения многокомпонентных смесей:

$$\lambda = \frac{n_k \cdot R_S^2}{t}, \text{сек}^{-1},$$

где R_S – разрешение пиков для наилучшим образом разделяемой пары.

VII. ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ В ЭКСКЛЮЗИОННОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

**143. ВРЕМЯ
УДЕРЖИВАНИЯ
ВЫСОКО-
МОЛЕКУЛЯРНОГО
НЕСОРБИРУЮЩЕГО
СЯ ВЕЩЕСТВА, t_o
RETENTION TIME OF
UNRETAINED
COMPOUND**

в эксклюзионной жидкостной хроматографии время пребывания в колонке неударживаемого вещества, размер молекул которого превышает размер самых больших пор сорбента. *Примечание:* данный компонент элюируется из колонки первым и даже раньше, чем содержащая его порция подвижной фазы.

**144. ОБЪЕМ
УДЕРЖИВАНИЯ
ВЫСОКО-
МОЛЕКУЛЯРНОГО
НЕСОРБИРУЮЩЕГОС
Я ВЕЩЕСТВА, V_o
RETENTION VOLUME
OF UNRETAINED
COMPOUND**

в эксклюзионной жидкостной хроматографии объем элюирования неударживаемого высокомолекулярного вещества, размер молекул которого больше самых крупных пор сорбента:

$$V_o = t_o \cdot F_c.$$

**145. ВРЕМЯ
УДЕРЖИВАНИЯ
НИЗКО-
МОЛЕКУЛЯРНОГО
НЕСОРБИРУЮЩЕГОС
Я ВЕЩЕСТВА,
РАЗМЕР МОЛЕКУЛ
КОТОРОГО МЕНЬШЕ
РАЗМЕРА САМЫХ
МАЛЕНЬКИХ ПОР
СОРБЕНТА, t_t
TOTAL MOBILE-PHASE
TIME**

в эксклюзионной жидкостной хроматографии соответствует времени элюирования неударживаемого вещества, размер молекул которого меньше или сопоставим с размером самых маленьких пор сорбента.

**146. ПОЛНЫЙ ОБЪЕМ
ПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ,
 V_t
TOTAL MOBILE-PHASE
VOLUME**

в эксклюзионной жидкостной хроматографии представляет сумму межгранульного и внутригранульного свободного объемов и соответствует объему элюирования неударживаемого вещества, размер молекул которого меньше размера самых маленьких пор сорбента.

Примечание: полный объем подвижной фазы рассчитывается по формуле:

$$V_t = t_t \cdot F_c$$

**147. ВНУТРИ-
ГРАНУЛЬНЫЙ
(СТАЦИОНАРНЫЙ)
ОБЪЕМ ЭЛЮЕНТА
(ОБЪЕМ
НЕПОДВИЖНОЙ
ФАЗЫ), V_i
INTERPARTICLE
VOLUME
OF THE COLUMN**

в эксклюзионной жидкостной хроматографии объем пор сорбента, занятый элюентом.

$$V_i = V_t - V_o$$

$$V_i = (t_t - t_o) \cdot F_c$$

**148. УДЕРЖИ-
ВАЕМЫЙ ОБЪЕМ
(ВРЕМЯ), V_R , t_R
RETENTION VOLUME
(TIME)**

объем (время) элюирования анализируемого компонента (аналита), размер молекул которого меньше, чем размер самых больших пор сорбента, и больше, чем размер наименьших пор.

$$V_R = t_R \cdot F_c$$

**149. ЧИСТОЕ ВРЕМЯ
УДЕРЖИВАНИЯ, t'_R
ADJUSTED RETENTION
TIME**

в эксклюзионной хроматографии время удерживания аналита за вычетом времени элюирования неудерживаемого высокомолекулярного вещества:

$$t'_R = t_R - t_o$$

**150. ЧИСТЫЙ ОБЪЕМ
УДЕРЖИВАНИЯ, V'_R
ADJUSTED RETENTION
VOLUME**

в эксклюзионной хроматографии объем элюирования аналита за вычетом объема элюирования неудерживаемого высокомолекулярного вещества:

$$V'_R = V_R - V_o$$

**151. ФАКТОР
УДЕРЖИВАНИЯ
В ЭКСКЛЮЗИОННОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ, k_ϵ
RETENTION FACTOR**

отношение чистого объема (времени) элюирования аналита к объему (времени) элюирования неудерживаемого высокомолекулярного вещества:

$$k_\epsilon = \frac{V_R - V_o}{V_o} = \frac{t_R - t_o}{t_o}$$

**152. КОНСТАНТА
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
В ЭКСКЛЮЗИОННОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ, K_o
DISTRIBUTION
CONSTANT IN
EXCLUSION
CHROMATOGRAPHY**

безразмерная величина, характеризующая долю внутригранульного объема элюента (объема пористого пространства сорбента), доступную молекулам данного размера

$$K_o = \frac{V_R - V_o}{V_i}$$

Причем: $V_R = V_o + K_o \cdot V_i$

Примечание: для неударживаемого высокомолекулярного вещества $V_R = V_o$ и, таким образом, $K_o = 0$. Для вещества, размер молекул которого меньше размера самых маленьких пор, $V_R = V_t$ и $K_o = 1$. Таким образом, в эксклюзионной хроматографии значение K_o изменяется в диапазоне от 0 до 1.

**153. РАЗРЕШЕНИЕ
ПИКОВ
В ЭКСКЛЮЗИОННОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ, $R_{1/2}$
PEAK RESOLUTION**

$$R_{1/2} = \frac{V_{R_1} - V_{R_2}}{(\omega_{b_1} + \omega_{b_2})/2}$$

где V_{R_1} и V_{R_2} относятся к компонентам молекулярной массы (размера) M_1 и M_2 , соответственно, причем $M_1 < M_2$. В эксклюзионной хроматографии крупные молекулы элюируются быстрее, чем маленькие и $V_{R_1} > V_{R_2}$.

154. ЭФФЕКТИВНОЕ
ЧИСЛО
ТЕОРЕТИЧЕСКИХ
ТАРЕЛОК И
ЭФФЕКТИВНАЯ
ВЫСОТА
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ТАРЕЛКИ, N_{eff} , H_{eff}
EFFECTIVE PLATE
NUMBER AND
EFFECTIVE PLATE
HEIGHT

Величины, характеризующие качество колонки и рассчитываемые по параметрам удерживания выбранного вещества и неудерживаемого высокомолекулярного вещества:

$$N_{eff} = 16 \left[\frac{V_R - V_o}{\omega_b} \right]^2 = 5.545 \left[\frac{(V_R - V_o)}{\omega_h} \right]^i$$

$$N_{eff} = 16 \left[\frac{t_R - t_o}{\tau_b} \right]^2 = 5.545 \left[\frac{(t_R - t_o)}{\tau_h} \right]^i$$

$$H_{eff} = L / N_{eff}$$

Примечание: в вычислениях числа теоретических тарелок значения величин τ_b и τ_h должны иметь ту же размерность, что и объем и время удерживания соответственно.

VIII. ПРИЛОЖЕНИЕ «ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ МЕЖФАЗНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В УСЛОВИЯХ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ»

155. ГИББСОВСКАЯ АДСОРБЦИЯ, Γ

избыток i -го компонента, приходящийся на единицу площади поверхности раздела фаз:

$$\Gamma_i = \frac{n_i - n_i^{\cdot} - n_i^{\prime}}{A},$$

где n_i – общее число молей i -го компонента в системе, n_i^{\cdot} и n_i^{\prime} – число молей того же компонента в каждой из двух соприкасающихся фаз в предположении, что его концентрации в фазах постоянны вплоть до геометрической разделяющей поверхности площадью A .

156. КОНСТАНТА ГЕНРИ АДСОРБЦИИ ПРИ МАЛЫХ ЗАПОЛНЕНИЯХ ПОВЕРХНОСТИ, $K_{1,C}$

отношение гиббсовской адсорбции вещества при малом заполнении поверхности адсорбента Γ_{GS} к молярной концентрации адсорбата в идеальной газовой фазе C_G :

$$K_{1,C} = \lim_{C_G \rightarrow 0} \left(\frac{\Gamma_{GS}}{C_G} \right),$$

где индекс «1» указывает на характеристику адсорбции при малом (нулевом) заполнении поверхности (область Генри), а индекс «C» – что концентрация в газовой фазе выражена как молярная.

Примечание: в равновесной газо-адсорбционной хроматографии постулируется, что константа Генри адсорбции:

$$K_{1,c} = \lim_{C_G \rightarrow 0} V_S^T,$$

где V_S^T – чистый объем удерживания, отнесенный к площади поверхности адсорбента A_S , $\text{см}^3/\text{м}^2$.

$$V_S^T = V_N / A_S,$$

где V_N – чистый объем удерживания.

**157. СТАНДАРТНЫЕ
ИЗМЕНЕНИЯ
ТЕРМО-
ДИНАМИЧЕСКИХ
ФУНКЦИЙ ПРИ
ПРЕДЕЛЬНО
НИЗКИХ
ЗНАЧЕНИЯХ
АДСОРБЦИИ В
СИСТЕМЕ
ПОСТОЯННОГО
ОБЪЁМА, $\Delta \bar{F}_1^o$, $\Delta \bar{U}_1^o$,
 $\Delta \bar{S}_{1,c}^o$**

в газо-адсорбционной хроматографии изменения энергии Гельмгольца, внутренней энергии и энтропии при переходе 1 моль адсорбата ($V, T = \text{const}$) из газовой идеальной подвижной фазы со стандартной концентрацией $C_G = 1$ $\mu\text{кмоль}/\text{см}^3$ в адсорбированное состояние с величиной гиббсовской адсорбции $\Gamma = 1$ $\mu\text{кмоль}/\text{м}^2$. Изменение энергии Гельмгольца связано с константой Генри адсорбции $K_{1,c}$ ($\text{см}^3/\text{м}^2$) соотношением:

$$\Delta \bar{F}_1^o = -RT \ln(K_{1,c} - 1),$$

а температурная зависимость константы Генри адсорбции в небольшом интервале температур описывается уравнением:

$$\ln K_{1,c} = -\frac{\Delta \bar{U}_1^o}{RT} + \frac{\Delta \bar{S}_1^o}{R} + 1$$

или

$$\ln K_{1,c} = \frac{q_{dif,1}}{RT} + \frac{\Delta \bar{S}_1^\circ}{R} + 1,$$

где $\Delta \bar{U}_1^\circ = -\bar{q}_{dif,1}$ – дифференциальная молярная теплота адсорбции, $\Delta \bar{S}_1^\circ = S_1^{\circ,S} - \bar{S}_{g,c}^\circ$ – стандартное изменение энтропии, $S_1^{\circ,S}$ – стандартная молярная энтропия адсорбированного вещества при $\Gamma = 1$ мкмоль/м², $\bar{S}_{g,c}^\circ$ – стандартная молярная энтропия адсорбента в газовой фазе с концентрацией $C_0 = 1$ мкмоль/см³.

**158. КОНСТАНТА
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ,
 K_c
DISTRIBUTION
CONSTANT**

отношение молярной концентрации сорбата в неподвижной жидкой фазе к его концентрации в газовой подвижной фазе.

Примечание: В газо-жидкостной хроматографии при малых пробах сорбата

$$K_c = \left(\frac{C_L}{C_G} \right)_{C_G \rightarrow 0},$$

$$K_c = \frac{(V_R - V_M) \cdot j_3^2}{V_L} = V_V^T = V_g^T \cdot \rho_L,$$

где V_L, ρ_L – объём и плотность жидкой неподвижной фазы при температуре колонки T_c .

**159. КОНСТАНТА
АДСОРБЦИИ НА
МЕЖФАЗНОЙ
ГРАНИЦЕ ГАЗ –
НЕПОДВИЖНАЯ
ЖИДКАЯ ФАЗА, K_{GL}**

в газо-жидкостной хроматографии отношение гиббсовской адсорбции вещества на границе газ – неподвижная жидкая фаза Γ_{GL} к его концентрации в газовой фазе C_G .

$$K_{GL} = \left(\frac{\Gamma_{GL}}{C_G} \right)_{C_G \rightarrow 0}$$

**160. КОНСТАНТА
АДСОРБЦИИ НА
МЕЖФАЗНОЙ
ГРАНИЦЕ
НЕПОДВИЖНАЯ
ЖИДКАЯ ФАЗА –
ТВЁРДЫЙ
НОСИТЕЛЬ, K_{LS}**

в газо-жидкостной хроматографии отношение гиббсовской адсорбции вещества на границе неподвижная жидкая фаза – твёрдый носитель Γ_{LS} к его концентрации в неподвижной жидкой фазе C_L .

$$K_{LS} = \left(\frac{\Gamma_{LS}}{C_L} \right)_{C_L \rightarrow 0}$$

Примечание: в газо-жидкостной хроматографии, если в удерживание вносит определенный вклад адсорбция, то чистый объем удерживания V_N (см³) включает в себя 3 слагаемых:

$$V_N = K_C \cdot V_L + K_{GL} \cdot A_{GL} + K_C \cdot K_{LS} \cdot A_{LS},$$

где A_{GL} , A_{LS} – поверхности раздела газ-жидкость и жидкость-твёрдый носитель в колонке; константы K_{GL} и K_{LS} имеют размерность см.

**161. КОНСТАНТА
(КОЭФФИЦИЕНТ)
ГЕНРИ, K_H**

отношение парциального давления P_i летучего вещества в идеальной газовой фазе к его мольной доле X_i в жидком растворе:

$$K_H = \left(\frac{P_i}{X_i} \right)_{x_i \rightarrow 0} .$$

Примечание: размерность K_H совпадает с размерностью давления; в газо-жидкостной хроматографии величина K_H обратно пропорциональна удельному удерживаемому объёму:

$$K_H = \frac{RT_c}{V_g^T \cdot M_L} ,$$

где M_L – молярная масса неподвижной жидкой фазы.

162. СТАНДАРТНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНЕРГИИ ГЕЛЬМГОЛЬЦА, ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ И ЭНТРОПИИ ПРИ СОРБЦИИ ВЕЩЕСТВ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НЕПОДВИЖНОЙ ЖИДКОЙ ФАЗОЙ В СИСТЕМЕ ПОСТОЯННОГО ОБЪЁМА, $\Delta_{sp}\bar{U}^\circ$, $\Delta_{sp}\bar{S}^\circ$

в газо-жидкостной хроматографии величины $\Delta_{sp}\bar{U}^\circ$, $\Delta_{sp}\bar{S}^\circ$ соответствуют стандартным изменениям энергии Гельмгольца, внутренней энергии и энтропии при изохорно-изотермическом переходе ($V, T = const$) малой пробы летучего сорбата из идеальной газовой подвижной фазы со стандартной концентрацией сорбата $C_G = 1$ мкмоль/см³ в состояние раствора в неподвижной жидкой фазе со стандартной концентрацией $C_L = 1$ мкмоль/см³ в расчёте на 1 моль сорбированного вещества.

Примечания: 1) изменение энергии Гельмгольца рассчитывается по уравнению:

$$\Delta_{sp}\bar{F}_{V,T}^\circ = -RT(\ln K_C - 1),$$

где K_C – константа распределения

$$(K_C = V_g^T \cdot \rho_L).$$

2) в небольшом интервале температур выполняется линейное уравнение:

$$\ln K_c = -\frac{\Delta_{sp}\bar{U}_V^\circ}{RT} + \frac{\Delta_{sp}\bar{S}_V^\circ}{R} + 1.$$

163. СТАНДАРТНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНЕРГИИ ГИББСА, ЭНТАЛЬПИИ И ЭНТРОПИИ ПРИ СОРБЦИИ ВЕЩЕСТВА ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НЕПОДВИЖНОЙ ЖИДКОЙ ФАЗОЙ В СИСТЕМЕ ПОСТОЯННОГО ДАВЛЕНИЯ,
 $\Delta_{sp}\bar{G}^\circ, \Delta_{sp}\bar{H}^\circ, \Delta_{sp}\bar{S}^\circ$

в газо-жидкостной хроматографии величины $\Delta_{sp}\bar{G}^\circ, \Delta_{sp}\bar{H}^\circ, \Delta_{sp}\bar{S}^\circ$ соответствуют стандартным изменениям энергии Гиббса, энтальпии и энтропии при изобарно-изотермическом переходе ($P, T = const$) 1 моль летучего сорбата из идеальной газовой фазы со стандартным давлением P_{st} его паров в состояние бесконечно разбавленного раствора в неподвижной жидкой фазе.

Примечания: 1) изменение энергии Гиббса связано с безразмерной константой сорбционного равновесия (P_{st}/K_H) уравнением:

$$\Delta_{sp}\bar{G}_{P,T}^\circ = -RT \ln \left(\frac{P_{st}}{K_H} \right),$$

где константа Генри K_H принимается независимой от давления в колонке;

2) стандартные молярные энтальпию и энтропию сорбции вещества при температуре T можно определить из зависимостей:

$$\Delta_{sp}\bar{H}_T^\circ = \left(\frac{\partial \Delta_{sp}\bar{G}_T^\circ}{\partial \left(\frac{1}{T} \right)} \right)_p = RT^2 \cdot \frac{d \ln \left(\frac{P_{st}}{K_H} \right)}{d\vartheta},$$

$$\Delta_{sp} \bar{S}_T^o = \left(\frac{\partial \Delta_{sp} \bar{G}_T^o}{\partial T} \right)_p = \frac{\Delta_{sp} \bar{H}_T^o - \Delta_{sp} \bar{G}_T^o}{T}.$$

3) в небольшом интервале температур зави-

симость $\frac{\Delta_{sp} \bar{G}_T^o}{T}$ от $1/T$ линейна, следовательно,

$$\ln \left(\frac{P_{st}}{K_H} \right) = - \frac{\Delta_{sp} \bar{H}_P^o}{RT} + \frac{\Delta_{sp} \bar{S}_P^o}{R},$$

где $\Delta_{sp} \bar{H}^o$ и $\Delta_{sp} \bar{S}^o$ – средние значения стандартных молярных энтальпии и энтропии сорбции вещества в исследуемом температурном интервале.

4) при физико-химических применениях газо-жидкостной хроматографии целесообразно принять $P_{st} = 1$ атм, так как большинство справочных термодинамических данных для газов и конденсированных фаз приводятся при стандартном давлении 1 атм.

5) в газо-жидкостной хроматографии $Q_v = \Delta_{sp} \bar{U}_i^o$ и $Q_p = \Delta_{sp} \bar{H}_i^o$, причем теплоты сорбции в небольшом интервале температур связаны зависимостью:

$$Q_p \approx Q_v - RT.$$

164. КОЭФФИЦИЕНТ АКТИВНОСТИ СОРБАТА ПРИ БЕСКОНЕЧНОМ РАЗБАВЛЕНИИ В НЕПОДВИЖНОЙ ЖИДКОЙ ФАЗЕ, $\gamma_i^\infty(T_c, \bar{P})$

отношение активности сорбата a_i к его концентрации в разбавленном растворе неподвижной жидкой фазы, выраженной через мольную долю (при температуре колонки T_c и среднем давлении в колонке \bar{P}):

$$\gamma_i^\infty(T_c, \bar{P}) = \left(\frac{a_i}{X_i} \right)_{x_i \rightarrow 0}$$

Примечания: 1) если концентрация сорбата в жидкой фазе выражена в мольных долях и применяется симметричная система отсчета ($\gamma_i \rightarrow 1$ при $x_i \rightarrow 1; i = 1, 2$), то рациональный коэффициент активности γ_i^∞ характеризует отклонение от закона Рауля в предельно разбавленном жидком растворе:

$$\gamma_i^\infty(T_c, \bar{P}) = \lim_{x_i \rightarrow 0} \left(\frac{P_i}{P_i^\circ X_i} \right),$$

где P_i° – давление насыщенного пара сорбата.

2) коэффициент активности связан с удельным объемом удерживания сорбата, определенным при среднем давлении в колонке \bar{P} и температуре T_c , соотношением:

$$\gamma_i^\infty(T_c, \bar{P}) = \frac{RT_c}{V_s^T \cdot M_L \cdot P_i^\circ} = \frac{K_{H,i}}{P_i^\circ},$$

причем указанное соотношение справедливо в том случае, если газовая подвижная фаза является идеальной и используются малые пробы сорбатов.

**165. ПАРЦИАЛЬНЫЕ
ИЗБЫТОЧНЫЕ
МОЛЯРНЫЕ
ЭНЕРГИЯ ГИББСА,
ЭНТАЛЬПИЯ И
ЭНТРОПИЯ
СОРБАТА ПРИ
ТЕМПЕРАТУРЕ
КОЛОНКИ В
БЕСКОНЕЧНО
РАЗБАВЛЕННОМ
РАСТВОРЕ
НЕПОДВИЖНОЙ
ЖИДКОЙ ФАЗЫ,
 $\bar{G}_i^{E,\infty}$, $\bar{H}_i^{E,\infty}$, $\bar{S}_i^{E,\infty}$**

избыток соответствующей термодинамической функции сорбата в реальном растворе по сравнению с соответствующей функцией в идеальном растворе такого же состава и при тех же значениях температуры и давления.

Примечания: 1) избыточные термодинамические функции характеризуют отклонение от закона Рауля и связаны с коэффициентом активности в предельно разбавленном растворе (симметричная система отсчета) соотношениями:

$$\begin{aligned}\bar{G}_i^{E,\infty} &= RT_c \ln \gamma_i^\infty, \\ \bar{G}_i^{E,\infty} &= \bar{H}_i^{E,\infty} - T\bar{S}_i^{E,\infty}\end{aligned}$$

причем в небольшом температурном интервале:

$$\begin{aligned}\ln \gamma_i^\infty &= \frac{\bar{H}_i^{E,\infty}}{RT_c} - \frac{\bar{S}_i^{E,\infty}}{R}; \\ \bar{G}_i^{E,\infty} &= \bar{\mu}_i^\infty.\end{aligned}$$

* Представленные в данном разделе термодинамические параметры, характеризующие межфазное распределение «газ-адсорбент» в условиях газовой хроматографии, базируются на известных работах Киселёва с сотр. [1-3], посвящённых термодинамике адсорбции из газовой фазы на твёрдых адсорбентах в системе постоянного объёма. В работах [4-6] дано обоснование расчёта термодинамических характеристик сорбции, характеризующих межфазное распределение в условиях газо-жидкостной хроматографии в системах как постоянного объёма, так и постоянного давления.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Авгуль, Н. Н. Адсорбция газов и паров на однородных поверхностях / Н. Н. Авгуль, А. В. Киселёв, Д. П. Пошкус. – Москва: Химия, 1975. – 384 с.

2. Киселёв, А. В. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии / А. В. Киселёв. – Москва: Высшая школа, 1986. – 360 с.

3. Лопаткин, А. А. Энтропия адсорбции / А. А. Лопаткин // Росс. хим. журн. – 1996. – Е. 40. – № 2. – С. 5–18.

4. Averaging the pressure and flow rate of the carrier gas in a gas chromatographic column / V. A. Davankov, L. A. Onuchak, S. Yu. Kudryashov [etc.] // Chromatographia. – 1999. – V. 49. – № 7/8. – P. 449–455.

5. Расчёт стандартных термодинамических функций сорбции в газо-жидкостной хроматографии / Л. А. Онучак, С. В. Кудряшов, В. А. Даванков. // Журн. физ. химии. – 2003. – Т. 77. – № 9. – С. 1677–1682.

6. Онучак, Л. А. Применение обращённой газо-жидкостной хроматографии для определения термодинамических функций сорбции в системе постоянного объёма / Л. А. Онучак, С. Ю. Кудряшов // Журн. физ. химии. – 2014. – Т. 88. – № 10. – С. 1600–1605.

Учебное издание

**ХРОМАТОГРАФИЯ.
ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ.
ТЕРМИНОЛОГИЯ**

Учебный словарь

Составители:

*Даванков Вадим Александрович,
Онучак Людмила Артемовна*

Редакционно-издательская обработка
издательства Самарского университета

Подписано в печать 28.12.2022. Формат 60x84 1/16.

Бумага офсетная. Печ. л. 4,25.

Тираж 25 экз. Заказ .

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)
443086, САМАРА, МОСКОВСКОЕ ШОССЕ, 34.

Издательство Самарского университета.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

