

Kovatsi retentsiooniindeks (RI)

2007 kevad

Probleem

- Kõik kromatograafilised süsteemid on pisut erinevad, mistõttu erinevate süsteemidega saadud tulemusi ei saa omavahel otseselt võrrelda.

2007 kevad

Kovatsi RI

- ... on meetod tulemuste väljendamiseks laboritevahelise võrdluse jaoks.
- ... skaala koostatud n-alkaanide parandatud retentsiooniaegade logaritmade baasil.
 - n-alkaanid, sest inertsed, mittepolaarsed ja enamikus statsionaarsetes faasides lahustuvad.

2007 kevad

Kovatsi RI võimaldab

- ... tulemusi standardiseerida.
- ... ennustada homoloogilise rea liikmete retentsiooniaegu.
- Kovatsi RI võib abistada aine identifitseerimisel kirjanduse alusel.
 - NB! Võrdsed RI-d ei ole identifitseerimiseks piisav! Vajalik täiendav kinnitus.
 - Identifitseerimine võib olla välistav.

2007 kevad

Kovatsi RI matemaatiliselt

$$I = 100 \left[n + (N - n) \frac{\log t'_x - \log t'_n}{\log t'_N - \log t'_n} \right]$$

- t'_x – parandatud retentsiooniajad,
 n – süsinike arv väiksemas alkaanis,
 N – süsinike arv suuremas alkaanis,
 t'_x – uuritava ühendi parandatud retentsiooniaeg,
 I – retentsiooniindeks uuritavale ainele.

2007 kevad

Kovatsi RI näiteid

Aine	temp	I	Aine	temp	I
n-heksaan		600	2-Me-heksaan	40	666.9
				100	667
3-Me-pentaan	40	582.8	benseen	100	650
	60	583.7		130	672
	100	585			
2,3-diMe-butaan	40	564.4	tsüklo-heksaan	60	662.2
	100	568		110	668
	150	573.0			

2007 kevad

Kovatsi RI omadusi

- RI iseloomustab analüüti ja statsionaarset faasi.
- Kovatsi I kasutatakse mitte- ja vähepolaarsete statsionaarsete faaside jaoks.
- RI ei sõltu voolukiirusest ega statsionaarse faasi kihipaksusest.
- RI ei sõltu kolonni mõõtmetest.
 - Täidiskolonni andmed on kasutatavad ka kapillaarkolonni korral, ja vastupidi.

2007 kevad

Kovatsi RI omadusi 2

- RI sõltub temperatuurist vähe
 - Tavaliselt 5 ühiku piires 50°C temperatuurivahemikus.
- RI kasutatakse isotermilisel režiimil.
 - Kuid kehtib ±5 ühiku piires ka temperatuuri programmeerimise tingimustes.
- RI hälbeid on täheldatud:
 - Väikese C arvuga (1-4) molekulides.
 - Kui funktsionaalsed rühmad paiknevad lähestikku (2-3 naabersüsiniku juures).

2007 kevad

RI variante

- Polaarse statsionaarsete faaside korral on kasutatud RI arvutamiseks n-FAME-sid
- Temperatuuri programmeerimise režiimis kasutatakse järgmist seost:

$$I = 100 \left[n + (N - n) \frac{t'_x - t'_n}{t'_N - t'_n} \right]$$

- (tähistused endised)

2007 kevad

Kust leida RI väärtusi?

- <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- http://www.flavornet.org/h_kovats.html
- The Sadtler Standard Gas Chromatography Retention Index Library (1985)

2007 kevad