

Kapilární zónová elektroforéza patří mezi hojně používané analytické metody vhodné k separaci chirálních analytů. Enantioselektivní prostředí je zajištěno přidáním komplexačního činidla přímo do základního elektrolytu, což zajišťuje vysokou flexibilitu separačního systému – komplexační činidlo či jeho koncentrace mohou být snadno měněny. Interakce mezi analyty a komplexačním činidlem je charakterizována komplexačními rovnováhami, jejichž studium je předmětem této dizertační práce.

Jednou z hlavních výhod kapilární elektroforézy je existence jejího kompletního matematického modelu a simulačních programů umožňujících předpovídat výsledky elektroforetických separací. Žádný z dosavadních modelů však není použitelný pro komplexující systémy. V rámci této práce byl představen matematický model elektroforézy rozšířený o komplexační rovnováhy. Model byl implementován do dynamického simulátoru elektroforézy Simul 5 a jeho platnost byla experimentálně ověřena. Nová verze programu Simul 5 Complex je schopna předpovědět mobilitu, amplitudu i tvar píku analytu v prostředí obsahujícím komplexační činidlo. V dalším kroku byly komplexační rovnováhy začleněny také do linearizovaného modelu elektromigrace simulátoru PeakMaster 5.3 Complex. Ten je schopen během několika vteřin předpovědět tvar píku v závislosti na separačním prostředí. Může tedy pomoci vybrat vhodné experimentální podmínky vedoucí k úzkým a symetrickým píkům (potlačení elektromigrační disperze) a optimalizaci separačních podmínek za výrazné úspory experimentálního času a chemikálií. Současně byl PeakMaster 5.3 Complex využit k vysvětlení vlivu komplexace analytu s komplexačním činidlem na tvar píku analytu.

Komplexační činidlo přidané do základního elektrolytu může interagovat nejen s analyty, ale také se složkami pufru. Tato interakce může významně změnit vlastnosti základního elektrolytu jako pH, iontovou sílu či vodivost. Bylo prokázáno, že interakce komplexačního činidla se složkami pufru může také významně ovlivnit stanovení komplexačních parametrů. Komplexační parametry určené v takových systémech mohou být zcela nesprávné a tak poskytovat mylnou informaci o síle komplexace. Proto by měla být možnost interakce komplexačního činidla se složkami pufru prověřena před samotnými experimenty např. kontrolou pH po přidání komplexačního činidla do základního elektrolytu.