

Abstrakt

Kapilární elektroforéza je široce používanou separační metodou analytické chemie. Pokud je do základního elektrolytu přidána interagující látka, selektor, lze tuto metodu využít i pro separace enantiomerů nebo látek s velmi podobnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi. V analytické praxi se často využívají také směsi selektorů, jednak záměrně připravené pro dosažení lepší separace, jednak proto, že komerčně dodávané derivatizované selektory mohou být ve skutečnosti směsmi látek lišícími se stupněm derivatizace a polohou substituentů. Matematický popis elektromigrace analytu v systémech s více selektory může usnadnit hledání optimálních separačních podmínek a zároveň poskytuje užitečný vhled do mechanismu separace v těchto z aplikačního hlediska velmi významných systémech.

V rámci této práce byl představen a experimentálně ověřen model elektromigrace analytu interagujícího se směsí dvou selektorů, který vychází z obecnějšího popisu systému s libovolným počtem selektorů. Tento model ukazuje, že směs, ve které se vzájemný poměr koncentrací selektorů nemění, lze pokládat za selektor jeden. V případě záměrné kombinace dvou selektorů lze pomocí tohoto popisu předpovědět, jak se budou separační schopnosti směsi měnit se změnou zastoupení obou selektorů, a zvolit nejvhodnější složení směsi i její celkovou koncentraci.

Dále byl představen model elektromigrace, který poprvé zahrnoval vedle interakce analytu s více selektory i možnost acidobazické disociace analytu. Model ukazuje, že závislost efektivní mobility na koncentraci selektoru, odvozená pro jedinou volnou formu analytu interagující s jediným selektorem, je obecně platná pro systémy se stechiometrií komplexace 1:1. Tento model také umožňuje na vzájemně provázané komplexační a acidobazické rovnováhy nahlížet odděleně a zvolit perspektivu vhodnou pro optimalizaci daného separačního systému. Závěry vyplývající z modelu byly experimentálně ověřeny na systému slabé jednosytné kyseliny jako analytu a dvou selektorů.

Pro určení komplexačních parametrů, se kterými pracují výše zmíněné elektromigrační modely, je klíčové stanovení správné efektivní mobility analytu. Z toho důvodu byla v rámci této práce navržena metoda umožňující měření efektivní mobility v systémech, kde může nabitý selektor interagovat s markerem elektroosmotického toku a tak výsledky měření znehodnotit. Dále byl navržen způsob, kterým lze určit správný migrační čas analytů podléhajících elektromigrační disperzi bez nutnosti nelineární regrese experimentálních dat.