

## Abstrakt

V kapilární elektroforéze se často využívají komplexující činidla, protože interakce mezi analytem a komplexující látkou může vést k dosažení či zlepšení separace. Mezi metody, které komplexaci využívají, se řadí i elektrokinetická chromatografie a afinitní kapilární elektroforéza (ACE).

ACE se využívá ke stanovování komplexačních konstant mezi analytem a komplexujícím činidlem. To se komplikuje v případě chirální separace, kdy na sobě parametry dvou analytů (enantiomerů) nejsou zcela nezávislé. V rámci práce byl proto navržen postup, který by při vyhodnocování komplexačních parametrů dvou enantiomerů měl být vždy používán. Současně bylo posouzeno i statistické vyhodnocení stanovených parametrů. Práce se dále zabývá stanovením metody, která umožňuje určit relativní migrační pořadí dvou enantiomerů ve dvou odlišných separačních systémech s komplexujícími činidly.

Matematický popis elektroforézy je založený na rovnicích kontinuity, které jsou z definice nelineární. Rovnice je však možné linearizovat a získat tak aproximativní analytické řešení. Z tohoto přístupu vychází i nový generalizovaný model elektromigrace, který umožňuje zahrnout kompletní komplexační rovnováhy do teoretického popisu elektroforézy. Tak je možné predikovat různé jevy, včetně nelineárních, spojené s komplexací. Práce se zaměřuje na popis a experimentální ověření těchto jevů. Studovány byly změny v chování analytu i v chování systémových píků způsobené komplexací se složkou základního elektrolytu.

Nelineární charakter elektroforetického procesu způsobuje trojúhelníkovitý tvar píků v elektroforéze. Běžnou praxí je fitovat tyto píky Haarhoff-van der Lindeho (HVL) funkcí, ačkoliv reálným píkům odpovídá tvar tzv. HVLR funkce. V rámci práce bylo pomocí simulací nepřímo dokázáno, že HVLR funkce konverguje na HVL funkci, a fitování experimentálních píků HVL funkcí je tak oprávněné. HVL či HVLR funkce je aproximativním řešením rovnic kontinuity, pokud pík migruje oddělen od všech ostatních píků v systému. Problém komigrujících píků v elektroforéze dosud nebyl adresován vzhledem k nelinearitě rovnic. V naší výzkumné skupině se podařilo nalézt aproximativní řešení pro dva komigrující píky analytů při zanedbání vlivu difúze. V rámci této práce byly navrženy a provedeny simulace a experimenty, pomocí kterých se teoreticky popsané jevy podařilo úspěšně ověřit.