บทคัดย่อ

รหัสโครงการ BRG/13/2542 T134363

ชื่อโครงการ การพิสูจน์เอกลักษณ์ลิปิดโดยแก๊สโครมาโตกราฟีโดยไม่ใช้สารอ้างอิง 2

ผู้วิจัยและสถาบัน รศ. ดร. คณิต กฤษณังกูร และรศ. นฤมล จียโชค คณะทรัพยากรชีวภาพและเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้า ธนบุรี

E-mail address: kanit.kri@kmutt.ac.th

ระยะเวลาโครงการ 3 ปี

การเคลื่อนที่ของสารอินทรีย์ในคอลัมน์แก๊สโครมาโตกราฟีสามารถอธิบายได้ในเชิงจลนศาสตร์หรือในเชิงอุณหพลศาสตร์การศึกษานี้เลือกใช้ทฤษฎีอุณหพลศาสตร์เนื่องจากมีความง่ายและให้ถูกต้องดีในการอธิบายกลไกการเคลื่อนที่ และเป็นความพยายามที่จะนำไปใช้วิเคราะห์เอกลักษณ์ลิปิด (ด้วยค่าความยาวคาร์บอนเทียบเท่า) และสารอินทรีย์ทั่วไป (ด้วยค่าดัชนีคงค้าง) โดยไม่ต้องใช้สารอ้างอิง การวิเคราะห์กระทำโดยการคำนวณค่าทั้งสองด้วยสมการคณิตศาสตร์ คือ $\ln k = a + bz + \frac{c}{T} + \frac{zd}{T}$ โดย a, b, c และ d เป็นค่าคงตัวคอลัมน์

จากการศึกษาปัจจัยต่างๆ พบว่า ความยาวคอลัมน์ไม่มีผลต่อค่าคงตัวทั้ง 4 แต่ขนาด เส้นผ่าศูนย์กลางนั้นมีผลต่อค่า a เท่านั้น และค่าที่เปลี่ยนเท่ากับอัตราส่วนวัฏภาคทั้งสอง ดังนั้น หากรู้ค่าอัตราส่วนนี้ สามารถปรับแก้ค่า a ให้ถูกต้องได้ เนื่องจากอัตราเร็วของแก๊สตัวพานั้นไม่มีผล ต่อค่าตัวประกอบคงค้าง การวิเคราะห์เอกลักษณ์สารจึงทำได้ที่ทุกอัตราการไหลของแก๊สตัวพา

สมการข้างต้นนี้ยังสามารถที่จะจดรูป หรือดัดแปลงเพื่อนำมาใช้ (1) หาค่าเวลาศูนย์ได้สะดวก และเวลาศูนย์นี้สามารถใช้ในการคำนวณอัตราไหลของแก๊สตัวพา ทำให้สามารถที่จะใช้คำนวณอัตราไหลของแก๊สตัวพาได้ทุกโครมาโตแกรม (2) ใช้วิเคราะห์คอนฟิเกอเรชันของว่าเป็น R- หรือ S-ไอโซเมอร์ เมื่อแอลฟาไฮดรอกซีแอซิดถูกเปลี่ยนเป็นอนุพันธ์ไดแอสเทอริโอเมอริกเอสเทอร์ คุณสมบัติเชิงกายภาพของไดแอสเทอริโอเมอร์ทั้งสองจะต่างกันและสามารถวิเคราะห์ได้ด้วยสมการข้างต้น (3) ใช้ทำนายค่าเวลาคงค้างสารในสภาวะโปรแกรมอุณหภูมิแบบ 1 หรือหลายขั้น (4) ใช้วิเคราะห์เอกลักษณ์กรดไขมันเมทิลเอสเทอร์ในสภาวะโปรแกรมอุณหภูมิแบบ 1 หรือหลายขั้น

เมื่อทำการนิยามเทอมใหม่ เช่น ความกว้างของสารไม่คงค้าง เพลททฤษฎีปรับแก้ และตัวประกอบความกว้าง ความกว้างของพีคที่ทุกๆ อุณหภูมิสามารถคำนวณได้ตามสมการ $\ln p' = -\ln\gamma + \ln k$ โดย $\ln\gamma = \frac{4t_M}{w_M\sqrt{N'}}$ และตัวประกอบคงค้าง k สามารถกระจายออกตามสมการข้างต้น นั่นคือ เวลาคงค้าง ความกว้างของพีคและอำนาจการแยกสารสามารถที่จะทำนายได้ก่อน การลงมือทดลองจริง ซึ่งจะทำให้ความสะดวกและย่น เวลาการทดลองลงอย่างมาก

Project Code: BRG/15/2542 TE 134363

Project Tittle: Gas Chromatographic Identification of Lipids without a Reference

Investigators: Assoc. Prof. Dr. Kanit Krisnangkura and Assoc. Narumon Jeyashoke

E-mail address: kanit.kri@kmutt.ac.th

Project Period: 3 years

The migration behavior of solutes in a gas chromatographic column can be described either by the kinetic or thermodynamic principle. Because of its simplicity and high accuracy, the thermodynamic approach is chosen. This study is part of our effort to develop gas chromatographic method of identification for lipids (through their equivalent chain length, ECL) and other general organic compounds (through their retention index, I) without a standard reference. The identification method bases on the mathematical equation: $\ln k = a + bz + \frac{c}{T} + \frac{zd}{T}$ where T is absolute temperature, a, b, c and d are thermodynamically related constants, z is ECL or I and k is retention factor.

The column length does not affect the numerical values of the four constants (a, b, c and d), but the column inside diameter or column phase ratio affects the constant, ***a***. If the column phase ratio is known, the numerical value of ***a*** can be calculated accordingly. Because carrier gas velocity has minimal effect on the retention factor, k, the above equation can be used for identification of organic solute at any carrier gas flow rate.

The above equation can be rearranged or modified: (1) to determine the gas hold-up time for routine analysis and the flow rate of the carrier gas can be conveniently calculated from the hold-up time. (2) to characterize the R- and S- 2-hydroxy fatty acids. When the hydroxy acids are converted into diasteriomeric esters with an optically active alcohol, the diasteriomers are physically different and can be separated and characterized on an achiral column. (3) to forecast the retention times of organic solutes in one or multi-step temperature-programmed gas chromatography (TPGC). (4) to tentatively identify fatty acid methyl esters in one or multi-step TPGC.

By introducing the hold-up width (w_M), adjusted plate number (N') and width factor (p'), peak width at any temperature can be accurately forecasted according to:

$\ln p' = \ln\gamma + \ln k$

where $\ln\gamma = \frac{4t_M}{w_M\sqrt{N'}}$ and ln k can be expanded to the above equation.

Therefore, retention time, peak width and resolution of any pair of organic solutes can be predicted prior to the real analysis.