



# Műszaki Kémiai Napok '05



---

**Veszprém, 2005. április 26-28.**

**GC ÁLLÓFÁZISOK ELMÉLETI KÉMIAI ÉS KEMOMETRIAI MÓDSZEREKKEL  
TÖRTÉNŐ JELLEMZÉSE**  
**CHARACTERIZATIONS OF THE GC STATIONARY PHASES BY METHODS OF  
THEORETICAL CHEMISTRY AND CHEMOMETRICS**

**RAJKÓ RÓBERT**

**SZTE Szegedi Élelmiszeripari Főiskolai Kar**  
**Élelmiszeripari Műveletek és Környezettechnika Tanszék**  
**6725 Szeged, Moszkvai krt. 5-7.**  
**6701 Szeged, Pf. 433.**  
**rajko@sol.cc.u-szeged.hu**  
**www.kemometria.hu/Rajko**

**KÖRTVÉLYESI TAMÁS, GÖRGÉNYI MIKLÓS**

**SZTE Természettudományi Kar**  
**Fizikai Kémiai Tanszék**  
**6701 Szeged, Pf. 105**  
**kortve@chem.u-szeged.hu**  
**www.staff.u-szeged.hu/~kortve/**

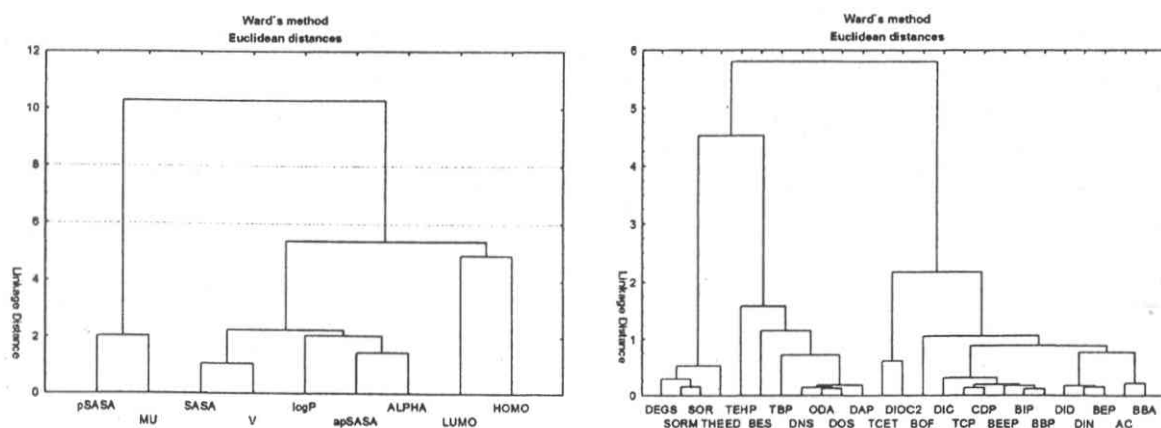
Kromatográfusok keresik a módszert, amellyel a kromatográfiás retenciót előre lehet jelezni: melyik állófázis és kolonna típus alkalmas az elegy lehetőleg összes alkotójának szétválasztására. Az oszlop polaritása és szelektivitása meghatározó jellegű. A McReynolds polaritás skála és a próbavegyületek szerkezeti/fizikai tulajdonságai közötti korreláció vizsgálatát végeztük el. A McReynolds próbavegyületek (benzol, 1-butanol, 2-pentanon, 1-nitropropán, piridin, 2-metil-2-pentanol, 1-jódbután, 2-oktán, 1,4-dioxán, *cis*-hidrindán) eletronszerkezetét, geometriáját és hidrofóbicitását PM3 szintű szemempirikus kvantumkémiai módszerrel és empirikus összefüggésekkel számoltuk. A McReynolds konstansok (a 24 db gázkromatográfiás (GC) állófázis: ftalátok, adipátok, szebakátok, foszfátok, citrátok és nitrilek McReynolds polaritásai) és a számított kémiai deskriptorok (E(HOMO): a legmagasabb betöltött molekulapálya energiája, E(LUMO): a legalacsonyabb betöltetlen molekulapálya energiája,  $\mu$ : dipólusmomentum,  $\alpha$ : polarizálhatóság, V: molekulatérfogat, log P: n-oktán és víz közötti megoszlási hányados logaritmus, SASA: a teljes, pSASA: a poláris és apSASA: az apoláris oldószer által elérhető felület) közötti lehetséges kapcsolatot többszörös lineáris regresszióval (MLR, Multiple Linear Regression), klaszter analízissel (CA, Cluster Analysis) és főkomponenselemzéssel (PCA, Principal Component Analysis) vizsgáltuk.

1. táblázat. MLR eredmények

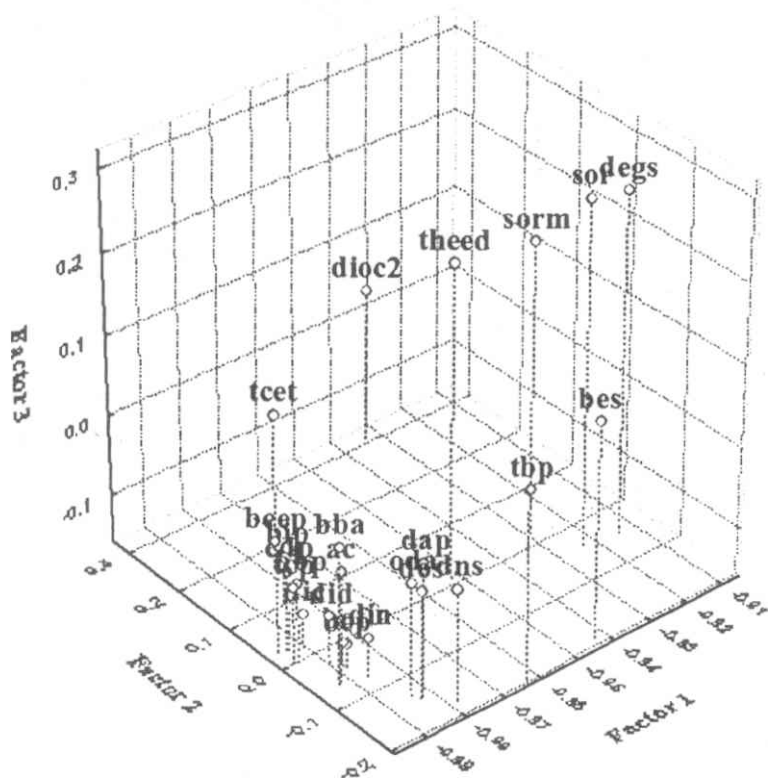
	A	B	C	D	E	R <sup>2</sup>	F
BBA	176.39	28.14	36.19	-5.12	1.55	0.950	23.98
DAP	84.72	21.29	26.68	-3.33	1.05	0.936	18.32
BBP	237.23	24.04	39.72	-4.60	1.21	0.965	34.21
BEP	138.34	16.84	31.09	-3.03	0.83	0.972	42.90
BIP	345.42	29.99	48.43	-5.85	1.47	0.962	31.53
BEEP	546.31	28.60	51.31	-3.58	n.a.	0.930	26.55
BOF	146.02	17.49	32.18	-3.17	0.86	0.972	43.86
DIC	330.71	16.23	37.08	-2.13	n.a.	0.941	31.65
DID	196.99	22.53	39.55	-4.31	1.20	0.970	40.41
DIN	114.56	18.86	31.67	-3.31	0.98	0.971	41.94
DIOC2	258.33	n.a.	9.73	-1.59	n.a.	0.915	37.85
BES	351.09	35.00	46.96	-2.53	n.a.	0.765	6.51
DOS	83.77	19.05	25.54	-2.97	0.91	0.934	17.68
DNS	64.36	20.43	26.05	-3.13	1.02	0.943	20.59
ODA	85.25	20.32	26.50	-3.34	1.06	0.941	19.96
THEED	1187.80	86.51	91.93	-8.11	n.a.	0.853	11.62
CDP	540.78	n.a.	24.60	-7.09 <sup>b</sup>	n.a.	0.896	30.14
TBP	374.60	39.97	53.62	-2.92	n.a.	0.835	10.14
TEHP	192.79	40.73	45.99	-1.85	n.a.	0.738	5.63
TCP	405.8	22.44	43.48	-2.64	n.a.	0.936	29.19
AC	179.14	27.91	38.75	-5.04	1.50	0.956	26.85
SOR	323.83	29.87	30.41	-2.52	n.a.	0.787	7.38
SORM	334.52	28.15	30.99	-2.52	n.a.	0.796	7.80
TCET	1526.07	n.a.	n.a.	-20.41 <sup>b</sup>	n.a.	0.841	42.21
DEGS	235.77	21.12	21.88	-1.85	n.a.	0.749	5.98

A: tengelymetszet, B: LUMO, C: MU, D: V, E: SASA. R<sup>2</sup>: korrelációs együttható négyzete, F: Fischer érték.

<sup>b</sup> Deszkriptor: Polarizálhatóság.



1. ábra. Klaszterelemzés eredménye



2. ábra. Főkomponenselemzés eredménye

Sajnos az eredmények nem voltak világosak, s gyakran ellentmondtak egymásnak, ezért az

$Y = X \cdot B$  alapmodellből kiindulva főkomponens regressziós (PCR, Principal Component Regression) és részleges legkisebb négyzetek (PLS, Partial Least Squares) módszerével kapott regressziós modelleket építettünk egyidejű változó- és esetszelekcióval kombinálva.

Megállapítottuk, hogy 6 db próbavegyület (benzol, 2-pentanon, 1-nitropropán, 1-jódbután, 1,4-dioxán és *cis*-hidrindán), valamint 4 deszkriptor (HOMO, LUMO,  $\alpha$  és apSASA) elegendő a keresztvényesítéssel (CV) ellenőrzött megfelelő prediktivitással rendelkező modell felépítéséhez.