

1. Teoría de cromatografía

Definiciones fundamentales y clasificación de las cromatografías. Desarrollo de la zona cromatográfica en cromatografía en columna. Perfil de la banda de elución. Teoría de platos y teoría de velocidad. Procesos de dispersión cromatográficos. Concentración del soluto en la banda cromatográfica: medio y máximo. Resolución. Análisis de mezclas con múltiples componentes. Capacidad de picos.

2. Flujo de gases y líquidos en lechos rellenos y tubos abiertos. Permeabilidad de una columna en CG y en CL. Definiciones de velocidad. Porosidad de los materiales. Integración de la ecuación de D'Arcy. Gradientes de presión y de velocidad en las columnas de CG. Factor de compresibilidad.

3.- Definición de volumen muerto en GC y en LC. Anatomía de una columna capilar y/o rellena. Métodos de estimación del tiempo muerto en CG y en CL. Comparación de resultados con distintos métodos.

4.- Principios fisicoquímicos de la retención y la separación en cromatografía. Interacciones moleculares. Principios termodinámicos de retención. Coeficientes de distribución y retención. Control de la selectividad. Medición de coeficientes de partición gas-líquido, coeficientes de actividad y propiedades termodinámicas de exceso por CG.

5.- Perfiles simétricos y asimétricos. Tipos de isotermas y efectos sobre el perfil de elución. Momentos estadísticos. Propiedades de la función de Gauss. Picos asimétricos; causas fundamentales de asimetría. Efectos extra-columna.

6.- Mecanismos de dispersión. Dispersión en la columna cromatográfica. Hidrodinámica de la cromatografía. Modelo de los trayectos aleatorios. Ecuaciones de velocidad: van Deemter, Knox, Giddings. Ecuación de Golay. Efecto de la compresibilidad del fluido. Validación de las ecuaciones.

7. Diseño de columnas. Optimización. Criterios de optimización. Columnas rellenas y columnas en tubos capilares. Radio óptimo, tamaño de partículas de relleno óptimo, presión mínima, velocidad óptima, mínimo consumo de solventes, máximo volumen de inyección. Optimización de variables en cromatografía de gases en tubos capilares. Optimización de variables en cromatografía de líquidos empleando columnas rellenas.

8.- Detectores comunes para GC y para LC. Propiedades generales de un detector. Detectores de GC: FID, TCD, ECD, detector de quimioluminiscencia, MS. Detectores de LC: uv y DAD, detectores de fluorescencia, ELSD, índice de refracción, detectores espectrométricos de masa.

Bibliografía

Textos generales sobre Separaciones:

C. E. Meloan, Chemical Separations. Principles, Techniques and Experiments, Wiley-Interscience Pub., John Wiley & Sons, New York, 1999

J. C. Giddings, Unified Separation Science, Wiley-Interscience Pub., John Wiley & Sons, New York, 1991

B. L. Karger, L. R. Snyder y C. Horvath, An Introduction to Separation Science, Wiley-Interscience Pub., John Wiley & Sons, New York, 1973

E. Heffmann, Ed., Chromatography, 6th. Edition. Fundamentals and applications of chromatography and related differential migration methods, Elsevier, Amsterdam, 2004

A. S. Said, Theory and Mathematics of Chromatography, W. Bertsch, W. G. Jennings, R. E. Kaiser Pub., Hüting Verlag, Heidelberg, 1981

P. J. Schoenmakers, Optimization of chromatographic selectivity. A guide to method development, Elsevier, Amsterdam, 1986

Textos específicos para CG:

J. R. Conder y C. L. Young, Physicochemical Measurements by Gas Chromatography, Wiley-Interscience Pub., John Wiley & Sons, New York, 1979

H. Purnell, Gas Chromatography, John Wiley & Sons, New York, 1962.

Textos específicos de LC:

R. P. W. Scott, Liquid Chromatography Column Theory, R.P. W. Scott y C. F. Simpson, Ed., John Wiley & Sons, New York, 1992

U. D. Neue, HPLC Columns. Theory, Technology and Practice, Wiley, New York, 1997.

L.R. Snyder, J. J. Kirkland, J. L. Glajch, Practical HPLC Method Development, 2nd. Ed., Wiley-Interscience Pub., John Wiley & Sons, New York, 1997