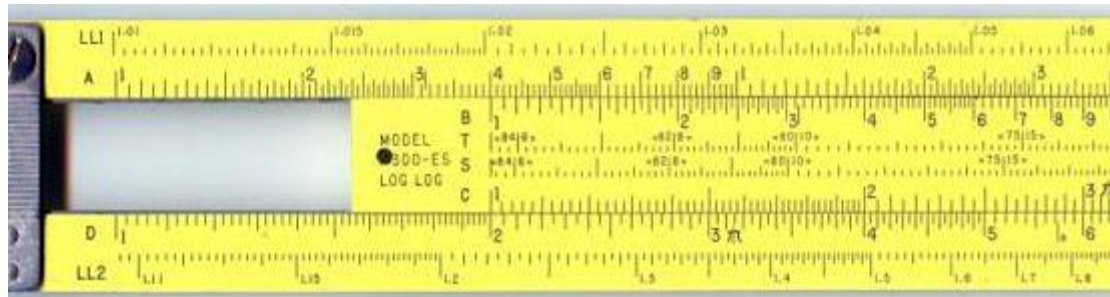
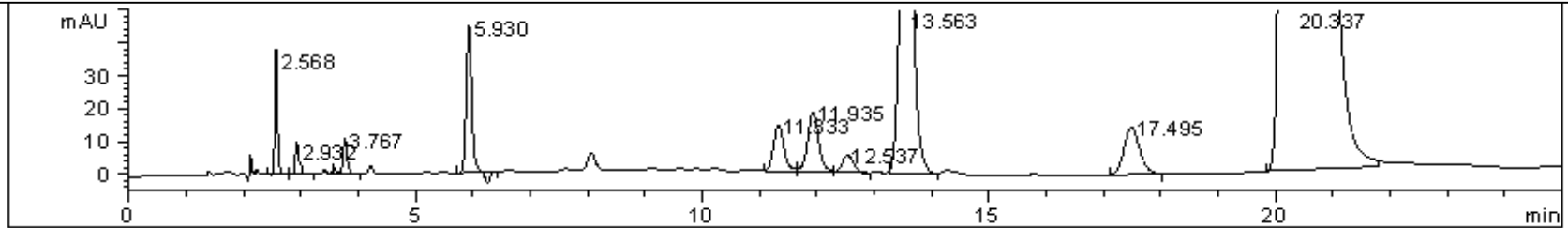


Chromatographische Messgrößen



Chromatographische Messgrößen



=====
Area Percent Report with Performance
=====

Multiplier: : 1.0000
Dilution: : 1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

Signal 1: DAD1 A, Sig=240,10 Ref=off

RetTime [min]	k'	Area [mAU*s]	Height [mAU]	Symm.	Width [min]	Plates	Resol ution	Select ivity
2.568	0.71	126.47984	33.98886	1.04	0.0533	12841	-	-
2.932	0.95	47.18009	6.90884	0.82	0.0842	6724	3.12	1.34
3.767	1.51	60.61774	9.94396	1.14	0.0750	13978	6.16	1.58
5.930	2.95	294.72192	43.82387	1.06	0.1050	17670	14.12	1.95
11.333	6.56	178.28558	13.84133	0.87	0.1917	19368	21.40	2.22

k

A_s

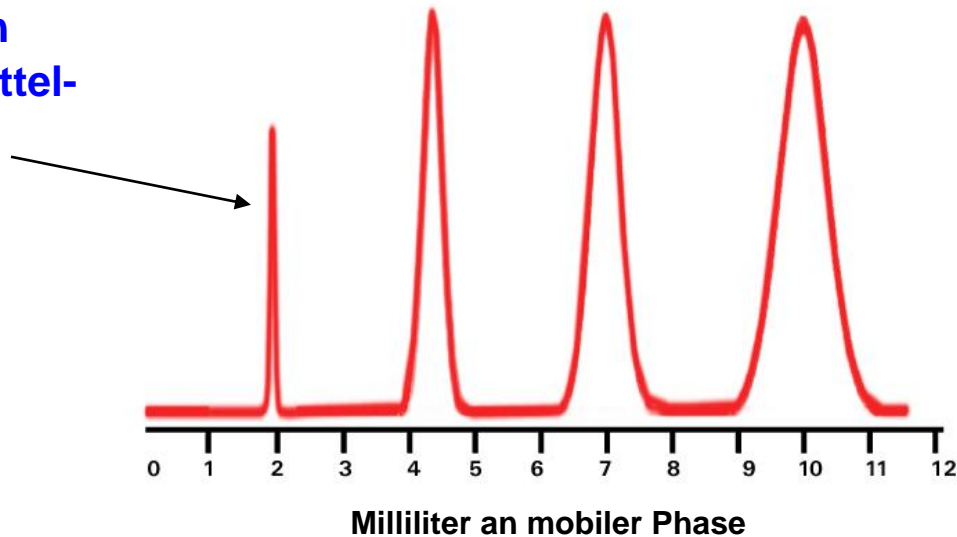
N

α

Das Totvolumen

Eine Verbindung, die nicht mit dem Adsorbens wechselwirkt, eluiert mit dem sogenannten **Totvolumen** oder der **Lösungsmittelfront**. Die Zeit, die eine nicht-retinierte Substanz zur Elution benötigt, ist die Totzeit oder t_0 .

- Totvolumen
- Lösungsmittel-
front
- t_0

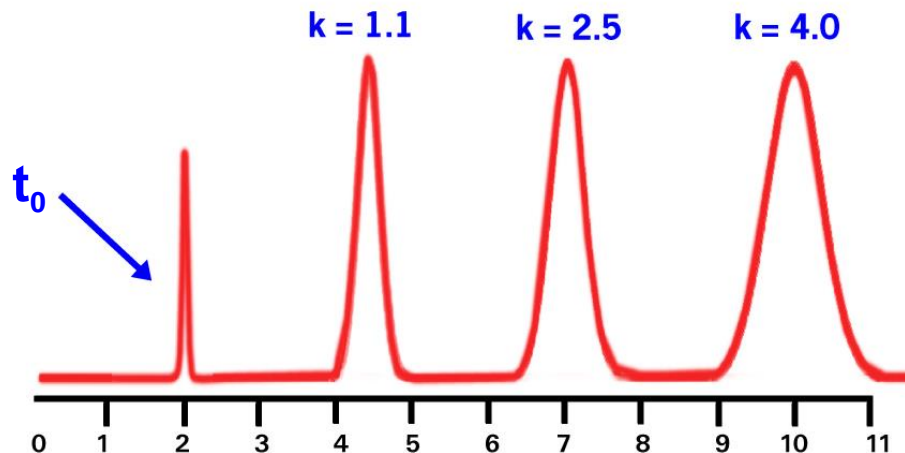


Der Retentionsfaktor (k)

Der **Retentionsfaktor (k)** oder auch Kapazitätsfaktor (k') einer eluierenden Substanz ist sein Elutionsvolumen (Zeit) relativ zum Elutionsvolumen (Zeit) einer nicht-retinierten Verbindung. Der k-Wert eines Analyten wird durch seine relative Affinität zur stationären Phase und mobilen Phase bestimmt.

Kapazitätsfaktor (k) =

$$\frac{t_R - t_0}{t_0}$$



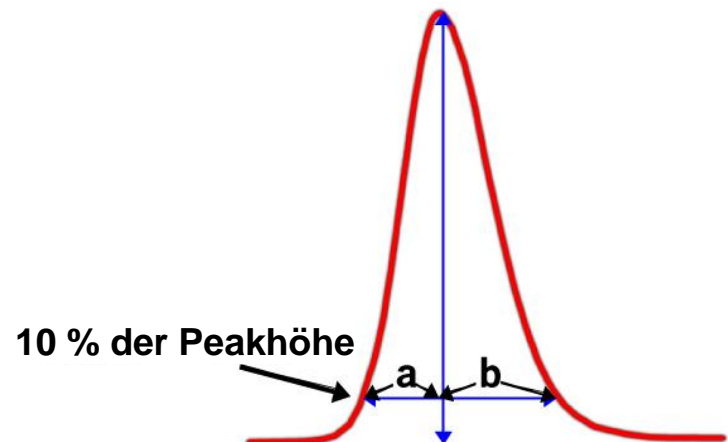
Peak-Asymmetrie

Der **Asymmetrie-Wert (A_s)** eines Peaks ist ein Maß für seine Abweichung von der idealen Gauß-Kurve. Peaks mit einem Asymmetrie-Wert $> 1,0$ nennt man “**tailend**”, die mit einem Asymmetrie-Wert $< 1,0$ nennt man “**frontend**”.

Asymmetrische Peaks können eine Reihe von Ursachen haben:

- (1) **Starke sekundäre Wechselwirkungen**
(z.B. ionische Wechselwirkungen zwischen basischen Substanzen und Restsilanolen)
- (2) **Überladung mit Probe**
- (3) **Falsches Injektionslösungsmittel**
- (4) **Schlechte Packungsqualität**

Peak-Asymmetrie (Asymmetrie-Faktor)

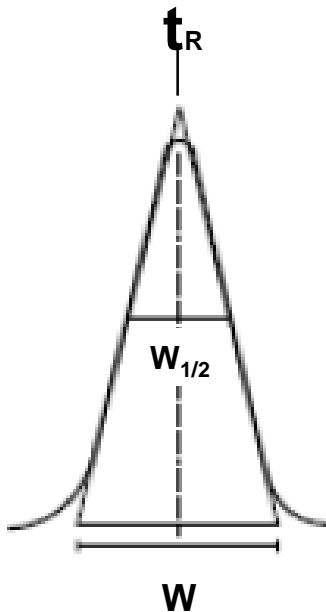


$$\text{Asymmetrie} = b/a$$

Effizienz (N)

Das Ausmaß der Banden-/Peakverbreiterung in der Säule kann durch die Berechnung der **Effizienz (N)** bestimmt werden, welche man als **Zahl der theoretischen Böden** pro Säule angibt:

$$N = 5,54 \left(\frac{t_R}{W_{1/2}} \right)^2$$



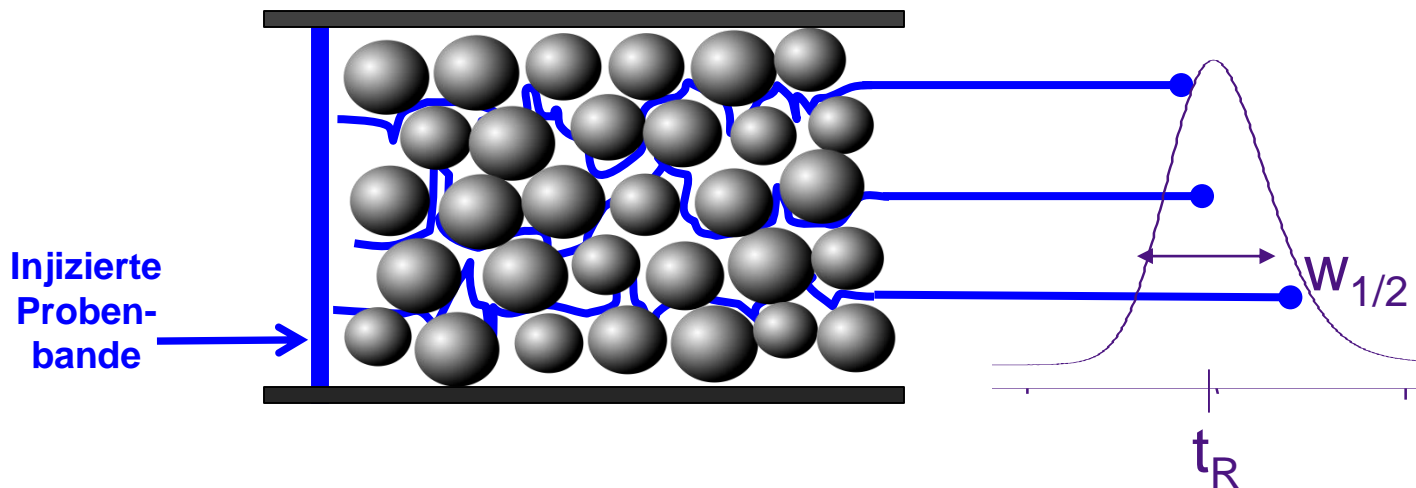
Peakbreite (W)

- Säulen, die zu einer deutlichen Peakverbreiterung führen, haben eine geringe Bodenzahl
- Säulen, die sehr scharfe Peaks erzeugen (geringe Peakverbreiterung), haben eine hohe Bodenzahl

Effizienz (N)

Die Probe wird in einer schmalen Bande injiziert und kommt so auf das Säulenbett. In Abhängigkeit von verschiedenen Variablen werden die Peaks dann auf der Säule breiter. Beispiele sind die:

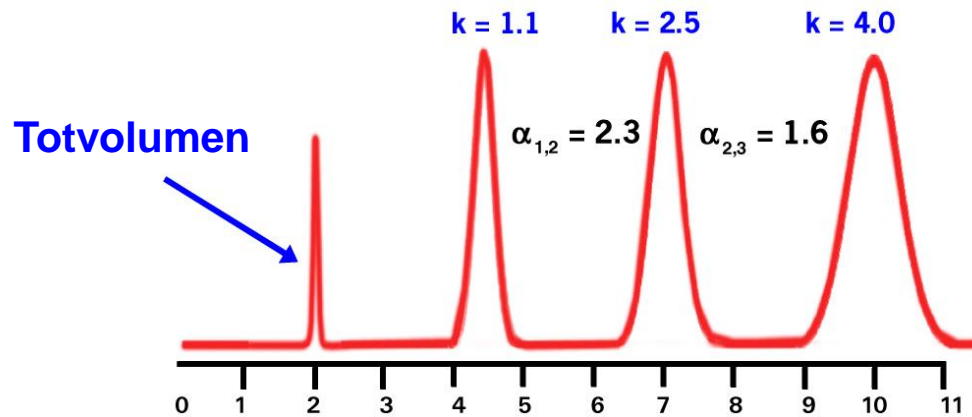
- **Partikelgröße**
- **Qualität der Packung**
- **Partikel-Morphologie**
- **Flussrate**



Trennfaktor / Selektivität (α)

Die **Selektivität** ist ein Maß für die unterschiedlichen chemischen Wechselwirkungen zweier Analyten mit der stationären Phase. Die Selektivität wird sowohl von der stationären Phase als auch der mobilen Phase beeinflusst.

$$\alpha = k_2/k_1$$



Zusammenfassung

Die bislang diskutierten chromatographischen Messgrößen spielen bei der Methodenentwicklung eine wichtige Rolle.

1. **Retentionsfaktor (k)** – Retention des Analyten relativ zur Totzeit t_0
 - Anpassung des Anteils (%) des starken Lösungsmittels
2. **Peak-Asymmetrie** – Peakform (frontend, tailend oder symmetrisch)
 - Bedingt durch sekundäre Wechselwirkungen (z.B. ionisch im RP-Modus)
 - Sensitiv für Überladungs- & Injektionslösungsmittelleffekte
3. **Effizienz (N)** – Funktion von Retention und Peakbreite
 - Wird durch die Partikelgröße, Säulenlänge und Flussrate beeinflusst
 - *Hängt auch von der Packungsqualität der Säule ab (Lieferant)*
4. **Selektivität (α)** – Unterschied der k-Werte zweier Analyten
 - Wird durch die Art der stationären Phase und die Zusammensetzung der mobilen Phase und beeinflusst