

Formulaire

Définitions

V_s : volume de phase stationnaire effective, V_M : volume de phase mobile effective, V_{mo} : volume de phase mobile physique, V_{st} : volume de phase stationnaire physique, V_i : volume interstitiel, V_p : volume des pores de la phase stationnaire. Volume de colonne : $V_c = V_{mo} + V_{st}$, volume de phase mobile physique : $V_{mo} = V_i + V_p$. Les volumes sont exprimés en mL.

Porosité d'une colonne remplie

$$\varepsilon = \frac{V_{mo}}{V_c} = \frac{V_i + V_p}{V_c}$$

ε : porosité de la colonne

Loi de Darcy

$$\Delta P = \frac{\Phi \eta L \bar{u}}{d_p^2}$$

ΔP : perte de charge (Pa), Φ : facteur de résistance à l'écoulement, η : viscosité dynamique (Pa·s), L : longueur de la colonne (cm), \bar{u} : vitesse d'écoulement linéaire moyenne de la phase mobile ($\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$), d_p : diamètre des particules de la phase stionnaire (cm)

Capacité disponible de la phase stationnaire :

$$C_D = \frac{Q_s}{m_{st}}$$

Q_s : Quantité de soluté fixé par la phase stationnaire lors de la saturation (g), m_{st} : masse de phase stationnaire contenue dans la colonne (g).

Résolution entre deux pics chromatographiques 1 et 2 (Relation de Purnell) :

$$R_{s(1,2)} = \frac{\sqrt{N_{(2)}}}{4} \times \left(\frac{\alpha_{(1,2)} - 1}{\alpha_{(1,2)}} \right) \times \left(\frac{k'_{(2)}}{1 + k'_{(2)}} \right)$$

$N_{(2)}$: nombre de plateaux théoriques du soluté 2, $\alpha_{(1,2)}$: facteur de sélectivité, $k'_{(2)}$: facteur de rétention du soluté 2, avec $t_{R(2)} > t_{R(1)}$.

Capacité de pics n_c :

$$n_c = \frac{\sqrt{\bar{N}}}{4R_{s(I,n)}} \times \ln \left(\frac{1+k'_{(n)}}{1+k'_{(I)}} \right) + 1$$

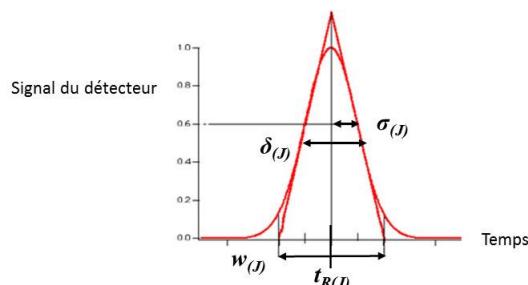
\bar{N} : nombre de plateaux théoriques moyens, $R_{s(I,n)}$: résolution entre les solutés **I** et **n**, $k'_{(I)}$: facteur de rétention du soluté **I**, $k'_{(n)}$: facteur de rétention du soluté **n**.

Rétention en chromatographie d'élution :

$$R_{(J)} = \frac{1}{k'_{(J)} + 1}$$

$R_{(J)}$: Facteur de retardement du soluté **J**, $k'_{(J)}$: facteur de rétention du soluté **J**.

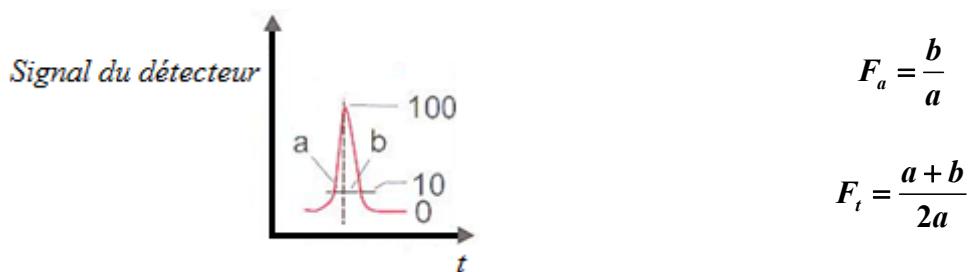
Signal chromatographique en chromatographie d'élution



$$\text{Signal}_{(J)}(t) = A_{(J)} \frac{1}{\sigma_{(J)}(t) \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{t-t_{R(J)}}{\sigma_{(J)}(t)} \right]^2}$$

$A_{(J)}$: constante qui dépend de la quantité de soluté **J** (masse, nombre de moles, concentration), $\sigma_{(J)}$: écart-type (min), $t_{R(J)}$: temps de rétention brut du soluté **J** (min). $w_{(J)}$, $\delta_{(J)}$, $\sigma_{(J)}$: sont calculés à 13,5%, 50% et 60,6% de hauteur respectivement et sont en minutes.

Facteur d'assymétrie F_a et facteur de traînée F_t en chromatographie d'élution



$$F_a = \frac{b}{a}$$

$$F_t = \frac{a+b}{2a}$$

Rétention en chromatographie planaire :

$$R_{(J)} = \frac{p_J u_M}{u_M}$$

$R_{(J)}$: Facteur de retardement du soluté J , p_J : fraction du soluté J en phase mobile effective, u_M : vitesse de la phase mobile ($\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$).

Statistique

loi	Binômiale	Poisson	Normale
Forme	$p_{(J)}(k) = \frac{n!}{k!(n-k)!} p_J^k q_J^{(n-k)}$	$p_{(J)}(k) = \frac{\lambda_J^k}{k!} e^{-\lambda_J}$	$p_{(J)}(k) = \frac{1}{\sigma_{(J)}(k)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{k - k_{(J)}}{\sigma_{(J)}(k)} \right]^2}$
Espérance	$\bar{k}_{(J)} = np_J$	$\bar{k}_{(J)} = \lambda_J$	$\bar{k}_{(J)} = \bar{k}_{(J)}$
Variance	$V_{(J)}(k) = np_J q_J$	$V_{(J)}(k) = \lambda_J$	$V_{(J)}(k) = \sigma_{(J)}^2(k)$
Ecart-type	$\sigma_{(J)}(k) = \sqrt{np_J q_J}$	$\sigma_{(J)}(k) = \sqrt{\lambda_J}$	$\sigma_{(J)}(k) = \sigma_{(J)}(k)$

Chromatographie GC

$$\ln\left(\frac{P_A^*(T_2)}{P_A^*(T_1)}\right) = \frac{\Delta_{vap}H_{m,A}}{R} \left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right]$$

$$\ln\left(\frac{P_A^*(T_2)}{P_A^*(T_1)}\right) = \frac{\Delta_{sub}H_{m,A}}{R} \left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right]$$

$P_A^*(T)$: pression de vapeur saturante du soluté A à la température T (Pa), $\Delta_{vap}H_{m,A}$: enthalpie molaire de vaporisation du soluté A ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$), $\Delta_{sub}H_{m,A}$: enthalpie molaire de sublimation du soluté A ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$), R : constante des gaz parfaits ($8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$). $T = T_{eb,A}$ et $T = T_{sub,A}$ lorsque $P_A^*(T) = P_{amb}$. Les températures sont en Kelvin.

$$P = \sum_{i=1}^N \gamma_i x_i P_i^* = P_M^*$$

P : pression totale de gaz (Pa), P_M^* pression de vapeur saturante d'un mélange de liquides miscibles (Pa), P_i^* : pression de vapeur saturante du soluté i (Pa), x_i : fraction molaire du soluté i , γ : coefficient d'activité du soluté i . Pour les solutions réelles, $\gamma \neq 1$. Pour les solutions idéales, $\gamma \rightarrow 1$.

$$SR = \frac{(débit sortie split) + (débit sortie colonne)}{débit sortie colonne}$$

SR : split ratio.

Chromatographie GC sur colonne capillaire WCOT et SCOT

$$\beta = \frac{V_{mo}}{V_{st}} = \frac{d_i}{4d_f}$$

β : rapport de phase, d_i : diamètre interne de la colonne (mm), d_f : épaisseur du film de phase stationnaire (mm).

Chromatographie GC : Indice de Kovats en fonction de la température en mode isotherme

$$I_x(T) = A + \frac{B}{T} + C \ln(T)$$

$I_x(T)$: indice de Kovats d'un soluté x à la température T , A , B et C : constantes.

Chromatographie GC : Constante de Mc Reynolds

$$\Delta I_s = I_{s, \text{phase considérée}} - I_{s, \text{squalane}}$$

ΔI_s : constante de Mc Reynolds du soluté s , $I_{s, \text{phase considérée}}$: indice de Kovats du soluté s sur la phase stationnaire considérée, $I_{s, \text{phase squalane}}$: indice de Kovats du soluté s sur une phase stationnaire de squalane.

Polarité d'un éluant organique ou hydro-organique

$$P'_E = \sum_{i=1}^N \Phi_i P'_i$$

P'_E : polarité de l'éluant, Φ_i : fraction volumique de solvant i , P'_i : polarité du solvant i .

Chromatographie HPLC sur phase stationnaire de partage normale

$$\log k'_{(J)} = -a[P] + b \rightarrow \text{phase stationnaire aminopropyle}$$

$$\log k'_{(J)} = -a \log x_p + b \rightarrow \text{phase stationnaire cyanopropyle}$$

$k'_{(J)}$: facteur de rétention du soluté J , a : constante, b : constante, $[P]$: concentration du solvant le plus polaire dans l'éluant, x_p : fraction molaire du solvant le plus polaire dans l'éluant.

Chromatographie HPLC sur phase stationnaire de partage inverse

$$\log k'_{(J)} = \log k'_{(J)_w} + a(\Phi_o)^2 - b\Phi_0 \rightarrow \text{cas général}$$

$$\log k'_{(J)} = \log k'_{(J)w} - S\Phi_o \rightarrow \text{cas particulier}$$

$$\log k'_{(J)} = a \log P_{(J)} + b$$

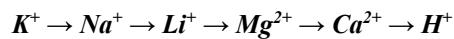
$k'_{(J)}$: facteur de rétention du soluté J , $k'_{(J)w}$: facteur de rétention du soluté J lorsque l'éluant est constitué seulement de phase aqueuse, a : constante, b : constante, S constante définie pour chaque couple éluant/soluté, Φ_o : fraction volumique en solvant organique dans l'éluant, $P_{(J)}$: coefficient de partage octan-1-ol/eau du soluté J .

Chromatographie IC

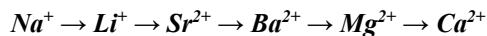
$$\log\left(k'_{(J^{x\pm})}\right) = \frac{1}{y} \log\left(K_{E^{y\pm}}^{J^{x\pm}}\right) + \frac{x}{y} \log\left(\frac{C_D}{y}\right) - \frac{x}{y} \log\left([E^{y\pm}]_M\right) + \log(\Phi_{SM})$$

$k'_{(J^{x\pm})}$: facteur de rétention du soluté $J^{x\pm}$, $K_{E^{y\pm}}^{J^{x\pm}}$: constante d'échange entre l'ion de l'éluant $E^{y\pm}$ et l'ion du soluté $J^{x\pm}$, x : charge du soluté $J^{x\pm}$, y : charge de l'éluant $E^{y\pm}$, C_D : capacité disponible de la phase stationnaire, $[E^{y\pm}]_M$: concentration de l'ion éluant $E^{y\pm}$ en phase mobile, Φ_{SM} : rapport de phase effectif.

Sur résine carboxylique, la rétention augmente le long de la série:



Sur résine aminodiacétate, la rétention augmente le long de la série:



Chromatographie SEC

$$R_g = a \left(\frac{M_M}{M_0} \right)^{0,588}$$

R_g : Rayon de giration d'une macromolécule (nm), a : constante (nm) M_M : masse molaire de la macromolécule ($g \cdot mol^{-1}$), M_0 : masse molaire des monomères constituant la macromolécule ($g \cdot mol^{-1}$).

$$K_{av(M)} = \frac{V_{R(M)} - V_i}{V_c - V_i}$$

$K_{av(M)}$: constante de distribution de la macromolécule M , $V_{R(M)}$: volume de rétention de la macromolécule (mL), V_i : volume interstitiel (mL), V_c : volume de la colonne chromatographique (mL).