

# Praca dyplomowa inżynierska

## Badanie wpływu dyspersji masy na sprawność rozdziału w kolumnie chromatograficznej

**Autor: Przemysław Andrzej Grabowski**

Nr albumu: 201084

Promotor: dr inż. Michał Lewak

Rok akademicki: 2014/2015

### Wprowadzenie

Dyspersja masy jest zjawiskiem mieszania płynu podczas przepływu, które może istotnie wpływać na rozkład stężeń jego składników. W chromatografii skutkuje to rozmywaniem pików na chromatogramie, utrudniając w ten sposób interpretację wyników poprzez obniżenie zdolności rozdzielczej kolumny.

### Cel i zakres pracy

Celem pracy jest wykazanie wpływu zjawiska dyspersji masy na współczynnik rozdziału, a właściwie wskazanie parametrów i zakresów pracy kolumn chromatograficznych w wysokosprawnej chromatografii ciekowej gdzie dyspersja masy znacząco przeszkadza w interpretacji wyników pomiarów pogarszając parametr jakości jakim jest współczynnik rozdziału.

Zakres pracy obejmuje:

- ogólne omówienie technik chromatograficznych
- opis dyfuzyjnego modelu matematycznego dyspersji masy
- zaimplementowanie modelu matematycznego do programu Matlab
- przeprowadzenie symulacji za pomocą napisanego programu

### Chromatografia

Chromatografia jest obecnie najbardziej rozpowszechnioną metodą analityczną. Pierwotnie była jednak jedynie metodą rozdziału wykorzystującą różnice w oddziaływaniu (powinowactwie) składników mieszaniny z fazami ruchomą (mobilną) i nieruchomą (stacjonarną) układu chromatograficznego. Zjawisko zróżnicowania sił oddziaływania poszczególnych faz ze sobą nawzajem stoi również u podstaw analitycznego potencjału chromatografii, który może być w pełni wykorzystany przy sprzężeniu z metodami spektroskopowymi. Fazę stacjonarną może stanowić ciało stałe, ciecz na nośniku lub żel. Fazę ruchomą (eluentem) może być gaz, ciecz oraz gaz lub ciecz w stanie nadkrytycznym

### Część obliczeniowa

W tym rozdziale przedstawiono model matematyczny wykorzystany do symulacji kolumny chromatograficznej, oraz ogólny opis sposobu jego implementacji do programu Matlab. Przedyskutowano również sens fizyczny parametrów symulacji procesu i wybrano najkorzystniejszy ich zakres do przedstawienia wpływu zjawiska dyspersji masy na współczynnik rozdziału w kolumnie chromatograficznej. Przedstawiono również wyniki przeprowadzonych symulacji.

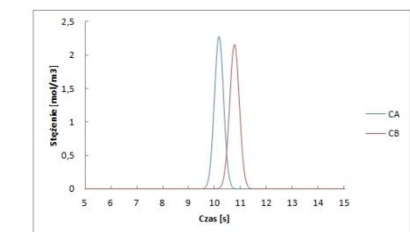
$$-\frac{u_0}{\varepsilon} \frac{\partial c_i}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} = \left(1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} K_i\right) \frac{\partial c_i}{\partial t} \quad (5.3)$$

warunek początkowy i warunki brzegowe Danckwerts'a:

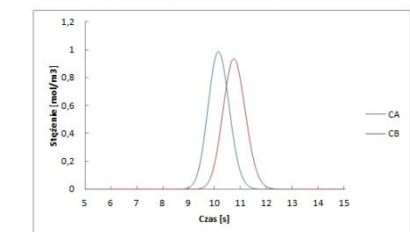
$$uc_{0,i} = uc_i - D_L \frac{\partial c_i}{\partial x} \quad \text{dla } x = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial x} = 0 \quad \text{dla } x = L \quad (4.6)$$

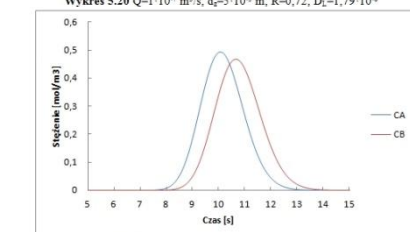
$$c_i(x) = 0 \quad \text{dla } t = 0 \quad (4.7)$$



Wykres 5.17  $Q=1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$ ,  $d_p=1 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ ,  $R=1,66$ ,  $D_e=3,29 \cdot 10^{-7}$



Wykres 5.20  $Q=1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$ ,  $d_p=5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ ,  $R=0,72$ ,  $D_e=1,79 \cdot 10^{-4}$



Wykres 5.21  $Q=1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$ ,  $d_p=2 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ ,  $R=0,36$ ,  $D_e=7,3 \cdot 10^{-4}$

### Wnioski

Z przeprowadzonych na modelu matematycznym w programie Matlab symulacji wynika, że w kolumnach chromatograficznych używanych obecnie w celach analitycznych i przy charakterystycznych dla nich parametrach pracy, a przede wszystkim bardzo małych średnicach ziaren zjawisko dyspersji masy ma niewielki wpływ na współczynnik rozdziału, gdyż zmienia się w tak niewielkim zakresie. Nie mniej jednak kolumny wykorzystywane w procesach chromatografii reaktywnej pracują w zakresie parametrów gdzie dyspersja masy ma bardziej znaczący wpływ na ich sprawność rozdziału, przede wszystkim ze względu na wykorzystywane stosunkowo duże średnice ziaren wypełnienia rzędu  $10^2 \mu\text{m}$ .

Ponadto można wyciągnąć wniosek, iż warunki brzegowe Danckwerts'a w wykorzystanym modelu matematycznym powodują rozbieżności numeryczne w rozwiązaniach na krańcach przedziałów obliczeń za pomocą funkcji pdepe programu Matlab. Aby zmniejszyć związany z tym faktem błąd należy stosować bardzo mały krok całkowania zarówno wymiaru przestrzennego jak i czasowego, co znacznie wydłuża czas obliczeń.