



Boletín informativo del grupo de


Cromatografía
y
Técnicas Afines

Real Sociedad Española de Química

Madrid, diciembre 1984. vol. 5, núm. 2

Instrumentación Analítica.

Nuestros resultados son una prueba más de nuestro liderazgo.



	VENTAS		BENEFICIOS	INVERSION EN INVESTIGACION Y DESARROLLO		EMPLEADOS Porc. anual de variación (1979-83)
	1983 Mill. de dólares	Variación en % sobre 1982		1983 Mill. de dólares	1983 Mill. de dólares	
HEWLETT PACKARD	4710	12.4	432	493.0	10.5	8.6
Finnigan	55	-0.3	-1	5.5	10.0	NA
Kratos	150	-10.1	-23	7.9	5.3	NA
Millipore	292	7.6	21	21.8	7.5	3.5
Perkin-Elmer	1015	-2.1	50	67.0	6.6	0.1
Spectra-Physics	143	4.5	1	14.5	10.1	NA

Fuente:
Business Week, 9, Julio, 84

Hewlett-Packard es hoy la máxima respuesta en tecnología y número de aplicaciones en Instrumentación Analítica. La experiencia demostrada por Hewlett-Packard en este campo, así como su servicio de asistencia de soporte mundial, son su mayor respaldo y garantía de calidad.

Somos especialistas en: CG, CL, CG/MS, UV/VIS y Sistemas Automáticos de Laboratorio.

Si desea más información, póngase en contacto con cualquiera de nuestras oficinas en España.

HEWLETT-PACKARD ESPAÑOLA, S. A.

MADRID. Ctra. de La Coruña, Km. 16,400. Las Rozas. Tel. (91) 637 00 11
08029 BARCELONA. Entenza, 321. Tel. (93) 322 24 51
41005 SEVILLA. Avda. San Francisco Javier, s/n. Edificio Sevilla 2. Tel. (954) 64 44 54
48001 BILBAO. San Vicente, s/n. Edificio Albia II. Tel. (94) 423 83 06
46004 VALENCIA. Isabel la Católica, 8. Tel. (96) 351 59 44

Nuestra eficacia son nuestros resultados.

 **HEWLETT
PACKARD**

BOLETIN INFORMATIVO DEL GCTA

Madrid, diciembre de 1984. Volumen 5, número 2

INDICE

-
- 2 EDITORIAL. CARTAS A LA REDACCION.
 - 3 PALABRAS DEL PRESIDENTE.
 - 4 INFORMACIONES.
 - 9 AVANCES EN DETECTORES PARA CROMATOGRAFIA DE GASES,
por María José González Carlos.
 - 13 CALCULO DE MEZCLAS DE FASES CON MICROCOMPUTADOR,
por Guillermo Reglero.
 - 20 ALGUNAS PUBLICACIONES DE MIEMBROS DEL GCTA.
 - 25 CROMATOGRAFIA: TERMINOS Y DEFINICIONES,
por M. Herráiz.
 - 27 CALENDARIO DE ACTIVIDADES.
 - 29 NUEVOS MIEMBROS DEL GCTA.
RESEÑA DE LIBROS.
 - 33 DE NUESTRAS EMPRESAS ASOCIADAS.
-

Edita: Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines
(Real Sociedad Española de Química)

Redacción: Isabel Martínez Castro
Guillermo Reglero

Depósito legal: M-1902-1975

Imprime: HELIOS, S.A., Conde de Cartagena, 18 - 28007 MADRID

Han colaborado en este número: M.D. Cabezudo, J.A. García Domínguez, M.J. González Carlos, M. Herráiz, I. Martínez Castro, R. Matas, M.C. Polo y G. Reglero.

editorial

Ante todo, queremos desear un Feliz Año 1985 a todos nuestros compañeros del GCTA.

No es nuestro propósito retrasar la aparición del Boletín; la demora de este número se debe únicamente a motivos económicos. Esperamos que a partir del próximo número, que aparecerá en el mes de julio, y con la colaboración de todos, podremos continuar como habíamos previsto.

Nuevamente, ¡FELIZ AÑO NUEVO!!

cartas a la redacción

Nota de Hewlett-Packard Española, S.A.

"...Según información aparecida en la revista "Businessweek", de 9 de julio de 1984, la compañía Hewlett-Packard, ocupa el duodécimo puesto (a continuación de ITT) en cuanto a inversiones en investigación y desarrollo. También, y según la misma revista, ocupa el cuarto lugar, en cuanto a ventas, entre las empresas de ordenadores".

M.A. López Sánchez

AGRADECIMIENTO

Desde estas páginas el GCTA desea hacer público su agradecimiento a algunas de las Empresas Asociadas que, con motivo de la pasada Reunión Bienal de Química, celebrada en Castellón, establecieron Becas de viaje para aquellos Socios en período de formación que, deseando presentar alguna Comunicación en el Simposio de Cromatografía, no dispusieran de otro tipo de ayuda.

Estas Empresas son:

KONIK INSTRUMENTS
HEWLETT-PACKARD ESPAÑOLA
LASING
WATERS ESPAÑOLA

palabras del presidente

En las dos ocasiones anteriores en que me he dirigido a los miembros del GCTA desde esta sección, he hecho referencia a dos acontecimientos en los que se encontraba implicado nuestro grupo de forma directa, y que ya han tenido lugar: me refiero a las dos Reuniones Científicas en que hemos participado como Grupo en el pasado año de 1984. En esta ocasión tengo que volver sobre el tema, aunque ya no haciendo referencia a los pasados congresos, sino recogiendo unas palabras que nuestro Presidente, M.V. Dabrio, pronunció en el curso de la segunda de dichas reuniones cuando invitó a los presentes, no todos miembros del GCTA, a que las Jornadas de Análisis instrumental se celebraran de forma regular coincidiendo con Expoquimia. Ahora, y por nuestra parte, el desafío recae no sólo sobre las sucesivas Juntas Directivas que se vayan eligiendo en el GCTA, sino sobre todos los miembros que lo formamos, tanto si tenemos encomendadas funciones directivas como si no.

No es necesario resaltar los beneficios que reportaría este contacto regular del GCTA con otros grupos científicos dedicados también al Análisis, a través de un congreso que incluye no sólo presentación de trabajos científicos sino conferencias, mesas redondas, etcétera, y en el que intervienen personas ligadas profesionalmente a la Industria, la Universidad o a otras Instituciones dedicadas a la investigación pura o aplicada. Es evidente que la celebración de unas Jornadas de Análisis Instrumental cada tres años sería bien recibida por todos.

Pero el papel del GCTA y de los otros grupos científicos, es precisamente el lograrlo. El reto para nosotros consiste en organizar la reunión, con todas las ayudas posibles, apoyados ciertamente en la infraestructura de Expoquimia, pero siendo plenamente conscientes de que la parte científica recaería sobre nosotros. Hasta ahora, la iniciativa ha partido de nuestro Grupo y esto puede seguir ocurriendo. No debemos asustarnos por ello. Y eso aunque seamos conscientes de que cada tres años vamos a tener dos Reuniones Científicas, como ha pasado en 1984, y que una de cada dos veces que eso ocurra, la reunión anual del Grupo va a tener que ser organizada por nosotros, sin la ayuda de la Real Sociedad Española de Química.

Y aún hay otro reto más. No será sólo un problema de presentar trabajos en dos congresos distanciados en pocos meses, u organizar, seleccionar, etc., la parte científica incluyendo conferenciantes, etc. Un aspecto que el GCTA no suele olvidar en acontecimientos de esta naturaleza, es el facilitar la asistencia de aquellas personas en formación, que están trabajando en temas cromatográficos, a través de la concesión de ayudas económicas, lo que puede poner al GCTA en situaciones financieras a las que no estamos acostumbrados.

Después de superar la prueba de los dos boletines informativos cada año, ahora nos planteamos este nuevo reto. ¿Estamos siendo demasiado ambiciosos?

Nosotros mismos tenemos la respuesta.

J.A. García-Domínguez

informaciones

REUNION ANUAL DEL GCTA

Los pasados días 27 y 28 de septiembre y en el marco de la Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, tuvo lugar, en el Colegio Universitario de Castellón de la Plana, la Reunión Anual del GCTA.

El presidente del Grupo, M.V. Dabrio, que lo era también de la primera Sesión, abrió la Reunión con unas breves palabras. A continuación, J. Albaigés presentó al primer conferenciante, M.L. Lee, de la Universidad Brigham Young de Salt Lake City (Utah), quien, a su vez, expuso los últimos avances en cromatografía capilar de fluidos supercríticos. El resto del día se dedicó a la presentación de comunicaciones orales sobre cromatografía de gases, hasta un total de quince.

El día 28 se abrieron las sesiones con una conferencia del profesor R.W. Frei, de la Universidad Libre de Amsterdam, presentando las últimas tendencias en detectores para HPLC. A continuación se presentaron ocho comunicaciones sobre cromatografía de líquidos, y por la tarde tuvo lugar la sesión de posters.

Hubo también una Mesa Redonda, con el título: "La columna cromatográfica", en la que actuaron como ponentes M.J. Molera, M. Gassiot, R. Matas e I. Martínez Castro. La discusión versó en su mayor parte sobre los problemas de coste, mantenimiento, reparación y eficacia de las columnas de HPLC.

* * *

ASAMBLEA ANUAL DEL GCTA

Con fecha 27 de septiembre pasado se celebró en Castellón de la Plana la preceptiva Asamblea Anual. En ella se trataron algunos puntos de interés general, tal como la subida de la cuota anual —tanto para los socios como para las empresas asociadas— ya que las actuales no son suficientes para la organización de la Reunión Anual y la edición de dos Boletines al año.

El punto más importante a tratar era la renovación de una parte de la Junta Directiva: presidente, un vicepresidente, secretario y cuatro vocales.

Por primera vez en la historia del GCTA había más de un candidato para la mayoría de los cargos a renovar.

Después de un largo y cuidadoso recuento, la Mesa Electoral anunció que los dos candidatos a la presidencia del GCTA, Joan Albaigés Riera y Luis Gascó Sánchez, habían obtenido 56 votos cada uno. El inesperado empate planteó un problema que no está contemplado en los Estatutos. El asunto fue remitido a la Real Sociedad, que, tras un profundo estudio, decidió abstenerse de ofrecer una solución. Finalmente, la Junta saliente del GCTA, que seguía en funciones hasta la resolución del problema, se reunió el día 12 de diciembre. Tras una nueva votación secreta, se llegó a un resultado definitivo.

Así pues, la composición de la nueva Junta del GCTA es la que sigue:

Presidente: Luis Gascó Sánchez.

Vicepresidentes: José Carlos Díez Masa y José Antonio García Domínguez.

Secretaria: Marta Herráiz Carasa.

Tesorera: María Carmen Polo Sánchez.

Vocales: María Dolores Cabezudo Ibáñez, Gonzalo Firpo Pamiés, Miguel Gassiot Matas, Joan Grimalt Obrador, Ricardo Matas Docampo, Sabino Rodríguez Moineiro y Jesús Sanz Perucha.

III JORNADAS DE ANALISIS INSTRUMENTAL

En el marco de la Expoquímica y en el Palacio del Cincuentenario de Barcelona, han tenido lugar, del 19 al 21 de noviembre, las III Jornadas de Análisis Instrumental, en cuya organización ha participado el GCTA.

La inauguración corrió a cargo de los profesores Enric Casassas, de la Universidad de Barcelona, y Miguel Montagut, del Instituto Químico de Sarriá, así como de Fernando Jimeno, de la Federación Empresarial de la Industria Química. Durante los tres días se sucedieron diez sesiones de comunicaciones orales y una de posters, dedicadas a Cromatografía, Análisis por inyección en flujo, Espectrofotometría, Quimiometría, Absorción atómica y Electroquímica.

Se celebraron también cuatro Mesas Redondas: "Demanda de Tecnología Analítica en el Sector Alimentario: Código Alimentario y entrada de España en el Mercado Común", coordinada por J. Obiols (Instituto Químico de Sarriá), M.T. Mora (Consejería de Sanidad de la Generalitat), M. Centrich (Laboratorio Municipal de Barcelona) y J. Marqués (Riera Marsá); "El microprocesador en el análisis instrumental y quimiometría", por H. Iturriaga (Universidad Autónoma de Barcelona), J.M. Riera y X. Tomás (Instituto Químico de Sarriá); "Colaboración interdepartamental a nivel de líneas de investigación: utilización y mantenimiento del instrumental", a cargo de A. Bladé (Servicio Técnico de Investigación de la Generalitat), M.V. Dabrio (CSIC) y G. Rauret (Universidad de Barcelona), y finalmente "Avances en instrumentación en el análisis de drogas y fármacos", coordinada por E. Gelpí (Instituto de Química Bioorgánica del CSIC) y J. Segura (Laboratorios Almirall).

A continuación se reseñan las comunicaciones presentadas en las Sesiones de Cromatografía.

- "Separación e identificación de nucleótidos de As por HPLC", C. Lagunas, D. Pestaña, J.C. Díez Masa, Institutos de Química Orgánica y de Enzimología y Patología Molecular (CSIC), Facultad de Medicina de la U.A.M. (Madrid).
- "Determinación de fármacos antidepresivos en plasma por HPLC", M.J. Sarrias, E. Gelpí, E. Martínez, F. Artigas, Instituto de Química Bioorgánica (CSIC), Barcelona.
- "Posibilidades en Biomedicina de la cromatografía de líquidos y la detección por radioinmunoensayo o monitorización de radiactividad", E. Gelpí, F. Casas, R. Freixa, J. Abian, J.O. Bulbena, J. Roselló, Instituto de Química Bioorgánica (CSIC) Barcelona.
- "Sistema de optimización del eluyente en una separación por cromatografía de líquidos", G. Firpo, Perkin-Elmer Hispania, S.A., Barcelona.
- "Utilización conjunta de CL, extrografía, GPC, CG, IR y RMN en la caracterización de los líquidos del carbón", S.R. Moinelo, J. Bermejo, A. García, R. Menéndez, Instituto Nacional del Carbón (CSIC), Oviedo.
- "Análisis de ácidos amargos en cerveza mediante cromatografía líquida de alta eficacia", A. Díaz, H. Sala, A. Vallmajor, M. Gassiot, Instituto Químico de Sarriá, Barcelona.
- "Investigación de aminoácidos libres en bebidas refrescantes de naranja", M.T. Valdehita, M.E. Torija, M.D. Tenorio, F. Plaza, Instituto de Bromatología, Universidad Complutense, Madrid.
- "Conexión accesible y de fácil manejo para cromatografía de líquidos", H. Wiederoeder, Hewlett-Packard GmbH, Waldbronn, R.F. Alemania.
- "Application of ionic chromatography", H. Barka, Knauer, Barcelona.
- "Presente y futuro de los sistemas analíticos acoplados", J. Grimalt, Instituto de Química Bioorgánica (CSIC), Barcelona.

- “Determinación indirecta de volúmenes específicos de retención en cromatografía de gases”. E. Fernández-Sánchez, J.A. García Domínguez, V. Menéndez, E. Pertierra-Rimada, Instituto Rocasolano (CSIC) y Universidad Complutense, Madrid.
- “Análisis de Met-enkefalina y heptapéptido adrenal en material biológico. Estudio del artefacto originado por oxidación durante el proceso de preparación de las muestras”. J. Abian, E. Peralta, E. Gelpí. Instituto de Química Bioorgánica del CSIC. Barcelona.
- “Contenido en plaguicidas y similares de las aguas de abastecimiento de Galicia”. J.M. Creus, J. Simal, J.M. Torres. Facultad de Farmacia. Sección de Química Analítica Bromatológica (CSIC). Santiago de Compostela.
- “Preoptimización de gradientes en cromatografía de líquidos de alta resolución mediante simulación”. R. Cela, C. García, J.A. Pérez Bustamante. Universidad de Cádiz.
- “Análisis de lubricantes de base ester mediante cromatografía de líquidos”. M.C. Gutiérrez, L. Aliste. Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial. Torrejón de Ardoz. Madrid.
- “Aplicació de l'acoblament cromatografia líquida-spectrometria de masses a l'anàlisi de microcontaminants orgànics en aigües”. J. Rivera, J. Cixach, F. Ventura. Instituto de Química Bioorgánica (CSIC). Sociedad General de Aguas de Barcelona, S.A. Barcelona.
- “Análisis de hidrocarburos aromáticos policíclicos en aguas de consumo público”. N. Salvatella, A. Tintó. Sociedad General de Aguas de Barcelona, S.A. Laboratorio de Análisis Dr. Hernández. Sabadell.
- “Influencia de la polaridad de la fase estacionaria en el orden de elución de esteres alifáticos saturados en cromatografía de gases”. J. Bermejo, M.D. Guillén. Instituto Nacional del Carbón (CSIC). Oviedo.
- “Aplicació de la tecnica d'injecció head-space en un laboratori de salut publica”. M. Centrich, F. Centrich, E. Serrahima, J. Solanich. Laboratorio Municipal del Ayuntamiento de Barcelona.
- “Estudio por GC/MS de la fracción de polialcoholes y azúcares reductores en vino y yogur”. I. Martínez Castro, A. Olano, J. Sanz. Instituto de Química Orgánica. Instituto de Fermentaciones Industriales (CSIC). Madrid.

GRUPO LOCAL DE MADRID

* * *

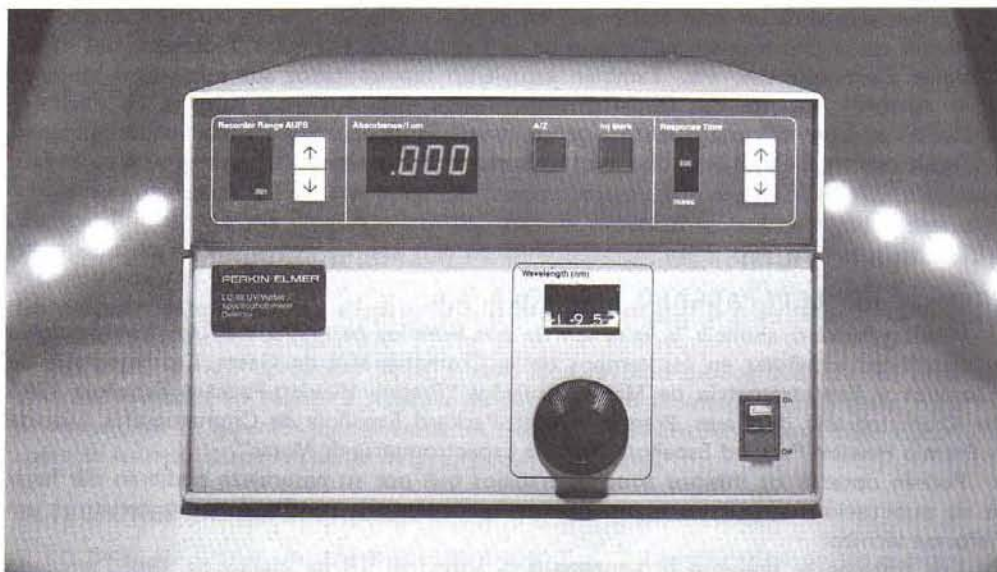
Este Grupo, en colaboración con la Sección Técnica de Química Farmacéutica de la ANQUE, organizó el pasado día 7 de junio, en el Salón de Actos de la Secretaría de Estado de Universidades e Investigación, una Mesa Redonda, sobre “Columnas para la cromatografía de líquidos de alta eficacia”, actuando como moderador don Venerando González, Catedrático de Química Analítica de la Universidad de Alcalá de Henares. Se expusieron tres ponencias: “Diseño y evaluación de columnas”, por J. Carlos Díez-Masa, del Instituto de Química Orgánica (CSIC) de Madrid; “Preparación de columnas”, por E. Gelpí, del Instituto de Química Bioorgánica (CSIC) de Barcelona, y “Problemas prácticos”, por M. Ramírez de la Peña, de CEPESA.

A continuación tuvo lugar una larga y animada discusión sobre los diversos problemas que suscita el uso y mantenimiento de las columnas de HPLC.

Para obtener información sobre el Grupo Local de Madrid los interesados pueden dirigirse a:

- José Carlos Díez-Masa, Instituto de Química Orgánica (CSIC), Juan de la Cierva, 3, 28006 Madrid, tel. (91) 262 29 00, ext. 212.
- Francisco Javier Fernández Ruiz, Laboratorios Morrith, S.A., Miguel Yuste, 45 28037 Madrid, tel. 204 81 40.
- María Carmen Polo Sánchez, Instituto de Fermentaciones Industriales (CSIC), Juan de la Cierva, 3, 28006 Madrid, tel. 262 29 00, ext. 299.

Detector LC-95 para cromatografía líquida. Su elegante simplicidad esconde sus espectaculares características.



Las características de nuestro detector de longitud de onda variable UV/VIS LC-95, le convierten en un detector aparte, y su diseño limpio y compacto le convierte el módulo central de nuestra instrumentación. Sensibilidades típicas mejores que $\pm 0,00001$ UA, linealidad mejor que 1% para más de 1,5UA, rango de longitud de onda útil desde 190 a 700 nm y, evidentemente, resultados cuantitativos, precisos y exactos.

El LC-95 se ha optimizado para sus necesidades específicas, en cuestión de segundos puede colocar una de tres microcélulas, cada una contrastada con el diseño óptico de doble haz, para el máximo rendimiento lumínico. Para microbore y Cromatografía Líquida ultrarrápida, una célula de 1,4 ul, para la máxima sensibilidad una célula de 18 ul, o para trabajos generales una célula

de 4,5 ul. Cada una de ellas utiliza el diseño exclusivo de Perkin-Elmer para eliminar los efectos de temperatura e índices de refracción. Y el módulo se ha diseñado para obtener las máximas especificaciones.

La Cromatografía Líquida se convierte en una tarea muy fácil utilizando el LC-95, el tiempo de calentamiento es menor de 5 minutos para trabajos generales, y en menos de 25 minutos se consigue las máximas especificaciones. La operación es fácil y rápida utilizando teclas pulsantes con ventanilla numérica de los parámetros analíticos y autocero.

Si se siente atraído por la elegante simplicidad y asombrosas características de este detector de Cromatografía Líquida de longitud de onda variable, póngase en contacto con la oficina Perkin-Elmer más próxima.

28034 Madrid
La Masó, 2
Tel. 734 04 00

08017 Barcelona
General Vives, 25-27
Tel. 212 22 58

41011 Sevilla
Av. República Argentina, 39
Tel. 45 70 22

48014 Bilbao
Av. Ejército, 11, 2.º, ap. 5
Tel. 447 10 21

46008 Valencia
Buen Orden, 11
Tel. 325 17 52

15006 La Coruña
Dr. Moragas, 2, 11.º dcha.
Tel. 29 43 33

Zaragoza - Comercial Rafer
Bologna, 12
Tel. 23 74 00

Oviedo - Neoquimia
Pedro Masaveu, 1
Tel. 23 18 04

PERKIN-ELMER

La Compañía de la Ciencia y de los Ordenadores.
Donde las soluciones son nuestro objetivo.

HOMENAJE A LA DOCTORA ROSARIO GARCIA OLMEDO

La doctora Rosario García Olmedo, catedrática de Bromatología, Toxicología y Análisis Químico de la Facultad de Farmacia de la Universidad Complutense y miembro de nuestro Grupo desde 1973, se ha jubilado recientemente. Con este motivo, la Facultad de Farmacia celebró un acto académico en el que participaron entre otras personalidades el Rector de la Universidad, el Decano de la Facultad de Farmacia, representantes de los Colegios Farmacéuticos, etc. También estuvieron representados sus numerosos alumnos y el personal docente del Departamento. Todos ellos tuvieron palabras de elogio y resaltaron su labor como profesora y como investigadora y sus grandes cualidades humanas.

Desde nuestro Boletín nos adherimos a tan merecido homenaje.

* * *

PREMIOS HEWLETT-PACKARD ESPAÑOLA, S.A.

Hewlett-Packard anuncia la creación de tres premios para ayuda de los investigadores y científicos españoles en los campos de la Cromatografía de Gases, Cromatografía de Líquidos y Espectrometría de Masas, titulados "Premio Hewlett-Packard Española 1985 de Cromatografía de Gases, Premio Hewlett-Packard Española de Cromatografía Líquida y Premio Hewlett-Packard Española 1985 de Espectrometría de Masas".

Podrán optar a los mismos aquellos trabajos que por su naturaleza pudieran dar lugar a su publicación en revistas especializadas, comunicación en Congresos o constituir un informe técnico.

Los trabajos se presentarán en castellano antes del 15 de marzo de 1985, teniendo que estar realizados con equipos Hewlett-Packard.

Hewlett-Packard ha pedido al GCTA que algún miembro del mismo forme parte del jurado calificador.

Los premios consistirán, además del correspondiente diploma, en la asistencia a la Reunión Científica Internacional a celebrar en Europa relativa a la técnica analítica utilizada en el trabajo, estando cubiertos los gastos de inscripción, viajes y alojamiento.

Para mayor información, diríjense, por favor, al Departamento de Analítica de Hewlett-Packard Española, carretera de la Coruña, Km. 16,400, Las Rozas (Madrid).

* * *

SUBIDA DE CUOTAS

En la Asamblea Anual del Grupo celebrada en Castellón el 27 de septiembre pasado, se aprobó la subida de las cuotas de los socios, que desde el 1 de enero último pasa a ser de 1.000 pesetas.

avances en detectores para cromatografía de gases

*María José González Carlos
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)*

INTRODUCCION

Durante las dos últimas décadas, la cromatografía de gases ha experimentado un incremento espectacular, llegando a constituirse en una de las técnicas analíticas más eficaces en la separación y determinación de compuestos químicos volátiles o volatilizables. En los últimos años, la cromatografía de gases ha superado la fase de rápido desarrollo, situándose en la actualidad en una fase de consolidación, en la que las investigaciones al respecto inciden principalmente en los aspectos fundamentales de la Química-física de los procesos de separación y de detección, como lo atestiguan la gran cantidad de trabajos realizados en estos dos campos.

Así pues, parece apropiado llevar a cabo una revisión bibliográfica de los recientes avances realizados en cuanto a sistemas de detección en cromatografía de gases, tratando de seleccionar los aspectos más interesantes tanto en el desarrollo de detectores específicos como en las modificaciones de los detectores convencionales.

DETECTORES DE ESPECTROSCOPIA DE EMISION DE PLASMA

En todas las formas de separación cromatográfica, la identificación de los compuestos eluidos puede ser tan importante como el proceso de resolución de la muestra. La identificación y la caracterización puede ser necesaria para asegurar la identidad de especies conocidas con propósitos cuantitativos o bien para examinar las sustancias desconocidas de una mezcla de multicomponentes. Algunos de los detectores tradicionales como el de captura electrónica, termiónicos o espectrofotométricos, nos proporcionan una información característica. Sin embargo, una información más completa y definitiva se puede conseguir acoplado a la columna cromatográfica una técnica analítica capaz por sí sola de proporcionar una identificación total de las muestras.

Estos instrumentos pueden clasificarse en dos categorías: los que nos proporcionan una caracterización "molecular" y los que dan una información "atómica". Entre los primeros se encuentran GC/MS y GC/IR y entre los segundos GC/AAS y GC/PES.

Existen cuatro tipos de plasma que se han utilizado con éxito como detectores de cromatografía de gases, el ICP (plasma acoplado de forma inducida), el d.c. DCP (plasma producido por descargas eléctricas de argón en corriente continua), el LP-MIP (plasma inducido por microondas a presión reducida) y el AP-MIP (plasma inducido por microondas a presión atmosférica).

El ICP se ha utilizado por sus aplicaciones en la determinación de fórmulas empíricas de compuestos orgánicos, basándose en la relación de intensidades de varios átomos (1), utilizándose esta fuente para excitar átomos en la región del infrarrojo (oxígeno y nitrógeno) (2).

El d.c. DCP se ha utilizado para monitorizar la redistribución catalizada de Fiedel Crafts de grupos alquilo entre átomos de silicio, germanio, estaño y plomo (3).

El LP-MIP, proporciona una elevada sensibilidad para los compuestos halogenados, fosforados y sulfurados, pero su utilización ha sido escasa en los últimos años, siendo sustituido por el AP-MIP, que es el más popular y efectivo de los plasmas.

Esta última forma de generar plasma fue introducida por Beenakker (4), en 1976, utilizando una cavidad resonante transversal, TMO10, para sustentar plasma de He a presión atmosférica, generado por microondas. Este tipo de detectores ha sido utilizado con éxito con columnas capilares (5) y en la detección específica de fósforo y carbono en la pirólisis de polifosfacenos (6).

Mulligan y col (7) desarrollaron un método de espectroscopia de barrido que funciona como un monitor de longitud de onda múltiple, que al incorporarse al detector AP-MIP, puede llegar a realizar 20 espectros por segundo. Cerbus y Gluck (8), diseñan y optimizan los parámetros operacionales del AP-MIP, para su utilización en un laboratorio industrial, llegando a conseguir un sistema con una elevada capacidad analítica y con una sensibilidad del orden de picogramos. Huf y Jansen (9), describen un AP-MIP, generado entre electrodos, eliminando la necesidad de un tubo de descarga, las reacciones indeseables en las paredes de la cavidad, y evitando que el plasma se extinga bien porque varíe la frecuencia del generador de microondas, o porque aumente la temperatura de la cavidad resonante ideada por Beenaker (4).

DETECTORES LASER

Los láseres como detectores selectivos en cromatografía de gases han recibido muy poca atención, ya que la indudable utilidad de sus propiedades únicas se vería frenada por el excesivo costo y su compleja instrumentación, sin embargo, en los últimos años se han realizado nuevos avances, encontrándose la investigación en este campo dentro de un proceso dinámico de desarrollo. De los cuatro tipos de láseres descritos en la bibliografía como detectores en C.G., dos de ellos resultan particularmente interesantes.

El primero de ellos es un láser He-Ne, operando simultáneamente a $3.39 \mu\text{m}$ (IR) y $0.63 \mu\text{m}$ (visible), utilizado como un detector selectivo de hidrocarburos (10). Las transiciones del IR y visible del láser se originan al mismo nivel de energía, siendo competitivas. Cuando los hidrocarburos penetran en la cavidad resonante del láser, la energía del IR, es absorbida por los C-H, debido a la vibración del enlace, aumentando la emisión del visible; esta emisión se monitoriza con un fotodiodo dando una medida cuantitativa de la concentración de la molécula absorbente. La selectividad de este detector hace pensar en su utilidad en la determinación contaminantes orgánicos.

El otro tipo de detectores es el de fluorescencia inducida por láser refrigerado rotacionalmente (RCLIF) (11); este sistema resuelve mezclas de isómeros, consiguiendo límites de detección del orden de picogramos, excelentes selectividades y sensibilidades, compensando sobradamente su elevado costo y su difícil manejo.

DETECTORES DE INFRARROJO

La espectrometría de infrarrojo con transformada de Fourier (IR-FT), ha recibido un gran interés como sistema de detección en cromatografía de gases, habiendo aparecido un gran número de publicaciones referentes a las operaciones y sistemas comerciales.

Uno de los diseños más interesantes ha sido el desarrollado por Wilkins y col. (12), realizando un acoplamiento directo de la GC/IR-TF/MS; las aplicaciones de este sistema pueden ser muy variadas, siendo muy interesante la continuación de su desarrollo.

Azarra y col. (13), realizan dos discusiones generales de las aplicaciones del 9C-FT-IR, en las ciencias forenses y del medio ambiente, discutiendo la posibilidad de insertar un fotoionizador no destructivo entre CG e IR. Wilkins y col. (14) desarrollaron dos sistemas de instrumentación GC/FT-IR/MS, combinado con columnas SCOT, para el análisis rápido de muestras complejas de más de 30 componentes.

DETECTORES DE ESPECTROMETRIA DE MASAS

La profusión de bibliografía de esta técnica ha disminuido durante los tres últimos años; las últimas novedades se deben a Taylor (15), que diseña una nueva fuente que permite de forma simultánea, o alternativamente, la ionización química y el impacto electrónico, aumentando la cantidad de información y la sensibilidad química; a Weiss (16), que describe un amplificador de alto rango dinámico, el cual permite resolver mezclas que contengan diferentes concentraciones de solutos; y a White y Wilkins (17), que describen un acoplamiento flexible de cromatografía de gases con columnas SCOT a un espectrómetro de masas con transformada de Fourier.

El análisis de datos por GC/FT-MS, está dando sus primeros pasos, por lo que es de esperar que en los próximos años, las mejoras de sensibilidad y el uso de nuevos procesadores hagan esta técnica más competitiva.

DETECTORES DE CAPTURA ELECTRONICA

El excesivo volumen de las células de los detectores de captura electrónica, han hecho incompatible el uso de columnas capilares de alta eficacia con este tipo de detectores en cromatografía de gases. Debido a ello, en los últimos años se han llevado a cabo algunos trabajos con el objeto de diseñar nuevas células, que minimicen los volúmenes muertos causantes de dicha incompatibilidad.

Así, Wells (18), diseña una célula de 100 μl , en la que un único método de introducción de la muestra reduce los problemas de pérdidas por absorción en las paredes de la misma, colocando la columna de tal forma que solape con la parte superior del ánodo. El mismo autor (19), compara los efectos producidos en la anchura de los picos utilizando tres células de diseños diferentes, dos de ellas de 350 μl dispuestas de forma coaxial y concéntrica y una de 100 μl de forma coaxial, encontrando los mejores resultados en la última.

DETECTORES DE CONDUCTIVIDAD TERMICA

El diseño de estos detectores se ha modificado a través de los años, introduciendo mejoras en la geometría de la célula y en la naturaleza del filamento. Así, Craven y col. (20), efectuaron un nuevo diseño de la célula que elimina las interferencias entre el flujo de masa de la muestra y de la referencia, mediante una amplificación de la fase diferencial, consiguiendo suficiente estabilidad y sensibilidad como para poder utilizarse con columnas capilares. Hua Yu Numg (21), modificó la configuración del filamento en la célula del detector, aumentando la sensibilidad, estabilidad, linealidad y reproducibilidad de la respuesta. Willems (22), realizó una nueva versión del puente de Winston, en el que la respuesta del detector ha sido definida en términos de diferencias de viscosidad entre la muestra y el gas de referencia. Por último, Wells y Simon (23), desarrollaron un modelo teórico numérico de todas las pérdidas por calor de estos detectores, en consonancia con otros modelos teóricos desarrollados con anterioridad.

DETECTORES FOTOMETRICOS DE LLAMA

Estos detectores, que son sensibles al azufre y al fósforo, han experimentado algunas innovaciones, ampliándose el número de aplicaciones durante los últimos años.

Se han empleado métodos de discriminación geométricos y químicos para distinguir entre compuestos que contienen germanio, azufre, selenio y estaño (24). Se ha realizado un nuevo diseño, reduciendo el amortiguamiento ocasionado por elevadas concentraciones

de hidrocarburos, y se han desarrollado varios métodos para distinguir entre picos correspondientes a compuestos orgánicos con azufre o selenio, empleando un detector de canal doble (discriminación óptica), o con un sólo canal, mezclando el gas portador con metano (25). Lawrence y Anthony (26), utilizaron un monocromador y una fibra óptica para la determinación de compuestos aromáticos por fluorescencia molecular, proporcionando una sensibilidad elevada, del orden de ng. Este tipo de detectores se ha utilizado con éxito en la determinación de compuestos de azufre en fracciones pesadas de hidrocarburos (queroseno y gasoil), utilizando dos llamas, por las cuales pasan las muestras sucesivamente; en la primera se eliminan las respuestas debidas a los hidrocarburos, convirtiéndose en especies que ya no interfieren en la respuesta del azufre al pasar por la segunda llama.

BIBLIOGRAFIA

- 1.—Denton, B.; M. Windsor; L.U.S. David (1980), Pat. Appl. 53634, 14 Mar.
- 2.—Brown, R.M.Jr. Fry R.C. (1981), *53*, 532-8.
- 3.—Estes, S.A., C.A. Poirier; P.C. Uden; R.M. Barnes (1980), *196*, 265-77.
- 4.—Beenaker, C.I.M. (1976). *Spectrochim. Acta*, **31B**, 483.
- 5.—Ouquing-Yu, Wang Guo-Chuen, Zeng Ke-Wei y Wei-Lu (1983), *Spectrochim. Acta*, **38B**, (1/2) 419-25.
- 6.—Riska, G.D.; S.A. Estes; J.O. Beyer y P.C. Uden (1983), *Spectrochim. Acta*, **38B**, (1/2), 40-17.
- 7.—Mulligan K.J., M. Zerezhgi y J.A. Caruso (1983). *Spectrochim. Acta*, **38B**, 369-375.
- 8.—Cerbis C.S. y S.J. Gluck (1983), *Spectrochim. Acta*, **38B**, (1/2), 387-397.
- 9.—Huf F.A. y G.W. Jansen (1983). *Spectrochim. Acta*, **38B**, (7), 1061-64.
- 10.—Parli, J.D. y Green R.B. (1982) *Anal. Chem.*, **52**, 1969-72.
- 11.—Hayes, J.M.; G.J. Small (1982), *Anal. Chem.* **54**, 1202-4.
- 12.—Wilkins, C.L.; G.N. Giss; G.M. Brissey; S. Steiner (1981), *Anal. Chem.* **53**, 113-17.
- 13.—Azarraga L.V.; C.A. Potter (1981). *J.H. Resol. Chromatogr. Chromatogr. Commun.* **4** (2), 60-9.
- 14.—Wilkins C.L.; G.N. Giss; R.L. White; G.M. Brissey and E.C. Onyiriuka (1982), *Anal. Chem.* **54**, 2260-64.
- 15.—Taylor K.T. y C.J. Wakenfield (1980). *Adv. Mass Spectrom.* **8B**, 1650-4.
- 16.—Weiss G. (1980). *Adv. Mass. Spectrom.* **8B**, 1624-8.
- 17.—White R.L. y C.L. Wilkins (1982). *Anal. Chem.* **54**, 2443-47.
- 18.—Wells G. (1983), *J. H. Resol. Chromatogr. Chromatogr. Commun.* **6**, 651-54.
- 19.—Wells G. y R. Simon (1983). *J. of H. Resol. Chromatogr. Chromatogr. Commun.* **6**, 427-430.
- 20.—Craven J.S.; D.E. Clouser (1980), *Analisis.* **8**, 1-5.
- 21.—Hua, Yu-Numg Fen Hsi Hua Hsueh. (1980), **8**, 157-60.
- 22.—Willems G.H.W. (1980). *J. Chromatogr.* **189**, 3-11.
- 23.—Wells G. y R. Simon (1983). *J. Chromatogr.* **256**, (1), 1-15.
- 24.—Flinn C.G.A.; A. Walter (1980), *J. Chromatogr. Sci.* **18**, 136-8.
- 25.—Fredriksson S.A.; A. Cedergren (1981), *Anal. Chem.* **53**, 614-18.
- 26.—Lawrence T.C. y A.K. Anthony (1982), *Anal. Chem.* **54** (14), 2597-99.

cálculo de mezclas de fases con microcomputador

G. Reglero

Instituto de Fermentaciones Industriales (C.S.I.C.)

INTRODUCCION

La separación de una pareja de compuestos determinada, por CGL, exige el empleo de una fase líquida adecuada. La elección de la misma puede resultar complicada, siendo además necesario disponer en el laboratorio de un elevado número de fases estacionarias entre las que elegir.

Hasta la fecha, no ha tenido éxito ningún intento de selección de un grupo pequeño de fases líquidas con el que se pueda resolver una amplia gama de problemas cromatográficos en el laboratorio (1).

La solución puede ser el uso de mezclas de fases líquidas como fase estacionaria, lo que ya se comprobó en los comienzos de la cromatografía de gases (2).

Al principio las proporciones de las mezclas se calculaban empíricamente. En 1959 Rohrschneider (3) propuso un método gráfico para el cálculo de mezclas de dos fases que todavía sigue siendo de utilidad. Sin embargo sólo permite calcular mezclas binarias ya que, para más de dos fases, el método resulta excesivamente laborioso.

En 1969 Molera y col. (4) amplían a cuatro el número de fases a mezclar, realizando el cálculo mediante un programa Fortran.

En este trabajo se presenta un programa Basic para microcomputador con el que pueden calcularse mezclas de hasta un máximo de diez fases, si se considera necesario emplear un número tan alto, específicas para resolver cada problema concreto. Se refiere a columnas rellenas, en condiciones isotérmicas de trabajo.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA

Se ha partido de la aproximación de que los tiempos de retención y los anchos de pico en la columna de fase mixta serán una combinación lineal de los medidos en las columnas standard de fase simple.

Existe en la literatura una amplia controversia sobre si tal aproximación es o no correcta. Molera y col. (4) la utilizan en su programa que también se empleó posteriormente con éxito por Cabezado y col. (5). En cualquier caso, no se incurrirá en un error grande siempre que las fases mezcladas no interactúen enérgicamente entre sí (6).

El programa calcula, pues, el tiempo de retención y el ancho del pico de cada uno de los solutos que se obtendrán con cada combinación de fases estacionarias, según:

$$100t_i = at_{iA} + bt_{iB} + \dots + nt_{iN}$$

$$100w_i = aw_{iA} + bw_{iB} + \dots + nw_{iN}$$

donde t_i y w_i son respectivamente el tiempo de retención y el ancho a la semialtura del pico correspondiente al soluto i en la mezcla de las fases A, B, ..., N; y a, b, \dots, n son el porcentaje de cada una de dichas fases en la mezcla.

$t_{iA}, t_{iB}, \dots, t_{iN}$ y $w_{iA}, w_{iB}, \dots, w_{iN}$ son los tiempos de retención y los anchos a la semialtura de los picos correspondientes al soluto i medidos experimentalmente en cada una de las columnas standard de fase simple A, B, ..., N.

Una vez conocidos los t_i el programa calcula los factores de capacidad (k') de los solutos en la fase mixta correspondiente, así como las retenciones relativas (α) de todas las parejas de picos adyacentes en tal fase mixta.

Para una resolución mínima R prefijada se puede calcular el número de platos teóricos necesario para separar todos los picos con dicha resolución:

$$N = \left(4R \frac{a}{1+a} \frac{1+k'}{k'} \right)^2$$

La eficacia de la columna mixta se calcula a partir de los t_i y w_i ya obtenidos. Mediante N y la eficacia calculada como AEPT se deduce la longitud de la columna mixta necesaria para separar la pareja más difícil, con la resolución prefijada R.

El programa realiza estos cálculos para todas las combinaciones posibles de fases simples, con porcentajes de mezcla que se pueden seleccionar libremente, e imprime todas aquellas columnas cuya longitud es menor a la que también se selecciona de antemano. Queda indicado el orden de elución previsto para los solutos en cada una de estas columnas con sus nombres y su factor de capacidad, así como las retenciones relativas y la resolución de cada pareja de picos contiguos.

El listado completo del programa para un microcomputador Olivetti M-20, es el que se indica.

```

10 ***** CALCULO DE FASES MIXTAS POR COMBINACION LINEAL *****
20
30 CLS
40 PRINT "CALCULO DE MEZCLAS DE FASES PARA COLUMNAS CLASICAS DE C.G."
50 PRINT "POR COMBINACION LINEAL DE FASES STANDARD"
60 FOR A=1 TO 3000 :GOTO A:CLS
70 LPRINT LPRINT LPRINT "*****"
80 LPRINT "*****" LPRINT LPRINT
90 LPRINT "***** CALCULO DE MEZCLAS DE FASES POR COMBINACION LINEAL *****"
LPRINT
100 ***** ENTRADA DE DATOS *****
110
120 INPUT "COMENTARIO :";C#:LPRINT C#:LPRINT
130 PRINT "MAXIMO 10 FASES STANDARD":PRINT:PRINT:PRINT
140 INPUT "NUMERO DE FASES STANDARD :";NFS:PRINT
150 INPUT "LONGITUD DE LAS COLUMNAS STANDARD (METROS) :";LS:L=LS*1000
160 INPUT "VELOCIDAD DEL PAPEL (MM/MIN) :";UP
170 INPUT "TIEMPO MUERTO DE LAS COLUMNAS STANDARD (MIN) :";TMR:TR=TMR*UP
180 CLS
190 INPUT "NUMERO DE COMPUESTOS A SEPARAR :";NC:PRINT
200 DIM NS$(NC):DIM TR$(10,NC):DIM TRC$(10,NC):DIM WC$(10,NC):HSC$(10,NC):NTR$(NC+1):HC
NC+1):K$(NC+1):ML$(NC+1):NW$(NC+1)
210 DIM RR$(NC):DIM RSC$(NC+1):DIM NNS$(NC):DIM RSP$(NC+1):DIM RF$(NC+1):DIM RAC$(NC+
1):DIM SC$(NC+1)
220 PRINT "ESCRIBA EL NOMBRE O UNA CARACTERISTICA DE IDENTIFICACION"
230 FOR A=1 TO NC:PRINT "SOLUTO N° ";A:INPUT NS$(A)
240 NEXT A
250 CLS
260 FOR A=1 TO NFS:CLS:PRINT "DATOS DE LA COLUMNA STANDARD N°";A:PRINT
270 INPUT "NOMBRE DE LA FASE :";NF$(A)
280 PRINT "TIEMPOS DE RETENCION (EN MINUTOS) Y "
290 PRINT "ANCHOS DE PICO A LA MITAD DE LA ALTURA (EN MILIMETROS)"
300 PRINT:PRINT "EN CASO DE ERROR ANOTE EL N° DE CASO PARA CORREGIR DESPUES"
310 FOR B=1 TO NC
320 PRINT "CASO :";B:PRINT "TR :";NS$(B):INPUT " ";TR$(A,B)
330 PRINT "M @ 5 :";NS$(B):INPUT " ";TRC$(A,B):PRINT
340 NEXT B
350 INPUT "SE DESEA CORREGIR ALGUN DATO (SI=1/NO=0)":I
360 IF I=0 THEN 420 ELSE 370
370 INPUT "NUMERO DE CASO :";J
380 PRINT "CASO :";J:"VALORES ANTERIORES : ";NS$(J):TR=$(TR$(A,J)):M @ 5 "M(A,
J)
390 PRINT "VALORES CORRECTOS : ";INPUT "TR :";TR$(A,J):INPUT " ";M @ 5 "M(A,
J)
400 PRINT:PRINT:PRINT:INPUT "OTRO CASO (SI=1/NO=0) ":Q
410 IF Q=0 THEN 420 ELSE 370
420 NEXT A
430 LPRINT NFS: LPRINT " FASES STANDARD "
440 FOR A=1 TO NFS:LPRINT NF$(A)
450 NEXT A

```



```

1220 GC=NL(COJ)
1230 NL(COJ)=NL(COK)
1240 NL(COK)=GC
1250 CLS PRINT J1,I2,H3,G4,F5 PRINT E6,D7,C8,B9,A10 PRINT "LONG. COL. " NL(NC) 1
000
1260 NEXT
1270 NEXT
1280 IF NL(NC) <= 10000 THEN 1290 ELSE 1580
1290 LPRINT TAB(5) "FASE" TAB(30) "TANTO POR CIENTO"
1300 LPRINT TAB(5) "-----" TAB(30) "-----"
1310 LPRINT TAB(5) NFA(1) TAB(35) J1
1320 LPRINT TAB(5) NFA(2) TAB(35) I2
1330 LPRINT TAB(5) NFA(3) TAB(35) H3
1340 LPRINT TAB(5) NFA(4) TAB(35) G4
1350 LPRINT TAB(5) NFA(5) TAB(35) F5
1360 LPRINT TAB(5) NFA(6) TAB(35) E6
1370 LPRINT TAB(5) NFA(7) TAB(35) D7
1380 LPRINT TAB(5) NFA(8) TAB(35) C8
1390 LPRINT TAB(5) NFA(9) TAB(35) B9
1400 LPRINT TAB(5) NFA(10) TAB(35) A10
1410 LPRINT TAB(5) " "
1420 LPRINT "LONGITUD DE LA COLUMNA NINTA (PARA EFICACIA STANDARD) " NL(NC) 100
0 " METROS"
1430 LPRINT LPRINT "DATOS PREVISTOS PARA ESTA COLUMNA " LPRINT
1440 FOR X=2 TO NC
1450 NPC(X)=NL(NC)/H(X):NEXT X
1460 FOR X=1 TO NC-1
1470 RSC(X+1)=(C(X)+1)-K(CX)=CNPC(X+1)^(C1+2)^(C4+C1+K(CX)+1) :NEXT X
1480 LPRINT TAB(5) "SOLUTO" TAB(35) "K" TAB(44) "RR" TAB(51) "RESOLUCION" TAB(6
5) "RS A LONG STD"
1490 LPRINT TAB(5) "-----" TAB(35) "----" TAB(44) "----" TAB(51) "-----" TAB(6
5) "-----"
1500 FOR AM=1 TO NC-1
1510 RSP(AM+1)=(C(AM)+1)-K(CAM)=C(L/H(CAM+1)^(C1+2)^(C4+C1+K(CAM)+1))
1520 RR(CAM)=K(CAM)/K(CAM)
1530 NEXT
1540 LPRINT TAB(5) NNS(1) TAB(32) KC(1) TAB(42) RR(1)
1550 FOR Y=2 TO NC
1560 LPRINT TAB(5) NNS(Y) TAB(32) KC(Y) TAB(42) RR(Y) TAB(52) RSC(Y) TAB(66) RSP
(Y) :NEXT
1570 LPRINT LPRINT TAB(5) "//////////////////////2//////3// ///////////////" LF
PRINT LPRINT TAB(5) "//////////////////////2//////3// ///////////////" LF
"//////////////////////2//////3// ///////////////" LF
1580 IF NFA=1 THEN 1770
1590 NEXT I2
1600 IF NFA=2 THEN 1770
1610 NEXT H3
1620 IF NFA=3 THEN 1770
1630 NEXT G4
1640 IF NFA=4 THEN 1770
1650 NEXT F5
1660 IF NFA=5 THEN 1770
1670 NEXT E6
1680 IF NFA=6 THEN 1770
1690 NEXT D7
1700 IF NFA=7 THEN 1770
1710 NEXT C8
1720 IF NFA=8 THEN 1770
1730 NEXT B9
1740 IF NFA=9 THEN 1770
1750 NEXT A10
1760 IF NFA=10 THEN 1770
1770 INPUT "DESEA PROBAR OTRA RESOLUCION NININA U OTRO % NINIMO DE MEZCLA (S(=1
NO=0) )" PR
1780 IF PR=1 THEN 1790 ELSE STOP
1790 LPRINT "-----"
1800 LPRINT "-----"
GOTO 610

```

182

```

1220 GC=NL(0J)
1230 NL(0J)=NL(0K)
1240 NL(0K)=00
1250 CLS PRINT J1,I2,H3,G4,F5 PRINT E6,D7,C8,B9,A10 PRINT "LONG. COL. " NL(0C) 1
999
1260 NEXT
1270 NEXT
1280 IF NL(0C) <= 10000 THEN 1290 ELSE 1580
1290 LPRINT TAB(05) "FASC" TAB(30) "TANTO POR CIENTO"
1300 LPRINT TAB(05) "----" TAB(30) "-----"
1310 LPRINT TAB(05) NF#(1) TAB(35) J1
1320 LPRINT TAB(05) NF#(2) TAB(35) I2
1330 LPRINT TAB(05) NF#(3) TAB(35) H3
1340 LPRINT TAB(05) NF#(4) TAB(35) G4
1350 LPRINT TAB(05) NF#(5) TAB(35) F5
1360 LPRINT TAB(05) NF#(6) TAB(35) E6
1370 LPRINT TAB(05) NF#(7) TAB(35) D7
1380 LPRINT TAB(05) NF#(8) TAB(35) C8
1390 LPRINT TAB(05) NF#(9) TAB(35) B9
1400 LPRINT TAB(05) NF#(10) TAB(35) A10
1410 LPRINT TAB(05) " "
1420 LPRINT "LONGITUD DE LA COLUMNA MIXTA (PARA EFICACIA STANDARD) : " NL(0C) 100
5 " METROS"
1430 LPRINT LPRINT "DATOS PREVISTOS PARA ESTA COLUMNA " LPRINT
1440 FOR X=2 TO NC
1450 NP(0K)=NL(0C)/H(0K):NEXT X
1460 FOR X=1 TO NC-1
1470 RSC(0K+1)=C(0K(0K+1)-K(0K)) * C(0L/H(0K+1))^(01/2000) / (4*(01+K(0K+1))) :NEXT X
1480 LPRINT TAB(05) "SOLUTO" TAB(35) "K" TAB(44) "RR" TAB(51) "RESOLUCION" TAB(68)
50 "RS A LONG. STD"
1490 LPRINT TAB(05) "-----" TAB(35) "----" TAB(44) "----" TAB(51) "-----" TAB(68)
50 "-----"
1500 FOR 0W=1 TO NC-1
1510 RP(0W+1)=C(0K(0W+1)-K(0W)) * C(0L/H(0W+1))^(01/2000) / (4*(01+K(0W+1)))
1520 RR(0W)=K(0W+1)/K(0W)
1530 NEXT
1540 LPRINT TAB(05) NNS#(1) TAB(32) K(1) TAB(42) RR(1)
1550 FOR Y=2 TO NC
1560 LPRINT TAB(05) NNS#(Y) TAB(32) K(Y) TAB(42) RR(Y) TAB(52) RSC(Y) TAB(66) RP
(Y) :NEXT
1570 LPRINT LPRINT TAB(05) "////////////////////////////////////// L"
RINT LPRINT TAB(05) "////////////////////////////////////// L"
"////////////////////////////////////// L"
1580 IF NFS=1 THEN 1770
1590 NEXT I2
1600 IF NFS=2 THEN 1770
1610 NEXT H3
1620 IF NFS=3 THEN 1770
1630 NEXT G4
1640 IF NFS=4 THEN 1770
1650 NEXT F5
1660 IF NFS=5 THEN 1770
1670 NEXT E6
1680 IF NFS=6 THEN 1770
1690 NEXT D7
1700 IF NFS=7 THEN 1770
1710 NEXT C8
1720 IF NFS=8 THEN 1770
1730 NEXT B9
1740 IF NFS=9 THEN 1770
1750 NEXT A10
1760 IF NFS=10 THEN 1770
1770 INPUT "DESEA PROBAR OTRA RESOLUCION MINIMA U OTRO % MINIMO DE MEZCLA (S(=1
ND=0) " :PR
1780 IF PR=1 THEN 1790 ELSE STOP
1790 LPRINT "-----"
1800 LPRINT "-----"
GOTO 810

```

183

EJEMPLO PRACTICO

En la tabla 1 se muestran los tiempos de retención y los anchos a media altura correspondientes a ocho solutos cuya separación total no es posible en columnas rellenas (2 m x 1 mm d. i.) de las fases que se indica.

Tabla 1. a: Tiempo de retención en minutos
b: Ancho a media altura en milímetros

	Fractonitril III	Carbowax 300	Ge Se-30	Triton X-100
Dietilacetal	3.12 (a) 0.5 (b)	3.07 0.5	4.80 0.8	3.65 0.6
Acetato de metilo	2.60 0.4	2.25 0.4	1.19 0.2	1.64 0.3
Formiato de etilo	2.33 0.4	2.11 0.3	1.19 0.2	1.55 0.3
Acetato de etilo	3.43 0.6	3.07 0.5	1.96 0.3	2.57 0.4
Acetona	3.12 0.5	2.44 0.4	0.97 0.2	1.55 0.3
Metanol	3.27 0.5	6.78 1.1	0.70 0.1	2.27 0.4
Propionato de etilo	5.04 0.8	4.81 0.8	3.88 0.6	4.53 0.8
Acetato de propilo	5.73 0.9	5.60 0.9	3.88 0.6	5.02 0.9

Con el fin de realizar la separación en el mínimo tiempo posible, se deseaba una columna corta por lo que la longitud máxima aceptada se fijó en 1.5 m. Asimismo se exigió una resolución mínima de 1.

Los resultados se muestran en la tabla 2 y han sido obtenidos para incrementos del 10% en las mezclas.

Tabla 2

	Fractonitril III %	Carbowax 300 %	Ge Se-30 %	Triton X-100 %	Longitud (m)
Columna n.º 1	60	0	10	30	1.2
Columna n.º 2	70	0	10	20	1.4
Columna n.º 3	50	0	10	40	1.4
Columna n.º 4	50	30	20	0	1.5
Columna n.º 5	50	0	20	30	1.5

El listado de los datos que corresponden a la columna más corta de las anteriores, tal y como lo confecciona el programa, es el que se indica.

Listado del resultado del cálculo para una columna seleccionada

FASE	TANTO POR CIENTO
FRACTIONITRIL III	60
CARBOWAX-300	0
SE-30	10
TRITON X-100	30

LONGITUD DE LA COLUMNA MIXTA (PARA EFICACIA STANDARD) = 1.23803 METROS

DATOS PREVISTOS PARA ESTA COLUMNA

SOLUTO	K'	RR	RESOLUCION	RS A LONG STD
FORMIATO DE ETILO	2.60364	1.15192		
ACETATO DE METILO	2.94727	1.15225	1	1.27101
ACETONA	3.42545	1.14809	1.18709	1.50983
METANOL	3.92273	1.14424	1.20155	1.52718
ACETATO DE ETILO	4.5	1.17051	1.1329	1.43992
DIETILACETAL	5.26727	1.45702	1.3955	1.7727
PROPIONATO DE ETILO	7.67454	1.13291	3.1434	3.99529
ACETATO DE PROPILO	8.69455	0	1.19413	1.51775

BIBLIOGRAFIA

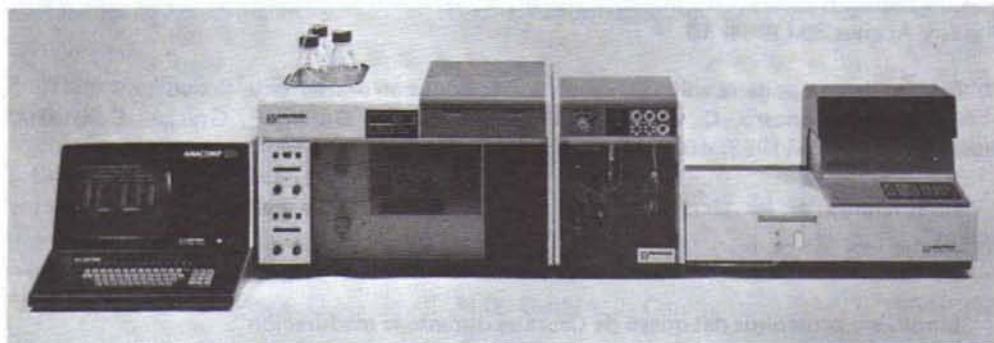
- (1) Mann, J.R. y Preston, Jr. S.T., J. of Chromatogr. Sci. **11** (1973) 216.
- (2) James, A.T. y Martin, A.T.P., Brit. Med. Bull. **10** (1954) 170.
- (3) Rohrschneider, L. Z. Anal. Chem. **170** (1959) 256.
- (4) Molera, M.J.; García-Domínguez, J.A. y Fernández-Biarge, J., J. of Chromatogr. Sci. **7** (1969) 305.
- (5) Cabezudo, M.D.; Gorostiza, E.F.; Herráiz, M.; Fernández-Biarge, J.; García-Domínguez, J.A. y Molera, M.J., J. of Chromatogr. Sci. **16** (1978) 61.
- (6) Keller, R.A. y Stewart, G.H., Anal. Chem. **36** (1964) 1186.

KONTRON **ANALYTICAL**

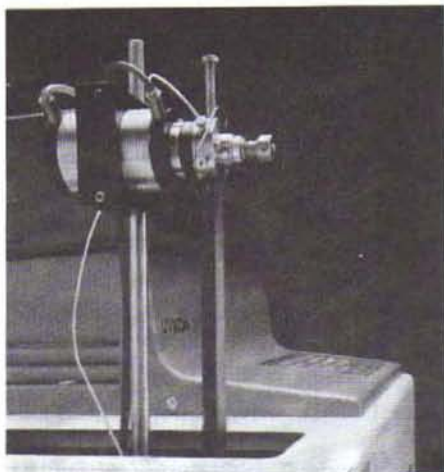
Los sistemas de Cromatografía líquida de KONTRON se ajustan a cualquier necesidad, cualquier configuración puede formarse con nuestros equipos compactos y modulares.

SERIE-600 Sistemas de Cromatografía Líquida, de alta eficacia, de fácil manejo y ampliables a la medida que aumentan los requerimientos.

Desde el sistema más sencillo para cromatografía isocrática en flujo y composición hasta los sistemas computarizados para HPLC incorporando la mejor técnica KONTRON en sus detectores UV/VIS y fluorimétricos.



Sistema HPLC



HPLC Alta Velocidad

- ANACOMP-220: permite el control total del sistema de recogida y almacenamiento de datos de más de un detector.
- TRACER MCS-670 la más avanzada tecnología en cromatografía multidimensional, permite usar hasta tres columnas, doce eluyentes en un mismo análisis.
- CROMATOGRAFIA LIQUIDA DE ALTA VELOCIDAD reduce el tiempo de análisis a unos pocos segundos, reduce cinco veces el consumo de disolventes y aumenta considerablemente la sensibilidad.

 **KONTRON**
S.A.

Salvatierra, 4 - Tel. 729 11 55
MADRID-34

algunas publicaciones de miembros del GCTA

Con objeto de facilitar el intercambio de información, que constituye uno de los fines del Grupo, el Boletín ofrece las referencias bibliográficas correspondientes a algunas publicaciones de varios de los socios.

Para que esta Sección llegue a ser realmente interesante, es deseable que se nos envíen separatas de las publicaciones, o al menos la referencia completa, ya que de otro modo es muy posible que no lleguemos a conocerla, y por lo tanto no aparezca reseñada.

Para solicitar información respecto a los trabajos que a continuación se citan, se puede escribir a:

*Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines (Boletín)
Juan de la Cierva, 3 - 28006 MADRID.*

"Nuevos derivados de la anilina en aceites asociados con el síndrome tóxico. I. Esteres grasos del 1,2-propanodiol-3-aminofenilo".

A. Vázquez-Roncero, R. Maestro Durán, E. Graciani Constante, C. Janer del Valle. *Grasas y Aceites* 35 (1984) 15.

"Nuevos derivados de la anilina en aceites asociados con el síndrome tóxico".

A. Vázquez Roncero, C. Janer del Valle, R. Maestro Durán, E. Graciani Constante. *Grasas y Aceites* 34 (1983) 405.

"Aplicaciones de las técnicas cromatográficas al control de calidad de los productos lácteos".

M. Juárez. *Rev. Agroquim. Tecnol. Alim.* 23 (1983) 467.

"Lipólisis y proteólisis del queso de Cabrales durante la maduración".

M. Juárez, L. Alonso, M. Ramos. *Rev. Agroquim. Tecnol. Alim.* 23 (1983) 541.

"Contribución al estudio de la grasa de huevo y su incidencia en productos que lo contienen. I: Composición en ácidos grasos de la grasa de huevo".

L. Coll Hellín, C. Valls Pallés, C. González López. *Anal. Brom.* 34 (1983) 239.

"Contribución al estudio de la grasa de huevo y a su incidencia en productos que lo contienen. II: Aplicación al análisis de mayonesas y postres de huevo".

C. Valls Pallés, L. Coll Hellín, C. González. *Anal. Brom.* 34 (1983) 285.

"Contaminación xenobiótica del Parque Nacional de Doñana. II: Residuos de insecticidas organoclorados, bifenilos policlorados (PCBs) y metales pesados en Falconiformes y Strigiformes".

M.J. González, M.C. Rico, M.C. Fernández-Aceytuno, L.M. Hernández y G. Baluja. *Doñana Acta Vertebrada* 10 (1983) 177.

"Selectivity for homologous series in reversed-phase LC. III. Investigation of non-specific selectivity".

H. Colin, G. Guiochon, Z. Ynn, J.C. Díez-Masa, J. Jandera. *J. Chromatogr. Sci.* 21 (1983) 179.

- "Compuestos fenólicos en *Astragalus clusii*".
J.L. Marco, J. Sanz, B. Rodríguez. *An. Quim.* 79 C (1983) 93.
- "The essential oils of some eastern Spain *Sideritis*".
C. Mateo, J. Sanz, J. Calderón. *Phytochemistry* 23 (1984) 319.
- "A two-step method for the immobilization of stationary phases in GC capillary columns".
V. Martínez de la Gándara, J. Sanz, I. Martínez Castro. *HRCCC* 7 (1984) 44.
- "Changes in anomeric composition of different crystalline forms of lactose during thermal treatment".
A. Olano, N. Corzo, I. Martínez Castro. *Food Chemistry* 14 (1984) 53.
- "Study of the applications of magnitudes of energy and charge of molecular orbitals to GC retention esters".
F. Saura Calixto, A. García Raso, M. Raso, J. Chromatogr. Sci. 22 (1984) 22.
- "Determination of the liquid loading in gas chromatographic packings by an extraction method".
E. Fernández Sánchez, J.A. García Domínguez, J. García Muñoz, M.J. Molera. *J. Chromatogr.* 299 (1984) 151.
- "Utilization of physicochemical properties and structural parameters for calculating retention indices of alkyl benzenes".
J. Bermejo, J.S. Canga, O.M. Gayol, M.D. Guillén. *J. Chromatogr. Sci.* 22 (1984) 252.
- "Prediction of GC retention indices of linear, branched, and cyclic alkanes from their physicochemical properties".
J. Bermejo, M.D. Guillén. *J. High Resol. Chromatogr. Chromatogr. Comm.* 7 (1984) 191.
- "Head space sampling and GC analysis of volatile urinary metabolites".
A. Cert, J. Bahima. *J. Chromatogr. Sci.* 22 (1984) 7.
- "Mercury distribution in an ecosystem of the 'Parque Nacional de Doñana' Spain".
G. Baluja, L.M. Hernández, M.J. González, R. Clavero. *Bull. Environm. Contam. Toxicol.* 30 (1983) 544.
- "Dansyl amino-acids behaviour on a Radial Pack C-18 column. Derivatization of grape wine musts, wines and wine vinegars".
P. Martín-Cordero, C. Polo, M.D. Cabezudo, M.V. Dabrio. *J. Liquid Chromatography* 7 (1984) 539.
- "Amino Acid Composition of Sediments from a Deltaic Environment".
J.M. González, J. Grimalt, J. Albaigés. *Mar. Chem.*, 14, 61 (1983).

ACCESORIOS PARA TECNICAS ANALITICAS CROMATOGRAFIA-ESPECTROSCOPIA



CROMATOGRAFIA (GASES, HPLC, CCF,...)

ESPECTROSCOPIA (AA, IR, UV-VIS, NMR,...)

PATRONES Y REACTIVOS

MATERIAL
AUXILIAR

KROMXPEK ANALITICA, S.A.

Ctra. Cerdanyola, 73-75 - Sant Cugat del Vallés. 08204 BARCELONA (SPAIN) - Tel. (93) 674 32 50 - Telex 59.199 - Apdo. 136

En líquidos y en gases
KROMATOGRAFIA
se escribe con K
de KONIK,
naturalmente!



KONIK® INSTRUMENTS, S.A.

Especialistas en cromatografía y técnicas afines
Specialists in chromatography and ancillary techniques

MADRID: Rosario Pino, 16 - 28020-MADRID (SPAIN) Tel. (91) 279 44 44

BARCELONA: Ctra. Cerdanyola, 73-75 - Sant Cugat del Vallés. 08204-BARCELONA (SPAIN)
Tel. (93) 674 32 50 - Telex 59.199 - Apdo. 136

"Recent Contributions of High Resolution Gas Chromatography to the Analysis of Environmental Hydrocarbons"

J.M. Bayona, J. Grimalt, J. Albaigés, W. Walker II, B.W. DeLappe, R.W. Risebrough, J. High Resol. Chrom. & C.C., 6, 605 (1983).

"Application of the Mussel Watch Concept in Studies of the Distribution of Hydrocarbons in the Coastal Zone of the Ebro Delta"

R.W. Risebrough, B.W. DeLappe, W. Walker II, B.R.T. Simoneit, J. Grimalt, J. Albaigés, J.A. García, A. Ballester, M. Mariño. Mar. Pollut. Bull., 14, 181 (1983).

"Rapid determination of procetofenic acid in plasma by high performance liquid chromatography". M.C. Caturla, J. Albaigés. J. Chromatogr., Biomed. Appl., 227, 219 (1982).

"A comparative study of chemical and microbiological monitoring of pollutant hydrocarbons in urban aquatic environments."

A.M. Solanas, R. Parés, C. Marfil, J. Albaigés. Internat. J. Environ. Anal. Chem., 12, 141 (1982).

"Hidrocarburos aromáticos policíclicos. I. Análisis por cromatografía líquida de alta eficacia".

J. Grimalt, J. Albaigés. Afinidad, 40, 223 (1983).

"Hidrocarburos aromáticos policíclicos. II. Análisis por cromatografía de gases con columnas capilares de vidrio y de sílice fundida"

J.M. Bayona, J. Albaigés. Afinidad, 40, 310 (1983).

"Analytical Techniques in Environmental Chemistry. 2."

J. Albaigés. Pergamon Press. Oxford. 546 pp. (1982).

"Chemistry and Analysis of Hydrocarbons in the Environment."

J. Albaigés, R.W. Frei, E. Merian. Gordon and Breach. Oxford. 314 pp. (1983).

"On the Possible Presence of Paraquat in Toxic Oil Samples"

Artigas, F., Martínez, E., Suñol, C., Tusell, J.M., Gelpí, E. Programa del CSIC para el estudio del Síndrome Tóxico, Trabajos Reunidos y Comunicaciones Solicitadas, Vol. 1, 77 (1983).

cromatografía: términos y definiciones

Marta Herráiz

Como continuación de la labor presentada en el número anterior (1) hoy se inicia la lista de términos ya definidos con sus equivalencias en otros idiomas. Para ello se ha tenido en cuenta las indicaciones de un moderno Diccionario de Cromatografía, de reciente aparición (2). Esta obra contiene aproximadamente 4.000 términos en francés, inglés, alemán y ruso. Dada la dificultad para transcribir los caracteres de este último idioma no se reproducen los términos rusos aquí, debiendo los interesados recurrir al original.

Español	Inglés	Francés	Alemán
01 Cromatografía	Chromatography	Chromatographie	Chromatographie
02 Cromatografiar	To chromatograph	Chromatographier	Chromatographieren
03 Cromatógrafo	Chromatograph	Appareil Chromatographique	Chromatographiegerät
04 Cromatograma	Chromatogram	Chromatogramme	Chromatogramm
05 Detector	Detector	Détecteur	Detektor
06 a 12 Cromatografía de:			
Reparto	Partition C.	C. de partage	Verteilungschromatographie
Adsorción	Adsorption C.	C. d'adsorption (3) C. par adsorption	Adsorptionschromatographie
Intercambio iónico	Exchange ion C.	C. d'échange d'ions (3)	Austauchionchromatographie
Exclusión	Exclusion C. Size-exclusion C. Gel permeation C. (3)	C. d'exclusion (3) C. par exclusion	Ausschlusschromatographie
de pares de iones (3) de Formación de pareja de iones	Paired-ion C.	C. de paire d'ions (3) C. a paire d'ions	Ionenpaarchromatographie
Afinidad	Affinity C.	C. d'affinité	Affiniätschromatographie
13 C. en columna	Column C.	C. de colonne (3) C. sur colonne	Säulenchromatographie
14 Columna rellena	Packed column	Colonne remplie (Colonne à remplissage)	Gepackte Säule

Español	Inglés	Francés	Alemán
15 Columna abierta	Open column	Colonne à tube ouvert	Offene Säule
16 Columna capilar	Capillary column	Colonne capillaire	Kapillarsäule
17 C. de gases	Gas C.	C. en phase gazeuse	Gaschromatographie
18 C. gas-líquido	Gas-liquid C.	C. gaz-liquide	Gas-Flüssigkeits-C.
19 C. gas-sólido	Gas-solid C.	C. gaz-solide	Gas-Adsorptionschromatographie
20 Fase estacionaria	Stationary phase	Phase stationnaire	Stationäre Phase
21 Fase líquida	Liquid phase	Phase liquide	Flüssige Phase
22 Fase móvil	Mobile phase	Phase mobile	Mobile Phase
23 Gas portador	Carrier gas	Gaz vecteur	Trägergas
24 Recubrimiento Impregnación (3)	Coating	Revêtement Impregnation (3)	Belegung
25 Columna Capilar abierta	Open tubular column Capillary (Golay) column	Colonne capillaire à tube ouvert Colonne de Golay	Golay Säule
26 Columna capilar de pared recubierta	Wall-coated open tubular column	Colonne capillaire à paroi recouverte	Dünnschicht-Kapillarsäule
27 Columna capilar de pared porosa	Porous layer open tubular column	Colonne capillaire à couche poreuse	Festschichtkapillarsäule
28 Columna capilar rellena	Packed capillary column	Colonne capillaire remplie	Gepackte Kapillarsäule

(1) M.D. Cabezudo "Cromatografía. Términos y Definiciones" Boletín del GCTA. 5 (1) 16-23 (1984).

(2) Hans-Peter Angelé "Dictionary of Chromatography" Dr. Alfred Hüthig Verlag, (1984).

(3) Propuestas por algunos socios del GCTA.

Se ruega encarecidamente a los Socios interesados que envíen sus opiniones sobre el tema.

calendario de actividades

25 de febrero-1 de marzo

36 Conferencia de Pittsburg sobre Química Analítica y Espectroscopia Aplicada. Nueva Orleans, Louisiana, U.S.A.

Información: Mrs. Linda Briggs, Program Secretary, 437 Donald Road, Pittsburg, PA 15235, U.S.A.

17-19 de abril

3.^{er} Simposio Internacional sobre TLC/HPTLC instrumental. Wurzburg, Alemania.

Información: Prof. Dr. S. Ebel Institut für Pharmazie Am Hubland D-8700 Wurzburg, Alemania Federal.

13-14 de mayo

8.^a Conferencia Mundial de Cromatografía y 6.^a de Espectroscopia. Hotel Palace Gastein, Bad Hofgastein, Salzburgo.

Información: Dr. V.M. Bhatnagar, Alena Enterprises of Canada, P.O. Box 1779 Cornwall, Ontario K6H 5V7, Canadá.

14-16 de mayo

6.^o Simposio Internacional sobre Cromatografía Capilar. Riva de Garda, Italia.

Información: Dr. P. Sandra. Laboratory of Organic Chemistry, University of Ghent, Krijkslaan 281 (S.4) B-9000 Gent, Bélgica.

3-6 de junio

21 Simposio Internacional sobre Avances

en Cromatografía "Chromatography 85". Oslo.

Información: Dr. A. Zlatkis, Department of Chemistry, University of Houston, Houston Texas 77004 U.S.A.

9-15 de junio

"ACHEMA 85". Encuentro Internacional sobre Ingeniería Química. Frankfurt.

Información: DECHEMA, Postfach 970146 D-6000 Frankfurt.

27-31 de mayo

Simposio en honor de A.J.P. Martin. Organizado por el Centro de Estudios para Metodología Química Instrumental de la Universidad de Urbino (Italia). Información: "Martin Simposium" Università degli Studi, Urbino, Italia.

27-28 de junio

5.^o Simposio Internacional sobre Polución Ambiental, Quebec.

Información: Dr. V.M. Bhatnagar, Hilton Hotel, Quebec City, Quebec, Canadá.

1-5 de julio

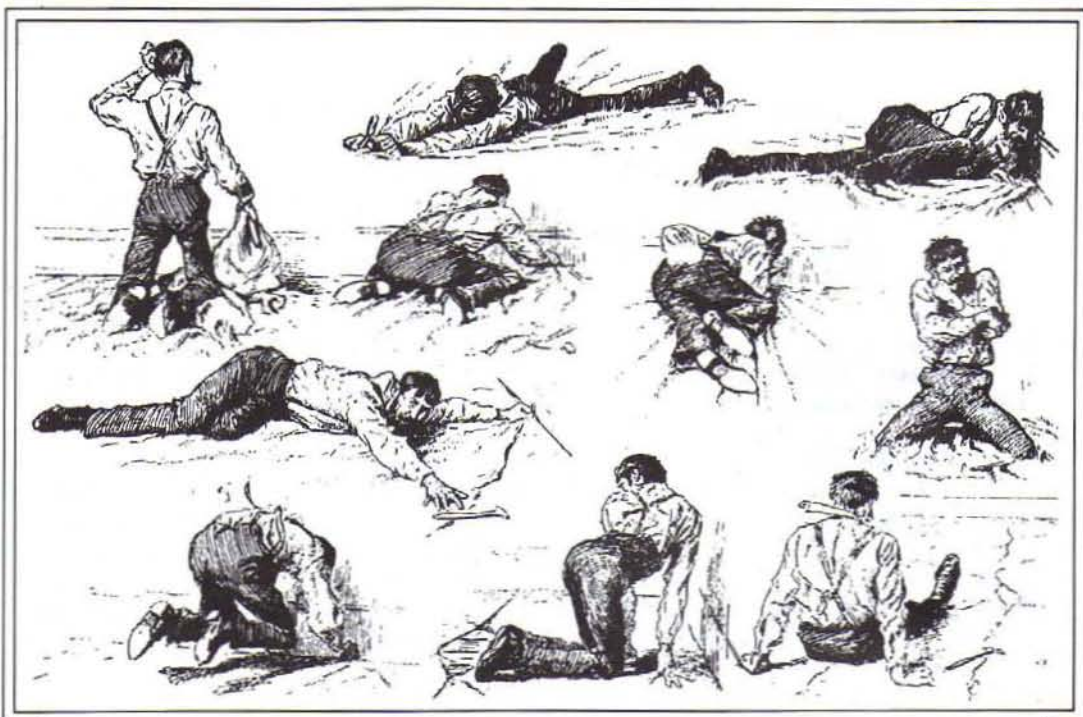
9.^o Simposio Internacional sobre Cromatografía de Líquidos en Columna. Edimburgo.

Información: Prof. J.H. Knox, 9th ISCLC Secretariat, 26 Albany Street, Edinburgh, EH1 3QH, Inglaterra.

SOLUCION AL DAMERO CROMATOGRAFICO

Han enviado la respuesta correcta al Damero cromatográfico publicado en el número anterior: Jesús Sanz Perucha, del Instituto de Química Orgánica (CSIC), y José Manuel Pereña, del Instituto de Plásticos y Caucho (CSIC).

"La Cromatografía de Gases, debido al riguroso control a que se somete cada una de las variables que intervienen en el proceso, puede utilizarse, no sólo para separar, sino también como método de identificación y de determinación cuantitativa de cada componente, siempre que se reúnan ciertas condiciones, que a veces son difíciles de obtener".



Ciertamente no fue fácil dar con un método para la optimización automática de métodos en H.P.L.C.

De cómo un «CHIP» puede convertir un problema analítico en un método.

La mayoría de los técnicos en desarrollo de métodos tienen cosas mejores que hacer que realizar intentos sin fin en la eterna lucha por obtener el máximo número de picos en el mínimo tiempo. Con el programa OPTIM I de SPECTRA-PHYSICS en «CHIP», el sueño se ha hecho realidad.

OPTIM I emula el proceso mental del experto en H.P.L.C.

OPTIM I aplica la misma lógica que Vd. usaría para la optimización de separaciones. Y *aprende mientras trabaja*. Cada separación es evaluada antes de decidir cuáles serán las condiciones del próximo experimento. Pero, lo mejor de todo es que todo ello se realiza automáticamente, 24 horas al día. OPTIM I usa el sistema de comunicación LABNET para el control de todos los microprocesadores involucrados en el sistema cromatográfico. Para que Vd. pueda dirigir su atención hacia tareas más interesantes. ¿No es este el tipo de *productividad* que su laboratorio estaba buscando?

No dude. Solo suminístrele la muestra. OPTIM I hará el resto.

OPTIM I es como Vd., **INDUCTIVO**. Y, como no siempre conocemos el número y tipo exacto de los componentes de nuestra muestra, OPTIM I no nos lo preguntará. ¡El problema es lo único que necesita!

Nos hemos esmerado para que Vd. lo tenga fácil.

OPTIM I es notablemente fácil de usar. El programa se suministra en un «CHIP», que Vd. mismo introduce en el integrado-computado SP-4200. Un breve diálogo le guiará para su puesta en marcha. Se necesita una columna y tres eluyentes. OPTIM I hará lo demás. El programa monitorizará el número de picos separados, la resolución entre ellos y el tiempo total de análisis. Encontrará la mejor separación.

OPTIM I es lo mejor después de un cromatografista.

OPTIM I es una opción de reducido costo en el sistema automático H.P.L.C. modelo SP-8100. Una modesta inversión convertirá este excelente cromatógrafo

automático en un inestimable «ayudante» del cromatografista en el desarrollo de métodos. Extraiga todas las prestaciones en H.P.L.C. y optimización de métodos a un precio realmente competitivo.

Con la garantía de
LASING S.A. DIVISION ANALITICA
Apartado 37.111. 28080-MADRID
Tel.: 268 36 43 ó 268 08 79



El sistema de optimización inteligente OPTIM I.



Spectra-Physics

Donde la tecnología es rentable y eficiente.

nuevos miembros del GCTA

Francesc VENTURA AMAT
Instituto de Química Biorgánica
Jorge Girona Salgado, 18-24
BARCELONA-34

José Antonio GOMEZ CAPILLA
Departamento Fisiología y Bioquímica
Facultad de Medicina
Universidad de Granada
GRANADA

Agustín PONS CARLOS-ROCA
Laboratorio Agrario del Estado
Avda. Moncloa, s/n
MADRID

Fernando HERRERA GONZALEZ
BASF Española, S.A.
Apartado 93
TARRAGONA

Fco. Javier ALFARO MATOS
Armada Española - Policlínica Naval
Arturo Soria, 270
MADRID-33

Josep RIVERA ARANDA
Instituto de Química Biorgánica (CSIC)
Jorge Girona Salgado, 18
08034 BARCELONA

Mercedes MARTINEZ RODRIGUEZ
Dpto. Físico-Químico - Procesos Industriales
Universidad Complutense
MADRID-3

Francisca RIVILLAS ROBLES
Lab. Sanidad y Producción Animal
Ministerio de Agricultura
Ctra. Algete, Km. 5,400
ALGETE (Madrid)

Rafael POCIÑA SEBASTIAN
Sta. Cruz del Marcenado, 15
MADRID

reseña de libros

"High performance liquid chromatography in forensic chemistry". Vol. 24 de la colección "Chromatographic Science Series". Editado por Ira. S. Lurie y John D. Wittwer. Marcel Dekker, 1983. XI + 439 pág., 15,5 x 23,4 cm. ISBN 0-8247-1756-2.

En este volumen se presentan las posibilidades de la cromatografía líquida en el análisis toxicológico, forense y criminalista. Los distintos autores que han colaborado en él, son químicos de entidades del gobierno americano relacionados con este tipo de análisis. El libro será de interés no sólo para los toxicólogos, forenses y criminólogos, sino también para clínicos y farmacólogos.

Consta de 8 capítulos en los que los dos primeros están dedicados a aspectos generales de la cromatografía líquida moderna. En el cap. 1 (I.S. Lurie) se presentan los principios fundamentales de la HPLC, y en el Cap. 2 (J.D. Wittwer) la instrumentación.

Los tres siguientes capítulos están dedicados a la descripción y aplicaciones de los principales mecanismos de separación utilizados en cromatografía líquida. En el Cap. 3 (J.D. Wittwer) se describe la cromatografía de adsorción y la utilización de la sílice, y en el Cap. 4 (I.S. Lurie) las aplicaciones de la fase inversa al análisis de drogas.

Ambos capítulos son extensos, más de 100 páginas, e incluyen tanto aspectos descriptivos y teóricos sobre estos mecanismos de separación, rellenos, fases móviles, etcétera, como aspectos prácticos sobre el cuidado de columnas, preparación de muestras, etcétera.

Las aplicaciones, en estos dos capítulos, incluyen innumerables tablas con datos de retención y extensa bibliografía sobre compuestos como: Antidepresivos, estimulantes, tranquilizantes, opiáceos, alucinógenos, LSD, alcaloides de la ergotamina, cannabis, triptaminas, metadona, cocaína, barbitúricos, etc.

El Cap. 5 (W.W. Mc Gee), constituye una revisión de la cromatografía de exclusión molecular (GPC) dirigida al criminalista, con aplicaciones como la identificación de residuos de plásticos, fibras, pinturas, proteínas plasmáticas, etc.

Los restantes capítulos del libro son cada vez más especializados. Así, el Cap. 6 (M.A. Peat), nos discute las posibilidades de la HPLC como técnica de investigación y screening de fármacos y drogas, en medios biológicos, con un enfoque de toxicología forense. El Cap. 7 (I.S. Krull), es un excelente capítulo, con 101 referencias, dedicado al análisis de explosivos y pólvoras. Su tratamiento incluye la separación de este tipo de compuestos, así como la identificación de restos a niveles de trazas con fines criminalistas. Con este último propósito se discute la utilización de sistemas complejos de detección (HPLC/MS, HPLC/ECD, HPLC/TEA...).

El último capítulo (A.M. Leyter), nos aborda el tema del análisis e identificación de tintas en la que se incluyen también aspectos criminalistas de identificación. R. Matas

* * *

"HPLC in food analysis". Editado por R. Macrae. Academic Press. 1982. XII + 340 pág., 15,5 x 23,5 cm. ISBN 0-12-464780-4.

En esta monografía se describen las aplicaciones de la cromatografía líquida al análisis alimentario.

El volumen consta de 13 capítulos escritos por 12 especialistas ingleses que pertenecen al gobierno, industria y Universidad.

Los cuatro primeros capítulos hacen referencia a aspectos generales de la cromatografía líquida. Cap. 1, Aspectos Teóricos; Cap. 2, Instrumentación; Cap. 3, Mecanismos de separación, y Cap. 4, Tratamiento de datos y automatización.

R. Macrae, en el capítulo 5, nos introduce en las posibilidades de la cromatografía líquida al análisis de alimentos comparándola con otras técnicas cromatográficas (GC, TLC, ...).

A partir de aquí, los capítulos están dedicados a temas específicos de análisis alimentario, ya sean macrocomponentes o microcomponentes. En el capítulo 6, se discute la determinación de carbohidratos, donde la HPLC muestra claras ventajas frente a otras técnicas cromatográficas.

El capítulo 7 hace referencia al análisis de lípidos, distinguiendo entre lípidos neutros, triglicéridos, ácidos grasos libres, fosfolípidos y otros lípidos polares. Se incluyen técnicas de caracterización directa de aceites por fase inversa no acuosa.

El capítulo 8 constituye una excelente revisión del análisis de vitaminas en alimentos donde se aprecia la clara ventaja de la HPLC frente a otras técnicas, al hacer posible el análisis de vitaminas hidro y liposolubles.

Se proporcionan innumerables tablas en las que se describen las condiciones cromatográficas para cada vitamina en distintos alimentos. Incluye 110 referencias bibliográficas.

La determinación de aditivos en alimentos se resume en el capítulo 9, incluyendo: Acidulantes (ácidos orgánicos), antioxidantes naturales y sintéticos, edulcorantes artificiales, saborizantes (flavour), aceites esenciales, conservantes, etc. Se incluyen 113 referencias.

El capítulo 10, desarrolla la separación y análisis de colorantes orgánicos sintéticos, así como de pigmentos naturales (antocianinos, carotenoides, clorofilas) que se pueden utilizar como aditivos alimentarios.

El tema de las aflatoxinas (B1, G1, B2, G2, M1, Patulina, Zerealona, ...) se describe en el capítulo 11 discutiendo temas como fase inversa o cromatografía de adsorción y sistemas de detección.

El capítulo 12, está dedicado a la determinación de aminoácidos y péptidos (161 referencias). Se describen métodos de hidrólisis de proteínas y preparación de muestras para el análisis de aminoácidos libres. Se destacan temas sobre aminoácidos individuales como los azufrados (metionina y cistina), triptófano, lisina y lisina disponible, 3-metil histidina, etc.

El último capítulo presenta los futuros desarrollos de la cromatografía líquida y su relación con el análisis alimentario. Columnas de diámetro reducido, GPC, HPLC/MS, etcétera.

R. Matas

* * *

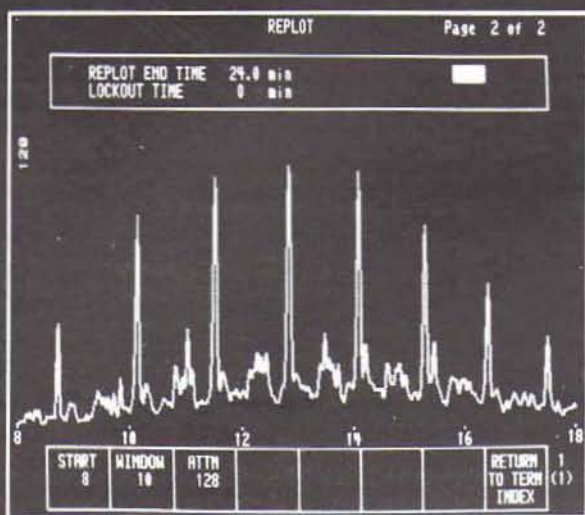
"Flavour Research of Alcoholic Beverages", por Lalli Nykänen y Pekka Lethonen. Foundation for Biotechnical and Industrial Fermentation Research, vol. 3. Helsinki (1984).

Este libro de reciente aparición puede tener mucho interés para los numerosos miembros del Grupo que trabajan en el campo de las bebidas alcohólicas. Consta de 23 capítulos redactados por investigadores muy relevantes de Alemania, Francia, Australia, Reino Unido, Holanda, Japón, Finlandia, USA y Suiza.

Los trabajos recogidos proceden del Alko Symposium on Flavour Research of Alcoholic Beverages, celebrado del 13 al 15 de junio de 1984 en Helsinki (Finlandia). Todos los temas resultan ser de la máxima actualidad y han sido tratados según la metodología más avanzada, tanto en cuanto a las técnicas analíticas (GC, MS,...) como al tratamiento de los datos. También se recogen interesantes sugerencias sobre la aplicación del Análisis Sensorial a las bebidas alcohólicas.

M.D.C.

Con el cromatógrafo de gases 8300 de Perkin-Elmer, cada imagen lleva un mensaje



Nuestro nuevo cromatógrafo de gases le ofrece de una forma simple, clara, precisa e instantánea, toda la información en cualquier momento de su análisis.

No solamente podrá ver su cromatograma mientras se está efectuando...

le permitirá además

- ...expandir, contraer, seleccionar su cromatograma antes de pasarlo a la impresora, con los tiempos de retención, nombres y análisis cuantitativo.
- ...compensar el sangrado de columna en temperatura programada con FID, ECD y NPD.
- ...le determina automáticamente los parámetros de línea de base y la sensibilidad de pico para los métodos de integración.
- ...le calcula y le indica los parámetros analíticos, tales como flujo o velocidad lineal del gas portador.

Con el modelo 8300 Ud. está frente sus resultados de la forma más directa, con la mayor información y precisión, que la de cualquier otro cromatógrafo.

Para mayor información, contacte con la oficina Perkin-Elmer más próxima.



PERKIN-ELMER

MADRID-34
La Masó, 2
Tel. 734 04 00

BARCELONA-17
General Vives, 25-27
Tel. 212 22 58

SEVILLA-11
Av. República Argentina, 39
Tel. 45 70 22

BILBAO-14
Av. Ejército, 11, 2º, ap. 5
Tel. 447 10 21

VALENCIA-8
Buen Orden, 11
Tel. 325 17 52

LA CORUÑA
Dr. Moragas, 2, 11º, dcha.
Tel. 29 43 33

ZARAGOZA - COMERCIAL RAFER
Bolonía, 12
Tel. 23 74 00

OVIEDO - NEOQUIMIA
Pedro Masaveu, 1
Tel. 23 18 04

de nuestras empresas asociadas

PERKIN-ELMER

NOVEDADES PERKIN-ELMER EN CROMATOGRAFIA DE GASES

Nueva Estación de Datos modelo Cromatografics 3

La nueva Estación de Datos Perkin-Elmer Cromatografics 3 utiliza un tipo de programas que nos permiten hacer Cromatografía de Gases y de Líquidos más fácilmente, más rápidamente y con mayor productividad. Ofrece a los cromatografistas de integración cromatográfica, el desarrollo de métodos cromatográficos incluyendo la posibilidad de multioperacional.

De una forma rápida, el analista puede tratar gráficamente sus cromatogramas haciendo expansiones de escala, dividiendo la pantalla para hacer comparaciones y haciendo restas entre ellos a través de las teclas funcionales del Ordenador Profesional Perkin-Elmer modelo 7500. El Cromatografics 3 permite al analista desarrollar métodos de integración trabajando directamente con los cromatogramas que están en la pantalla. También se tiene la opción de redefinir las líneas de base para obtener nuevos resultados de integración. Los métodos de integración existentes en memoria se pueden utilizar para volver a integrar datos existentes o datos futuros de una forma automática.

El Cromatografics 3 puede aceptar simultáneamente los resultados de hasta 4 Integradores LCI-100. Cada LCI-100 integra los cromatogramas, facilitándose así una forma de trabajo multicanal al permitir al analista hacer análisis, recoger datos y desarrollar nuevos métodos, todo al mismo tiempo.

Nuevo vaporizador a temperatura programada

A todas las líneas cromatográficas existentes en Perkin-Elmer actualmente se le pueden adaptar el nuevo Vaporizador a Temperatura Programable PTV. El modelo

Perkin-Elmer es el inyector de columnas capilares con más avances existente en el mercado. Es un inyector con división y sin división, cuya entrada es susceptible de ser programada respecto a la temperatura. Se introduce la muestra de la aguja de la jeringa a su interior a baja temperatura, eliminando la discriminación de la muestra y reduciendo las descomposiciones térmicas. Después de la introducción de la muestra se vaporiza rápidamente. El Inyector PTV es una combinación de la baja discriminación y de los efectos térmicos de una inyección en columna, pero con la tecnología de un inyector con división y sin división.

Las ventajas de este inyector son las siguientes:

Se puede utilizar de forma automática, es ideal para sustancias técnicamente sensibles, se obtiene el nivel de más altas especificaciones en la inyección en columna capilar, su exactitud y precisión es superior a cualquier inyector de columnas capilares, se reduce la discriminación en las sustancias de alto peso molecular, las sustancias no volátiles no entran en la columna, puede adaptarse a columnas desde 0,1 a 0,53 mm de diámetro interno, se puede utilizar la forma de purga de disolvente, para separar el disolvente de los picos que se eluyen más tarde.

En una mezcla de hidrocarburos de C-10 a C-40 se obtienen los siguientes resultados:

División standard relativa en área inferior a 0,5%.

División standard relativa de los factores de respuesta inferior a 0,5%.

División standard relativa en tiempo de retención inferior a 0,04%.

CROMATOGRAFIA LIQUIDA DE ALTA RESOLUCION

Nueva bomba modelo Series 400

La nueva bomba Perkin-Elmer modelo Series 400 es el sistema más económico en Cromatografía Líquida utilizando cuatro disolventes. Se basa en la arquitectura de un microprocesador de 16 bits que nos con-

trola el flujo y la mezcla de disolventes. Sus especificaciones son excelentes y su modo de operación sencillísimo. La bomba Series 400 permite la programación simultánea de hasta 4 disolventes, siendo su rango de flujo desde 0,01 a 10 ml/min. Este sistema puede guardar en memoria hasta 10 métodos de 9 pasos cada uno de ellos, lineales o gradiente. El reducido volumen interno y la precisión en que se forman dichos gradientes nos permiten poder trabajar con columnas microbore o semipreparativa. La compensación automática de la compresibilidad y su sistema proporcional de suministro de volumen nos compensa automáticamente los efectos de la mezcla de disolventes asegurándose una reproducibilidad absoluta entre instrumentos y laboratorios. La división standard relativa en tiempo de retención es inferior a 0.05%. Entre otras peculiaridades incluye el poder modificar un método en tiempo real, se le puede instalar un sistema de desgasificación mediante helio, tiene límites inferiores de presión programable, entradas y salidas para su inyección con inyectores automáticos y otros periféricos, y teclado para introducción de parámetros y comprobar el estado del método.

NOVEDADES PRESENTADAS EN EXPOQUIMIA'84

Cromatógrafo de Líquidos HPLC KONIK KNK-500

- Diseñado para microbore; compatible con columnas convencionales y aptos para cualquier aplicación (Reversa, Iones, GPC...).
- Opción de tres inyectores montados permanentemente (microbore, convencional, automático).
- Opción exhaustiva de detectores (UV, Conductividad, Índice Refracción...).
- Formación de gradientes binarios, ternarios o cuaternarios, con una sola bomba.
- Capacidad de desarrollo automático de métodos encadenando la inyección de

la misma muestra en condiciones analíticas distintas.

- Control y automatización total por microprocesador (flujos, presión, temperaturas, inyección, eventos externos...). Amplio rango de flujos desde 0,01 a 5,00 cc/min. (0,1 a 9,9 opcionalmente).

- Sistema de desgasificación, purga y cebado incorporados.

Cromatógrafo de Gases KONIK KNK-2000 Serie C

- Diseñados para capilares; compatibles con rellenas.

- Opción de todas las modalidades de inyectores y técnicas de inyección (en columna, split, splitless, head space...).

- Opción exhaustiva de detectores (TC, FID, ECD, HALL, PID, Fotométrico, NPD).

- Cada equipo permite ampliación modular hasta tres detectores y cinco sistemas de inyección.

- Control y automatización total por microprocesador. Amplio rango de temperaturas desde ambiente a 400 °C. Multi-rampa y eventos externos.

Sistemas de tratamiento de datos basados en ordenadores personales y profesionales

- Konik ha presentado en Expoquimia'84 una serie de paquetes de software en castellano así como las interfases correspondientes para un tratamiento de datos cromatográfico exhaustivo (todas las modalidades).

A través de ordenadores APPLE II E, DIGITAL PC-350 e IBM PC con capacidad para trabajar con uno a ocho aparatos simultáneamente, modelo y configuración elegidos.



VARIAN: LINEA COMPLETA EN CROMATOGRAFIA LIQUIDA

La respuesta VARIAN en HPLC se plantea de tres formas diferentes atendiendo

a unos objetivos y necesidades muy concretas por parte del usuario. De esta manera VARIAN presenta sus tres series 2000, 5000 y 5500, que con sofisticación creciente van cubriendo los objetivos requeridos por el mercado actual.

La nueva serie de componentes para HPLC Slim 2000, por su atractivo precio, representa la inversión ideal para el "nuevo usuario" de HPLC o para aquellos laboratorios con poco volumen de muestras o limitados fondos.

La serie incluye:

— Bomba con caudales entre 10 ul/mn y 9.9 ml/mn para HPLC en sus versiones microbore, analítica, ultrarrápida y semipreparativa.

— Detectores de UV, Espectrofluorímetro, Índice de Refracción, Conductividad.

— Programador de Gradientes para programación de caudales y proporción de disolventes.

— Columnas, Inyectores y Horno para columnas.

La ya conocida serie 5000 está dirigida fundamentalmente a la solución de problemas que requieran la realización de gradientes de elución. Esta serie controlada totalmente por microprocesador combina una alta precisión en el sistema hidráulico con un alto grado de coordinación entre sus diferentes partes. Su detector de ultravioleta-visible UV-100, de longitud de onda variable y programable, con capacidad de barrido entre 195 y 700 nm, permite obtener la máxima sensibilidad para cada uno de los compuestos eluidos.

La gran variedad de accesorios que puede adaptar (Sistema hexanario de disolventes, Sistema de cromatografía semipreparativa, Sistemas de reacción post-columna, etc.), convierten a la serie 5000 en el instrumento ideal para el desarrollo de métodos o el análisis con gradientes de elución en rutina.

Por último, la serie 5500 está concebida para la realización de análisis cromatográficos de forma totalmente inatendida. Su diseño desde software modular deja abiertas las puertas para cualquier ampliación futura.

Su refinado programa evita cualquier posibilidad de error en análisis automático. Las características hidráulicas del sistema son similares a las de la serie 5000 pero con un rango de flujos algo más amplio (10 ul/mn a 15 ml/mn). Todas estas características junto con su extremada sencillez de manejo hacen de él el cromatógrafo totalmente automático más preciso y cómodo del mercado actual.

La gama se completa con una gran variedad de accesorios (columnas, reactivos, fittings, etc.), que cubren todas las necesidades de cualquier usuario exigente.

CHROMPACK



Avda. de América, 58
28028 Madrid
Tel. (91) 256 57 34

La más reciente empresa, al servicio de la cromatografía española.

CROMATOGRAFIA LIQUIDA

Columnas HPLC para separación de proteínas y peptidos, marcas VYDAC y TSK (Toyo Soda) exclusivas, las mejores mundiales para técnicas analíticas y preparativas.

Análisis de aminoácidos en 20 minutos con las nuevas columnas poliméricas, con las que un cromatógrafo líquido convencional, sustituye con ventaja a los analizadores.

También su cromatógrafo convencional, se convierte en un poderoso y completo instrumento de análisis de aniones (incluyendo fluoruros) y de cationes, simplemente colocando nuestras columnas Wacronex e Ionospher.

En sólo 10 minutos, nuestras columnas ORH analizan los ácidos orgánicos (ac. láctico, acético, benzoico, cítrico, etc.) de bebidas, zumos de frutas, conservas, etc.

En el análisis de azúcares, nuestras columnas de cambio catiónico separan perfectamente los monosacáridos de disacáridos, polisacáridos y polioles, disponiendo también de cols. capilares para esta aplicación.

Disponemos de todas las columnas de fase inversa: Lichrosorb, Hypersil, Nucleosil, Spherisorb, Zorbax, etc., así como nuestro relleno exclusivo CP-Spher de hasta 125.000 platos por metro.

El gran éxito alcanzado con la presentación en el mercado, de nuestras columnas de cristal de fase inversa, a 16.000 pesetas, nos ha obligado a aumentar el tipo de rellenos, en este tipo de columnas de HPLC.

Instrumentos

¿Quiere usted mismo fabricarse sus columnas HPLC de cualquier modelo y relleno? Le ofrecemos la máquina de empaquetado de columnas, económica y de fácil manejo que se emplea en Europa.

Además: hornos para calentado y control térmico de columnas, compatibles con cualquier cromatógrafo; muestrador automático autosampler para inyección automatizada de 125 viales de 1 ml, etc.

CROMATOGRAFIA DE GASES

Su cromatógrafo, ¿no está adaptado para recibir columnas capilares? No es problema. Adquiera nuestro kit de modificación, que le permite de una forma económica y fácil, poder trabajar en 5 minutos con una col. capilar. Diferentes modelos, según marca de cromatógrafo y con inyección splitter y on-column.

Todo en cromatografía capilar GC2, campo donde Chrompack es líder mundial, con 84 diferentes rellenos de columnas de sílice fundida, incluyendo las exclusivas CP-Sil de fase químicamente unida (cross linked) y entrega inmediata.

En 100 segundos usted podrá analizar los hidrocarburos ligeros C1-C4 existentes en una muestra petroquímica, con nuestra columna exclusiva PLOT.

Análisis completos de pesticidas en 30 minutos con la col. capilar CP-Sil 19 que no se rompe, al ser de sílice fundida.

Ahora es posible el análisis de aminas por cromatografía capilar, mediante la col. CP-Wax 51.

En el análisis de ácidos grasos libres y FAME (como metil ésteres), las columnas CP-Sil 88 separan perfectamente en 20 min. los isómeros de C-14 a C-22, distinguiendo claramente los C-18 de los C-20. Otras columnas capilares específicas para aminoácidos, azúcares, isómeros ópticos, etc.

Instrumentos

Válvulas Valco para inyección automática, de 4, 6 y 8 vías.

Filtros para eliminar trazas de humedad, oxígeno y materia orgánica, en el gas portador, aumentando la vida de las columnas capilares.

TCT inyector de trampa fría, para atrapar trazas de comp. volátiles y posterior inyección en columna capilar; de interés en análisis de medio ambiente, aromas, etc.

Metanizador, adaptado a un GC analiza ppm de CO y CO2.

GAMA COMPLETA DE PRODUCTOS AL SERVICIO DEL CROMATOGRAFISTA

Columnas empaquetadas para GC con 300 fases distintas, además de las exclusivas CP-Sil.

Viales de vidrio y cápsulas de aluminio, de todos los tamaños.

Patrones standard Polyscience y patrones de calibración.

Septum, jeringuillas, ferrulas, guarda-columnas, medidores de caudal de gas, etc.

Boletines técnicos periódicos CHROM-PACK NEWS.



ESPECTROMETROS DE MASAS

HP ofrece los nuevos sistemas de sobremesa 5970B y 5995C.

Ambos hacen uso de toda la capacidad de la nueva estación de datos CG/EM, que facilita su manejo y el tratamiento de datos, con posibilidades analíticas y de automatización hasta el momento sólo posibles de

conseguir con los sistemas más costosos.

El HP 5995C acepta 70 paquetes de programación técnicos y de gestión, incluyendo VisiCalc y Context MBA, y los programas que el usuario se prepare para sus aplicaciones específicas, mientras el HP 5970B, al incorporar un detector de CG/EM de elevado rendimiento, amplía la capacidad tanto cualitativa como cuantitativa de su sistema analítico.

Ambos sistemas han sido optimizados para cromatografía de gases capilar con una alta velocidad en la toma de datos, en los modos de barrido y monitorización de iones seleccionados. Además realizan la tarea de almacenamiento, corrección, visualización y el informe de datos en el formato elegido. Se pueden comparar espectros, efectuar conexiones a registros gráficos u otros ordenadores y muchas acciones más, pulsando tan sólo unas pocas teclas.

ESPECTROFOTOMETROS UV/VIS

De los dos modelos que actualmente ofrece HP en la línea de espectrofotometría UV/VIS, se ha presentado el 8451A, pensado para satisfacer las necesidades de cada día del laboratorio a un reducido costo.

La avanzada tecnología HP de diodos en sistema integrado ofrece velocidades de barrido tan rápidas como 0,1 seg. desde 190 a 820 nm, la monitorización de hasta 25 longitudes de onda individuales cada 0,1 seg. y una evaluación instantánea de hasta 12 compuestos en un análisis de multicomponentes.

Al poder utilizar interfases diversas, es compatible con una amplia variedad de periféricos y ordenadores, permitiendo el desarrollo de programas en BASIC mediante el teclado alfanumérico opcional.

Ningún otro UV/VIS de haz único ofrece su reproducción de longitudes de onda, el detector de diodos en sistema integrado y el algoritmo comparativo de máxima probabilidad para proporcionar un nivel comparable de precisión y seguridad.

CROMATOGRAFOS DE GASES

El más reciente modelo de cromatógrafo de gases HP, el 5890A, combina un precio excepcional con el rendimiento y la productividad que hoy se precisa, ofreciendo un diseño original que permite alcanzar un nuevo nivel de comodidad y simplicidad para el usuario en el transcurso del proceso analítico y un costo de mantenimiento verdaderamente bajo.

El 5890A permite la elección entre diversos sistemas de inyección y toda una gama de potentes detectores, que incluye FID, NPD, TCD y ECD. Incorpora sensor de flujo y compensación de columna simple capilar o de relleno y una lectura alfanumérica que facilita la situación del sistema en cualquier momento.

El CG se completa con su capacidad de comunicación opcional, que hace posible el establecimiento de redes de comunicación que acceden a la conexión en serie con el Integrador HP 3392A para almacenamiento de datos e impresión o incorporación de un sistema de automatización de laboratorio completo.

SISTEMAS DE AUTOMATIZACION DE LABORATORIO

La HP 3350 es una nueva familia de sistemas de automatización de laboratorio basada en los ordenadores Serie HP 1000A con capacidad para redes de trabajo.

Se ofrece la posibilidad de elección entre dos redes de trabajo analítico: Conexión de Datos HP, para larga distancia, con lazo múltiple de una gran flexibilidad en su configuración, y el Anillo HP, en que convertidores analógicodigital se incorporan a un anillo conectado a un controlador con microordenador.

Cada sistema HP está programado para la toma de datos, integración, cálculos cromatográficos estándar, control del inyector automático, control de eventos externos e informes, etc. Se le incorporan diversos paquetes de programación para gestión de muestras, y si se utiliza el ordenador per-

sonal de pantalla táctil HP 150 se consigue análisis financiero, procesado de palabras y presentaciones gráficas con numerosos paquetes de programación.

CROMATOGRAFOS DE LIQUIDOS

El HP 1090A es el único Cromatógrafo de Líquidos que asegura una precisión excelente y una automatización sencilla con columnas convencionales, de alta velocidad o de diámetro reducido.

Su automuestreador permite la inyección de volúmenes programables desde 0,1 μ l y un acceso rápido a 100 muestras. El intervalo de flujo va de 1 μ l/min y el horno ofrece una gran capacidad de calentamiento de disolvente y columna para eficacia y selectividad óptimas.

Tres son las formas de detección que pueden utilizarse: detectores de filtro-fotométrico, de diodos en circuito integrado y de índice de refracción.

Desde un principio, el HP 1090A se ha diseñado como una serie de módulos integrados, susceptibles de ampliación. Esto permite no sólo adquirir la configuración exacta que actualmente se precise, sino modificarla con facilidad si las necesidades del usuario se modifican o se desarrollan nuevas técnicas HPLC.

ANALISIS AMINOACIDOS. METODO PICO-TAG

UN NUEVO SISTEMA EN HPLC MICROBORE

LKB ofrece ahora un nuevo sistema en HPLC MICROBORE que como características más sobresalientes destacan:

- Sensibilidad aproximadamente 6 veces superior a los sistemas HPLC convencionales.
- Límite de detección: unas 14 veces mejor que el HPLC convencional (a nivel de picomoles o picogramos).
- Ahorro en el consumo de eluyentes o disolventes en un 95 por ciento.
- Posibilidad de trabajo en gradiente con sistema MICROBORE.

Estas posibilidades radican en las excelentes prestaciones de la bomba convencional de LKB (2150-002) en combinación con:

- Inyector de MICROBORE con posibilidad de inyectar 1 μ l. o menos.
- Columnas de MICROBORE de 1 mm. de diámetro interno con 250 mm. de longitud con fases C-8 y C-18 que ofrecen una alta eficiencia y resolución, garantizadas con un mínimo de 35.000 platos/m.
- Célula de flujo para el monitor de longitud de onda variable LKB (2151-002) de un volumen interno de 0,8 μ l. con flujo optimizado y un *paso óptico de 3 mm.*

Estas características, unidas a la posibilidad de flujos precisos y reproducibles muy bajos y libres de pulsaciones, permiten a la bomba de LKB la posibilidad de trabajar en MICROBORE y gradiente MICROBORE gracias a un controlador que es capaz de almacenar 15 programas diferentes de gradientes con un programa de encadenado de métodos.

Una ventaja muy importante de este sistema es la posibilidad de utilizar los componentes:

- Bomba.
- Controlador.
- Monitor de longitud de onda variable, con un sistema de HPLC convencional, con sus respectivas columnas, inyector y célula de flujo, permitiendo cualquier tipo de Cromatografía de alta eficacia (preparativa, fase reversa, fase normal, cambio iónico, gel permeación, Cromatografía ultrarrápida, etcétera).

El sistema permite, por tanto, su ampliación futura tanto en sus posibilidades de detección:

- Detector índice de refracción.
- Detector fluorescencia de longitud de onda de emisión y excitación variable.
- Detector electroquímico.
- Detector de conductividad/pH.
- Detector "diode array" espectral con conexión a IBM-PC, como en sus posibilidades de ampliación de mezcla de solventes, pudiendo llegar a



convertirse en un sistema cuaternario mediante la utilización de dos bombas y dos válvulas dinámicas externas que, comandadas por el controlador, modifican la proporción de la mezcla de solventes. Asimismo, es posible automatizar el sistema y optimizarlo mediante la inclusión de un autoinyector y el horno de columnas.

CROMATOGRAFO DE GASES PORTATIL GOBERNADO POR MICROPROCESADOR MARCA SHIMADZU, MOD. GC-MINI3

El modelo GC-Mini3, de la firma SHIMADZU CORPORATION, es el Cromatógrafo de Gases de doble canal más pequeño del mercado. Su sencillez de manejo y su reducido tamaño y peso (aprox. 25 Kgr.) le convierte en un práctico y compacto Cromatógrafo portátil, y sus prestaciones le convierten en un instrumento adecuado para las exigencias de cualquier laboratorio de análisis. Esta firma está representada en nuestro país por la firma IZASA, S.A.

El control por teclado, vía microprocesador, pone grandes posibilidades a disposición del usuario, como, por ejemplo, la posibilidad de programar hasta cinco rampas de temperatura, diez archivos de programación para parámetros operacionales, control del rango y polaridad de las señales del detector (doble detector de ionización de llama muy estable y de alta sensibilidad), cronómetro, función de puesta en marcha y parada automática, etc.

Utiliza el sistema on-column, on-detector y, mediante la adición de los accesorios correspondientes, puede trabajar con columnas capilares.

Otra característica importante de este moderno instrumento es su bajo precio, siendo, pues, accesible a la economía de cualquier laboratorio. El equipo se suministra con un conjunto de pequeños accesorios: septums, O rings, medidor de presión, 2 llaves fijas, etc.

CROMATOGRAFO DE GASES, MARCA SHIMADZU, MODELO GC-9AM

Gobernado por microcomputador con

sistema de análisis modular único, de modo que, puerta de inyección, columna y detector están combinados en una unidad modular para facilitar el cambio rápido de condiciones analíticas, evitando así contaminaciones entre muestras. Control independiente de temperatura de inyector y detector. Hasta 4 unidades de análisis con conexión muy sencilla de línea de gases. Indicador de unidad de análisis en uso.



KONTRON, S.A. ha presentado en EXPOQUIMIA-84 su gama completa de equipos para cromatografía líquida de alta presión, así como el resto de equipos dedicados a la Química Analítica: espectrofotómetros, espectrofluorímetros, centrífugas, etc.

Queremos dentro de la línea de cromatografía líquida destacar los siguientes equipos:

DETECTOR UV-VIS UVIKON-722 de doble haz con una excelente estabilidad en todo el rango de longitud de onda.

Scan de longitud de onda lo que simplifica la optimización del detector.

Almacenamiento de línea de base que permite la exacta interpretación incluso en condiciones extremas de gradiente y picos pequeños.

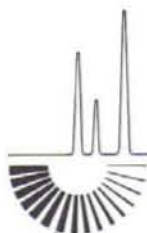
Programación de longitud de onda para bajos niveles de detección.

TRACER MCS-670. Conmutador de columnas.

El Tracer MCS-670 refleja la última tecnología en preparación automática de muestras y cromatografía multidimensional.

Es posible cualquier tipo de enriquecimiento de muestra en guard-column.

Con la combinación de varios métodos de conmutación y materiales de columnas se consiguen fáciles y reproducibles análisis incluso en las más complejas muestras biológicas, pudiéndose utilizar hasta un máximo de doce disolventes.



lasing, s.a.

DIVISION ANALITICA

NUEVO PASADOR AUTOMATICO DE MUESTRAS PARA HPLC CON LECTOR DE CODIGO DE BARRAS

Spectra Physics anuncia la introducción de su nuevo Pasador Automático de Muestras SP-8780 XR.

Esta unidad autónoma automatiza cualquier cromatógrafo de líquidos modular. Permite una operación totalmente integrada con todos los módulos SPECTRA PHYSICS, incluyendo la bomba SP 8700 XR. El control y la comunicación exterior se realiza a través del interface RS-232-C, circuitos "contact closure" y el network, de SPECTRA PHYSICS, LABNET.

Una característica única del nuevo módulo es su capacidad para leer CODIGO DE BARRAS en cada vial de muestra. Así, el código de barras permite una identificación positiva de cada vial y la eliminación de errores en el posicionamiento de las muestras. El código de barras determina el programa a ser empleado en cada muestra, lo que automatiza completamente la puesta en marcha de los sistemas de comunicación LABNET.

El nuevo pasador SP-8780-XR permite:

- Programación vía teclado o desde computador externo.
- Capacidad para 80 muestras con caruseles extraíbles para operación continua sin interrupciones.
- Condiciones de inyección y análisis programables individualmente para cada vial.
- Volúmenes de inyección programables entre 1 y 500 microlitros.
- Lavado y conducción de muestras variables para la inyección de muestras muy viscosas.

Los envíos comenzarán a finales de 1984.

NEWGUARD - BROWNLEE

Nuevo concepto en sistemas de protección de columnas en HPLC

Las separaciones analíticas de rutina en HPLC demandan una larga vida de la columna, tanto para la reducción de los costes como para la obtención de separaciones reproducibles en una misma columna. El nuevo sistema NEWGUARD, de Brownlee Labs., protege la columna de HPLC contra partículas así como contra contaminantes en la muestra.

El NEWGUARD ofrece prestaciones superiores debido al nuevo diseño que selecciona la longitud (1,5 cm.) y el diámetro interno (3,2 mm.) para una geometría óptima. El material de soporte (sílica de 7 micras y porosidad de 300 Å) se ha preparado para una máxima capacidad de protección y un aporte de presión mínimo. Este optimizado diseño tiene un efecto mínimo en los tiempos de retención y forma de los picos.

Los cartuchos desechables poseen un amplio filtro de entrada para la filtración de las muestras. Pueden eliminarse fácilmente partículas y fibra de este filtro.

El soporte permanente de cartuchos y precolumnas HPLC cierra, herméticamente, hasta 7.000 p.s.i. bajo la presión de las manos. No se requieren herramientas para el cambio de columnas o precolumnas. Estas pueden conectarse directamente mediante una unión especial.

Existen 11 diferentes fases estacionarias para NEWGUARD, cubriendo la mayor parte de las aplicaciones existentes. El coste de tres precolumnas, de cualquier fase estacionaria, es de 15.800 pesetas. El soporte para las mismas (de uso indefinido) vale 23.188 pesetas.

Para cualquier información sobre este tema consultar a:

LASING, S.A.
División Analítica
Virgen del Lluç, 94
28027 Madrid
Tels. 268 36 43 - 268 08 79.



PHILIPS

CROMATOGRAFIA DE GASES

PU 4500

Cromatógrafo de reciente aparición, de bajo coste, ideal para el análisis de rutina. Existen diferentes versiones, isotermos o con programación de temperatura y diferentes detectores. Existe una versión diseñada especialmente para columnas capilares.

304

Cromatógrafo de gases modular, controlado por microprocesador, con programación de temperatura que incluye hasta tres rampas. Cinco sistemas de detección diferentes: FID, TC, FPD, EC y ND, pudiéndose utilizar simultáneamente hasta tres detectores.

PU 4700

Inyector automático de muestras para cromatografía de gases con control por microprocesador de todos los parámetros de inyección. Capacidad para 102 muestras.

PU 4750

Analizador "headspace", acoplable a cualquier cromatógrafo, para el análisis de sustancias volátiles en productos no volátiles.

CROMATOGRAFIA DE LIQUIDOS

PU 4000

Equipo modular de gran flexibilidad, integrado por las siguientes unidades: bomba de doble pistón, PU 4010, con ajuste de caudal entre 0.1 y 9.9 ml/min, con una presión máxima de trabajo de 6000 psi; bomba de altas especificaciones LC-XP, con ajuste de caudal en intervalos de 0.01 ml/min y una presión máxima de 10.000 psi. Detectores: PU 4020, de UV con longitud de onda variable; PU 4021, de fluorescencia; PU 4022, de índice de refracción y PU 4023, detector electroquímico. Pro-

gramador de disolventes LC-XP para gradientes de elución, controlado por microprocesador y con capacidad de memoria para 10 programas con 10 segmentos.

INTEGRADORES

PU 4810

Integrador computerizado con registro incorporado. Cinco métodos de calibración y posibilidad de doble canal.

PU 4850

Centro de control cromatográfico con pantalla de rayos catódicos. Controla hasta cuatro sistemas cromatográficos simultáneamente. Visualización en pantalla de los cromatogramas. Programación de los instrumentos a través del teclado o cinta de cassette. Integración de los cromatogramas con visualización en pantalla de la línea de base y posibilidades de corrección de la misma. Registro de los cromatogramas y de los resultados.



WATERS ESPAÑOLA S.A.

La Cromatografía líquida

ESTADO ACTUAL DEL ANALISIS DE AMINOACIDOS POR CROMATOGRAFIA LIQUIDA. UN NUEVO METODO DE DERIVACION PRECOLUMNA UTILIZANDO FENILISOTOCIANATO

El análisis de aminoácidos es cada vez de mayor interés en investigación bioquímica y biotecnológica, donde la información estructural de péptidos y proteínas es importante.

La determinación de aminoácidos es también útil en el campo de la nutrición, tanto humana como animal. Con ello se puede incluir desde el análisis de aminoácidos en una solución parenteral hasta su cuantificación en un hidrolizado de harinas o piensos.

El análisis de aminoácidos se puede dividir en dos grandes subgrupos: Análisis de hidrolizados de péptidos y proteínas, en los que se determinan de 18 a 20 amino-

ácidos, y el análisis de aminoácidos libres presentes en líquidos o medios fisiológicos, que en este caso pueden llegar hasta 40 o más componentes.

El método tradicional de aminoácidos fue desarrollado por Stein y Moore, que efectuaron su separación por intercambio iónico gracias a gradientes escalonados de pH, con distintos eluyentes. La detección, en este caso, se efectúa coloriméricamente, previa derivatización post-columna con ninhidrina. Con este principio se han diseñado gran número de analizadores de aminoácidos existentes en el mercado.

Con la aparición de la cromatografía líquida, y considerando a esta como una técnica instrumental de mayor flexibilidad que un analizador con dedicación exclusiva, se han desarrollado variantes del método clásico de intercambio iónico que incluyen: gradientes continuos, derivatización post-columna con otros reactivos como el OPA además de la ninhidrina, detección UV-Vis o fluorimétrica, etc., que permiten una respuesta más amplia a las distintas necesidades planteadas en el análisis de aminoácidos.

Los recientes métodos de purificación y aislamiento de péptidos y proteínas por cromatografía líquida, utilizando mecanismos de hidrofobicidad (fase inversa), intercambio iónico y tamaño molecular han creado nuevas necesidades en el análisis de aminoácidos aplicado al terreno bioquímico. Teniendo esto presente, los principales objetivos en el desarrollo de nuevos métodos analíticos de aminoácidos por cromatografía líquida, han sido:

- Mayor sensibilidad (nivel de picomol).
- Menor tiempo de análisis (inferior a 15 minutos).
- Detección conjunta de amino e iminoácidos (prolina).
- Respuesta lineal.
- Preparación simple de la muestra y derivado.

Los investigadores de este tipo de metodologías analíticas han realizado sus mayores esfuerzos en técnicas de derivatiza-

ción precolumna y análisis de los correspondientes derivados de los aminoácidos por cromatografía en fase reversa. Actualmente, los derivados más populares son los dansil, OPA y PTH-aminoácidos. Si bien estos métodos proporcionan, casi todos ellos, mayor sensibilidad y rapidez que los métodos de intercambio iónico y derivatización post-columna, se han presentado, en algunos casos, dificultades de estabilidad del derivado, reproductibilidad, interferencias con el reactivo (dansilación) y, en el caso del OPA (ortoftaldehído), ausencia de reactividad con los aminoácidos secundarios (prolina).

Teniendo esto presente, la División de Cromatografía de Waters, de la empresa Millipore, ha desarrollado un nuevo método denominado PICO-TAG, en el que se utiliza el fenilisotiocianato como agente derivatizante. Este reactivo ha sido utilizado desde hace 30 años en la secuenciación de proteínas basándose en la degradación de Edman.

La derivatización de los aminoácidos o hidrolizados de proteínas se realiza a temperatura ambiente con el fenilisotiocianato en solución hidroalcohólica y en presencia de trietilamina. Posteriormente se elimina el exceso de reactivos a presión reducida. Waters tiene comercializado un sistema instrumental denominado PICO-TAG workstation, que facilita estas operaciones, así como el hidrolizado previo de las proteínas.

Los derivados que se obtienen son feniltiocarbamil-aminoácidos que se separan en fase reversa en una columna C18. La detección se realiza en el ultravioleta ya que estos derivados presentan fuerte absorción a 269 nm., siendo posible su cuantificación al nivel de los picomoles.

El análisis es rápido (12 minutos), con buena resolución de los 18 aminoácidos más frecuentes en una proteína (ver cromatograma adjunto). La respuesta es lineal y prácticamente similar para todos los aminoácidos, incluyendo la prolina. De hecho, una de las principales ventajas de este método es que todos los aminoácidos, excep-

grafía líquida los métodos de derivatización precolumna y separación por fase inversa son los más aconsejables. De entre ellos destaca esta última técnica de derivatización con fenilisotiocianato (PICO-TAG) descrita. La validez del método ha sido revalidada para el análisis estructural de proteínas, coincidiendo los valores experimentales, en contenido de aminoácidos, con los valores teóricos.

En la actualidad se está evaluando la aplicación a muestras más complejas, incluidas las fisiológicas.

tuando la lisina, que forma un producto disustituido, tienen respuestas similares. La reproducibilidad en el análisis cuantitativo es del 2-3 por 100 en la escala de los 200 picomoles. Otra de las características fundamentales del método es la estabilidad de los derivados, previa a la cromatografía, que permite la preparación de muestras en grandes series para su posterior análisis cromatográfico.

En resumen, podemos concluir que en la búsqueda de sistemas de análisis rápidos y sensibles de aminoácidos por cromato-

REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUIMICA
GRUPO DE CROMATOGRAFIA Y TECNICAS AFINES

HOJA DE INSCRIPCION

APELLIDOS NOMBRE

Ciudad (DP.....) calle núm.

Industria u Organización

..... Ciudad (Dep.....)

calle núm.

Firma

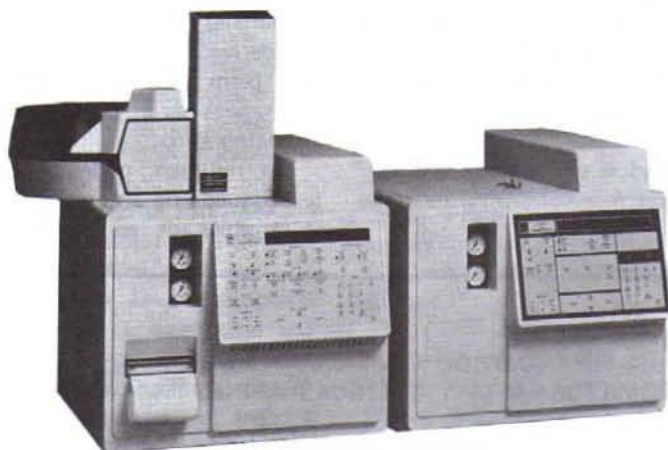
Si desea hacerse Socio del GCTA, rellene y envíe la hoja de inscripción al Secretario del Grupo:

Marta Herráiz - Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines.

Juan de la Cierva, 3 - 28006 MADRID

Cuota anual: 1.000 ptas.

Sólo un cromatógrafo de gases supera al nuevo VARIAN 3300...



¡El nuevo VARIAN 3400!

GC 3300

- Revolucionario sistema de autodiagnóstico que hace mínimos los costes de mantenimiento.
- Control total por microprocesador de las temperaturas de inyectores, detectores y horno, así como rangos y autoceros en los detectores.
- Teclado de membrana de fácil manejo.
- Económico.

GC 3400

- Memorización de hasta cuatro métodos completos.
- Control total del inyector automático, así como de periféricos externos.
- Sistemas de inyección en columna empaquetada, wide-bore y columna capilar incluyendo el On-column de temperatura programable.
- Seis diferentes detectores TCD, FID, ECD, TSD, FPD, HECD todos compatibles con capilares.
- Comunicación con cualquier ordenador a través de salida RS423/232C.



varian

en ESPAÑA con la garantía



Avda. Filipinas, 46 - 28003 Madrid
Tels. 254 66 77-8/254 42 21

empresas colaboradoras del GCTA

PROTECTORAS:

KONIK INSTRUMENTS
PERKIN ELMER HISPANIA, S.A.

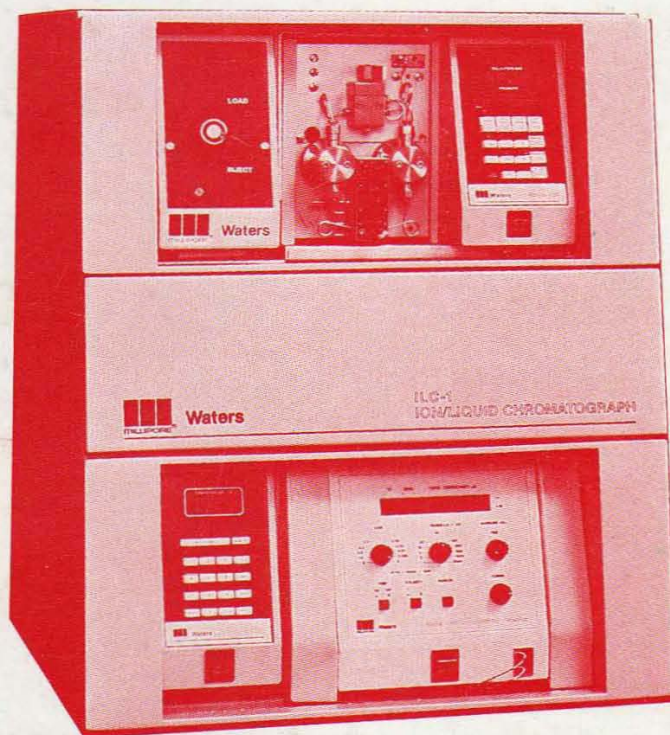
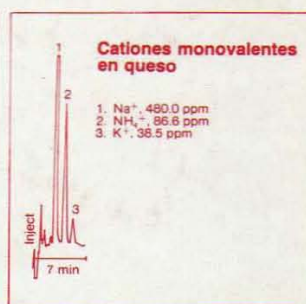
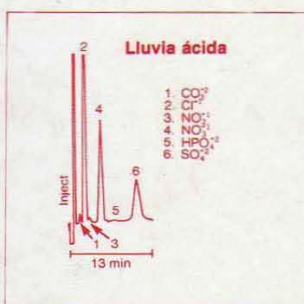
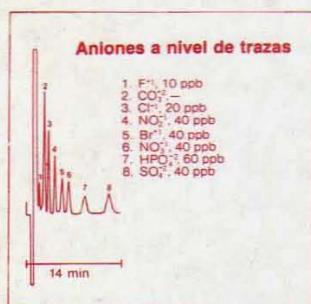
ASOCIADAS:

CES ANALITICA, S.A.
CHEMICONTROL, S.L.
CHROMPACK
HEWLETT PACKARD ESPAÑOLA, S.A.
IZASA, S.A.
KONTRON, S.A.
LASING, S.A.
PHILIPS IBERICA, S.A.E.
SOCIEDAD ESPAÑOLA DEL OXIGENO
SUGELABOR
TEKNOKROMA Ltda.
WATERS ESPAÑOLA, S.A.

Waters

la cromatografía líquida

Serie Waters ILC CROMATOGRAFIA IONICA



MILLIPORE
División Cromatografía Waters

08015 BARCELONA - Entenza, 28 Entlo. - Tel. (93) 325 96 16
28040 MADRID - Explanada, 5 - Tel. (91) 253 63 69