

Streszczenie

Niniejsza praca poświęcona jest rozdzielaniu mieszanin enancjomerów metodą chromatografii achiralnej z wykorzystaniem zjawiska samo-dysproporcjonowania enancjomerów (SDE). Celem dysertacji było opracowanie alternatywnej wobec chromatografii chiralnej (CCh) metody separacji mieszanin tych związków, która może być zastosowana w praktyce przemysłowej.

W ramach przeprowadzonych badań wstępnych opracowano procedurę doboru warunków prowadzenia chromatografii achiralnej (ACh) sprzyjających wystąpieniu zjawiska SDE. Na tym etapie przeprowadzono również pomiary polarymetryczne dla wybranych chiralnych związków modelowych, na podstawie których wykluczono możliwość tworzenia się asocjatów w fazie ciekłej. Wyniki tych badań stanowiły podstawę sformułowania hipotezy mechanizmu SDE, który opiera się na oddziaływaniach międzycząsteczkowych enancjomerów w fazie zaadsorbowanej na powierzchni złoża krzemionkowego.

W cyklu kolejnych badań zrealizowanych w niniejszej pracy wyznaczono wpływ rodzaju i stężenia modyfikatora eluentu na selektywność chromatografii achiralnej prowadzonej w trybie izokratycznym oraz gradientowym. W celu uzyskania opisu ilościowego przebiegu tych procesów sformułowano model izotermy adsorpcji, który opisywał mechanizm wielowarstwowej adsorpcji enancjomerów, uwzględniając tworzenie się homochiralnych i heterochiralnych asocjatów. Równanie izotermy zostało zaimplementowane do równowagowo-dyspersyjnego modelu dynamiki kolumny chromatograficznej i zweryfikowane eksperymentalnie.

Przeprowadzony cykl badań nad zjawiskiem SDE wraz z jego opisem matematycznym doprowadziły do opracowania procesu zintegrowanego składającego się z etapu chromatografii achiralnej i chiralnej, pozwalającego na efektywne rozdzielanie mieszanin enancjomerów. Metodę tę zaprezentowano w różnych wariantach, umożliwiając rozdzielanie mieszanin nieracemicznych lub racematów. Zaprojektowany proces zoptymalizowano oraz zweryfikowano eksperymentalnie.

Rozdzielanie nieracemicznych mieszanin enancjomerów przeprowadzono także w trybie frontalnym chromatografii achiralnej. Do opisu procesu opracowano uproszczony model dynamiki oparty na teorii równowagi, który pozwolił na szybką optymalizację jego wydajności.