Modélisation de la rétention de phénols séparés par CLHP – PI avec une phase mobile méthanol – eau

Modelling the retention of phenols separated by RP – HPLC with a methanol – water mobile phase.

Djelloul Messadi *, Hamza Boufenaya, Leila Lourici, Mohamed Lotfi Souici

Laboratoire de Sécurité Environnementale et Alimentaire (LASEA),
Université Badji Mokhtar Annaba, BP 12, 23 000, Annaba, Algérie.

Soumis le : 02.07.2014 *Révisé le 09.02.2015* *Accepté le : 16.02.2015*

ملخص

الإستبقاء (log k) لمجموعة غير متجانسة من الفينولات مفصولة بالطريقة الإيزوكراتيكية (isochratique) للكروماتوغرافيا السائلة عالية الأداء (HPLC-PI) ذات الطور المعكوس بإستعمال عمود بارتيزيل(partisil ODS) ، مع طور متحرك متكون من ميثانول – ماء، تم ربط هذا الإستبقاء مع الشروط التجريبية (درجة الحرارة، التجزئة الحجمية، طور مساعد-مذيب عضوي) و معامل التقسيم أكتانول –ماء لموريقوشي (Moriguchi) MlogP محسوب بمساعدة البرنامج الألي DRAGON.
مجموعة تشكيل النمودج (40 عنصر) تحصلنا عليها بإستعمال خوارزمية DUPLEX، فتمكنا من إيجاد نمودج يوفر الفرضيات لنمودج إحصائي خطي ذو تأثير ثابت،قوي،وله قابلية تصديق داخلية ليست بعيدة عن القابلية التعديلية .
التصديق الخارجي لمجموعة تحتوي على 26 عنصر تؤكد القابلية التنبؤية الجيدة ل لوغاريتم معامل التقسيم log k التي لم تستعمل في تشكيل النمودج.

الكلمات الدالة: *فينولات –كروماتوغرافيا سائلة عالية الأداء –طور معكوس – نمودج QSRR*

Résumé

La rétention (log k) d'un mélange hétérogène de phénols séparés en régime isochratique par CLHP – PI, sur une colonne Partisil ODS, avec une phase mobile méthanol – eau a été reliée aux conditions d'analyse (température T ; fraction volumique, φ, du co-solvant organique) et au coefficient de partage n-octanol / eau de Moriguchi (M log P) calculé à l'aide du logiciel DRAGON.
L'ensemble de calibrage (40 éléments), obtenu en appliquant l'algorithme DUPLEX, permet de calculer un modèle vérifiant les hypothèses d'un modèle statistique linéaire à effets fixes, robuste, et dont la capacité de prédiction interne n'est pas trop dissemblable de son pouvoir d'ajustement. La validation statistique externe, sur un ensemble test de 26 éléments, atteste de la bonne capacité prédictive des log k n'ayant pas servi au calcul du modèle.

Mots-clés: *Phénols – CLHP / PI – Rétention –Modèle QSRR.*

Abstract

The retention (log k) of an heterogeneous set of phenols separated by reversed phase chromatography (RP – HPLC) on a Partisil ODS column by using isochratic elution with methanol – water has been correlated to analytical condition (temperature T; volume fraction, φ, of organic co-solvent) and Moriguchi n-octanol / water partition coefficient calculated with DRAGON software for molecular modeling.
The DUPLEX algorithm was used to split the original data set into a training set (40 objects) and a validation set (26 objects). The proposed model, which fulfils the assumptions of a linear statistical model with fixed effects, is robust, and has internal predictivity not too dissimilar from fitting power. The model is also predictive for objects not used in the model development (statistical external validation on validation set objects).

Key-words: *Phenols – RP / HPLC – Retention – QSRR model*

Auteur correspondant : d_messadi@yahoo.fr
©UBMA – 2015