

UTILITAT PER AL CÀLCUL DE pH DE FASES MÒBILS
ACETONITRIL-SOLUCIÓ AMORTIDORA AQUOSA
Xavier Subirats - Versió 1.0 - 2007

INTRODUCCIÓ

Aquest full de càlcul permet calcular el pH d'una fase mòbil que contingui acetonitril com a modificador orgànic, a qualsevol fracció de solvent orgànic compresa entre el 0 i el 60% en volum, a 25°C.

Els sistemes amortidors estudiats inclosos en la *versió 1.0* són:

- Àcid acètic/acetat
- Amoni/amoniac
- Àcid cítric/dihidrogenocitrat/hidrogenocitrat/citrat
- Àcid fosfòric/dihidrogenfosfat/hidrogenfosfat

Les concentracions de la solució amortidora aquosa (abans d'addicionar-hi l'acetonitril) poden estar compreses entre 0.001 i 0.1 mol·L⁻¹.

INSTRUCCIONS

1. S'escull el sistema amortidor (*acetic, citric, phosphoric* o *ammonium*)
2. S'introdueix el percentatge en volum d'acetonitril en la fase mòbil; aquest valor ha d'estar comprès entre 0 i 60% (p.ex. 60)

| | | |
|---|----|---------|
| MeCN fraction in hydroorganic mixture (% v/v) | 60 | (0-60%) |
|---|----|---------|

3. S'introdueix el pH inicial de la solució aquosa, abans d'addicionar-hi l'acetonitril (p.ex. 5.00).

| | | |
|-----------------|------|--------|
| $w_w \text{pH}$ | 5.00 | (0-14) |
|-----------------|------|--------|

4. S'introdueix la concentració inicial de la solució amortidora en la fase aquosa, abans d'addicionar-hi l'acetonitril; aquest valor ha d'estar comprès entre 0.001 i 0.1 mol·L⁻¹ (p.ex. 0.01)

| | | |
|--|-------|--------------|
| Initial aqueous concentration - c_T (mol·L ⁻¹) | 0.01 | (0.001-0.1M) |
| log c_T | -2.00 | |

5. S'obté el resultat en dues escales diferents de pH: $s_w \text{pH}$ i $s_s \text{pH}$

| | |
|-----------------|------|
| $s_w \text{pH}$ | 6.37 |
| $s_s \text{pH}$ | 6.81 |

BIBLIOGRAFIA

Retention of ionisable compounds on high-performance liquid chromatography XV. Estimation of the pH variation of aqueous buffers with the change of the acetonitrile fraction of the mobile phase.

Xavier Subirats, Elisabeth Bosch, Martí Rosés

Journal of Chromatography A, 1059 (2004) 33–42

(doi:10.1016/j.chroma.2004.09.085)