

演 題	表計算ソフトによるクロマトグラフィーのシミュレーション(2)	
発表者(所属)	菅田 節 朗 (共 立 薬 大)	
連 絡 先	〒105-8512 東京都港区芝公園 1-5-30 共立薬科大学 Tel 03-5400-2480 E-mail: sugata-st@kyoritsu-ph.ac.jp Fax 03-3434-5343	
キーワード	Spreadsheet, Chromatography, Nonlinear Isotherms, Simulation	
開発意図、適用分野、期待効果特徴など	過去に、クロマトグラフィーの基礎をわかりやすく理解するためのガラス容器を用いたモデルを他誌に発表した。今回は、その中の非線形等温線の場合を表計算ソフトを用いてリアルに、動的に再現した。	
環 境	適応機種名	DOS/V
	OS 名	MS-Windows 98/Me
	ソース言語	MS-EXCEL 97/2000
	周辺機器	
流通形態 (右のいずれかにをつけてください)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販ソフトの頒布は行わない ・その他	具体的方法
	・未定	

1. はじめに

表計算ソフト(スプレッドシート)はワープロソフトと並び最も一般社会で使用される応用ソフトのひとつである。計算結果を表示させるためのグラフ機能も豊富に準備されている。一般的に使っている限り、使用法は容易であるが表現には限界がある。

クロマトグラフィーの学習において、等温線の形とクロマトグラムとの関係はすぐには理解しがたい。著者らは、そのよりよい理解のために比較的単純なガラス容器を用いたモデル¹⁾(以下、試験管モデル、と略す)を発表した。このモデルは大変分かりやすいが、単純ではあるが特殊な形をしたガラス容器を必要とするし、その手操作はやや煩わしい。そこでこのモデルのコンピューターシミュレーション化をBasic言語を用いて行った²⁾。前回発表では、より一般的に使用されるようになった表計算ソフトを一般的に使用して線形等温線の場合について、固定(S-)相と移動(M-)相間の溶質の分配平衡とM-相の移動が交互に繰り返される表現³⁾も取り入れ、よりリアルな動的なものを発表した⁴⁾。今回は、非線形等温線の場合を表計算ソフトを用いてリアルに、動的に再現した。

2. 基になる考え方と計算式

非線形等温線は、Langmuir型の吸着等温式： $n_s = abn_m / (1 + bn_m)$ (上に凸)と $n_m = abn_s / (1 + bn_s)$ (下に凸)を用いた。クロマトグラフィーはdiscrete flow modelの考え方に基づいた。平

衡とM-相の移動を n 回繰り返した時の、任意の段 j における溶質の分布量は、表計算ソフトを用いる既存の方法⁵⁾で計算した。ラッパ型の試験管の形は円錐台の連なったものとして計算⁶⁾した。ただし深さ dh = 一定で計算を繰り返した。

3. プログラムの概要と結果

カラム内で物質が、上に凸(または下に凸)の等温線に基づきM-相とS-相に分配される過程(平衡)とM-相の移動を繰り返しながら分離され、カラム外に出たM-相がクロマトグラムになるようすを、試験管モデル¹⁾のシミュレーションという形で、学習者が納得しながら逐一動かせる(必要なら元に戻せる)ようにした。結果は、図に示すように、試験管モデル¹⁾をリアルに再現できた。比較のため、線形等温線に従う物質の分離のようすも同時に描かせた。前回⁴⁾と今回の発表で、線形と非線形等温線ともに試験管モデル¹⁾を再現できた。パソコンだから、ガラス容器も面倒な手操作も不要で、かつ任意の定数で手軽にシミュレーションできる。技術面では、立体的表現と動的表現は前回の方法を踏襲した。

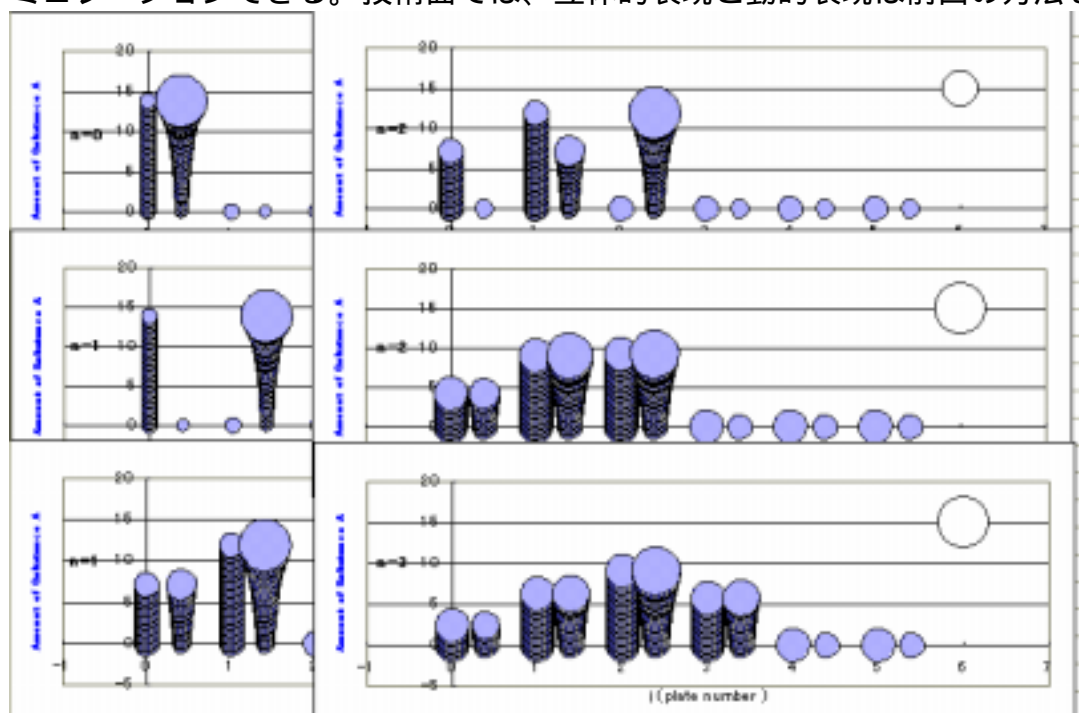


図1. カラム内での溶質移動(上に凸の非線形等温線、各段の左がS、右がM相)

$n=0$ と 3 は平衡状態のみ示した。 $n=1$ と 2 はM相の移動と平衡状態を示した。右上は基準円。

4. 参考文献

- 1) S.Sugata and Y. Abe, *J.Chem.Educ.*, 74, 406(1997).
- 2) S.Sugata and Y. Abe, *J.Chem.Software*, 6, 127(2000).
- 3) S.Sugata, *Ann.Rept.Kyoritsu Coll.Pharm.*, 40, 27(1995).
- 4) 菅田節朗, 化学ソフトウェア学会年会2001研究討論会講演要旨集, p38-39(2001).
- 5) B.R.Sundheim, *J.Chem.Educ.*, 69, 1003(1992).
- 6) S.Sugata, *ACH-Models Chem.*, 136, 349(1999).