

# 超臨界混合流体を用いた キラル吸着分離過程のモデル化とパラメータ決定

研究代表者 船造 俊孝 研究員

## 緒言

超臨界流体クロマトグラフィー(SFC)は製薬関連物質などのキラル分離に有力な方法であり、急速に普及しつつある。分離条件の最適化には各成分の保持時間の推算が不可欠であるが、その有効な推算方法は確立されていない。本研究は、SFCにおけるキラル化合物の保持因子の推算のために、保持因子と分離条件との相関式を求めることを目的とした。

## 結果および考察

保持因子は共溶媒の組成の増加にともない一律に減少し連続的に変化するように見られるが、CO<sub>2</sub>と共溶媒(ここではメタノール)の臨界軌跡近傍と遠方とは保持因子に及ぼす操作条件の影響が異なることを明らかにした。臨界軌跡の近傍と遠方とは等温圧縮率 $\beta_T$ (Eq.(1))の大きさを指標とし、 $\beta_T < 0.01 \text{ MPa}^{-1}$ を遠方、 $\beta_T > 0.01 \text{ MPa}^{-1}$ を近傍とした。

$$\beta_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (1)$$

1. 臨界軌跡から遠方の領域—保持因子 $k$ は移動相密度の関数として表され、具体的には溶解度 $y$ の温度、密度( $\rho$ )依存性を表すChrastil式(Eq.(2))型の相関式Eq.(3)で表せた。(Fig.2)

$$\ln y = \frac{A_1}{T} + A_2 + A_3 \ln \rho \quad (2)$$

$$\ln k = \frac{B_1}{T} + B_2 + B_3 \ln \rho \quad (3)$$

2. 臨界軌跡近傍の領域—保持因子 $k$ はEq.(3)では表せず(Fig.3)等温圧縮率 $\beta_T$ と相関できた。(Fig.4)

## 実験

SFC装置は市販のシリンジポンプ、検出器、背圧弁等を組み立てたものであり、その構成をFig.1に示す。キラル化合物としてtrans-stilbene oxideを用いた。

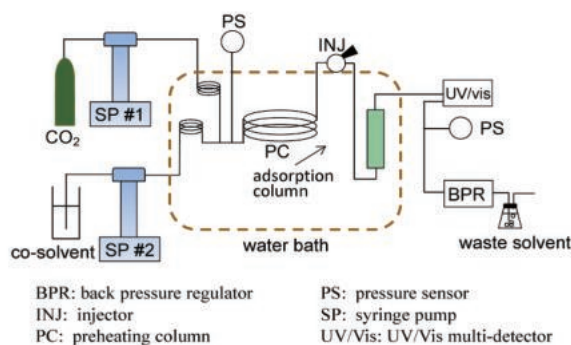


Fig. 1 SFC装置概略

## 結論

SFCにおけるキラル化合物の保持因子は超臨界流体/混合流体の臨界点/臨界軌跡からの遠近により2つの領域に分けられ、遠方では移動相密度に、近傍では移動相の等温圧縮率と相関できた。

## 発表論文

T. Funazukuri et al., J. Chromatogr. A, 1527, 91(2017).  
T. Funazukuri, J. Supercrit. Fluids, 134, 28 (2018).

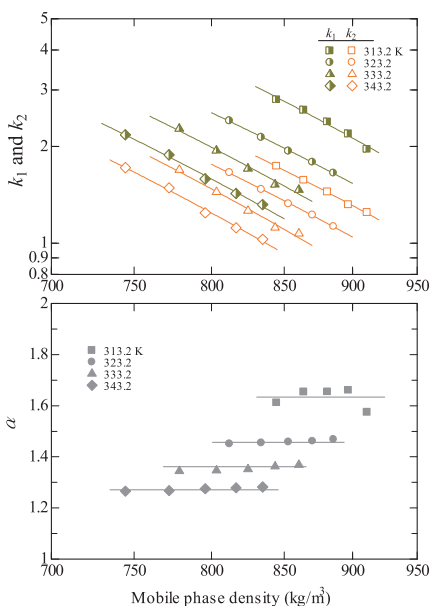


Fig. 2.  $k_1$  and  $k_2$ , and separation factor  $\alpha$  vs. density ( $\beta_T < 0.01$ ).

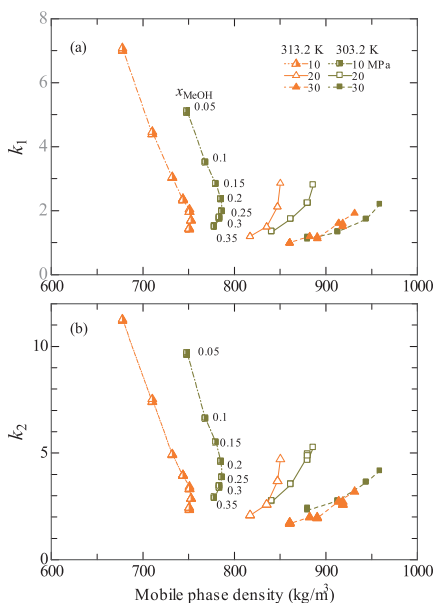


Fig. 3.  $k_1$  and  $k_2$  vs. density ( $\beta_T > 0.01$ )

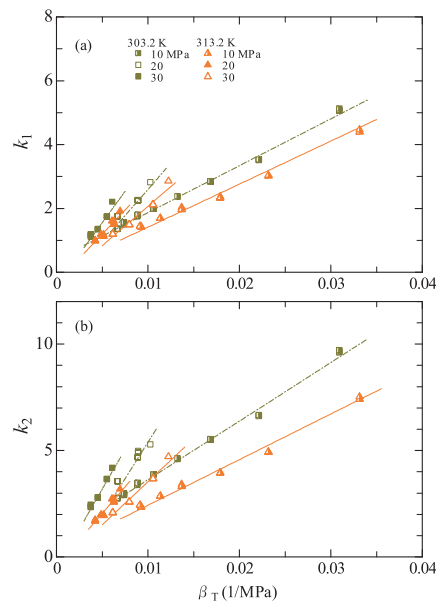


Fig. 4.  $k_1$  and  $k_2$  vs.  $\beta_T$