



فصلنامه

دانش آزمایشگاهی ایران

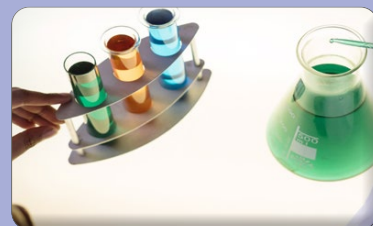
سال یازدهم ■ شماره ۳ ■ پاییز ۱۴۰۲ ■ شماره پیاپی ۴۳

ISSN 2538-3450



تعیین و ارزیابی منابع عدم قطعیت در آزمون کشش

حضور شبکه آزمایشگاهی و مراکز عضو در چهاردهمین نمایشگاه بین‌المللی فناوری نانو



ارزیابی عدم قطعیت اندازه‌گیری در
آزمایشگاه‌ها با ارائه یک نمونه عینی



مروری بر اهمیت و طبقه‌بندی
روش واکنش زنجیره پلیمرز در زمان واقعی
و کاربرد آن در صنایع غذایی



ساخت نانوزیست کامپوزیت کیتوسان-
هالوسیت به‌عنوان جاذب برای روش
ریزاستخراج فیلم نازک



کالیبراسیون مرتبه بالا و آنالیز داده‌ها در
کروماتوگرافی



نقش پایگاه داده COMAR برای مواد مرجع

نویسندگان

فریده باتقوا^{۱*}حمید حیدری^۲

۱. دکترای شیمی تجزیه، کارشناس آزمایشگاه تحقیقاتی

اکسیر تجهیز آزما

۲. عضو کارگروه کروماتوگرافی

*exirtajhizazma@gmail.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۷/۰۱

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۸/۰۲

کالیبراسیون مرتبه بالا و آنالیز داده‌ها در کروماتوگرافی

چکیده

واژه‌های کلیدی

کرومتری، مدل سه گانه، کروماتوگرافی مایع-آشکارسازی
آرایه دیودی، کروماتوگرافی مایع-اسپکترومتري جرمی.

با توسعه سریع ابزارهای کروماتوگرافی چند کاناله، آنالیز داده‌های چندتایی و کالیبراسیون تانسوری، مورد توجه بیشتری قرار گرفته‌اند. با ترکیب روش‌های کروماتوگرافی و کمومتریکس مبتنی بر روش‌های کالیبراسیون مرتبه بالا، برخی از مشکلات گذشته در آنالیز، به‌عنوان مثال، مراحل آماده‌سازی پیچیده، زمان‌های شستشوی طولانی و یا حتی نتایج آنالیز اشتباه، قابل اجتناب/بهبود هستند. این مقاله یک نمای کلی از داده‌های مرتبه دوم تا سوم را ارائه می‌کند که نظریه‌ها و کاربردها را همراه با پردازش داده‌های مربوطه در کروماتوگرافی پوشش می‌دهد.

مقدمه

کمومتری را می‌توان به‌عنوان استفاده از روش‌های ریاضی و یا آماری برای آنالیز شیمیایی تعریف کرد. در کمومتری نیز مانند هر مدلی در ریاضیات، نیاز به استفاده از اعداد به‌دست آمده از مقادیر اندازه‌گیری شده متغیرهای شیمیایی وجود دارد [۱ و ۲]. برای شیمی تجزیه، تعداد زیادی روش ابزاری وجود دارد که مزایای خاصی برای اندازه‌گیری متابولیت‌ها و یا ماتریس‌های خاص دارند. از این رو، می‌توان به روش‌های طیف‌سنجی (مادون قرمز، فرابنفش مرئی، اشعه ایکس و غیره)، طیف‌سنجی جرمی، کروماتوگرافی، الکتروشیمیایی و حرارتی و روش‌های ترکیبی اشاره کرد [۳ و ۴]. پیشرفت‌ها در الکترونیک و پردازش داده‌ها به کمک رایانه، ابزار قدرتمندی را فراهم کرده است که اطلاعاتی بیش از آنچه که با استفاده از روش‌های قدیمی تجزیه و تحلیل داده‌ها قابل آنالیز باشد، به‌دست می‌آورند. بنابراین، در این مرحله، کمومتری به‌عنوان انتخاب ارجح، برای آنالیز این داده‌های پیچیده به نظر می‌رسد. از این رو، در این مقاله به معرفی این موضوع می‌پردازیم.

معرفی

کروماتوگرافی شامل روش‌های جداسازی براساس تقسیم آنالیت‌ها بین فاز متحرک و فاز ثابت است. به دلیل حساسیت، گزینش‌پذیری و تکرارپذیری بالا، از کروماتوگرافی به‌طور گسترده در صنایع غذایی، علوم دارویی و فناوری محصولات طبیعی استفاده می‌شود. تنوع روش‌های کروماتوگرافی، امکان آنالیز طیف وسیعی از متابولیت‌ها، گازهای آلیفاتیک با وزن مولکولی کم تا مواد پلیمری پیچیده با وزن مولکولی بالا را فراهم می‌کند.

تاکنون روش‌های کروماتوگرافی زیادی توسعه یافته‌اند و می‌توان آن‌ها را براساس ویژگی‌های مختلف طبقه‌بندی کرد. براساس یک نوع تقسیم‌بندی، می‌توان آن‌ها را به کروماتوگرافی ستونی و کروماتوگرافی مسطح تقسیم نمود. همچنین کروماتوگرافی گازی و کروماتوگرافی مایع براساس حالت فیزیکی فاز متحرک طبقه‌بندی می‌شوند. علاوه بر این، دسته‌های بسیار دیگری نیز وجود دارند که با ویژگی‌های دیگر (به‌عنوان مثال، سازوکار جداسازی، روش‌های خاص) طبقه‌بندی می‌شوند. در هر صورت، طبقه‌بندی کروماتوگرافی خارج از محدوده این مقاله است.

هدف از کروماتوگرافی، جداسازی اجزای یک مخلوط است. این مخلوط در سیالی به نام فاز متحرک که آن را از طریق ساختاری که ماده دیگری به نام فاز ساکن را در خود نگه می‌دارد، حل می‌شود. جداسازی براساس تقسیم تقاضی بین فاز متحرک و ثابت انجام می‌شود. تفاوت‌های جزئی در ضریب تقسیم یک ترکیب، منجر به باقی ماندن در فاز ثابت می‌شود که بر جداسازی تأثیر گذار است.

امروزه به دلیل ویژگی جداسازی منحصر به فرد، روش‌های کروماتوگرافی به ابزاری ضروری برای آنالیز و تحقیقات معمول در صنایع دارویی، زیست‌پزشکی، غذایی و محیطی تبدیل شده‌اند. با این حال، دو ایراد اصلی وجود دارد که باید برطرف شوند / بهبود یابند. مورد اول در مورد خود نمونه است. هنگامی که نمونه‌های ماتریس پیچیده آنالیز می‌شوند، برخی از روش‌های پیش آماده‌سازی خسته‌کننده اما مناسب همچون استخراج و خالص‌سازی، برای حذف تداخل‌های بالقوه موجود در ماتریس‌های پیچیده ضروری هستند. بهینه‌سازی این روش‌ها به نسبت خسته‌کننده بوده و استفاده از حجم زیادی از مصرف حلال‌ها اجتناب‌ناپذیر است که این روش را غیراقتصادی و ناسازگار با محیط‌زیست می‌کند. علاوه بر این، در آنالیزهای کروماتوگرافی قدیمی، هنگامی که یک نمونه پیچیده آنالیز می‌شود، همپوشانی بین آنالیت‌ها و اجزای ماتریس بیشتر مشاهده می‌شود؛ در نتیجه، زمان طولانی یا شرایط کروماتوگرافی بسیار پیچیده‌تر برای جداسازی مورد نیاز است. به‌طور کلی، زمان شویش برای هر نمونه اغلب ۳۰ تا ۵۰ دقیقه طول می‌کشد که بسیار زمان‌بر و ناکارآمد است. در عین حال، برخی مشکلات دیگر مانند رانش خط پایه،

تغییر در شکل پیک‌ها، استخراج ناقص آنالیت‌ها و جابجایی در زمان شویش نیز ممکن است کیفیت نتیجه نهایی آنالیز را کاهش دهد. مشکل دیگر کروماتوگرافی به دلیل جنبه جهانی آن است. در حال حاضر صدها ستون کروماتوگرافی مختلف وجود دارد که می‌توان آن‌ها را از بازار تهیه کرد و ستون‌های جدید به‌طور دائم در حال توسعه هستند. با این حال، هنگامی که با تعداد زیادی از ستون‌های احتمالی مواجه می‌شویم، برای کارشناسان دشوار است که مناسب‌ترین ستون برای یک شرایط خاص را انتخاب کنند. در همین حال، بسیاری از آزمایشگاه‌ها و مؤسسات عمومی ممکن است تمام فازهای ثابت موجود را نداشته باشند و عملکرد ستون ممکن است در طول زمان و نگهداری طولانی‌مدت و یا استفاده در آنالیزهای مداوم بدتر شود [۴]. بنابراین، کارشناسان اغلب، زمان زیادی را در جستجوی مناسب‌ترین ستون از چندین فاز ثابت مختلف برای تحلیل تلف می‌کنند. همه کاستی‌های فوق ممکن است مانع از توسعه بیشتر کاربردهای کروماتوگرافی شود.

یکی از روش‌های فعلی در آنالیز کمی، اجتناب از مراحل خسته‌کننده آماده‌سازی نمونه و شویش‌های طولانی کروماتوگرافی، بهره‌برداری از توانایی ابزارهای پردازش داده مدرن با استفاده از تفکیک ریاضی اجزای هم شویش^۱ است [۵]. ترکیب ابزارهای کموتری مناسب همراه با داده‌های طیفی کروماتوگرافی و یا داده‌های جرمی کروماتوگرافی ممکن است مشکل را حل کند / بهبود دهد. با صرف زمان کمتر و مصرف حلال کمتر می‌توان نتایج کمی بهتری به‌دست آورد. کالیراسیون چند مرتبه (مرتبه دوم و سوم) براساس «جداسازی ریاضی» روشی ارزشمند در زمینه آنالیز شیمیایی است که می‌تواند تداخلات بالقوه را کالبره کند و پیک‌های هم شویش را با موفقیت در نمونه‌های واقعی با حداقل مراحل آماده‌سازی نمونه حل کند. همچنین پروفایل غلظت دقیق اجزای مورد نظر را نیز می‌توان به‌دست آورد. به‌طور کلی، این ویژگی به «مزیت مرتبه دوم» اشاره می‌کند که پتانسیل بسیار زیادی در آنالیز چند مرتبه دارد که اخیراً به کانون تحقیقات نظری و کاربردهای عملی تبدیل شده‌است. ترکیب کروماتوگرافی با کالیراسیون مرتبه بالاتر، دارای مزایایی است. از جمله می‌تواند مراحل آماده‌سازی خسته‌کننده چند مرحله‌ای و جستجوی شرایط پیچیده جداسازی بهینه در کروماتوگرافی را ساده کند و توانایی‌های بالقوه را برای آنالیز نمونه‌های مختلف با تداخل‌های مختلف در یک زمان نشان دهد. روش‌های آماده‌سازی خسته‌کننده را می‌توان با استفاده از «جداسازی ریاضی» به جای روش‌های قدیمی‌تر «جداسازی فیزیکی/شیمیایی» جایگزین کرد. روش کروماتوگرافی مایع همراه با روش‌های مرتبه دوم کالیراسیون نیز محبوب است چرا که می‌تواند به سرعت و به‌طور هم‌زمان چندین ترکیب را در پس زمینه‌های پیچیده با تداخل‌های ناشناخته تعیین و پیک‌های هم شویش را جدا و انحرافات خطوط پایه را حذف کند [۶].

طرفه، سه طرفه، چهار طرفه و N-طرفه مربوطه را ایجاد کنند. کالیبراسیون تانسور مرتبه صفر به‌عنوان کالیبراسیون تک متغیره نیز نامیده می‌شود. روش کالیبراسیون تک متغیره، دارای محدودیت‌هایی در کاربرد آن است زیرا به گزینش‌پذیری کامل برای سیگنال‌های آنالیت‌های هدف نیاز دارد. به جز کالیبراسیون تک متغیره برای آنالیز داده‌ها، سایر کالیبراسیون‌ها به‌عنوان کالیبراسیون چند متغیره شناخته می‌شوند. آنالیز تانسور مرتبه دوم و تانسور مرتبه بالاتر به‌عنوان کالیبراسیون چند متغیره یا چند جزئی نشان داده می‌شود.

علاوه‌بر این، شرح مفصلی برای انواع مختلف نمونه نیز ارائه شده‌است. براساس توابع مختلف، نمونه‌ها را می‌توان به کالیبراسیون، پیش‌بینی و مجموعه‌های واقعی^۷ تقسیم کرد. مجموعه‌های واقعی شامل نمونه‌های پیش‌بینی شده (شامل آنالیت‌های هدف) و یا نمونه‌های واقعی (اعم از اینکه شامل آنالیت‌های هدف یا ناشناخته باشند) هستند. اجزای موجود در نمونه‌های مورد استفاده برای کالیبراسیون و اعتبارسنجی به‌طور معمول، «معلوم^۸» و یا «مورد انتظار^۹» نامیده می‌شوند، که در این مجموعه‌ها انتظار می‌رود در نمونه‌های واقعی وجود داشته باشند. اجزای مورد انتظار را می‌توان بیشتر به «کالیبره شده» و «کالیبره نشده» تقسیم کرد. غلظت‌های اولیه مورد استفاده برای کالیبراسیون، از قبل طراحی شده و معلوم است؛ در حالی که اجزای «کالیبره شده» در مجموعه‌های واقعی نیز می‌توانند در دسترس باشد که شامل آنالیت‌های (مورد نظر می‌شود. از سوی دیگر، اجزایی که فقط در مجموعه‌های واقعی هستند، «ناشناخته^{۱۰}» و یا «غیر منتظره^{۱۱}» و همچنین تداخل‌های بالقوه نامیده می‌شوند.

تئوری

• مدل‌های چند خطی

با توجه به نوع داده و ویژگی تقارن چرخه‌ای داخلی آن، مدل‌های چند خطی را می‌توان به مدل‌های سه خطی^{۱۲}، چهار خطی^{۱۳}، پنج خطی^{۱۴} و حتی خطی بالاتر تقسیم کرد. در آنالیز کروماتوگرافی همراه با کالیبراسیون چند راهه، به‌طور معمول از مدل‌های سه خطی و چهار خطی استفاده می‌شود.

هارشمن [۹] همراه با کارول و چانگ [۱۰] برای اولین بار مدل آنالیز فاکتور مشابه^{۱۵} را در سال ۱۹۷۰ پیشنهاد کردند. در این مدل سه خطی، هر عنصر X_{ijk} شامل یک آرایه سه طرفه با ارزش واقعی $X(IJKL)$ است. در مدل چهار خطی از آرایه داده چهار طرفه با ارزش واقعی $X(IJKL)$ ، که در آن، هر عنصر X_{ijkl} را می‌توان بیان کرد.

تاکنون الگوریتم‌های زیادی برای تجزیه آرایه‌های داده‌های چند مرتبه پیشنهاد شده‌اند که ابزارهای جایگزینی برای شیمی دانان تجزیه به‌منظور مطالعه راحت بدنه آرایه‌های داده چند مرتبه ارائه کرده‌اند. چندین روش نیز در «دانشنامه شیمی تحلیلی» [۷] و «تحلیل عاملی در شیمی» [۸] به‌طور مفصل توضیح داده شده‌است. در این مقاله نیز مروری بر مدل‌های چند خطی، ویژگی تقارن چرخه‌ای چند مرتبه، الگوریتم‌های کالیبراسیون چند مرتبه، تخمین رتبه شیمیایی، جعبه ابزار برای کالیبراسیون چند مرتبه و سایر مسائل و کاربردهای اساسی در کروماتوگرافی برای کمک به خوانندگان در درک سیستمی و فشرده در مورد الگوریتم‌ها ارائه شده‌است.

اصطلاحات و نامگذاری در داده‌های چند مرتبه

برای تسهیل درک خوانندگان در هنگام برخورد با آنالیز چند متغیره در آرایه‌های داده چند مرتبه، لازم است اصطلاحات و نامگذاری مورد استفاده در داده‌های چند مرتبه معرفی شود.

مرتبه صفر^۲ مربوط به ابزارهایی است که در هر نمونه، یک پاسخ واحد تولید می‌کنند؛ به‌عنوان مثال، خوانش داده‌های یک pH متر یا مقدار جذب در یک طول موج. داده‌های مرتبه اول به‌عنوان یک بردار مرتبه اول برای یک نمونه منفرد، مانند طیف‌های UV، فلورسانس، مادون قرمز و رزونانس مغناطیسی هسته‌ای مرتب می‌شوند. داده‌های مرتبه دوم زمانی تشکیل می‌شوند که داده‌های ماتریسی را بتوان برای یک نمونه به‌دست آورد. دو راه برای دستیابی به داده‌های مرتبه دوم وجود دارد:

۱. استفاده از یک ابزار منفرد؛ به‌عنوان مثال، طیف‌سنج تهیج-نشر^۳ و یا طیف‌سنج آرایه دیود برای بررسی سینتیک یک واکنش شیمیایی.

۲. استفاده از ابزارهای کوپل شده مانند کروماتوگرافی مایع با کارایی بالا - تشخیص آرایه فتودیود^۴ و یا کروماتوگرافی مایع - طیف‌سنجی جرمی^۵.

هنگامی که داده‌های مرتبه دوم که از یک سری نمونه به‌دست آمد، کالیبراسیون مرتبه بالا و آنالیز داده‌ها در کروماتوگرافی (نمونه‌های کالیبراسیون و نمونه‌های پیش‌بینی^۶) در یک جهت روی هم چیده می‌شوند، آرایه سه بعدی که به آن آرایه سه طرفه نیز گفته می‌شود، می‌تواند به‌دست آید و داده‌های مربوطه به‌طور معمول به‌عنوان داده‌های سه طرفه شناخته می‌شوند. بنابراین، یک سری نمونه در یک ردیف، به‌عنوان مرتبه صفر (اسکالر)، مرتبه اول (بردار)، مرتبه دوم (ماتریس)، مرتبه سوم (آرایه سه طرفه) و تانسورهای مرتبه بالاتر قرار می‌گیرند که می‌توانند به ترتیب مجموعه داده‌های یک طرفه، دو

برخی مسائل اساسی مرتبط

روش هم‌ترازی پیک^{۱۹} کروماتوگرافی

هم‌ترازی پیک کروماتوگرافی، چالشی در زمینه آنالیز سیستم‌های پیچیده با روش‌های کالبراسیون چند راهه است. چندین روش برای هم‌ترازی پیک، براساس ابزارهای مرتبه دوم که داده‌های ماتریسی را برای هر نمونه تولید می‌کنند، توسعه یافته‌اند. این روش‌ها به‌عنوان مثال، شامل کمینه‌سازی مرتبه‌ای^{۲۰}، هم‌ترازی آنالیز عامل موازی^{۲۱} و سایر روش‌هایی است که اخیراً پیشنهاد شده و مبتنی بر حداقل مربعات متناوب برای هم‌ترازی پیک‌های کروماتوگرافی است. این روش‌ها با هدف هم‌ترازی نواحی کروماتوگرافی موضعی است؛ از این رو، می‌توان نتایج رضایت‌بخشی را برای جابجایی‌های زمان بازداری در کل کروماتوگرام به‌دست آورد به‌گونه‌ای که بدون توجه به وجود تداخل‌های ناشناخته، به تراز زمانی دقیق دست یافت.

انحراف پس‌زمینه^{۲۲}

در آنالیز کروماتوگرافی، گاهی عوامل غیر سه خطی مانند انحراف پس‌زمینه به دلیل ترکیب شیب شوی و یا ماهیت ماتریس‌های پیچیده، اجتناب‌ناپذیر است که ممکن است منجر به نتایج آنالیز اشتباه با الگوریتم‌های کمومتری شود. آمیگو^{۲۳} و همکارانش، در مقاله‌ای مروری، مدل‌های ریاضی مورد استفاده را خلاصه کرده‌اند که مثال معمول آن، روش‌های جداسازی منحنی چند متغیره^{۲۴} است.

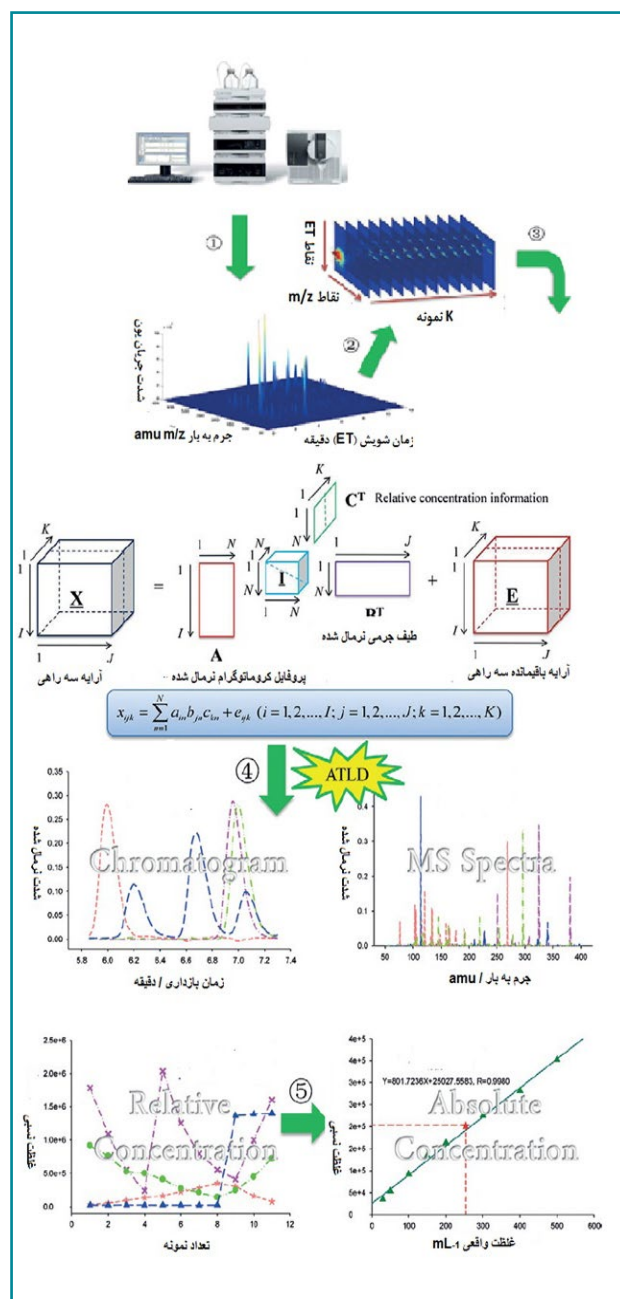
روش تصحیح انحراف پس‌زمینه در کروماتوگرافی در سال ۲۰۰۷ برای داده‌های کروماتوگرافی مایع با آشکارساز آرایه فوتودیودی^{۲۵} ایجاد شد. ایده اصلی آن، انجام تجزیه سه خطی است که براساس الگوریتم تجزیه سه خطی متناوب^{۲۶} برای داده‌های پاسخ دستگاه است. در آنالیز، انحراف پس‌زمینه را می‌توان با در نظر گرفتن آن به‌عنوان یک جزء یا عامل اضافی حذف کرد. در این روش از تجزیه سه خطی برای حل داده‌های خام، استخراج و کسر مؤلفه پس‌زمینه از داده‌های خام برای به‌دست آوردن سیگنال آنالیت‌ها با خط پایه صاف استفاده می‌شود.

کاربرد

از آنجایی که روش‌های کمومتری دارای «مزایای مرتبه دوم یا مرتبه بالا» هستند، برخی از برنامه‌های کاربردی واقعی برای آنالیز داروها، ماتریس‌های زیستی، مواد غذایی، لوازم آرایشی، ماتریس‌های محیطی و غیره توسعه یافته‌اند. برای افزایش گزینش‌پذیری از الگوریتم‌های کالبراسیون چند راهه استفاده شده‌است که می‌توان غلظت پیش‌بینی شده دقیق آنالیت(های) مورد نظر را بدون تداخل ماتریس تداخل بالقوه به‌دست آورد. این کاربردها به‌طور خلاصه در جدول (۱) نشان داده شده‌است که در آینده به‌طور مفصل به شرح آنها پرداخته می‌شود.

پردازش داده

صحت تجزیه یک مدل چند خطی^{۱۶} مستلزم آن است که مدل چند خطی، حالت چند خطی بودن را حفظ کند. با این حال، برخی از عوامل غیر چند خطی وجود دارد که می‌تواند باعث شود یک مدل چند خطی از حالت خود منحرف شود. به‌عنوان مثال، در نوع کروماتوگرافی مدل سه خطی^{۱۷} مانند داده‌های HPLC-DAD و LC-MS، جابجایی زمان بازداری و مشکل خط زمینه^{۱۸} در بین تزریق‌های مختلف باعث انحراف مدل سه خطی از حالت خود می‌شود. بنابراین، آرایه‌های داده در کالبراسیون چند متغیره قبل از تجزیه چند خطی، به روش‌های پیش پردازش مناسب داده نیاز دارند. در شکل (۱) نمایی از کل برنامه آنالیز LC-MS با کمک کمومتری نشان داده شده‌است.



شکل (۱): نمایی از کل برنامه آنالیز LC-MS با کمک کمومتری [۱۰].

جدول (۱): مروری بر کاربردها [۱۰].

نوع داده	الگوریتم	آنالیت
صنایع دارویی		
HPLC-DAD	ATLD	پورارین و دیدزین
HPLC-DAD	ATLD	کاستونولید و دهیدروکاستوس لاکتون
HPLC-DAD	ATLD, SWATLD, AFR	ایزونیازید و پیرازینامید
ماتریس‌های زیستی		
HPLC-DAD	ATLD	یازده آنتی‌هایپرتنسیو
HPLC-DAD	ATLD	چهار بازدارنده تیروزین کیاناز
LC-MS	ATLD	شش معرف ضد دیابت
HPLC-DAD	ATLD	آلکالوئیدها
غذا		
HPLC-DAD	ATLD	شش رنگدانه سنتزی
HPLC-DAD	ATLD	آنتی‌اکسیدان‌های فنلی سنتزی
HPLC-DAD	ATLD	هشت فلاونوئید
HPLC-DAD	ATLD	نه پلی‌فنل
LC-MS	ATLD	ده مایکوتوکسین
ماتریس محیطی		
HPLC-DAD	SWATLD	سه آفت‌کش
HPLC	ATLD	۱-کلرو ۴و۲ - دی‌نیتروبنزن و دی‌نیتروبنزوئیک اسید
HPLC	ATLD	پنج ایزومر دی‌متیل‌فنل
HPLC	ATLD	کاتچول و رزورسینول و هیدروکوینون

نتیجه‌گیری

در این مقاله به روش‌ها و کاربردهای مختلف کمومتری چند راهه در کروماتوگرافی پرداخته و به چندین الگوریتم کالیبراسیون چند راهه اشاره شد. برخی از مسائل اساسی مربوط به آنالیز کروماتوگرافی مانند هم‌ترازی پیک و رانش پس‌زمینه نیز مورد بحث و بررسی قرار گرفت. با ترکیب روش‌های کروماتوگرافی با کمومتری مبتنی بر روش‌های کالیبراسیون چند راهه، می‌توان آماده‌سازی‌های پیچیده و خسته‌کننده نمونه را تا حد زیادی ساده کرد و از زمان‌های شویش طولانی کروماتوگرافی جلوگیری نمود. تمام کاربردهای ذکر شده جهانی، سریع و حساس برای تعیین انواع آنالیت در ماتریس‌های پیچیده هستند.

پی‌نوشت

1. Coeluting
2. Zeroth Order
3. excitation-emission spectrofluorimeter (EEMs)
4. high performance liquid chromatography-photodiode array detection (HPLC-DAD)
5. liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS)
6. Predict samples
7. Real samples
8. Known
9. Expected
10. Unknown
11. Unexpected
12. Trilinear
13. Quadrilinear
14. Quinquelinear
15. Parallel factor analysis (PARAFAC)
16. Multilinear
17. Trilinear
18. Baseline
19. Peak alignment
20. Rank minimization (RM)
21. Parallel factor analysis alignment
22. Background drift
23. Amigo
24. Multivariate curve resolution (MCR)
25. Liquid chromatography photo diode array (LC DAD)
26. Alternating Trilinear Decomposition Algorithm (ATLD)

مراجع

- [1] Yin XL, Wu HL, Gu HW, Hu Y, Wang L, Xia H, et al. Chemometrics-assisted high performance liquid chromatography-diode array detection strategy to solve varying interfering patterns from different chromatographic columns and sample matrices for beverage analysis. *Journal of Chromatography A*. 2016;1435:75-84.
- [2] Visky D, Haghedooren E, Dehouck P, Kovács Z, Kóczyán K, Noszá B, et al. Facilitated column selection in pharmaceutical analyses using a simple column classification system. *Journal of Chromatography A*. 2006;1101(1):103-114
- [3] Jandera P, Vyňuchalová K, Hájek T, Česla P, Vohralík G. Characterization of HPLC columns for two-dimensional LC_ LC separations of phenolic acids and flavonoids. *Journal of Chemometrics*. 2008;22(3-4):203-217
- [4] Haghedooren E, Farkas E, Kerner Á, Dragovic S, Noszá B, Hoogmartens J, et al. Effect of long-term storage and use on the properties of reversed-phase liquid chromatographic columns. *Talanta*. 2008;76(1):172-182
- [5] Pérez RL, Escandar GM. Multivariate calibration-assisted high-performance liquid chromatography with dual UV and fluorimetric detection for the analysis of natural and synthetic sex hormones in environmental waters and sediments. *Environmental Pollution*. 2016;209:114-122.
- [6] Tan F, Tan C, Zhao A, Li M. Simultaneous determination of free amino acid content in tea infusions by using high-performance liquid chromatography with fluorescence detection coupled with alternating penalty trilinear decomposition algorithm. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2011;59(20):10839-10847
- [7] Fleming C, Kowalski B. *Encyclopedia of Analytical Chemistry*. New York: John Wiley & Sons Inc; 2000. pp. 9737-9764
- [8] Malinowski ER. *Factor Analysis in Chemistry*, 3rd Ed. *Technometrics*. 2002;36(1):180-181.
- [9] Harshman RA. Foundations of the PARAFAC procedure: Models and conditions for an “explanatory” multi-model factor analysis. *UclaWorking Papers in Phonetics*. 1970;16
- [10] Carroll JD, Pruzansky S, Kruskal JB. CANDELINC: A general approach to multidimensional analysis

Author

Farideh Bataghva^{1,2*}
Hamid Heydari^{1,2}

*exirtajhizazma@gmail.com

1. PhD in analytical chemistry, Exir Tajhiz Azma research laboratory expert
2. Member of working group of chromatography



High-Order Calibration and Data Analysis in Chromatography

Abstract

Multiway data analysis and tensorial calibration are gaining widespread acceptance with the rapid development of multichannel chromatographic instruments. By combining chromatographic techniques with chemometrics based on high-order calibration methods, some traditional problems in analysis, such as complicated pretreatment steps, long elution times, or even worse analysis results, can be avoided/improved. This chapter presents an overview from second-order to third-order data that cover theories and applications together with corresponding data processing in chromatography.

Keywords

chemometrics, second-order advantages, trilinear model, high-performance liquid chromatography-diode array detection, liquid chromatography-mass spectrometry.



Iranian Journal of

Laboratory Knowledge

ISSN 2538-3450

Volume 11 ■ Issue 3 ■ Fall 2023 ■ No.43



Determining and evaluating sources of uncertainty in the Tensile test



Evaluating of the measurement uncertainty in laboratories by presenting an objective example



An overview of the importance and classification of Real-Time PCR technique and its application in food industry



Preparation of a nano-biocomposite film based on halloysite-chitosan as the sorbent for thin film microextraction



High-Order Calibration and Data Analysis in Chromatography



The role of the COMAR database for reference materials