

Le Century Mix : Outil clé pour l'évaluation des performances des systèmes GCxGC

Djulia Bensaada¹

Anaïs Rodrigues¹, Jean-Marie Dimandja², Jean-François Focant¹, Pierre-Hugues Stefanuto¹

1 -Organic and Biological Analytical Chemistry Group, MolSys Research Unit, University of Liège, 4000 Liège, Belgium

2 -Georgia Institute of Technology, GW Woodruff School of Mechanical Engineering, Atlanta, USA

Contact : djulia.bensaada@doct.uliege.be

En chromatographie en phase gazeuse bidimensionnelle (GCxGC), disposer d'un mélange de référence standardisé est essentiel pour évaluer et comparer les performances des systèmes chromatographiques. Le Century Mix (CM) répond à ce besoin en intégrant une centaine de composés issus de diverses familles chimiques, telles que les alcanes, alcènes, alcynes, alcools, cétones, esters et aromatiques. Cette diversité permet de simuler des mélanges complexes, fournissant ainsi une base solide pour tester la capacité de séparation des systèmes GCxGC. De ce fait, le Century Mix vise à devenir une norme de référence incontournable pour évaluer les systèmes chromatographiques et comparer les résultats obtenus sur différents équipements. Il permet également d'assurer la surveillance de la qualité des analyses, dans le cadre du contrôle qualité (QC), notamment dans le cadre des analyses non ciblées¹.

Dans cette étude, le Century Mix est utilisé pour examiner l'impact de différents paramètres chromatographiques sur la séparation des analytes en GC x GC. Un plan d'expériences est mis en place pour tester des facteurs tels que la rampe de température, le flux de gaz et la période de modulation. L'objectif est d'étudier l'influence de ces paramètres sur les indices de rétention en utilisant une configuration de colonnes inversée (mi-polaire x apolaire). Une configuration normale (apolaire x polaire) sera testée ultérieurement afin de comparer les performances des deux approches. Cette étude permet de mieux comprendre l'effet des paramètres chromatographiques sur la performance des systèmes GC x GC et d'optimiser la séparation des composés dans les échantillons complexes.

Par la suite, une étude interlaboratoire a été réalisée en utilisant divers systèmes GCxGC (modulateurs thermique, modulateurs à flux) ainsi que différentes configurations de colonnes (normale, inversée, hybride). Les conditions opératoires, telles que le débit de gaz, la rampe de température, les paramètres d'acquisition du détecteur, etc., ont été uniformisées afin de garantir des résultats comparables. L'objectif principal de cette étude était de comparer les performances des systèmes GCxGC dans des conditions contrôlées et de démontrer l'intérêt d'utiliser un mélange standardisé comme référence afin de simplifier les comparaisons interlaboratoires. Les différentes séries homologues présentes dans le CM ont permis d'approfondir la compréhension de la sélectivité des combinaisons de colonnes, en tenant compte de l'ordre d'élution dans la seconde dimension. Dans les systèmes normaux, les alcanes sont les premiers à éluer, suivis des alcènes, tandis que les lactones et les phthalates éluent en dernier. En revanche, dans les systèmes inversés, cet ordre d'élution est totalement inversé. Pour les systèmes hybrides, où des colonnes de même phase stationnaire sont utilisées, un profil d'élution unique a été observé, soulignant ainsi l'importance du Century Mix pour l'étude de la sélectivité des phases stationnaires. Les résultats ont également révélé que l'ordre d'élution des composés avec des modulateurs à flux est pratiquement identique à celui obtenu avec des modulateurs thermiques. Cela confirme la pertinence de l'utilisation du Century Mix pour une évaluation qualitative des différents systèmes GCxGC.

(1) Dimandja, J.-M.; Archer, J.; Casanova, J.; Poseneker, E.; Stefanuto, P.-H. (PH); Focant, J.-F.; Struk, D.; Hesketh, P.; Heist, C.; Rimmer, C. Development of a Standardized Protocol for the Classification of Column Sets in Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography. *LCGC Int.* **2024**, 1, 12–20.