

ВСЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ

Хроматография  
и хроматографические приборы

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

МОСКВА 2004

АЛГОРИТМ СОЗДАНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ БАЗЫ ДАННЫХ "ВЭЖХ-УФ"

И.Н. Азарова, Г.И. Барам

*Лимнологический институт Сибирского отделения РАН, г. Иркутск*

Известные ВЭЖХ-методы определения веществ, предусматривающие иденти-фикацию по базам данных (БД), содержащим параметры удерживания и спектраль-ные характеристики (ВЭЖХ-УФ), не рассчитаны на прямое "тиражирование", т.к. не включают в себя процедуру полной валидации всей хроматографической системы, необходимую при переходе от одного хроматографа к другому, даже если эти хроматографы формально являются одной и той же моделью. Нами разработан алгоритм создания и применения БД "ВЭЖХ-УФ", включающий в себя процедуру достаточно полной валидации хроматографической системы. В течение двух лет алгоритм успешно апробирован при работе с БД для лекарственных веществ на более чем 10 хроматографах "Милихром А-02" (ЗАО "ЭкоНова", Новосибирск).

Процедура валидации заключается в хроматографировании смеси из 5 веществ (КВг, уридин, кофеин, *m*- и *o*-нитроанилины) на колонке  $\varnothing 2 \times 75$  мм с ProntoSIL-120-5 C18 AQ (элюенты: А- 4 М LiClO<sub>4</sub>-0.1 М HClO<sub>4</sub>:H<sub>2</sub>O (5:95), Б- MeCN; градиент: от 5% до 100% Б за 40 мин; 100% Б 3 мин;  $F=100$  мкл/мин;  $t=40^\circ\text{C}$ ;  $\lambda=210, 220, 230, 240, 250, 260, 280$  и  $300$  нм) с последующим сравнением полученных хроматографических и спектральных данных с "эталонными". Если они не выходят за границы погрешности, то вся хроматографическая система может применяться для работы с БД. Такая процедура дает возможность в одном эксперименте проверить "правильность" следующих параметров системы:  $V_0$  колонки; погрешность настройки детектора в диапазоне длин волн 210-300 нм и его линейность до 10 е.о.п.; погрешность значения рН элюента А; правильность "формы" градиента и эффективность работы смесителя.

Формирование БД "ВЭЖХ-УФ" производится путем хроматографирования растворов веществ с  $C=0.2$  мг/мл. Идентификация веществ-аналитов проводится по величине  $V_R \pm 10\%$  (предварительно) и по спектральным отношениям  $S_\lambda/S_{210}$  (оконча-тельно). Максимальная теоретическая емкость БД "ВЭЖХ-УФ" превышает  $10^{11}$  веществ. Методика определения хроматографических и спектральных параметров, а также концентрации веществ с помощью базы данных "БД-2003" аттестована Госстандартом России (свидетельства об аттестации № 37-03 и № 38-03).

