

ВСЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ

**Хроматография
и хроматографические приборы**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Идентификация веществ по хроматографическим и спектральным параметрам, собранным в базы данных (БД), начала применяться в ВЭЖХ в 80-х гг. XX века. Только с помощью такого подхода можно реально решать аналитические задачи, требующие быстрого и достоверного определения того или иного вещества (веществ) из заранее известного списка. К таким скрининговым задачам относятся:

- контроль качества лекарств (фармацевтика);
- контроль безопасности продуктов питания (здравоохранение);
- контроль загрязнения окружающей среды (экология);
- определение наркотиков и сильнодействующих веществ (наркология, судебно-медицинская экспертиза, токсикология, криминалистика).

Идентификация веществ по БД освобождает аналитика от необходимости иметь и поддерживать обширную (и дорогостоящую) коллекцию сертифицированных стандартов, а также от необходимости калибровки хроматографа перед выполнением каждого анализа, как требуют того все "традиционные" методики.

Скрининговые ВЭЖХ-методы, разработанные для определения более 100 веществ, основаны на применении обращенно-фазной градиентной хроматографии со спектральным детектированием (ВЭЖХ-УФ или ВЭЖХ-МС). Многие из известных методов предполагают использование в качестве параметров идентификации *индексов удерживания* (ИУ), вычисляемых относительно t_R специально выбранных для этого веществ (например, набор 1-нитроалканов). Это позволяет корректировать БД при изменении удерживания веществ в результате "старения" колонки или при замене колонки на близкую по хроматографическим свойствам. Если список веществ в БД превышает 100 названий, т.е. превышает пиковую емкость колонки, то t_R как параметр идентификации может выступать лишь как "предварительный". Окончательная идентификация осуществляется по спектральной информации, качество которой определяет максимально возможную "емкость" БД и, в конечном итоге, достоверность самого результата анализа.