

Сертификация материалов и аккредитация лабораторий

УДК 389.0

О МЕТРОЛОГИЧЕСКОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ БАЗ ДАННЫХ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ И КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ УФ-ПОГЛОЩАЮЩИХ ВЕЩЕСТВ МЕТОДОМ ВЭЖХ

© О. Л. Рутенберг¹, Ш. Р. Фаткудинова¹, Г. И. Барам², И. Н. Азарова²

Статья поступила 30 ноября 2005 г.

Аттестованы методики выполнения измерений спектральных и хроматографических параметров УФ-поглощающих веществ, предназначенных для включения в базу данных, и массовой концентрации УФ-поглощающих веществ с использованием базы данных. Рассмотрена процедура идентификации и количественного определения УФ-поглощающих веществ методом ВЭЖХ.

Идентификация веществ по хроматографическим и спектральным параметрам, собранным в базы данных (БД), начала применяться в высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) в 80-х гг. XX века. Только с помощью такого подхода можно решать аналитические задачи, требующие быстрого и достоверного определения того или иного вещества (веществ) из заранее известного списка. Подобные задачи носят название скрининговых. Важнейшими из них являются:

- контроль качества лекарственных средств (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 стандартных образцов, а также от необходимости проведения трудоемкой процедуры градуировки хроматографа при переходе от анализа одного вещества к анализу другого, как того требуют все “традиционные” методики.

Скрининговые ВЭЖХ-методы основаны на применении обращенно-фазовой градиентной хроматографии со спектральным детектированием (ВЭЖХ-УФ или ВЭЖХ-МС) [1 – 10]. Используемые БД содержат сотни и даже тысячи веществ [7, 10]. Поскольку пиковая емкость ВЭЖХ-колонок обычно составляет всего около 100 (что существенно меньше в сравнении с газохроматографическими колонками), параметры удерживания применимы лишь для предварительной идентификации веществ. Использование индексов удерживания вместо абсолютных значений объемов (времен) удерживания [3, 4, 9] позволяет корректировать БД, например, при “старении” колонки или при замене ее на близкую по хроматографическим свойствам. Окончательную идентификацию осуществляют по спектральной информации, качество которой определяет максимально возможную “емкость” БД и достоверность результата анализа.

Существенное ограничение опубликованных скрининговых ВЭЖХ-методов с применением баз данных состоит в том, что каждый из них разработан для набора хроматографического оборудования (хроматографа), метрологические характеристики которого детально не исследованы и не описаны. Это обстоятельство не позволяет использовать идентификационные параметры баз данных в случае применения подобного, но не идентичного хроматографа.

Сфера применения скринингового метода и созданной на его основе БД многократно расширяется, если возможно их “тиражирование”, т. е. использование не только в одной лаборатории. Такой

¹ ФГУП “Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы”, Москва, Россия.

² ЗАО “Институт хроматографии “ЭкоНова”, г. Новосибирск, Россия.