

В статье предложен метод вычисления спектра хроматографического пика по «наилучшей локальной чистоте»

КАК ПОЛУЧИТЬ ПРАВИЛЬНЫЙ СПЕКТР ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО ПИКА

Введение

В последние годы в высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) все более широкое применение находят многоволновые спектрометрические детекторы [1]. Чаще всего это детекторы с фотодиодной матрицей. Эти детекторы позволяют, кроме обычных хроматографических данных, определять спектры поглощения веществ.

Такая информация представляет значительный интерес, в частности, для идентификации компонентов путем сравнения с эталонными спектрами веществ. Однако ряд факторов: шумы, ошибки вычисления базовой линии, выход за пределы линейного диапазона детектора и прочие — могут существенно исказить спектральную информацию. Применение специальных математических методов обработки [2] позволяет в значительной мере устранить влияние этих негативных факторов. Но при этом к методам вычисления спектров предъявляются весьма жесткие требования, так как они должны быть устойчивы к перечисленным выше искажениям и обладать хорошей воспроизводимостью от анализа к анализу — только в этом случае получаемые результаты будут достаточно надежны и однозначны для применения их на практике.

В настоящей работе рассматривается метод вычисления спектра по «наилучшей локальной чистоте» (далее — НЛЧ), реализованный в программе «МультиХром», и про-

водится сравнительный анализ с другими известными методами.

Теория

На сегодняшний день наиболее употребительными являются следующие методы вычисления спектров: спектр в вершине пика, средний спектр пика, спектры на переднем и заднем склонах пика. Чтобы пояснить способ вычисления спектров по НЛЧ введем необходимые определения.

Для сравнения спектров друг с другом в [3] было предложено использовать понятия угла в N -мерном пространстве, где N — число значений длины волны, на которых производится измерения. Каждый спектр в этом случае представляется как N -мерный вектор, компонентами которого являются отклики детектора на N длинах волн.

Если имеются два спектра с компонентами P_i и Q_i , то косинус угла ϕ между ними вычисляется следующим образом:

$$\cos(\phi) = \frac{\sum (P_i \cdot Q_i)}{\sqrt{\sum P_i^2} \cdot \sqrt{\sum Q_i^2}},$$

где суммирование производится по всем длинам волн.

Если сравниваются спектры, полученные в результате разных анализов, то применяется специальная процедура нормировки, позволяющая минимизировать влияние погрешностей измерения [3].

Поясним данное определение на простом примере, когда измерения производятся всего на двух длинах волн, т.е. рассмотрим два спектра с компонентами P_1, P_2 и Q_1, Q_2 .

АВТОРЫ

Ю.А. Каламбет —
генеральный директор
ЗАО «Амперсенд»,
канд. физ.-мат. наук
Ю.П. Козьмин —
ЗАО «Амперсенд»
С.А. Мальцев —
ЗАО «Амперсенд»