

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО АДСОРБЦИИ И ХРОМАТОГРАФИИ**  
**ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ ИМ. А.Н. ФРУМКИНА**



*X Международная конференция*

**Теоретические проблемы химии поверхности, адсорбции  
и хроматографии**

*24 - 28 апреля 2006 года*

*Москва – Клязьма*

## РАЗВИТИЕ БАЗЫ ДАННЫХ "ВЭЖХ-УФ" ДЛЯ ХРОМАТОГРАФА "МИЛИХРОМ А-02"

И.Н.Азарова<sup>1</sup>, Г.И.Барам<sup>1</sup>, О.Л.Рутенберг<sup>2</sup>, Ш.Р.Фаткудинова<sup>2</sup>, С.А.Мальцев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ЗАО Институт хроматографии "ЭкоНова", г. Новосибирск

<sup>2</sup>ФГУП "ВНИИМС", г. Москва

<sup>3</sup>ЗАО "Амперсенд", г. Москва

Ранее нами были разработаны методики определения веществ на хроматографе "Милихром А-02" (ЗАО "ЭкоНова") с использованием базы данных (БД) "ВЭЖХ-УФ", внесенные в Федеральный реестр МВИ под №№ ФР.1.31.2003.00950 и ФР.1.31.2003.00951. Согласно этим методикам, идентификация веществ проводится путем сравнения семи спектральных отношений  $S_{\lambda}/S_{210}$  с соответствующими значениями из БД. Однако, в мировой практике более распространен алгоритм идентификации, основанный на вычислении угла между векторами в  $n$ -мерном (в нашем случае  $n=8$ ) пространстве, описывающими спектры эталона и анализируемого вещества. В связи с этим мы реализовали известный алгоритм в новой версии методики, используя массив данных, ранее полученный в условиях межлабораторного эксперимента:

- колонка  $\varnothing 2 \times 75$  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;
- $t=40^{\circ}\text{C}$ ;
- детектор: 210, 220, 230, 240, 250, 260, 280 и 300 нм.

Для обработки хроматограмм использовали компьютерную программу "МультиХром-СПЕКТР", версия 2.4 (ЗАО "Амперсенд").

Показано, что критерием идентичности спектров является угол между векторами в 8-мерном пространстве, не превышающий  $2^{\circ}$ .

К настоящему времени в базу данных "ВЭЖХ-УФ" внесено 350 веществ - фармацевтические субстанции, пестициды, взрывчатые вещества и пр.