

УДК 543.061

ПРИМЕНЕНИЕ АДДИТИВНЫХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ВЕЩЕСТВ В ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Каплин А.В., Лещев С.М., Винарский В.А., Юрченко Р.А.

Белорусский государственный университет, г. Минск

В работе показана возможность применения метода инкрементов групп для идентификации различных производных вещества на основании параметров удерживания и величин инкрементов функциональных групп в данных условиях хроматографирования.

Идентификация новых и неизвестных веществ является одной из основных, но в то же время наиболее сложных задач химического анализа [1].

В работе описана и доказана возможность применения метода инкрементов групп для идентификации близких по химическому строению веществ при их газохроматографическом определении [2,3].

Предлагаемая методика основывается на определении времени удерживания исследуемого соединения и времени удерживания стандарта, строение молекулы которого близко к предполагаемому строению молекулы анализируемого соединения. На основании полученных данных и значений инкрементов различных групп, определенных в данных условиях, с помощью аддитивных расчетов определяются структурные различия между исследуемым соединением и введенным стандартом. Анализ полученных результатов позволяет с достаточно высокой достоверностью установить структуру неизвестного соединения.

Установлено, что данный подход позволяет нам идентифицировать вещества в случае их определения методом газовой хроматографии, используя в качестве стандартов их изомеры, гомологи или близкие по структуре соединения, отличающиеся на одну или несколько функциональных групп. Метод мо-

жет применяться для предварительной идентификации соединений в ходе скринингового анализа образцов.

Литература:

7. Fundamentals of GC-MS: in three parts / B.J. Gudzinowicz [and others] – 1976 – Part I: Gas Chromatography – New York and Basel: Marcel Dekker, Inc., 1976.
8. Каплин, А.В., Лещев, С.М., Винарский, В.А., Юрченко, Р.А. Возможности использования аддитивных расчетов для прогнозирования параметров удерживания органических веществ в газовой хроматографии // Аналитика РБ, 2010, Сб. тез. докл. респ. конф. по аналитич. химии с междунар. участием, Минск, 14-15 мая 2010.
9. Лещев, С.М., Онищук, В.И. // Журн. прикл. химии, 1989. – Т. 61. – № 8. – С. 1796-1800.

**ADDITIVE CALCULATIONS APPLICATION FOR THE IDENTIFICATION
OF SUBSTANCES IN GAS CHROMATOGRAPHY**

Kaplin A.V., Leschev S.M., Vinarsky V.A., Yurchenko R.A.

The paper shows the possibility of applying the method of increments to identify different substances derivatives on the basis of the retention parameters and values of the increments of functional groups in these conditions of chromatography.