

Lech Szczepaniak

Opracowanie systemu komputerowej identyfikacji związków organicznych w analizie rozpoznawczej metodą GC/MS

Streszczenie

Identyfikacja związków organicznych w próbkach pochodzenia naturalnego o skomplikowanym składzie matrycy stanowi jedno z największych wyzwań współczesnej chemii analitycznej. Metoda chromatografii gazowej ze spektrometrią mas (GC/MS) pozwala podjąć to wyzwanie. Podstawą identyfikacji analitów w tej metodzie jest jednoczesne użycie dwóch parametrów analitycznych: widma mas i chromatograficznego indeksu retencji (RI). Korzystanie z wartości RI dostępnych w źródłach literaturowych nie daje oczekiwanych wyników ze względu na zbyt małą liczbę zgromadzonych danych oraz ze względu na zbyt słabą odtwarzalność RI.

Niniejsza rozprawa dotyczy zaprojektowania, stworzenia i praktycznego wdrożenia systemu komputerowej identyfikacji związków organicznych metodą GC/MS. Celem głównym było stworzenie takiego narzędzia, które umożliwi zbieranie RI i widm w sposób automatyczny: szybko i z wykluczeniem błędów wprowadzania ręcznego. Rozprawa ma formę komentarza do pięciu artykułów naukowych o łącznym współczynniku Impact Factor (2012) równym 18,739. Wszystkie artykuły dotyczą publikacji wartości chromatograficznych indeksów retencji. W trzech artykułach prowadzona jest analiza rozpoznawcza, która polega na zastosowaniu metod przewidywania wartości RI dla substancji, które nie posiadały dotychczas tych parametrów zmierzonych. Niniejsze artykuły powstały z częściowym wspomaganie przez opracowany system.

W języku programowania Pascal (z pakietu Delphi 5.0) zbudowano relacyjną bazę danych (RI_mz), która przechowuje informacje o próbkach, chromatogramach, widmach mas i RI zidentyfikowanych analitów. W środowisku MSD Chemstation (Agilent Technologies) napisano programy (makra) umożliwiające obustronną wymianę danych pomiędzy zarejestrowanymi chromatogramami a bazą RI_mz. Zgromadzone dane dotyczą analitów zidentyfikowanych w próbkach pochodzenia naturalnego: ekstrakty z tkanek roślin, eksudaty, olejki eteryczne, ekstrakty produktów pszczelich. W bazie RI_mz zebrano też dane dostępnych w naszym laboratorium substancji wzorcowych oraz zsyntetyzowanych ich pochodnych. Wszystkie pomiary wykonywano w jednakowych warunkach z użyciem kolumny chromatograficznej tego samego typu (polidimetylosiloksan z 5% domieszką grup fenylowych). Zapewniona została w ten sposób wysoka powtarzalność uzyskanych wyników.

System został wdrożony do praktycznego użycia i działa w laboratoriach trzech uczelni: Uniwersytetu w Białymstoku, Uniwersytetu Medycznego w Białymstoku oraz Politechniki Białostockiej.