

Хроматографические аппаратно-программные комплексы



Программное обеспечение  
Хроматэк Аналитик 2.5/1.5  
Руководство пользователя  
214.00045-51И

ЗАО СКБ “Хроматэк”

30 октября 2007 г.



# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>11</b>
1.1	Условные обозначения . . . . .	11
1.2	Программное обеспечение “Хроматэк Аналитик” . . . . .	12
1.2.1	Основные сведения . . . . .	12
1.2.2	Переход с версии “Хроматэк Аналитик 2.2” . . . . .	16
1.2.3	Установка программного обеспечения . . . . .	19
1.3	Основные термины и определения . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Панель управления</b>	<b>29</b>
2.1	Основные сведения о программе . . . . .	29
2.2	Подключение хроматографа к компьютеру . . . . .	31
2.2.1	Особенности подключения по шине USB . . . . .	31
2.2.2	Особенности подключения через Ethernet . . . . .	34
2.2.3	Создание нового соединения . . . . .	40
2.2.4	Запуск соединения . . . . .	49
2.2.5	Главное окно программы . . . . .	50
2.2.6	Краткая характеристика этапов хроматографа . . . . .	55
2.3	Настройка конфигурации хроматографа . . . . .	57
2.3.1	Основные сведения . . . . .	57
2.3.2	Конфигурация Кристалл-ПМ2 . . . . .	59
2.3.3	Конфигурация Кристалл-ПМ2. Детекторы . . . . .	68
2.3.4	Конфигурация Кристалл-ПМ2. Газовые регуляторы . . . . .	72
2.3.5	Калибровка газовых регуляторов . . . . .	76

2.3.6	Конфигурация Кристалл-ПМ1 . . . . .	77
2.4	Задание режима хроматографа . . . . .	81
2.4.1	Основные сведения о режиме хроматографа . . . . .	81
2.4.2	Режим хроматографа Кристалл-ПМ2 . . . . .	82
2.4.3	Режим хроматографа Кристалл-ПМ1 . . . . .	89
2.4.4	Режим хроматографа Кристалл-2000 . . . . .	93
2.4.5	Продувка до анализа . . . . .	94
2.4.6	Использование предстарта . . . . .	97
2.4.7	Сохранение и загрузка режима . . . . .	98
2.4.8	Управление хроматографом на этапе “Анализ” . . . . .	99
2.5	Периферийные и внутренние устройства . . . . .	100
2.5.1	Общие сведения о периферийных и внутренних устройствах . . . . .	100
2.5.2	Дозатор автоматический жидкостный . . . . .	103
2.5.3	Дозатор парогазовый . . . . .	105
2.5.4	Дозатор автоматический газовый . . . . .	105
2.5.5	Дозатор равновесного пара . . . . .	107
2.5.6	Дозатор бесшприцевого ввода . . . . .	108
2.5.7	Пиролитический испаритель . . . . .	109
2.5.8	Внутренние устройства . . . . .	109
2.5.9	Краны . . . . .	111
2.5.10	Клапан в ПМ2 . . . . .	113
2.5.11	Клапан в ПМ1 . . . . .	116
2.6	Несколько анализов на одном хроматографе . . . . .	117
2.6.1	Постановка задачи. Соединение и сеанс . . . . .	117
2.6.2	Одновременные и независимые анализы . . . . .	117
2.6.3	Два анализа в разных режимах . . . . .	120
2.6.4	Получение диагностической информации . . . . .	121
2.6.5	Управление сеансами . . . . .	123

2.7	Изменение настроек соединений и сеансов . . . . .	124
2.7.1	Настройка соединения в экспертном режиме . . . . .	124
2.7.2	Изменение и добавление сеансов . . . . .	128
2.7.3	Изменение микропрограммы (прошивки) хроматографа . . . . .	135
2.8	Завершение работы с хроматографом . . . . .	137
2.8.1	Охлаждение хроматографа . . . . .	137
2.8.2	Задание режима сна . . . . .	139
<b>3</b>	<b>Конвертер хроматограмм</b>	<b>141</b>
3.1	Основные сведения о программе . . . . .	141
3.2	Запуск программы . . . . .	144
3.3	Главное окно программы . . . . .	144
3.4	Работа с программой . . . . .	146
3.4.1	Выбор источника и приемника хроматограмм . . . . .	146
3.4.2	Выполнение преобразования . . . . .	150
3.4.3	Дополнительные возможности . . . . .	152
<b>4</b>	<b>Теоретические основы обработки хроматограмм</b>	<b>155</b>
4.1	Основы хроматографического процесса . . . . .	155
4.2	Этапы обработки хроматограммы . . . . .	156
4.3	Фильтрация шумов . . . . .	157
4.3.1	Медианная фильтрация . . . . .	158
4.3.2	Гауссова фильтрация . . . . .	158
4.4	Разметка пиков на хроматограмме . . . . .	159
4.4.1	Общие положения . . . . .	159
4.4.2	Автоматическое интегрирование . . . . .	159
4.4.3	События интегрирования . . . . .	163
4.5	Идентификация пиков на хроматограмме . . . . .	164
4.5.1	Алгоритм идентификации пиков . . . . .	164
4.5.2	Идентификация по времени удерживания . . . . .	165

4.5.3	Идентификация относительно опорных пиков . . . . .	165
4.5.4	Идентификация по индексам удерживания . . . . .	166
4.5.5	Идентификация на двух каналах детекторов . . . . .	167
4.6	Градуировка компонентов . . . . .	169
4.7	Количественный расчет . . . . .	172
4.7.1	Метод процентной нормализации . . . . .	172
4.7.2	Метод внутренней нормализации . . . . .	173
4.7.3	Метод абсолютной градуировки . . . . .	174
4.7.4	Метод внешнего стандарта . . . . .	174
4.7.5	Метод внутреннего стандарта . . . . .	175
4.8	Дополнительные расчеты . . . . .	176
4.8.1	Расчет по неидентифицированным пикам . . . . .	176
4.8.2	Расчет концентрации основного вещества . . . . .	176
4.8.3	Расчет погрешности градуировки . . . . .	177
4.8.4	Расчет сходимости . . . . .	177
4.8.5	Расчет разведения . . . . .	177

## **5 Хроматэк Аналитик 2.5 179**

5.1	Основные сведения о программе . . . . .	179
5.1.1	Особенности программы . . . . .	179
5.1.2	База данных проекта . . . . .	180
5.1.3	Запуск программы . . . . .	181
5.1.4	Главное окно программы . . . . .	182
5.1.5	Меню и панель инструментов . . . . .	182
5.1.6	График . . . . .	186
5.1.7	Таблицы . . . . .	186
5.1.8	Метод . . . . .	188
5.1.9	Операции и последовательность операций . . . . .	188
5.2	Проекты. Создание и изменение . . . . .	189

5.2.1	Администратор проектов . . . . .	189
5.2.2	Создание нового проекта . . . . .	190
5.2.3	Добавление, удаление и изменение проекта . . . . .	192
5.2.4	Настройка параметров проекта . . . . .	194
5.3	Настройка главного окна . . . . .	195
5.3.1	Общие параметры работы программы . . . . .	195
5.3.2	Настройка меню и панели инструментов . . . . .	196
5.3.3	Настройка страниц главного окна . . . . .	198
5.3.4	Настройка диалога “Полезный совет” . . . . .	198
5.3.5	Настройка автоматического удаления хроматограмм . . . . .	199
5.4	Настройка таблиц . . . . .	200
5.4.1	Настройка свойств таблиц . . . . .	201
5.4.2	Адаптация под способ идентификации пиков . . . . .	203
5.4.3	Адаптация под метод количественного расчета . . . . .	204
5.4.4	Оптимизация записей в таблицах . . . . .	207
5.5	Обработка хроматограмм . . . . .	210
5.5.1	Особенности работы в процессе снятия хроматограмм . . . . .	210
5.5.2	Заполнение паспорта хроматограммы . . . . .	212
5.5.3	Настройка графика хроматограммы . . . . .	219
5.5.4	Визуальная оценка хроматограммы. Работа с графиком . . . . .	221
5.5.5	Фильтрация хроматограммы . . . . .	225
5.5.6	Коррекция нулевой линии . . . . .	226
5.5.7	Инверсия хроматограммы . . . . .	228
5.5.8	Расчет хроматограммы . . . . .	229
5.5.9	Ручная корректировка и удаление разметки пиков . . . . .	239
5.5.10	Создание и изменение компонентов. Работа с таблицами . . . . .	241
5.5.11	Идентификация пиков на хроматограмме . . . . .	244
5.5.12	Проведение градуировки . . . . .	247
5.5.13	Метод . . . . .	251

5.5.14	Количественный расчет . . . . .	256
5.5.15	Расчет анализа . . . . .	259
5.5.16	Отчет хроматограммы. Отчет анализа . . . . .	261
5.6	Внешний расчет . . . . .	263
5.7	Поверка хроматографа . . . . .	265
5.8	Приложения . . . . .	269
5.8.1	Настраиваемые столбцы таблиц программы . . . . .	269
5.8.2	Горячие клавиши . . . . .	273
<b>6</b>	<b>Пошаговое руководство</b>	<b>275</b>
6.1	Общие принципы работы с программным обеспечением “Хроматэк Аналитик” . . . . .	275
6.2	Подключение и настройка хроматографа . . . . .	275
6.3	Создание метода . . . . .	277
6.3.1	Создание метода без проведения градуировки . . . . .	277
6.3.2	Создание метода с проведением градуировки . . . . .	280
6.4	Проведение анализа по созданному методу . . . . .	285
6.5	Проверка точности и корректировка метода . . . . .	287
<b>7</b>	<b>Хроматэк Аналитик 1.5</b>	<b>289</b>
7.1	Основные сведения о программе . . . . .	289
7.1.1	Запуск программы . . . . .	289
7.1.2	Главное окно программы . . . . .	289
7.1.3	Меню и панель инструментов . . . . .	291
7.1.4	График . . . . .	292
7.2	Настройка программы . . . . .	293
7.2.1	Настройка параметров анализа . . . . .	293
7.2.2	Настройка параметров отчета . . . . .	293
7.2.3	Работа с окнами . . . . .	293
7.3	Обработка хроматограмм . . . . .	295

7.3.1	Особенности работы в процессе снятия хроматограмм. Вспомогательное окно . . . . .	295
7.3.2	Заполнение паспорта хроматограммы . . . . .	296
7.3.3	Визуальная оценка хроматограммы. Работа с графиком . . . . .	297
7.3.4	Фильтрация хроматограммы . . . . .	299
7.3.5	Интегрирование . . . . .	299
7.3.6	Идентификация . . . . .	301
7.3.7	Ручная корректировка и удаление разметки пиков . . . . .	302
7.3.8	Создание и изменение компонентов . . . . .	303
7.3.9	Калибровка . . . . .	305
7.3.10	Импорт компонентов и калибровочных уровней . . . . .	309
7.3.11	Количественный расчет . . . . .	309
7.4	Работа с файлами хроматограмм . . . . .	310
<b>8</b>	<b>Программа корреляции времен удерживания</b>	<b>313</b>
	<b>Предметный указатель</b>	<b>330</b>



# Глава 1

## Введение

### 1.1 Условные обозначения

В данном руководстве используются следующие условные обозначения:



На эту информацию следует обратить особое внимание, что позволит избежать проблем в дальнейшей работе.



Эта информация носит ознакомительный характер и помогает организовать работу эффективнее.



Таким символом выделены примеры работы.

В ряде случаев для программ серии *Хроматэк Аналитик* различных версий используются совокупные обозначения:

- программы *Хроматэк Аналитик* первой версии (1.20, 1.21, 1.22, 1.23, 1.24, 1.5) обозначаются *Хроматэк Аналитик 1.x*;
- программы *Хроматэк Аналитик* второй версии (2.0, 2.1, 2.2, 2.5) обозначаются *Хроматэк Аналитик 2.x*.

Используемые аббревиатуры приведены в таблице 1.1.

**Таблица 1.1. Используемые аббревиатуры**

Аббревиатура	Расшифровка
АЦП	Аналого-цифровой преобразователь.
БСД	Блок сбора данных.
ДАГ	Дозатор автоматический газовый.
ДАЖ	Дозатор автоматический жидкостный.
ДБВ	Дозатор бесшприцевого ввода.
ДПГ	Дозатор парогазовый.
ДРП	Дозатор равновесного пара.
ДТП	Детектор по теплопроводности.
ДТХ	Детектор термохимический.
МСД	Масс-спектрометрический детектор.
ПИД	Пламенно-ионизационный детектор.
ПМ1	Процессорный модуль 1.
ПМ2	Процессорный модуль 2.
ПО	Программное обеспечение.
ПУ	Панель управления.
ПФД	Пламенно-фотометрический детектор.
РД	Регулятор давления газа.
РРГ	Регулятор расхода газа.
СКО	Среднеквадратичное отклонение.
ТИД	Термоионный детектор.
ФГП	Формирователь газовых потоков.
ФИД	Фотоионизационный детектор.
ФЭУ	Фотоэлектронный умножитель.
ХА 1.5	Хроматэк Аналитик 1.5.
ХА 2.5	Хроматэк Аналитик 2.5.
ЭЗД	Электрозахватный детектор.

## 1.2 Программное обеспечение “Хроматэк Аналитик”

### 1.2.1 Основные сведения

Программное обеспечение (далее сокращенно — ПО) *Хроматэк Аналитик* предназначено для сбора и обработки хроматографической информации, поступающей от хроматографов серии “Кристалл” и другого аналитического оборудования.

ПО *Хроматэк Аналитик* позволяет:

- управлять хроматографами серии **Хроматэк Кристалл**, а так же другим хроматографическим оборудованием, таким как **Блок сбора данных**, **Формирователь газовых потоков** и т.п.;

- осуществлять автоматизированный сбор и хранение хроматографической и разнообразной диагностической информации;
- выполнять обработку хроматографической информации с выдачей результатов анализов;
- оформлять отчеты по выполненным анализам в соответствии с требованиями пользователя;
- преобразовывать хроматографические данные в различные файловые форматы для использования этих данных в программах других производителей;
- выполнять различные узкоспециализированные расчеты по конкретным аналитическим задачам с помощью приложений не входящих в стандартную поставку ПО.

ПО состоит из двух частей: базовой и дополнительной (см. рисунок 1.1).



Рисунок 1.1. Состав ПО “Хроматэк Аналитик”

**В состав базовой части входят программы:**

#### ***Панель управления***

Основная программа, осуществляющая управление аналитическими приборами и сбор хроматографической информации. Подробно эта программа описана в главе 2.

#### ***Драйвер USB-COM***

Программа, преобразующая подключение через USB-интерфейс в виртуальный COM-порт. Использование драйвера описано в разделе 2.2.1.

**В состав дополнительной части входят программы:**

#### ***Хроматэк Аналитик 2.5***

Программа визуализации и обработки хроматографической информации. Данная программа, подробно описанная в главе 5 (часть 2 печатной версии руководства пользователя),

разработана на основе версии *Хроматэк Аналитик 2.2*, обладающей значительными преимуществами в возможностях визуализации и обработки хроматограмм, по сравнению с версией *Хроматэк Аналитик 1.2х*

### ***Хроматэк Аналитик 1.5***

Программа визуализации и обработки хроматографической информации. Данная программа, подробно описанная в главе 7 (часть 3 печатной версии руководства пользователя), разработана на основе версии *Хроматэк Аналитик 1.2х*, которая зарекомендовала себя как простая в изучении, хотя и ограниченная в возможностях визуализации и обработки хроматограмм.

### ***Конвертер хроматограмм***

Программа, позволяющая преобразовывать хроматограммы из предыдущих версий программы *Хроматэк Аналитик* в новые версии и обратно. Программа подробно описана в главе 3.



**Программы обработки и Конвертер хроматограмм не входят в комплект поставки ФГП.**

В зависимости от решаемой заказчиком аналитической задачи, в состав дополнительной части могут быть включены программы специализированных расчетов.

### ***Хроматэк Природный газ***

Программа предназначена для обработки результатов анализа природного газа по М-МВИ-125-03. Программа выполняет:

- расчет теплоты сгорания, плотности, числа Воббе по ГОСТ 22667-82;
- расчет плотности, фактора сжимаемости по ГОСТ 30319.1-96 при стандартных и при заданных условиях;
- расчет молекулярной массы газа;
- расчет средних значений параметров природного газа за любой период времени с возможностью задания условия отбора анализов для расчета.

### ***Хроматэк Сжиженный газ***

Программа предназначена для обработки результатов анализа сжиженного газа по ГОСТ 10679. Программа выполняет расчет плотности и давления сжиженного газа по ГОСТ 28656-90 при заданных температурах.

### ***Хроматэк Gasoline***

Программа предназначена для обработки результатов детального углеводородного анализа бензина по ASTM 5134. Программа определяет:

- групповой состав отдельно по углеводородам C1-C15 в массовых, объемных и мольных долях;
- суммарный групповой состав по классам углеводородов (н-парафины, изопарафины, нафтены, ароматика, олефины);
- плотность при 20 градусах;

- среднюю молекулярную массу групп углеводов;
- расчетное октановое число по исследовательскому методу с расшифровкой доли октанового числа для каждого класса углеводов;
- индивидуальный компонентный состав в массовых, объемных и мольных долях с указанием рассчитанного индекса удерживания Ковача.

### ***Хроматэк Энергетик***

Программа предназначена для диагностики развивающихся дефектов трансформаторного оборудования по составу газов, растворенных в масле. Программа позволяет проводить диагностику трансформаторов:

- по РД 153-34.0-46.302-00;
- по рекомендациям завода “Мосизолятор”, Москва, 1994 г.
- по руководству IEE:199 - 36A/50/CD, май 1995 г.

### ***Хроматэк Дистилляция***

Программа предназначена для обработки результатов анализа нефти и нестабильного газового конденсата по ASTM 2887. Программа строит кривую разгонки и рассчитывает фракционный состав пробы.

## **Состав и компоновка руководства пользователя**

Данное руководство пользователя выпускается в двух формах: электронной и печатной.

### **Электронное руководство**

Электронный вариант руководства представляет собой файл в формате **pdf**, расположенный на дистрибутивном компакт-диске. Для чтения электронного руководства предназначена свободно распространяемая программа **Adobe Acrobat Reader**, которая также присутствует на дистрибутивном диске и устанавливается с него на компьютер.

В электронном руководстве присутствуют описания всех частей ПО (кроме специализированных программ), независимо от его состава.

Электронное руководство можно читать как отдельно, так и в качестве контекстно-зависимой справки к любой из частей ПО. Для того чтобы прочитать описание какого-либо диалогового окна, открытого в данный момент в любой из программ *Хроматэк Аналитик*, достаточно нажать на клавиатуре компьютера клавишу **F1**. Электронное руководство будет открыто на первой странице раздела, посвященного данному диалогу.

### **Печатное руководство**

Печатное руководство, текст которого аналогичен электронному, состоит из трех книг.

В состав первой книги входят главы, посвященные программам базовой части ПО:

- *Панель управления.*

- *Конвертер хроматограмм.*
- *Драйвер USB2COM* (драйвер описан в главе, посвященной *Панели управления*).

В состав второй книги входит глава, посвященная программе обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*

В состав третьей книги входит глава, посвященная программе обработки *Хроматэк Аналитик 1.5*



**Вторая и третья книги данного руководства предваряются главой, посвященной теоретическим основам обработки хроматограмм. В разделе 6 второй книги приведено пошаговое руководство, выполняющее функции быстрой подсказки (памятки). Если вы только начинаете работать с ПО *Хроматэк Аналитик*, вам будет полезно изучить данный раздел руководства пользователя.**

Рекомендуется изучать руководство последовательно, поскольку весь материал изложен в режиме близком к пошаговому, то есть в каждом разделе документа описывается какой-либо этап работы с ПО *Хроматэк Аналитик*, который не может быть выполнен раньше (или его не рекомендуется выполнять раньше), чем этап, описанный до него.

### 1.2.2 Переход с версии “Хроматэк Аналитик 2.2”

В данном разделе описаны отличия ПО *Хроматэк Аналитик 2.2* и *Хроматэк Аналитик 2.5*. Если вы имеете опыт работы с ПО *Хроматэк Аналитик 2.2*, нижеприведенная информация поможет вам быстро освоить работу с новым программным обеспечением. Если вы никогда ранее не работали с ПО *Хроматэк Аналитик 2.2*, вы можете опустить данный раздел.

Преимущества ПО *Хроматэк Аналитик 2.5/1.5* по сравнению с ПО *Хроматэк Аналитик 2.2*:

- Упрощен процесс настройки соединения с хроматографами.
- Возможность получения хроматографических данных от хроматографов других моделей с помощью блока сбора данных (БСД).
- Возможность управления газовыми потоками в хроматографах других моделей с помощью формирователя газовых потоков (ФГП).
- Скорректирован калькулятор газов, рассчитывающий параметры **Давление**, **Скорость** и **Поток** при работе с капиллярной колонкой.
- Возможность выбора программы обработки хроматографической информации в зависимости от задач и предпочтений пользователя.



**Если вы привыкли к программам серии *Хроматэк Аналитик 1.2x*, вы можете использовать разработанную на их основе программу *Хроматэк Аналитик 1.5* для обработки данных, получаемых от хроматографов с процессорным модулем ПМ2 (“Хроматэк Кристалл 5000.1”). Если же вы уже работали с ПО *Хроматэк Аналитик 2.2*, вам не составит большого труда освоить программу обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*. Ваши проекты могут быть преобразованы для их использования в новом ПО в помощью программы *Конвертер хроматограмм*.**

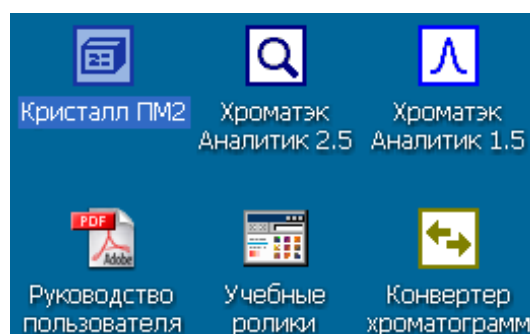
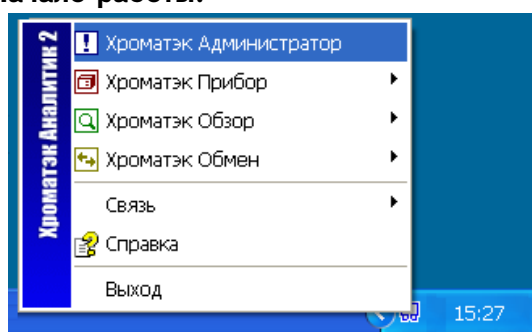
- Значительно упрощен процесс настройки системы для проведения двух одновременных независимых анализов на одном хроматографе.
- ПО *Хроматэк Аналитик 2.5/1.5* позволяет автоматизировать многие “рутинные” анализы и упростить их проведение и настройку.
- Программа *Хроматэк Аналитик 2.5* дополнена новыми операциями обработки хроматографической информации при сохранении неизменными интерфейса и принципов работы, характерных для *Хроматэк Аналитик 2.2*.
- Улучшены функции группировки, сортировки и фильтрации списка хроматограмм.
- Реализована функция защиты хроматограмм-методов от случайного изменения.
- Руководство снабжено большим количеством примеров работы.
- В состав ПО *Хроматэк Аналитик 2.5/1.5* входят учебные видео-ролики, с помощью которых вы сможете быстрее освоить работу с данным ПО.

В таблице 1.2 показаны наиболее заметные отличия ПО *Хроматэк Аналитик 2.2* от *Хроматэк Аналитик 2.5*, на которые начинающий пользователь обратит внимание в первую очередь.

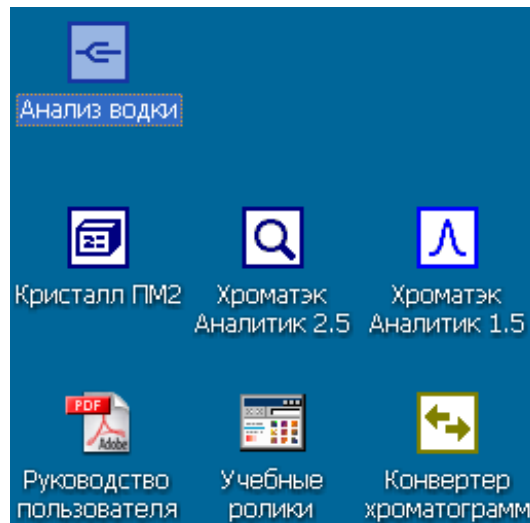
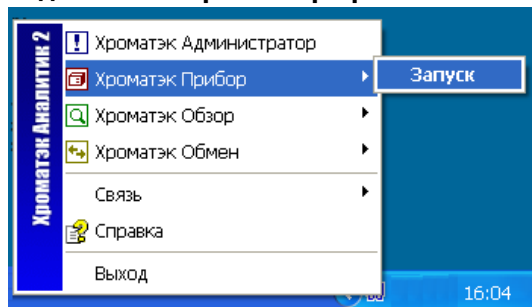
**Таблица 1.2. Отличия ПО *Хроматэк Аналитик 2.2* и *Хроматэк Аналитик 2.5***

Хроматэк Аналитик 2.2	Хроматэк Аналитик 2.5
<p><b>Размещение после установки:</b> Папка программы <b>C:\Program-files\Хроматэк</b>. Папка проектов <b>C:\Мои документы\Хроматэк\Проекты</b>. Размещение ярлыков запуска — System Tray (область в правом нижнем углу экрана компьютера).</p>	<p>Папка программы <b>C:\Program-files\Chromatec</b>. Папка проектов <b>C:\Аналитик 2.5\Проекты</b>. Размещение ярлыков запуска — Рабочий стол Windows.</p>

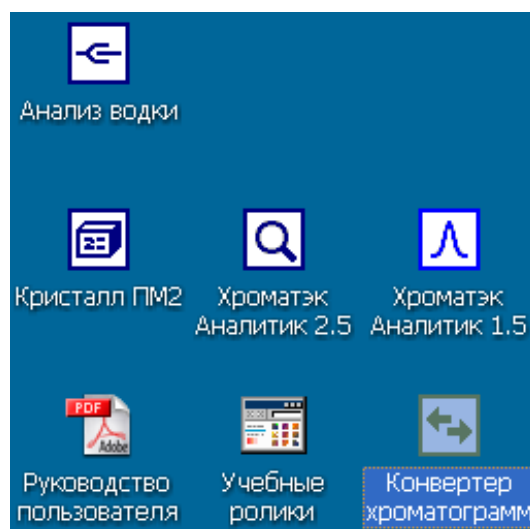
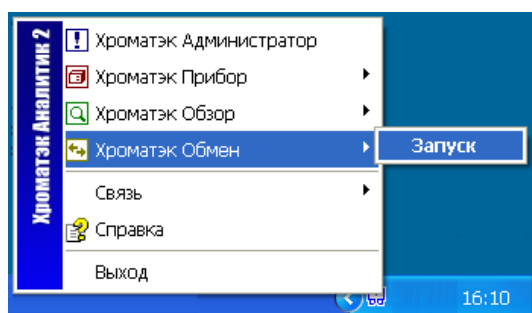
#### Начало работы:



#### Соединение с хроматографом:

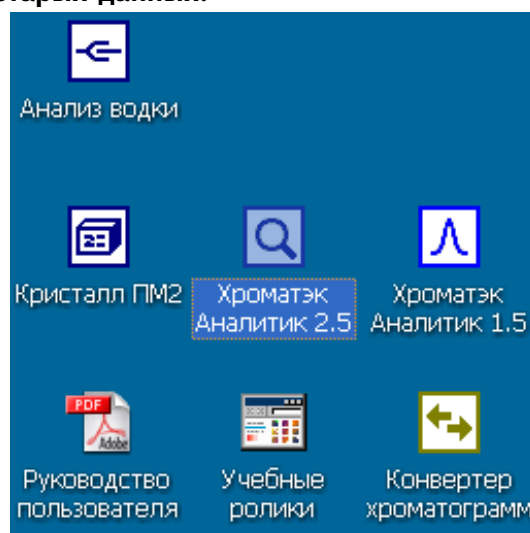
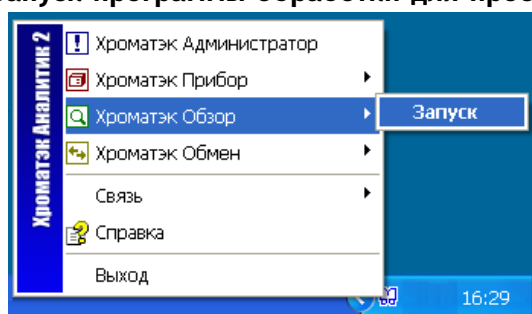


#### Запуск программы для преобразования хроматограмм в различные форматы:

**Запуск программы обработки в процессе проведения анализов:**

В процессе проведения анализов, программа обработки *Хроматэк Обзор* запускается автоматически.

В процессе проведения анализов, программа обработки *Хроматэк Аналитик 2.5* запускается автоматически.

**Запуск программы обработки для просмотра старых данных:**

### 1.2.3 Установка программного обеспечения

Программное обеспечение *Хроматэк Аналитик* предъявляет достаточно невысокие, по современным меркам, требования к аппаратному и программному обеспечению персонального компьютера. Как правило, если ресурсов компьютера хватает для комфортной работы с Windows и офисными приложениями Microsoft, то и работа с *Хроматэк Аналитик* будет приятной.



При комплектации аппаратно-программного комплекса Кристалл-МС масс-спектрометрическим детектором Trace DSQ, в состав комплекса входит программное обеспечение Xcalibur, повышающее системные требования к компьютеру. Для нормального функционирования ПО Xcalibur, на компьютере должна быть установлена операционная система Windows XP Professional (прочие версии Windows XP, а так же другие операционные системы недопустимы).

Минимальные системные требования к компьютеру приведены в таблице 1.3.

**Таблица 1.3. Минимальные требования к компьютеру**

Категория	ХА 1.5	ХА 2.5	Xcalibur
Операционная система	Windows 98/2000/XP	Windows 2000/XP	Windows XP Professional
Оперативная память, Мбайт	32	256	256
Процессор	Pentium	Pentium III	Pentium IV
Разрешение монитора	800x600x16bpp	1024x768x16bpp	1024x768x16bpp
Жесткий диск, Гбайт	8	20	60
Привод CD-ROM	+	+	+
Сетевая карта	Не обязательно	Не обязательно	PCI 10/100mb



ПО *Хроматэк Аналитик 2.5* может функционировать и под управлением операционной системы Windows 98, но в этом случае будет невозможно осуществить соединение с хроматографом по шине USB.

Кроме всего вышеперечисленного вам потребуется манипулятор типа **мышь**, принтер для печати отчетов и свободные порты на компьютере (COM или USB) для подключения хроматографического оборудования.

ПО *Хроматэк Аналитик* поставляется на компакт-диске. Компакт-диск так же содержит:

- Программы для обновления операционной системы компьютера. Эти программы свободно распространяются разработчиком операционной системы и могут быть уже установлены на вашем компьютере. Работа без этих программ невозможна, поэтому, если вы не уверены, присутствуют ли они на вашем компьютере, установите их с компакт-диска *Хроматэк Аналитик*.
- Видеоуроки. Набор видеофайлов, предназначенных для более быстрого обучения работе с ПО *Хроматэк Аналитик*.
- Микропрограммы. Набор различных версий управляющей микропрограммы для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

Для установки программного обеспечения:

- Вставьте в привод CD-ROM Вашего компьютера компакт-диск с программным обеспечением. Дождитесь автоматического запуска программы установки, главное окно которой показано на рисунке 1.2



Если программа установки автоматически не запускается, с помощью любого файлового менеджера (например, Проводника Windows) откройте окно с файлами и папками компакт-диска и запустите на выполнение файл `browser.exe`.

- В списке программ (в левой части окна) выберите программу обработки — **Хроматэк Аналитик 2.5** или **Хроматэк Аналитик 1.5**. На рисунке 1.3 показан вид окна программы установки при выборе программы обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*.
- Выберите ссылку **Установка полного комплекса**.

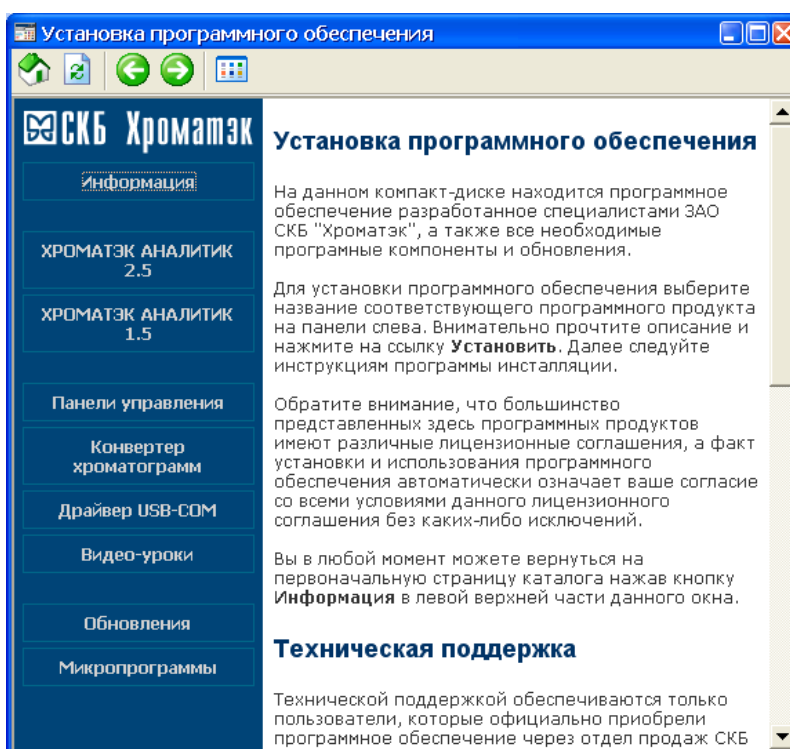


Рисунок 1.2. Установка программного обеспечения “Хроматэк Аналитик”



Ссылка **Установка программы**, присутствующая в данном окне, позволяет установить только программу обработки без каких-либо дополнительных компонентов.

- Ознакомьтесь с лицензионными соглашениями и, приняв их, продолжите установку нажатием кнопки **Далее**.
- В окне **Выбор компонентов** (см. рисунок 1.4) выберите из выпадающего списка опцию **Полная установка** и нажмите кнопку **Далее** для завершения установки ПО. После установки компьютер должен быть перезагружен.



Если на вашем компьютере уже установлена программа *Хроматэк Аналитик 2.5*, при выборе компонентов для установки удалите галочку возле компонента **SQL-Сервер Firebird**.

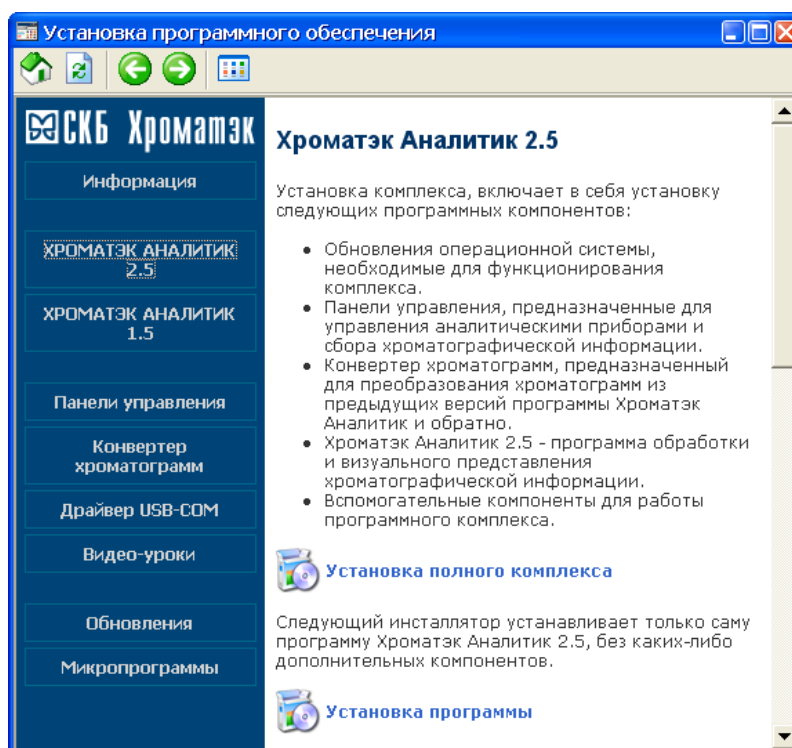


Рисунок 1.3. Выбор комплекса с программой обработки “Хроматэк Аналитик 2.5”

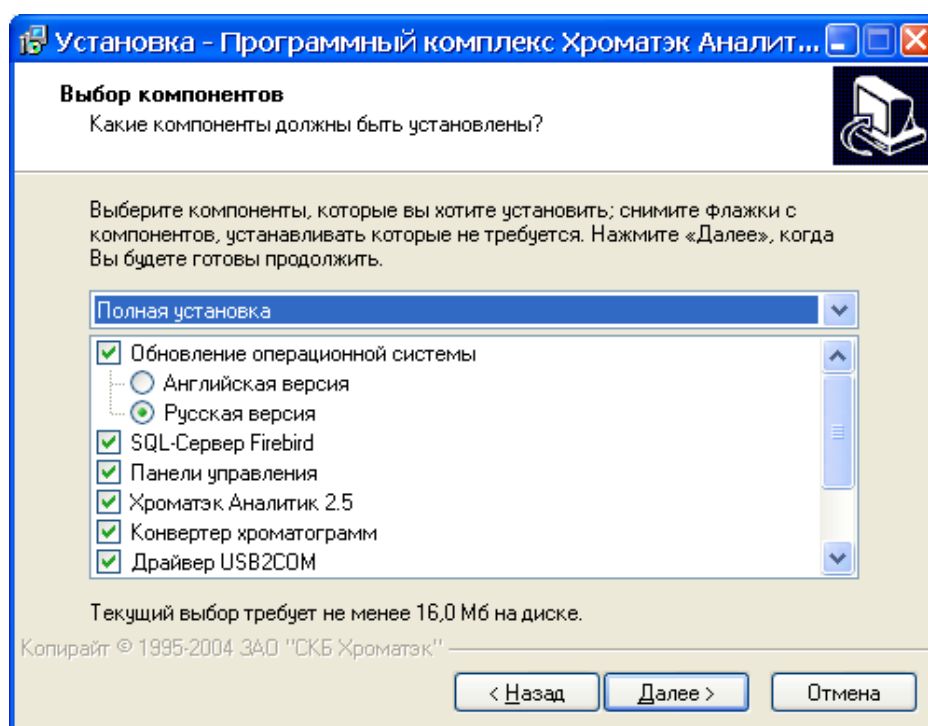


Рисунок 1.4. Установка программного обеспечения. Выбор состава комплекса



Опытные пользователи могут устанавливать не все ПО, а лишь те программы, которые им необходимы. Для этого нужно нажать соответствующую кнопку на панели в левой части окна программы установки (см. рисунок 1.2) и на открывшейся странице выбрать команду *Установка программы*. Если вы не уверены в том, какие компоненты можно не устанавливать, всегда выполняйте полную установку комплекса.



Если в вашем хроматографе установлен сетевой адаптер Ethernet NE-4110S фирмы Мох Tech., необходимо дополнительно установить драйвер сетевого адаптера. Для этого в главном окне программы установки (рисунок 1.2) выберите пункт *Различные программы*. В появившемся списке на правой панели окна выберите команду *Драйвер сетевого адаптера*. Далее следуйте инструкциями в диалоге установки драйвера.

## 1.3 Основные термины и определения

### Активное периферийное устройство

Автоматическое устройство (ДАЖ, ДАГ, ДРП, ДБВ, парогазовый дозатор, кран-дозатор), обладающее возможностью выполнять серию анализов по заданной программе.

### Анализ

Совокупность хроматограмм в проекте, имеющая одинаковый номер анализа. Как правило, в один анализ объединяются хроматограммы повторных определений одной пробы для расчета среднего результата нескольких повторных хроматограмм анализируемой пробы.

### Базовая линия

Воображаемая линия под пиком, соединяющая его начало и конец, необходимая для вычисления параметров пика.

### Внутренний стандарт

Вещество, добавляемое в известном количестве к аликвоте анализируемой смеси при расчете методом внутреннего стандарта. Вещество, используемое в качестве внутреннего стандарта должно быть химически инертно к анализируемым веществам, иметь близкий коэффициент чувствительности к анализируемым веществам, элюироваться довольно близко, но хорошо отделяться от других компонентов смеси. Концентрация внутреннего стандарта в пробе должна иметь один порядок величины с концентрациями анализируемых веществ.

### Время удерживания пика

Время от начала анализа до выхода максимума пика.

### Высота пика

Расстояние от вершины пика до базовой линии.

### Газовая хроматография

Вид хроматографии, где в качестве подвижной фазы используется газ.

### Градуировка

Процедура установления градуировочной зависимости. Одноточечная градуировка - градуировка с использованием одной градуировочной смеси. Многоточечная градуировка - градуировка с использованием двух и более градуировочных смесей. Для версии программы обработки *Хроматэк Аналитик 1.5* традиционно (по аналогии с версиями *Хроматэк*

*Аналитик 1.2х*) вместо термина **градуировка** используется термин **калибровка**. В рамках данного руководства эти два термина имеют одно понятие. Также одно понятие имеют все термины и словообразования, происходящие от **градуировка** и **калибровка**.

### **Градуировочная зависимость**

Связь между величиной отклика детектора (площадь или высота пика) и количеством компонента в пробе.

### **Градуировочные коэффициенты**

Коэффициенты чувствительности детектора к определяемому веществу.

### **График хроматограммы**

График зависимости сигнала детектора от времени.

### **Дрейф**

Изменение сигнала нулевой линии детектора во времени. При поверке хроматографа дрейф нулевой линии детектора оценивается за 1 час.

### **Идентификация**

Операция установки соответствия пика на хроматограмме тому или иному компоненту из списка.

### **Изолиния**

Линия равного значения какой-либо величины на графике. Изолинии дают характеристику непрерывных явлений в некоторый период или момент времени. Например, словосочетание **изолиния расхода газа** сообщает о том, что речь идет о неизменном значении расхода газа в некотором интервале времени.

### **Изотерма**

Изолиния температуры.

### **Индекс удерживания**

Безразмерная величина, характеризующая положение пика вещества на хроматограмме относительно пиков выбранных стандартов. Логарифмический индекс удерживания — индекс удерживания, рассчитанный исходя из логарифмической зависимости при изотермических условиях анализа. Линейный индекс удерживания — индекс удерживания при программировании температуры.

### **Интегрирование**

Операция автоматической разметки пиков на хроматограмме и вычисления их параметров в соответствии с заданными событиями интегрирования.

### **Канал**

Последовательность данных с АЦП датчика хроматографа (например: значения температур, расходов, напряжений детекторов и др.).

### **Количественный расчет**

Расчет количества или концентрации компонента в анализируемой пробе. В программе существуют методы процентной нормализации, внутренней нормализации, внутреннего стандарта, внешнего стандарта, абсолютной градуировки.

### **Компонент**

В хроматографическом анализе **компонент** — вещество, входящее в состав анализируемой

смеси. Интерес представляют компоненты, элюируемые на хроматограмме в виде пиков. В программе *Хроматэк Аналитик компонент* — запись (строка) в таблице **Компоненты**, которая содержит априорную информацию, необходимую для обнаружения пиков и проведения расчетов.

### **Мертвое время**

Время выхода неудерживаемого компонента.

### **Метод**

В программах обработки *Хроматэк Аналитик 1.5* и *Хроматэк Аналитик 2.5* метод представляет собой хроматограмму, содержащую в себе следующую информацию:

- условия проведения анализа (режим хроматографа);
- данные паспорта хроматограммы;
- таблицу компонентов с их характеристиками.

В программе *Хроматэк Аналитик 2.5*, хроматограмма-метод дополнительно содержит настройки отчетов, операций обработки хроматограммы (расчета хроматограммы), в паспорте хроматограммы-метода установлен признак “Метод” и название метода. Ежедневная работа с хроматографом начинается с передачи метода в программе *Хроматэк Аналитик*.

### **Метод абсолютной градуировки**

Метод количественного расчета, проводимый по полученной ранее градуировочной зависимости.

### **Метод внешнего стандарта**

Метод расчета, сходный с методом абсолютной градуировки. Отличается тем, что при градуировке в хроматограф вводится только внешний стандарт (изолированный компонент, разбавленный чистым растворителем). При этом градуировочные коэффициенты других анализируемых веществ по отношению к внешнему стандарту заранее известны и используются при количественном расчете.

### **Метод внутреннего стандарта**

Метод расчета, проводимый по полученной ранее градуировочной зависимости. При проведении анализа в анализируемую пробу добавляется известное количество вещества сравнения, внутреннего стандарта.

### **Метод внутренней нормализации**

Метод расчета, основанный на том, что сумма исправленных площадей всех пиков на хроматограмме равна определенной величине, называемой коэффициентом нормализации. Исправленная площадь пика представляет собой произведение коэффициента чувствительности детектора и измеренной площади пика.

### **Метод процентной нормализации**

Метод количественного расчета, основанный на том, что сумма площадей или высот всех пиков на хроматограмме равна 100%.

### **Многоканальная хроматограмма**

Графики зависимостей сигналов двух и более детекторов от времени, полученные в результате одного хроматографического разделения.

**Недетектируемый компонент**

Компонент, не элюируемый на хроматограмме анализируемой пробы, но искусственно учитываемый в количественном расчете хроматографического анализа.

**Нулевая линия**

Фоновый сигнал детектора, регистрируемый на хроматограмме при прохождении в детекторе газа-носителя без пробы. Измерение высоты пика или его площади производится по отношению к нулевой линии.

**Окно поиска**

Интервал шкалы времени на хроматограмме, выраженный в %, в котором происходит поиск компонента. Задается в столбце окно для каждого компонента.

**Операция**

В программе *Хроматэк аналитик 2.5* — программный модуль, выполняющий определенные действия над данными, хранящимися в базе (интегрирование, печать, экспорт и пр.).

**Панель инструментов**

Прямоугольная область с набором кнопок, которые используются для быстрого выполнения команд.

**Паспорт**

Набор данных, характеризующих хроматограмму в целом (например: имя оператора, информация о пробе, и др.)

**Пассивное периферийное устройство**

Автоматическое устройство (пиролитический испаритель, кран-переключатель), не обладающее возможностью выполнять серию анализов.

**Пик**

Создается и содержит данные, полученные в результате обработки хроматограммы.

**Площадь пика**

Область, ограниченная профилем пика и базовой линией.

**Последовательность операций**

В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* — последовательность выполняемых друг за другом операций.

**Предел детектирования**

Наименьшее количество вещества, которое может быть обнаружено данным детектором или по данной аналитической методике. Обычно за предел детектирования принимается такое количество вещества, которое вызывает хроматографический пик амплитудой превышающей амплитуду шумов в 2 раза.

**Проба**

Анализируемая смесь, вводимая в хроматограф для проведения градуировки или анализа.

**Проект**

В программе *Хроматэк аналитик 2.5* — зарегистрированная база данных, в которой содержатся результаты хроматографических анализов, методы их проведения и создания отчетов.

**Профиль коррекции**

Хроматограмма полученная в результате выполнения холостого анализа, подвергнутая специальной обработке (фильтрации, удалению ложных пиков). Эта хроматограмма используется при выполнении операции **Вычитание хроматограммы** для коррекции нулевой линии в программе обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*.

**Сеанс**

Процесс получения хроматографической или диагностической информации от аналитического прибора и ее обработка. Сеанс позволяет регистрировать данные с одного или нескольких каналов хроматографа независимо от состояния других каналов в текущий момент. Настройки сеанса определяют, какие именно данные будут получены, а также где они будут размещены и какой программой (*Хроматэк Аналитик 1.5* или *Хроматэк Аналитик 2.5*) обработаны.

**События интегрирования**

Параметры, позволяющие более тонко настроить алгоритм интегрирования пиков.

**Соединение**

Группа настроек *Панели управления*, определяющих тип и параметры связи с хроматографом: номер СОМ-порта, к которому подключен прибор, название данного соединения, отличающее его от других, и набор созданных в нем сеансов.

**Холостой анализ**

Анализ без ввода пробы.

**Хроматограмма**

Содержит информацию, полученную в результате одного хроматографического разделения:

- данные каналов;
- паспорт;
- список действий и необходимые параметры по обработке.

Несколько хроматограмм одной пробы в проекте объединяются в Анализ.

**Хроматография**

Физико-химический метод разделения, основанный на разности коэффициентов распределения разделяемых компонентов между двумя фазами: неподвижной и подвижной.

**Шум**

Высокочастотные флуктуации сигнала нулевой линии детектора.



## Глава 2

# Панель управления

### 2.1 Основные сведения о программе

Программа *Панель управления* входит в состав базовой части программного обеспечения *Хроматэк Аналитик*. Ее назначение — управление аналитическими приборами серии “Хроматэк Кристалл”, а также сохранение и передача получаемой хроматографической информации другим программам, входящим в состав ПО *Хроматэк Аналитик*, для ее последующего визуального представления и обработки.

По умолчанию в состав программного обеспечения *Хроматэк Аналитик* входят три *Панели управления*, различающихся по типам процессорных модулей хроматографов. Необходимый тип *Панели управления* выбирается на этапе инсталляции ПО (могут быть выбраны все три панели).

#### **Панель управления Кристалл-ПМ2**

Эта программа осуществляет управление следующими приборами, имеющими в своем составе процессорный модуль ПМ2:

- Хроматограф “Хроматэк Кристалл-2000М” (выпуск — с июня 2004 года).
- Хроматограф “Хроматэк Кристалл-5000.1”.
- Блок сбора и обработки данных (БСД) “Хроматэк Кристалл”.
- Формирователь газовых потоков (ФГП) “Хроматэк Кристалл ФГП”.

#### **Панель управления Кристалл-ПМ1**

Эта программа осуществляет управление следующими приборами, имеющими в своем составе процессорный модуль ПМ1:

- Хроматограф “Хроматэк Кристалл-2000М” (выпуск — до июня 2004 года).
- Хроматограф “Хроматэк Кристалл-5000.2”.

## Панель управления Кристалл-2000

Программа обеспечивает работу с хроматографом “Кристалл-2000”;

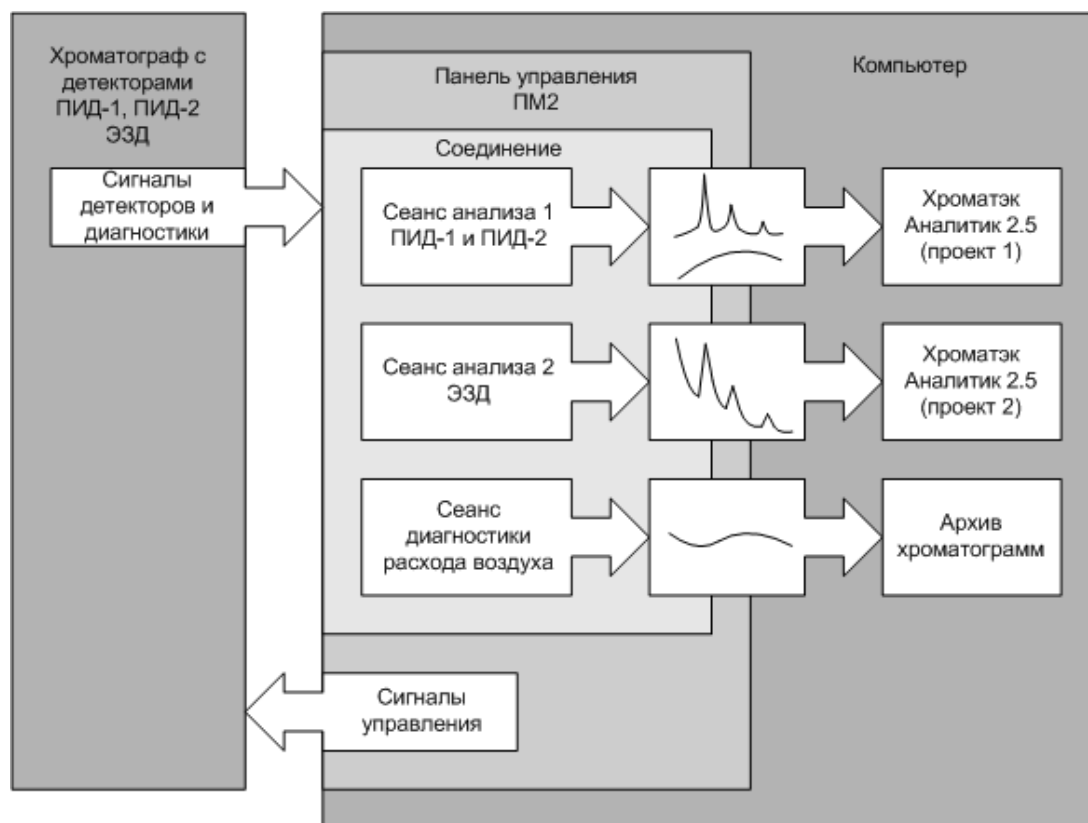
Использование *Панели Управления* позволяет решать широкий круг задач — от простых, рутинных анализов до сложных задач, требующих проведения двух одновременных и независимых анализов на одном хроматографе.

Успешность реализации сложных задач стала возможной благодаря использованию в программе идеи сеанса.

В *Панель управления* от хроматографа поступает большое число данных (данные с детекторных каналов, диагностических каналов). Среди них одни данные для пользователя являются более значимыми (например, данные с детекторных каналов), другие представляют интерес лишь для узкого круга специалистов. Создание сеанса позволяет выделить из общего потока данных именно ту информацию, которая необходима для решения определенной задачи. При необходимости одновременного решения нескольких задач для каждой из них создается и настраивается отдельный сеанс.



**Сеанс — процесс получения хроматографической или диагностической информации от аналитического прибора и ее обработка. Сеанс позволяет регистрировать данные с одного или нескольких каналов хроматографа независимо от состояния других каналов в текущий момент. Настройки сеанса определяют, какие именно данные будут получены, а также где они будут размещены и какой программой (*Хроматэк Аналитик 1.5* или *Хроматэк Аналитик 2.5*) обработаны.**



**Рисунок 2.1. Пример использования сеансов в программе “Панель управления”**

На рисунке 2.1 показан пример одновременного использования нескольких сеансов. В этом примере из всех данных, поступающих от хроматографа (детекторные и диагностические

сигналы), выделены три потока (сеанса). В двух сеансах происходит обработка сигналов с детекторов, а в третьем — обработка одного из диагностических сигналов. Все остальные сигналы, идущие от хроматографа, не обрабатываются.



В хроматографической практике наиболее распространен случай, когда на хроматографе проводится только один анализ, и из общего потока данных необходимо выделить сигнал, поступающий от одного детектора. В подобной ситуации оператору достаточно создать только один сеанс. В следующих разделах текущей главы мы будем рассматривать именно такой случай. Более сложные задачи, предполагающие проведение нескольких анализов на одном хроматографе, подробно рассматриваются в разделе 2.6.

## 2.2 Подключение хроматографа к компьютеру



Для того чтобы с помощью компьютерного программного обеспечения можно было управлять хроматографом, он должен быть подключен к компьютеру. Хроматографы с процессорным модулем ПМ2 могут быть подключены к компьютеру:

- через последовательный COM-порт;
- с помощью универсальной шины USB;
- через локальную сеть Ethernet.

Если Ваш хроматограф подключен через COM-порт, никаких дополнительных настроек не требуется и вы можете сразу приступить к созданию нового соединения (см. раздел 2.2.3).

### 2.2.1 Особенности подключения по шине USB

В том случае, если подключение осуществлено с помощью универсальной шины USB, на стадии установки ПО должен был быть установлен драйвер USB2COM, преобразующий подключение по USB-шине в виртуальный COM-порт.

Слово “виртуальный” в данном контексте означает, что физически данный COM-порт не существует, а лишь создается специальным программным обеспечением, входящим в состав драйвера. Несмотря на это, с ним можно работать так же, как и с любым реальным COM-портом.

При первом включении хроматографа, подключенного по USB, начнется автоматическая настройка виртуального COM-порта.

На экране появляется окно (рисунок 2.2.1), предлагающее установить устройство USB High Speed Serial Converter. Не изменяя ничего в этом окне, нажмите кнопку **Далее**. В ответ на следующее сообщение (рисунок 2.2.2). Нажмите на кнопку **Все равно продолжить**. После завершения установки устройства нажмите кнопку **Готово** в окне на рисунке 2.2.3.

Далее Windows автоматически начнет настройку порта USB Serial port (Crystal-PM2). Для завершения настройки в диалоговых окнах на рисунках 2.2.4-6 выполните действия аналогичные вышеописанным.



Рисунок 2.2. Преобразование соединения по USB в виртуальный COM-порт



Если в вашем компьютере установлена плата расширения (мультикарта), позволяющая подключать дополнительные COM-порты, виртуальный COM-порт может быть определен неправильно и иметь номер, одинаковый с физическим COM-портом. В этом случае номер COM-порта должен быть задан вручную. Для этого:

- нажмите на панели задач Windows кнопку Пуск и выберите в меню Панель управления команду Система;
- в появившемся диалоге перейдите на закладку Оборудование и нажмите кнопку Диспетчер устройств. Появится окно, показанное на рисунке 2.3. На этом рисунке виртуальный COM-порт выделен синим курсором в группе Порты (COM и LPT);
- нажмите правую кнопку мыши на названии виртуального COM-порта и в появившемся контекстном меню выберите команду Свойства.
- перейдите на закладку Port Settings;
- нажмите кнопку Advanced;
- из выпадающего списка COM Port Number (в левом верхнем углу окна) выберите новый номер COM-порта (например, если в компьютере существует четыре физических COM-порта, обозначьте виртуальный как COM-5).

После переименования COM-портов необходимо перезагрузить компьютер.

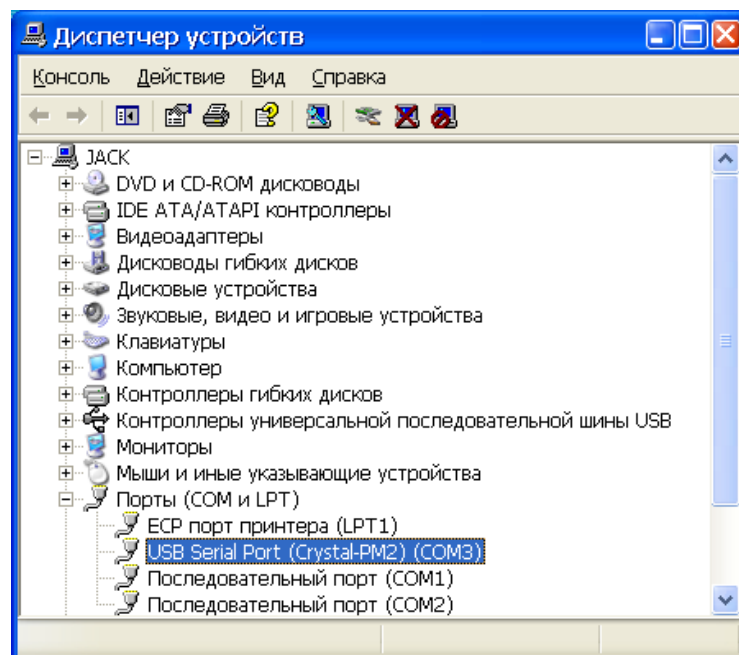


Рисунок 2.3. Определение номера виртуального COM-порта

## 2.2.2 Особенности подключения через Ethernet

В том случае, если подключение осуществлено с помощью Ethernet, на стадии установки ПО должен был быть установлен драйвер Ethernet2COM, преобразующий подключение по Ethernet в виртуальный COM-порт.

Включение хроматографа в локальную сеть Ethernet осуществляется с помощью сетевого адаптера на базе платы Моха NE-4110S.



**На заводе-изготовителе в конфигурационные настройки сетевого адаптера внесен IP-адрес 192.168.1.1.**

**Для использования данного устройства в вашей локальной сети необходимо изменить IP-адрес. За получением нового IP-адреса обратитесь к сетевому администратору вашего предприятия.**

Для управления адаптером используется драйвер, устанавливаемый вместе с ПО *Хроматэк Аналитик*.

Для установки драйвера в главном окне программы установки выберите пункт **Различные программы**. В появившемся списке на правой панели окна выберите команду **Драйвер сетевого адаптера**. Далее следуйте инструкциями в диалоге установки драйвера.

После установки драйвера на рабочем столе появляется ярлык *Network Enabler Administrator 2.7*. Перед началом работы драйвер необходимо настроить. Для этого:

- С помощью ярлыка запустите программу Network Enabler Administrator 2.7.
- Щелчком правой клавиши мыши на элементе **Configuration** откройте контекстное меню и выберите пункт **Broadcast Search** (см. рисунок 2.4).
- На экране появится окно **Searching** (см. рисунок 2.5). В течении 5 секунд система находит сетевое устройство, после чего окно **Searching** автоматически закрывается.
- Щелчком правой клавиши мыши на выделенном устройстве откройте контекстное меню и выберите пункт **Configure** (см. рисунок 2.6).
- В появившемся диалоге **Configurtion** на закладке **Network** задайте IP-адрес и маску сети, полученные у сетевого администратора вашего предприятия (см. рисунок 2.7).
- На панели **Function** выберите элемент **COM-mapping**. Щелчком правой кнопки мыши откройте контекстное меню и выберите пункт **Add target** (см. рисунок 2.8).
- В окне, показанном на рисунке (см. рисунок 2.9) нажмите **ОК**.
- На панели **COM mapping - 1 COM** выделите созданный COM-порт. Для его настройки откройте контекстное меню и выберите пункт **COM Setting** (см. рисунок 2.10).
- Выберите номер COM-порта (см. рисунок 2.11).



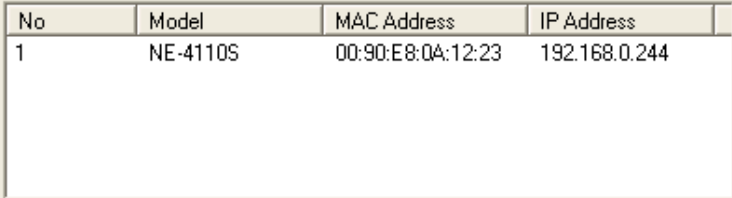
**Созданный COM-порт не должен иметь номер совпадающий с уже присутствующими в компьютере COM-портами.**

- Подтвердите изменения, выбрав в контекстном меню пункт **Apply changes**.

После настройки виртуального COM-порта с хроматографом, включенным в локальную сеть, можно работать, как с любым другим, подключенным непосредственно к данному компьютеру с помощью COM-порта.



### Рисунок 2.4. Старт поиска сетевого устройства



### Рисунок 2.5. Автоматическое обнаружение сетевого устройства

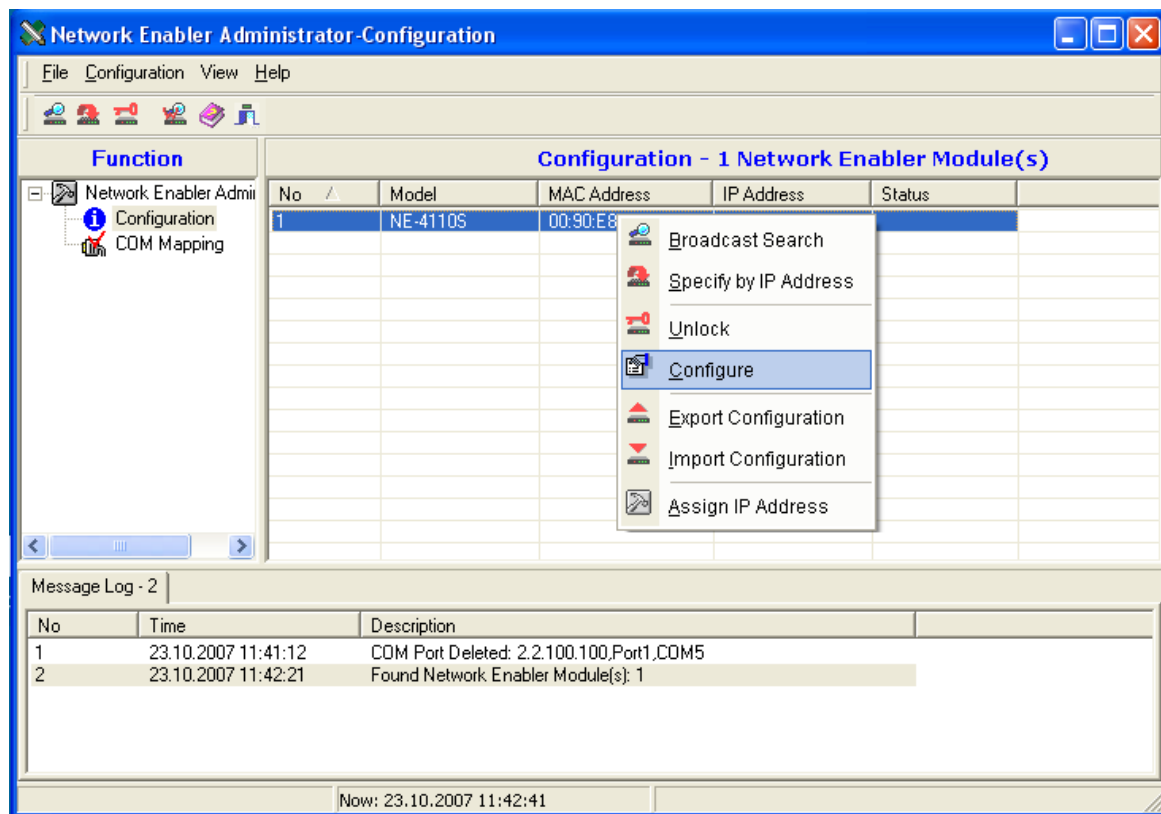


Рисунок 2.6. Выбор диалога конфигурирования устройства

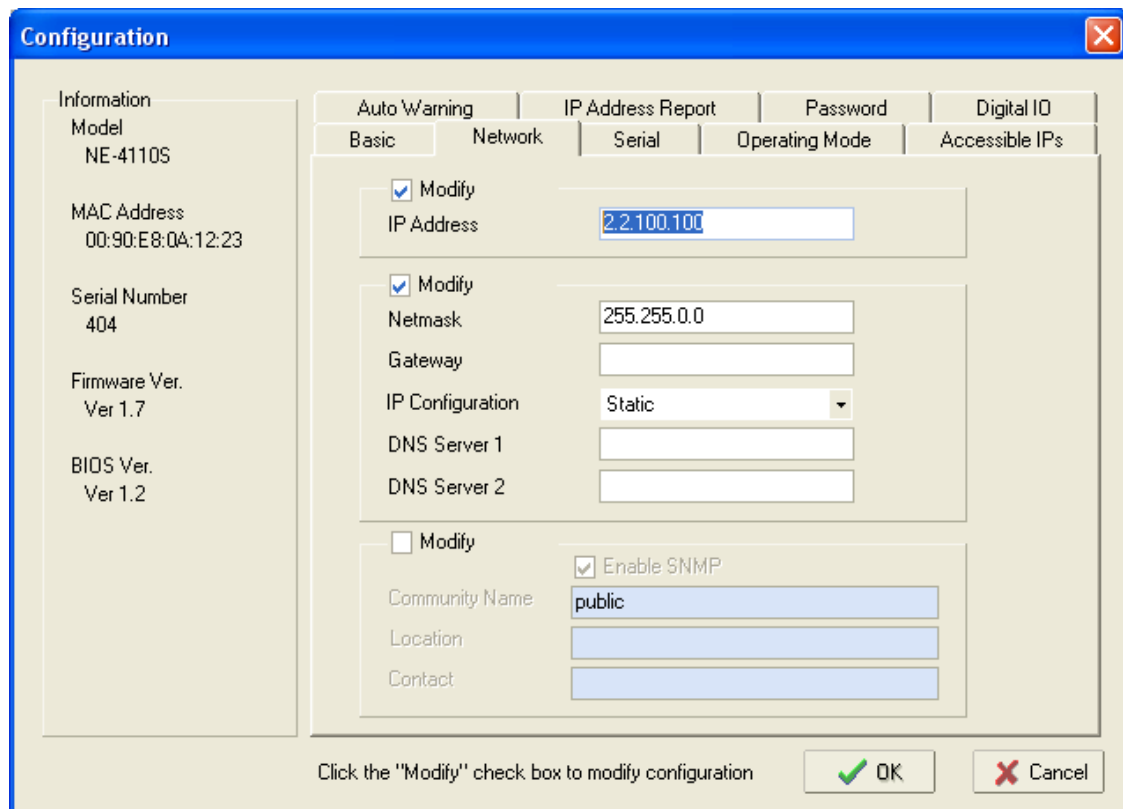


Рисунок 2.7. Изменение IP-адреса

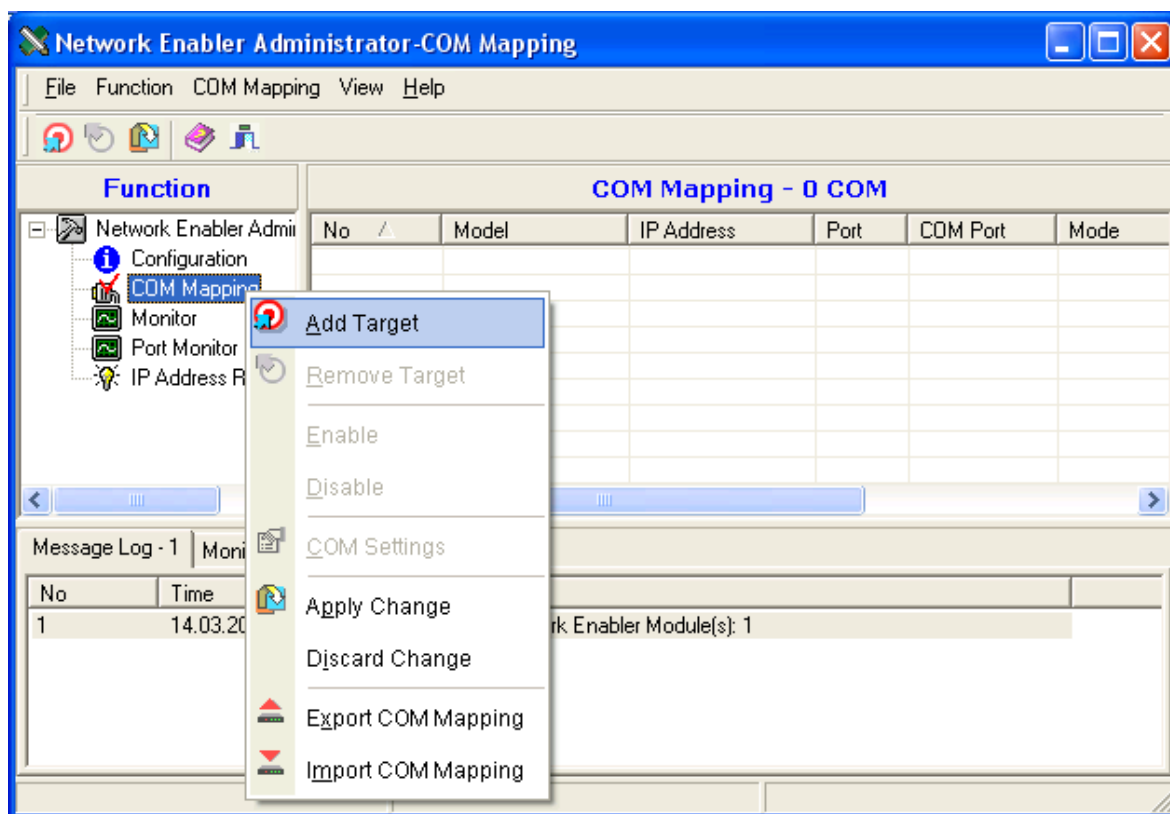


Рисунок 2.8. Добавление нового COM-порта

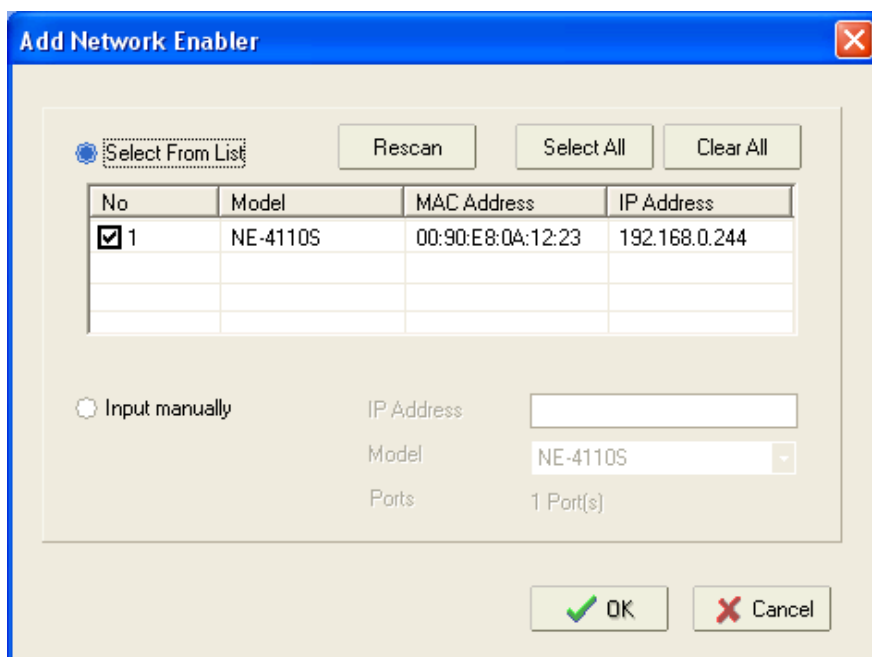


Рисунок 2.9. Добавление нового COM-порта

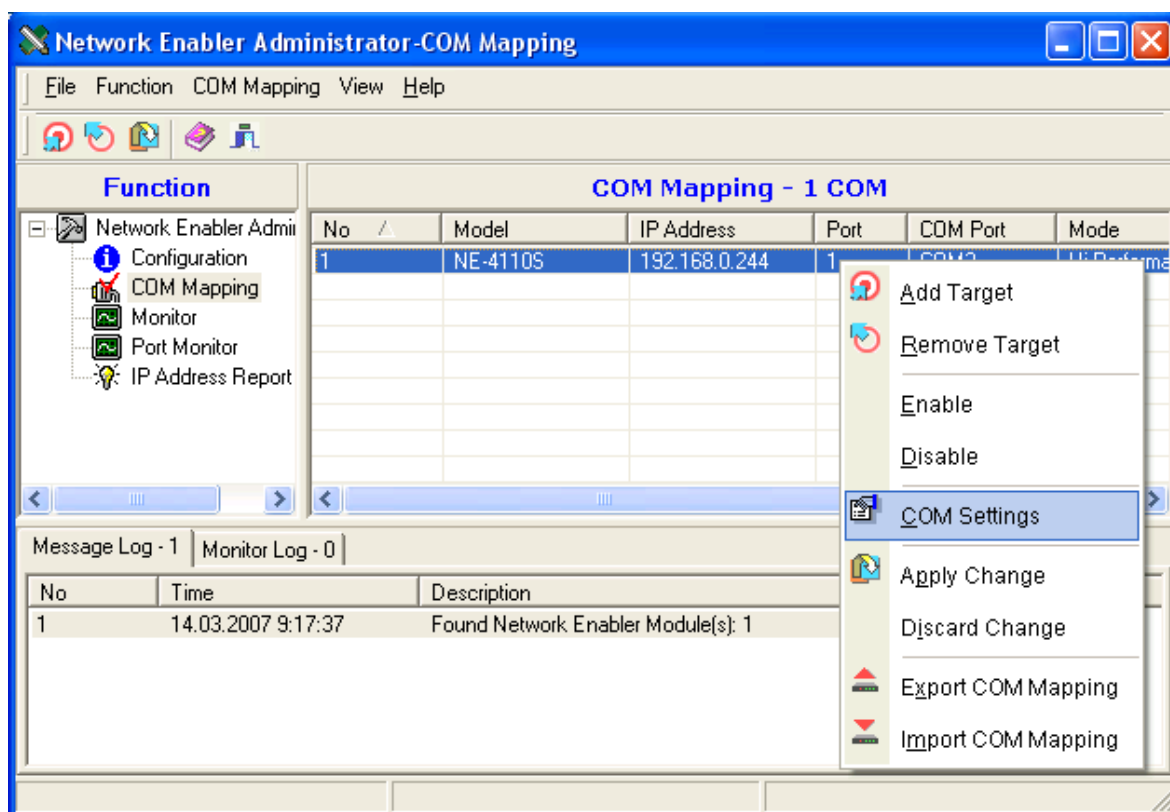


Рисунок 2.10. Выбор настройки COM-порта

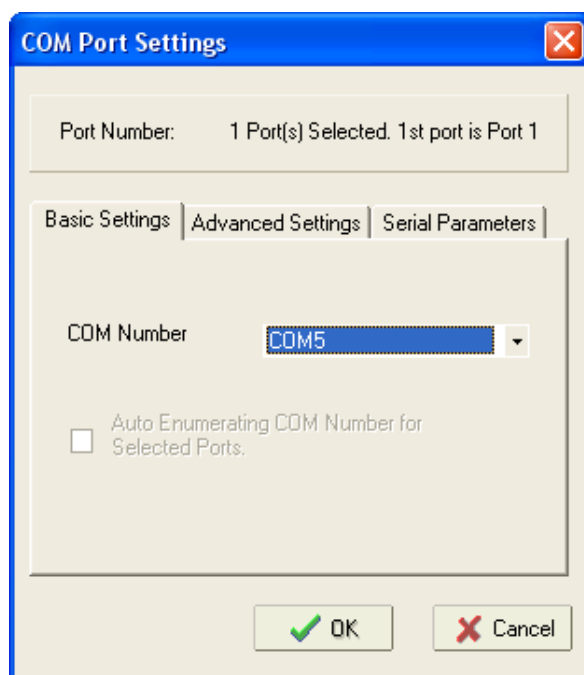


Рисунок 2.11. Задание номера COM-порта

### 2.2.3 Создание нового соединения

Работа с ПО *Хроматэк Аналитик* начинается с создания **соединения** с хроматографом в программе *Панель управления*.



**Соединение** — процесс установления связи программы *Панель управления* с прибором. Данный процесс выполняется в соответствии с группой настроек программы, определяемых пользователем и позволяющих для каждого подключенного к компьютеру хроматографа задать индивидуальные параметры связи.

Ярлыки программ, входящих в состав ПО *Хроматэк Аналитик* располагаются на рабочем столе Windows. Для создания нового соединения выполните двойной щелчок мышью на ярлыке:

- **Кристалл ПМ2**, если вы хотите настроить соединение с хроматографом, оборудованным процессорным модулем ПМ2;
- **Кристалл ПМ1**, если вы хотите настроить соединение с хроматографом, оборудованным процессорным модулем ПМ1;
- **Кристалл 2000**, если вы хотите настроить соединение с хроматографом, оборудованным процессорным модулем Кристалл-2000.

На экране появится диалог, показанный на рисунке 2.12. В данном диалоге вы можете:

- **Добавить** новое соединение.
- **Удалить** существующее соединение.
- Выполнить **Настройку** соединения, выбранного в списке.



При нажатии на кнопку **Добавить** выдается сообщение: **Использовать упрощенный вариант настройки соединения?**. Если вы еще не имеете достаточного опыта работы с программой *Панель управления*, нажмите в окне запроса кнопку **Да**, для запуска вспомогательной программы **Мастер** нового соединения, упрощающей процесс создания соединения для начинающих пользователей.

При создании соединения с помощью **Мастера** формируется минимальный набор настроек, обеспечивающий полнофункциональное управление большинством аналитических задач. Если вам все же требуется получить доступ к большому количеству функций *Панели управления* и вы достаточно хорошо понимаете идеологию Сеансов, изучите раздел 2.7 данного руководства. Подробно о сеансах см. раздел 2.6.

После запуска **Мастера** на экране появится первое окно (рисунок 2.13).

Мастер предлагает пользователю в пошаговом режиме ответить на ряд вопросов, необходимых для создания соединения.

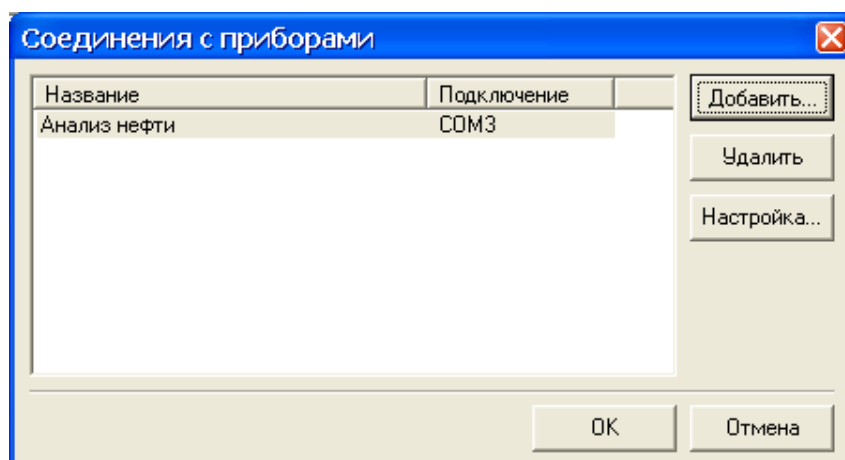


Рисунок 2.12. Диалог “Соединения с приборами”

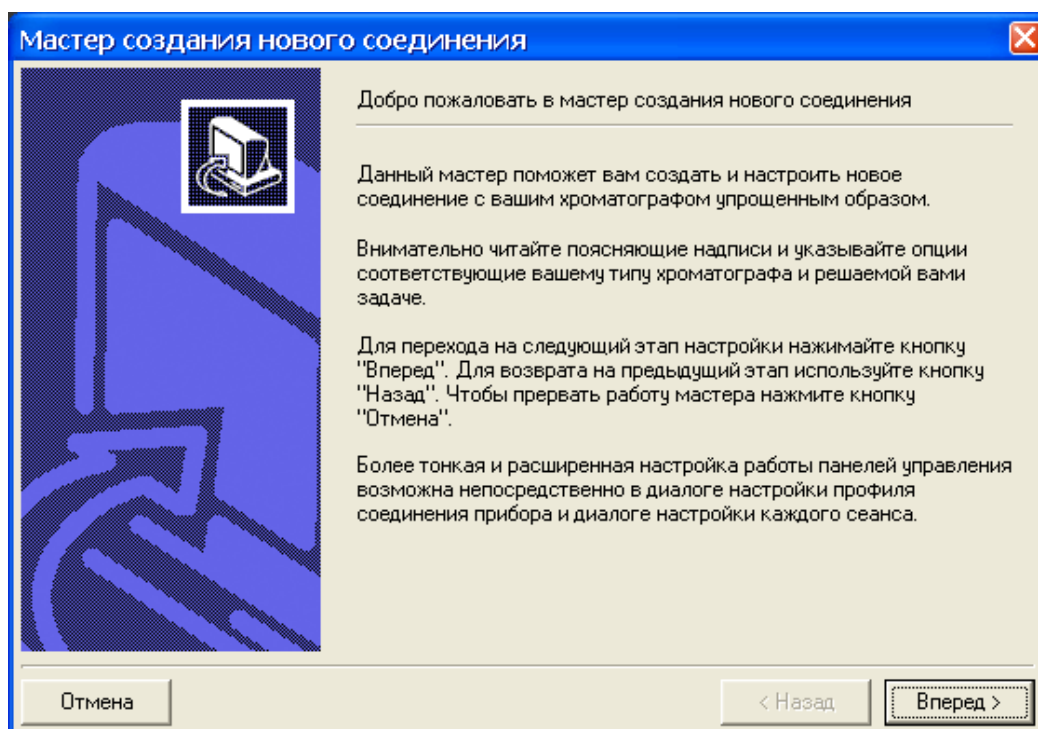


Рисунок 2.13. Мастер создания нового соединения

## Шаг 1

Укажите COM-порт, по которому хроматограф соединен с компьютером (рисунок 2.14).

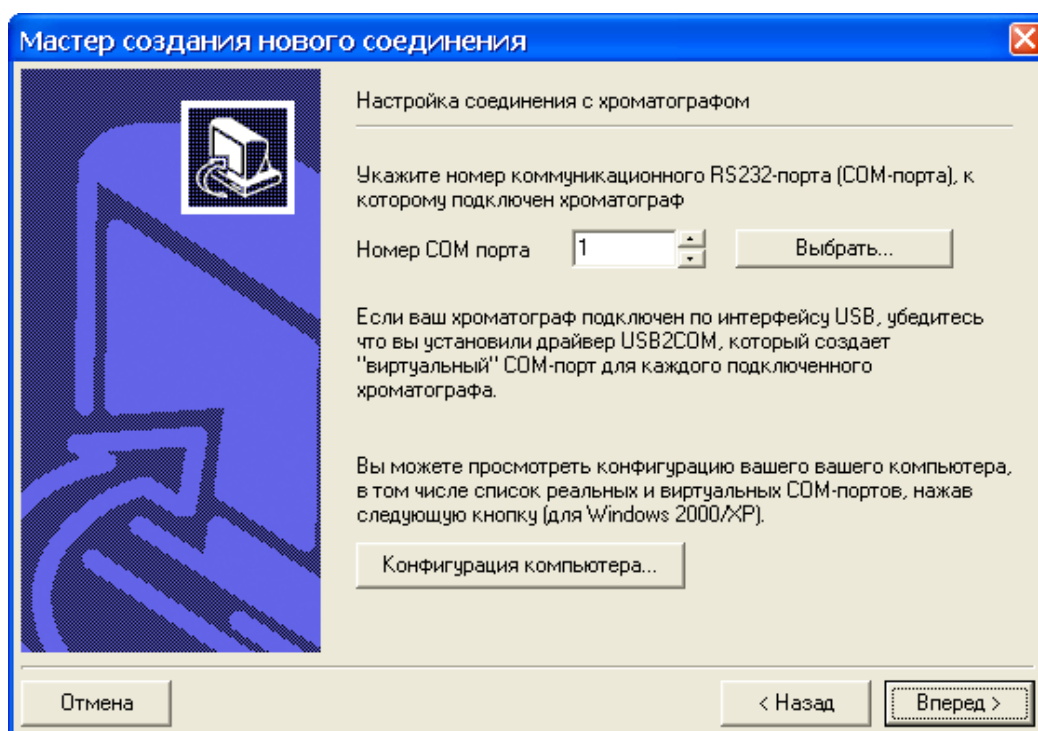


Рисунок 2.14. Мастер создания нового соединения. Шаг 1. Выбор COM-порта

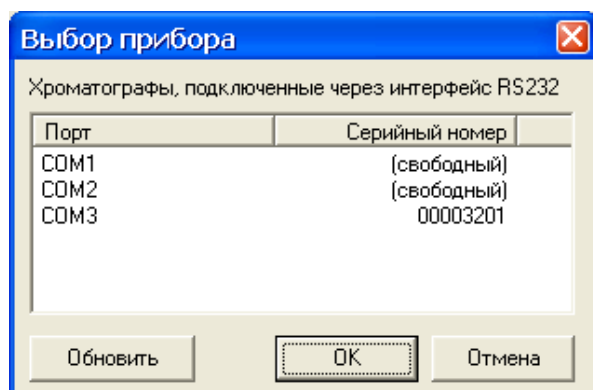


Рисунок 2.15. Диалог "Выбор прибора"

Если вы затрудняетесь в определении, к какому COM-порту подключен хроматограф, воспользуйтесь диалогом **Выбор прибора**, показанным на рисунке 2.15. Для запуска данного диалога нажмите на кнопку **Выбрать**.

При использовании соединения по универсальной шине USB предварительно должна быть выполнена процедура создания виртуального COM-порта (см. раздел 2.2.1).

Вы можете просмотреть номера виртуальных COM-портов с помощью стандартного диалога Windows *Диспетчер устройств*. Для этого нажмите кнопку **Конфигурация компьютера** и, с помощью стандартного диалога Windows *Диспетчер устройств* выберите в списке категорию **Порты (COM и LPT)**.

Обозначение виртуального COM-порта имеет запись вида: **USB serial port (Crystal-PM2)(COM-3)** (это лишь пример, номер COM-порта может быть другим).

**Шаг 2**

Введите **Название** соединения (рисунок 2.16). Если необходимо, введите комментарий к данному соединению.

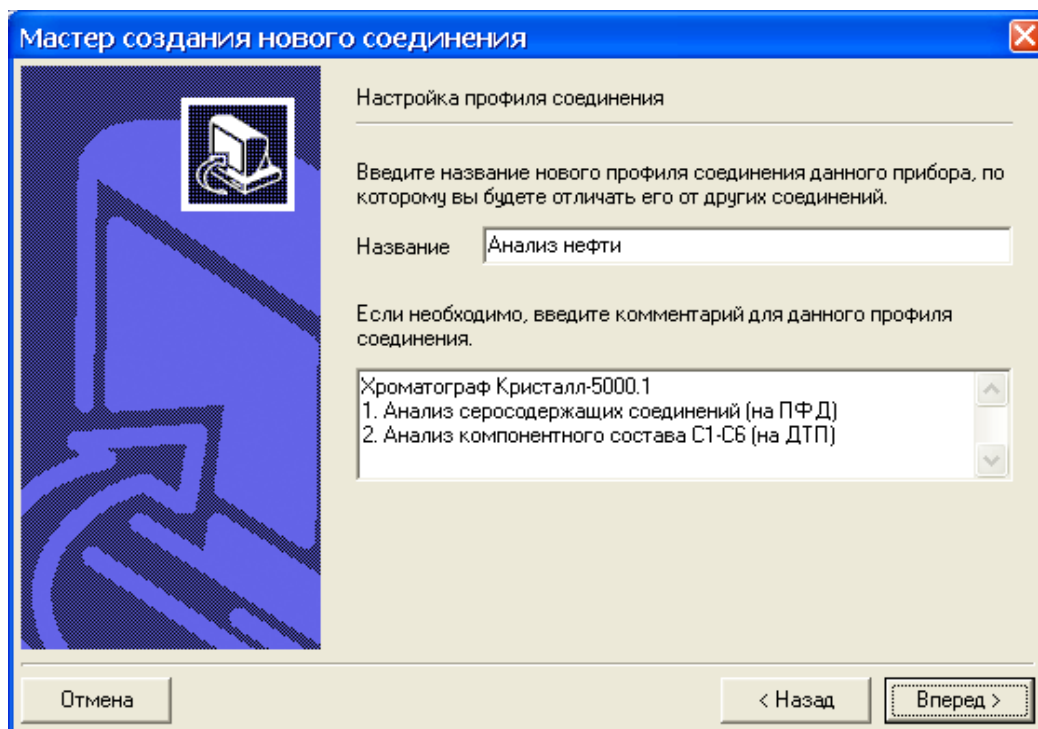


Рисунок 2.16. Мастер создания нового соединения. Шаг 2. Название соединения

### Шаг 3

Создайте ярлык для запуска данного соединения (рисунок 2.17). Ярлык может быть размещен на рабочем столе Windows или располагаться в папке **Автозагрузка**. В последнем случае *Панель управления* с данным соединением будет запускаться сразу же после загрузки Windows. Если вы работаете с хроматографом не постоянно, не устанавливайте признак автозагрузки.

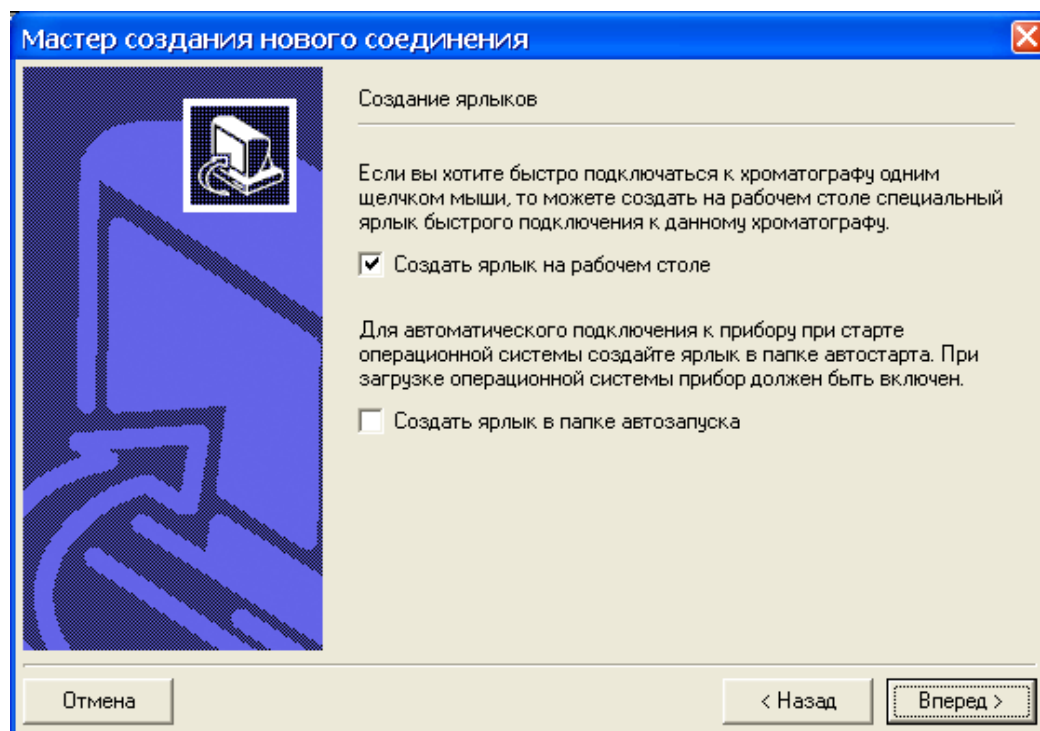
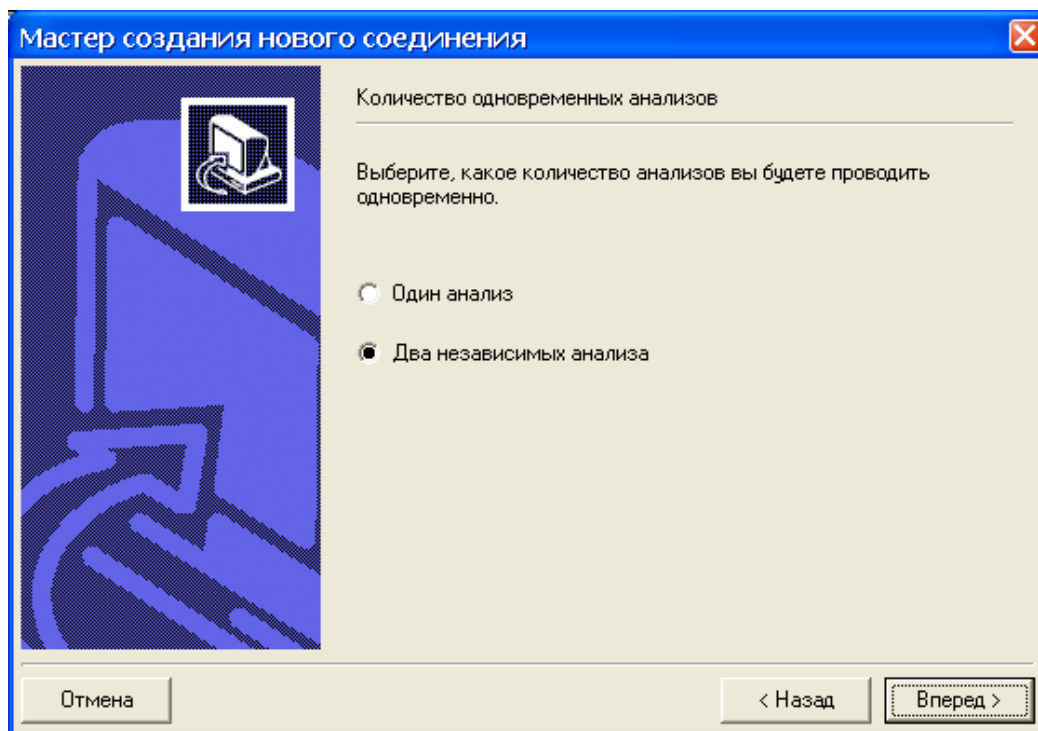


Рисунок 2.17. Мастер создания нового соединения. Шаг 3. Создание ярлыка

**Шаг 4**

Как правило, одна конфигурация хроматографа позволяет решать несколько задач. Если есть такая необходимость, задачи могут решаться по очереди, но бывают случаи, когда возможно одновременное решение 2-х задач. Укажите, какое количество независимых анализов вы будете проводить одновременно, один или два (рисунок 2.18).

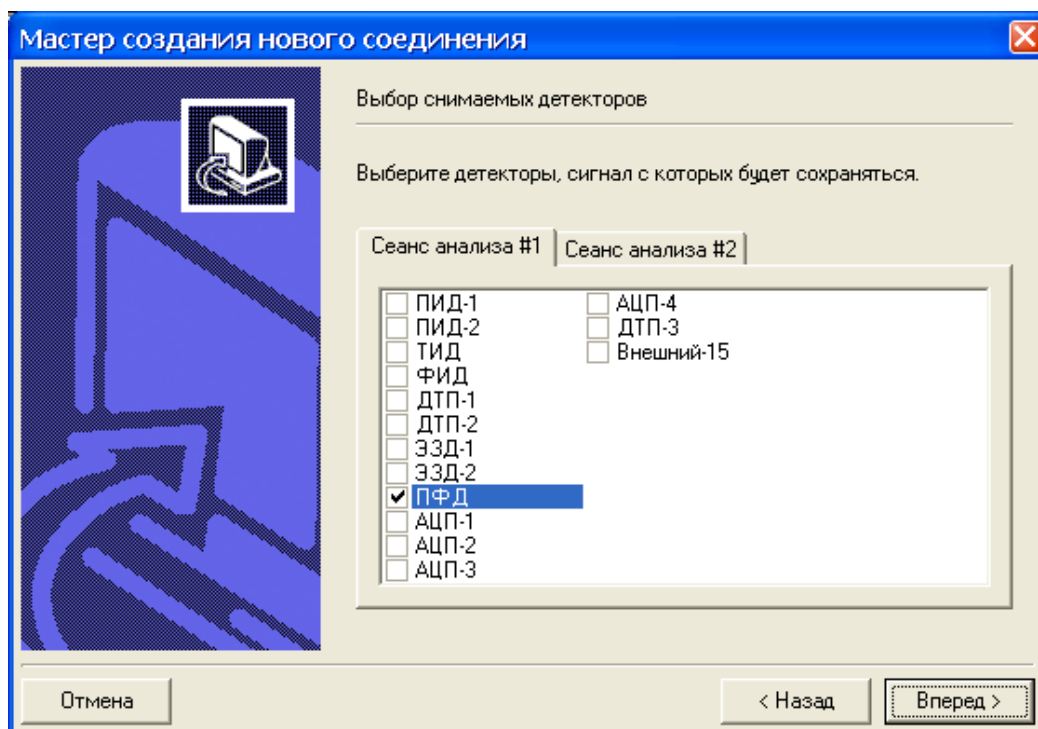


**Рисунок 2.18. Мастер создания нового соединения. Шаг 4. Выбор числа независимых анализов**

- Если вы будете решать с помощью хроматографа только одну аналитическую задачу, выберите опцию **Один анализ**. *Мастер нового соединения* создаст один единственный сеанс.
- Если же Вам необходимо решать две аналитические задачи (например, Вам необходимо анализировать два типа проб, детектируемых разными детекторами и разделяющихся на различных колонках), причем анализы, соответствующие каждой из задач нужно выполнять независимо друг от друга и одновременно, выберите опцию **Два независимых анализа**. Будет создано два сеанса, из которых первый будет выполняться при нажатии на хроматографе кнопки **Старт 1**, а второй — при нажатии кнопки **Старт 2**. Работа с двумя одновременными независимыми анализами описана в разделе 2.6.

**Шаг 5**

Выберите детекторы, сигнал с которых будет сохраняться в хроматограммах. На рисунке 2.19 показана ситуация, когда на предыдущем этапе работы *Мастер нового соединения* была выбрана опция **Два независимых анализа**. В этом случае детекторы для каждого из сеансов анализов выбираются на соответствующих закладках. Если на предыдущем этапе выбрана опция **Один анализ**, в текущем окне закладка **Сеанс анализа #2** будет отсутствовать.



**Рисунок 2.19. Мастер создания нового соединения. Шаг 5. Выбор детекторов**

## Шаг 6

Выберите программу в которой будет проводится обработка получаемых хроматограмм (рисунок 2.20).

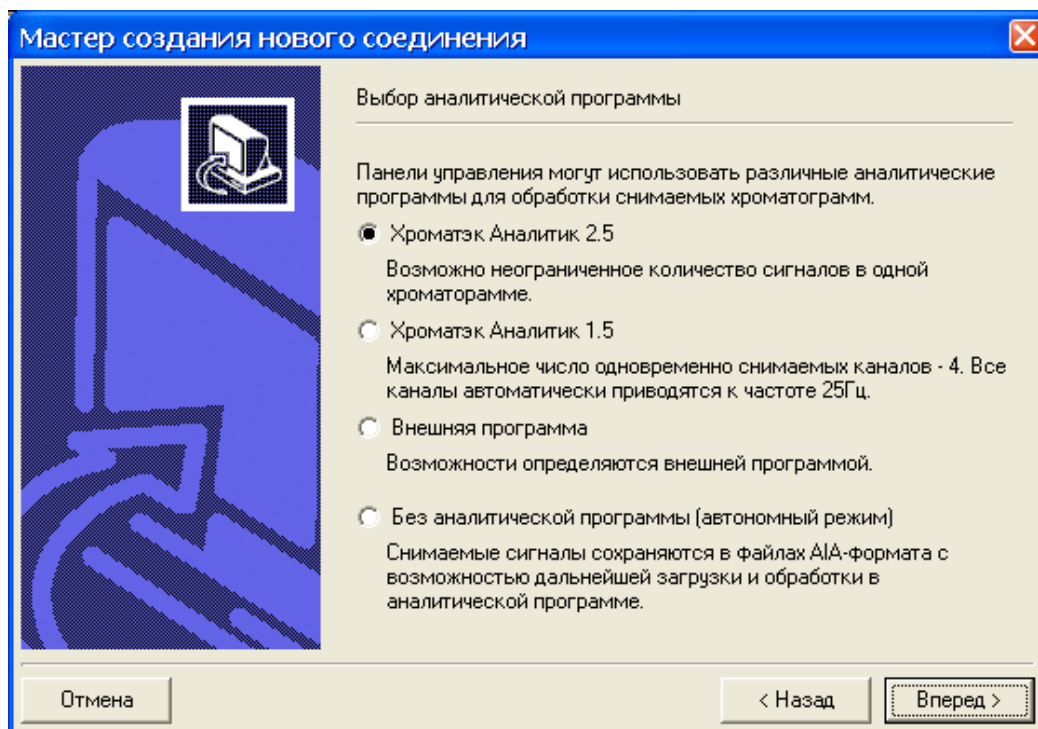


Рисунок 2.20. Мастер создания нового соединения. Шаг 6. Выбор программы обработки



Если вы выберете в качестве программы обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*, следующим шагом настройки соединения будет выбор проекта (см. рисунок 2.21). Если создается два сеанса (для двух независимых анализов), диалог на данном рисунке будет содержать две закладки, на которых нужно выбрать (или создать) проекты для каждого из сеансов. Проект выбирается (а при отсутствии существующих, создается) с помощью диалога Администратор проектов программы *Хроматэк Аналитик 2.5*. Данный диалог подробно описан в разделе 5.2.1 (часть 2 печатной версии руководства пользователя).

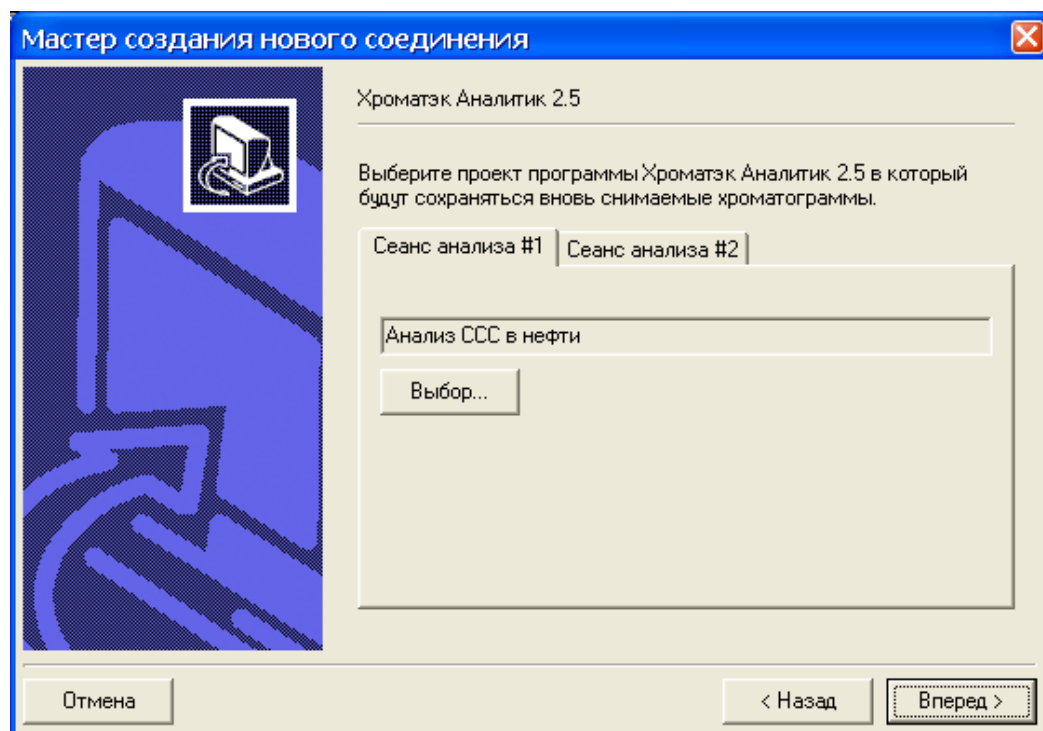


Рисунок 2.21. Мастер создания нового соединения. Выбор проекта “Хроматэк Аналитик 2.5”

### Шаг 7

На финальном этапе создания соединения убедитесь в правильности настроек (рисунок 2.22). Если вы хотите запустить созданное соединение немедленно, установите соответствующую опцию. Нажмите кнопку **Вперед** для завершения работы мастера.

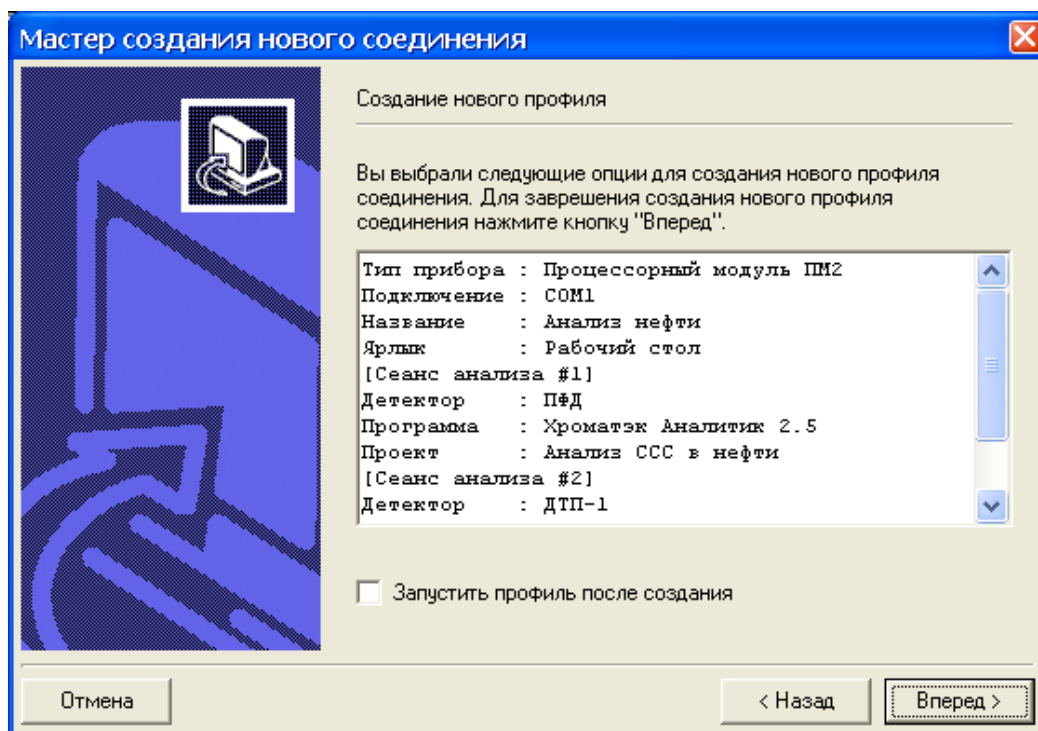



Рисунок 2.22. Мастер создания нового соединения. Шаг 7. Просмотр созданных настроек соединения

### 2.2.4 Запуск соединения

Запуск соединения для начала работы с программой *Панель управления* может быть осуществлен тремя способами:

1. Наиболее простой (и рекомендуемый) способ заключается в запуске соединения непосредственно с помощью его ярлыка , расположенного на рабочем столе Windows.
2. Второй способ предполагает запуск программы *Панель управления* с помощью одного из ярлыков на рабочем столе Windows: **Кристалл ПМ2**, **Кристалл ПМ1**, **Кристалл 2000**. Запущенная таким образом *Панель управления* автоматически предлагает оператору выбрать соединение из списка.
3. Третий способ — автозапуск соединения при загрузке компьютера. Он возможен в случае, если вы отметили соответствующую опцию на стадии создания соединения (см. рисунок 2.18). Необходимо помнить, что хроматограф в этом случае нужно включить **перед** включением компьютера.

## 2.2.5 Главное окно программы

Главное окно программы *Панель управления*, показанное на рисунке 2.23, состоит из следующих элементов (сверху вниз):

- заголовок окна;
- главное меню;
- панель инструментов;
- информационная область с закладками;
- строка состояния.

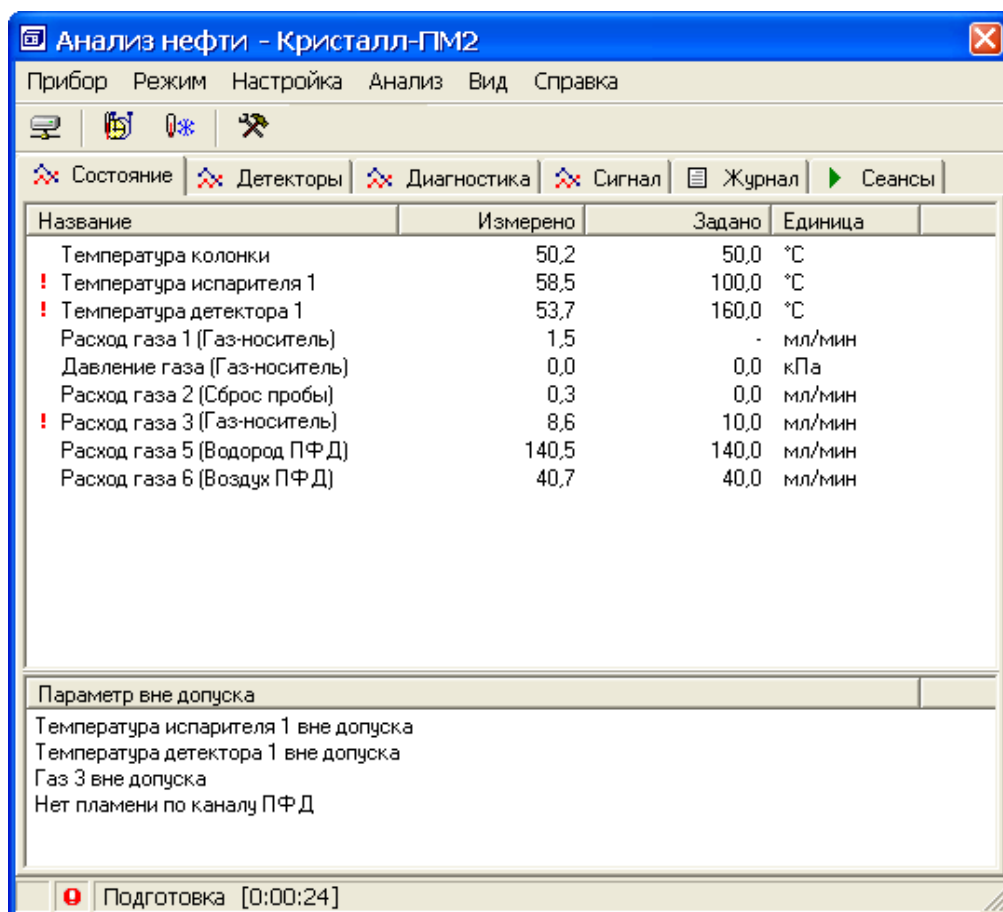


Рисунок 2.23. Главное окно программы

Заголовок главного окна *Панели управления* содержит информацию о названии соединения и типе прибора (в примере на рисунке 2.23 название соединения — **Анализ нефти**, тип прибора — **Кристалл-ПМ2**).

Главное меню содержит набор команд, необходимых для работы с программой.

На панели инструментов расположены кнопки быстрого доступа (дублирующие наиболее часто используемые команды меню).

В нижней части окна программы расположена строка состояния. Она предназначена для индикации этапа работы хроматографа (в примере на рисунке 2.23 хроматограф находится на этапе “Подготовка”). Рядом с названием этапа указано его текущее время.

### Закладки главного окна

В рабочей области программы расположены информационные закладки:

#### Состояние

На данной закладке выводится таблица заданных и измеренных значений температур (колонки, испарителя, детектора, обогреваемых зон различных периферийных устройств), расходов и давлений газов. Если данные не поступали из прибора в течении 3-х секунд на месте значения выводится прочерк. Параметры, находящиеся вне допуска, отмечаются красным восклицательным знаком, расположенным слева от названия параметра, а также выводятся в нижней области закладки (см. рисунок 2.24).

Состояние   Детекторы   Диагностика   Сигнал   Журнал   Сеансы				
Название	Измерено	Задано	Единица	
Температура колонки	50,2	50,0	°C	
! Температура испарителя 1	58,5	100,0	°C	
! Температура детектора 1	53,7	160,0	°C	
Расход газа 1 (Азот)	1,5	-	мл/мин	
Расход газа 2 (Азот)	0,3	0,0	мл/мин	
! Расход газа 3 (Азот)	8,6	10,0	мл/мин	
Расход газа 4 (Азот)	0,7	0,0	мл/мин	
Расход газа 5 (Водород)	140,5	140,0	мл/мин	
Расход газа 6 (Воздух)	40,7	40,0	мл/мин	
Давление газа 1 (Азот)	0,0	0,0	кПа	
Давление газа 2 (Азот)	-	-	кПа	
Давление газа 3 (Азот)	-	-	кПа	
Давление газа 4 (Азот)	-	-	кПа	
Давление газа 5 (Водород)	-	-	кПа	
Давление газа 6 (Воздух)	-	-	кПа	
Параметр вне допуска				
Температура испарителя 1 вне допуска				
Температура детектора 1 вне допуска				
Газ 3 вне допуска				
Нет пламени по каналу ПФД				

Рисунок 2.24. Закладка “Состояние”

#### Детекторы

На данной закладке выводятся измеренные значения сигналов детекторов, присутствующих в хроматографе, и частота детекторных каналов. Во время анализа в столбце **Старт** выводится канал старта (Старт 1 или Старт 2, см. рисунок 2.25).

Состояние   Детекторы   Диагностика   Сигнал   Журнал   Сеансы				
Название	Старт	Гц	Измерено	Единица
ПИД-1		24,9	0,00	мВ
ПИД-2		24,9	0,00	мВ
ПФД	Старт-1	24,9	5,55	мВ

Рисунок 2.25. Закладка “Детекторы”

## Диагностика

Эта закладка служит для отображения различной диагностической информации, такой как напряжения на клапанах РРГ, значения АЦП, температура окружающей среды и т.п. (см. рисунок 2.26).

Состояние	Детекторы	Диагностика	Сигнал	Журнал	Сеансы
Название	Измерено	Единица			
Дополнительный канал 1	2,0	В			
Дополнительный канал 2	2,0	В			
Напряжение опоры датчика температур 1	5,0	В			
Напряжение земли датчика температур 1	0,0	В			
Напряжение опоры датчика температур 2	5,0	В			
Напряжение земли датчика температур 2	0,0	В			
Спираль поджига 1	0,0	В			
Спираль поджига 2	0,0	В			
Температура окружающей среды	31,8	°C			
Давление окружающей среды	10,6	кПа			
Напряжение 200В	0,0	В			
Напряжение на клапане газа 1	-	В			
Напряжение на клапане газа 2	0,0	В			
Напряжение на клапане газа 3	2,3	В			
Напряжение на клапане газа 4	0,0	В			
Напряжение на клапане газа 5	1,8	В			
Напряжение на клапане газа 6	2,1	В			
Напряжение опоры датчика давления	5,0	В			
Напряжение земли датчика давления	0,0	В			
Напряжение опоры датчика расхода	5,0	В			
Напряжение земли датчика расхода	0,0	В			

Рисунок 2.26. Закладка “Диагностика”

## Журнал

В журнале сохраняются все записи об операциях, выполняемых с данным прибором, а также фатальные аварии и ошибки прибора (см. рисунок 2.27).

Состояние	Детекторы	Диагностика	Сигнал	Журнал	Сеансы
Время	Параметр				
11:29:30.320	Соединение открыто				
11:29:59.278	Передан режим хроматографа				
11:30:10.906	Переданы параметры конфигурации				
11:30:13.672	Передан режим хроматографа				

Рисунок 2.27. Закладка “Журнал”

## Сигнал

На данной закладке отображаются графики изменения сигналов со всех диагностических и детекторных каналов за последний час (см. рисунок 2.28). Канал, график сигнала с которого необходимо просмотреть, выбирается из выпадающего списка. Для того, чтобы масштабировать график, выполните на нем двойной щелчок левой кнопкой мыши. На экране появится окно, показанное на рисунке 2.28.



**Работа с диагностическим графиком (масштабирование, сохранение в виде графического файла и распечатка) выполняется с помощью кнопок, расположенных на панели инструментов данного окна, а так же с помощью мыши. Для того чтобы увеличить некоторый участок графика, удерживая нажатой клавишу Shift, нажмите левую кнопку мыши в левом верхнем углу интересующей области и, не отпуская, переместите указатель мыши в противоположный угол**

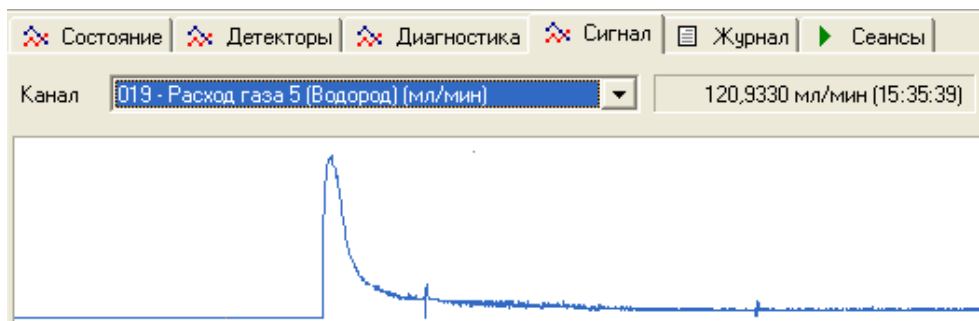


Рисунок 2.28. Закладка “Сигнал”



Рисунок 2.29. Окно “Подробный просмотр сигнала”

## Сеансы

На этой закладке (см. рисунок 2.30) выводится список сеансов, созданных для текущего соединения. В столбце **Активность** показано состояние каждого сеанса: значение **Да** — сеанс активен и может быть автоматически запущен при старте анализа (если имеет привязку к данному каналу старта), значение **Нет** — сеанс не будет запущен даже при старте связанного с ним анализа (соответственно, в этом случае не будет получено никаких хроматограмм или диагностических графиков).

Состояние   Детекторы   Диагностика   Сигнал   Журнал   Сеансы			
Название	Активность	Длительность	Время
Сеанс анализа #1	Да	* 0:30:00	
Сеанс анализа #2	Да	* 0:30:00	
Диагностика расхода водорода	Нет	* 0:30:00	

Рисунок 2.30. Закладка “Сеансы”

В столбце **Длительность** указывается интервал времени, в течение которого осуществляется выполнение сеанса. Звездочка слева от значения длительности сеанса означает, что данный сеанс синхронизирован по времени с анализом.





Если такая синхронизация отсутствует, длительность получаемых при выполнении сеанса хроматограмм может быть меньше времени анализа. Обычно такой вариант настройки сеанса применяется при работе с блоком сбора данных (БСД) “Хроматэк-Кристалл”. БСД осуществляет запись сигнала с хроматографов других производителей. Поскольку они не подключены напрямую к программе *Панель управления*, с ее помощью нельзя задать для них время анализа явно.

В столбце **Время** отображается текущее время выполняемого сеанса.



Любые действия по настройке сеанса выполняются с помощью контекстного меню, открываемого при щелчке правой кнопкой мыши на названии сеанса. Если такой щелчок выполнен на свободном поле закладки *Сеансы*, контекстное меню будет содержать единственный пункт — **Добавить**. Более подробно о настройке сеансов см. раздел 2.7


### Минимизация окна

Нажатие на кнопку  в заголовке главного окна программы не закрывает ее, а минимизирует в System Tray — область системных часов компьютера в правом нижнем углу экрана. В этой области появляется иконка данной панели управления .

Во избежание проблем у неопытных пользователей рекомендуется настроить панель задач Windows. Для этого щелкните правой кнопкой мыши на самой панели задач и в появившемся контекстном меню выберите команду **Свойства**. на экране появится диалог настройки панели задач. В данном диалоге:

- установите галочку **Отображать панель задач поверх остальных окон**;
- уберите галочку **Автоматически скрывать панель задач**;
- уберите галочку **Скрывать неиспользуемые значки**;
- уберите галочку **Группировать сходные кнопки панели задач**.

Минимизация окна предназначена для эффективного использования экрана компьютера, поскольку, в отличие от программ обработки, необходимости в постоянном присутствии *Панели управления* на экране компьютера нет.

Для активации *Панели управления* щелкните мышкой на иконке  в области системных часов. Повторный щелчок скроет *Панель управления*. Если навести курсор мыши на эту иконку и удерживать несколько секунд, появится окно подсказки, в которое будет выведена краткая информация о состоянии прибора (см. рисунок 2.31).

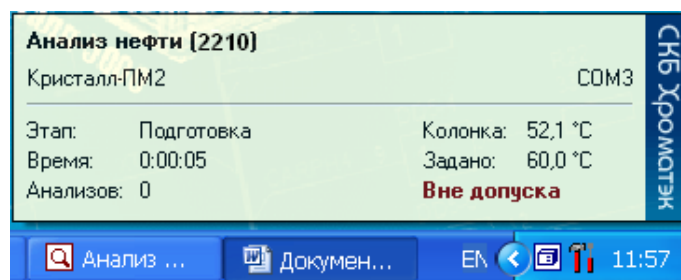


Рисунок 2.31. Минимизация окна

*Панель управления* может быть вызвана непосредственно из активной программы обработки. В программах *Хроматэк Аналитик 1.5* и *Хроматэк Аналитик 2.5* для вызова *Панели управления* выберите соответствующую команду в меню **Хроматограф**.



Для того чтобы завершить работу с программой *Панель управления*, выберите в меню **Файл** команду **Выход**.

### 2.2.6 Краткая характеристика этапов хроматографа

#### Инициализация

Этап, наступающий сразу после включения питания хроматографа. На этом этапе выпол-

няется тестирование памяти, микропрограмм хроматографа и подготовка к работе. Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

### Нулевой

Начальный этап работы хроматографа, наступает сразу после инициализации. Все устройства выключены. Прибор готов к приему команд с клавиатуры или компьютера.

### Подготовка

Этап, на котором происходит установка заданных значений параметров режима хроматографа.



**В случае, если активизирован режим предстарта (см. раздел 2.4.6), значения некоторых параметров могут быть не равны заданным (например, расход газа по каналу сброса пробы в splitless режиме).**

### Поджиг

На этом этапе выполняется поджиг пламенных детекторов.

### Поиск коэффициента

На данном этапе выполняется калибровка газовых регуляторов, работающих в режиме **РРГ-11 — расход**. Подробнее о данном этапе см. раздел 2.3.5. Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

### Подготовка к продувке (перед анализом)

Этап начинает выполняться после начала отработки хроматографом параметров режима **продувки перед анализом** и продолжается до достижения значения температуры колонки, заданного в этом режиме. Данный этап необходим для того, чтобы отсчет времени этапа **Продувка** начался с момента достижения заданной для продувки температуры колонки. Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

### Продувка перед анализом

Этап кондиционирования колонки перед проведением анализа. Может выполняться сразу же после включения хроматографа, либо при принудительном задании. Диалог настройки описан в разделе 2.4.5. Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

### Ожидание

Этап наступает после этапа **Подготовка** и предшествует этапу **Готовность**, если задано ненулевое **время ожидания** (задается в диалоге **Блокировки**).

### Ожидание готовности

Данный этап наступает после этапа **Ожидание**, если выполнено какое-либо из условий **предстарта**. Работа с режимом **предстарта** описана в разделе 2.4.6. Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

### Готовность

Этап, на котором все параметры режима хроматографа соответствуют заданным для предстартового состояния. Хроматограф готов к началу анализа.

### Экономия

Этап, наступающий после заданного времени нахождения прибора на этапе **Готовность**

без начала анализа. На этом этапе задаются специальные (экономичные) значения расходов газов. Выход из этапа **Экономия** в подготовку производится передачей режима хроматографа.

### Анализ

Этап, наступающий при выполнении старта по какому-либо из каналов хроматографа. На данном этапе происходит выполнение режима хроматографа и программ его изменения (программирование температур, расходов газов и т.п.) в соответствии с заданной методикой.

Анализ может быть остановлен принудительно. Для этого, в зависимости от того, по какому каналу старта необходимо остановить анализ используется команда **Останов анализа (Стоп 1)** или **Останов анализа (Стоп 2)**. Обе эти команды расположены в меню **Анализ**. Особенности принудительной остановки анализов при работе с активными периферийными устройствами описаны разделе [2.5.1](#).

### Подготовка к продувке (после анализа)

Этап начинает выполняться после окончания анализа (если в режиме хроматографа заданы параметры продувки) и продолжается до достижения значения температуры колонки, заданного в этом режиме. Данный этап необходим для того, чтобы отсчет времени этапа **Продувка** начался с момента достижения заданной для продувки температуры колонки.

### Продувка

Кондиционирование колонки после анализа. Поддерживаются значения расходов газов и температуры колонки, заданные в режиме хроматографа.

### Охлаждение

Этап завершения работы. Задаются и выполняются параметры диалога **Охлаждение** (см. раздел [2.8.1](#)).

### Сон

Этап временного отключения рабочих параметров прибора. На этом этапе задаются и выполняются параметры диалога **Охлаждение** (см. раздел [2.8.1](#)). Этап используется только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2.

## 2.3 Настройка конфигурации хроматографа

### 2.3.1 Основные сведения

После первого запуска хроматографа необходимо настроить его конфигурацию. Для разных типов процессорных модулей состав конфигурационных настроек и их диалоги различны, но в общем случае оператор должен выполнить следующие операции:

- Указать наличие или отсутствие в хроматографе компонентов и устройств, которые не могут быть обнаружены автоматически, и задать их параметры.
- Задать параметры автоматически обнаруженных устройств хроматографа, если такие присутствуют.


- Задать блокировки температур термостатов колонок, детекторов и испарителей, а также дополнительных термостатов, если такие присутствуют.
- Задать параметры поджига пламени для пламенных детекторов (ПИД, ТИД, ПФД) при их наличии в хроматографе.



**Возможность конфигурирования процессорного модуля Кристалл-2000 с помощью программы *Панель управления* отсутствует.**

## Процессорный модуль ПМ2

Конфигурационные настройки хроматографа с процессорным модулем ПМ2 объединены в единый диалог. Для запуска этого диалога:

- или в меню **Настройка** выберите команду **Конфигурация**;
- или на панели инструментов нажмите кнопку .

На экране появится диалог **Конфигурация**. Окно диалога состоит из двух частей. В левой области диалога расположен список страниц, каждая из которых содержит определенную группу параметров компонентов и устройств хроматографа. Компоненты данного списка неизменны, за исключением детекторов, которые отображаются в списке в том случае, если их усилители обнаружены хроматографом. В правой области отображается содержимое выбранной страницы. При запуске диалога по умолчанию выбирается страница **Общие** (см. рисунок 2.32).

Для того чтобы каждый раз при включении хроматографа не приходилось вновь задавать параметры конфигурации, необходимо сохранить эти настройки. Обычно настройки конфигурации сохраняются на заводе-изготовителе, но вы, в случае необходимости, можете изменить их и сохранить заново, выбрав в меню **Настройки** команду **Сохранение настроек**.

### Процессорный модуль ПМ1

Конфигурационные настройки хроматографа с процессорным модулем ПМ1, в отличие от ПМ2, представлены тремя диалогами:

- Диалог **Блокировки**.
- Диалог **Поджиг**.
- Диалог **Регуляторы газа**.

Запуск и работа с этими диалогами описана в разделе [2.3.6](#).



**Диалог Блокировки для процессорного модуля ПМ1, кроме блокировок температур термостатов, содержит ряд других конфигурационных параметров (параметры детекторов, признаки наличия дополнительных устройств хроматографа и т.п.).**

### 2.3.2 Конфигурация Кристалл-ПМ2



**В данном разделе рассматриваются следующие конфигурационные настройки процессорного модуля ПМ2:**

- **Общие параметры конфигурации (нагревательные платформы, устройства расширения, звуковая индикация).**
- **Параметры колонок.**
- **Блокировки температур термостатов хроматографа.**
- **Параметры поджига пламенных детекторов.**

**Описания настройки детекторов и регуляторов газов занимают значительный объем и для удобства читателя выделены в отдельные разделы:**

- **Детекторы подробно рассматриваются в разделе [2.3.3](#).**
- **Регуляторы газов подробно рассматриваются в разделе [2.3.4](#).**

### Настройка общих параметров

На странице **Общее** (рисунок [2.32](#)):

- Отметьте наличие дополнительной нагревательной платформы для **Испарителя 2** и **Детектора 2**. Если в хроматографе какая-либо из дополнительных нагревательных платформ отсутствует, соответствующий признак должен быть отключен.
- Установите опцию **резервная память**, если в хроматографе присутствует соответствующее устройство расширения.

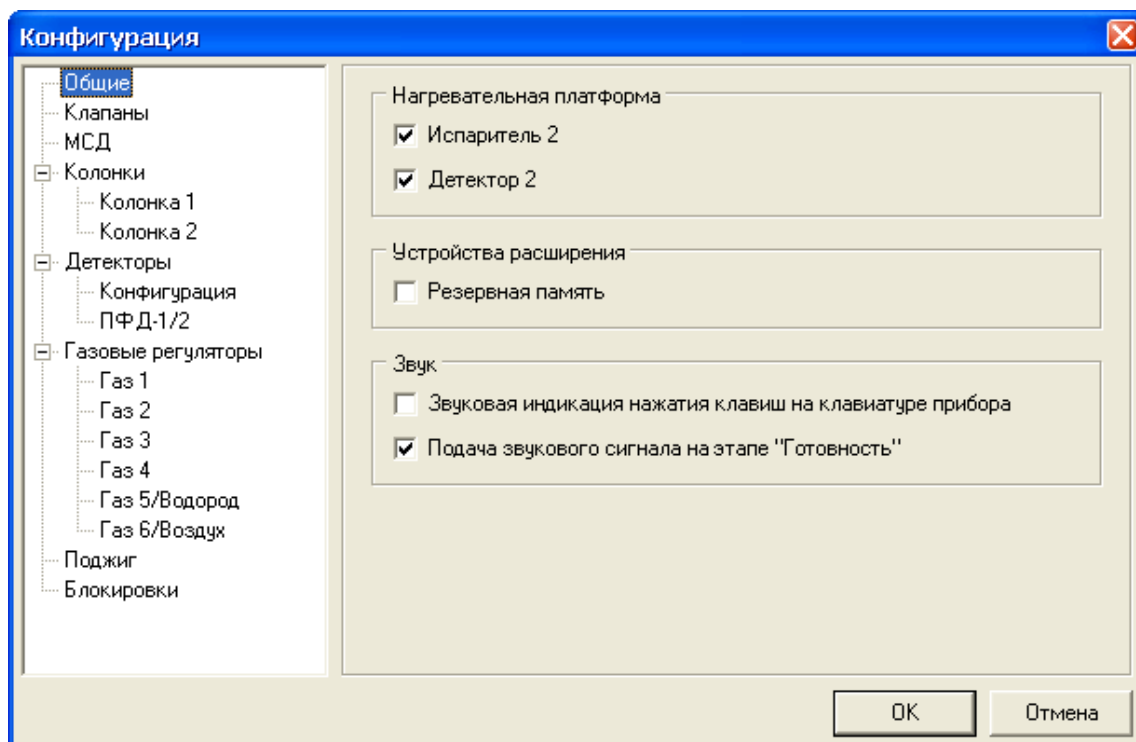


Рисунок 2.32. Диалог “Конфигурация”. Страница “Общее”

- Если вы хотите, чтобы нажатие клавиш на клавиатуре хроматографа сопровождалось звуковым сигналом, отметьте опцию **Звуковая индикация нажатия клавиш на клавиатуре прибора**.
- Установите опцию **Подача звукового сигнала при наличии параметров вне допуска**, если хотите продублировать звуковым сигналом световой индикатор **Допуск**.

### Настройка параметров клапанов

На странице **Клапаны** (рисунок 2.33) задайте параметры электромагнитных клапанов.

- Если клапан отсутствует в хроматографе, выберите из выпадающего списка параметр **Выключен**.
- Если необходимо, чтобы при включении питания хроматографа клапан был открыт, выберите из выпадающего списка параметр **Нормальное состояние клапана - “открыт”**.
- Если необходимо, чтобы при включении питания хроматографа клапан был закрыт, выберите из выпадающего списка параметр **Нормальное состояние клапана - “закрыт”**.

### Настройка параметров МСД

На странице **МСД** (рисунок 2.34) задайте параметры масс-спектрометрического детектора.

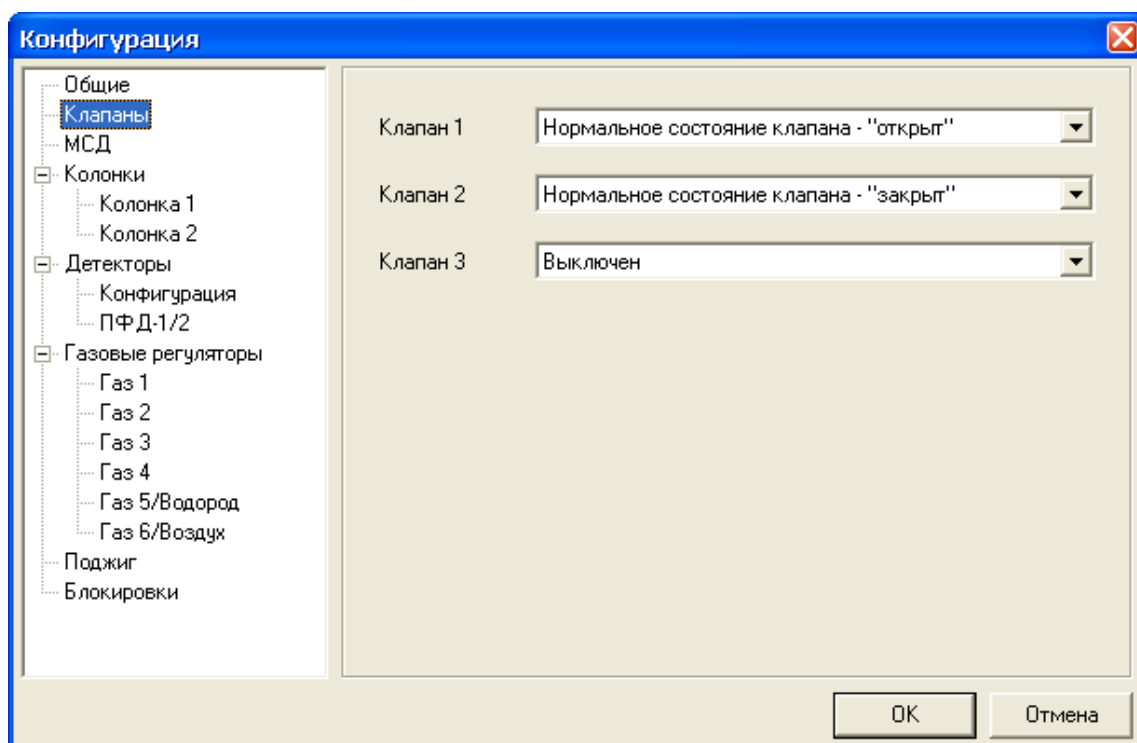


Рисунок 2.33. Диалог “Конфигурация”. Страница “Клапаны”

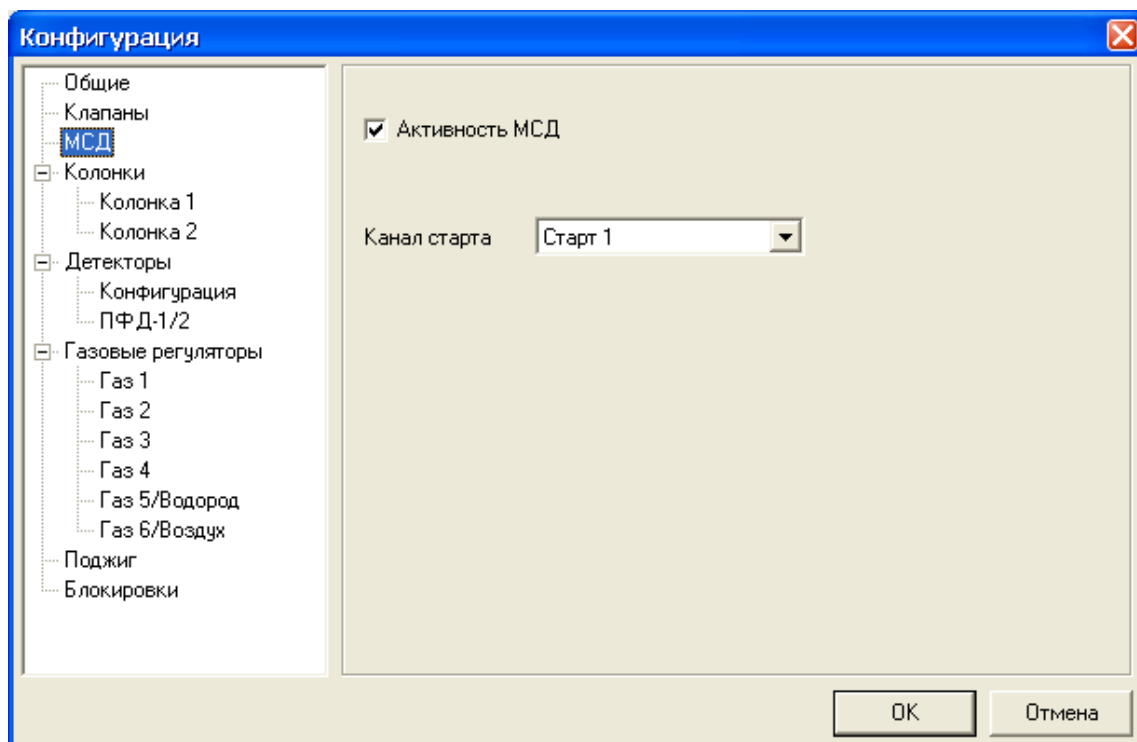


Рисунок 2.34. Диалог “Конфигурация”. Страница “МСД”

- Для того, чтобы хроматограф при выходе на этап **Готовность** осуществлял проверку готовности МСД включите признак **Активность МСД**.
- Задайте канал старта МСД. Подробнее о каналах старта см. раздел 2.3.3

## Настройка параметров колонок

На страницах **Колонка 1** и **Колонка 2** (рисунок 2.35) введите параметры используемых в работе колонок.



Как правило, если в хроматографе применяются капиллярные колонки, то капиллярная колонка 1 обслуживается парой газовых регуляторов Газ 1 — Газ 2, а капиллярная колонка 2 — парой Газ 3 — Газ 4.

Рисунок 2.35. Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Колонки”. Страница “Колонка 1”

Часть параметров колонок несет исключительно информативный характер, поэтому эти параметры заполнять не обязательно. Обязательными для заполнения являются:

- **Длина** и **Диаметр** колонки. Данные параметры используются при расчете газового режима капиллярных колонок в соответствующем диалоге (см. раздел 2.4.2, стр. 85). Как было сказано выше, параметры **Колонки 1** используются в расчете газового режима для пары регуляторов **Газ 1 — Газ 2**, а параметры **Колонки 2** — в аналогичном расчете для пары **Газ 3 — Газ 4**.
- **Макс. температура** колонки. Данный параметр вводится для предотвращения перегрева колонки.

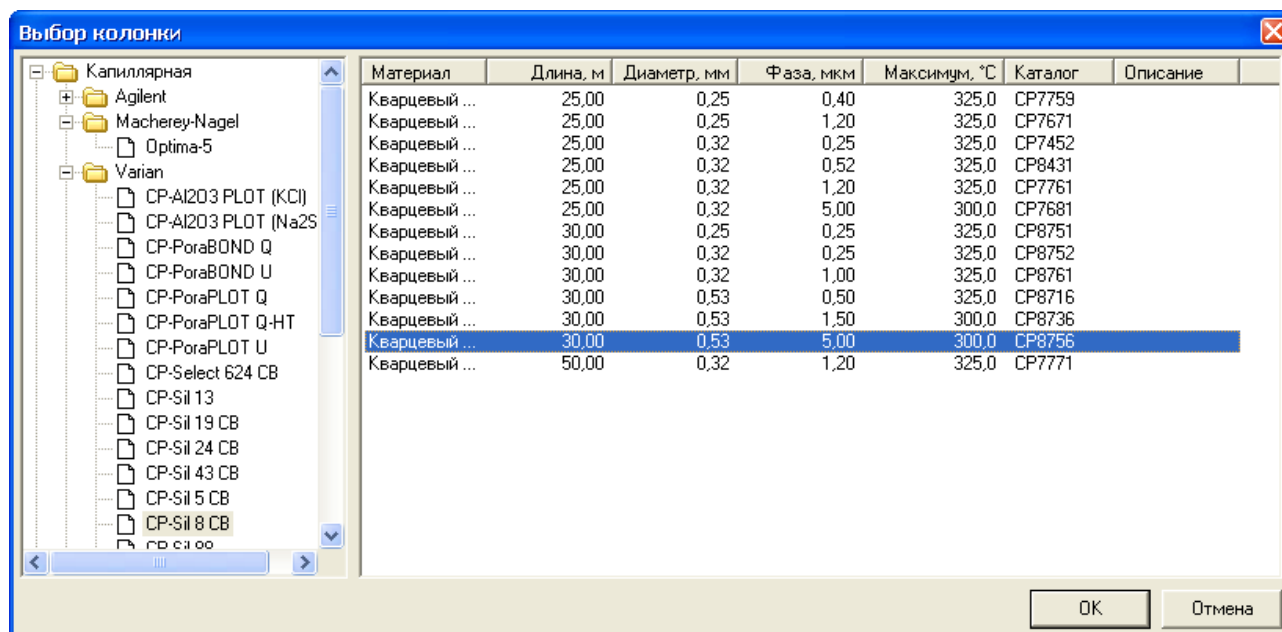


Рисунок 2.36. Диалог “Выбор колонки”

Для ускорения процесса заполнения параметров колонок вы можете воспользоваться их каталогом. Для этого нажмите кнопку **Каталог**. На экране появится диалоговое окно, показанное на рисунке 2.36.

В данном диалоге выберите необходимую колонку из списка, отсортированного по производителю колонок, и нажмите кнопку **ОК**. Каталог содержит далеко не все колонки, выпускаемые в данный момент различными компаниями. Если вы не обнаружили в списке необходимую Вам колонку, введите ее параметры вручную.

## Настройка блокировок

Назначение страницы **Блокировки** — задание максимальных температур термостатов, времен аварии и ожидания, переключение режимов **работа/поверка**. Окно диалога **Конфигурация** с выбранной страницей **Блокировки** показано на рисунке 2.37.

На данной странице:

- Задайте предельные значения температур термостатов колонки, испарителей и детекторов.

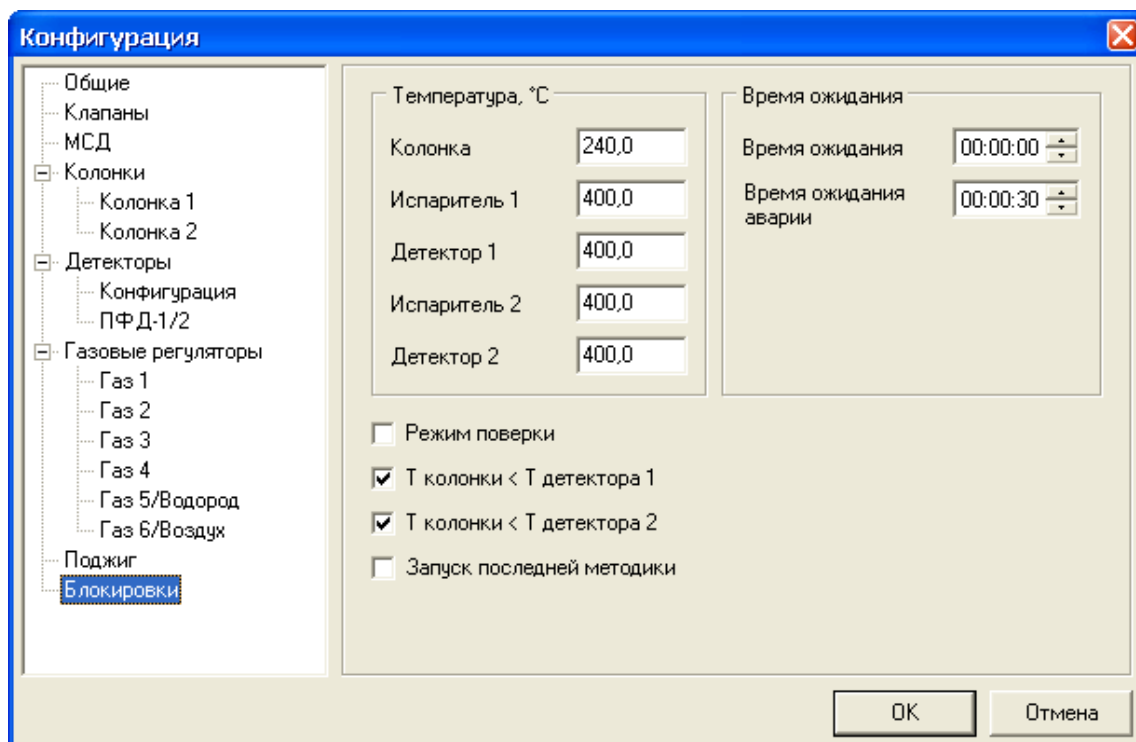


Рисунок 2.37. Диалог “Конфигурация”. Страница “Блокировки”



Эти параметры предназначены для защиты от перегрева: если по каким-либо причинам хотя бы одна из температур превысит заданное предельное значение на 10 градусов, прибор, выдав сообщение **Фатальная авария**, начнет принудительное охлаждение.

Предельная температура термостата колонок определяется максимальной температурой сорбентов используемых колонок. Температура термостатов испарителей определяется природой анализируемых веществ и обычно не превышает 300 °C. Температура детекторов определяется также конструкцией детектора:

- для ПИД, ТИД, ЭЗД, ПФД — не выше 400 °C;
- для ДТП — не выше 300 °C
- для ФИД — не выше 250 °C

- Установите признак **Режима поверки**, для того чтобы отключить отслеживание параметров вне допуска.



Данный режим может использоваться только сервисными службами на этапах наладки оборудования и его технического обслуживания. В условиях обычной работы признак **Режима поверки** должен быть всегда выключен.

- Отметьте опции **Т колонки < Т детектора**, для того чтобы запретить превышение температуры колонки измеренного значения температуры соответствующего детектора.

- Задайте **время ожидания аварии** — время, в течении которого хроматограф игнорирует выход за пределы допуска какого-либо параметра на этапе **Готовность**. Если в течении данного времени параметр не вернулся в пределы допуска, прибор перейдет на этап **Подготовка**. На этапе **Подготовка**, после того, как все параметры будут приведены в пределы допуска переход хроматографа на этап **Готовность** задерживается на время, равное времени ожидания аварии. Обычно время ожидания аварии задают равным 30 секундам.
- Задайте **время ожидания** — время задержки выхода хроматографа на этап **Готовность** после установки всех параметров в пределы заданных значений.



**Время ожидания полезно задавать, если после выхода хроматографа на этап Готовность существует недопустимый дрейф нулевой линии. Для того чтобы хроматограф перешел на этап Готовность только после стабилизации нулевой линии, задайте время ожидания больше времени стабилизации. Время стабилизации определяется экспериментальным путем.**

### Настройка параметров поджига

Назначение страницы **Поджиг** — задание параметров режима поджига пламенных детекторов. Обычно эти параметры устанавливаются только один раз на заводе-изготовителе, но в случае необходимости вы можете изменить их.

В группе параметров **Поджиг** (рисунок 2.38):

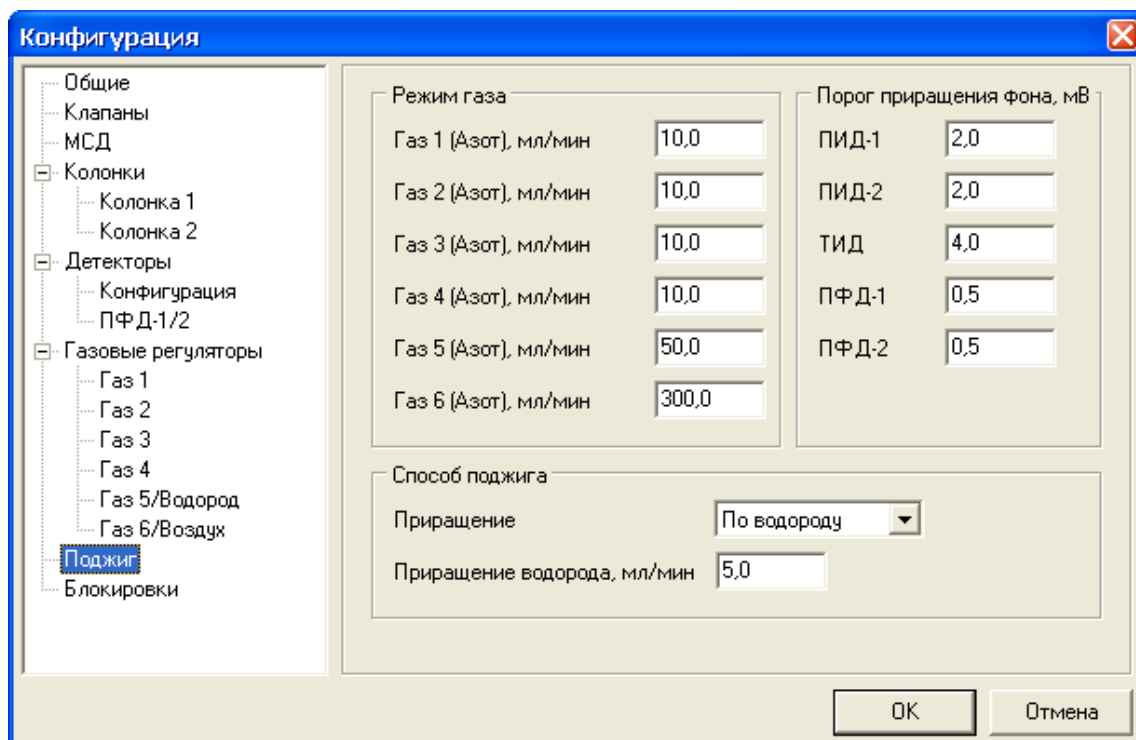


Рисунок 2.38. Диалог “Конфигурация”. Страница “Поджиг”

- В группе **Режим газа** задайте значения параметров газов, поддерживаемые на этапе **Поджиг**.

- При поджиге пламени измеряемый фон пламенных детекторов увеличивается. Для того чтобы хроматограф зафиксировал наличие пламени, фон должен превысить некоторое пороговое значение, задаваемое параметром **Порог приращения фона**. Конкретные значения порога для различных пламенных детекторов описаны в руководстве по эксплуатации хроматографа.
- Укажите **способ поджига**.
- Если вы выбрали способ поджига **по водороду**, укажите значение **приращения водорода** при каждой последующей попытке поджига.

В зависимости от использования различных пламенных детекторов, этап **поджиг** начинается:

- для ПИД, ПФД — по достижении температуры 150 градусов при условии, что прошло не менее 10 минут с момента пересечения температуры 80 градусов;
- для ТИД — по достижении заданной рабочей температуры (значение из режима);
- при одновременном использовании детекторов ПИД или ПФД с ТИД — по условиям ТИД.



Хроматограф поддерживает два способа (алгоритма) поджига пламени.

**1. Алгоритм поджига По водороду:**

- формируется заданный расход Газа носителя;
- измеряется выходной сигнал детектора;
- формируется заданный расход воздуха;
- формируется заданный расход водорода;
- нагревается спираль поджига;
- отключается спираль поджига;
- контролируется наличие пламени по увеличению выходного сигнала детектора;
- формируются заданные в методике расходы газов.

Если приращение выходного сигнала детектора больше приращения порогового значения, задаваемого в меню, то поджиг осуществлен, если нет — производится повторная попытка поджига при расходе водорода большем на величину приращения водорода. Таким образом хроматограф производит семь попыток поджига, по истечении которых при отсутствии пламени устанавливается Нулевой этап и выводится сообщение Невозможно выполнить поджиг.

**2. Алгоритм поджига По воздуху:**

- формируется заданный расход Газа носителя;
- измеряется выходной сигнал детектора;
- формируется заданный расход водорода;
- нагревается спираль поджига;
- постепенно увеличивается расхода воздуха до параметров, заданных в режиме поджига;
- отключается спираль поджига;
- контролируется наличие пламени по увеличению выходного сигнала детектора;
- формируются заданные в методике анализа расходы газов.

В отличие от режима По водороду приращение водорода при новой попытке поджига отсутствует.



Хроматограф может быть переведен на этап поджиг принудительно. Для этого в меню Настройка выберите команду Ручной поджиг. Если при этом хроматограф находится в режиме поверка, напряжение на спирали поджига будет подано немедленно.

### 2.3.3 Конфигурация Кристалл-ПМ2. Детекторы

В группе **Детекторы** расположены настройки тех детекторов, чьи усилители обнаружены хроматографом. Детекторы обладают рядом общих параметров, настройка которых производится на странице **Конфигурация** (рисунок 2.39).

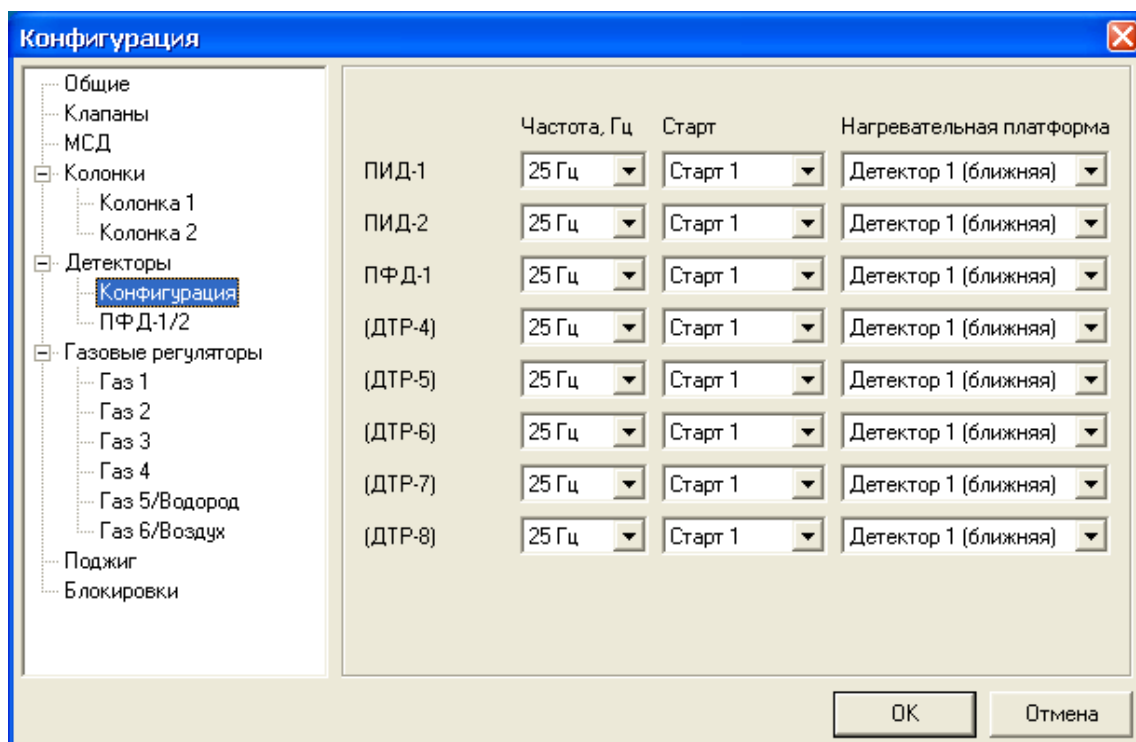


Рисунок 2.39. Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Детекторы”. Страница “Конфигурация”

#### Частота, Гц

Частота детекторного канала оказывает влияние на информативность хроматограммы. Чем выше частота, тем более узкие пики могут быть обнаружены, но и тем выше уровень шумов. Установленное по умолчанию значение 25 Гц является оптимальным.

#### Старт

Данный параметр задает привязку детектора к одному из двух каналов старта анализа. Он может принимать значения **Старт 1** и **Старт 2**.



Например, если для детектора ТИД задан канал **Старт 2**, сеанс, содержащий данный детектор, будет запущен на анализ только в том случае, если оператор нажмет на хроматографе кнопку **Старт 2**. Если же будет нажата кнопка **Старт 1**, хроматограф выдаст сообщение **Нет привязанных детекторов или нестартовый этап**. Таким образом, если вы хотите проводить два независимых анализа одновременно, для всех детекторов, входящих в сеанс анализа 2, запускаемого по нажатию на кнопку **Старт 2**, установите в диалоге **Конфигурация** привязку к каналу **Старт 2**

#### Нагревательная платформа

Данный параметр устанавливает привязку детектора к нагревательной платформе. Он может принимать значения **Тд1 (ближняя)** (привязка к платформе 1) и **Тд2 (дальняя)** (привязка к платформе 2)



В хроматографе может быть одна или две нагревательные платформы детекторов: основная (расположена ближе к передней панели хроматографа) и дополнительная. При наличии дополнительной платформы она должна быть включена с помощью соответствующей опции в группе параметров Общее (см. рисунок 2.32). После этого для установленных на дополнительной платформе детекторов необходимо указать в данном диалоге тип платформы Тд2 (дальняя).



Детекторы ПИД-1, ПИД-2 и ТИД обладают только вышеперечисленными параметрами. Для других детекторов существуют дополнительные параметры. При обнаружении хроматографом усилителей ДТП, ДТХ, ЭЗД, ПФД, ФИД и АЦП в группе параметров “Детекторы” появляются дополнительные страницы, содержащие индивидуальные настройки детекторов.

### Параметры детекторов ДТП-1, ДТП-2 и ДТП-3

Параметры детекторов ДТП-1, ДТП-2 и ДТП-3 показаны на рисунке 2.40.

#### Мощность

Параметр задает мощность нагрева спиралей ДТП в зависимости от типа текущего через детектор **газа-носителя**. Если в качестве газа-носителя используется гелий, установите значение мощности **Гелий 100%**, а если используется азот — **Азот 25%**.

Рисунок 2.40. Параметры детекторов ДТП-1, ДТП-2 и ДТП-3

В режиме мощности 25 %, при использовании гелия в качестве газа-носителя, можно регистрировать пики в диапазоне концентраций компонентов до 100 об. % при объеме дозы 0,5-1,0 мл.

#### Смещение, мВ

Задайте значение смещения нулевой линии сигнала ДТП. Усилитель ДТП автоматически балансируется таким образом, чтобы фон детектора соответствовал заданному смещению. Рекомендуется подбирать значение смещения таким образом, чтобы фон детектора был равен 100-200 мВ. Смещение задается после выхода параметров режима хроматографа в норму.

#### Спираль

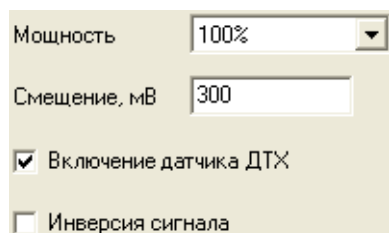
Установите признак включения спирали ДТП. При включении данной опции, ДТП переводится в автоматический режим защиты спиралей от перегрева. Во время работы спираль ДТП должна находиться в автоматическом режиме. При выключении опции нагрев спиралей ДТП будет отключен.

#### Инверсия

Установите эту опцию, если на хроматограмме все пики отрицательные (обратные).

## Параметры детекторов ДТХ-1 и ДТХ-2

Параметры детекторов ДТХ-1 и ДТХ-2 показаны на рисунке 2.41.



### Мощность

Переключение уровня мощности нагрева датчиков детектора. Может принимать значения 80% или 100%.

**Рисунок 2.41. Параметры детекторов ДТХ-1 и ДТХ-2**

### Смещение, мВ

Задайте значение смещения нулевой линии сигнала ДТХ. Усилитель ДТХ автоматически балансируется таким образом, чтобы фон детектора соответствовал заданному смещению. Рекомендуется подбирать значение смещения таким образом, чтобы фон детектора был равен 300-500 мВ. Смещение задается после выхода параметров режима хроматографа в норму.

### Включение датчика ДТХ

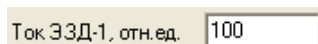
Установите признак включения датчиков ДТХ. При включении данной опции, ДТХ переводится в автоматический режим защиты датчиков от перегрева. Во время работы датчики ДТХ должны находиться в автоматическом режиме. При выключении опции нагрев датчиков будет отключен.

### Инверсия

Установите эту опцию, если на хроматограмме все пики отрицательные (обратные).

## Параметры детекторов ЭЗД-1 и ЭЗД-2

Параметр детекторов ЭЗД-1 и ЭЗД-2 показан на рисунке 2.42.



**Рисунок 2.42. Параметр детекторов ЭЗД-1 и ЭЗД-2**

### Ток ЭЗД, отн. ед.

Значение опорного тока, соответствующее величине протекающего через детектор ионизационного тока. Ток ЭЗД задается в относительных единицах от 0 (0 нА) до 350 (4.1 нА), значение по умолчанию — 100, которое соответствует примерно 1.17 нА. Задаваемое значение зависит от величины активности радиоактивного источника, находящегося в детекторе.

Ток ЭЗД устанавливается на заводе-изготовителе при выпуске хроматографа. В некоторых случаях для улучшения отношения сигнал/шум можно изменять установленное значение тока в пределах  $\pm 50$  единиц.

### Параметры детектора ПФД

Параметры детектора ПФД показаны на рисунке [2.43](#).

#### Питание включено

Установите этот признак для включения питания фотоумножителя детектора ПФД.



**При выполнении технического обслуживания ПФД, питание фотоумножителя должно быть выключено.**

☑ Питание включено

ФЗУ ПФД-1

Нулевой фон, мВ

ФЗУ ПФД-2

Нулевой фон, мВ

#### Фон ФЭУ, мВ

Вследствие технологических разбросов параметров ФЭУ некоторые экземпляры детекторов ПФД имеют фоновый сигнал до поджига пламени. В этом случае хроматограф может при отсутствии пламени зарегистрировать его наличие. Чтобы избежать этого, измените значение **Фона ФЭУ** на измеренное в момент достижения заданного значения температуры детектора. При этом сместится уровень нулевого сигнала ПФД, от которого будет отсчитываться порог поджига (см. назначение порога поджига в разделе [2.3.2](#) стр. [65](#)).

**Рисунок 2.43. Параметры детектора ПФД**

### Параметры детектора ФИД

Параметр детектора ФИД показан на рисунке [2.44](#).

☑ Включить питание лампы ФИД

**Рисунок 2.44. Параметр детектора ФИД**

#### Включить питание лампы ФИД

Установите данную опцию для включения лампы ФИД.

## Параметры АЦП

Параметры АЦП-1, АЦП-2, АЦП-3 и АЦП-4 показаны на рисунке 2.45.

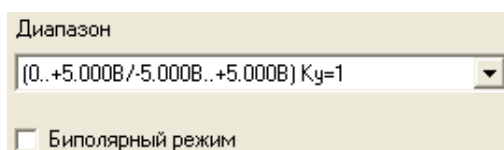


Рисунок 2.45. Параметры АЦП-1, АЦП-2, АЦП-3 и АЦП-4

### Диапазон

Задайте диапазон изменения входного сигнала внешнего АЦП.

### Биполярный режим

Установите эту опцию, если сигнал, подаваемый на вход выносного блока АЦП, может принимать как положительные, так и отрицательные значения.

## 2.3.4 Конфигурация Кристалл-ПМ2. Газовые регуляторы

Назначение — выбор типа регулятора газа по каждому газовому каналу и проведение настройки регуляторов в соответствии с поставленной задачей.

Страница настроек каждого из газовых регуляторов содержит три закладки.

На закладке **Регулятор** (рисунок 2.46):

- В зависимости от типа регулятора (**РРГ10** или **РРГ11**), а также режима его работы (**расход**, **давление**, **скорость** или **поток**) установите один из пяти возможных вариантов **Конфигурации**.



**Режим Давление** используется для поддержания на выходе регулятора постоянного давления заданной величины.

**Режимы Скорость и Поток** (задаются только для каналов Газ 1, Газ 3) могут применяться при работе с капиллярными колонками для поддержания заданной постоянной скорости или потока через капиллярную колонку.

**Режим Расход** используется для поддержания через регулятор заданного постоянного расхода Газы носителя.

- Выберите **Тип газа**.
- Выберите из предлагаемого списка **Функцию регулятора**. Данный параметр описывает назначение регулятора согласно газовой схеме хроматографа и отображается в окне **Состояние Панели управления**. Если функция регулятора не задана, в окне **Состояние** будет отображаться тип газа. При желании вы можете вписать в поле **Функция регулятора** любую символьную строку, если в списке функций отсутствует нужная.

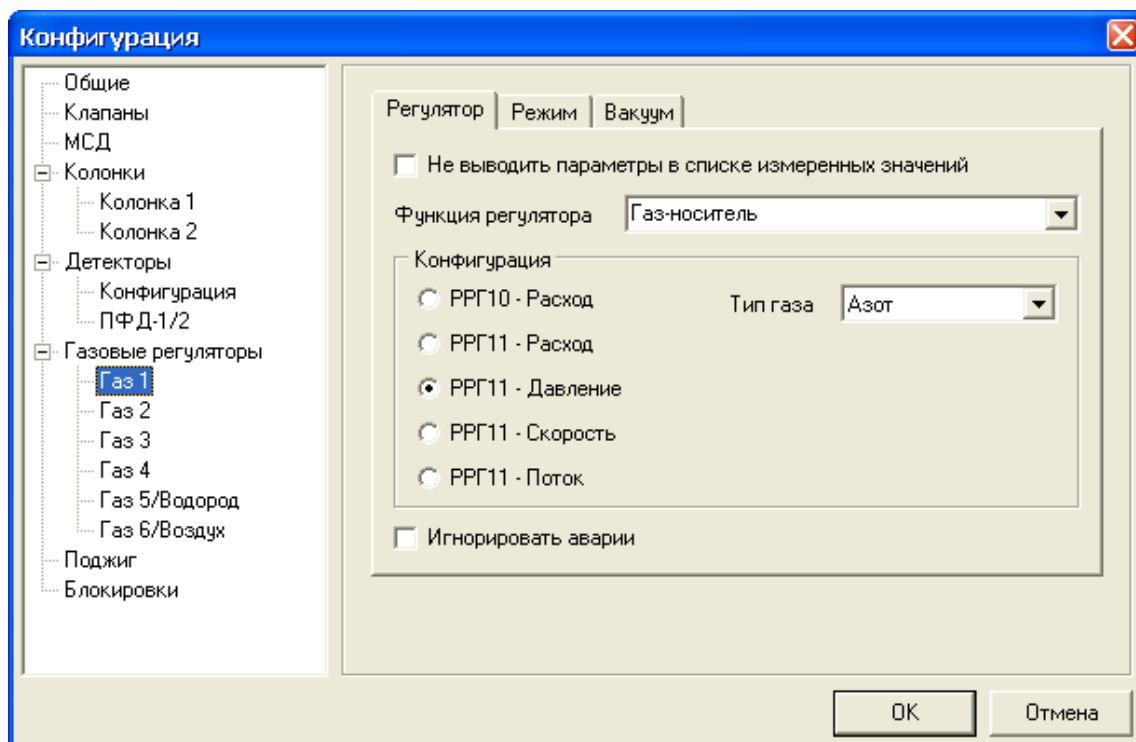


Рисунок 2.46. Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Газовые регуляторы”. Страница “Газ 1”

- Отметьте опцию **Не выводить параметры в списке измеренных значений**, если вы хотите, чтобы данный регулятор не отображался в окне **Состояние Панели управления** (например, если регулятор Газ 4 отсутствует в хроматографе, нет смысла выводить его состояние).
- Включите опцию **Игнорировать аварии**, если в процессе работы требуется, чтобы хроматограф не отслеживал состояние данного регулятора.



Игнорирование аварии чаще всего используется в случаях:

- Когда для питания пламенного детектора применяется ручной регулятор давления по каналу воздуха или водорода. В таких случаях для указанного регулятора необходимо включить игнорирование аварии для корректной работы алгоритма поджига.
- Когда регулятор используется для поддержания постоянного давления в дозирующей петле крана-дозатора.

На закладке **Режим** (рисунок 2.47):

- При необходимости **включите** функцию экономии газа. Установите **время**, с которого начнет действовать эта функция, и задайте **значение** расхода газа.

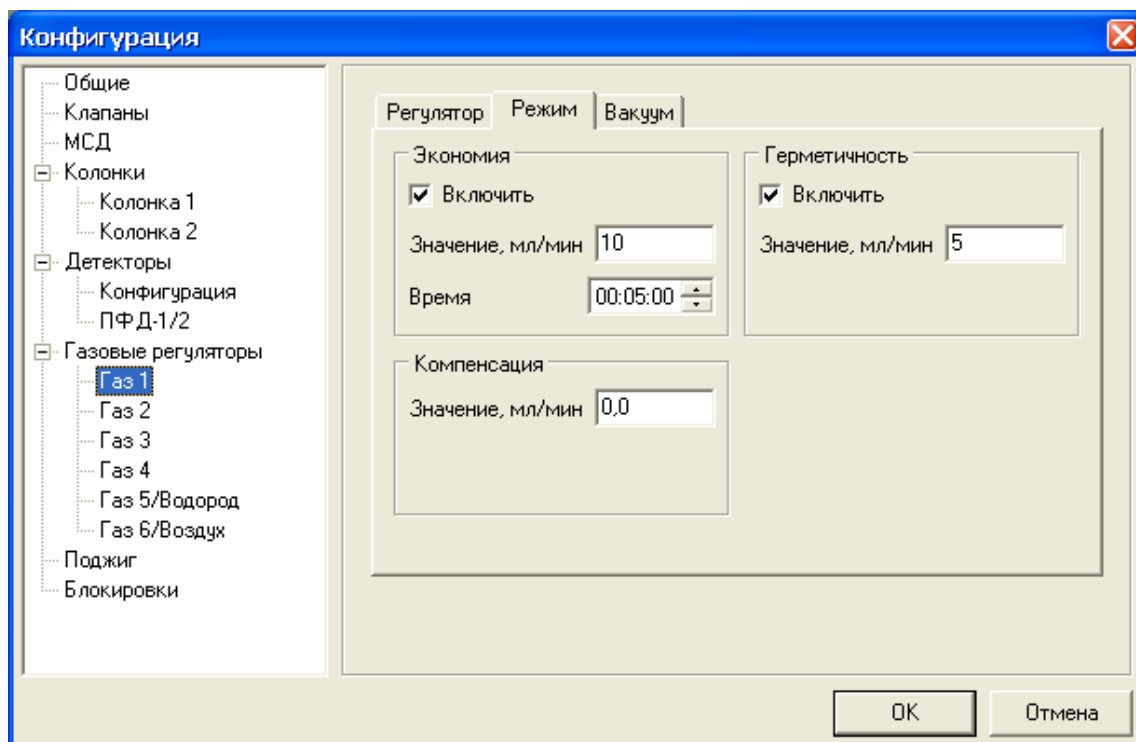


Рисунок 2.47. Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Режим”



Экономия газа задается для регуляторов РРГ-10 и РРГ-11 в режиме расхода. Функция позволяет экономить газы, снижая их расход. Ее использование удобно в тех случаях, когда анализы на хроматографе идут с определенными промежутками во времени. Экономия газа включается через заданный промежуток времени, с момента выхода прибора на этап Готовность. Во время этапа экономия мигает индикатор Готовность на панели управления. Для выхода хроматографа из этапа экономия достаточно нажать клавишу Старт на передней панели прибора.

- При необходимости включите функцию контроля герметичности для регуляторов РРГ-11 в режиме давление (скорость, поток) и задайте значение герметичности (максимально допустимая разница расходов газов (мл/мин) пары регуляторов, обслуживающих капиллярную колонку — **Газ 1/Газ 2** или **Газ 3/Газ 4**). Рекомендуемое значение контроля герметичности — 10 мл/мин. Если значение герметичности равно нулю, контроль не осуществляется.

**Пример контроля герметичности:**

Контроль герметичности производится на этапе Готовность. Допустим, капиллярная колонка обслуживается парой регуляторов Газ 1/Газ 2 (регулятор Газ 1 поддерживает давление на входе в колонку, а Газ 2 — расход газа по линии сброса пробы). Задано значение герметичности — 10 мл/мин.

Несмотря на то, что регулятор Газ 1 поддерживает давление, он также позволяет измерить текущий через него расход. Измеренное значение расхода можно увидеть на закладке Состояние главного окна программы. В том случае, если разница показаний измеренных значений расходов Газ 1 и Газ 2 превысит 10 мл/мин, в окне Параметр вне допуска на закладке Состояние появится надпись Негерметичность газа. При этом хроматограф перейдет на этап Подготовка.

Разница расходов газа для пары регуляторов, обслуживающих капиллярную колонку, увеличивается вследствие износа мембраны испарителя. Таким образом, при появлении сообщения Негерметичность газа, данную мембрану следует заменить.

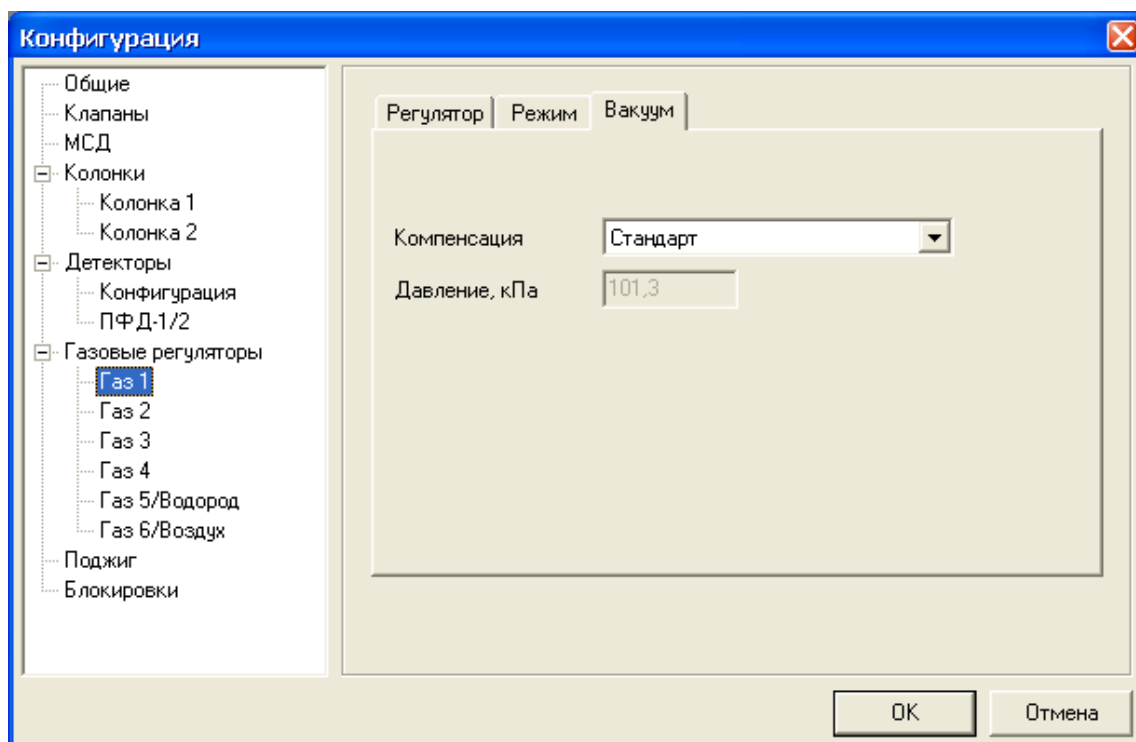


Рисунок 2.48. Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Вакуум”

На закладке **Вакуум** (рисунок 2.48) выберите тип вакуумной **Компенсации**.



Данная функция используется при работе хроматографа совместно с масс-спектрометрическим детектором. В таком детекторе на выходе колонки давление окружающей среды нулевое (вакуум).

В зависимости от того, какое давление окружающей среды существует на выходе колонки, которую обслуживает данный регулятор, выберите одно из предлагаемых значений:

- **Стандарт** — атмосферное давление в нормальных условиях (101.3 кПа).
- **Вакуум** — на выходе колонки существует вакуум (давление равно нулю).

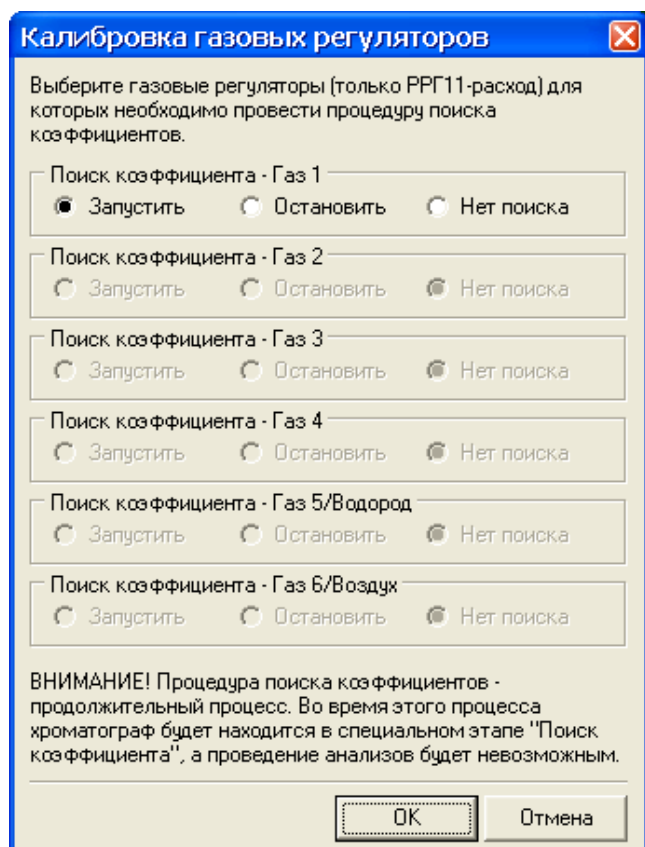
- **С датчика** — автоматически задается давление, измеренное встроенным в хроматограф датчиком.
- **Другое** — введите значение давления на выходе колонки вручную.

### 2.3.5 Калибровка газовых регуляторов

Если вы используете газовый регулятор **РРГ-11** в режиме **расход**, данный регулятор необходимо откалибровать.



**Калибровка регуляторов РРГ-11 в режиме расход выполняется только при работе с хроматографом под управлением процессорного модуля ПМ2. Перед началом калибровки убедитесь, что регулятор подключен к колонке. Калибровка начнется только в том случае, если температура колонки находится в пределах допуска.**



Для запуска процедуры калибровки регуляторов в меню **Настройка** выберите пункт **Поиск коэффициента**. На экране появится диалог **Калибровка газовых регуляторов**.

Диалог содержит список регуляторов хроматографа. Регуляторы, конфигурация которых отлична от **РРГ-11 — расход**, в списке не активны (о настройке конфигурации регуляторов см. раздел 2.3.4).

Для тех регуляторов, калибровку которых вы хотите выполнить, установите опцию **Запустить** и нажмите **ОК**. Хроматограф перейдет на этап **Поиск коэффициента**.

Коэффициенты калибровки регуляторов являются корректными до тех пор, пока неизменно пневмосопротивление на выходе регулятора (то есть неизменна колонка). Если вы замените колонку, к которой подключен регулятор, работающий в режиме **РРГ-11 — расход**, процедуру поиска коэффициента необходимо выполнить заново.

Рисунок 2.49. Диалог “Калибровка газовых регуляторов”




**Продолжительность этапа Поиск коэффициента зависит от быстродействия конкретного регулятора и составляет в общем случае около 30 минут. Для того чтобы узнать, сколько времени осталось до окончания данного этапа, на клавиатуре хроматографа нажмите клавишу Допуск. Обратите внимание на то, что время вычисляется весьма приблизительно. Чем меньше его осталось до окончания этапа, тем более точным становится его отсчет.**

### 2.3.6 Конфигурация Кристалл-ПМ1

#### Настройка блокировок

Назначение данного диалога — задание максимальных температур термостатов, времен аварии и ожидания, переключение режимов **работа/поверка**. Окно диалога показано на рисунке 2.50.

Для запуска диалога:

- или в меню **Настройка** выберите команду **Блокировки**;
- или на панели инструментов нажмите кнопку .

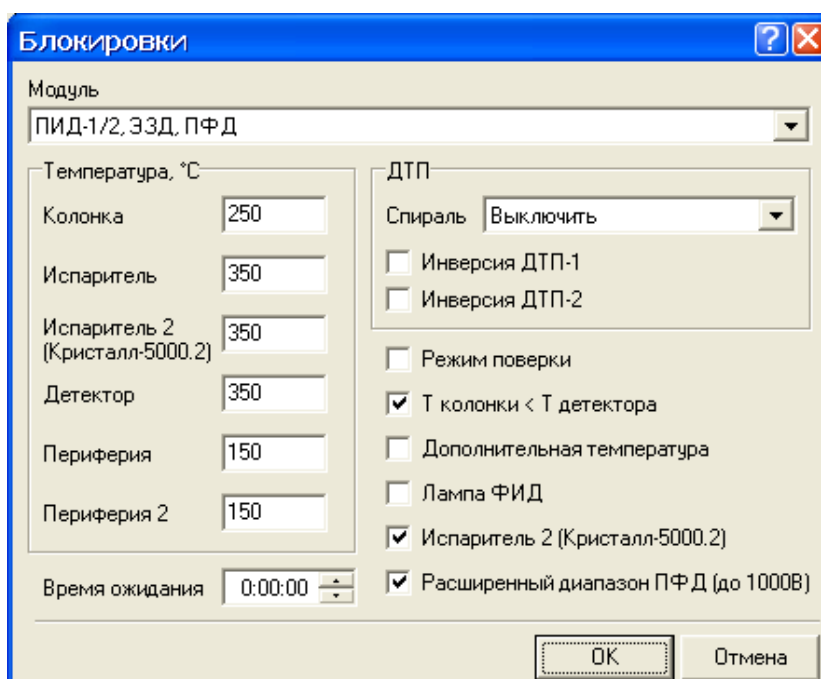


Рисунок 2.50. Диалог “Блокировки”

В окне диалога **Блокировки**:

- Задайте предельные значения температур термостатов колонки, испарителей и детекторов.
- Задайте **время ожидания** — время задержки выхода хроматографа на этап **Готовность** после установки всех параметров в пределы заданных значений.
- Выберите режим работы спиралей ДТП. Данная настройка используется только при наличии ДТП. В режиме **Выключить** спираль ДТП выключена всегда, в режиме **авто** — спираль выключена во всех случаях кроме этапов Готовность и Анализ. Обычно при работе спирали ДТП устанавливаются в режим авто.

- Выберите **инверсия ДТП-1 (инверсия ДТП-2)**, если хотите инвертировать выходные сигналы соответствующих каналов детекторов.
- Установите признак **Режим поверки** для отключения режима слежения за параметрами, находящимися вне допуска.




**Данный режим может использоваться только сервисными службами на этапах наладки оборудования и его технического обслуживания. В условиях обычной работы признак Режим поверки должен быть всегда выключен.**

- Отметьте опцию **Т колонки < Т детектора**, для того чтобы запретить превышение температуры колонки измеренного значения температуры соответствующего детектора.
- Установите флажок **Дополнительная температура** для включения нагрева независимого испарителя 2, если он присутствует в хроматографе (для хроматографа “Хроматэк Кристалл 2000М-ПМ1”).
- Установите флажок **Лампа ФИД** для включения питания лампы детектора ФИД.
- Флажок **Испаритель 2** устанавливается при работе под управлением процессорного модуля ПМ1.3 для обеспечения возможности нагрева независимого испарителя 2 (для хроматографа “Хроматэк Кристалл 5000.2-ПМ1”).
- Установите флажок **Расширенный диапазон ПФД (до 1000 В)** для работы с исполнением усилителя ПФД, обладающим расширенным диапазоном детектирования. Отличить данный усилитель можно по маркировке на корпусе **ПФД-1000**.

## Настройка параметров поджига

Назначение данного диалога — задание параметров режима поджига пламенных детекторов. Обычно параметры поджига устанавливаются только один раз на заводе-изготовителе, но в случае необходимости вы можете изменить их. Окно диалога показано на рисунке [2.51](#).

Для запуска диалога:

- или в меню **Настройка** выберите команду **Поджиг**;
- или на панели инструментов нажмите кнопку .

В окне диалога **Поджиг**:

- В группе **Режим газа** задайте значения параметров газов, поддерживаемые на этапе **Поджиг**.
- При поджиге пламени измеряемый фон пламенных детекторов увеличивается. Для того чтобы хроматограф зафиксировал наличие пламени, фон должен превысить некоторое пороговое значение, задаваемое параметром **Порог приращения фона**. Конкретные значения порога для различных пламенных детекторов приведены в руководстве по эксплуатации хроматографа.

Поджиг	
Газы	
Газ-1	10
Газ-2	10
Газ-3	10
Воздух	300
Водород	30
Водород при ПИД	30
Водород при ПФД	0
Приращение водорода	5
Порог приращения фона, мВ	
ПФД	0,3
ПИД-1, ТИД	2
ПИД-2	2
ОК Отмена	

Рисунок 2.51. Диалог “Поджиг”

- Укажите значение **приращения водорода** при каждой последующей попытке поджига.

### Настройка параметров регуляторов

Диалог **Регуляторы газов** позволяет выбрать тип установленного в приборе регулятора по каналу Газ 1, задать параметры его работы, а также задать параметры функции экономии Гаса 2. Настройки диалога хранятся в энергонезависимой памяти хроматографа. Диалог содержит две закладки, показанные на рисунках 2.52 и 2.53.

Для запуска диалога в меню **Настройка** выберите команду **Регуляторы газов**.

Регуляторы газов	
Газ 1	Газ 2
Тип регулятора	
РРГ-11, капиллярная колонка	
Допуск герметичности, мл/мин	10
ОК Отмена	

Рисунок 2.52. Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Газ 1”

На закладке **Газ 1**:

- Выберите **тип регулятора** и режим его работы.
- Если выбран тип регулятора **РРГ-11, капиллярная колонка**, вы можете задать **допуск герметичности газа** — максимально допустимую разницу расходов газов (мл/мин) пары регуляторов, обслуживающих капиллярную колонку (**Газ 1/Газ 2**). Рекомендуемое значение контроля герметичности — 10 мл/мин. Если значение герметичности равно нулю, контроль не осуществляется.



#### Пример контроля герметичности:

Контроль герметичности производится на этапе **Готовность**. Капиллярная колонка обслуживается парой регуляторов Газ 1/Газ 2 (регулятор Газ 1 поддерживает давление на входе в колонку, а Газ 2 — расход газа по линии сброса пробы). Задано значение герметичности — 10 мл/мин.

В том случае, если разница показаний измеренных значений расходов Газ 1 и Газ 2 (не смотря на то, что регулятор Газ 1 поддерживает давление, он так же позволяет измерить текущий через него расход) превысит 10 мл/мин, в окне Параметр вне допуска на закладке **Состояние** главного окна **Панели управления** появится надпись **Негерметичность газа 1**. При этом хроматограф перейдет на этап **Подготовка**.

Разница измеренных расходов газа для пары регуляторов, обслуживающих капиллярную колонку увеличивается вследствие износа мембраны испарителя. Таким образом, при появлении сообщения **Негерметичность газа**, данную мембрану следует заменить.

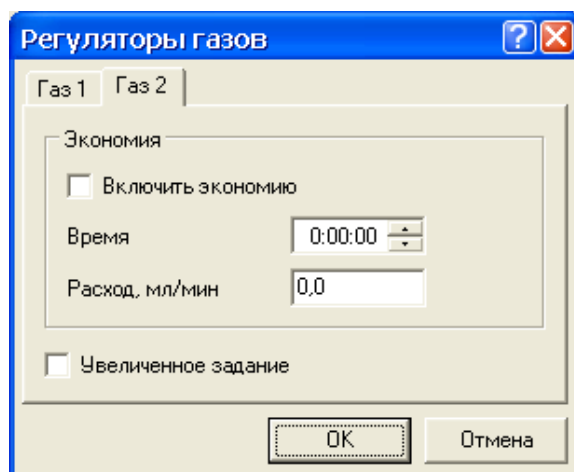


Рисунок 2.53. Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Газ 2”

На закладке **Газ 2**:

- **Включите** при необходимости признак действия функции экономии газа.
- Задайте **время** наступления экономии — время этапа **Готовность**, по истечении которого хроматограф переходит на этап **экономия**.
- Установите **расход** Газа 2 на этапе **экономия**.



Экономия газа задается для регуляторов РРГ-10 и РРГ-11 в режиме расхода. Функция позволяет экономить газы, снижая их расход. Ее использование удобно в тех случаях, когда анализы на хроматографе идут с определенными промежутками во времени. Экономия газа включается через заданный промежуток времени, с момента выхода прибора на этап Готовность. Во время этапа экономия мигает индикатор Готовность на панели управления. Для выхода хроматографа из этапа экономия достаточно нажать клавишу Старт на передней панели прибора.



В некоторых аналитических задачах требуется задавать расход газа-носителя по каналу сброса пробы (при работе с капиллярной колонкой) до 350 мл/мин. Серийный процессорный модуль ПМ1 не позволяет формировать такой расход. Для решения подобных задач используется модифицированный процессорный модуль ПМ1.4.

Модифицированный процессорный модуль ПМ1 работает под управлением встроенной микропрограммы версии 2.49 и выше (определить номер версии микропрограммы можно, нажав на клавиатуре хроматографа клавишу РСП). В случае если в Вашем хроматографе установлен такой процессорный модуль, для корректного задания расхода Газ 2 установите на закладке Газ 2 диалога Регуляторы газов флажок Увеличенное задание.

## 2.4 Задание режима хроматографа

### 2.4.1 Основные сведения о режиме хроматографа

*Панель управления* позволяет осуществлять полное управление хроматографом и подключаемыми к нему периферийными устройствами. В данном разделе рассматривается задание режима хроматографа при проведении хроматографического анализа. Управление периферией и внутренними устройствами расширения (кранами, метанатором и клапаном) описано в разделе [2.5](#)

Диалог **Режим хроматографа** используется для задания нового режима или просмотра и изменения параметров текущего режима.

Для запуска диалога:

- или в меню **Режим** выберите команду **Хроматограф**;
- или на панели инструментов нажмите кнопку



В диалоге Режим хроматографа для всех типов *Панелей управления* по умолчанию заблокирован список выбора детекторов. Данный список определяет, будет детектор активен или нет (будет ли поджигаться пламя в пламенных детекторах ПИД, ТИД и ПФД, включатся ли спирали в детекторах ДТП и т.п.). Активность детекторов в программе *Панель управления* задается автоматически исходя из настроек сеансов. Однако возможна ситуация, когда требуется активность детекторов задавать вручную. Пример такой ситуации описан в разделе 2.7.1.

Наличие признака активности детектора в диалоге Режим хроматографа не является условием для получения хроматограммы по данному детекторному каналу. Каналы, для которых необходимо получать хроматограммы, выбираются на этапе создания соединения (см. раздел 2.2.3). В большинстве случаев нет необходимости изменять эти настройки при дальнейшей работе. Если все же возникла подобная потребность, используйте прием, описанный в разделе 2.7.2.

## 2.4.2 Режим хроматографа Кристалл-ПМ2

В левой области диалога **Режим хроматографа** расположен список страниц, каждая из которых содержит определенную группу параметров режима.

### Страница “Общие”

На странице **Общее** (рисунок 2.54):

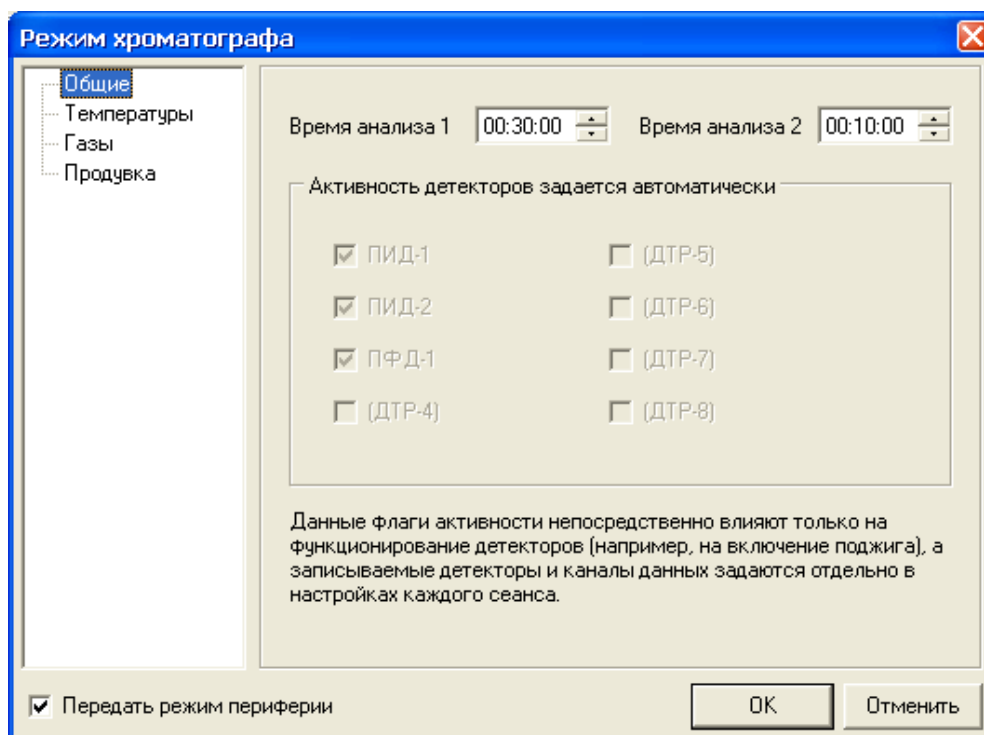


Рисунок 2.54. Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Общее”

- Задайте время анализа 1 и время анализа 2.



Если вы выполняете на хроматографе только один анализ, задайте время анализа 1, а поле время анализа 2 оставьте без изменения.

При работе с двумя независимыми анализами заполните оба поля. Для этого случая, на стадии создания соединения с помощью диалога Мастер нового соединения создаются два сеанса: Сеанс анализа 1 и Сеанс анализа 2, каждый из которых синхронизирован с соответствующим временем анализа. Таким образом, при нажатии на хроматографе кнопки Старт 1 будет выполнен Сеанс анализа 1 с длительностью, указанной в поле время анализа 1, а при нажатии кнопки Старт 2 — Сеанс анализа 2 с длительностью, указанной в поле время анализа 2.

- Если вы работаете с периферийными устройствами, установите опцию **Передать режим периферии**, для того чтобы соответствующий режим был передан одновременно с режимом хроматографа.

### Страница “Температуры”

На странице **Температуры** (рисунок 2.55) задайте **температуры** колонки, детекторов и испарителей. В правой части диалога приведены справочные значения блокировок температуры, которые выставлены в диалоге **Конфигурация** (см. раздел 2.3.2 стр. 63). Для редактирования значений блокировок необходимо открыть указанный диалог.



Температура, °C		Блокировки, °C	
Колонка	50,0		240,0
Испаритель 1	70		400,0
Детектор 1	150		400,0
Испаритель 2	100		400,0
Детектор 2	200		400,0

Величина устанавливаемой температуры должны быть меньше величины заданной в блокировках. Редактирование блокировок осуществляется в меню "Настройка\Конфигурация\Блокировки..."

☒ Передать режим периферии


OK Отменить

Рисунок 2.55. Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Температуры”

При необходимости задания программирования температур колонки или испарителей, нажмите справа от соответствующего поля кнопку  и в открывшемся окне (рисунок 2.56) задайте параметры программирования. После нажатия кнопки **ОК** и закрытия этого окна, кнопка диалога программирования температур примет вид .

**Режим температуры** [?] [X]

Колонка



Число изотерм ☐ 1 ☐ 2 ☒ 3 ☐ 4 ☐ 5

Температура, °C	50	100	200
Время	0:10:00	0:15:00	0:00:00
Скорость, °C/мин	10	20	

OK Отменить

Рисунок 2.56. Диалог “Программирование температуры”



Рисунок 2.57. Пример графика изменения температуры при программировании колонки



Пример задания параметров программирования температуры:

На рисунке 2.56 приведен пример настройки диалога для следующих условий анализа:

- Общее время анализа — 50 минут.
- После начала анализа по нажатию кнопки Старт1 или Старт2 поддерживается значение температуры первой изотермы — 50 градусов — в течение 10 минут.
- Далее начинается увеличение температуры со скоростью 10 градусов в минуту до момента достижения второй изотермы — 100 градусов.
- Вторая изотерма длится 15 минут. По истечении этого времени, температура увеличивается со скоростью 20 градусов в минуту до момента достижения последней изотермы — 200 градусов.

Если последняя изотерма будет поддерживаться до конца анализа, ее время задавать не нужно. График изменения температуры, соответствующий данному примеру, показан на рисунке 2.57.

### Страница “Газы”

На странице Газы (рисунок 2.58) задайте значения параметров газов. Режимы газов: расход, давление, скорость или поток задаются в диалоге **Конфигурация** на странице **Газовые регуляторы** (см. раздел 2.3.4).

Режим газа	
Газ 1 (Газ-носитель), кПа	60,0
Газ 2 (Сброс пробы), мл/мин	19,3
Газ 3 (Поддув), мл/мин	10,0
Газ 4 (Азот), мл/мин	0,0
Газ 5 (Воздух ПФД), мл/мин	40
Газ 6 (Воздух ПФД), мл/мин	140

☒ Передать режим периферии

ОК Отменить


Рисунок 2.58. Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Газы”

Справа от названия каждого газа показаны единицы измерения его режима:

- Расход, мл/мин.
- Давление, кПа.
- Скорость, см/с.
- Поток, мл/мин.

При работе с капиллярными колонками, регуляторы нечетных газов **Газ 1, Газ 3** поддерживают давление (скорость, поток), а четных **Газ 2, Газ 4** — расход.

Каждая капиллярная колонка обслуживается парой регуляторов **Газ 1/Газ 2** или **Газ 3/Газ 4**.

Справа от полей ввода параметров для каждой пары расположена кнопка, отмеченная символом . При ее нажатии будет запущен диалог **Режим газов**, показанный на рисунке 2.59.

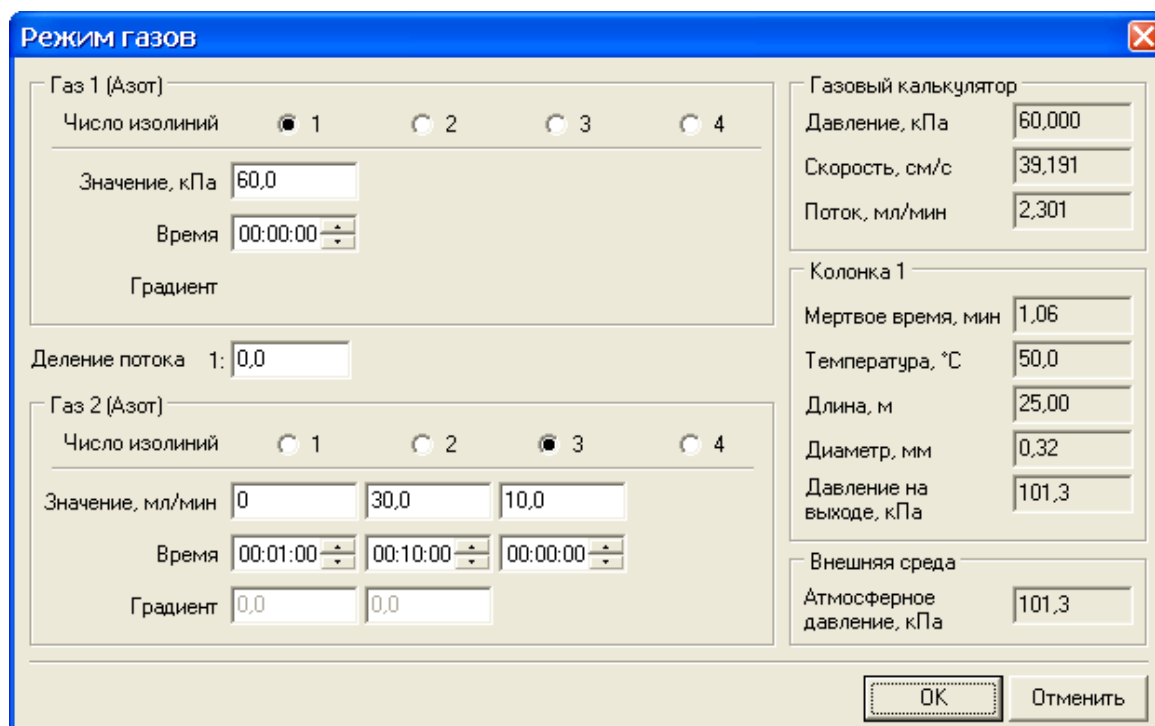


Рисунок 2.59. Диалог “Режим газов”

В данном диалоге задайте давление (скорость, поток) Газа 1 (или Газа 3).



**Давление, скорость и поток — взаимозависимые параметры, при задании одного из них остальные пересчитываются автоматически. Также автоматически вычисляется мертвое время (время выхода неударживаемого компонента).**

Для формирования сброса пробы:

- или задайте **деление потока** в испарителе;
- или задайте расход Газа 2 (Газа 4).



**Деление потока в испарителе и расход газа-носителя по каналу сброса пробы находятся в прямой зависимости друг от друга. Если изменяется один из этих параметров, автоматически изменяется и другой. Таким образом, в диалоге можно задавать любой из этих параметров.**

При необходимости программировать давление и расход, задайте параметры изолиний.



Для корректного программирования расхода по каналу сброса пробы (Газ 2 или Газ 4) необходимо, чтобы хроматограф обрабатывал первую изолинию расхода непосредственно перед вводом пробы в испаритель. На этапе Подготовка должна выполняться последняя изолиния. Для того, чтобы изменить расход газа непосредственно перед началом анализа используйте режим предстарта. Подробно режим предстарта описан в разделе 2.4.6. Для активизации предстарта должны быть выполнены следующие условия:

- Регулятор по каналу Газ 2 (Газ 4) работает в режиме РРГ-10 — расход.
- Количество изолиний при программировании четного газа (Газ 2 или Газ 4) более одной.
- Время первой изолинии по четному газу (Газ 2 или Газ 4) не равно нулю.

В примере на рисунке 2.59 показаны возможные значения параметров газов при работе с капиллярной колонкой в режиме splitless, а на рисунке 2.60 — график изменения расхода газа по каналу сброса пробы в соответствии с этими параметрами.

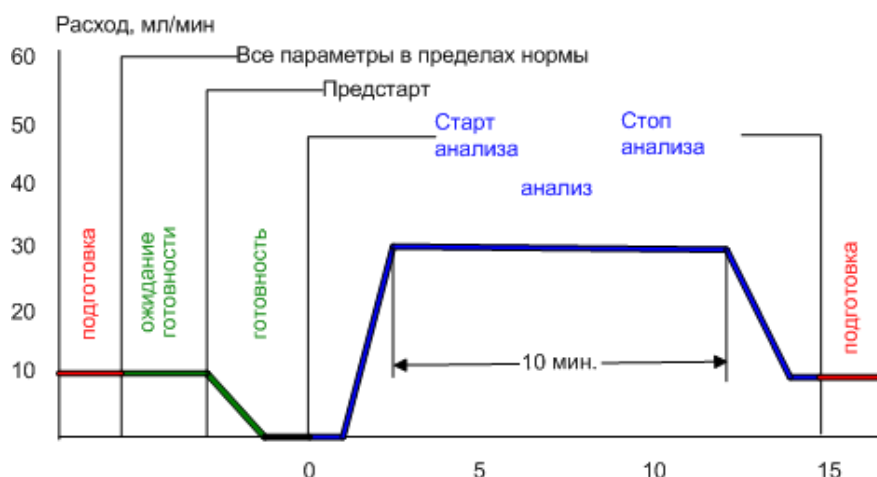


Рисунок 2.60. Пример изменения расхода газа по каналу сброса пробы в splitless-режиме

Если в диалоге **Режим газа**, количество изолиний расхода (давления, скорости или потока) задано более одной, кнопка запуска данного диалога примет вид

## Страница “Продувка”

На странице **Продувка** (рисунок 2.61) задайте значения параметров газов и температуру колонки, которые хроматограф будет обрабатывать на этапе **продувка** после анализа.

Используйте **продувку после анализа** в тех случаях, когда анализируемая проба содержит компоненты с большими временами удерживания, детектирование которых не требуется. В этом случае время анализа может быть небольшим и определяется последним выходящим целевым компонентом. Для того чтобы более высококипящие, но ненужные для количественного или качественного расчета компоненты были удалены из хроматографического тракта, в данном диалоге:

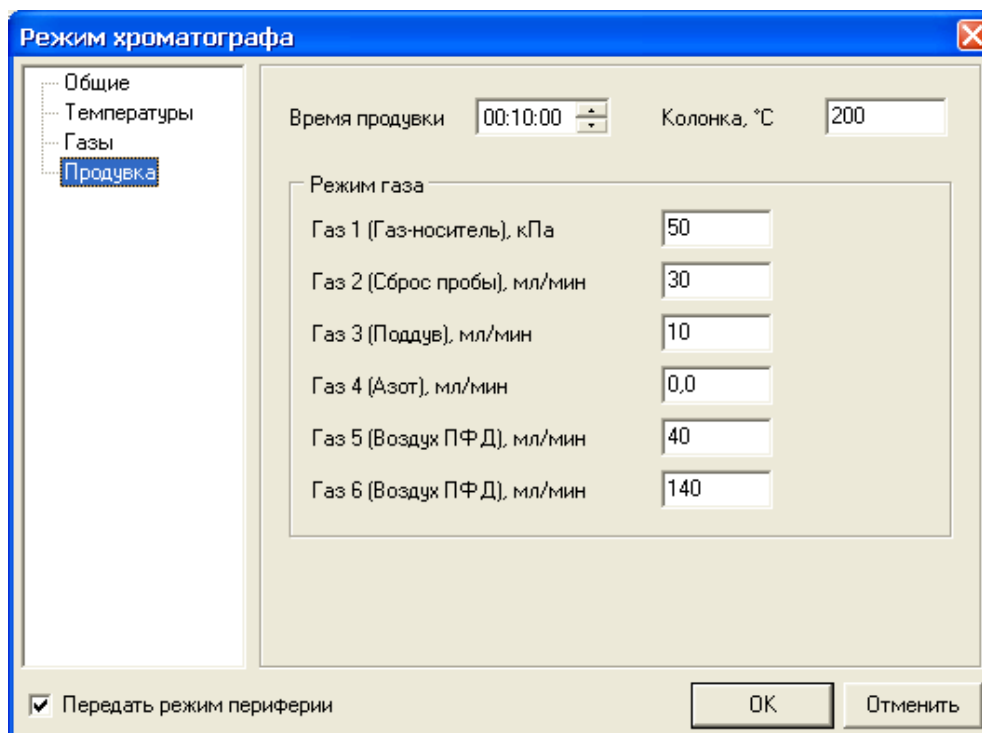


Рисунок 2.61. Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Продувка”

- задайте **время продувки** — длительность нахождения хроматографа на этапе **продувка**, отсчитываемое от момента достижения температурой колонки заданного в данном диалоге значения;
- установите **температуру колонки**;
- задайте **режим газов**.



Для того чтобы отключить продувку после анализа, задайте нулевое время продувки.

### 2.4.3 Режим хроматографа Кристалл-ПМ1

Диалог **Режим хроматографа** содержит четыре закладки:

#### Закладка “Общие”

На закладке **Общее** (рисунок 2.62):

- Задайте **Длительность анализа**.
- Если вы работаете с периферийными устройствами, установите опцию **Передать режим периферии** для того, чтобы соответствующий режим был передан одновременно с режимом хроматографа.

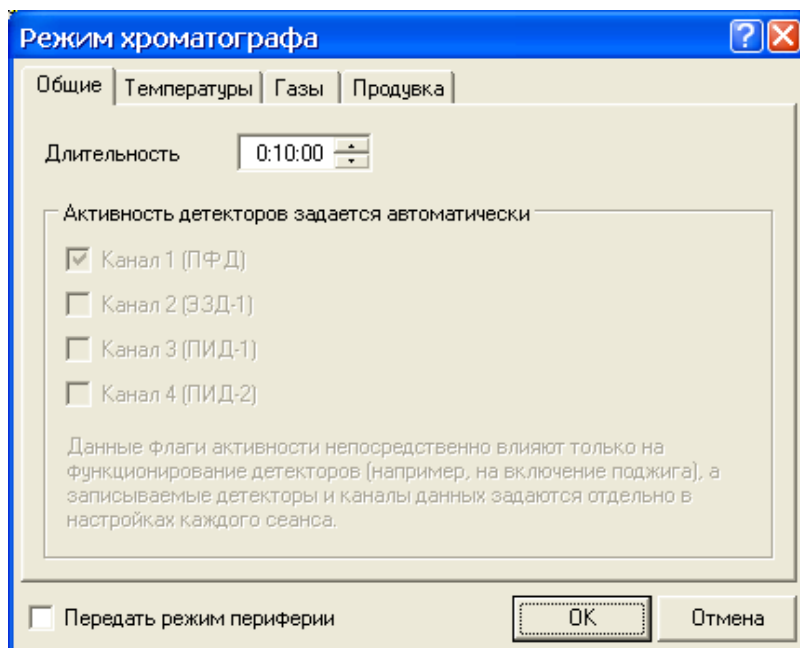


Рисунок 2.62. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Общее”

### Закладка “Температуры”

На закладке **Температуры** (рисунок 2.63):

- Задайте **температуры** колонки, детектора и испарителя.
- При необходимости задания программирования температуры колонки, установите флажок слева от заблокированной кнопки **Колонка**. Далее нажмите кнопку и в открывшемся диалоге **Режим колонки** (рисунок 2.64) задайте параметры программирования.

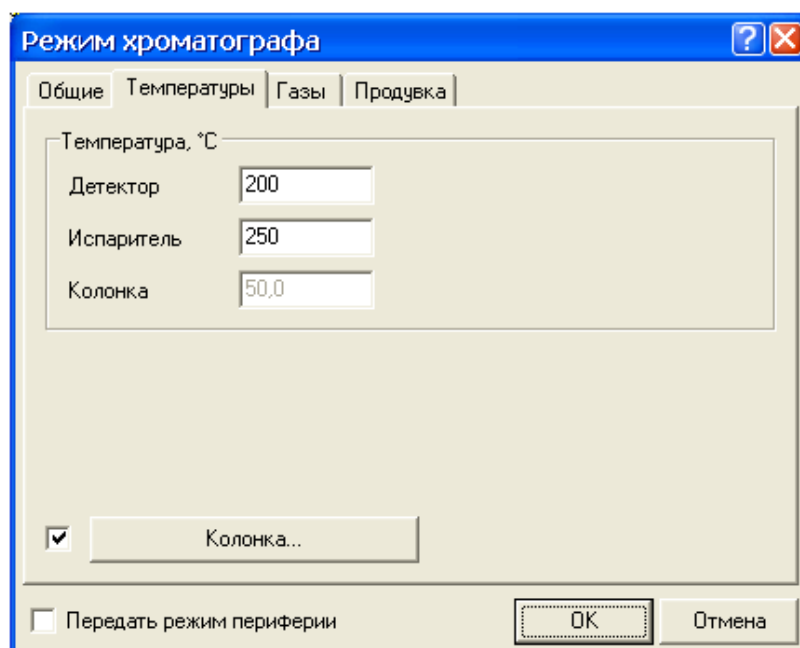


Рисунок 2.63. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Температуры”

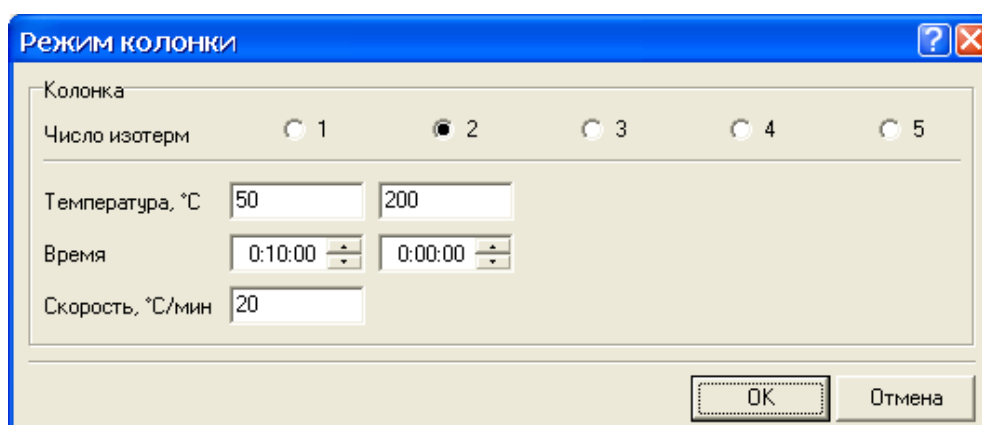


Рисунок 2.64. Диалог “Программирование температуры”

## Закладка “Газы”

На закладке **Газы** (рисунок 2.65) задайте значения параметров газов.

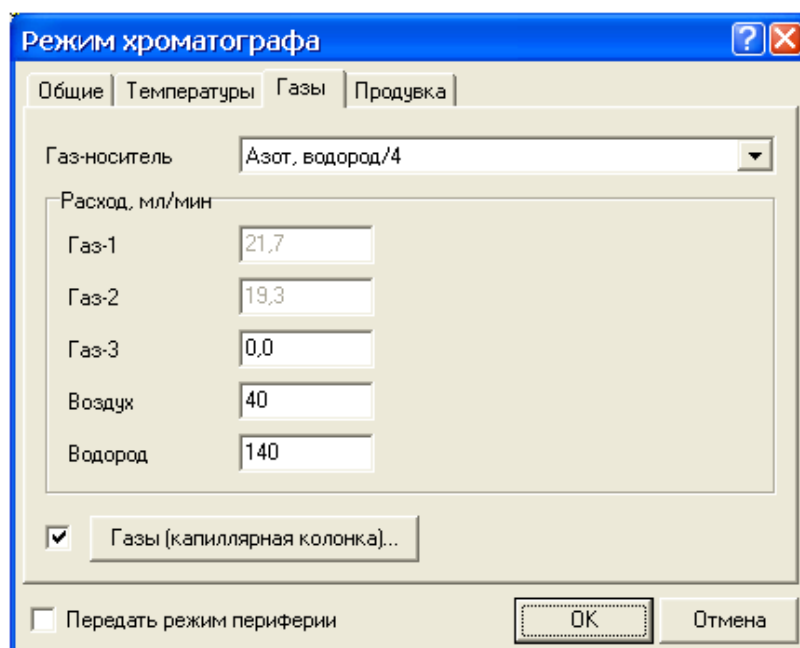


Рисунок 2.65. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Газы”

Для работы с капиллярными колонками установите флажок слева от заблокированной кнопки **Газы (капиллярная колонка)**, далее нажмите кнопку и в открывшемся диалоге **Режим газа** (рисунок 2.66) задайте:

- **длину и диаметр** капиллярной колонки;
- **давление** (скорость, поток) Газа 1;
- при необходимости программировать давление и расход, задайте параметры изолиний.



**Давление, скорость и поток — взаимозависимые параметры, при задании одного из них остальные пересчитываются автоматически. Также автоматически вычисляется мертвое время (время выхода неудерживаемого компонента).**

Для формирования сброса пробы:

- или задайте **деление потока** в испарителе;
- или задайте расход Газа 2;



**Деление потока в испарителе и расход газа-носителя по каналу сброса пробы находятся в прямой зависимости друг от друга. Если изменяется один из этих параметров, автоматически изменяется и другой. Таким образом, в диалоге можно задавать любой из этих параметров.**

Режим газов

Газ-носитель 1

Число изолиний ☒ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4

Давление, кПа

Время

Градиент

Газ-носитель 2

Число изолиний ☒ 1 ☐ 2 ☐ 3

Расход, мл/мин

Время

Скорость, см/с 47,184

Давление, кПа 60,000

Поток, мл/мин 2,854

Деление потока 1:

Колонка

Мертвое время 0:00:52

Температура, °C 0,0

Длина, м

Диаметр, мм

OK Отмена

Рисунок 2.66. Диалог “Режим газа”

### Закладка “Продувка”

На закладке **Продувка** (рисунок 2.67) задайте значения параметров газов и температуру колонки, которые хроматограф будет обрабатывать на этапе **Продувка** после анализа.

Используйте **продувку после анализа** в тех случаях, когда анализируемая проба содержит компоненты с большими временами удерживания, детектирование которых не требуется. В этом случае время анализа может быть небольшим и определяется последним выходящим целевым компонентом. Чтобы ненужные для количественного или качественного расчета более высококипящие компоненты были удалены из хроматографического тракта, в данном диалоге:

- задайте **время продувки** — длительность нахождения хроматографа на этапе **Продувка**, отсчитываемое от момента достижения температурой колонки заданного в данном диалоге значения;
- установите **температуру колонки**;
- задайте **режим газов**.



Для того чтобы отключить продувку после анализа, задайте нулевое время продувки.

#### 2.4.4 Режим хроматографа Кристалл-2000

Диалог **Режим хроматографа** содержит три закладки:

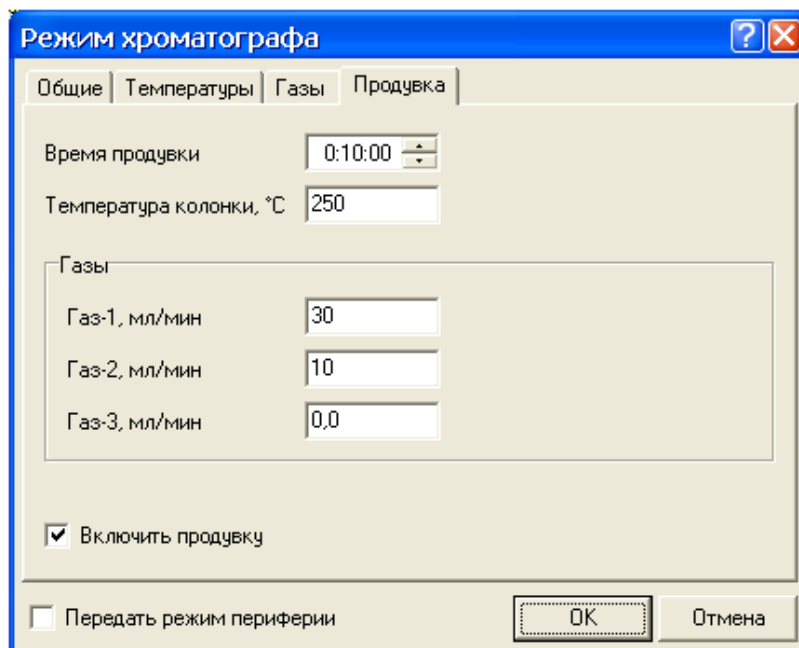


Рисунок 2.67. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Продувка”

### Закладка “Общие”

На закладке **Общее** (рисунок 2.68):

- Задайте **длительность анализа**.
- При необходимости задайте **длительность продувки**.
- Задайте тип **модуля**.

### Закладка “Температуры”

На закладке **Температуры** (рисунок 2.69) задайте **температуры** колонки, детектора и испарителя, а также, при необходимости, параметры программирования колонки.

### Закладка “Газы”

На закладке **Газы** (рисунок 2.70) задайте расходы газов и тип газа-носителя.

## 2.4.5 Продувка до анализа

Назначение данного диалога — задание условий проведения кондиционирования колонки.

Для вызова диалога в меню **Режим** выберите пункт **Продувка**. Диалоговое окно показано на рисунке 2.71. В данном диалоге:

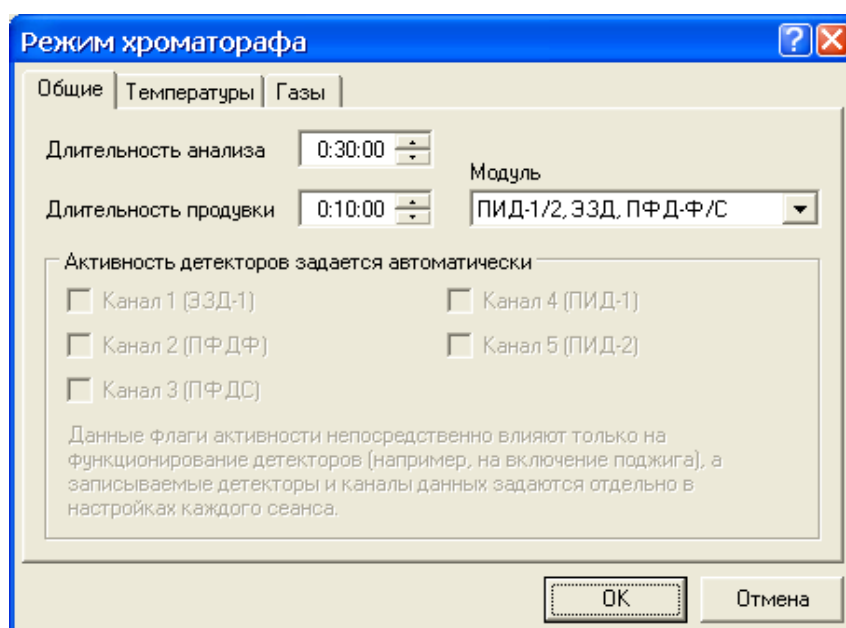


Рисунок 2.68. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Общее”

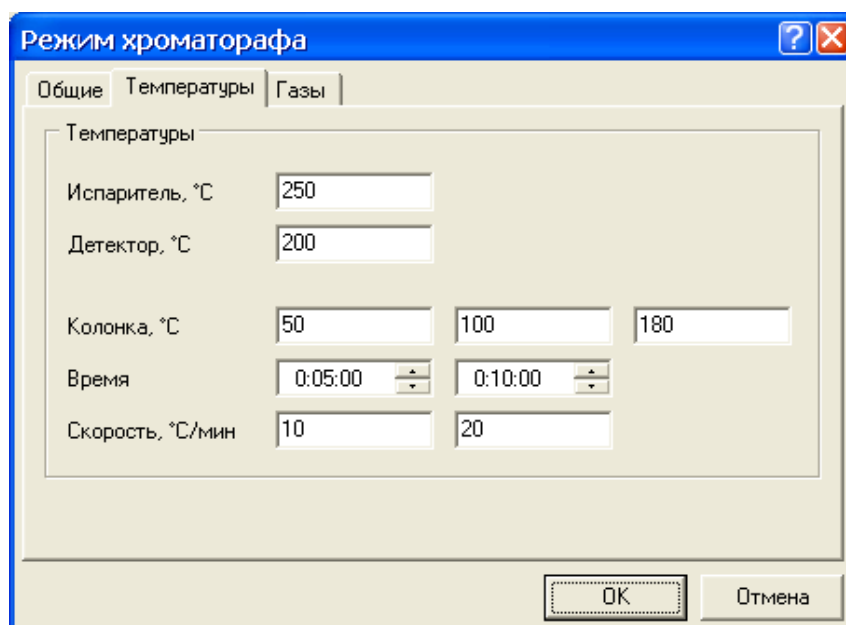


Рисунок 2.69. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Температуры”

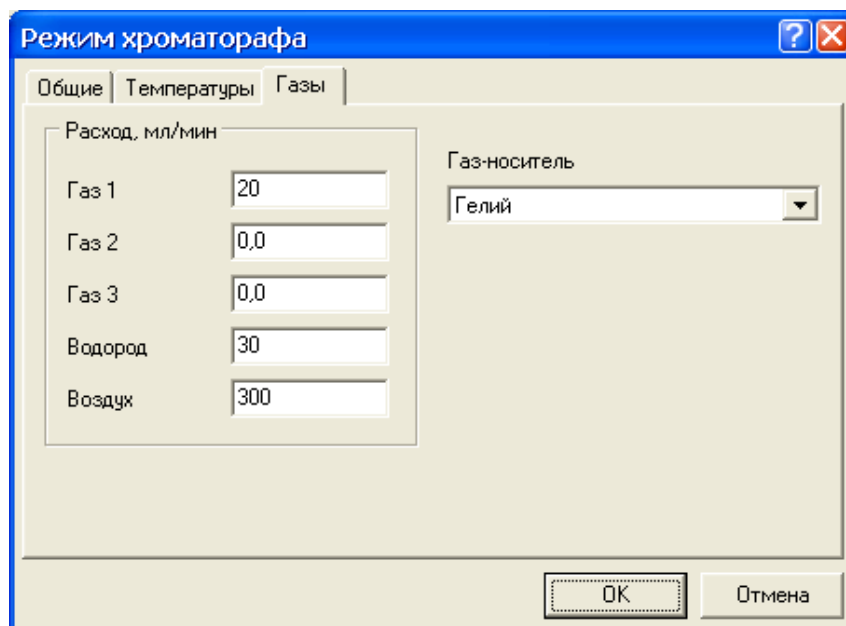


Рисунок 2.70. Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Газы”

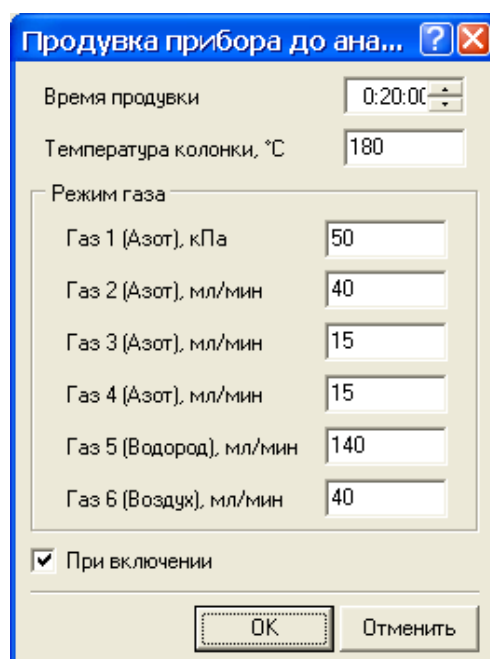


Рисунок 2.71. Диалог “Продувка прибора до анализа”

- Задайте **время продувки**.
- Укажите **температуру колонки**.
- Введите значения **параметров газов** во время продувки.
- Установите флажок **при включении** для проведения продувки после включения хроматографа и достижения всеми параметрами заданных значений.



**Продувка при включении предполагает автоматический запуск этапа продувка после включения прибора и выхода его на этап Готовность. По истечении этого этапа хроматограф выходит на этап готовность для проведения анализов. При работе с прибором можно в любой момент включить продувку. Для этого достаточно вызвать описанный диалог, задать необходимые параметры и нажать кнопку ОК.**

### 2.4.6 Использование предстарта

Предстарт применяется, когда значение параметра режима (расход газа по каналу сброса пробы) или состояние внутреннего устройства (кран-переключатель или клапан) на этапе **Подготовка** и непосредственно перед началом анализа отличаются.

Хроматограф с процессорным модулем ПМ2 позволяет выполнить предстарт в следующих ситуациях:

1. **Предстарт по газам** — при использовании нескольких (более одной) изолиний расхода газа по каналу сброса пробы (работа с капиллярной колонкой), когда необходимо непосредственно перед анализом задать первую изолинию, тогда как на этапе **Подготовка** выполняется последняя изолиния.
2. **Предстарт по крану или клапану** — при использовании клапана или крана-переключателя в схеме обратной продувки колонки (или предколонки), когда необходимо, чтобы непосредственно перед началом анализа кран (или клапан) переключился из первого (начального) положения во второе.



**Предстарт может быть активизирован одновременно для пар газов Газ 1 — Газ2 и Газ 3 — Газ4, если для обеих пар выполнены все необходимые условия.**

Предстарт по газам активизируется при выполнении следующих условий:

- Количество изолиний при программировании четного газа (Газ 2 или Газ 4) более одной.
- Время первой изолинии по четному газу (Газ 2 или Газ 4) не равно нулю.

Предстарт по крану или клапану активизируется в том случае, если установлена опция **предстарт** в диалогах настройки **внутренних устройств** (см. раздел 2.5.8) или **клапана** (см. раздел 2.5.11).



Если хроматограф работает в режиме поверка, предстарт не выполняется.

При активизации предстарта, хроматограф по истечении этапов **Подготовка** и **Ожидание** переходит на этап **Ожидание готовности**. На данном этапе на панели хроматографа горит светодиод **Подготовка**, на индикаторе появляется надпись **Для выхода на готовность нажмите Старт**. Значения всех параметров режима на этом этапе соответствуют тем, что выполнялись на этапе **Подготовка**.

Как только оператор нажмет кнопку **Старт**, хроматограф переходит на этап **Готовность** и выполняется следующее:

- Если выполнены условия предстарта по газам, хроматограф отрабатывает первые изолинии расхода четных газов, участвующих в предстарте.
- Если выполнены условия предстарта по крану, кран переключается из первого положения во второе.
- Если выполнены условия предстарта по клапану, клапан переключается из исходного положения в противоположное.



Если после выполнения предстарта какой-либо из параметров выходит за пределы допуска (например, при изменении расхода газа), включается светодиод **Допуск** и в окне **Параметр вне допуска** **Панели управления** выводится название данного параметра. Хроматограф в этом случае не переходит на этап **Подготовка**.

Поскольку на этапе **Готовность** старт анализа может быть выполнен в любой момент, контроль параметров вне нормы возлагается на оператора, который должен подождать их установки в пределы допуска и только после этого ввести пробу и выполнить старт анализа.

При работе с активными периферийными устройствами (выполняющими серию анализов), по приведенной выше схеме осуществляется старт только первого анализа серии. Для второго и последующих анализов есть отличие, заключающееся в том, что этап **Ожидание готовности** в данном случае фиксирован и длится 5 секунд, после чего хроматограф автоматически выполняет предстарт. Перед выполнением старта нового анализа периферийное устройство ждет, пока все параметры установятся в пределах нормы.

## 2.4.7 Сохранение и загрузка режима

Созданный режим можно сохранить, если в дальнейшем он будет часто использоваться. Для этого служат команды **Загрузить** и **Сохранить** в меню **Режим**.

При выборе команды **Сохранить** появляется стандартный диалог Windows, в котором нужно выбрать место сохранения файла, ввести его имя и нажать кнопку **ОК**. После этого будет выдан запрос **Загружать данный режим автоматически при следующем подключении к прибору?**. Если вы выберете ответ **Да**, то при каждом новом запуске данного соединения, хроматограф будет автоматически отрабатывать сохраненный режим. В случае ответа **Нет**, функция автозапуска не будет активизирована, но вы можете в

любой момент выбрать и запустить сохраненный режим вручную, с помощью команды **Запустить**.



Для удаления сохраненного режима из автозагрузки руководствуйтесь информацией, изложенной в разделе 2.7.

### 2.4.8 Управление хроматографом на этапе “Анализ”

С помощью программы *Панель управления* можно:

- выполнить старт анализа, не нажимая соответствующую кнопку на хроматографе;
- выполнить останов анализа или серии анализов с активным периферийным устройством;
- изменить время текущего анализа.

Вышеперечисленные операции выполняются с помощью команд, расположенных в меню **Анализ**. Поскольку на одном хроматографе одновременно могут выполняться два одновременных и независимых анализа, в меню **Анализ** вложено два подменю **Анализ 1** и **Анализ 2**. Например, если вы хотите выполнить останов анализа, запущенного при нажатии кнопки **Старт 2**, вам необходимо выбрать соответствующую команду из меню **Анализ 2**.

При выборе команды **Изменить время анализа** отображается диалог, показанный на рисунке 2.72. В данном диалоге вы можете с помощью предопределенных кнопок увеличить время анализа на 5, 10, 20 и 30 минут. При необходимости задать длительность текущего анализа более точно, введите вручную новое время в соответствующем поле.

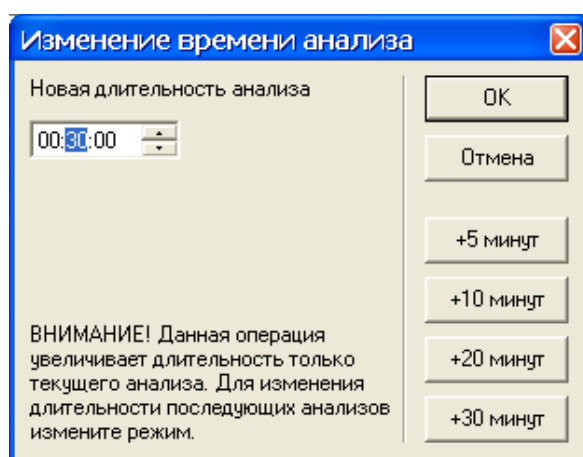


Рисунок 2.72. Диалог “Изменение времени анализа”



Данный диалог служит лишь для оперативной корректировки длительности анализа. С его помощью можно изменить только длительность текущего анализа. При старте следующего анализа его время будет соответствовать заданному в диалоге **Режим хроматографа**. При изменении времени, запись об этом вносится в журнал и отображается на соответствующей закладке главного окна программы.

## 2.5 Периферийные и внутренние устройства

### 2.5.1 Общие сведения о периферийных и внутренних устройствах

Периферийные и внутренние устройства предназначены для автоматизации работы с хроматографом и/или расширения его возможностей по проведению некоторых анализов.



**В данном разделе на каждое устройство приведено краткое описание элементов диалога. Более подробно режимы работы устройств, а также рекомендуемые значения их параметров изложены в руководствах по эксплуатации на данные устройства.**

К периферийным устройствам относятся:

- Дозатор автоматический жидкостный (ДАЖ).
- Дозатор автоматический газовый (ДАГ).
- Парогазовый дозатор.
- Дозатор равновесного пара (ДРП).
- Дозатор бесшприцевого ввода (ДБВ).
- Пиролитический испаритель.
- Термодесорбер.

Периферийные устройства, как следует из их названия, располагаются вне хроматографа и подключаются к нему (все, кроме термодесорбера) через его последовательный порт (СОМ-порт).

К внутренним устройствам относятся:

- Кран-дозатор.
- Кран-переключатель.
- Метанатор.
- Электромагнитный клапан.

Внутренние устройства выполняются в виде встроенных в хроматограф узлов.



**Далее в Руководстве, кроме специально оговоренных случаев, периферийные и внутренние устройства будут упрощенно называться периферия.**

Периферия может быть активной и пассивной:

**Активное периферийное устройство** — автоматическое устройство (ДАЖ, ДАГ, ДРП, ДБВ, парогазовый дозатор, кран-дозатор), обладающее возможностью выполнять серию анализов по заданной программе.



При выполнении серии анализов активным периферийным устройством, выполнение команды **Останов анализа** (расположенной в меню **Анализ**) прервет текущий анализ и хроматограф начнет подготовку к следующему анализу серии. Для того чтобы прервать выполнение всей серии, выберите в меню **Анализ** команду **Останов серии анализов (Дозатор автоматический газовый)** (в зависимости от используемого типа периферийного устройства команда может выглядеть иначе).

**Пассивное периферийное устройство** — автоматическое устройство (пиролитический испаритель, кран-переключатель), не обладающее возможностью выполнять серию анализов.

### Работа с периферией в “Панели управления ПМ2”

Для хроматографов с процессорным модулем ПМ2 управление периферией унифицировано. Любое устройство подключается к хроматографу через СОМ-порт (внутренние устройства не используют внешних кабелей). Хроматограф с ПМ2 поддерживает до шести СОМ-портов (два встроенных, остальные создаются с помощью специальных плат расширения), позволяющих, таким образом, подключать сразу шесть устройств, два из которых могут быть активны одновременно.

Распознавание типа устройства происходит автоматически при его включении. Каждое из подключенных к хроматографу устройств получает индивидуальный номер, соответствующий номеру порта, к которому оно подключено, например **ДАГ#1**, **ДАЖ#3** и т.д. При распознавании периферии программой *Панель управления*, в меню **Режим** появляются дополнительные пункты, названия которых зависят от типа устройства, например **Дозатор автоматический газовый #1**, **Дозатор равновесного пара #2** и т.п. Режим каждого устройства задается в соответствующих диалогах, появляющихся при выборе данных пунктов меню.

В диалогах задания режимов периферии присутствуют три элемента интерфейса, общие для всех устройств (см., например, рисунок 2.73):

- Выпадающий список поддерживаемых хроматографом устройств.



**Назначение списка** — в случае неправильной идентификации периферии, оператор может вручную изменить тип устройства. Если к хроматографу подключены, например, ДАЖ и ДАГ, задав режим ДАЖа, невозможно задать и режим ДАГа, выбрав его из выпадающего списка, поскольку устройства из данного списка подключены к одному и тому же порту обмена данными. Периферия же подключается к различным, независимым друг от друга портам.

- Выбор канала старта.



В данном выпадающем списке, в соответствии с типом Вашего устройства и потребностями, выберите одно из следующих значений канала старта:

- Кнопка Старт 1 — периферийное устройство, подключенное к данному СОМ-порту, начнет работу по заданной программе при осуществлении старта по каналу 1.
- Кнопка Старт 2 — периферийное устройство, подключенное к данному СОМ-порту, начнет работу по заданной программе при осуществлении старта по каналу 2.
- Старт от периферии по каналу 1 — пассивное периферийное устройство начнет работу по заданной программе при осуществлении старта активного периферийного устройства, связанного с каналом Старт 1.
- Старт от периферии по каналу 2 — пассивное периферийное устройство начнет работу по заданной программе при осуществлении старта активного периферийного устройства, связанного с каналом Старт 2.
- Периферия не участвует в работе — периферийное устройство, подключенное к данному СОМ-порту не будет реагировать на старт анализа ни по одному из каналов.

Если, например, к хроматографу подключены ДАЖ и кран-переключатель, и необходимо, чтобы они выполняли свою работу при выполнении старта по каналу 1, для ДАЖ нужно установить канал Кнопка Старт 1, а для крана-переключателя — Старт от периферии по каналу 1.

- Опция **Передать режим хроматографу**. Установите ее для того, чтобы при передаче режима периферийному устройству одновременно передавался и режим хроматографа.

## Работа с периферией в “Панели управления ПМ1”

К хроматографу с процессорным модулем ПМ1 периферия подключается через СОМ-порт, но, в отличие от хроматографа с ПМ2, она не может распознаваться автоматически.

Для того чтобы запустить диалоги задания режимов периферийных устройств, в меню **Режим | Периферия** выберите команду, соответствующую используемому Вами типу периферии.



В последующих разделах приведено краткое описание элементов диалога задания режима каждого из устройств. Иллюстрации диалоговых окон соответствуют *Панели управления ПМ2*. Диалоги настройки периферии для *Панели управления ПМ1* в основном идентичны, за исключением того, что в них отсутствует возможность задания канала старта.

### 2.5.2 Дозатор автоматический жидкостный

Дозатор автоматический жидкостный ДАЖ-2М предназначен для ввода жидких проб в испаритель хроматографа.

ДАЖ-2М является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

ДАЖ-2М поддерживает три способа ввода пробы:

- Простой ввод (рисунок 2.73).
- “Сэндвич” простой (рисунок 2.74).
- “Сэндвич” с растворителем (рисунок 2.75).

Периферийное устройство

Дозатор автоматический жидкостный

Число вводов из одной виалы	10		Режим ввода	Простой ввод
Скорость набора, мкл/с	2		Промывка шприца	сверху
Скорость ввода, мкл/с	9		Время, сек	3
Прокачек при отборе пробы	6		Промывка лайнера	Объем, мкл 3
Воздух верхний, мкл	0		При задании объема отбор промывочной жидкости производится из последней виалы набора	
Растворитель, мкл	0		Набор виал	С 1 по 2
Воздух средний, мкл	0			
Проба, мкл	1			
Воздух нижний, мкл	0			
Время прогрева иглы, сек	0			

Старт периферии: Кнопка "Старт 1"

☒ Передать режим хроматографа

OK Отменить

Рисунок 2.73. Дозатор автоматический жидкостный. Режим простого ввода

Все эти способы отличаются наличием или отсутствием во вводимой пробе прослоек из воздуха и растворителя.

ДАЖ-2М обеспечивает два способа промывки микрошприца:

- Промывка “сверху” (рисунок 2.73).
- Промывка “из виалы” (рисунок 2.74).

Рисунок 2.74. Дозатор автоматический жидкостный. Режим “сэндвич”

Выбор способа зависит от типа решаемой с помощью ДАЖ-2М аналитической задачи.



В Панели управления ПМ1 поддерживается два типа ДАЖ-2М:

- **Жидкостный дозатор.** Данный диалог позволяет управлять дозаторами ДАЖ-2М ранних версий (выпущенных до августа 2004 года).
- **Жидкостный дозатор v2.** Данный диалог позволяет управлять дозаторами ДАЖ-2М с расширенными возможностями ввода и промывки (диалог полностью аналогичен описанному выше).

В зависимости от требований Вашей задачи (методики):

- выберите **режим ввода**;
- выберите способ **промывки шприца**;
- укажите **набор виал** и **число вводов из одной виалы**;
- задайте необходимые параметры ввода пробы;
- задайте **объем** растворителя для **промывки лайнера**, если того требует Ваша методика.

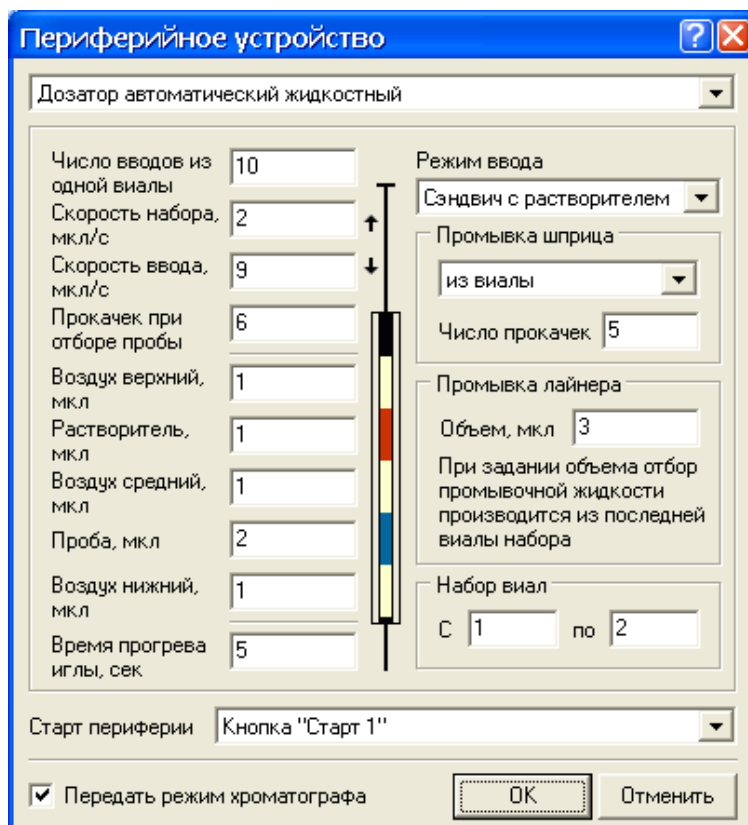


Рисунок 2.75. Дозатор автоматический жидкостный. Режим “сэндвич с растворителем”

### 2.5.3 Дозатор парогазовый

Данный дозатор предназначен для ввода в испаритель хроматографа паровой фазы. Дозатор разработан на основе ДАЖ-2М. Диалог управления данным устройством показан на рисунке 2.76.

В данном диалоге:

- выберите **тип шприца**;
- задайте **температуру** обогреваемых виал;
- выберите способ **промывки шприца**;
- укажите **набор виал** и **число вводов из одной виалы**;
- задайте необходимые параметры ввода пробы;
- задайте **объем** растворителя для **промывки лайнера**, если того требует Ваша методика.

### 2.5.4 Дозатор автоматический газовый

Дозатор автоматический газовый (ДАГ) предназначен для ввода в хроматограф газовых проб.

Периферийное устройство

Парагазовый дозатор

Число вводов из одной вials: 5

Скорость набора, мкл/с: 2

Скорость ввода, мкл/с: 8

Прокачек при отборе пробы: 6

Промывка шприца: из вials

Число прокачек: 6

Тип шприца, мкл: 50

Температура, °C: 80

Проба, мкл: 3

Время ввода пробы, сек: 3

Набо вials: с 1 по 3

Старт периферии: Кнопка "Старт 1"

☒ Передать режим хроматографа

OK Отменить

Рисунок 2.76. Дозатор парогазовый

Периферийное устройство

Дозатор автоматический газовый

Количество инъекций: 5

Температура: 90

Время отбора, сек: 60

Время анализа, сек: 0:10:00

Старт периферии: Кнопка "Старт 1"

☒ Передать режим хроматографа

OK Отменить

Рисунок 2.77. Дозатор автоматический газовый

ДАГ является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

Диалог управления ДАГ показан на рисунке 2.77. В данном диалоге:

- задайте **количество инъекций**;
- задайте **температуру** встроенного крана-дозатора;
- введите **время отбора** пробы в секундах;
- введите **время анализа**.

### 2.5.5 Дозатор равновесного пара

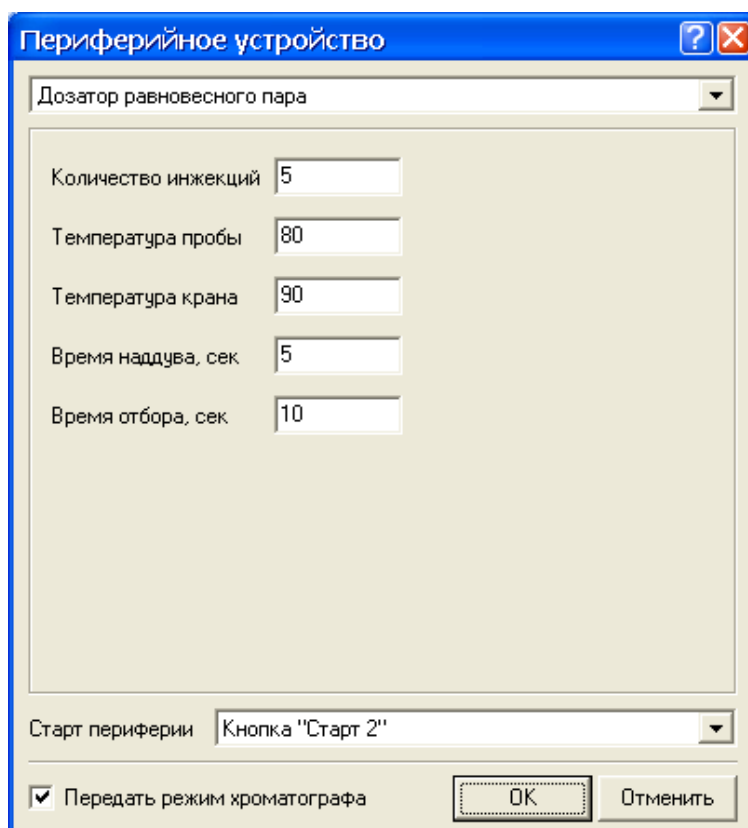


Рисунок 2.78. Дозатор равновесного пара

Дозатор равновесного пара (ДРП) предназначен для ввода в хроматограф паровой фазы.

ДРП является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

Диалог управления ДРП показан на рисунке 2.78. В данном диалоге:

- задайте **количество инъекций**;
- задайте **температуру** пробы;

- задайте **температуру** крана;
- введите **время наддува** в секундах;
- введите **время отбора** в секундах.

### 2.5.6 Дозатор бесшприцевого ввода

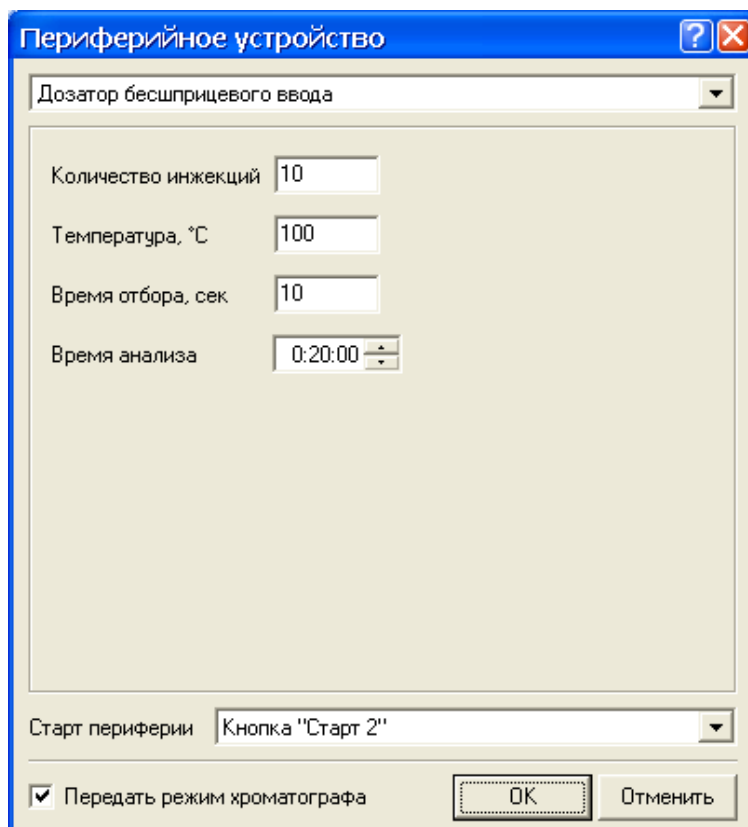


Рисунок 2.79. Дозатор бесшприцевого ввода

Дозатор бесшприцевого ввода (ДБВ) предназначен для ввода в хроматограф жидких проб под избыточным давлением.

ДБВ является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

Диалог управления ДБВ показан на рисунке 2.79. В данном диалоге:

- задайте **количество инъекций**;
- задайте **температуру** встроенного крана-дозатора;
- введите **время отбора** пробы в секундах;
- введите **время анализа**.

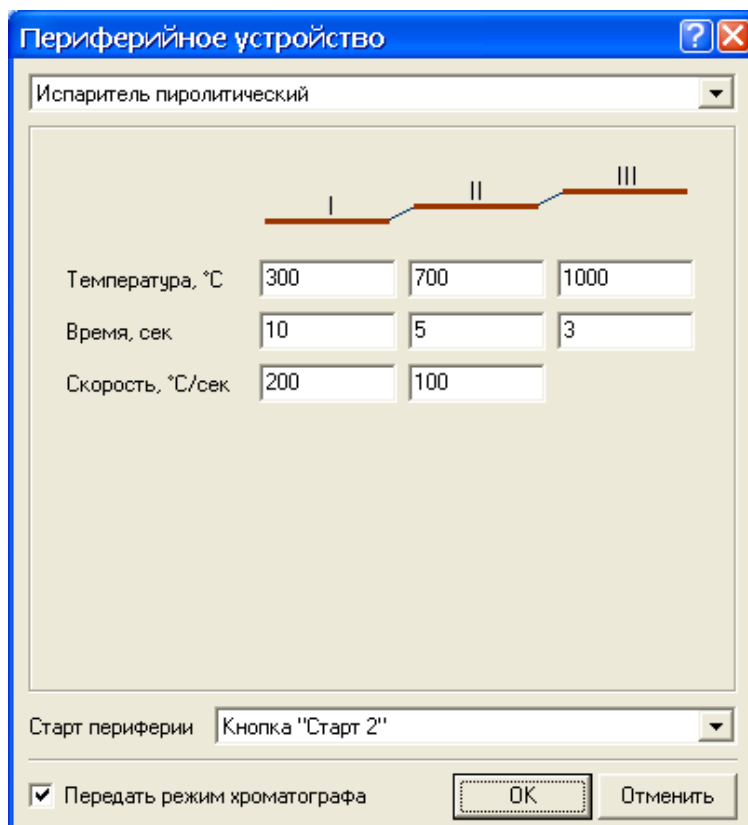


Рисунок 2.80. Пиролизный испаритель

### 2.5.7 Пиролизный испаритель

Данное устройство предназначено для ввода в испаритель хроматографа твердых проб с предварительной пиролизной деструкцией.

Пиролизный испаритель не является активным периферийным устройством, то есть не может выполнять серию анализов.

Диалог управления пиролизным испарителем показан на рисунке 2.80. В данном диалоге:

- задайте значения **температуры** изотерм в соответствии с требованиями Вашей методики;
- задайте **время** каждой из изотерм;
- введите **скорость** программирования температуры.

### 2.5.8 Внутренние устройства

Данный диалог обеспечивает управление поворотными кранами (автоматическими, термостатируемыми), мембранными кранами и метанатором с помощью специального контроллера внутренних устройств. Этот контроллер является развитием контроллера кранов и может быть установлен только в хроматографах с процессорным модулем ПМ2.

В зависимости от наличия в хроматографе тех или иных устройств, в диалоге активны или заблокированы группы параметров соответствующих устройств. В примере на рисунке 2.81 активны **краны-переключатели** и **метанатор**, а параметры **крана-дозатора** заблокированы (он отсутствует в хроматографе.)

Рисунок 2.81. Внутренние устройства



Если в хроматографе имеется кран-дозатор или краны-переключатели, но поле ввода значения температуры заблокировано, это может означать, что:

- Кран не термостатируемый.
- Кран термостатируемый, но датчик температуры не исправен (оборван).

## Кран-дозатор

Кран-дозатор является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

При использовании крана-дозатора:

- задайте **количество инъекций**;
- задайте **температуру** крана-дозатора;
- введите **время отбора** пробы в секундах;

- введите **время анализа**.

### Краны-переключатели



**Хроматограф обеспечивает работу, как с одним краном-переключателем, так и с двумя кранами, располагающимися на одной нагревательной платформе.**

При использовании кранов-переключателей:

- задайте **температуру** кранов;
- введите время каждого переключения (в секундах);
- при необходимости выполнить **предстарт**, установите соответствующую опцию (подробно режим предстарта описан в разделе [2.4.6](#)).

### Метанатор

При использовании метанатора, задайте его температуру.

## 2.5.9 Краны

Данный диалог (см. рисунок [2.82](#)) обеспечивает управление поворотными кранами с помощью специального контроллера.



**Контроллер внутренних устройств более совершенен, чем устаревший контроллер кранов. Контроллер кранов не выпускается с сентября 2004 года, но поддержка его в программе *Панель управления* сохранена.**



**При работе с *Панелью управления ПМ1*, для выбора диалога управления кранами, в меню Режим выберите команду Краны. Диалог в этом случае имеет вид, показанный на рисунке [2.83](#)**

### Кран-дозатор

Кран-дозатор является активным периферийным устройством, то есть способен выполнять серию анализов по определенной программе.

При использовании крана-дозатора:

- задайте **количество инъекций**;
- задайте **температуру** крана-дозатора;
- введите **время отбора** пробы в секундах;
- введите **время анализа**.

Периферийное устройство

Краны

Кран-дозатор

Количество инъекций 5      Время отбора, сек 60

Температура 90      Время анализа 0:30:00

Краны-переключатели

#1   #2   #3   #4

Температура 90

Время 1, сек 5      Время 3, сек 0

Время 2, сек 10      Время 4, сек 0

Старт периферии Кнопка "Старт 2"

☒ Передать режим хроматографа      OK      Отменить

Рисунок 2.82. Диалог управления кранами для хроматографов с ПМ2

Краны

Кран 1   Кран 2   Кран дозатор

Температура, °C 80

Время 1 0:05:00

Время 2 0:10:00

Время 3 0:00:00

Время 3 0:00:00

OK      Отмена

Краны

Кран 1   Кран 2   Кран дозатор

Температура, °C 90

Время отбора 0:01:00

Время анализа 0:30:00

Инъекций 5

OK      Отмена

Рисунок 2.83. Диалог управления кранами для хроматографов с ПМ1

## Краны-переключатели

При использовании кранов-переключателей:

- выберите закладку с параметрами необходимого переключателя;
- задайте **температуру** крана;
- введите времена переключений (в секундах).



При использовании метанатора с контроллером кранов, его температура задается в поле ввода температуры крана-переключателя 1.

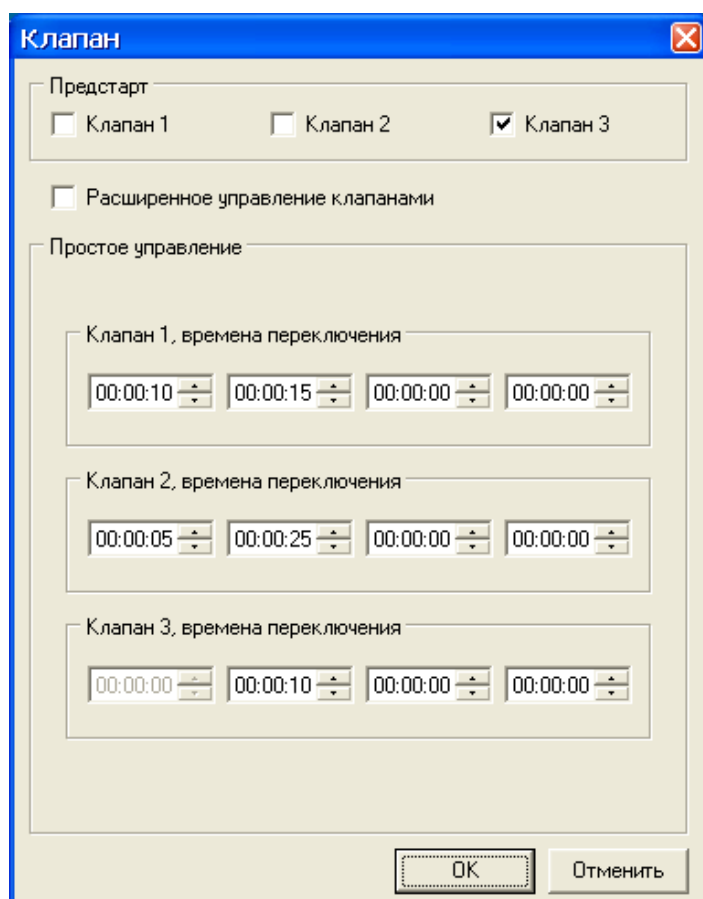
### 2.5.10 Клапан в ПМ2

Электромагнитный клапан относится ко внутренним устройствам, но не имеет собственного контроллера и управляется с помощью платы расширения (платы портов).

- На странице **Клапаны** диалога **Конфигурация** задайте параметры клапанов (см. раздел [2.3.2](#)).
- В меню **Режим** выберите команду **Клапан**.

Диалог управления клапанами содержит два режима: **простой** и **расширенный**.

#### Простой режим



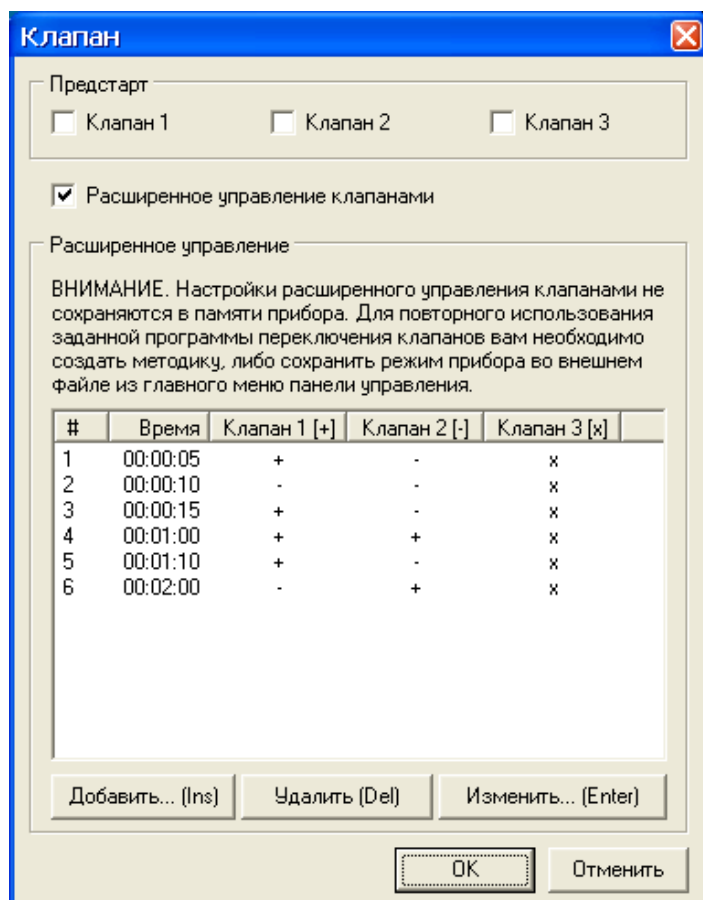
В простом режиме оператор может задать не более четырех переключений для каждого из трех клапанов, которые могут быть установлены в хроматографе. Программа переключений сохраняется в общем режиме хроматографа. Вид диалога управления клапанами в простом режиме показан на рисунке 2.84.

При работе с клапаном в простом режиме задайте времена переключения клапана.

Если требуется первое включение клапана выполнить перед вводом пробы в хроматограф, отметьте опцию **предстарт**. При этом поле ввода значения **времени включения 1** будет заблокировано, и даже если там установлено какое либо значение, выполняться оно не будет (поскольку к моменту начала анализа клапан уже включен). Остальные поля остаются доступными. Режим предстарта описан в разделе 2.4.6.

Рисунок 2.84. Диалог управления клапанами для хроматографов с ПМ2 в простом режиме

## Расширенный режим



В расширенном режиме оператор может задать неограниченное количество переключений клапанов, но в таком случае программа этих переключений не сохраняется в памяти хроматографа. Для повторного использования заданной программы, необходимо создать методику, либо сохранить режим хроматографа во внешнем файле. Для того, чтобы переключить режим диалога включите опцию **Расширенное управление клапанами**. Вид диалога управления клапанами в расширенном режиме показан на рисунке 2.85.

В расширенном режиме времена переключения клапанов задаются с помощью редактора событий.

**Рисунок 2.85. Диалог управления клапанами для хроматографов с ПМ2 в расширенном режиме**

- Для добавления нового события (нового времени переключения переключения клапанов) нажмите кнопку **Добавить...(Ins)**.
- Для удаления какого-либо времени переключения? выделите его в списке и нажмите кнопку **Удалить (Del)**.
- Чтобы изменить какое-либо событие, выделите его в списке и нажмите кнопку **Изменить...(Enter)**.



**Здесь Ins, Del и Enter — дублирующие клавиши на клавиатуре компьютера.**

При добавлении нового события или изменении существующего, на экране появляется диалог изменения состояния клапанов, показанный на рисунке 2.86. В данном диалоге укажите новое **время** переключения клапанов и задайте для каждого из них необходимое состояние.

Для описания состояния клапанов в редакторе событий используются следующие символы:

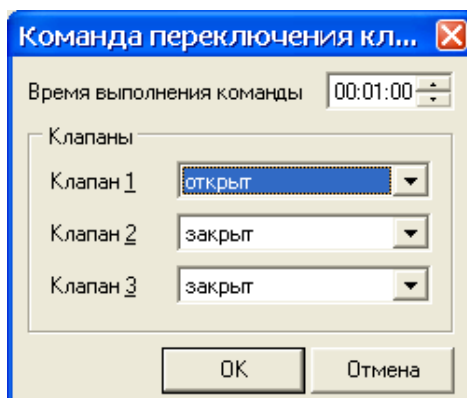


Рисунок 2.86. Диалог задания переключения клапанов

“+” — клапан открыт;

“–” — клапан закрыт;

“х” — клапан выключен (не используется в работе).



Каждое событие переключения воздействует сразу на все клапаны. Например, на рисунке 2.85 можно видеть, что при выполнении событий 3, 4 и 5, для клапана 1 выполняется одна и та же команда — открыть. Это вызвано тем, что для клапана 2 в это время выполняется другая программа и чтобы сохранить состояние клапана 1 открытым, оператор вынужден заново подтверждать это состояние при каждом переключении клапана 2.

### 2.5.11 Клапан в ПМ1

Для запуска диалога в меню **Режим** выберите команду **Клапан**. Диалог управления клапаном показан на рисунке 2.87.



При работе с клапаном в составе хроматографа с ПМ1 можно задавать только одно время включения клапана.

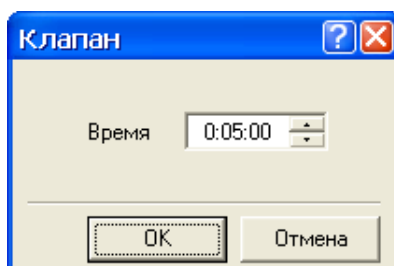


Рисунок 2.87. Диалог управления клапаном для хроматографов с ПМ1

## 2.6 Несколько анализов на одном хроматографе

### 2.6.1 Постановка задачи. Соединение и сеанс

В хроматографической практике часто встречаются аналитические задачи, условия которых позволяют проводить на одном хроматографе сразу несколько анализов разных типов, в том числе и одновременно.

В зависимости от количества и условий аналитических задач удобно использовать различные способы организации их решения.

В разделах 2.1 и 2.2 приведены ключевые понятия, с помощью которых осуществляется настройка программы для решения определенной задачи. Это понятия **соединение** и **сеанс**. Приведем еще раз их определения:



**Сеанс** — процесс получения хроматографической или диагностической информации от аналитического прибора и ее обработка. Сеанс позволяет регистрировать данные с одного или нескольких каналов хроматографа независимо от состояния других каналов в текущий момент. Настройки сеанса определяют, какие именно данные будут получены, а также где они будут размещены и какой программой (*Хроматэк Аналитик 1.5* или *Хроматэк Аналитик 2.5*) обработаны.

**Соединение** — процесс установления связи программы *Панель управления* с прибором. Данный процесс выполняется в соответствии с группой настроек программы, определяемых пользователем и позволяющих для каждого подключенного к компьютеру хроматографа задать индивидуальные параметры связи.

Как было сказано в разделе 2.1, для решения каждой задачи в программе *Панель управления* необходимо создать сеанс. Если на хроматографе планируется решать несколько задач последовательно, в разных режимах, удобно для каждой задачи создать не только отдельный сеанс, но и отдельное соединение. В соответствии с вышесказанным, можно выделить четыре основных способа организации работы в ПУ (см. таблицу 2.1).



Число сеансов может быть больше, чем типов анализов, реализуемых на данном хроматографе. Сеансы используются не только для получения и обработки хроматографической информации. Назовем такие сеансы аналитическими или сеансами анализов. Сеансы могут применяться и для представления диагностических сигналов в виде графиков. Такие сеансы называются диагностическими или сеансами диагностики. Подробнее о использовании диагностических сеансов см. раздел 2.6.4.

Принципиально аналитические и диагностические сеансы ничем друг от друга не отличаются. Их создание и изменение в программе *Панель управления* осуществляется одинаково. Необходимость в использовании диагностических сеансов возникает достаточно редко.

### 2.6.2 Одновременные и независимые анализы



Одновременные и независимые анализы могут быть реализованы только на хроматографе с процессорным модулем ПМ2. В данном разделе будет рассмотрена работа лишь с этим типом хроматографов.

Таблица 2.1. Способы организации сеансов

Задача	Способ организации работы
На хроматографе решается только одна задача.	Создается одно соединение с одним сеансом. Для этого рекомендуется воспользоваться диалогом <b>Мастер нового соединения</b> .
На одном хроматографе одновременно проводятся два независимых анализа.	Создается одно соединение с двумя сеансами. Для этого рекомендуется воспользоваться диалогом <b>Мастер нового соединения</b> . Этот способ работы описан в разделе <a href="#">2.6.2</a> .
На одном хроматографе последовательно выполняется несколько задач в разных режимах.	Для каждой задачи создается одно соединение с одним сеансом. Для этого рекомендуется воспользоваться диалогом <b>Мастер нового соединения</b> . Этот способ работы описан в разделе <a href="#">2.6.3</a> .
Кроме аналитических используются диагностические сеансы.	Аналитические сеансы организуются в зависимости от типа задачи по одному из вышеописанных способов. Диагностические сеансы добавляются непосредственно в программе <i>Панель управления</i> . Этот способ работы описан в разделе <a href="#">2.6.4</a> .

Хроматограф с процессорным модулем ПМ2 позволяет проводить одновременно два независимых анализа. Для организации таких анализов на одном хроматографе необходимо выполнение следующих условий:

- Температура термостата колонок должна быть одинакова для обоих анализов и не может изменяться, то есть нельзя задавать программирование температуры колонки.
- Нельзя задавать программирование температуры испарителей.
- Нельзя использовать продувку после анализа.
- Не рекомендуется использовать предстарт.

Рассмотрим реализацию двух одновременных и независимых анализов на примере.

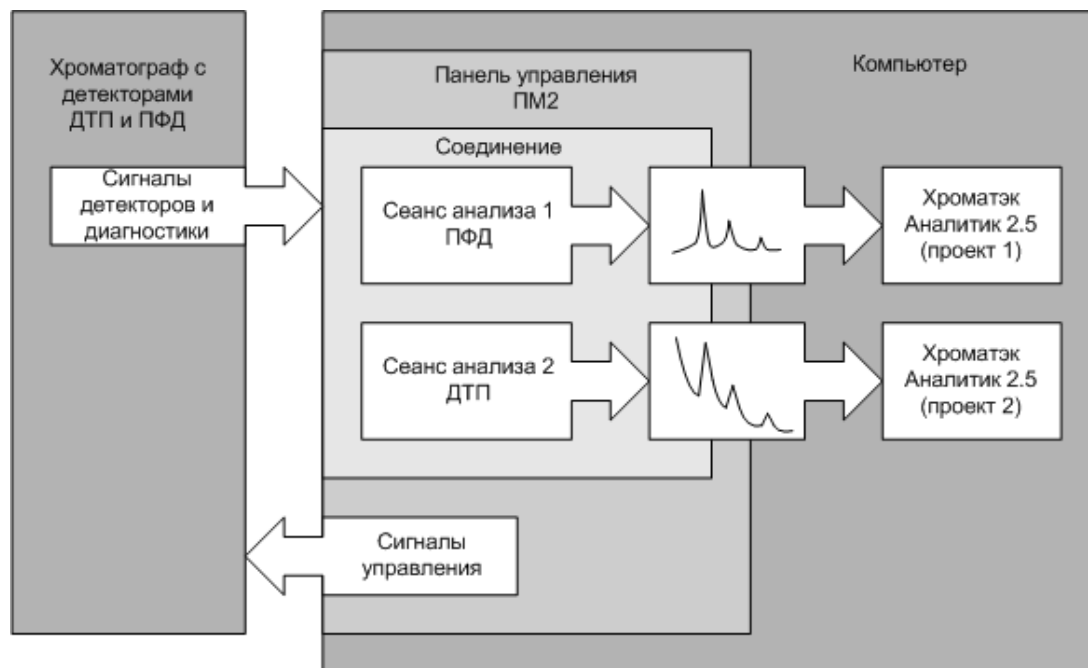


Рисунок 2.88. Пример организации двух одновременных и независимых анализов



Пример организации двух одновременных и независимых анализов.

Условия задачи:

1. Необходимо регулярно выполнять два одновременных и независимых анализа. В одном из анализов используется детектор ПФД, а в другом — детектор ДТП.
2. Время анализа по каналу ПФД - 15 минут, по каналу ДТП - 10 минут.

Для реализации данной задачи создадим соединение с хроматографом, используя диалог Мастер нового соединения (см. раздел 2.2.3).

- При создании соединения укажем, что на хроматографе будут выполняться два анализа. Автоматически будут созданы два сеанса.
- Для Сеанса анализа 1 зададим рабочий детектор ПФД. В качестве программы обработки выберем *Хроматэк Аналитик 2.5*. Для записи и хранения хроматограмм создадим проект 1.
- Для Сеанса анализа 2 зададим рабочий детектор ДТП. В качестве программы обработки выберем *Хроматэк Аналитик 2.5*. Для записи и хранения хроматограмм создадим проект 2.

После завершения настройки соединения запустим его. Выполним настройку конфигурации хроматографа (см. раздел 2.3.3).

- В конфигурации детектора ПФД укажем привязку к старту 1.
- В конфигурации детектора ДТП укажем привязку к старту 2.

По умолчанию длительность хроматограммы для каждого сеанса синхронизирована с временем соответствующего анализа. В режиме хроматографа (см. раздел 2.4.2) зададим:

- время анализа 1 — 15 минут;
- время анализа 2 — 10 минут.

### 2.6.3 Два анализа в разных режимах

Нередка ситуация, когда на одном хроматографе требуется проводить несколько типов анализов в разных режимах. Для организации подобной работы необходимо создать несколько соединений с единственным сеансом в каждом. Рассмотрим работу с несколькими анализами на примере анализа водки и спирта по ГОСТ Р 51698-2000.

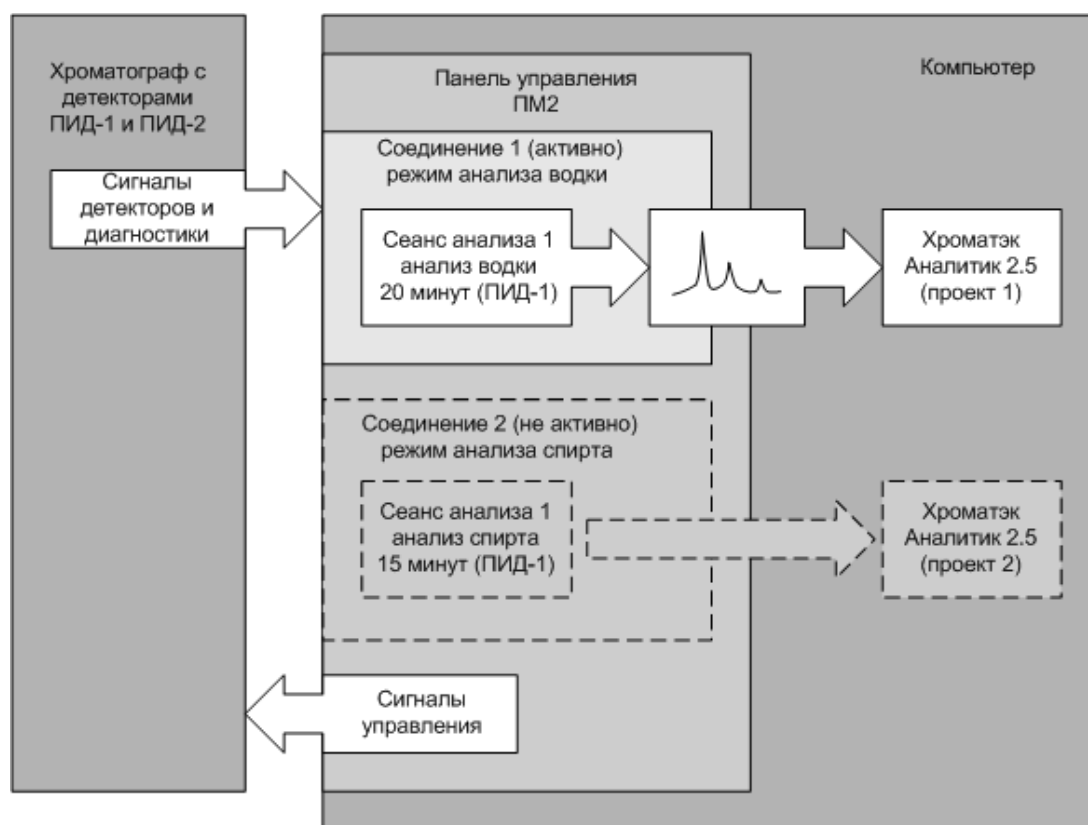


Рисунок 2.89. Пример работы с двумя анализами в разных режимах



Пример работы с двумя анализами в разных режимах:

Особенностью анализа водки и спирта по ГОСТ Р 51698-2000 является то, что проводятся они в различных режимах, но детектор и колонка используются одни и те же. В таком случае оператору наиболее удобно создать с помощью диалога **Мастер нового соединения** (см. раздел 2.2.3) два соединения, каждое из которых будет содержать один сеанс. Настройки сеансов в обоих соединениях будут однотипны. Если в качестве программы обработки используется программа **Хроматэк Аналитик 2.5**, каждый из сеансов целесообразно связать с отдельным проектом.

К любому соединению может быть подключен режим хроматографа, обрабатываемый прибором сразу же после установления связи по данному соединению (так называемый, режим по умолчанию). Этой функцией соединения мы и воспользуемся в данной ситуации. После запуска соединения 1 и создания режима хроматографа, параметры режима необходимо сохранить в специальном файле (см. раздел 2.4.7), из которого они автоматически будут считываться при последующих запусках этого соединения. Эту процедуру следует проделать и для соединения 2.

Таким образом, оператор, завершив работу с одним анализом (например с анализом водки по соединению 1), может, закрыв программу обработки и **Панель управления**, запустить другое соединение (в данном примере — соединение 2) для выполнения анализа в соответствии с сохраненным в данном соединении режимом (анализ спирта). Описанный способ работы показан в виде схемы на рисунке 2.89.

#### 2.6.4 Получение диагностической информации

Обычно в ходе повседневной работы не возникает необходимости в получении графиков изменения во времени каких-либо параметров хроматографа. Однако иногда такие графики могут оказать помощь в обнаружении причин ухудшения характеристик хроматографа. Например, детектор ТИД очень чувствителен к расходу водорода. Оценка графика изменения расхода водорода может помочь в поиске причины ухудшения шумов данного детектора.

Для того чтобы получить нужный диагностический график, необходимо создать соответствующим образом настроенный дополнительный сеанс. Диагностические сеансы нельзя создавать с помощью диалога **Мастер нового соединения**. Создание и изменение дополнительных сеансов подробно описано в разделе 2.7. Здесь мы рассмотрим алгоритм создания и использования диагностического сеанса на примере.

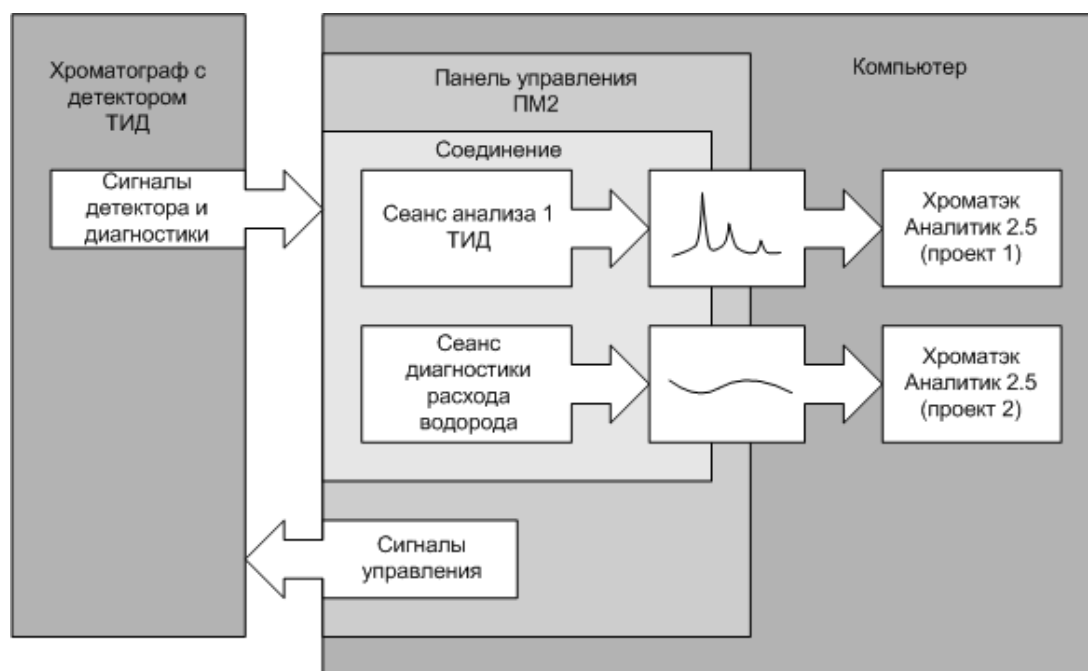


Рисунок 2.90. Пример использования диагностического сеанса



Пример использования диагностического сеанса:

Условия задачи:

1. Необходимо регулярно выполнять анализ с применением детектора ТИД.
2. Время от времени, по желанию оператора, нужно получать диагностический график расхода водорода.

Для реализации данной задачи создадим соединение с хроматографом, используя диалог Мастер нового соединения (см. раздел 2.2.3).

- При создании соединения укажем, что на хроматографе будет выполняться один анализ. Автоматически будет создан единственный сеанс.
- Для Сеанса анализа 1 зададим рабочий детектор ТИД. В качестве программы обработки выберем *Хроматэк Аналитик 2.5*. Для записи и хранения хроматограмм создадим проект 1.

После завершения настройки соединения запустим его.

Непосредственно в программе *Панель управления* создадим дополнительный сеанс (см. раздел 2.7.2), предназначенный для получения диагностического графика расхода водорода. Этот сеанс будет синхронизирован с временем анализа 1. В качестве канала старта зададим старт по детектору ТИД, чтобы данный сеанс выполнялся одновременно с сеансом анализа 1 (анализа с ТИД). Поскольку по условиям задачи не требуется выполнять диагностический сеанс всегда, укажем признак активности Нет. В тех случаях, когда нам потребуется выполнить диагностический сеанс, достаточно будет установить в его настройках признак активности — Да (см. подробнее об управлении сеансами раздел 2.6.5). Для записи и просмотра диагностического графика будем использовать программу обработки *Хроматэк Аналитик 2.5*, в которой создадим проект 2.

Результат всех описанных настроек будет следующим (рисунок 2.90):

- При нажатии на кнопку Старт 1 начнет выполняться сеанс анализа 1 и будет получена хроматограмма по каналу ТИД, а также, в случае активности диагностического сеанса, график изменения расхода водорода. Обработка хромато-

### 2.6.5 Управление сеансами

Управление сеансами осуществляется с помощью контекстного меню (см. рисунок 2.91).

Программа...	Enter
Принудительный запуск сеанса	Shift+Ctrl+S
Принудительный останов сеанса	Shift+Ctrl+P
Переключить активность	Alt+A
Монопольная активность	Ctrl+Alt+A
Добавить...	Ctrl+Ins
Удалить	Ctrl+Del
Свойства...	Alt+Enter

Контекстное меню управления сеансами запускается на закладке **Сеансы** главного окна по нажатию правой кнопки мыши в любом свободном месте закладки или на названии сеанса. В первом случае в контекстном меню будет доступен пункт **Добавить**, позволяющий создать новый сеанс. Во втором случае контекстное меню будет содержать следующие команды:

Рисунок 2.91. Контекстное меню управления сеансами

#### Программа

Запуск программы обработки хроматографической информации, с которой связан данный сеанс. Для запуска может быть использована клавиша **Enter**.

#### Принудительный запуск сеанса

Запуск сеанса на выполнение независимо от состояния хроматографа. Принудительный запуск может быть осуществлен при нажатии на клавиатуре комбинации клавиш **Shift+Ctrl+S**. Данная команда позволяет получать хроматограммы и различные диагностические данные на любом этапе работы хроматографа, а не только на этапе **Анализ**. Это очень удобно при диагностике хроматографа. Принудительно может быть запущен даже неактивный сеанс. В этом случае старт анализа не окажет никакого воздействия на выполнение данного сеанса, то есть сеанс не будет остановлен и не будет начат заново.

#### Принудительный останов сеанса

Остановка выполняющегося сеанса. Принудительный останов может быть осуществлен при нажатии на клавиатуре комбинации клавиш **Shift+Ctrl+P**. Если в момент выполнения данной команды хроматограф находится на этапе **Анализ**, принудительный останов сеанса приведет к прекращению приема данных анализа программой обработки, но этап **Анализ** не прекратится.

#### Переключить активность

Эта команда позволяет включить или выключить признак активности сеанса. Переключение активности может быть осуществлено также нажатием на клавиатуре комбинации клавиш **Alt+A**. Признак активности, принимающий значения **Да** или **Нет**, указывает на то, будет ли выполняться данный сеанс при осуществлении старта анализа. Если сеанс активен и выполняется принудительно, старт анализа прервет его выполнение и запустит заново.

#### Монопольная активность

Если в соединении присутствует несколько сеансов, выполнение этой команды позволяет для выбранного установить признак активности **Да**, а для всех остальных — **Нет**. Установка монопольной активности может быть осуществлена нажатием на клавиатуре комбинации клавиш **Ctrl+Alt+A**.

### Добавить

Данная команда, позволяющая добавить новый сеанс, запускает диалог **Параметры сеанса** (подробно описан в разделе 2.7.2). Для добавления сеанса может быть использована комбинация клавиш **Ctrl+Ins**.

### Удалить

Данная команда удаляет сеанс. Может быть использована комбинация клавиш **Ctrl+Del**.

### Свойства

Данная команда запускает диалог **Параметры сеанса** (подробно описан в разделе 2.7.2), в котором можно изменять настройки данного сеанса. Для запуска этого диалога может быть использована комбинация клавиш **Alt+Enter**.

## 2.7 Изменение настроек соединений и сеансов



Иногда тех возможностей создания и настройки соединения и сеансов, что предлагает пользователю Мастер нового соединения, может быть недостаточно для работы. Оператор, помимо основного сеанса (или двух основных сеансов, если на хроматографе проводятся два независимых одновременных анализа), может создать дополнительные, позволяющие регистрировать различные диагностические параметры.

В данном разделе описываются настройки *Панели управления*, существенно расширяющие ее возможности. Часть этих настроек не требуется в повседневной работе большинства пользователей, поэтому они скрыты в программе. Их использование может быть рекомендовано опытным пользователям. Работа с *Панелью управления*, предполагающая использование этих дополнительных настроек, условно называется экспертной работой или экспертным режимом.

### 2.7.1 Настройка соединения в экспертном режиме

Диалог **Соединения с приборами** (см. рисунок 2.12 в разделе 2.2.3), появляющийся при загрузке *Панели управления*, может быть запущен и позже. Если вы хотите подключить программу к другому прибору, в меню **Прибор** выберите команду **Подключение**.

- Для добавления нового соединения нажмите кнопку **Добавить**.
- Для изменения настроек уже существующего соединения нажмите кнопку **Настройка**.

В обоих случаях на экране появится диалог **Настройка соединения**.



Если, работая с *Панелью управления*, вы желаете изменить настройки текущего соединения, нет необходимости открывать диалог Соединения с приборами. Достаточно в меню *Прибор* выбрать команду *Настройка*. В этом случае сразу будет запущен диалог *Настройка соединения*.

Диалог содержит четыре закладки:

### Закладка “Общие”

На данной закладке (рисунок 2.92):

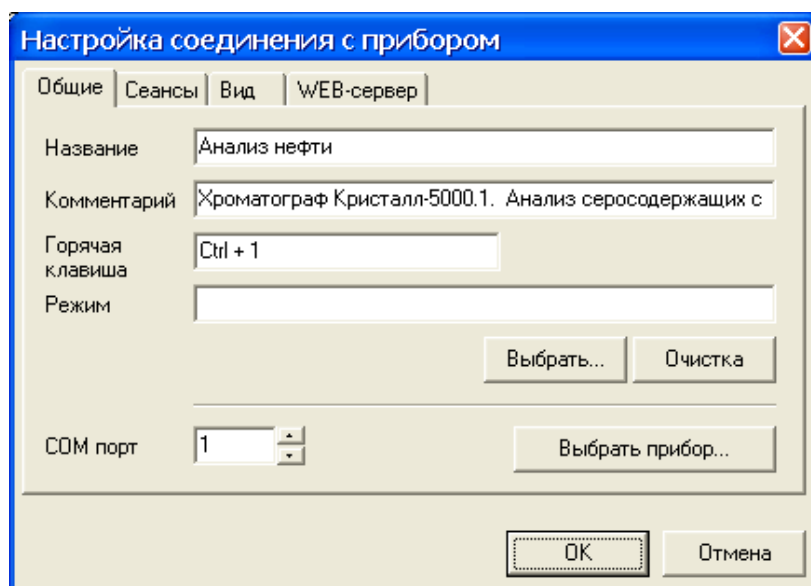


Рисунок 2.92. Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Общие”

- **Название** нового соединения и, по желанию, комментарии.
- Задайте **горячую клавишу соединения** — комбинацию клавиш, с помощью которой будет вызываться *Панель управления* с данным соединением, если она свернута в System Tray (область в правом нижнем углу экрана).



### Пример использования горячих клавиш:

Допустим, существует три соединения, соответствующие трем хроматографам. Хроматографы подключены к трем COM-портам компьютера. Оператор для этих соединений задает горячие клавиши Ctrl+1, Ctrl+2 и Ctrl+3. После того как эти соединения запущены, их *Панели управления* могут быть свернуты в System Tray. Оператор, при необходимости вызвать какое-либо из них для просмотра состояния хроматографа, может не пользоваться мышью, выбирая с помощью окна подсказки (см. рисунок 2.31) какое из них ему нужно открыть. Достаточно нажать соответствующее нужной панели сочетание клавиш на клавиатуре компьютера. Таким образом, оператор, обслуживая сразу несколько хроматографов, может ускорить процесс доступа к *Панели управления* каждого из приборов. Вообще, как показывает практика, использование “горячих клавиш” позволяет значительно быстрее работать с программой, нежели пользуясь мышью.

- **Выберите** файл режима, который вы будете использовать по умолчанию при запуске данного соединения (выбор осуществляется с помощью стандартного диалога открытия файла в Windows). Путь к файлу будет показан в соответствующей строке. Если вы хотите отменить использование файла по умолчанию, нажмите кнопку **Очистить**. Строка **Режим** будет очищена.
- Задайте номер СОМ-порта. Если вы затрудняетесь с указанием номера СОМ-порта, к которому подключен хроматограф, воспользуйтесь дополнительным диалогом **Выбрать прибор** (нажмите соответствующую кнопку). Диалог выбора прибора полностью аналогичен описанному в разделе 2.2.3 (см. рисунок 2.15).

### Закладка “Сеансы”

На закладке **Сеансы** (рисунок 2.93) вы можете видеть все сеансы данного соединения. Чтобы изменить настройки какого-либо сеанса, выделите его в списке и нажмите кнопку **Настройка**. Если Вам нужно добавить новый сеанс, воспользуйтесь кнопкой **Добавить** (для удаления сеанса используйте кнопку **Удалить**).

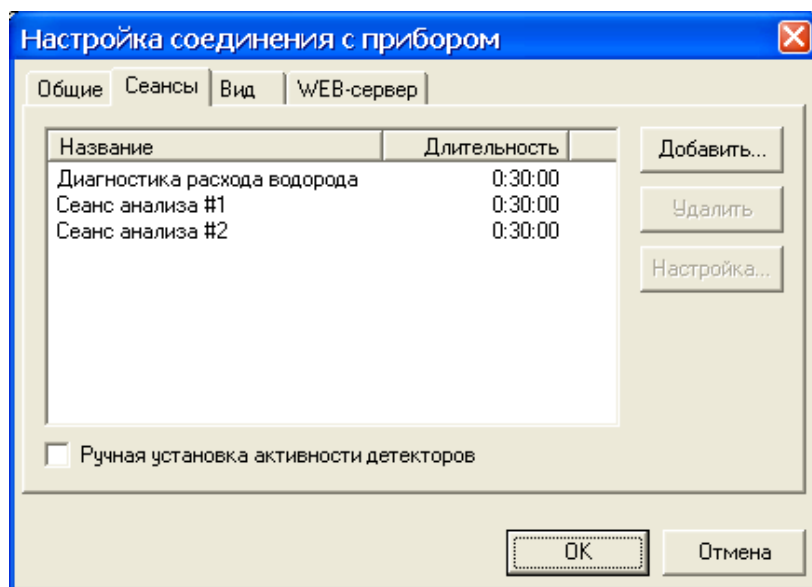


Рисунок 2.93. Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Сеансы”

В примере на рисунке 2.93 можно видеть, что в соединении присутствуют три сеанса. Два из них (**Сеанс анализа 1** и **Сеанс анализа 2**) созданы при помощи диалога **Мастер нового соединения**, а третий — дополнительный, добавлен для получения диагностического графика расхода водорода.

Использование кнопок **Добавить** и **Настройка** запускает диалог **Параметры сеанса**, который подробно рассмотрен в разделе 2.7.2



Пример использования дополнительных сеансов приведен в разделе 2.6.4.

Закладка содержит также опцию **Ручная установка активности детекторов**. Рассмотрим ее назначение на примере.



Пример использования ручной установки активности детекторов:

В некоторых случаях требуется выполнять сеанс анализа с пламенным детектором (например, ПИД), не поджигая пламя и не контролируя его наличие. Для того чтобы снимать сигнал с детектора ПИД, не поджигая его пламя, признак активности ПИД должен быть включен в сеансе, а в диалоге Режим хроматографа — выключен. Но по умолчанию эти флажки заблокированы (см. рисунок 2.54 в разделе 2.4.2). *Панель управления* определяет активность детекторов по их наличию в активных сеансах (подробнее активность сеансов рассмотрена выше, в разделе 2.6.5).

В нашем случае блокировку нужно снять. Для этого включите опции Ручная установка активности детекторов. После этого вы можете включить или выключить активность детекторов вручную. В данном примере активность ПИД должна быть выключена, иначе *Панель управления* будет выдавать сообщение Нет пламени по каналу ПИД.



Активность детектора задается в случаях, когда необходимо включить какой-либо из специфических режимов или параметров, например: спираль ДТП или поджиг пламени в пламенных детекторах (ПИД, ТИД и ПФД). Наличие признака активности детектора в диалоге Режим хроматографа не является условием для получения хроматограммы по данному детекторному каналу.

## Закладка “Вид”

На закладке **Вид** (рисунок 2.94) настройте параметры внешнего вида программы *Панель управления*. Отметьте те из закладок главного окна программы, которые необходимо отображать. Рекомендуется всегда включать закладки **Состояние**, **Диагностика** и **Детекторы**.

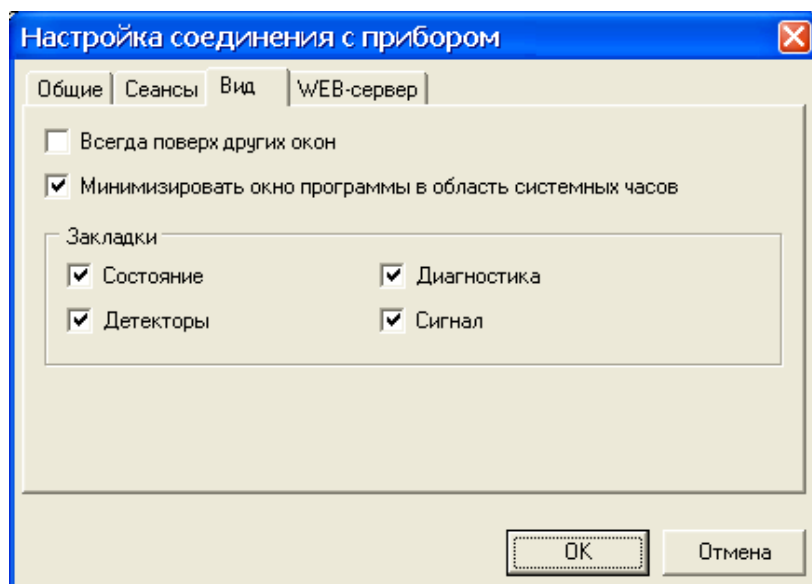


Рисунок 2.94. Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Вид”

## Закладка “WEB-сервер”

Диагностический WEB-сервер предназначен для просмотра состояния удаленного хроматографа по локальной сети или через Internet. Для этого на указанной закладке (рисунок 2.95):

- **Включите** диагностический WEB-сервер;
- укажите **порт** сервера. По умолчанию — 80;
- при необходимости ограничения доступа к удаленному хроматографу введите имя пользователя (**логин**) и **пароль**.

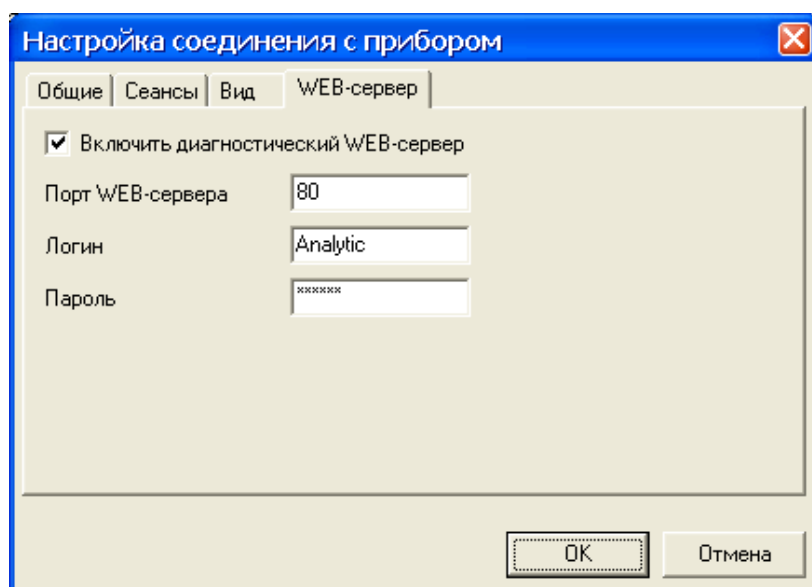


Рисунок 2.95. Диалог “Соединение с прибором”. Закладка “WEB-сервер”

Удаленный доступ осуществляется с помощью любого Internet-браузера, в поле **адрес** которого нужно ввести строку вида **http://Имя компьютера:Порт**.

### 2.7.2 Изменение и добавление сеансов

В этом разделе рассматривается процесс добавления новых сеансов и изменения настроек уже существующих.

Сеанс, в общем случае, содержит в себе следующую информацию:

#### Название сеанса

Уникальное имя, позволяющее отличать один сеанс от другого.

#### Длительность сеанса

Промежуток времени, в течение которого осуществляется выполнение сеанса.

#### Канал старта

Привязка к кнопкам **Старт 1** или **Старт 2** (только для хроматографов с процессорным

модулем ПМ2) определяет, какая из них должна быть нажата для старта анализа в соответствии с настройками данного сеанса.

### Каналы детектирования и диагностики

Типы каналов (сигналы с детекторов, диагностическая информация), графики которых (хроматограммы) будут сняты в ходе анализа.

### Тип программы

Программа, в которой будет выполнена обработка полученных хроматограмм (*Хроматэк Аналитик 1.5* или *Хроматэк Аналитик 2.5*).

### Активность

Признак, указывающий на то, будет ли выполняться сеанс или нет.

Добавление или изменение сеанса осуществляется с помощью диалога **Параметры сеанса**, который может быть запущен двумя способами:

- С помощью диалога **Соединение с прибором** (описан в разделе [2.7.1](#)).
- С помощью контекстного меню на закладке **Сеансы** главного окна.

Перейдите на закладку **Сеансы** главного окна и щелкните правой кнопкой мыши на названии требуемого сеанса. Появится контекстное меню со списком команд.

В текущем разделе описаны две команды: **Добавить** и **Свойства**. Остальные команды описаны в разделе [2.6.5](#).



**Если вы выполните щелчок правой кнопкой мыши не на названии сеанса в списке, а на свободном пространстве закладки, в контекстном меню будет доступна только одна команда — Добавить.**

Команды контекстного меню **Добавить** и **Свойства** открывают диалог **Параметры сеанса**, причем первая из них служит для создания нового сеанса, а вторая — для редактирования уже существующего.

### Задание общих параметров сеанса

На закладке **Общее** (рисунок [2.96](#)):

- Введите **название** сеанса. Название может быть произвольным, но рекомендуется задавать его таким, чтобы оно отражало назначение и характерные особенности сеанса.
- Укажите длительность сеанса или задайте синхронизацию с **временем анализа 1** или **временем анализа 2**. При установке синхронизации длительность сеанса будет совпадать с длительностью соответствующего анализа, заданной в диалоге **Режим хроматографа** (см. раздел [2.4](#)).

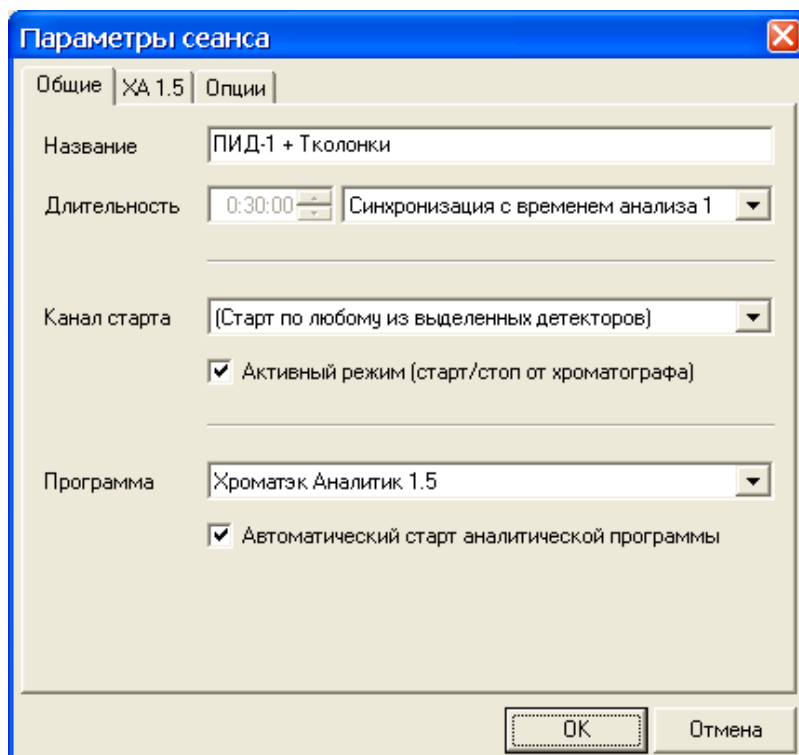


Рисунок 2.96. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Общее”



**Пример настройки длительности сеанса:**

При работе с хроматографом другого производителя с помощью БСД (блока сбора данных) “Хроматэк Кристалл” нет возможности управления этим хроматографом, следовательно, нет возможности задания времени анализа. Однако для записи получаемых хроматограмм необходимо задать их длительность. Для этого нужно выбрать опцию Нет синхронизации длительности, после чего задайте длительность сеанса в соответствующем поле.

- Укажите **Канал старта**.

**Задание канала старта при работе с процессорным модулем ПМ2:**

В хроматографе с процессорным модулем ПМ2 существует два канала старта (Старт 1 и Старт 2). Каждый из этих стартов выполняется при нажатии на соответствующую кнопку хроматографа. Для того чтобы при нажатии кнопки был выполнен старт, к данному каналу старта должен быть привязан хотя бы один детектор. В противном случае на индикаторной панели хроматографа будет выведено сообщение Нет привязанных детекторов или нестартовый этап. Привязка детектора к каналу старта задается в диалоге Конфигурация (см. раздел 2.3.3). По умолчанию в сеансах, созданных с помощью диалога Мастер нового соединения, в качестве канала старта задается Любой выбранный детектор.

Ниже рассмотрены примеры ситуаций, в которых задается другой канал старта.

1. Необходимо получить какой-либо диагностический график без регистрации хроматограммы детекторного канала в этом же сеансе. В этом случае задается канал старта Детекторы привязанные к <Старт 1> или Детекторы привязанные к <Старт 2>, в зависимости от того, какая из кнопок старта запустит данный сеанс. Необходимое условие такой работы — в режиме хроматографа должен быть задан детектор, связанный с тем же каналом старта, что и диагностический сеанс. Детектор задается или автоматически (считывается из активного сеанса), или вручную (пример ручного задания активности детекторов см. в разделе 2.7.1).
2. Необходимо получить какой-либо диагностический график при работе с масс-спектрометрическим детектором (МСД). В этом случае задается канал старта Этап анализа. Диагностический сеанс начнет выполняться, как только хроматограф с МСД перейдет на этап анализ.

**Задание канала старта при работе с процессорным модулем ПМ1:**

При работе с процессорным модулем ПМ1 к качестве канала старта может быть задана либо Кнопка “Старт” на хроматографе, либо Внешняя кнопка.

- Отметьте опцию **Активный режим (старт/стоп от хроматографа)** для того, чтобы сеанс мог быть запущен при старте анализа. Если эта опция не отмечена, сеанс при старте не будет выполняться. В таком случае его можно запустить принудительно. Подробнее об этом см. раздел 2.6.5
- Выберите программу для обработки хроматографической информации. В примере на рисунке 2.96 выбрана программа *Хроматэк Аналитик 1.5*.
- Для запуска программы обработки одновременно с соединением, установите опцию **Автоматический запуск аналитической программы**.

В зависимости от выбора программы обработки, вид окна **Параметры сеанса** изменяется.

**Задание параметров сеанса для программы “Хроматэк Аналитик 1.5”**

Если в качестве программы обработки выбрана *Хроматэк Аналитик 1.5*, в окне **Параметры сеанса** добавляется закладка **ХА 1.5** (рисунок 2.97).

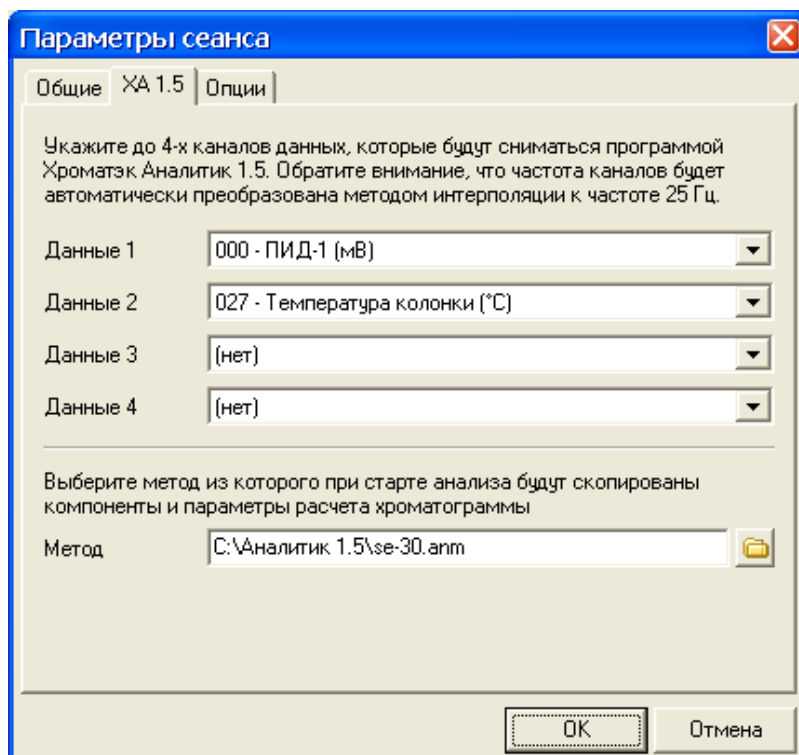



Рисунок 2.97. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “ХА 1.5”

Программа обработки *Хроматэк Аналитик 1.5* позволяет получать хроматографическую информацию по четырем каналам. Это могут быть как сигналы с детекторов, так и диагностическая информация.

- На закладке **ХА 1.5** выберите из выпадающих списков те каналы, которые вы хотите снимать при выполнении данного сеанса.
- Если у вас уже есть хроматограмма-метод, вы можете в каждую вновь создаваемую хроматограмму автоматически копировать компоненты и параметры расчета из метода. Для этого, нажав на кнопку , в стандартном диалоге Windows выберите нужный файл метода (он имеет расширение **anm**).

### Задание параметров сеанса для программы “Хроматэк Аналитик 2.5”

Если в качестве программы обработки выбрана *Хроматэк Аналитик 2.5*, в окне **Параметры сеанса** добавляются закладки **Детекторы**, **Диагностика** и **ХА 2.5**.

На закладке **Детекторы** (рисунок 2.98) отметьте детекторы, сигналы с которых будут присутствовать в хроматограммах данного сеанса.

Если вы хотите, чтобы в хроматограммах данного сеанса присутствовали какие-либо диагностические графики, на закладке **Диагностика** (рисунок 2.99) отметьте нужные диагностические каналы.

На закладке **ХА 2.5** (рисунок 2.100) выберите **проект**, в котором будут сохраняться хроматограммы. При необходимости выберите **метод**, по которому автоматически будут обрабатываться все вновь получаемые хроматограммы.

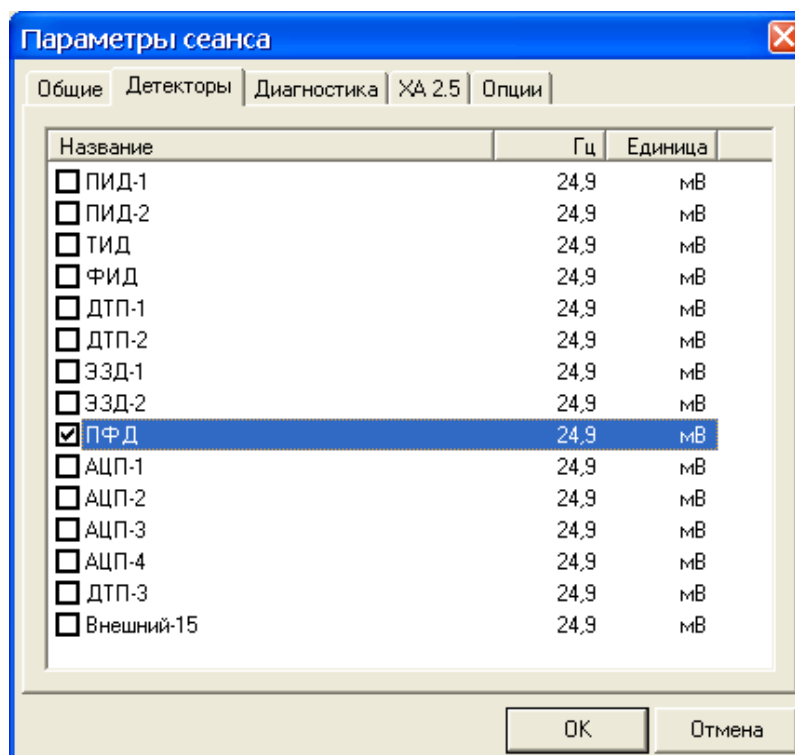


Рисунок 2.98. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Детекторы”

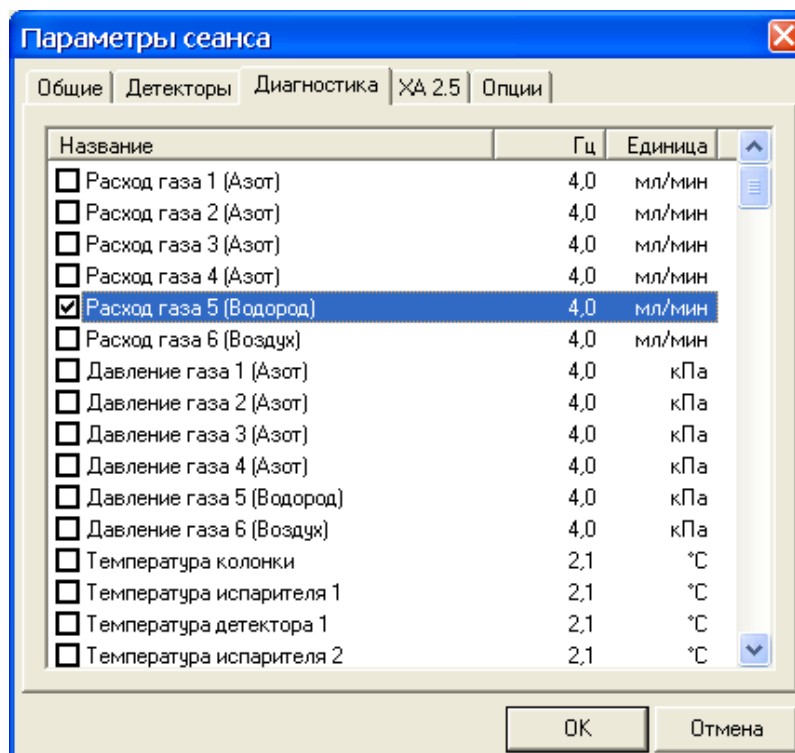


Рисунок 2.99. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Диагностика”

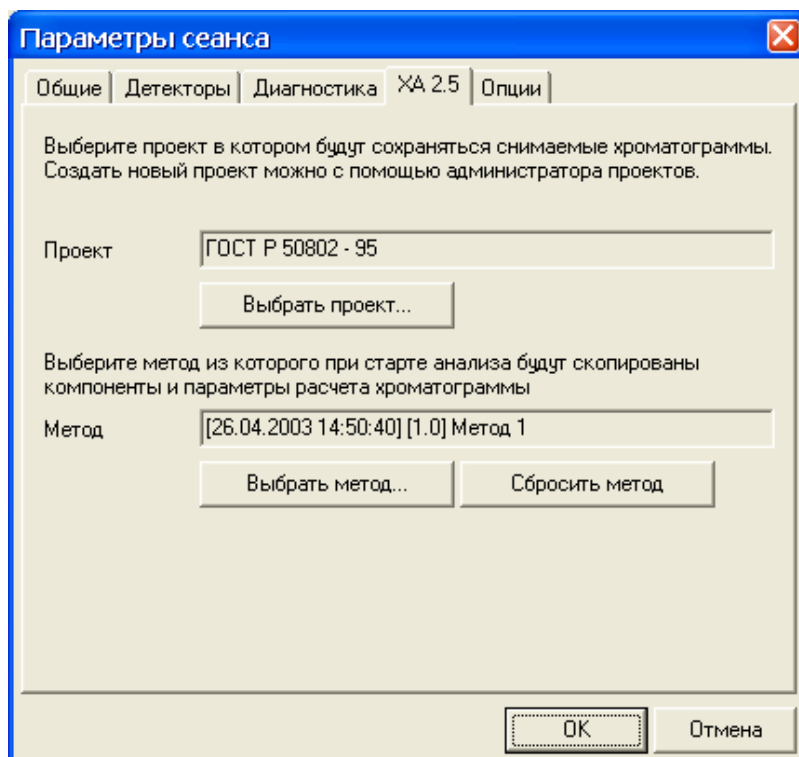


Рисунок 2.100. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “XA 2.5”



При нажатии на кнопку **Выбрать проект** будет запущен диалог **Администратор проектов** (см. раздел 5.2.1, часть 2 печатной версии руководства пользователя).

### Задание дополнительных параметров сеанса

На закладке **Опции** (рисунок 2.101) задаются параметры автосохранения резервных копий хроматограмм.

Сохранение резервных копий позволяет избежать потери информации в случае сбоя программы обработки. Файлы резервных копий располагаются в папке **Архив хроматограмм** и могут быть восстановлены с помощью программы *Конвертер хроматограмм*, входящей в состав ПО *Хроматэк Аналитик*.

Резервные копии сохраняются по умолчанию в формате **AIA Level 1**, стандартном хроматографическом формате, воспринимаемом некоторыми программами обработки хроматографической информации (например, МультиХром). Также может быть выбран формат **IEEE 754**, сохраняющий резервную копию в бинарном файле.

- Если вы не хотите, чтобы при работе программы *Панель управления* создавались резервные копии хроматограмм, выберите в выпадающем списке параметр **Не сохранять**.
- Для того чтобы защитить файлы резервных копий хроматограмм от случайного удаления, выберите опцию **Устанавливать файловый атрибут “Только чтение”**.

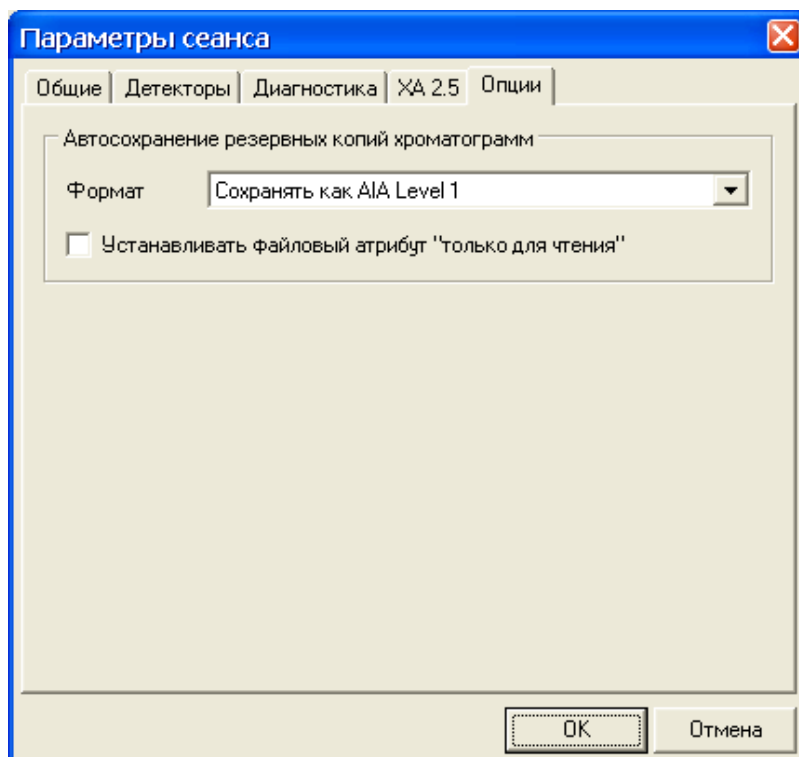


Рисунок 2.101. Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Опции”

### 2.7.3 Изменение микропрограммы (прошивки) хроматографа

Хроматограф допускает возможность изменения внутренней управляющей микропрограммы. Такая возможность позволяет оперативно добавлять новые и изменять существующие функции хроматографа.



**Изменение микропрограммы хроматографа с помощью *Панели управления* возможно только для хроматографов с процессорным модулем ПМ2. Для процессорного модуля ПМ1 это достигается лишь заменой процессора и не может быть выполнено пользователем.**

Версии всех микропрограмм хроматографа можно определить с помощью специального информационного окна, для запуска которого в меню **Настройка** выберите команду **Версии**. Информационное окно представлено на рисунке [2.102](#)

Для того чтобы заменить в хроматографе с ПМ2 микропрограмму, воспользуйтесь встроенным в *Панель управления* программатором.

Перед запуском программатора необходимо перевести *Панель управления* в расширенный диагностический режим. Для этого после запуска программы нажмите комбинацию клавиш **Ctrl+Alt+F5**.

В главном окне программы появятся дополнительные закладки (см. рисунок [2.103](#)). Эти закладки содержат расширенную диагностическую информацию, предназначенную исключительно для сервисных служб.

Кроме закладок главного окна, в меню **Прибор** добавляется подменю **Прошивка** со следующими командами:

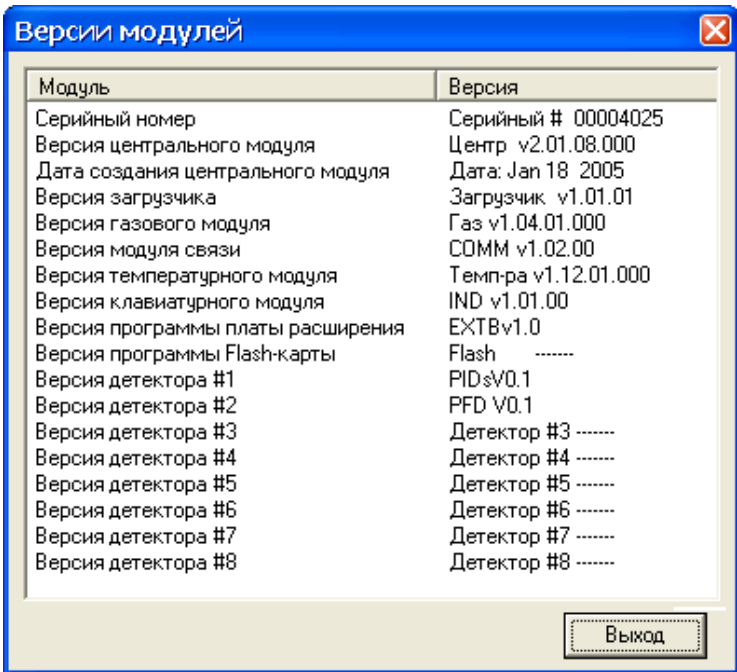


Рисунок 2.102. Список версий микропрограмм хроматографа

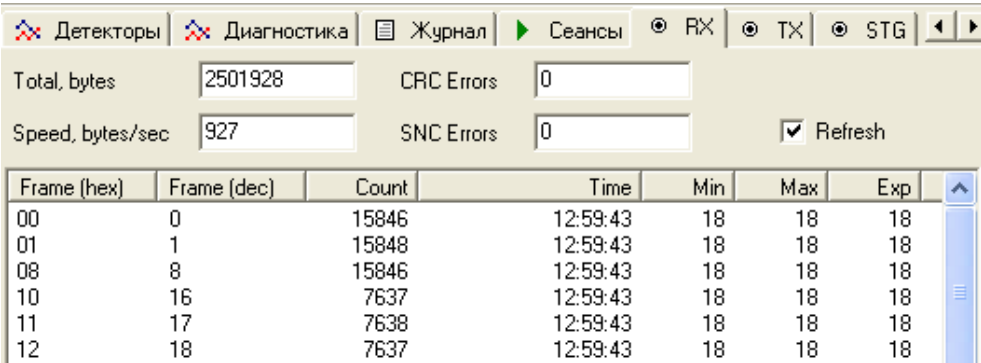


Рисунок 2.103. Расширенный диагностический режим главного окна

**Считать из прибора**

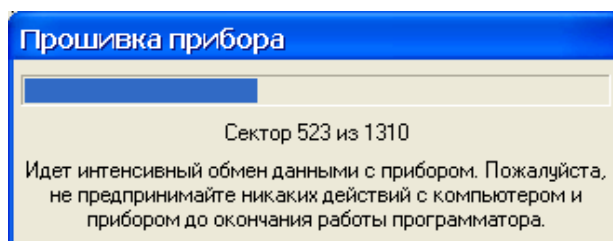
Считывание микропрограммы из прибора и сохранение ее в виде файла с расширением **prg**.

**Загрузить в прибор**

Загрузка новой микропрограммы в прибор. Если флэш-память хроматографа не была очищена, перед выполнением загрузки произойдет ее стирание. Требуемая прошивка (файл с расширением **prg**) выбирается в стандартном диалоге открытия файла, который появляется при выборе данной команды меню.

**Очистить прошивку**

Стирание флэш-памяти. По окончании выдается сообщение: **Микропрограмма прибора очищена. После стирания подключитесь к прибору заново и загрузите прошивку в прибор.**



**Рисунок 2.104. Прошивка прибора**

Для загрузки новой прошивки в хроматограф выберите команду **Загрузить прошивку**, после чего в появившемся стандартном диалоге Windows выберите файл прошивки. Хроматограф начнет стирание уже существующей прошивки (на индикаторе загорается надпись **Стирание флэш-памяти**). Этот процесс занимает около полутора минут. После завершения стирания сразу же начнется загрузка новой прошивки. Этот процесс сопровождается индикацией, показанной на рисунке [2.104](#).

По окончании загрузки новой прошивки *Панель управления* выдаст сообщение: **Соединение с прибором принудительно разорвано. Подключитесь к прибору заново.**

## **2.8 Завершение работы с хроматографом**

### **2.8.1 Охлаждение хроматографа**

Режим охлаждения прибора используется после окончания работы, перед выключением хроматографа. Для вызова диалога в меню **Режим** выберите команду **Охлаждение**. Диалоговое окно для *Панели управления ПМ2* показано на рисунке [2.105](#), а для *Панели управления ПМ1*, на рисунке [2.106](#).

В данном диалоге:

- Задайте значения **температур** термостатов на этапе **Охлаждение**.
- Введите значения **параметров газов** при охлаждении прибора.

**Охлаждение прибора**

Температура, °C		Режим газа	
Колонка	20	Газ 1 (Азот), кПа	10
Испаритель 1	50	Газ 2 (Азот), мл/мин	10
Детектор 1	50	Газ 3 (Азот), мл/мин	10,0
Испаритель 2	50	Газ 4 (Азот), мл/мин	10,0
Детектор 2	50	Газ 5 (Водород), мл/мин	0,0
		Газ 6 (Воздух), мл/мин	0,0

OK Отменить

Рисунок 2.105. Диалог “Охлаждение” в Кристалл-ПМ2

**Охлаждение прибора**

Температура, °C	
Колонка	20
Испаритель	50
Детектор	50
Периферия	50

Расход газов, мл/мин 10

OK Отмена

Рисунок 2.106. Диалог “Охлаждение” в Кристалл-ПМ1

### 2.8.2 Задание режима сна

Назначение диалога — задание экономичного режима работы хроматографа с последующим запуском указанной методики.

Для вызова диалога в меню **Режим** выберите команду **Сон**. Диалоговое окно показано на рисунке 2.107. В данном диалоге:

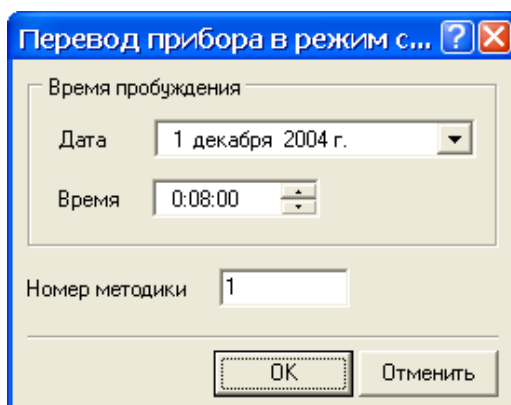


Рисунок 2.107. Диалог “Сон”

- Укажите **дату** пробуждения прибора.
- Введите **время** выхода прибора из режима сна.
- Задайте **номер методики**, которую необходимо запустить после режима сна.



**Методику, которую вы хотите запустить после режима сна, необходимо сохранить в памяти прибора под номером от 0 до 3. Подробнее об этом см. часть 2 “Руководства по эксплуатации хроматографа”, раздел “Диалог оператора при помощи панели управления”.**



# Глава 3

## Конвертер хроматограмм

### 3.1 Основные сведения о программе

Программа *Конвертер хроматограмм* входит в состав базовой части программного обеспечения *Хроматэк Аналитик*. Ее назначение — перенос хроматографической информации между различными версиями программного обеспечения *Хроматэк Аналитик*, а также хроматографическими программами других производителей.

В семействе программ *Хроматэк Аналитик*, в процессе их развития, были реализованы два различных метода хранения хроматографической информации:

- Хранение хроматограмм в виде файлов (каждая хроматограмма занимает отдельный файл). Такой метод хранения используется в программах *Хроматэк Аналитик 1.x*.
- Хранение хроматограмм в проекте. Проект — один большой файл, база данных, в которой каждая хроматограмма представляет собой отдельную запись. Проекты используются программами *Хроматэк Аналитик 2.x*.

*Конвертер хроматограмм* позволяет переносить хроматограммы:

- из одного проекта в другой проект;
- из проекта в файл с преобразованием формата;
- из файла в проект;
- из одного файла в другой с преобразованием формата.

Поддерживаются следующие файловые форматы хранения хроматографической информации:

#### **ХА 1.21 (расширение .anl)**

Формат хроматограмм в программе *Хроматэк Аналитик 1.21*.

#### **ХА 1.23 (расширение .anl)**

Формат хроматограмм в программе *Хроматэк Аналитик 1.23*.

**ХА 1.24 (расширение .anl)**

Формат хроматограмм в программе *Хроматэк Аналитик 1.24*.

**ХА 1.5 (расширение .anl)**

Формат хроматограмм в программе *Хроматэк Аналитик 1.5*.

**ХА 2.x (расширение .anp)**

Формат хроматограмм в проектах программ серии *Хроматэк Аналитик 2.x* (здесь **.anp** — расширение файла проекта).

**Flash (расширение .bkr)**

Файлы архивных хроматограмм, которые автоматически создаются устройством резервной памяти хроматографов с процессорным модулем ПМ2. Обратное преобразование невозможно.

**Excel (расширение .excel.xml)**

Формат таблиц Microsoft Excel. В файл данного формата из хроматограммы переносится только паспорт хроматограммы и таблица компонентов. Обратное преобразование невозможно.

**AIA (расширение .cdf)**

Международный формат для обмена хроматографической информацией. При экспорте хроматограмм поддерживается уровень AIA Level 2, а при импорте — AIA Level 1.

**ТХТ (расширение .txt)**

Текстовый формат представления хроматограмм в виде последовательности отсчетов. Обратное преобразование невозможно.

**BIN (расширение .bin)**

Бинарный формат представления хроматограмм в виде последовательности 8-байтных отсчетов. Обратное преобразование невозможно.

**MAT (расширение .mat)**

Формат представления хроматограмм для использования в программе *MATLAB*. Обратное преобразование невозможно.

**XML (расширения .anx)**

Открытый формат обмена информацией. Может быть использован при создании собственных программ для обработки хроматограмм или для переноса информации между проектами программ семейства *Хроматэк Аналитик 2.x*.

**XML2x (расширения .xml)**

Аналогичен формату XML. Файлы с расширением **.xml** создавались при использовании программы *Хроматэк Обмен* из комплекта *Хроматэк Аналитик* версий 2.1 и 2.2.

**XML.GZIP (расширение .anz)**

Аналогичен формату XML, но файлы автоматически упаковываются компрессором GZIP.



**Перенести из одного формата в другой все данные невозможно, так как в конечном формате может быть не предусмотрено соответствующих полей. Наиболее существенные ограничения форматов приведены в таблице [3.1](#).**

Таблица 3.1. Основные особенности и ограничения форматов хроматограмм

Формат	Каналы	Частота, Гц	Запись в формат	Чтение из формата
XA 1.21	4	25	+	+
XA 1.23	4	25	+	+
XA 1.24	4	25	+	+
XA 1.5	4	25	+	+
XA 2.x	175	произвольная	+	+
Flash	1	произвольная	-	+
Excel	-	-	+	-
AIA	1	произвольная	+	+
TXT	1	произвольная	+	-
BIN	1	произвольная	+	-
MAT	1	произвольная	+	-
XML	175	произвольная	+	+
XML2x	175	произвольная	+	+
XML.GZIP	175	произвольная	+	+

- При конвертировании многоканальной хроматограммы в форматы AIA, TXT, BIN и MAT будет создано столько файлов с одноканальными хроматограммами, сколько каналов присутствует в исходной.
- При конвертировании хроматограммы в форматы серии XA 1.x количество каналов хроматограммы урезается до четырех, а частота сбора данных приводится к 25 Гц.

При конвертировании хроматограмм в формат **Хроматэк Аналитик 1.x** из других форматов могут измениться названия детекторов, так как конвертер автоматически производит подбор модуля детекторов по следующему алгоритму:

- для каждого модуля детекторов подсчитывается количество совпадений детекторов;
- выбирается модуль с наибольшим количеством совпадений. При одинаковом количестве совпадений предпочтение отдается модулю с наибольшим количеством доступных детекторов;
- каналы известных детекторов располагаются в модуле по свои местам;
- каналы неизвестных детекторов располагаются в модуле по свободным местам (таким образом, могут измениться названия детекторов).



При переносе хроматограмм из проекта в проект можно копировать настройки внешнего вида программы обработки **Хроматэк Аналитик** (расположение и ширина столбцов в таблицах, группировка данных и промежуточные итоги, масштаб отображения графика хроматограммы, надписи над пиками и др.).

## 3.2 Запуск программы

Для запуска программы *Конвертер хроматограмм*:

- или выберите соответствующую команду в главном меню Windows (**Пуск | Программы | СКБ Хроматэк | Конвертер хроматограмм**);
- или выполните двойной щелчок левой кнопкой мыши на соответствующем ярлыке рабочего стола Windows.

Когда вы работаете в какой-либо программе обработки хроматографической информации, вы можете запустить *Конвертер хроматограмм* непосредственно из этой программы, для этого:

- при работе в программе *Хроматэк Аналитик 1.5* выберите команду **Конвертер хроматограмм** в меню **Файл**;
- при работе в программе *Хроматэк Аналитик 2.5* выберите команду **Конвертер хроматограмм** в меню **Проект**.

## 3.3 Главное окно программы

Главное окно программы *Конвертер хроматограмм* (представлено на рисунке 3.1) содержит две панели со списками хроматограмм. Каждая панель может работать в одном из двух режимов:

- **Файловый режим.** В этом режиме панель показывает список файлов хроматограмм в выбранной папке с расширениями **\*.anl**, **\*.cdf**, **\*.bkr**, **\*.anx**, **\*.anz**, **\*.xml**.
- **Проектный режим.** В этом режиме панель показывает список хроматограмм выбранного проекта программы *Хроматэк Аналитик 2.x*.

В заголовке каждой панели отображается название проекта, выбранного на данной панели, либо путь к папке, если для панели задан файловый режим.

В зависимости от того, каким способом был запущен *Конвертер хроматограмм* (см. раздел 3.2), состояние панелей будет следующим:

- Если *Конвертер хроматограмм* запущен из главного меню Windows или с рабочего стола, на каждой панели будут открыты те папки или проекты, которые открывались последними при предыдущем запуске. При первом запуске программы на обеих панелях отображается содержимое папки **Мои документы**.
- Если *Конвертер хроматограмм* вызван из программы *Хроматэк Аналитик 1.5*, на левой панели будут отображены файлы хроматограмм, расположенные в той папке, с которой в данный момент работает *Хроматэк Аналитик 1.5*. На правой панели будут открыты те папки или проекты, которые открывались последними при предыдущем запуске программы (или папка **Мои документы**, если программа запущена впервые).

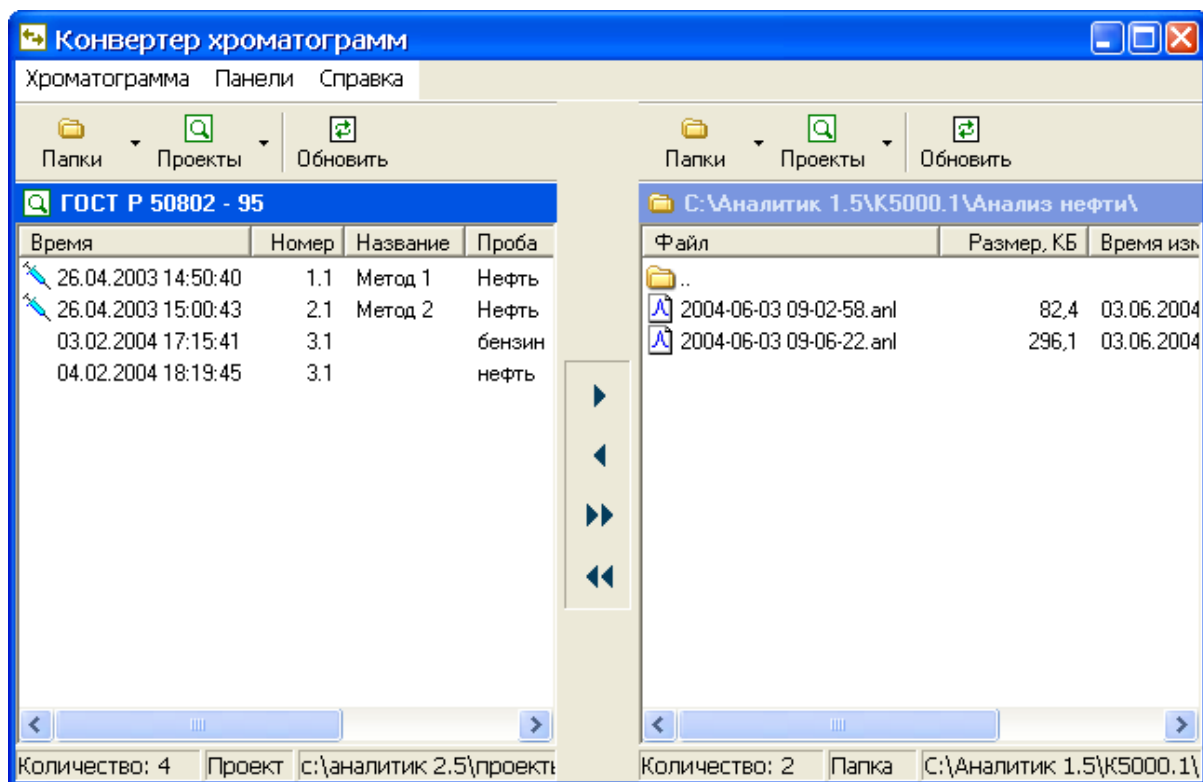


Рисунок 3.1. Конвертер хроматограмм

- Если *Конвертер хроматограмм* вызван из программы *Хроматэк Аналитик 2.5*, на левой панели будет отображено содержимое проекта, с которым в данный момент работает *Хроматэк Аналитик 2.5*. На правой панели будут открыты те папки или проекты, которые открывались последними при предыдущем запуске программы (или папка **Мои документы**, если программа запущена впервые).

## 3.4 Работа с программой



Конвертирование хроматограмм производится путем их переноса с одной панели программы на другую. Поэтапно это происходит таким образом:


- На одной из панелей (например, на левой) выбирается источник хроматограмм (папка или проект, в зависимости от того, из какого формата будут конвертироваться хроматограммы).
- На противоположной панели (в нашем примере — на правой) выбирается приемник хроматограмм (папка или проект, в зависимости от того, в какой формат будут преобразованы хроматограммы).
- На панели-источнике, с помощью мыши, выделяются те хроматограммы, которые необходимо конвертировать.
- Выполняется копирование хроматограмм в приемник с преобразованием формата (если осуществляется копирование из проекта в проект, формат не изменяется).

Источником является панель, активная в данный момент (цвет заголовка активной панели одинаков с цветом заголовка главного окна). Для того чтобы сделать панель активной, щелкните мышью в любом ее свободном месте или начните выделять на ней хроматограммы.


### 3.4.1 Выбор источника и приемника хроматограмм

Выбор источника и приемника осуществляется с помощью кнопок, расположенных над каждой из панелей.



Если во время работы с программой *Конвертер хроматограмм* в проект или папку добавляется новая хроматограмма (например, при завершении очередного анализа), на панелях она не отображается. Для того чтобы все же показать ее в списке, нажмите кнопку  Обновить, расположенную над панелью, на которой необходимо произвести обновление списка.

#### Выбор папки

Для того чтобы установить на левой или правой панели файловый режим и выбрать папку с файлами хроматограмм, в группе кнопок над данной панелью нажмите кнопку  **Папка**. Будет запущен диалог выбора папки с файлами хроматограмм (рисунок 3.2). Выберите в этом диалоге нужную папку и нажмите кнопку **Ок**. На панели будет отображен список хроматограмм, файлы которых располагаются в данной папке.

В столбцах списка представлена краткая информация о хроматограммах:

#### Файл

Имя файла хроматограммы с расширением. В качестве имени файла обычно используется дата его создания (записи хроматограммы). В программе *Хроматэк Аналитик 1.5* имя

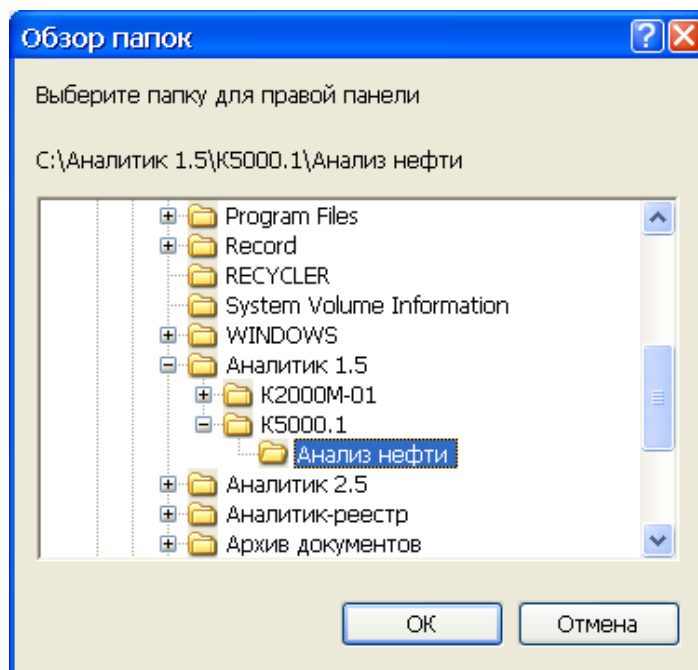


Рисунок 3.2. Выбор папки

файла имеет вид **2004-11-17 13-57-12.anl**. Здесь цифры до пробела обозначают дату (в данном примере 17 ноября 2004г.), а цифры после пробела — время записи хроматограммы.



Одну и ту же хроматограмму можно конвертировать в несколько различных файловых форматов, например в форматы Хроматэк Аналитик 1.21 и Хроматэк Аналитик 1.5. Имена файлов в этом случае будут одинаковы, что не допускается операционной системой. Чтобы избежать такой ситуации, при конвертировании в файловый формат к имени файла добавляется специальный постфикс, например **\_v121** и **\_v150**. Имена файлов при добавлении постфикса уже не совпадают и имеют вид **2004-11-17 13-57-12\_v121.anl**

### Размер, КБ

Размер файла в килобайтах.


### Время изменения

В данном столбце отображается дата и время последнего изменения данного файла. Время изменения может не совпадать с временем создания, указанным в имени файла.

### Версия

Формат файла (список всех форматов см. в разделе 3.1). Для хроматограмм-методов к версии формата добавляется признак **метод**.



Стрелка, направленная вниз (расположена справа от кнопки  Папки), отображает список папок, которые открывались в Конвертере хроматограмм за последнее время. Пример списка показан на рисунке 3.3.

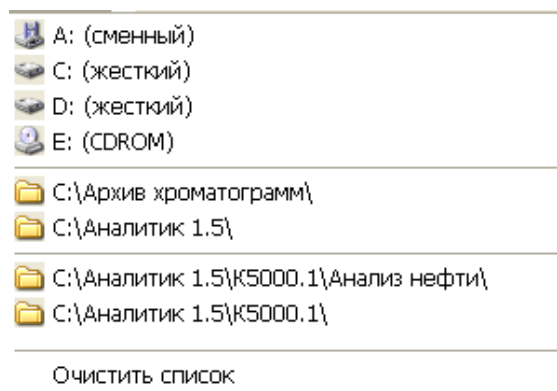



Рисунок 3.3. Пример списка последних открывавшихся папок

### Выбор проекта

Для того чтобы установить на левой или правой панели проектный режим и выбрать проект, в группе кнопок над данной панелью нажмите кнопку  **Проекты**. Будет запущен диалог выбора проекта (рисунок 3.4).

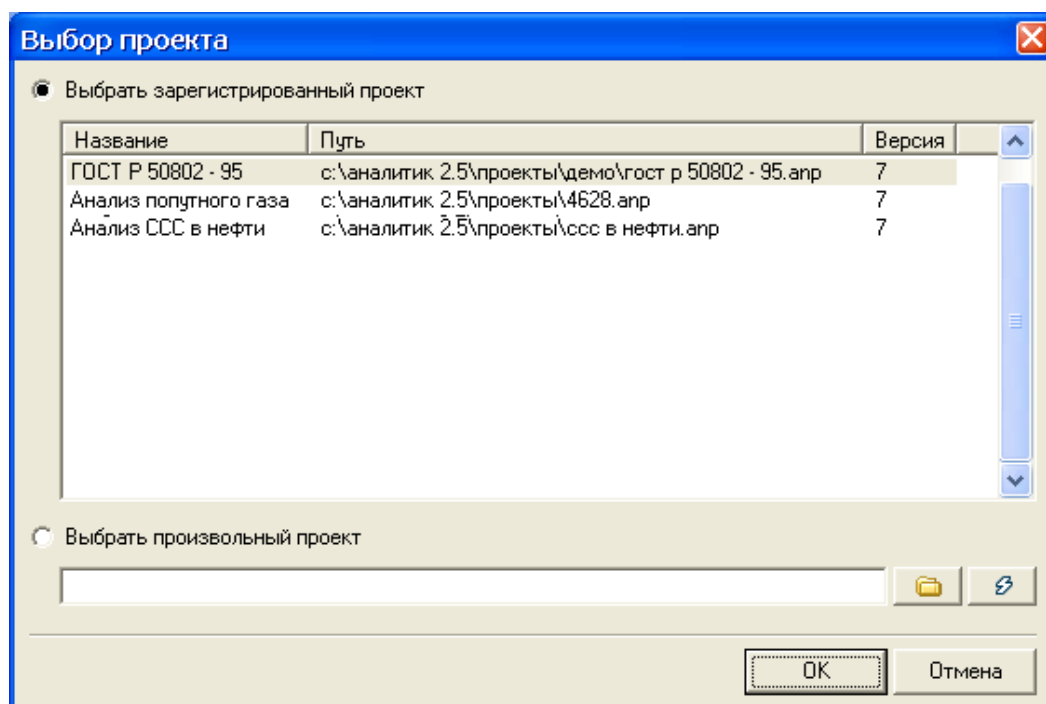




Рисунок 3.4. Выбор проекта

В данном диалоге:

- Для того чтобы выбрать проект, зарегистрированный на данном компьютере, выделите его в списке с помощью мыши и нажмите кнопку **Ок**.
- Для того чтобы выбрать проект, не зарегистрированный на данном компьютере, но находящийся на нем (например, перенесенный с другого компьютера), нажмите на кнопку  и, в появившемся стандартном диалоге Windows **Выбор файла**, найдите

файл проекта (расширение файла — .anp). После этого в диалоге **Выбор проекта** нажмите кнопку **Ок**.

- Для того чтобы выбрать проект, расположенный на удаленном компьютере, нажмите на кнопку . На экране появится диалог **Удаленный проект** (см. рисунок 3.5). В этом диалоге задайте имя **удаленного компьютера**, **протокол** передачи данных и **путь** к файлу проекта на удаленном компьютере. Нажмите в диалоге **Выбор проекта** кнопку **Ок**.



**В списке зарегистрированных проектов отображаются только проекты программы Хроматэк Аналитик 2.5. Если на компьютере одновременно установлена программа Хроматэк Аналитик 2.2 (2.1 или 2.0), то проекты этой программы не считаются зарегистрированными и могут быть выбраны как произвольные с указанием места их расположения.**

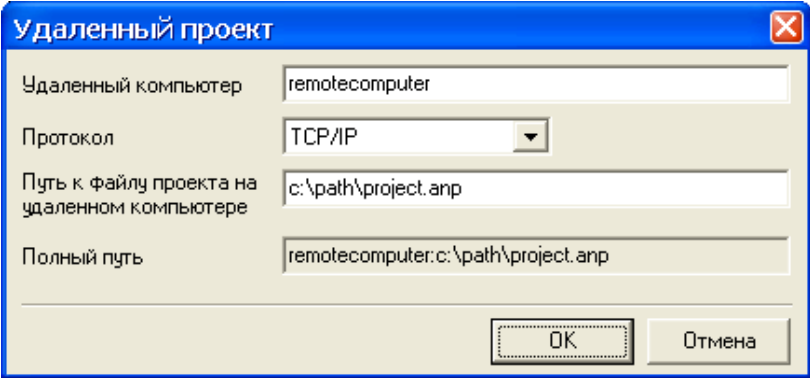



Рисунок 3.5. Удаленный проект

На панели будет отображен список хроматограмм, присутствующих в выбранном проекте. Символ  в списке хроматограмм, отмечает те из них, которые являются методами. В столбцах списка представлена краткая информация из паспортов хроматограмм ( пример списка показан на рисунке 3.6)

**Время.** Дата и время записи данной хроматограммы (цифры до пробела — дата, после пробела — время).

**Номер.** Номер хроматограммы в проекте.


**Название.** Название метода, на основе которого получена и обработана данная хроматограмма.

**Проба.** Название образца, в результате анализа которого получена данная хроматограмма.

**Оператор.** Имя (фамилия) оператора, выполнявшего анализ.

**Мкл.** Объем пробы в микролитрах.



**Стрелка, направленная вниз (расположена справа от кнопки  Проекты), отображает список проектов, зарегистрированных на данном компьютере.**

ГОСТ Р 50802 - 95 (с:\аналитик 2.5\проекты\демо\гост р 50802 - 95.anp)  
Анализ попутного газа (с:\аналитик 2.5\проекты\4628.anp)  
Анализ ССС в нефти (с:\аналитик 2.5\проекты\ССС в нефти.anp)

Рисунок 3.6. Пример списка зарегистрированных проектов

### 3.4.2 Выполнение преобразования

Для того чтобы выполнить преобразование, выделите с помощью мыши нужные хроматограммы на панели-источнике (источник — панель с активным заголовком).

Далее:

- или выберите в меню **Хроматограмма** команду **Конвертировать**;
- или нажмите на клавиатуре компьютера клавишу F5;
- или просто перетащите с помощью мыши выделенные файлы на панель-приемник.

Также возможен следующий способ копирования с преобразованием формата:

- Для того чтобы перенести выделенные хроматограммы с левой панели на правую, нажмите кнопку ►. Если вы хотите перенести **все** хроматограммы с левой панели, нажмите кнопку ►►.
- Для того чтобы перенести выделенные хроматограммы с правой панели на левую, нажмите кнопку ◀. Если вы хотите перенести **все** хроматограммы с правой панели, нажмите кнопку ◀◀.

Вы можете воспользоваться любым из предложенных способов. После выполнения, тем или иным способом, команды переноса появится диалог **Преобразование хроматограмм** (рисунок 3.7), предлагающий выбрать тип формата.

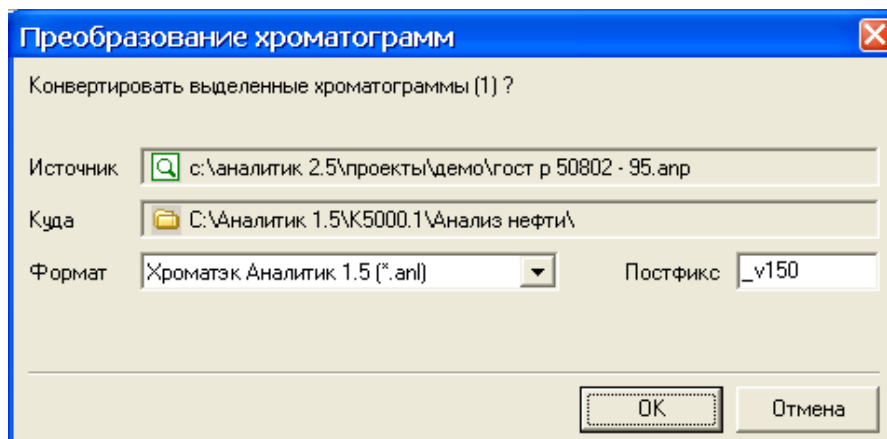


Рисунок 3.7. Преобразование хроматограмм

В данном диалоге выберите из выпадающего списка **формат**, в который вы хотите преобразовать выбранные хроматограммы. При выборе форматов хроматограмм, используемых программами серии *Хроматэк Аналитик 1.x*, к имени файла автоматически будет добавлен постфикс (о назначении постфикса см. раздел 3.4.1). После указания формата нажмите кнопку **Ок**.



Если хроматограммы переносятся в проект, преобразование формата будет задано автоматически и диалог Преобразование хроматограмм примет вид, показанный на рисунке 3.8.

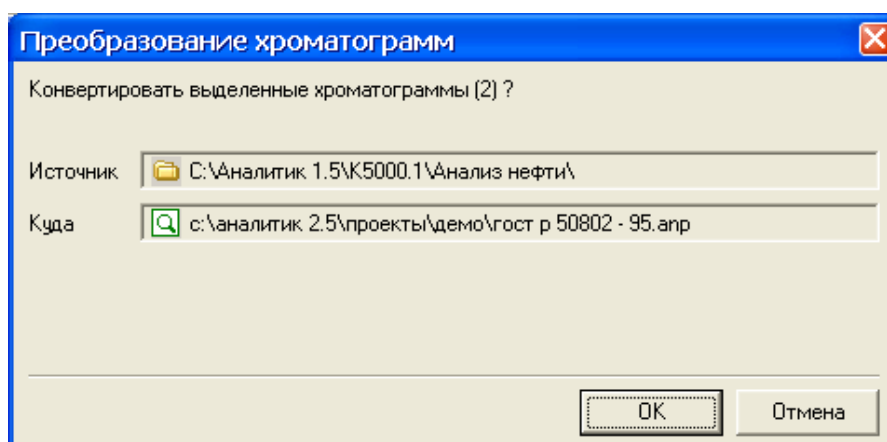


Рисунок 3.8. Преобразование хроматограмм с переносом в проект

Процесс преобразования отображается в специальном окне (рисунок 3.9). По окончании преобразования хроматограмм нажмите кнопку **Заккрыть**.

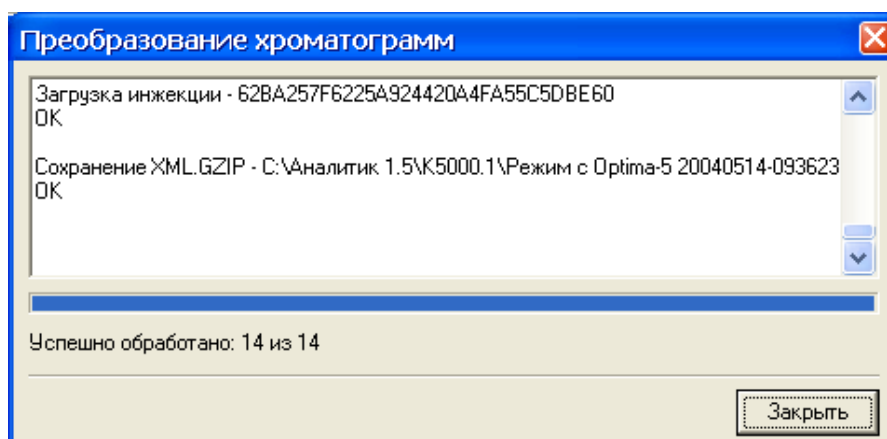


Рисунок 3.9. Завершение процесса преобразования хроматограмм

### 3.4.3 Дополнительные возможности

#### Перенос настроек проекта

*Конвертер хроматограмм* позволяет переносить из одного проекта в другой следующие настройки:

- Ширину и формат столбцов в таблицах, порядок их расположения, признаки видимости для каждого столбца.
- Масштаб и цвета графиков, формат надписей над пиками.

Для переноса настроек выберите проекты, источник и приемник (источником является проект, расположенный на панели с активным заголовком), и выберите в меню **Хроматограмма** команду **Перенос настроек проекта**.

#### Контекстное меню

Открыть...	Enter
Выделить все	Ctrl+A
Системное меню...	Alt+S
Файловый проводник...	Alt+E
Паспорт...	Alt+Enter

Щелчок правой кнопкой мыши на хроматограмме открывает контекстное меню (рисунок 3.10) с дополнительными командами:

**Рисунок 3.10. Контекстное меню**

#### Открыть

Выбор данной команды позволяет открыть хроматограмму в соответствующей программе обработки. Поддерживаются программы обработки *Хроматэк Аналитик 1.5* и *Хроматэк Аналитик 2.x*. Если формат хроматограммы иной (например ХА 1.21 или XML), открыть хроматограмму нельзя.

#### Выделить все

Выбор данной команды позволяет выделить все хроматограммы на данной панели.

#### Системное меню

Данная команда запускает системное контекстное меню Windows (показано на рисунке 3.11). Для панелей в проектном режиме данная команда недоступна.

#### Файловый проводник

Данная команда запускает стандартную программу Windows *Проводник*. Для панелей в проектном режиме данная команда недоступна.

#### Паспорт

С помощью этой команды можно просмотреть паспорт выделенной хроматограммы (рисунок 3.12).

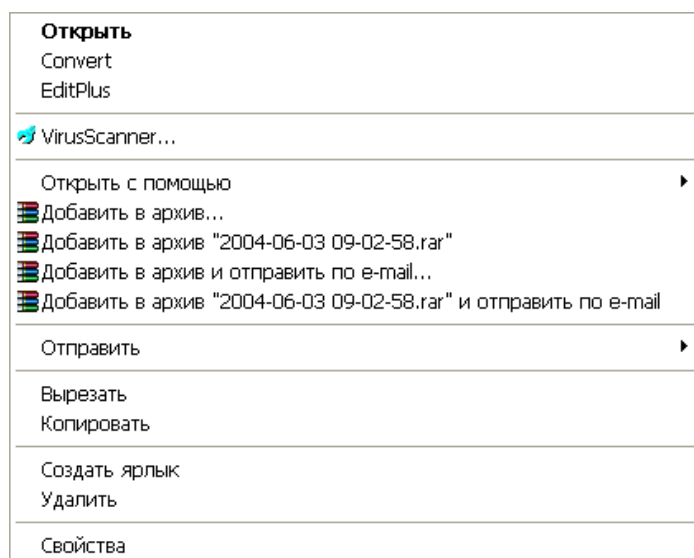


Рисунок 3.11. Системное контекстное меню Windows

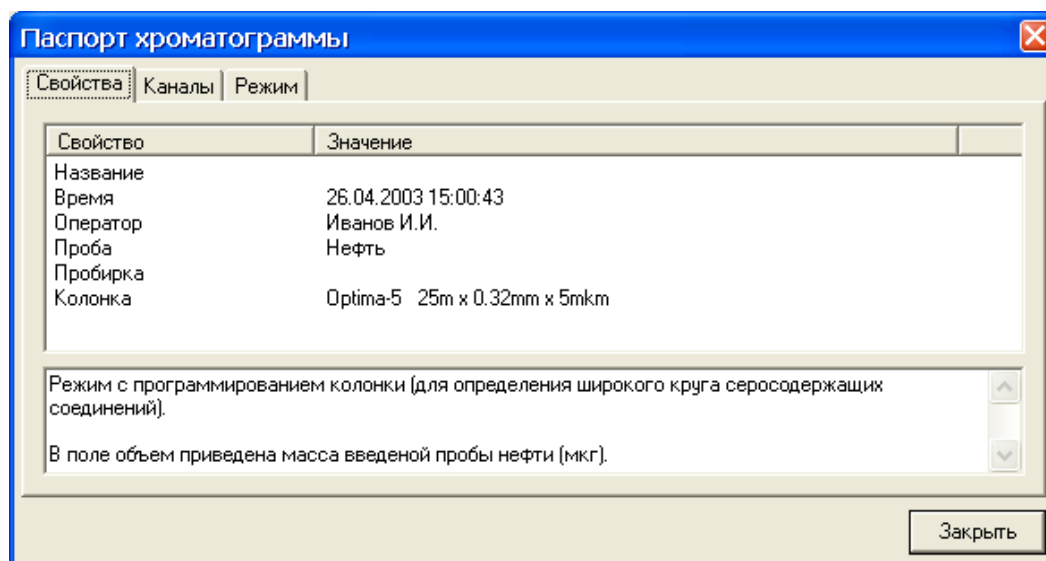


Рисунок 3.12. Паспорт хроматограммы



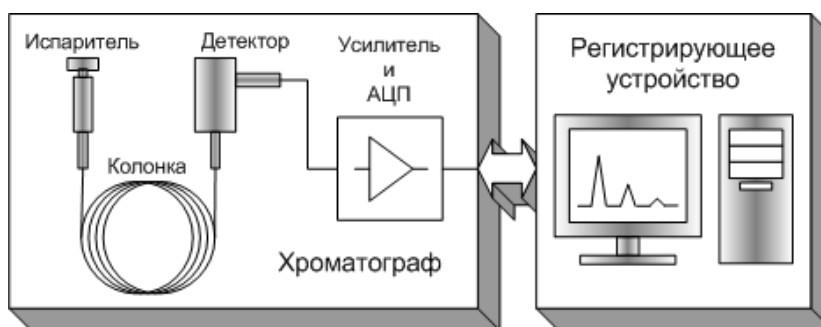
## Глава 4

# Теоретические основы обработки хроматограмм

### 4.1 Основы хроматографического процесса

Хроматография — физико-химический метод разделения компонентов анализируемой смеси, основанный на разности коэффициентов их распределения между двумя фазами: неподвижной и подвижной.

В газовой хроматографии в качестве подвижной фазы используется газ, называемый газом-носителем. Неподвижная фаза может быть как твердым телом (адсорбентом), так и жидкостью (в виде пленки, нанесенной на поверхность твердого носителя).



**Рисунок 4.1. Принципиальная схема хроматографа**

Устройство ввода (рисунок 4.1) подает в поток газа-носителя определенное количество анализируемой смеси в газообразном состоянии непосредственно перед колонкой.

В хроматографической колонке осуществляется разделение смеси на отдельные составляющие компоненты за счет процессов сорбции и десорбции веществ на неподвижной фазе. При этом слабо сорбируемые вещества, будут переноситься подвижной фазой по колонке с большей скоростью и наоборот.

Из колонки разделенные компоненты смеси попадают в детектор. Детектор регистрирует присутствие веществ, отличающихся по физическим или физико-химическим свойствам от газа-носителя, и преобразует возникающие изменения в электрический сигнал. Далее

происходит усиление и аналого-цифровое преобразование полученного сигнала. Регистрирующий прибор (компьютер или самописец) строит график зависимости сигнала детектора от времени, называемый хроматограммой (рисунок 4.2).

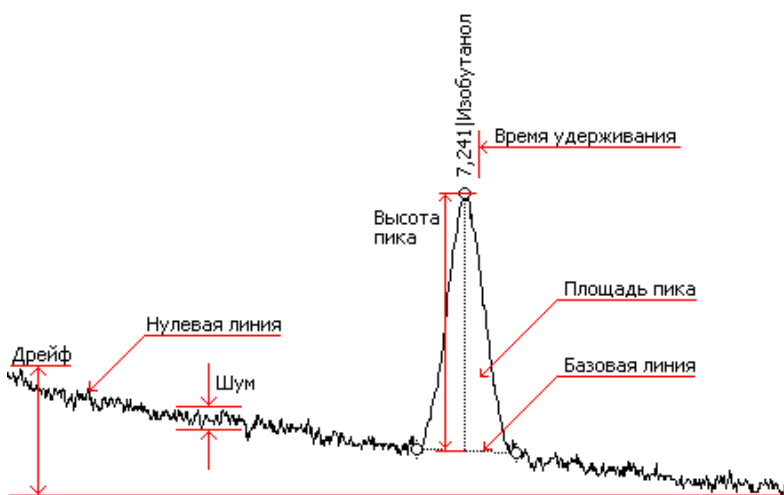


Рисунок 4.2. Структура хроматограммы

Прохождение в детекторе газа-носителя без пробы на хроматограмме отражается фоновым сигналом детектора, который называется **нулевой линией**. Нулевая линия имеет высокочастотные колебания — **шум**. Изменение сигнала нулевой линии детектора во времени называется **дрейфом**.

При прохождении через детектор анализируемого компонента происходит отклонение уровня сигнала детектора от нулевой линии. Это отклонение отображается на хроматограмме в виде пика. Пик на хроматограмме имеет следующие характеристики:

#### Время удерживания

Время от начала анализа до выхода максимума пика. Время удерживания — качественная характеристика анализируемого компонента, площадь и высота — количественные характеристики.

#### Площадь

Область, ограниченная профилем пика и базовой линией.

#### Высота

Расстояние от вершины пика до базовой линии.

## 4.2 Этапы обработки хроматограммы

После получения хроматограммы проводится ее обработка, которая включает в себя несколько последовательных этапов.

#### Фильтрация шумов

Сглаживание нулевой линии хроматограммы с целью повышения стабильности автоматической обработки хроматограммы.



**Фильтрация шумов** обычно применяется с исключительных случаях, например, при наличии выбросов на хроматограмме. В большинстве случаев в данной операции нет необходимости.

### Интегрирование пиков

Определение базовой линии пиков и измерение параметров пиков (время удерживания, площадь, высота).

### Идентификация пиков

Отнесение пиков на хроматограмме к тому или иному компоненту в таблице по параметрам удерживания.

### Градуировка

Анализ проб с известным содержанием анализируемых компонентов с целью вычисления коэффициентов чувствительности детектора к этим компонентам.



**В тех случаях, когда градуировочные коэффициенты известны заранее, градуировка не проводится. При этом известные коэффициенты заносятся в таблицу компонентов.**

### Количественный расчет

Завершающая стадия количественного анализа, в которой производится расчет концентраций компонентов в анализируемой пробе.



**Таким образом, хроматограмма, в зависимости от поставленной цели, может служить для выполнения градуировки прибора либо для расчета концентраций в пробе с неизвестным содержанием компонентов.**

## 4.3 Фильтрация шумов

На хроматограмме всегда присутствуют шумы и выбросы, которые обусловлены неидеальностью хроматографического тракта системы: детектора, усилителя, АЦП и их соединения. Высокое значение шума не является хорошей характеристикой для хроматографического анализа, так как в этом случае снижается предел детектирования, затрудняется автоматическая обработка хроматограммы и т.д.



**Рисунок 4.3. Окно фильтрации**

Существует ряд методов фильтрации шумов, отличающихся по принципу действия. Большая часть из них заключается в выполнении определенных преобразований над точкой хроматограммы, причем результат зависит от значений соседних точек. Количество соседних точек, расположенных справа или слева от преобразуемой точки, называется полушириной окна фильтрации.



**Поскольку любая фильтрация искажает форму пиков, то ее использование оправдано только при высоких значениях шума. При этом рекомендуется начинать подбор полуширины окна фильтра с единицы и постепенно увеличивать ее до получения удовлетворительного результата.**

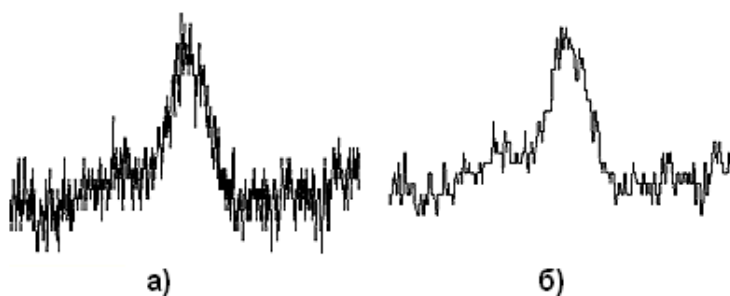
При настройке операции фильтрации важно обратить внимание на то, чтобы одновременно с подавлением шумов нулевой линии не исказились площади (высоты) пиков. Для оценки искажения отклика выберите самый узкий анализируемый пик.

Значение полуширины окна при настройке следует выбирать минимальным и постепенно увеличивать его до оптимального.

### 4.3.1 Медианная фильтрация

Значения точек внутри окна фильтрации сортируются в порядке возрастания и точка, соответствующая середине окна, заменяется другим значением, попадающим в центр отсортированного массива.

Этот метод влияет на хроматографические пики в наименьшей степени, хорошо сглаживает базовую линию, не меняет форму пика на склонах и эффективно устраняет отдельные выбросы. Однако он сглаживает вершины пиков и ложбины между пиками и может изменять как высоту, так и площадь хроматографических пиков. Хроматограмма до и после медианной фильтрации показана на рисунке 4.4.



**Рисунок 4.4. Хроматограмма а) до фильтрации, б) после фильтрации**

### 4.3.2 Гауссова фильтрация

Вычисляется среднее взвешенное значение всех точек внутри окна с весом, распределенным по функции Гаусса с центром в середине окна, результат используется как новое значение отклика детектора. Пики после сглаживания становятся ниже и шире, их площадь при этом не изменяется.



**Гауссов фильтр, по сравнению с медианным, дает лучшее визуальное сглаживание собственно пиков, но меньше сглаживает шумы базовой линии. Медианный фильтр эффективно подавляет выбросы на хроматограмме, при этом полуширина окна фильтра должна быть не меньше ширины самого большого выброса.**

## 4.4 Разметка пиков на хроматограмме

### 4.4.1 Общие положения

Интегрирование пиков (разметка) — операция вычисления параметров пиков на полученной хроматограмме. При этом пики ограничиваются базовой линией (прямой, соединяющей точки начала и конца пика на нулевой линии).

На основании полученных фигур оцениваются **Время удерживания**, **Площадь** и **Высота**.

В некоторых случаях необходимо знать ширину пика, которая измеряется у его основания и совпадает с длиной базовой линии. Используется также понятие ширина пика на половине его высоты (например, для расчета эффективности колонки).

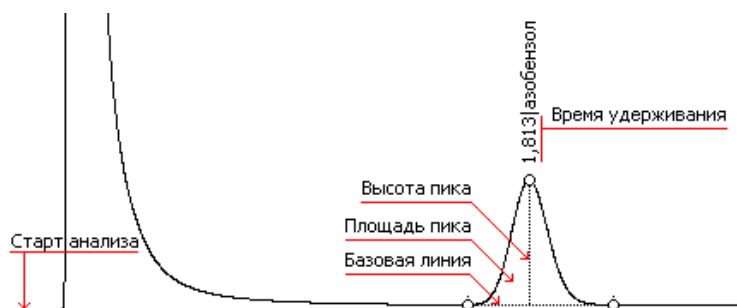


Рисунок 4.5. Разметка пика



**Корректность разметки пиков оказывает большое влияние на правильность результатов количественного анализа.**

В программе использован алгоритм автоматического детектирования пиков на основе первой производной (наклона) хроматографической кривой, дополненный механизмом событий интегрирования.



**Следует иметь в виду, что никакой алгоритм не может в ряде случаев (сложная форма базовой линии, плохое разделение хроматографических пиков, малые пики-наездники, высокий уровень шумов и т.д.) гарантировать корректную автоматическую разметку на пики, поскольку само понятие “пик” во многом субъективно и зависит от конкретно решаемой задачи. При этом правильность получаемых результатов зачастую зависит от опыта оператора. Поэтому оператор должен сообщить процедуре автоматического детектирования пиков как можно больше априорной информации, для того чтобы хроматограмма была размечена в соответствии с его представлениями.**

### 4.4.2 Автоматическое интегрирование

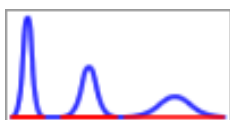
Настройка параметров интегрирования имеет смысл, если ожидается обработка серии хроматограмм со сходными, повторяющимися особенностями базовой линии.

Параметры интегрирования, с помощью которых оператор может влиять на операцию обнаружения пиков на хроматограмме, перечислены ниже:

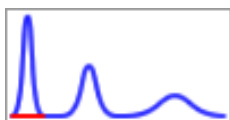
### Ширина

Ожидаемая ширина основания характерного пика в секундах.

Для определения величины производной берется некоторое количество точек справа и слева от заданной, по ним вычисляются средние значения и разница средних считается оценкой производной в заданной точке хроматограммы. При этом количество суммируемых точек зависит от параметра “Ширина”. Данный параметр является наиболее значимым и сильно влияет на корректность обнаружения пиков на хроматограмме, поэтому рекомендуется задавать его с особой тщательностью.



Оптимальное значение параметра “Ширина”.



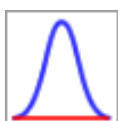
Значение параметра “Ширина” слишком мало, в результате чего широкие пики на данном участке хроматограммы принимаются за дрейф базовой линии и их разметка не выполняется.

### Порог

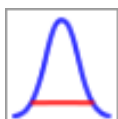
Критерий срабатывания детектора на переднем склоне пика.

Полученное значение производной делится на величину шума базовой линии и, если это отношение превышает уровень, установленный данным параметром, то производная на переднем фронте пика считается значимой.

Рекомендуемое значение параметра находится в пределах от 1 до 3.



Оптимальное значение параметра “Порог”.



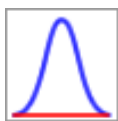
Значение параметра “Порог” слишком большое, в результате чего положение характерных точек начала и окончания пика сильно смещено к вершине пика.

### Асимметрия

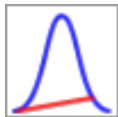
Отношение порога на заднем склоне пика к порогу на переднем склоне.

Порог значимости для заднего склона пика может быть установлен отличающимся от порога для переднего склона. Отношение этих порогов и задается данным параметром.

Если указанный параметр равен 0.7 (рекомендуемое значение), то это означает, что порог на заднем склоне пика составляет 0.7 от величины порога на переднем склоне пика.



Оптимальное значение параметра “Асимметрия”.



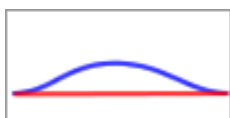
Значение параметра “Асимметрия” слишком большое, в результате чего положение характерной точки окончания пика сильно смещено к вершине пика.

## Плато

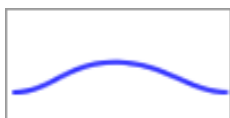
Максимальная ширина плато на вершине пика. Единицей измерения является текущее значение параметра “Ширина”.

Вблизи вершины пика производная становится ниже порога и может быть на этом уровне в течение времени, задаваемого параметром “Плато”. Если соответствующий промежуток времени больше, то особенность на хроматограмме интерпретируется не как пик, а как подъем базовой линии на новый уровень.

Рекомендуемое значение параметра равно 2.



Значение параметра “Плато” слишком велико для того, чтобы обнаруженный пик был удален по данному критерию.



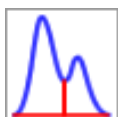
При достаточно малом значении параметра “Плато” обнаруженный пик будет удален. Чем меньше значение данного параметра, тем больше пиков будет удалено.

## База

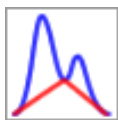
Минимальная ширина плато на спуске пика, достаточная для завершения пика и идентификации базовой линии. Единицей измерения является текущее значение параметра “Ширина”.

Окончание пика определяется по уменьшению производной ниже порога и, если уровень производной остается низким в течение периода времени, превышающего значение параметра “База”, то пик считается вышедшим на базовую линию. В противном случае будут зарегистрированы слившиеся пики.

Рекомендуемое значение параметра равно 0.5, при значении равном 0 все пики будут размечены как отдельно стоящие.



Значение параметра “База” достаточно большое. При этом площади между смежными пиками делятся по вертикали.

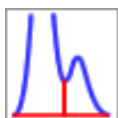


Значение параметра “База” достаточно мало для того, чтобы близко расположенные пики были размечены как отдельно стоящие.

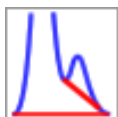
### Наездник

Параметр, служащий для идентификации пика как наездника, отделяемого от основного пика тангенциальным спуском.

Значение данного параметра указывает, во сколько раз второй пик должен быть меньше первого, чтобы стать наездником. При значении параметра, равном 0, пики-наездники не определяется. Рекомендуемое значение данного параметра равно 0, но если все же имеется необходимость детектирования пиков-наездников, можно установить значение параметра в пределах от 5 до 10.



Значение параметра “Наездник” больше отношения высот первого и второго пиков, поэтому площадь между ними делится по вертикали.

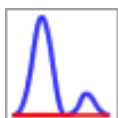


Значение параметра “Наездник” достаточно мало. При этом площадь между смежными пиками делится по касательной. Чем меньше значение данного параметра, тем больше будет пиков-наездников.

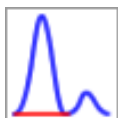
### Минимальная площадь

Минимально допустимая площадь детектируемого пика.

При детектировании пиков имеется возможность подавлять пики, площадь которых меньше заданной. При этом значение параметра, равное 0, означает, что подавление пиков выключено.



Значение параметра “Минимальная площадь” меньше площади правого пика.

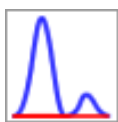


Значение параметра “Минимальная площадь” достаточно большое. При этом правый пик был удален. Чем больше значение данного параметра, тем больше пиков будет удалено.

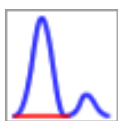
### Минимальная высота

Минимально допустимая высота детектируемого пика.

Подавление пиков с высотой, значение которой меньше заданного. При этом значение параметра, равное 0, означает, что подавление пиков выключено.

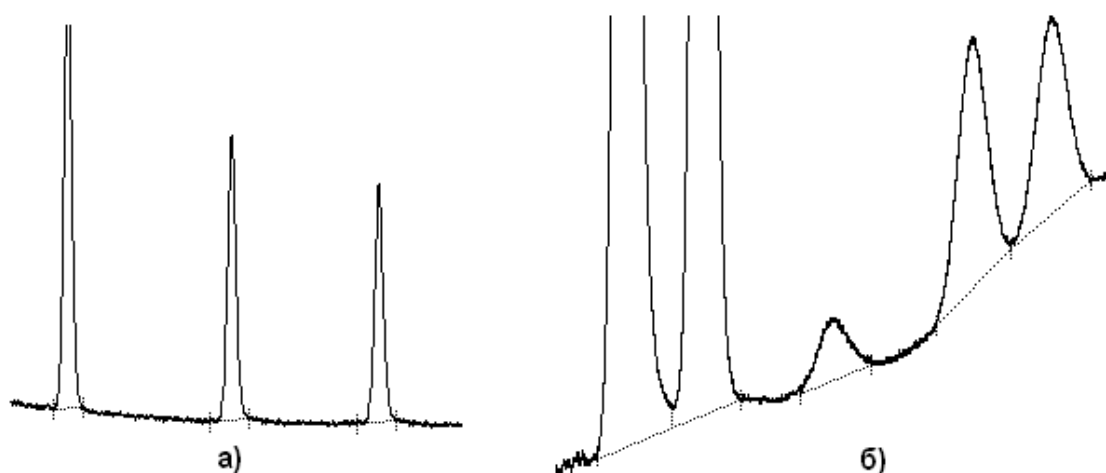


Значение параметра “Минимальная высота” меньше высоты правого пика.



Значение параметра “Минимальная высота” достаточно большое. При этом правый пик был удален. Чем больше значение данного параметра, тем больше пиков будет удалено.

Для капиллярной колонки характерны узкие пики, для насадочной — широкие (см. рисунок 4.6), поэтому для разметки пиков компонентов, разделенных на капиллярных и насадочных колонках, обычно применяются различные наборы значений параметров интегрирования (пример см. в таблице 4.9).



**Рисунок 4.6. Пики, полученные при работе с колонкой: а) капиллярной, б) насадочной**

Для достижения желаемого результата необходимо варьировать параметры интегрирования.

**Таблица 4.1. Рекомендуемые параметры интегрирования**

Параметр	Капилляр. колонка	Насадочная колонка	Параметр	Капилляр. колонка	Насадочная колонка
Ширина	2	10	Плато	1	2
Порог	1	1	База	0.01	0.5
Асимметрия	0.7	0.7	Мин. площадь	0	2
Наездник	5	3	Мин. высота	0.1	0

#### 4.4.3 События интегрирования

Не всегда получается подобрать одинаковые параметры для разметки всех пиков на. Например, с увеличением времени выхода пика, изменяется его ширина, поэтому значения

параметров, подходящие для пиков в начале хроматограммы, могут не подходить для пиков в ее конце. В таких случаях рекомендуется использовать события интегрирования.

События интегрирования позволяют установить значения перечисленных выше параметров еще более тонко, позволяя оператору еще сильнее влиять на процедуру детектирования пиков на хроматограмме. Событие можно задать для отдельного детектора, и оно начинает действовать с указанного момента времени до тех пор, пока не будет переопределено другим событием такого же типа или пока не завершится хроматограмма.

Настройка алгоритма разметки с использованием событий интегрирования имеет смысл, если ожидается обработка серии хроматограмм со сходными, повторяющимися особенностями базовой линии. В противном случае рекомендуется ручная коррекция пиков.



**Если не удастся добиться желаемой разметки при использовании параметров и событий интегрирования, используют ручное графическое интегрирование (непосредственно на графике хроматограммы). Подробные описания процессов ручного графического интегрирования приведены в разделах [5.5.9 \(Хроматэк Аналитик 2.5\)](#) и [7.3.7 \(Хроматэк Аналитик 1.5\)](#)**

## 4.5 Идентификация пиков на хроматограмме

Идентификация — отнесение пиков на хроматограмме к тому или иному компоненту из списка. При этом производится сравнение рассчитанных параметров удерживания всех обнаруженных на хроматограмме пиков с информацией, хранящейся в таблице компонентов.

### 4.5.1 Алгоритм идентификации пиков

Программы обработки *Хроматэк Аналитик* используют два различных алгоритма идентификации. Идентификация в программе *Хроматэк Аналитик 2.5* проводится по следующему алгоритму:

#### Этап 1

Составляется список всех возможных пар (пик — компонент), для пиков попадающих в окна поиска компонентов. Таким образом, в построенном списке один пик может претендовать на несколько компонентов и наоборот.

#### Этап 2

Составленный список сортируется по удовлетворению критерия выбора пика в окне компонента. Критерии сортировки: близость по шкале времени или индекса. Этот критерий, а так же приоритетность идентификации опорных и обычных пиков задается в диалоге **Идентификация** последовательности операций **Расчет хроматограммы** (см. раздел [5.5.8](#)).

#### Этап 3

Из отсортированного списка пар идентифицируются **опорные** пики. Компонент считается идентифицированным, если в списке пар присутствуют одноименные подтверждающие

для него компоненты. При отсутствии пиков–претендентов для подтверждающих компонентов, идентификация пика не производится. После идентификации **опорных** пиков пересчитываются ожидаемые параметры удерживания (время, индекс) для обычных и всех прочих пиков.

#### Этап 4

Идентификация обычных пиков проводится аналогично **этапу 3**.



**В программе Хроматэк Аналитик 1.5 применяется более простой (но менее надежный) алгоритм, согласно которому пик считается идентифицированным, если его время удерживания попадает в окно поиска компонента. Если в одно окно попадают два и более пиков, идентифицированным считается первый по времени пик.**

### 4.5.2 Идентификация по времени удерживания

Наиболее простой способ идентификации — сравнение времени удерживания анализируемого компонента с временем удерживания известного соединения при строго заданных условиях анализа. Для проведения идентификации пика по времени удерживания в таблице компонентов используются следующие поля:

- название компонента;
- время удерживания;
- окно поиска по времени, %.

Окно поиска — границы области, в которой будет осуществляться поиск пика, как в положительную, так и в отрицательную сторону от заданного в таблице параметра удерживания.

На хроматограмме пик присваивается тому компоненту, заданное время удерживания которого наиболее близко к реальному времени пика.

### 4.5.3 Идентификация относительно опорных пиков

При идентификации по времени удерживания большую помощь оказывает введение опорных пиков. Например, при одновременном сдвиге по той или иной причине времен удерживания всех компонентов наличие опорных пиков поможет правильно идентифицировать вещества, несмотря на то, что время их удерживания не будет попадать в окно поиска по времени. Опорными, как правило, выбираются стоящие отдельно или большие пики. Им присваивается тип: опорный в таблице компонентов и задается увеличенное окно поиска (2–5%). В этом случае идентификация производится следующим образом:

1. Производится поиск опорных пиков по времени удерживания.
2. Рассчитывается разница между реальными и табличными временами удерживания опорных пиков и строится линейная функция сдвига времен удерживания.
3. Для обычных (не опорных) пиков рассчитывается ожидаемое время удерживания, исходя из заданного в таблице компонентов и функции сдвига времен удерживания.

#### 4.5.4 Идентификация по индексам удерживания

Кроме того, для идентификации могут использоваться относительные параметры удерживания, которые в меньшей степени зависят (в отличие от времени удерживания) от условий анализа. Одним из таких параметров является индекс удерживания — безразмерная величина, характеризующая положение пика вещества на хроматограмме относительно пиков выбранных стандартов. Если в качестве стандартов используются *n*-алканы, то индекс удерживания называется индексом Ковача. Выбор типа индекса (линейный или логарифмический) зависит от условий анализа. Для постоянной температуры колонки во время анализа характерна логарифмическая зависимость, при программировании — линейная. Однако между этими двумя крайними случаями нет четкой границы.

При идентификации по индексам удерживания в таблицу компонентов должны быть занесены табличные значения индексов компонентов, а также окно поиска по индексу. Необходимо опорным пикам присвоить тип: опорный в таблице компонентов и задать увеличенное окно поиска (2–5%) по времени.

Опорных пиков должно быть два, желательно выходящих до и после анализируемого компонента. Если в качестве опорных пиков используются *n*-алканы, то выбирают ближайшие по времени относительно анализируемого вещества. Если в таблице компонентов указано больше двух опорных пиков, то при идентификации выбираются те два из них (до и после компонента), которые по времени удерживания расположены ближе к интересующему веществу.

Идентификация по индексам удерживания производится следующим образом:

1. Производится идентификация опорных пиков по времени удерживания.
2. Опорным пикам присваиваются соответствующие индексы из таблицы компонентов.
3. Используя заданные индексы удерживания опорных пиков, рассчитываются индексы удерживания обычных пиков и сравниваются с табличными данными.

Индексы удерживания рассчитываются по формулам:

- линейный индекс удерживания:

$$I_i = I_n + (I_{n+1} - I_n)(t_i - t_n)/(t_{n+1} - t_n),$$

- логарифмический индекс удерживания:

$$I_i = I_n + (I_{n+1} - I_n)(\log(t'_i) - \log(t'_n))/(\log(t'_{n+1}) - \log(t'_n)),$$

где  $I_i$  — индекс удерживания интересующего пика,  $I_n, I_{n+1}$  — индексы предыдущего и последующего компонентов с известной величиной индекса,  $t_i$  — время удерживания интересующего пика,  $t_n, t_{n+1}$  — времена удерживания пиков, соответствующие предыдущему и последующему компонентам с известными индексами,  $t'$  — приведенное время удерживания.



**Приведенное время удерживания равно разности абсолютного времени удерживания и мертвого времени (времени нахождения неудерживаемого компонента в хроматографической системе). Мертвое время определяется экспериментально и задается в паспорте хроматограммы. Если мертвое время не задано, то программа принимает за него время удерживания первого пика.**

Если у компонента задано более одного параметра удерживания, идентификация производится согласно приоритету шкал (время, линейный индекс, логарифмический индекс), задаваемого оператором для всей хроматограммы. Если опорные пики не заданы — идентификация всех пиков производится только по времени удерживания.

В окно ожидаемого времени или индекса удерживания одного компонента может попасть несколько пиков. В этом случае выбор пика, в зависимости от настройки, может осуществляться по следующим критериям:

- ближайший к ожидаемому времени или индексу удерживания;
- максимальный по высоте;
- максимальный по площади.

Один и тот же пик может попасть в окна поиска разных компонентов, тогда он будет сопоставлен компоненту, имеющему меньшее время удерживания.



**В общем случае, схема идентификации пиков на хроматограмме может быть следующей: опорные компоненты — максимальные по высоте, остальные — ближайшие по времени или индексу. Для более точной коррекции времен и расчета индексов удерживания рекомендуется выбирать не менее двух опорных компонентов: один в начале хроматограммы и один ближе к окончанию.**

Указанная схема распознавания компонентов оказывается достаточно универсальной и гибкой для того, чтобы проблема корректного распознавания в подавляющем большинстве случаев не стояла. Все, что требуется от оператора — на этапе настройки грамотно выбрать опорные пики и в дальнейшем время от времени корректировать их ожидаемые времена удерживания по текущей хроматограмме.

#### 4.5.5 Идентификация на двух каналах детекторов



**Данный способ идентификации используется только в программе *Хроматэк Аналитик 2.5*.**

Схема идентификации компонентов на двух каналах детекторов применяется для более надежной, достоверной идентификации при анализе сложных многокомпонентных проб, когда одного параметра, времени удерживания компонента далеко недостаточно.

Варианты двухканальных схем идентификации:

- Последовательное детектирование. Проба проходит через разделительную колонку, попадает в первый детектор, затем без разрушения переходит во второй детектор. Необходимое условие таких схем: первый детектор не должен разрушать образец. Примеры: ДТП-ПВД, ЭЗД-ТИД, ЭЗД-ПВД.

- Параллельное детектирование. Проба вводится и разделяется в хроматографической колонке. На выходе из колонки проба разделяется на два потока, каждый из которых попадает в независимый детектор. В этом случае может применяться сочетание двух любых детекторов.
- Разделение с применением двух колонок различной полярности. Этот способ идентификации основан на различиях в разделительной способности двух неподвижных фаз, имеющих разную полярность. Проба попадает в устройство ввода и затем разделяется на две хроматографические колонки имеющие разную полярность. Компоненты двигаются по колонкам с различной скоростью. На выходе каждой колонки один и тот же компонент имеет разное время удерживания. В этом варианте идентификации обычно используется сочетание двух одинаковых детекторов.

При проведении идентификации на двух каналах создаются компоненты с одинаковым именем на каждом канале детектора. При этом в столбце "идентификация" для компонента на одном из каналов устанавливается признак опорный или обычный (в зависимости от цели), на втором – подтверждающий. Идентификация с применением двух каналов может сочетаться с любыми вышеописанными приемами. Так, если для компонента не создается одноименный компонент на втором канале, его идентификация будет проведена по обычному алгоритму.

При проведении анализа с применением двух колонок различной полярности идентификация становится достаточно сложной и требует от оператора проведения правильных настроек при создании таблицы компонентов. Следующие советы позволят повысить достоверность идентификации и избежать ошибок при интерпретации хроматограмм:

- Времена удерживания компонентов должны указываться максимально точно. Окна поиска должны быть небольшие с целью минимизации временных областей поиска, в которых возможно присутствие двух или более компонентов.
- При идентификации на двух каналах обычный (опорный) компонент следует выбирать на том канале, где этот компонент лучше отделяется от других анализируемых компонентов и посторонних пиков. На втором канале, где пересечение областей поиска с другими компонентами более вероятно, данный компонент будет носить признак подтверждающий.
- Аналогично, если сорбент колонки на одном из каналов способствует элюированию несимметричных пиков (время удерживания которых отклоняется при увеличении концентрации), компонент на этом канале должен иметь признак подтверждающий. На канале, имеющем симметрично элюируемый пик, компонент будет иметь признак обычный (или опорный).
- Если различие заданного параметра удерживания двух компонентов с реальным временем удерживания пика одинаково, предпочтение в идентификации будет отдано компоненту с меньшим окном поиска. Это может быть использовано оператором, как искусственный прием, например, если присутствие одного компонента в анализируемой пробе более вероятно, чем второго. Для использования этого приема, двум близко элюируемым компонентам назначается одинаковое время удерживания и незначительно отличающиеся окна поиска (например, 3% и 2.99%).

Тем не менее, идентификация с применением двух каналов является достаточно сложным процессом и в некоторых ситуациях программа может работать некорректно. Ниже приведены примеры некорректной работы программы:



**Спорные ситуации при проведении идентификации. Пример 1.**

**Условие:** На одном из каналов два компонента совпадают друг с другом по времени и при совместном присутствии размечены одним пиком. В примере на рисунке 4.7.а два компонента (изопентан и н-пентан) не могут быть одновременно идентифицированы на одной хроматограмме, даже если они будут присутствовать в пробе совместно. Один из компонентов будет “подтверждаться” первым и блокировать возможность подтверждения второго компонента.



**Спорные ситуации при проведении идентификации. Пример 2.**

Показан на рисунке 4.7.б. Компонент А идентифицируется на двух каналах: “обычный” — на ПИД-1, “подтверждающий” — на ПИД-2. Интервал времени между временем поиска “обычного” компонента А на ПИД-1 и реальным временем пика составляет 0.012 мин; аналогичный интервал для “подтверждающего” компонента А на ПИД-2 составляет 0.116 мин. Компонент Б идентифицируется на канале ПИД-2. Интервал искомого и реального времени составляет 0.015 мин. Таким образом, в соответствии с алгоритмом идентификации (см. раздел 4.5.1) приоритетность при сортировке пар (пик — компонент) принадлежит компоненту А (разница времен 0.012 мин — против 0.015 мин для компонента Б). При идентификации компонент А будет идентифицирован на канале ПИД-1 и подтвержден на канале ПИД-2. Компонент Б не будет идентифицирован, т.к. его потенциальный пик будет занят “подтверждающим” компонентом А, хотя время удерживания последнего сильнее отличается от компонента Б.

Для исключения возможности появления подобных ситуаций рекомендуется:

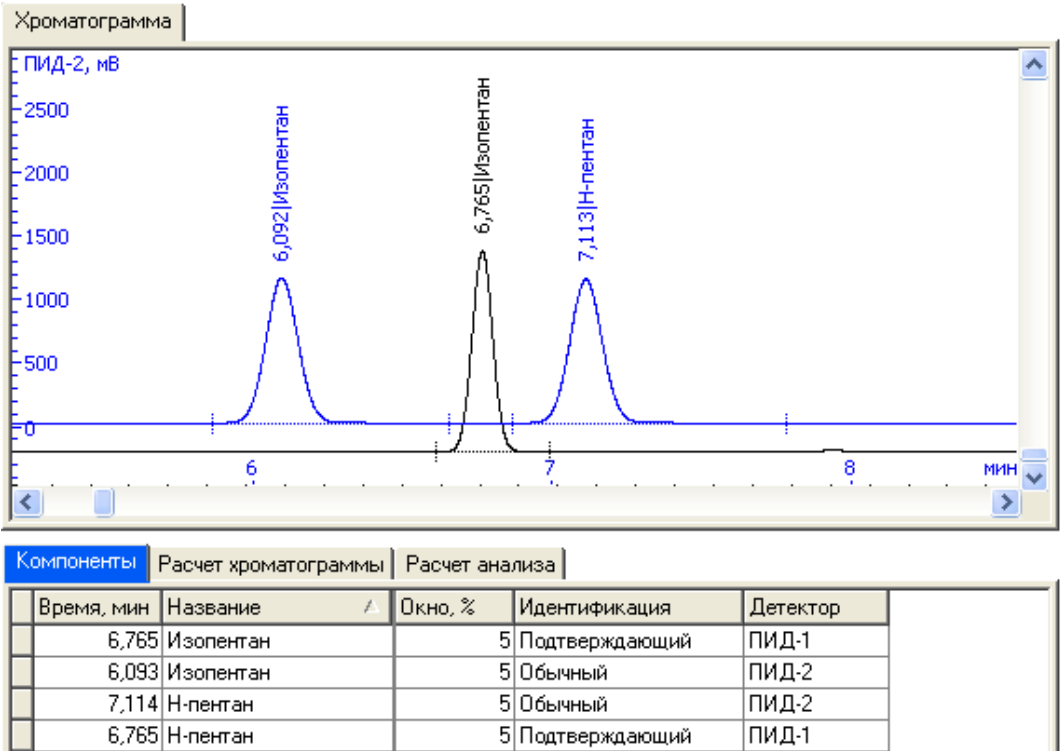
- Подбирать неподвижные фазы хроматографических колонок, обеспечивающие наилучшее разделение компонентов анализируемой пробы.
- По возможности снизить интервалы пересечения временных шкал поиска компонентов путем снижения окна поиска.
- При неизбежности случаев “абсолютного” наложения для одного из компонентов не создавать подтверждающий компонент на втором канале.

При обработке хроматограмм после проведения расчета хроматограммы рекомендуется проводить проверку правильности идентификации компонентов, особенно тщательно в спорных случаях.

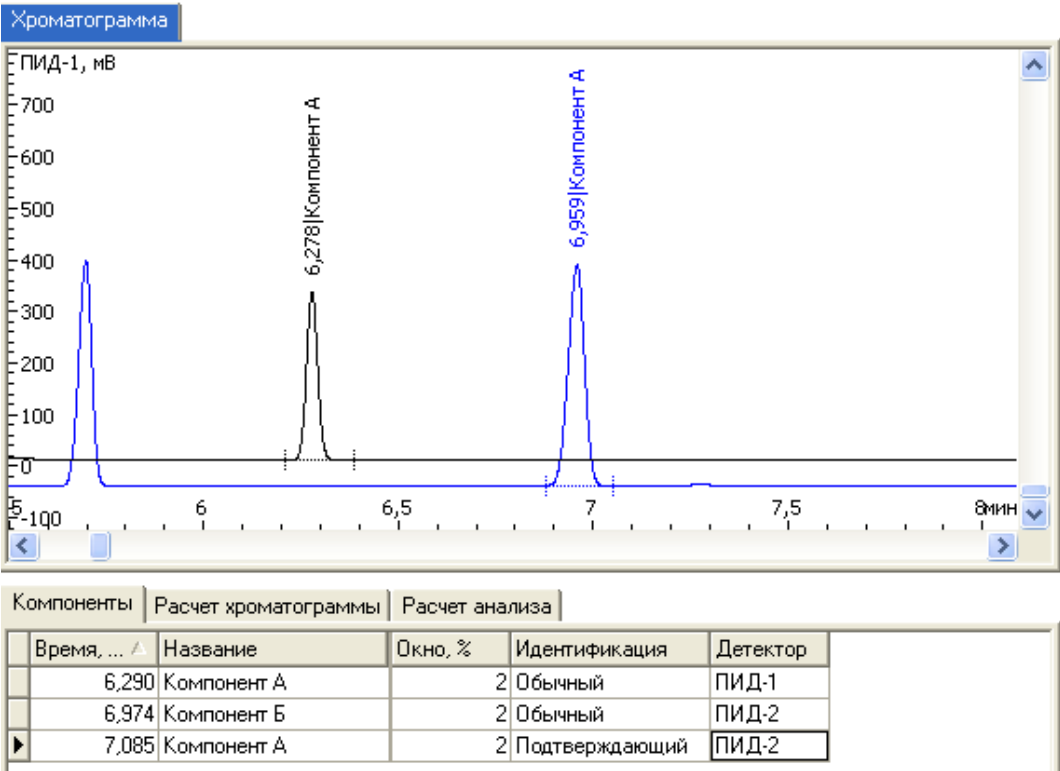
## 4.6 Градуировка компонентов

Градуировка проводится с целью получения градуировочной зависимости, которая характеризует связь между величиной отклика детектора (площадь или высота пика) и количеством компонента в пробе. Градуировочная зависимость компонента в общем случае имеет вид:

$$Q(R) = K_2 R^2 + K_1 R + K_0,$$



а)



б)

Рисунок 4.7. Особенности идентификации на двух каналах: а) пример 1, б) пример 2

где  $Q(R)$  — количество компонента в пробе,  $R$  — отклик детектора,  $K_2, K_1, K_0$  — градуировочные коэффициенты компонента (коэффициенты чувствительности детектора к компоненту).

Для получения градуировочной зависимости проводят анализы одного или нескольких образцов с известным содержанием анализируемых компонентов.



**Концентрации компонентов в градуировочных смесях в идеале должны охватывать весь диапазон измеряемых концентраций. Для получения достоверных результатов анализ каждой градуировочной смеси проводят не менее 2-х раз.**

По полученным результатам строится градуировочный график зависимости отклика пика от концентрации (рисунок 4.8).

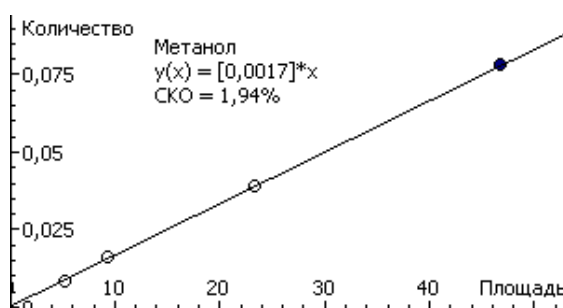


Рисунок 4.8. Градуировочный график зависимости отклика пика от концентрации

Градуировочные коэффициенты  $K_2, K_1, K_0$  рассчитываются исходя из градуировочного графика.

При многоточечной градуировке зависимость может быть аппроксимирована кривой любого, необязательно линейного типа. Градуировочные коэффициенты рассчитываются методом наименьших квадратов для кривой, наилучшим образом описывающей экспериментальные данные. Тип кривой для расчета выбирается оператором.

Если градуировочная зависимость представляет собой прямую линию, проходящую через начало координат  $Q(R) = K_1 R$ , она может быть построена по одной точке (с применением одной градуировочной смеси с известными концентрациями компонентов).



**Выбор отклика (площадь или высота) для формирования графика градуировочной зависимости не всегда однозначен. В большинстве случаев площадь является более объективным показателем, однако есть много результатов в пользу лучшей воспроизводимости высоты. Общие закономерности таковы:**

- Если пики узкие и высокие, то их высота измеряется более точно, чем площадь.
- Для несимметричных пиков расчеты, основанные на высотах, непригодны.
- Площади пиков более устойчивы к колебаниям условий анализа.

В программах обработки хроматографической информации серии *Хроматэк Аналитик* одновременно строится два графика зависимости, по высоте и по площади. Таким образом, проведя градуировку, вы можете оценить воспроизводимость результатов каждого графика и выбрать отклик, наиболее удовлетворяющий условиям анализа.

Программы серии *Хроматэк Аналитик* поддерживает два типа градуировки: метод абсолютной градуировки и метод внутреннего стандарта.

В методе абсолютной градуировки количество вещества компонента рассчитывается по формуле:

$$Q = CV,$$

где  $C$  — концентрация компонента,  $V$  — объем вводимой пробы.

При градуировке методом внутреннего стандарта построение графиков идет в тех же осях, однако количество вещества компонента определяется по формуле:

$$Q = \frac{CW_{is}(R_{is})}{C_{is}},$$

где  $W_{is}(r_{is})$  - расчетное количество внутреннего стандарта,  $C_{is}$  - известная концентрация внутреннего стандарта в смеси.

При этом для внутреннего стандарта  $K_1 = 1$ , а рассчитанный  $K_1$  для компонента является относительным коэффициентом чувствительности детектора к компоненту по внутреннему стандарту.

При некоторых методах расчета, например, **методе внутренней нормализации**, часто используются относительные коэффициенты отклика детектора, которые бывают известны заранее. В этом случае можно, не выполняя градуировочных измерений, выбрать функцию вида  $Q(R) = K_1 R$  и вручную задать значение коэффициента  $K_1$ .

## 4.7 Количественный расчет

Количественный расчет — завершающая стадия количественного анализа, на которой производится расчет концентраций компонентов в пробе с неизвестным содержанием анализируемых компонентов. При проведении количественного расчета измеряют отклик анализируемого компонента и по имеющейся градуировочной зависимости рассчитывают его концентрацию.

Наиболее часто используются следующие методы количественного расчета.

### 4.7.1 Метод процентной нормализации

Метод процентной нормализации основан на том, что сумма площадей или высот всех пиков на хроматограмме принимается за 100%.

Этот метод не требует предварительной градуировки и предполагает ряд условий:

- все компоненты анализируемой пробы элюируются из колонки;
- все компоненты имеют одинаковые коэффициенты чувствительности детектора.

Концентрации вычисляются по формуле:

$$C_i^{\%} = R_i / \sum(R),$$

где  $R_i$  — отклик (площадь или высота) пика,  $\sum(R)$  — сумма откликов всех пиков в канале хроматограммы.

### 4.7.2 Метод внутренней нормализации

#### Расчет для одноканальных хроматограмм

В методе внутренней нормализации учитывают относительные коэффициенты чувствительности детектора к различным компонентам анализируемой смеси, заранее известные. Отклик каждого компонента пересчитывают с учетом этих коэффициентов. Сумму полученных откликов принимают за величину, равную коэффициенту нормализации. Коэффициент нормализации равен 100%, если детектируются все вещества анализируемой пробы. В противном случае содержание недетектируемых веществ определяют другими методами и уменьшают коэффициент нормализации на величину недетектируемых компонентов. Метод внутренней нормализации не применим, если на хроматограмме присутствуют зашкаленные пики.

Концентрацию вещества вычисляют по формуле:

$$C_i^{\%} = \frac{N M_i W_i(R_i)}{\sum(MW(R))},$$

где  $N$  — коэффициент нормализации,  $W(R)$  — построенная заранее градуировочная зависимость компонента,  $M$  — множитель.

В простейшем случае, когда градуировочная зависимость имеет вид:

$$W(R) = K_1 R,$$

где  $K_1$  — относительный коэффициент чувствительности детектора к компоненту, формула принимает вид:

$$C_i^{\%} = \frac{N K_{1i} R_i M_i}{\sum(K_1 R M)}.$$

### Расчет для многоканальных хроматограмм

При расчете методом внутренней нормализации иногда бывает необходимо просуммировать компоненты, детектируемые на разных каналах. Для этого нужно привести каналы к одной шкале чувствительности.

Приведение к одной шкале чувствительности производится путем расчета поправочных коэффициентов (коэффициентов сшивки) для каждого из суммируемых каналов. Эти коэффициенты рассчитываются программой автоматически с помощью компонентов (компонентов сшивки), детектируемых одновременно на 2-х или более каналах. Формула расчета концентрации компонента методом внутренней нормализации для многоканальных хроматограмм имеет вид:

$$C_i^{\%} = NW_i(R_i)K_nM_i / \sum (W(R)K_nM),$$

где  $K_n$  — коэффициент сшивки для канала, который участвует в расчете концентрации данного компонента.

### 4.7.3 Метод абсолютной градуировки

В методе абсолютной градуировки количество компонента в пробе определяют по предварительно полученной градуировочной зависимости. Важнейшими требованиями при проведении количественного анализа методом абсолютной градуировки являются точность дозирования образца пробы, а также строгое соблюдение условий хроматографирования при проведении градуировки и при определении содержания анализируемого компонента.

Количество вещества находится по градуировочной зависимости и корректируется с учетом множителя и разведения:

$$Q_i = W_i(R_i)M_iD.$$

Концентрация компонента равна отношению количества вещества компонента к объему введенной пробы:

$$C_i = \frac{W_i(R_i)M_iD}{V},$$

где  $V$  — объем введенной пробы,  $D$  — разведение.

### 4.7.4 Метод внешнего стандарта

В методе внешнего стандарта предварительно определяют градуировочную зависимость (методом абсолютной градуировки) для компонента, взятого за внешний стандарт. Для

остальных компонентов используют относительные коэффициенты чувствительности детектора по отношению к внешнему стандарту, заранее известные или определенные экспериментально. Расчет концентраций веществ методом внешнего стандарта осуществляется по формуле:

$$C_i = \frac{K_{1es} W_i(R_i) M_i D}{V},$$

где  $K_{1es}$  — коэффициент чувствительности детектора к внешнему стандарту.

Этот метод справедлив только в случае линейной зависимости внешнего стандарта.

#### 4.7.5 Метод внутреннего стандарта

Метод внутреннего стандарта основан на добавлении известного количества определенного вещества, называемого “внутренним стандартом”, к анализируемым смесям. Если относительные коэффициенты чувствительности детектора к компонентам по внутреннему стандарту не известны заранее, проводится градуировка с использованием смеси с известным содержанием анализируемого вещества и внутреннего стандарта.

Для определения градуировочной зависимости можно использовать либо метод абсолютной градуировки, либо метод внутреннего стандарта. Выбор метода расчета градуировочных коэффициентов определяется следующими факторами:

- Абсолютные коэффициенты позволяют проводить количественный расчет как методом абсолютной градуировки, так и методом внутреннего стандарта. Однако в этом случае необходимо дозирование точного объема пробы.
- При расчете коэффициентов методом внутреннего стандарта нет необходимости точного дозирования анализируемой пробы, а также исключается влияние изменений скорости газа-носителя и температуры колонки. Однако в этом случае может использоваться только линейная зависимость.

При количественном анализе неизвестной пробы к ней добавляют известное количество внутреннего стандарта и по полученной ранее зависимости рассчитывают содержание анализируемого компонента. Расчет производится с учетом множителя и разведения:

$$Q_i = \frac{Q_{is} M_i D W_i(R_i)}{W_{is}(R_{is})},$$

или

$$C_i = \frac{C_{is} M_i D W_i(R_i)}{W_{is}(R_{is})}.$$



**Обратите внимание на то, что в формуле  $C_{is}$  — это концентрация внутреннего стандарта в анализируемой пробе, и она не пересчитывается с учетом множителя.**

## 4.8 Дополнительные расчеты



Описанные ниже дополнительные расчеты доступны только в программе обработки Хроматэк Аналитик 2.5

### 4.8.1 Расчет по неидентифицированным пикам

В некоторых анализах, когда некоторые определяемые компоненты имеют близкие коэффициенты чувствительности детектора и нет необходимости производить расчет по каждому из них, удобно использовать расчет по неидентифицированным пикам. Этот расчет возможен для методов внутреннего и внешнего стандарта, а также для метода внутренней нормализации.

В методе внутренней нормализации для неидентифицированных пиков  $K_1 = 1$  и зависимость для этих компонентов принимает вид  $W(R) = R$ .

В методах внутреннего и внешнего стандарта коэффициенты чувствительности неидентифицированных пиков принимаются равными коэффициентам стандартов и формулы, соответственно, принимают вид:

для метода внутреннего стандарта

$$C_i = \frac{C_{is} D S_i}{S_{is}};$$

для метода внешнего стандарта

$$C_i = \frac{K_{1es} S_i D}{V}.$$

### 4.8.2 Расчет концентрации основного вещества

Иногда в результате анализа необходимо представить процентный состав пробы, в которой рассчитаны концентрации примесей, а основное вещество вычислено по формуле

$$C_o = 100\% - \sum(C_p),$$

где  $C_o$  — концентрация основного вещества,  $\sum(C_p)$  — сумма концентраций примесей, %.

Концентрации примесей могут быть рассчитаны методами абсолютной градуировки, внутреннего или внешнего стандарта. При содержании в пробе недетектируемых примесей, их концентрацию, рассчитанную другими методами, можно внести в таблицу компонентов. В методах внутреннего и внешнего стандарта возможен расчет с учетом концентраций неидентифицированных пиков.

Концентрация недетектируемых примесей не пересчитывается с учетом множителя и разведения.

### 4.8.3 Расчет погрешности градуировки

Критерием правильности построения градуировочной зависимости является **погрешность**. Данный параметр показывает процентное отклонение расчетного значения концентрации компонента от его заранее известного значения. Расчетное значение концентрации определяется по заранее построенной градуировочной зависимости.

Таким образом, при проведении градуировки, заранее известная концентрация компонента в стандартном образце сравнивается с концентрацией этого же компонента, определенной по градуировочной зависимости. Если эта погрешность превысит допустимое методикой анализа значение, градуировка не может считаться удовлетворительной.

Расчет погрешности проводится по формуле:

$$K_i = 100 \frac{|C_i - C_{i0}|}{C_{i0}},$$

где  $K_i$  — результат расчета погрешности, %;  $C_{i0}$  — концентрация  $i$ -го в образце для контроля;  $C_i$  — результат определения концентрации  $i$ -го в образце для контроля по градуировочной зависимости.

### 4.8.4 Расчет сходимости

Обычно при количественных измерениях для повышения достоверности одну и ту же пробу хроматографируют несколько раз, и за результат анализа принимают среднее значение результатов нескольких хроматограмм. Разброс результатов количественного расчета оценивается с помощью специального критерия, называемого **Сходимость**.

Расчет сходимости осуществляется по формуле

$$D = 100 \frac{(C_{max} - C_{min})}{C_{cp}}.$$

### 4.8.5 Расчет разведения

Коэффициент разведения указывается в паспорте хроматограммы и участвует в формулах расчета, указанных выше. Коэффициент разведения можно ввести двумя способами:

- посчитать вручную и указать в соответствующем поле готовый результат;
- воспользоваться диалоговым окном Пробоподготовка для автоматического расчета разведения.

Автоматический расчет разведения осуществляется по формуле:

$$D = KV_{p-pa}/Q_o,$$

где  $Q_o$  — общий объем или общая масса пробы,  $V_{p-ra}$  — объем экстракта (объем, из которого была отобрана аликвота для хроматографирования)  $K$  — дополнительный множитель

Если какой-то из параметров формулы в диалоговом окне не указан, его значение принимается равным “1”.

# Глава 5

## Хроматэк Аналитик 2.5

### 5.1 Основные сведения о программе

#### 5.1.1 Особенности программы

Программа *Хроматэк Аналитик 2.5*, входит в состав одноименного программного обеспечения, осуществляющего управление аналитическими приборами серии “Хроматэк Кристалл”. Назначение программы *Хроматэк Аналитик 2.5* — визуализация и обработка хроматографической информации, получаемой от аналитического прибора посредством программы *Панель управления*.

От предшествующих программ серии *Хроматэк Аналитик 1.x* программу *Хроматэк Аналитик 2.5* отличают следующие нововведения:

- переход от файлового хранения хроматограмм к их хранению в базе данных под управлением SQL-сервера InterBase;
- настраиваемый вид меню и панели инструментов, а также отображения графиков и таблиц;
- запись и графическое представление более 150 параметров диагностической информации;
- экспорт/импорт данных в различные форматы: Word, Excel, XML и др.;
- возможность добавления новых операций обработки данных, позволяющая пользователям самостоятельно реализовать свои специфические расчеты и отчеты;
- выполнение статистических расчетов в ходе градуировки по ISO 8466.

*Хроматэк Аналитик 2.5* позволяет:

- использовать события интегрирования для тонкой настройки алгоритма выявления пиков на хроматограмме;

- проводить идентификацию с использованием реперных компонентов, обеспечивающую надежные результаты в условиях нестабильности температуры или старения колонки;
- выполнять многоточечную градуировку с использованием как линейных, так и нелинейных градуировочных зависимостей;
- визуально сравнивать до десяти хроматограмм на одном графике;
- рассчитывать среднее значений по результатам единичных измерений;
- выполнять групповую обработку серии хроматограмм.

Усовершенствованы многие возможности программ серии *Хроматэк Аналитик 1.x*:

- упрощена процедура градуировки;
- упрощен процесс редактирования параметров компонентов;
- таблицы имеют возможность сортировки, группировки, подведения промежуточных итогов, настройки формата представления чисел;
- переработана работа с графиками, упрощена процедура ручной корректировки пиков на хроматограмме;
- добавлена возможность предварительного просмотра отчетов перед печатью, сохранение их в виде файла;
- упрощена процедура поверки аналитических приборов.

### 5.1.2 База данных проекта

Ключевым понятием системы сбора и обработки хроматографической информации *Хроматэк Аналитик 2.5* является **проект**.

Проект — база данных, в которой содержатся результаты хроматографических анализов, методы их проведения и создания отчетов. Проекты создаются и регистрируются на локальном компьютере с помощью диалога **Администратор проектов**. Хроматографическая информация в проект заносится программой *Панель управления*, осуществляющей управление и обмен данными с хроматографом. Программа *Хроматэк Аналитик 2.5* считывает данные из проекта и отображает их в виде хроматограммы, позволяя просматривать, корректировать и многократно обрабатывать, как в реальном времени, так и после окончания анализа. Функции поиска дают возможность быстро получить доступ к любой из хранящихся в проекте хроматограмм.

База данных проекта *Хроматэк Аналитик 2.5* имеет достаточно сложную организацию. Упрощенное изображение ее структурной схемы с указанием основных таблиц и взаимосвязей между ними представлено на рисунке 5.1.

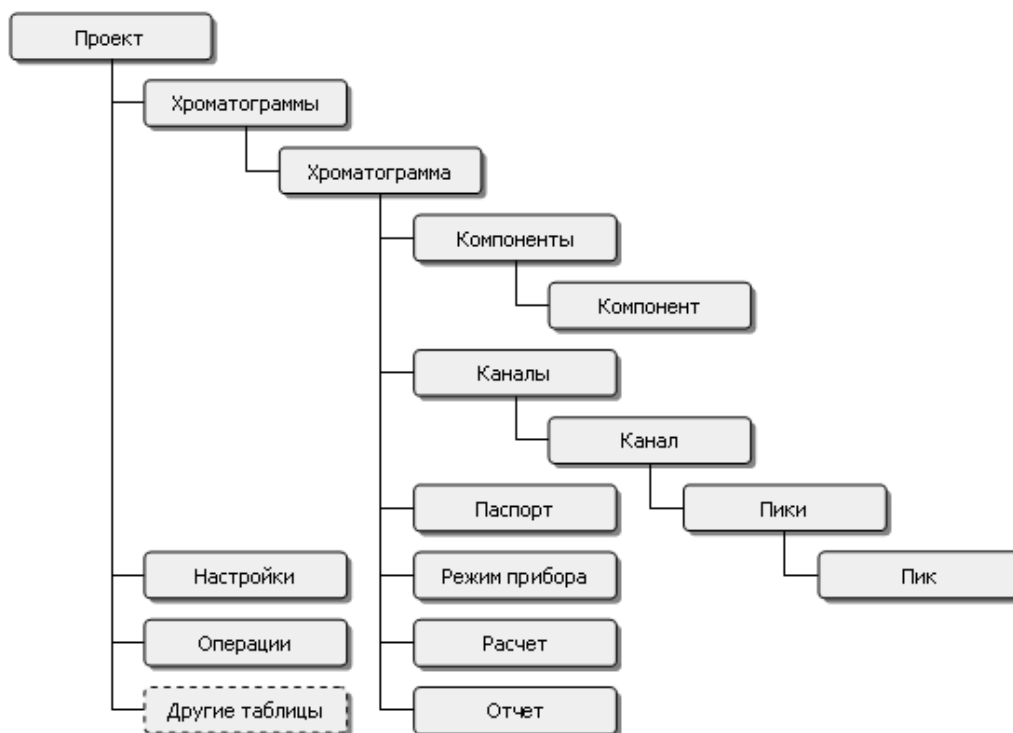


Рисунок 5.1. Структура базы данных проекта

### 5.1.3 Запуск программы

Программа *Хроматэк Аналитик 2.5* может быть запущена в двух режимах:

- с подключением к *Панели управления* (режим on-line);
- без подключения к *Панели управления* (режим off-line).

При запуске программы *Панель управления* автоматически запускается и *Хроматэк Аналитик 2.5*. В этом случае программа *Хроматэк Аналитик 2.5* является активной, то есть может принимать от *Панели управления* хроматографическую информацию.

Если запустить *Хроматэк Аналитик 2.5* с помощью ярлыка на рабочем столе Windows (или из меню **Пуск**), она не будет связана с программой **Панель управления** и, следовательно, неактивна.

На панели задач Windows иконки программы в зависимости от текущего состояния меняют внешний вид (см. таблицу 5.1).

**Таблица 5.1. Иконки главного окна на панели задач Windows**

Иконка	Состояние программы
	<i>Хроматэк Аналитик 2.5</i> не подключен к <i>Панели управления</i> .
	<i>Хроматэк Аналитик 2.5</i> подключен к <i>Панели управления</i> .



*Хроматэк Аналитик 2.5* подключен к *Панели управления*, идет процесс снятия хроматограммы. На этом этапе используется анимированная иконка.

---

### 5.1.4 Главное окно программы

Главное окно программы *Хроматэк Аналитик 2.5*, показанное на рисунке 5.2, состоит из следующих элементов (сверху вниз):

- заголовок окна;
- главное меню;
- панели инструментов;
- рабочая область окна;
- строка состояния.

**Заголовок главного окна** *Хроматэк Аналитик 2.5* содержит информацию о названии проекта (в примере на рисунке 5.2 — **ГОСТ Р 50802-95**), а также дату, время и номер текущей открытой хроматограммы.

**Главное меню** содержит набор команд, необходимых для работы с программой.

**Панели инструментов** в программе представлены панелью кнопок быстрого доступа (дублирующих наиболее часто используемые команды меню) и информационной панелью, содержащей название пробы из паспорта данной хроматограммы.

В **рабочей области** программы, разделенной на две части, расположены четыре страницы: (**Хроматограмма**, **Компоненты**, **Расчет хроматограммы**, **Расчет анализа**). Одновременно отображаются только две из них, но невидимые страницы могут быть активизированы в любой момент (подробнее о работе со страницами главного окна см. раздел 5.3.3).

**Строка состояния** расположена в нижней части окна программы. Она предназначена для индикации выполняемых программой операций. Когда курсор мыши находится над страницей **Хроматограмма**, в строке состояния выводятся координаты курсора (время и значение сигнала) и размер выведенного на экран участка хроматограммы.

### 5.1.5 Меню и панель инструментов

Меню содержит набор команд программы *Хроматэк Аналитик 2.5*. На панели инструментов расположен базовый набор кнопок быстрого доступа, необходимый для большинства пользователей. При желании можно включить **Информационную панель**, на которой отображается название пробы из паспорта текущей хроматограммы, а также создать новые, собственные панели.

Для удобной и быстрой работы с программой *Хроматэк Аналитик 2.5* вы можете:

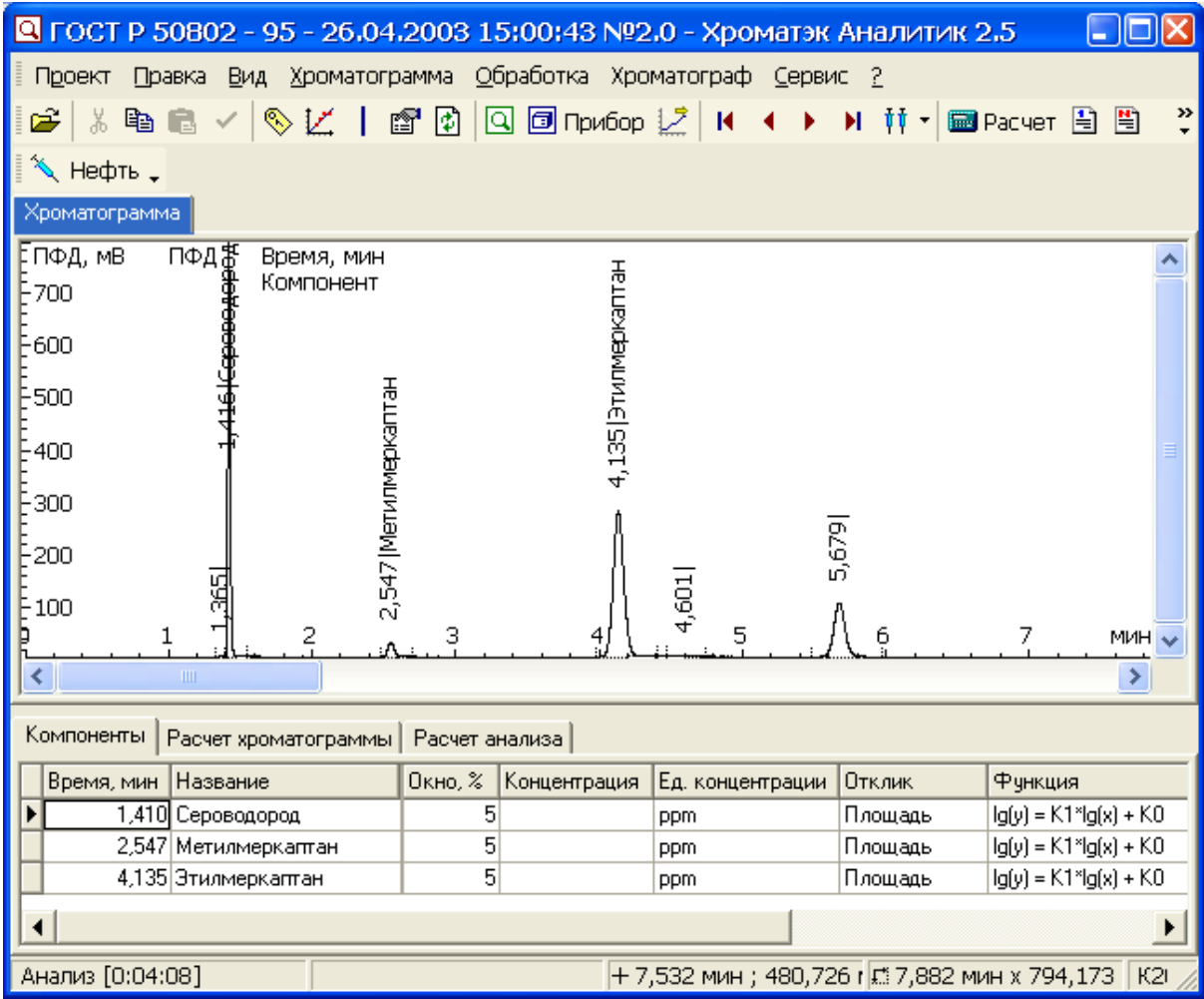














Рисунок 5.2. Главное окно программы



- вынести необходимые вам кнопки или команды в главное меню или на панель инструментов;
- убрать неиспользуемые Вами кнопки или команды из главного меню или панели инструментов;
- создать новую панель и поместить на нее любые команды или кнопки;
- удалить ненужные панели или отключить их видимость (кроме главного меню);
- настроить некоторые сервисные параметры.

Все вышеуказанные действия осуществляются с помощью диалога **Настройка**, подробно описанного в разделе 5.3.2. Настройки меню и панели инструментов действуют одинаково для всех проектов на вашем компьютере.







Разделы главного меню программы *Хроматэк Аналитик 2.5* описаны в таблице 5.2.

**Таблица 5.2. Элементы главного меню**




Команда меню		Выполняемое действие
<i>Меню “Проект”</i>		
	<b>Администратор проектов</b>	Открывает диалог <b>Администратор проектов</b> , в котором пользователь должен выбрать один из зарегистрированных проектов для работы.
	<b>Заккрыть проект</b>	Выполняет отключение от базы данных текущего открытого проекта.
	<b>Конвертер хроматограмм</b>	Запускает программу <i>Конвертер хроматограмм</i> .
	<b>Настройки</b>	Открывает диалог настройки общих параметров проектов.
	<b>Информация</b>	Отображает окно с информацией о названии проекта и его описании.
	<b>Выход</b>	Закрывает программу <i>Хроматэк Аналитик 2.5</i> .
<i>Меню “Правка”</i>		
	<b>Вырезать</b>	Удаляет выделенную информацию и записывает ее в буфер обмена.
	<b>Копировать</b>	Копирует выделенную информацию в буфер обмена.
	<b>Вставить</b>	Вставляет информацию из буфера обмена.
	<b>Добавить запись</b>	Добавляет новую запись в активную таблицу.
	<b>Удалить запись</b>	Удаляет выделенную запись из активной таблицы.
	<b>Подтвердить запись</b>	Сохраняет изменения текущей записи в базе данных.
<i>Меню “Вид”</i>		
	<b>Паспорт</b>	Выводит паспорт текущей хроматограммы, в котором содержится информация о текущей открытой хроматограмме.
	<b>Градуировка</b>	Выводит окно с градуировочным графиком и списком градуировочных точек текущего компонента.
	<b>Маркер</b>	Управляет видимостью вертикальной линии маркера на графике хроматограммы.
	<b>Свойства</b>	Вывод диалога настройки свойств для текущей активной страницы рабочей области программы.

	<b>Обновить</b>	Принудительное считывание данных текущей открытой хроматограммы из базы данных проекта.
	<b>Новое окно</b>	Открывает дополнительное окно программы <i>Хроматэк Аналитик 2.5</i> , в котором можно во время анализа просматривать и редактировать хроматограммы, записанные в текущий проект ранее хроматограммы.
	<b>Восстановить вид окна</b>	Восстановление порядка расположения закладок главного окна по умолчанию.



#### Меню “Хроматограмма”

	<b>Первая</b>	Переход к первой хроматограмме в проекте.
	<b>Предыдущая</b>	Переход к предыдущей хроматограмме в проекте.
	<b>Следующая</b>	Переход к следующей хроматограмме в проекте.
	<b>Последняя</b>	Переход к последней хроматограмме в проекте.
	<b>Список</b>	Вывод диалога со списком хроматограмм проекта.
	<b>Клонировать</b>	Создание новой хроматограммы на основе текущей, но без графика.
	<b>Удалить</b>	Удаление текущей хроматограммы из базы данных проекта.

#### Меню “Обработка”

	<b>Расчет хроматограммы</b>	Настройка и выполнение последовательности расчета хроматограммы.
	<b>Отчет хроматограмма</b>	Настройка и вывод отчета хроматограммы по стандартному шаблону.
	<b>Расчет анализа</b>	Настройка и выполнение операции расчета анализа.
	<b>Отчет анализа</b>	Настройка и вывод отчета анализа по стандартному шаблону.
	<b>Внешний расчет</b>	Вывод диалога со списком хроматограмм проекта.
	<b>Операции</b>	Запуск одиночной операции обработки.


#### Меню “Хроматограф” (отображается при подключении к Панели управления)

	<b>Прибор</b>	Отображение на экране окна программы <i>Панель управления</i> .
	<b>Метод</b>	Выбор метода по которому автоматически будут рассчитываться все хроматограммы при старте анализа до конца текущего сеанса работы с хроматографом или повторного выполнения данной команды с другим методом.

#### Меню “Сервис”

<b>Автоматическое удаление хроматограмм</b>	Настройка периодичности и параметров удаления хроматограмм из проекта.
<b>Меню</b>	Настройка меню и панелей инструментов программы.
<b>Параметры</b>	Настройка внешнего вида и поведения программы.

#### Меню “?”

	<b>Справка</b>	Вызов справочной системы программы.
	<b>Полезный совет</b>	Вывод полезного совета.
	<b>О программе</b>	Показ краткой информации о программе.

### 5.1.6 График

*Хроматэк Аналитик 2.5* предоставляет широкие возможности при работе с графической информацией. Хотя в программе присутствуют различные типы графиков (хроматограмма, градуировочная функция и другие), взаимодействие с ними построено на одних и тех же принципах. Настройка параметров графика подробно описана в разделе 5.5.3. Работа с графиком подробно описана в разделе 5.5.4.

Основные элементы графика хроматограммы представлены на рисунке 5.3.

При работе с графиком *Хроматэк Аналитик 2.5* позволяет:

- масштабировать график в реальном времени, увеличивая и уменьшая на нем некоторую прямоугольную область;
- запоминать часто используемый масштаб осей графика;
- переносить при помощи мыши некоторые элементы графика;
- отображать многоканальные хроматограммы, содержащие как сигналы с детекторов, так и диагностическую информацию;
- корректировать пики на хроматограмме вручную;
- копировать график в буфер обмена в формате точечного рисунка и метафайла для использования в качестве иллюстрации в других программах;
- для визуального сравнения накладывать друг на друга до десяти графиков, скопированных из других хроматограмм.



Рисунок 5.3. График хроматограммы

### 5.1.7 Таблицы

В *Хроматэк Аналитик 2.5* широко используется работа с данными, представленными в виде таблиц. Таблицы применяются как для простого просмотра, так и для редактирования информации. Взаимодействие со всеми таблицами в программе построено на одних и

тех же принципах. Процедура настройки таблиц описана в разделе 5.4. Работа с таблицами описана в разделе 5.5.10. Пример внешнего вида таблицы с описанием ее основных элементов представлен на рисунке 5.4.

Время, мин	Компонент	Площадь	Высота	Концентрация
1,373	Сероводород	2009,318	1674,271	2363,903
2,484	Метилмеркаптан	157,636	56,068	185,454
4,031	Этилмеркаптан	1975,966	406,309	2324,666
4,486		9,904	1,672	0,000
Max=4,486		4152,824	2138,320	4874,024

Рисунок 5.4. Таблица

При работе с таблицами *Хроматэк Аналитик 2.5* позволяет:

- выбирать нужную ячейку с помощью мыши или курсорных клавиш;
- редактировать содержимое ячеек;
- копировать данные ячеек в буфер обмена и вставлять в ячейки данные из буфера;
- объединять данные ячеек в группу при совпадении значений;
- сортировать данные в прямом и обратном порядке;
- изменять порядок столбцов;
- изменять формат представления числовых значений в ячейках таблиц.

Так же предусмотрена возможность отображения панели, на которой выводится итоговая информация:

- количество;
- максимум;
- минимум;
- среднее;
- сумма.

### 5.1.8 Метод

Метод — хроматограмма, которая содержит в себе следующую информацию:




- условия проведения анализа (режим хроматографа);
- данные паспорта хроматограммы;
- анализируемые компоненты и их характеристики (название, время удерживания, канал детектирования, функция отклика детектора, группа калибровки и т.д.);
- настройки расчета хроматограммы, отчетов и отдельных операций обработки;
- признак “Метод” и название метода в паспорте хроматограммы.

При работе с методом условия проведения анализа из него передаются в хроматограф. Данные паспорта без названия пробы, список компонентов без концентраций, настройки расчета хроматограммы, отчетов и отдельных операций обработки наследуются в хроматограммах, снимаемых по текущему методу. Подробнее о работе с методом см. раздел [5.5.13](#).

### 5.1.9 Операции и последовательность операций



В *Хроматэк Аналитик 2.5* ключевым понятием автоматической обработки информации является **операция**. Операция, как правило, выполняет определенные действия над данными текущей хроматограммы. В таблице [5.3](#) представлен список операций, сгруппированный по функциональному назначению.

**Таблица 5.3. Список одиночных операций обработки**




Команда меню		Выполняемое действие
<i>Операции обработки хроматографической информации</i>		
	<b>Медианная фильтрация</b>	Метод фильтрации нулевой линии хроматограммы. Используется для подавления отдельных выбросов нулевой линии.
	<b>Гауссова фильтрация</b>	Метод фильтрации нулевой линии хроматограммы. Используется для сглаживания формы пиков.
	<b>Интегрирование</b>	Автоматическая разметка базовой линии пиков хроматограммы.
	<b>Идентификация</b>	Идентификация пиков хроматограммы в соответствии с данными удерживания компонентов в таблице.
	<b>Градуировочные коэффициенты</b>	Пересчет градуировочной зависимости в текущей группе градуировки.
	<b>Количественный расчет</b>	Расчет концентраций компонентов в анализируемой пробе.
	<b>Расчет анализа</b>	Расчет средних значений концентрации компонентов по результатам нескольких измерений.
	<b>Удалить пики</b>	Удаление пиков на хроматограмме по задаваемым критериям.
	<b>Внешний расчет</b>	Проведение специализированных расчетов во внешних приложениях.
	<b>Инверсия хроматограммы</b>	Инверсия сигнала относительно нулевой линии.

**Вычитание хроматограммы** Вычитание выбираемой хроматограммы из текущей.




#### *Операции генерации отчетов*

-  **Отчет хроматограммы** Настройка и вывод отчета хроматограммы по стандартному шаблону.
-  **Отчет анализа** Настройка и вывод отчета анализа по стандартному шаблону.

#### *Операции поверки хроматографа*

-  **Оперативная оценка шума** Быстрая оценка шумовых характеристик выбранного участка хроматограммы.
-  **Поверка хроматографа** Расчет шума, дрейфа, СКО, предела детектирования в соответствии с нормативами поверки прибора.
-  **Фильтр 2-го порядка** Подавление шума с помощью фильтра 2-го порядка.

#### *Вспомогательные операции*

- Сгенерировать компоненты** Добавление в таблицу **Компоненты** новых записей, соответствующих неидентифицированным пикам.
- Уточнить времена удерживания** Корректировка времен удерживания идентифицированных компонентов в таблице, в соответствии с реальными значениями, полученными при выполнении анализа.
-  **Обработать как предыдущую** Обработка текущей хроматограммы с переносом из предыдущей хроматограммы проекта таблицы компонентов, настроек расчета и отчета.
-  **Обработать по методу** Обработка хроматограммы по выбранному методу.
-  **Корректировка метода** Изменение метода на основе текущей хроматограммы.

Операции могут быть объединены в последовательность **Расчет хроматограммы**, в которой они выполняются в определенном порядке, друг за другом. Последовательность операций является неотъемлемой частью метода обработки хроматограммы и наследуется новыми хроматограммами.

Настройка последовательности **Расчет хроматограммы** подробно описана в разделе 5.5.8. Последовательность может быть автоматически запущена после завершения анализа для обработки снятой хроматограммы. Благодаря этому, после необходимой настройки, работа *Хроматэк Аналитик 2.5* может происходить полностью в автоматическом режиме без участия оператора.

## 5.2 Проекты. Создание и изменение

### 5.2.1 Администратор проектов

Любая работа по созданию, изменению и открытию проекта в системе *Хроматэк Аналитик 2.5* выполняется с помощью диалога **Администратор проектов**. Окно диалога

показано на 5.5.

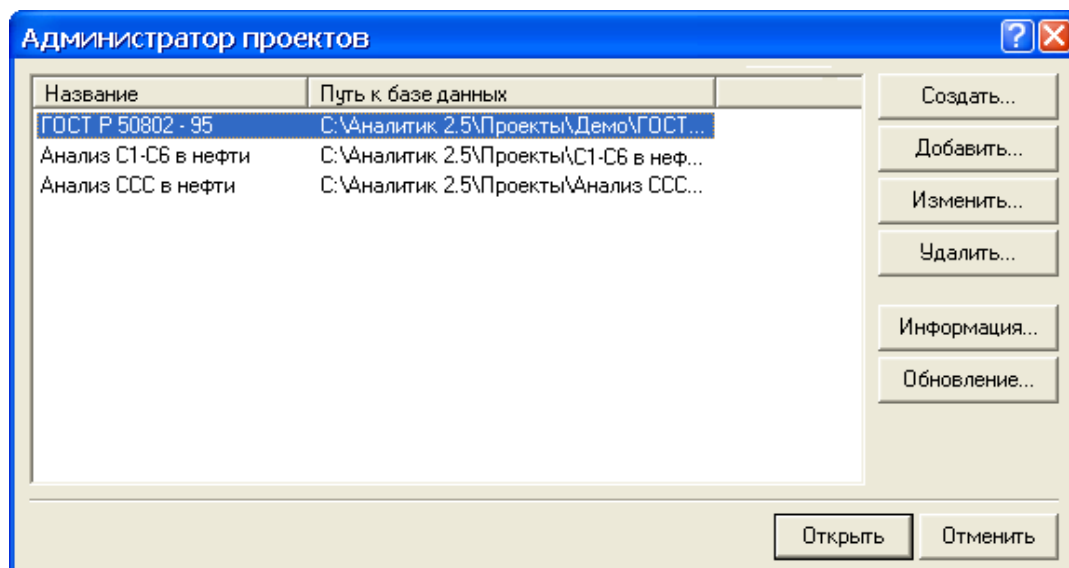


Рисунок 5.5. Администратор проектов

Диалог **Администратор проектов** может быть вызван на различных этапах работы:

- для изменения существующего проекта или создания нового — из программы *Панель управления*;
- для открытия, создания или изменения проекта — из главного окна *Хроматэк Аналитик 2.5*.

В главном окне *Хроматэк Аналитик 2.5* диалог **Администратор проектов** вызывается автоматически при открытии программы, а также в любое время с помощью соответствующей команды меню **Проект**.

В рабочей области диалога расположен список зарегистрированных проектов. Для совершения каких-либо действий над проектом, его необходимо выбрать из списка.

### 5.2.2 Создание нового проекта

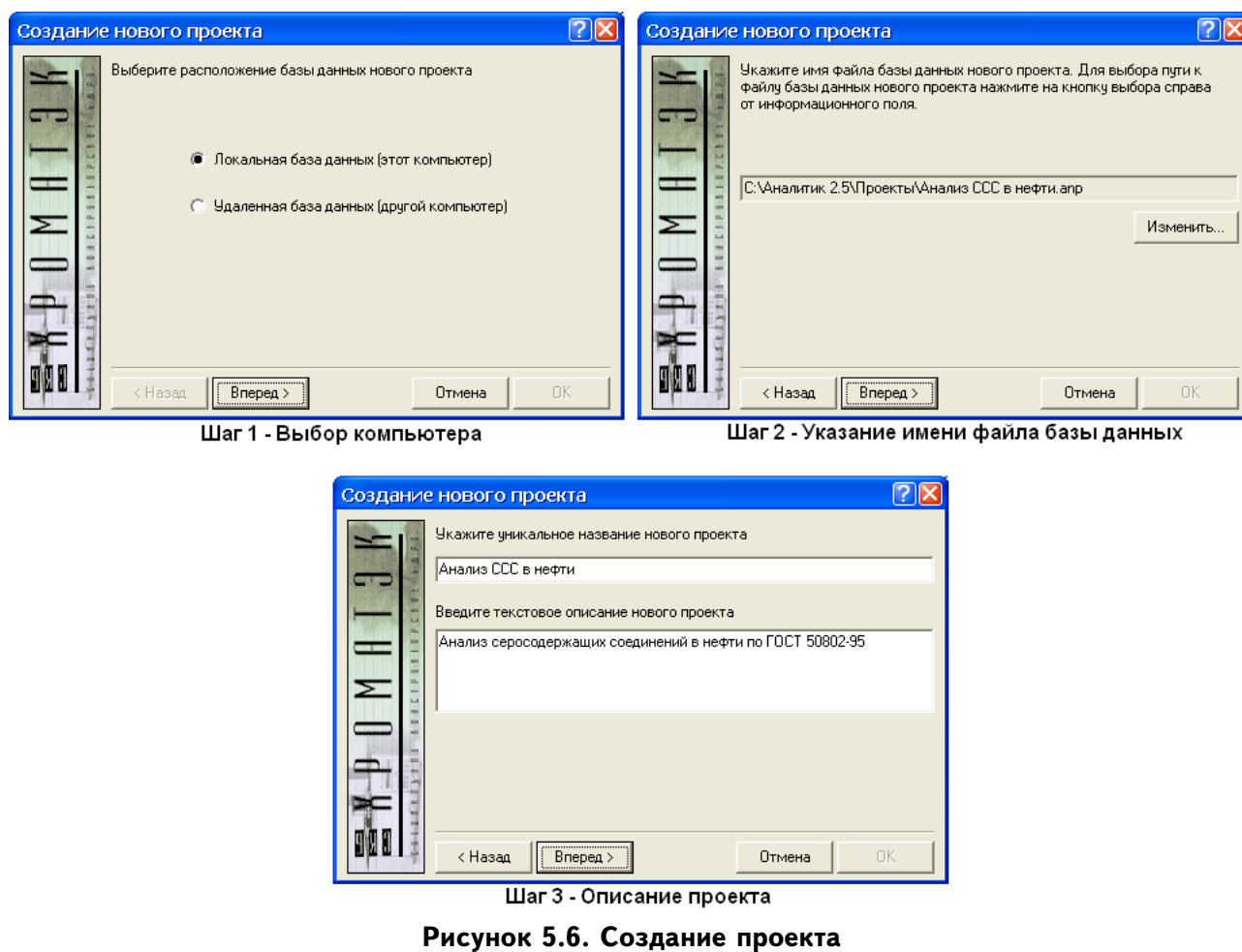
Нажмите на кнопку **Создать**, чтобы запустить мастер создания нового проекта. Вам будет предложено последовательно выполнить несколько действий, необходимых для создания нового проекта. Создание проекта (рисунок 5.6):

**Шаг 1.** Выберите компьютер, на котором будет храниться база данных проекта: этот компьютер или другой.

**Шаг 2.** Задайте **имя** файла базы данных и **путь** к нему. Для этого в соответствующем окне нажмите кнопку **Изменить**, после чего, в появившемся диалоге создания файла проекта, введите его имя и нажмите кнопку **Сохранить**.



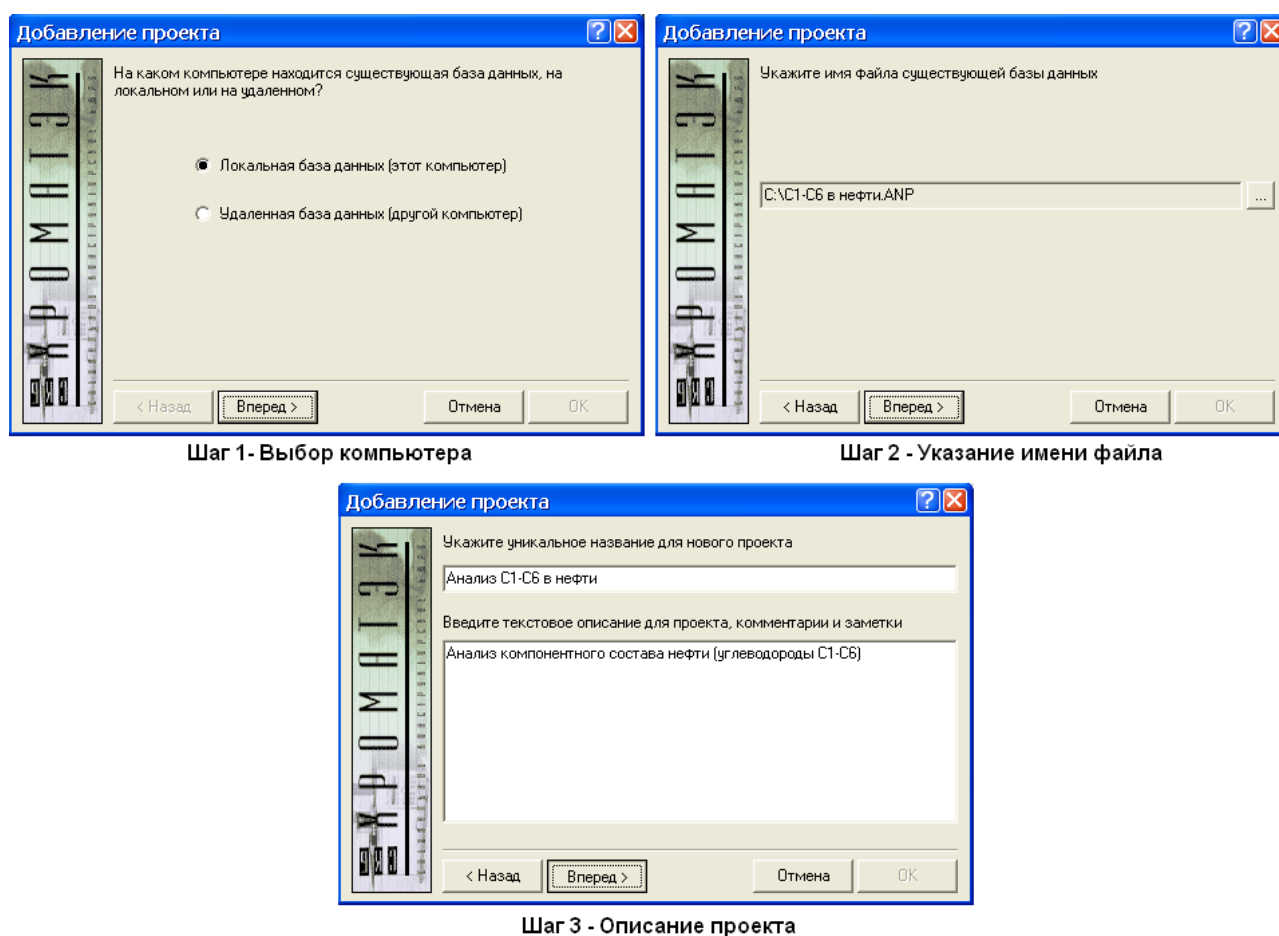
Если файл базы данных проекта будет расположен на удаленном компьютере, то следует ввести имя компьютера в сети, указать полный путь к файлу базы данных проекта, а также выбрать протокол соединения.



**Шаг 3.** Задайте **название проекта**. Следует стремиться к тому, чтобы название проекта имело ассоциативную связь с содержанием проекта. Не задавайте слишком длинное название, так как в этом случае оно будет отображаться в таблицах не полностью. Если необходимо, введите более подробное **описание проекта**.

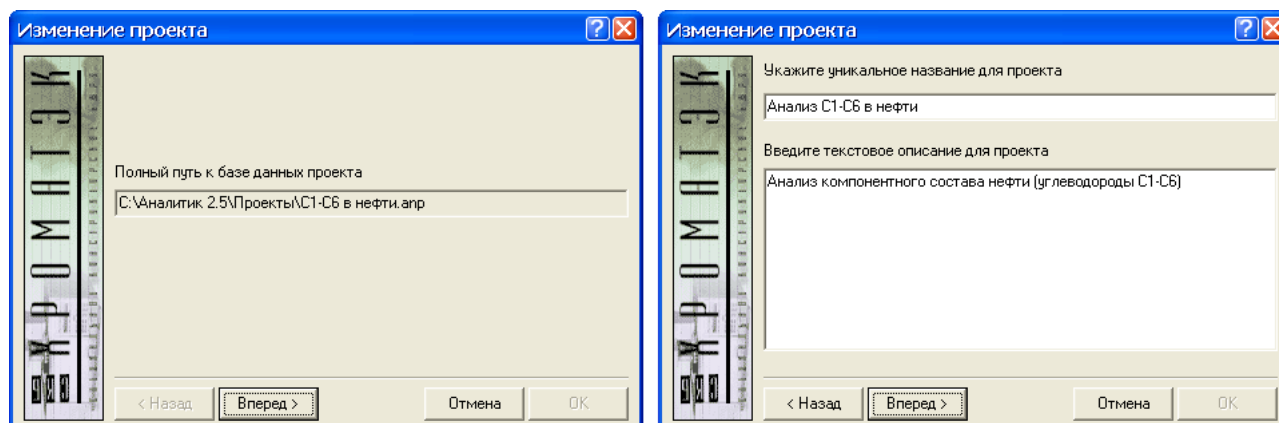
### 5.2.3 Добавление, удаление и изменение проекта

Если вы хотите работать с уже существующим проектом (например, созданным другим пользователем и перенесенным с другого компьютера), нажмите кнопку **Добавить** для запуска мастера добавления проекта. Данный мастер (диалоговые окна показаны на рисунке 5.7) почти полностью аналогичен мастеру создания нового проекта, за исключением **шага 2**. Здесь необходимо с помощью стандартного диалога Windows не создать новый файл, а указать место расположения уже существующего файла проекта.



**Рисунок 5.7. Добавление проекта**

Вы можете изменить название и текстовое описание уже зарегистрированного в системе проекта. Для этого нажмите кнопку **Изменить**. Диалоги мастера показаны на рисунке 5.8. Путь к файлу изменить нельзя.



Шаг 1 - Просмотр пути к файлу проекта

Шаг 2 - Изменение описания проекта

Рисунок 5.8. Изменение проекта



Программа **Хроматэк Аналитик** постоянно совершенствуется. Иногда для реализации той или иной новой функции программы требуется изменение формата проекта, в результате чего старые проекты становятся невозможно открыть в новой версии программы. В таких случаях проекты необходимо преобразовать в новый формат. Для преобразования проектов в диалоге Администратор проектов нажмите кнопку **Обновление**. Ответив утвердительно на запрос о необходимости преобразования, вы запустите автообновление проекта. Ход автообновления отображается в специальном окне (рисунок 5.9).



Если вы попытаетесь открыть проект устаревшей версии без преобразования формата, вам все равно будет предложено его обновить.

Для удаления проекта из системы, нажмите на кнопку **Удалить**.

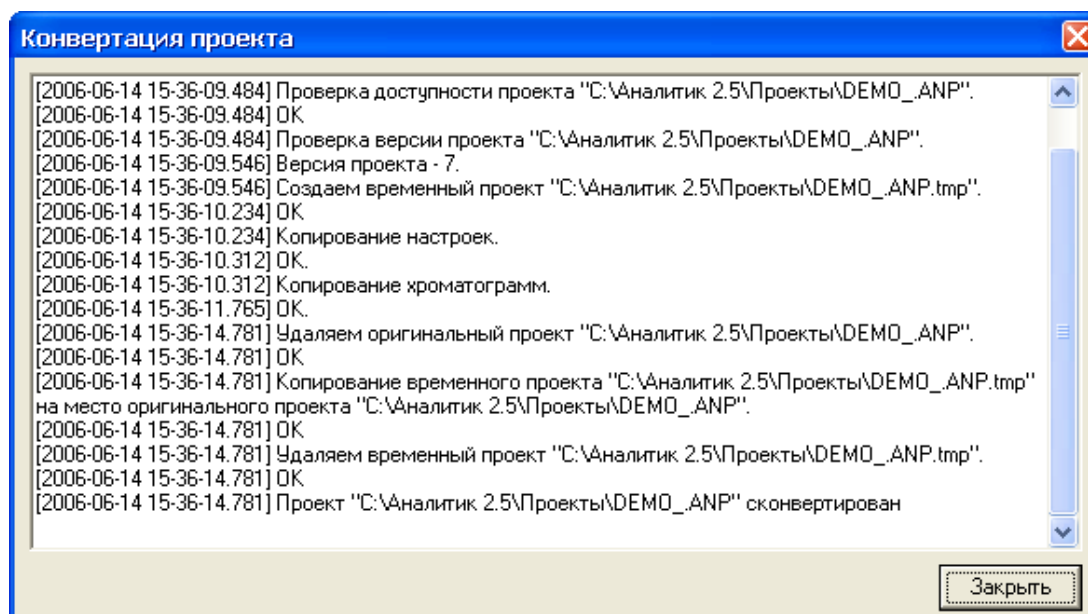


Рисунок 5.9. Автообновление проекта

### 5.2.4 Настройка параметров проекта

Для всех проектов в системе существует общая группа параметров, устанавливаемых по умолчанию. При желании вы можете изменить их с помощью диалога (рисунок 5.10), запускаемого при выборе команды **Настройки** в меню **Проект**. В этом диалоге:

- Установите признак **Заполнять паспорт** для автоматического вызова паспорта при старте хроматограммы.

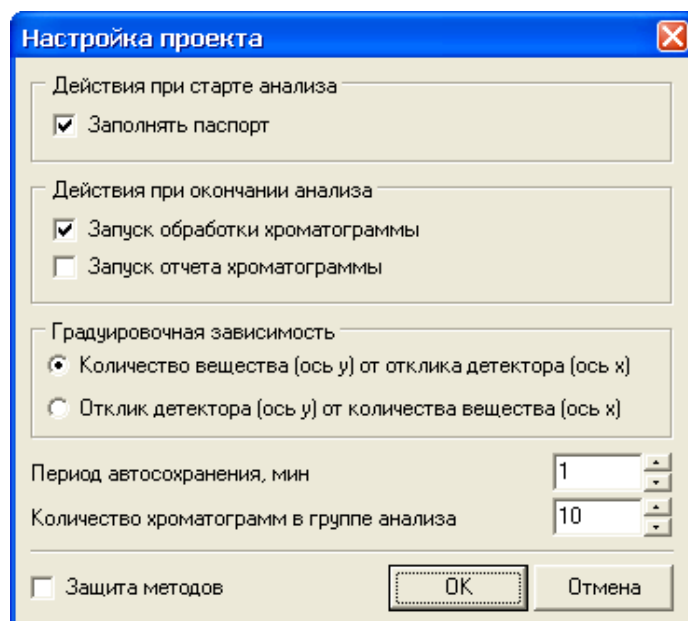


Рисунок 5.10. Настройки проекта

- Укажите, нужно ли по окончании анализа автоматически осуществлять **запуск обработки хроматограммы**.
- Укажите, нужно ли по окончании анализа автоматически осуществлять **запуск отчета хроматограммы**.



По умолчанию данный флажок отключен, так как по окончании анализа рекомендуется сначала провести визуальную оценку хроматограммы и, при необходимости, ее корректировку.

- Выберите тип градуировочной зависимости.



По стандарту ISO 8466 градуировочная зависимость является функцией отклика детектора от количества вещества. В нормативных документах, действующих на территории России градуировочная зависимость определяется функцией количества вещества от отклика детектора. Результат количественного расчета не зависит от выбора типа функции.

- Задайте **период автосохранения** — интервал времени, через который *Хроматэк Аналитик 2.5* будет обновлять данные, идущие от *Панели управления* во время анализа. Чем больше этот интервал, тем меньше загрузка операционной системы.

- Укажите **количество хроматограмм в группе анализа** для их автоматической нумерации.



Хроматограммам присваивается составной номер из двух цифр, разделенных точкой, например “1.2”, “1.5”, “3.20”. Первая цифра — номер анализа, вторая — номер хроматограммы в анализе. При наличии в анализе более одной хроматограммы может быть сгенерирован Отчет анализа с вычислением средних значений параметров компонентов (площадь, концентрация и т.п.), а также сходимости в хроматограммах данного анализа.

- Установите опцию **Защита методов** для того, чтобы заблокировать хроматограммы-методы от изменения. Подробнее о защите метода см. раздел [5.5.13](#).

## 5.3 Настройка главного окна

### 5.3.1 Общие параметры работы программы

Общие параметры работы программы *Хроматэк Аналитик 2.5* сохраняются в реестре Windows и для программы являются глобальными, т.е. действуют одинаково для всех проектов на вашем компьютере. Для их настройки выберите команду **Параметры** в меню **Сервис**. В открывшемся диалоге (рисунок [5.11](#)):

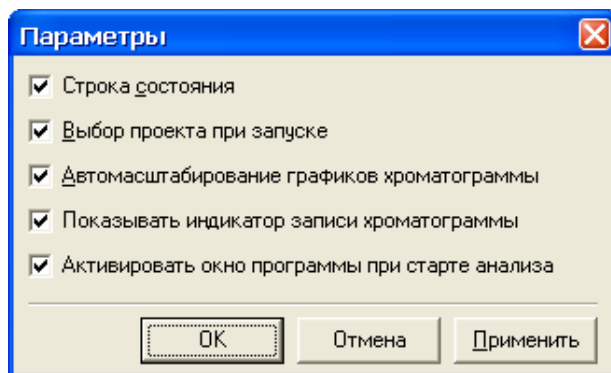


Рисунок 5.11. Общие параметры программы

- Отметьте признак видимости **строки состояния**, расположенной в нижней части главного окна.
- Отметьте **выбор проекта при запуске**, для того чтобы при запуске программы в режиме off-line (без подключения ее к программе *Панель управления*) выводился диалог **Администратор проектов** (см. его описание в разделе [5.2.1](#)).
- Если необходимо при открытии хроматограммы показать всю хроматограмму, установите опцию **автомасштабирование графиков хроматограммы**, в противном случае каждая последующая хроматограмма всегда будет отображаться в масштабе предыдущей.

- Установите опцию **Показывать индикатор записи хроматограммы** для отображения во время записи хроматограммы мигающего индикатора “Rec” в правом верхнем углу окна.
- Для того, чтобы при старте анализа окно *Хроматэк Аналитик 2.5* автоматически активировалось (появлялось поверх всех запущенных в Windows окон), установите соответствующую опцию.

### 5.3.2 Настройка меню и панели инструментов

На панели инструментов программы *Хроматэк Аналитик 2.5* расположен набор кнопок быстрого доступа, предлагаемый по умолчанию. Если вы хотите добавить на панель инструментов дополнительные кнопки или убрать неиспользуемые, используйте диалог **Настройка**. Для его вызова:

- или в меню **Сервис** выберите команду **Настройка**;
- или на панели инструментов нажмите на правую кнопку мыши и из контекстного меню выберите команду **Настройка**.

На закладке “Панели” (рисунок 5.12) данного диалога вы можете:

- определить видимость панели, установив соответствующий флажок;
- создать, изменить название или удалить выделенную панель;
- вернуть выделенную мышью панель в первоначальное состояние с помощью кнопки **Сброс**.

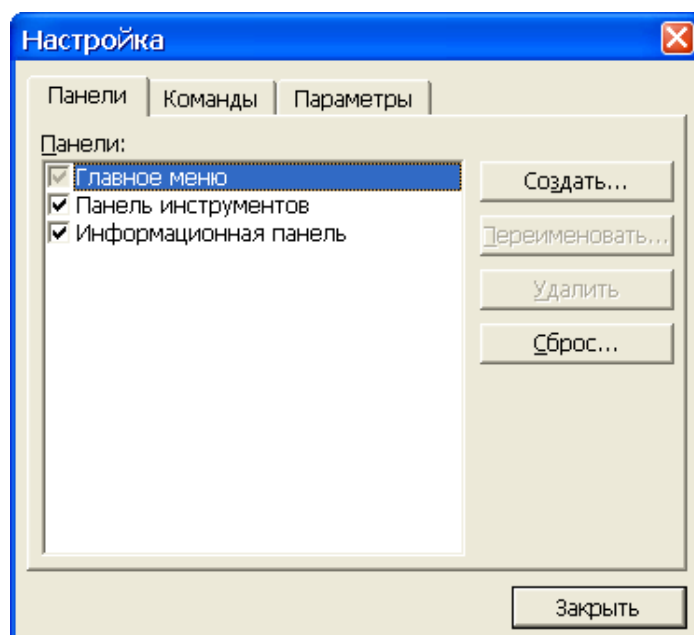


Рисунок 5.12. Настройка панелей инструментов. Закладка “Панели”

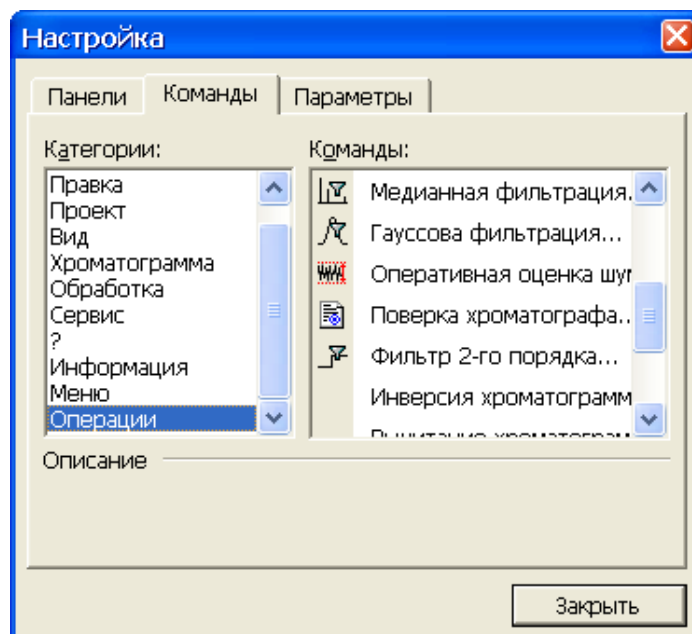


Рисунок 5.13. Настройка панелей инструментов. Закладка “Команды”

Закладка “Команды” (рисунок 5.13) предназначена для добавления на панель инструментов дополнительных кнопок быстрого доступа.

Для добавления кнопки:

- Выберите категорию, в которой находится интересующая вас команда.
- Подведите указатель мыши к команде, которую вы хотите добавить на панель инструментов, нажмите левую кнопку мыши и, удерживая ее в нажатом состоянии, переместите указатель в нужное место на панели инструментов. Таким образом добавьте на панель инструментов необходимые вам кнопки. Если команда имеет иконку, кнопка будет отображаться в виде рисунка. Иначе кнопка будет иметь вид надписи.

Для удаления неиспользуемой кнопки подведите указатель мыши к кнопке, которую вы хотите удалить с панели инструментов, нажмите левую кнопку мыши и, удерживая ее в нажатом состоянии, переместите указатель в окно диалога **Настройка**.



**Неиспользуемую кнопку можно выключить. Для этого подведите указатель мыши к кнопке с изображением стрелки вниз (крайняя правая кнопка панели инструментов) и нажмите левую кнопку мыши. Появится контекстное меню с единственной командой **Добавить или удалить кнопки**. После выбора данной команды будет отображен список кнопок, расположенных на панели инструментов в данный момент. В данном списке уберите галочки возле кнопок, которые вы хотите выключить. Если, в дальнейшем, потребуется их включить, выполните обратную процедуру.**

На закладке “Параметры” (рисунок 5.14) вы можете выбрать или отменить предложенные эффекты отображения меню и панелей инструментов.

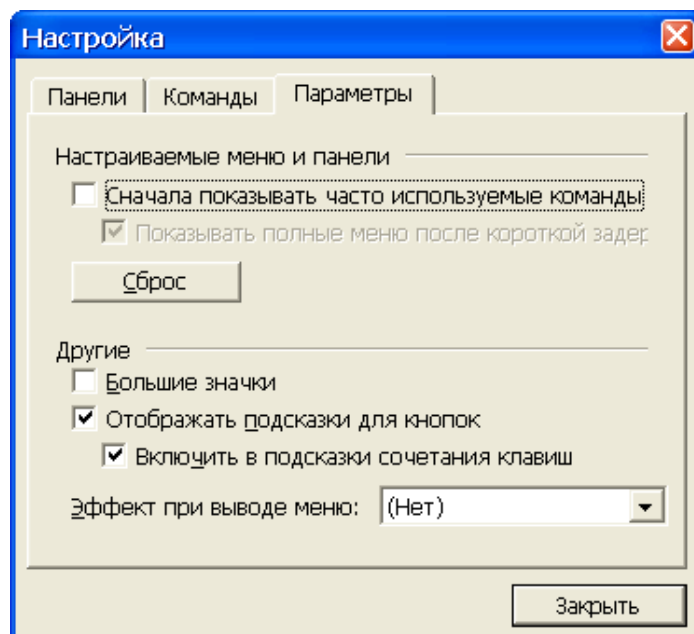


Рисунок 5.14. Настройка панелей инструментов. Закладка “Параметры”

### 5.3.3 Настройка страниц главного окна

Со страницами рабочей области программы *Хроматэк Аналитик 2.5* можно производить следующие действия:

- перемещать из одной части рабочей области в другую. Для этого нужно перетащить мышью страницу за ее заголовок в нужное место;
- распахивать страницу на всю рабочую область программы при помощи двойного щелчка мыши на ее заголовке;
- перемещать границу верхней и нижней рабочих областей при помощи мыши.



**Клавиша Tab позволяет переключаться между верхней и нижней областями. Сочетание клавиш Ctrl+Tab позволяет перемещаться по страницам области.**

Вы можете настроить размеры страниц по своему усмотрению и изменить их в любой момент времени. Текущие размеры страниц автоматически сохраняются в проекте. При необходимости всегда можно восстановить расположение и размеры страниц, предлагаемые программой по умолчанию, выбрав команду **Восстановить вид окна** в меню **Вид**.

### 5.3.4 Настройка диалога “Полезный совет”

Назначение диалога — показ коротких полезных советов при запуске программы, помогающих сделать работу эффективнее. Окно диалога показано на рисунке 5.15. Для вызова диалога в меню ? выберите команду **Полезный совет**. В диалоговом окне:

- Установите опцию **Советовать при запуске**, для того чтобы полезный совет отображался каждый раз при старте программы.
- Нажмите кнопку **Следующий** для отображения следующего совета.

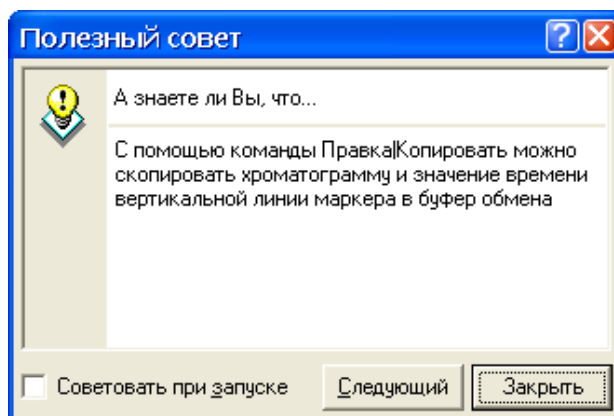


Рисунок 5.15. Диалог “Полезный совет”

### 5.3.5 Настройка автоматического удаления хроматограмм

Диалог **Автоматическое удаление хроматограмм** предназначен для настройки периодического удаления хроматограмм из проекта в соответствии с заданными параметрами.

Для вызова диалога (показан на рисунке 5.16) в меню **Сервис** выберите команду **Автоматическое удаление хроматограмм**.

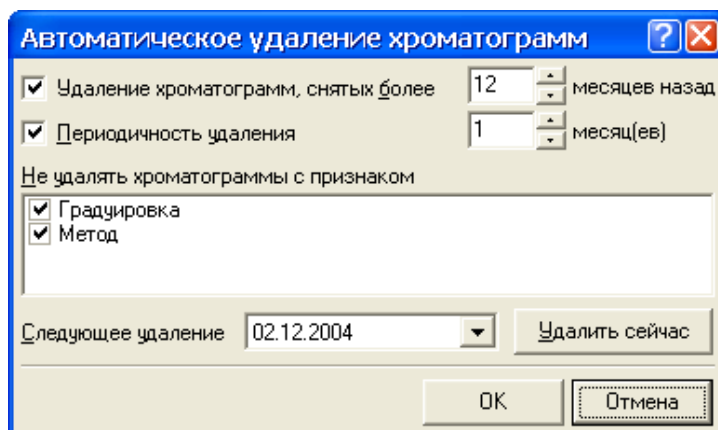


Рисунок 5.16. Автоматическое удаление хроматограмм

В данном диалоге:

- Отметьте необходимость **удаления хроматограмм, снятых более указанного количества месяцев назад**. Когда эта опция установлена, диалог будет появляться каждый раз при загрузке проекта, в котором присутствуют хроматограммы, записанные ранее указанной даты.

- Задайте **периодичность удаления**. При этом хроматограммы будут удаляться каждый раз по истечении указанного количества месяцев.
- Выберите **признаки для хроматограмм, которые не будут удаляться** из проекта.
- После того как будут удалены старые хроматограммы, **дата следующего удаления** автоматически увеличивается в соответствии с заданным периодом. Дату следующего удаления можно также указать и вручную.
- Для немедленного удаления хроматограмм, удовлетворяющих отмеченным в диалоге условиям, нажмите кнопку **Удалить сейчас**.

## 5.4 Настройка таблиц

Программа *Хроматэк Аналитик 2.5* содержит следующие таблицы:

- Компоненты.
- Расчет хроматограммы.
- Расчет анализа.
- Список хроматограмм (в одноименном диалоге).
- Таблица градуировочных точек (в окне **Градуировка**).

Перед началом работы с программой эти таблицы должны быть настроены в соответствии с выбранным способом идентификации пиков и методом количественного расчета. Проводится оптимизация представления данных в таблицах под конкретные задачи оператора.


При подготовке таблиц к работе выполняются следующие процедуры:

- Настройка свойств.
- Адаптация таблиц под способ идентификации пиков.
- Адаптация таблиц под метод количественного расчета.
- Оптимизация записей в таблицах.

Настройки таблиц **Компоненты**, **Расчет хроматограммы** и **Расчет анализа** действуют индивидуально для каждого проекта. Настройки **Списка хроматограмм** и **Таблицы градуировочных точек** действуют одинаково для всех проектов на вашем компьютере.

### 5.4.1 Настройка свойств таблиц

На начальной стадии работы с программой *Хроматэк Аналитик 2.5* необходимо настроить внешний вид таблиц **Компоненты** и **Расчет хроматограммы** (в зависимости от выбранного метода количественного расчета и идентификации отобразить или скрыть некоторые столбцы). Управление видимостью столбцов, а также настройка некоторых других параметров осуществляется с помощью диалога **Свойства таблицы**. Для вызова диалога активизируйте нужную таблицу (щелкните мышью на его заголовке), далее:

- или нажмите на кнопку ;
- или в меню **Вид** выберите команду **Свойства**;
- или используйте комбинацию клавиш **Alt+Enter**;

Диалог **Свойства таблицы** содержит две закладки — **Элементы** (рисунок 5.17) и **Столбцы** (рисунок 5.19).

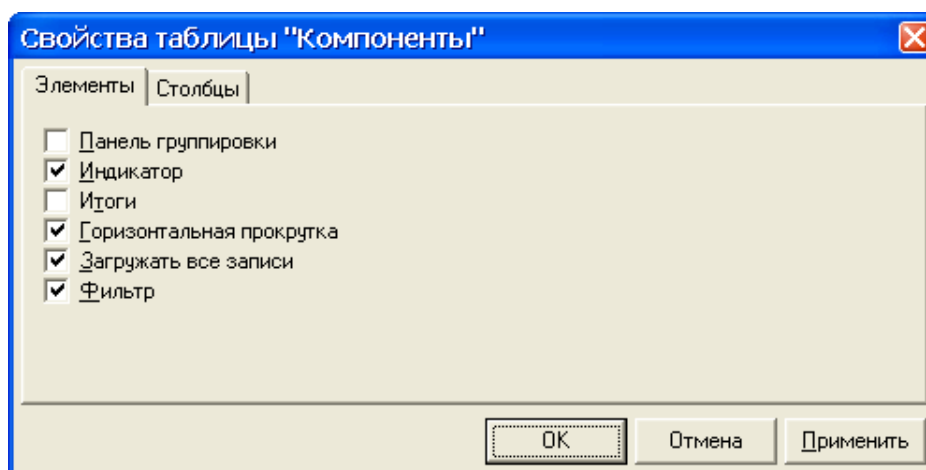


Рисунок 5.17. Свойства таблицы. Закладка “Элементы”

На закладке **Элементы** выполните следующие действия:

- Отметьте опцию **панель группировки** для отображения в таблице соответствующего элемента. Использование панели группировки описано в разделе 5.4.4.
- Включите **индикатор** состояния записей в таблице (см. рисунок 5.18).
- Для вывода обобщающей информации по столбцам включите панель **Итоги**. Настройка типа итоговой информации производится на закладке **Столбцы** этого диалога.
- Снимите отметку с опции **горизонтальная прокрутка**, если хотите, чтобы столбцы заняли все горизонтальное пространство таблицы.
- Установка опции **Загружать все записи** позволяет сортировать, группировать данные в таблицах. Также автоматически производится подсчет итоговых значений в столбцах. Рекомендуется отключать при большом количестве записей.

- Включите опцию **Фильтр** для отображения дополнительных элементов группировки записей в таблице. Подробнее о фильтрации записей см. раздел 5.4.4.

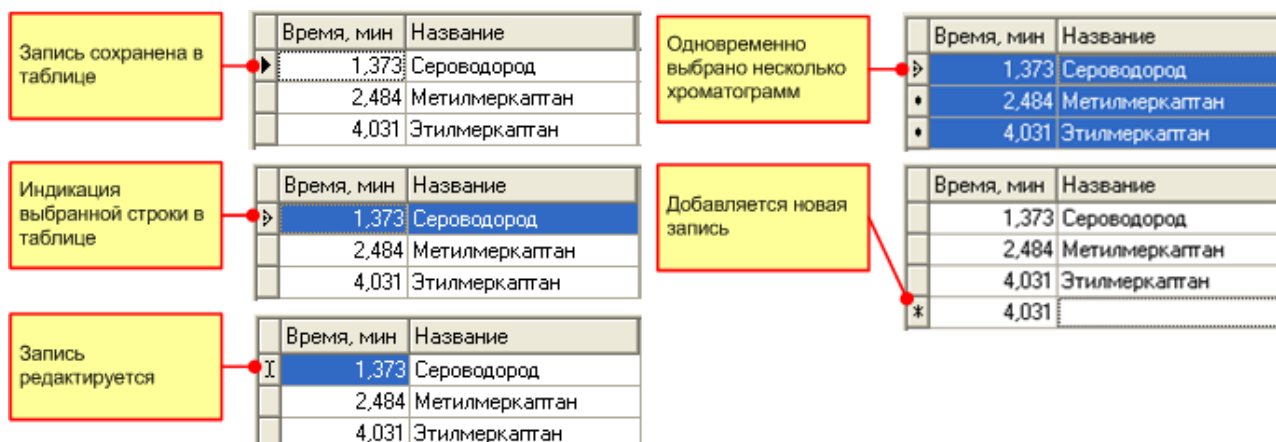


Рисунок 5.18. Индикаторы состояния записей в таблицах

Все столбцы, которые могут быть отображены в таблице, перечислены на закладке **Столбцы** диалога **Свойства таблицы**. Каждый из столбцов обладает пятью параметрами, определяющими его внешний вид и содержание:

- Надпись** Заголовок столбца, название которого может совпадать с названием соответствующего поля базы данных таблицы.
- Ширина** Ширина столбца.
- Показать?** Управление видимостью столбца.
- Формат** Шаблон формата отображения данных столбца и итогов. Позволяет задать экспоненциальную или нормальную форму отображения числа, количество символов после десятичной точки и др.
- Итоги** Тип подводимых итогов всех данных столбца и группы: количество, максимум, минимум, среднее или сумма.

Описания всех доступных столбцов приведены в разделе 5.8.1.

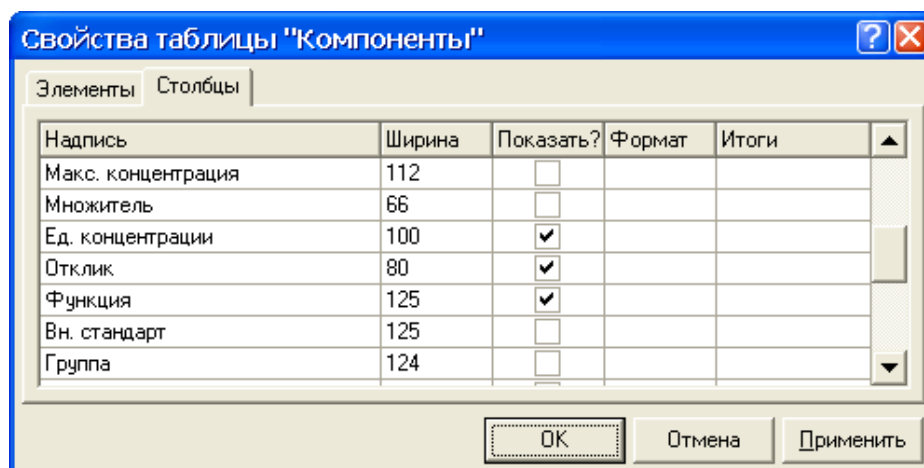


Рисунок 5.19. Свойства таблицы. Закладка "Столбцы"



Для упрощения работы с программой **Хроматэк Аналитик 2.5** рекомендуется для каждого метода идентификации и количественного расчета использовать отдельный проект. Поскольку, как уже говорилось выше, настройки таблиц Компоненты и Расчет хроматограммы действуют индивидуально для каждого проекта, то адаптация этих таблиц под выбранный метод количественного расчета проводится только один раз и в дальнейшем менять эту настройку нет необходимости.

### 5.4.2 Адаптация под способ идентификации пиков



Подробно различные способы идентификации рассмотрены в разделе [4.5](#).

В таблице [5.4](#) показаны столбцы таблицы **Компоненты** которые должны быть активированы в этой таблице при выборе того или иного способа идентификации пиков на хроматограмме.

**Таблица 5.4. Столбцы, необходимые при проведении идентификации пиков**

Идентификация	Необходимые столбцы
По времени удерживания	Название Время, мин. Окно, %
По времени удерживания относительно опорных пиков	Название Время, мин. Окно, % Идентификация
На двух каналах	Название Время, мин. Окно, % Идентификация Расчет?
По индексам удерживания	Название Время, мин. Окно, % Окно, инд. Лог. индекс (или Лин. индекс) Идентификация

В случае многоканальной хроматограммы при любом методе идентификации необходимо вывести столбец **Детектор**, в котором указывается, на каком канале ожидается выход компонента.



Проведение идентификации пиков описано в разделе [5.5.11](#)

### 5.4.3 Адаптация под метод количественного расчета

В зависимости от используемого метода количественного расчета, в таблицы **Компоненты**, **Расчет хроматограммы**, **Расчет анализа** должны быть включены соответствующие столбцы. Ниже приведены примеры настройки таблиц для разных методов расчета (при идентификации по времени).

Кроме того, в таблицы могут быть включены любые другие столбцы. Например, столбцы **Высота** и **Площадь** не являются обязательными, но могут представлять интерес для некоторых пользователей. Описание всех столбцов приведено в разделе 5.8.1.



**Если вы используете идентификацию пиков на хроматограмме с применением двух каналов детекторов, активируйте в таблице Компоненты столбец Расчет?.**

Рассмотрим вид таблиц при различных методах количественного расчета:

#### Расчет методом процентной нормализации

В соответствии с формулой, для расчета нужно указать лишь тип отклика, по которому будет производиться расчет. Тип отклика задается при настройке операции **Количественный расчет**, описанной в разделе 5.5.8. Вид таблиц показан на рисунке 5.20.

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа	
Время, мин	Название	Окно, %	Детектор

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа	
Перетащите сюда заголовок столбца для группировки по этому столбцу			
Время, мин	Компонент	Концентрация	

Рисунок 5.20. Вид таблиц при расчете методом процентной нормализации

#### Расчет методом внутренней нормализации

В соответствии с формулой, для задания относительных коэффициентов чувствительности в таблице **Компоненты** необходимо вывести столбец **К1**. Другие коэффициенты используются в случаях, когда функция не проходит через начало координат (**К0**) или функция не является линейной (**К2**).

Столбец **Множитель** выводится, если расчет производится более чем по одному каналу детектирования. В этом случае в столбце задаются коэффициенты пересчета, учитыва-

ющие отличия условий анализа и количества пробы на двух каналах. **Коэффициент нормализации** задается при настройке операции **Количественный расчет**, описанной в разделе 5.5.8. Вид таблиц показан на рисунке 5.21.

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа				
Время, мин	Название	Окно, %	Множитель	Отклик	K1	Детектор

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа
Перетащите сюда заголовок столбца для группировки по этому столбцу		
Время, мин	Компонент	Концентрация

Рисунок 5.21. Вид таблиц при расчете методом внутренней нормализации

### Расчет методом абсолютной градуировки

В соответствии с принципом этого метода, для занесения значений концентраций в таблицу при проведении градуировки необходим столбец **Концентрация**. Можно вывести столбцы **K2**, **K1**, **K0** которые будут показывать рассчитанные значения соответствующих коэффициентов. Для оценки правильности градуировки необходимо вывести в таблице **Расчет хроматограммы** столбец **Погрешность**. Вид таблиц показан на рисунке 5.22.

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа							
Время, мин	Название	Окно, %	Концентрация	Ед. концентрации	Множитель	Функция	Отклик	K1	Детектор

Компоненты	Расчет хроматограммы	Расчет анализа		
Перетащите сюда заголовок столбца для группировки по этому столбцу				
Время, мин	Компонент	Концентрация	Ед. концентрации	Погрешность, %

Рисунок 5.22. Вид таблиц при расчете методом абсолютной градуировки

### Расчет методом внутреннего стандарта

При данном методе расчета в таблицу **Компоненты** добавляется столбец **Вн. Стандарт**, в котором выбирается стандарт для каждого компонента. Если коэффициенты известны и градуировка не требуется — необходим столбец **K1**. Для внесения концентраций веществ при градуировке и концентрации стандарта при количественном расчете необходим столбец **Концентрация**. Вид таблиц показан на рисунке 5.23.

### Расчет методом внешнего стандарта

При данном методе расчета в таблицу **Компоненты** добавляется столбец **Вн. Стандарт**, в котором выбирается стандарт для каждого компонента. Для внесения концентрации внешнего стандарта при градуировке необходим столбец **Концентрация**. Для внесения заранее известных относительных коэффициентов чувствительности необходим столбец **Множитель**. Столбец **K1** используется для градуировки внешнего стандарта. Значения **K1** прочих компонентов (кроме стандарта) необходимо установить равными “1”. Для оценки правильности градуировки внешнего стандарта необходимо вывести в таблице **Расчет хроматограммы** столбец **Погрешность**. Вид таблиц показан на рисунке 5.23.

Компоненты

Расчет хроматограммы

Расчет анализа

Время, мин	Название	Окно, %	Концентрация	Множитель	Ед. концентрации	Отклик	Вн. стандарт	K1	Детектор

Компоненты

Расчет хроматограммы

Расчет анализа

Перетащите сюда заголовок столбца для группировки по этому столбцу

Время, мин	Компонент	Группа	Площадь	Высота	Концентрация	Ед. концентрации	Погрешность, %	Детектор

Рисунок 5.23. Вид таблиц при расчете методом внешнего или внутреннего стандарта

### Расчет концентрации основного вещества

При необходимости такого расчета в таблицу **Компоненты** выводится столбец **Идентификация**. В этом столбце для компонента, являющегося основным веществом, необходимо выставить признак **Основной**. Для недетектируемых веществ установите в указанном столбце признак **Недетектируемый**, а для внесения концентрации выведите столбец **Концентрация**. Остальные столбцы настраиваются в зависимости от метода расчета примесей.

### Недетектируемый компонент

Иногда не все компоненты пробы элюируются на хроматограмме, но есть необходимость их учета в расчете хроматограммы и вывода в отчете. В таком случае, можно воспользоваться функцией учета **недетектируемого компонента**. Использование этой функции подробно описана в разделе 5.5.14, на стадии настройки таблиц необходимо лишь включить в таблице **Компоненты** столбец **Идентификация**.

#### 5.4.4 Оптимизация записей в таблицах

Общей в настройке всех таблиц является настройка ширины столбцов, перестановка их в желаемом порядке, а так же сортировка содержимого.

#### Размеры и расположение столбцов

- Для настройки ширины столбца подведите курсор к его правой границе (при этом появится специальный значок). Нажав и удерживая левую кнопку мыши, измените размер столбца.
- Для перемещения столбца нажмите левой кнопкой мыши на его заголовок и, удерживая ее, переместите столбец в нужное место.



**У каждой таблицы слева имеется специальная область, столбцы которой при горизонтальной прокрутке таблицы остаются неподвижными. Когда количество столбцов таблицы велико, и все они одновременно не умещаются на экране, наиболее информативные столбцы (такие как: название компонента, время удерживания и др.) можно при помощи мыши перенести в левую область и отрегулировать ширину всех столбцов. Если же столбцов не так много, то можно включить специальный режим работы без горизонтальной полосы прокрутки, при котором столбцы автоматически размещаются по всей ширине таблицы.**

#### Сортировка записей в таблицах

Для того, чтобы сортировать записи таблицы по какому-либо столбцу, щелкните мышью на заголовке данного столбца. В правой части заголовка столбца появится значок, показывающий, в каком направлении будет осуществляться сортировка:



Сортировка по возрастанию значений записей в данном столбце.



Сортировка по убыванию значений записей в данном столбце.

Направление сортировки меняется повторным щелчком мыши на заголовке столбца. Чтобы отменить сортировку записей по какому-либо столбцу, просто задайте сортировку по другому столбцу. Рекомендуется сортировать записи таблицы по возрастанию значений столбца **Время, мин.**

В некоторых случаях удобно проводить сортировку записей сразу по нескольким столбцам. В этом случае заголовки столбцов по которым осуществляется сортировка выбираются с удерживанием в нажатом состоянии клавиши **Shift** на клавиатуре компьютера.



Рассмотрим пример сортировки записей по двум столбцам. Необходимость подобной сортировки может возникнуть при работе с многоканальной хроматограммой. В такой ситуации, для удобства восприятия записей в таблицах, желательно в первую очередь сортировать записи по детекторному каналу, а во вторую очередь — по времени удерживания компонентов в пределах каждого канала.

**Шаг 1.** Выберите столбец **Детекторы**, щелкнув мышью по его заголовку в таблице **Компоненты**. При этом данные в таблице расположатся по возрастанию имен детекторов (или убыванию, если щелкнуть 2 раза, см. положение значка в правой части заголовка столбца). Компоненты внутри каждой группы детекторов будут расположены в хаотичном порядке. Вид таблицы **Компоненты** на этом этапе сортировки показан на рисунке 5.24.

**Шаг 2.** Удерживая нажатой клавишу **Shift**, щелкните мышью по заголовку столбца **Время, мин** в таблице **Компоненты**. При этом порядок расположения по детекторам сохранится, а компоненты в группе каждого детектора расположатся в порядке возрастания (или убывания, если щелкнуть два раза) времен удерживания.

Компоненты			
Расчет хроматограммы		Расчет анализа	
Время, мин	Название	Окно, %	Детектор
3,583	азот	5	ДТП-1
11,145	окись углерода	5	ДТП-1
17,107	этан	5	ДТП-1
2,033	кислород	5	ДТП-1
9,900	изобутан	5	ДТП-2
10,610	н-бутан	5	ДТП-2
6,033	пропан	5	ДТП-2
1,950	этан	5	ДТП-2
1,333	двуокись углерода	5	ДТП-2

Шаг 1. Выделение столбца "Детектор"

Компоненты			
Расчет хроматограммы		Расчет анализа	
Время, ...	Название	Окно, %	Детектор
2,033	кислород	5	ДТП-1
3,583	азот	5	ДТП-1
11,145	окись углерода	5	ДТП-1
17,107	этан	5	ДТП-1
1,333	двуокись углерода	5	ДТП-2
1,950	этан	5	ДТП-2
6,033	пропан	5	ДТП-2
9,900	изобутан	5	ДТП-2
10,610	н-бутан	5	ДТП-2

Шаг 2. Выделение столбца "Время"

Рисунок 5.24. Пример сортировки записей по двум столбцам

### Настройка списка хроматограмм

Таблица в окне **Список хроматограмм** также может быть оптимизирована для индивидуального использования. Настройка размеров и расположения столбцов данной таблицы выполняется так же, как и для всех остальных таблиц.

Вы можете сгруппировать данные в таблице по определенному признаку, воспользовавшись **панелью группировки**.



**Панель группировки** — это прямоугольная область в верхней части таблицы. Для группировки данных по выбранному столбцу необходимо перенести его заголовок на панель группировки. Группировка данных может производиться одновременно по нескольким столбцам. Пример использования панели группировки показан на рисунке 5.25.

Список хроматограмм							
Перетащите сюда заголовок столбца для группировки по этому столбцу							
Дата и время	N°	Проба	Название метода	Градуиров...	Метод?	Оператор	
12.05.2004 18:...	1.10	метафос-Р	Предел Р в стандарт...	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Иванов	
12.05.2004 18:...	1.11	шум-Р	Предел Р в стандарт...	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Иванов	
▶ 14.05.2004 9:2...	2.1	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Иванов	
14.05.2004 9:3...	2.2	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Иванов	
14.05.2004 9:3...	2.3	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Иванов	

а)

Список хроматограмм							
Градуировка? ▲							
Дата и время	N°	Проба	Название метода	Метод?	Оператор	Ко	
+ Градуировка?: Нет							
▶ - Градуировка?: Да							
14.05.2004 9:2...	2.1	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input checked="" type="checkbox"/>	Иванов	Ори	
14.05.2004 9:3...	2.2	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input type="checkbox"/>	Иванов	Ори	
14.05.2004 9:3...	2.3	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input type="checkbox"/>	Иванов	Ори	
14.05.2004 9:5...	2.4	мал. мерк.	Режим с Optima-5	<input type="checkbox"/>	Иванов	Ори	

б)

**Рисунок 5.25. Панель группировки: а) не задействована, б) задана группировка строк по столбцу “Градуировка”**

Если вам необходимо показать в списке хроматограммы, полученные за определенный период времени, воспользуйтесь элементами управления в нижней части окна списка хроматограмм (см. рисунок 5.26).

- Для отображения хроматограмм, полученных за последние X дней отметьте опцию **За период, дней** и укажите требуемый период.
- Для отображения группы хроматограмм, полученных начиная с некоторой даты, отметьте опцию **Начиная с даты** и выберите из выпадающего списка начальную дату.



В примере на рисунке 5.26 показан список с хроматограммами, полученными за три дня, начиная с 23 июня 2005 года.

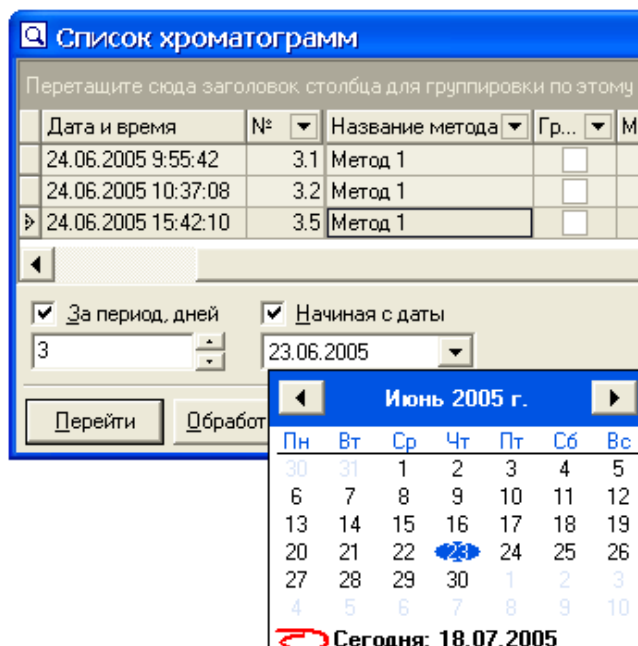


Рисунок 5.26. Пример отображения хроматограмм за определенный период времени

В случае, если вам требуется выделить в списке некоторую группу хроматограмм с каким-либо общим свойством, рекомендуется прибегнуть к фильтрации списка по определенному параметру. Для этого в заголовке столбца по которому будет выполняться фильтрация списка выберите из выпадающего списка нужный параметр.



#### Пример использования фильтра записей в списке хроматограмм:

В примере на рисунке 5.27 оператору требуется отобразить в списке только хроматограммы пробы “сероуглерод в гексане”. Для этого в заголовке столбца проба оператор открывает выпадающий список, и выбирает нужную пробу.

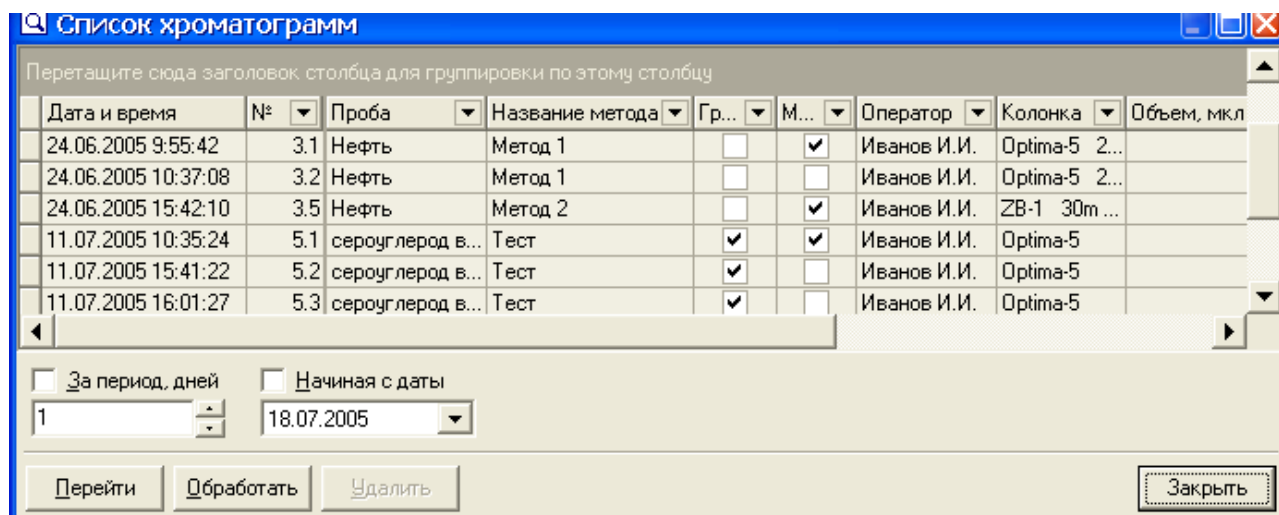
После включения фильтрации списка, в его нижней части появляется информационная полоса, показывающая, по какому признаку отображаются хроматограммы. Для того, чтобы вновь показать в списке все хроматограммы проекта, закройте эту полосу.

## 5.5 Обработка хроматограмм

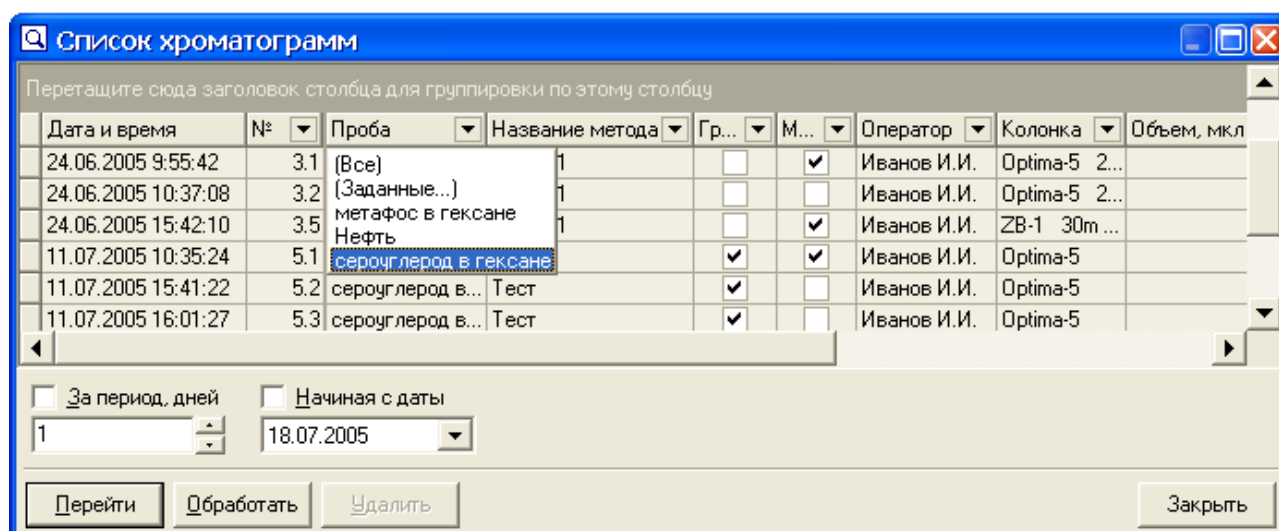
### 5.5.1 Особенности работы в процессе снятия хроматограмм

Во время снятия хроматограммы программа *Хроматэк Аналитик 2.5*, для привлечения внимания пользователя, автоматически отображает специальные индикаторы:

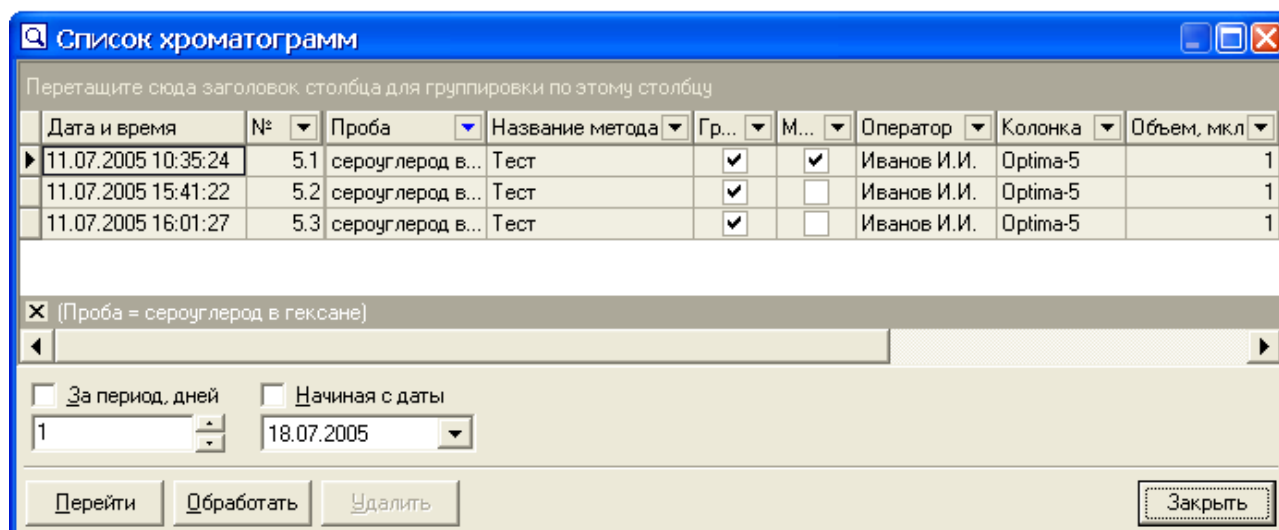
- изменяется внешний вид иконки программы на панели задач Windows, иконка становится анимированной (см. таблицу 5.1);
- в правом верхнем углу графика хроматограммы отображается мигающая красная надпись **Rec**, по желанию данный индикатор можно отключить (см. раздел 5.3.1).



а) Состояние 1. В списке отображены все хроматограммы проекта




б) Выбор фильтра по типу пробы "сероуглерод в гексане"



в) Состояние 2. В списке отображены хроматограммы пробы "сероуглерод в гексане"

Рисунок 5.27. Пример использования фильтра записей в списке хроматограмм

Программа *Хроматэк Аналитик 2.5* позволяет выполнять обработку хроматограмм как в процессе анализа, так и по его окончании. Во время снятия хроматограммы некоторые функции программы (например, навигация по снятым ранее хроматограммам проекта, корректировка градуировочного графика) запрещены. Тем не менее, часто требуется на этом этапе получить доступ ко всем возможностям программы. Если возникла такая необходимость, запустите вспомогательное окно программы, для этого:

- или выберите в меню **Вид** команду **Новое окно**;
- или нажмите на кнопку  на **Панели инструментов**.

Во вспомогательном окне доступны любые действия по обработке и просмотру хроматограмм, как текущего проекта, так и любого другого. На панели задач Windows иконка вспомогательного окна программы выглядит иначе, чем иконка главного (см. таблицу 5.1).

### 5.5.2 Заполнение паспорта хроматограммы

Назначение паспорта — хранение различных параметров хроматограммы. Поля паспорта, помимо обязательной информации (участвующей в хроматографических расчетах) могут содержать и необязательную, такую, как фамилия оператора, описание колонки, различные комментарии. Для удобства навигации по проекту, быстрого поиска нужной хроматограммы не рекомендуется пренебрегать заполнением этих полей паспорта.

Диалог **Паспорт** активизируется автоматически при старте анализа, если при проведении настройки проекта была включена соответствующая опция (см. раздел 5.2.4). Окно диалога содержит четыре закладки.

#### Закладка “Общее”

На данной закладке (рисунок 5.28):

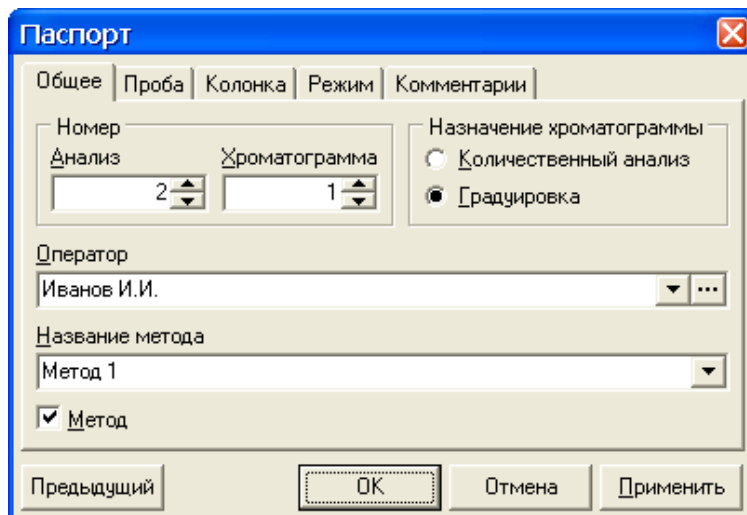


Рисунок 5.28. Паспорт хроматограммы. Закладка “Общее”

- Номера анализа и хроматограммы (**Анализ №** и **Хроматограмма №**) устанавливаются автоматически в соответствии с настройками проекта (см. раздел 5.2.4).



По номеру анализа происходит группировка хроматограмм для расчета средних значений и сходимости (расчет анализа). Поэтому хроматограммы, являющиеся параллельными измерениями одной пробы, должны иметь одинаковый номер анализа. При необходимости номер хроматограммы и анализа можно скорректировать вручную.

- Выберите **назначение хроматограммы**. Если данная хроматограмма используется для получения градуировочной зависимости компонентов, необходимо указать назначение — **Градуировка**.
- Из выпадающего списка **Оператор** выберите фамилию оператора. Для внесения новой фамилии в список, нажмите кнопку , расположенную справа от поля **Оператор**. На экране появится список операторов, показанный на рисунке 5.29.
- Установите признак **Метод**, если данная хроматограмма будет в дальнейшем использоваться как шаблон для проведения последующих анализов.
- Поле **Название метода** используется: в хроматограммах с назначением **Градуировка** — для группировки градуировочных точек, в хроматограммах с назначением **Количественный расчет** — для указания на тот график, по которому нужно производить расчеты. Названием метода может служить любая символьная строка.



Названия методов хроматограмм, входящих в одну группу градуировки, должны совпадать с точностью до символа. Например, хроматограммы, имеющие названия методов “Градуировка ПИД” и “Градуировка ПИД” не будут входить в одну группу градуировки (обратите внимание на лишний пробел во втором названии).

- Если есть необходимость скопировать содержимое полей предыдущего сохраненного паспорта, нажмите кнопку **Предыдущий**.

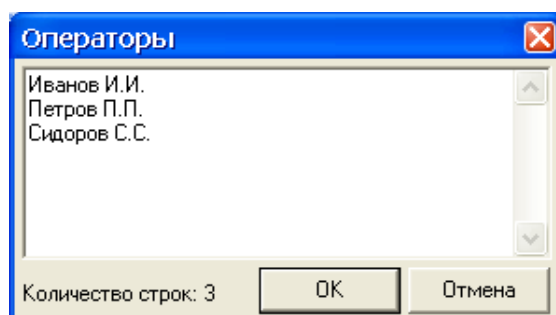


Рисунок 5.29. Заполнение списка фамилий операторов

Рисунок 5.30. Паспорт хроматограммы. Закладка “Проба”

### Закладка “Проба”

На данной закладке (рисунок 5.30):

- Введите название анализируемой **пробы** и укажите ее **объем** в мкл или **массу** в мкг.
- Укажите коэффициент **разведения** пробы или воспользуйтесь кнопкой **Пробоподготовка** для автоматического расчета этого коэффициента.

Для автоматического расчета в окне **Пробоподготовка** (рисунок 5.31) поставьте галочки у тех полей, которые будут участвовать в расчете, и укажите соответствующие значения:

Рисунок 5.31. Окно “Пробоподготовка”

- общий объем или общую массу пробы;
- объем экстракта — объем, из которого была отобрана аликвота для хроматографирования;
- дополнительный множитель — в случае необходимости пересчета единиц концентрации, либо если нужен какой-то другой множитель для окончательного расчета.




Формула автоматического расчета разведения указана в разделе [4.8.5](#).

- При необходимости укажите **Место** отбора и **Дату отбора пробы**. Для указания даты ее необходимо выбрать во встроенном календаре, в это же поле можно вписать время отбора (после даты) в формате чч:мм:СС.
- Поле **Виала** заполняется автоматически при работе с периферийными устройствами: ДАЖ, Парогазовый дозатор.



### Расчет объема газовой пробы:

В анализах газовых проб количество вещества, введенного в хроматограф, зависит от условий окружающей среды. Чтобы исключить эту ошибку необходимо учитывать колебания атмосферного давления и температуры. Для этого на закладке Проба нажмите кнопку , расположенную в поле Объем. Будет запущен диалог Объем газовой пробы (см. рисунок 5.32). В данном диалоге:

- Задайте Объем введенной пробы.
- Задайте Давление и Температуру окружающей среды, при которых проводится анализ, выбрав нужные единицы измерения.
- Если давление и температура окружающей среды в момент проведения анализа соответствуют Нормальным условиям, нажмите соответствующие кнопки.

В соответствии с ГОСТ 12.1.016-79 нормальными условиями считаются:

- Атмосферное давление 101.325 кПа (760 мм рт. ст.).
- Температура окружающей среды 20°C (293 K).

В результате проведенного расчета в поле Объем закладки Проба будет записан объем газовой пробы, приведенный к нормальным условиям.

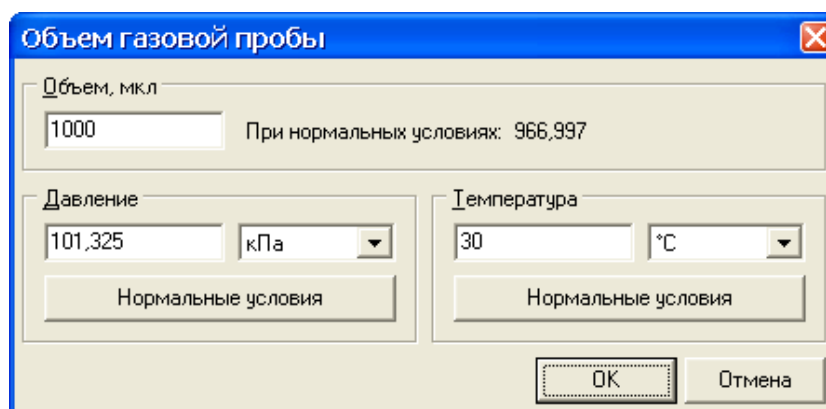



Рисунок 5.32. Калькулятор объема газовой пробы

### Закладка “Колонка”

На данной закладке (рисунок 5.33):

- Из выпадающего списка **Тип колонки** выберите нужную колонку. Для внесения новой колонки в список, нажмите кнопку , расположенную справа от поля **Тип колонки**. На экране появится список колонок, показанный на рисунке 5.34.
- Задайте **Мертвое время** колонки в минутах. Данный параметр используется в некоторых расчетах. Если он не задан, то за мертвое время берется время выхода первого пика.

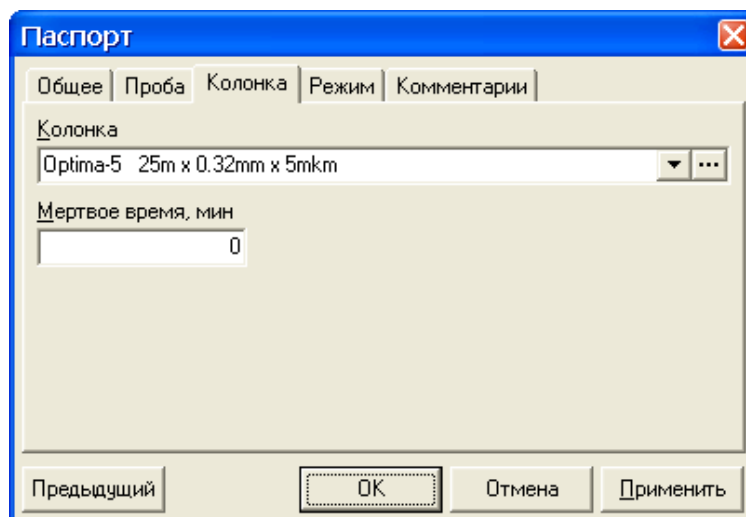


Рисунок 5.33. Паспорт хроматограммы. Закладка “Колонка”

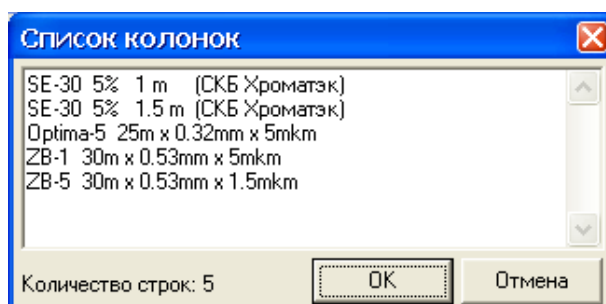


Рисунок 5.34. Пример списка колонок

### Закладка “Режим”

Данная закладка (рисунок 5.35) предназначена для просмотра режима, в котором проведен данный анализ. Редактирование режима запрещено.

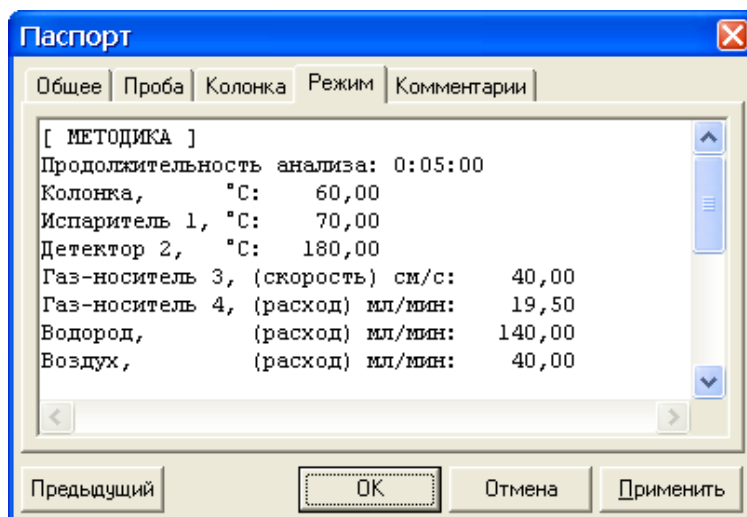


Рисунок 5.35. Паспорт хроматограммы. Закладка “Режим”

### Закладка “Комментарии”

Данная закладка (рисунок 5.36) служит для записи произвольной информации, облегчающей поиск нужной хроматограммы в проекте.

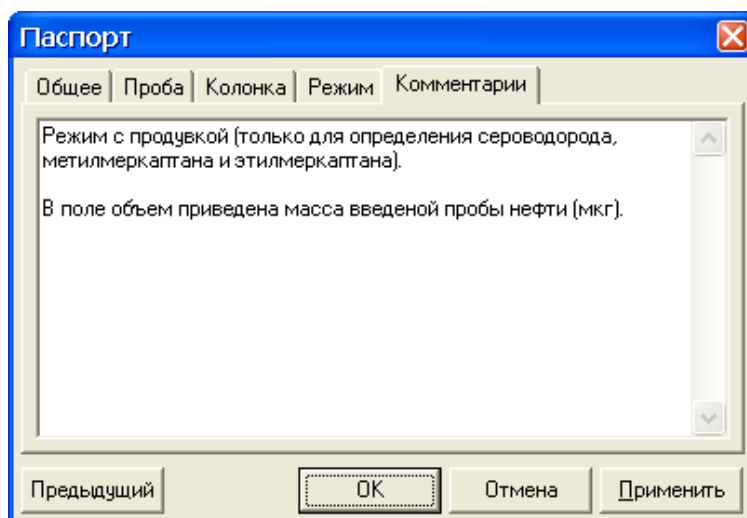


Рисунок 5.36. Паспорт хроматограммы. Закладка “Комментарии”



Паспорт является немодальным диалогом, то есть при его отображении на экране главное окно не блокируется и в нем можно выполнять любые действия.


### 5.5.3 Настройка графика хроматограммы

В ходе настройки графика вы можете:

- изменить цвет канала;
- включить или выключить отображение легенд на графике;
- включить или выключить каналы;
- задать размер графика;
- выбрать надписи над пиками.

Все вышеуказанные действия осуществляются с помощью диалога **Свойства хроматограммы**. Настройки свойств графика, кроме цвета канала, индивидуальны для проекта. Цвет канала действует одинаково для всех проектов на вашем компьютере.

Для вызова диалога активизируйте страницу с графиком (щелкните мышью в любом его месте), далее:

- или нажмите на кнопку ;
- или в меню **Вид** выберите команду **Свойства**;
- или используйте комбинацию клавиш **Alt+Enter**.

Диалог **Свойства хроматограммы** содержит три закладки.

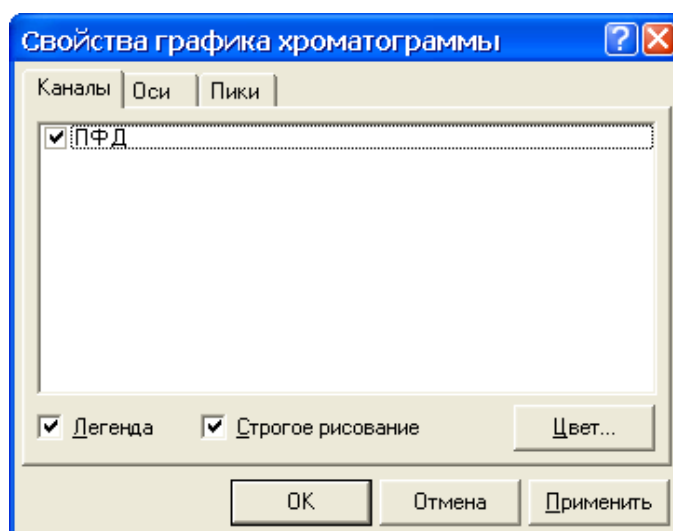


Рисунок 5.37. Свойства хроматограммы. Закладка “Каналы”

На закладке **Каналы** (рисунок 5.37):

- Отметьте **каналы**, которые необходимо выводить на экран.
- Для вывода **легенды** списка каналов на графике отметьте соответствующую опцию.

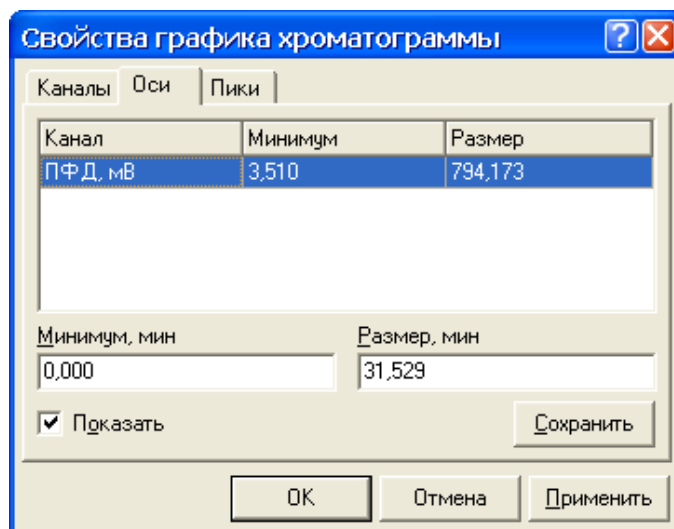
- Для включения высокой детализации вывода графика установите признак **Строгое рисование**. В этом случае гарантируется вывод значений всех точек при изменении размеров графика (окна программы). Данную опцию рекомендуется отключать при длинных хроматограммах.
- Нажав кнопку **Цвет**, настройте цвет отображения выделенного в списке канала. Это можно сделать также двойным щелчком мыши в строке списка каналов.



**Следует отметить, что при настройке цвет привязывается к названию канала, т.е. если вы поменяете цвет канала ЭЗД, то во всех проектах, где присутствует этот канал, его цвет будет изменен.**

На закладке **Оси** (рисунок 5.38):

- Установите размеры выводимых на экран каналов. При этом размер отклика каждого канала задается индивидуально, а по времени размеры общие для всех каналов.
- Выберите опцию **Показать** для отображения осей на графике хроматограммы.
- Нажмите кнопку **Сохранить** для фиксации текущего масштаба хроматограммы. При этом в проекте сохраняются все значения координат графика, установленные на данной закладке в текущий момент времени.



**Рисунок 5.38. Свойства хроматограммы. Закладка “Оси”**



**Назначение фиксированного масштаба и примеры практического использования данной функции подробно описано в примерах к разделу 5.5.4.**

На закладке **Пики** (рисунок 5.39) выберите из списка параметров те, которые будут отображаться над пиками.

- Для вывода **легенды** с расшифровкой надписей над пиками поставьте соответствующую отметку.
- Если необходимо отображение **базовой линии** под пиками, установите соответствующую опцию.

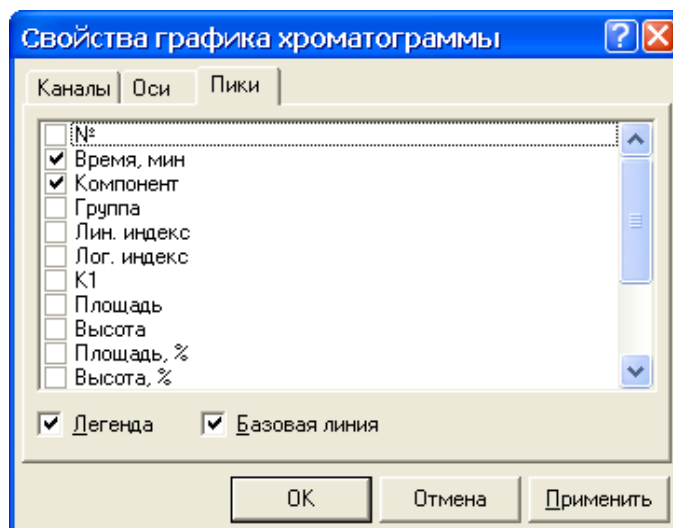


Рисунок 5.39. Свойства хроматограммы. Закладка “Пики”

#### 5.5.4 Визуальная оценка хроматограммы. Работа с графиком

После снятия хроматограммы (или в процессе снятия) рекомендуется:

- оценить уровень и характер шумов с тем, чтобы принять решение о целесообразности применения фильтрации (подробно фильтрация описана в разделе 5.5.5);
- оценить характер дрейфа нулевой линии для того, чтобы принять решение о необходимости его коррекции (подробно об этом говорится в разделе 5.5.6);
- при наличии на хроматограмме обратных (отрицательных) пиков принять решение об их инверсии (инверсия пиков описана в разделе 5.5.7).



**Также необходимо производить визуальную оценку хроматограммы после выполнения расчета (см. раздел 5.5.8) для того, чтобы принять решение о необходимости ручной корректировки пиков (см. раздел 5.5.9).**

По умолчанию автоматически устанавливается масштаб, при котором видна вся хроматограмма. Для того чтобы оценить характер хроматограммы у подножия пиков, необходимо воспользоваться операциями масштабирования. Для масштабирования хроматограммы не предусмотрено использование каких-либо элементов интерфейса — все действия выполняются с помощью мыши и клавиатуры. Используются следующие клавиши:

- Растягивание хроматограммы по амплитуде — Стрелка вверх.
- Сжатие хроматограммы по амплитуде — Стрелка вниз.
- Растягивание хроматограммы по времени — Стрелка вправо.
- Сжатие хроматограммы по времени — Стрелка влево.

Для того чтобы увеличить некоторый участок хроматограммы, нажмите левую кнопку мыши в одном из углов интересующей области и, не отпуская, переместите указатель мыши в противоположный угол. После отпускания кнопки выбранная область будет увеличена.

Для того чтобы вернуться к отображению на экране всей хроматограммы:

- или выполните на любом месте хроматограммы двойной щелчок мыши;
- или нажмите клавишу **Enter** (страница **Хроматограмма** должна быть активна).



Иногда оператору удобно представлять на экране не всю хроматограмму целиком, а лишь часть ее. Например, при анализе микропримесей в каком-либо растворителе пик растворителя на порядки превосходит пики примесей, хорошо виден только он один, тогда как оператора интересуют именно маленькие пики. Если у вас возникла подобная потребность, выделите наиболее интересующий вас участок хроматограммы и зафиксируйте его масштаб, как описано в разделе 5.5.3. Теперь для отображения хроматограммы в фиксированном масштабе нужно, удерживая нажатой клавишу **Shift**, выполнить в любом месте хроматограммы двойной щелчок мыши или нажать комбинацию клавиш **Shift+Enter**. Изменять фиксированный масштаб можно неограниченное количество раз.

## Работа с буфером обмена

Иногда пользователю требуется скопировать график хроматограммы, чтобы вставить его в другую хроматограмму (для визуального сравнения) или в другую программу (например Word). Копирование хроматограммы осуществляется с помощью буфера обмена.

Работа с буфером обмена осуществляется с помощью стандартных команд операционной системы *Windows* — **Вырезать**, **Копировать**, **Вставить**, расположенных в меню **Правка**. При выполнении команды копирования в буфер обмена будет помещена следующая информация:

- изображение хроматограммы в форматах точечного рисунка и метафайла;
- значение координаты “время” вертикальной линии маркера, если она показана на хроматограмме.

При выполнении команды вставки из буфера обмена будет выполнено следующее:

- если активным является график хроматограммы, то к нему будет добавлен новый канал для просмотра (таким образом можно сравнивать каналы разных хроматограмм на одном графике);
- если активным является элемент, который поддерживает вставку текста, то будет вставлено значение положения вертикальной линии маркера, указанное в минутах и долях минуты;
- если активным является элемент, который поддерживает вставку рисунков, то будет вставлено изображение хроматограммы.



Имеются приложения, которые поддерживают вставку из буфера обмена как текста, так и графики. В этом случае для достижения желаемых результатов рекомендуется пользоваться специальной вставкой.







### Работа с многоканальной хроматограммой

В случае многоканальной хроматограммы графики каналов располагаются один под другим. При этом один из каналов рисуется поверх остальных и является активным. Оси с надписями, отображаемые слева и снизу, относятся только к активному каналу, так как в общем случае масштабы каналов могут не совпадать и вообще иметь разные единицы измерения. Координаты указателя мыши, отображаемые в строке состояния программы, также относятся к активному каналу. Переместить канал наверх и, следовательно, сделать его активным, можно щелкнув мышью на его графике.



### Пример наложения хроматограмм:

Очень удобно для визуального сравнения хроматограмм, снятых в разных анализах, применять наложение каналов хроматограмм. Для наложения хроматограммы:

1. С помощью расположенных на панели инструментов кнопок навигации по проекту     выберите хроматограмму, из которой необходимо копировать канал.
2. Если открытая хроматограмма содержит несколько каналов, активизируйте интересующий канал щелчком мыши на его графике.
3. Нажатием кнопки  (копировать) скопируйте канал.
4. С помощью кнопок навигации откройте хроматограмму, в которую необходимо вставить канал хроматограммы.
5. Нажатием кнопки  (вставить) вставьте канал.

Добавленные (дополнительные) каналы автоматически сохраняются в целевой хроматограмме. Каждому из накладываемых каналов присваивается идентификатор, например: “Доп-1 [ПФД] №1.4”, “Доп-2 [ПВД] №2.5”. Здесь “№1.4”, “№2.5” — составной номер анализа и хроматограммы текущего проекта, откуда взят канал, идентификатор которого указан в квадратных скобках. Таким образом вы можете наложить до десяти дополнительных каналов. С любым из наложенных каналов можно выполнять те же действия, что и с основным.

Для удаления добавленного канала активизируйте его щелчком мыши на графике и нажмите клавишу Delete на клавиатуре. Основной канал, в отличие от добавленного, не может быть удален.

Визуальное сравнение каналов на многоканальной хроматограмме удобно проводить с помощью клавиш на клавиатуре. Нажатие клавиши Пробел осуществляет масштабирование каналов относительно активного по размеру, нажатие сочетания клавиш Shift+Пробел осуществляет масштабирование каналов по размеру, а также приводит в соответствие оси амплитуды каналов относительно активного.

## Использование маркера

Вертикальная линия маркера на графике хроматограммы служит для того, чтобы сгладить некоторое неудобство использования единицы измерения времени в минутах и долях минуты, принятой в большинстве хроматографических программ, вместо более привычных часов, минут и секунд. Так при перемещении по строкам таблиц, элементы которых имеют время (компоненты, пики и др.), вертикальная линия маркера на хроматограмме также перемещается в соответствующее положение. Кроме того, при перемещении по таблице компонентов на графике хроматограммы отображаются границы окна допуска. Установив при помощи мыши положение маркера на графике, можно скопировать значение, соответствующее времени его положения, в буфер обмена и затем вставить в любой элемент редактирования текста.

### 5.5.5 Фильтрация хроматограммы

Иногда высокое значение уровня шума детектора затрудняет обработку хроматограммы и. В этом случае допускается применение фильтрации. *Хроматэк Аналитик 2.5* поддерживает три метода фильтрации, любой из которых может быть выполнен как отдельная операция, выбираемая в меню **Обработка | Операции**, так и в составе последовательности операций **Расчет хроматограммы** (см. раздел 5.5.8).

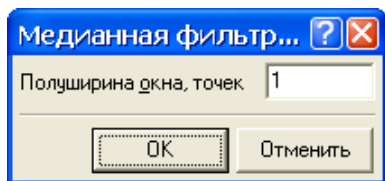
Подробно фильтрация хроматограмм описана в разделе 4.3.



**После выполнения любой фильтрации вернуть хроматограмму к первоначальному виду уже нельзя.**

#### Медианная фильтрация

Наиболее часто для снижения уровня шумов и подавления выбросов на хроматограмме используется **Медианная фильтрация**.



Для запуска медианной фильтрации:

- Выберите команду **Медианная фильтрация** в меню **Обработка | Операции**.
- В появившемся диалоговом окне (см. рисунок 5.40) задайте значение **полуширины окна** в точках и нажмите кнопку **ОК**.

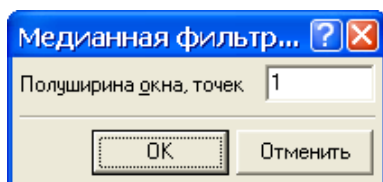
**Рисунок 5.40. Диалог “Медианная фильтрация”**



**Значение полуширины окна при настройке следует выбирать минимальным и постепенно увеличивать его, если результат все еще неудовлетворителен.**

#### Гауссова фильтрация

Этот вид фильтрации служит для сглаживания профиля хроматограммы. Как и все другие, гауссов фильтр искажает исходные данные, поэтому пользоваться им следует только в крайних случаях.



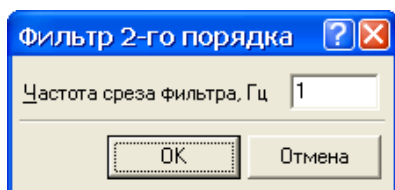
Для запуска гауссовой фильтрации:

- Выберите команду **Гауссова фильтрация** в меню **Обработка | Операции**.
- В появившемся диалоговом окне (см. рисунок 5.41) задайте значение **полуширины окна** в точках и нажмите кнопку **ОК**.

Рисунок 5.41. Диалог “Гауссова фильтрация”

### Фильтр 2-го порядка

Этот вид фильтрации служит для подавление высокочастотных шумов на хроматограмме. При использовании фильтра выбирайте частоту среза как можно выше, т.к. в этом случае искажение минимально.



Для запуска фильтра 2-го порядка:

- Выберите команду **Фильтр 2-го порядка** в меню **Обработка | Операции**.
- В появившемся диалоговом окне (см. рисунок 5.42) установите значение **частоты среза фильтра** в герцах и нажмите кнопку **ОК**.

Рисунок 5.42. Диалог “Фильтр 2-го порядка”

## 5.5.6 Коррекция нулевой линии

Часто на хроматограмме наблюдается значительный дрейф нулевой линии, который может затруднять процесс разметки пиков и тем самым вносить искажения в количественный расчет. Если этот дрейф носит систематический характер, *Хроматэк Аналитик 2.5* позволяет минимизировать его негативное влияние. Для этого служит специальная операция **Вычитание хроматограммы**.

Смысл этой операции заключается в следующем: из каждой точки графика хроматограммы, которую подвергают коррекции, вычитается соответствующая (по координатной оси “Время”) точка хроматограммы-профиля. Если одна из хроматограмм короче по времени, чем другая, результирующая длительность хроматограммы будет равна меньшей.

**Профиль** — хроматограмма, содержащая дрейф нулевой линии, близкий по форме тому, который требуется скорректировать, но не содержащая пиков. Чаще всего в качестве профиля коррекции используется хроматограмма, полученная без ввода пробы (холостой анализ).

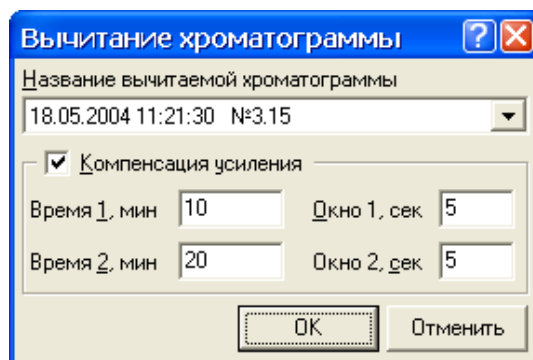


Рисунок 5.43. Операция “Вычитание хроматограмм”

Операция **Вычитание хроматограмм** позволяет выполнить любой из трех возможных вариантов коррекции нулевой линии:

#### Коррекция монотонного дрейфа

Если дрейф монотонен (постоянное увеличение фона с некоторого момента до конца анализа), профиль не требуется. Просто укажите в диалоге **Вычитание хроматограмм** время начала и окончания дрейфа (**время 1** и **время 2**), а так же отметьте опцию **Компенсация усиления**.

#### Коррекция стабилизирующегося дрейфа

В том случае, если дрейф на хроматограмме стабилизируется во время анализа, для проведения его коррекции:

- в выпадающем списке диалога выберите профиль (хроматограмму холостого анализа);
- задайте время начала и окончания дрейфа (**время 1** и **время 2**);
- если величина дрейфа в профиле меньше, чем в корректируемой хроматограмме, отметьте опцию **Компенсация усиления**.

Разумеется, идеального результата добиться трудно, поскольку на хроматограмме холостого анализа могут присутствовать ложные пики (пики компонентов, отсутствующих в пробе, но присутствующих в хроматографическом тракте в качестве загрязнителей). Если при вычитании хроматограмм времена удерживания этих пиков различаются хотя бы на одну–две секунды, полного их устранения не происходит, они частично приобретают обратный, инвертированный характер (см. рисунок 5.44). Для того чтобы избежать этого, рекомендуется хроматограмму–профиль предварительно обработать фильтром 2-го порядка, с частотой среза 0.5-1 Гц (см. раздел 5.5.5).



**После выполнения операции Вычитание хроматограммы, вернуть хроматограмму к первоначальному виду уже нельзя.**

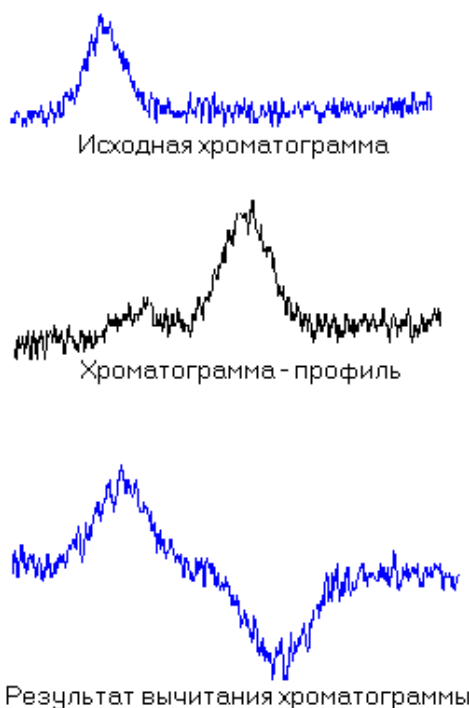


Рисунок 5.44. Вычитание профиля со смещенным ложным пиком

### 5.5.7 Инверсия хроматограммы

В некоторых случаях на хроматограмме могут присутствовать обратные (отрицательные) пики. Пример отрицательного пика показан на рисунке 5.45.а.

В *Хроматэк Аналитик 2.5* не предусмотрена автоматическая разметка таких пиков, однако их можно инвертировать. Для этого служит операция **Инверсия хроматограммы**, запускаемая выбором одноименной команды в меню **Обработка | Операции**.



Пример инверсии участка хроматограммы (см. рисунок 5.45.а):

1. В меню **Обработка | операции** выберите команду **Инверсия хроматограммы**.
2. В появившемся на экране диалоге (показан на рисунке 5.45.в) нажмите кнопку **Добавить** для добавления нового участка инверсии. В диалоговом окне появится новая пустая строка.
3. В соответствующих столбцах введите начало и окончание участка в минутах (в данном примере начало участка — 4.4 мин., окончание — 5 мин.)
4. Выберите из выпадающего списка в крайнем правом столбце канал, на котором будет выполнена инверсия (в данном примере — ПФД). Если канал не выбран, инверсия будет осуществлена на соответствующих участках всех каналов хроматограммы.
5. Нажмите кнопку **Ок** для выполнения операции. Результат инверсии в данном примере показан на рисунке 5.45.б

Вы можете задать сразу несколько участков хроматограммы, которые будут инвертированы.



Рисунок 5.45. Инверсия отрицательного пика

а) пик до инверсии, б) пик после инверсии, в) диалог операции "Инверсия хроматограммы"

### 5.5.8 Расчет хроматограммы


После снятия хроматограммы должен быть произведен ее расчет. В *Хроматэк Аналитик 2.x* имеется возможность быстрой автоматической обработки хроматограммы при помощи последовательности операций, называемой **Расчет хроматограммы**. Данная последовательность может выполняться автоматически по окончании анализа (в случае если включена соответствующая опция в диалоге **Настройка проекта**, см. раздел 5.2.4) и/или вызываться оператором неограниченное количество раз практически на любом этапе обработки хроматограмм.

Последовательность содержит следующие базовые операции:

- Медианная фильтрация (по умолчанию операция отключена).
- Интегрирование.
- Теоретические тарелки (по умолчанию операция отключена).
- Идентификация.
- Градуировочные коэффициенты.
- Количественный расчет.
- Отчет хроматограммы (по умолчанию операция отключена).
- Внешний расчет (по умолчанию операция отключена).

В зависимости от решаемой задачи в последовательность могут быть добавлены дополнительные операции.

Перед первоначальным использованием **Расчета хроматограммы**, а также для любого последующего изменения параметров операций, входящих в последовательность, порядка их выполнения, необходимо произвести настройку диалога. Для вызова диалога настройки последовательности:

- или в меню **Обработка** выберите команду **Расчет хроматограммы**;
- или нажмите на кнопку  **Расчет**, расположенную на **Панели инструментов**.

В данном диалоге (см. рисунок 5.46):

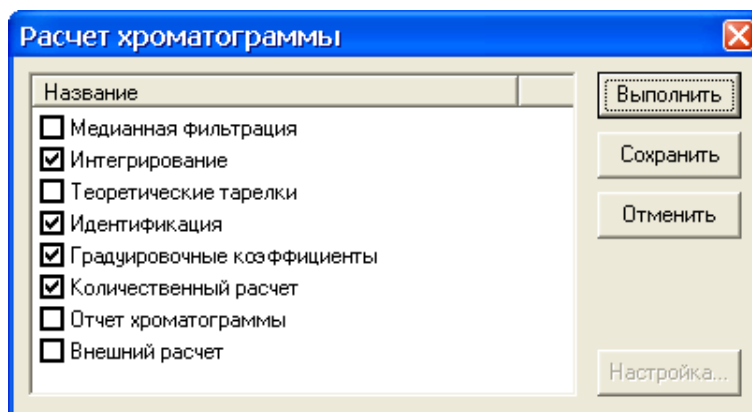


Рисунок 5.46. Настройка расчета хроматограммы

- Для настройки операции, входящей в последовательность, выделите ее мышью в списке и нажмите кнопку **Настройка**.
- С помощью кнопки **Сохранить** можно зафиксировать в текущей хроматограмме настройки последовательности, не выполняя ее.
- Нажатие на кнопку **Выполнить** закрывает диалог настройки и выполняет последовательность операций над текущей хроматограммой.
- Кнопка **Отменить** отменяет все произведенные изменения в настройках и закрывает диалог.

Отмеченные галочками операции включены в последовательность (активны). Если вы хотите включить неактивную операцию в последовательность, установите соответствующую галочку.



**При запуске последовательности операции выполняются одна за другой, согласно положению в списке, сверху вниз. Не отмеченные галочкой операции не выполняются.**

### Контекстное меню расчета хроматограммы

Добавлять, удалять операции, перемещать их в пределах последовательности можно с помощью контекстного меню, вызываемого при щелчке правой кнопкой мыши в списке операций (см. рисунок 5.47).

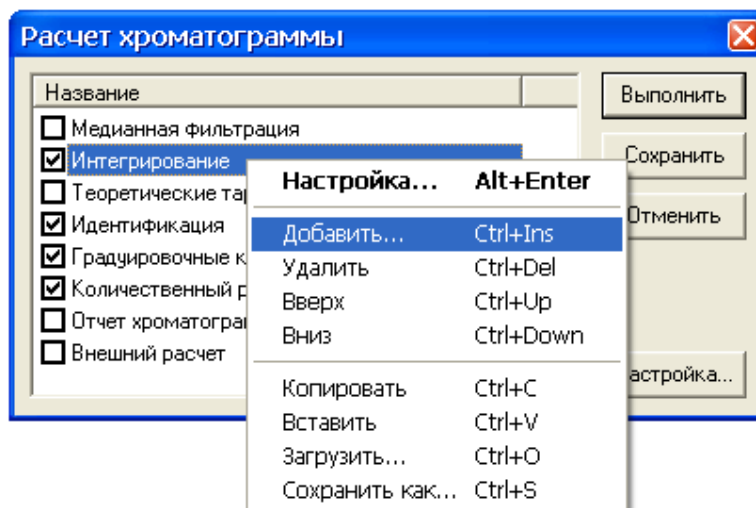


Рисунок 5.47. Контекстное меню расчета хроматограммы

В данном диалоге:

- Нажмите кнопку **Настройка** для запуска диалога настройки выделенной в списке операции.
- Для добавления в последовательность операции нажмите кнопку **Добавить**. При этом будет открыт диалог **Выбор операции**, представленный на рисунке 5.48. По умолчанию часть операций скрыта, для их отображения в списке установите признак **Показать все операции**. Для добавления операции выделите ее мышью в списке и нажмите кнопку **Ок**. После чего можно провести настройку добавленной операции.
- Для удаления операции из последовательности нажмите кнопку **Удалить**.
- Кнопки **Вверх** и **Вниз** позволяют переместить выделенную операцию для изменения очередности ее выполнения.
- Для копирования настроек последовательности операций в буфер обмена выберите команду **Копировать**.
- Для вставки настроек последовательности операций из буфер обмена в текущую последовательность выберите команду **Вставить**.
- Для того чтобы загрузить, ранее сохраненные, настройки последовательности операций из файла выберите команду **Загрузить**.
- Чтобы сохранить настройки последовательности операций в файле выберите команду **Сохранить как**.

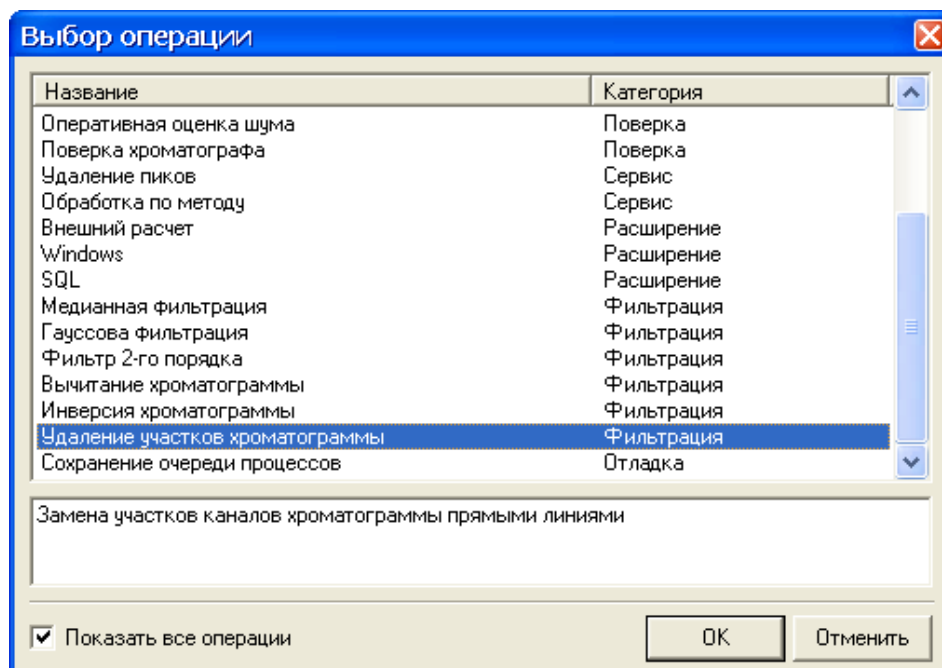


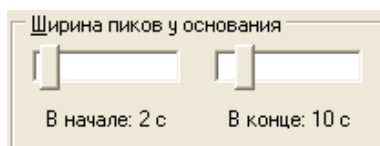
Рисунок 5.48. Добавление операций в последовательность

### Настройка операций: медианная фильтрация

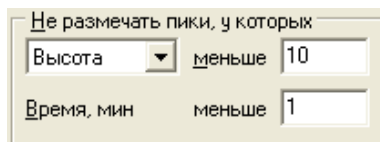
Медианная фильтрация по умолчанию отключена. Причина этого в том, что любая фильтрация искажает хроматограмму, и поэтому применять ее следует с осторожностью. Рекомендуется перед применением фильтрации, предварительно визуально оценив уровень шумов детектора, принять решение о ее целесообразности. Желательно применять фильтрацию в виде одиночной операции. Если же высокий шум детектора, узкие всплески и провалы нулевой линии носят систематический характер, включите эту операцию и произведите ее настройку. Диалог настройки медианного фильтра описан в разделе 5.5.5.

### Настройка операций: интегрирование

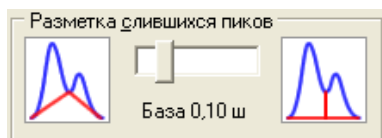
Назначение интегрирования — обнаружение и разметка пиков на хроматограмме, расчет их площадей и высот. На странице **Общие настройки** диалога **Интегрирование** (см. рисунок 5.49) задайте основные параметры интегрирования.



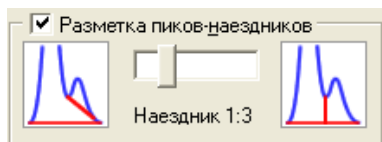
Задайте ожидаемую ширину пика в секундах. Чем больше данный параметр, тем более широкие пики могут быть размечены. Если данный параметр мал, широкие пики воспринимаются программой, как дрейф нулевой линии и не размечаются.



Для того, чтобы запретить разметку некоторых пиков, вы можете задать пороговое значение **площади, высоты** или **ширины**. Если соответствующий параметр пика окажется меньше заданного значения, этот пик не будет размечен.



При уменьшении параметра **База** программа будет стремиться разметить слившиеся пики, как отдельностоящие. При увеличении параметра слившиеся пики будут размечены с общей базовой линией.



При настройке разметки пиков-наездников увеличение отношения высот первого и второго пиков приводит к уменьшению числа пиков, которые могли бы быть размечены, как наездники. Все большее число пиков в данном случае будет размечено, как слившиеся. Если вы не желаете выполнять разметку наездников, отключите опцию **Разметка пиков-наездников**.



Вы можете включить опцию **Корректировка пиков-наездников**. В этом случае площадь пика-наездника будет вычислена, как показано на рисунке слева, однако визуально на графике хроматограммы такая разметка показана не будет.



**Более подробно о параметрах интегрирования см. в разделе 4.4.**

Иногда подбором параметров интегрирования добиться корректной разметки пиков удастся не на всей хроматограмме, а лишь на некотором ее участке (обычно в начале). В других случаях на хроматограмме могут присутствовать пики, не участвующие в расчете, а их разметка может мешать визуальному восприятию хроматограммы. Для тонкой настройки разметки пиков на хроматограмме могут быть использованы **События интегрирования**. Диалог настройки событий интегрирования показан на рисунке 5.50 (страница “События интегрирования”).

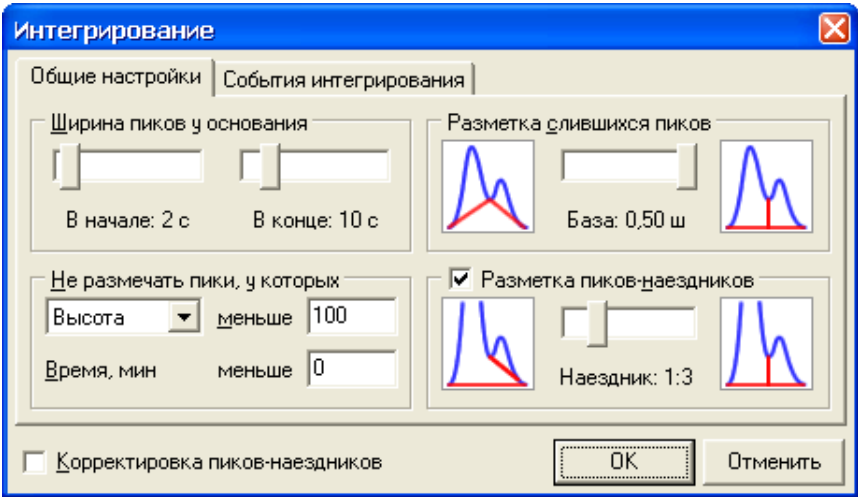


Рисунок 5.49. Окно операции “Интегрирование”. Страница “Общие настройки”

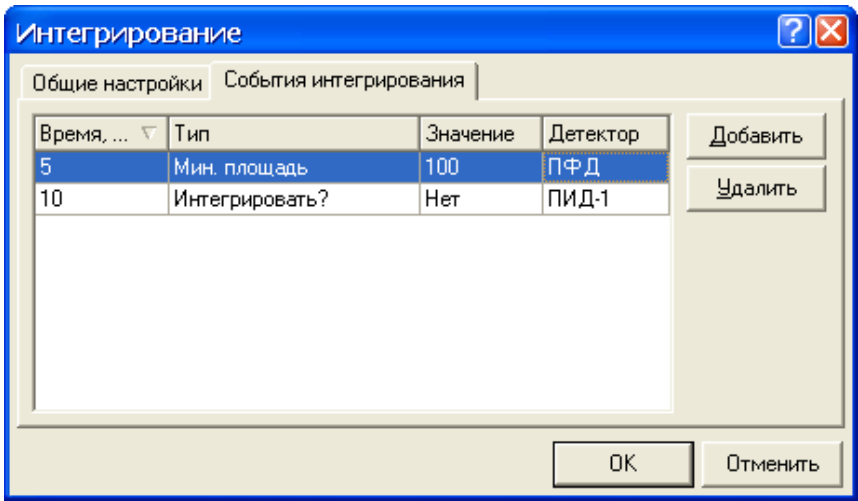


Рисунок 5.50. Окно операции “Интегрирование”. Страница “События интегрирования”



Рассмотрим пример создания двух событий интегрирования (см. рисунок 5.50). Допустим, требуется выполнить интегрирование двухканальной хроматограммы (ПФД/ПИД) со следующими условиями: на канале ПФД, начиная с 5 минут, разметка пиков не должна выполняться, а на канале ПИД-1, начиная с 10 минут, необходимо разметить только те пики, чья площадь больше 100 мВ\*с. Для того чтобы настроить события интегрирования в соответствии с заданными условиями:

- В диалоговом окне Интегрирование перейдите на закладку События интегрирования.
- Два раза нажмите кнопку Добавить для создания двух событий интегрирования.
- Для первого события введите значение Время, мин — 5 мин., выберите из выпадающего списка Тип события детектирования — Интегрировать?, Значение события детектирования — Нет, Детектор — ПФД.
- Для второго события введите значение Время, мин — 10 мин., выберите из выпадающего списка Тип события детектирования — Мин. площадь, Значение события детектирования — 100, Детектор — ПИД-1.
- Нажмите кнопку ОК.

Событие интегрирования действует по заданному детектору с указанного момента времени до следующего аналогичного события или до окончания хроматограммы. Если в столбце **Детектор** ничего не указано, то данное событие действует по всем детекторам одновременно.



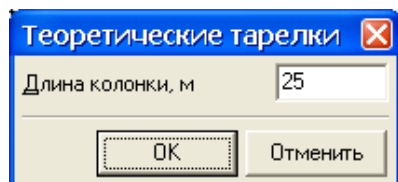
Настройка алгоритма разметки с использованием событий интегрирования имеет смысл, если ожидается обработка серии хроматограмм со сходными, повторяющимися особенностями базовой линии. В противном случае рекомендуется ручная коррекция пиков.



Если в канале хроматограммы присутствуют пики, созданные или измененные вручную, то автоматического обнаружения новых пиков в данном канале не производится.

### Настройка операций: теоретические тарелки

Назначение операции — расчет числа теоретических тарелок колонки. По умолчанию операция отключена, в большинстве задач данный расчет выполнять не требуется. Для выполнения расчета включите и настройте операцию (диалог настройки показан на рисунке 5.51).



В диалоге настройки операции укажите длину колонки в метрах. Если необходимо выполнить расчет теоретических тарелок не на метр длины, а для всей колонки, укажите значение длины — 1.

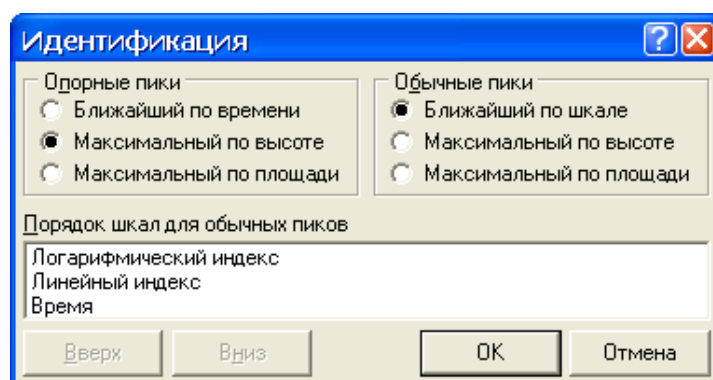
**Рисунок 5.51. Окно операции “Теоретические тарелки”**

В расчете участвует значение мертвого времени, задаваемое в паспорте хроматограммы (см. рисунок 5.33).

Данная операция всегда выполняется только после операции **Интегрирование**. Результат расчета теоретических тарелок для каждого размеченного пика выводится в столбце **Теор. тарелки** на странице **Расчет хроматограммы**.

**Настройка операций: идентификация**

Назначение идентификации — установка соответствия между заранее заданными компонентами и обнаруженными пиками на хроматограмме. Диалог настройки данной операции показан на рисунке 5.52.



**Рисунок 5.52. Окно операции “Идентификация”**

Для настройки операции:

- Выберите параметр, по которому будут идентифицироваться опорные пики при попадании нескольких пиков в окно удерживания компонента.
- Выберите параметр идентификации обычных пиков.
- Используя кнопки **Вверх** и **Вниз** установите порядок шкал идентификации обычных пиков.

В общем случае, схема идентификации пиков на хроматограмме может быть следующей: опорные пики — по высоте, обычные пики — ближайший по шкале, порядок шкал следующий: логарифмический индекс, линейный индекс, время.



Более подробная информация представлена в разделе 4.5.

### Настройка операций: градуировочные коэффициенты

Назначение операции — расчет коэффициентов градуировочных функций у компонентов. Диалог настройки данной операции показан на рисунке 5.53.

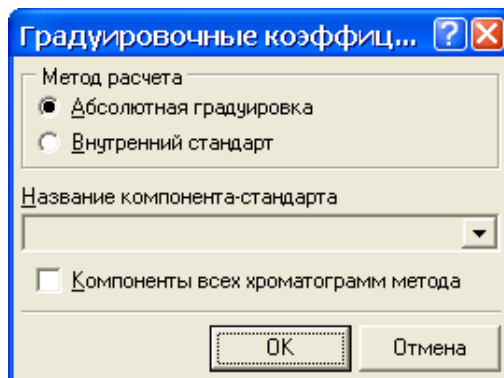


Рисунок 5.53. Окно операции “Градуировочные коэффициенты”

Для настройки операции:

- Выберите метод расчета градуировочных коэффициентов.
- Установите отметку, если необходимо обновить градуировочные коэффициенты у компонентов всех хроматограмм текущего метода, который указан в паспорте хроматограммы. Если эта отметка не установлена, в группе градуировочных хроматограмм всей информацией о градуировке будет обладать только последняя хроматограмма, если отметка установлена — любая хроматограмма в группе.
- При расчете по методу внутреннего стандарта выберите название компонента-стандарта.

Если у компонента отсутствуют градуировочные точки, то при выполнении операции градуировочные коэффициенты остаются без изменений.



Более подробная информация представлена в разделе 4.6.

### Настройка операций: количественный расчет

Назначение — расчет концентраций компонентов и процентных соотношений. Диалог настройки данной операции показан на рисунке 5.54.

Для настройки операции:

- Задайте метод расчета.
- При расчете методом процентной нормализации выберите тип отклика (площадь или высота), по которому будет производиться расчет.

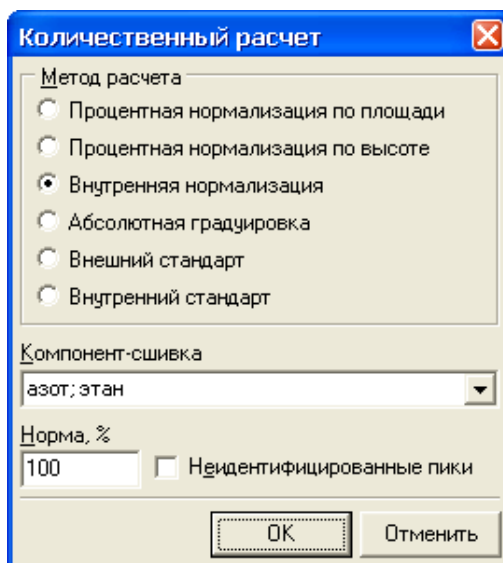


Рисунок 5.54. Окно операции “Количественный расчет”

- В случае расчета методом внутренней нормализации укажите коэффициент нормализации. При проведении анализа одновременно на нескольких детекторных каналах, вы можете выбрать из списка компонент для сшивки каналов. Если компонентов сшивки несколько, укажите их названия через точку с запятой.
- При расчете методом внутреннего или внешнего стандарта выберите в выпадающем списке компонент-стандарт. Если вы будете использовать более одного стандарта, выберите пустую строку. В этом случае для каждого компонента необходимо назначить индивидуальный стандарт в столбце **Вн. стандарт** таблицы **Компоненты** (см. раздел 5.4.3).
- При необходимости выберите расчет по неидентифицированным пикам.



Более подробная информация представлена в разделе 4.7.

### Настройка операций: отчет хроматограммы

Назначение операции — сохранение, просмотр и печать стандартного отчета хроматограммы. Данная операция в последовательности по умолчанию отключена, поскольку не всегда имеется необходимость в печати отчета каждой хроматограммы.

Подробно процесс настройки **Отчета хроматограммы** описан в разделе 5.5.16.

### Настройка операций: внешний расчет

Назначение операции — запуск специализированных программ обработки. Поскольку эти программы предназначены для конкретных анализов, данная операция в стандартной последовательности отключена. Подробно процесс настройки **Внешнего расчета** описан в разделе 5.6.

## Быстрый расчет хроматограммы

В случае, если есть необходимость выполнить **Расчет хроматограммы** без изменения настроек, достаточно нажать на клавиатуре клавишу F9.



**Нажимайте клавишу F9 всякий раз после того, как вы выполняете какую-либо единичную операцию обработки (исключая операции Отчет хроматограммы и Отчет анализа), проводите ручную корректировку разметки пиков либо изменяете содержимое столбцов таблицы Компоненты.**

### 5.5.9 Ручная корректировка и удаление разметки пиков

С помощью настройки параметров операции **Интегрирование** в последовательности **Расчет хроматограммы** не всегда удается добиться автоматической корректной разметки пиков на хроматограмме. Для устранения этой проблемы прямо на графике хроматограммы можно визуальнo откорректировать положение характерных точек пика. Кроме того, некоторые пользователи всегда производят расстановку пиков вручную.

Существуют следующие типовые операции по ручному редактированию пиков на хроматограмме:

- создание нового пика в активном канале;
- корректировка положения точек начала, вершины и окончания выделенного пика;
- удаление выделенного пика.



**Пример ручной корректировки пиков:**

Пример неправильной разметки пика показан на рисунке 5.55.а. Для корректировки положения окончания пика проделайте следующие действия:

1. Нажмите и удерживайте клавишу Ctrl во время всей операции корректировки (курсор мыши примет форму креста).
2. Подведите курсор к базовой линии под большим пиком (она отображается пунктиром) и, когда курсор вновь примет форму стрелки (знак того, что он попал в область нулевой линии), нажмите левую кнопку мыши. При этом у пика будут выделены характерные точки начала, вершины и окончания (рисунок 5.55.б).
3. Подведите курсор к точке окончания пика, нажмите левую кнопку мыши и, удерживая ее, переместите точку окончания пика в нужное место (рисунок 5.55.в).
4. После корректировки разметки сделайте перерасчет хроматограммы (нажмите клавишу F9).

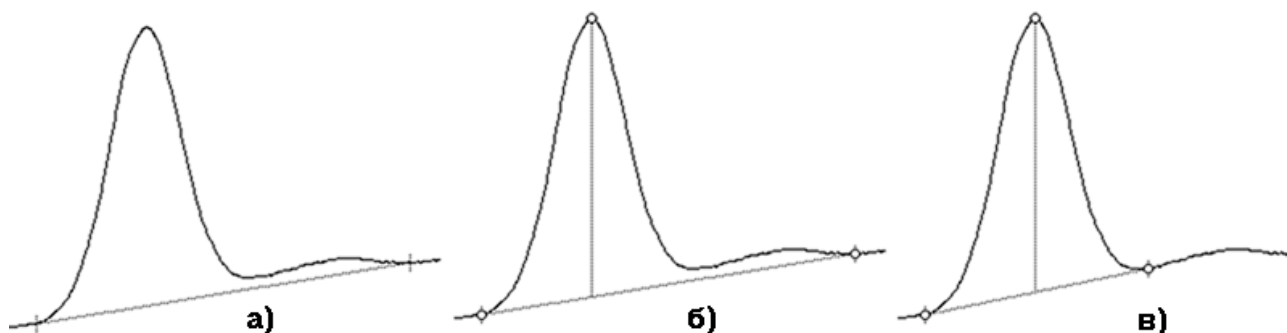


Рисунок 5.55. Пример корректировки разметки пика

а) пик размечен неправильно; б) выделение пика; в) перенос окончания пика.



После проведения ручной корректировки пиков на хроматограмме, при выполнении Расчета хроматограммы, операция Интегрирование не производит поиск новых пиков, а только пересчитывает площади и высоты существующих. Это сделано для того, чтобы вся работа по ручной корректировке пиков, выполненная во время текущего анализа, не была сведена на нет автоматической разметкой по его окончании. Для того чтобы производилось автоматическое обнаружение новых пиков, на хроматограмме не должно быть пиков, скорректированных вручную. Если возникла необходимость провести автоматическую разметку после процедуры ручной корректировки, все пики нужно удалить.

### Удаление разметки пиков с помощью одноименной операции

Для удаления пиков в меню **Обработка | Операции** выберите команду **Удаление пиков** (диалог данной операции показан на рисунке 5.56).

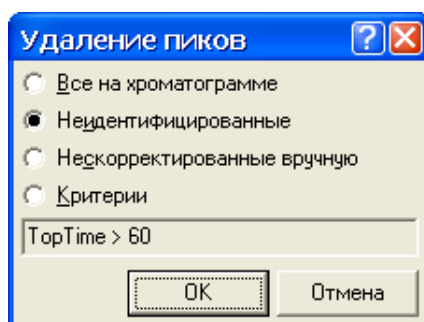


Рисунок 5.56. Диалог операции “Удаление пиков”

- Выберите критерий **Все на хроматограмме** для удаления разметки всех пиков.
- Часто на хроматограмме обнаруживаются “лишние” пики, не соответствующие анализируемым компонентам, но удовлетворяющие заданным критериям интегрирования (см. рисунок 5.57). Выберите критерий **Неидентифицированные**, если хотите удалить их разметку.
- Установите опцию **Нескорректированные вручную**, чтобы удалить разметку пиков, для которых не проводилась ручная корректировка.

- Иногда бывает необходимо удаление пиков на хроматограмме по другим критериям. Для задания пользовательского **критерия** у операции удаления пиков существует специальное поле ввода. Например, если ввести туда **TopTime > 60**, на хроматограмме будут удалены пики с временем удерживания больше 60 минут.

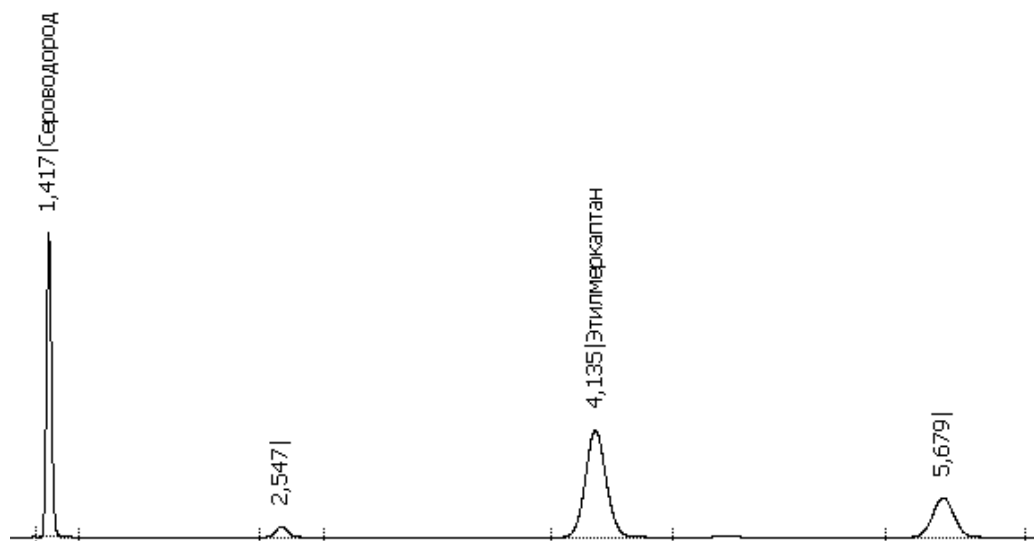


Рисунок 5.57. Неидентифицированные пики



Операцию Удаление пиков с критерием Неидентифицированные удобно включать в последовательность Расчет хроматограммы после операции Идентификация. Настройка последовательности описана в разделе 5.5.8.

### Удаление разметки пиков вручную

Для удаления пика вручную выделите его на хроматограмме, как описано в примере ручной корректировки (см. стр. 239 пп. 1-2 ) и нажмите на клавиатуре компьютера клавишу Delete.

### 5.5.10 Создание и изменение компонентов. Работа с таблицами

После проведения **Расчета хроматограммы**, пики на ней, по выбранным критериям идентификации, будут сопоставлены с соответствующими записями в таблице **Компоненты** и над пиками, в зависимости от настроек свойств графика хроматограммы (см. раздел 5.5.3) появятся надписи, характеризующие каждый пик (название, время удерживания, площадь и т.д.).

На начальном этапе формирования метода записи в таблице **Компоненты** отсутствуют и их необходимо создать.



Перед созданием списка компонентов все таблицы должны быть настроены в соответствии с выбранным методом количественного расчета, см. раздел 5.4.

Создание списка компонентов может быть осуществлено двумя способами: автоматически (по обнаруженным пикам на хроматограмме) и вручную.

### Создание списка компонентов вручную

Для создания новой записи в таблице **Компоненты** активизируйте ее щелчком мыши в любом ее месте. Далее:

- или из меню **Правка** выберите пункт **Добавить запись**;
- или щелчком правой кнопки мыши откройте контекстное меню и выберите пункт **Добавить запись**;
- или нажмите на клавиатуре комбинацию клавиш **Alt+Ins**.

В список будет добавлена строка с заполненными по умолчанию полями **Окно %**, **Окно Инд**, **Функция**, **Отклик**. Остальные поля будут пустыми. Изменить содержимое активной ячейки (выделенной с помощью мыши) можно, просто начав печатать на клавиатуре. Внесите в соответствующие ячейки время удерживания компонента, его название, концентрацию и другие параметры. Для расчетов с использованием стандарта укажите для каждого компонента в соответствующем столбце его стандарт.

Если на графике хроматограммы вершина пика обозначена маркером (использование маркера описано в разделе [5.5.4](#)), при создании новой записи позиция маркера в минутах будет автоматически записана в поле **Время**.

### Автоматическое создание списка компонентов

Команда **Сгенерировать компоненты** из меню **Обработка | Операции** позволит вам быстро создать список компонентов по пикам, размеченным на хроматограмме. При этом в таблицу компонентов будут добавлены строки со значениями времен удерживания пиков. В каждую строку останется внести название компонента, его концентрацию и, при необходимости, скорректировать предложенные по умолчанию параметры. Для расчетов с использованием стандарта укажите для каждого компонента в соответствующем столбце его стандарт.

### Работа с буфером обмена





Компоненты могут быть перенесены из ранее созданных хроматограмм через буфер обмена. При выполнении команды копирования данных в буфер обмена туда будет помещена следующая информация:

- выделенные строки таблицы в специальном формате;
- данные выделенных строк таблицы в текстовом формате, разделенные символами табуляции.

При выполнении команды вставки данных из буфера обмена будет выполнено следующее:

- если активным элементом является таблица, то в нее будут добавлены новые строки (таким образом можно переносить компоненты из одной хроматограммы в другую);
- если активным является элемент, который поддерживает вставку текста, то в него будут добавлены новые строки с символами табуляции внутри (перенос компонентов во внешние приложения, например: Microsoft Excel).

Для копирования компонента:

- выберите с помощью кнопок навигации по проекту   хроматограмму-источник;
- выделите с помощью мыши нужную строку в таблице **Компоненты** (удерживая нажатой клавишу **Shift**, можно выделить сразу несколько строк);
- нажмите на панели инструментов кнопку  (копировать);
- перейдите, с помощью кнопок навигации по проекту, к хроматограмме, в которую нужно внести скопированные компоненты;
- нажмите на панели инструментов кнопку  (вставить);
- выполните перерасчет хроматограммы, нажав кнопку **F9**.

## Уточнение времен удерживания

Часто, после копирования компонентов тем или иным способом из ранее снятых хроматограмм, можно видеть, что времена удерживания компонентов в таблице смещены относительно реальных (показанных над пиками). Причин такого смещения может быть много (изменился режим, произошло старение колонки, оператор замешкался и поздно нажал кнопку **Старт** и т.д.). Времена удерживания идентифицированных компонентов могут быть автоматически скорректированы с помощью специальной операции **Уточнить времена удерживания**, выбираемой в меню **Обработка | Операции**.

### 5.5.11 Идентификация пиков на хроматограмме



**Идентификация пиков на хроматограмме производится в ходе выполнения последовательности операций Расчет хроматограммы (см. раздел 5.5.8).**

В таблице **Компоненты** существует несколько столбцов, определяющие идентификацию пиков. Эти столбцы настраиваются заранее в зависимости от выбранного способа идентификации пиков на хроматограмме (см. раздел 5.4.2). Ниже приведен полный перечень этих столбцов:

- **Название** — в этом поле указывается имя компонента.
- **Время, мин** — задается время удерживания компонента, выраженное в минутах.
- **Окно, %** — задается интервал шкалы времени удерживания на хроматограмме, выраженный в %, в котором происходит поиск компонента.
- **Лог. индекс** (логарифмический индекс удерживания) — задается индекс удерживания, рассчитанный исходя из логарифмической зависимости при изотермических условиях анализа.
- **Лин. индекс** (линейный индекс удерживания) — задается индекс удерживания при программировании температуры.
- **Окно инд. (окно индекса)** — указывается интервал шкалы индекса удерживания на хроматограмме, выраженный в единицах индекса, в котором происходит поиск компонента.
- **Детектор** — выбирается канал детектора, в котором будет производиться поиск пиков для данного компонента.
- **Идентификация** — в этом поле выбирается признак компонента, определяющий приоритетность его идентификации по отношению к другим компонентам, и дальнейшую обработку.

Поле **идентификация** может принимать следующие значения:

#### Обычный

Идентификация компонентов с этим признаком проводится после **опорных** пиков (при их наличии).

**Опорный**

Идентификация компонентов с признаком **Опорный** проводится в первую очередь. После идентификации **опорных** компонентов производится поправка времен удерживания для **обычных, подтверждающих и основного** компонентов с учетом разницы времен поиска **опорных** компонентов и фактических времен идентифицированных пиков.

**Недетектируемый**

Компонент с этим признаком не элюируется на хроматограмме и не участвует в идентификации, его время удерживания равно 0. Более подробно использование этого признака описано в разделе [5.5.14](#).

**Основной**

Основной компонент идентифицируется аналогично **обычным**. Его концентрация не измеряется в соответствии с откликом по выбранным методам количественного расчета, а определяется как разность: 100% минус содержание прочих компонентов.

**Подтверждающий**

Идентификация компонентов с признаком подтверждающий проводится после идентификации **обычных** пиков с одноименным названием. Как правило, этот признак применяется в идентификации с использованием двух каналов.

Рассмотрим особенности заполнения столбцов таблицы **Компоненты** в зависимости от выбранного способа идентификации:

**Идентификация по времени удерживания**

Для идентификации пиков по этому способу достаточно указать:

- **название** каждого компонента;
- его **время удерживания**;
- **окно** времени удерживания в процентах.

Последний параметр необходим для идентификации пика в ситуации, когда его время удерживания сместилось относительно заданного в таблице.

Теоретические сведения по данному способу идентификации см. в разделе [4.5.2](#).

**Идентификация по времени удерживания с применением опорных пиков**

При использовании данного способа идентификации, кроме вышеуказанных параметров компонента, в столбце **Идентификация** дополнительно указывается:

- для опорных пиков — признак **Опорный**;
- для обычных пиков — признак **Обычный**.

Теоретические сведения по данному способу идентификации см. в разделе [4.5.3](#).

## Идентификация с применением двух каналов

Для идентификации с применением двух каналов детектирования, кроме вышеуказанных параметров компонента, в столбце **Идентификация** дополнительно указывается:

- признак **Обычный** для компонента на том канале, где этот компонент лучше отделяется от других;
- признак **Подтверждающий** для одноименного компонента на втором канале (пересечение областей поиска с другими компонентами более вероятно).

Для того чтобы определить по какому из компонентов будет выполняться количественный расчет, поставьте галочку в столбце **Расчет?** данного компонента.

Подробнее теоретические сведения по данному способу идентификации см. в разделе [4.5.5](#).

## Идентификация по индексам удерживания

Если предполагается применение идентификации по индексам удерживания, кроме всех вышеуказанных столбцов включите в таблицу **Компоненты** столбцы **Окно** и **Лог. индекс** (или **Лин. индекс**). При этом для опорных пиков в столбце **Идентификация** ставится признак — **Опорный** и заполняются столбцы:

- **Название.**
- **Время, мин.**
- **Окно, %.**
- **Лог. индекс или Лин. индекс.**

Для обычных пиков в столбце **Идентификация** ставится признак — **Обычный** и заполняются столбцы:

- **Название.**
- **Окно, инд..**
- **Лог. индекс или Лин. индекс.**

Строго говоря, для обычных компонентов необходимо задать хотя бы один из параметров удерживания (время, линейный индекс или логарифмический индекс) и окно поиска для него. Если для обычного компонента задается более одного параметра удерживания, приоритетно идентификация будет проводиться в соответствии с порядком шкал настройки операции **Идентификация** (см. раздел [5.5.8](#) стр. [236](#)).

Пример вида таблицы **Компоненты** при идентификации по индексам показан на рисунке [5.58](#).

Компоненты							
Расчет хроматограммы				Расчет анализа			
	Время, мин	Название	Окно, %	Лог. инд...	Окно, инд.	Идентификация	Детектор
▶	6,800	этан	1	200,000	1,000	Опорный	ПИД-1
	0,000	пропен	0	295,000	1,000	Обычный	ПИД-1
	7,080	пропан	3	300,000	0,000	Опорный	ПИД-1
	0,000	i-бутан	0	366,900	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	метанол	5	371,900	2,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	бутен-1	0	390,700	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	Ос4-1	0	394,400	1,000	Обычный	ПИД-1
	7,930	n-бутан	2	400,000	0,000	Опорный	ПИД-1
	0,000	винил ацетилен	0	407,000	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	t-бутен-2	0	410,000	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	2,2-диметилпропан	0	414,400	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	c-бутен-2	0	424,700	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	этанол	0	440,300	2,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	Ос4-2	0	445,500	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	3-метилбутен-1	0	457,100	1,000	Обычный	ПИД-1
	0,000	Ос5-1	0	461,900	1,000	Обычный	ПИД-1

Рисунок 5.58. Вид таблицы “Компоненты” при идентификации по индексам удерживания

Подробные теоретические сведения по данному способу идентификации см. в разделе 4.5.4.



**В случае многоканальной хроматограммы при любом методе идентификации необходимо вывести столбец Детектор, в котором указывается, на каком канале ожидается выход компонента.**

**При обработке хроматограмм после проведения расчета хроматограммы рекомендуется проводить проверку правильности идентификации компонентов, особенно тщательно в спорных случаях.**

### 5.5.12 Проведение градуировки

Градуировка проводится с целью получения градуировочной зависимости, которая характеризует связь между величиной отклика детектора (площадь или высота пика) и количеством компонента в пробе (теоретические сведения по данному вопросу изложены в разделе 4.6).



**Градуировка может быть как одноточечной, так и многоточечной. Отличие последней заключается в том, что при ее проведении в хроматограф вводятся стандартные образцы, имеющие разную концентрацию компонентов (может вводиться одна концентрация, но разный объем пробы). Многоточечная градуировка используется в тех случаях, когда одноточечная не обеспечивает необходимой точности определения в большом диапазоне концентраций компонентов. Для детекторов, имеющих нелинейную зависимость отклика от концентрации компонента, например ПФД, корректно применять только многоточечную градуировку.**

Для построения градуировочной зависимости какого-либо компонента необходимо снять нужное количество хроматограмм и обработать их. Обработанная хроматограмма должна удовлетворять следующим требованиям:

- в паспорте хроматограммы, которой принадлежит компонент, на закладке **Проба** установлен признак (назначение хроматограммы) **Градуировка**;
- в паспорте хроматограммы указан объем пробы;
- в последовательность операций **Расчет хроматограммы** (см. раздел 5.5.8) включена операция **Градуировочные коэффициенты**;
- компонент идентифицирован на хроматограмме, т.е. успешно проведен **Расчет хроматограммы** и компоненту сопоставлен размеченный пик, у которого известны его высота и площадь;
- в таблицу компонентов внесена известная концентрация компонента;
- выбран тип **функции** градуировочной зависимости;
- у компонента отсутствует признак **Брак?**.



**Если в последовательности операций Расчет хроматограммы включена операция Градуировочные коэффициенты, но хроматограмма имеет признак Количественный расчет, указанная операция выполняться не будет.**

Каждый компонент может иметь в проекте не один градуировочный график. Если компонент детектируется более чем на одном канале хроматограммы, то для каждого канала строится своя градуировочная зависимость (при условии, что для каждого канала выполнены указанные выше требования). Кроме того, при проведении переградуировки возникает необходимость построения нового градуировочного графика. Для того чтобы точки разных градуировок не смешивались, они должны иметь разное **Название метода**, которое задается в паспорте хроматограммы на закладке **Проба**. Таким образом, для каждого компонента его **Градуировочные точки** объединяются в один график при совпадении следующих параметров:

- канал детектора;
- название метода.

Расчет градуировочных зависимостей осуществляется операцией **Градуировочные коэффициенты**, входящей в последовательность операций **Расчет хроматограммы** (см. раздел 5.5.8). Рассчитанные значения коэффициентов **K<sub>2</sub>**, **K<sub>1</sub>**, **K<sub>0</sub>** выводятся в соответствующие, заранее настроенные, столбцы в таблице компонентов (см. раздел 5.4.3).

Последующие хроматограммы должны обрабатываться в соответствии с настройками первой. Для этого после получения каждой новой хроматограммы градуировки используйте операцию **Обработать как предыдущую хроматограмму**. Для выполнения этой операции:

- или выберите команду **Обработать как предыдущую** в меню **Обработка | Операции**
- или нажмите на панели инструментов кнопку



При выполнении операции Обработать как предыдущую хроматограмму, значения концентраций компонентов переносятся из предыдущей хроматограммы в текущую. Если вы проводите многоточечную градуировку, проверяйте правильность заполнения ячеек столбца Концентрация таблицы Компоненты и, при необходимости, корректируйте концентрации.

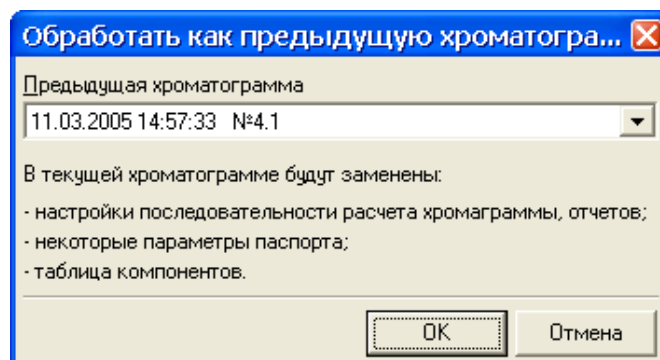


Рисунок 5.59. Диалог “Обработать как предыдущую”

Обработка каждой новой хроматограммы должна завершаться выполнением быстрого перерасчета (F9).

### Оценка градуировочного графика

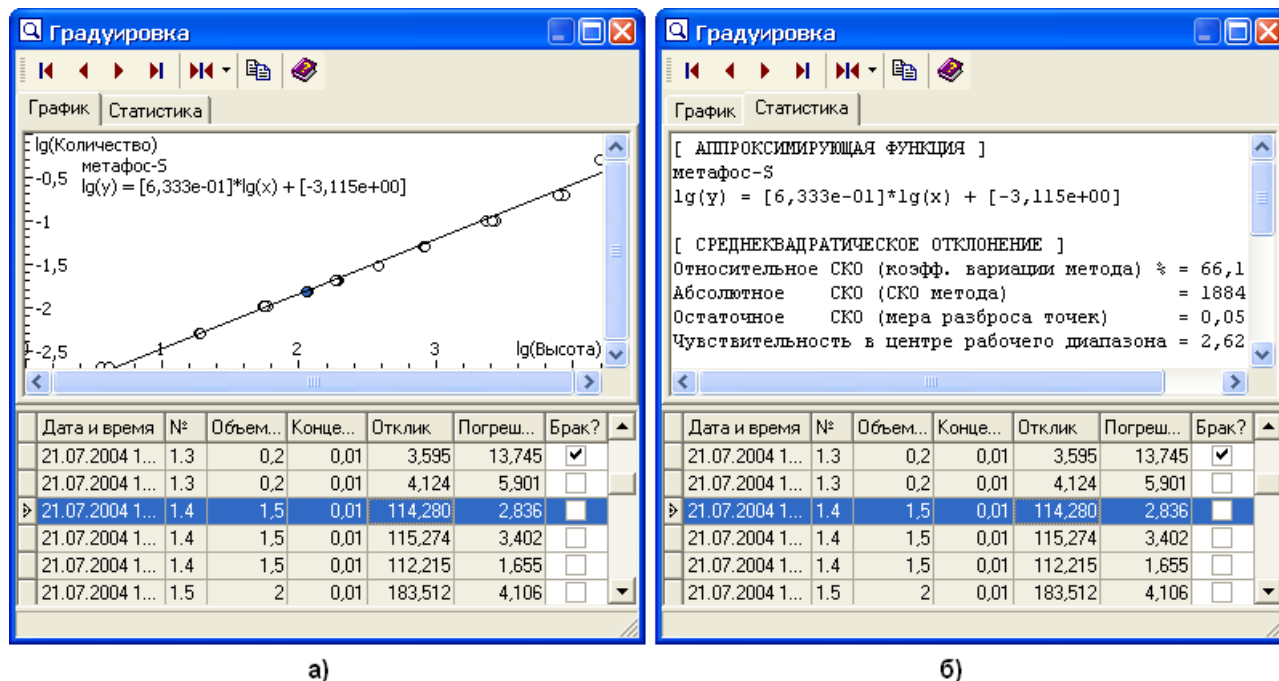


Рисунок 5.60. Окно “Градуировка”


а) закладка “График”, б) закладка “Статистика”

Градуировочный график строится программой автоматически на основании имеющихся данных. По окончании обработки последней хроматограммы:

- Нажмите правую кнопку мыши в таблице компонентов (в любом месте, кроме заголовка) и в появившемся контекстном меню выберите команду **Градуировка**, при этом появится окно с градуировкой выделенного компонента (пример которого показан на рисунке 5.60). В данном окне на закладке **График** градуировочный график для данного компонента и рассчитанные коэффициенты функции градуировки. На закладке **Статистика** приведены статистические характеристики градуировки.
- Оцените значение **погрешности** для каждого градуировочного уровня.



**Погрешность** показывает процентное отклонение расчетного значения концентрации компонента от его заранее известного значения. Значения погрешности для каждого компонента дополнительно выводятся в соответствующих столбцах таблиц **Расчет хроматограммы** и **Расчет анализа**. При расчете погрешности в таблице **Расчет хроматограммы**, расчетное значение концентрации компонента берется из столбца **Концентрация** этой таблицы. При расчете погрешности в таблице **Расчет анализа** — соответственно из столбца **рассчитанной средней концентрации** этой таблицы. Дополнительно о погрешности градуировки см. раздел 4.8.3.

- Передвигаясь по компонентам с помощью кнопок  в окне **Градуировка**, перейдите к следующему компоненту и оцените значение погрешности для него. Повторите оценку погрешностей для каждого компонента.

Окно **Градуировка** является немодальным, то есть, когда оно показано на экране, элементы главного окна (меню, панель инструментов, таблицы и график) не блокируются.

Каждая градуировочная точка изображена на графике в виде маленькой окружности. Закрашенная окружность соответствует градуировочной точке, выделенной в таблице точек в нижней части окна. Характеристики градуировочных точек (объем, концентрация, отклик) в таблице показаны только для просмотра, редактировать ни один из них (кроме параметра **Брак?**) нельзя.

Градуировочный график можно, так же, как и хроматограмму, масштабировать. Это очень удобно, когда градуировочных точек много и они расположены очень плотно.




**Если для всех градуировочных уровней значение погрешности удовлетворительно, градуировку можно считать успешно завершенной. Установите в паспорте последней градуировочной хроматограммы признак Метод. В противном случае выполните корректировку градуировочного графика.**


### Корректировка градуировочного графика

Если точка “выпадает” из построенного градуировочного графика, то есть значение ее отклика существенно отличается от других (пример градуировочного графика с “выпадающей точкой” показан на рисунке 5.60), необходимо проверить разметку пика компонента в соответствующей хроматограмме. Для этого:

- В таблице градуировочных точек выберите “выпадающую” точку (при выборе ее в строке таблицы она будет выделена на графике).

- Нажатием на кнопку , перейдите в хроматограмму “выпадающей” точки и скорректируйте разметку соответствующего пика (см. раздел 5.5.9).
- Нажмите клавишу **F9** для перерасчета.

Если после проведения ручной разметки точка по-прежнему не совпадает с графиком построенной функции, можно исключить ее из расчета, установив в соответствующей этой точке строке таблицы флажок **Брак?**. Не забудьте после этой операции снова провести пересчет (нажмите клавишу **F9**).

Если необходимо исключить точки всех компонентов одной хроматограммы из градуировочного графика, перейдите на эту хроматограмму (нажмите на кнопку ) , в меню **Вид** вызовите диалог **Паспорт** и смените признак **Градуировка** на **Количественный расчет**. Данная хроматограмма будет полностью исключена из градуировки.



**Корректировка градуировочного графика не может быть проведена в основном окне Хроматэк Аналитик 2.5 во время анализа. Для того чтобы провести корректировку, или дождитесь окончания анализа, или запустите вспомогательное окно программы, выбрав команду Новое окно в меню Вид.**

Переградуировка прибора может быть проведена по этому же алгоритму.

### Градуировка методом стандартной добавки

При градуировке методом стандартной добавки в столбце **концентрация** необходимо указывать концентрацию добавки, а в столбце **функция** выбирать **стандартная добавка**. Если в градуировке участвует хроматограмма пробы без добавки, в столбце **концентрация** следует указать значение “0” (добавки нет, следовательно, ее концентрация равна нулю).



**Функция стандартная добавка используется только для линейной зависимости между откликом детектора и количеством компонента в пробе.**

### 5.5.13 Метод

Метод — хроматограмма, которая содержит в себе следующую информацию (части метода):

- условия проведения анализа (режим хроматографа);
- данные паспорта хроматограммы;
- анализируемые компоненты и их характеристики (название, время удерживания, канал детектирования, функция отклика детектора, группа калибровки и т.д.);
- настройки расчета хроматограммы и отчетов;
- признак **Метод** и название метода в паспорте хроматограммы.

При работе с методом условия проведения анализа из него передаются в хроматограф. Данные паспорта без названия пробы, список компонентов без концентраций, настройки расчета хроматограммы, отчетов и отдельных операций обработки наследуются в хроматограммах, снимаемых по текущему методу.


### Создание метода

Для того чтобы объявить некоторую хроматограмму методом (данная хроматограмма может не иметь пиков, например — хроматограмма холостого анализа), в ее **Паспорте** на вкладке **Общее** нужно установить признак **Метод**.

### Обработка по методу

В разделе 5.5.10 рассматривался процесс создания списка компонентов. Для некоторых видов анализов (например, для детального углеводородного анализа бензина) список компонентов так велик (может быть более 400 записей), что его создание вручную крайне неудобно. В таких случаях в комплекте с хроматографом поставляется типовая хроматограмма в специальном формате **XML**. Эта хроматограмма предварительно вносится в проект с помощью программы *Конвертер хроматограмм* (работа с этой программой подробно описана в главе 3) и используется как шаблон для операции **Обработать по методу**.

Для выполнения данной операции:

- или выберите команду **Обработать по методу** в меню **Обработка | Операции**
- или нажмите на панели инструментов кнопку .

Диалог операции **Обработать по методу** показан на рисунке 5.61.

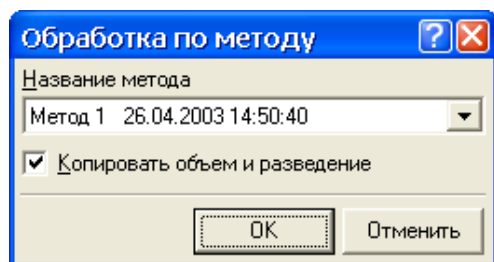


Рисунок 5.61. Диалог “Обработать по методу”

Выберите из выпадающего списка хроматограмму-метод и установите признак **Копировать объем и разведение**, если хотите, чтобы значения соответствующих параметров были скопированы в текущую хроматограмму из метода.



**Для того чтобы обработать какую-либо хроматограмму по существующему методу, эта хроматограмма не должна содержать признак Метод. Когда необходимо создать новый метод на основе типового, признак Метод устанавливается только после выполнения операции Обработать по методу.**

Вы можете обрабатывать по какому-либо методу сразу несколько хроматограмм. Для этого:

- Выберите в меню **Хроматограмма** команду **Список**.
- В открывшемся окне **Список хроматограмм**, удерживая нажатой клавишу **Shift**, выделите с помощью мыши хроматограммы, которые хотите обработать.
- Нажмите кнопку **Обработать**.
- На экране появится окно **Обработка** (см. рисунок 5.62). В данном окне выберите операцию **Обработать по методу** и нажмите **ОК**.
- Дальнейшие действия по настройке операции **Обработать по методу** аналогичны описанным выше.



При выполнении операции **Обработать по методу** в текущую хроматограмму из хроматограммы-метода переносятся: таблица компонентов, настройки расчета хроматограммы, отчетов хроматограммы и анализа. Сразу после переноса автоматически производится расчет хроматограммы. В выпадающем списке вы можете выбрать любую из хроматограмм проекта. По умолчанию выбирается предыдущая по времени записи хроматограмма.

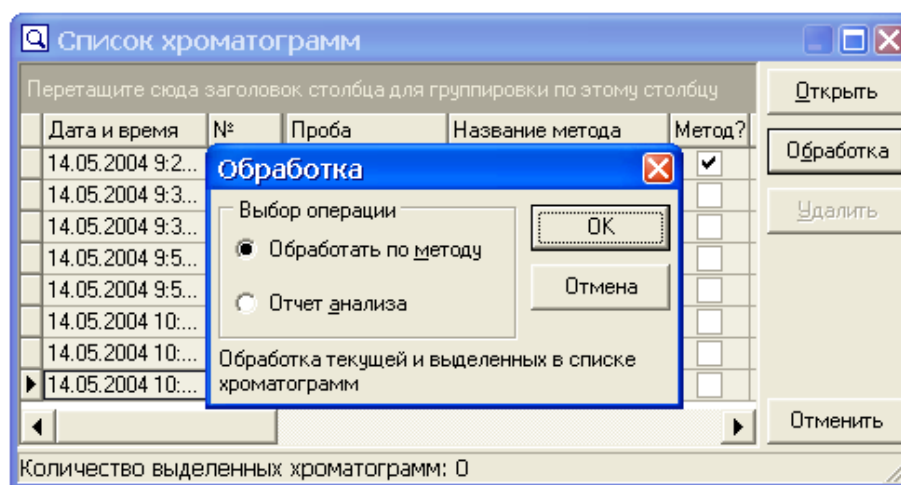


Рисунок 5.62. Обработка группы хроматограмм

### Корректировка метода

Иногда возникает необходимость провести корректировку метода на основе текущей хроматограммы, например, в случае, если оператор изменил какие-либо настройки расчета хроматограммы и желает, чтобы эти изменения были отражены в методе. Для этого служит операция **Корректировка метода**. Для выполнения этой операции выберите команду **Корректировка метода** в меню **Обработка | Операции**.

Диалог данной операции показан на рисунке 5.63. Для выполнения корректировки метода выберите из выпадающего списка хроматограмму-метод и отметьте части метода, которые будут заменены соответствующими частями из текущей хроматограммы.

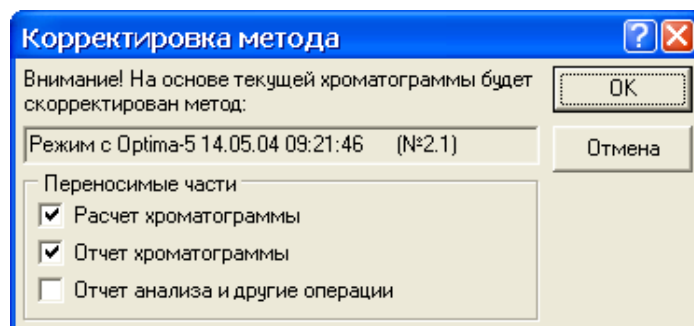


Рисунок 5.63. Диалог “Корректировка метода”

## Защита метода

Хроматограмма-метод с набором градуировочных уровней используется независимо от градуировочных хроматограмм, формирующих эти уровни. Это позволяет переносить метод в другие проекты без искажения градуировочной функции. Однако, выполнение перерасчета для метода исказит градуировочную функцию, если в проекте отсутствуют остальные хроматограммы, участвовавшие в градуировке. Для того, чтобы избежать подобного искажения в программе *Хроматэк Аналитик 2.5* реализована защита метода.

Если хроматограмма является методом (то есть в ее паспорте установлен признак **Метод**), любые операции обработки данной хроматограммы выполняются с предупреждением: **Текущая хроматограмма является методом. Вы действительно хотите выполнить операцию?**. В случае ответа **Да** операция (или последовательность операций **Расчет хроматограммы**) будет выполнена.



**Во избежании искажения точности метода, любые операции с хроматограммой-методом следует выполнять осторожно и осмысленно. Не подтверждайте запрос на выполнение перерасчета метода, если вы не уверены в необходимости перерасчета**

В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* дополнительно реализован более жесткий механизм защиты методов от случайного изменения. Для включения защиты, в диалоге **Настройка проекта** установите опцию **Защита методов** (см. раздел 5.2.4).

При включении защиты в хроматограммах-методах будут заблокированы от изменения таблицы компонентов. При попытке выполнить последовательность **Расчет хроматограммы** или какую-либо одиночную операцию обработки будет выводиться сообщение: **Метод защищен. Операция не может быть выполнена**.

## Передача метода. Метод по умолчанию

После создания метода он может быть передан *Панели управления*, для того чтобы все снимаемые в дальнейшем хроматограммы заимствовали его части (список компонентов, настройки расчета и отчета хроматограммы, настройки отчета анализа) и обрабатывались в соответствии с ними.

Для передачи метода *Панели управления* выберите команду **Метод** в меню **Хроматограф**. Будет запущен диалог **Выбор метода**, показанный на рисунке 5.64.

- Для выбора метода выделите его в списке с помощью мыши.
- Установленный по умолчанию признак **Метод** отображает в списке только хроматограммы-методы. Для того чтобы отображались все хроматограммы проекта, снимите данный признак.
- Установите признак **Градуировка**, чтобы отображать в списке хроматограммы, имеющие соответствующее назначение.

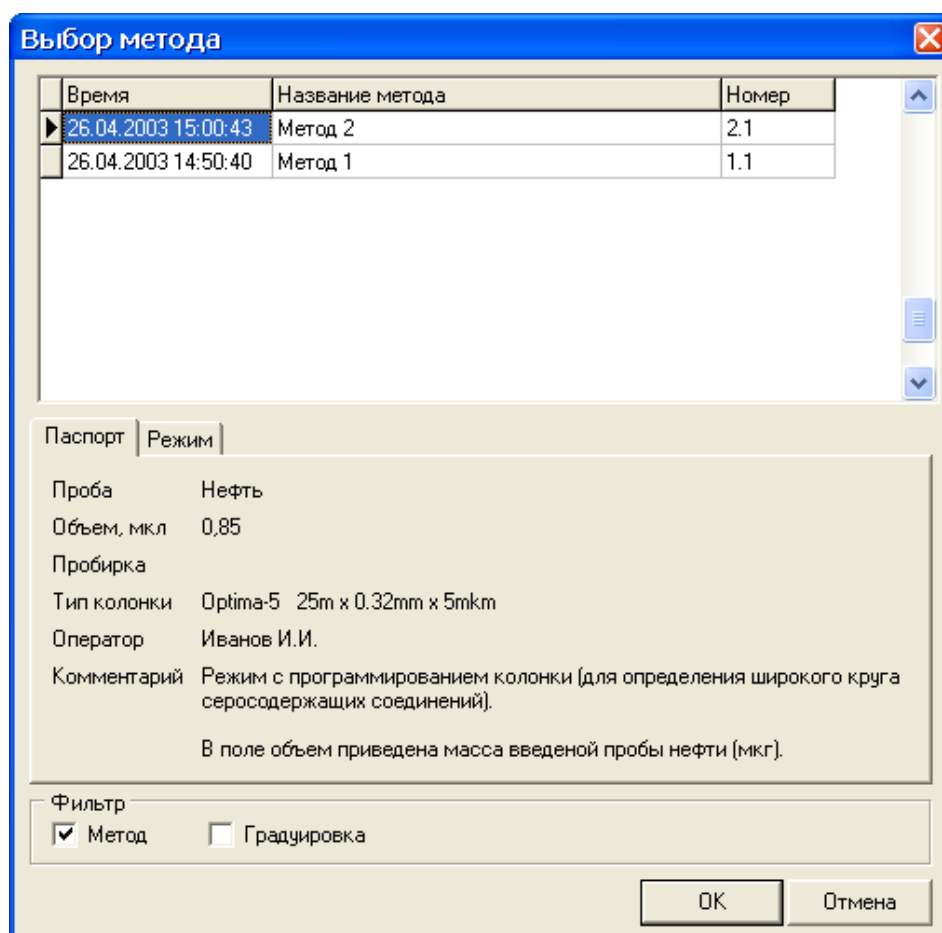


Рисунок 5.64. Диалог “Выбор метода”

При передаче метода, на экране появится сообщение, предлагающее передать хроматографу режим из данного метода. Если вы хотите, чтобы хроматограф отработал режим из данного метода, нажмите на кнопку **Да**.



Вы можете объявить любой из методов проекта используемым по умолчанию. Это может быть полезно в тех случаях, когда вы проводите много “рутинных” анализов и всегда используете один и тот же метод. Использование метода по умолчанию позволяет существенно автоматизировать процесс работы с программой и хроматографом, весь процесс подготовки к проведению анализов может быть сведен к двойному щелчку мышью на одном ярлыке. При запуске соединения автоматически будут выполнены процедуры:

- запуск *Панели управления*;
- запуск *Хроматэк Аналитик 2.5*
- передача метода (включая режим хроматографа, который сразу запустится на выполнение).

Для того, чтобы сделать метод используемым по умолчанию, в меню *Хроматограф | Сервис* выберите команду *Метод по умолчанию*. На экране появится диалог, показанный на рисунке 5.65.

- Нажмите на кнопку *Выбрать* для задания нужного метода.
- Если вам необходимо отключить метод по умолчанию, нажмите на кнопку *Очистить*.

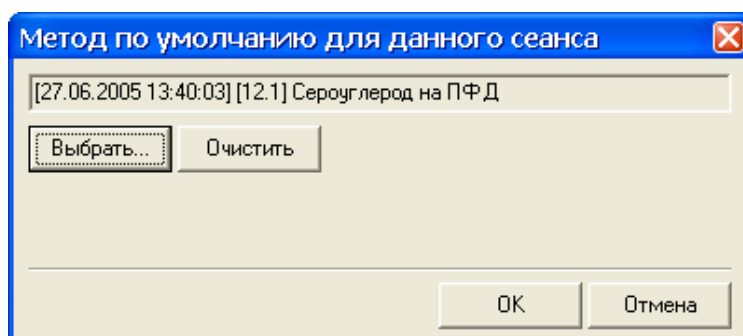


Рисунок 5.65. Диалог “Метод по умолчанию для данного сеанса”

#### 5.5.14 Количественный расчет

Расчет концентраций компонентов анализируемой смеси производится на основании полученных при градуировке зависимостей или по заранее известным зависимостям.

В программе **Хроматэк Аналитик 2.5** используются следующие методы количественного расчета:

- Метод процентной нормализации.
- Метод внутренней нормализации.
- Метод абсолютной градуировки.
- Метод внутреннего стандарта.

- Метод внешнего стандарта.



Подробно каждый из методов описан в разделе 4.7.



После выбора метода количественного расчета необходимо, в соответствии с ним, настроить вид таблиц Компоненты и Расчет хроматограммы. Эта процедура выполняется на этапе настройки программы (см. раздел 5.4).

Расчет концентраций компонентов в анализируемой пробе производится с помощью операции **Количественный расчет**, которая входит в последовательность **Расчет хроматограммы**. Настройка операции описана в разделе 5.5.8 (см. стр. 237).

Для выполнения количественного расчета неизвестной пробы, хроматограмма данной пробы должна быть обработана по какому-либо методу. Если снятие хроматограммы анализируемой пробы проведено без предварительной передачи метода, таблица компонентов, операции расчета хроматограммы и другие необходимые для обработки данные в ней отсутствуют. В таком случае для переноса всех необходимых параметров используйте операцию **Обработка по методу** (описана в разделе 5.5.13).

Оцените правильность проведенной идентификации и разметки пиков. При необходимости поправьте разметку пиков вручную и снова выполните перерасчет. Результаты количественного расчета выводятся на странице **Расчет хроматограммы**, в столбце **Концентрация**. На странице **Расчет анализа**, в столбце **Концентрация**, выводятся результаты средних значений концентраций компонентов по всем хроматограммам данного анализа, в столбце **Сходимость** показана сходимость в процентах, а в столбце **Количество** — количество хроматограмм принявших участие в анализе.



Если вы проводили идентификацию пиков по двум каналам детекторов (см. раздел 5.5.11), вы должны выбрать для одноименных компонентов каждого канала, по какому из них будет выполняться количественный расчет, после чего поставьте галочку в столбце Расчет? выбранного компонента.

## Использование множителя и разведения

Множитель и разведение являются коэффициентами пересчета концентраций веществ при проведении операции **Количественный расчет**. Разведение задается в **паспорте** и является общим коэффициентом для всех компонентов хроматограммы. Множитель является коэффициентом для пересчета концентрации индивидуального компонента и задается в таблице **Компоненты**. При построении градуировочного графика эти коэффициенты не учитываются.

В некоторых методах количественного расчета множитель и разведение не применяются.



Формулы расчета с учетом множителя и разведения представлены в разделе [4.7](#).



Пример использования разведения:

Примером использования разведения может служить анализ по ГОСТ Р 51698-2000. “Водка и спирт этиловый. Газохроматографический экспресс–метод определения содержания токсичных микропримесей”.

Согласно п. 4.5.2 этого нормативного документа, для пересчета на безводный спирт полученные результаты умножают на коэффициент П, определяемый по формуле

$$\Pi = 100/P,$$

где Р — объемная доля этилового спирта в анализируемом образце, %; 100 — объемная доля безводного спирта,

Для автоматического пересчета результатов на безводный спирт внесите рассчитанный коэффициент П в поле Разведение паспорта хроматограммы.



Пример использования множителя:

Примером использования множителя может служить анализ по ГОСТ Р 51392-99. “Определение содержания летучих галогенорганических соединений газожидкостной хроматографией”. В формуле расчета концентрации компонента присутствует коэффициент извлечения, индивидуальный для каждого вещества. Для включения этого коэффициента в расчет внесите его значение для каждого компонента в поле Множитель.

## Недетектируемый компонент

Функция недетектируемый компонент используется при количественном расчете, если не все компоненты пробы элюируются на хроматограмме, но есть необходимость их учета в расчете хроматограммы и вывода в отчете.



Настройка таблицы Компоненты для использования недетектируемого компонента описана в разделе [5.4.2](#)



**Пример учета недетектируемого компонента:**

Для учета недетектируемого компонента при обработке хроматограмм достаточно ввести его в таблицу компонентов:

- Активизируйте таблицу Компоненты.
- В меню Правка выберите команду Добавить запись.
- Задайте нулевое значение времени удерживания.
- Задайте Название компонента.
- В столбце Идентификация выберите признак Недетектируемый.
- Заполнение прочих полей необязательно для данного компонента.
- Концентрация недетектируемого компонента указывается для каждой хроматограммы отдельно.

Использование функции недетектируемого компонента возможно во всех методах количественного расчета.

### Сшивка каналов

Сшивка каналов используется при расчете многоканальной хроматограммы методом внутренней нормализации. Необходимым условием сшивки двух каналов является наличие на каждом из них одноименного компонента.



**Пример:**

Природный газ анализируется на 3-х колонках с применением 3-х детекторов. На одном детекторе определяются водород, гелий и азот, на другом — кислород, азот, метан, этан, на третьем — углекислый газ, этан, пропан и др. углеводороды (см. рисунок 5.66 ). Для расчета методом внутренней нормализации необходимо осуществить сшивку 3-х каналов. При этом на 1-м и 2-м канале общим компонентом является азот, на 2-м и 3-м — этан. Соответственно, настройка количественного расчета будет выглядеть, как показано на рисунке 5.54.



Подробнее о сшивке каналов см. раздел 4.7.2.

### 5.5.15 Расчет анализа

Обычно при количественных измерениях для повышения достоверности одну и ту же пробу хроматографируют несколько раз, и за результат анализа принимают среднее значение результатов нескольких хроматограмм. В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* реализован расчет среднего результата по концентрациям отдельного компонента и группы компонентов, а также расчет сходимости анализа по компонентам.

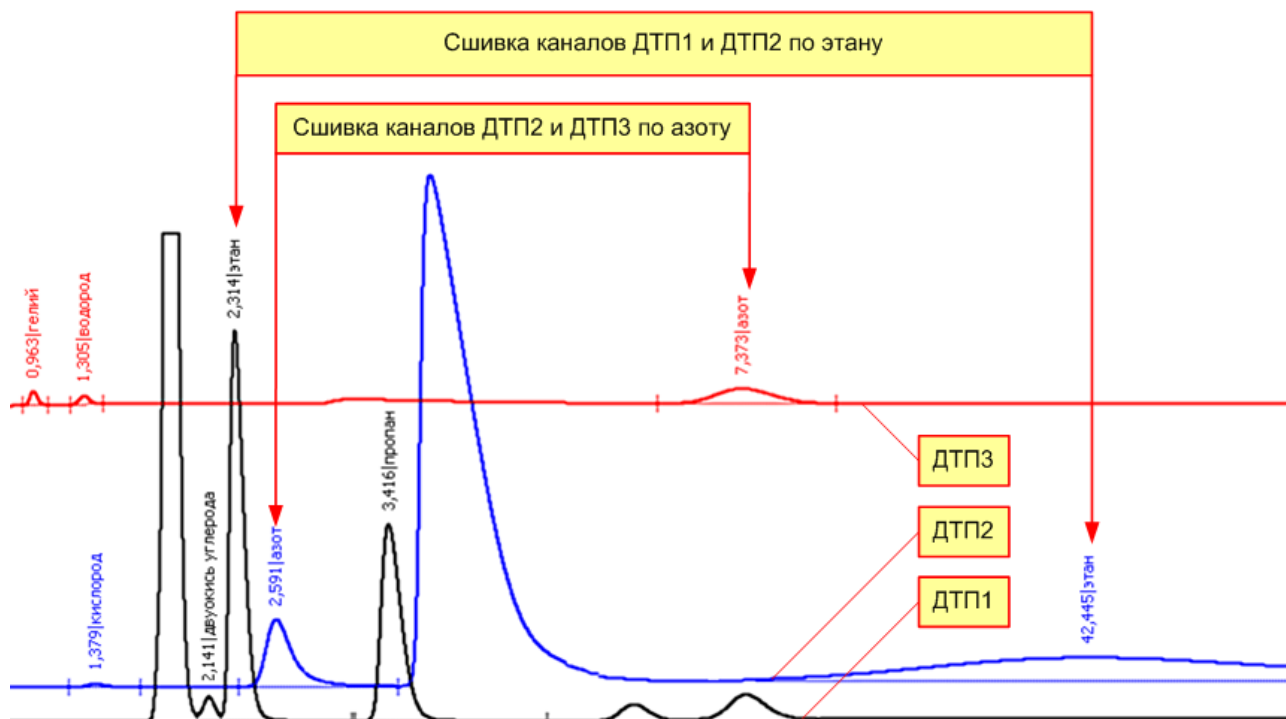


Рисунок 5.66. Пример сшивки каналов

В расчете анализа участвуют хроматограммы проекта, имеющие одинаковый номер анализа. Как говорилось выше, полный номер хроматограммы состоит из двух частей: номер анализа и номер хроматограммы в анализе. Например хроматограмма с номером 4.7 входит в анализ 4 и является седьмой хроматограммой в этом анализе.

Данная операция выполняется автоматически после выполнения последовательности **Расчет хроматограммы**. Если необходимо исключить хроматограмму из анализа, в меню **Обработка** выберите команду **Расчет анализа**. Будет запущен диалог, показанный на рисунке 5.67. В данном диалоге уберите галочки у тех хроматограмм, которые нужно исключить из расчета анализа и нажмите кнопку **Ок**.

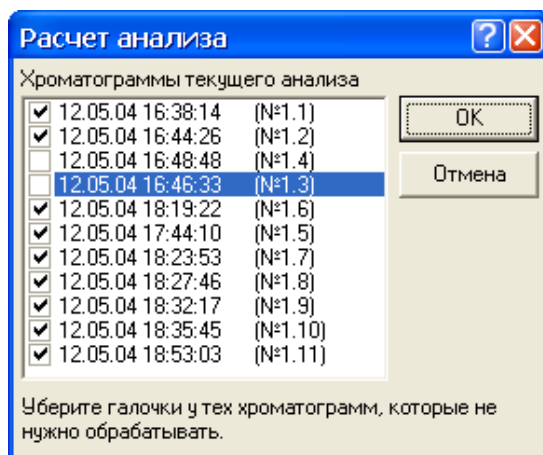


Рисунок 5.67. Диалог "Расчет анализа"


Результат расчета анализа выводится в таблице на странице **Расчет анализа**.

Формула, по которой производится расчет сходимости, представлена в разделе 4.8.4.


### 5.5.16 Отчет хроматограммы. Отчет анализа

Назначение данных операций — сохранение, просмотр и печать стандартного отчета. Их отличие между собой заключается в том, что в **Отчете анализа** присутствуют данные о сходимости результатов, а также количестве и номерах участвующих в анализе хроматограмм.

Для запуска операции **Отчет хроматограммы**:

- или выберите соответствующую команду в меню **Обработка | Операции**;
- или нажмите на кнопку панели инструментов .

Для запуска операции **Отчет анализа**:

- или выберите соответствующую команду в меню **Обработка | Операции**;
- или нажмите на кнопку панели инструментов .

Оба диалога содержат по три закладки. Поскольку диалоговые окна обеих операций практически идентичны, приведено описание только одного диалога — **Отчет хроматограммы**.

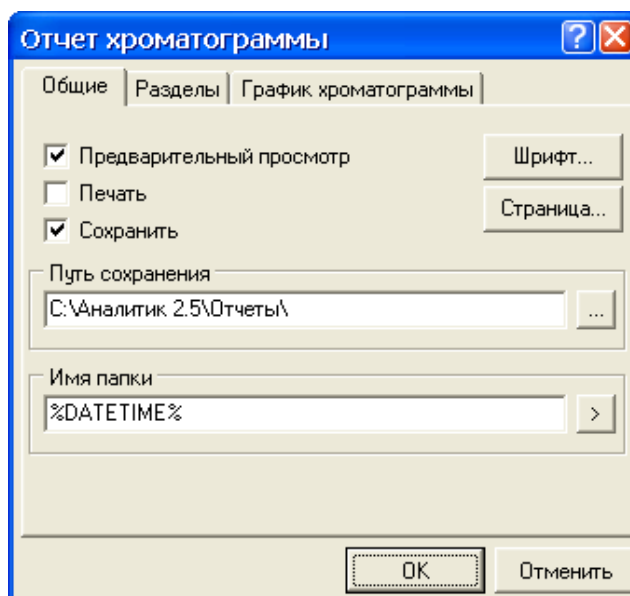


Рисунок 5.68. Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “Общие”

На закладке **Общие** (рисунок 5.68):

- Отметьте опцию **Предварительный просмотр** для просмотра отчета перед выводом его на печать.
- Отметьте опцию **Печать отчета** для вывода отчета на печать.

- Опция **Сохранить** предназначена для сохранения файла отчета на жестком диске компьютера в формате XML. Укажите **путь сохранения** и **имя папки**, в которой будет сохранен файл отчета (используемое по умолчанию имя %DATETIME% обозначает, что в качестве имени папки будут использованы дата и время создания отчета).



**Сохранение отчетов очень удобно, поскольку по истечении времени отчет ранее снятого анализа может быть вновь востребован. Если поиск нужной хроматограммы вызывает затруднения (или она вообще была удалена), сохраненный отчет может быть распечатан в любое время без использования программы *Хроматэк Аналитик 2.5*. Для этого достаточно найти на диске нужную папку, выбрать в ней файл *Analytic 2.0 Report.xml*, запустить его и, в открывшейся программе *Microsoft Internet Explorer*, выбрать в меню **Файл** команду **Печать**.**

- Нажмите кнопку **Шрифт** для задания размера и типа шрифта отчета.
- Нажмите кнопку **Страница** для настройки параметров страницы отчета при печати.

На закладке “Разделы” (рисунок 5.69) необходимо отметить галочкой те элементы или характеристики хроматограммы (паспорт, режим прибора, таблица компонентов, график хроматограммы, комментарии и т.п), которые необходимо отобразить в отчете.

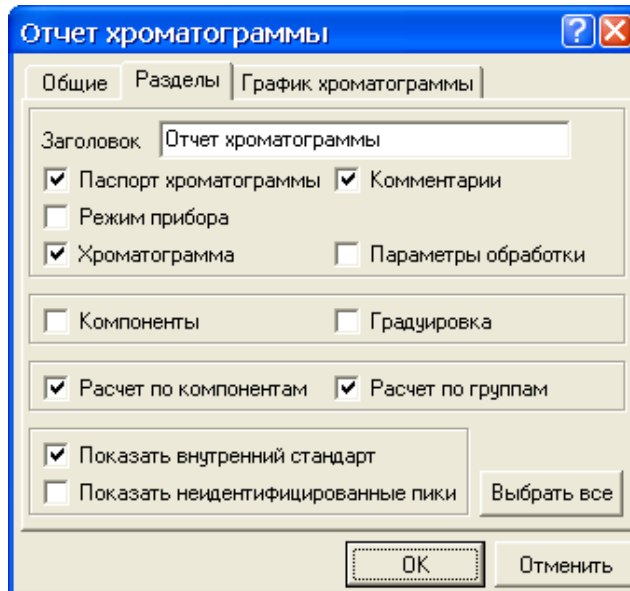


Рисунок 5.69. Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “Разделы”



Опция неидентифицированные пики присутствует только в диалоге Отчет хроматограммы.

На закладке **График хроматограммы** (рисунок 5.70):

- Задайте **Размер** (ширину и высоту) печатаемого графика хроматограммы в сантиметрах.

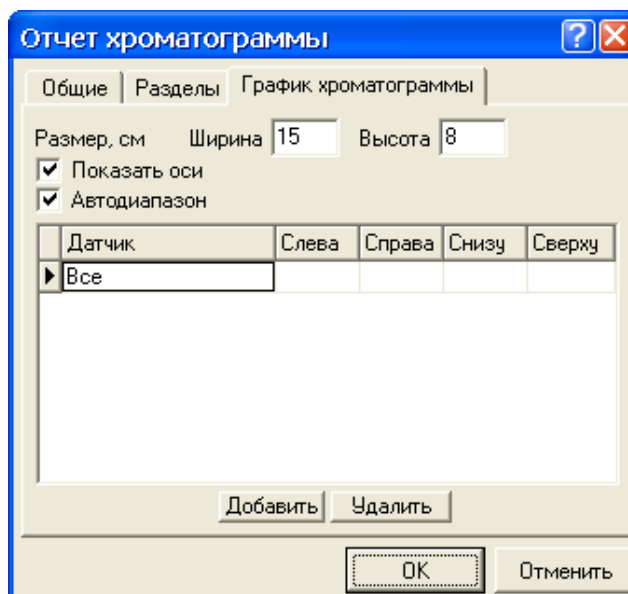


Рисунок 5.70. Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “График хроматограммы”

- Отметьте опцию **Показать оси** для отображения на распечатке графика координатных осей.
- При выборе опции **Автодиапазон** будет распечатана только та часть хроматограммы, которая видна на экране в данный момент.
- График хроматограммы можно распечатать как целиком, так и по частям. В случае необходимости распечатки части графика нажмите кнопку **Добавить** столько раз, сколько участков графика требуется распечатать. Задайте для каждого участка время (в столбцах **Слева** и **Справа**) и амплитуду (в столбцах **Сверху** и **Снизу**). В столбце **Датчик** укажите нужный канал хроматограммы. По умолчанию печататься будут все каналы хроматограммы.

## 5.6 Внешний расчет

Диалог **Внешний расчет** предназначен для настройки параметров запуска вспомогательной программы, производящей некоторый дополнительный расчет с использованием данных, полученных в результате обработки хроматограммы.

В зависимости от задачи (методики анализа), в состав дополнительной части программного обеспечения *Хроматэк Аналитик 2.5* могут (по заказу) входить следующие программы внешнего расчета:

- *Хроматэк Природный газ.*
- *Хроматэк Сжиженный газ.*
- *Хроматэк Gasoline.*
- *Хроматэк Энергетик.*

- *Хроматэк Дистилляция.*



Кратко назначение этих программ описано в главе Введение данного руководства. Более подробную информацию о каждой из программ можно получить из соответствующих руководств по эксплуатации.

Для запуска диалога **Внешний расчет** (показан на рисунке 5.71) выберите соответствующую команду в меню **Обработка**.

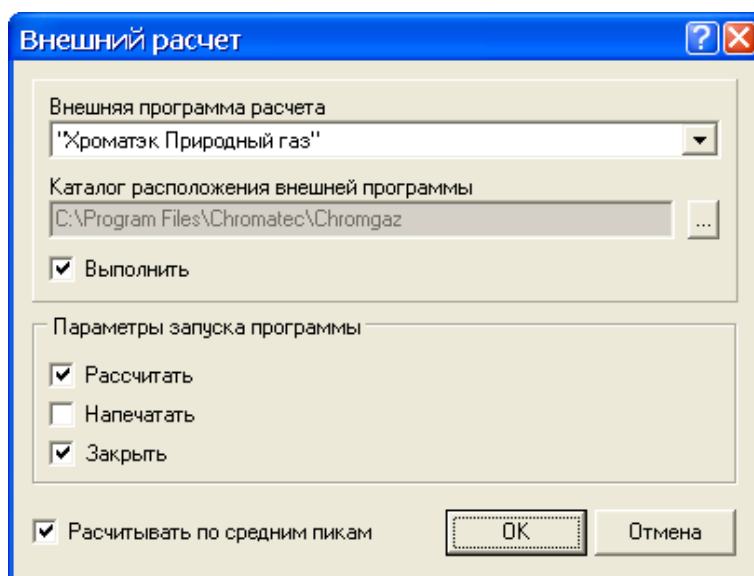


Рисунок 5.71. Диалог “Внешний расчет”.

В данном диалоге:

- Из выпадающего списка выберите **Внешнюю программу расчета**.
- Нажмите кнопку (...) для выбора **пути к внешней программе**. Появится стандартный диалог Windows **Выбор папки**. В этом диалоге выберите папку, в которую была установлена внешняя программа.
- Установите опцию **Выполнить**. Если эта опция не установлена, *Хроматэк Аналитик 2.5* осуществит запись результатов анализа в специальный файл данных (для разных программ внешнего расчета имена файлов данных, пути к ним и их форматы отличаются), но программа внешнего расчета запущена на выполнение не будет.



Если в качестве программы внешнего расчета выбрана *Хроматэк Gasoline*, в диалоге добавляется опция **Время в минутах**. Установите ее, если хотите, чтобы в отчете время удерживания компонентов выводилось в минутах (в противном случае время будет представлено в формате часы:минуты:секунды, например 01:30:00)

Если опция **Выполнить** установлена, группа **Параметры запуска программы** становится активной. В этой группе:

- Установите опцию **Рассчитать**, чтобы выбранная внешняя программа осуществила расчет по данным из сгенерированного файла с результатами анализа.

- Для того чтобы распечатать отчет по внешнему расчету, установите опцию **Напечатать** (она может быть установлена только в том случае, если была выбрана опция **Рассчитать**).
- Установите опцию **Заккрыть**, чтобы по завершении работы внешней программы она была автоматически закрыта.



**Если вы желаете предварительно просмотреть результаты внешнего расчета, не устанавливайте опции Напечатать и Заккрыть. Распечатать отчет можно непосредственно в программе внешнего расчета.**

- Для того чтобы в файл данных записывались результаты анализа (средние значения всех рассчитанных параметров, считываемые из таблицы **Расчет анализа**), отметьте опцию **Рассчитывать по средним пикам**. В противном случае расчет будет выполнен по данным из таблицы **Расчет хроматограммы**.



**Внешний расчет может быть добавлен в последовательность операций Расчет хроматограммы (см. раздел [5.5.8](#)).**

## 5.7 Поверка хроматографа

Данная операция предназначена для автоматизации выполнения процедуры поверки приборов серии “Кристалл”.

Поверка производится в соответствии с ГОСТ 8.485-83 “Хроматографы аналитические газовые лабораторные. Методы и средства поверки”, ГОСТ 26703-93 “Хроматографы аналитические газовые. Общие технические требования и методы испытаний”, РД 214.2.840.030Д “Хроматограф Кристалл-2000М. Методика поверки”.

Для вызова операции в меню **Обработка | Операции** выберите команду **Поверка хроматографа**.

Порядок выполнения отчета поверки:

### Заполнение общих параметров

На закладке “Общее” (рисунок [5.72](#)):

- Задайте **Тип** поверочного отчета: отчет по средним значениям результатов поверочных анализов, среднеквадратичному отклонению (СКО), пределу детектирования или отчет по шумам.
- При использовании **выносного БСД** (блока сбора данных) отметьте его тип: усилитель или АЦП. Если БСД не используется, выберите пустую строку.

**Поверка хроматографа**

Общее | Шум | Среднее, СКО, предел

**Отчет**

Тип: Среднее, СКО, предел | Выносной БСД: [ ]

☒ СКО  
☐ Аномальные  
☒ Предел

**Хроматограмма**

Высота, см: 5

☒ Автодиапазон

от	до	мин	от	до	мВ
0,000	30,011		3,538	101,709	

**Прибор**

Модель: Хроматэк Кристалл-2000М | Зав. №: 4524

ПФД, ДТП: 3201

☒ Зав. № модуля  
☐ Зав. № детектора, коэфф. преобр. в амперы

ПФД: 0 | 7,2e+6

Комментарий: Предел детектирования по серному каналу ПФД

В программе... | Расчет | Отчет | Закрыть | Сохранить

Рисунок 5.72. Поверка хроматографа. Закладка “Общее”

- Установите опцию **СКО** для отображения в отчете среднеквадратичного отклонения результатов поверочных анализов.
- Для того чтобы в отчете выделялись **анормальные** результаты анализа (результаты, значительно ухудшающие СКО), отметьте соответствующую опцию.
- Укажите **высоту** графика хроматограммы в отчете.
- Задайте диапазон координат времени и амплитуды выводимых на печать графиков каналов (участок хроматограммы). По умолчанию используется **автодиапазон** (будет распечатана только та часть хроматограммы, которая видна на экране в данный момент).
- Выберите **модель** хроматографа, поверка которого выполняется.
- Введите заводской номер (**Зав. №**) прибора.
- Если поверяется хроматограф “Хроматэк Кристалл 2000М”, установите опцию **Зав. № модуля** и задайте заводской номер модуля.
- Если поверяется хроматограф “Хроматэк Кристалл 5000”, установите опцию **Зав. № детектора, коэфф. преобр. в амперы** и задайте заводской номер детектора. При работе с выносным БСД задайте коэффициент преобразования сигнала.
- Внесите необходимые **комментарии**.

### Измерение уровня шума

На закладке “Шум” (рисунок 5.73):

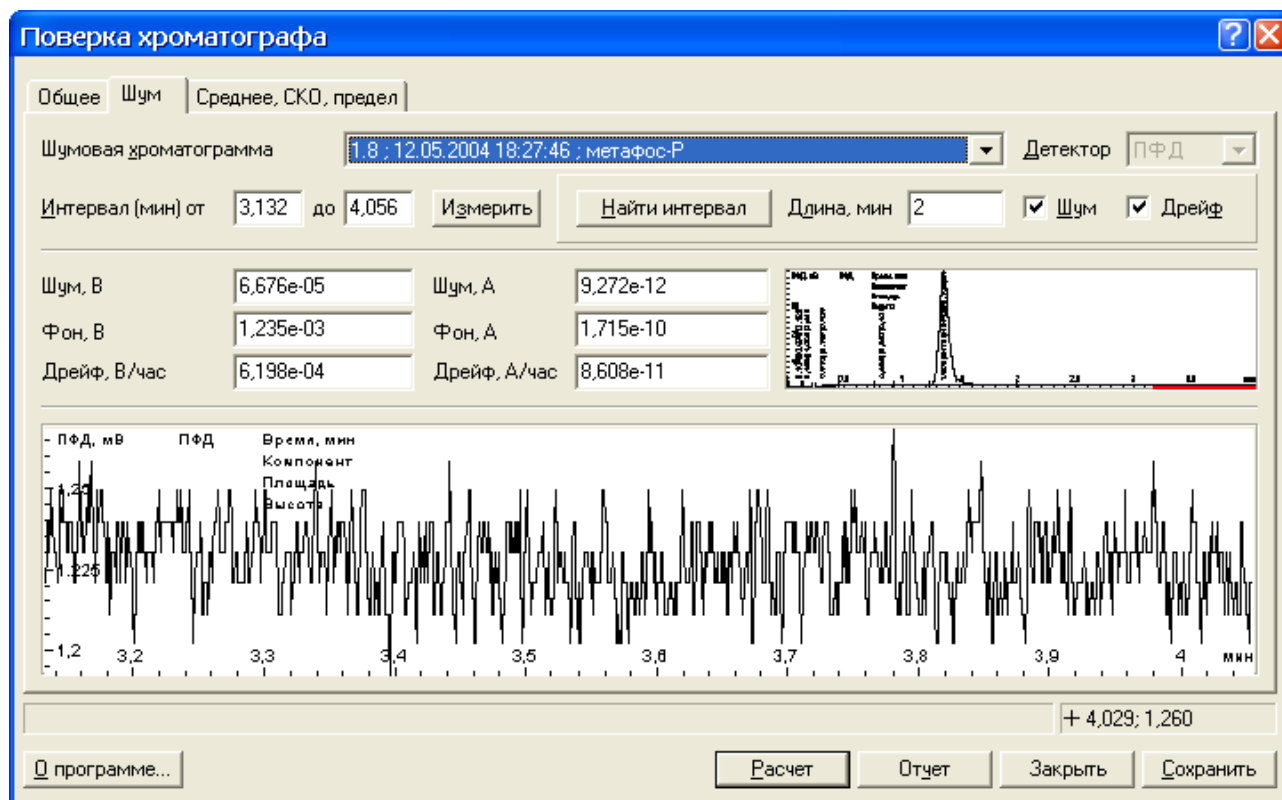


Рисунок 5.73. Поверка хроматографа. Закладка “Шум”

- Выберите из списка **шумовую хроматограмму** — хроматограмму, на которой будете измерять уровень шумов.
- Если на выбранной хроматограмме более одного канала — выберите нужный **детектор**.
- Задайте **интервал** координаты “время”, на котором будет измерен шум.
- Нажмите кнопку **Измерить** для измерения шума в указанном интервале.
- Нажмите кнопку **Найти интервал** для автопоиска интервала указанной длины с минимальным уровнем шума. Кнопка активна, если задана опция **Шум**. Установка опции **Дрейф** выключает дополнительное условие поиска — дрейф нулевой линии на искомом участке должен удовлетворять требованиям “Методики поверки”.

### Измерение СКО и предела детектирования

На закладке “Среднее, СКО, предел” (рисунок 5.74):

- Выберите из списка **методику**, в соответствии с которой производится поверка.
- Задайте название **пробы**.

**Поверка хроматографа**

Общее | Шум | Среднее, СКО, предел

Методика: Стандартная | Проба: |

Объем, мкл: 400 | Разведение: 8 | Колонка: Optima-5

Ведущий компонент: H2S | Детектор: ПФД | Ед. концентр.: мг/мл | Концентрация: 30e-6 | Множитель: 1 | Хим. формула: | Молек. масса: 0

Компонент	Детектор	Время	№	Дата, время	Проба
<input type="checkbox"/> MeSH	ПФД	2,382	<input checked="" type="checkbox"/> 3.39	21.05.2004 11:10:42	
<input type="checkbox"/> EtSH	ПФД	3,724	<input checked="" type="checkbox"/> 3.40	21.05.2004 11:41:31	
			<input checked="" type="checkbox"/> 3.46	21.05.2004 16:44:16	
			<input type="checkbox"/> 3.52	25.05.2004 11:18:23	

Выбрать все | Выбрать выделенные | Отменить все

Выбрать все | ☐ Фильтр по режиму | ☒ Фильтр по браку  
☒ Фильтр по методу

Расход г-н, мл/мин: 0 | Температура, °C: 20 | Давление, мм. рт. ст.: 760 | К: 0,94 | ☐ Квадратичная формула

В программе... | Расчет | Отчет | Закрыть | Сохранить

Рисунок 5.74. Поверка хроматографа. Закладка “Среднее, СКО, предел”

- Введите тип **колонки** на которой выполнено разделение компонентов пробы.
- Введите **объем** пробы в микролитрах.
- Задайте **разведение** пробы (при проведении поверки с капиллярной колонкой в это поле нужно внести коэффициент деления пробы в испарителе).
- Выберите **ведущий компонент** — компонент, по которому будет выведен подробный отчет.
- Укажите при необходимости другие **компоненты** из списка, по которым будет произведен расчет СКО и аномальных.
- Выберите **единицу измерения концентрации** компонента, введите **концентрацию** и, при необходимости, **множитель**.
- Установите опции **фильтр по режиму, по методу, по браку** для задания условий, по которым компоненты будут отображаться в списке.
- Выберите те **хроматограммы** из списка, которые должны участвовать в расчете.
- Задайте при необходимости поправочный коэффициент **К**.



**В зависимости от рабочего детектора и единиц концентрации становятся активными другие поля страницы, которые необходимо заполнить.**

Оценка шума может проводиться оперативно без использования диалога **Поверка**. Для этого выделите на хроматограмме участок, шум на котором необходимо оценить, и выберите в меню **Обработка | Операции** команду **Оперативная оценка шума**. Результат будет выведен в специальном окне, показанном на рисунке 5.75.

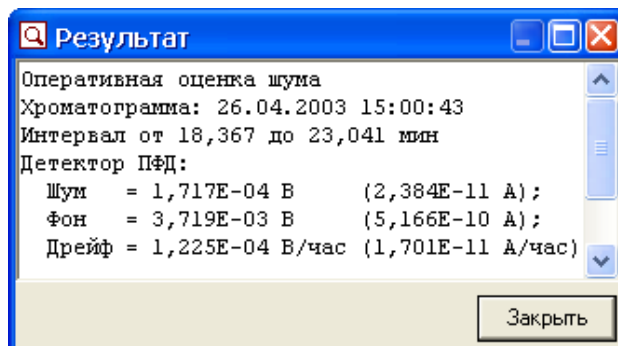


Рисунок 5.75. Результат оперативной оценки шума

## 5.8 Приложения

### 5.8.1 Настраиваемые столбцы таблиц программы

В данном разделе перечислены все столбцы таблиц программы *Хроматэк аналитик 2.5*, доступные для использования.

#### Краткое описание столбцов таблицы “Компоненты”

##### Время, мин.

Ожидаемое время удерживания хроматографического пика.

##### Название

Название компонента.

##### Окно

Допустимое отклонение заданного времени удерживания. По умолчанию задано значение 5 %, которое используется обычно для насадочных колонок. Для капиллярных колонок это значение меньше: 1-3 %

##### Детектор

Детектор, на котором ожидается появление пика. Если хроматограмма одноканальная, то детектор можно не указывать.

##### Лог. индекс

Значение логарифмического индекса удерживания компонента, рассчитанное исходя из логарифмической зависимости при изотермических условиях анализа.

##### Лин. индекс

Значение линейного индекса удерживания при программировании температуры.

**Окно, инд.**

Окно, в котором следует искать пик от заданного индекса удерживания. По умолчанию задано 2, значение зависит от свойств вещества.

**Идентификация**

Тип пика для идентификации и некоторых расчетов — опорный, обычный, основной или недетектируемый.

**Концентрация**

Значение концентрации компонента в пробе в случае проведения градуировочного анализа (или концентрация внутреннего стандарта).

**Мин. концентрация**

Минимально допустимое значение концентрации.

**Макс. концентрация**

Максимально допустимое значение концентрации.

**Ед.концентрации**

Название единицы концентрации компонента.

**Множитель**

Коэффициент пересчета концентрации. По умолчанию задано “1”.

**Функция**

Построение градуировочной зависимости компонента. Выбирается такая функция, которая наилучшим образом описывает экспериментальные данные. По умолчанию выставлена функция вида  $y(x) = K1 * x$ .

**Отклик**

Тип отклика пика — площадь или высота, по которому будут производиться расчеты.

**Вн. стандарт**

Задание внутреннего или внешнего стандарта для данного вещества.

**Группа**

Объединение компонентов в группы для суммирования результатов расчета.

**Брак?**

Признак исключения градуировочной точки из соответствующего графика.

**K2, K1, K0**

Значения коэффициентов градуировочной функции.

**Эфф. объем, мкл.**

Эффективный объем при расчете методом внутреннего стандарта.

**СКО, %**

Значение СКО для компонента. Выводится из окна “Градуировка”.

**Краткое описание столбцов таблицы “Расчет хроматограммы”****№**

Порядковый номер пика в канале хроматограммы.

**Время**

Время выхода пика

**Компонент**

Название компонента, сопоставленного данному пику при идентификации.

**Детектор**

Название детектора, на котором зафиксировано появление пика.

**Лог. индекс**

Значение логарифмического индекса удерживания вещества.

**Лин. индекс**

Значение линейного индекса удерживания вещества.

**K1**

Значения коэффициента градуировочной функции.

**Площадь**

Площадь пика.

**Высота**

Высота пика.

**Площадь, %**

Площадь пика в процентах от суммы площадей всех пиков в канале хроматограммы.

**Высота, %**

Высота пика в процентах от суммы высот всех пиков в канале хроматограммы.

**Теор. тарелки**

Отображение результатов расчета числа теоретических тарелок.

**Концентрация**

Рассчитанная концентрация компонента в пробе.

**Мин. концентрация**

Минимально допустимое значение концентрации.

**Макс. концентрация**

Максимально допустимое значение концентрации.

**Ед. концентрации**

Название единицы концентрации компонента.

**Погрешность, %**

Результат оперативного расчета погрешности градуировки.

**Множитель**

Коэффициент пересчета концентрации.

**Группа**

Объединение компонентов в группы для суммирования результатов расчета.

**Краткое описание столбцов таблицы “Расчет анализа”****Время**

Среднее время выхода пика.

**Компонент**

Название компонента.

**Детектор**

Название детектора, на котором зафиксировано появление пика.

**Лог. индекс**

Значение логарифмического индекса удерживания вещества.

**Лин. индекс**

Значение линейного индекса удерживания вещества.

**K1**

Значения коэффициента градуировочной функции.

**Площадь**

Площадь пика.

**Высота**

Высота пика.

**Площадь, %**

Площадь пика в процентах от суммы площадей всех пиков в канале хроматограммы.

**Высота, %**

Высота пика в процентах от суммы высот всех пиков в канале хроматограммы.

**Концентрация**

Рассчитанная концентрация компонента в пробе.

**Ед. концентрации**

Название единицы концентрации компонента.

**Сходимость**

Значение сходимости по концентрации.

**Погрешность, %**

Результат оперативного расчета погрешности градуировки.

**Количество**

Количество обработанных результатов.

**Множитель**

Коэффициент пересчета концентрации.

## Группа

Объединение компонентов в группы для суммирования результатов расчета.

### 5.8.2 Горячие клавиши

В списках горячих клавиш указаны буквы в русской кодировке. В случае использования английских букв, имеющих одинаковое написание с русскими, стоит указатель: англ.

В таблице 5.6 описаны клавиши, используемые для работы с графиком.

**Таблица 5.5. Горячие клавиши для работы с графиком**

Горячая клавиша	Выполняемое действие
Стрелка вверх	Растягивание хроматограммы по амплитуде.
Стрелка вниз	Сжатие хроматограммы по амплитуде.
Стрелка вправо	Растягивание хроматограммы по времени.
Стрелка влево	Сжатие хроматограммы по времени.
Shift+Стрелка вверх	Сдвиг на 1/10 часть экрана вверх.
Shift+Стрелка вниз	Сдвиг на 1/10 часть экрана вниз.
Shift+Стрелка вправо	Сдвиг на 1/10 часть экрана вправо.
Shift+Стрелка влево	Сдвиг на 1/10 часть экрана влево.
Enter	Показать все с автомасштабированием и перекрытием каналов.
Shift+Enter	Показать хроматограмму в фиксированном масштабе.
Ctrl+Enter	Показать все без перекрытия каналов.
Пробел	Привести в соответствие усиление.
Shift+Пробел	Привести в соответствие оси.

В таблице 5.7 описаны клавиши общего назначения.

Таблица 5.6. Горячие клавиши общего назначения

Горячая клавиша	Выполняемое действие
Alt+p	Вызов меню Проект.
Alt+П	Вызов меню Правка.
Alt+B	Вызов меню Вид.
Alt+X	Вызов меню Хроматограмма.
Alt+O	Вызов меню Обработка.
Alt+C	Вызов меню Сервис.
Ctrl+O (англ)	Запуск администратора проектов.
F4	Запуск конвертера хроматограмм.
Ctrl+X (англ)	Вырезать.
Ctrl+C (англ)	Копировать.
Ctrl+V	Вставить.
Alt+Ins	Добавить запись.
Ctrl+Del	Удалить запись.
Ctrl+Enter	Подтвердить запись.
Ctrl+1	Паспорт хроматограммы.
Ctrl+2	Градуировка.
Ctrl+M (англ)	Линия маркера.
Alt+Enter	Свойства (в зависимости от активности страницы, вызывается тот или иной диалог настройки свойств).
F5	Обновить.
Ctrl+N	Запуск вспомогательного окна.
Alt+Стрелка вверх	Первая хроматограмма.
Alt+Стрелка вниз	Последняя хроматограмма.
Alt+Стрелка вправо	Следующая хроматограмма.
Alt+Стрелка влево	Предыдущая хроматограмма.
Ctrl+Стрелка вправо	Просмотр подножия следующего пика на хроматограмме (относительно выделенного).
Ctrl+Стрелка влево	Просмотр подножия предыдущего пика на хроматограмме (относительно выделенного).
Ctrl+I	Список хроматограмм.
Ctrl+Q	Показать панель управления.
Shift+Ctrl+M (англ)	Выбрать метод для передачи панели управления.
Ctrl+S	Сохранить.

# Глава 6

## Пошаговое руководство

### 6.1 Общие принципы работы с программным обеспечением “Хроматэк Аналитик”



В основных разделах данного руководства пользователя информация по работе с каждой из частей комплекса изложена достаточно подробно и последовательно. Если при работе с программным комплексом вы забыли, какова последовательность операций, необходимых для получения результатов хроматографического анализа, если вы затрудняетесь ответить на вопрос: “А что же нужно сделать дальше?” — внимательно прочитайте данный раздел.

Материал в Пошаговом руководстве изложен сжато, по шагам. Для того чтобы получить более подробную информацию по каждому из рассматриваемых шагов работы с программой, изучите раздел из основных глав Руководства пользователя, соответствующий данному шагу.

Работа с программой *Панель управления* описана на примере *Панели управления Кристалл-ПМ2*. Управление хроматографами с процессорными модулями ПМ1 и Кристалл-2000 осуществляется, в целом, аналогично, за исключением ряда индивидуальных особенностей, описанных в соответствующих разделах главы 2.

В качестве программы обработки хроматографической информации в данном пошаговом руководстве рассматривается программа *Хроматэк Аналитик 2.5*.

Процесс получения результатов хроматографического анализа протекает в три этапа:

1. Подключение и настройка хроматографа.
2. Создание метода.
3. Проведение анализа по созданному методу.

### 6.2 Подключение и настройка хроматографа

Действия по подключению и настройке обычно выполняются однократно, при первом включении хроматографа. К этим действиям относятся:

1. Подключение хроматографа к компьютеру и создание нового соединения.
2. Настройка конфигурации хроматографа.



В некоторых случаях, при решении на хроматографе сложных задач, связанных с необходимостью изменять газовую схему прибора, переустанавливать хроматографические колонки, детекторы, может возникнуть необходимость изменения настроек конфигурации прибора.

### Шаг 1. Подключение хроматографа к компьютеру. Создание соединения

- Подключите хроматограф к компьютеру с помощью кабеля USB или COM.



В случае подключения по USB необходимо преобразовать подключение в виртуальный COM-порт. Подробнее об этом см. раздел 2.2 (часть 1 печатной версии руководства пользователя).

- Запустите с помощью ярлыка на рабочем столе Windows программу *Кристалл ПМ2* (*Кристалл ПМ1* или *Кристалл 2000*, если вы хотите создать соединение с хроматографами, оборудованными этими процессорными модулями). На экране автоматически появится диалог **Соединения с приборами**. Нажмите в данном диалоге кнопку **Мастер** для запуска вспомогательной программы **Мастер нового соединения**. Вводя в диалоговых окнах, последовательно предлагаемых вспомогательной программой, необходимую информацию, создайте новое соединение с хроматографом.

### Шаг 2. Настройка конфигурации хроматографа

- Включите хроматограф.
- Запустите соединение двойным щелчком по его ярлыку на рабочем столе Windows. Загрузятся программы *Панель управления* и *Хроматэк Аналитик*.
- Перейдите в программу *Панель управления*.
- Запустите диалог **Конфигурация** и задайте конфигурационные параметры хроматографа.



Для хроматографа с процессорным модулем ПМ2, подробную информацию о настройке конфигурации, о том, какие параметры необходимо задать и какие значения им присвоить, можно получить в разделе 2.3 (часть 1 печатной версии руководства пользователя).

Хроматограф настроен и готов к работе.

## 6.3 Создание метода

Наиболее важным и ответственным является этап создания метода, поскольку от точности метода зависит достоверность результатов хроматографических анализов. На этом этапе выполняются операции:

1. Задание режима хроматографа.
2. Проведение анализа стандартного образца (нескольких анализов, если в качестве метода количественного расчета предполагается использование метода абсолютной градуировки или внешнего стандарта).
3. Настройка операций обработки хроматограммы стандартного образца.
4. Создание списка компонентов.




**В зависимости от выбранного метода количественного расчета метод может быть создан, как с проведением градуировки, так и без нее. Алгоритм создания метода показан на рисунке 6.1.**

### 6.3.1 Создание метода без проведения градуировки

Если коэффициенты чувствительности детектора к определяемым веществам заранее известны (например, в методе внутренней нормализации) или расчет происходит без применения коэффициентов (например, в методе процентной нормализации), создание метода не требует проведения градуировки.

#### Шаг 1. Задание режима хроматографа

- Запустите соединение с помощью ярлыка , расположенного на рабочем столе Windows. Загрузятся программы *Панель управления* и *Хроматэк Аналитик*.
- Перейдите в программу *Панель управления*. В меню **Режим** выберите команду **Хроматограф**.
- Задайте необходимые значения температур, расходы газов. Задайте параметры продувки после анализа, если требования Вашей методики ее предусматривают. Задайте время каждого анализа для каждого из сеансов. Если в соединении создан только один сеанс (на хроматографе проводится только один вид анализов), необходимо задавать только **Время анализа 1**.

При нажатии на кнопку **ОК** режим будет передан хроматографу. Теперь режим можно сохранить, чтобы он всегда обрабатывался при запуске соединения. Для этого:

- В меню **Режим** программы *Панель управления* команду **Сохранить**.
- На экране появится стандартный диалог сохранения файла. Укажите в нем место сохранения файла, его имя и нажмите на кнопку **ОК**.

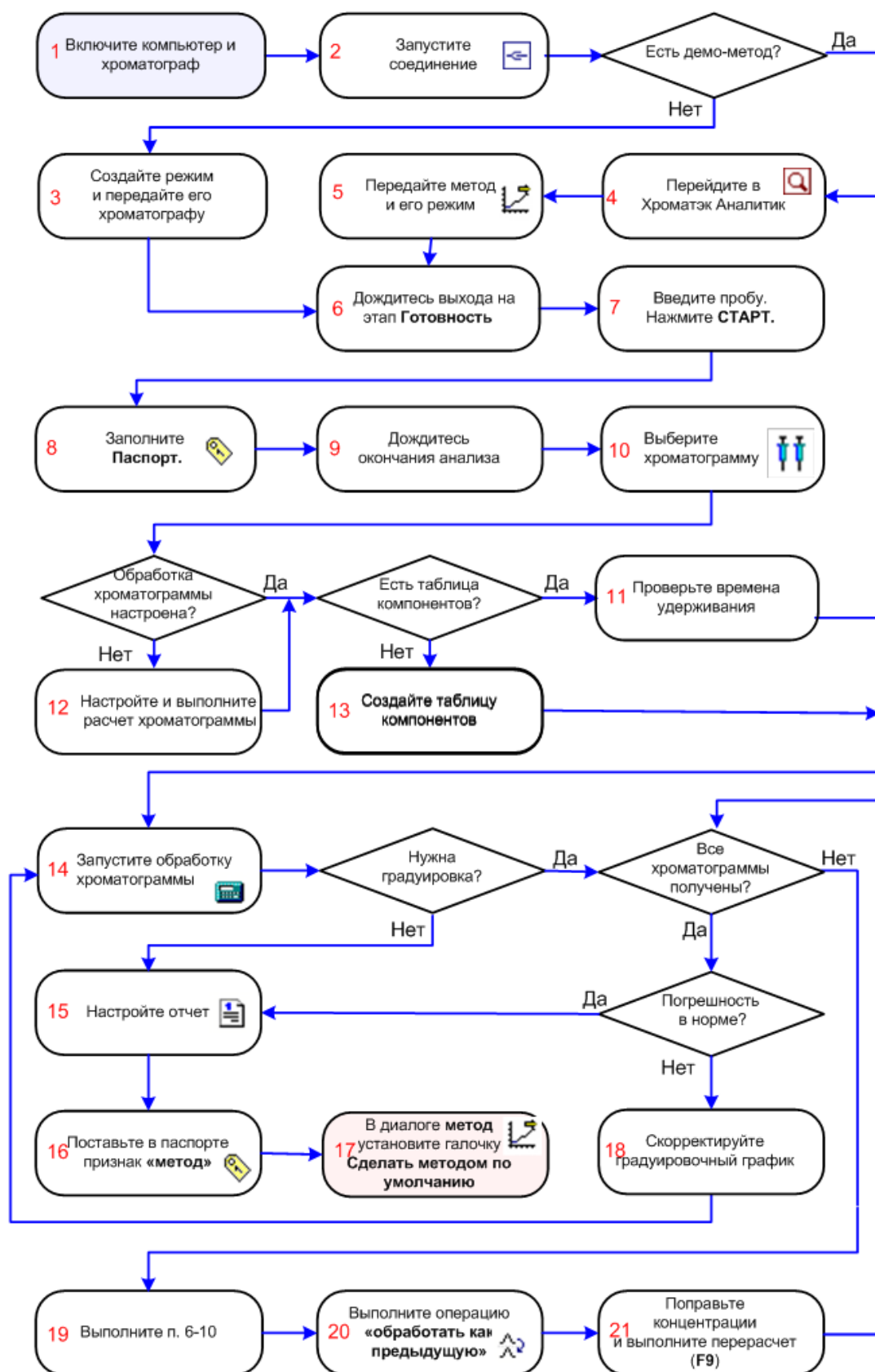


Рисунок 6.1. Создание метода

- На запрос **Загружать данный режим автоматически при следующем подключении к прибору?** ответьте **Да**.

В окне **Состояние** можно наблюдать за изменением параметров режима. После выхода прибора на рабочий режим, в левом нижнем углу окна программы появится надпись **Готовность**.

### Шаг 2. Получение и обработка хроматограммы

- Введите пробу и нажмите кнопку **Старт** на хроматографе. Автоматически на экране появится программа *Хроматэк Аналитик 2.5*.
- Заполните поля в диалоге **Паспорт**.
- Дождитесь выхода всех компонентов.



**Перед проведением обработки первой хроматограммы выполните настройку программы *Хроматэк Аналитик 2.5* (см. разделы 5.3 и 5.4).**

- В меню **Обработка** выберите команду **Расчет хроматограммы**. В появившемся диалоговом окне поставьте галочки у операций **Интегрирование**, **Идентификация** и **Количественный расчет**. Настройте указанные операции (выделите операцию и нажмите кнопку **Настройка**, после чего, в появившемся диалоге, задайте все необходимые параметры). После настройки нажмите кнопку **Выполнить**.
- Проверьте разметку пиков. В случае некорректной разметки повторите расчет хроматограммы, предварительно скорректировав настройки операции **Интегрирование**, либо проведите **ручную корректировку пиков**.



**Подробно Расчет хроматограммы описан в разделе 5.5.8.**

### Шаг 3. Создание списка компонентов

Команда **Сгенерировать компоненты** меню **Обработка** позволит вам быстро создать список компонентов по пикам, обнаруженным на хроматограмме. При этом в таблицу компонентов будут добавлены строки со значениями времен удерживания пиков. В каждую строку останется внести название компонента и, при необходимости, скорректировать предложенные по умолчанию параметры.

Если размеченных пиков на хроматограмме слишком много, а компоненты требуется создать лишь для небольшого их числа, удобнее добавить компоненты вручную. Для создания новой записи таблицы компонентов нажмите правую кнопку мыши в рабочей области страницы **Компоненты** и выберите команду **Добавить запись**.



**Подробно создание списка компонентов описано в разделе 5.5.10.**

## Шаг 4. Завершение создания метода

Если количественный расчет требует применения индивидуальных градуировочных коэффициентов (например, при расчете методом внутренней нормализации), их необходимо внести в столбец **K1** на странице **Компоненты**.

После проведения всех настроек выполните еще раз **Расчет хроматограммы** (поскольку изменения настроек расчета уже не требуется, вы можете произвести быстрый перерасчет, нажав на клавиатуре компьютера клавишу **F9**). Настройки всех выполненных операций будут сохранены в текущей хроматограмме.

Для завершения создания метода:


- откройте **Паспорт хроматограммы** и на закладке **Общее** установите признак **Метод**;
- откройте диалог **Метод** и установите галочку **Сделать методом по умолчанию для данного соединения**.

Метод создан. Теперь можно переходить к проведению количественного анализа неизвестной пробы (раздел 6.4).

## 6.3.2 Создание метода с проведением градуировки

Проведение градуировки необходимо в тех случаях, когда коэффициенты чувствительности детектора к анализируемым веществам необходимо определить экспериментально (методы абсолютной градуировки, внутреннего стандарта, внешнего стандарта). В этом случае создание метода состоит из следующих этапов: задание режима хроматографа, снятие градуировочных хроматограмм, обработка первой хроматограммы, обработка последующих хроматограмм, оценка градуировочного графика, корректировка градуировочного графика, присвоение хроматограмме признака **Метод**.

### Шаг 1. Задание режима хроматографа

- Запустите соединение с помощью ярлыка , расположенного на рабочем столе Windows. Загрузятся программы *Панель управления* и *Хроматэк Аналитик*.
- Перейдите в программу *Панель управления*. В меню **Режим** выберите команду **Хроматограф**.
- Задайте необходимые значения температур, расходы газов. Задайте параметры продувки после анализа, если требования Вашей методики ее предусматривают. Задайте время каждого анализа для каждого из сеансов. Если в соединении создан только один сеанс (на хроматографе проводится только один вид анализов), необходимо задавать только **Время анализа 1**.

При нажатии на кнопку **ОК** режим будет передан хроматографу. Теперь режим можно сохранить, чтобы он всегда обрабатывался при запуске соединения. Для этого:

- В меню **Режим** программы *Панель управления* команду **Сохранить**.
- На экране появится стандартный диалог сохранения файла. Укажите в нем место сохранения файла, его имя и нажмите на кнопку **ОК**.
- На запрос **Загружать данный режим автоматически при следующем подключении к прибору?** ответьте **Да**.

В окне **Состояние** можно наблюдать за изменением параметров режима. После выхода прибора на рабочий режим, в левом нижнем углу окна программы появится надпись **Готовность**.

## Шаг 2. Получение и обработка первой хроматограммы

- Введите пробу и нажмите кнопку **Старт** на хроматографе. Автоматически на экране появится программа *Хроматэк Аналитик 2.5*.
- Заполните поля в диалоге **Паспорт** (обязательно должны быть заполнены поля **Название метода**, **Объем**, а так же установлены признаки **Метод** и **Градуировка**).
- Дождитесь выхода всех компонентов.



При заполнении паспорта следует учитывать, что его данные (кроме названия пробы и номера хроматограммы) будут передаваться в паспорта хроматограмм анализов, получаемых на основании создаваемого метода.



Перед проведением обработки первой хроматограммы выполните настройку программы *Хроматэк Аналитик 2.5* (см. разделы [5.3](#) и [5.4](#)).

- В меню **Обработка** выберите команду **Расчет хроматограммы**. В появившемся диалоговом окне поставьте галочки у операций **Интегрирование**, **Идентификация**, **Градуировочные коэффициенты** и **Количественный расчет**. Настройте указанные операции (выделите операцию и нажмите кнопку **Настройка**, после чего, в появившемся диалоге, задайте все необходимые параметры). После нажатия на кнопку **ОК** последовательность операций будет выполнена. При этом в соответствии с заданными критериями будут размечены пики на хроматограмме.
- Проверьте разметку пиков. В случае некорректной разметки повторите расчет хроматограммы, предварительно скорректировав настройки операции **Интегрирование**, или проведите **ручную корректировку пиков**.



Подробно Расчет хроматограммы описан в разделе [5.5.8](#).

## Шаг 3. Создание списка компонентов

Команда **Сгенерировать компоненты** меню **Обработка** позволит вам быстро создать список компонентов по пикам, обнаруженным на хроматограмме. При этом в таблицу компонентов будут добавлены строки со значениями времен удерживания пиков. В каждую строку останется внести название компонента и, при необходимости, скорректировать предложенные по умолчанию параметры.



Команда **Сгенерировать компоненты** создает строку компонента для каждого размеченного на хроматограмме пика. Поэтому перед выполнением данной команды удалите вручную все лишние пики на хроматограмме.

Если размеченных пиков на хроматограмме слишком много, а компоненты требуется создать лишь для небольшого числа, удобнее добавить компоненты вручную. Для создания

новой записи таблице компонентов нажмите правую кнопку мыши в рабочей области страницы **Компоненты** и выберите команду **Добавить запись**.

В столбец **Концентрация** таблицы **Компоненты** внесите концентрации компонентов. Для расчетов с использованием стандарта укажите для каждого компонента в соответствующем столбце его стандарт.

После проведения всех настроек выполните еще раз **Расчет хроматограммы** (поскольку изменения настроек расчета уже не требуется, вы можете произвести быстрый перерасчет, нажав на клавиатуре компьютера клавишу **F9**). Настройки всех выполненных операций будут сохранены в текущей хроматограмме.



**Подробно создание списка компонентов описано в разделе 5.5.10.**

#### Шаг 4. Получение и обработка последующих хроматограмм

- Выполните еще один анализ стандартного образца (повторите шаг 2).
- В меню **Обработка | Операции** выберите команду **Обработать как предыдущую**, или нажмите на панели инструментов кнопку
- Поправьте, при необходимости, концентрации компонентов в столбце **Концентрация** таблицы **Компоненты**.
- Проверьте разметку пиков. При необходимости скорректируйте пики вручную.
- Нажмите клавишу **F9** для пересчета хроматограммы.

Аналогичным образом выполните необходимое количество анализов стандартных образцов и обработайте все градуировочные хроматограммы.


#### Шаг 5. Оценка градуировочного графика

Градуировочный график строится программой автоматически на основании имеющихся данных.


- Нажмите правую кнопку мыши в таблице **Компоненты** (в любом месте, кроме заголовка) и в появившемся контекстном меню выберите команду **Градуировка**, при этом появится окно с градуировкой выделенного компонента.
- Оцените значение **погрешности** для каждого градуировочного уровня.
- С помощью кнопок в окне **Градуировка**, перейдите к следующему компоненту и оцените значение погрешности для него. Повторите оценку погрешностей для каждого компонента.

## Шаг 6. Корректировка градуировочного графика

Если хотя бы для одного градуировочного уровня значение **погрешности** неудовлетворительно, необходимо проверить разметку пика компонента в соответствующей хроматограмме. Для этого:

- В таблице градуировочных точек выберите точку, для которой значение погрешности не удовлетворяет требованиям методики данного анализа (при выборе точки в строке таблицы она будет выделена на графике).
- Нажатием на кнопку , перейдите в хроматограмму “выпадающей” точки и скорректируйте разметку соответствующего пика.
- Нажмите клавишу **F9** для перерасчета.

Если после проведения ручной разметки точка по прежнему не совпадает с графиком построенной функции, можно исключить ее из расчета, установив в соответствующей этой точке строке таблицы флажок **Брак?**. Не забудьте после этой операции снова провести пересчет (нажмите клавишу **F9**).

Если необходимо исключить точки всех компонентов одной хроматограммы из градуировочного графика, перейдите на эту хроматограмму (нажмите на кнопку ) , в меню **Вид** вызовите диалог **Паспорт** и смените признак **Градуировка** на **Количественный расчет**. Данная хроматограмма будет полностью исключена из градуировки.



**Корректировка градуировочного графика не может быть проведена в основном окне Хроматэк Аналитик 2.5 во время анализа. Для того чтобы провести корректировку, или дождитесь окончания анализа, или запустите вспомогательное окно программы, выбрав команду Новое окно в меню Вид.**

Если значения погрешности градуировки для всех точек оказались в пределах допуска, то градуировку можно считать успешно завершенной. Градуировочные коэффициенты будут автоматически сохранены в хроматограмме.

## Шаг 7. Завершение создания метода

Для завершения создания метода:

- откройте **Паспорт хроматограммы** и на закладке **Общее** установите признак **Метод**;
- откройте диалог **Метод** и установите галочку **Сделать методом по умолчанию для данного соединения**.


Метод создан. Теперь можно переходить к проведению количественного анализа неизвестной пробы (раздел 6.4).

## 6.4 Проведение анализа по созданному методу



Расчет концентраций компонентов анализируемой смеси производится на основании полученных при градуировке зависимостей или по заранее известным зависимостям. Алгоритм проведения анализа показан на рисунке 6.2.

### Шаг 1. Передача хроматографу режима из метода

- Запустите соединение с помощью ярлыка , расположенного на рабочем столе Windows. Загрузятся программы *Панель управления* и *Хроматэк Аналитик*.
- В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* выполните команду **Метод** в меню **Хроматограф**.
- В появившемся диалоге **Метод** выберите в списке метод, по которому будет проведен количественный анализ, установите галочку **Передать режим из выбранного метода** и нажмите кнопку **ОК**.

С помощью команды **Прибор** меню **Хроматограф** вы можете отобразить на экране *Панель управления* и наблюдать за изменением параметров режима. После выхода прибора на рабочий режим, в левом нижнем углу окна программы появится надпись **Готовность**.

### Шаг 2. Получение и обработка хроматограммы

- Введите пробу и нажмите кнопку **Старт** на хроматографе. Автоматически на экране появится программа *Хроматэк Аналитик 2.5*.
- Заполните поля в диалоге **Паспорт**, установите назначение хроматограммы **Количественный расчет**.
- Дождитесь выхода всех компонентов.
- Запустите на выполнение последовательность **Расчет хроматограммы**.
- Если количественный расчет производится методом внутреннего стандарта, задайте концентрацию внутреннего стандарта в столбце **Концентрация** таблицы **Компоненты**. При использовании в расчетах концентраций недетектируемых компонентов задайте их значения.
- При необходимости скорректируйте разметку пиков и выполните перерасчет (нажмите клавишу **F9**).

Результат количественного расчета можно просмотреть в таблице на странице **Расчет хроматограммы**.

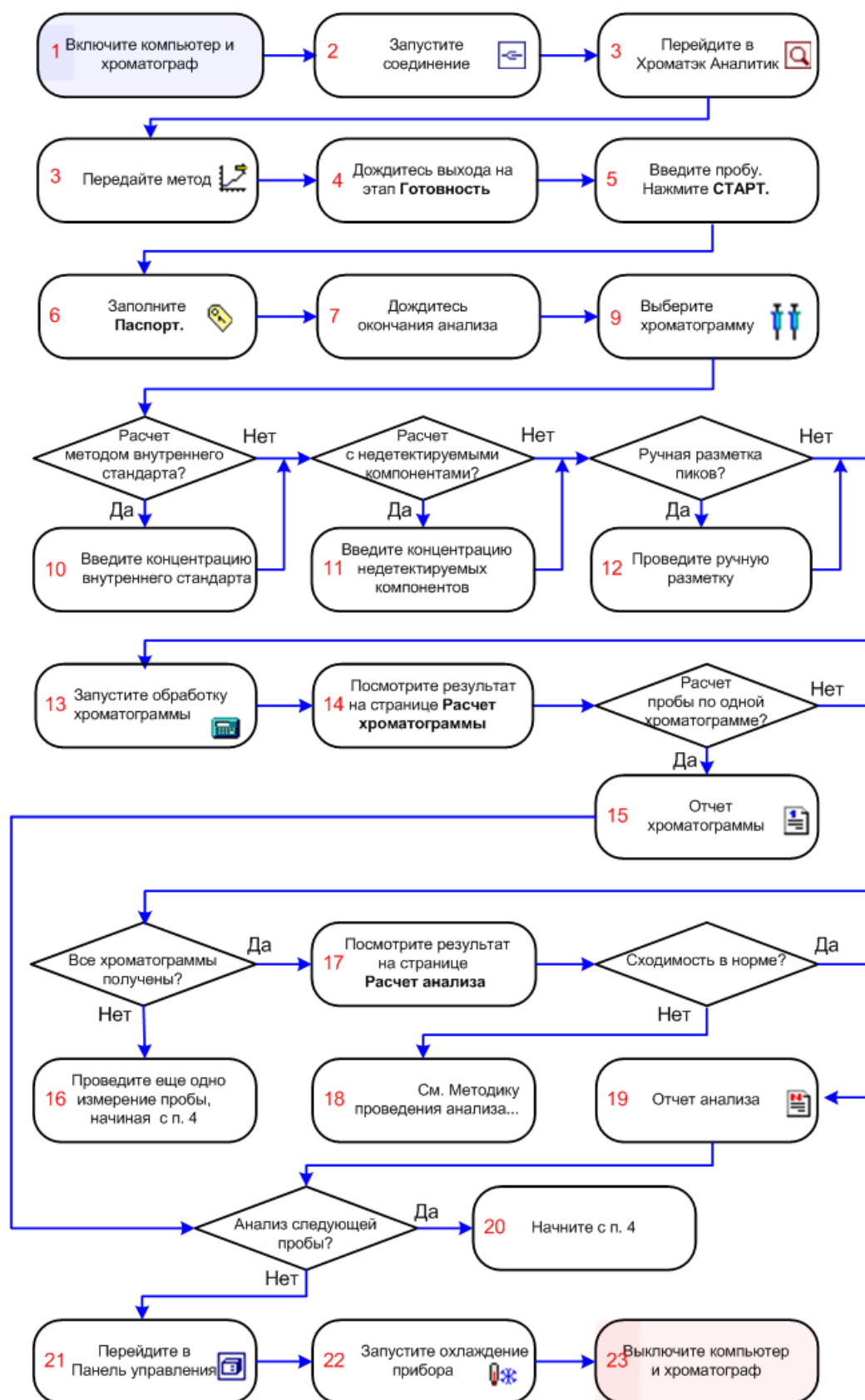


Рисунок 6.2. Проведение анализа

### Шаг 3. Печать отчета

Обычно распечатка отчета завершает процесс получения результатов хроматографического анализа. Существуют два шаблонных отчета — **Отчет хроматограммы** и **Отчет анализа**. Отличие этих отчетов заключается в том, что в **Отчете анализа**, в отличие от **Отчета хроматограммы**, присутствуют данные о сходимости результатов, о количестве и номерах участвующих в анализе хроматограмм.



Обычно при количественных измерениях для повышения достоверности одну и ту же пробу хроматографируют несколько раз, и за результат анализа принимают среднее значение результатов нескольких хроматограмм. В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* реализован расчет среднего результата по концентрациям отдельного компонента и группы компонентов, а также расчет сходимости анализа по компонентам. Расчет сходимости осуществляется по формуле:

$$100(C_{max} - C_{min})/C_{cp},$$

Указанные расчеты производятся с помощью операции **Расчет анализа**. Результат расчета анализа выводится на одноименной странице главного окна.

- Для запуска операции **Отчет хроматограммы**, или выберите соответствующую команду в меню **Обработка | Операции**, или нажмите на кнопку панели инструментов
- Для запуска операции **Отчет анализа**, или выберите соответствующую команду в меню **Обработка | Операции**, или нажмите на кнопку панели инструментов

После настройки параметров отчета нажмите кнопку **ОК** для вывода отчета на печать.

## 6.5 Проверка точности и корректировка метода


Если количественный расчет выполняется по методу с градуировкой, достоверность градуировки необходимо периодически проверять.

### Шаг 1. Передача хроматографу режима из метода

- Запустите соединение с помощью ярлыка , расположенного на рабочем столе Windows. Загрузятся программы *Панель управления* и *Хроматэк Аналитик*.
- В программе *Хроматэк Аналитик 2.5* выполните команду **Метод** в меню **Хроматограф**.
- В появившемся диалоге **Метод** выберите в списке метод, по которому будет проведен количественный анализ, установите галочку **Передать режим из выбранного метода** и нажмите кнопку **ОК**.

С помощью команды **Прибор** меню **Хроматограф** вы можете отобразить на экране *Панель управления* и наблюдать за изменением параметров режима. После выхода прибора на рабочий режим, в левом нижнем углу окна программы появится надпись **Готовность**.

## Шаг 2. Получение и обработка хроматограммы

- Введите пробу стандартного образца с известной концентрацией компонентов. Нажмите кнопку **Старт** на хроматографе. Автоматически на экране появится программа *Хроматэк Аналитик 2.5*.
- Заполните поля в диалоге **Паспорт**, установите назначение хроматограммы **Градуировка**.
- Дождитесь выхода всех компонентов.
- Запустите на выполнение последовательность **Расчет хроматограммы**.
- При необходимости скорректируйте разметку пиков.
- В столбец **Концентрация** таблицы **Компоненты** внесите концентрации компонентов.
- Выполните перерасчет (нажмите клавишу F9).
- Нажмите правую кнопку мыши в таблице **Компоненты** (в любом месте, кроме заголовка) и в появившемся контекстном меню выберите команду **Градуировка**, при этом появится окно с градуировкой выделенного компонента. В левом верхнем углу окна **Градуировка** указано название компонента, для которого построен текущий градуировочный график, рассчитанные коэффициенты функции градуировки и значение **погрешности**.
- Передвигаясь по компонентам с помощью кнопок  в окне **Градуировка**, оцените значение погрешности для каждой градуировочной точки.



Если погрешность удовлетворяет требованиям методики, градуировка верна. В этом случае, хроматограмму, с помощью которой проверялась градуировка, нужно объявить методом, установив в ее Паспорте соответствующий признак. В дальнейшем, количественный анализ нужно проводить на основе именно этого, нового метода.

Если же значение погрешности неудовлетворительно, необходимо переградуировать хроматограф (создать новый метод). Алгоритм создания нового метода полностью аналогичен описанному в разделе 6.3.2. Обратите внимание на то, что название нового метода не должно совпадать с названием старого.

# Глава 7

## Хроматэк Аналитик 1.5

Программа предназначена для автоматизации работы с аппаратным комплексом на базе хроматографов “Кристалл-2000”, “Кристалл-2000М”, “Кристалл-2000М” и обработки данных, полученных в результате хроматографического анализа.

### 7.1 Основные сведения о программе

#### 7.1.1 Запуск программы

Программа *Хроматэк Аналитик 1.5* может быть запущена в двух режимах:

- с подключением к *Панели управления* (режим on-line);
- без подключения к *Панели управления* (режим off-line).

При запуске программы *Панель управления* автоматически запускается и *Хроматэк Аналитик 1.5*. В этом случае программа *Хроматэк Аналитик 2.5* является активной, то есть может принимать от *Панели управления* хроматографическую информацию.

Если запустить *Хроматэк Аналитик 1.5* с помощью ярлыка на рабочем столе Windows (или из меню **Пуск**), она не будет связана с программой **Панель управления** и, следовательно, неактивна.

#### 7.1.2 Главное окно программы

Главное окно программы *Хроматэк Аналитик 1.5*, показанное на рисунке 7.1 состоит из следующих элементов (сверху вниз):

- заголовок окна;
- главное меню;

- панель инструментов;
- рабочая область окна;
- строка состояния.

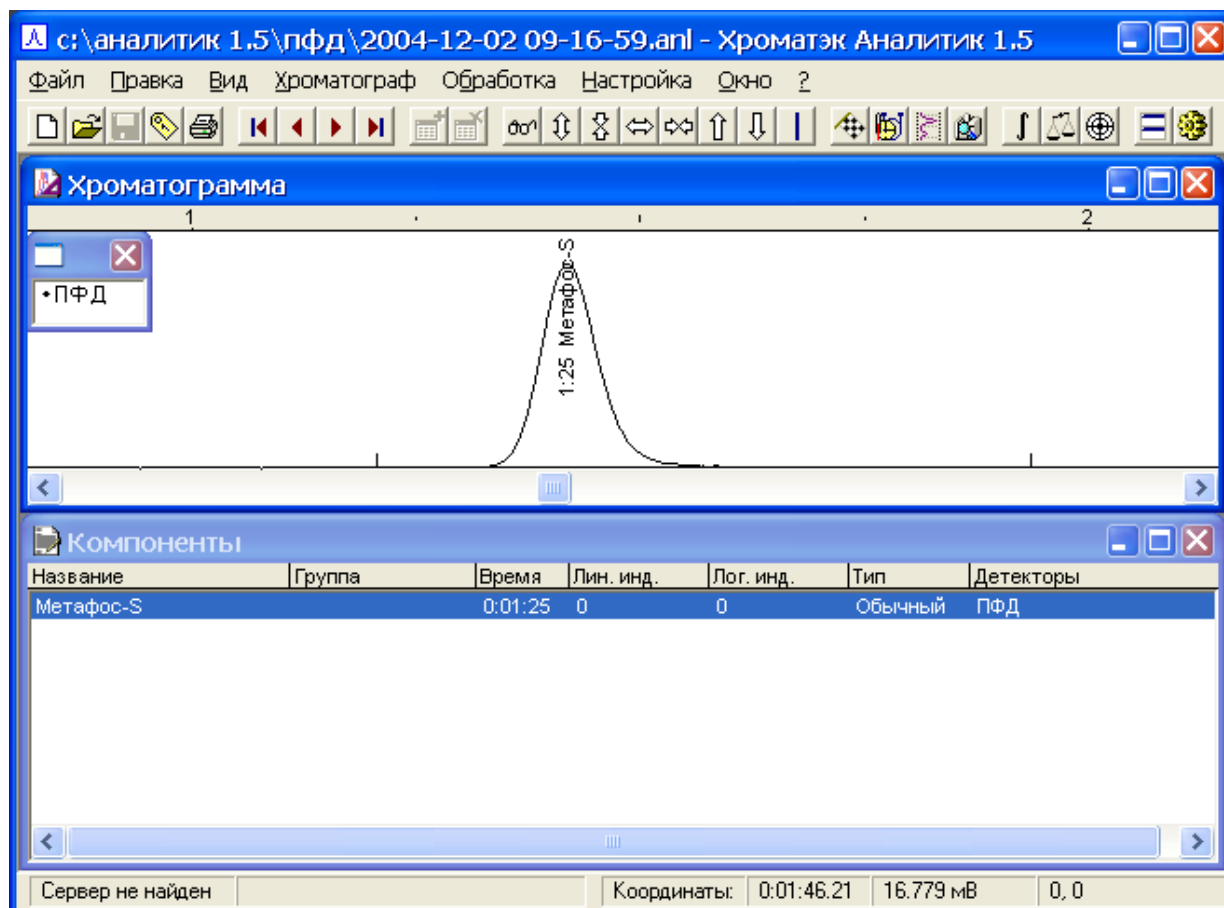


Рисунок 7.1. Главное окно программы

Заголовок главного окна *Хроматэк Аналитик 1.5* содержит информацию о названии открытого в данный момент файла и пути к нему.

Главное меню содержит набор команд, необходимых для работы с программой.

На панели инструментов расположены кнопки быстрого доступа, дублирующие наиболее часто используемые команды меню.

В рабочей области располагаются дочерние окна программы — **Хроматограмма** и **Компоненты**. Дочерние окна могут располагаться в главном окне каскадом (одно над другим) или мозаикой. Любое из окон может быть развернуто на весь экран. Подробнее о работе с окнами см. раздел 7.2.3.

Строка состояния расположена в нижней части окна программы. Она предназначена для индикации выполняемых программой операций. Когда курсор мыши находится над страницей **Хроматограмма**, в строке состояния выводятся координаты курсора (время и значение сигнала) и размер выведенного на экран участка хроматограммы. Кроме того, если курсор мыши остановлен над какой-либо кнопкой панели инструментов или выбран какой-либо

пункт меню, в строке состояния выводится подсказка о назначении соответствующего элемента.

Анализ водки	Нулевой [1:27:13]	Координаты:	0:06:06.65	23.291 мВ	0, 0	Размер:	0:10:02.99	21.419 мВ	0, 0
--------------	-------------------	-------------	------------	-----------	------	---------	------------	-----------	------

**Рисунок 7.2. Строка состояния**

### 7.1.3 Меню и панель инструментов




Меню содержит набор команд программы *Хроматэк Аналитик 1.5*. На панели инструментов расположен базовый набор кнопок быстрого доступа.

Если в программе не открыто ни одного файла, большая часть кнопок на панели инструментов недоступна.

Назначение каждой кнопки панели инструментов приведено в таблице 7.1.

**Таблица 7.1. Кнопки панели инструментов**

Кнопка	Выполняемое действие
	Создание нового метода
	Открыть хроматограмму или метод
	Сохранить хроматограмму
	Паспорт хроматограммы
	Печать отчета
	Перейти к первой хроматограмме в текущей папке
	Перейти к предыдущей хроматограмме в текущей папке
	Перейти к следующей хроматограмме в текущей папке
	Перейти к последней хроматограмме в текущей папке
	Добавить компонент
	Удалить компонент
	Показать надписи над пиками
	Растянуть хроматограмму по вертикали
	Сжать хроматограмму по вертикали
	Растянуть хроматограмму по горизонтали
	Сжать хроматограмму по горизонтали
	Сдвинуть хроматограмму вверх на 1/10 экрана
	Сдвинуть хроматограмму вниз на 1/10 экрана
	Показать на хроматограмме линию маркера
	Запустить метод
	Передать режим хроматографу
	Запустить на выполнение сеанс (запись хроматограммы)
	Показать <i>Панель управления</i>
	Интегрировать хроматограмму
	Выполнить количественный расчет

- |   |                                    |
|---|------------------------------------|
|  | Калибровка                         |
|  | Расположить дочерние окна мозаикой |
|  | Открыть дополнительное окно        |
- 

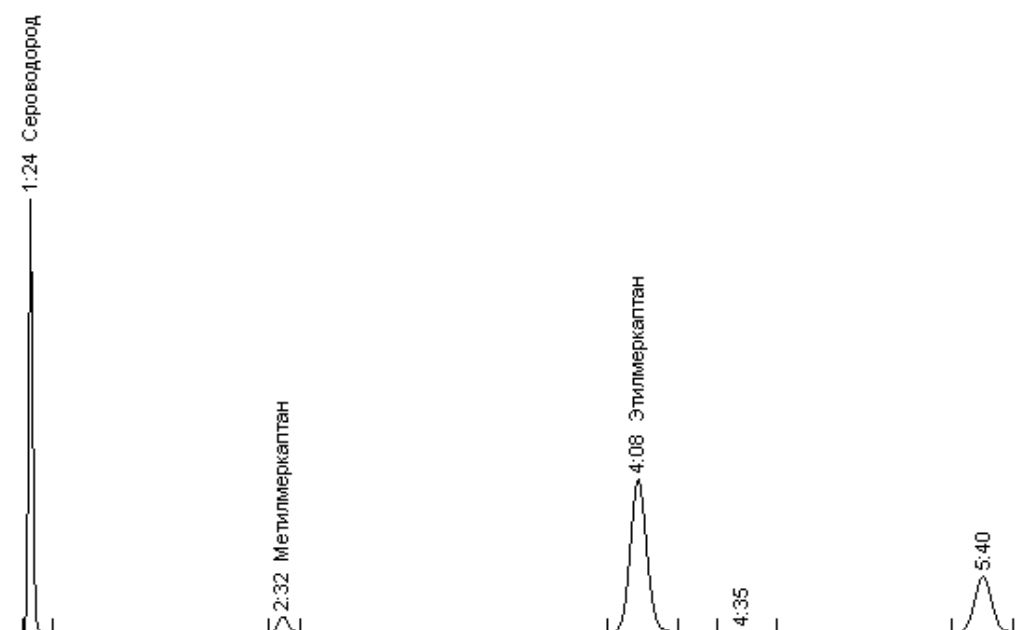
### 7.1.4 График

*Хроматэк Аналитик 1.5* предоставляет широкие возможности при работе с графической информацией.

Основные элементы графика хроматограммы представлены на рисунке [7.3](#).

При работе с графиком *Хроматэк Аналитик 1.5* позволяет:

- масштабировать график в реальном времени, увеличивая и уменьшая на нем некоторую прямоугольную область;
- отображать многоканальные хроматограммы, содержащие, как сигналы с детекторов, так и диагностическую информацию (например: значения температур, расходов, напряжений детекторов и др.);
- корректировать пики на хроматограмме вручную;



**Рисунок 7.3. Пример графика хроматограммы**

Подробно работа с графиком описана в разделе [7.3.3](#)

## 7.2 Настройка программы

### 7.2.1 Настройка параметров анализа

Команда меню **Настройка | Анализ** выводит диалог **Анализ**, показанный на рисунке 7.4, в котором задаются параметры автоматического проведения анализа.

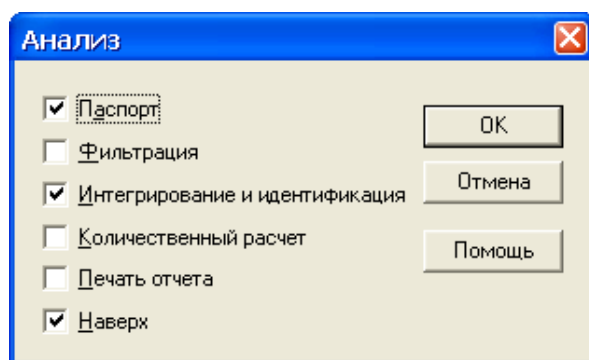


Рисунок 7.4. Настройка анализа

- Отметьте опцию **Паспорт** для того, чтобы сразу после начала анализа автоматически предлагалось заполнение паспорта хроматограммы.
- Для того, чтобы по окончании анализа автоматически была запущена **фильтрация** хроматограммы, отметьте соответствующую опцию.
- Установите признак **Интегрирование и идентификация**, чтобы эти процессы были выполнены автоматически после завершения анализа.
- Отметьте опции **Количественный расчет** и **Печать отчета**, если хотите, чтобы данные операции были выполнены автоматически после завершения анализа (обычно, эти опции не устанавливаются, поскольку после получения хроматограммы, рекомендуется провести предварительную визуальную оценку и, при необходимости, корректировку пиков).
- Если у вас на компьютере запущено несколько программ (например, вы набираете документ в редакторе MS Word), то указав опцию **Наверх**, после анализа программа Хроматэк Аналитик станет активной программой.

### 7.2.2 Настройка параметров отчета

Команда меню **Настройка | Отчет** выводит диалог **Отчет**, показанный на рисунке 7.5. В данном диалоге отметьте те элементы отчета, которые будут выведены на печать.

### 7.2.3 Работа с окнами

Команда меню **Окно | Каскад** строит окна таким образом, что все они имеют одинаковый размер и у каждого перекрытого окна виден лишь заголовок (рисунок 7.6).

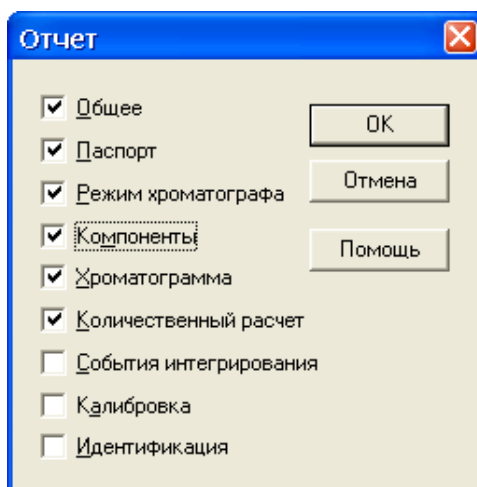


Рисунок 7.5. Настройка отчета

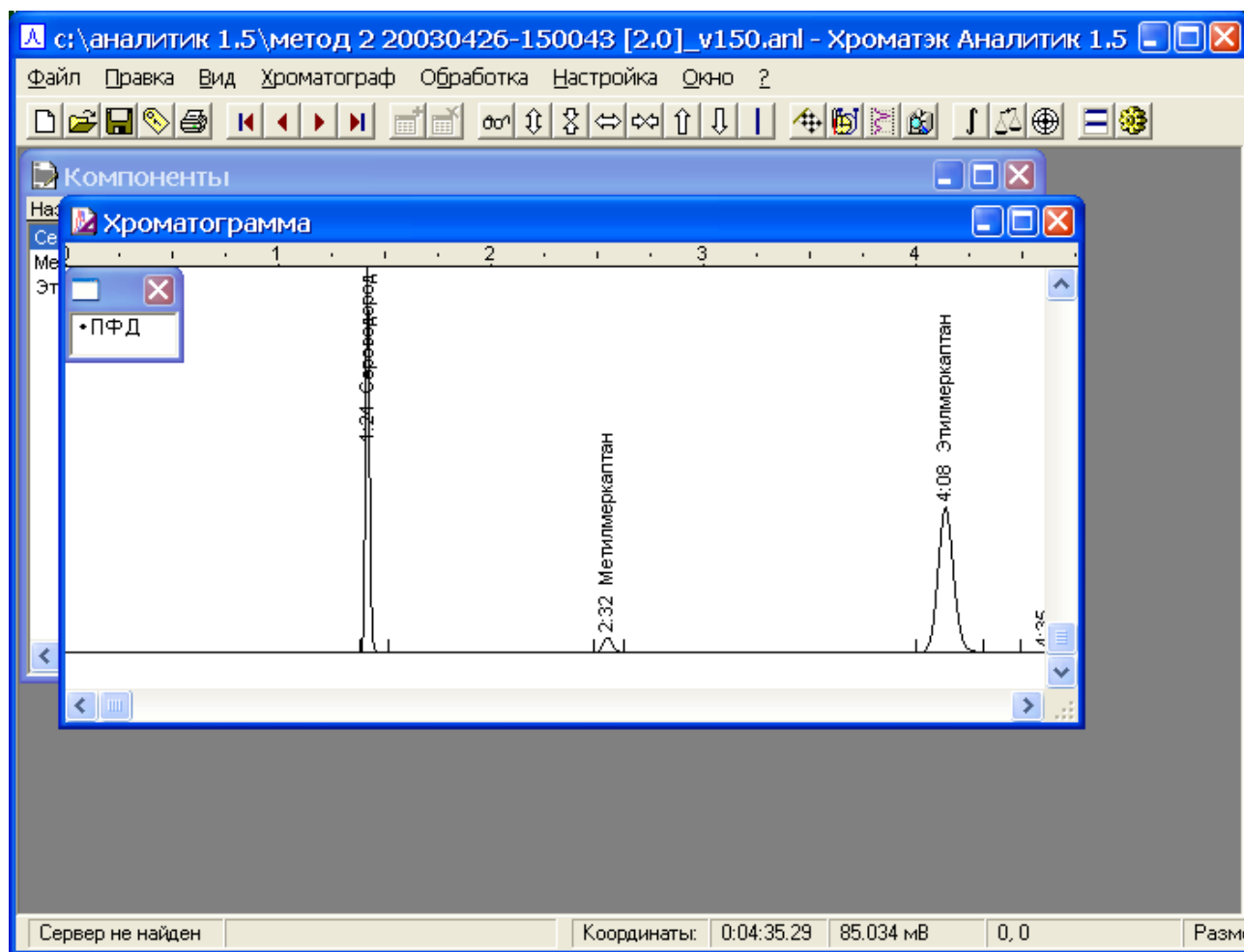


Рисунок 7.6. Размещение дочерних окон каскадом

Команда меню **Окно | Мозаика** строит окна таким образом, что они располагаются, не перекрываясь, друг под другом (рисунок 7.7).

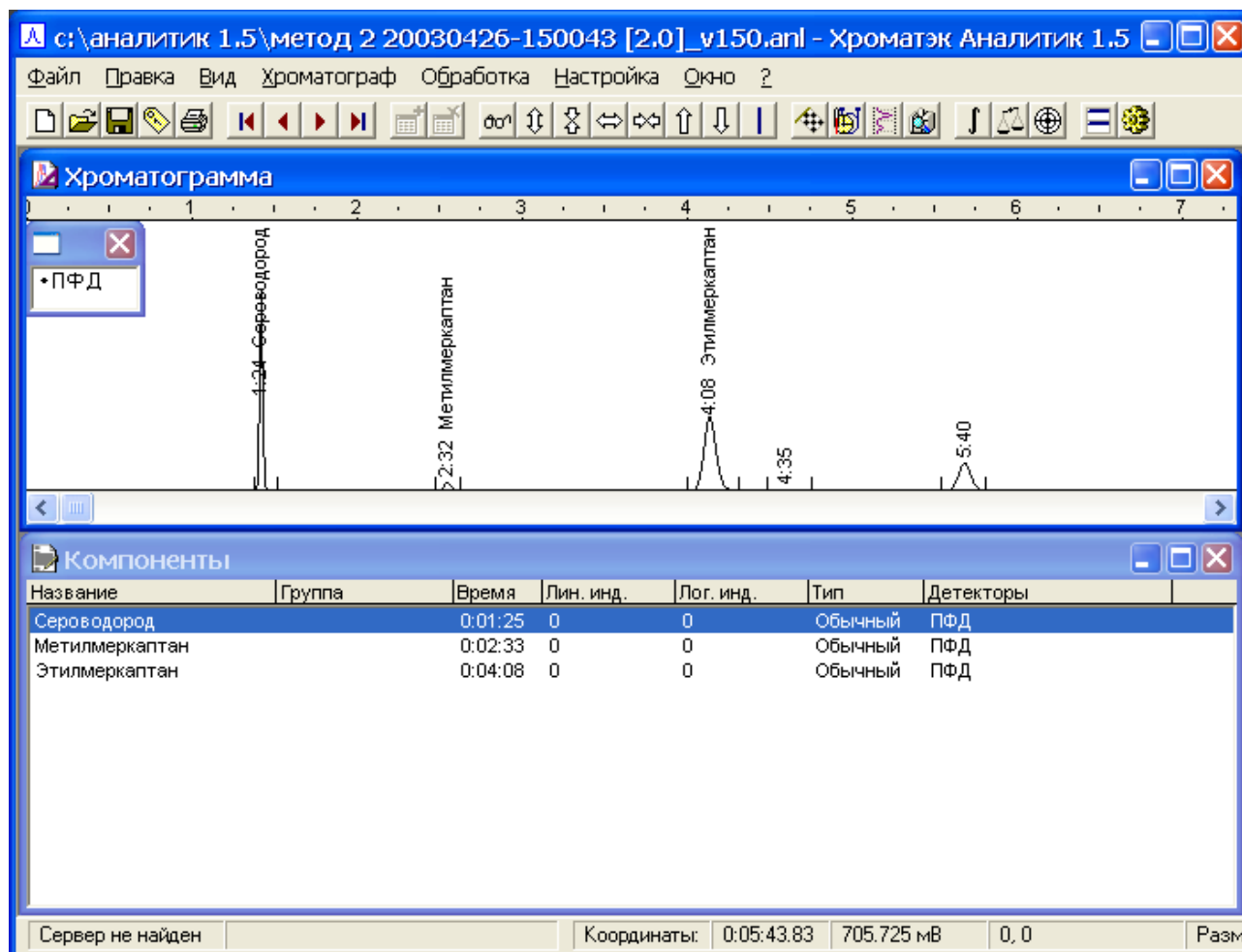


Рисунок 7.7. Равномерное размещение дочерних окон

Команда меню **Окно | Упорядочить значки** упорядочивает все минимизированные окна, расставляя их равномерно в левом нижнем углу программного окна (рисунок 7.8).

Команда меню **Окно | Заккрыть** все закрывает все открытые окна.

## 7.3 Обработка хроматограмм

### 7.3.1 Особенности работы в процессе снятия хроматограмм. Вспомогательное окно

Программа *Хроматэк Аналитик 1.5* позволяет выполнять обработку хроматограмм, как в процессе анализа, так и по его окончании. Во время снятия хроматограммы некоторые функции программы, например навигация по снятым ранее хроматограммам проекта, корректировка градуировочного графика, запрещены. Тем не менее, часто требуется на этом этапе получить доступ ко всем возможностям программы. Если возникла такая необходимость, запустите вспомогательное окно программы, для этого:

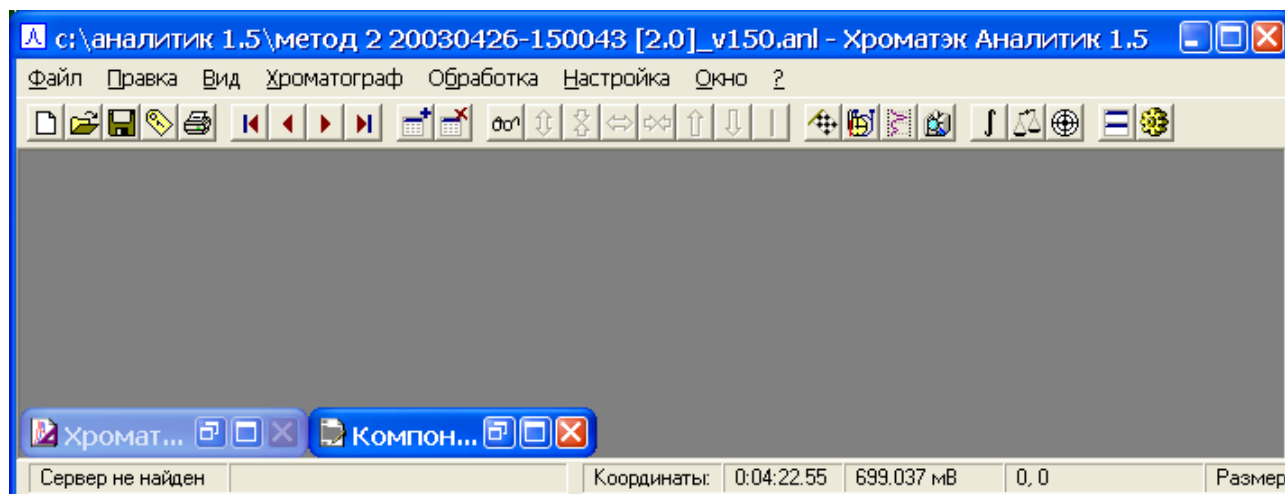


Рисунок 7.8. Минимизация дочерних окон

- выберите в меню **Окно** команду **Главное**;
- в появившемся на экране диалоге **Главное окно** (7.9) нажмите на кнопку **Новое**.

В новом (вспомогательном) окне доступны любые действия по обработке и просмотру хроматограмм, как текущей папки, так и любой другой.

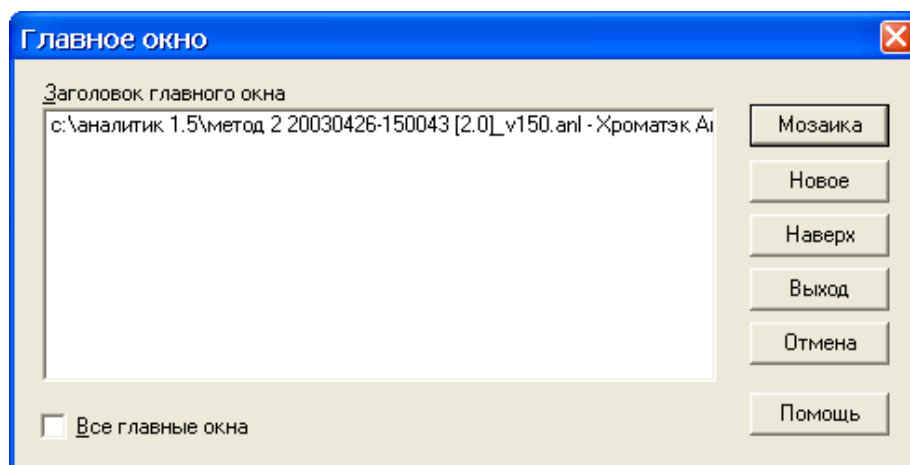


Рисунок 7.9. Диалог “Главное окно”

### 7.3.2 Заполнение паспорта хроматограммы

Назначение паспорта — хранение различных параметров хроматограммы. Поля паспорта, помимо обязательной информации (участвующей в хроматографических расчетах) могут содержать и необязательную, такую, как фамилия оператора, описание колонки, различные комментарии. Для удобства навигации по проекту, быстрого поиска нужной хроматограммы, не рекомендуется пренебрегать заполнением паспорта этих полей.

Диалог **Паспорт** активизируется автоматически при старте анализа, если при проведении настройки проекта была включена соответствующая опция (см. раздел 7.2.1). Окно

диалога показано на рисунке 7.10.

Паспорт

Название  
Анализ природного газа

Оператор  
Иванов И.И.

Объем, мкл  
1000

Единица концентрации  
об %

Проба  
ПГС

Колонка  
Наузер N

Комментарии  
Анализ природного газа на ДТП  
Калибровка

Мертвое время  
0:00:00

ОК  
Отмена  
Помощь

Рисунок 7.10. Паспорт хроматограммы

В данном диалоге:

- Введите **Название** анализа.
- В поле **Оператор** введите фамилию оператора. Форма записи — произвольная.
- Введите **Объем** и **единицу концентрации** анализируемой пробы.
- Введите **Название пробы**.
- Введите в поле **Колонка** параметры хроматографической колонки на которой происходило разделение компонентов пробы. Форма записи — произвольная.
- Если есть необходимость, внесите **Комментарии** к данному анализу.

### 7.3.3 Визуальная оценка хроматограммы. Работа с графиком

После снятия хроматограммы (или в процессе снятия) рекомендуется оценить уровень и характер шумов с тем, чтобы принять решение о целесообразности применения фильтрации (подробно фильтрация описана в разделе 7.3.4). Так же необходимо производить визуальную оценку хроматограммы после выполнения интегрирования (см. раздел 7.3.5) для того, чтобы принять решение о необходимости ручной корректировки пиков (см. раздел 7.3.7).

По умолчанию автоматически устанавливается масштаб, при котором видна вся хроматограмма. Для того, чтобы оценить характер хроматограммы у подножия пиков, необходимо воспользоваться операциями масштабирования. Масштабирование хроматограммы может быть осуществлено с помощью команд меню **Вид**, но наиболее удобно выполнять его с помощью мыши и клавиатуры. Используются следующие клавиши:

- Растягивание хроматограммы по амплитуде — **Стрелка вверх**.
- Сжатие хроматограммы по амплитуде — **Стрелка вниз**.
- Растягивание хроматограммы по времени — **Стрелка вправо**.
- Сжатие хроматограммы по времени — **Стрелка влево**.

Для того, чтобы увеличить некоторый участок хроматограммы нажмите левую кнопку мыши в одном из углов интересующей области и, не отпуская, переместите указатель мыши в противоположный угол. После отпускания кнопки выбранная область будет увеличена.

Для того чтобы вернуться к отображению на экране всей хроматограммы:

- или выполните на любом месте хроматограммы двойной щелчок мыши;
- или нажмите клавишу **Enter** (окно **Хроматограмма** должно быть активно).

### Использование маркера

Вертикальная линия маркера на графике хроматограммы используется в основном, при проведении ручной корректировки пиков (см. раздел 7.3.7). При установке курсора на какую-либо строку таблицы **Компоненты**, маркер на хроматограмме автоматически устанавливается в позицию, соответствующую времени удерживания данного компонента.

Для отображения маркера, в меню **Вид** выберите команду **Маркер**.

### 7.3.4 Фильтрация хроматограммы

Иногда высокое значение уровня шума детектора затрудняет обработку хроматограммы (особенно в случае разметки небольших пиков) и снижает предел детектирования. В этом случае допускается применение фильтрации. В *Хроматэк Аналитик 1.5* применяется два метода фильтрации: **медианная** и **гауссова**.



Подробно фильтрация хроматограмм описана в разделе 4.3.

Для запуска фильтрации:

- Выберите команду **Фильтрация** в меню **Обработка**.
- На экране появится диалоговое окно, показанное на рисунке 7.11, установите в нем значение **степени сглаживания** и нажмите кнопку **ОК**.

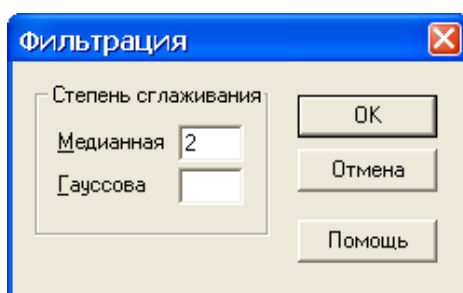


Рисунок 7.11. Диалог “Фильтрация”

### 7.3.5 Интегрирование

Назначение интегрирования — обнаружение пиков на хроматограмме, разметка, расчет их площадей и высот. Диалог настройки интегрирования показан на рисунке 7.12

Для запуска диалога выберите команду **Интегрирование** в меню **Обработка**. В появившемся на экране диалоговом окне введите в соответствующих полях значения параметров интегрирования.

**Интегрирование**

Начальное значение

Ширина, с: 10      Плато, ш: 2      Площадь, мВ\*с: 0

Порог: 1      База, ш: 0.5      Высота, мВ: 1

Асимметрия: 0.7      Наездник: 0

Событие интегрирования (изменение порядка Ctrl+Up или Ctrl+Down)

Тип события	Детекторы	Время	Значение
Высота, мВ	ПФД	0:10:00	100

Добавить...  
Удалить  
Событие...

OK  
Отмена  
Помощь

Рисунок 7.12. Задание параметров интегрирования



Наиболее важным параметром при обнаружении пиков на хроматограмме является параметр “Ширина”. Более подробно, параметры интегрирования описаны в разделе 4.4.

Иногда, подбором параметров интегрирования, удается добиться корректной разметки пиков лишь на небольшом участке хроматограммы (обычно в ее начале), тогда как на значительной ее части результаты интегрирования неудовлетворительны. К тому же, во многих анализах, на хроматограмме могут присутствовать пики, не участвующие в расчете, их разметка мешает визуальному восприятию хроматограммы. Для тонкой настройки разметки пиков на хроматограмме могут быть использованы **События интегрирования**.

**Событие интегрирования**

Тип события интегрирования: Высота, мВ

Детектор: ☒ ПФД

Время: 0:10:00

Значение: 1000

OK  
Отмена  
Помощь

Рисунок 7.13. Создание события интегрирования



Пример создания события интегрирования

Для создания события интегрирования:

- В диалоговом окне **Интегрирование** нажмите кнопку **Добавить**. На экране появится диалоговое окно создания нового события интегрирования (см. рисунок 7.13).
- В данном диалоге выберите из выпадающего списка **тип события интегрирования**, например **Высота, мВ**.
- При работе с многоканальной хроматограммой выберите **Детектор** для которого будет выполнено событие интегрирования.
- Задайте **Время**, начиная с которого начнет выполняться данное событие (в нашем примере — 10 минут).
- Задайте значения параметра интегрирования (1000).

Результат работы только что созданных событий интегрирования будет следующим: на канале ПФД, начиная с 10 минут будут размечены только те пики, чья высота больше 1000 мВ.

Если вы хотите удалить событие интегрирования, выделите его мышью в списке и нажмите кнопку **Удалить**.

Событие интегрирования действует по заданному детектору с указанного момента времени до следующего аналогичного события или до окончания хроматограммы.



**Настройка алгоритма разметки с использованием событий интегрирования имеет смысл, если ожидается обработка серии хроматограмм со сходными, повторяющимися особенностями базовой линии. В противном случае рекомендуется ручная коррекция пиков. Если в канале хроматограммы присутствуют пики созданные или измененные вручную, то автоматического обнаружения новых пиков в данном канале не производится.**

### 7.3.6 Идентификация

Назначение идентификации — установка соответствия между заранее заданными компонентами и обнаруженными пиками на хроматограмме. Диалог настройки данной операции показан на рисунке 7.14.

Для запуска диалога выберите команду **Идентификация** в меню **Обработка**.

Для настройки идентификации:

- Выберите параметр, по которому будут идентифицироваться опорные пики, при падении нескольких пиков в окно удерживания компонента.
- Выберите параметр идентификации обычных пиков.
- Используя кнопки **Вверх** и **Вниз** установите порядок шкал идентификации обычных пиков.

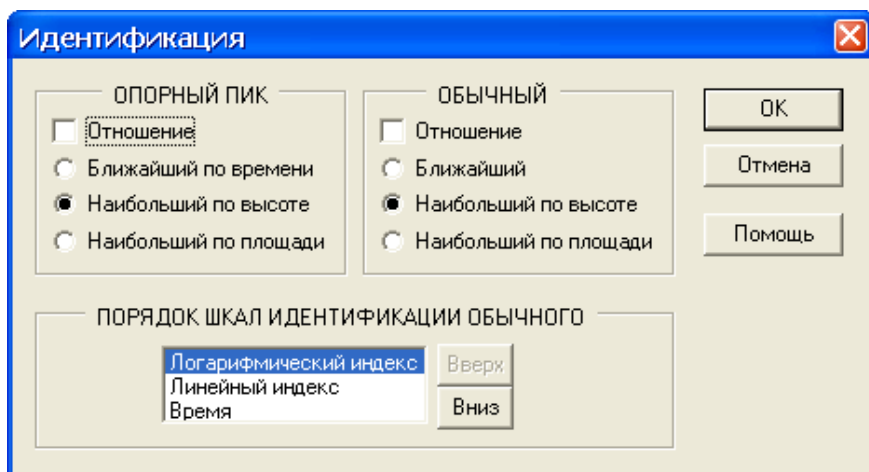


Рисунок 7.14. Настройка параметров идентификации пиков

В общем случае, схема идентификации пиков на хроматограмме может быть следующей: опорные пики — по высоте, обычные пики — ближайший по шкале, порядок шкал следующий: логарифмический индекс, линейный индекс, время.



Более подробная информация представлена в разделе 4.5.

### 7.3.7 Ручная корректировка и удаление разметки пиков

С помощью настройки параметров операции **Интегрирование** в последовательности **Расчет хроматограммы** не всегда удастся добиться автоматической корректной разметки пиков на хроматограмме. Для устранения этой проблемы прямо на графике хроматограммы можно визуально откорректировать положение характерных точек пика. Кроме того, некоторые пользователи всегда производят расстановку пиков вручную.

Существуют следующие типовые операции по ручному редактированию пиков на хроматограмме:

- создание нового пика в активном канале;
- корректировка положения точек начала, вершины и окончания выделенного пика;
- удаление выделенного пика.

Ручная корректировка пиков выполняется с помощью маркера и команд, расположенных в меню **Правка**. Каждый пик имеет три реперные метки: начало пика, вершину и конец. Для того, чтобы изменить скорректировать разметку пика, необходимо переместить эти метки. Новое положение метки указывается с помощью маркера, после чего выполняется команда перемещения (в зависимости от того, какую метку требуется переместить, используются команды **Начало пика**, **Вершина пика** и **Конец пика**).



Пример ручной корректировки пиков

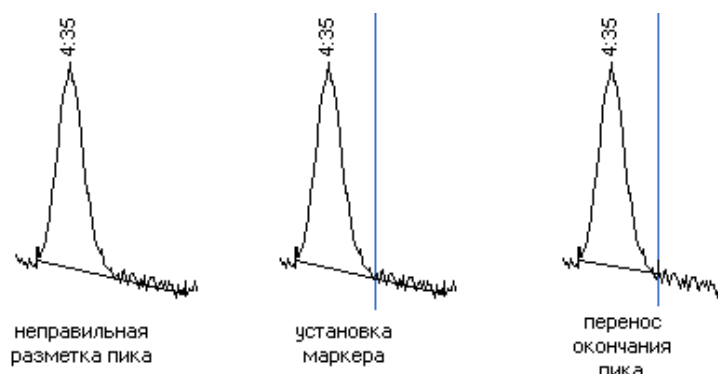


Рисунок 7.15. Корректировка разметки пиков

Рассмотрим процесс корректировки пиков на следующем примере неправильной разметки (рисунок 7.15). Для показанного на данном рисунке пика неправильно задано окончание. Для его коррекции необходимо выполнить следующие действия:

- отобразить на экране маркер с помощью соответствующей коменды из меню **Вид**;
- подвести маркер с помощью мыши к месту, в котором, по нашему мнению должен располагаться пик;
- выбрать в меню **Правка** команду **Конец пика**.

Окончание пика перенесено в новую позицию.

Иногда, при проведении корректировки разметки пиков удобно не переносить реперные метки пика, а удалить его и нарисовать вручную заново. Для того, чтобы удалить пик, установите маркер внутрь пика и выберите в меню **Правка** команду **Удалить пик**. После этого нажмите на клавиатуре клавишу **Ctrl** (ее необходимо удерживать во время все й процедуры рисования пика), подведите курсор мыши к нулевой линии хроматограммы и, нажав левую кнопку, удерживая ее (за курсором потянется “резиновая нить”), подведите курсор к месту, в котором нужно разместить окончание пика. Отпустите кнопку мыши и клавишу **Ctrl**. На появившийся запрос **Добавить пик?** ответьте **Да**.



**После проведения ручной корректировки пиков на хроматограмме, при выполнении Интегрирования, пики будут размечены автоматически и, соответственно, вся ручная корректировка будет уничтожена, поэтому ее следует выполнять только после проведения автоматического интегрирования.**

### 7.3.8 Создание и изменение компонентов

Для создания нового компонента активизируйте окно **Компоненты** щелчком мыши в любой его области. В меню **Правка** выберите команду **Добавить компонент**. На экране появится окно настройки свойств компонента (рисунок 7.16).

В данном диалоговом окне:

**Компонент**

Название: Метафос-S      Группа:      OK

Идентификация

Рабочие детекторы

☒ ПФД

☐

☐

☐

Ведущий: ПФД

Тип компонента: Обычный

Время: 0:01:25

Окно, %: 5

Лин. индекс: 0

Лог. индекс: 0

Окно, инд.: 2

Функция:  $y = K1 \cdot x$

Отклик: Площадь

K2:      K1: 0.00010655

K0:      Добавить...

Калибровочный уровень: ☐ Запретить

Площадь

СКО: 4.8538 %

К о л и ч е с т в о

Удалить

Уровень...

Название	Концентрация,	Объем, мкл	Площадь, мВ*сек
2004-12-02 09-16-59	0.01	1	98.925
2004-12-02 09-23-22	0.01	1	91.505
2004-12-02 09-40-36	0.01	1	90.669

Рисунок 7.16. Диалог настройки свойств компонента

- Введите **Название** компонента и, при необходимости, укажите **группу** веществ, к которой он относится.
- Задайте **Ведущий** детектор — детекторный канал для которого будет выполняться количественный расчет данного компонента. В случае многоканальной хроматограммы отметьте **Рабочие детекторы**).



В случае многоканальной хроматограммы данный компонент будет количественно рассчитан только в том случае, если его пики идентифицированы на всех каналах, выбранных в группе **Рабочие детекторы**, причем расчет ведется по каналу, указанному, как **Ведущий**. Например, если на хроматограмме присутствуют два детекторных канала — ТИД и ЭЗД, оба они отмечены в группе рабочих детекторов, ведущим объявлен ТИД. Пик компонента, присутствующий на канале ТИД будет количественно рассчитан только если он идентифицирован, так же, и на канале ЭЗД. Если для ЭЗД убрать признак рабочий детектор, компонент на канале ТИД будет количественно рассчитан в любом случае.

- Выберите **Тип компонента** — **Обычный** или **Опорный**. Тип **опорный** используется при идентификации по индексам удерживания.
- Укажите **Время удерживания** компонента.
- Задайте **Окно, %** — максимально допустимое процентное отклонение реального времени удерживания от заданного, при котором пик данного компонента будет идентифицирован.
- В случае применения метода идентификации пиков по индексам удерживания, задайте логический индекс (**Лог.индекс**) или линейный (**Лин.индекс**)
- В случае применения метода идентификации пиков по индексам удерживания, задайте **Окно, инд** — максимально допустимое отклонение значения индекса удерживания от заданного, при котором пик данного компонента будет идентифицирован.
- Выберите из выпадающего калибровочную **Функцию**.
- Выберите тип **Отклика** который будет отображаться в таблице калибровочных уровней, в нижней части данного диалогового окна.



Другие элементы диалога настройки свойств компонента описаны в разделе **7.3.9**, посвященном проведению калибровки.

### 7.3.9 Калибровка

Калибровка проводится с целью получения калибровочной зависимости. Это зависимость между величиной отклика детектора (площадь или высота пика) и количеством компонента в пробе.

На этапе получения зависимости задаваемой величиной является количество компонента (задаются концентрация компонента и объем пробы), а определяемой — величина отклика детектора. На этапе проведения обычного “измерительного” эксперимента известным оказывается отклик детектора, а количество рассчитывается по зависимости.

Калибровка может проводиться по одной калибровочной смеси (одноточечная) или по нескольким (многоточечная). При одноточечной калибровке калибровочная зависимость представляет собой прямую, проходящую через начало координат. При многоточечной калибровке обычно используется также линейная зависимость, но для получения ее коэффициентов используется несколько калибровочных экспериментов, что обеспечивает более высокую точность вычислений и надежность получаемых результатов. Многоточечная калибровка дает также возможность при необходимости использовать нелинейные калибровочные зависимости или линейную зависимость, не проходящую через начало координат (см. рисунок 7.17).



Рисунок 7.17. Калибровочная зависимость

Калибровочные хроматограммы служат источником информации об ожидаемых временах удерживания компонентов. На основании калибровочных хроматограмм создается таблица компонентов с названиями компонентов, ожидаемыми временами удерживания и другой сопутствующей информацией.

- Выберите команду меню **Обработка | Калибровка**.
- В диалоге **Калибровка** (рисунок 7.18) нажмите **Добавить**. Данной командой программа заносит данные пиков идентифицированных компонентов в таблицы калибровочных уровней компонентов, то есть добавляет уровень, заполняя его данными хроматограммы. Объем пробы и единица концентрации в калибровочном уровне берутся из паспорта. Название уровня соответствует имени файла, из которого берутся данные.
- Выберите компонент левой кнопкой мыши в окне **Компоненты**.
- Выберите команду меню **Правка | Компонент**. На экране появится окно настройки свойств компонента (см. рисунок 7.16).
- Нажмите кнопку **Уровень**.
- Введите концентрацию компонента и нажмите **ОК**.

Кроме добавления, удаления и редактирования калибровочных уровней в диалоге **Компонент** вводятся также другие параметры калибровки компонента.

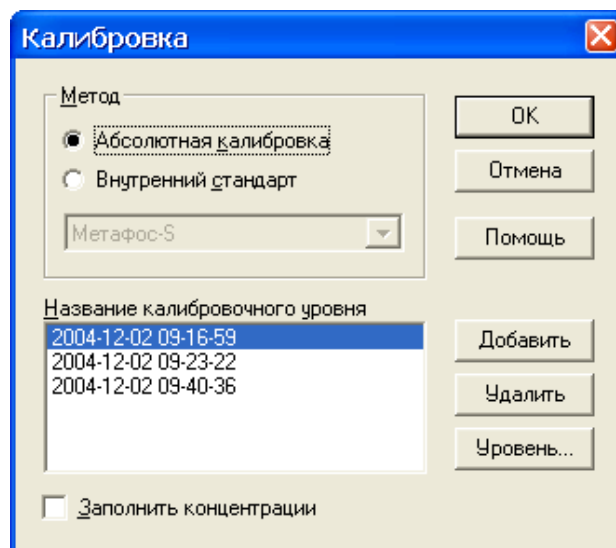


Рисунок 7.18. Добавление калибровочного уровня

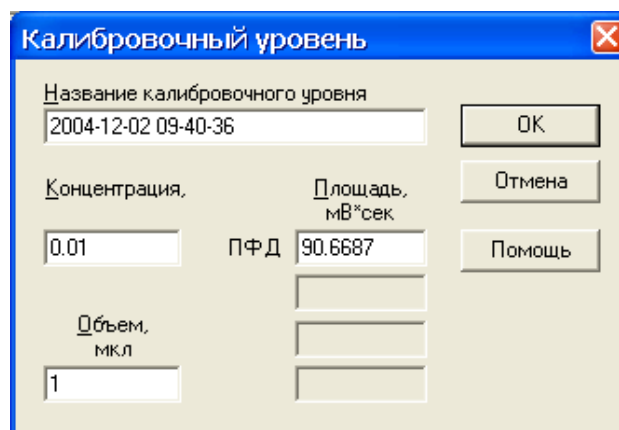


Рисунок 7.19. Внесение концентрации в калибровочный уровень

- Выберите отклик (площадь или высоту пика). Если пики узкие и высокие, то высота измеряется более точно, чем площадь. Если температура колонки недостаточно стабильна, что имеет решающее значение для концентрации компонента в выходящем из колонки газе, то расчеты, основанные на использовании высот пиков, не пригодны. В противоположность этому, если нельзя обеспечить нужную стабильность скорости потока, то расчеты по площадям производить нельзя, и предпочтительно использование высоты пиков. Для несимметричных пиков расчеты, основанные на высотах, непригодны.
- При некоторых методах расчета, например методом внутренней нормализации, часто используются относительные коэффициенты отклика детектора, которые часто бывают известны заранее. При этом не нужно выполнять описанную выше калибровку, а просто занести этот коэффициент в  $K_1$  (если вы уже добавили уровень нажмите кнопку **Удалить**). При наличии калибровочных уровней коэффициенты для подстановки в калибровочную функцию рассчитываются автоматически.
- Откалибровав компоненты по одной хроматограмме, проведите еще несколько калибровочных анализов с разным количественным составом проб. После каждого анализа проводите калибровку.

Таким образом, компоненты будут содержать по несколько калибровочных уровней, что позволит точнее определять количество вещества. Количество калибровочных уровней не ограничено.

- Выберите функцию. В большинстве случаев используется функция  $y(x) = K_1x$  — линейная, проходящая через ноль. Функция  $y(x) = K_1x + K_0$  — линейная, не проходящая через ноль. Функция  $y(x) = K_2x^2 + K_1x$  — парабола, проходящая через ноль. Функция  $y(x) = K_2x^2 + K_1x + K_0$  — парабола, не проходящая через ноль.

При одноточечной калибровке калибровочная зависимость является прямой, проходящей через начало координат и точку калибровочного уровня. Многоточечная калибровка означает, что проводится несколько измерений для определения калибровочной зависимости и на графике имеется несколько точек. В этом случае зависимость может быть аппроксимирована кривой любого, необязательно линейного, типа.

При наличии нескольких калибровочных уровней рассчитывается СКО в процентах по выбранному отклику. Методом наименьших квадратов рассчитываются калибровочные коэффициенты  $K_2, K_1, K_0$  для выбранной функции. Выбирается такая функция, которая наилучшим образом описывает экспериментальные данные.

- Сохраните на диске методику. Для этого выберите команду меню **Файл | Сохранить как**. В открывшемся диалоге **Сохранить как** введите **Имя файла**, например “metod”, укажите **Каталог**, куда следует сохранить методику, нажмите кнопку **ОК** для сохранения.

Примечание: в каталоге **Analytic**, вы можете создать подкаталог для хранения методик, либо создавать отдельный каталог для каждой методики (хроматограммы по умолчанию будут записываться в тот же каталог, где записана методика, на основе которой они получены).

Далее в процессе работы при изменении методики вы можете сохранять методику по мере необходимости командой меню **Файл | Сохранить**. Измененная методика запишется поверх старой. Если вы захотите закрыть методику, например, при выходе из программы, программа всегда напомним вам о сохранении, если вы что-то изменили.

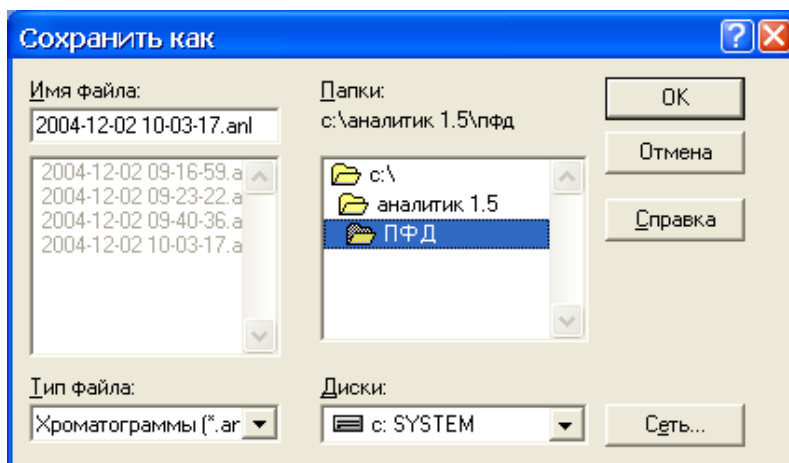


Рисунок 7.20. Сохранение методики на диске

### 7.3.10 Импорт компонентов и калибровочных уровней

Команда меню **Файл | Импортировать** позволяет скопировать в открытый или вновь созданный файл методики (хроматограммы) компоненты другого файла.

Если компонент уже есть в импортируемом файле (определяется по названию), то из данного файла добавляются только новые калибровочные уровни (определяется по названию уровня).

Импорт бывает полезно использовать при калибровке (сняв несколько хроматограмм можно импортировать из них калибровочные уровни в последнюю хроматограмму).

### 7.3.11 Количественный расчет

Назначение — расчет концентраций компонентов и процентных соотношений. Диалог настройки данной операции показан на рисунке 7.21.

В данном диалоге:

- Задайте метод расчета.
- При расчете методом процентной нормализации выберите тип отклика (площадь или высота), по которому будет производиться расчет.
- В случае расчета методом внутренней нормализации укажите значение **нормировку, %**;
- В случае расчета абсолютной градуировкой, задайте объем введенной пробы;
- При расчете методом внешнего стандарта выберите в выпадающем списке компонент-стандарт и укажите объем введенной пробы. При расчете методом внутреннего стандарта дополнительно укажите концентрацию стандарта.
- При необходимости выберите расчет по неидентифицированным пикам.

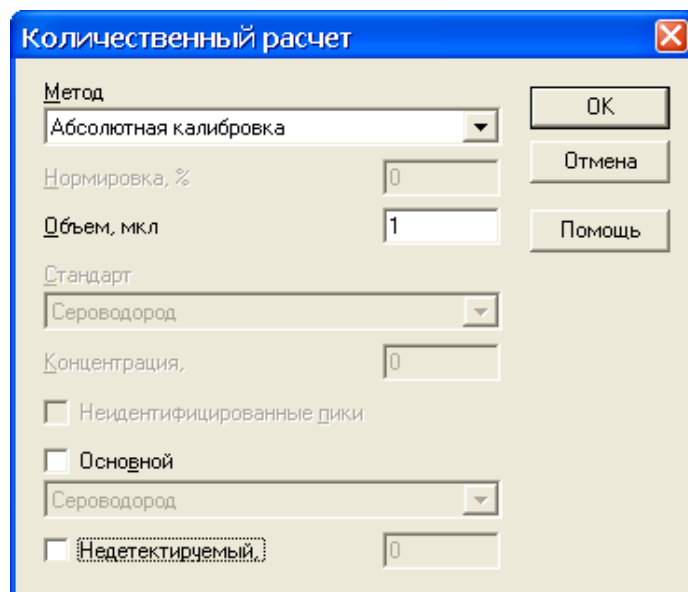


Рисунок 7.21. Диалог “Количественный расчет”



Более подробная информация представлена в разделе [4.7](#).

## 7.4 Работа с файлами хроматограмм

### Открытие файла

Команда меню **Файл | Открыть** вызывает диалог **Открыть**, в котором вы можете выбрать хроматограмму (метод) для загрузки. Для упрощения поиска нужно хроматограммы, в диалоге отображается содержимое паспорта файла хроматограммы (метод).

Выберите тип файла, который хотите открыть. Файлы методов имеют расширение **anm**, а файлы обычных хроматограмм — **anl**.

В программе может быть одновременно открыт только один файл. Не открывайте файлы во время снятия хроматограммы. Если вам необходимо открыть файл воспользуйтесь возможностью запуска еще одной копии программы.

### Сохранение файла

Команда меню **Файл | Сохранить** сохраняет текущий файл. Файлу присваивается имя, имеющее вид **2004-11-17 13-57-12.anl**. Здесь первая часть имени (до пробела — дата создания файла, а вторая часть — время создания). При желании вы можете сохранить файл под любым другим именем, для этого выполните команду **Файл | Сохранить как**. При выборе данной команды на экране появляется диалог задания имени файла, показанный на рисунке [7.23](#).

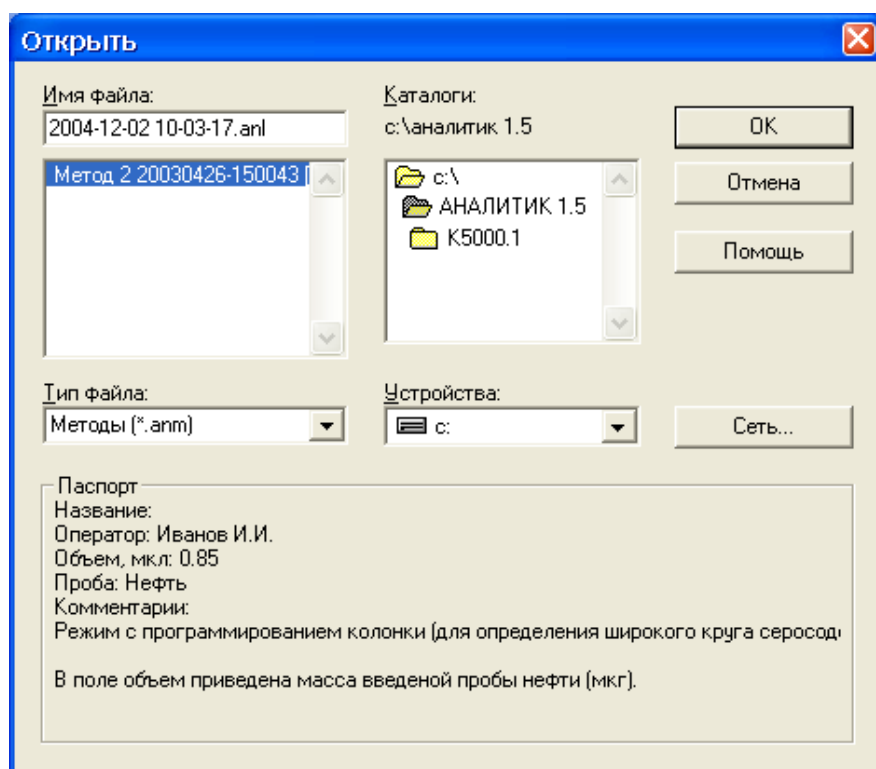


Рисунок 7.22. Открыть файл хроматограммы (метода)

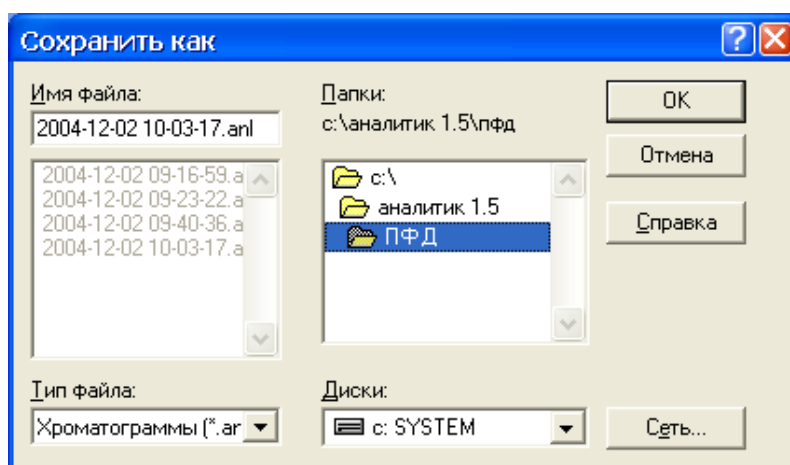


Рисунок 7.23. Сохранение файла



Если вы хотите объявить текущую хроматограмму методом, по которому будут обрабатываться хроматограммы анализов неизвестных проб, выберите в меню **Файл** команду **Сохранить как метод**. Будет запущен диалог, аналогичный показанному на рисунке 7.23. Его отличительной особенностью является то, что он сохраняет хроматограмму с расширением **apm**.

### Заккрытие файла

Команда меню **Файл | Заккрыть** закрывает открытый файл. При открытии другого или создании нового файла программа автоматически закрывает текущий открытый файл. Если сделанные изменения в файле не сохранялись, программа запросит подтверждение на сохранение файла.

### Удаление файла

Файл, который нужно удалить, сначала надо открыть. После открытия вызовите команду меню **Файл | Удалить**. На экране появится запрос о подтверждении на удаление файла. Если вы нажмете в данном запросе кнопку **Да**, файл будет удален.

## Глава 8

# Программа корреляции времен удерживания

Программа корреляции времен удерживания позволяет построить зависимость между давлением на входе в колонку и временем выхода опорного компонента и рассчитать по этой зависимости давление, необходимое для выхода компонента в желаемое время.

Для запуска программы *Корреляция времен удерживания*:


- или выберите соответствующую команду в главном меню Windows (Пуск | Программы | СКБ Хроматэк | Корреляция времен удерживания);
- или выполните двойной щелчок левой кнопкой мыши на соответствующем ярлыке рабочего стола Windows.

На экране появится главное окно программы (рисунок 8.1).

Работа с программой представляет собой следующую последовательность действий:

- Построение калибровочной зависимости времени удерживания компонента от давления на входе в колонку.
- Ввод времени удерживания компонента, которое необходимо получить. Программа по построенной калибровочной зависимости определяет, какое давление на входе в колонку должно быть для того, чтобы данный компонент был детектирован в указанное время. Значение давления выдается оператору в информационном поле.
- Передача хроматографу режима с полученным значением давления на входе в колонку (в программе *Панель управления*).

Для построения калибровочной зависимости необходимо сначала создать **профиль**, в котором указать **метод** и **компонент**, для которых проводится калибровка, а также название **калибровки** (здесь удобно указывать ее дату).

Для создания нового профиля калибровки нажмите кнопку  в правом верхнем углу окна. На экране появится диалог выбора профиля (см. рисунок 8.2).

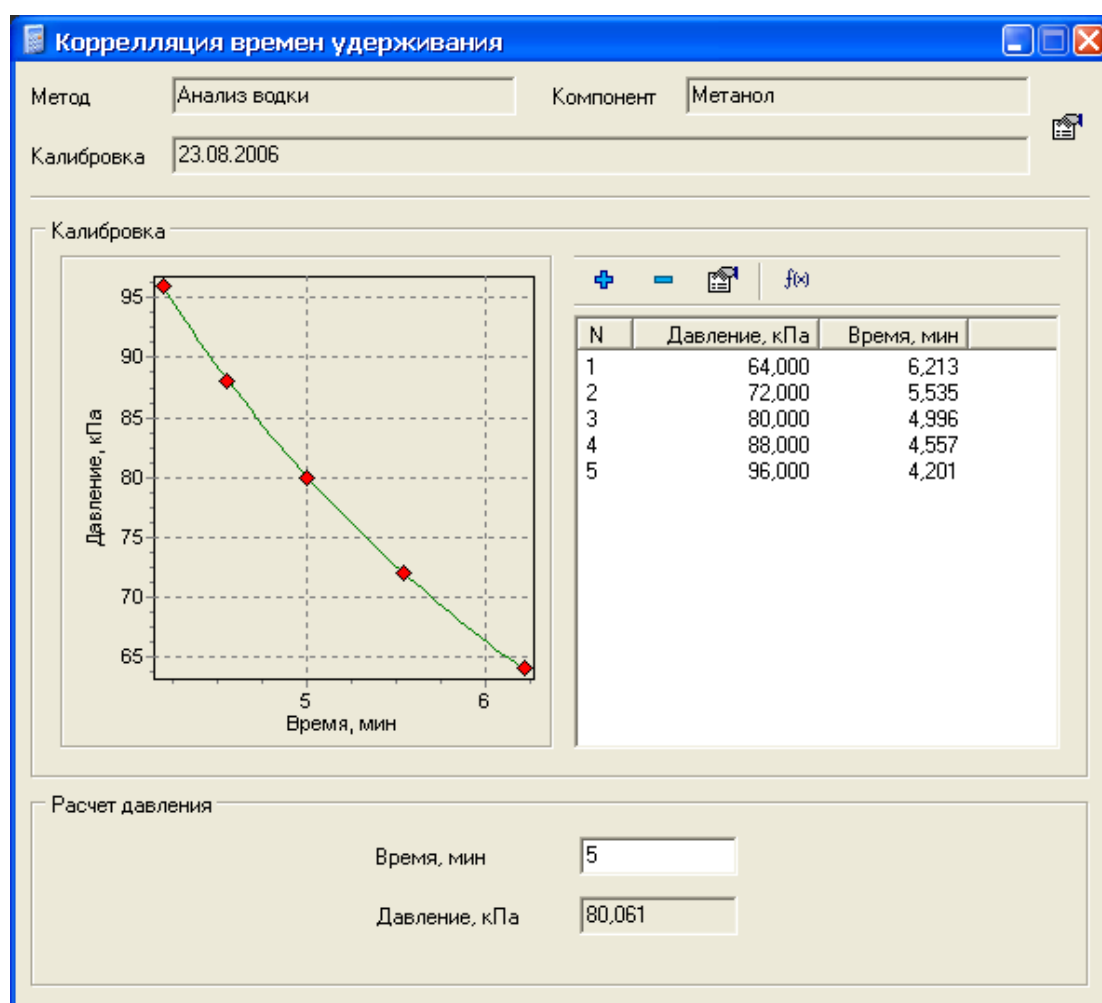


Рисунок 8.1. Программа корреляции времен удерживания

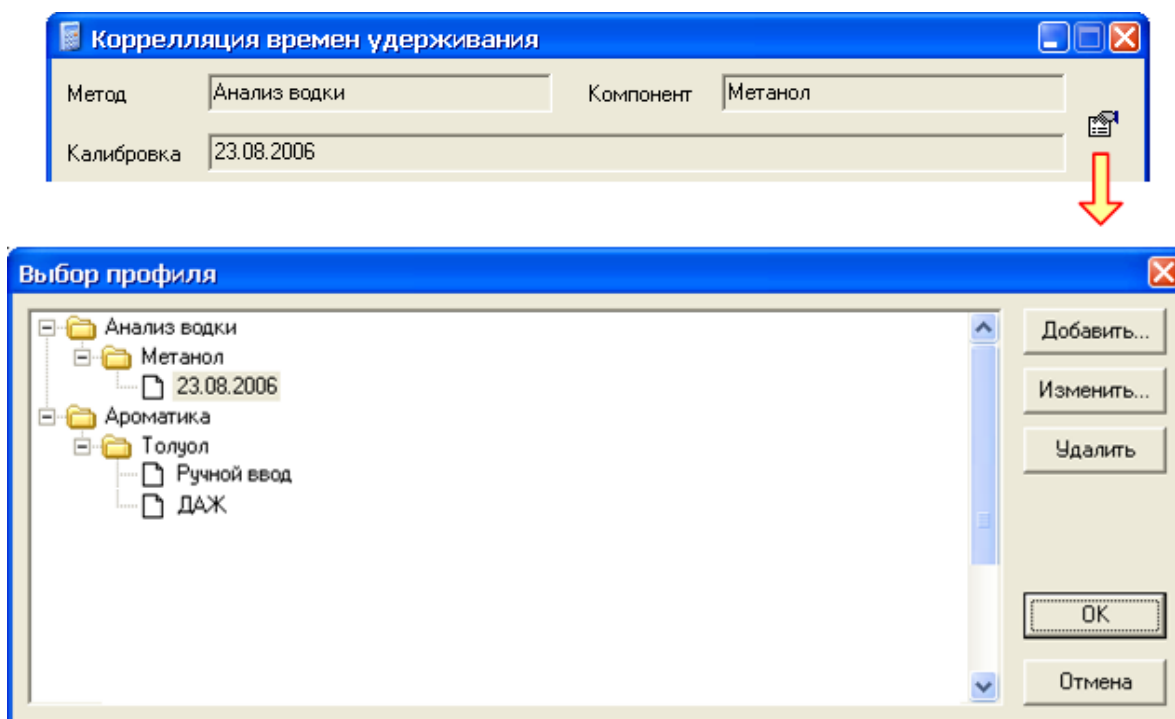


Рисунок 8.2. Диалог “Выбор профиля”

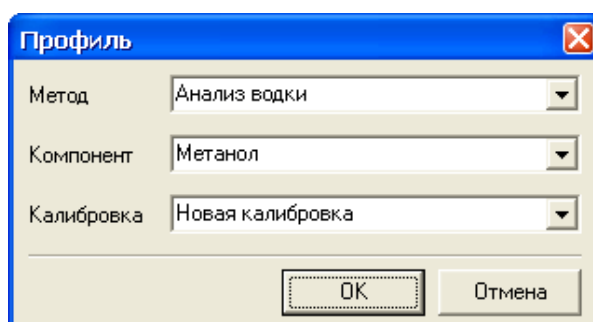



Рисунок 8.3. Диалог “Профиль”

В диалоге **Выбор профиля** можно **добавить**, **изменить** или **удалить** профиль. При добавлении и изменении профиля на экране появится диалог, показанный на рисунке 8.3.

Для выбора созданного профиля, выделите его в таблице с помощью мыши и нажмите кнопку **ОК**.

### Проведение калибровки

Для проведения калибровки нужно получить несколько хроматограмм при различных значениях давления и зафиксировать время выхода опорного компонента. Обычно берут номинальное значение давления,  $\pm 10\%$  и  $\pm 20\%$  от номинального. Полученные данные (давление и соответствующее время выхода компонента) заносят в калибровочную таблицу.

- Для добавления уровня нажмите кнопку **+** и в появившемся диалоговом окне (см. рисунок 8.4) укажите давление и соответствующее время (при необходимости можно указать комментарий).
- Для удаления уровня нажмите кнопку **-**.
- При необходимости редактирования имеющегося калибровочного уровня воспользуйтесь кнопкой .

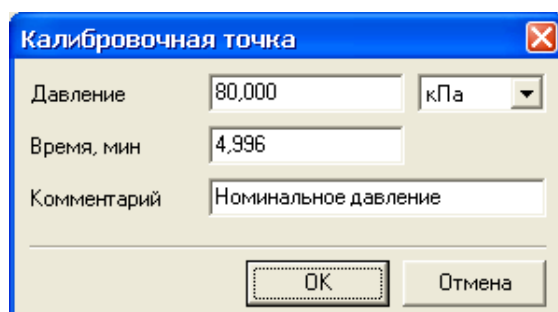
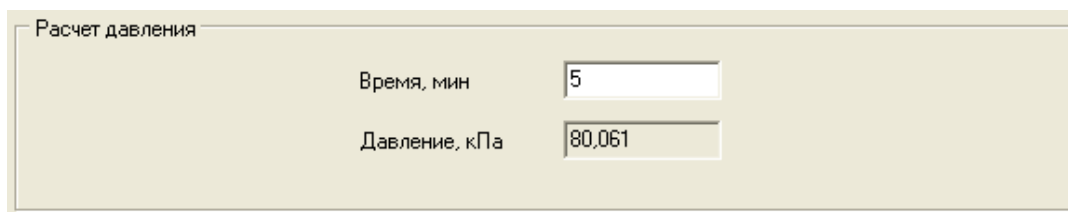


Рисунок 8.4. Диалог “Калибровочная точка”

После добавления каждого уровня программой автоматически производится расчет коэффициентов калибровочной функции (при этом число точек должно быть не меньше трех).

### Расчет давления по калибровочной функции

После проведения калибровки и построения функции можно рассчитать давление, необходимое для выхода опорного компонента в желаемое время. Для этого в поле **время, мин** (рисунок 8.5) задайте необходимое значение. Давление будет рассчитано автоматически.

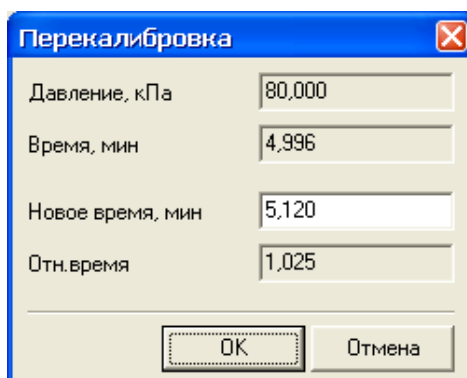


Расчет давления	
Время, мин	5
Давление, кПа	80,061

Рисунок 8.5. Расчет давления

## Перекалибровка

Если вы хотите произвести перекалибровку прибора, можно ее сделать на основе предыдущей калибровки. Для этого необходимо получить значение времени выхода компонента при номинальном значении давления, а затем в текущей калибровке выделить уровень с этим значением давления, нажать кнопку **fn** и в появившемся диалоговом окне (рисунок 8.6) указать новое значение времени. После нажатия на кнопку **ОК**, в появившемся диалоговом окне, введите имя новой калибровки. Все значения времен будут соответственно пересчитаны.



Перекалибровка	
Давление, кПа	80,000
Время, мин	4,996
Новое время, мин	5,120
Отн. время	1,025

ОК Отмена

Рисунок 8.6. Перекалибровка



# Список иллюстраций

1.1	Состав ПО “Хроматэк Аналитик” . . . . .	13
1.2	Установка программного обеспечения “Хроматэк Аналитик” . . . . .	21
1.3	Выбор комплекса с программой обработки “Хроматэк Аналитик 2.5” . . . . .	22
1.4	Установка программного обеспечения. Выбор состава комплекса . . . . .	22
2.1	Пример использования сеансов в программе “Панель управления” . . . . .	30
2.2	Преобразование соединения по USB в виртуальный СОМ-порт . . . . .	33
2.3	Определение номера виртуального СОМ-порта . . . . .	34
2.4	Старт поиска сетевого устройства . . . . .	36
2.5	Автоматическое обнаружение сетевого устройства . . . . .	36
2.6	Выбор диалога конфигурирования устройства . . . . .	37
2.7	Изменение IP-адреса . . . . .	37
2.8	Добавление нового СОМ-порта . . . . .	38
2.9	Добавление нового СОМ-порта . . . . .	38
2.10	Выбор настройки СОМ-порта . . . . .	39
2.11	Задание номера СОМ-порта . . . . .	39
2.12	Диалог “Соединения с приборами” . . . . .	41
2.13	Мастер создания нового соединения . . . . .	41
2.14	Мастер создания нового соединения. Шаг 1. Выбор СОМ-порта . . . . .	42
2.15	Диалог “Выбор прибора” . . . . .	42
2.16	Мастер создания нового соединения. Шаг 2. Название соединения . . . . .	43
2.17	Мастер создания нового соединения. Шаг 3. Создание ярлыка . . . . .	44
2.18	Мастер создания нового соединения. Шаг 4. Выбор числа независимых анализов . . . . .	45

2.19	Мастер создания нового соединения. Шаг 5. Выбор детекторов . . . . .	46
2.20	Мастер создания нового соединения. Шаг 6. Выбор программы обработки . . . . .	47
2.21	Мастер создания нового соединения. Выбор проекта “Хроматэк Аналитик 2.5” . . . . .	48
2.22	Мастер создания нового соединения. Шаг 7. Просмотр созданных настроек соединения . . . . .	49
2.23	Главное окно программы . . . . .	50
2.24	Закладка “Состояние” . . . . .	51
2.25	Закладка “Детекторы” . . . . .	51
2.26	Закладка “Диагностика” . . . . .	52
2.27	Закладка “Журнал” . . . . .	52
2.28	Закладка “Сигнал” . . . . .	53
2.29	Окно “Подробный просмотр сигнала” . . . . .	53
2.30	Закладка “Сеансы” . . . . .	54
2.31	Минимизация окна . . . . .	55
2.32	Диалог “Конфигурация”. Страница “Общее” . . . . .	60
2.33	Диалог “Конфигурация”. Страница “Клапаны” . . . . .	61
2.34	Диалог “Конфигурация”. Страница “МСД” . . . . .	61
2.35	Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Колонки”. Страница “Колонка 1” . . . . .	62
2.36	Диалог “Выбор колонки” . . . . .	63
2.37	Диалог “Конфигурация”. Страница “Блокировки” . . . . .	64
2.38	Диалог “Конфигурация”. Страница “Поджиг” . . . . .	65
2.39	Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Детекторы”. Страница “Конфигурация” . . . . .	68
2.40	Параметры детекторов ДТП-1, ДТП-2 и ДТП-3 . . . . .	69
2.41	Параметры детекторов ДТХ-1 и ДТХ-2 . . . . .	70
2.42	Параметр детекторов ЭЗД-1 и ЭЗД-2 . . . . .	70
2.43	Параметры детектора ПФД . . . . .	71
2.44	Параметр детектора ФИД . . . . .	71
2.45	Параметры АЦП-1, АЦП-2, АЦП-3 и АЦП-4 . . . . .	72

2.46	Диалог “Конфигурация”. Группа параметров “Газовые регуляторы”. Страница “Газ 1” . . . . .	73
2.47	Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Режим” . . . . .	74
2.48	Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Вакуум” . . . . .	75
2.49	Диалог “Калибровка газовых регуляторов” . . . . .	76
2.50	Диалог “Блокировки” . . . . .	77
2.51	Диалог “Поджиг” . . . . .	79
2.52	Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Газ 1” . . . . .	79
2.53	Диалог “Регуляторы газов”. Закладка “Газ 2” . . . . .	80
2.54	Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Общее” . . . . .	82
2.55	Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Температуры” . . . . .	83
2.56	Диалог “Программирование температуры” . . . . .	84
2.57	Пример графика изменения температуры при программировании колонки .	84
2.58	Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Газы” . . . . .	85
2.59	Диалог “Режим газов” . . . . .	86
2.60	Пример изменения расхода газа по каналу сброса пробы в splitless-режиме	88
2.61	Диалог “Режим хроматографа”. Страница “Продувка” . . . . .	89
2.62	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Общее” . . . . .	90
2.63	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Температуры” . . . . .	91
2.64	Диалог “Программирование температуры” . . . . .	91
2.65	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Газы” . . . . .	92
2.66	Диалог “Режим газа” . . . . .	93
2.67	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Продувка” . . . . .	94
2.68	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Общее” . . . . .	95
2.69	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Температуры” . . . . .	95
2.70	Диалог “Режим хроматографа”. Закладка “Газы” . . . . .	96
2.71	Диалог “Продувка прибора до анализа” . . . . .	96
2.72	Диалог “Изменение времени анализа” . . . . .	99
2.73	Дозатор автоматический жидкостный. Режим простого ввода . . . . .	103

2.74	Дозатор автоматический жидкостный. Режим “сэндвич” . . . . .	104
2.75	Дозатор автоматический жидкостный. Режим “сэндвич с растворителем” .	105
2.76	Дозатор парогазовый . . . . .	106
2.77	Дозатор автоматический газовый . . . . .	106
2.78	Дозатор равновесного пара . . . . .	107
2.79	Дозатор бесшприцевого ввода . . . . .	108
2.80	Пиролитический испаритель . . . . .	109
2.81	Внутренние устройства . . . . .	110
2.82	Диалог управления кранами для хроматографов с ПМ2 . . . . .	112
2.83	Диалог управления кранами для хроматографов с ПМ1 . . . . .	112
2.84	Диалог управления клапанами для хроматографов с ПМ2 в простом режиме	114
2.85	Диалог управления клапанами для хроматографов с ПМ2 в расширенном режиме . . . . .	115
2.86	Диалог задания переключения клапанов . . . . .	116
2.87	Диалог управления клапаном для хроматографов с ПМ1 . . . . .	116
2.88	Пример организации двух одновременных и независимых анализов . . . .	119
2.89	Пример работы с двумя анализами в разных режимах . . . . .	120
2.90	Пример использования диагностического сеанса . . . . .	122
2.91	Контекстное меню управления сеансами . . . . .	123
2.92	Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Общие” . . . . .	125
2.93	Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Сеансы” . . . . .	126
2.94	Диалог “Настройка соединения с приборами”. Закладка “Вид” . . . . .	127
2.95	Диалог “Соединение с прибором”. Закладка “WEB-сервер” . . . . .	128
2.96	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Общее” . . . . .	130
2.97	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “ХА 1.5” . . . . .	132
2.98	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Детекторы” . . . . .	133
2.99	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Диагностика” . . . . .	133
2.100	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “ХА 2.5” . . . . .	134
2.101	Диалог “Параметры сеанса”. Закладка “Опции” . . . . .	135

2.102	Список версий микропрограмм хроматографа . . . . .	136
2.103	Расширенный диагностическим режим главного окна . . . . .	136
2.104	Прошивка прибора . . . . .	137
2.105	Диалог “Охлаждение” в Кристалл-ПМ2 . . . . .	138
2.106	Диалог “Охлаждение” в Кристалл-ПМ1 . . . . .	138
2.107	Диалог “Сон” . . . . .	139
3.1	Конвертер хроматограмм . . . . .	145
3.2	Выбор папки . . . . .	147
3.3	Пример списка последних открывавшихся папок . . . . .	148
3.4	Выбор проекта . . . . .	148
3.5	Удаленный проект . . . . .	149
3.6	Пример списка зарегистрированных проектов . . . . .	150
3.7	Преобразование хроматограмм . . . . .	150
3.8	Преобразование хроматограмм с переносом в проект . . . . .	151
3.9	Завершение процесса преобразования хроматограмм . . . . .	151
3.10	Контекстное меню . . . . .	152
3.11	Системное контекстное меню Windows . . . . .	153
3.12	Паспорт хроматограммы . . . . .	153
4.1	Принципиальная схема хроматографа . . . . .	155
4.2	Структура хроматограммы . . . . .	156
4.3	Окно фильтрации . . . . .	157
4.4	Хроматограмма а) до фильтрации, б) после фильтрации . . . . .	158
4.5	Разметка пика . . . . .	159
4.6	Пики, полученные при работе с колонкой: а) капиллярной, б) насадочной . . . . .	163
4.7	Особенности идентификации на двух каналах: а) пример 1, б) пример 2 . . . . .	170
4.8	Градуировочный график зависимости отклика пика от концентрации . . . . .	171
5.1	Структура базы данных проекта . . . . .	181
5.2	Главное окно программы . . . . .	183

5.3	График хроматограммы . . . . .	186
5.4	Таблица . . . . .	187
5.5	Администратор проектов . . . . .	190
5.6	Создание проекта . . . . .	191
5.7	Добавление проекта . . . . .	192
5.8	Изменение проекта . . . . .	193
5.9	Автообновление проекта . . . . .	193
5.10	Настройки проекта . . . . .	194
5.11	Общие параметры программы . . . . .	195
5.12	Настройка панелей инструментов. Закладка “Панели” . . . . .	196
5.13	Настройка панелей инструментов. Закладка “Команды” . . . . .	197
5.14	Настройка панелей инструментов. Закладка “Параметры” . . . . .	198
5.15	Диалог “Полезный совет” . . . . .	199
5.16	Автоматическое удаление хроматограмм . . . . .	199
5.17	Свойства таблицы. Закладка “Элементы” . . . . .	201
5.18	Индикаторы состояния записей в таблицах . . . . .	202
5.19	Свойства таблицы. Закладка “Столбцы” . . . . .	202
5.20	Вид таблиц при расчете методом процентной нормализации . . . . .	204
5.21	Вид таблиц при расчете методом внутренней нормализации . . . . .	205
5.22	Вид таблиц при расчете методом абсолютной градуировки . . . . .	205
5.23	Вид таблиц при расчете методом внешнего или внутреннего стандарта . . . . .	206
5.24	Пример сортировки записей по двум столбцам . . . . .	208
5.25	Панель группировки: а) не задействована, б) задана группировка строк по столбцу “Градуировка” . . . . .	209
5.26	Пример отображения хроматограмм за определенный период времени . . . . .	210
5.27	Пример использования фильтра записей в списке хроматограмм . . . . .	211
5.28	Паспорт хроматограммы. Закладка “Общее” . . . . .	212
5.29	Заполнение списка фамилий операторов . . . . .	213
5.30	Паспорт хроматограммы. Закладка “Проба” . . . . .	214

5.31	Окно “Пробоподготовка” . . . . .	214
5.32	Калькулятор объема газовой пробы . . . . .	216
5.33	Паспорт хроматограммы. Закладка “Колонка” . . . . .	217
5.34	Пример списка колонок . . . . .	217
5.35	Паспорт хроматограммы. Закладка “Режим” . . . . .	218
5.36	Паспорт хроматограммы. Закладка “Комментарии” . . . . .	218
5.37	Свойства хроматограммы. Закладка “Каналы” . . . . .	219
5.38	Свойства хроматограммы. Закладка “Оси” . . . . .	220
5.39	Свойства хроматограммы. Закладка “Пики” . . . . .	221
5.40	Диалог “Медианная фильтрация” . . . . .	225
5.41	Диалог “Гауссова фильтрация” . . . . .	226
5.42	Диалог “Фильтр 2-го порядка” . . . . .	226
5.43	Операция “Вычитание хроматограмм” . . . . .	227
5.44	Вычитание профиля со смещенным ложным пиком . . . . .	228
5.45	Инверсия отрицательного пика . . . . .	229
5.46	Настройка расчета хроматограммы . . . . .	230
5.47	Контекстное меню расчета хроматограммы . . . . .	231
5.48	Добавление операций в последовательность . . . . .	232
5.49	Окно операции “Интегрирование”. Страница “Общие настройки” . . . . .	234
5.50	Окно операции “Интегрирование”. Страница “События интегрирования” . . . . .	234
5.51	Окно операции “Теоретические тарелки” . . . . .	236
5.52	Окно операции “Идентификация” . . . . .	236
5.53	Окно операции “Градуировочные коэффициенты” . . . . .	237
5.54	Окно операции “Количественный расчет” . . . . .	238
5.55	Пример корректировки разметки пика . . . . .	240
5.56	Диалог операции “Удаление пиков” . . . . .	240
5.57	Неидентифицированные пики . . . . .	241
5.58	Вид таблицы “Компоненты” при идентификации по индексам удерживания . . . . .	247
5.59	Диалог “Обработать как предыдущую” . . . . .	249

5.60	Окно “Градуировка” . . . . .	249
5.61	Диалог “Обработать по методу” . . . . .	252
5.62	Обработка группы хроматограмм . . . . .	253
5.63	Диалог “Корректировка метода” . . . . .	254
5.64	Диалог “Выбор метода” . . . . .	255
5.65	Диалог “Метод по умолчанию для данного сеанса” . . . . .	256
5.66	Пример сшивки каналов . . . . .	260
5.67	Диалог “Расчет анализа” . . . . .	260
5.68	Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “Общие” . . . . .	261
5.69	Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “Разделы” . . . . .	262
5.70	Диалог “Отчет хроматограммы”. Закладка “График хроматограммы” . . . . .	263
5.71	Диалог “Внешний расчет”. . . . .	264
5.72	Поверка хроматографа. Закладка “Общее” . . . . .	266
5.73	Поверка хроматографа. Закладка “Шум” . . . . .	267
5.74	Поверка хроматографа. Закладка “Среднее, СКО, предел” . . . . .	268
5.75	Результат оперативной оценки шума . . . . .	269
6.1	Создание метода . . . . .	278
6.2	Проведение анализа . . . . .	286
7.1	Главное окно программы . . . . .	290
7.2	Строка состояния . . . . .	291
7.3	Пример графика хроматограммы . . . . .	292
7.4	Настройка анализа . . . . .	293
7.5	Настройка отчета . . . . .	294
7.6	Размещение дочерних окон каскадом . . . . .	294
7.7	Равномерное размещение дочерних окон . . . . .	295
7.8	Минимизация дочерних окон . . . . .	296
7.9	Диалог “Главное окно” . . . . .	296
7.10	Паспорт хроматограммы . . . . .	297

7.11	Диалог “Фильтрация” . . . . .	299
7.12	Задание параметров интегрирования . . . . .	300
7.13	Создание события интегрирования . . . . .	300
7.14	Настройка параметров идентификации пиков . . . . .	302
7.15	Корректировка разметки пиков . . . . .	303
7.16	Диалог настройки свойств компонента . . . . .	304
7.17	Калибровочная зависимость . . . . .	306
7.18	Добавление калибровочного уровня . . . . .	307
7.19	Внесение концентрации в калибровочный уровень . . . . .	307
7.20	Сохранение методики на диске . . . . .	309
7.21	Диалог “Количественный расчет” . . . . .	310
7.22	Открыть файл хроматограммы (метода) . . . . .	311
7.23	Сохранение файла . . . . .	311
8.1	Программа корреляции времен удерживания . . . . .	314
8.2	Диалог “Выбор профиля” . . . . .	315
8.3	Диалог “Профиль” . . . . .	315
8.4	Диалог “Калибровочная точка” . . . . .	316
8.5	Расчет давления . . . . .	317
8.6	Перекалибровка . . . . .	317



# Список таблиц

1.1	Используемые аббревиатуры . . . . .	12
1.2	Отличия ПО <i>Хроматэк Аналитик 2.2</i> и <i>Хроматэк Аналитик 2.5</i> . . . . .	18
1.3	Минимальные требования к компьютеру . . . . .	20
2.1	Способы организации сеансов . . . . .	118
3.1	Основные особенности и ограничения форматов хроматограмм . . . . .	143
4.1	Рекомендуемые параметры интегрирования . . . . .	163
5.1	Иконки главного окна на панели задач Windows . . . . .	181
5.2	Элементы главного меню . . . . .	184
5.3	Список одиночных операций обработки . . . . .	188
5.4	Столбцы, необходимые при проведении идентификации пиков . . . . .	203
5.5	Горячие клавиши для работы с графиком . . . . .	273
5.6	Горячие клавиши общего назначения . . . . .	274
7.1	Кнопки панели инструментов . . . . .	291

# Предметный указатель

- абсолютная градуировка, [174](#), [205](#), [237](#)
- активное периферийное устройство, [23](#), [100](#)
- анализ, [23](#)
  - изменение времени, [99](#)
  - останов, [99](#)
- базовая линия, [23](#)
- быстрый перерасчет, [239](#)
- внешний расчет, [238](#), [263](#)
- внешний стандарт, [174](#), [206](#), [237](#)
- внутренние устройства, [109](#)
  - кран-дозатор, [110](#)
  - кран-переключатель, [111](#)
  - метанатор, [111](#)
- внутренний стандарт, [23](#), [175](#), [206](#), [237](#)
- внутренняя нормализация, [173](#), [204](#), [237](#)
  - многоканальная хроматограмма, [174](#)
  - одноканальная хроматограмма, [173](#)
- время удерживания пика, [23](#)
- высота пика, [23](#)
- газовая хроматография, [23](#)
- газы
  - Кристалл-2000, [94](#)
  - Кристалл-ПМ1, [92](#)
  - Кристалл-ПМ2, [85](#)
- главное окно, [182](#), [289](#)
  - меню, [196](#)
  - настройка, [195](#)
  - Панель управления, [50](#)
  - панель инструментов, [196](#)
  - параметры, [195](#)
  - страницы, [198](#)
- горячие клавиши, [273](#)
- градуировка, [23](#), [247](#)
  - абсолютная, [174](#)
  - градуировочная зависимость, [247](#)
  - градуировочные точки, [248](#)
  - градуировочный график, [249](#)
  - график, [247](#)
  - компонентов, [169](#)
  - корректировка, [250](#)
  - коэффициенты, [237](#)
  - метод стандартной добавки, [251](#)
  - погрешность, [177](#), [249](#)
  - среднеквадратичное отклонение, [249](#)
  - функция, [247](#)
- градуировочная зависимость, [24](#)
- градуировочные коэффициенты, [24](#)
- график, [186](#), [292](#)
  - автомасштабирование, [195](#)
  - фиксированный масштаб, [220](#)
- график хроматограммы, [24](#)
- диалог
  - администратор проектов, [189](#)
  - блокировки Кристалл-ПМ1, [77](#)
  - вычитание хроматограммы, [226](#)
  - гауссова фильтрация, [225](#)
  - инверсия хроматограммы, [228](#)
  - конфигурация, [58](#), [59](#)
  - корректировка метода, [253](#)
  - медианная фильтрация, [225](#)
  - настройка панели инструментов, [196](#)
  - настройка проекта, [194](#)
  - настройка соединения, [124](#)
  - обработать по методу, [252](#)
  - отчет анализа, [261](#)
  - отчет хроматограммы, [261](#)
  - охлаждение, [137](#)
  - параметры главного окна, [195](#)
  - параметры сеанса, [128](#)
  - паспорт, [212](#)
  - поджиг в Кристалл-ПМ1, [78](#)
  - полезный совет, [198](#)
  - продувка до анализа, [94](#)
  - расчет хроматограммы, [229](#)
  - регуляторы газа Кристалл-ПМ1, [79](#)
  - режим хроматографа
    - Кристалл-2000, [93](#)
    - Кристалл-ПМ1, [89](#)
    - Кристалл-ПМ2, [82](#)
  - свойства таблицы, [201](#)
  - свойства хроматограммы, [219](#)
  - соединения с приборами, [124](#)

- сон, 139
- удаление разметки пиков, 240
- фильтр 2-го порядка, 226
- дозатор автоматический газовый, 105
- дозатор автоматический жидкостный, 103
- дозатор бесшприцевого ввода, 108
- дозатор равновесного пара, 107
- дрейф, 24
- защита метода, 254
- идентификация, 24, 164, 203, 244, 301
  - алгоритм, 164
  - время удерживания, 165
  - индексы удерживания, 203
  - на двух каналах, 167
  - параметры компонентов
    - недетектируемый, 245
    - обычный, 244
    - опорный, 245
    - основной, 245
    - подтверждающий, 245
  - по времени удерживания, 203, 245
  - с применением опорных пиков, 203, 245
  - по двум каналам, 203, 246
  - по индексам удерживания, 203, 246
- изменение времени анализа, 99
- изолиния, 24, 87
- изотерма, 24, 83
- индекс
  - Ковача, 166
  - опорный пик, 165
  - удерживания, 166
- индекс удерживания, 24
- интегрирование, 24, 159, 299
  - автоматическое, 159
  - асимметрия, 160
  - база, 161
  - минимальная высота, 162
  - минимальная площадь, 162
  - наездник, 162
  - плато, 161
  - порог, 160
  - события, 163
  - ширина, 160
- испаритель пиролитический, 109
- Конвертер хроматограмм, 141
  - выбор папки, 146
  - выбор проекта, 148
- выполнение преобразования, 150
- главное окно, 144
- запуск программы, 146
- панель-источник, 146
- панель-приемник, 146
- перенос настроек проекта, 152
- проектный режим, 146
- файловый режим, 146
- калибровка, 305
  - импорт калибровочных уровней, 309
- калибровка газовых регуляторов, 76
- канал, 24
- клапан
  - ПМ1, 116
  - ПМ2, 113
    - простой режим, 113
    - расширенный режим, 115
- количественный расчет, 24, 172, 237, 256, 309
  - метод процентной нормализации, 237, 256
  - метод абсолютной градуировки, 205, 237, 256
  - метод внешнего стандарта, 206, 237, 256
  - метод внутреннего стандарта, 206, 237, 256
  - метод внутренней нормализации, 204, 237, 256
  - метод процентной нормализации, 204
- множитель, 258
- недетектируемый компонент, 258
- разведение, 258
- расчет анализа, 259
- сходимость, 259
- сшивка каналов, 259
- компонент, 24
  - градуировка, 169
- компоненты
  - импорт компонентов, 309
  - копирование, 243
  - создание, 241, 303
- конфигурация Кристалл-ПМ1, 59, 77
  - блокировки, 77
  - поджиг, 78
  - регуляторы газа, 79
- конфигурация Кристалл-ПМ2, 58
  - блокировки, 63
  - детекторы, 68
  - АЦП, 72

- ДТП, 69
- ДТХ, 70
- ПИД, 68
- ПФД, 71
- ТИД, 68
- ФИД, 71
- ЭЗД, 70
- клапаны, 60
- колонки, 62
- МСД, 60
- общие параметры, 59
- параметры поджига, 65
- регуляторы газов, 72
- сохранение настройки, 58
- концентрация
  - основное вещество, 176
- кран-дозатор, 110, 111
- кран-переключатель, 111, 113
- краны, 111
  - кран-дозатор, 111
  - кран-переключатель, 113
- Мастер нового соединения, 40
- маркер, 224, 299
- мертвое время, 25, 86, 92
- метанатор, 111, 113
- метод, 25, 188
  - абсолютная градуировка, 174, 205
  - внешний стандарт, 174, 206
  - внутренний стандарт, 175, 206
  - внутренняя нормализация, 173, 204
    - многоканальная хроматограмма, 174
    - одноканальная хроматограмма, 173
  - защита, 254
  - корректировка, 253
  - метод по умолчанию, 254
  - название, 248
  - обработать по методу, 252
  - передача метода, 254
  - процентная нормализация, 172, 204
  - создание, 251
  - части метода, 251
- метод абсолютной градуировки, 25
- метод внешнего стандарта, 25
- метод внутреннего стандарта, 25
- метод внутренней нормализации, 25
- метод процентной нормализации, 25
- метод стандартной добавки, 251
- микропрограмма хроматографа, 135
- минимизация окна ПУ, 55
- многоканальная хроматограмма, 25
- настройка соединения
  - web-сервер, 128
  - вид главного окна, 127
  - общие параметры, 125
  - сеансы, 126
- настройка хроматографа
  - Кристалл-ПМ2
    - сохранение настройки, 58
  - калибровка газовых регуляторов, 76
  - конфигурация, 57
    - Кристалл-ПМ1, 59, 77
    - Кристалл-ПМ2, 58, 59
  - основные сведения, 57
- недетектируемый компонент, 26, 207
- неидентифицированные пики, 176
- нормализация
  - внутренняя, 173
  - процентная, 172
- нулевая линия, 26
- одновременные анализы, 117
- ожидание готовности, 97
- окно поиска, 26
- операции, 188
  - внешний расчет, 238
  - вычитание хроматограммы, 226
  - гауссова фильтрация, 225
  - градуировочные коэффициенты, 237
  - идентификация, 236
  - инверсия хроматограммы, 228
  - интегрирование, 232
  - количественный расчет, 237
  - корректировка метода, 253
  - медианная фильтрация, 225, 232
  - обработать как предыдущую, 248, 252
  - обработать по методу, 252
  - отчет анализа, 261
  - отчет хроматограммы, 238, 261
  - последовательность операций, 188, 229
  - расчет теоретических тарелок, 235
  - расчет хроматограммы, 229
  - события интегрирования, 233
  - уточнить времена удерживания, 244
  - фильтр 2-го порядка, 226
- операция, 26
- останов анализа, 57, 99
- отчет
  - отчет анализа, 261
  - отчет хроматограммы, 261

- охлаждение, 137
- Панель управления, 29  
запуск программы, 49
- Пошаговое руководство, 275
- Программа корреляции времен удерживания, 313
- панель инструментов, 26, 182, 291
- панель информации, 182
- параметры сеанса  
дополнительные, 134  
основные, 129
- парогазовый дозатор, 105
- паспорт, 26, 296
- пассивное периферийное устройство, 26, 101
- периферийное устройство, 100  
активное, 100, 101  
ДАГ, 105  
ДАЖ, 103  
ДБВ, 108  
ДПГ, 105  
ДРП, 107  
пиролитический испаритель, 109
- пики, 26  
время удерживания, 23  
высота, 23  
идентификация, 164  
надписи над пиками, 220  
неидентифицированные, 176  
обратные, 228  
отрицательные, 228  
площадь, 26  
ручная корректировка, 239, 302  
удаление разметки, 240
- пиролитический испаритель, 109
- площадь пика, 26
- поверка, 265  
оперативная оценка шума, 268
- погрешность, 177, 249
- поиск коэффициента, 76
- полезный совет, 198
- последовательность операций, 26
- предел детектирования, 26
- предстарт, 97
- проба, 26
- программирование газов  
Кристалл-ПМ1, 92  
Кристалл-ПМ2, 85
- программирование температуры  
Кристалл-2000, 94  
Кристалл-ПМ1, 90  
Кристалл-ПМ2, 83
- продувка до анализа, 94
- продувка после анализа  
Кристалл-ПМ1, 93  
Кристалл-ПМ2, 88
- проект, 26  
база данных, 180  
добавление, 192  
изменение названия, 192  
изменение формата, 192  
настройка, 194  
обновление, 192  
создание, 190  
структура, 180  
удаление, 193
- профиль коррекции, 27, 226
- процентная нормализация, 172, 204, 237
- прошивка хроматографа, 135
- разведение, 177
- разметка, 159
- расчет, 172  
количественный, 172
- расчет анализа, 259
- расчет концентрации основного вещества, 206
- расчет по неидентифицированным пикам, 237
- расчет теоретических тарелок, 235
- расчет хроматограммы, 229  
градуировочные коэффициенты, 237  
идентификация, 236  
интегрирование, 232  
количественный расчет, 237  
медианная фильтрация, 232  
события интегрирования, 233  
теоретические тарелки, 235
- режим  
автозадание, 98  
загрузка, 98  
охлаждение, 137  
по умолчанию, 98  
продувка до анализа, 94  
сон, 139  
сохранение, 98
- режим хроматографа, 81  
Кристалл-2000  
газы, 94  
программирование температуры, 94

- температура, 94
- Кристалл-ПМ1, 89
  - газы, 92
  - общие параметры, 89
  - программирование газов, 92
  - программирование температуры, 90
  - продувка после анализа, 93
  - температура, 90
- Кристалл-ПМ2, 82
  - газы, 85
  - общие параметры, 82
  - программирование температуры, 83
  - продувка после анализа, 88
  - температура, 83
- общие параметры
  - Кристалл-2000, 94
- сеанс, 27, 117
  - анализический, 117
  - диагностический, 117, 121
  - добавление, 128
  - изменение, 128
  - параметры, 128
    - дополнительные, 134
    - основные, 129
  - программа обработки
    - ХА 1.5, 131
    - ХА 2.5, 132
  - управление, 123
- события интегрирования, 27, 163
- соединение, 27, 117
  - запуск, 49
  - изменение параметров, 124
  - подключение по COM-порту, 31
  - подключение по Ethernet, 34
  - подключение по USB, 31
  - создание, 40
- сон, 139
- стандарт
  - внешний, 174
  - внутренний, 175
- стандартная добавка, 251
- сходимость, 177, 259
- сшивка каналов, 174, 237, 259
- таблицы, 186, 241
  - адаптация под метод расчета, 204
  - адаптация под способ идентификации, 203
  - индикатор состояния записей, 201
  - настройка, 200
- панель группировки, 209
- размеры столбцов, 207
- расположение столбцов, 207
- свойства, 201
- сортировка записей, 207
- сортировка хроматограмм, 209
- столбцы, 202, 269
- фильтр записей, 201, 210
- температура
  - Кристалл-2000, 94
  - Кристалл-ПМ1, 90
  - Кристалл-ПМ2, 83
- требования к компьютеру, 19
- управление периферией, 100
  - Кристалл-ПМ1, 102
  - Кристалл-ПМ2, 101
  - общие сведения, 100
- условные обозначения, 11
- установка программного обеспечения, 19
- устройства
  - внутренние, 100
  - периферийные, 100
- фильтрация, 157
  - гауссова, 158, 225
  - медианная, 158, 225
  - полуширина окна, 158
  - фильтр 2-го порядка, 226
- формат хроматограммы
  - AIA, 142
  - BIN, 142
  - Excel, 142
  - Flash, 142
  - MAT, 142
  - TXT, 142
  - XML, 142
  - XML.GZIP, 142
  - XML2x, 142
  - ХА 1.21, 141
  - ХА 1.23, 141
  - ХА 1.24, 142
  - ХА 1.5, 142
  - ХА 2.x, 142
- Хроматэк Аналитик 1.5, 289
  - вспомогательное окно, 295
  - запуск программы, 289
  - работа с окнами, 293
- Хроматэк Аналитик 2.5, 179
  - вспомогательное окно, 212

запуск программы, 181

холостой анализ, 27, 226

хроматограмма, 27

- автоматическое удаление, 199
- визуальная оценка, 221, 297
- вычитание, 226
- график, 186, 292
- инверсия, 228
- канал, 186, 292
- копирование, 222
- коррекция нулевой линии, 226
- многоканальная, 223
- надписи над пиками, 220
- наложение, 223
- настройка, 219
- обработать как предыдущую, 248, 252
- обработать по методу, 252
- обработка, 210, 295
- оси, 220
- паспорт, 212, 296
- работа с буфером обмена, 222
- работа с графиком, 221, 297
- расчет, 229
- фиксированный масштаб, 220
- фильтрация, 225, 299
- формат, 141
- цвет канала, 219

хроматографический процесс, 155

хроматография, 27

шум, 27

экспертный режим, 124

этап

- анализ, 57
- готовность, 56
- инициализация, 55
- нулевой, 56
- ожидание, 56
- ожидание готовности, 56, 97
- охлаждение, 57
- подготовка, 56
- подготовка к продувке, 56, 57
- поджиг, 56
- поиск коэффициента, 56, 76
- продувка, 57
- продувка перед анализом, 56
- сон, 57
- экономия, 56

этапы обработки хроматограмм, 156

этапы хроматографа, 55



**САЙТ**

<http://www.chromatec.ru>

**ТЕЛЕФОНЫ**

Код города	<b>8362</b>
Приемная	<b>68-59-01, тел./факс 68-59-16</b>
Коммерческий директор	<b>68-59-03, 12-67-12</b>
Технический директор	<b>68-59-04</b>
Заместитель генерального директора по производству	<b>68-59-02</b>
Заместитель генерального директора по маркетингу	<b>68-59-18</b>
Коммерческий отдел	<b>телефоны 68-59-71, 68-59-69, 68-59-70; факс 63-05-00</b>
Ремонтно-эксплуатационная служба	<b>68-59-19, 68-59-32, 68-59-33</b>
Отдел программного обеспечения	<b>68-59-39</b>
Аналитическая лаборатория	<b>68-59-41</b>
Методическая лаборатория	<b>68-59-40, 68-59-42</b>
Курсы для специалистов	<b>68-59-40</b>

**ПОЧТОВЫЙ АДРЕС**

424000, г. Йошкар-Ола, Главпочтамт, а/я 84, ЗАО СКБ ХРОМАТЭК

**ЮРИДИЧЕСКИЙ АДРЕС**

424000, г. Йошкар-Ола, ул. Строителей, д. 94

**БАНКОВСКИЕ РЕКВИЗИТЫ**

Расчетный счет 40702810637180100160 в ОСБ Марий Эл № 8614 г. Йошкар-Ола к/с 301018103000000000630, БИК 048860630 Идентификационный номер (ИНН) 1215032212 Код по ОКОНХ 95130, 19320 Код по ОКПО 12908609

**ЭЛЕКТРОННАЯ ПОЧТА**

<a href="mailto:sos@chromatec.ru">sos@chromatec.ru</a>	оперативное решение технических проблем
<a href="mailto:support@chromatec.ru">support@chromatec.ru</a>	ремонтно-эксплуатационная служба
<a href="mailto:analytics@chromatec.ru">analytics@chromatec.ru</a>	аналитическая лаборатория
<a href="mailto:softlab@chromatec.ru">softlab@chromatec.ru</a>	отдел программного обеспечения
<a href="mailto:school@chromatec.ru">school@chromatec.ru</a>	обучение, курсы для специалистов
<a href="mailto:mail@chromatec.ru">mail@chromatec.ru</a>	общие вопросы, секретарь
<a href="mailto:sales@chromatec.ru">sales@chromatec.ru</a>	отдел продаж