

ООО Амперсенд 2018



МультиХром

версия 1.6
ГПХ / SEC

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ



Оглавление

	0
Раздел I Оглавление	12
Раздел II Для начинающих	12
Раздел III Клавиатура и мышь	13
Раздел IV Введение	14
1 Общая информация	14
АМПЕРСЕНД	14
МультиХром	15
Принципы работы системы	16
Прием данных	16
Интерфейс	17
АЦП "МультиХром" ADC7710b	18
АЦП ЛА-И24	21
АЦП МультиХром ADC7710RS	22
АЦП МультиХром-1	22
АЦП Е-24	23
Аналого-цифровое преобразование	23
Установки платы АЦП	24
Настройка на АЦП	24
Установки СОМ портов	26
Демонстрационный режим	26
Требования к компьютеру	26
2 Установка и удаление программы	27
Установка программы	27
3 Компоненты системы	27
Главное окно программы	28
Окно хроматограммы	28
Статус процесса	28
Система меню	29
Удаление программы	29
Пиктографическое меню	29
Открыть метод и запустить	30
Продолжить хроматограмму	31
Закончить хроматограмму	31
Перезапустить метод	31
Приостановить хроматограмму	31
Внешний старт	31
Продлить! (+2 мин)	31
Просмотр	31
Контекстные меню	32
Диалоговые окна	32
Заголовок хроматограммы	33
Текстовые поля	33
Числовые поля	33

Списочные поля.....	33
Переключатели.....	33
ok	33
Отмена cancel.....	33
Справка	33
Применить apply.....	33
Заголовок диалогового окна.....	34
Типы файлов	34
Клавиатура и мышь	34

Раздел V Главное меню

35

1 Меню файл	36
Меню Файл: Открыть	36
Меню файл: сохранить	37
Новый метод	37
Удалить	37
Печать хроматограммы_2	37
Выйти	37
Закреть	37
2 Меню Буфер	37
3 Меню таблица	38
4 Меню Пик	38
5 Меню Вид	39
Вид	39
Оси хроматограммы.....	40
Ось X	41
Ось Y	41
Оси: флажки.....	41
Оси: метки.....	41
Метки	42
Вид: метки пиков.....	43
Метки пика: флажки.....	43
Рисовать каждую точку.....	43
Не соединять точки.....	43
Маркеры канала.....	44
Выбрать канал.....	44
Список каналов	44
Текущий канал.....	45
Показать все.....	45
Скрыть все.....	45
Вид: цвета.....	45
Выбор	46
Цвет элемента.....	46
Элементы окна.....	46
Контроль базовой линии.....	46
Образец	46
Ширина линии.....	47
По умолчанию-цвета.....	47
Загрузить основные.....	47
Colors	47
Показать все.....	47
Все по горизонтали	47

Все по вертикали	47
Всё	48
Автомасштабирование	48
Компенсация дрейфа	48
6 Меню Измерение	48
7 Меню Обработка	49
Градуировать	49
Вычесть	49
Урезать хроматограмму	50
Перевернуть	50
Сжатие данных	50
8 Меню Метод	50
9 Меню настройка	51
Шрифты	51
10 Меню Окно	52
Tile	52
Cascade	52
Arrange icons	52
Закреть всё	52
11 Справочная система	53

Раздел VI ХроматограммаХроматограмма 53

1 Хроматограмма-определение	53
2 Меню Вид	53
3 Редактор пиков	54
Курсор	56
4 Хроматограмма: градуировочная	56
5 Работа с файлами хроматограмм	57
Открыть хроматограмму	57
Записать хроматограмму	58
Копировать, удалять, перемещать хроматограммы_2	58
Экспорт хроматограммы	58
Экспорт хроматограммы: текстовый формат	58
Импортировать хроматограмму	59
6 Хроматограмма: обычная	59
7 Печать хроматограммы	59

Раздел VII Метод 59

1 Метод определение	60
2 Разметка	61
Параметры разметки: Установки	61
Число пиков	62
Выбор канала	63
Задержка	63
Ширина	63
Уширение	63
Порог	63
Асимметрия	63

Мин.Площадь и Мин.Высота	63
Наездник	64
Отрицательные пики	64
Предложить	64
Интерпол.начало/конец базовой линии	64
События интегрирования	65
Число событий	66
Список событий	66
Удаление события	66
Отключить события	66
Добавить событие разметки	66
Список событий интегрирования	66
Базовая линия	68
Шум базовой линии	68
Пик	68
3 Паспорт	68
Лист Общее	69
Продолжительность хроматограммы	70
Имя файла метода	70
Имя файла хроматограммы	70
Дата и время запуска	70
Дата и время записи	71
Градуировочная точка	71
Имя текущего пользователя	71
Название детектора	71
Число каналов	71
Номер текущего анализа	71
Номер текущей хроматограммы	71
Описание пробы	72
Общее описание	72
Объем пробы	73
Разведение	73
Количество образца	73
Количество стандарта	73
Дата/время	73
Колонка	74
Серийный номер колонки	74
Внутренний диаметр колонки	74
Описание сорбента	75
Зернение сорбента в микронах	75
Параметры предколонки	75
Элюент	75
Состав подвижной фазы	76
Объемная скорость подвижной фазы	76
Давление на входе колонки	76
Температура термостата	76
Комментарии	76
Новый комментарий	76
Журнал метода	76
Журнал хроматограммы	77
4 Настройка метода	77
Измерение	78
Частота сбора данных	79
Делитель частоты	79

Задержка старта хроматограммы.....	79
Режим запуска.....	79
Внешний стоп.....	80
Название детектора.....	80
Информация об интерфейсе.....	80
Настройка метода: каналы	80
Поменять.....	81
Удалить канал.....	81
Подогнать под опорный.....	81
Фильтры: установки метода	81
Фильтры	83
Фильтрация шумов.....	83
Число измерений.....	84
метод Гаусса.....	84
медиана	84
выбросы	84
число точек.....	84
Лист Обработка	84
переключение.....	86
во время измер. каждые XXX мин.....	86
авт. выдача отчета.....	86
Автомасштабирование.....	86
Adjust retention time.....	86
авт. закрытие хр-мы.....	87
Перезапуск метода.....	87
Каталог	87
программа до-после.....	87
Лист "Формулы"	87
Европейская фармакопея.....	88
Параметры и формулы.....	88
Фармакопея США.....	89
Метод расчета мертвого времени/объема.....	89
Метод расчета индексов удерживания.....	90
5 Операции с файлами методов	90
Метод: открыть	90
Метод: сохранить	90
6 Настройка сбора данных	90
НСД- Метод	91
НСД - Интерфейс	92
НСД - Выбор интерфейса	92
НСД -Добавление канала	92
НСД -Удаление канала	92
НСД -очистить список	92

Раздел VIII Градуировка: основные операции

1 Градуировка: Введение	93
2 Идентификация пиков	94
Интегрирование	95
Распознавание	95
Окно идентификации	96

Ожидаемое время удерживания	96
Реперный компонент	96
Обычные компоненты	96
Критерий идентификации	96
Мертвое время	97
3 Таблица компонентов	97
Создание Таблицы компонентов	99
Отклик детектора	100
Индексы удерживания	100
Фактор отклика	101
Пересчитать	101
Единицы удерживания	102
Стандартный компонент	102
Специальный компонент	102
Универсальный компонент	102
Группы	103
4 Таблица концентраций	103
Создание Таблицы концентраций	104
Таблица концентраций: Добавить точку	104
Таблица концентраций: Инфо	105
5 Градуировочный график (Компонент)	105
Градуировочная зависимость	107
Меню окна градуировочной зависимости.....	107
Одноточечная градуировка	108
Многоточечная градуировка	108
Уровень градуировки	108
Градуировочная кривая	108
Обозначения	109
Метод внутреннего стандарта	110
Абсолютная градуировка	111
Табличная градуировка	111
Относительные коэффициенты отклика.....	112
6 Импорт градуировки	112
7 Экспорт градуировки	113
8 Записать в метод	113
9 Прочитать из метода	113
10 Количественный расчет	113
ФО	113
Приведенный объем пробы	114
Сырое количество	114
Расчетное количество	114
Количество	114

Раздел IX Очереди 114

1 Очередь-определение	114
2 Редактор очередей	115
Редактор очередей: исполнение очереди	115
Отменить (режим исполнения).....	116
Приостановить очередь (режим исполнения).....	116
Сбросить.....	116

Отменить последний анализ.....	116
Режим редактирования.....	116
Редактор очередей: редактирование таблицы очереди	116
Запустить очередь (режим исполнения).....	117
Редактор очередей: Меню Настройки.....	117
Редактор очередей: Меню Управление.....	117
Редактор очередей: Меню Редактор.....	118
Сохранить и выйти.....	119
Запустить очередь.....	119
Изменить систему	119
Сбросить.....	119
Размножить	119
Увеличить по порядку.....	120
Продублировать строки.....	120
Удалить строки.....	120
Вставить строки.....	120
Скопировать строки.....	120
Вырезать строки.....	120
Вернуть.....	121
Печать таблицы очереди.....	121
Сохранить очередь.....	121
Открыть очередь.....	121
Редактор очередей: меню Файл.....	121
Редактор очередей: меню Справка.....	121
Сохранить и выйти	122
3 Таблица очереди	122
4 Работа с очередями	123
5 Очередь: файловые операции	123
Очереди: сохранение	123
Очередь: открытие файла	124
Раздел X Пакет хроматограмм: общее	124
1 Пакеты хроматограмм	124
2 Пакетный пересчет: открыть	125
3 Окно «Пакетный пересчет»	125
Пакетный пересчет: общие установки	126
Использовать метод из файла для пересчета	126
Открыть пример.....	126
Редактировать таблицу	127
Открыть все файлы.....	127
Пересчитать обычные.....	127
Пересчитать градуировочные.....	127
Обновить файл метода после пересчета.....	127
Пакетный пересчет: режим пересчета	127
Переразметить.....	128
Редактировать параметры разметки.....	128
Переградуировать.....	128
Только пересчитать.....	129
Изменить паспорт.....	129
Редактировать паспорт	129
Изменить вид хроматограммы.....	129
Редактировать вид.....	129

Пересчет	129
Объединить	130
Закреть пакетный пересчет	130
4 Пакеты хроматограмм: работа с файлами	130
Последний пакет	130
Как открыть пакет хроматограмм	130
Пакеты хроматограмм: создание	131
Как сохранить пакет хроматограмм	131
5 Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограмм	131
Пакетный пересчет: таблица пакета хроматограмм	132
Редактор пакета: меню Файл	133
Редактор пакета: меню Редактор	133
6 Пакетный пересчет: отчет	133

Раздел XI Многоканальная хроматограмма 134

1 Каналы	134
Таблица описания каналов	135
Опорный канал	135
Сдвиг каналов	136
Канал Total	136
2 Спектральный анализ	137
Факторный анализ: выбор ранга	137
Факторный анализ: выбор канала	137
Факторный анализ: результаты	137

Раздел XII Отчет 138

1 Разделы отчета	139
2 Заголовок отчета	140
3 Дополнительные разделы	140
Таблица пиков	140
Опции отчета: Таблица пиков	140
Относительная концентрация	141
Относительная концентрация %	141
концентрация %	142
Концентрация	142
Тип компонента	142
Коэффициент емкости	142
4 Метод расчета концентраций	143
Нормализация	143
Внутренняя нормализация	143
Абсолютная градуировка	144
Тест колонки	144
Заказной метод	144
Эффективность на метр	146
Число теоретических тарелок (N _т)	146
ВЭТТ	147
5 Куда направить отчет	147
Отчет: параметры печати в файл	147

6	Разметка страницы	148
7	Пролистать	148
8	Конфигурация принтера	148
9	Принять	148
10	Шаблоны и разделители	149
	RTT файлы	149
	Разделитель	151
11	кнопка Отчет	151
	Просмотр	151
12	Как напечатать отчет	151
Раздел XIII Глобальные настройки		152
1	Перезаписывать файл данных	153
2	Если метод изменен	153
3	Если метод на диске более свежий	154
4	Настройки: Открытие хроматограммы	154
5	Режим GLP	154
6	Настройки: Сохранение хроматограммы	154
7	Единицы хроматограммы	154
8	Печатать через буфер	154
9	Настройки: GLP	155
Раздел XIV Защита		155
1	Уровень доступа	155
2	Пароль	156
3	Блокировать систему	156
Раздел XV Как выполнить...		156
1	Как напечатать отчет	156
2	Как провести пакетный пересчет	157
3	Как запустить очередь	158
4	Как создать таблицу компонентов	158
5	Как создать таблицу концентраций	159
Раздел XVI Модуль ГПХ		159
1	Введение к ГПХ	159
2	Создание методов ГПХ	162
	Разметка хроматограммы ГПХ	162
	Первая градуировка при ГПХ	165
	ГПХ Создание таблицы компонентов	166
	ГПХ Получение градуировочной зависимости	167
	Метод Монодисперсный	168
	Метод Полидисперсный	169

Метод Универсальный.....	170
ГПХ Завершение градуировки и запись метода.....	170
ГПХ Печать результатов градуировки.....	171
3 Получение хроматограмм с использованием методов ГПХ	171
Определение ММР	171
ГПХ Добавление и удаление градуировочных хроматограмм	171
4 Особенности отчетов для ГПХ	174
 Индекс	 178

2. Запустить загруженный Метод

Выполните команду **Перезапустить** из **меню Измерение**. В появившемся диалоговом окне введите **Продолжительность** хроматограммы (в минутах) и заполните бланк **Запуск анализа**.

Нажмите кнопку **ОК**. Если выбрана внешняя синхронизация запуска, нажмите кнопку внешнего запуска. Если хроматограмма успешно стартовала, цвет окна изменится и Вы увидите бегущую хроматограмму.

После освоения операций запуска хроматограммы можно модифицировать группы параметров **Измерение** и **Параметры обработки**

Для изменения масштаба хроматограммы на экране пользуйтесь **клавиатурой и мышью**

Обе операции по чтению и запуску **Метода** можно совместить, выполнив команду **Открыть метод и запустить** из **меню Измерение**.

Во время измерений существует возможность считывать **хроматограммы** с диска и повторно их обрабатывать, а также запускать другие хроматограммы, регистрируемые по **незакрепленным еще каналам АЦП**.

3 Клавиатура и мышь

С помощью мыши можно легко увеличить любой участок хроматограммы. Для этого нужно поместить курсор мыши в верхний левый угол выделяемой области, нажать левую кнопку и, удерживая её, переместить курсор мыши в правый нижний угол выделяемой области. После отпускания кнопки выбранная кнопка будет увеличена до полного окна.

В случае активного **курсора** (режим редактора пиков) правая кнопка мыши передвигает его с места на место. Для перехода в режим редактора пиков дважды быстро щелкните правой кнопкой мыши.

Клавиатура позволяет изменять масштаб хроматограммы, как описано ниже.

См. также: [Ручная разметка](#)

Комбинация

Выполняемое действие

Курсор неактивен

[Вверх]

увеличение чувствительности по оси Y;

[Вниз]

уменьшение чувствительности по оси Y;

[Вправо]

растянуть хроматограмму по оси X;

[Влево]

сжать хроматограмму по оси X;

[Ctrl]+[Home]

автомасштабирование по оси X (показать все по X);

[Ctrl]+[End]

автомасштабирование по оси Y (показать все по Y);

[Alt]+[V]

автомасштабирование по осям X и Y (аналогично

кнопке **Показать все**)

[Shift]+[Вверх]

сдвиг хроматограммы на 1/10 часть экрана вверх;

[Shift]+[Вниз]

сдвиг хроматограммы на 1/10 часть экрана вниз;

[PageUp]

увеличить расстояние между каналами хроматограммы

[PageDown]

уменьшить расстояние между каналами

хроматограммы

[Z]

установка нуля по последней точке хроматограммы

В случае, когда видна только часть хроматограммы:

[Ctrl]+[Вправо]	переместиться вправо на одно окно (без изменения масштаба по X и Y);
[Ctrl]+[Влево]	переместиться влево на одно окно (без изменения масштаба по X и Y);
[Home]	показать начало хроматограммы (без изменения масштаба по X и Y);
[End]	показать конец хроматограммы (без изменения масштаба по X и Y);
[Z]	установка нуля по низшей точке участка хроматограммы

Курсор активен

[Z]	установка нуля в местоположении курсора
[Вправо]	переместить курсор вправо;
[Shift]+[Вправо]	быстро переместить курсор вправо;
[Влево]	переместить курсор влево;
[Shift]+[Влево]	быстро переместить курсор влево;
[Home]	переместить курсор в начало окна;
[End]	переместить курсор в конец окна;
[Shift]+[End]	установить начало окна в местоположении курсора
[Shift]+[Home]	установить конец окна в местоположении курсора

4 Введение

[Общая информация](#)

[Установка и удаление программы](#)

[Основные компоненты системы](#)

4.1 Общая информация

[Коротко об ООО "Амперсенд"](#)

[О программе МультиХром](#)

[Принципы работы системы](#)

[Демонстрационный режим](#)

[Требования к компьютеру](#)

4.1.1 АМПЕРСЕНД

-(значок '&') - это имя Российской компании с более чем 30- летним опытом в области компьютерной автоматизации хроматографии. Она основана в 1988 году сотрудниками ведущих институтов Российской Академии Наук.

С самого начала АМПЕРСЕНД специализируется на компьютерных системах сбора и обработки хроматографических данных. На настоящий момент АМПЕРСЕНД является развивающейся компанией, занимающейся производством и распространением научного

программного обеспечения.

Разработанная АМПЕРСЕНД система **МультиХром** является лидером российского рынка в области систем сбора и обработки хроматографических данных.

Компания АМПЕРСЕНД сотрудничает с широким кругом передовых производителей и поставщиков хроматографического оборудования и разработчиков хроматографических методик.

В настоящее время в России и странах ближнего зарубежья успешно работает более 8000 систем. Программами разработанными компанией АМПЕРСЕНД комплектуются хроматографы некоторых известных европейских фирм.

Товарные знаки ООО Амперсенд, зарегистрированные в Российской Федерации Федеральным институтом промышленной собственности (свидетельства №№ 104098, 216439, 217649, 218441, 231798) :

Генеральный директор
АО «Амперсенд»

Каламбет Юрий Анатольевич

телефон	8(916)675-25-92, 8(499)322-99-61, 8(499)196-18-57, 8(499)196-52-90
почта	123182, Москва, а/я 27
офис	Москва, пл. Академика Курчатова, д. 2, стр. 2
e-mail	support@ampersand.ru, support@multichrom.ru
веб-сайт	multichrom.ru

4.1.2 МультиХром

МультиХром - это хорошо известный и широко используемый на территории бывшего СССР программный продукт, созданный [АО "АМПЕРСЕНД"](#). Англоязычная версия программы вышла на международный рынок (под маркой различных западных фирм-производителей оборудования).

Программное обеспечение **МультиХром** решает комплекс общих задач по приему и обработке хроматографических данных: аналого-цифровое преобразование, фильтрацию шумов, интегрирование, качественный и количественный анализ компонентов анализируемой смеси. Система обеспечивает также пакетную обработку хроматограмм (работа с очередями), контроль целостности данных, использование пароля и другие возможности. Проведение анализа и оформление отчета производится в соответствии с международными стандартами **Хорошей Лабораторной Практики (GLP, Good Laboratory Practice)**, требованиями **Европейской Фармакопеи и Фармакопеи США**.

Отличительной особенностью комплекса **МультиХром** является возможность получения и обработки **многоканальных хроматограмм**.

Версия **МультиХром» 1.5X** является полностью **32-х разрядным приложением**, оптимизированным для работы в операционной среде *Windows 95*, *Windows 98* или *Windows NT*, что существенно повышает отказоустойчивость и надежность системы, особенно в многозадачном режиме (при работе с несколькими приложениями одновременно). Обеспечивается **совместимость данных** ("снизу вверх") с предыдущими версиями программы.

Настоящая версия **МультиХром 1.6X** содержит в дополнение к ПО версии 1.5x специализированный [модуль для расчета молекулярно-массового распределения полимеров](#)

[\(ММР\)](#) по хроматограммам

4.1.3 Принципы работы системы

Система сбора и обработки хроматографических данных МультиХром состоит из [аппаратной части](#) и [программного обеспечения](#) для IBM PC/AT-совместимого компьютера.

Аппаратная часть служит для [аналого-цифрового преобразования](#) входных данных.

Программное обеспечение решает следующие задачи:

[прием данных от АЦП](#) или другого прибора,

[фильтрация шумов](#),

[интегрирование](#),

[идентификация пиков](#),

[градуировка](#) и [расчет концентраций](#),

[формирование отчета](#),

Все это сочетается с расширенными возможностями обработки, включая работу с [сериями хроматограмм](#) (очередями).

Большим преимуществом системы является возможность приема и обработки [многоканальных хроматограмм](#), в том числе с использованием факторного спектрального анализа.

[Прием данных](#)

[Демонстрационный режим](#)

[Требования к компьютеру](#)

4.1.3.1 Прием данных

Программа МультиХром версии 1.5x может получать данные от [АЦП](#) или других [приборов](#), а также передавать из компьютера, через восемь [портов ввода-вывода](#): [COM1](#), [COM2](#), [COM3](#), [COM4](#), [Плата1](#), [Плата2](#), [Плата3](#), [Плата4](#). Первые четыре - это стандартные серийные порты IBM-совместимого компьютера. Четыре последних обеспечивают доступ максимум к четырем платам АЦП (или другим интерфейсным платам), установленным в компьютере. Каждый прибор использует свой порт. При использовании специальных плат расширения или USB-COM конвертеров вместо портов [Плата1 - Плата4](#) могут использоваться дополнительные серийные [COM4 - COM8](#)

Конфигурацию [АЦП](#) можно определить через опцию [Настройка АЦП>>](#) из диалогового окна [Настройка/Интерфейсы](#).

Каждый [АЦП](#), в свою очередь, может принимать данные по нескольким каналам (входам), от нескольких хроматографов, хотя передает эти данные в компьютер через единственный свой порт ввода-вывода. Обычно АЦП имеют от 2 до 16 каналов и программа [МультиХром](#) позволяет работать со всеми каналами одновременно и независимо друг от друга.

Параметры процесса приема данных задаются через бланк [Параметры сбора данных](#) в [меню Метод](#).

См. также: [Принципы работы системы](#)

Многоканальные хроматограммы:

Несколько любых каналов одного или различных АЦП могут быть объединены в одну [многоканальную хроматограмму](#).

[Интерфейс](#)

[Аналого-цифровое преобразование](#)

4.1.3.1.1 Интерфейс

Интерфейс - это способ, которым АЦП или другой прибор соединен с компьютером (прежде всего, порт ввода-вывода компьютера, используемый для соединения), а также соответствующие протоколы обмена данными между прибором, компьютером и программой «МультиХром».

Программа "МультиХром" позволяет принимать данные от АЦП или других приборов через восемь портов ввода-вывода: COM1, COM2, COM3, COM4, Плата1, Плата2, Плата3, Плата4. Первые четыре - это стандартные серийные порты IBM-совместимого компьютера. Четыре последних обеспечивают доступ к максимум четырем платам АЦП (или другим интерфейсным платам), установленным в компьютер, или к портам COM5-COM8 в случае наличия специальных плат расширения или USB-COM конвертеров. Порты могут использоваться как для приема данных в компьютер от внешнего прибора, так и для обратной пересылки из компьютера во внешний прибор (используется для управления блоками хроматографа).

Каждый такой источник или приемник данных, называемый "Прибор", использует свой порт для передачи данных. Прибором может быть АЦП, хроматограф, детектор, насос или любой другой блок, имеющий собственный последовательный интерфейс типа RS-232 для общения с компьютером.

Вся базовая информация по интерфейсам с приборами хранится в специальных файлах, имеющих расширение «*.DEW». Каждый тип прибора имеет свой **интерфейсный файл**. Загрузив с диска правильный файл устройства, Вы сконфигурируете свою систему.

Диалоговое окно **Интерфейсы** вызывается из **меню Настройка** и дает возможность установить конфигурацию аппаратной части системы приема данных в соответствии с имеющимся оборудованием.

Конфигурирование системы должен проводить **только квалифицированный персонал** во время установки или переустановки программного обеспечения. Рекомендуется не изменять параметры в этом бланке.

Кнопки:

[Настройка >>](#)

открывает соответствующее диалоговое окно для установки параметров АЦП и выбора портов ввода-вывода

[<Прочитать>](#)

считывает драйвер Прибора с диска (файл *.DEW)

[<Записать как>](#)

записывает драйвер Прибора на диск. Позволяет пользователю создавать свои собственные файлы конфигурации оборудования.

[<Удалить АЦП>](#)

стирает информацию о Приборе, подключенном к выбранному порту ввода-вывода

[АЦП МультиХром ADC7710b](#)

[АЦП ЛА-И24](#)

[АЦП МультиХром ADC7710RS](#)

[АЦП МультиХром-1.](#)

[АЦП Е-24](#)

4.1.3.1.1.1 АЦП "МультиХром" ADC7710b

Р
а
з
р
я
д
н
о
с
т
ь
,
б
и
т

2
4
Р
а
з
р
е
ш
е
н
и
е
,
б
и
т

2
0
*
К
о
л
и
ч
е
с
т
в
о
к
а
н

а
л
о
в

2
/
4
М
а
к
с
и
м
а
л
ь
н
а
я
с
к
о
р
о
с
т
ь
с
б
о
р
а
д
а
н
н
ы
х
,
и
з
м
/
с

1
0
/
5
Д
и
а
п
а

з
о
н
в
х
о
д
н
ы
х
н
а
п
р
я
ж
е
н
и
й
,
В
о
л
ь
т

+
/
-
2
.
5

*Реальное разрешение АЦП, ограниченное шумами системы АЦП-кабель-хроматограф, в режиме сбора данных по двум каналам.

Данная плата базируется на микросхеме AD7710 производства фирмы "Analog Devices" и предназначена для хроматографических целей. Она может быть использована с программой МультиХром, обеспечивая возможность сбора данных по 2 или 4 входным каналам. Режим GLP обеспечивает надежное преобразование с частотой 10 Гц по двум каналам, мультиплексный режим обеспечивает скорость сбора данных 5 Гц по 4 каналам при несколько увеличенном уровне шумов.

На плате установлены два ряда контактных пар. Ряд 1 находится над серединой разъема, вставляемого в ЭВМ, ряд 2 - у конца разъема.

Ряд 1 задает **уровень аппаратного прерывания**, используемого платой:

1	3 (верхнее положение)
2	4
3	5
4	9

При работе с ПО *МультиХром* аппаратное прерывание не используется и перемычка **должна быть разомкнута**.

Ряд 2 задает **адрес базового порта** платы:

1	308 (значение по умолчанию для первой платы)
---	--

2	318 (значение для второй платы)
3	338 (значение для третьей платы)
4	348 (значение для четвертой платы)

При установке в компьютер более, чем одной платы, перемычка должна быть переставлена в соответствующее положение и адрес установленного порта необходимо внести в поле *Базовый адрес* диалогового окна *Device settings*.

На плате находятся два 9-контактных разъема для подключения приборов. Их функции зависят от используемого режима. Верхний разъем соответствует каналу 1 (и 3-му каналу для 4-х канального режима). Нижний разъем соответствует второму каналу (четвертому каналу для 4-х канального режима).

Сигналы на контактах входного разъема DB9:

- 1 - защитная земля основного аналогового канала
- 2 - основной аналоговый вход, минус (-)
- 3 - дополнительный аналоговый вход, минус (-) (обычно не используется)
- 4 - TTL вход 1 (в момент замыкания с контактным входом 5 генерируется условие "Внешнего старта" для основного канала)
- 5 - цифровая земля основного канала (подсоединена к земляной шине компьютера и НЕ ДОЛЖНА подсоединяться к земляной шине хроматографа.)
- 6 - защитная земля дополнительного аналогового канала
- 7 - основной аналоговый вход, плюс (+)
- 8 - дополнительный аналоговый вход, плюс (+) (обычно не используется)
- 9 - TTL вход 2 (в момент замыкания с контактным входом 5 генерируется условие "Внешнего старта" для дополнительного канала)

Каналы 3 и 4 работают в режиме 4-х канального мультиплексного режима, при установке соответствующего драйвера.

4.1.3.1.1.2 АЦП ЛА-И24

В плате **АЦП ЛА-И24** используется микросхема типа **AD7710**, представляющая собой **интегральный 24-разрядный аналого-цифровой преобразователь**. Реализованный в микросхеме способ преобразования (дельта-сигма преобразование) исключает появление дифференциальной нелинейности и погрешностей, связанных с остаточными зарядами на интегрирующих конденсаторах, присущих другим типам **АЦП**.

Основные характеристики АЦП ЛА-И24.

Разрядность	24 бит
Динамический диапазон, не менее	20 бит
Собственный шум платы, тип.	1.6 мкВ
Интегральная нелинейность преобразования, тип	0.0045%
Подавление синфазной помехи, не менее	-92 дБ
Количество каналов	2 или 3 (4 или 6)
Максимальная скорость сбора данных, изм/с	50
Диапазон входных напряжений	+/-2.5 В
Коэффициент усиления (программируемый)	1,2,4,128
Входное сопротивление, не менее	100 МОм
Прочность оптронной изоляции	400 В

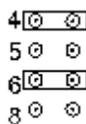
Потребляемый ток (+5 В), не более

270 мА

Выбор базового адреса ввода-вывода.

Базовый **адрес ввода-вывода** устанавливается переключателями в переключателе **SA2**.

По умолчанию используется адрес 320Н:



Альтернативное значение адреса - 330Н:



Выбранный переключателями адрес порта ввода-вывода должен соответствовать установленному адресу порта в диалоговом окне [Настройка на АЦП](#)

Все разъемы для подключения аналоговых сигналов имеют одинаковую цоколевку:

- | | |
|----|---|
| 1. | Аналоговый вход (-), дополнительный канал |
| 2. | Аналоговый вход (+), дополнительный канал |
| 3. | Аналоговая земля дополнительного канала (гальванически развязанная) |
| 4. | Аналоговая земля основного канала (гальванически развязанная) |
| 5. | Аналоговый вход (-), основной канал |
| 6. | Аналоговый вход (+), основной канал |
| 7. | Цифровая земля, соединена с землей IBM PC |
| 8. | Сигнал синхронизации запуска всех каналов АЦП (только на разъеме ХР1) |
| 1. | Сигнал синхронизации запуска основного канала АЦП (по низкому ТТЛ уровню или замыканию на цифровую землю) |

4.1.3.1.1.3 АЦП МультиХром ADC7710RS

Этот **АЦП** также базируется на микросхеме **AD7710** производства фирмы "Analog Devices", но собран в отдельном корпусе, со своим блоком питания. Блок может быть установлен в непосредственной близости от хроматографов и соединяется двухпроводным кабелем с компьютером (через стандартный последовательный **порт COM1** или **COM2**).

Исполнение **АЦП** в виде отдельного выносного блока имеет то преимущество, что позволяет установить компьютер на любом удалении (до десятков метров) от **АЦП**.

Основные характеристики блока аналогичны плате [L241](#).

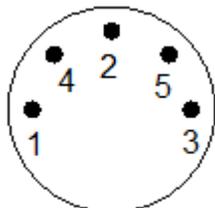
См. также: [АЦП МультиХром-1](#)

4.1.3.1.1.4 АЦП МультиХром-1.

Блок **АЦП МультиХром-1** является базовым для DOS-версии программы **МультиХром**, но может использоваться и с программой МультиХром для Windows. Блок собран в отдельном корпусе, со своим блоком питания. Блок **устанавливается** в непосредственной близости от хроматографов и соединяется двухпроводным кабелем с компьютером (через стандартный последовательный **порт COM1** или **COM2**). В настоящее время не производится.

Основные характеристики блока.

Разрядность	16 бит
Число каналов	2, 4 или 8
Диапазон входного сигнала (определяется пользователем при заказе АЦП) вариант)	-100 мВ ... +1000 мВ (стандартный -1 В ... +10 В -10 мВ ... +100 мВ)



Сигналы на входных разъемах блока:

- 1 - Аналоговый вход (+)
- 2,3 - к кнопке дистанционного запуска (1-й контакт)
- 4 - Аналоговый вход (-)
- 5 - Аналоговая земля (экран)

4.1.3.1.1.5 АЦП Е-24

Выносной модуль Е-24 выпускается в двух- и четырехканальной модификациях, с независимым дистанционным запуском хроматограмм по каждому из каналов. Модуль соединяется с компьютером с помощью цифрового кабеля через порт RS232. Через этот же кабель осуществляется питание АЦП.

Разрядность, бит	24
Динамический диапазон, бит	20
Количество каналов	2 или 4
Скорость сбора данных, (изм/с)	10, 50, 60
Диапазон входных напряжений, Вольт	-2.5 до +2.5
Собственный шум платы, мкВ	1.6
Входное сопротивление, М	100
Питание: от последовательного порта или 12В постоянного тока.	
Разрядность, бит	24
Динамический диапазон, бит	20
Количество каналов	2 или 4
Скорость сбора данных, (изм/с)	10, 50, 60
Диапазон входных напряжений, Вольт	-2.5 до +2.5
Собственный шум платы, мкВ	1.6
Входное сопротивление	

4.1.3.1.2 Аналого-цифровое преобразование

Как правило, в процессе хроматографического анализа на выходе детектора имеется аналоговый сигнал, который не может быть принят компьютером непосредственно. Для преобразования и передачи этого сигнала в компьютер используется специальное устройство - **аналого-цифровой преобразователь (АЦП)**. Многие современные детекторы и хроматографы имеют встроенные АЦП и присоединяются непосредственно к компьютеру

цифровым кабелем.

К одному компьютеру может быть подключено несколько АЦП одновременно. **Прием данных** от АЦП или других приборов осуществляется программой через соответствующие **порты ввода-вывода** компьютера.

В свою очередь, каждый АЦП может принимать данные от нескольких хроматографов по нескольким своим каналам (входам). Большинство АЦП имеют от 2 до 16 входов. При этом программное обеспечение **МультиХром** способно работать со всеми используемыми каналами, одновременно и независимо друг от друга.

В настоящее время с программой **МультиХром для Windows** могут поставляться следующие типы АЦП в виде вставных плат для IBM PC/AT-совместимого компьютера:

[АЦП L241;](#)

[АЦП ЛА-И24;](#)

Поддерживаются также [выносные блоки АЦП](#):

[АЦП МультиХром ADC7710RS;](#)

[АЦП МультиХром-1.](#)

[АЦП E-24](#)

[Установки платы АЦП](#)

[Настройка на АЦП](#)

[Установки COM портов](#)

См. также: [Принципы работы системы](#)

4.1.3.1.2.1 Установки платы АЦП

Каждому каналу на плате **АЦП** соответствует одна специализированная микросхема **АЦП**, позволяющая установить собственную частоту сбора данных и усиление.

Chip	номер микросхемы
Frequency (частота)	установка максимальной частоты сбора данных по каждому каналу (10, 50 или 60 Гц)
Period (период)	периодичность оцифровки данных, вычисляется автоматически из установленной частоты сбора данных.
Gain (усиление)	коэффициент усиления входного усилителя АЦП (1 - 128), значение по умолчанию равно 1.

4.1.3.1.2.2 Настройка на АЦП

Параметры этого диалогового окна контролируют процесс сбора данных, их изменение разрешено только персоналу с уровнем доступа **Администратора** системы. Эти параметры хранятся в специальных **файлах конфигурации** и большинство из них недоступно пользователю для редактирования.

Устройство	название АЦП. Имя АЦП появляется при запуске хроматограммы в паспорте в поле « <i>Детектор</i> ». Произвольно редактируется пользователем.
Протокол	протокол обмена между АЦП, компьютером и программой « <i>МультиХром</i> ». Не редактируется.
Тип	тип порта ввода-вывода компьютера (<i>RS232C</i> или <i>Плата</i>) для приема

	данных от АЦП. Не редактируется.
Базовый адрес	базовый адрес порта ввода-вывода компьютера. В случае конфликтов с другими устройствами можно изменить базовый адрес порта, при этом должны переставляться перемычки на плате АЦП (используется только для плат АЦП).
Диапазон	не используется
Режим измерения	(одновременный, мультиплексный, сканер). Не редактируется.
Число каналов	общее число аналоговых входов данного АЦП. Зависит от типа АЦП. Не требует редактирования.
Время преобр.	максимальное время преобразования (сек.).
Размер буфера	размер буфера данных (байт). По умолчанию 30000 байт.
Подгонка времени	данная опция позволяет определить величину интервала времени между точками измерения для приборов, выдающих результаты с различным периодом. При этом используется программная эмуляция таймера компьютера. Рекомендуется установка опции для большинства АЦП.
Сканер	параметры, устанавливаемые для некоторых типов спектральных сканирующих детекторов или детекторов с диодной матрицей. от: шаг:

Таблица каналов table Таблица «*Параметры каналов*» описывает параметры отдельных аналоговых входов АЦП и служит для индивидуальной настройки на подключенный к каждому каналу АЦП детектор.

В программе «*МультиХром*» доступ к таблице каналов возможен в двух местах: при конфигурации интерфейса (**Настройка / Интерфейсы / Настройка**>>) и при настройке метода (через меню **Метод / Настройка метода / Каналы**). Первый способ дает доступ ко всем параметрам таблицы каналов и является *глобальным*, сделанные установки будут использованы для всех последующих хроматограмм и методов при их перезапуске. Второй способ - *локальный*, сделанные установки действуют только внутри данной хроматограммы. При перезапуске метода будет взята конфигурация из таблицы каналов интерфейса.

«Вкл./выкл. Канал» эта кнопка позволяет включить или выключить любой канал АЦП. Неактивные каналы АЦП можно выключить, чтобы случайно не использовать его для сбора данных.

«Порт» данная кнопка вызывает диалоговое окно [Параметры COM-порта](#)

«Частота...» в зависимости от типа Прибора, данная кнопка вызывает соответствующее диалоговое окно для настройки: [Установки АЦП](#)

4.1.3.1.2.3 Установки СОМ портов

Диалоговое окно **Параметры СОМ-порта** действует для выносных блоков **АЦП** или внешних **Приборов**.

Скорость, бод	скорость передачи данных блоком АЦП в компьютер, в бодах. (Значение по умолчанию - 9600 бод). Не требует редактирования.
Данные, бит	число бит представления данных (по умолчанию равно 8). Не требует редактирования
Четность	контроль четности (по умолчанию - Нет). Не требует редактирования.
Стоп. битов	число стоповых битов (по умолчанию равно 1). Не требует редактирования
Вход. (выход.) очередь	размер входного (выходного) буфера данных, в байтах (значение по умолчанию - 30000). Не требует редактирования.

4.1.4 Демонстрационный режим

Программа запускается в **демонстрационном режиме**, если не установлен специальный электронный ключ в любой из принтерных портов компьютера. Данный режим не позволяет принимать данные от АЦП или хроматографа. Все остальные функции программы, связанные с обработкой полученных ранее данных, работают без ограничений.

Чтобы определить, в каком режиме работает программа, необходимо вызвать диалоговое окно **О программе**.

4.1.5 Требования к компьютеру

Программное обеспечение **МультиХром для Windows** не требовательно к системным ресурсам. Минимальная конфигурация компьютера определяется используемой операционной средой *Windows*, а также необходимостью одновременной работы с другими программами. Для установки программы и комфортной работы рекомендуется следующая минимальная конфигурация компьютера:

x86-совместимый процессор класса не ниже Pentium-100

Операционная система *Windows 95*, *Windows 98*, *Windows 2000* или *Windows NT*

16 Мб оперативной памяти (32 Мб для *Windows NT* и *Windows 2000*)

Не менее 4 Мб свободного места на жестком диске (только для инсталляции)

Не менее 50 Мб свободного места на жестком диске для хранения данных

1.44 Мб накопитель на флорпи дискетах

SVGA графический адаптер (рекомендуется разрешение 600x800 или выше)

Принтерный порт

Свободный RS-232 порт (для подключения внешнего АЦП) или свободный ISA-разъем на материнской плате (для подключения платы АЦП)

Мышь или другое подобное устройство

Принтер (любой *Windows*-совместимый)

4.2 Установка и удаление программы

[Установка](#)

[Удаление](#)

4.2.1 Установка программы

Установка программы производится в соответствии с рекомендациями, данными в "Руководстве пользователя".

По умолчанию программа устанавливается в каталог `c:\mlcw15`, хотя может быть выбран и любой другой. Кроме того, в рабочем каталоге по умолчанию будут созданы следующие папки:

Data

Каталог для хранения [хроматограмм \(*.chw\)](#) и [пакетов хроматограмм \(*.bar\)](#). После установки здесь хранятся несколько файлов с примерами хроматограмм. Название каталога изменяется в диалоговом окне [Настройка метода / Обработка](#).

Methods

Каталог для хранения [методов \(*.mtw\)](#) и [очередей \(*.que\)](#).

Reports

Каталог для хранения файлов текстов отчетов (*.*) и рисунков хроматограмм (*.wmf). Название каталога изменяется в диалоговом окне ["Опции отчета"](#).

Пользователь может использовать произвольные каталоги для хранения хроматограмм, методов или отчетов. Полные имена этих каталогов хранятся в методе и хроматограмме.

4.3 Компоненты системы

[Главное окно программы](#)

[Окно хроматограммы](#)

[Система меню](#)

[Главное меню](#)

[Пиктографическое меню](#)

[Диалоговые окна](#)

[Типы файлов](#)

[Клавиатура и мышь](#)

[Контекстные меню](#)

4.3.1 Главное окно программы

Программа **МультиХром** в операционной среде *Windows* существует в виде главного окна.

Элементами **главного окна программы** являются:

Заголовок	самая верхняя линейка окна, содержит эмблему и название программы, а также стандартные системные кнопки  (<Свернуть> , <Развернуть> и <Закреть> , соответственно).
Главное меню	ниспадающее меню, дающее доступ ко всем функциям системы.
Пиктографическое меню	линейка, содержащая пиктограммы наиболее часто используемых операций. Если установить указатель мышки на выбранной иконке, в статусной строке главного окна появится краткая подсказка.
Статусная строка	состоит из двух полей:
Подсказка	содержит подсказку-сообщение по текущей операции
Пользователь	имя текущего пользователя
Рабочая область	вся остальная часть главного окна. Может содержать одно или несколько открытых или свернутых окон хроматограмм

4.3.2 Окно хроматограммы

Окно хроматограммы служит для показа хроматографической кривой в процессе сбора данных, а также во время или после их обработки. Каждое окно содержит одну хроматограмму. Может быть открыто одновременно несколько окон, однако для манипуляции данными пользователь должен перейти в **текущее окно**.

Окно хроматограммы состоит из:

- Строки **заголовка** с названием окна и кнопками разворачивания/сворачивания окна.
- Строки **статуса** процесса.
- Линеек горизонтальной и вертикальной прокрутки изображения.
- Собственно **поля хроматограммы**.

Масштаб хроматограммы может изменяться с помощью [клавиатуры и мыши](#), а также через диалоговое окно [Оси](#) из **Меню Вид**. Некоторые функции управления окном собраны в [меню Окно](#).

4.3.2.1 Статус процесса

Статус процесса показывает **информацию о текущем состоянии процесса**. Появляется в специальном поле в левом верхнем углу окна хроматограммы.

Готов	хроматограмма готова к запуску;
Ожидая запуска	программа ждет сигнала внешнего запуска;
Измерение	идет прием данных хроматограммы;
Пауза	прием данных приостановлен;
Конец	измерения закончены, но хроматограмма не обработана;
Выполняю	хроматограмма обрабатывается после ее окончания;
Не вкл.	никаких операций в текущем окне не проводится

Ошибки:

Авария неожиданная остановка насоса и т.д.

Ошибка COM порта ошибка в интерфейсе COM порта.

4.3.3 Система меню

[Главное меню](#)

[Пиктографическое меню](#)

[Меню редактора очередей: режим редактирования](#)

[Меню редактора очередей:режим исполнения](#)

[Меню редактора пакетов файлов](#)

[Меню редактора пиков](#)

[Меню окна градуировочной зависимости](#)

[Контекстные меню](#)

4.3.4 Удаление программы

При установке программы **МультиХром** создается специальная запись, дающая возможность полностью удалить все установленные файлы.

Для удаления программы:

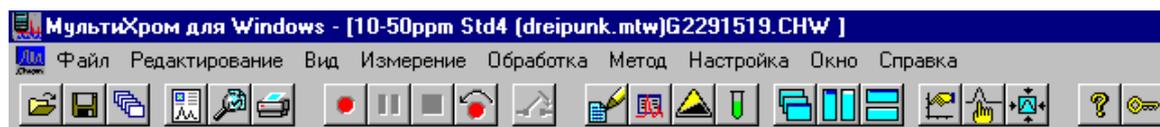
Откройте "Контрольную панель" **<Старт> / Установки / Контрольная панель** (**<Start> / Settings / Control panel** в англоязычной версии).

Откройте диалоговое окно **Установка/Удаление программ (Add/Remove programs)**.

Выберите **МультиХром для Windows 1.5x** в списке программ и щелкните по кнопке **<Добавить/Удалить> (<Add/remove>)**. Все установленные файлы и папки будут удалены. Все файлы данных, появившиеся позднее, после инсталляции, будут сохранены.

4.3.5 Пиктографическое меню

Пиктографическое меню служит для организации удобного и быстрого доступа к наиболее часто используемым операциям и функциям. Все операции пиктографического меню относятся, как правило, только к **текущей хроматограмме**, хотя некоторые операции применяются ко всем открытым хроматограммам.



[Открыть хроматограмму](#)



[Сохранить хроматограмму](#)



[Открыть последний пакет](#)

	Настроить отчет
	Просмотреть отчет
	Печатать отчет
	Открыть и запустить метод
	Приостановить хроматограмму
	Закончить хроматограмму
	Перезапустить метод
	Внешний старт
	Паспорт
	Установки метода
	Параметры интегрирования
	Таблица компонентов
	Каскадное расположение окон
	Вертикальная мозаика
	Горизонтальная мозаика
	Вид
	Редактор пиков
	Показать всё
	Справка
	Блокировать систему

4.3.5.1 Открыть метод и запустить

Эта операция предлагает выбрать метод сбора и обработки данных из текущего каталога методов. После считывания метода программа открывает новое окно хроматограммы и предлагает модифицировать группу параметров диалогового окна [Запуск анализа](#). В данном диалоговом окне имеется несколько диалоговых листов, входящих в состав [Паспорта](#) и [Установок метода](#):

[Общее](#)

[Проба](#)

[Элюент](#)

[Измерение](#)

[Обработка](#)

Хроматограмма запускается щелчком по кнопке **ОК** или нажатием **[Enter]**.

4.3.5.2 Продолжить хроматограмму

Возобновляет сбор данных после **остановки хроматограммы**. Как правило, хроматограмма в точке остановки "портится". Если ход очереди был приостановлен, он также продолжается.

4.3.5.3 Закончить хроматограмму

Останавливает сбор данных до истечения установленной продолжительности хроматограммы. В этом случае выполняются все операции, предусмотренные в диалоговом окне **Обработка**.

4.3.5.4 Перезапустить метод

Перезапускает текущий метод. Перезапустить можно и снятую ранее хроматограмму, предварительно считав её с диска. При этом все данные из прошлой хроматограммы стираются в памяти компьютера, поэтому не забудьте записать ее на диск!

При перезапуске появляется то же диалоговое окно, что и в случае операции **Открыть метод и запустить**.

4.3.5.5 Приостановить хроматограмму

Позволяет временно остановить сбор данных в аварийной ситуации, с возможностью продолжения с места остановки хроматограммы. При этом не выполняются действия по **обработке**, предусмотренные в методе по окончании хроматограммы. Если идет **очередь**, она тоже приостанавливается.

См. также: **Продолжить хроматограмму**

4.3.5.6 Внешний старт

Данная опция эмулирует нажатие кнопки **Внешний запуск** и запускает анализ, если метод запущен и находится в режиме **контроля базовой линии**.

4.3.5.7 Продлить! (+2 мин)

Данная опция позволяет быстро увеличить продолжительность хроматограммы в аварийном случае, когда заказанное время на исходе, без редактирования поля **Продолжительность в паспорте** хроматограммы.

4.3.5.8 Просмотр

Предварительный постраничный просмотр отчета на экране.

Отчет выдается в соответствии с установками диалогового окна **Опции отчета**

Для перехода между страницами можно воспользоваться клавишами **[PgUp]** и **[PgDn]** или линейкой вертикальной прокрутки.

4.3.6 Контекстные меню

Контекстные меню появляются при щелчке правой кнопкой мыши. Состав меню зависит от текущего диалогового окна.

Контекстными меню удобно пользоваться в следующих ситуациях:

1. Во всех диалоговых окнах, связанных с файловыми операциями, можно выполнять операции копирования, удаления, перемещения выбранных файлов.
1. В окне хроматограммы можно выбрать ряд функций меню **Вид**, а также вызвать **редактор пиков**.
2. В **таблице компонентов** можно добавлять или удалять компоненты.

4.3.7 Диалоговые окна

Диалоговые окна используются для ввода и редактирования данных и параметров, они могут служить также для получения от пользователя ответов типа да/нет. Часто диалоговые окна имеют сложную структуру в виде набора **диалоговых листов** с закладками. Можно быстро переходить с одного листа на другой, щелкая мышкой по закладкам с названиями листов. В верхней строке каждого диалогового окна имеется его **заголовок** (название).

Поля, доступные для редактирования, выделены белым цветом. Для редактирования щелкните в нужном месте мышкой или используйте **[Tab]** или **[Shift]+[Tab]** для перехода к следующему (предыдущему) полю. Основными элементами диалогового окна могут быть текстовые, числовые и списочные поля, флажки и переключатели.

Текстовые поля допускают ввод произвольного текста и являются описательными.

Числовые поля допускают ввод только чисел. Для принятия введенных значений не требуется нажатия клавиши **[Enter]**, можно просто переходить к следующему полю.

Списочные поля могут принимать только допустимые значения.

Щелкните по кнопке  и выберите требуемое значение из списка.

 **Флажки**

могут принимать только два значения: **включено** и **выключено**. Флажки отмечаются серыми или белыми квадратами . Каждый такой флажок устанавливается независимо от состояния других флажков. Щелкните мышкой по значку, чтобы изменить значение на противоположное. Если флажок установлен, в квадрате появляется галочка .

 **Переключатели**

позволяют выбрать только один из приведенных вариантов. Выбранный вариант отмечается значком .

Диалоговое окно может содержать также несколько **командных кнопок**, расположенных в нижней или правой части окна. При нажатии на такую кнопку будет выполнена соответствующая операция. В диалоговом окне могут быть и кнопки, открывающие другие диалоговые окна. Наиболее часто встречаются следующие кнопки:



принимает все сделанные изменения. То же самое происходит при нажатии клавиши **[Enter]**



отменяет все сделанные изменения. Можно также закрыть окно, щелкнув мышкой по кнопке  в его правом верхнем углу или нажав **[Esc]**.



сохраняет все изменения без выхода из диалогового окна



вызов контекстно-чувствительной подсказки. Можно также нажать [F1]

4.3.7.1 Заголовок хроматограммы

Заголовок хроматограммы используется при дисковых операциях чтения/записи, а также появляется как название **окна хроматограммы**.

Заголовок берется из **таблицы очереди**, если идет **серия хроматограмм**

4.3.7.2 Текстовые поля

Текстовые поля допускают ввод произвольного текста и являются описательными.

4.3.7.3 Числовые поля

Числовые поля допускают ввод только чисел. Для принятия введенных значений не требуется нажатия клавиши [Enter], можно просто перейти к следующему полю.

4.3.7.4 Списочные поля

Списочные поля могут принимать только допустимые значения.

Щелкните по кнопке  и выберите требуемое значение из списка.

4.3.7.5 Переключатели

Переключатели позволяют выбрать только один из приведенных вариантов. Выбранный вариант отмечается точкой

4.3.7.6 ok

Кнопка **<OK>** принимает все сделанные в диалоговом окне изменения и закрывает окно. То же самое происходит при нажатии клавиши [Enter]

4.3.7.7 Отмена cancel

Кнопка **<Cancel>** (**<Отмена>** в русскоязычной версии *Windows*) отменяет все сделанные изменения и закрывает окно. То же самое происходит при щелчке мышкой по кнопке  в его правом верхнем углу или нажатии клавиши [Esc].

4.3.7.8 Справка

Кнопка **<Help>** (**<Справка>** в русскоязычной версии *Windows*) вызывает контекстно-чувствительную подсказку. Можно также нажать [F1]. Комбинация [Shift]+[F1] вызывает оглавление справочной системы.

4.3.7.9 Применить apply

Кнопка **<Apply>** (**<Применить>** в русскоязычной версии *Windows*) принимает все изменения без выхода из диалогового окна.

4.3.7.10 Заголовок диалогового окна

Заголовок диалогового окна

4.3.8 Типы файлов

Программное обеспечение **МультиХром версия 1.5x** работает со следующими типами файлов:

- *.bar пакетные файлы (двоичный формат)
Содержат информацию о пакете хроматограмм и методе его пересчета. Файлы записываются в тот же каталог, где хранятся обрабатываемые хроматограммы (по умолчанию - в каталоге **Data**).
- *.cal временные файлы градуировки (двоичный формат)
Служат для переноса градуировочных данных между методами и (или) хроматограммами с помощью опций **Метод / Градуировка / Импортировать градуировку** и **Метод / Градуировка / Экспортировать градуировку**.
Записывается в папку **Methods**.
- *.chw Файл хроматограммы (двоичный формат)
Содержит хроматографические данные, а также конфигурацию системы сбора данных и метод обработки данных (метод).
По умолчанию записывается в папку **Data**, хотя может использоваться любая директория. Каталог хроматограмм можно установить в диалоговом окне **Метод / Установки метода / Обработка**
- *.mtw Файл **метода** (двоичный формат)
Содержит метод сбора и обработки данных.
Хранится по умолчанию в каталоге **Methods**.
- *.que Файл очереди file (двоичный формат)
Содержит конфигурацию **очереди**.
По умолчанию хранится в каталоге **Methods**.
- *.rtt **Шаблон отчета** (ASCII файл).
Хранится в папке программ (**mlcw15** по умолчанию).
- *.dew Файлы интерфейса (ASCII file)
Содержат драйверы **АЦП**.
По умолчанию хранятся в программ (**mlcw15**).
- *.wmf Рисунок хроматограммы в формате *.wmf (Windows метафайл). Записывается параллельно файлу отчета, если одновременно выбран раздел отчета **График**.
Используется для экспорт рисунка хроматограммы в другие приложения.

При записи отчета в файл может использоваться любое расширение.

4.3.9 Клавиатура и мышь

С помощью мыши можно легко увеличить любой участок хроматограммы. Для этого нужно поместить курсор мыши в верхний левый угол выделяемой области, нажать левую кнопку и, удерживая её, переместить курсор мыши в правый нижний угол выделяемой области. После отпускания кнопки выбранная кнопка будет увеличена до полного окна.

В случае активного **курсора** (режим редактора пиков) правая кнопка мыши передвигает его с места на место. Для перехода в режим редактора пиков дважды быстро щелкните правой кнопкой мыши.

Клавиатура позволяет изменять масштаб хроматограммы, как описано ниже.

См. также: [Ручная разметка](#)

Комбинация	Выполняемое действие
Курсор неактивен	
[Вверх]	увеличение чувствительности по оси Y;
[Вниз]	уменьшение чувствительности по оси Y;
[Вправо]	растянуть хроматограмму по оси X;
[Влево]	сжать хроматограмму по оси X;
[Ctrl]+[Home]	автомасштабирование по оси X (показать все по X);
[Ctrl]+[End]	автомасштабирование по оси Y (показать все по Y);
[Alt]+[V]	автомасштабирование по осям X и Y (аналогично кнопке Показать все)
[Shift]+[Вверх]	сдвиг хроматограммы на 1/10 часть экрана вверх;
[Shift]+[Вниз]	сдвиг хроматограммы на 1/10 часть экрана вниз;
[PageUp]	увеличить расстояние между каналами хроматограммы
[PageDown]	уменьшить расстояние между каналами хроматограммы
[Z]	установка нуля по последней точке хроматограммы

В случае, когда видна только часть хроматограммы:

[Ctrl]+[Вправо]	переместиться вправо на одно окно (без изменения масштаба по X и Y);
[Ctrl]+[Влево]	переместиться влево на одно окно (без изменения масштаба по X и Y);
[Home]	показать начало хроматограммы (без изменения масштаба по X и Y);
[End]	показать конец хроматограммы (без изменения масштаба по X и Y);
[Z]	установка нуля по низшей точке участка хроматограммы

Курсор активен

[Z]	установка нуля в местоположении курсора
[Вправо]	переместить курсор вправо;
[Shift]+[Вправо]	быстро переместить курсор вправо;
[Влево]	переместить курсор влево;
[Shift]+[Влево]	быстро переместить курсор влево;
[Home]	переместить курсор в начало окна;
[End]	переместить курсор в конец окна;
[Shift]+[End]	установить начало окна в местоположении курсора
[Shift]+[Home]	установить конец окна в местоположении курсора

5 Главное меню

Меню [главного окна программы](#)

[Меню Файл](#)

[Меню Редактирование](#)

[Меню Таблица](#)

замещает меню [Редактирование](#), если активна [таблица КОМПОНЕНТОВ](#)

Меню Пик замещает меню **Редактирование**, если активен редактор ПИКОВ

Меню Вид

Меню Измерение

Меню Обработка

Меню Метод

Меню Настройка

Меню Окно

Меню Подсказка (?)

5.1 Меню файл

Открыть

Сохранить

Импортировать

Экспортировать

Закрыть

Удалить

Новый метод

Печать

Просмотр

Настройки принтера

Страница

Выход

5.1.1 Меню Файл: Открыть

Хроматограмму Выбор и открытие выбранных файлов хроматограмм (*.chw).

Метод Выбор и открытие файла метода (*.mtw).

Пакетный пересчет Выбор и открытие пактного файла (*.bar).

Последний пакет Открытие пакета хроматограмм, который редактировался последний раз (*.bar).

Очередь Выбор и открытие существующего файла очереди или создание нового (*.que).

5.1.2 Меню файл: сохранить

[Хроматограмму](#)

сохранение текущей хроматограммы

[Метод](#)

сохранение метода

5.1.3 Новый метод

Чтение метода с диска (с целью его модификации и записи под новым именем).

См. также: [функции контекстного меню](#)

5.1.4 Удалить

Данная опция закрывает текущее окно и удаляет текущую хроматограмму с диска. Предварительно запрашивается подтверждение у пользователя.

5.1.5 Печать хроматограммы_2

Производит печать рисунка хроматограммы на устройство вывода (принтер или в файл).

Перед печатью вызывается стандартное окно Windows **Печать (Print)**, позволяющее: выбрать принтер (любой из числа установленных в системе), задать требуемое число копий, настроить специфические параметры принтера. записать двоичную копию отчета (в виде команд выбранного принтера) в файл.

5.1.6 Выйти

Выбрав эту опцию меню, Вы завершаете работу с программой **МультиХром**. Если Вы забыли записать одну или несколько хроматограмм, программа напомнит об этом.

5.1.7 Закрывать

Данная команда закрывает **текущее окно хроматограммы**. Если хроматограмма не была записана на диск или изменился метод обработки, система предложит записать хроматограмму.

Можно воспользоваться также комбинацией клавиш **[Alt] + [F3]**.

Для закрытия всех активных окон можно воспользоваться опцией **Окно / Все закрыть**.

5.2 Меню Буфер

Копирует содержимое активного окна в буфер обмена.

Эта опция позволяет скопировать рисунок хроматограммы или выделенную часть отчета в буфер обмена Windows для последующего использования в таких программах как WinWord, Excel, Lotus 1-2-3 и т.д.

5.3 Меню таблица

Меню таблица замещает **меню Буфер** в случае, если открыта **Таблица компонентов**

5.4 Меню Пик

Данное меню содержит все функции **редактора пиков** и появляется в главном меню только когда **редактор пиков** активизирован.

Тем не менее, в работе более удобно использовать **пиктографическое меню** редактора пиков, а также "быстрые клавиши":

Пункт меню	Иконка	"Быстрая клавиша"	Выполняемое действие
Отмена		нет	отмена последней операции
Вставить пик		[Ins]	вставка пика на месте курсора
Удалить пик		Del]	удаление выбранного пика
Выбрать ближайшую точку	нет	[Ctrl]+[Enter]	выбирает ближайшую к курсору точку (начало, вершину, конец или долину) и выбирает пик
Выбрать начало пика		нет	выбирает ближайшую к курсору точку начала пика и выбирает пик.
Выбрать вершину пика		нет	выбирает ближайшую к курсору вершину пика и выбирает пик.
Выбрать конец пика		нет	выбирает ближайший к курсору конец пика и выбирает пик
Выбрать долину		нет	выбирает ближайшую к курсору долину между пиками
Снять выделение пика		[Esc]	снимает выделение пика
Перенести выбранную точку		[-]	передвигает выбранную точку пика в позицию курсора.
Объединить пики		[+]	Объединяет два соседних пика в один пик.
Сделать соседями		[*]	Объединяет начало предыдущего и конец следующего пика в точке нахождения курсора.
Расщепить пик		[/]	Расщепляет пик на два в позиции курсора.
Уничтожить все пики слева.		нет	Уничтожает все пики слева от позиции курсора.
Уничтожить все пики справа		нет	Уничтожает все пики справа от позиции курсора.
		нет	Копирует хроматограмму в текущем окне в буфер обмена

Скопировать в буфер

5.5 Меню Вид

[Вид](#)

[Все по горизонтали](#)

[Все по вертикали](#)

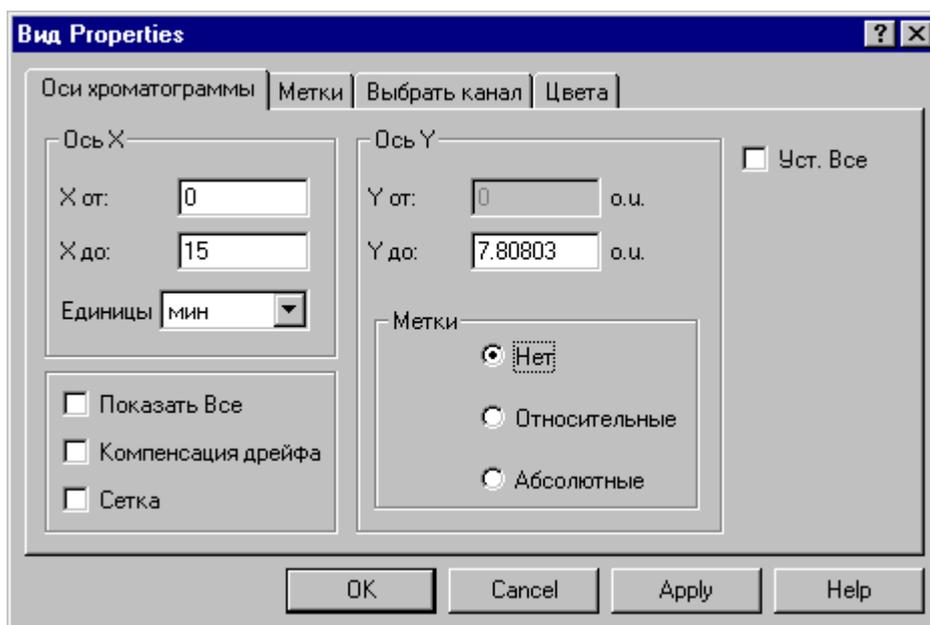
[Всё](#)

[Автомасштабирование](#) — включить или выключить "режим самописца",

[Компенсация дрейфа](#) — позволяет компенсировать монотонный дрейф базовой линии хроматограммы

[Очередь](#) — данная опция становится доступна только если идет **очередь хроматограмм**

5.5.1 Вид



Эта опция из [меню Вид](#) открывает окно, состоящее из следующих диалоговых листов:

[Оси хр-мы](#)

[Метка пика.](#)

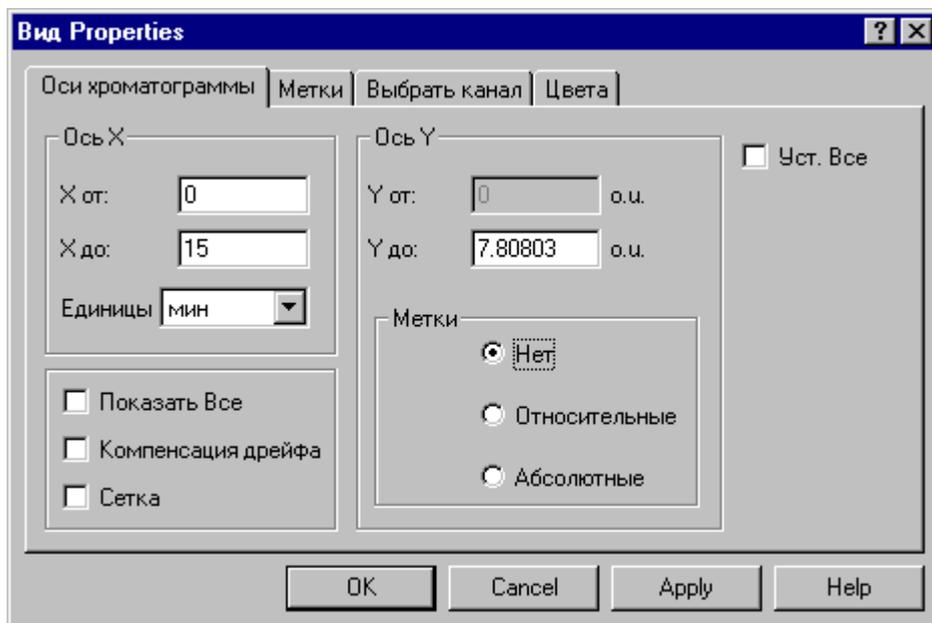
[Выбор канала](#)

[Цвета](#)

Уст. все — данный флажок позволяет применить сделанные для текущей хроматограммы установки ко всем открытым окнам хроматограмм. Данная опция полезна для быстрого приведения всех открытых хроматограмм к одному масштабу.

Для быстрого доступа к данному диалоговому окну служит пиктограмма .

5.5.1.1 Оси хроматограммы



Ось X

Единицы

выбор единиц удерживания по оси абсцисс

X от

начало окна по оси X

X до

конец окна по оси X

Ось Y

Y от

начало окна по оси Y. Параметр доступен, если используются абсолютные метки

Y до

конец окна по оси Y

Метки

Нет

метки вдоль оси Y отсутствуют. В верхней части шкалы ставится одна метка для информации о выбранном масштабе. Данный режим используется по умолчанию

Относительные

метки вдоль оси Y являются относительными, т.е. положение хроматограммы сдвинуто по оси Y таким образом, чтобы компенсировать постоянную составляющую сигнала детектора.

Абсолютные

метки вдоль оси Y являются абсолютными, т.е. на хроматограмме отображается абсолютная величина сигнала детектора, с учетом ее постоянной составляющей.

Показать все

масштаб по X и Y устанавливается таким образом, чтобы показать хроматограмму целиком.

Компенсация дрейфа

компенсирует дрейф базовой линии хроматограммы таким образом, чтобы ее первая и последняя точки оказались на одной горизонтальной линии. Данная функция неактивна, пока идет хроматограмма.

Сетка

проводит сетку из горизонтальных и вертикальных линий в окне

- Уст. Все** хроматограммы.
данный флажок позволяет установить выбранный масштаб во всех открытых окнах хроматограмм.

5.5.1.1.1 Ось X

Ось X

- Единицы** выбор единиц удерживания по оси абсцисс
X от начало окна по оси X
X до конец окна по оси X

5.5.1.1.2 Ось Y

Ось Y

- Y от метки** начало окна по оси Y. Параметр доступен, если используются **абсолютные**
Y до конец окна по оси Y

5.5.1.1.3 Оси: флажки

Вид: флажки

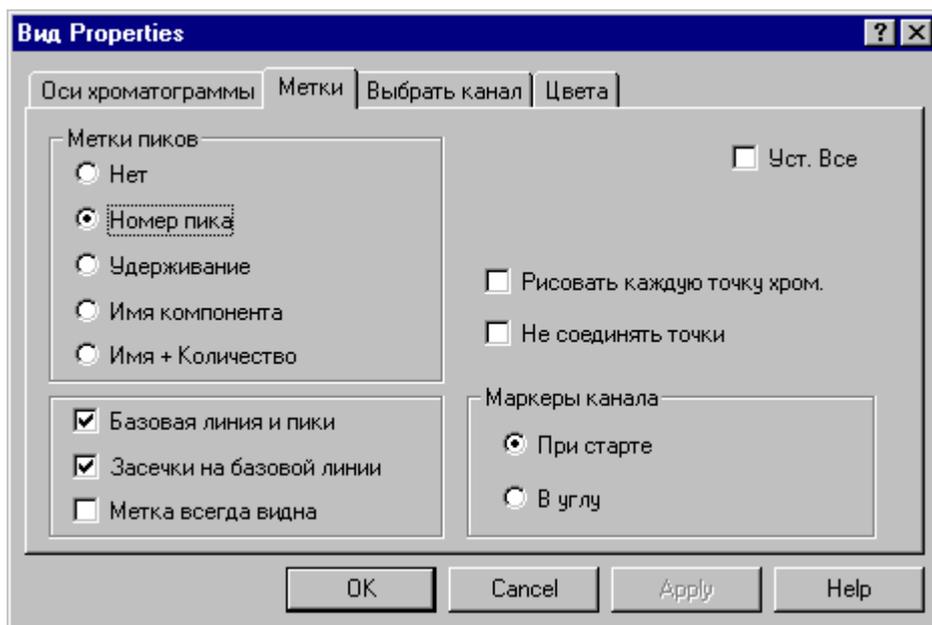
- Показать все** масштаб по X и Y устанавливается таким образом, чтобы показать хроматограмму целиком.
 Компенсация дрейфа компенсирует дрейф базовой линии хроматограммы таким образом, чтобы ее первая и последняя точки оказались на одной горизонтальной линии. Данная функция неактивна, пока идет хроматограмма.
 Сетка проводит сетку из горизонтальных и вертикальных линий в окне хроматограммы.

5.5.1.1.4 Оси: метки

Оси: метки

- Нет** метки вдоль оси Y отсутствуют. В верхней части шкалы ставится одна метка для информации о выбранном масштабе. Данный режим используется по умолчанию. Начало оси Y является **относительным** и определяется автоматически.
 Относительные метки вдоль оси Y являются относительными, т.е. положение хроматограммы сдвинуто по оси Y таким образом, чтобы компенсировать постоянную составляющую сигнала детектора.
 Абсолютные метки вдоль оси Y являются абсолютными, т.е. на хроматограмме отображается абсолютная величина сигнала детектора, с учетом ее постоянной составляющей.

5.5.1.2 Метки



Данный лист дает возможность выбрать тип метки, появляющейся над вершинами пиков на рисунке хроматограммы.

Метки пиков:

- Нет** метка и базовая линия не показываются
- Номер пика** номер пика (значение по умолчанию)
- Удерживание** время удерживания пика. Можно менять **единицы удерживания** из листа **Вид / Оси...**
- Имя компонента** имя компонента из таблицы компонентов (появляется только если данный пик был идентифицирован).
- Имя+количество** имя и концентрация компонента

 Рисовать каждую точку хроматограммы

выключается функция аппроксимации хроматограммы в промежутках между точками

 Не соединять точки

показать отдельные точки хроматограммы (измерения АЦП), не соединяя их линиями.

Маркеры канала:

- При старте** маркеры каналов АЦП (их название) рисуются на хроматограмме в самом ее начале, под базовой линией.
- В углу** маркеры каналов АЦП перечисляются в правом верхнем углу

Другие опции: **Базовая линия и пики**

показывается базовая линия под пиками

 Засечки на базовой линии

ставятся засечки начала и конца каждого пика. Опция доступна, если установлен флажок **Базовая линия и**

пики.

Метка всегда видна

если данная опция активна, метка пика будет всегда видна внутри окна хроматограммы, даже для пиков, не помещающихся в окне.

По умолчанию опция выключена и метка ставится всегда **над вершиной пика**.

5.5.1.2.1 Вид: метки пиков

Вид: метки пиков

Нет

метка и базовая линия не показываются

Номер пика

номер пика (значение по умолчанию)

Удерживание

время удерживания пика. Можно менять **единицы удерживания** из листа **Вид / Оси...**

Имя компонента

имя компонента из таблицы компонентов (появляется только если данный пик был идентифицирован).

Имя+количество

имя и концентрация компонента

5.5.1.2.2 Метки пика: флажки

Метки пика: флажки

Базовая линия и пики

показывается базовая линия под пиками

Засечки на базовой линии

ставятся засечки начала и конца каждого пика. Опция доступна, если установлен флажок **Базовая линия и пики**.

Метка всегда видна

если данная опция активна, метка пика будет всегда видна внутри окна хроматограммы, даже для пиков, не помещающихся в окне. По умолчанию опция выключена и метка ставится всегда **над вершиной пика**.

5.5.1.2.3 Рисовать каждую точку

Рисовать каждую точку

Рисовать каждую точку хроматограммы

выключается функция аппроксимации хроматограммы в промежутках между точками

5.5.1.2.4 Не соединять точки

Не соединять точки

Не соединять точки

показать отдельные точки хроматограммы (измерения АЦП), не соединяя их линиями.

5.5.1.2.5 Маркеры канала

Маркеры канала

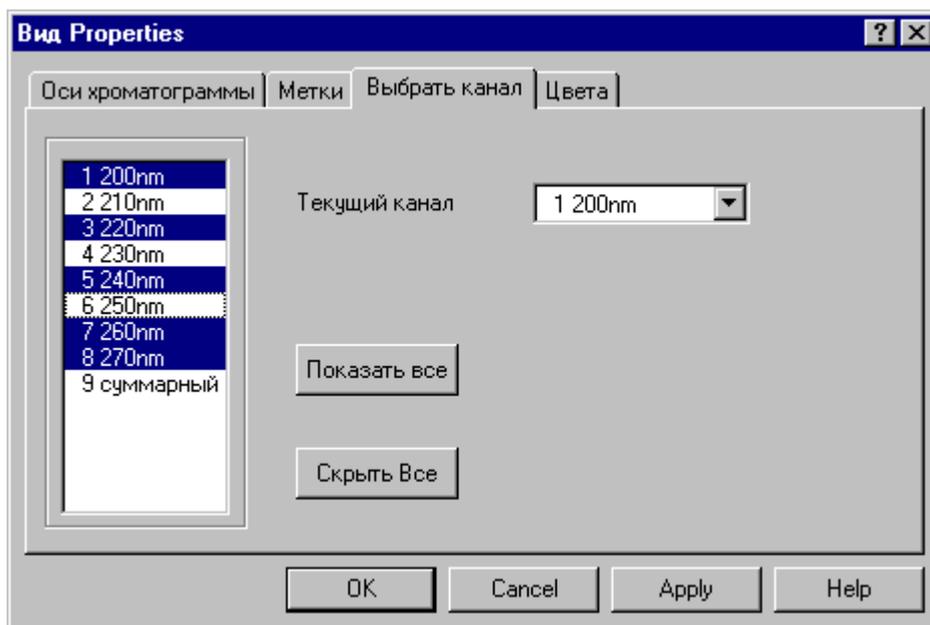
При старте

маркеры каналов АЦП (их название) рисуются на хроматограмме в самом ее начале, под базовой линией.

В углу

маркеры каналов АЦП перечисляются в правом верхнем углу

5.5.1.3 Выбрать канал



Выбор видимых на экране каналов в многоканальной хроматограмме.

Текущий канал

выбор текущего канала. Текущий канал используется для показа меток пиков.

Кнопки:

<Показать все>

выбрать все каналы хроматограммы.

<Скрыть все>

отмена выбора всех каналов.

Выбранные каналы выделяются цветом в списке.

См. также: [Сводный канал \(канал Total\)](#).

5.5.1.3.1 Список каналов

Список каналов

Данное поле содержит список каналов. Выбранные каналы выделяются цветом и будут отображены на хроматограмме.

5.5.1.3.2 Текущий канал

Текущий канал

Выбор текущего канала из списка. Текущий канал используется для показа меток пиков.

5.5.1.3.3 Показать все

Показать все

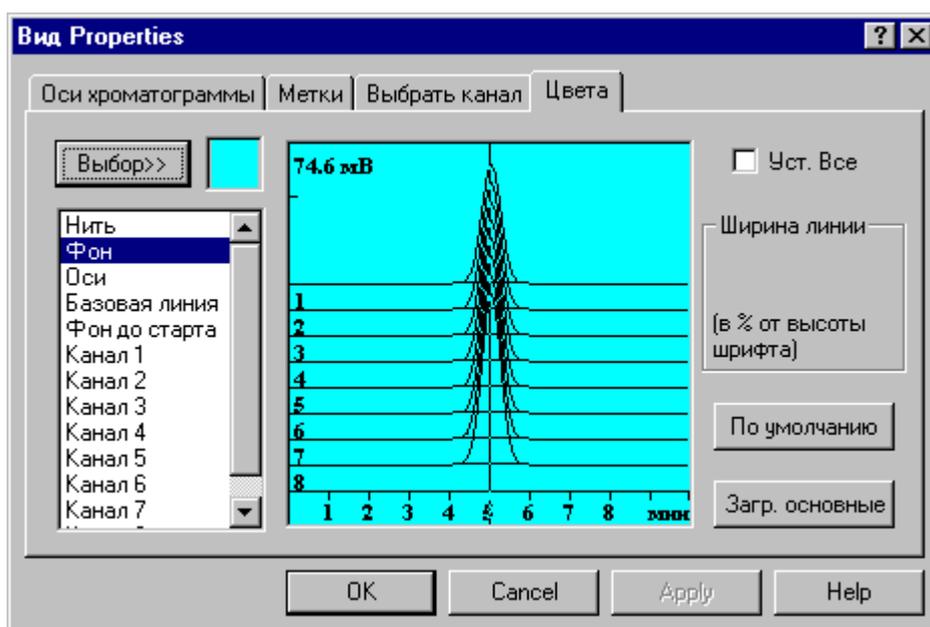
Показать все каналы хроматограммы.

5.5.1.3.4 Скрыть все

Скрыть все

Очистить список выбранных каналов .

5.5.1.4 Вид: цвета



Данная страница позволяет настроить цвета фона, курсора, осей, а также цвет хроматографической кривой для каждого канала хроматограммы. Внешний вид хроматограммы показывается в центральной части окна.

Цветовая схема сохраняется в **методе**!

<Выбор>

данная кнопка позволяет выбрать цвет для **текущего элемента** окна хроматограммы.

Список элементов окна хроматограммы приведен в левой части диалогового окна.

Ширина линии

данный параметр определяет ширину линии для осей и каналов хроматограммы. Ширина измеряется в % от высоты используемого для графиков **шрифта**.

Ширина линии элементов влияет на их представление как на экране, так и при выводе на принтер.

- <По умолчанию>** данная кнопка записывает текущую схему цветов как схему по умолчанию.
- <Загр.основные>** загружает схему по умолчанию

5.5.1.4.1 Выбор

Выбор

Данная кнопка позволяет выбрать цвет для **текущего элемента** окна хроматограммы.

5.5.1.4.2 Цвет элемента

Цвет элемента

Данное поле показывает цвет текущего **элемента окна**

5.5.1.4.3 Элементы окна

Элементы окна

Данное поле содержит список следующих элементов, которые допускают настройку цвета.

- Нить** курсор
- Фон** фон окна хроматограммы после запуска анализа
- Базовая линия** базовая линия (отрезок между началом и концом пика)
- Фон до старта** фон окна хроматограммы до запуска анализа, во время **контроля базовой линии**
- Канал 1 - Канал N** **каналы** хроматограммы.

5.5.1.4.3.1 Контроль базовой линии

Если установлен дистанционный способ запуска, в окне хроматограммы после инициации будет идти базовая линия. При этом можно использовать клавиши управления курсором (стрелки) для изменения масштаба. Контроль базовой линии позволяет убедиться, что базовая линия стабилизировалась перед вводом пробы.

После старта хроматограммы (нажатия кнопки дистанционного запуска) эти данные будут потеряны.

5.5.1.4.4 Образец

Образец

Данная часть окна позволяет оценить получившуюся цветовую схему.

5.5.1.4.5 Ширина линии

Ширина линии

Данный параметр определяет ширину линии для **осей** и **каналов** хроматограммы.

Ширина измеряется в % от высоты используемого для графиков **шрифта**.

Ширина линии элементов влияет на их представление как на экране, так и при выводе на принтер.

5.5.1.4.6 По умолчанию-цвета

По умолчанию

Данная кнопка записывает текущую схему цветов как схему по умолчанию.

Схема по умолчанию используется при загрузке или запуске хроматограммы, если в методе отсутствуют установки цветов.

5.5.1.4.6.1 Загрузить основные

Загрузить основные

Данная кнопка загружает для текущей хроматограммы схему цветов по умолчанию.

Позволяет определить цвета фона, курсора, осей, а также цвет хроматографической кривой для каждого канала хроматограммы.

5.5.1.5 Показать все

Показать все

Уст. Все

данный флажок позволяет установить выбранные параметры во всех открытых окнах хроматограмм.

Принимаются во внимание только параметры данной диалоговой страницы! Другие страницы могут иметь свои флажки.

5.5.2 Все по горизонтали

Показывает всю хроматограмму по оси X. Данная команда аналогична комбинации **[Ctrl-Home]** с клавиатуры.

5.5.3 Все по вертикали

Показывает всю хроматограмму по оси Y. Данная команда аналогична комбинации **[Ctrl-End]** .

5.5.4 Всё

Показывает всю хроматограмму как по горизонтали, так и по вертикали. Данная команда аналогична клавиатурной комбинации **Alt-V** [Alt-V].

Имеется также специальная пиктограмма на панели инструментов.

5.5.5 Автомасштабирование

Если линия хроматограммы выходит за пределы окна

- 1) *вправо*, то окно сдвигается на пол-экрана вправо;
- 2) *вниз*, то проводится процедура установки нуля;
- 3) *вверх*, то масштаб по вертикали увеличивается вдвое.

Выключив эту опцию, можно изменить масштаб любой части идущей хроматограммы.

5.5.6 Компенсация дрейфа

Функция **Компенсация дрейфа** позволяет компенсировать монотонный дрейф базовой линии хроматограммы

5.6 Меню Измерение

Открыть метод и запустить

загружает новый метод для запуска. После считывания метода появляется диалоговое окно **Сбор данных**.

Приостановить хроматограмму

позволяет временно остановить хроматограмму в аварийной ситуации, с возможностью ее продолжения. При этом не выполняются действия по **обработке**, предусмотренные в методе по окончании хроматограммы. Если идет **очередь**, она тоже приостанавливается.

Продолжить хроматограмму

возобновляет сбор данных после **остановки хроматограммы**. Как правило, хроматограмма в точке остановки "портится". Если ход очереди был приостановлен, она также продолжается.

Перезапустить метод

перезапускает текущий метод. При этом данные прошлой хроматограммы стираются из памяти.

Внешний старт

эмуляция нажатия кнопки внешнего запуска хроматограммы

Продлить! (+2мин)

быстро увеличивает продолжительность хроматограммы на 2 минуты

Завершить хроматограмму

заканчивает сбор данных и проводит действия по обработке хроматограммы

Приостановить очередь

останавливает выполнение **очереди** после окончания текущей хроматограммы

Продолжить очередь

продолжает выполнение очереди с прерванного места

5.7 Меню Обработка

Выдать отчет	вызывает диалоговое окно Опции отчета
Переразметка	вызывает диалоговое окно Параметры разметки
Ручная разметка	активизирует редактор пиков
Градуировать	вносит информацию из текущей хроматограммы на указанный градуировочный уровень
Еще:	
Сжатие	вызывает диалоговое окно Сжатие хроматограммы
Перевернуть	инвертирует сигнал хроматограммы
Вычесть	вычитает из текущей хроматограммы одну из открытых хроматограмм
Урезать хроматограмму	позволяет отрезать начальный или/и конечный участок хроматограммы.
Факторный анализ	вызывает программный модуль для проведения факторного анализа многоканальной хроматограммы .

5.7.1 Градуировать

Данная операция обновляет любую **существующую градуировочную точку** данными, взятыми из текущей хроматограммы, не входя в режим редактирования таблицы концентраций (*меню Метод /Градуировка /Концентрации*) и пересчитывает [градуировочные коэффициенты](#).

Не забудьте записать хроматограмму или метод после проведения данной операции!

[Таблица концентраций](#) должна быть заполнена до выполнения команды [Градуировать!!!](#)

См. также: [уровни градуировки](#)

5.7.2 Вычесть

Данная функция **вычитает из текущей хроматограммы одну из открытых хроматограмм**. Используется обычно для вычитания фона ("холостой" хроматограммы). При этом допускается использование хроматограмм разной длины.

При вызове функции появляется окно со списком открытых хроматограмм. Результат вычитания остается в текущем окне и рассматривается системой как новая хроматограмма (во избежание изменения исходных данных).

5.7.3 Урезать хроматограмму

Данная опция позволяет отрезать начальный или/и конечный участок хроматограммы.

от... до...

выбор нужной части данных

Запомнить время старта если данный флажок установлен (установка по умолчанию), при урезании хроматограммы шкала времени остается неизменной. Если флажок снят, отсчет времени начинается с точки начала вырезанного участка хроматограммы; при этом возможны следующие варианты:

Сдвинуть времена компонентов времена удерживания всех компонентов сдвигаются на величину отрезанного начального участка. Если величина отрезанного участка превышает время удерживания, оно устанавливается равным нулю.

Сдвинуть времена событий времена **событий интегрирования** сдвигаются на величину отрезанного начального участка.

5.7.4 Перевернуть

Позволяет инвертировать сигнал хроматограммы.

Большинство современных **АЦП**, таких как **L241** или **ЛА-И24**, имеют гальванически развязанные сигнальные входы и позволяют подавать на них как положительные, так и отрицательные сигналы. Данная опция позволяет нормально работать в случае, если сигнал хроматографа отрицательный, например перепутаны проводники в кабеле, детектор дает двуполярный сигнал (рефрактометр, поляриметр, детектор по теплопроводности) и т.д.

При перезапуске хроматограммы сделанная установка по инвертированию сигнала сохраняется.

5.7.5 Сжатие данных

Эта функция дает возможность сжимать данные хроматограммы в случае избыточной частоты приема данных целью экономии места в памяти и на диске.

Производится суммирование нескольких соседних точек и вычисление среднего. Коэффициент сжатия задается пользователем. При этом программа предлагает оптимальное значение.

Оптимальный коэффициент сжатия вычисляется так, чтобы ширина на полувысоте самого узкого пика описывалась **хотя бы 30 точками**. При выборе более высокой степени сжатия точность интегрирования может уменьшаться.

При сжатии данных будет изменено также значение параметра "**Замедление**" из диалогового окна **Сбор данных** в **меню Метод**.

5.8 Меню Метод

Позволяет редактировать **метод** сбора и обработки данных.

Паспорт редактирование описания хроматограммы.

Настройка метода редактирование наиболее общих установок метода.

Разметка задание параметров разметки хроматограммы.

Градуировка...	вызов подменю операций, связанных с процедурой градуировки.
Компоненты	редактирование « <i>Таблицы компонентов</i> »
Идентификация	установка общих параметров идентификации компонентов
Концентрации	редактирование « <i>Таблицы концентраций</i> »
Графики	просмотр и редактирование градуировочных зависимостей
Пересчитать	обновить времена удерживания, индексы или градуировочные коэффициенты для всех компонентов, в соответствии с текущей хроматограммой.
Прочитать из метода	записывает результаты градуировки из текущей хроматограммы в текущий метод
Записать в метод	читает результаты градуировки из текущего метода в текущую хроматограмму.
Экспортировать градуировку	экспорт результатов градуировки в файл.
Импортировать градуировку	импорт результатов градуировки из файла.
Настройка отчета	конфигурирование и вывод отчета.
Настройка сбора данных	позволяет изменять число каналов и редактировать параметры каналов.

5.9 Меню настройка

[Интерфейсы](#)

[Шрифты](#)

[Защита](#)

[Блокировать систему](#)

[Глобальные настройки](#)

5.9.1 Шрифты

Система использует четыре разновидности шрифтов. От их выбора зависит правильное представление информации на экране и принтере. Вы можете менять эти шрифты по своему вкусу, исходя из установленного набора Вашей системы Windows. Все шрифты должны быть русифицированные.

Из всего набора установленных шрифтов используются только моноширинные, т.е. имеющие одинаковую ширину символов, шрифты.

Шрифт для диалогов

Этим шрифтом отображается информация во всех диалоговых окнах программы. Рекомендуется использовать экранный шрифт жирного начертания MS Dialog размера 8 пунктов (советуем без нужды не менять этот шрифт).

Шрифт для отчетов

шрифт, которым будет выводиться отчет на экран или принтер, обычно выбирается нормальный шрифт размером 10 пунктов.

Шрифт для таблиц

шрифт, которым будут напечатаны данные во всех таблицах в программе (не относится к представлению таблиц в отчете)

Шрифт для рисунков

выбор шрифта для надписей на рисунках (хроматограмма, градуировочная кривая и др.)

Если русификация Windows проведена некорректно, часть сообщений системы (например, об ошибках общего характера) может выдаваться в "нечитабельном" виде. Во избежание проблем со шрифтами рекомендуется установить русскую или пан-европейскую версию Windows-95!

5.10 Меню Окно

Каскад

размещает все открытые окна в виде каскада.

Вертикальная мозаика

размещает все открытые окна в виде мозаики

Горизонтальная мозаика

размещает все открытые окна в виде мозаики

Упорядочить пиктограммы

упорядочивает значки активных хроматограмм

Закреть все

закреть все активные окна хроматограмм

В нижней части меню расположен список открытых **хроматограмм**. Выбрав нужную, можно сделать это окно текущим. Свернутое окно хроматограммы при этом будет развернуто.

Для манипуляции с окнами удобно использовать соответствующие пиктограммы на панели инструментов.

5.10.1 Tile

Позволяет расположить все открытые хроматограммы на экране в виде мозаики. Вид мозаики при этом зависит от количества открытых хроматограмм и выбранного горизонтального (**горизонтальная мозаика**) или вертикального (**вертикальная мозаика**) расположения окон.

Данная функция не затрагивает **свернутые окна хроматограмм**.

5.10.2 Cascade

Данная опция размещает все открытые окна в виде каскада.

Данная функция не затрагивает **свернутые окна хроматограмм**.

5.10.3 Arrange icons

Упорядочивает значки свернутых хроматограмм.

5.10.4 Закреть всё

Закрывает все активные окна хроматограмм. Если какие-либо хроматограммы не были записаны на диск, система делает запрос на сохранение.

5.11 Справочная система

Оглавление

оглавление справочной системы по программе **МультиХром**

Использование Справки

основные правила пользования справочной системой Microsoft Windows

Про программу

информационное окно об авторских правах и версии программы **МультиХром** и номере установленного в принтерный порт защитного ключа. Если ключ установлен и исправен, будет выведен серийный номер ключа типа: **WXXXXX**.

6 ХроматограммаХроматограмма

[Определение хроматограммы](#)

[Вид хроматограммы](#)

[Редактор пиков](#)

[Пересчет пакетов хроматограмм](#)

[Как напечатать отчет](#)

[Работа с файлами хроматограмм](#)

6.1 Хроматограмма-определение

Хроматограмма

Хроматограмма - это данные, представляющие зависимость сигнала детектора от времени. Графическое изображение хроматограммы выводится в [окне хроматограммы](#).

Все данные, полученные во время одного хроматографического измерения, вместе с сопутствующей информацией по их получению и обработке (т.е. методом сбора и обработки данных, или просто [методом](#)), хранятся в едином файле **хроматограммы**. Имя файла хроматограммы создается автоматически на основе даты и времени начала сбора хроматографических данных и имеет [расширение](#) ***.CHW**. Работа с файлами хроматограмм осуществляется через меню [Файл](#).

По умолчанию хроматограммы хранятся в директории **.\DATA**. Название каталога изменяется в диалоговом окне [Настройка метода / Обработка](#).

Типы хроматограмм:

[обычные хроматограммы](#)

[градуировочные хроматограммы](#)

[многоканальные хроматограммы](#)

6.2 Меню Вид

[Вид](#)

[Все по горизонтали](#)

[Все по вертикали](#)

[Всё](#)

[Автомасштабирование](#)

включить или выключить "режим самописца",

[Компенсация дрейфа](#)

позволяет компенсировать монотонный дрейф базовой линии хроматограммы

[Очередь](#)

данная опция становится доступна только если идет [очередь хроматограмм](#)

6.3 Редактор пиков

Для ручной коррекции результатов разметки на пики используется [Редактор пиков](#).

Режим *Редактора пиков* включается:

клавиатурной комбинацией [\[Alt\]+\[C\]](#),

двойным щелчком правой кнопкой мыши,

щелчком по кнопке "Ручная разметка"  в пиктографическом меню.

Если режим редактора пиков включен, в поле окна появляется вертикальная черта [курсора](#) и ряд кнопок опций редактора.

Вы не можете редактировать разметку на пики, пока активна [таблица компонентов](#). И наоборот, при включенном режиме редактора пиков [таблица компонентов](#) недоступна.

Кнопки и клавиши редактора пиков

Эти кнопки появляются в правой части хроматографического окна, когда активизирован курсор редактора.

См. также: [клавиатура и мышь](#)

Кнопка

Клавиатура

Выполняемое действие

(Мышь)

[\[Ctrl\]+\[Enter\]](#)

выбрать ближайшую точку пика;

[\[<-\]+\[Ctrl\]+\[Enter\]](#)

выбрать левую точку пика (слившиеся пики);

[\[->\]+\[Ctrl\]+\[Enter\]](#)

выбрать правую точку пика (слившиеся пики);



отмена последней операции.

При выходе из редактора пиков возможна отмена [всех](#) сделанных изменений.



выбрать начало пика, ближайшее к положению курсора



выбрать вершину, ближайшую к положению курсора



выбрать конец пика, ближайший к положению курсора



выбрать долину между соседними пиками, ближайшую к положению курсора



убрать выделение



[-]

установить новое положение выбранной точки пика;



[*]

слить соседние пики (объединить конец предыдущего и начало следующего пика);



[+]

стереть границу соседних пиков (объединение пиков);



[/]

расщепить (разделить) пик на два;



[Ins]

создать новый пик с вершиной на месте курсора;



[Del]

стереть выбранный пик;



стереть все пики слева от выбранной точки



стереть все пики справа от выбранной точки
[->], [-<]

ПК

перемещение курсора вправо или влево
[Shift] + [->]

быстрое перемещение курсора вправо
[Shift] + [-<]

быстрое перемещение курсора влево

Меню Пик

6.3.1 Курсор

Курсор

Курсор - это вертикальная линия, пересекающая окно. Помогает изменять разметку на пики вручную, с помощью кнопок [редактора пиков](#).

Курсор может быть активирован клавиатурной комбинацией [Alt]+[C], двойным щелчком правой кнопкой мыши или щелчком по кнопке "Ручная разметка"  в пиктографическом меню.

Движение курсора с помощью мыши

Можно передвигать курсор при нажатой правой кнопки мыши. Отпускание кнопки фиксирует курсор в новой позиции.

Управление курсором с клавиатуры

[Влево]	двигает курсор влево;
[Shift] + [Влево]	двигает курсор влево быстрее;
[Вправо]	двигает курсор вправо;
[Shift] + [Вправо]	двигает курсор вправо быстрее;
Home	передвигает курсор к началу окна;
End	передвигает курсор к концу окна

6.4 Хроматограмма: градуировочная

Градуировочные хроматограммы - это хроматограммы градуировочных смесей известного состава, с известными концентрациями. Параметр [«Градуировочная точка»](#) для таких хроматограмм отличен от нуля. Градуировочные хроматограммы используются для

проведения [градуировки](#) системы.

6.5 Работа с файлами хроматограмм

[Открыть хроматограмму](#)

[Сохранить хроматограмму](#)

[Копировать, удалять, перемещать хроматограммы](#)

[Экспорт хроматограммы](#)

[Импорт хроматограммы](#)

6.5.1 Открыть хроматограмму

По этой команде открывается диалоговое окно, содержащее список файлов текущего каталога. Для текущего файла хроматограммы можно посмотреть **паспортные** данные или внешний **вид хроматограммы**. Используйте клавиши стрелок для перемещения по списку и клавишу [пробел] для выбора требуемых файлов из списка и затем нажмите кнопку **<OK>** или клавишу [Enter] для подтверждения. Более удобно операции выбора выполняются с помощью мыши.

Основные поля паспорта хроматограммы:

Имя	шаблон имени файла типа
Отмечено:	информация о числе выбранных пользователем файлов и их суммарном размере.
Каталог	информация о рабочем каталоге
Каталоги	позволяет изменить рабочий каталог или дисковод
Файл: Имя: Метод:	поле со списком файлов текущего каталога. Содержит также имя метода и заголовок хроматограммы
Описание хроматограммы	описание хроматограммы состоит из двух страниц:
Паспорт	выборочная информация из Паспорта хроматограммы
Вид	внешний вид хромтограммы
Кнопки:	
<OK>	загружает с диска все выбранные хроматограммы, каждую в своем окне
<Отмена>	закрывает окно без каких-либо действий
<В пакет>	формирует из выбранных хроматограмм очередь для дальнейшей пакетной обработки
<Копировать>	копирует выбранные файлы в указанную директорию
<Переместить>	перемещает выбранные файлы в указанную директорию
<Удалить>	удаляет выбранные файлы с диска

6.5.2 Записать хроматограмму

По этой команде программа предложит записать текущую хроматограмму в файл на диске. При этом вместе с данными будет полностью записан метод сбора и обработки данных, включая описание, разметку на пики и градуировку.

Имя хроматограммы формируется автоматически, исходя из даты и времени запуска анализа. Используемая система формирования имени файла обеспечивает нормальную работу системы до 2024 года.

Если хроматограмма уже имеется на диске, появится сообщение:

xxxxxxx.chw уже существует. Переписать?

Если Вы желаете ликвидировать старую копию хроматограммы и оставить только последний вариант, выберите **Да**.

При нажатии **Нет** хроматограмма будет записана в новый файл при сохранении предыдущей копии неизменной. Новый файл при этом появляется в списке перед старым.

Нажатие кнопки **Отмена** прервет операцию записи.

6.5.3 Копировать, удалять, перемещать хроматограммы_2

Файлы хроматограмм, выбранные в диалоговом окне [Открытие хроматограммы](#) могут быть удалены с диска, а также скопированы или перемещены на другое место.

Откройте окно [Открытие хроматограммы](#), щелкнув по иконке  или выбрав опцию **Файл/Открыть/Хроматограмму**.

Выберите требуемые файлы.

Для выделения нескольких файлов подряд нажмите [Shift] и, удерживая ее, выделите требуемые файлы с помощью мыши или клавиш управления курсором.

Для выделения нескольких файлов в произвольном порядке нажмите **клавишу [Ctrl]** и, удерживая ее, выделите файлы с помощью мыши или клавиши [**Пробел**].

Щелкните по кнопке нужной операции (**<Копировать>**, **<Переместить>**, **<Удалить>**)

Операции с хроматограммами можно также проводить, используя функции [КОНТЕКСТНОГО МЕНЮ](#)

6.5.4 Экспорт хроматограммы

Экспортирует "сырые" данные из программы в следующие форматы:

AIA (*.cdf)

формат Analytical Instrument Association.

текстовый

текстовый (ASCII) формат

6.5.5 Экспорт хроматограммы: текстовый формат

Экспорт хроматографических данных в ASCII файл (*.txt)

Представить данные как:

нижеследующие параметры определяют формат выводимых данных

Рабочие единицы (десятичн.)

Данные по оси ординат выражены в принятых физических единицах (как на хроматограмме)

Значения АЦП (целые)

Данные по оси ординат выражены в дискретах АЦП (в битах)

Включить время выхода:

установите этот флаг, если требуется добавить столбец времени для каждой точки, и выберите требуемый формат

чисел.

В секундах (с плав. точкой)
Как номер точки

Помимо собственно данных, текстовый файл также включает **заголовок**, содержащий:

полное число точек хроматограммы (cycles);

временной интервал между точками (cycle time);

величину дискрет АЦП в заданных физических единицах (coef);

заданные физические единицы (units).

6.5.6 Импортировать хроматограмму

Позволяет импортировать хроматограммы, записанные в формате **МультиХром для DOS**, **HyperData**, **ЭнвайроХром**, **AIA**, **LongInteger** (целочисленный четырехбайтовый формат), а также **ТЕКСТОВОМ** виде.

6.6 Хроматограмма: обычная

Обычные хроматограммы используются для расчета неизвестных концентраций анализируемых проб. Для обычных хроматограмм параметр **Градуировочная точка** равен нулю.

6.7 Печать хроматограммы

Производит печать рисунка хроматограммы на устройство вывода (принтер или в файл).

Перед печатью вызывается стандартное окно Windows **Печать (Print)**, позволяющее:

выбрать принтер (любой из числа установленных в системе),

задать требуемое число копий,

настроить специфические параметры принтера.

записать двоичную копию отчета (в виде команд выбранного принтера) в файл.

7 Метод

[Определение метода](#)

[Операции с файлами методов](#)

[Структура метода](#)

[Разметка](#)

[Паспорт](#)

[Описание пробы](#)

[Колонка](#)

[Комментарии](#)

[Журнал метода](#)

[Журнал хроматограммы](#)

[Настройка метода](#)

[Настройка сбора данных](#)

[НМ - Выбор интерфейса](#)

[очистить список](#)

[Добавление канала](#)

[Удаление канала](#)

[Фильтры: установки метода](#)

[Лист Обработка](#)

[Лист "Формулы"](#)

7.1 Метод определение

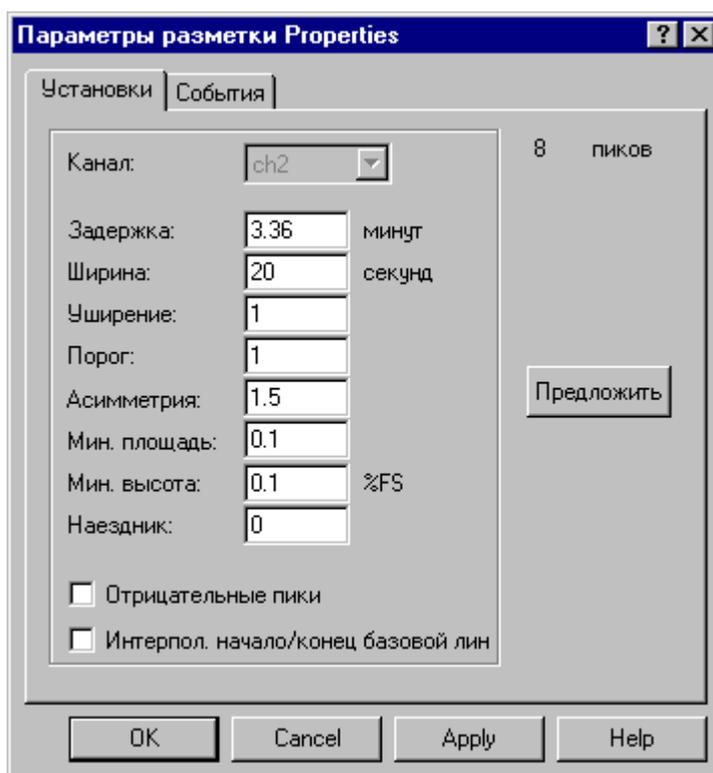
Метод включает всю информацию, необходимую для сбора и обработки данных, выдачи отчета и управления хроматографическим оборудованием. Метод можно рассматривать как бланк хроматограммы, не заполненный данными.

Данные в хроматограмме всегда хранятся вместе с методом, который использовался при их получении и обработке. Поэтому для повторения эксперимента, по аналогии с ранее сделанным, достаточно загрузить и перезапустить требуемую хроматограмму.

Если метод будет использоваться для целой серии однотипных хроматограмм, рекомендуется записать его в отдельный файл для дальнейшего использования. Имя метода определяется пользователем во время записи на диск.

Составные части метода описаны в [меню Метод](#).

7.2 Разметка



Это диалоговое окно содержит два диалоговых листа:

Установки параметры, используемые для **интегрирования**.

События редактирование списка событий интегрирования.

Базовая линия

Шум базовой линии

Пик

7.2.1 Параметры разметки: Установки

Параметры разметки: Установки

Число пиков информация о числе найденных **пиков**

Канал выбор канала для разметки на пики в **многоканальной хроматограмме**. Рекомендуется для этой цели использовать канал **Суммарный**

Задержка время (в минутах), с которого начинается разметка на пики.

Ширина Параметр "**Ширина**" примерно соответствует ширине пика, выраженной в секундах. Данный параметр позволяет отличить пики от шума и дрейфа базовой линии. В качестве начального приближения обычно можно принять ширину самых узких (первых) пиков на хроматограмме.

Уширение во сколько раз ожидаемая ширина пика в конце хроматограммы будет больше, чем в начале (для изотермического или изократического анализа).

Порог порог срабатывания детектора пиков на переднем

	склоне пика
Асимметрия	Отношение порога на переднем и заднем склонах пика (значение по умолчанию 1.3)
МинПлощадь	минимальная значимая площадь пика для интегрирования
МинВысота	минимальная значимая высота пика для интегрирования
Наездник	параметр, показывающий во сколько раз второй пик должен быть меньше первого, чтобы считаться "наездником". Наездник отделяется от основного пика тангенциальным спуском. Значение по умолчанию равно нулю (наездник не определяется).
<input checked="" type="checkbox"/> Отрицательные пики	переключатель детектирования отрицательных пиков. (Выбор этой опции может снизить устойчивость алгоритма интегрирования)
<input checked="" type="checkbox"/> Интерпол.начало/конец базовой линии	включает функцию интерполяции начала и конца базовой линии при проведении разметки для более точного определения точек начала и конца пиков в случае невысокого отношения сигнал/шум. Данная опция рекомендуется взамен функций <u>фильтрации данных</u>
<Предложить>	специальная процедура для подбора параметров интегрирования, обеспечивающих разметку, близкую к имеющемуся образцу.
Число пиков	
Выбор канала	
Задержка	
Ширина	
Уширение	
Порог	
Асимметрия	
Мин.Площадь и Мин.Высота	
Наездник	
Отрицательные пики	
Предложить	
Интерпол.начало/конец базовой линии	

7.2.1.1 Число пиков

Информация о числе найденных на хроматограмме **ПИКОВ**

7.2.1.2 Выбор канала

Выбор **канала** для разметки на пики в **многоканальной хроматограмме**. Рекомендуется для этой цели использовать канал **Суммарный**

7.2.1.3 Задержка

Задержка (в минутах), после которой начинается разметка на пики. Единицы измерения данного параметра не зависят от масштаба по оси X, выбранного в диалоговом окне **Вид**

7.2.1.4 Ширина

Параметр примерно соответствует **ширине пика**, выраженной в **секундах**. Данный параметр позволяет отличить пики от шума и дрейфа базовой линии. В качестве начального приближения обычно можно принять ширину самых узких (первых) пиков на хроматограмме.

7.2.1.5 Уширение

Уширение показывает, во сколько раз ожидаемая ширина пика в конце хроматограммы будет больше, чем в начале (для изотермического или изократического анализа).

7.2.1.6 Порог

Порог срабатывания детектора пиков на переднем склоне пика

В программе **МультиХром** использован алгоритм детектирования пиков на основе первой производной (наклона) хроматографической кривой. Для того, чтобы решить, является ли наклон в некоторой точке значимым, величина **первой производной** делится на значение **шума базовой линии**. Вычисленная величина шума базовой линии (в единицах преобразования АЦП) указывается в разделе отчета **Таблица каналов**.

Наклон принимается значимым в случае, если это отношение превышает величину **Порог**. Величины **порога** для задней и передней части пика могут отличаться (их отношение задается параметром **Асимметрия**). Деление не полностью разделенных пиков производится прямой по вертикали или с использованием тангенциального спуска. Обычно пределы изменения параметра **Порог** лежат в диапазоне 0.5-5 (значение по умолчанию - 3).

7.2.1.7 Асимметрия

Асимметрия - отношение порога на переднем и заднем склонах пика (значение по умолчанию 1.3)

7.2.1.8 Мин.Площадь и Мин.Высота

Мин.Площадь и Мин.Высота

Эти параметры позволяют игнорировать пики, площадь и/или высота которых менее указанного значения. Обычно используется параметр **Минимальная высота**, поскольку его легче определить по рисунку хроматограммы визуально. Параметр особенно полезен при методе расчета **Нормализация**, а также в случае невысокого отношения сигнал/шум.

Минимальная высота измеряется в единицах, установленных в **Таблице каналов**.

Единицы измерения параметра **Минимальная площадь** не зависят от выбранных единиц по оси X (мин, сек, мкл, мл) и измеряются в ЕД*сек, где ЕД - единицы измерения по каналу, установленные в **Таблице каналов**.

7.2.1.9 Наездник

Наездник - параметр, показывающий во сколько раз второй пик должен быть меньше первого, чтобы считаться **наездником**. **Наездник** отделяется от основного пика тангенциальным спуском. Значение по умолчанию равно нулю (**наездник** не определяется).

7.2.1.10 Отрицательные пики

Отрицательные пики

переключатель детектирования отрицательных пиков.
(Выбор этой опции может снизить устойчивость алгоритма интегрирования)

7.2.1.10.1 Предложить

Процедура устанавливает подходящие значения параметров **интегрирования** следующим образом (в предположении, что разметка на пики скорректирована вручную нужным образом):

- параметр **Ширина** устанавливается равным среднему значению ширины пиков на хроматограмме;
- параметр **Порог** принимает значение равное 2.0;
- параметр **Асимметрия** устанавливается равным 1.3.

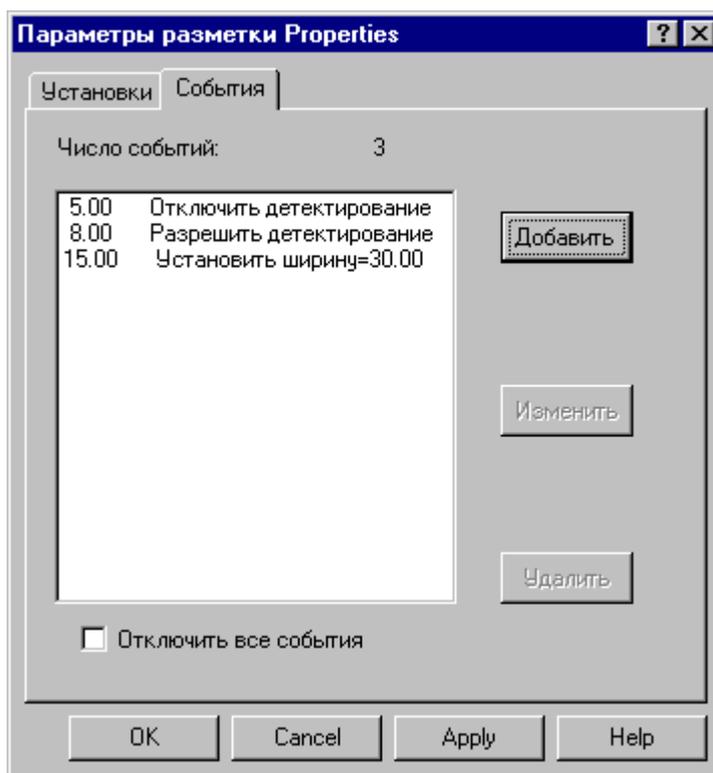
Во многих случаях последовательное нажатие кнопок **<Предложить>** и **<Применить>** приводит к приемлемой разметке, даже если исходные параметры были далеки от оптимальных.

7.2.1.11 Интерпол.начало/конец базовой линии

Интерпол.начало/конец базовой линии

включает функцию интерполяции начала и конца базовой линии при проведении разметки для более точного определения точек начала и конца пиков в случае невысокого отношения сигнал/шум. Данная опция рекомендуется взамен функций **фильтрации данных**

7.2.2 События интегрирования



События интегрирования (события разметки) используются для тонкой настройки процесса **интегрирования** и обычно используются, если проблема не может быть решена изменением общих параметров интегрирования из диалогового окна **Разметка**. События разметки позволяют разбивать хроматограмму на участки, имеющие свои собственные параметры разметки, отличные от принятых для хроматограммы в целом.

Число событий

информация о числе установленных событий разметки

Отключить все события

данный флажок позволяет игнорировать все установленные события интегрирования при разметке хроматограммы

Кнопки:

<Добавить>

появляется окно **Событие разметки**, в котором выбирается тип события, время его наступления, и, если необходимо, параметр (значение) данного события.

<Изменить>

редактирование выбранного в списке события

<Удалить>

удаление выбранного в списке события

<Apply>

переинтегрировать хроматограмму с учетом сделанных изменений без закрытия окна.

<OK>

переразметка хроматограммы и выход из диалогового окна

[Число событий](#)

[Список событий](#)

[Удаление события](#)

[Отключить события](#)

[Добавить событие разметки](#)

[Список событий интегрирования](#)

7.2.2.1 Число событий

Информация о числе установленных **событий разметки**

7.2.2.2 Список событий

Список установленных **событий разметки**

7.2.2.3 Удаление события

Удаление выбранного **события** из списка

7.2.2.4 Отключить события

Данный флажок позволяет **отключить** все установленные **события интегрирования** при разметке хроматограммы, не удаляя список **событий**.

7.2.2.5 Добавить событие разметки

Добавить событие разметки

Данное окно позволяет **добавить** событие или **изменить** параметры любого из них.

Время время наступления события

Событие выбор события из списка

Значение значение параметра для данного события (необязательный параметр)

7.2.2.6 Список событий интегрирования

Список событий интегрирования

Разрешить детектирование возобновляет процесс интегрирования.

Отключить детектирование приостанавливает процесс поиска новых пиков. Если пик начался до данного события, он либо заканчивается досрочно (пики на стадии спуска) либо не принимаются во внимание.

Разрешить отрицательные пики разрешает детектирование отрицательных пиков.

Отключить отрицательные пики запрещает детектирование отрицательных пиков. (рекомендуемый режим). Событие не влияет на уже начавшиеся отрицательные пики.

Разрешить отбраковку пиков отменяет установку «**Запретить отбраковку**».

Отключить отбраковку пиков устанавливает режим, когда пик не может быть отброшен из-за очень плоской вершины.

Разрешить долина-к-долине запрещает разделение пиков по перпендикулярно. Проводит базовую линию по самым низким точкам между пиками.

Отключить долина-к-долине разрешает разделение пиков по

	перпендикуляру .
Включить режим одного пика	все пики после данного события будут обработаны, как один слившийся пик .
Отключить режим одного пика	устанавливает нормальный режим разметки, когда каждый минимум между пиками вызывает деление по перпендикуляру или по наклонной.
Установить горизонтальную базу	устанавливает горизонтальную базовую линию, первая точка которой начинается с началом первого пика после данного события .
Установить нормальную базу	устанавливает режим, принятый по умолчанию.
Установить начало пика	начинает новый пик в этой точке. Если пик уже идет, он или отбрасывается (на подъеме) либо досрочно завершается.
Установить конец пика	завершает пик в этой точке. Не достигшие максимума пики отбрасываются (кроме начатых по событию Установить начало пика), пики на стадии спуска заканчиваются.
Разделить пик	завершает текущий и начинает новый пик.
Установить ширину	устанавливает новое значение параметра Ширина . При этом линейное возрастание этого параметра во времени прекращается.
Установить порог	устанавливает новое значение параметра Порог .
Установить минимальную высоту	устанавливает новое значение параметра МинВыс .
Установить отношение наездника	устанавливает новое значение параметра Наездник .
Установить горизонтальную базу назад	устанавливает горизонтальную базовую линию для второго из двух неразделенных пиков. Линия проводится назад от конечной точки второго пика.
Установить точку базовой линии	принимает заданную точку хроматограммы в качестве точки базовой линии. На участке между двумя точками базовой линией является соединяющая их прямая.
Форсировать горизонтальную базу	устанавливает горизонтальную базовую линию для одиночного пика от начальной точки до конечной точки в месте пересечения базовой линии и хроматограммы.
Отменить горизонтальную базу	отменяет предыдущую команду.
Форсировать горизонтальную базу назад	устанавливает горизонтальную базовую линию для одиночного пика от конечной точки до начальной точки в месте пересечения базовой линии и хроматограммы.
Отменить горизонтальную базу	отменяет предыдущую команду.
Вкл. сквозную базовую линию	
Откл. сквозную базовую линию	

7.2.3 Базовая линия

Базовая линия - это воображаемая линия, соответствующая хроматограмме при отсутствии ввода образца в колонку. Между **пиками базовая линия** совпадает с линией хроматограммы, а под **пиками** - с отрезками, соединяющими начала и концы **пиков**.

7.2.4 Шум базовой линии

Шум базовой линии оценивается по специальному алгоритму. Результат для каждого канала помещается в соответствующую колонку [Таблицы каналов](#).

7.2.5 Пик

Пик

Хроматографический пик - область, заключенная между **базовой линией** и линией хроматограммы. Слившиеся пики могут быть разделены друг от друга перпендикулярно или наклонными линиями. Положение пика определяется его **началом**, **вершиной** и **концом**.

7.3 Паспорт

Паспорт - это составная часть **метода**, включающая детальное текстовое описание текущего хроматографического разделения.

Составные части паспорта могут быть целиком или выборочно включены в отчет из диалогового окна [Настройка отчета](#) в меню *Метод*.

Общее:	сводный лист наиболее общих параметров метода.
Проба:	лист описания пробы.
Колонка:	лист описания хроматографической колонки.
Элюент	лист описания данного анализа
Комментарий:	окно для ввода комментариев.
Журнал метода	окно, автоматически фиксирующее все изменения,

внесенные в метод

Журнал Хроматограммы

окно, автоматически фиксирующее все изменения, внесенные в данную хроматограмму

7.3.1 Лист Общее

Паспорт Properties

Общие | Проба | Колонка | Элюент | Комментарий | Журнал метода | Data Log

Имя: Продолжит.: мин

МЕТОД: C:\mlcw15rus\Methods\mlc1.mtw

ДАННЫЕ: C:\MLCW15RUS\DATA\97311307.chw

Дата/врем: 31/07/1989 13:05:10 Записана: 23/01/2000 19:48:16

Градуировочная точка:

Пользователь: Nagaev

Детектор: Milichrom1

N анализа: 0

N в очереди: 0/0

OK Cancel Apply Help

Лист содержит сводку общих параметров **паспорта** хроматограммы.

Имя:

имя хроматограммы доступное при дисковых операциях чтения/записи, а также заголовок, появляющийся как название окна хроматограммы. Заголовок берется из *таблицы очередей*, если идет **очередь хроматограмм**

Продолжительность:

продолжительность хроматограммы. Данное поле может редактироваться при запуске метода или во время анализа. Если идет процесс сбора данных, индицируется время с начала хроматограммы. Продолжительность измеряется в **единицах удерживания**, выбранных для оси X (минуты, микролитры, миллилитры, число измерений).

Метод:

полное имя файла метода.

Хр-ма:

полное имя файла хроматограммы. Формируется автоматически из времени и даты запуска хроматограммы.

Дата/время:

дата и время запуска хроматограммы.

Записана:

дата и время записи хроматограммы (последняя редакция).

Уровень градуировки:

можно изменить уровень градуировки, пока хроматограмма не закончилась. После окончания это можно сделать, обновляя требуемый градуировочный уровень или с помощью **очередей**.

Пользователь:

имя текущего пользователя. Берется системой из **списка пользователей**.

Детектор:

название детектора. Может быть отредактировано в бланке **Метод/Установки/Измерение**.

- Каналов:** число каналов в данной хроматограмме. Может быть изменено в бланке **Метод/Сбор данных**.
- № анализа:** номер текущего анализа. Ведется сквозная нумерация всех полученных хроматограмм с момента установки системы **МультиХром**. **Этот параметр недоступен для редактирования**.
- № в очереди:** номер текущей хроматограммы в серии хроматограмм. Дробь, показывающая текущий номер хроматограммы и общее количество хроматограмм в очереди.

[Продолжительность хроматограммы](#)

[Имя файла метода](#)

[Имя файла хроматограммы](#)

[Дата и время запуска](#)

[Дата и время записи](#)

[Градуировочная точка](#)

[Имя текущего пользователя](#)

[Название детектора](#)

[Число каналов](#)

[Номер текущего анализа](#)

[Номер текущей хроматограммы](#)

7.3.1.1 **Продолжительность хроматограммы**

Продолжительность хроматограммы. Данное поле может редактироваться при запуске метода или во время анализа. Если идет процесс сбора данных, индицируется время с начала хроматограммы. Продолжительность измеряется в **единицах удерживания**, выбранных для оси X (минуты, микролитры, миллилитры, число измерений).

7.3.1.2 **Имя файла метода**

Полное имя файла **метода**.

7.3.1.3 **Имя файла хроматограммы**

Полное имя файла **хроматограммы**. Формируется автоматически из времени и даты запуска хроматограммы.

7.3.1.4 **Дата и время запуска**

Дата и время запуска хроматограммы.

7.3.1.5 Дата и время записи

Дата и время записи хроматограммы (последняя редакция).

7.3.1.6 Градуировочная точка

Поле **Градуировочная точка** можно изменить, пока хроматограмма не закончилась. После окончания это можно сделать, обновляя требуемый градуировочный уровень или с помощью **очередей**.

7.3.1.7 Имя текущего пользователя

Имя текущего пользователя. Берется системой из **списка пользователей**.

7.3.1.8 Название детектора

Название детектора. Может быть отредактировано в бланке **Метод/Установки/Измерение**.

7.3.1.9 Число каналов

Число каналов в данной хроматограмме. Может быть изменено в бланке **Метод/Сбор данных**.

7.3.1.10 Номер текущего анализа

Номер текущего анализа. Ведется сквозная нумерация всех полученных хроматограмм с момента установки системы **МультиХром**.

Этот параметр не может быть изменен пользователем!

7.3.1.11 Номер текущей хроматограммы

Номер текущей хроматограммы в серии хроматограмм. Дробь показывает текущий номер хроматограммы и общее количество хроматограмм в очереди.

7.3.2 Описание пробы

Описание пробы - это часть **Паспорта** хроматограммы. Может быть включено в отчет выбором соответствующих пунктов из диалогового окна **Настройка отчета** в меню **Метод**.

Инфо1, Инфо2 общее описание пробы, 2 строки по 255 знаков каждая.

Объем объем пробы в микролитрах, по умолчанию равен 1; берется из таблицы очередей, если идет **серия анализов**

Разведение разведение исходного образца, по умолчанию равно 1; берется из таблицы очередей, если идет серия анализов

№ пробирки номер позиции автосамплера для отбора текущей пробы; берется из таблицы очередей, если идет серия анализов

Количество количество образца (вес или объем), взятое для приготовления пробы. По смыслу является величиной, обратной параметру **Разведение**. Если параметр **Количество** отличен для градуировочных (с) и обычных (s) хроматограмм, концентрация умножается на коэффициент равный **Amount(s) / Amount(c)**

Кол-во внутр. стандарта количество **внутреннего стандарта** в пробе. Используется для расчета относительных концентраций.

Дата и время получения пробы это поле может быть изменено пользователем при необходимости. По умолчанию заполняется системой датой и временем запуска хроматограммы. В паспорте имеется также другое поле с временем запуска, недоступное для редактирования

7.3.2.1 Общее описание

Общее **описание пробы**, 2 строки по 255 знаков каждая.

7.3.2.2 Объем пробы

Объем пробы в микролитрах, по умолчанию равен 1; значение берется из таблицы очередей, если идет серия анализов

7.3.2.3 Разведение

Разведение исходного образца, по умолчанию равно 1; берется из таблицы очередей, если идет серия анализов

7.3.2.4 Количество образца

Количество образца (вес или объем), взятое для приготовления пробы. По смыслу является величиной, обратной параметру **Разведение**.

Если параметр **Количество** отличен для калибровочных (с) и обычных (s) хроматограмм, концентрация умножается на коэффициент равный $Amount(s) / Amount(c)$

Может использоваться как коэффициент пересчета концентраций.

7.3.2.5 Количество стандарта

Количество **внутреннего стандарта**. Используется для расчета относительных концентраций.

7.3.2.6 Дата/время

Поле **Дата/время получения пробы** может быть изменено пользователем, например, при необходимости указать время отбора пробы. По умолчанию заполняется системой датой и временем запуска хроматограммы. В **паспорте** имеется также другое поле с временем запуска хроматограммы, недоступное для редактирования.

7.3.3 Колонка

Описание колонки - это часть **Паспорта** хроматограммы. Может быть включено в отчет выбором соответствующих пунктов из диалогового окна **Настройка отчета** в меню *Метод*.

Номер	серийный номер колонки, до 12 символов.
Вн.Диам.	внутренний диаметр колонки в миллиметрах.
Длина	длина колонки в миллиметрах. Используется для расчета линейной скорости подвижной фазы.
Сорбент	описание сорбента колонки, до 48 символов.
Размер (частиц)	зернение сорбента в микронах. Используется для расчета приведенной высоты теоретической тарелки.
Мертвый объем	мертвый объем колонки. Используется для расчета логарифмических индексов удерживания, факторов емкости компонентов и линейной скорости элюента.
Предколонка	параметры предколонки
Вн.диам.	внутренний диаметр предколонки в миллиметрах.
Длина	длина предколонки в миллиметрах. Установите значение "0", если предколонка отсутствует.

7.3.3.1 Серийный номер колонки

Серийный номер колонки, до 12 символов

7.3.3.2 Внутренний диаметр колонки

Внутренний диаметр колонки в миллиметрах.

7.3.3.3 Описание сорбента

Описание сорбента колонки, до 255 символов.

7.3.3.4 Зернение сорбента в микронах

Зернение сорбента в микронах.

Используется для расчета приведенной высоты теоретической тарелки (**ПВТТ**).

7.3.3.5 Параметры предколонки

Параметры предколонки

Вн.диам.

внутренний диаметр предколонки в миллиметрах.

Длина

длина предколонки в миллиметрах.

Установите значение "0", если предколонка отсутствует.

7.3.4 Элюент

Паспорт Properties

Общие | Проба | Колонка | Элюент | Комментарий | Журнал метода | Data Log

Подвижная фаза

Элюент А: 80% MeOH : 20% water

В:

С:

Поток: 50 мкл/мин Давление: 0 МПа Темп.: 0 °C

OK Cancel Apply Help

Описание элюента - это часть **Паспорта** хроматограммы. Может быть включено в отчет выбором соответствующих пунктов из диалогового окна **Настройка отчета** в меню **Метод**.

Элюент А (В, С)

состав подвижной фазы в насосах А, В и С, соответственно

Поток

объемная скорость подвижной фазы, мкл/мин.

Используется при выборе объемных **единиц удерживания** по оси X хроматограммы и для пересчета площадей пиков в объемные единицы.

Давление

давление на входе колонки, бар

Темп.

температура термостата колонки, °C

7.3.4.1 Состав подвижной фазы

Состав подвижной фазы в насосах А, В и С, соответственно.

7.3.4.2 Объемная скорость подвижной фазы

Объемная скорость подвижной фазы, мкл/мин. Используется при выборе объемных **единиц удерживания** по оси X хроматограммы и для пересчета площадей пиков в объемные единицы.

7.3.4.3 Давление на входе колонки

Давление на входе колонки, бар

7.3.4.4 Температура термостата

Температура термостата колонки, °С

7.3.5 Комментарии

Комментарии - это часть паспорта хроматограммы. Лист комментариев может содержать любую дополнительную текстовую информацию пользователя по данному разделению, не вошедшую в другие разделы **метода**. Объем комментариев может составлять несколько печатных листов. С помощью диалогового окна **Настройка отчета** из меню *Метод* можно включить печать комментариев в отчет.

7.3.5.1 Новый комментарий

Данное окно позволяет добавить новый комментарий к **Журналу метода** или **Журналу данных**. Комментарий добавляется в виде текста в произвольной форме. Текущие **дата/время** и **имя пользователя** добавляются автоматически.

Диалоговое окно **Новый комментарий** вызывается также, если стирается **журнал метода**.

7.3.6 Журнал метода

Журнал метода предназначен для автоматического ведения протокола изменений, вносимых в метод. Все изменения автоматически сопровождаются датой и временем их внесения, а также именем пользователя, выполнившего указанное действие.

<Добавить новый> добавление нового комментария в произвольной форме в журнал метода. Дата, время и имя пользователя вносятся автоматически.

<Очистить> удаление содержимого журнала. При этом создается новый комментарий. Дата, время и имя пользователя вносятся автоматически.

7.3.7 Журнал хроматограммы

Журнал данных предназначен для автоматического ведения протокола изменений, вносимых в хроматограмму.

При записи хроматограммы вначале создается запись, содержащая информацию о равномерности приема данных, а также сведения об ошибках регистрации.

При внесении любого изменения в хроматограмму автоматически записываются следующие данные:

дата и время;

имя пользователя;

характер внесенных изменений;

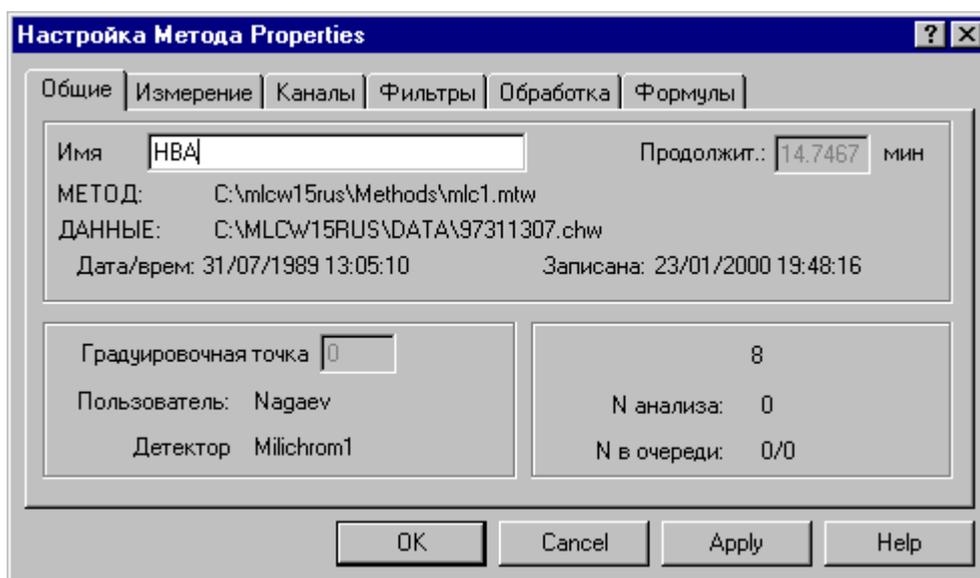
имя файла, в котором были записаны измененные данные.

В протокол также можно внести произвольный комментарий, щелкнув по кнопке **<Добавить новый>**.

При создании копии хроматограммы все данные протокола сохраняются, а при запуске новой хроматограммы (команда **Измерение/Перезапустить метод**) протокол полностью очищается.

7.4 Настройка метода

Установки метода - это часть метода, содержащая основные параметры и настройки текущего метода, а также действия, выполняемые по окончании хроматограммы.



Общие наиболее общие установки. Данный лист полностью дублирует лист [Паспорт / Общее](#).

Измерение часто используемые параметры и установки сбора данных

Каналы редактирование **таблицы каналов** в случае **многоканальной хроматограммы**

Фильтры задание параметров фильтрации данных. Фильтрация может проводиться по окончании хроматограммы автоматически или после ее завершения в ручном режиме.

Обработка выбор действий, выполняющихся автоматически после завершения

хроматограммы.

Формулы

выбор формул для расчета **эффективности, индексов и мертвого объема**

Измерение

Настройка метода: каналы

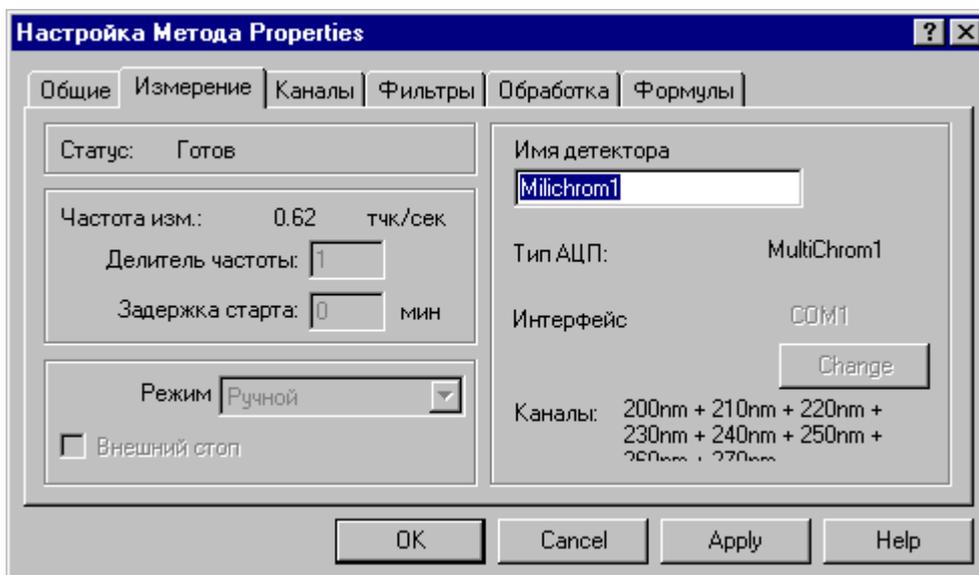
НМ - Метод

НМ - Интерфейс

Настройка сбора данных

7.4.1 Измерение

Лист **Измерение** диалогового окна **Установки метода** предназначен для редактирования и контроля общих параметров, определяющих процесс сбора данных.



Статус — сообщение системы о текущем состоянии процесса хроматографии.

Частота изм. информирует о частоте сбора данных для хроматограммы. Зависит от типа АЦП и параметра **делитель частоты**.

Делит. частоты определяет, во сколько раз частота приема данных для текущей хроматограммы меньше максимальной для данного АЦП.

Задержка старта задержка старта хроматограммы на необходимое время

Режим запуска способ синхронизации запуска хроматограммы.

Внешний стоп возможность остановки хроматограммы повторным нажатием кнопки внешнего запуска

Имя детектора название детектора (тип детектора, длина волны и т.д.). Произвольно определяется пользователем, например, УФ254 нм.

Тип АЦП тип АЦП (прибора)

Интерфейс

интерфейс (порт) ввода-вывода

Каналы

имена каналов, использованные в данном методе для приема данных.

[Информация об интерфейсе](#)[Название детектора](#)[Внешний стоп](#)[Делитель частоты](#)[Задержка старта хроматограммы](#)[Частота сбора данных](#)**7.4.1.1 Частота сбора данных**

Частота сбора данных для данного метода. Зависит от типа **АЦП** и параметра **делитель частоты**.

7.4.1.2 Делитель частоты

Параметр **Замедление** позволяет уменьшить скорость приема данных относительно некоторого максимального для данного АЦП значения и снизить тем самым затраты памяти и дискового пространства для хранения хроматограммы.

Программа суммирует заданное этим параметром число измерений АЦП, вычисляет среднее и заносит его в хроматограмму как одну точку. Может принимать значение от 1 до 255. Оптимальное значение *Замедления* для данной хроматограммы может быть получено с помощью операции **меню Обработка /Еще..../ Сжатие**.

7.4.1.3 Задержка старта хроматограммы

Задержка старта хроматограммы по отношению к моменту ее запуска оператором. Данные, полученные во время задержки, не включаются в хроматограмму.

7.4.1.4 Режим запуска

Способ синхронизации запуска хроматограммы:

Ручной

запуск производится сразу после нажатия клавиши [Y] на клавиатуре компьютера;

Внешний

после нажатия клавиши [Y] на клавиатуре компьютера система переходит в состояние ожидания. Сбор данных начинается после нажатия **кнопки дистанционного запуска**;

Внешний стоп

данная опция позволяет заканчивать хроматограмму при повторном нажатии на **кнопку дистанционного запуска**. Длительность нажатия должна превышать 25 измерений АЦП.

7.4.1.5 Внешний стоп

Установка флажка **Внешний стоп** дает возможность остановить хроматограмму повторным нажатием **кнопки внешнего запуска**.

Длительность нажатия кнопки должна превышать 25 измерений АЦП

7.4.1.6 Название детектора

Название детектора (обычно включает тип детектора, длину волны и т.д.). Произвольно определяется пользователем, например, УФ254 нм.

7.4.1.7 Информация об интерфейсе

Информация об интерфейсе

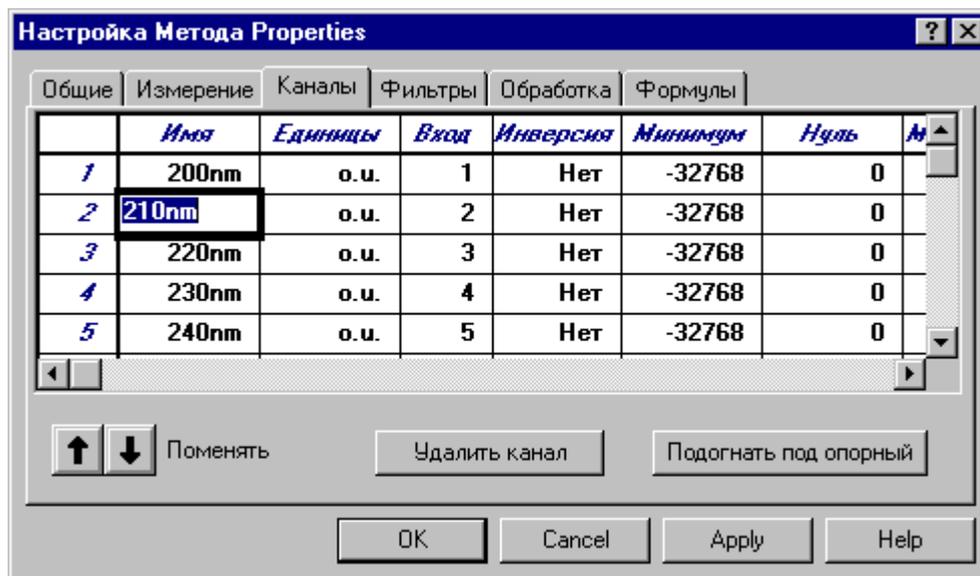
Тип АЦП	тип АЦП (прибора)
Интерфейс	интерфейс (порт) ввода-вывода
Каналы	имена каналов, использованные в данном методе для приема данных.
<Change>	вызов диалогового окна Настройка сбора данных для выбора интерфейса и для каналов для приема данных. Данная кнопка доступна только при загрузке метода с диска

7.4.2 Настройка метода: каналы

Данное диалоговое окно позволяет редактировать **таблицу каналов** метода.

Диалоговое окно **Каналы** доступно только для **многоканальных хроматограмм**.

Кроме того, для многоканальных хроматограмм можно выполнять ряд специальных процедур: изменять порядок расположения графиков различных каналов, исключать отдельные каналы, задавать временной сдвиг относительно **опорного** канала.



Для того чтобы изменить значения в столбцах **Имя, Единицы, Диапазон**, щелкните мышкой по нужной ячейке и введите новое значение.

Для того чтобы изменить положение канала в списке, выделите его щелчком мыши, а затем переместите в требуемое положение с помощью кнопок **<Поменять>**.

Для того чтобы исключить канал, выделите его, а затем нажмите кнопку **<Удалить канал>**.

[Поменять](#)

[Удалить канал](#)

[Подогнать под опорный](#)

7.4.2.1 Поменять

Поменять

Данные кнопки позволяют изменить порядок каналов в таблице.

Для того чтобы изменить положение канала в списке, выделите его щелчком мыши, а затем переместите в требуемое положение с помощью кнопок **<Поменять>**.

7.4.2.2 Удалить канал

Удалить канал

Данное окно удаляет выбранный канал хроматограммы из таблицы каналов метода.

Для того чтобы исключить канал, выделите его, а затем нажмите кнопку **<Удалить канал>**

7.4.2.3 Подогнать под опорный

Подогнать под опорный

Позволяет установить сдвиг выбранного канала относительно **опорного**

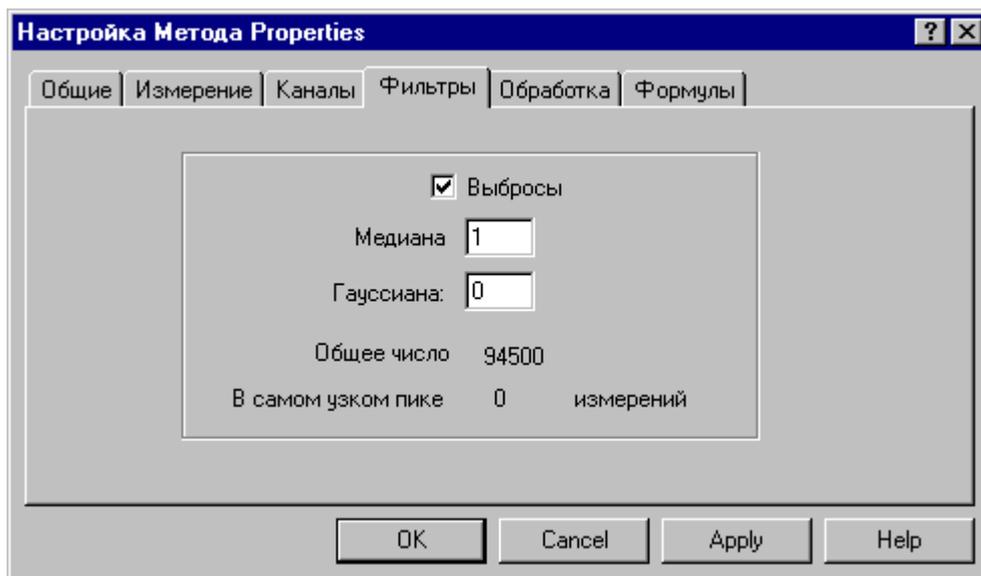
Выделите канал, а затем нажмите кнопку **<Подогнать под опорный>** При этом откроется одноименное окно.

Введите величину временного сдвига в секундах.

Нажмите кнопку **<ОК>**. При этом окно закроется, а введенное значение будет пересчитано в число точек на хроматограмме и введено в ячейку **Сдвиг** таблицы каналов.

7.4.3 Фильтры: установки метода

Лист **Фильтры** устанавливает операции фильтрации шумов, выполняемые программой автоматически по окончании хроматограммы.



Операции **фильтрации шумов** изменяют исходные данные, поэтому не рекомендуется пользоваться ими без необходимости. Как альтернативный вариант, рекомендуется использовать операцию **сжатие данных**.

Методы фильтрации

Выбросы

удаляет только отдельные выбросы. Не влияет на остальные точки хроматограммы.

Медиана

проводит фильтрацию *методом медианы*. Параметр **Щель** определяет **степень сглаживания**. При значении щели, равном 0, сглаживание не проводится

Гаусс

проводит фильтрацию *методом Гаусса*. Параметр **Щель** определяет **степень сглаживания**. При значении щели, равном 0, сглаживание не проводится

Общее число измерений

суммарное число точек в хроматограмме

В самом узком пике

число измерений в самом узком пике. Исходная информация для возможности проведения процедуры **сжатия данных**.

См. также: [фильтрация шумов](#).

[Фильтры](#)

[Фильтрация шумов](#)

[Число измерений](#)

[метод Гаусса](#)

[медиана](#)

[выбросы](#)

[число точек](#)

7.4.3.1 Фильтры

Эти опции используются для фильтрации шумов.

Фильтрация шумов изменяет исходные данные, поэтому не рекомендуется пользоваться ей без необходимости. Во всяком случае, имейте в виду операцию **сжатие данных** как альтернативный вариант.

Методы фильтрации

Выбросы

устраняет только выбросы. Не влияет на остальные точки хроматограммы.

Медиана

проводит фильтрацию *методом медианы*.

Гаусс

проводит фильтрацию *методом Гаусса*.

Щель1 (Щель2)

определяют *степень сглаживания* в алгоритмах фильтрации по методу Медианы (Гаусса).

См. также: [фильтрация шумов](#).

7.4.3.2 Фильтрация шумов

Собранные данные хранятся в памяти компьютера "в сыром" виде. Иногда после окончания хроматограммы может потребоваться их сглаживание (фильтрация шумов). Программа МультиХром использует три алгоритма фильтрации шумов: фильтрация выбросов, метод медианы и метод Гаусса. Эти алгоритмы могут быть использованы для сглаживания исходных данных в любом сочетании, в порядке их перечисления. Обычно не требуется использовать другие методы фильтрации, кроме первого.

При правильной настройке хроматографической системы, детектора и АЦП фильтрация не является необходимым этапом преобразования данных и может быть опущена! Обычно вместо фильтрации целесообразно применить другую процедуру - сжатие данных.

Фильтр выбросов

сглаживает первую и последнюю точку хроматограммы, а также точки, идентифицированные как выбросы. Выброс заменяется на полусумму двух соседних с ним точек. Этот фильтр не искажает форму пиков и может быть включен постоянно.

Если используется метод медианы или Гаусса, каждый канал хроматограммы просматривается через специальное окно (щель) из (2·степень сглаживания + 1) точек.

Медиана

один из самых эффективных способов сглаживания шумов. В этом способе точки внутри щели сортируются в возрастающем порядке и преобразуемая точка заменяется на другую, попадающую в центр щели после сортировки. Этот способ хорошо сглаживает базовую линию, не меняет форму пика на склонах, но слегка "приглаживает" вершины пиков и ложбины между пиками. Он также эффективно убирает "выбросы", которые иногда возникают на хроматограммах. Главный недостаток этого метода - то, что он может изменять как высоту, так и площадь хроматографических пиков.

Гаусс

вычисляется сумма всех значений точек окна, с учетом весов распределения Гаусса, и используется вместо исходных данных в центре окна. Этот фильтр также искажает высоту и форму пика, оставляя неизменной его площадь.

Визуально медианная фильтрация лучше сглаживает шум базовой линии, тогда как Гауссов фильтр лучше сглаживает шумы на склонах и вершинах пиков.

См. также: [фильтры](#).

7.4.3.3 Число измерений

Число измерений в самом узком пике. Исходная информация для возможности проведения процедуры **сжатия данных**.

7.4.3.4 метод Гаусса

Данный метод проводит фильтрацию методом **Гаусса**. Параметр **Щель** определяет **степень сглаживания**. При значении щели, равном **0**, сглаживание не проводится.

7.4.3.5 медиана

Данный метод проводит фильтрацию методом **медианы**.

Параметр **Щель** определяет **степень сглаживания**. При значении щели, равном **0**, сглаживание не проводится

7.4.3.6 выбросы

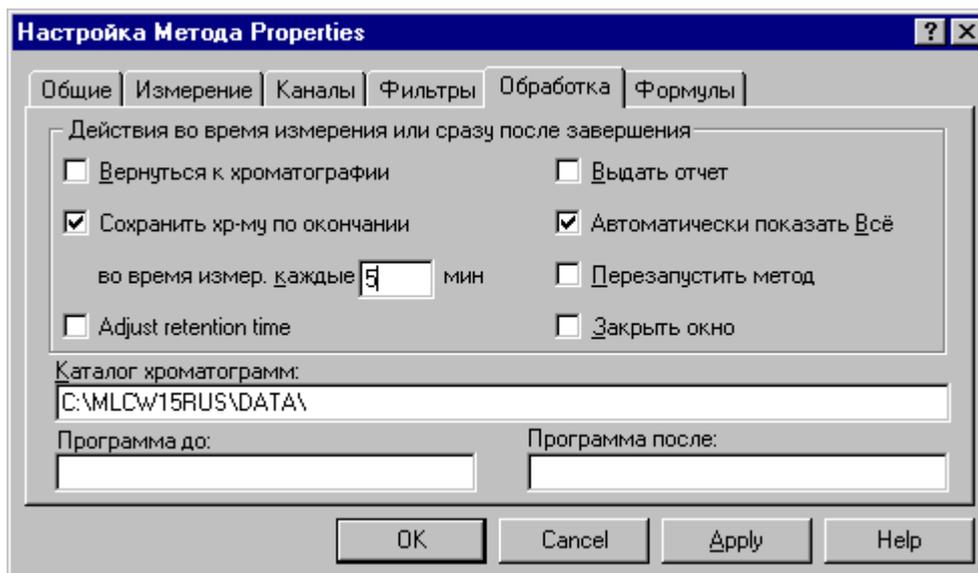
Данный метод фильтрации устраняет только отдельные **выбросы**. Не влияет на остальные точки хроматограммы.

7.4.3.7 число точек

Суммарное **число точек** в хроматограмме

7.4.4 Лист Обработка

Лист **Обработка** диалогового окна **Метод / Установки** включает перечень действий, выполняющихся автоматически после завершения хроматограммы.



Вернуться к хроматографии

система автоматически переключается в окно программы **МультиХром** по окончании хроматограммы, если пользователь в этот момент работал с другой программой.

Сохранить хр-му по окончании

вкл./выкл. автоматическую запись хроматограммы на диск.

во время измер. каждые XXX мин

позволяет установить периодичность записи хроматограммы на диск (на случай сбоя) во время приема данных. Ноль - резервная запись не производится.

Выдать отчет

вкл./выкл. автоматическую выдачу **отчета**. Отчет выдается в соответствии с установками в окне **Опции отчета**

Автоматически показать все

позволяет выбрать между автоматическим методом определения масштаба рисунка хроматограммы и используемым по умолчанию (выбранным в пунктах **меню Вид**)

Adjust retention time

Закреть окно

закрывает окно хроматограммы после ее окончания.

Перезапустить метод

перезапуск метода после окончания хроматограммы. Позволяет создавать непрерывные ("бесконечные") циклы с текущим методом.

Каталог хроматограмм

каталог, в который будет записана хроматограмма.

Будьте внимательны: при вводе система не проверяет, существует ли указанный каталог на диске!

Программа до

имя программы или командного файла, запускаемой перед началом хроматограммы.

Программа после

имя программы или командного файла, запускаемой после окончания хроматограммы. Используется, например, для передачи отчета в базу данных, электронную таблицу или другую программу.

[переключение](#)

[во время измер. каждые XXX мин](#) [во время измер. каждые XXX мин](#)

[авт. выдача отчета](#)

[Автомасштабирование](#)

[Ajust retention time](#)

[авт. закрытие хр-мы](#)

[Перезапуск метода](#)

[Каталог](#)

[программа до-после](#)

7.4.4.1 переключение

При установке флажка по окончании хроматограммы система автоматически переключается в окно **МультиХром**, если пользователь в этот момент работает с другой программой.

7.4.4.2 во время измер. каждые XXX мин во время измер. каждые XXX мин

Данный флажок включает автоматическую запись хроматограммы на диск по окончании.

во время измер. каждые XXX мин

данное поле позволяет установить периодичность записи хроматограммы на диск (на случай сбоя) во время приема данных.
Ноль - резервная запись не производится.

7.4.4.3 авт. выдача отчета

Данный флажок включает автоматическую **выдачу отчета** по окончании хроматграммы.
Отчет выдается в соответствии с установками окна [Опции отчета](#).

7.4.4.4 Автомасштабирование

Автомасштабирование рисунка хроматограммы по ее окончании. По умолчанию используются установки из [меню Вид](#).

7.4.4.5 Ajust retention time

Ajust retention time

7.4.4.6 авт. закрытие хр-мы

Автоматически закрывает окно хроматограммы после ее окончания.

7.4.4.7 Перезапуск метода

Перезапуск метода после окончания хроматограммы. Позволяет создавать непрерывные ("бесконечные") циклы с текущим методом.

7.4.4.8 Каталог

Каталог, в который будет записана хроматограмма.

7.4.4.9 программа до-после

Программа до имя программы или командного файла, запускаемой перед началом хроматограммы.

Программа после имя программы или командного файла, запускаемой после окончания хроматограммы. Используется, например, для передачи отчета в базу данных, электронную таблицу или другую программу.

7.4.5 Лист "Формулы"

Лист **Формулы** позволяет выбрать основные зависимости, используемые для расчета **эффективности колонки, мертвого времени, индексов удерживания, разрешения и асимметрии пиков**, а также сигнала **суммарного канала** для многоканальных хроматограмм.

The screenshot shows the 'Настройка Метода Properties' dialog box with the 'Формулы' tab selected. The dialog has several sections for configuring formula parameters:

- Параметр:** A dropdown menu showing 'Набор формул'.
- Формула:** A dropdown menu showing 'Собственные формулы'.
- Мертвое время/объем:** A section containing:
 - Метод расчета мертвого:** A dropdown menu showing 'Отсутствует'.
 - Мертвый объем:** A text input field showing '0.00' followed by 'мл' and a percentage sign.
 - Мертвое время:** A text input field showing '0' followed by 'сек'.
- Индекс удерживания:** A section containing:
 - Интерполяция:** A dropdown menu showing 'Линейный'.
 - Внутренний/Внешний:** Two radio buttons, with 'Внутренний' selected.

At the bottom of the dialog are four buttons: 'OK', 'Cancel', 'Apply', and 'Help'.

[Параметры и формулы](#)

[Мертвое время/объем](#)

[Индекс удерживания](#)

[Европейская фармакопея](#)

[Параметры и формулы](#)

[Фармакопея США](#)

[Метод расчета мертвого времени/объема](#)

[Метод расчета индексов удерживания](#)

7.4.5.1 Европейская фармакопея

Набор формул, принятых в **Европейской фармакопее**:

Теоретические тарелки $Eff = 5.54 (tr / W1/2)^2$

Разрешение $Rs = 1.177 (t2 - t1) / (W20.5 + W10.5)$

Асимметрия $As = W20.1 / W10.1$

7.4.5.2 Параметры и формулы

Списочные поля **Параметр** и **Формула** позволяют выбирать различные варианты наборов формул для расчета **эффективности** колонки, **разрешения** и **асимметрии** пиков.

Для **многоканальных хроматограмм** к списку параметров добавляются формулы для расчета сигнала **суммарного канала**.

Набор формул

данная установка позволяет выбрать один из стандартных наборов формул в поле **Формула**

Собственные формулы для каждого параметра может быть выбрана любая из доступных формул

Европейская фармакопея выбор формул расчета, принятых в Европейской фармакопее.

Фармакопея США выбор формул расчета, принятых в фармакопее США

Теоретические тарелки

режим выбора формулы для расчета эффективности колонки

$2 (T H / A)^2$ $Eff = 2 (H tr / A)^2$. Данная формула применима для плохо разделенных пиков

$5.54(T/W)^2$ $Eff = 5.54 (tr / W1/2)^2$. Эта формула используется в Европейской фармакопее

$16(T/Wb)^2$ $Eff = 16 (tr / Wb)^2$. Эта формула используется в фармакопее США
Здесь tr - время удерживания пика, H - высота, A - площадь, $W1/2$ - полуширина, Wb - ширина пика

Разрешение

режим выбора формулы для расчета разрешения между соседними пиками

$(T2-T1) / (W2+W1) |60.7%$ $Rs = (t2 - t1) / (W20.607 + W10.607)$.
Данная формула применима для плохо разделенных пиков

$1.177 * (T2-T1) / (W2+W1) |50%$ $Rs = 1.177 (t2 - t1) / (W20.5 + W10.5)$.
Эта формула используется в Европейской фармакопее.

$$2 * (T2-T1) / (Wb2+Wb1) \quad R_s = 2 (t2 - t1) / (W2b + W1b)$$

Эта формула используется в фармакопее США

Здесь t_2 and t_1 - время удерживания двух соседних пиков, W_{ib} , $W_{i0.5}$, и $W_{i0.607}$ - их ширина у основания, на полувысоте и 0.607 от высоты, соответственно. R_s -разрешение между пиками.

Асимметрия

режим выбора формулы для расчета асимметрии пиков

$$(\text{Width after}) / (\text{Width before}) | 10\% \quad A_s = W_{20.1} / W_{10.1}$$

Эта формула используется в Европейской фармакопее

$$((\text{Width after}) + (\text{Width before})) / 2 * (\text{Width before}) | 5\% \quad A_s = (W_{20.05} + W_{10.05}) / (2 W_{10.05})$$

Эта формула используется в фармакопее США

где $W_{20.1}$ и $W_{20.05}$ - полуширина пика со стороны его конца, $W_{10.1}$ and $W_{10.05}$ - полуширина пика со стороны его конца, измеренная на высоте 10% или 5%, соответственно.

Суммарный канал

режим выбора формулы для расчета **суммарного**

канала

(данная опция доступна только для **многоканальных хроматограмм**)

Отсутствует Сумма s/n

суммарный канал не рассчитывается

суммарный канал вычисляется как сумма отношений сигнал/шум по всем каналам хроматограммы. Суммарный канал может использоваться для спектрального анализа и разметки хроматограммы на пики.

Сумма откликов

суммарный канал вычисляется как сумма откликов по всем каналам хроматограммы. В этом случае он может использоваться для разметки хроматограммы на пики и расчета концентраций компонентов.

7.4.5.3 Фармакопее США

Набор формул, принятых в **фармакопее США**:

Теоретические тарелки

$$Eff = 16 (tr / Wb)^2$$

Разрешение

$$R_s = 2 (t_2 - t_1) / (W_{2b} + W_{1b})$$

Асимметрия

$$A_s = (W_{20.05} + W_{10.05}) / (2 W_{10.05})$$

7.4.5.4 Метод расчета мертвого времени/объема

Нет

мертвое время вводится вручную, в специальное поле, и считается константой;

Первый компонент

пик, соответствующий первому компоненту данной хроматограммы, выбирается как маркер "**мертвого времени**". Его время удерживания замещает прежнее значение **мертвого времени**. Если первый компонент не найден, используется его **ожидаемое время удерживания**;

Первый пик

первый найденный пик данной хроматограммы используется как маркер **мертвого времени**;

Из % мертвого объема

мертвое время вычисляется как % **мертвого объема** от объема пустой колонки, вычисляемого из ее размеров .

7.4.5.5 Метод расчета индексов удерживания

Тип	выбор формулы для расчета ИНДЕКСОВ
Линейный	расчет линейных индексов
Логарифмический	расчет логарифмических индексов (индексов Ковача)
Шкала индексов	
Внутренняя	использование внутренней (т.е. построенной на основе текущей хроматограммы) шкалы индексов удерживания
Внешняя	использование внешней (т.е. построенной на основе другой, градуировочной хроматограммы) шкалы индексов удерживания

7.5 Операции с файлами методов

[Открыть метод](#)

[Сохранить метод](#)

7.5.1 Метод: открыть

Данная функция открывает файл **метода**.

Может быть выбран любой метод из расположенных на диске. По умолчанию файлы методов хранятся в директории **Methods**, хотя могут использоваться и любые другие каталоги.

См.также: [функции контекстного меню](#)

7.5.2 Метод: сохранить

Данная функция сохраняет файл **метода** текущего **окна хроматограммы**

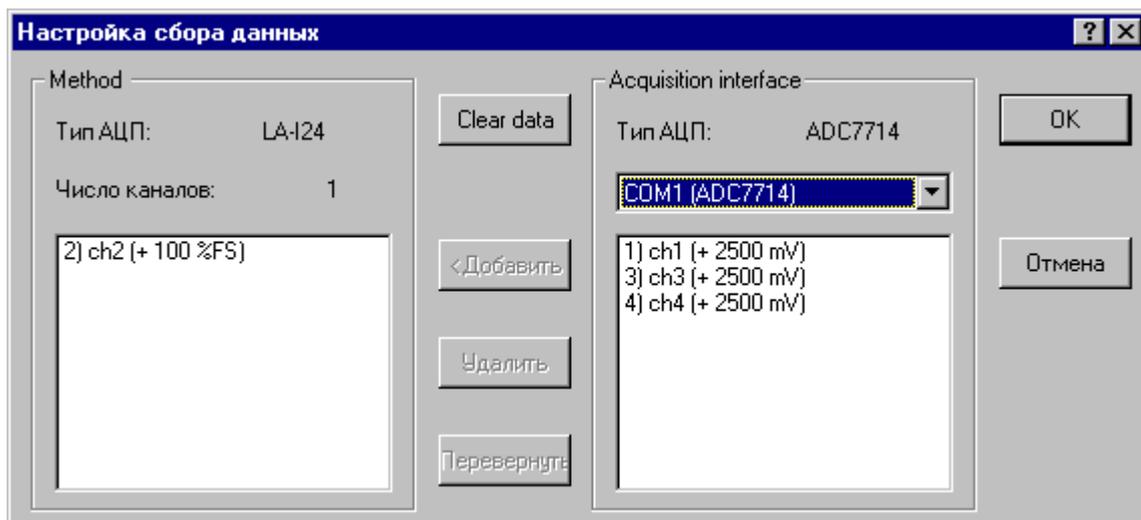
Метод может быть сохранен под тем же или другим именем, в той же или другой директории.

Текущее имя метода указывается в заголовке окна хроматограммы. Если метод был изменен оператором, после имени метода появляется звездочка.

См.также: [функции контекстного меню](#)

7.6 Настройка сбора данных

Диалоговое окно **Настройка сбора данных** позволяет выбрать АЦП, а также число и входы каналов, задействованных для приема данных в методе. (Первичная конфигурация АЦП производится в диалоговом окне **Настройка/Интерфейсы**, а характеристики каналов АЦП - в диалоговом окне **Настройка АЦП**).



Метод	Данное поле содержит информацию о типе АЦП и каналах , задействованных в данном методе для приема данных, т.е. текущую конфигурацию метода.
Тип АЦП	имя выбранного прибора (АЦП). Берется из диалогового окна Настройка / Интерфейсы / Настройка .
Число каналов	число задействованных в методе каналов. Список выбранных каналов приведен ниже.
Интерфейс	Данное поле позволяет выбрать тип АЦП , а также содержит информацию о свободных ресурсах системы, (каналах, которые еще не задействованы в текущем методе).
Тип АЦП	имя выбранного прибора (АЦП). Тип АЦП (из числа установленных в системе) выбирается в списочном поле путем выбора соответствующего порта, к которому АЦП подключен.
АЦП	имя прибора (АЦП). Берется из диалогового окна Настройка / Интерфейсы / Настройка .
Число каналов	число каналов (длин волн) измерения при многоканальном детектировании.
Входы	номера задействованных входов АЦП
Подключен к интерфейсу	порт, через который компьютер связан с АЦП или детектором
Каналы...	кнопка вызова диалогового окна Каналы

7.6.1 НСД- Метод

НСД -Метод

Данное поле в левой части окна содержит информацию о **типе АЦП** и **каналах**, задействованных в методе для приема данных

Тип АЦП информация о типе **АЦП**.

Число каналов число задействованных в методе **каналов**.

Список каналов

список задействованных в методе каналов.

7.6.2 НСД - Интерфейс

НСД -Интерфейс

Данное поле в правой части окна позволяет выбрать **тип АЦП**, а также содержит список свободных каналов, которые могут быть задействованы в текущем методе.

Тип АЦП имя выбранного прибора (АЦП).

Тип АЦП (из числа установленных в системе) выбирается в **списочном поле** путем выбора соответствующего порта ввода/вывода .

7.6.3 НСД - Выбор интерфейса

НСД - Выбор интерфейса

Выбор интерфейса автоматически выбирает подключенный к нему АЦП

7.6.4 НСД -Добавление канала

НСД -Добавление канала

Добавление выбранного канала из правой части окна к списку каналов метода.

7.6.5 НСД -Удаление канала

НСД -Удаление канала

Удаление выбранного канала из левой части окна

7.6.6 НСД -очистить список

НСД -очистить список

Очистка списка каналов метода

8 Градуировка: основные операции

Все операции, связанные с количественным и качественным определением компонентов анализируемой смеси, сгруппированы в подменю **Градуировка** из меню **Метод**. Каждый пункт подменю вызывает свое диалоговое окно:

Компоненты

создание или редактирование «**Таблицы компонентов**» (включает данные по названиям, временам удерживания компонентов, и т.д.)

Распознавание	установка общих параметров идентификации, количественного расчета и градуировки
Концентрации	создание или редактирование « Таблицы концентраций » (включает градуировочные данные по всем компонентам Градуировка: Введение)
Графики	просмотр и редактирование градуировочных зависимостей для каждого компонента.
Пересчитать	обновить времена удерживания, индексы или градуировочные коэффициенты для всех компонентов, в соответствии с текущей хроматограммой.
Записать в метод	записывает результаты градуировки из текущей хроматограммы в текущий метод (т.е. в метод, которым была получена данная хроматограмма)
Прочитать из метода	читает результаты градуировки из текущего метода в текущую хроматограмму
Экспорт	записывает Таблицу компонентов и <i>параметры градуировки</i> на диск. Служит для передачи градуировочных данных между методами и хроматограммами.
Импорт	считывает Таблицу компонентов и параметры градуировки с диска. Служит для передачи градуировочных данных из метода в метод.

См. также: [Введение в процедуру градуировки](#)

[Градуировка: Введение](#)

[Идентификация пиков](#)

[Таблица компонентов](#)

[Таблица концентраций](#)

[Градуировочный график](#)

[Импорт градуировки](#)

[Экспорт градуировки](#)

[Записать в метод](#)

[Прочитать из метода](#)

[Количественный расчет](#)

8.1 Градуировка: Введение

Процедура градуировки заключается в получении и обработке хроматограмм стандартных смесей с целью получения предварительной информации для **количественного анализа**.

Процедура градуировки имеет две цели.

1. Определить **времена удерживания (объемы удерживания, индексы удерживания)** анализируемых компонентов. Эта информация требуется для последующей *идентификации* компонентов в смеси неизвестного состава (качественный анализ смеси).
2. Определить **градуировочные коэффициенты**,

связывающие **отклик детектора** (**высоту** или **площадь пика**) и **концентрацию** каждого компонента в пробе. Эта информация нужна для расчета концентраций компонентов в анализируемой пробе (количественный анализ).

Как правило, обе цели достигаются одновременно, путем получения градуировочных хроматограмм для смесей с известным качественным и количественным составом.

Результатом этой процедуры является **градуировочная кривая**, показывающая зависимость **количества** компонента от **отклика детектора**.

В программе **МультиХром** результаты градуировки хранятся как в *методе*, так и в каждой **хроматограмме**.

Основными типами градуировки являются **метод абсолютной градуировки** и **метод внутреннего стандарта**. Кроме того, самостоятельно существует модифицированный, упрощенный метод *абсолютной градуировки*, называемый **табличным**. Эти методы отличаются по способу построения градуировочной кривой.

Градуировка может быть **одноточечной** и **многоточечной**.

См. также: [Градуировка: основные операции](#)

8.2 Идентификация пиков

Идентификация пиков - это процесс соотнесения **Таблицы пиков** и **Таблицы компонентов**.

Параметры *Таблицы компонентов*, ответственные за идентификацию:

Имя	название компонента;
Время	время удерживания из градуировочного разделения;
Окно, %	допускаемое отличие ожидаемого и реального времени удерживания, измеренное в % от величины ожидаемого удерживания;
Реперный	индикатор опорного компонента;

Идентификация пиков - это двухступенчатая процедура. На первом этапе распознаются только **реперные компоненты** (если они заданы!), на втором - все остальные. Реперный пик ищется в пределах заданного для него временного окна. Если в окне присутствует несколько пиков, в качестве реперного обычно выбирается самый высокий пик (хотя можно использовать и другие *критерии идентификации*).

На втором этапе, когда реперные пики найдены, для идентификации **обычных компонентов** используется относительное **ожидаемое время удерживания**, скорректированное в соответствии с полученными в данной хроматограмме временами удерживания реперных компонентов. Например, если время удерживания реперного компонента (пусть только один компонент объявлен реперным) в данной хроматограмме увеличилось на 10%, то и ожидаемое время выхода всех остальных компонентов также будет увеличено на 10%. Для более точной коррекции времен удерживания рекомендуется выбирать 2-3 реперных компонента: один в начале хроматограммы и один ближе к концу.

Рекомендуется проводить идентификацию реперных пиков по высотам, а остальных - по временам удерживания (**критерии идентификации** устанавливаются в диалоговом окне **Установки / пункт Градуировка, меню Метод**).

[Интегрирование](#)

[Распознавание](#)

[Окно идентификации](#)

[Ожидаемое время удерживания](#)

[Реперный компонент](#)

[Обычные компоненты](#)

[Критерий идентификации](#)

[Мертвое время](#)

8.2.1 Интегрирование

Процедура интегрирования служит для распознавания **пиков** на хроматографической кривой и для определения положения **базовой линии**.

Программа МультиХром включает встроенный автоматический алгоритм интегрирования, управляемый параметрами и функциями диалогового окна **Разметка** из **меню Метод**. Возможна также ручная разметка с помощью **редактора пиков**.

Встроенный алгоритм интегрирования основан на использовании первой производной (наклона). Чтобы решить, достаточна ли величина наклона, значение первой производной делится на величину **шума базовой линии** и результат сравнивается с некой пороговой величиной, которая для положительного и отрицательного наклонов может отличаться.

Специальная процедура **Предложить** может быть использована для подбора параметров разметки, обеспечивающих разметку, близкую к имеющемуся образцу.

См. также: [Основы работы системы](#),
[Идентификация пиков](#),
[Количественный расчет](#),
[События интегрирования](#)

Многоканальные хроматограммы:

Разметка на пики проводится по каналу, указанному в соответствующем поле диалогового окна **Разметка** из **меню Метод**. В большинстве случаев для разметки рекомендуется использовать синтетический канал "**total**".

Положения начала, вершины и конца пика принимаются одинаковыми для всех каналов **многоканальной хроматограммы**.

8.2.2 Распознавание

Данное диалоговое окно служит для настройки алгоритма **идентификации пиков**.

Число компонентов информация о числе компонентов в **таблице компонентов**.

Схема (распознавания):

Стандартная устанавливает распознавание реперных пиков по высотам, а других пиков - по временам удерживания

Нестандартная позволяет выбрать любую доступную комбинацию **параметров распознавания пиков**.

Параметры распознавания пиков:

Реперные пики выбор **критерия идентификации** для реперных компонентов;

Другие пики выбор критерия идентификации для других (обычных) компонентов;

Единицы

выбор **единиц удерживания**. Возможные варианты: Секунды, Минуты, Микролитры, Миллилитры, Точки измерений.

Распознать

позволяет скорректировать времена удерживания компонентов в соответствии с текущей хроматограммой. Вывод о необходимости корректировки можно сделать на основе двух нижних строк в этом диалоговом окне.

Первая дает информацию об имени компонента с максимальным отклонением от **ожидаемого времени удерживания** и величине этого отклонения, выраженной в долях **окна идентификации**.

Вторая строка дает значение усредненного по всем компонентам отклонения от ожидаемого времени удерживания, выраженное в %.

8.2.3 Окно идентификации

допускаемое отличие ожидаемого и реального времени удерживания, измеренное в % от величины **ожидаемого удерживания**;

8.2.4 Ожидаемое время удерживания

Для **реперного компонента** - это время его удерживания, взятое из *градуировочной* хроматограммы. Таким образом, реперные компоненты имеют абсолютную шкалу удерживания.

Обычные компоненты имеют скорректированное ожидаемое время удерживания, зависящее от реально полученных в *данной* хроматограмме времен удерживания реперных компонентов. Таким образом, обычные компоненты имеют относительную шкалу удерживания.

8.2.5 Реперный компонент

Реперный компонент

Характерный компонент, который может быть легко найден на хроматограмме. Обычно это отдельно стоящий или самый большой пик. Реперные компоненты используются для лучшей **идентификации пиков** для **обычных компонентов**. Использование реперных компонентов позволяет существенно повысить надежность распознавания пиков при дрейфе времени удерживания (за счет старения колонки, изменения температуры и т.д.). Для реперных компонентов используется абсолютную шкалу **ожидаемых времен удерживания**.

8.2.6 Обычные компоненты

Обычный компонент - это любой компонент, не являющийся **реперным**. Обычные компоненты используют относительную шкалу **ожидаемых времен удерживания** для **идентификации пиков**

8.2.7 Критерий идентификации

Показывает, по какому критерию выбрать пик, соответствующий данному компоненту. В любом случае рассматриваются только пики, попадающие в **окно идентификации** для данного компонента. Допустимые значения:

Время

выбирается пик, самый близкий по времени к **ожидаемому времени удерживания** компонента. При

наличии хотя бы одного реперного компонента ожидаемые времена **обычных компонентов** будут отличаться от указанных в **таблице компонентов**;

Площади	выбирается пик с наибольшей площадью;
Высоты	выбирается пик, наибольший по площади (значение по умолчанию для реперных компонентов);
Номера	выбирается пик с номером, равным номеру компонента в таблице компонентов ;
Индексы	выбирается пик, самый близкий по индексу удерживания . Не может использоваться для идентификации реперных пиков .

См. также: [Идентификация пиков](#)

8.2.8 Мертвое время

Мертвое время колонки - это время, необходимое подвижной фазе для того, чтобы пройти хроматографическую систему от инжектора до детектора. Используется при вычислении коэффициента емкости, линейной скорости и логарифмических индексов удерживания. Вместо величины мертвого времени часто используют величину **мертвого объема** колонки, однозначно связанную с первой, но не зависящая от скорости подвижной фазы.

Обычно за мертвое время принимается время удерживания "неудерживаемого" компонента. Способ вычисления мертвого объема колонки выбирается в диалоговом листе **Метод / Установки / Формулы**.

См. также:

8.3 Таблица компонентов

В **таблице компонентов** хранятся градуировочные данные обо всех анализируемых компонентах: имя, время удерживания, индекс удерживания, градуировочные коэффициенты, а также некоторая другая информация, необходимая для **идентификации** и количественного расчета.

Таблица компонентов создается на базе **градуировочной хроматограммы**, т.е. хроматограммы смеси известного состава, с известными, как правило, концентрациями. Для создания **таблицы компонентов** можно использовать данные из нескольких градуировочных хроматограмм, каждая из которых содержит информацию лишь о части интересующих компонентов.

В дальнейшем в **Таблицу компонентов** заносятся конечные результаты **градуировки** в виде градуировочных коэффициентов.

Для наглядности над **таблицей компонентов** расположен рисунок хроматограммы. При перемещении по **таблице компонентов** графический курсор устанавливается на пик текущего компонента.

Режим ввода **таблицы компонентов** выбирается через опцию **меню Метод / Градуировка / Компоненты**.

Таблица компонентов содержит следующие колонки:

Номер	порядковый номер строки в таблице компонентов (заполняется автоматически);
Пик	номер соответствующего пика хроматограммы;

Время	время удерживания компонента градуировочной хроматограммы. При вводе номера пика время удерживания вводится системой автоматически.
Окно, %	допустимое отличие ожидаемого и реального времени удерживания, выраженное в % от величины ожидаемого времени удерживания ;
Репер	индикатор реперного компонента (да/нет);
Имя	название компонента (не должно содержать пробелы). Все строки с пустым именем при завершении редактирования будут удалены из Таблицы компонентов ;
Группа	номер группы для данного компонента. Значение, введенное в это поле, модифицирует Отчет . При нулевом значении группы никакие действия не выполняются.
Индекс	индекс удерживания для компонентов с известными индексами (должен быть равен нулю, если неизвестен). Для расчета необходимо определить индексы хотя бы для двух компонентов. Остальные индексы будут рассчитаны с использованием линейной или логарифмической аппроксимации.
ФО	фактор отклика детектора (response factor) - коэффициент k1 градуировочной зависимости данного компонента. Если имеется достаточно градуировочных данных, программа вычислит значение фактора отклика , в противном случае в этой графе должна стоять единица.
min C и max C	минимальная и максимальная концентрации данного компонента в анализируемых смесях. При выходе концентрации за указанный диапазон в Таблице пиков в графе Тип данного компонента будет стоять знак [!].

Функциональные кнопки:

Доб.	добавляет новый компонент (пустую строку) в Таблицу компонентов
Удал.	удаляет текущий компонент из Таблицы компонентов
Распознавание>>	вызывает одноименное диалоговое окно для настройки алгоритма идентификации компонентов.
График>>	вызывает диалоговое окно для редактирования градуировочной зависимости по текущему компоненту
Концентрации>>	вызывает диалоговое окно для ввода таблицы концентраций
ОК	принимает все сделанные изменения, заканчивает редактирование <i>таблицы компонентов</i>
Отмена	Заканчивает редактирование Таблицы компонентов , отменяет все сделанные в текущем сеансе редактирования изменения

Установив время удерживания компонента равным нулю, можно создать т.н. **универсальный компонент**. Все параметры универсального компонента будут использованы для расчетов по всем неидентифицированным пикам хроматограммы.

См. также: [создание Таблицы компонентов](#)

[Создание Таблицы компонентов](#)

[Отклик детектора](#)

[Индексы удерживания](#)

[Response factor](#)

[Пересчитать](#)

[Единицы удерживания](#)

[Стандартный компонент](#)

[Специальный компонент](#)

[Universal component](#)

[Группы](#)

8.3.1 Создание Таблицы компонентов

Для создания **Таблицы компонентов** необходимо получить **градуировочную хроматограмму**, т.е. хроматограмму градуировочной пробы, содержащую все компоненты, которые будут в дальнейшем определяться в анализируемых смесях.

1. Выберите опцию **Метод / Градуировка / Компоненты**.

При этом в окне под хроматограммой появится **Таблица компонентов**, пока еще незаполненная. Если в загруженном методе уже имелась **Таблица компонентов**, ее можно стереть, выбрав опцию **Таблица / Удалить таблицу**.

2. С помощью мыши нажмите имеющуюся над таблицей кнопку **<Добавить>**. Можно действовать и помощью клавиатуры: выбрать команду **Таблица / Добавить компонент**. В таблице появится новая строка.

- В первый столбец новой строки введите **номер пика**, которому хотите дать имя. Нажмите клавишу [→] и во втором столбце появится его время удерживания.

- Введите **ширину окна** идентификации в колонку **«Окно%»**:
3-10% в зависимости от Вашей хроматографической системы.

- Введите имя компонента. **Компоненты без имени** будут исключены из **Таблицы компонентов** по окончании ее редактирования.

- Если необходимо, заполните остальные колонки для данного компонента:

Репер (да/нет) - признак реперных компонентов

Группа - номер группы, присвоенный данному компоненту. Данный параметр используется для групповой идентификации компонентов.

Индекс - индекс компонента. Для расчета индексов необходимо ввести индексы как минимум для двух компонентов.

ФО - фактор отклика. По умолчанию устанавливается равным 1.

3. Повторите указанные выше действия для каждого компонента, который Вы хотите добавить в **Таблицу компонентов**. Можно удалить текущую строку из таблицы компонентов, указав мышкой на кнопку **<Удал.>** или выбрав опцию **Таблица / Удалить компонент**.

4. Закройте **Таблицу компонентов**, указав мышкой на кнопку **<ОК>**, расположенную над таблицей. Если Вы не хотите вносить сделанные изменения в **Таблицу компонентов**, выберите кнопку **<Отмена>**.

5. Перезапишите метод (**Файл / Сохранить / Метод**) и хроматограмму (**Файл / Сохранить /**

Хроматограмму).

8.3.2 Отклик детектора

Откликом детектора для данного компонента является **площадь** или **высота** соответствующего **пика**, в зависимости от выбранной базы для расчетов. База выбирается в диалоговом окне **Метод / Градуировка / Графики**, изменением параметра **Отклик**.

8.3.3 Индексы удерживания

Любая хроматограмма имеет **первичную шкалу удерживания**, измеряемую в единицах времени или объема удерживания. Кроме того, может существовать и **вторичная шкала**, появляющаяся уже после идентификации пиков. Эта шкала называется **Индексом удерживания**. Типичным случаем являются **индексы Ковача** и **линейные индексы** в газовой хроматографии.

Кроме того, вместо индекса можно подставлять **температуру кипения**, **октановое число** или **молекулярную массу**, давая возможность дополнительных вычислений с этими величинами.

При вычислениях индекса используется время удерживания предыдущего и последующего пиков с известной величиной индекса. В случае отсутствия пиков с известными индексами по обе стороны от интересующего пика, программное обеспечение проводит экстраполяцию индексов.

Для получения более точных значений индексов удерживания необходимо использовать компоненты, служащие базой для используемой системы индексов. Например, в газовой хроматографии для определения индексов Ковача используются n-алканы, для системы индексов ECL - метиловые эфиры насыщенных жирных кислот и т.д. Если такие компоненты не содержатся в анализируемых смесях, их следует добавить. При этом их удобно использовать также в качестве внутренних стандартов.

Могут быть выбраны два различных метода интерполяции индекса, линейный или логарифмический (**индекс Ковача**):

Линейный индекс вычисляется по формуле:

$$I_i = I_n + (I_{n+1} - I_n) \cdot (t_i - t_n) / (t_{n+1} - t_n),$$

где:

I_i	индекс интересующего пика;
I_n, I_{n+1}	индексы предыдущего и последующего компонентов с известной величиной индекса, соответственно;
t_i	время удерживания интересующего пика;
t_n, t_{n+1}	времена удерживания пиков, соответствующее предыдущему и последующему компонентам с известными индексами.

Логарифмический индекс (Ковача) вычисляется по формуле:

$$I_i = I_n + (I_{n+1} - I_n) \cdot (\log(t'_i) - \log(t'_n)) / (\log(t'_{n+1}) - \log(t'_n)).$$

Если вместо индекса введено октановое число, то итог отражает октановое число анализируемого образца, если температура кипения - итог показывает температуру, при которой выкипает половина анализируемого вещества.

Программа **МультиХром** позволяет строить два типа шкал индексов удерживания:

Внутренний и **Внешний**.

Внутренняя шкала индексов предполагает, что компоненты, используемые для ее построения, присутствуют во всех анализируемых образцах (или добавлены в них). В этом случае для вычисления индексов используются реальные времена удерживания идентифицированных компонентов.

При построении **Внешней шкалы индексов** используются ожидаемые времена удерживания компонентов из градуировочной хроматограммы. При этом не требуется наличие опорных компонентов в анализируемых образцах, хотя точность вычисления индексов оказывается несколько ниже, чем при использовании внутренней шкалы.

8.3.4 Фактор отклика

Фактор отклика

Ввиду того, что **градуировочные зависимости** в большинстве случаев линейны, наиболее информативным градуировочным коэффициентом является K_1 (**фактор отклика**). Тем не менее, если выбрана нелинейная или не проходящая через начало координат градуировочная зависимость, все расчеты будут выполнены правильно, хотя в **Таблице компонентов** будет по-прежнему присутствовать только коэффициент K_1 (**фактор отклика** детектора).

Другие коэффициенты могут быть напечатаны через раздел отчета **Результаты градуировки** (См. [Опции отчета](#)).

8.3.5 Пересчитать

Данные, занесенные в **Таблицу компонентов** при ее создании, время от времени требуют обновления с целью скорректировать **дрейф времен удерживания**, коэффициентов отклика детектора и т.д. Периодичность обновления зависит от типа хроматографической системы, от стабильности ее работы в целом.

Для ручного обновления указанных параметров служит опция **Метод / Градуировка / Пересчитать**. Данная опция, наряду с обновлением градуировки, позволяет также выполнять некоторые полезные операции, в частности, обновлять по выбору:

Удержание

заменяет **ожидаемые времена удерживания** компонентов временами удерживания соответствующих пиков текущей хроматограммы. Данная операция позволяет скорректировать **дрейф времен удерживания** и должна выполняться до того, как произойдет нарушение правильности идентификации компонентов. Эту же операцию более удобно выполнять из диалогового листа **Метод / Градуировка / Распознавание**.

Индекс

заполняет поле **Индекс** для компонентов с нулевыми индексами.

Коэффициенты

пересчитывает все градуировочные коэффициенты для всех компонентов (реградуировка). Равнозначна операции **Обработка / Градуировать**, но действует только на текущий градуировочный уровень.

Коэфф.(остатка)

пересчитывает коэффициент для **универсального компонента**. Смысл этой операции - пересчитать коэффициент по данному компоненту так, чтобы нормировать сумму концентраций по всем найденным компонентам к введенной концентрации универсального (нулевого) компонента. Заявленная суммарная концентрация вводится в поле **Концентрация** в строку **Универсальный компонент** в столбце **Эта хр-ма**

При занесении точки на градуировочный уровень программа проверяет дрейф времен удерживания компонентов. Если для какого-либо компонента дрейф превысил половину

идентификационного окна, система предлагает провести автоматическую коррекцию времен удерживания, в соответствии с текущей хроматограммой.

8.3.6 Единицы удерживания

Единицы удерживания выбираются из ряда:

секунды,
минуты,
микролитры,
миллилитры,
число измерений.

Объемные единицы больше подходят для жидкостной хроматографии, а временные - для газовой. Этот параметр влияет также на величину площадей пиков: для временных единиц площадь измеряется в **ед.отклика · сек**, а для объемных единиц - в **ед.отклика · мкл**.

8.3.7 Стандартный компонент

Под стандартным компонентом имеют в виду:

- 1) компонент с известной концентрацией для расчета **относительных концентраций**; Стандартный компонент для расчетов концентраций выбирается в диалоговом окне **Опции отчета (Метод/Настройка отчета или Обработка/Выдать отчет)**
- 2) компонент, выбранный как стандартный в диалоговом **окне Компонент** из **меню Метод / Градуировка/Графики**. Используется в методах градуировки **Внутренний стандарт** или **Табличный. Стандартный компонент** для процедуры градуировки выбирается через опцию **Метод/Градуировка/Графики**.

Обычно один и тот же стандарт используется как для градуировки, так и для расчета концентраций, хотя это и необязательно.

Специальный компонент может иметь свой собственный стандарт, отличный от принятого по умолчанию. Объявить компонент специальным и назначить для него свой стандарт можно через опцию **Метод / Градуировка /Графики...**

8.3.8 Специальный компонент

Специальный компонент может использовать градуировочные параметры (база, канал, стандарт, формула), отличные от указанных в диалоговом окне **Метод/ Градуировка/ Графики**. Специальные компоненты маркируются значком [P] в **Таблице компонентов** в специальной графе **Тип** при выводе отчета. Графа **Тип** может быть включена и в **Таблицу пиков** при выборе **метода расчета Заказной**.

8.3.9 Универсальный компонент

Универсальный компонент

Программа **МультиХром** позволяет присвоить имя некоего **универсального компонента** всем неидентифицированным пикам. Для создания универсального компонента необходимо в градуировочной таблице создать строку с **временем удерживания, равным нулю**. Параметры этой строки будут использованы для идентификации и расчета для всех неопознанных пиков. При отсутствии этой строки все неопознанные пики будут исключены из отчета.

Не забудьте ввести имя для универсального компонента, в противном случае данная строка будет исключена из Таблицы компонентов!

8.3.10 Группы

Каждому компоненту в таблице компонентов может быть присвоена дополнительная характеристика - **номер группы**. По номеру группы компоненты могут объединяться в подмножества.

Для каждой **группы компонентов** создается дополнительная **таблица пиков**, в которую включены только пики, относящиеся к данной группе. Эти групповые отчеты следуют за сводным отчетом (содержащим информацию обо всех компонентах). Каждый из них содержит данные по одной группе.

В настоящей версии **МультиХром 1.5x** группы отличаются только номером и не могут иметь имена.

8.4 Таблица концентраций

Таблица концентраций содержит информацию о концентрациях всех компонентов, описанных в **Таблице компонентов**, на каждом из градуировочных уровней. При заполнении градуировочных уровней сюда также заносится информация о площадях (высотах) пиков, и объемах введенной пробы из соответствующих градуировочных хроматограмм.

Единицы наименование единиц концентрации, использованных в данном случае. Введенные единицы служат только для информации, их изменение не влияет на расчет значений концентраций компонентов.

Отображаемая величина поле, позволяющее выбрать из списка отображаемую в колонках **Таблицы концентраций** величину (концентрация, высота, площадь, объем).

Колонки таблицы концентраций:

Номер порядковый номер компонента

Название имя компонента, автоматически взятое из **Таблицы компонентов**

Эта хр-ма концентрации компонентов в текущей хроматограмме, рассчитанные из площадей (высот) пиков и градуировочных коэффициентов. Значения недоступны для редактирования.

Уровень 1, Уровень 2 ... концентрации компонентов в градуировочных хроматограммах, заявленные пользователем для соответствующего градуировочного уровня. В зависимости от выбора в поле **Отображаемая величина** может содержать также высоту или площадь пика, а также объем введенной пробы.

Кнопки:

<Добавить> добавляет новый уровень градуировки в **Таблицу концентраций**

<Удалить> удаляет текущий уровень градуировки (столбец таблицы, в котором расположен курсор) из **Таблицы концентраций**

<Заменить> заполняет текущий уровень информацией из текущей градуировочной хроматограммы. При окончании редактирования **Таблицы концентраций** будут пересчитаны все градуировочные коэффициенты.

- <Инфо>** вызов окна с дополнительными параметрами по всем градуировочным точкам
- <OK>** принимает все изменения, внесенные в **Таблицу концентраций**
- <Cancel>** отменяет все изменения, внесенные в **Таблицу концентраций** в текущем сеансе редактирования

См. также: [создание Таблицы концентраций](#)

[Создание Таблицы концентраций](#)

[Таблица концентраций: Добавить точку](#)

[Таблица концентраций: Инфо](#)

8.4.1 Создание Таблицы концентраций

Для создания **Таблицы концентраций**:

1. Получите хроматограмму градуировочной смеси.
1. Заполните **Таблицу компонентов**;
1. Откройте **Таблицу концентраций** (Метод / Градуировка... / Концентрации...). Вновь созданная таблица содержит два столбца: имен компонентов (**Название**) и их концентраций (**Эта хр-ма**), посчитанных исходя из градуировочных коэффициентов (берутся из **Таблицы компонентов**). Оба этих столбца недоступны для редактирования пользователем.
1. Нажмите кнопку **Добавить**. При этом в таблице появится новый столбец **Уровень 1**. Заполните его концентрациями компонентов в первой градуировочной пробе. Как правило, здесь используется та же проба, что и для получения **Таблицы компонентов**.
 1. Аналогично создайте и заполните для каждой градуировочной смеси, которую Вы будете использовать, по одному уровню градуировки. Если Вы намереваетесь сделать несколько анализов одной и той же пробы, необходимо создать по одному уровню на каждую хроматограмму образца.
 1. Перезапишите метод (**Хроматограмма / Сохранить метод как...**) и хроматограмму (**Хроматограмма / Записать...**).

Если уровень градуировки не содержит информацию о высоте или площади соответствующего пика, такой уровень считается пустым и не используется для расчетов по данному компоненту!

8.4.2 Таблица концентраций: Добавить точку

Создание градуировочной точки

номер новой градуировочной точки. Если какой-то уровень отсутствует (был удален), по умолчанию будет предложен именно его номер.

Одинаковые конц. для всех комп.

установка указанной концентрации для всех компонентов данного уровня.

Копировать концентрации точки

копирование концентрации с любого из существующих уровней на данный уровень

Градуировать сразу по рабочей хр-ме

установите флажок, чтобы использовать текущую хроматограмму для градуировки данного уровня сразу по окончании редактирования таблицы концентраций.

8.4.3 Таблица концентраций: Инфо

Диалоговое окно «[Общие данные градуировочных точек](#)» содержит для всех градуировочных уровней следующие дополнительные параметры, сведенные в таблицу:

Гр точка	наименование градуировочной точки. Возможные значения:
Эта хр-ма	значения параметров для текущей хроматограммы
Точка 1 ... Точка N	значения параметров для i-й градуировочной точки
Объем	объем пробы
Разведение	разведение образца перед анализом
Количество	количество взятого образца
Файл	имя файла. Для текущей хроматограммы дается полное имя файла (включая полный путь).

8.5 Градуировочный график (Компонент)

Данное диалоговое окно включает параметры, определяющие вид градуировочной зависимости по текущему компоненту, а также показывает график [градуировочной зависимости](#) и [градуировочные коэффициенты](#).

Здесь можно:

1. Посмотреть получившуюся градуировочную кривую по каждому из компонентов.
2. Изменить форму градуировочной кривой (тип аппроксимационной зависимости).
3. Исключить некоторые (выпадающие) точки из градуировочной кривой.
4. Установить для некоторых компонентов *специальные* (индивидуальные) градуировочные параметры.

Верхняя строчка над градуировочной кривой представляет собой ее аналитическое выражение в общем виде $Q = K_3 \cdot A^3 + K_2 \cdot A^2 + K_1 \cdot A + K_0$.

Ниже стоит значение среднего квадратичного отклонения (*RMS*), позволяющее оценить результаты аппроксимации.

Под графиком приведены коэффициенты градуировочной зависимости K_0 , K_1 , K_2 и K_3 .

Компонент	выбор текущего компонента из списка
Удерживание	удерживание текущего компонента
Концентрация	концентрация текущего компонента
Метод градуировки	выбор метода построения градуировки

Таблица уровней градуировки

Включает следующие колонки:

Точка	номер уровня градуировки для точки градуировочной
--------------	---

зависимости для текущего компонента.

Концентрация

концентрация текущего компонента в данной точке градуировочной зависимости.

Высота или площадь

высота или площадь пика компонента в данной точке градуировочной кривой, в зависимости от выбранной базы.

Файл

имя файла градуировочной хроматограммы, в котором хранятся данные для данной точки.

Использ.

индикатор, показывающий, использована ли данная точка при расчетах градуировочных коэффициентов для текущего компонента (**да/нет**). Исключение/включение точек производится с помощью кнопки **Использовать?**

Параметры специального компонента

Доступны только для **специальных компонентов**.

Спец.

столбец индикаторных кнопок (флажков), позволяющих сделать данный компонент *специальным* по идущим ниже параметрам.

Отклик

показывает, высота или площадь пика используются для расчетов для данного компонента.

Канал

выбор опорного канала, используемого для измерения площади или высоты пиков.

Формула

выбор вида **градуировочной зависимости**;

Вес

выражение для взвешивающего коэффициента, используемого для вычисления градуировочных коэффициентов. Значение по умолчанию равно 1.

Стандарт

имя стандартного компонента

Концентрация стандарта

значение концентрации стандартного компонента

Кнопки:

Использовать?

пересчитывает градуировочные коэффициенты для текущего компонента, исключив выбранную в **Таблице уровней** точку. Повторное нажатие опять учитывает исключенную точку в расчетах;

Пункты меню:

верхняя строка окна **Графики** содержит дополнительное меню

Занести в буфер

заносят график градуировочной зависимости текущего компонента в буфер обмена (Clipboard) для дальнейшего встраивания средствами Windows в различные документы.

Напечатать

выводит график градуировочной зависимости и градуировочные коэффициенты для текущего компонента на принтер.

Просмотр

предварительный просмотр градуировочного отчета на экране

[Градуировочная зависимость](#)

[Меню окна градуировочной зависимости](#)

[Одноточечная градуировка](#)

[Многоточечная градуировка](#)

[Уровень градуировки](#)

[Градуировочная кривая](#)

[Обозначения](#)

[Метод внутреннего стандарта](#)

[Абсолютная градуировка](#)

[Табличная градуировка](#)

[Относительные коэффициенты отклика](#)

8.5.1 Градуировочная зависимость

Градуировочная зависимость показывает зависимость **количества компонента** от **отклика детектора**

Имеется шесть видов градуировочных зависимостей:

$K1 \cdot R$	линейная зависимость, проходящая через начало координат, формула по умолчанию для всех компонентов, кроме специальных ;
$K1 \cdot R + K0$	линейная зависимость, не проходящая через начало координат;
$K2 \cdot R^2 + K1 \cdot R$	квадратичная зависимость, проходящая через начало координат;
$K2 \cdot R^2 + K1 \cdot R + K0$	квадратичная зависимость, не проходящая через начало координат;
$K3 \cdot R^3 + K2 \cdot R^2 + K1 \cdot R$	кубическая зависимость, проходящая через начало координат. Описывает S-образные градуировочные кривые;
$K3 \cdot R^3 + K2 \cdot R^2 + K1 \cdot R + K0$	кубическая зависимость, не проходящая через начало координат. Описывает S-образные градуировочные кривые;

См. также: [градуировка](#).

8.5.1.1 Меню окна градуировочной зависимости

Скопировать в буфер	заносят график градуировочной зависимости текущего компонента в буфер обмена (Clipboard) для дальнейшего встраивания средствами Windows в различные документы.
Печать	выводит график градуировочной зависимости и градуировочные коэффициенты для текущего компонента на принтер.
Просмотр	предварительный просмотр градуировочного отчета на экране

8.5.2 Одноточечная градуировка

В этом случае для построения **градуировки** компонента используется только один градуировочный образец, для каждого компонента на **градуировочной кривой** имеется только одна точка, её зависимость линейна и проходит через начало координат.

8.5.3 Многоточечная градуировка

Многоточечная **градуировка** означает, что для построения **градуировочной кривой** снимается несколько градуировочных хроматограмм. При этом градуировочная кривая для каждого компонента имеет несколько точек, может быть нелинейная и может не проходить через начало координат. Для вычисления градуировочных коэффициентов используется метод наименьших квадратов.

См. также: [уровень градуировки](#).

8.5.4 Уровень градуировки

Каждый уровень градуировки соответствует одному хроматографическому разделению (хроматограмме) и включает в себя такую информацию, как концентрация компонента, площадь или высота соответствующего пика, **приведенный объем пробы** и др. **для всех компонентов Таблицы компонентов**. На градуировочной зависимости компонента каждый уровень представляется точкой.

Если уровень градуировки больше нуля, данная хроматограмма считается **градуировочной**, концентрации компонентов в пробе считаются известными (они должны быть занесены в **Таблицу концентраций**), данные из нее будут использованы для расчета градуировочных коэффициентов.

При запуске хроматограммы ее градуировочный уровень считается равным нулю. Это означает, что полученные хроматографические данные по окончании хроматограммы будут использованы программой для расчета концентраций компонентов анализируемой смеси, исходя из имеющихся в *Таблице компонентов* градуировочных коэффициентов. Полученную хроматограмму можно сделать градуировочной, занеся данные из нее на любой отличный от нуля уровень

Перед проведением процедуры градуировки рекомендуется заранее создать *многоуровневую градуировочную таблицу (Таблицу концентраций)* и внести концентрации всех компонентов для всех запланированных уровней градуировки. Хотя, по желанию пользователя, можно создавать новый уровень после каждого градуировочного разделения.

См. также:

[градуировка](#)

[многоточечная градуировка](#)

[одноточечная градуировка](#).

8.5.5 Градуировочная кривая

Градуировочная кривая - это график зависимости **количества** компонента от **отклика** детектора. Используется для определения величины **расчетного количества** компонента.

Градуировочная кривая описывается **градуировочной формулой**. Для расчета коэффициентов градуировочной зависимости используется **метод наименьших квадратов**.

В случае метода **табличной градуировки** для расчета градуировочных кривых всех остальных компонентов используется градуировочная кривая стандартного компонента:

$$W_i(R) = K_{1i} \cdot W_s(R)$$

8.5.6 Обозначения

При описании алгоритмов градуировки и количественного расчета использованы следующие обозначения:

R	величина отклика детектора (площадь или высота, в зависимости от установки, выбранной в диалоговом окне Параметры градуировки)
V	объем введенной пробы
D	коэффициент разведения (указывает, в какое количество раз первоначальный раствор пробы был разведен перед вводом в хроматограф)
V'=V / D	скорректированный (приведенный) объем введенной пробы. Коррекция проводится с учетом коэффициента разведения
C	концентрация компонента в первоначальном растворе (перед разведением)
Q=C · V'	введенное количество компонента (используемое для построения градуировочной зависимости)
t	время удерживания компонента
t₀	мертвое время (время удерживания абсолютно не удерживаемого компонента)
t'=t - t₀	скорректированное (чистое) время удерживания
L	длина колонки
v=L / t₀	линейная скорость потока
W(R)=K₂·R²+K₁·R+K₀	градуировочная зависимость количества вещества в пике от отклика детектора. В случае линейной градуировочной зависимости, проходящей через начало координат, только коэффициент K₁ отличается от нуля и таким образом Q=W(R)=K₁·R . Концентрация компонента в анализируемой смеси вычисляется по формуле C=W(R) / V' .
RMS(Q, R)	процедура, используемая для вычисления коэффициентов регрессии градуировочной зависимости W(R) с использованием метода наименьших квадратов. Процедура в качестве исходных данных использует набор градуировочных точек (количество Q - отклик R) и тип выбранной градуировочной зависимости W(R) . На выходе процедура дает коэффициенты K₂, K₁ и K₀ градуировочной зависимости W(R) , используемой для вычисления количества компонента в пике Q = W(R) .

Используемые индексы:

j	обозначает j-й градуировочный уровень,
s	обозначает стандартный компонент,
i	обозначает номер компонента

RMS обозначает применение **метода наименьших квадратов** для вычисления коэффициентов градуировочной зависимости, **Q_{ij}** - количество введенного i-го компонента в j-й градуировочной хроматограмме.

8.5.7 Метод внутреннего стандарта

Метод используется для увеличения точности вычислений на основе имеющейся у пользователя дополнительной информации о концентрации в пробе некоторого компонента, называемого **внутренним стандартом**. Метод внутреннего стандарта использует известное значение концентрации стандарта в пробе и полученное в данном разделении значение площади (высоты) пика стандарта для коррекции концентраций всех остальных компонентов.

Эта априорная информация может быть использована как на этапе градуировки (**градуировка методом Внутреннего стандарта**), так и на этапе расчета концентраций (**расчет методом Внутреннего стандарта**) для коррекции погрешностей дозирования и учета потерь при пробоподготовке.

Использование метода внутреннего стандарта как на этапе построения градуировочной кривой, так и для расчета концентраций существенно улучшает *воспроизводимость* анализа и точность определения *относительных* концентраций и коэффициентов.

Для расчета абсолютных концентраций необходимо получить абсолютную градуировочную кривую для внутреннего стандарта методом **абсолютной градуировки**.

Если градуировочная кривая для внутреннего стандарта неизвестна, принимается линейная зависимость с концентрационным коэффициентом, равным 1. При этом для компонентов могут быть вычислены только относительные коэффициенты отклика.

Следует различать собственно **количественный расчет** методом внутреннего стандарта и **градуировку** методом внутреннего стандарта.

Количественный расчет методом внутреннего стандарта проводится для вычисления *относительных концентраций* компонентов в образце и служит для уменьшения погрешностей при подготовке и вводе проб. Концентрации компонентов при этом корректируются относительно концентрации выбранного **стандартного компонента** (концентрация стандарта вводится в поле "*Концентрация станд.*" диалогового окна **Опции отчета**).

Концентрация i -го компонента вычисляется по формуле:

$$C_i = C_s \cdot W_i(R_i) / W_s(R_s)$$

Если имеется абсолютная градуировочная зависимость для стандартного компонента, то можно вычислить абсолютные концентрации всех компонентов пробы.

Если градуировочный график стандарта неизвестен, то принимается, что он носит линейный характер, проходит через начало координат и **Фактор отклика** для него равен единице. Это приводит к тому, что система ведет себя аналогично "классической" градуировке методом **Внутреннего стандарта** и рассчитывает относительные коэффициенты отклика детектора. Если зависимость линейна, этот подход обеспечивает правильные величины **Относительной концентрации, процентов Относительной концентрации и Нормализованной концентрации**. Абсолютная концентрация в этом случае не имеет смысла и вычислена быть не может.

Градуировка методом внутреннего стандарта - это средство для получения более точной градуировочной кривой.

При этом количества всех компонентов, кроме стандартного, определяются выражением:

$$Q_i = C_i \cdot W_s(R_s) / C_s$$

Градуировочные кривые $W_i(R)$ строятся в координатах (Q', R) :

$$W_i(R) = RMS(Q'_{ij}, R_{ij})$$

Если известна абсолютная градуировочная кривая стандартного компонента $W_s(R)$, градуировочные кривые всех остальных компонентов пригодны для расчета всех типов концентраций.

Использование методов внутреннего стандарта как для градуировки, так и для расчетов, предполагает, что все компоненты смеси ведут себя аналогично выбранному стандартному компоненту. Для компонентов с сильно отличными химическими, физическими или хроматографическими свойствами рекомендуется назначать индивидуальные стандарты (см: [Специальные компоненты](#)).

При этом точность определения абсолютных концентраций определяется во многом точностью получения абсолютной градуировочной кривой для внутреннего стандарта.

См. также: [градуировка](#);
[обозначения](#).

8.5.8 Абсолютная градуировка

Метод **абсолютной градуировки** (называемая также градуировкой методом **внешнего стандарта**) - это основной, базовый способ градуировки.

Градуировка: строится зависимость высоты или площади соответствующего пика от количества введенного в пробу компонента. При этом количество вычисляется как произведение объявленной концентрации стандарта на приведенный объем пробы:

$$Q = C \cdot V' = C \cdot V / D$$

Процедура построения градуировочной зависимости $W_i(R)$ может быть описана формулой

$$W_i(R) = \text{RMS}(Q_{ij}, R_{ij}),$$

Расчет: сырое количество компонента вычисляется как отношение количества (найденного по полученной ранее градуировочной кривой) к приведенному объему введенной пробы, т.е. представляет собой концентрацию компонента в анализируемом образце

$$C_i = W_i(R_i) / V'.$$

См. также: [градуировка](#);
[обозначения](#)

8.5.9 Табличная градуировка

Табличный метод градуировки является упрощенным вариантом 6.

Фактор относительного отклика одного из компонентов (**стандартного компонента**) принимается равным единице и этот компонент градуируется с использованием метода **внешнего стандарта**:

$$W_s(R) = \text{RMS}(C_{sj} \cdot V'_j, R_{sj}).$$

Другие компоненты не градуируются. Градуировочная кривая i -го компонента рассчитывается умножением кривой для стандартного компонента на заданный в таблице компонентов **фактор отклика** (коэффициент K_{1i}):

$$W_i(R_i) = K_{1i} \cdot W_s(R_i)$$

Относительные коэффициенты отклика компонентов могут быть получены расчетным путем, из литературных данных или методом **внутреннего стандарта**.

Градуировочная кривая стандартного компонента может быть **нелинейной**. В этом случае градуировочные кривые всех остальных компонентов будут **подобны**.

Если абсолютная градуировочная кривая стандартного компонента неизвестна, возможен расчет только относительных концентраций.

8.5.9.1 Относительные коэффициенты отклика

Относительные коэффициенты отклика детектора определяются по отношению к выбранному стандартному компоненту. Для стандартного компонента относительный коэффициент отклика принимается равным 1. Как правило, они требуются при использовании метода градуировки **Табличный**.

Относительные коэффициенты отклика могут быть взяты **из литературных данных** или получены **экспериментально**.

Для некоторых детекторов они могут быть **рассчитаны**, исходя из справочных данных или эмпирических зависимостей.

Для экспериментального получения относительных коэффициентов отклика детектора используется **метод внутреннего стандарта**. При этом принимается, что градуировочный график стандарта носит линейный характер, проходит через начало координат и **Фактор отклика** для него равен единице.

Рекомендуемый порядок расчета относительных коэффициентов.

1. Получите абсолютную градуировочную зависимость для всех интересующих компонентов, используя соответствующие градуировочные смеси.
2. В диалоговом окне **Параметры градуировки (Метод / Градуировка... / Графики)** поставьте метод градуировки **Внутренний стандарт**. Выберите компонент - стандарт для градуировки.
3. В **Таблице компонентов (Метод / Градуировка... / Компоненты)** в колонку **ФО** для стандартного компонента введите значение 1.
4. Выберите пункт меню **Метод / Градуировка... / Пересчитать**. Все абсолютные градуировочные коэффициенты будут пересчитаны в относительные.
5. Запомните результаты, записав метод на диск.

8.6 Импорт градуировки

Данная опция считывает **Таблицу компонентов** и **параметры градуировки** с диска, из файла, указанного пользователем. Служит для передачи градуировочных данных из метода в метод.

См. также: [Прочитать из метода](#)

8.7 Экспорт градуировки

Данная опция записывает [Таблицу компонентов](#) и [параметры градуировки](#) на диск в файл, имя которого определяет пользователь.

Служит для передачи градуировочных данных между методами и хроматограммами.

См. также: [Записать в метод](#)

8.8 Записать в метод

Записывает результаты [градуировки](#) из текущей [хроматограммы](#) в текущий [метод](#) (т.е. в метод, которым была получена данная хроматограмма). Данная опция предназначена для обновления [градуировки](#) в методе.

8.9 Прочитать из метода

Читает результаты [градуировки](#) из текущего [метода](#) в текущую [хроматограмму](#). Данная опция предназначена для переноса [градуировки](#) из [метода](#) в [хроматограмму](#).

8.10 Количественный расчет

Количественный расчет

Количественный расчет - это процедура, дающая ответ на вопрос: "Какова концентрация компонентов в исходном образце?". Для её проведения необходимо предварительно выполнить другую процедуру, называемую [градуировка](#).

Если градуировка проведена правильно, для каждого компонента можно узнать величину, называемую [сырое количество](#), которая либо является концентрацией компонента в тестируемой смеси, либо пропорциональна ей.

[ФО](#)

[Приведенный объем пробы](#)

[Сырое количество](#)

[Расчетное количество](#)

[Количество](#)

8.10.1 ФО

Ввиду того, что градуировочные кривые в большинстве случаев линейны, наиболее разумным градуировочным коэффициентом для этих случаев является **K1 (фактор отклика)**. Другие коэффициенты могут быть напечатаны через раздел отчета [Результаты градуировки](#).

Итог для столбца равен средневзвешенному фактору отклика с весом, равным отклику (площади или высоте). Этот итог может использоваться как коэффициент для универсального компонента.

См. также: [Градуировочная формула](#)

8.10.2 Приведенный объем пробы

Это отношение **введенного объема пробы** к величине **разбавления** образца. Равен объему исходного образца без его дополнительного разбавления перед анализом.

$$V' = V / D$$

8.10.3 Сырое количество

Это концентрация компонента, вычисленная как отношение **расчетного количества** к **приведенному объему** пробы.

$$C = W(R) / V'$$

8.10.4 Расчетное количество

Расчетное количество W(R) определяется из **градуировочной кривой**. Используется для вычисления **сырого количества** компонента.

8.10.5 Количество

Количество компонента в градуировочной смеси определяется как произведение концентрации компонента **C** на **приведенный объем пробы V'**.

$$Q = C \cdot V'$$

для **градуировки** методами **абсолютной градуировки** или **табличным**

$$Q = C \cdot W_s(R_s) / C_s$$

для градуировки методом **внутреннего стандарта**,

где **W_s(R_s)** - **расчётное количество** стандартного компонента в текущем разделении, а

C_s - известная концентрация стандартного компонента в смеси.

9 Очереди

[Что такое очереди](#)

[Работа с файлами очередей](#)

[Редактор очередей: режим редактирования](#)

[Редактор очередей: режим исполнения](#)

[Таблица очереди](#)

9.1 Очередь-определение

Очередь - это последовательность методов, которые будут запускаться и выполняться автоматически. Очереди служат для автоматизации работы с автосамплером и(или) серийными анализами.

В состав одной очереди могут входить разные методы. Кроме того, можно одновременно запустить несколько независимых (т.е. не использующих общие ресурсы) очередей

Последовательность анализов в очереди задается в форме **Таблицы очереди**.

Операции по редактированию и управлению очередями выполняются отдельным приложением

в составе пакета **МультиХром 1.5х** - **Редактором очередей**.

Очереди хранятся на диске в виде «*.que» файлов и могут быть вызваны опцией меню **Файл / Открыть / Очередь**.

9.2 Редактор очередей

Редактор очередей является отдельной программой **Quebar.exe**, входящей в пакет **МультиХром 1.5х**, предназначенной для автоматизации процесса получения или повторной обработки серии хроматограмм.

Для получения новых хроматограмм формируются **очереди** последовательно запускаемых методов, а для всех видов обработки ранее полученных данных - **пакеты** хроматограмм.

Редактор очередей запускается из программы **МультиХром 1.5х** при открытии файла очереди, а также при редактировании таблицы пакета в режиме пакетного пересчета хроматограмм. Возможен также автономный запуск программы при задании специальных параметров в командной строке (ключей «/b» и «/q», соответственно).

Очереди и пакеты представляются в виде таблиц, включающих в себя список методов (или хроматограмм), а также некоторые дополнительные параметры и данные.

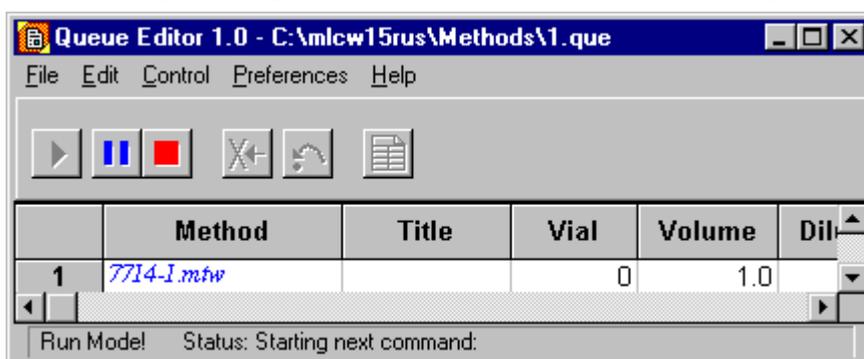
См. также:

[Редактор очередей: режим редактирования](#)

[Редактор очередей: исполнение очереди](#)

[Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограмм](#)

9.2.1 Редактор очередей: исполнение очереди



В режиме исполнения очереди система пиктографического и текстового меню модифицируется (по сравнению с режимом редактирования):

Меню Файл	файловые операции
Меню Редактор	операции редактирования таблицы очереди. Доступны только в режиме редактирования.
Меню Управление	функции управления очередью. Доступны только в режиме исполнения очереди.
Меню Настройки	общие настройки Редактора очередей
Меню Справка	вызов справочной системы.

9.2.1.1 Отменить (режим исполнения)



Отменить (режим исполнения)

Данная команда завершает текущую хроматограмму, снимает отметку о ее выполнении в **таблице очереди** и приостанавливает запуск следующей хроматограммы.

9.2.1.2 Приостановить очередь (режим исполнения)



Приостановить очередь (режим исполнения)

Данная команда приостанавливает исполнение очереди (текущая хроматограмма нормально завершается).

9.2.1.3 Сбросить



Сбросить

Данная команда удаляет информацию о выполненных анализах (устанавливает флаг **Выполнено=0** во всех строках таблицы очереди). После этой операции очередь может быть запущена сначала. Команда доступна только после (при)остановки очереди.

9.2.1.4 Отменить последний анализ



Отменить последний анализ

Данная команда останавливает текущую хроматограмму, снимает отметку о выполнении последней хроматограммы (значение в ячейке **Выполнено** уменьшается на 1). Хроматограмма на диск не записывается.

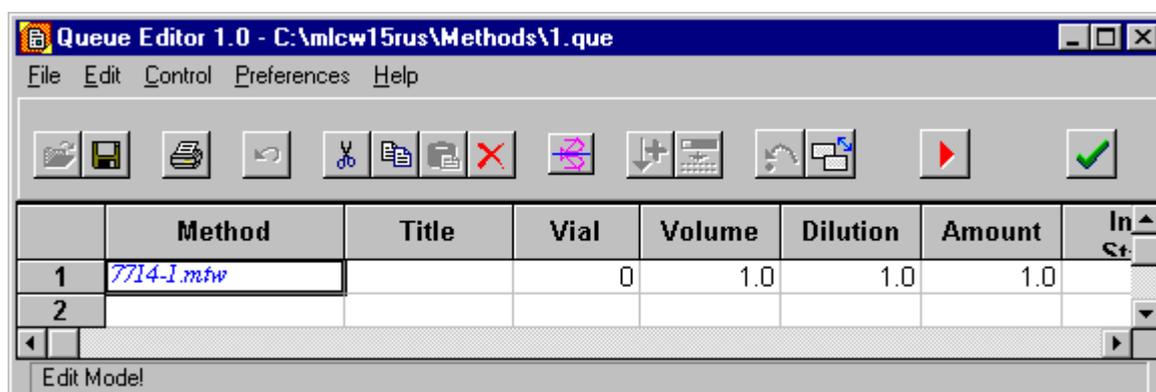
9.2.1.5 Режим редактирования



Режим редактирования

Команда перехода в **режим редактирования таблицы очереди** (доступна только после приостановки очереди).

9.2.2 Редактор очередей: редактирование таблицы очереди



В режиме редактирования таблицы очереди активны следующие пункты меню:

<u>Меню Файл</u>	файловые операции
<u>Меню Редактор</u>	операции редактирования таблицы очереди. Меню доступно в режиме редактирования очереди или пакета хроматограмм.
<u>Меню Управление</u>	функции управления очередью. Меню доступно только в режиме исполнения очереди.
<u>Меню Настройки</u>	общие настройки Редактора очередей Меню доступно в режиме редактирования и исполнения очереди.
<u>Меню Справка</u>	вызов справочной системы.

9.2.2.1 Запустить очередь (режим исполнения)



▶ Запустить очередь (режим исполнения)

Данная команда запускает **очередь** после приостановки или отмены исполнения **очереди** (запускается первая из невыполненных **хроматограмм**).

9.2.2.2 Редактор очередей: Меню Настройки

Всегда сверху

Устанавливает размещение окна редактора поверх всех остальных окон, открытых на экране

Взаимодействие

Открывает окно для настройки поведения программы при возникновении ошибок. Опция доступна только в режиме редактирования.

Полный останов при ошибке

остановка очереди сразу после возникновения ошибки, с выдачей соответствующего сообщения.

Останов очереди при остановке анализа

Активизировать при ответе

В случае ошибки:

Не отменять последний анализ

Отменить последний анализ

Запрашивать

9.2.2.3 Редактор очередей: Меню Управление

В **режиме редактирования** таблицы большинство команд этого меню заблокировано (кроме команд «Показать рабочее окно» и «Запустить очередь»)

Все функции доступны только в режиме **исполнения очереди**.



▶ Запустить очередь

запуск очереди на выполнение или повторный запуск после приостановки или отмены исполнения очереди (запускается первая из невыполненных хроматограмм). Переход в [режим исполнения очереди](#).



Приостановить очередь приостанавливает выполнение очереди (текущая хроматограмма нормально завершается).



Отменить завершает текущую хроматограмму, снимает отметку о ее выполнении в таблице очереди и приостанавливает запуск следующей.



Отменить последний анализ снимает отметку о выполнении последней хроматограммы (значение в ячейке «Done» уменьшается на 1)



Режим редактора переход в режим редактирования таблицы очереди.

Показать рабочее окно

переключение в окно основной программы **МультиХром 1.5x** (без остановки выполнения очереди). Для возвращения в окно редактора очередей можно использовать стандартную функцию Windows ([Alt]+[Tab]) или щелкнуть мышкой по значку редактора очередей на панели задач.

9.2.2.4 Редактор очередей: Меню Редактор



Вернуть отменяет последнее действие.



Вырезать строки удаляет строки с выделенными ячейками и помещает их в буфер.



Скопировать строки копирует строки с выделенными ячейками и помещает их в буфер.



Вставить строки вставляет строки из буфера над строкой, в которой установлен курсор.



Удалить строки удаляет строки с выделенными ячейками.



Продублировать строки дублирует строки с выделенными ячейками.



Увеличить по порядку увеличивает на 1 значения в выделенных ячейках столбца (сверху вниз). Применимо для столбцов **Title**, **Vial**, **Level**, **Sample Info 1**, **Sample Info 2**. При отсутствии какого-либо значения в столбцах **Vial** и **Level** ввод значений начинается с 0. В остальных столбцах процедура выполняется только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке.



Размножить вводит в выделенные ячейки значения из соответствующих ячеек верхней строки.



Сбросить удаляет информацию о выполненных анализах (устанавливает флаг **Выполнено**=0 во всех строках таблицы очереди). После этой операции очередь может быть

запущена сначала.



Изменить систему позволяет выбрать новый файл метода, который будет использоваться для сбора и обработки данных. Метод заменяется для всего выделенного диапазона строк.

9.2.2.5 Сохранить и выйти



Сохранить и выйти из РО

Сохранение текущей очереди с последующим выходом из **Редактора очередей**.

9.2.2.6 Запустить очередь



Запустить очередь

Запуск очереди на выполнение или повторный запуск после приостановки или отмены исполнения очереди (запускается первая из невыполненных хроматограмм).

Переход в [режим исполнения очереди](#).

9.2.2.7 Изменить систему



Изменить систему

Данная функция позволяет выбрать новый файл **метода**, который будет использоваться для сбора и обработки данных. **Метод** заменяется для всего выделенного диапазона строк.

9.2.2.8 Сбросить



Сбросить

Удаление информации о выполненных анализах (устанавливает флаг **Выполнено=0** во всех строках таблицы очереди). После этой операции **очередь** может быть запущена сначала.

9.2.2.9 Размножить



Размножить

Копирование значения верхней ячейки во все ячейки выделенного диапазона.

Функция применима для любых столбцов **таблицы очереди** и может применяться одновременно для нескольких столбцов.

9.2.2.10 Увеличить по порядку



Последовательное увеличение значений в выделенных ячейках столбца (сверху вниз) на единицу. Применимо для столбцов **Title**, **Vial**, **Level**, **Sample Info 1**, **Sample Info 2**.

При отсутствии какого-либо значения в столбцах **Vial** и **Level** ввод значений начинается с «0».

Для текстовых значений процедура выполняется только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке. При этом изменяется не только последняя цифра, но и все число, на которое оканчивается строка.

9.2.2.11 Продублировать строки



Дублирование выделенных строк. Допускается выделение одной или нескольких строк.

9.2.2.12 Удалить строки



Удаление выделенных строк с выделенными ячейками (достаточно выделить любые ячейки в нужных строках).

9.2.2.13 Вставить строки



Вставка строки из буфера обмена над строкой, в которой установлен курсор.

9.2.2.14 Скопировать строки



Копирование выделенных строк (достаточно выделить любые ячейки нужных строк) в буфер обмена.

9.2.2.15 Вырезать строки



Удаление строки с выделенными ячейками и копирование их в буфер обмена.

9.2.2.16 Вернуть



Вернуть

Отмена последнего действия при редактировании таблицы очереди.

9.2.2.17 Печать таблицы очереди



Печать таблицы очереди

Открывает окно **Печать** для вывода таблицы очереди на принтер.

9.2.2.18 Сохранить очередь



Сохранить очередь

Сохранение текущей **очереди**.

9.2.2.19 Открыть очередь



Открыть очередь

Выбор файла ранее созданной очереди.

Команда доступна только при автономном запуске программы **Редактор очередей!**

9.2.2.20 Редактор очередей: меню Файл



Новый создание новой очереди.

Команда доступна только при автономном запуске программы

Редактор очередей

Открыть выбор файла ранее созданной очереди.

Команда доступна только при автономном запуске программы

Редактор очередей



Сохранить сохраняет текущую очередь.

Сохранить как сохраняет текущую очередь под новым именем.

Команда доступна только при автономном запуске программы

Редактор очередей



Сохранить и выйти сохраняет текущую очередь с последующим выходом из Редактора очередей.



Печать Открывает окно **Печать** для вывода таблицы очереди на принтер.

Выход Выход из программы **Редактор очередей**. Аналогичное действие происходит при нажатии **[Alt]+[F4]**.

9.2.2.21 Редактор очередей: меню Справка

Редактор очередей: меню Справка

Вызов справочной системы по **Редактору очередей**.

9.2.3 Сохранить и выйти



Сохранение текущей очереди с последующим выходом из **Редактора очередей**.

9.3 Таблица очереди

Таблица очереди задает последовательность анализов (**методов**), которые будут выполняться автоматически.

Информация из Таблицы очереди изменяет соответствующие значения полей используемого Метода.

Таблица очереди содержит следующие столбцы:

Метод

файл метода, использующийся в данном анализе для сбора и обработки данных. В разных строках могут использоваться различные методы. Имя метода можно изменить командой **Редактор/Изменить метод** (пиктограмма ) или редактировать вручную.

Все файлы методов должны храниться в основной директории **Methods!**

Заголовок

заголовок будущей хроматограммы. Автоматически заносится в **паспорт** хроматограммы при запуске анализа.

Флакон

номер позиции флакона в автосамплере. Значение автоматически заносится в **паспорт** хроматограммы при запуске анализа; не используется в версии **МультиХром 1.5x** для управления автосамплером.

Объем

объем пробы в микролитрах. Значение автоматически заносится в **паспорт** хроматограммы при запуске анализа. Значение по умолчанию - **1** [мкл].

Разведение

произведенное разведение пробы до анализа. Значение автоматически заносится в **паспорт** хроматограммы при запуске анализа. Значение по умолчанию - **1**.

Количество

количество вещества. Используется при концентрировании пробы как величина, обратная **разведению**, а также в качестве нормирующего множителя (в этом случае может иметь любую размерность). Значение по умолчанию - **1**.

Кол-во внутр.станд.

концентрация вещества, используемого в качестве внутреннего стандарта в данном анализе. Значение по умолчанию - 100. Единицы размерности указываются в **Таблице концентраций**

Гр.точка

уровень градуировки для данного анализа. Нулевое значение уровня соответствует нормальному, а больше или равное 1 - градуировочному разделению. Если соответствующий уровень существует в **Таблице концентраций** используемого метода, при завершении хроматограммы его данные будут автоматически обновлены.

Иньекции

Число повторных инъекций одной и той же пробы. По умолчанию устанавливается значение **1** (для градуировочных хроматограмм другие значения не имеют смысла).

Выполнено	Признак исполнения. До запуска хроматограммы значение равно 0 . При запуске каждой последующей хроматограммы увеличивается на 1. Максимальное значение равно величине, установленной в ячейке Инъекции . Не редактируется.
Описание 1	Информация о пробе (поле Инфо 1 паспорта хроматограммы, до 256 знаков).
Описание 2	Информация о пробе (поле Инфо 1 паспорта хроматограммы, до 256 знаков).
См. также:	Работа с очередями Обработка пакетов хроматограмм

9.4 Работа с очередями

Существует возможность автоматического запуска серии последовательных хроматограмм (очереди) без вмешательства оператора. Для этого необходимо заполнить **таблицу Очереди**.

1. Выберите пункт меню **Файл/Открыть/Очередь**. Если создается новая серия хроматограмм, введите имя файла (если требуется перезапустить старую очередь, выберите имя файла из списка) и нажмите **[Enter]**. Будет запущено специальное приложение **Редактор очередей**
2. Создайте и отредактируйте **таблицу очереди**.
3. Для запуска очереди на исполнение нажмите кнопку  (или выберите пункт меню **Управление/Запустить очередь**).
4. После запуска **Редактор очередей** переходит в **режим исполнения очереди**. Каждая новая хроматограмма открывается в своем **окне хроматограммы**. По ее окончании происходит обработка данных в соответствии с используемым **Методом** и **хроматограмма** всегда записывается на диск.

См. также: [Очередь](#)

9.5 Очередь: файловые операции

[Открытие очередей](#)

[Сохранение очередей](#)

9.5.1 Очереди: сохранение

Очередь может быть сохранена на диске, используя опции **Редактора очередей**. При этом можно использовать как пиктографическое, так и текстовое меню:



Файл/Сохранить очередь.

сохранение очереди без закрытия **редактора**



Файл/Сохранить и выйти

сохранение очереди и выход из **редактора очередей**.

Файл/Сохранить как

сохранение очереди под новым именем
(данная опция доступна только если **Редактор очередей** запущен как отдельное приложение)

9.5.2 Очередь: открытие файла

Файлы **очереди** открываются в основной программе через опцию **Файл/Открыть/Очередь**.

Для открытия уже существующих файлов просто выберите требуемый файл и нажмите **Открыть**. По умолчанию файлы очередей хранятся в директории **METHODS**.

Чтобы создать новую очередь, введите новое имя файла и нажмите **Открыть**.

После открытия появится окно **редактора очередей**, содержащее **таблицу очереди**.

10 Пакет хроматограмм: общее

[Что такое пакет хроматограмм](#)

[Создание пакета хроматограмм](#)

[Работа с файлами пакетов](#)

[Редактор пакета хроматограмм](#)

10.1 Пакеты хроматограмм

Пакет хроматограмм - это множество полученных ранее хроматограмм, над которыми требуется выполнить ряд одних и тех же операций (т.е. провести **пересчет хроматограмм**).

Как правило, в пакет объединяют хроматограммы, полученные одним **методом**. Если пакетный файл содержит хроматограммы, полученные разными **методами**, при пересчете они будут обработаны одним и тем же **методом**. При этом ответственность за достоверность получаемых результатов лежит на операторе.

Пакеты хроматограмм хранятся на диске в виде файлов с расширением «*.bar». По умолчанию файлы хранятся в той же директории, что и обрабатываемые хроматограммы.

Пакеты хроматограмм используются для следующих целей:

переразметка хроматограмм

обновление градуировки

изменение паспорта

изменение внешнего вида

вывод результатов анализа (отчет)

См. также:

[Создание пакета хроматограмм](#)

[Пакетный пересчет](#)

[Редактирование пакета хроматограмм](#)

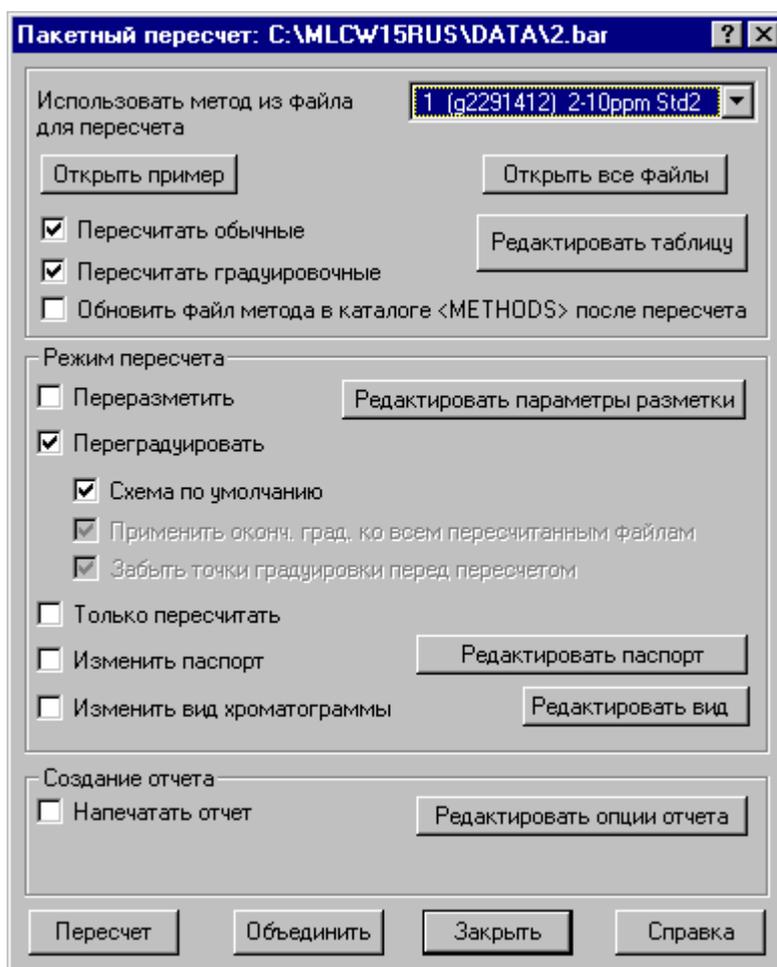
10.2 Пакетный пересчет: открыть

Данная функция открывает файл **пакета хроматограмм**.

Может быть выбран любой файл из расположенных на диске. Файлы пакетов имеют расширение «*.BAR» и по умолчанию хранятся в той же директории, что и входящие в **пакет хроматограммы**.

10.3 Окно «Пакетный пересчет»

Данное окно предназначено для управления процессом пересчета **пакета хроматограмм**.



[Общие установки](#)

[Режим пересчета](#)

[Создание отчета](#)

Кнопки:

<Пересчет>

Начинает пересчет в соответствии со сделанными установками

<Объединить>

Объединение всех хроматограмм пакета в одну [многоканальную](#)

[хроматограмму](#).

<Закреть>

Закрытие окна «Пакетный пересчет».

См. также:

[Как создать пакет](#)

[Редактирование пакета хроматограмм](#)

10.3.1 Пакетный пересчет: общие установки

Использовать метод из файла для пересчета

выбор хроматограммы, метод которой будет использован для пересчета всего пакета. Хроматограмма-прототип выбирается в списочном поле справа.

<Открыть пример>

открытие хроматограммы, метод которой выбран в качестве прототипа. Данная функция удобна для просмотра и, возможно, коррекции метода из хроматограммы-прототипа.

<Открыть все файлы>

открытие всех хроматограмм пакета. После пересчета изменения будут внесены как в открытые хроматограммы, так и в их файлы на диске.

<Редактировать таблицу>

открытие **Редактора очереди** для изменения таблицы пакета хроматограмм

Пересчитать обычные

установите флажок, если требуется пересчитать обычные хроматограммы (анализ проб неизвестного состава)

Пересчитать градуировочные

установите флажок, если требуется пересчитать градуировочные хроматограммы (обновление градуировки). Можно выбрать оба типа хроматограмм.

Обновить файл метода в каталоге <METHODS> после пересчета

обновляет файл метода после пересчета пакета

10.3.1.1 Использовать метод из файла для пересчета

Использовать метод из файла для пересчета

Выбор хроматограммы, метод которой будет использован для пересчета всего пакета.

Хроматограмма-прототип выбирается в списочном поле.

10.3.1.2 Открыть пример

Открыть пример

Открытие **хроматограммы**, метод которой выбран в качестве прототипа. Данная функция удобна для просмотра и коррекции метода из хроматограммы-прототипа.

10.3.1.2.1 Редактировать таблицу

Редактировать таблицу

Открытие [Редактора очередей](#) для изменения таблицы [пакета хроматограмм](#)

10.3.1.3 Открыть все файлы

Открыть все файлы

Открытие всех хроматограмм [пакета](#). После пересчета изменения будут внесены как в открытые хроматограммы, так и в их файлы на диске.

10.3.1.4 Пересчитать обычные

Пересчитать обычные

Установите флажок, если требуется пересчитать обычные хроматограммы (анализ проб неизвестного состава)

10.3.1.5 Пересчитать градуировочные

Пересчитать градуировочные

Установите флажок, если требуется пересчитать только [градуировочные хроматограммы](#) (обновление градуировки). Можно выбрать обычные и градуировочные хроматограммы одновременно.

10.3.1.6 Обновить файл метода после пересчета

Обновить файл метода в каталоге <METHODS>после пересчета

Обновление файла метода после пересчета пакета

10.3.2 Пакетный пересчет: режим пересчета

Переразметить производит переразметку хроматограмм данного пакета. При запуске пересчета для редактирования будет вызвано диалоговое окно [Параметры разметки](#)

<Редактировать параметры разметки>

Вызов окна [Параметры разметки](#) для редактирования параметров и событий интегрирования.

Переградуировать. производит переградуировку на основе градуировочных хроматограмм и в соответствии с содержащимися в методе хроматограммы-прототипа градуировочными данными и установками. Результирующая градуировка прикладывается ко всем обычным хроматограммам, если установлен флажок [Пересчитать обычные](#)

Схема по умолчанию выбор схемы по умолчанию для процесса переградуировки. В этом случае устанавливаются два следующих флажка.

Забывать точки градуировки перед пересчетом строит градуировку заново, полностью удалив результаты прежней. Если флажок сброшен, старая градуировка будет сохранена, но отдельные градуировочные точки будут обновлены в соответствии с установками [таблицы пакета](#) хроматограмм.

Приложить оконч. град. ко всем пересчитанным файлам обновляет градуировку во всех пересчитанных хроматограммах на

конечную. Если флажок сброшен, все градуировочные хроматограммы будут содержать т.н. "историческую" градуировку, обычные хроматограммы будут содержать окончательную градуировку, если установлен флажок **Пересчитать обычные**

Только пересчитать пересчет хроматограмм с использованием параметров **Объем, Разведение, Количество, Количество внутреннего стандарта** из таблицы пакета хроматограмм.

При установке этого флажка автоматически сбрасываются флажки **Переразметить** и **Переградуировать**

Операция **Только пересчитать** обычно проводится автоматически, если установлены флажки **Переразметить** или **Переградуировать**.

Изменить паспорт данная опция позволяет изменить паспорт в пересчитываемых хроматограммах пакета. Для этого требуется щелкнуть по кнопке **<Редактировать паспорт>** и внести необходимые изменения в паспорт хроматограммы. Паспорт берется из выбранной хроматограммы-прототипа. В результате пересчета будут изменены только подвевнувшиеся редактированию поля **паспорта**.

Изменить вид хроматограммы

данная опция позволяет изменить внешний вид пересчитываемых хроматограмм пакета.

Параметры для пересчета можно установить с помощью кнопки **<Редактировать вид>**

10.3.2.1 Переразметить

Переразметить

Установите данный флажок для переразметки хроматограмм данного **пакета**. При запуске пересчета будет вызвано диалоговое окно **Параметры разметки** для редактирования параметров.

10.3.2.2 Редактировать параметры разметки

Редактировать параметры разметки

Вызов окна **Параметры разметки** для редактирования параметров и событий интегрирования.

10.3.2.3 Переградуировать

Переградуировать

Производится переградуировка на основе градуировочных хроматограмм и в соответствии с содержащимися в методе хроматограммы-прототипа градуировочными данными и установками. Результирующая градуировка прикладывается ко всем обычным хроматограммам, если установлен флажок **Пересчитать обычные**

Схема по умолчанию выбор схемы по умолчанию для процесса переградуировки. В этом случае устанавливаются два следующих флажка.

Забить точки градуировки перед пересчетом

строит градуировку заново, полностью удалив результаты прежней. Если флажок сброшен, старая градуировка будет сохранена, но отдельные градуировочные точки будут обновлены в соответствии с установками **таблицы пакета хроматограмм**.

Приложить оконч. град. ко всем пересчитанным файлам

обновляет градуировку во всех пересчитанных хроматограммах на

конечную. Если флажок сброшен, все градуировочные хроматограммы будут содержать т.н. "историческую" градуировку, обычные хроматограммы будут содержать окончательную градуировку, если установлен флажок «Пересчитать обычные»

10.3.2.4 Только пересчитать

Только пересчитать

Пересчет хроматограмм с использованием параметров **Объем, Разведение, Количество, Количество внутреннего стандарта**» из таблицы пакета хроматограмм.

При установке этого флажка автоматически сбрасываются флажки **Переразметить** и **Переградуировать**

Операция «**Только пересчитать**» обычно проводится автоматически, если установлены флажки **Переразметить** или **Переградуировать**.

10.3.2.5 Изменить паспорт

Изменить паспорт

Данная опция позволяет изменить **паспорт** в пересчитываемых хроматограммах пакета. Для этого требуется щелкнуть по кнопке **<Редактировать паспорт>** и внести необходимые изменения в **паспорт** хроматограммы. **Паспорт** берется из выбранной хроматограммы-прототипа.

В результате пересчета будут изменены только подвегнущиеся редактированию поля **паспорта**.

10.3.2.6 Редактировать паспорт

Редактировать паспорт

Данная кнопка вызывает для редактирования сокращенный вариант **паспорта хроматограммы**. В данном режиме имеет смысл редактировать только пустые поля **паспорта**. В результате пересчета будут изменены только подвегнущиеся редактированию поля.

10.3.2.7 Изменить вид хроматограммы

Изменить вид хроматограммы

Данная опция позволяет изменить внешний вид пересчитываемых хроматограмм **пакета**. Параметры для пересчета можно установить с помощью кнопки **<Редактировать вид>**

10.3.2.8 Редактировать вид

Редактировать вид

Данная кнопка вызывает для редактирования диалоговое окно **Вид**

10.3.3 Пересчет

Пересчет

Начинает пересчет **пакета** хроматограмм в соответствии со сделанными установками.

10.3.4 Объединить

Объединить

Объединение всех хроматограмм пакета в одну **многоканальную хроматограмму**.

10.3.5 Закрывать пакетный пересчет

Закрывать пакетный пересчет

Закрытие окна **Пакетный пересчет**.

10.4 Пакеты хроматограмм: работа с файлами

[Создание пакета хроматограмм](#)

[Как открыть пакет хроматограмм](#)

[Как сохранить пакет хроматограмм](#)

10.4.1 Последний пакет

Открывает для пересчета **пакет** хроматограмм, редактировавшийся **последним**. Данная функция используется, если требуется временно закрыть текущий **пакет** (окно [Пакетный пересчет](#)).

10.4.2 Как открыть пакет хроматограмм

Файл/Открыть/Пакетный пересчет

этот пункт главного меню позволяет загрузить любой из существующих на диске **пакетов хроматограмм**.

Файлы пакетов хроматограмм хранятся в той же директории, что и входящие в пакет хроматограммы и имеют расширение «*.BAR».



Файл/Открыть/Последний пакет

эта иконка или пункт главного меню позволяет открыть для пересчета последний редактировавшийся **пакет** хроматограмм.

Данная функция используется, если требуется временно закрыть текущий пакет (окно [Пакетный пересчет](#)).

Если редактор очередей запущен **автономно** (отдельно от основной программы mlcw15.exe) в режиме редактирования пакетов хроматограмм, для загрузки пакета с диска можно воспользоваться пунктом меню редактора **Файл/Открыть**. Для автономного запуска редактора в режиме редактирования пакетов хроматограмм в командной строке используется ключ **«/b»**.

10.4.3 Пакеты хроматограмм: создание

Хранящиеся на диске хроматограммы могут быть пересчитаны за одну операцию помощью **Пакетов хроматограмм**.

Для создания **пакета хроматограмм** откройте диалоговое окно "**Прочитать хроматограмму**" (**Файл / Открыть / Хроматограмму** или иконка ) , выберите с помощью мыши требуемые хроматограммы и щелкните по кнопке **<В пакет>**. На запрос системы введите имя очереди и нажмите **<ОК>**. Если такой файл уже существует на диске, будет выдано предупреждение.

После открытия очереди появится диалоговое окно **Пакетный пересчет**

В одну очередь можно включать хроматограммы, полученные разными методами, однако все хроматограммы будут пересчитаны лишь одним методом!

В пакет можно объединить только хроматограммы, хранящиеся в одной директории!

10.4.4 Как сохранить пакет хроматограмм

Сохранение **пакета хроматограмм** выполняется из меню **Файл редактора очередей**.



Файл/Сохранить и выйти

сохранение изменений текущего пакета в файл **«.BAR»**, закрытие редактора и возвращение в окно **Пакетный пересчет**.



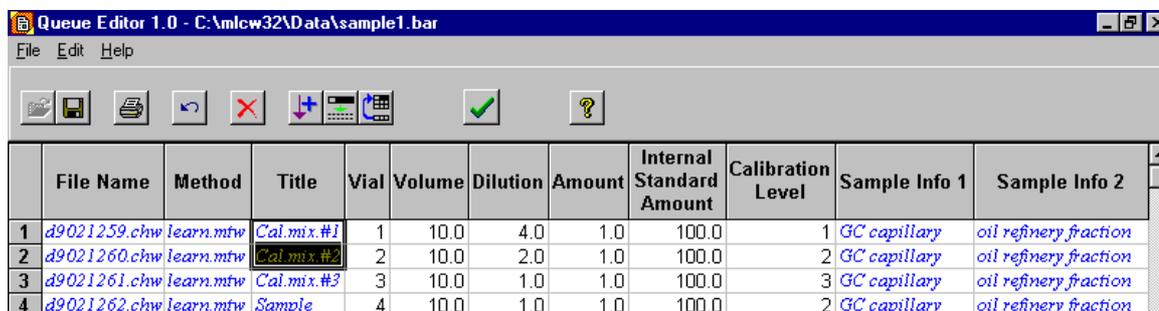
Файл/Сохранить

сохранение текущего пакета в файл **«.BAR»** без закрытия программы редактора.

Файл/Сохранить как

сохранение текущего пакета хроматограмм под новым именем. Данный пункт меню доступен только в **автономном** режиме работы редактора.

10.5 Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограмм



	File Name	Method	Title	Vial	Volume	Dilution	Amount	Internal Standard Amount	Calibration Level	Sample Info 1	Sample Info 2
1	d9021259.chw	learn.mtw	Cal.mix.#1	1	10.0	4.0	1.0	100.0	1	GC capillary	oil refinery fraction
2	d9021260.chw	learn.mtw	Cal.mix.#2	2	10.0	2.0	1.0	100.0	2	GC capillary	oil refinery fraction
3	d9021261.chw	learn.mtw	Cal.mix.#3	3	10.0	1.0	1.0	100.0	3	GC capillary	oil refinery fraction
4	d9021262.chw	learn.mtw	Sample	4	10.0	1.0	1.0	100.0	2	GC capillary	oil refinery fraction

Для редактирование таблицы пакета хроматограмм используется специальное приложение - **Редактор очередей**, запускаемое в режиме редактирования пакета.

В режиме редактирования **таблицы пакета хроматограмм** активны следующие пункты меню:

Меню Файл

файловые операции

Меню Редактор

операции редактирования **таблицы очереди**.
Меню доступно в режиме редактирования очереди или **пакета хроматограмм**.

Меню Справка

вызов контекстно-чувствительной **справочной системы**.

10.5.1 Пакетный пересчет: таблица пакета хроматограмм

Таблица пакета хроматограмм задает список файлов хроматограмм, которые будут пересчитаны автоматически, а также все необходимые для этого параметры.

Таблица пакета хроматограмм содержит следующие столбцы (к сожалению, в данной версии используются английские названия столбцов):

File name	имя файла хроматограммы
Method	файл метода, который использовался для сбора и обработки данных. В разных строках могут использоваться различные методы.
Title	заголовок хроматограммы. Заносится в паспорт хроматограммы при пересчете.
Vial	номер позиции флакона в автосамплере. Значение заносится в паспорт хроматограммы при пересчете.
Volume	объем пробы в микролитрах. Значение заносится в паспорт хроматограммы при пересчете. Значение по умолчанию - 1 [мкл].
Dilution	произведенное разведение пробы до анализа. Значение заносится в паспорт хроматограммы при пересчете. Значение по умолчанию - 1.
Amount	количество вещества. Используется при концентрировании пробы как величина, обратная разведению, а также в качестве нормирующего множителя (в этом случае может иметь любую размерность). Значение по умолчанию - 1.
Internal standard amount	концентрация вещества, используемого в качестве внутреннего стандарта в данном анализе. Значение по умолчанию - 100. Единицы размерности указываются в Таблице концентраций
Level	уровень градуировки для данного анализа. Нулевое значение уровня соответствует нормальному, а больше или равное 1 - градуировочному разделению. Если соответствующий уровень существует в Таблице концентраций используемого метода, при завершении хроматограммы его данные будут автоматически обновлены.
Sample info 1	Информация о пробе (поле Инфо 1 паспорта хроматограммы, до 256 знаков).
Sample info 2	Информация о пробе (поле Инфо 1 паспорта хроматограммы, до 256 знаков).

10.5.2 Редактор пакета: меню Файл

	Открыть	выбор файла ранее созданного пакета хроматограмм. Команда доступна только при автономном запуске программы «Quebar»
	Сохранить	сохраняет текущий пакет хроматограмм.
	Сохранить как	сохраняет текущий пакет хроматограмм под новым именем. Команда доступна только при автономном запуске программы «Quebar»
	Сохранить и выйти	сохраняет текущий пакет хроматограмм с последующим выходом из Редактора очередей .
	Печать	Открывает окно Печать для вывода таблицы очереди на принтер.
	Выход	Выход из программы Редактор очередей . Аналогичное действие происходит при нажатии [Alt]+[F4] .

10.5.3 Редактор пакета: меню Редактор

	Вернуть	отменяет последнее действие.
	Удалить строки	удаляет строки с выделенными ячейками.
	Увеличить по порядку	увеличивает на 1 значения в выделенных ячейках столбца (сверху вниз). Применимо для столбцов Title, Vial, Level, Sample Info 1, Sample Info 2 . При отсутствии какого-либо значения в столбцах Vial и Level ввод значений начинается с 0 . В остальных столбцах процедура выполняется только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке.
	Размножить	вводит в выделенные ячейки значения из соответствующих ячеек верхней строки.
	Переставить строки	меняет местами первую и последнюю строки из выделенного диапазона.
	Сохранить и выйти	сохраняет сделанные изменения, выходит из редактора очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет .

10.6 Пакетный пересчет: отчет

Напечатать отчет	выводит отчет по каждой хроматограмме очереди, в соответствии с установками в диалоговом окне Опции отчета использованного метода. Флажки Пересчитать обычные и Пересчитать
-------------------------	--

градуировочные позволяют напечатать отчет по выбранной группе хроматограмм.

Параметры отчетов устанавливаются с помощью кнопки

[<Редактировать опции отчета>](#)

11 Многоканальная хроматограмма

В некоторых случаях хроматографический детектор измеряет не одну, а несколько величин. Например, УФ детектор с диодной матрицей, быстрый сканирующий УФ-детектор для ВЭЖХ и т.д.

В ряде случаев два и более разных детекторов могут работать одновременно. Типичные примеры - последовательное включение катарометра и пламенно-ионизационного детекторов в ГЖХ, или ультрафиолетового детектора и рефрактометра (или детектора по радиоактивности) в ВЭЖХ.

В этих случаях система **МультиХром** использует концепцию **многоканальных хроматограмм**. Программное обеспечение реализует полный набор алгоритмов для корректной обработки таких данных при разметке хроматограмм, идентификации и расчете концентраций компонентов. Наиболее полно преимущества **многоканальных хроматограмм** проявляются при использовании **модуля спектрального факторного анализа**.

Особенности обработки **многоканальных хроматограмм**, если таковые есть, обсуждаются в конце каждой темы. Тематиками, характерными только для многоканальных хроматограмм, являются **сдвиг**, **канал total** и **спектральный анализ**.

11.1 Каналы

Диалоговое окно **Каналы** содержит набор параметров, описывающий работу входов **АЦП**.

В программе **МультиХром** имеется две **таблицы описания каналов**. Одна является составной частью метода, а другая - интерфейса АЦП. В обоих случаях вид таблицы каналов одинаков.

Первый способ дает доступ ко всем параметрам таблицы каналов и является **глобальным**, сделанные установки будут использованы для всех последующих хроматограмм и методов при их перезапуске. Второй способ - **локальный**, сделанные установки действуют только внутри данной хроматограммы. При перезапуске метода будут взята конфигурация из **таблицы каналов интерфейса**.

Для редактирования **таблицы каналов метода**, нужно выбрать лист **Каналы**. При этом возможны следующие операции:

- 1) **скорректировать сдвиг** между каналами полученной хроматограммы;
- 2) после окончания хроматограммы **изменить единицы измерения** по оси ординат (например, с милливольт на о.е.), изменить названия каналов, и т.д..
- 3) **удалить** какие-либо каналы из полученной хроматограммы

Основным параметром в таблице каналов метода является **номер канала** АЦП (графа **Вход**). В момент запуска метода остальные параметры берутся из **таблицы каналов интерфейса**, доступной из диалогового окна **Настройка АЦП** (меню **Настройка / Интерфейс / Настройка>>**).

Изменения в таблице описания каналов метода действуют только для текущей хроматограммы и могут быть сделаны только после ее окончания. Для изменения числа каналов в **методе** (перед запуском) служит диалоговое окно **Настройка сбора данных**.

При необходимости сделать изменения, касающиеся всех будущих разделений, следует

редактировать **таблицу описания каналов** из диалогового окна [Настройка АЦП](#).

11.1.1 Таблица описания каналов

Имя	имя канала, появляется на рисунке хроматограммы при ее запуске. Обычно содержит имя детектора, длину волны и т.д.
Единицы	определяемые пользователем единицы измерения той физической величины, которую измеряет детектор.
Вход	Номер входа АЦП, принимающего требуемый аналоговый сигнал.
Минимум	минимум линейного диапазона АЦП или присоединенного к нему прибора, в единицах преобразования АЦП (битах). Используется для контроля условия переполнения.
Нуль	величина отклика АЦП в единицах преобразования, при нулевом сигнале на его входе. Используется при настройке устаревших типов АЦП, при проведении пуско-наладочных работ.
Максимум	верхний предел линейного диапазона АЦП или присоединенного к нему прибора, в единицах преобразования АЦП (битах). Используется для контроля условия переполнения.
Диапазон	величина входного сигнала на верхнем пределе линейного диапазона АЦП, в задаваемых пользователем Единицах. Диапазон = (Максимум - Нуль)·Чувствительность.
Чувствительность	вес одного разряда АЦП, в заданных пользователем единицах.
Шум	оценка величины шума по каналу, в единицах преобразования АЦП (битах).
Сдвиг	величина сдвига канала относительно опорного (имеет значение только для многоканальных хроматограмм).

Не рекомендуется изменять параметры **таблицы каналов** без необходимости, так как это может нарушить работоспособность системы.

11.1.2 Опорный канал

При расчете концентраций компонентов по данным **многоканальных хроматограмм** используется сигнал какого-либо одного канала, который называется **опорным**.

Опорный канал многоканальной хроматограммы - это канал, используемый для **расчета концентраций** компонентов и **градуировки**.

Опорный канал является общим для всех компонентов хроматограммы, кроме **специальных**.

В качестве **опорного** рекомендуется выбирать тот канал, для которого пик текущего компонента имеет максимальное отношение сигнал/шум. Для разных компонентов такие

каналы могут не совпадать, в этом случае **опорный канал** для отдельных компонентов может быть задан как **локальный** параметр в окне [Графики](#).

При этом разметка должна быть произведена таким образом, чтобы на хроматограмме присутствовали пики всех компонентов (если ни на одном из каналов не присутствуют все пики, для разметки рекомендуется выбрать **суммарный канал** в окне [Параметры разметки](#))

11.1.3 Сдвиг каналов

Если Вы используете только одноканальную конфигурацию, можно пропустить данную тему.

Есть два случая, в которых требуется учет временных сдвигов каналов.

Во-первых, когда данные принимаются от разных детекторов, соединенных последовательно. В этом случае необходимо скорректировать запаздывание между откликами детекторов, возникшее из-за существования "мертвого объема" между ними. Типичные примеры - последовательное включение катарометра и пламенно-ионизационного детекторов в газовой хроматографии, спектрофотометрического и рефрактометрического детекторов в жидкостной хроматографии.

Другой случай - сканирующий УФ детектор, где измерения в разных каналах разнесены во времени, например, хроматограф "Милихром". Спектральный детектор этого хроматографа производит измерения на разных длинах волн в циклическом режиме со сдвигом во времени. В этом случае все измерения приводятся к среднему времени цикла с помощью параболической интерполяции. Эта операция существенно повышает стабильность спектра по хроматографическому пику.

Величина сдвига хранится в [таблице описания каналов](#). Перед вычислением канала **Total** происходит коррекция сдвига.

См. также: [Многоканальная хроматограмма](#)

11.1.4 Канал Total

Сводный канал (или **суммарный канал**) доступен только для [многоканальных хроматограмм](#)

Сводный канал является суперпозицией других каналов многоканальной хроматограммы и формируется либо как **сумма отношений сигнал/шум** по всем каналам, либо как **сумма откликов** по всем каналам.

Сводный канал можно сделать доступным на рисунке хроматограммы через опцию [меню Вид / Канал](#).

Сводный канал рекомендуется использовать для разметки многоканальной хроматограммы, желательно после проведения коррекции [сдвига каналов](#).

Можно использовать его также для идентификации компонентов и расчета концентраций. В этом случае следует формировать сводный канал как сумму откликов каналов.

Метод формирования сводного канала определяется в диалоговом окне [Метод / Установки / Формулы](#).

11.2 Спектральный анализ

Данная функция позволяет провести **факторный анализ многоканальной хроматограммы**.
Анализируется участок хроматограммы, находящийся в **окне хроматограммы**.

[Факторный анализ: выбор ранга](#)

[Факторный анализ: выбор канала](#)

[Факторный анализ: результаты](#)

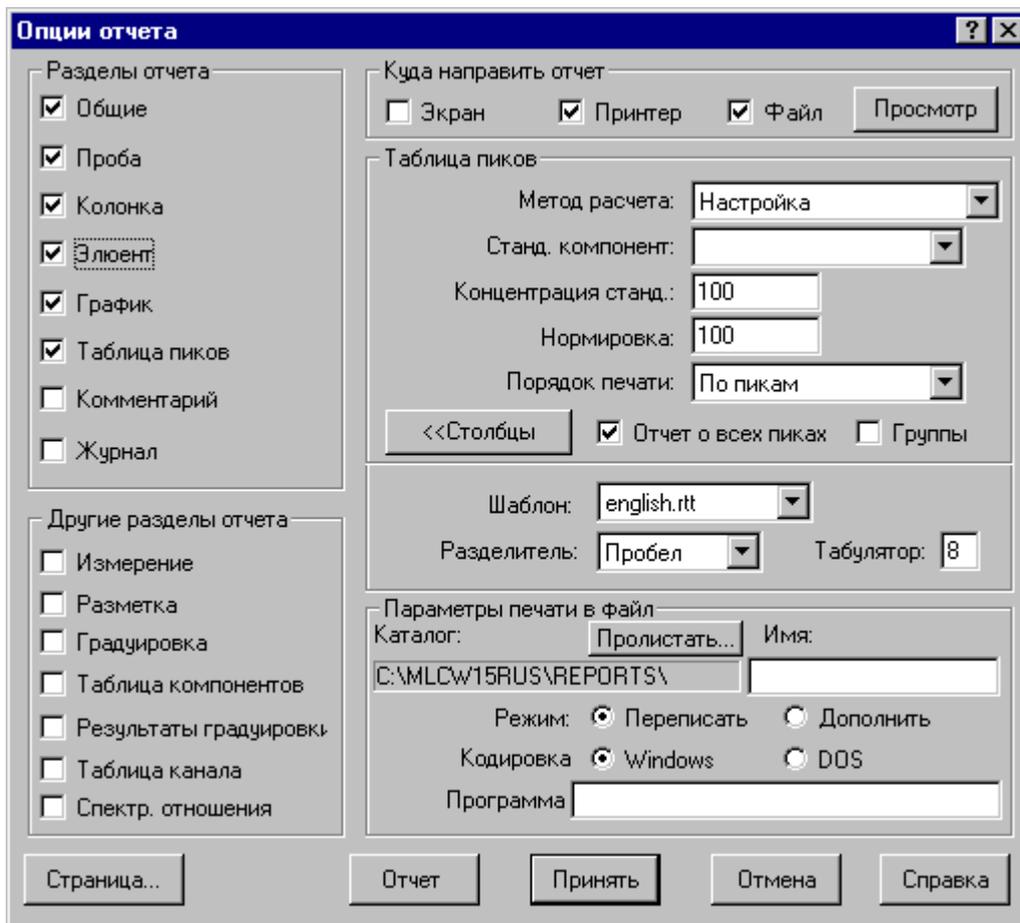
11.2.1 Факторный анализ: выбор ранга

11.2.2 Факторный анализ: выбор канала

11.2.3 Факторный анализ: результаты

12 Отчет

Данное диалоговое окно доступно через пункты меню **Обработка / Выдать отчет** или **Метод / Настройка отчета**, а также иконку  пиктографического меню



Диалоговое окно **Опции отчета** разделено на нескольких полей - областей окна, каждое из которых содержит некоторые функции и опции, сгруппированные по назначению.

Разделы отчета

В левой части окна приведен список составных частей отчета. Отмеченные мышкой части будут включены в отчет.

Другие разделы отчета

Дополнительные разделы, которые могут быть включены в отчет

Куда направить отчет

поле, определяющее устройство для вывода. Можно выбирать несколько устройств вывода одновременно. Сюда же по назначению относится группа установок **Параметры печати в файл**.

Таблица пиков

поле, содержащее набор параметров, определяющих структуру **таблицы пиков** в отчете.

Шаблоны и разделители

выбирается ***.rtt файл**, содержащий все заголовки отчета на определенном языке

Разделитель

тип разделителя, используемого для разделения колонок таблиц при выводе отчета

Параметры печати в файл

параметры печати в файл становятся доступными, если отчет

направляется в файл.

Кнопки:

<Отчет>	принимает все установки и изменения и выдает отчет.
<Принять>	принимает все установки и выходит из диалогового окна
<Просмотр>	предварительный просмотр отчета на экране (как будет выглядеть отчет при печати на принтере)
<Отмена>	отменяет все сделанные изменения и выходит из диалогового окна
<Страница>	позволяет редактировать параметры страницы, если отчет выводится на принтер
<Столбцы>	при выборе метода расчета Настройка

12.1 Разделы отчета

Данная область диалогового окна **Опции отчета** содержит список разделов, которые могут быть выборочно включены в отчет.

- Общее** общая информация из паспорта хроматограммы о времени запуска анализа, имени хроматограммы, имени оператора, имени файла и метода, и т.д.
- Проба** информация о пробе (описание пробы, объем, разведение и т.д.)
- Колонка** информация о колонке (описание сорбента, размеры колонки, размер частиц сорбента, мертвое время колонки, пористость сорбента)
- Элюент** информация об элюенте (описание элюента, скорость, температура, рабочее давление)
- График** включает в отчет график хроматограммы. При выводе отчета на экран график не печатается. При выводе отчета на принтер хроматограмма печатается в полном соответствии с ее видом в окне. При выводе отчета в файл график печатается в файл **.wmf** формата (Windows metafile), с тем же именем, что и файл текстового отчета.
- Таблица пиков** включает в отчет **Таблицу пиков**. (**Таблица пиков** содержит основные результаты анализа). Если какие-либо компоненты в **Таблице компонентов** объединены в группы, будут напечатаны также групповые таблицы пиков.
- Комментарий** включает в отчет дополнительное описание анализа в свободной форме. Комментарий заполняется в **Паспорте хроматограммы**.
- Журнал** включает в отчет **Журнал метода** и **Журнал данных**.

12.2 Заголовок отчета

Типичный заголовок отчета зависит от опций, выбранных в диалоговом окне [Опции отчета](#) из меню **Метод**.

12.3 Дополнительные разделы

В данное поле сгруппированы редко используемые **разделы отчета**, включаемые в отчет как дополнительная информация.

- Измерение** параметры настройки процесса приема данных, установленные в диалоговом окне [Измерение](#)
- Разметка** параметры настройки процесса интегрирования хроматограммы, установленные в диалоговом окне [Параметры разметки](#)
- Градуировка** параметры градуировки и идентификации
- Табл. компонентов** **таблица компонентов**
- Рез-ты градуир.** градуировочные коэффициенты K0, K1, K2 и стандартное отклонение для всех компонентов. Градуировочный график по каждому компоненту можно распечатать из диалогового окна [Графики](#)
- Таблица каналов** описание каналов АЦП, используемого для приема хроматографических данных. Кроме того, для каждого канала приводится величина шума и дрейфа базовой линии, величина среднеквадратичного отклонения и амплитудное значение сигнала за время данной хроматограммы (выраженные в дискретах АЦП и в выбранных физических единицах отклика по каналам)
- Спектр.отношения** относительные отклики по всем каналам хроматограммы (за единицу принимается отклик опорного канала, выбранного в диалоговом окне [Компоненты](#)). Спектральные отношения приводятся для всех пиков, вне зависимости от того, идентифицированы они или нет. В случае **многоканальных хроматограмм** спектральные отношения представляют дополнительную информацию для идентификации компонентов.

12.3.1 Таблица пиков

Таблица пиков представляет результаты качественного и количественного определения анализируемой пробы и содержит для всех идентифицированных компонентов анализируемой смеси такие параметры как номер пика на хроматограмме, высота или площадь, концентрация и т.д. Количество и тип включаемых в **Таблицу пиков** столбцов определяется использованным [Методом расчета](#) концентраций.

12.3.1.1 Опции отчета: Таблица пиков

Метод расчета: _____ выбор метода расчета концентраций компонентов.

Станд.компонент: _____ выбор стандартного компонента

Концентрация станд.: _____ концентрация стандартного компонента

Нормировка: _____ величина, на которую нормируется сумма концентраций компонентов в **Таблице пиков** при расчетах методами **Нормализация** и **Внутренняя нормализация**. По

умолчанию действует значение 100 (%).

Порядок печати:

порядок строк в таблице пиков:

- 1) по пикам; неидентифицированные (соответствующие универсальному компоненту) пики присутствуют, пропущенные компоненты -нет
- 2) по компонентам; сумма концентраций неидентифицированных пиков представлена в одной строке, пропущенные компоненты с нулевой концентрацией включены в отчет
- 3) по группам

<<Столбцы

кнопка выбора списка названий колонок, которые будут включены в **Таблицу пиков**. Доступна только при установке метода расчета **Заказной**

Отчет о всех пиках

выбор этой опции включает в отчет строки с нулевыми концентрациями компонента. Опция доступна только для *методов расчета* **Заказной, Расчет индексо", Тест колонки**.

Группы

этот флажок включает в отчет отдельную **таблицу пиков** для каждой **группы** компонентов

12.3.1.2 Относительная концентрация

Относительная концентрация

Этот столбец содержит концентрацию компонента, рассчитанную с учетом известной концентрации стандартного компонента. В большинстве случаев относительная концентрация должна рассматриваться как аналог абсолютной концентрации, но полученной методом **Внутреннего стандарта**. Применим при использовании любого метода градуировки.

Концентрация компонента вычисляется по формуле:

$$C'_i = W_i(R_i) / V_e = W_i(R_i) * C_s / W_s(R_s),$$

где $V_e = W_s(R_s)/C_s$ - эффективный объем введенной пробы (более подробно смотрите [градуировка методом Внутреннего стандарта](#)).

Значение концентрации стандартного компонента C_s вводится пользователем. Итоговая величина для столбца относительной концентрации не включает значение концентрации стандартного компонента, поскольку считается, что компонент внутреннего стандарта введен в анализируемую пробу искусственно.

12.3.1.3 Относительная концентрация %

Процент относительной концентрации

Процент относительной концентрации отличается от процента концентрации тем, что стандарт не учитывается при суммировании, так что сумма всех концентраций за исключением стандарта равна **NORM**.

Итоговая величина для столбца равна **NORM** для основной таблицы и сумме концентраций компонентов группы для групповой таблицы.

12.3.1.4 концентрация %

Процент концентрации

Столбец **Процент концентрации** содержит нормализованную концентрацию:

$$C_i\% = \text{NORM} * W_i(R_i) / \sum (W_i(R_i)),$$

где **NORM** - коэффициент нормализации, введенный пользователем, по умолчанию равен 100. Итоговая величина для столбца равна **NORM** для основной **таблицы пиков** и сумме концентраций группы для групповой **таблицы пиков**.

12.3.1.5 Концентрация

Концентрация

Столбец содержит значения абсолютной концентрации, вычисленной по методу **Внешнего стандарта**):

$$C_i = W_i(R_i) / V'.$$

Итоговой величиной для столбца является сумма концентраций всех компонентов.

12.3.1.6 Тип компонента

Тип компонента обозначается однобуквенным кодом:

R - реперный пик,

S - стандартный компонент,

C - градуировочный стандарт в случае его отличия от расчетного,

? - соответствующий пик чересчур большой

! - концентрация находится вне заданных пределов.

Перед типом компонента может стоять информация о типе пика, например:

BD_ Пик, начинающийся на базовой линии (**baseline, B**) и отделенный от соседнего пика справа по перпендикуляру (**drop line, D**).

BBR Пик-наездник (**rider, R**), отделенный от главного пика (**horse, BH**) по тангенте.

Полностью тип компонента может выглядеть так: **BBD : !R**.

12.3.1.7 Коэффициент емкости

Фактор емкости

Фактор емкости (**коэффициент емкости, коэффициент удерживания**) данного компонента равен отношению его скорректированного **времени удерживания** ($t_i - t_0$) к **мертвому времени** колонки t_0 :

$$K'_i = (t_i - t_0) / t_0$$

Итоговая величина для этого столбца равна **фактору емкости** для последнего пика хроматограммы.

12.4 Метод расчета концентраций

Программа **МультиХром** имеет несколько стандартных форм отчета, определяемых опцией *Метод расчета* из диалогового окна [Опции отчета](#). Эти формы соответствуют расчетам концентраций компонентов по хорошо известным всем методам.

Доступные методы расчета концентраций:

[Нормировка отклика](#)

[Внутренняя нормализация](#)

[Абсолютная концентрация](#)

[Относительная концентрация](#)

[Тест колонки](#)

[Расчет индексов](#)

расчет **индексов удерживания**

[Настройка](#)

позволяет произвольно выбрать тип и число колонок в **таблице пиков**.

12.4.1 Нормализация

Сумма откликов детектора нормируется на величину **NORM** (по умолчанию - 100%), указанную в поле **Нормировка** диалогового окна [Опции отчета](#) :

$$C_i = \text{NORM} \cdot R_i / \sum(R_i)$$

Производится расчет по всем пикам, независимо от того, идентифицированы они или нет.

Метод **Нормировка отклика** **работает всегда**, вне зависимости от того, проводилась ли **градуировка** системы, заполнен ли **паспорт** хроматограммы и т.д. Все идентифицированные пики получают имена.

12.4.2 Внутренняя нормализация

Дает одновременно концентрацию (сырое количество) компонента и отношение концентрации компонента к сумме концентраций всех компонентов, нормализованное на величину **NORM**:

$$C_i = \text{NORM} \cdot W_i(R_i) / \sum(W_i(R_i)),$$

где **NORM** - это задаваемый пользователем в диалоговом окне [Опции отчета](#) коэффициент нормализации, по умолчанию равный 100.

При выборе метода нормализованной концентрации в отчет включаются **столбцы**:

Номер,
Время,
Высота,
Площадь,
ФО,
Концентрация,
Концентрация%,
Название.

В отчете приводятся только компоненты с **ненулевой концентрацией** (т.е. идентифицированные пики с отличным от нуля коэффициентом **ФО**). Если **Таблица компонентов** содержит т.н. **Универсальный компонент**, будут приведены все пики.

Метод требует обязательной градуировки системы.

12.4.3 Абсолютная градуировка

Абсолютная концентрация - метод расчета, дающий концентрацию (сырое количество), рассчитанную **прямо из градуировочной зависимости**, без каких-либо пересчетов:

$$Q_i = W_i(R_i) / V'$$

Метод включает **столбцы**:

Номер,
Время,
Высота,
Площадь,
ФО,
Конц.,
Конц. %,
Название.

Приводятся только пики с ненулевой концентрацией. Если *Таблица компонентов* содержит т.н. **Универсальный компонент**, будут приведены все пики.

Метод требует обязательной градуировки системы.

См. также: [Обозначения](#)

12.4.4 Тест колонки

Тест колонки - метод расчета, вычисляющий набор характеристик, необходимый для оценки качества хроматографической колонки: линейную скорость элюента, фактор емкости (коэффициент удерживания), число теоретических тарелок, высота эквивалентная теоретической тарелке и асимметрия пика.

Метод **Тест колонки** включает **столбцы**:

Номер,
Время,
k',
ТТ,
ТТ/м,
ПВЭТТ,
Асимметрия,
Название.

Для расчета всех приведенных параметров требуется задание длины колонки, мертвого времени, размера частиц сорбента.

Расчет ведется только для идентифицированных компонентов с ненулевой концентрацией.

12.4.5 Заказной метод

Заказной метод дает пользователю возможность выбрать столбцы, включаемые в таблицу пиков, самостоятельно. При этом, если позволяют исходные данные, программа вычислит все требуемые значения. Используя **Заказной метод**, можно проводить расчет **любым имеющимся в программе МультиХром методом** и использовать любые их комбинации. Достоверность полученных результатов зависит от полноты информации, предоставленной пользователем для расчетов.

Столбцы таблицы пиков

Номер пика

номера пиков, в порядке их выхода.

Время выхода	времена (в мин) или объемы (в мл) удерживания компонентов, в зависимости от используемых единиц удерживания по оси X. Итоговая величина отвечает продолжительности хроматограммы.
Полуширина	ширина пиков на половине высоты. Итоговая величина показывает среднее значение полуширины для всех пиков хроматограммы.
Высота	высота пиков. Высота измеряется в единицах, установленных в описании канала хроматограммы. Итоговая величина равна сумме высот.
Высота%	Проводится нормализация высот всех пиков, включенных в <i>Таблицу пиков</i> , на величину NORM , указанную в поле Норма в бланке Опции отчета (по умолчанию - на 100%) $H_i\% = NORM \cdot H_i / \sum(H_i)$
Площадь	площадь пиков. Единицы измерения площадей пиков зависят от выбранных единиц по осям X и Y. Пусть по оси Y отклик детектора измеряется в [мВ]. Тогда при выборе временных единиц по оси X (сек и мин) площадь будет измеряться в [мВ*сек], при выборе объемных (мкл и мл) - в [мВ*мкл]. Итоговая величина равна сумме площадей всех пиков.
Площадь%	Проводится нормализация площадей всех пиков, включенных в Таблицу пиков , на величину NORM , указанную в поле <i>Норма</i> в бланке Опции отчета (по умолчанию - на 100%). $A_i\% = NORM * A_i / \sum(A_i)$
Фактор емкости	
Разрешение	разрешение между двумя соседними пиками (i и (i+1))
Эффективность (TR)	
Эффективность (TR/m)	
Приведенная высота теоретической тарелки	
Асимметрия пиков	вычисляется на 1/10-ой от высоты пика как отношение ширины за вершиной пика к ширине перед его вершиной: $A_s = W_2 / W_1$
Фактор отклика (RF)	фактор отклика детектора
Концентрация	значения абсолютной концентрации, вычисленной по методу Внешнего стандарта).
Концентрация%	
Отн. концентрация	
Отн. Концентрация%	
Индекс	
Тип	
Номер группы	для каждой группы компонентов создается

дополнительная таблица пиков, в которую включены только пики, относящиеся к данной группе. Эти групповые отчеты следуют за сводным отчетом (содержащим информацию обо всех компонентах). Каждый из них содержит данные по одной группе.

Любой метод, за исключением **Заказного**, не включает столбец **Группа** в сводную таблицу, а включает его в дополнительную таблицу по группе.

Название компонента

в этом столбце указаны названия идентифицированных компонентов.

Имя файла

в этом столбце указано имя файла хроматограммы. Этот столбец предназначен для облегчения импорта результатов расчета в электронные таблицы: после вывода отчета в файл в режиме добавления можно отсортировать все строки получившегося файла так, чтобы результаты по каждому компоненту находились рядом, при этом в поле **Имя файла** можно найти ссылку на тот анализ, откуда получены данные.

Заголовок

в этом столбце указан заголовок паспорта хроматограммы. Заголовок дает дополнительный ключ для сортировки хроматограмм во внешних базах данных.

Спектральное отношение

относительные отклики по всем каналам хроматограммы (за единицу принимается отклик опорного канала, выбранного в диалоговом окне **Компоненты**). **Спектральные отношения** рассчитываются только для **многоканальных хроматограмм** и приводятся для всех пиков, вне зависимости от того, идентифицированы они или нет.

12.4.6 Эффективность на метр

Количество теоретических тарелок на метр

Количество теоретических тарелок на метр N' вычисляется следующим образом:

$$N' = N_i \cdot 1000 / L,$$

где L - длина колонки в мм. Итоговая для этого столбца равна среднему для приводимых пиков.

12.4.7 Число теоретических тарелок (N_т)

Число теоретических тарелок (N_т)

Число теоретических тарелок N_i для i -го хроматографического пика вычисляется по формуле:

$$N_i = 2 \cdot P_i \cdot (t_i \cdot H_i / A_i)^2,$$

где $P_i = 3.1415926t_i \dots$, - время удерживания, H_i - высота, A_i - площадь пика. Эта формула обеспечивает для отдельно стоящих пиков величины очень близкие к тем, что получаются при обычно используемой формуле:

$$N_i = 5.54 \cdot (t_i / W_i)^2,$$

где W_i - ширина на половине высоты пика. Первая формула предлагает более точные величины для неразделенных пиков, потому что ошибка определения ширины на **полувысоте** для этих пиков намного больше ошибки определения высоты или площади. Итоговая величина для этого столбца равна среднему для приводимых пиков.

12.4.8 ВЭТТ

Приведенная высота, эквивалентная теоретической тарелке

Приведенная высота, эквивалентная теоретической тарелке, вычисляется по формуле:

$$N_i = 1000 * L / (N_i * d_p).$$

где L - длина колонки в мм, d_p - диаметр частиц в мкм.

12.5 Куда направить отчет

Это совокупность опций, определяющих устройство для вывода отчета, а также некоторые требуемые для этого параметры. Можно выбирать несколько устройств вывода одновременно.

- Экран** вывод отчета на экран
- Принтер** вывод отчета на принтер
 - <Просмотр>** предварительный просмотр отчета на экране (как будет выглядеть отчет при печати на принтере)
- Файл** вывод отчета в файл. При этом становятся доступными **параметры печати в файл**

12.5.1 Отчет:параметры печати в файл

Параметры печати в файл становятся доступными, если установлен флажок **Файл**

- Каталог** каталог для записи файла отчета (по умолчанию - c:/mlcw15/reports)
 - <Пролистать>** кнопка, позволяющая сменить каталог для записи файла отчета
- Имя** имя файла отчета. Если в отчет включен график хроматограммы, отчет сохраняется в формате WMF (Windows Metafile), под тем же именем, но с расширением *.wmf.
- Режим** режим вывода отчета в файл:
 - Переписать** файл отчета пишется поверх существующего
 - Дополнить** отчет добавляется к имеющемуся файлу
- Кодировка** Используемая таблица кодировки символов. Параметр важен для печати русских букв.
 - Windows** использование кодировки ANSI, принятой в оболочке Windows
 - DOS** использование альтернативной ASCII кодировки, являющейся стандартом де-факто для приложений DOS
- Программа** полное имя программы, запускаемой по окончании записи отчета в файл. Используется для дальнейшей обработки отчета другой программой. Если после имени программы стоит параметр «@», вместо него ставится полное (включая диск и директорию) имя файла отчета.

12.6 Разметка страницы

Дает возможность установить **поля** печати, а также **размер рисунка хроматограммы** и **размер градуировочного графика** при выводе отчета на принтер. Данная опция доступна также из диалогового окна [Опции отчета](#)

Единицы измерения	выбор единиц измерения (дюймы или сантиметры).
Поля страницы	верхнее, нижнее, левое и правое поля страницы
Размер рисунка хроматограммы	размеры рисунка хроматограммы при выводе отчета
Размер графика градуировки	размеры графика градуировки при выводе отчета
<Читать основные>	прочитать параметры страницы принятые по умолчанию
<Записать как основные>	сохранить текущие параметры страницы как параметры по умолчанию

Параметры данного диалогового окна сохраняются в [методе](#) и [хроматограмме](#)

12.7 Пролистать

Пролистать

Данная кнопка позволяет сменить каталог для записи файла отчета.

12.8 Конфигурация принтера

Данное окно позволяет выбрать текущий принтер (один из принтеров, установленных в операционной среде Windows), установить стандартные настройки принтера, такие как размер, источник и ориентация бумаги.

Более тщательная настройка конфигурации принтера возможна с помощью кнопки **<Properties>** (**<Свойства>**). При этом вызывается специальное диалоговое окно. Вид окна и доступные настройки определяются типом принтера и типом его драйвера.

12.9 Принять

Принять

Прием сделанных установок и выход из диалогового окна [Опции отчета](#)

12.10 Шаблоны и разделители

Шаблоны

выбор шаблона для отчета. В установочный комплект программы входят шаблоны, рассчитанные на различные языки. Кроме того, имеется специальный шаблон **export.rtt** для экспорта отчетов в электронные таблицы или базы данных.

Разделители

выбор символа-разделителя для таблиц отчета

Табулятор

устанавливает размер табуляции при выводе отчета на экран. Данная установка работает, если выбран тип разделителя **Табулятор** или символы табуляции содержатся в RTT-файле.

12.10.1 RTT файлы

Программа **МультиХром** имеет гибкую двухуровневую систему настройки отчета. Первый из них - из диалогового окна **Опции отчета**, второй - путем редактирования файла шаблона отчета (**.rtt - файла**).

На первом уровне пользователь может выбрать подходящий RTT-файл шаблона, разделы, включаемые в отчет, определить формы **Таблицы пиков** и т.д.

Второй путь настройки отчета - через редактирование RTT файла шаблона. Это более сложный, требующий аккуратности, внимания и знания некоторых принципов, путь. Тем не менее, он дает возможность более гибкого управления. Имя RTT- файла сохраняется в методе, что позволяет создавать свой стиль отчета для каждого метода.

RTT-файлы - это обычные текстовые файлы, записанные в кодировке ANSI (кодировка, принятая в Windows). Для их модификации можно пользоваться редактором Notepad, входящим в состав любой системы Windows. Рекомендуется не модифицировать исходные RTT файлы, поставляемые с системой (**ENGLISH.RTT, GERMAN.RTT, RUSSIAN.RTT**), а записывать измененные файлы под новым именем. Исходные тексты RTT файлов содержат комментарии, позволяющие понять смысл строк и разделов.

RTT файлы содержат форматы, используемые при выводе всех данных в отчет, при печати на экран, на принтер или в файл. Они могут содержать **комментарий** - строки, начинающиеся двумя косыми чертами (**//**).

RTT файл состоит из **разделов**, начинающихся именем раздела в квадратных скобках. Например:

[PRN_HEADER]

...

[PRN_SAMPLE]

...

Каждый раздел отчета в диалоговом окне **Опции отчета** имеет соответствующий ему раздел в RTT файле.

Раздел **[PRN_END]** завершает печатаемую часть отчета.

Раздел **[PRN_CALIBGRAPH]** соответствует информации, печатаемой из диалогового окна **Графики**. Если в разделе присутствует строка RS_CHROMPLOT, он относится к градуировочному графику, а не к хроматограмме.

Каждая строка внутри раздела состоит из двух частей, разделенных вертикальной линией (**|**). Первая часть представляет собой строку формата на языке "C" (например, "Duration = %5.2f\n"). Вторая часть - это внутреннее имя переменной, которая будет печататься в указанном формате (например, RUN_DURATION).

При редактировании RTT файлов могут появляться ошибки, приводящие к сбоям во время исполнения программы. Самый простой способ избежать их - не модифицировать строки формата. При этом можно переносить строки из раздела в раздел (перенесенный параметр будет ассоциироваться с другим разделом отчета), удалять строку (удаленный параметр не появится в отчете).

Если удаление и перемещение строк не может решить Ваших проблем, придется более подробно изучить синтаксис строк формата языка "C".

Каждая строка формата содержит текст, в который включены **спецификация формата** и **специальные знаки**.

Специальные знаки начинаются со знака обратной черты (\):

\n	конец строки
\t	табуляция
\p	конец страницы
\\	символ "обратная черта" (\)
\%	знак процентов (%)

Спецификация формата начинается со знака процентов (%) и имеет следующую форму:

%[width] [.prec] [type]

[width]	минимальное количество печатаемых знаков, заполняемых пробелами или нулями. Может быть опущен.
 [.prec]	максимальное число печатаемых знаков. Для целых чисел - минимальное число печатаемых знаков (точность). Точка перед цифрами точности обязательна. Может быть опущен.
[type]	тип печатаемой переменной. Обязательный операнд.
s	текст
f	действительное число с фиксированной плавающей точкой
g	то же, что и "f", но с возможностью конвертирования в число с порядком
d	двухбайтное целое число
ld	четырёхбайтное целое число

Если сразу после знака "%" стоит знак "-", печатаемая величина выравнивается влево, в противном случае - вправо.

Существует параметр, не включенный в стандартные RTT файлы: RS_RAWDATA. Данный параметр вызывает печать исходных хроматографических данных и может занимать очень много места. Данный параметр используется для передачи исходных данных в другие программы через файл отчета.

Два раздела, [CUSTOM_TITLE] и [CUSTOM_FORMAT], определяют правила, по которым будет напечатана **Таблица пиков**.

[CUSTOM_TITLE]	содержит заголовки колонок
[CUSTOM_FORMAT]	содержит информацию о ширине колонок и точности выводимых данных.

12.10.2 Разделитель

Столбцы в отчете разделяются по умолчанию пробелами. Однако, для удобства экспорта таблиц в другие приложения, например, базы данных или электронные таблицы, предпочтительны другие типы разделителей.

Допустимые типы разделителей в программе **МультиХром**:

Пробел	разделитель по умолчанию
Табуляция	основной тип разделителя при экспорте данных в электронные таблицы
Запятая	альтернативный разделитель
Точка с запятой	альтернативный разделитель

12.11 кнопка Отчет

Отчет

Выдача отчета в соответствии с сделанными установками.

12.11.1 Просмотр

Просмотр

Функция предварительного просмотра отчета на экране (как будет выглядеть отчет при печати на принтере). Страницы отчета можно листать клавишами **[PgUp]** и **[PgDn]**, а также щелкая мышью на линейке прокрутки.

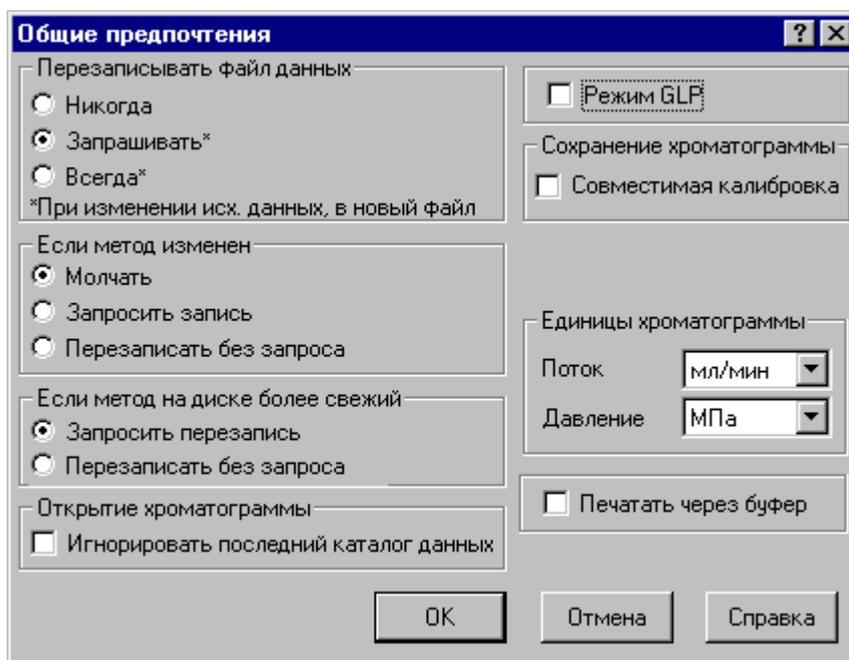
12.12 Как напечатать отчет

1. **Откройте хроматограмму.**
2. Установите требуемый **масштаб хроматограммы**.
3. Если требуется, настройте **вид** хроматограммы.
4. Вызовите диалоговое окно **Опции отчета** и, если необходимо, настройте параметры отчета. Для вывода отчета на принтер отметьте флажок **Принтер**
5. Вызовите диалоговое окно **Страница** для установки полей и размеров рисунка. Выбор типа принтера, размера и ориентации бумаги проводится в окне **Файл/Настройки принтера**.
6. Щелкните по кнопке **<Просмотр>** для просмотра отчета на экране. Отчет показывается в графическом виде, в точном соответствии с принтерной копией.
7. Щелкните по кнопке **<Отчет>** для вывода отчета на принтер. Если требуется несколько копий или выборочная печать страниц, примите установки и закройте окно **Опции отчета**, выберите опцию меню **Файл / Печать**.

Замечание: если принтер обладает высоким разрешением (более 300 dpi), линии графиков могут оказаться слишком тонкими. В этом случае можно уменьшить разрешение принтера или увеличить параметр «Ширина линии» в диалоговом окне **Цвета для осей и каналов**.

13 Глобальные настройки

Данное окно содержит настройки, являющиеся общими для программы **МультиХром 1.5х**. Все программы и методы будут использовать эти установки.



Все параметры собраны в группы.

Если выбран флажок **Режим GLP**, ряд параметров окна устанавливаются автоматически

Перезаписывать файл данных

- Никогда** файл хроматограммы никогда не переписывается. Измененная хроматограмма всегда записывается в новый файл. Имя нового файла формируется из имени старого файла путем добавления единицы к последней цифре.
- Запрашивать** решение о перезаписи файла каждый раз принимает пользователь
- Всегда** система всегда перезаписывает существующие файлы хроматограмм, не спрашивая подтверждения.

Если метод изменен

- Молчать** измененный метод не сохраняется автоматически. Для записи метода используйте опцию меню **Файл/Сохранить/Метод**
- Запросить запись** пользователь запрашивается о необходимости записи метода. При этом можно записать метод под новым именем.
- Переписать без запроса** измененный метод сохраняется автоматически.

Если метод на диске более свежий

- Запросить перезапись** если дисковая версия метода является более свежей, система делает дополнительный запрос о ее перезаписи.
- Перезаписать без запроса** более свежая версия метода будет перезаписана автоматически

Открытие хроматограммы

Игнорировать последний каталог данных

при установке этого флажка каждый раз при открытии хроматограмм будет использоваться директория для данных по умолчанию. В противном случае используется каталог, из которого последний раз считывались данные.

Режим GLP

Данный флажок включает набор установок в соответствии с требованиями **GLP**:

Перезаписывать файл данных**Никогда****Если метод изменен****Запросить запись****Если метод на диске более свежий****Запросить перезапись****Сохранение хроматограммы** **Совместимая калибровка**

при установке этого флажка используется старый формат градуировочных данных. Это дает возможность читать хроматограммы в более старых версиях программы **МультиХром**.

Единицы хроматограммы**Поток**выбор единиц для потока подвижной фазы: **мкл/мин, мл/мин****Давление**выбор единиц для измерения давления: **МПа, psi, бар, атм** **Печатать через буфер**

при установке флажка вывод на принтер производится через буфер печати. При этом вывод на печать ускоряется.

13.1 Перезаписывать файл данных

Перезаписывать файл данных**Никогда**

файл хроматограммы никогда не переписывается. Измененная хроматограмма всегда записывается в новый файл. Имя нового файла формируется из имени старого файла путем добавления единицы к последней цифре.

Запрашивать

решение о перезаписи файла каждый раз принимает пользователь

Всегда

система всегда перезаписывает существующие файлы хроматограмм, не спрашивая подтверждения.

13.2 Если метод изменен

Если метод изменен**Молчать**

измененный метод не сохраняется автоматически. Для записи метода используйте опцию меню **Файл/Сохранить/Метод**

Запросить запись

пользователь запрашивается о необходимости записи метода. При этом можно записать метод под новым именем.

Переписать без запроса

измененный метод сохраняется автоматически.

13.3 Если метод на диске более свежий

Если метод на диске более свежий

Запросить перезапись если дисковая версия метода является более свежей, система делает дополнительный запрос о ее перезаписи.

Перезаписать без запроса более свежая версия метода будет перезаписана автоматически

13.4 Настройки: Открытие хроматограммы

Открытие хроматограммы

Игнорировать последний каталог данных

при установке этого флажка каждый раз при открытии хроматограмм будет использоваться директория для данных по умолчанию. В противном случае используется каталог, из которого последний раз считывались данные.

13.5 Режим GLP

Режим GLP

Данный флажок включает набор установок в соответствии с требованиями **GLP**:

Перезаписывать файл данных

Никогда

Если метод изменен

Запросить запись

Если метод на диске более свежий

Запросить перезапись

13.6 Настройки: Сохранение хроматограммы

Сохранение хроматограммы

Совместимая калибровка

при установке этого флажка используется старый формат градуировочных данных. Это дает возможность читать хроматограммы в более старых версиях программы **МультиХром**.

13.7 Единицы хроматограммы

Единицы хроматограммы

Поток

выбор единиц для потока подвижной фазы: **мкл/мин, мл/мин**

Давление

выбор единиц для измерения давления: **МПа, psi, бар, атм**

13.8 Печатать через буфер

Печатать через буфер

При установке флажка вывод на принтер производится через буфер печати. При этом вывод на печать ускоряется, а печать происходит в фоновом режиме.

13.9 Настройки: GLP

Система **GLP** (Good Laboratory Practice) - это система **Европейских лабораторных стандартов**, и ведения документации, имеющая целью по высить надежность и воспроизводимость получаемых данных.

Применительно к системе **МультиХром 1.5x** это означает:

Полная конфигурация системы сбора и параметры обработки данных, также как и исходные данные, хранятся в одном файле. Это дает возможность полностью воспроизвести как сам анализ, так и результаты.

Встроенная **система безопасности** на основе пароля позволяет ограничить **уровень доступа** пользователя, в соответствии с его квалификацией.

Все полученные хроматограммы имеют штамп, состоящий из времени их запуска и порядкового номера. Данная информация не может быть изменена пользователем.

Программа имеет встроенные методы расчета для определения пригодности хроматографической системы и колонки.

Встроенные механизмы автоматического ведения **Журнала метода** и **Журнала данных** для отслеживания всех изменений, внесенных в **метод** и **хроматограмму**.

См. также: [Защита](#)
[Глобальные установки](#)

14 Защита

В соответствии с требованиями GLP система МультиХром обеспечивает защиту от несанкционированного доступа к программе при помощи пароля. Каждый пользователь может получить свое **имя**, свой **пароль** и **уровень доступа**, определяющий набор доступных ему операций, в соответствии с его квалификацией и статусом.

Диалоговое окно **Защита (меню Настройка)** позволяет **администратору** системы редактировать **список пользователей**.

При запуске система запрашивает пароль пользователя через диалоговое окно **Пароль** и устанавливает имя пользователя и **уровень доступа**, соответствующее паролю. Данное имя автоматически включается в *паспорт* хроматограммы. Имя пользователя может быть изменено с помощью опции **Замкнуть программу (меню Настройка)**.

14.1 Уровень доступа

Уровень доступа является частью **защиты** системы. Он устанавливается при запуске системы вместе с вводом имени пользователя через диалоговое окно **Пароль**.

Пользователь может иметь три уровня доступа:

Нормальный позволяет модифицировать только основные параметры, защищает методы и данные от случайной модификации.

Расширенный обеспечивает полный контроль над системой за

некоторыми исключениями: пользователь не может изменить конфигурацию оборудования и уровень доступа для других пользователей. Рекомендуется для создания и модификации методов.

Администратор

это пользователь с наивысшим приоритетом доступа. Этот уровень устанавливается только при конфигурировании системы или изменении конфигурации. **Администратор** системы может также менять уровни доступа, имена и пароли других пользователей.

14.2 Пароль

Это диалоговое окно появляется при запуске системы, а также при вызове опции [замкнуть систему](#). Пользователь должен ввести свой пароль и нажать [Enter].

Имя пользователя и его уровень доступа будут найдены по паролю в списке пользователей. Допускается длина пароля до 6 знаков.

14.3 Блокировать систему

Эта опция позволяет закрыть доступ к системе (через вызов диалогового окна [Пароль](#)). Используется для защиты данных в случае временной отлучки пользователя. Опция позволяет также сменить текущего пользователя системы.

15 Как выполнить...

[Как запустить хроматограмму](#)

[Как копировать, удалять, перемещать файлы хроматограмм](#)

[Как напечатать отчет](#)

[Как создать пакет хроматограмм](#)

[Как открыть существующий пакет хроматограмм](#)

[Как провести пакетный пересчет](#)

[Как запустить очередь](#)

[Как создать таблицу компонентов](#)

[Как создать таблицу концентраций](#)

15.1 Как напечатать отчет

1. **Откройте хроматограмму.**
2. Установите требуемый **масштаб хроматограммы**.
3. Если требуется, настройте **вид** хроматограммы.
4. Вызовите диалоговое окно **Опции отчета** и, если необходимо, настройте параметры отчета. Для вывода отчета на принтер отметьте флажок **Принтер**
5. Вызовите диалоговое окно **Страница** для установки полей и размеров рисунка. Выбор типа

принтера, размера и ориентации бумаги проводится в окне [Файл/Настройки принтера](#).

6. Щелкните по кнопке **<Просмотр>** для просмотра отчета на экране. Отчет показывается в графическом виде, в точном соответствии с принтерной копией.

7. Щелкните по кнопке **<Отчет>** для вывода отчета на принтер. Если требуется несколько копий или выборочная печать страниц, примите установки и закройте окно [Опции отчета](#), выберите опцию меню [Файл / Печать](#).

Замечание: если принтер обладает высоким разрешением (более 300 dpi), линии графиков могут оказаться слишком тонкими. В этом случае можно уменьшить разрешение принтера или увеличить параметр **Ширина линии** в диалоговом окне **Цвета** для осей и каналов.

15.2 Как провести пакетный пересчет

Создайте **новый пакет** хроматограмм или откройте существующий ([меню Файл / Открыть / Пакетный пересчет](#)). Для открытия последнего редактировавшегося пакета можно

воспользоваться опцией [меню Файл / Открыть / Последний пакет](#) (или иконкой )

В окне [Пакетный пересчет](#) выберите одну хроматограмму-прототип, чей метод будет использован для пересчета всех хроматограмм пакета.

Выберите тип хроматограмм (можно отдельно пересчитать только **градуировочные** или только **обычные хроматограммы**. Можно выбрать также оба типа хроматограмм).

Установите флажок **Обновить файл метода...** В этом случае дисковая версия метода будет автоматически обновлена в соответствии с результатами пересчета.

Установите флажок **Переразметить** если требуется переразметка хроматограмм. Можно изменить параметры интегрирования, щелкнув по кнопке [<Редактировать параметры разметки>](#).

Установите флажок **Переградуировать** если требуется создать или обновить градуировку и выберите схему градуировки.

Если очищены флажки **Переразметить** и **Переградуировать**, можно воспользоваться опцией **«Только пересчитать»**.

Установите флажок **Изменить паспорт** если требуется изменить какие-то поля паспорта, общие для всех хроматограмм пакета. Щелкните по кнопке [<Редактировать паспорт>](#) и внесите требуемые изменения.

Примечание: Некоторые параметры паспорта берутся из [таблицы пакета хроматограмм](#) и могут быть индивидуальными для каждой хроматограммы пакета.

Установите флажок **Изменить вид хроматограммы** если нужно изменить вид пересчитываемых хроматограмм. Щелкните по кнопке [<Редактировать вид>](#), измените требуемые параметры.

Примечание: Все изменения будут сделаны в момент выхода из окна «Вид».

Установите флажок **Напечатать отчет** если требуется вывести отчет или просто изменить параметры отчета для всех хроматограмм пакета. Если параметры отчета должны отличаться от установок хроматограммы-прототипа, щелкните по кнопке [<Редактировать опции отчета>](#) и внесите требуемые изменения.

Для начала пересчета щелкните по кнопке **<Пересчет>**.

15.3 Как запустить очередь

1. Активируйте пункт меню **Файл / Открыть / Очередь**
В открывшемся окне выберите существующий файл очереди. Чтобы повторно запустить очередь, которая уже выполнялась, нужно **сбросить** ее текущее состояние.
Если ввести имя новой очереди, будет запрошен **метод**, который будет использоваться для получения и обработки хроматограмм очереди.
2. Заполните или отредактируйте **таблицу очереди**.
Для каждого анализа должна быть создана своя строка. Обязательно должны быть введены параметры **Method, Level**.
В разных хроматограммах могут использоваться различные методы. Для смены метода используется функция **Изменить систему**.
Обратите внимание на реальное соответствие параметров **Volume, Dilution, Amount, Internal Standard Amount**.
Остальные параметры являются чисто описательными и замещают при запуске соответствующие поля **паспорта** из используемого метода.
3. При редактировании удобно пользоваться **пиктограммами редактирования**
Строки можно **вырезать, копировать, удалять, дублировать, размножить**
Для отдельных столбцов можно пользоваться функциями **Увеличить по порядку** и **размножить**
Последнее действие можно отменить
4. Запустите очередь, щелкнув по иконке . При этом редактор очередей перейдет в **режим исполнения**. Можно записать созданную очередь и выйти из редактора в основной модуль МультиХром.

15.4 Как создать таблицу компонентов

Таблица компонентов создается на базе **градуировочной хроматограммы**

1. Получите или загрузите с диска градуировочную хроматограмму.
2. Проверьте и скорректируйте разметку хроматограммы на пики.
3. Щелкните по пиктограмме  или выберите пункт **Метод / Градуировка / Компоненты**.
В нижней половине окна появится пустая **таблица компонентов**.
4. Щелкните по кнопке **<Добавить>**. В таблице появится новый ряд.
5. В столбец **Пик** введите номер пика на хроматограмме. Нажмите клавишу **[Влево]** или щелкните мышкой по другой клетке. Курсор скачком переместится на вершину выбранного пика, в колонке **Время** появится его время удерживания.
6. В колонку **Окно, %** введите ширину окна идентификации. Значение этого параметра обычно колеблется от 2% до 10% от заявленного времени удерживания данного компонента, в зависимости от типа Вашей хроматографической системы.
7. В колонку **Имя** введите название компонента. По умолчанию система предлагает в качестве имени компонента его порядковый номер.
Все компоненты без имени будут исключены из таблицы по окончании ее редактирования!
8. Аналогичным образом добавьте строки для всех остальных компонентов градуировочной смеси. Для компонентов с известными индексами удерживания заполните также графу **Индекс**
9. Выберите 1-3 пика, которые будут отдельно стоящими или заведомо самыми большими в своем идентификационном окне, во всех последующих хроматограммах. Объявите их

реперными, установив триггерный переключатель в графе **Ссылка** в состояние «Да». Установите для реперных пиков ширину окна идентификации вдвое большую, чем для остальных пиков.

10. Для обозначения всех пиков, отсутствующих в градуировочной таблице, можно создать т.н. **Универсальный компонент**.
11. Закройте **таблицу компонентов**, щелкнув по кнопке **<ОК>**. Можно отказаться от внесенных изменений, щелкнув по кнопке **<Отмена>**.

15.5 Как создать таблицу концентраций

Таблица концентраций может создаваться только на основе ранее созданной **таблицы компонентов**.

1. **Создайте таблицу компонентов**
2. Не закрывая таблицу компонентов, нажмите кнопку **<Концентрации>**. (Если окно таблицы концентраций было закрыто, выберите команду **Метод/Градуировка/Концентрации** или пиктограмму ). Откроется окно **Таблица концентраций**.
3. Далее в таблицу необходимо добавить столько столбцов, сколько **градуировочных точек** предполагается использовать для получения градуировочной характеристики. Щелкните мышкой по кнопке **<Добавить>**. Откроется окно **Добавить точку**. Введите номер градуировочной точки. Заполните его концентрациями компонентов в соответствующей градуировочной пробе. Если концентрации всех компонентов одинаковы, введите значение в поле **Одинаковые конц. для всех комп-тов**. Можно заполнить новый уровень значениями концентраций с любого существующего уровня. Для этого установите флажок **Копировать концентрации точки** и выберите номер уровня, с которого будут копироваться концентрации.
4. Аналогично создайте и заполните для каждой градуировочной смеси, которую Вы будете использовать. Если требуется сделать несколько анализов одной и той же пробы, создайте по одному уровню на каждую хроматограмму образца.

Если уровень градуировки не содержит информацию о высоте или площади соответствующего пика, такой уровень считается пустым и не используется для расчетов по данному компоненту!

16 Модуль ГПХ

[Введение](#)
[Описание модуля ГПХ](#)
[Способы подключения ГПХ](#)
[Панель управления](#)
[Получение информации о используемых методах ГПХ](#)
[Описание ММР](#)
[Обработка и хранение градуировочных характеристик](#)
[Добавление смеси для ГПХ](#)

16.1 Введение к ГПХ

В состав программного обеспечения программно-аппаратного комплекса **МультиХром**, версия 1.6х в дополнение к ПО версии 1.5х включен специализированный модуль для расчета **молекулярно-массового распределения полимеров (ММР)** по хроматограммам, полученным методом **гель-проникающей хроматографии (ГПХ)**, в дальнейшем именуемый **модуль ГПХ**.

Настоящее **Руководство по работе с модулем для гель-проникающей хроматографии** (далее - **Руководство**) содержит дополнительные сведения, необходимые для работы с **модулем ГПХ**, которые могут потребоваться пользователю, имеющему опыт работы с системой **МультиХром**. Пользователям, впервые осваивающим систему **МультиХром**, рекомендуется следующее:

- Если **МультиХром** предполагается использовать как для проведения количественного и качественного анализа смесей, так и для определения **ММР**, следует вначале изучить методы работы с системой, описанные в **Руководстве пользователя** для работы с **версией 1.5x** (далее - **РП**), а затем ознакомиться с особенностями работы **модуля ГПХ** по настоящему **Руководству**.
- Если **МультиХром** предполагается использовать *только* для определения **ММР**, следует сначала установить систему, ознакомившись с разделами **РП: Введение** и **Установка и настройка**, а затем перейти к настоящему **Руководству**, обращаясь к разделам основного **РП** в соответствии с указаниями в тексте.

Общее описание процедуры определения ММР

Определение **ММР** с помощью **ГПХ** основано на зависимости времени выхода фракции высокомолекулярного вещества от молекулярной массы составляющих ее молекул.

Процедура определения **ММР** состоит из двух этапов. Первый – получение **хроматограмм** (одной или нескольких) для образца с известным **ММР** и определение по ней градуировочной зависимости, второй – получение хроматограммы исследуемого образца и расчет для него с помощью ранее полученной **градуировочной зависимости** параметров **ММР**.

Методы градуировки

В программе предусмотрены три метода градуировки с использованием образцов двух типов.

Первый метод предназначается для градуировки по полидисперсным образцам с **широким ММР**, которые характеризуются двумя параметрами – средней молекулярной массой **M_n** и средневзвешенной молекулярной массой **M_w**. При этом предполагается линейная связь между логарифмом молекулярной массы **Ig(M)** и временем выхода **T**:

$$I_g(M) = k_0 - k_1 \cdot T$$

Коэффициенты **k₀** и **k₁**, рассчитанные при градуировке, далее используются для определения параметров **ММР** исследуемого образца.

Для второго, наиболее распространенного метода требуются градуировочные образцы, содержащие несколько монодисперсных фракций, характеризующиеся величинами молекулярной массы для каждой фракции. При этом для аппроксимации градуировочной зависимости можно использовать не только линейную, но также квадратичную или кубическую функцию:

$$I_g(M) = k_0 - k_1 \cdot T + k_2 \cdot T^2$$

$$I_g(M) = k_0 - k_1 \cdot T + k_2 \cdot T^2 + k_3 \cdot T^3$$

При использовании градуировочной зависимости вида **Ig(M) = F(T)** предполагается, что и градуировка, и последующие измерения выполняются не только в одинаковых условиях, но и с использованием образцов *одного и того же* высокомолекулярного соединения.

Третий метод предназначен для определения **ММР** в случае, когда градуировка выполнена для образца *другого* соединения, с использованием *универсальной* зависимости **Ig**

([v]·M) = F(T), где **[v] = K·M^α** – характеристическая вязкость. Для использования этого метода необходимо знать параметры **K** и **α** как для градуировочного, так и для исследуемого образца.

Градуировка производится аналогично второму методу (используются образцы, содержащие набор монодисперсных фракций; функция $F(T)$ может быть аппроксимирована полиномом 1-3 степени).

Выполнение расчетов

При выполнении расчетов вся хроматограмма разбивается на малые **интервалы (кванты времени)**. Для каждого i -ого интервала значение молекулярной массы M_i считается постоянным, а количество вещества – пропорциональным площади A_i , заключенной в пределах этого интервала между **хроматографической кривой** и **базовой линией**. Величина интервала задается пользователем, при этом точность расчета **ММР** возрастает с уменьшением интервала, но одновременно возрастает время расчета.

При проведении градуировки по полидисперсному образцу программа сначала рассчитывает методом последовательных приближений величину k_1 из соотношения

$$M_w/M_n = (\sum(A_i \cdot 10^{-k_1 \cdot T_i}) / \sum A_i) / (\sum A_i / \sum(A_i / 10^{-k_1 \cdot T_i}))$$

а затем величину k_0 из соотношения

$$M_w = k_0 \cdot \sum(A_i \cdot 10^{-k_1 \cdot T_i}) / \sum A_i$$

Для исследуемого образца программа рассчитывает следующие параметры ММР:

$$M_n = \sum A_i / \sum(A_i / M_i)$$

$$M_w = \sum(A_i \cdot M_i) / \sum A_i$$

$$M_z = \sum(A_i \cdot M_i^2) / \sum(A_i \cdot M_i)$$

$$M_{z+1} = \sum(A_i \cdot M_i^3) / \sum(A_i \cdot M_i^2)$$

где M_i - значение молекулярной массы, рассчитанное по градуировочной зависимости для значения времени удерживания T_i , а суммирование производится по всем интервалам в пределах *области анализа* (см. раздел **Разметка хроматограммы ГПХ**).

Замечания об особенностях модуля ГПХ для пользователей, имеющих опыт работы с системой МультиХром

Если в состав системы **МультиХром** включен **модуль ГПХ**, лист **Общие** имеет дополнительный флажок **Гель-проникающая хроматография (ГПХ)**. Переход к **модулю ГПХ** осуществляется путем установки этого флажка, а также при запуске метода или открытии хроматограммы, у которых этот флажок был установлен.

Первое значительное отличие **модуля ГПХ** относится к способу разметки: на хроматограмме выделяется *область анализа*, для которой строится общая базовая линия. Необходимые для этого дополнительные параметры вводятся на листе **Параметры ГПХ** окна **Параметры разметки**.

Второе, наиболее важное отличие касается процедуры *градуировки*: при проведении количественного и качественного анализа целью градуировки является определение зависимости **отклик – концентрация**, а при расчете **ММР** – зависимости **удерживание – молекулярная масса**. Следствием этого отличия являются следующие особенности градуировки:

- Не создается **Таблица концентраций**.
- В результате градуировки получается единственная **градуировочная зависимость**, а не набор зависимостей для всех компонентов. При этом вместо набора окон **Компонент** параметры градуировки задаются через единственное окно **Градуировка ГПХ**.

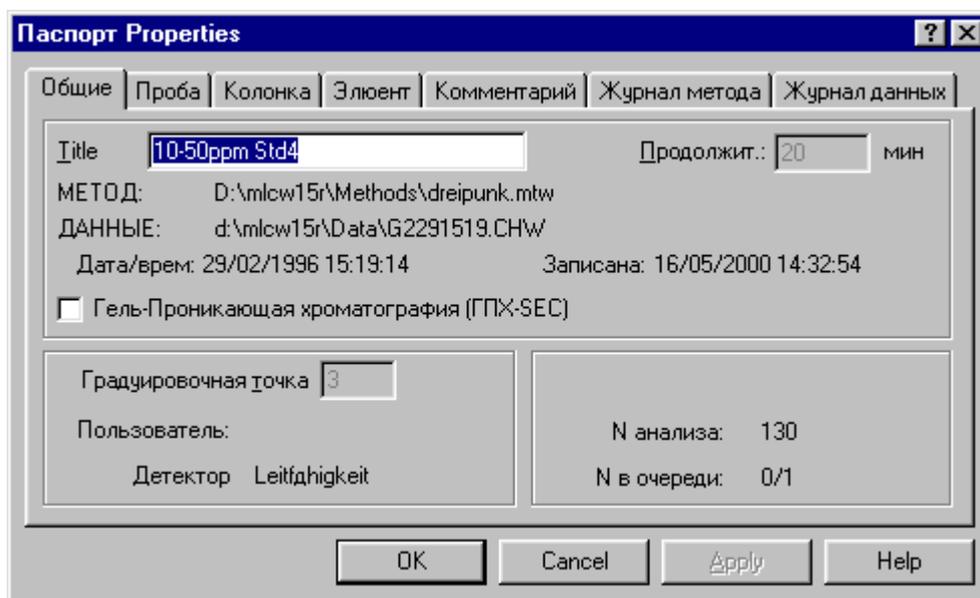
- Каждая точка градуировочной зависимости соответствует **одному компоненту из Таблицы компонентов**, а не **градуировочной хроматограмме**.
- Для построения **всей** градуировочной зависимости может быть достаточно **одной** градуировочной хроматограммы при условии, что она содержит все компоненты. Использование нескольких градуировочных хроматограмм, содержащих одни и те же компоненты, позволяет только повысить достоверность получаемых данных.

Третьей существенной особенностью является представление результата анализа в отчете в виде набора параметров **ММР** (для этого в окне [Опции отчета](#) добавлен соответствующий раздел).

16.2 Создание методов ГПХ

Метод для работы с **модулем ГПХ** может быть создан на основе обычного метода. Далее описана процедура создания такого метода в процессе получения первой **градуировочной хроматограммы** для **ГПХ**.

- Запустите программу и откройте какой-либо метод. При этом откроется окно [Запуск анализа](#).



- Установите **флажок ГПХ**. При этом появится предупреждение: **"Эта операция уничтожит всю градуировку. Продолжить?"** Нажмите кнопку **Да**.
- Введите новое имя в поле **Имя**.
- Если требуется, отредактируйте значение в поле **Продолжит.**, а также внесите необходимые изменения на других листах окна.
- Нажмите кнопку **OK** или клавишу **[Enter]**, окно [Запуск анализа](#) закроется.
- Запустите хроматографический процесс для градуировочного образца, при этом система **МультиХром** начнет сбор данных.

16.2.1 Разметка хроматограммы ГПХ

При создании **метода ГПХ** на основе обычного метода **первая хроматограмма ГПХ** по окончании сбора данных не будет размечена, так как для этого необходимы дополнительные параметры: **начало и конец области анализа**, которые задает пользователь, и **значения базы** в начальной и конечной точке области анализа (уровень **базовой линии**),

автоматически рассчитываемые программой. Уровень **базовой линии**, как правило, определяется по участкам без пиков, специально выделенным пользователем в начале и конце хроматограммы. При этом можно исключить из расчетов участки, непосредственно примыкающие к области анализа, если они содержат случайные пики и провалы (связанные, например, с выходом низкомолекулярных веществ, пузырьков воздуха и пр.) Таким образом, пользователь имеет возможность задать до шести точек, разбивающих хроматограмму на участки: **Начало базовой линии, Конец базовой линии, Начало пиков, Конец пиков, Начало области анализа, Конец области анализа.**

Построение базовой линии

Программа проводит **базовую линию** для всей **области анализа**, используя **значения базы** в первой и последней точках этой области. Значения базы рассчитываются способом, который зависит от числа точек на участках, специально выделенных для этой цели в начале и в конце хроматограммы.

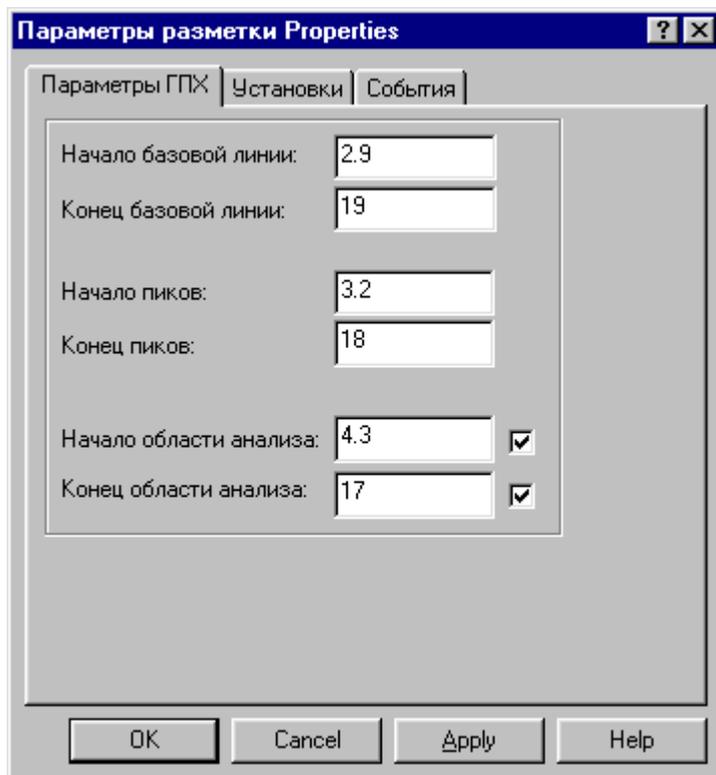
- Значение базы в *первой* точке области анализа определяется как:
- результат экстраполяции прямой, проведенной по всем точкам начального участка методом наименьших квадратов, если точек больше 5 (рекомендуемый вариант);
- среднее значение на начальном участке, если точек не более 5 точек;
- Значение базы в *последней* точке области анализа определяется как:
- результат экстраполяции прямой, проведенной по всем точкам конечного участка методом наименьших квадратов, если точек больше 5 (рекомендуемый вариант);
- игнорируется, если число точек не более 5.

Базовая линия проводится следующим образом:

- если в первой и последней точках области анализа значения базы определены, базовая линия соединяет эти точки;
- если значение базы в последней точке области анализа не определено, базовой линией является экстраполяция базовой линии на начальном участке. В частности, если начальный участок содержит не более 5 точек, базовая линия будет горизонтальной.

Задание параметров разметки

- Откройте окно **Параметры разметки**, нажав кнопку  или выбрав команду **Метод/Разметка**, при этом на экране будет представлен лист **Параметры ГПХ**.



Параметр	Значение	Активно
Начало базовой линии:	2.9	
Конец базовой линии:	19	
Начало пиков:	3.2	
Конец пиков:	18	
Начало области анализа:	4.3	<input checked="" type="checkbox"/>
Конец области анализа:	17	<input checked="" type="checkbox"/>

- Задайте следующие параметры разметки.
- **Начало базовой линии** – определяет начало участка для вычисления значения базы в *первой* точке области анализа.

- **Начало пиков** – определяет конец участка для вычисления значения базы в *первой* точке области анализа. Значение должно быть *не меньше* величины, заданной в поле **Начало базовой линии**.
- **Начало области анализа** – определяет первую точку области анализа. Задается только в том случае, когда *перед* областью анализа требуется выделить участок, который исключается из расчетов. Ввод данных в это поле возможен только при установке расположенного рядом флажка. Если флажок не установлен, первой точкой области анализа является точка **Начало пиков**.
- **Конец области анализа** – определяет последнюю точку области анализа. Задается только в том случае, когда *после* области анализа требуется выделить участок, который исключается из расчетов. Ввод данных в это поле возможен только при установке расположенного рядом флажка. Если флажок не установлен, последней точкой области анализа является точка **Конец пиков**.
- **Конец пиков** – определяет начало участка для вычисления значения базы в *последней* точке области анализа. Значение должно быть *больше* величины, заданной в поле **Начало пиков**.
- **Конец базовой линии** – определяет конец участка для вычисления значения базы в *последней* точке области анализа. Значение должно быть *не меньше* величины, заданной в поле **Конец пиков**.
- Процедуру заполнения перечисленных полей рекомендуется выполнять, используя для их обхода клавишу **[TAB]**.
- Перейдите на лист **Установки**, внесите, если требуется, изменения, и нажмите кнопку **ОК**. В области анализа будет выполнена разметка на пики: построена общая **базовая линия** и определены основные пики, промежутки между которыми будут также отмечены как дополнительные пики – таким образом, при интегрировании вся площадь между базовой линией и хроматографической кривой будет отнесена к тому или иному пику, никакая ее часть не останется неучтенной.

Полученную разметку можно откорректировать вручную с помощью **Редактора пиков**, однако следует учитывать, что операции удаления и добавления пиков при работе с **модулем ГПХ** заблокированы (см.о [разметке](#) и раздел [Интегрирование](#)).

При использовании ранее созданных методов **ГПХ**, а также при перезапуске хроматограмм **ГПХ** разметка будет производиться автоматически в соответствии с установленными на листе **Параметры ГПХ** параметрами.



Допустимо проведение сбора данных для хроматограмм **ГПХ** до установки флажка **ГПХ**, но при этом следует уделить особое внимание разметке, так как она будет автоматически выполнена обычным образом. Поэтому после установки флажка **ГПХ** хроматограмму **обязательно** требуется переразметить, задав необходимые параметры на листе **Параметры ГПХ**.

16.2.2 Первая градуировка при ГПХ

Процедура градуировки включает в себя создание **Таблицы компонентов**, выбор метода градуировки и ввод параметров градуировочного образца, а также, при необходимости, корректировку полученной градуировочной зависимости.

В системе предусмотрено проведение градуировки тремя методами (в скобках указаны используемые далее названия методов):

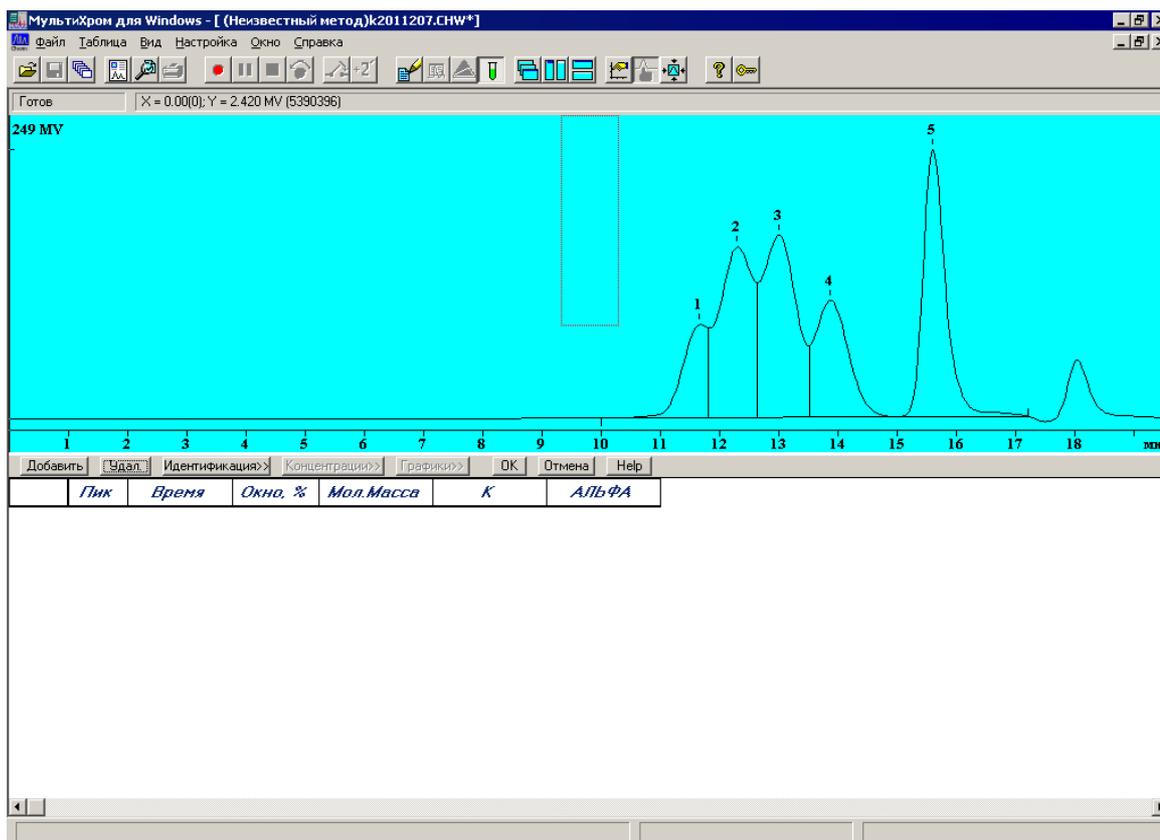
с использованием одного полидисперсного образца, для которого известны параметры **ММР (Полидисперсный)**;

с использованием одного или нескольких образцов исследуемого вещества, содержащих ряд монодисперсных компонентов с известными значениями молекулярной массы (**Монодисперсный**);

метод, аналогичный **Монодисперсному**, но позволяющий использовать при градуировке вещества, отличные от исследуемых образцов, если для тех и других известны параметры **К** и **Альфа** (**Универсальный**).

16.2.2.1 ГПХ Создание таблицы компонентов

- Откройте **Таблицу компонентов**, нажав кнопку  или выбрав команду **Метод/Градуировка/Компоненты**. **Таблица компонентов** содержит столбцы **Пик**, **Время**, **Окно%**, **Молек.Масса**, **К**, **Альфа** (см. раздел [Таблица компонентов](#)).



- Нажмите кнопку **Добавить**. В **Таблице компонентов** появится первая строка. Если предполагается использовать метод **Полидисперсный**, создание таблицы компонентов на этом завершается.
- Для метода **Монодисперсный** заполните **таблицу пиков**.
- Нажимая кнопку **Добавить**, создайте в таблице столько строк, сколько пиков, соответствующих монодисперсным фракциям, представлено на хроматограмме. При этом в столбце **Пик** автоматически проставляется номер пика на хроматограмме.
- Если при градуировке предполагается использовать несколько хроматограмм и первая из них содержит не все фракции, можно добавить строки для отсутствующих фракций, при этом в столбце **Пик** будет указано значение 0. Можно также не создавать такие строки заранее, а добавлять их в **Таблицу компонентов** по мере надобности.
- В каждой строке ведите в столбец **Молек.Масса** значение молекулярной массы.
- Если в таблицу ошибочно введены лишние строки, удалите их, устанавливая на строку курсор и нажимая кнопку **Удалить**.

- Для метода **Универсальный** заполнение **Таблицы компонентов** возможно выполнить двумя способами.
- Если для градуировки используется образец, в котором для большинства монодисперсных фракций **К = 1**, **Альфа = 0**, или же все фракции имеют различные значения этих параметров, создайте **Таблицу компонентов** вышеописанным способом, а затем внесите необходимые коррективы в столбцы **К** и **Альфа**.
- Если для градуировки используется образец, в котором для большинства монодисперсных фракций **К** и/или **Альфа** имеют одинаковые, но отличные соответственно от 1 и 0 значения, рекомендуется после создания первой строки **Таблицы компонентов** ввести эти значения в окне **Градуировка ГПХ**, а затем завершить формирование таблицы. В этом случае требуемые значения **К** и **Альфа** будут вводиться для всех компонентов по умолчанию.

16.2.2.2 ГПХ Получение градуировочной зависимости

- Перейдите в окно **Градуировка ГПХ**, нажав кнопку **График**.

В верхней половине окна расположены поля и кнопки, позволяющие пользователю выбирать метод и задавать параметры градуировки, в нижней – результаты градуировки.

- В списочном поле **Метод** выберите требуемый метод градуировки (по умолчанию установлен **Монодисперсный**).
- Переход от метода **Монодисперсный** или **Универсальный** к методу **Полидисперсный**, а также обратно, сопровождается уничтожением ранее сделанной градуировки, поэтому в этом случае появляется соответствующее сообщение-напоминание. Для подтверждения смены метода нажмите кнопку **Да**.
- Для того чтобы текущая хроматограмма была использована для градуировки, нажмите кнопку **Добавить к градуировке**. Операции, производимые при этом программой, а также дальнейшие процедуры, выполняемые пользователем, зависят от выбранного метода.

[Метод Монодисперсный](#)

[Метод Полидисперсный](#)

[Метод Универсальный](#)

16.2.2.2.1 Метод Монодисперсный

При выборе этого метода после нажатия кнопки **Добавить к градуировке** в списке **градуировочных точек** появляются строки, содержащие имя файла текущей хроматограммы. Число строк равно числу компонентов, для которых в **Таблице компонентов** в столбце **Пик** указан номер пика на хроматограмме.

Список градуировочных точек содержит следующую информацию:

- Точка** Номер градуировочной точки, имеющий структуру (**Номер градуировочной хроматограммы/Номер компонента в Таблице компонентов**). Если компонент, указанный в **Таблице компонентов**, в градуировочном образце отсутствует (в **Таблице пиков** в столбце **Пик** стоит значение 0), строка с соответствующим номером в списке градуировочных точек также отсутствует.
- Масса** Молекулярная масса, указанная в столбце **Мол.масса Таблицы компонентов**
- К Альфа** Параметры фракций градуировочного образца, указанные в соответствующих столбцах **Таблицы компонентов** (для метода **Монодисперсный** эти столбцы в списке градуировочных точек не заполняются).
- Время** Время удерживания компонента, измеренное по его пику на указанной градуировочной хроматограмме.
- Файл** Имя файла градуировочной хроматограммы.
- Исп.** Признак использования данной точки при расчете градуировочной зависимости. Может иметь значения **Да** или **Нет**.

После нажатия кнопки **Добавить к градуировке** программа сразу же рассчитывает градуировочную зависимость, используя формулу аппроксимации, установленную в поле **Формула** (по умолчанию $Y = k1 \cdot X + k0$). Результаты расчета представляются в окне в следующем виде:

строится график градуировочной зависимости, на котором знаком \circ отмечаются точки, использованные при его построении;

в полях **k0...k3** выводятся значения одноименных коэффициентов;

приводится формула градуировочной зависимости **L(T)** и значение среднеквадратичного отклонения **СКО** экспериментальных точек от расчетных значений.

Градуировка ГПХ

Скопировать в буфер Печать... Просмотр

Метод градуировки: **Монодисперсный**

Опорный канал: ch1

Формула: $Y=K1 \cdot X+K0$

Данные пробы: К: 1 Альфа: 0

Добавить к градуировке Удалить хром Изпольз

Точка	Масса	К	Альфа	Время	Файл	Исп.
2/1	226000.0			1056.941	Q8291117.CHW	Да
2/2	64000.0			1233.588	Q8291117.CHW	Да
2/3	17500.0			1440.399	Q8291117.CHW	Да

$k_0 = 8.39845$
 $k_1 = -0.00289258$
 $k_2 = 0$
 $k_3 = 0$

$L = -0.00289258 \cdot T + 8.39845$

СКО = 0.613 %

OK Отмена Справка

- Оцените полученный результат визуально по графику или по величине **СКО**.
- Если какая-либо точка заметно выпадает из общего ряда, исключите ее, выделив соответствующую строку в списке градуировочных точек и щелкнув мышью по кнопке **Использ**. При этом в последнем столбце списка слово **Да** заменится на слово **Нет**, точка будет отмечена на графике знаком **+**, будет выполнен пересчет коэффициентов и построение нового графика. Повторное выполнение той же процедуры вновь включает точку в число используемых. Исключить можно любое количество точек.
- Если требуется, выберите оптимальный вариант аппроксимирующей зависимости, изменяя значения в списочном поле **Формула**. При этом все изменения результатов расчетов будут отражаться в окне в виде изменения значений параметров и вида графика.

Для получения градуировки с помощью метода **Монодисперсный** достаточно одной градуировочной хроматограммы. Однако также предусмотрена возможность использования для одной градуировки и хроматограмм нескольких образцов, которые могут содержать как одни и те же, так и различные монодисперсные фракции. В первом случае повышается статистическая достоверность получаемой градуировки, во втором – также расширяется диапазон определяемых молекулярных масс и/или добавляются данные для наилучшего выбора аппроксимирующей функции. Процедура добавления данных для градуировки описана в разделе **Добавление и удаление градуировочных хроматограмм**.

16.2.2.2.2 Метод Полидисперсный

При выборе этого метода в окне **Градуировка ГПХ** происходят следующие изменения: списочное поле **Формула** блокируется, так как возможно использование только линейной аппроксимации; область **Данные пробы** заменяется областью **Параметры градуировки** с полями **Mn** и **Mw**. После нажатия кнопки **Добавить к градуировке** эти поля становятся доступными для ввода данных, а в списке градуировочных точек появляется единственная строка, содержащая имя файла текущей хроматограммы. Далее для расчета градуировочной зависимости необходимо выполнить следующее.

- * Введите в поля **Mn** и **Mw** в области **Параметры градуировки** соответствующие параметры градуировочного образца.

- * Щелкните мышью по любому полю кроме того, в которое были введены последние данные. Программа произведет расчет градуировочных коэффициентов **k1** и **k0**, которые будут представлены в одноименных полях. В окне также появятся формула и график градуировочной зависимости.

При получении градуировки с помощью метода **Полидисперсный** возможно использовать только *одну* градуировочную хроматограмму.

16.2.2.3 Метод Универсальный

После выбора в списочном поле **Метод** значения **Универсальный** поля **K** и **Альфа** становятся доступными для ввода данных, кроме того, изменяется величина, представляемая на графике по координате $Y: lg(M)$ заменяется величиной $lg([v]M)$. Дальнейший порядок действий зависит от того, полностью ли была создана **Таблица компонентов**.

- Если **Таблица компонентов** создана, все дальнейшие процедуры выполняются так же, как для метода **Монодисперсный** (см. выше). Единственное отличие состоит в том, что в списке градуировочных точек вводятся данные также в столбцы **K** и **Альфа**.
- Если **Таблица компонентов** содержит только одну строку, выполните следующее.
- Введите в поля **K** и **Альфа** значения, соответствующие большинству монодисперсных фракций используемого образца, и нажмите кнопку **ОК**. Произойдет возврат в **Таблицу компонентов**.
- Завершите создание **Таблицы компонентов**, как это описано выше в разделе **Создание таблицы компонентов**.
- Вернитесь в окно **Градуировка ГПХ** и нажмите кнопку **Добавить к градуировке**. Программа выполнит расчет градуировочной зависимости.
- Если требуется, внесите необходимые коррективы, как это описано в разделе **Метод Монодисперсный**.

При получении градуировки с помощью метода **Универсальный** возможно использовать как одну, так и несколько градуировочных хроматограмм аналогично методу **Монодисперсный**.

16.2.2.3 ГПХ Завершение градуировки и запись метода

- После завершения всех операций в окне **Градуировка ГПХ** нажмите кнопку **ОК**. Произойдет возврат в **Таблицу компонентов**.
- Нажмите кнопку **ОК**, **Таблица компонентов** закроется.
- Для того чтобы в дальнейшем при использовании создаваемого метода получать отчеты в требуемом виде, откройте окно **Опции отчета**, нажав кнопку , и выполните необходимые настройки (см. раздел **Особенности отчетов для ГПХ**).
- Выберите команду **Файл/Сохранить/Метод** и запишите файл метода под новым именем.
- Закройте хроматограмму, сохранив внесенные изменения.

16.2.2.4 ГПХ Печать результатов градуировки

Результаты градуировки могут быть распечатаны непосредственно из окна **Градуировка ГПХ** независимо от отчета для конкретной хроматограммы. Кроме того, отдельно может быть скопирован в буфер для вставки в другой файл график градуировочной зависимости. Команды, необходимые для выполнения этих операций, включены в меню, расположенное под заголовком окна. Печать результатов градуировки производится с использованием установок, сделанных в окне **Опции отчета** (см. выше).

- Для предварительного просмотра результатов градуировки, выводимых на печать, выберите команду **Просмотр**. Откроется окно **Просмотр** (см. раздел [Вывод на принтер](#)).
- Для печати отчета выберите команду **Печать**. При этом откроется стандартное окно системы *Windows* для печати (**Печать** или **Print** для русско- или англоязычной версии *Windows* соответственно). Все процедуры в этом окне выполняются по общим правилам работы в *Windows* (см. там же).
- Для копирования рисунка в буфер выберите команду **Скопировать в буфер**.

16.3 Получение хроматограмм с использованием методов ГПХ

[Определение ММР](#)
[Изменение и удаление градуировочных хроматограмм](#)

16.3.1 Определение ММР

Для определения **ММР** исследуемого образца выполните следующее.

- Откройте ранее созданный **метод ГПХ**, содержащий **градуировку**, или **хроматограмму**, полученную с использованием такого метода.
- Запустите сбор данных и получите новую хроматограмму.
- Убедитесь, что на участках хроматограммы, выделенных для определения начального и конечного значения базы, нет случайных пиков или провалов. В случае необходимости измените границы этих участков (см. раздел [Разметка хроматограммы ГПХ](#)).
- Если при градуировке был использован метод **Универсальный**, введите значения параметров **К** и **Альфа** для исследуемого образца, выполнив следующее.
- Откройте окно **Градуировка ГПХ**, выбрав команду **Метод/Градуировка.../Графики** или открыв **Таблицу компонентов** и нажав кнопку **Графики**.
- Введите значения **К** и **Альфа** в одноименные поля и нажмите кнопку **ОК**. Если окно **Градуировка ГПХ** было открыто из **Таблицы компонентов**, при ее закрытии также необходимо нажать кнопку **ОК**.

Получите **отчет** с параметрами **ММР**, рассчитанными по хроматограмме, в соответствии со стандартной процедурой получения

16.3.2 ГПХ Добавление и удаление градуировочных хроматограмм

Добавление данных для образца с исходным набором монодисперсных фракций

Для того чтобы добавить к градуировке данные хроматограммы образца, содержащего те же монодисперсные фракции, выполните следующее.

- [Получите хроматограмму](#) с использованием метода, содержащего градуировку, к которой производится добавление данных.
- Откройте [Таблицу компонентов](#) и убедитесь в правильности идентификации пиков. Возможны следующие ошибки идентификации:
- Пик не найден из-за того, что время выхода пика на текущей хроматограмме отличается от ранее заданного в [Таблице компонентов](#) больше, чем указано в столбце [Окно](#). Для такого компонента в столбце [Пик](#) стоит значение 0.
- Вместо большого пика идентифицирован соседний маленький пик, случайно имеющий более близкое значение времени удерживания.
- Если идентификация произведена с ошибками, внесите исправление в таблицу, введя в столбец [Пик](#) номера пиков, соответствующих монодисперсным фракциям.
- Откройте окно [Градуировка ГПХ](#) и нажмите кнопку [Добавить к градуировке](#). Программа добавит необходимое число строк в [список градуировочных точек](#) с указанием имени файла текущей хроматограммы, нанесет новые точки на график и произведет пересчет [градуировочной зависимости](#).



В [списке градуировочных точек](#) указывается фактическое [время удерживания](#), полученное в указанной хроматограмме, то есть, для одного и того же компонента в разных строках могут стоять несколько отличающиеся значения. В [Таблице компонентов](#) для всех градуировочных хроматограмм сохраняются одни и те же значения времени удерживания, полученные при первой градуировке, если не выполнялась процедура обновления значений.

- Оцените полученный результат и произведите, если требуется, корректировку, как это делалось при первоначальном получении градуировочной зависимости (см. раздел [Метод Монодисперсный](#)).
- Закройте окно [Градуировка ГПХ](#) и [Таблицу компонентов](#), нажав в обоих случаях кнопку [ОК](#).
- Сохраните новую градуировку в файле метода, как это описано в разделе [Завершение градуировки и запись метода](#).

Добавление данных для образца с измененным набором монодисперсных фракций

Для того чтобы добавить к градуировке данные хроматограммы образца, содержащего *иной* набор монодисперсных фракций, выполните следующее.

- Получите хроматограмму с использованием метода, содержащего градуировку, к которой производится добавление данных (см. [предыдущий раздел](#)).
- Откройте [Таблицу компонентов](#). Если программа не найдет пиков, которые можно сопоставить тем или иным компонентам из таблицы, в соответствующих строках в столбце [Пик](#) будет стоять значение 0. Некоторым компонентам, отсутствующим в текущем образце, могут быть сопоставлены случайные мелкие пики.
- Внесите необходимые изменения в [Таблицу компонентов](#).
- Исправьте, если требуется, ошибки идентификации для компонентов, ранее включенных в таблицу: в столбец [Пик](#) введите номер пика на текущей хроматограмме, если соответствующая фракция есть в образце, или 0, если этой фракции в образце нет.
- Добавьте необходимое число строк для новых фракций, нажимая кнопку [Добавить](#), и введите для них значения в столбец [Мол.вес](#) (для метода [Универсальный](#), при необходимости, отредактируйте также значения [К](#) и [Альфа](#)).
- Откройте окно [Градуировка ГПХ](#) и выполните все процедуры, описанные в предыдущем разделе.
-

Объединение нескольких независимо полученных хроматограмм

Градуировочная зависимость может быть построена на основе данных нескольких независимо полученных хроматограмм. Этот способ особенно удобно использовать в случае, когда в разных хроматограммах вообще нет пиков одних и тех же фракций, в частности, если для каждой фракции получена отдельная хроматограмма.

Для построения градуировочной зависимости выполните следующее.

- Откройте все хроматограммы и расположите их так, чтобы они все были одновременно видны, с помощью команды **Окно/Расположить по вертикали** или **Окно/Расположить по горизонтали**.



Все хроматограммы должны быть получены с использованием одного и того же метода!

- Выберите какую-либо хроматограмму и выполните следующее.
 - Откройте окно **Параметры разметки**, задайте в полях **Начало пиков** и **Конец пиков** такие значения, чтобы полученный диапазон перекрывал область пиков для всех градуировочных хроматограмм, и нажмите кнопку **ОК**.
 - Если для этой хроматограммы ранее не была создана **Таблица компонентов**, выполните процедуры, описанные в разделе **Создание таблицы компонентов**.
 - Если данные этой хроматограммы не были ранее использованы для построения градуировочной зависимости, выполните процедуры, описанные в разделе **Получение градуировочной зависимости**, для метода **Монодисперсный** или **Универсальный**.



Если в первой хроматограмме содержится только один пик, единственная точка не показывается на графике в окне **Градуировка ГПХ**.

- Запишите произведенные изменения в файл метода, выбрав команду **Метод/Градуировка/ Записать в метод**.
- Закройте хроматограмму.
- Выберите какую-либо другую хроматограмму и добавьте эти данные для построения градуировочной зависимости, выполнив следующее.
 - Скопируйте данные из файла метода, выбрав команду **Метод/Градуировка/ Прочитать из метода**.
 - Откройте **Таблицу компонентов** – в ней будут содержаться данные из первой хроматограммы.
 - Исправьте, если требуется, ошибки идентификации для компонентов, ранее включенных в таблицу, как это описано в предыдущем разделе.
 - Добавьте строки для пиков фракций, которых не было в предыдущей хроматограмме, и введите для них данные о молекулярных весах.
 - Откройте окно **Градуировка ГПХ** и далее добавьте текущую хроматограмму к градуировочным, как это описано в разделе **Добавление данных для образца с исходным набором монодисперсных фракций**.
 - Запишите произведенные изменения в файл метода, выбрав команду **Метод/Градуировка/ Записать в метод**.
 - Закройте хроматограмму.
- Повторите описанную процедуру для всех остальных хроматограмм. В результате в файле метода будет получена полная **градуировочная зависимость** с использованием данных всех хроматограмм.

Удаление градуировочной хроматограммы

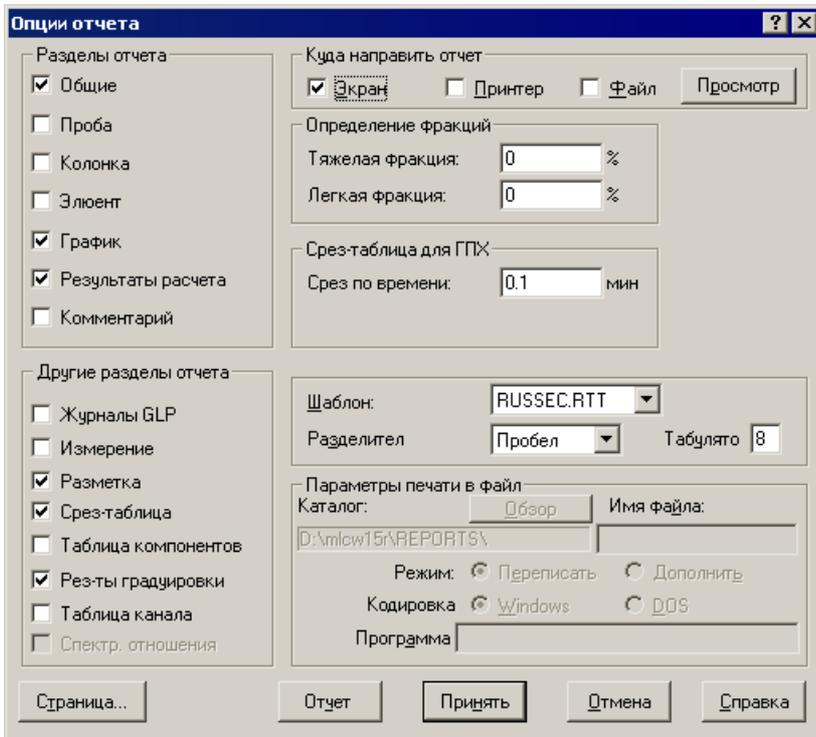
Любая **градуировочная хроматограмма** может быть удалена. Эта операция, в отличие от *исключения* точек (см. раздел [Метод Монодисперсный](#)) является необратимой, то есть, удаленная **градуировочная хроматограмма** не может быть тут же восстановлена (кроме случая, когда она является текущей). Для удаления **градуировочной хроматограммы** выполните следующее.

- Установите курсор на любую строку **списка градуировочных точек**, относящуюся к удаляемой хроматограмме.
- Нажмите кнопку **Удалить пр-му**. При этом появится сообщение, содержащее запрос на подтверждение удаления.
- Нажмите кнопку **Да**. При этом будут удалены все строки с именем удаляемой хроматограммы из списка градуировочных точек и точки с графика, а также выполнен перерасчет градуировочной зависимости. При удалении какой-либо хроматограммы номера всех остальных хроматограмм сохраняются неизменными. Если удаляется текущая хроматограмма, вновь становится активной кнопка **Добавить к градуировке**.

16.4 Особенности отчетов для ГПХ

Настройки опций отчета

- Откройте окно **Опции отчета**, нажав кнопку  (общую информацию о настройке опций отчета см. [Отчет](#)).

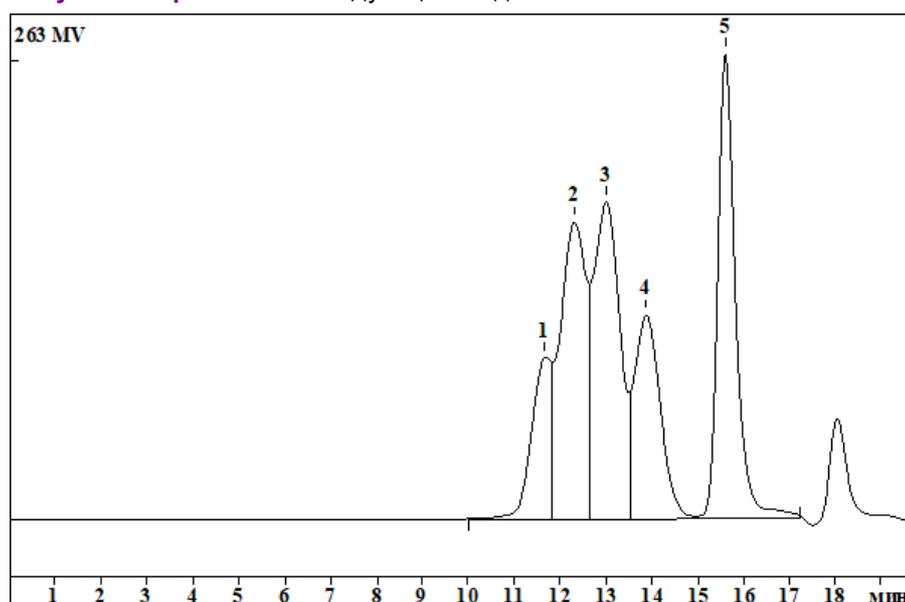


- В списочном поле **Шаблон** выберите файл *russec.rtt*, который предназначен для создания отчета для **хроматограмм ГПХ** на русском языке.
- В области **Разделы отчета** установите флажки, соответствующие разделам **График** и **Результаты расчета**, а также любые другие флажки, которые содержат требуемую информацию о хроматографическом процессе.

- Если требуется отдельно определить параметры **Mn** и **Mw** для тяжелой и/или легкой фракции, задайте в области **Определение фракций** долю фракций в % от полной массы (площади под кривой).
- Если требуется получить в отчете таблицу данных **по временным срезам**, выполните следующее.
 - В области **Срез-таблица для ГПХ** введите в поле **Срез по времени** величину временного интервала вывода данных в таблице.
 - В области **Другие разделы** установите флажок **Срез-таблица**.
- В области **Другие разделы** установите, если требуется, флажок **Результаты градуировки**, а также **Разметка**, включающие в отчет разделы со сведениями о градуировке, использованной при расчете **ММР**, и о разметке текущей **хроматограммы ГПХ**. Возможна также установка других незаблокированных флажков этой области для включения в отчет информации о параметрах приема данных. Разделы, соответствующие заблокированным флажкам, в отчете печататься не будут, независимо от их установки.
- Нажмите кнопку **Принять**. Окно **Опции отчета** закроется с сохранением всех сделанных установок.

Вид отчета

Результаты расчета **ММР** включаются в отчет при установке флажков **График** и **Результаты расчета** в следующем виде:



РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ММР

Для образца с $K = 1.000000$ Альфа = 0.000000

MN: 1089.29

MW: 6456.27

MW/MN: 5.92704 (Индекс полидисперсности)

MZ: 14039.3

MZ+1: 21156.4

MP: 381.551 (Молекулярная масса для наибольшего пика)

MN, тяжелая фракция: 21262.7

MW, тяжелая фракция: 22441.4

MN, легкая фракция: 263.626

MW, легкая фракция: 286.846

При установке соответствующих флажков в области **Другие разделы** в отчет также могут быть включены другие разделы), которые содержат специфическую для **ГПХ** информацию.

Данные листа **Параметры ГПХ** окна **Параметры разметки** (флажок **Разметка**).

ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Границы интервалов для расчета ММР

Начало базовой линии: 0мин

Конец базовой линии: 20мин

Начало пиков: 10мин

Конец пиков: 20мин

Начало области анализа: 10мин

Конец области анализа: 17.2мин

Данные по временным срезам представляются в таблице, содержащей следующие столбцы: **Время** (среднее значение времени интервала, длительность которого задана в поле **Срез по времени** в окне **Опции отчета**); **Mw** – значение средневзвешенной молекулярной массы для интервала; **M%** – % от общей массы полимера, приходящийся на интервал; **M%, сумма** – % от общей массы, приходящийся на все интервалы, начиная с текущего; **N%** – % от общего числа молекул, приходящийся на интервал; **N%, сумма** – % от общего числа молекул, приходящийся на все интервалы, начиная с текущего.

ТАБЛИЦА ДАННЫХ ПО СРЕЗАМ

№	Время	Mw	M%	M%, сумма	N%	N%, сумма
1	10.24	78296.8	0.048	100.000	0.001	100.000
2	10.74	47567.9	0.230	99.952	0.005	99.999
3	11.24	28899.1	3.429	99.722	0.128	99.994
4	11.74	17557.2	9.666	96.293	0.596	99.866
5	12.24	10666.6	16.033	86.627	1.626	99.270
6	12.74	6480.3	16.054	70.594	2.680	97.644
7	13.24	3937.0	13.110	54.540	3.603	94.964
8	13.74	2391.9	10.509	41.430	4.754	91.361
9	14.24	1453.1	5.329	30.920	3.968	86.607
10	14.74	882.8	0.425	25.592	0.521	82.639
11	15.24	536.3	5.731	25.166	11.560	82.118
12	15.74	325.8	17.476	19.436	58.026	70.558
13	16.24	198.0	1.444	1.960	7.891	12.532
14	16.74	120.3	0.516	0.516	4.641	4.641

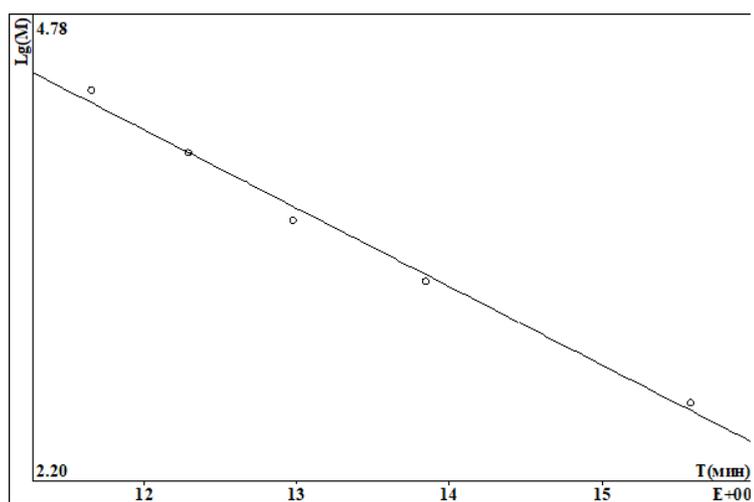
Градуировочные данные, соответствующие информации, представленной в окне **Градуировка ГПХ**.

ГРАДУИРОВКА ДЛЯ ГПХ АНАЛИЗА:

Метод градуировки: Монодисперсный

Градуировочная зависимость: $L = - 0.43286 \cdot T + 9.32695$

СКО: 1.897 %



K3 = 0.000000
K2 = 0.000000
K1 = -0.432860
K0 = 9.326947

Мол.Масса	K	Альфа	Хр-ма	Время
22300.0	0.000000	0.000000	1	11.6579
10100.0	0.000000	0.000000	1	12.2939
4300.0	0.000000	0.000000	1	12.9792
1960.0	0.000000	0.000000	1	13.8541
423.0	0.000000	0.000000	1	15.5876

Градуировочные хроматограммы:

Хр-ма Файл
1 K2011206.CHW

Индекс

- Ajust retention time 86
- apply 33
- cancel 33
- Серийный номер колонки 74
- К 171
- M% 174
- M%, сумма 174
- Mw 174
- N% 174
- N%, сумма 174
- OK 33
- RTT файлы 149
- Абсолютная градуировка 144
- авт. выдача отчета 86
- авт. закрытие хр-мы 87
- Автомасштабирование 48, 86
- автоматическое закрытие хр-мы 87
- адрес ввода-вывода 21
- Альфа 171
- Асимметрия 63
- АЦП "МультиХром" ADC7710b 18
- АЦП E-24 23
- АЦП ЛА-И24 21
- АЦП МультиХром ADC7710 22
- АЦП МультиХром-1 22
- Базовая линия 68
- Блокировать систему 156
- Введение 14
- Вернуть 121
- Вид 39
- Вид: выбрать канал 44
- Вид: метки пиков 43
- Вид: цвета 45
- Внешний старт 31
- Внешний стоп 80
- Внутренний диаметр колонки 74
- Внутренняя нормализация (Нормализация концентраций) 143
- во время измер. каждые XXX мин 86
- Время 174
- Всё 48
- Все по вертикали 47
- Все по горизонтали 47
- Вставить строки 120
- Входное сопротивление 23
- Выбор 46
- Выбор базового адреса ввода-вывода 21
- Выбор канала 63
- Выбросы 84
- Выйти 37
- Вырезать строки 120
- Вычесть 49
- гель-проникающая хроматография 159
- Главное меню 35
- Главное окно программы 28
- Глобальные настройки 152
- ГПХ 159
- ГПХ параметры разметки 162
- ГПХ Выполнение расчетов 159
- ГПХ Добавление градуировочной хроматограммы 171
- ГПХ Завершение градуировки и запись метода 165
- ГПХ Задание параметров разметки 162
- ГПХ Методы градуировки 159
- ГПХ окно Параметры разметки 162
- ГПХ Печать результатов градуировки 165
- ГПХ Получение градуировочной зависимости 165
- ГПХ Построение базовой линии 162
- ГПХ Создание таблицы компонентов 165
- ГПХ Удаление градуировочной хроматограммы 171
- Градуировать 49
- Градуировка: Введение в процедуру 93
- Градуировка: основные операции. 92
- Градуировочная зависимость 107
- Градуировочная кривая 108
- Градуировочная точка 71
- Градуировочный график 105
- Границы интервалов для расчета MMP 174
- Группы 103
- Давление на входе колонки 76
- Дата и время записи 71
- Дата и время запуска 70
- Дата/время получения пробы 73
- Делитель частоты 79
- Демонстрационный режим 26

- Диалоговые окна 32
- Диапазон входного сигнала
- Аналоговая земля (экран) 22
 - Аналоговый вход (-) 22
 - Аналоговый вход (+) 22
 - кнопка дистанционного запуска (1-й контакт) 22
- Диапазон входных напряжений 23
- Динамический диапазон 23
- Добавить событие разметки 66
- Добавление канала 92
- Дополнительные разделы отчета 140
- дрейф времен удерживания 101
- Европейская фармакопея 88
- Единицы удерживания 102
- Единицы хроматограммы 154
- Если метод изменен 153
- Если метод на диске более свежий 154
- Журнал метода 76
- Журнал хроматограммы 77
- Заголовок диалогового окна 34
- Заголовок отчета 140
- Заголовок хроматограммы 33
- Загрузить основные 47
- Задержка 63
- Задержка старта хроматограммы 79
- Заказной метод 144
- Закончить хроматограмму 31
- Закрывать 37
- Закрывать всё 52
- Закрывать пакетный пересчет 128, 130
- Записать в метод 113
- Записать хроматограмму 58
- Запуск 79
- Запуск хроматограммы 12
- Запустить очередь 119
- Запустить очередь (режим исполнения) 117
- Защита 155
- Зернение сорбента 75
- Идентификация пиков 94
- Изменить вид хроматограммы 129
- Изменить паспорт 129
- изменить порядок каналов 81
- Изменить систему 119
- Измерение 78
- Импорт градуировки 112
- Импортировать хроматограмму 59
- Имя текущего пользователя 71
- имя файла метода 70
- Имя файла хроматограммы 70
- индекс удерживания 90
- Индексы удерживания 100
- интегральный 24-разрядный аналого-цифровой преобразователь 21
- Интегрирование 95
- Интерпол.начало/конец базовой линии 64
- Интерполяция 64
- Интерфейс 17, 92
- Информация об интерфейсе 80
- Использовать метод из файла для пересчета 126
- Как выполнить... 156
- Как запустить очередь 158
- Как напечатать отчет 151, 156
- Как открыть пакет хроматограмм 130
- Как провести пакетный пересчет 157
- Как создать таблицу компонентов 158
- Как создать таблицу концентраций 159
- Канал Total 136
- Каналы 80, 134
- Каскад 52
- Каталог 87
- Клавиатура и мышь 13, 34
- Кнопка Отчет 151
- Количественный расчет 113
- Количество 114
- Количество внутреннего стандарта 73
- Количество каналов 23
- Количество образца 73
- Количество теоретических тарелок на метр 146
- Колонка 74
- Комментарии 76
- Компенсация дрейфа 48
- Компоненты системы 27
- Конец базовой линии 64, 174
- Конец области анализа 174
- Конец пиков 174
- Контекстные меню 32
- Контроль базовой линии 46
- Конфигурация принтера 148
- Концентрация 142
- Коротко об АО "АМПЕРСЕНД" 14

Критерий идентификации	96	Многоканальные хроматограммы-Интегрирование	95
Куда направить отчет	147	Многоточечная градуировка	108
Курсор	56	модуль ГПХ	159
Лист "Измерение"	78	Мозаика	52
Лист "Формулы"	87	молекулярно-массовое распределение полимеров	159
Лист Обработка	84	Монодисперсный метод	165
Лист Общее	69	МультиХром	15
Маркеры канала	44	Наездник	64
медиана	84	Название детектора	71, 80
Меню Буфер	37	Настройка АЦП	24
Меню Вид	39, 53	Настройка метода	77
Меню Измерение	48	Настройка метода: каналы	80
Меню Метод	50	Настройка сбора данных	90
Меню настройка	51	Настройки: GLP	155
Меню Обработка	49	Настройки: Открытие хроматограммы	154
Меню окна градуировочной зависимости	107	Настройки: Сохранение хроматограммы	154
Меню Окно	52	начало	64
Меню Пик	38	Начало базовой линии	174
Меню таблица	38	Начало области анализа	174
Меню файл	36	Начало пиков	174
Меню Файл: Открыть	36	Не соединять точки	43
Меню файл: сохранить	37	Новый комментарий	76
Мертвое время	97	Новый метод	37
Метка пика	42	Номер текущего анализа	71
Метки пика: флажки	43	Номер текущей хроматограммы	71
Метод	59, 60, 91	Нормализация	143
Метод - сбор данных	91	НСД - Выбор интерфейса	
Метод абсолютной градуировки.	111	Выбор интерфейса	92
Метод внутреннего стандарта	110	НСД - Интерфейс	92
метод Гаусса	84	НСД -Добавление канала	92
Метод Монодисперсный	165	НСД- Метод	91
Метод определение	60	НСД -очистить список	92
Метод Полидисперсный	165	НСД -Удаление канала	92
Метод расчета	90	область анализа ГПХ	162
Метод расчета индексов удерживания	90	Обновить файл метода после пересчета	127
Метод расчета концентраций	143	Обозначения	109
Метод расчета мертвого времени/объема:	89	Обработка	84
Метод Универсальный	165	Образец	46
Метод: открыть	90	Общая информация	14
Метод: сохранить	90	Общее	69
Мин.Высота	63	Общее описание пробы	72
Мин.Площадь	63	Объединение хроматограмм	171
Минимальная высота	63	Объединить	130
Минимальная площадь	63	Объем пробы в микролитрах	73
ММР	159		
Многоканальная хроматограмма	134		

- Объемная скорость подвижной фазы 76
Обычные компоненты 96
Одноточечная градуировка 108
Ожидаемое время удерживания 96
Окно «Пакетный пересчет» 125
окно Градуировка ГПХ 171
Окно идентификации 96
окно Компонент 105
Окно хроматограммы. 28
Операции с файлами методов 90
Описание пробы 72
Описание сорбента 75
Опорный канал 135
Определение ММР 171
Опции отчета: Таблица пиков 140
Оси хроматограммы 40
Оси: метки 41
Оси: флажки 41
Ось Y 41
Ось X 41
Отклик детектора 100
Отключить события 66
Открыть все файлы 127
Открыть метод и запустить 30
Открыть очередь 121
Открыть пример 126
Открыть хроматограмму 57
Отмена 33
Отменить (режим исполнения) 116
Отменить последний анализ 116
Относительная концентрация 141
Относительные коэффициенты отклика 112
Отрицательные пики 64
Отчет 138
Отчет: параметры печати в файл 147
Очереди 114
Очереди: сохранение 123
Очередь определение 114
Очередь: файловые операции 123
Очередь: открытие файла 124
очистить список 92
Пакет хроматограмм: общее 124
Пакет хроматограмм: сохранение 131
Пакетный пересчет: общие установки 126
Пакетный пересчет: открыть 125
Пакетный пересчет: отчет 133
Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограмм 131
Пакетный пересчет: режим пересчета 127
Пакетный пересчет: таблица пакета хроматограмм 132
Пакеты хроматограмм: определение 124
Пакеты хроматограмм: работа с файлами 130
Пакеты хроматограмм: создание 131
Параметры 88
параметры ММР 159
Параметры предколонки 75
Параметры разметки 61
Параметры разметки: Установки 61
Пароль 156
Паспорт 68
Первая градуировка 165
Перевернуть 50
Перезаписывать файл данных 153
Перезапуск метода 87
Перезапустить метод 31
Переключатели 33
переключение 86
Переразметить 128
Пересчет 129
Пересчитать 101
Пересчитать градуировочные 127
Пересчитать обычные 127
Печатать через буфер 154
Печать таблицы очереди 121
Печать хроматограммы 37, 59
Пик 68
Пиктографическое меню 29
По умолчанию-цвета 47
Подогнать под опорный 81
Подсказка 53
Показать все 45, 47
Поле Градуировочная точка 71
Полидисперсный метод 165
Помощь 33
Порог 63
порядок каналов 81
Последний пакет 130
Предложить 64
Приведенная высота
эквивалентная теоретической тарелке 147
Приведенный объем пробы 114

Прием данных от АЦП	16	Режим запуска	79
Применить	33	Режим редактирования	116
Принципы работы системы	16	Реперный компонент	96
Принять	148	Рисовать каждую точку	43
Приостановить хроматограмму	31	Ручная разметка	54
Приостановить очередь (режим исполнения) программа до-после	116 87	Сбросить	116, 119
Продолжительность хроматограммы	70	Сдвиг каналов	136
Продолжить хроматограмму	31	Сжатие данных	50
Продублировать строки	120	Система меню	29
Пролистать	148	Скопировать строки	120
Просмотр	31, 151	Скорость сбора данных	23
процедура определения MMP	159	Скрыть все	45
Процент концентрации	142	Собственный шум платы	23
Процент относительной концентрации	141	События интегрирования	65
Прочитать из метода	113	Создание методов ГПХ	162
Работа с очередями	123	Создание Таблицы компонентов	99
Работа с файлами хроматограмм	57	Создание Таблицы концентраций	104
Разведение исходного образца	73	Состав подвижной фазы	76
Разделитель	151	Сохранить и выйти	122
Разделы отчета	139	Сохранить и выйти из РО	119
Разметка	61	Сохранить очередь	121
Разметка страницы	148	Спектральный анализ	137
Разметка хроматограммы ГПХ	162	Специальный компонент	102
Размножить	119	список градуировочных точек	171
Разрядность	22, 23	Список каналов	44
Распознавание	95	Список событий	66
Расставить иконы	52	Список событий интегрирования	66
Расчетное количество	114	Списочные поля	33
Редактировать вид	129	Справка	33, 53
Редактировать параметры разметки	128	Срез по времени	174
Редактировать паспорт	129	Стандартный компонент	102
Редактировать таблицу	127	Статус процесса	28
Редактор очередей	115	Сырое количество	114
Редактор очередей: исполнение очереди	115	Таблица компонентов	97
Редактор очередей: Меню Настройки	117	Таблица концентраций	103
Редактор очередей: Меню Редактор	118	Таблица концентраций: Добавить точку	104
Редактор очередей: меню Справка	121	Таблица концентраций: Инфо	105
Редактор очередей: Меню Управление	117	Таблица описания каналов	135
Редактор очередей: меню Файл	121	Таблица очереди	122
Редактор очередей: редактирование таблицы очереди	116	Таблица пиков	140
Редактор пакета: меню Редактор	133	Табличная градуировка	111
Редактор пакета: меню Файл	133	Текстовые поля	33
Редактор пиков	54	Текущий канал	45
Режим GLP	154	Температура термостата	76
		Тест колонки	144
		Тип компонента	142

- Типы файлов 34
Только пересчитать 129
Требования к компьютеру 26
Увеличить по порядку 120
Удаление канала 92
Удаление программы 29
Удаление события 66
Удалить 37
Удалить канал 81
Удалить строки 120
Универсальный метод 165
Универсальный компонент 102
Урезать хроматограмму 50
Уровень градуировки 108
Уровень доступа 155
Установка и удаление программы 27
Установка программы 27
Установки 61
Установки COM портов 26
Установки метода 77
Установки платы АЦП 24
Учиться 64
Уширение 63
Фактор емкости 142
Фактор отклика 101
Фактор отклика детектора 113
Факторный анализ: выбор канала 137
Факторный анализ: выбор ранга 137
Факторный анализ: результаты 137
Фармакопея США 89
Фильтрация шумов 83
Фильтры 83
Фильтры: установки метода 81
флажок Гель-проникающая хроматография 159
флажок ГПХ 162
формулы 87, 88
Хроматограмма 53
Хроматограмма: градуировочная 56
Хроматограмма: обычная 59
Хроматограмма: продлить 31
Хроматограмма-определение 53
Хроматограммы: как копировать
перемещать файлы 58
Цвет элемента 46
Цвета 47
Частота сбора данных 79
Число измерений 84
Число каналов 22, 71
Число пиков 62
Число событий 66
Число теоретических тарелок (N_т) 146
число точек 84
Числовые поля 33
Шаблоны и разделители 149
Ширина 63
Ширина линии 47
широкое ММР 159
Шрифты 51
Шум базовой линии 68
Экспорт градуировки 113
Экспорт хроматограммы 58
Экспорт хроматограммы: текстовый формат 58
Элементы окна 46
Элюент 75

Back Cover