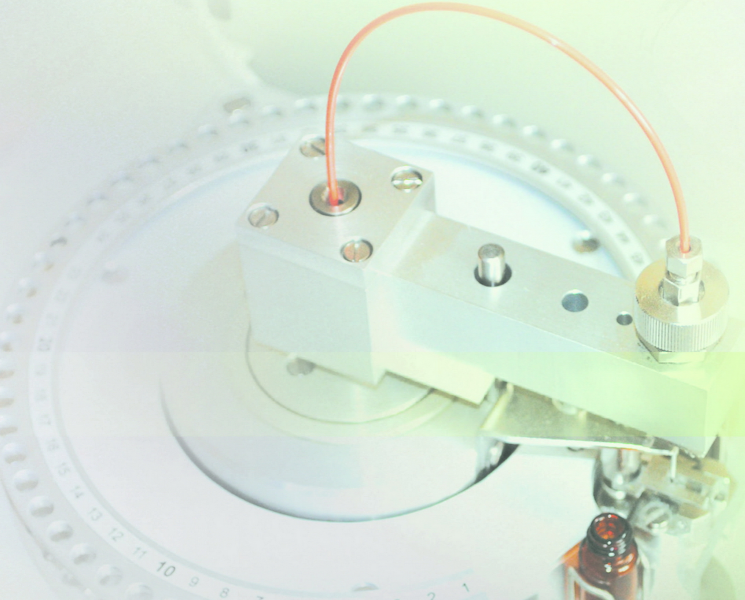
ЭКОНОВА
ECONOVA



Компьютерная программа-тренажёр

«ЖИДКОСТНЫЙ ХРОМОТОГРАФ»

Новосибирск - 2013

Компьютерная программа-тренажер “Жидкостный хроматограф”

Барам Г.И., Азарова И.Н., Петков А.П., Рябичев Д.А., Барам Е.Г., Каламбет Ю.А., Козьмин Ю.П., Мальцев С.А., Михайлова К.В.

Программа-тренажер "Жидкостный хроматограф" допущена Учебно-методическим объединением по классическому университетскому образованию в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки ВПО 020100 - "химия" и специальности ВПО 020201 - "фундаментальная и прикладная химия".

Программа дает возможность закрепить теоретические знания, полученные на лекциях, путем решения разнообразных аналитических задач на виртуальном жидкостном хроматографе.

© Новосибирский государственный университет, 2012
© ЗАО Институт хроматографии “ЭкоНова”, 2012
© ООО “ЭрминСофт”, 2012
© ЗАО “Амперсенд”, 2012
© Коллектив авторов, 2012

ЭКОНОВА ECONOVA

ЗАО Институт хроматографии “ЭкоНова”

630090, Новосибирск, Академгородок, ул. Николаева, д.8
Тел.: 8(383) 330-95-57 Факс: 8(383) 330-83-21
Эл. почта: info@econova.nsk.su Сайт: www.econova.ru

Общие сведения о программе

Программа устанавливается на компьютер с ОС Windows® XP/Vista/7 и предназначена для обучения работе на жидкостном хроматографе. Она требует знания основ обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) и умения работать на компьютере с установленными ОС Windows®, Microsoft Office® и Adobe Acrobat Reader® в объеме среднего пользователя.

Тренажер эмулирует работу хроматографа “Милихром А-02” и позволяет хроматографировать пробы растворов, состав которых определяет сам пользователь согласно списка из 30 веществ. Тренажер дает возможность менять состав подвижной фазы, осуществлять изократический и градиентный режимы элюции, менять скорость потока, температуру, объем пробы и параметры детектора во всем диапазоне значений, реализуемых в хроматографе “Милихром А-02”. Колонка и элюенты А и Б в версии программы v.1.1. фиксированы.

В состав Тренажера включена программа МультиХром-СПЕКТР (ЗАО “Амперсенд”, Москва), с помощью которой хроматограммы, генерируемые Тренажером, обрабатываются по типовым алгоритмам, а также по уникальным алгоритмам, включая возможность применения Базы данных “ВЭЖХ-УФ”. Важно, что Тренажер и МультиХром-СПЕКТР позволяют освоить все тонкости количественного анализа - наиболее трудоемкого раздела ВЭЖХ.

Программа поставляется на CD, DVD или USB-флеш-накопителе. К каждой копии прилагается электронный USB-ключ, без которого полная версия программы “Жидкостный хроматограф” работать не может. Демо-версия Тренажера распространяется бесплатно.

Комплект “Тренажер” включает в себя электронные версии следующих документов:

- Как работать с программой-тренажером. Краткая инструкция.
- Как работать с программой-тренажером. Подробная инструкция.
- Словарь терминов:
  I. Glossary of liquid-phase separation terms. IUPAC, 2001.
  II. Основные понятия и термины жидкостной хроматографии. Номенклатура Научного совета по хроматографии РАН, 1997.
- Типовые задачи для обучения методу ВЭЖХ-УФ с помощью компьютерного тренажера "Жидкостный хроматограф".
- Хроматограф жидкостный микроколоночный "Милихром А-02". Техническое описание и руководство по эксплуатации.
- Программа “МультиХром СПЕКТР”. Руководство пользователя.
- “Массовая концентрация УФ-поглощающих веществ”. МВИ методом ВЭЖХ (База данных “ВЭЖХ-УФ”). № ФР.1.31.2003.00950.
- База данных ”ВЭЖХ-УФ”. Список из 500 веществ по алфавиту.
- База данных ”ВЭЖХ-УФ”. Список из 500 веществ по возрастанию удерживания.
- Руководство к спектральному модулю программы МультиХром-СПЕКТР “Спектрохроматографический анализ при работе с хроматографом "Милихром А-02"”.
- Научные основы эмулирования ВЭЖХ-УФ. Разработка алгоритмов работы и методического обеспечения компьютерного тренажера “Жидкостный хроматограф”. Дипломная работа А.П.Петкова. Новосибирский государственный университет, 2008 г.

Инструкция по установке программы-тренажера на компьютер

Требования к компьютеру: операционная система Windows® XP/Vista/7;
установленная программа Adobe Acrobat Reader® версии 7.0 или выше;
разрешение экрана 1280x780 пикселей или более;
CD/DVD-привод и USB-порт.

Для установки программы запустить файл setup.exe, находящийся в папке ChromaTrainer+Multichrom (Demo).

На компьютере с ОС Windows Vista необходимо отключить контроль учетных записей (UAC):
.../Панель управления / Учетные записи пользователей / Включение или отключение контроля учетных записей (UAC).

На компьютере с ОС Windows 7 необходимо отключить контроль учетных записей:
.../Панель управления / Учетные записи пользователей / Изменение параметров контроля учетных записей.

Полная версия Программы может работать только тогда, когда в USB-порт вставлен электронный ключ и удален файл **.../ChromaTrainer/demo.key**.

Обновление демо-версии программы-тренажера пользователи осуществляют бесплатно и самостоятельно, загружая дистрибутив программы с сайта **www.econova.ru**. Дату выпуска установленной программы можно узнать, если навести курсор мыши на иконку со знаком “**?**”, расположенную в верхнем правом углу Главного окна программы.

Пароль в окне "Характеристики хроматографа" для всех выпусков программы по умолчанию всегда **econova**. Если Пользователь забыл пароль, который он установил самостоятельно, то для восстановления пароля **econova** надо переустановить программу.

Демо-версия Программы работает без ключа и распространяется бесплатно.

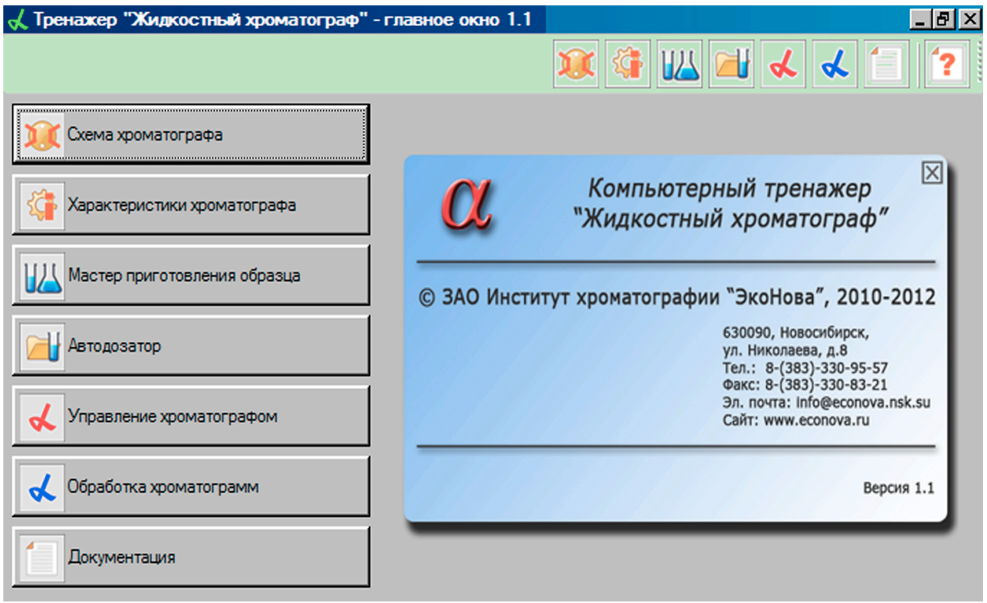
ВНИМАНИЕ! Программу Тренажер нельзя запускать, если на компьютере уже запущена программа "АльфаХром", управляющая работой хроматографа “Милихром А-02”.

Программа <Компьютерный тренажер "Жидкостный хроматограф"> зарегистрирована в Государственном реестре программ для ЭВМ под № 2010616585 и находится под защитой законов РФ о защите прав на интеллектуальную собственность.

Можно ли научиться управлять жидкостным хроматографом за 1 час? С помощью компьютерной программы-тренажера - легко! Потребуются лишь знания основ ВЭЖХ и немного терпения.

Установите, следуя Инструкции, программу-тренажер на компьютер, найдите на его рабочем столе иконку , щелкните по ней дважды левой клавишей мыши, и на экране появится Главное окно тренажера “Жидкостный хроматограф”.

Интерфейс Тренажера интуитивно понятен, и программа не требует специального изучения. В каждом окне есть свой раздел “Помощь”. В разделе “Документация” (Главное окно Программы) собран большой объем справочной информации, который полезен для углубленного изучения метода ВЭЖХ.



Материалы представлены в виде pdf-файлов, для чтения которых необходима соответствующая программа (например, Acrobat Reader). Все файлы расположены в папках ...\ChromaTrainer\Help и ...\Pdf. Для чтения файлы можно открывать из Проводника, не запуская Тренажер.

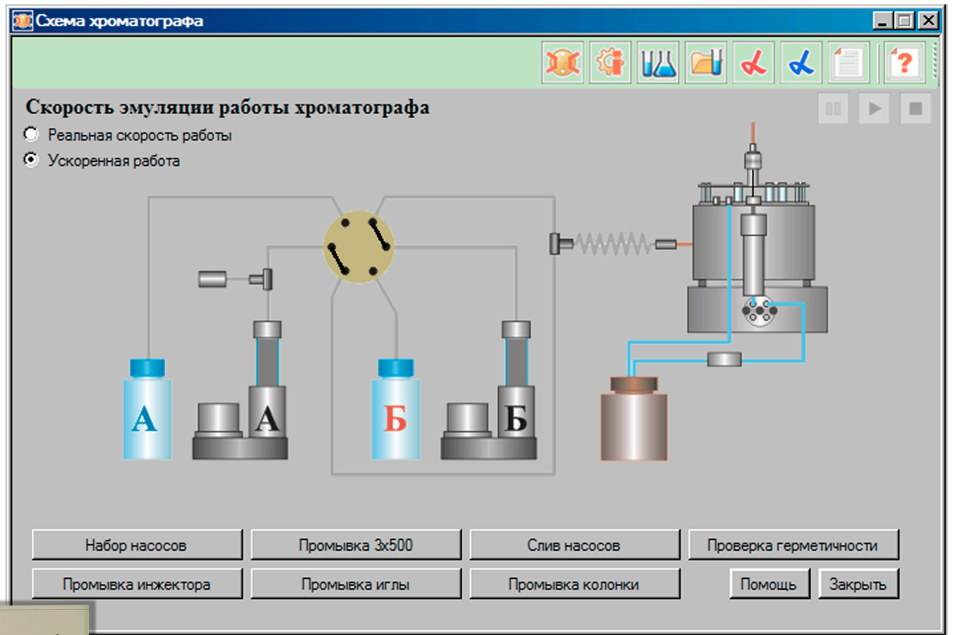
* * *

Тренажер “Жидкостный хроматограф” работает в полном объеме только в том случае, если в USB-порт компьютера вставлен специальный ***ключ***. Версия программы, работающая без ключа, имеет ряд ограничений, предназначена для первого ознакомления и распространяется бесплатно.

После щелчка левой клавишей мыши по иконке мы попадаем в окно Тренажера “Схема хроматографа”.

Очевидно, что Тренажер должен эмулировать работу только одного хроматографа, точно также, как не бывает “универсальных” тренажеров для летчиков, космонавтов, танкистов... Наш тренажер эмулирует работу хроматографа “Милихром А-02”, фотография которого внизу страницы. Подробно о нем написано в материалах раздела “Документация”. Отметим лишь, что хроматограф “Милихром А-02” имеет следующие характерные особенности:

- *двухшприцевый градиентный насос;*
- *УФ-спектрофотометрический детектор с возможностью быстрого циклического изменения длины волны (до 8 длин волн в цикле);*
- *инжектирование образца в колонку осуществляется после остановки потока элюента и сброса давления.*



В окне “Схема хроматографа” в режиме анимации можно “увидеть” принципы выполнения типичных операций по командам оператора. Названия этих операций написаны на соответствующих кнопках.

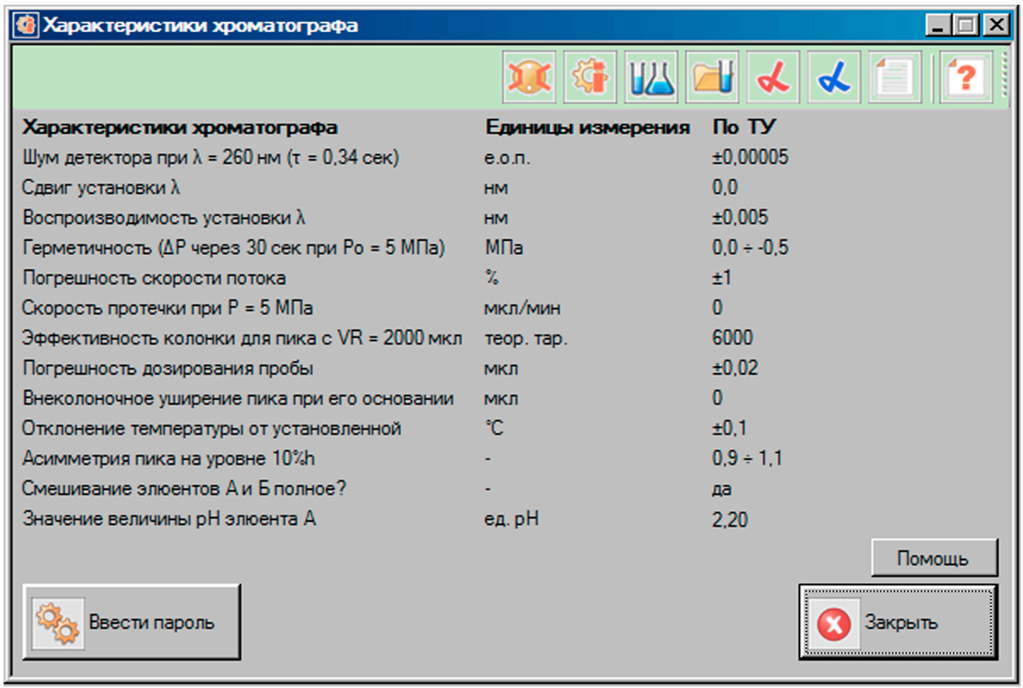
Важно! Скорость эмуляции работы хроматографа, задается только в этом окне. Режим “Реальная скорость работы” (медленный режим) нужен лишь для того, чтобы успеть “рассмотреть” быстрые операции (”Промывка иглы” и “Промывка инжектора”), а также для эмуляции записи УФ-спектров элюата во время хроматографии после остановки потока. В остальных случаях целесообразно применять режим “Ускоренная работа”.

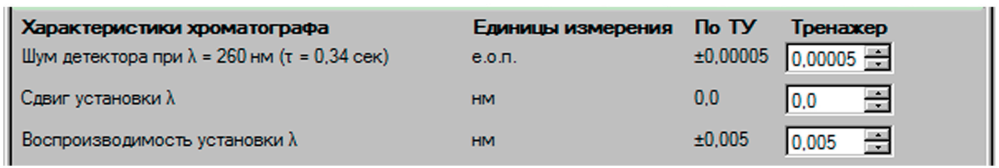
Если Вы не Студент, а Учитель, то щелкните левой клавишей мыши по иконке и зайдите в окно “Характеристики хроматографа”. Введите известный Вам **пароль,** установите “неправильные” характеристики хроматографа и закройте окно. Теперь хроматограф “испорчен”, но об этом знает только хранитель пароля. Студенту же предстоит обнаружить неисправность с помощью каких-либо приемов, иначе хорошей оценки ему не получить. Всё как в жизни.

В данной версии Тренажера (v. 1.1.) можно изменять только три характеристики хроматографа и величину эффективности колонки. По мере развития программы мы расширим возможности до полного набора, приведенного в таблице.

* * *

Демо-версия Тренажера изменять характеристики хроматографа не позволяет.





Теперь сформулируем Задачу, которую мы будем решать в процессе демонстрации Тренажера. Например, так:

Разработать экспрессную методику определения 2- и 3-нитроанилинов в воде с разрешением пиков R_s = 2 - 3.

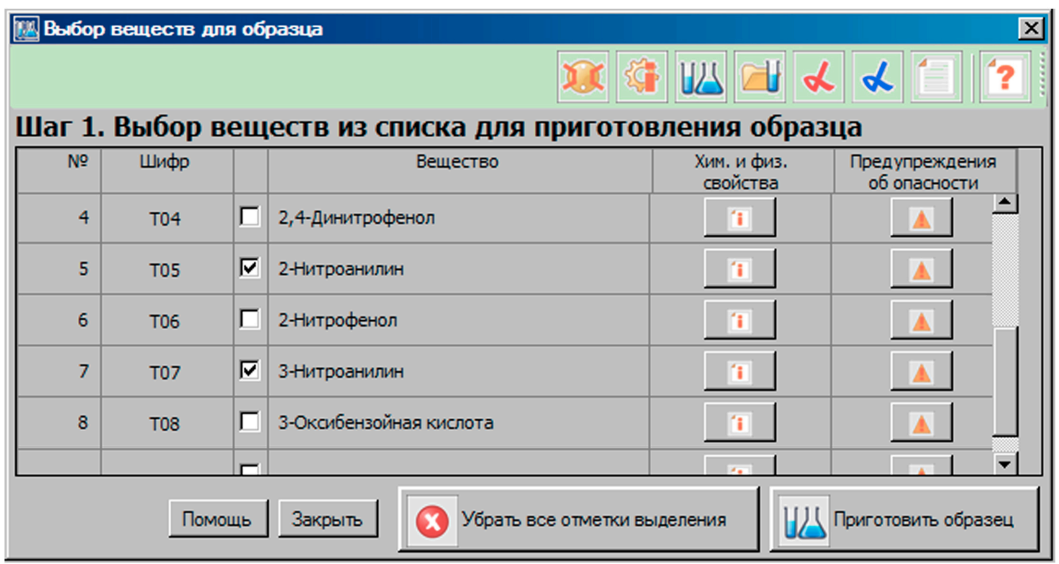
* * *

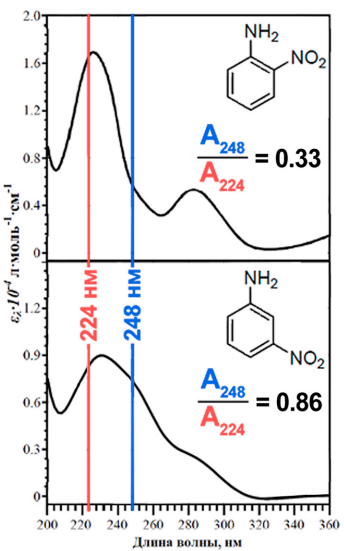
Начнем с приготовления раствора нитроанилинов, для чего щелкнем по иконке и откроем окно “Мастер приготовления образца”. В таблице “Выбор веществ для образца” отметим **2-нитроанилин** и **3-нитроанилин**, а затем узнаем их свойства, нажав соответствующие кнопки напротив выбранных веществ и вызвав, тем самым, на экран информационные листы в pdf-формате.

Обратим внимание на УФ-спектры нитроанилинов. Сравнив их между собой, выберем для детектора длины волн 224 и 248 нм. При этих длинах волн и чувствительность анализа будет высокой, и спектральные отношения будут значительно различаться. По величинам спектральных отношений мы без труда узнаем, какой пик на хроматограмме какому нитроанилину соответствует.

Можно, конечно, выбрать не две, а только одну длину волны, но тогда нам придется отдельно хроматографировать растворы каждого вещества, чтобы идентифицировать пики на хроматограммах по объемам или временам удерживания.

В данной версии Тренажера Список веществ включает в себя 30 соединений, формулы которых приведены в конце брошюры.

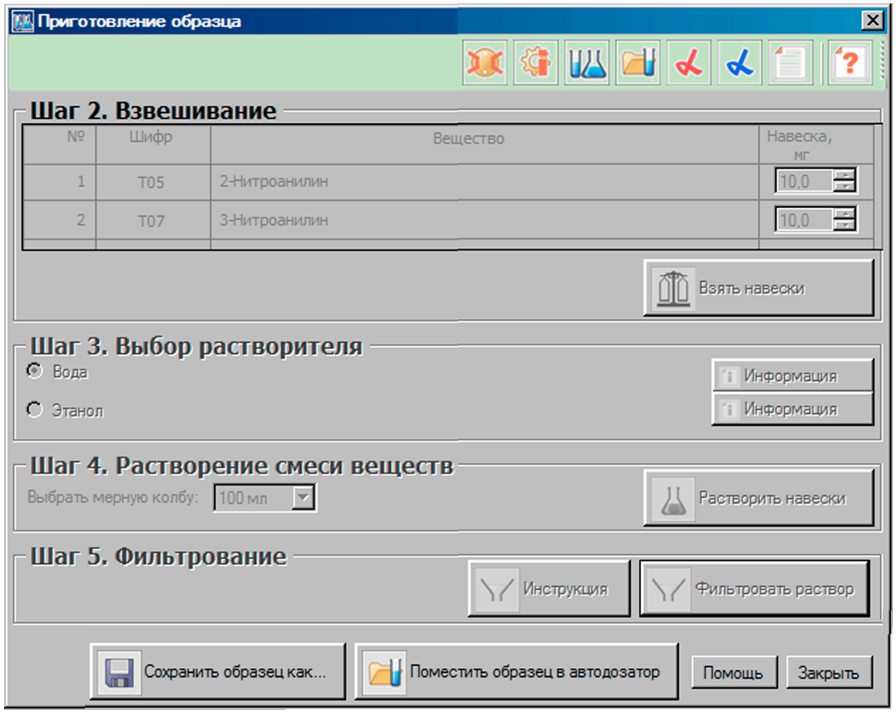




Для продолжения работы нажмем кнопку “Приготовить образец”.

В этом окне всё просто. Каждая последующая процедура становится возможной только тогда, когда выполнена предыдущая.

1. *Выбираем навески по 10.0 мг.*
2. *Нажимаем кнопку “Взять навески”.*
3. *Выбираем растворитель “Вода”.*
4. *Выбираем мерную колбу “100 мл”.*
5. *Нажимаем кнопку “Растворить навески”.*
6. *Перед тем как раствор фильтровать, надо нажать кнопку “Инструкция”, а уже затем будет позволено нажать кнопку “Фильтровать раствор”.*
7. *Нажимаем кнопку “Сохранить образец как...” и сохраняем его под именем Нитроанилины.sample.*
8. *Записываем в блокнот состав образца, как принято делать в лабораторной практике.*
9. *Нажимаем кнопку “Поместить образец в автодозатор” и переходим, тем самым, в следующее окно Тренажера.*



В данной версии Тренажера можно выбирать только один из двух растворителей, но этот ассортимент будет расширен. Если какое-нибудь вещество в выбранном растворителе не растворяется, то навески придется брать снова.

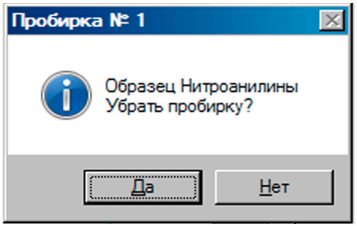
Образец в файл можно не сохранять. Его имя будет сгенерировано автоматически из шифров веществ. Информация об образце в этом случае сохраняется только в оперативной памяти компьютера до тех пор, пока не составлен следующий образец.

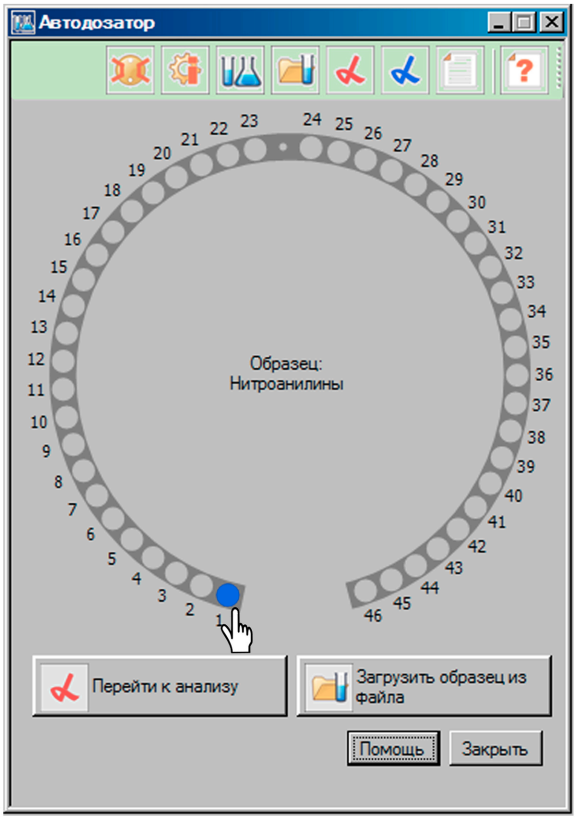
В демо-версии Тренажера возможности “Сохранить образец как...” нет.

* * *

Погрешность приготовления растворов образцов определяется величиной взятой навески (погрешность взвешивания +/- 0.1 мг) и погрешностью объема выбранной мерной колбы (класс точности 2, ГОСТ 1770-74).

В хроматографе “Милихром А-02” ввод пробы в колонку осуществляется только автоматически с помощью автодозатора. Для того, чтобы установить пробирку с образцом в одно из 46 гнезд автодозатора, надо навести курсор мыши на нужное гнездо и, когда появится указатель “палец”, щелкнуть левой клавишей. Гнездо зальется синим цветом, а в центре кассеты автодозатора появится название образца. Если навести курсор на занятое гнездо и нажать правую клавишу мыши, то на экране появится окно “Пробирка №...” с предложением убрать пробирку.





В окно “Автодозатор” можно заходить не только из “Мастера приготовления образца”, но и из любого другого окна. Для этого достаточно щелкнуть по иконке с изображением пробирки на фоне папки.

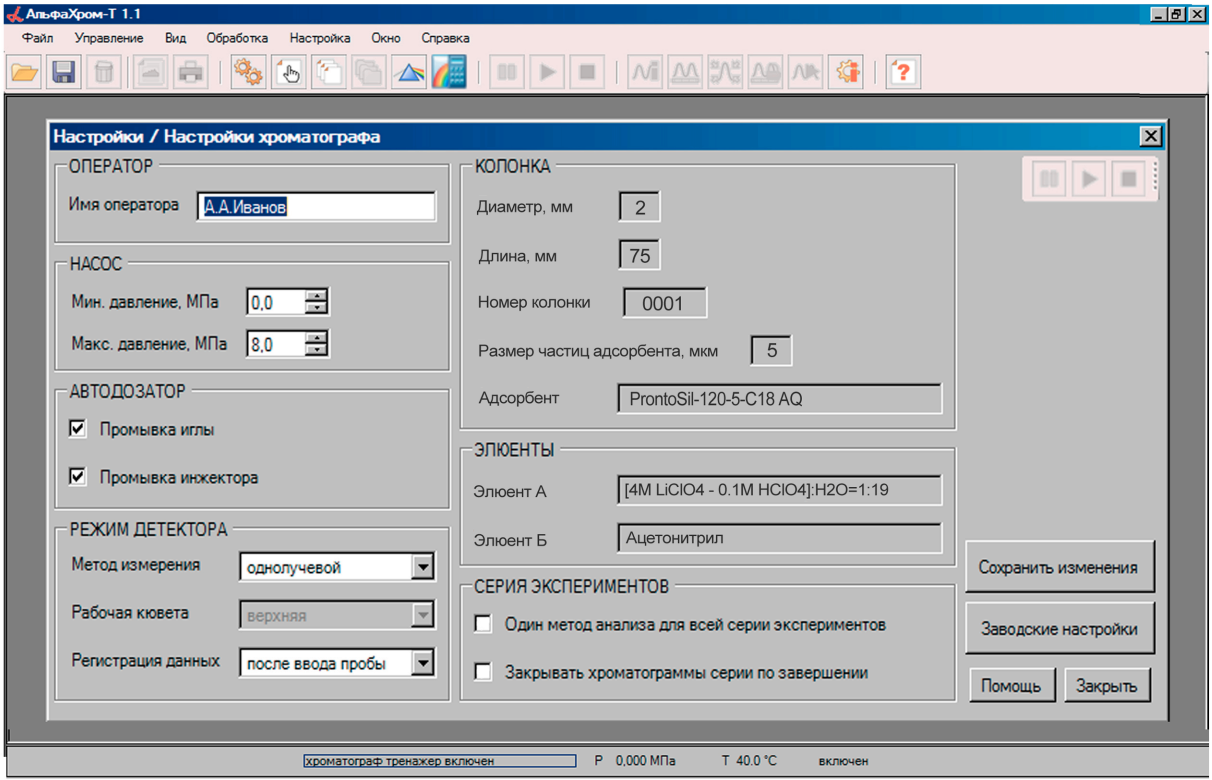
В демо-версии возможности загружать образцы из файлов нет.

* * *

Теперь, когда пробирка с образцом установлена в автодозатор, можно “включить” хроматограф и заняться хроматографией, для чего надо нажать кнопку “Перейти к анализу”.

Работа на хроматографе начинается с его настройки. В этот раздел заходят, щелкнув по иконке .
Не вдаваясь в подробности, которые каждый может самостоятельно узнать из Инструкции по эксплуатации хроматографа “Милихром А-02”, отметим, что в данной версии Тренажера не предусмотрен выбор колонок и элюентов. Все эксперименты осуществляются на одной колонке с неизменными элюентами А и Б.

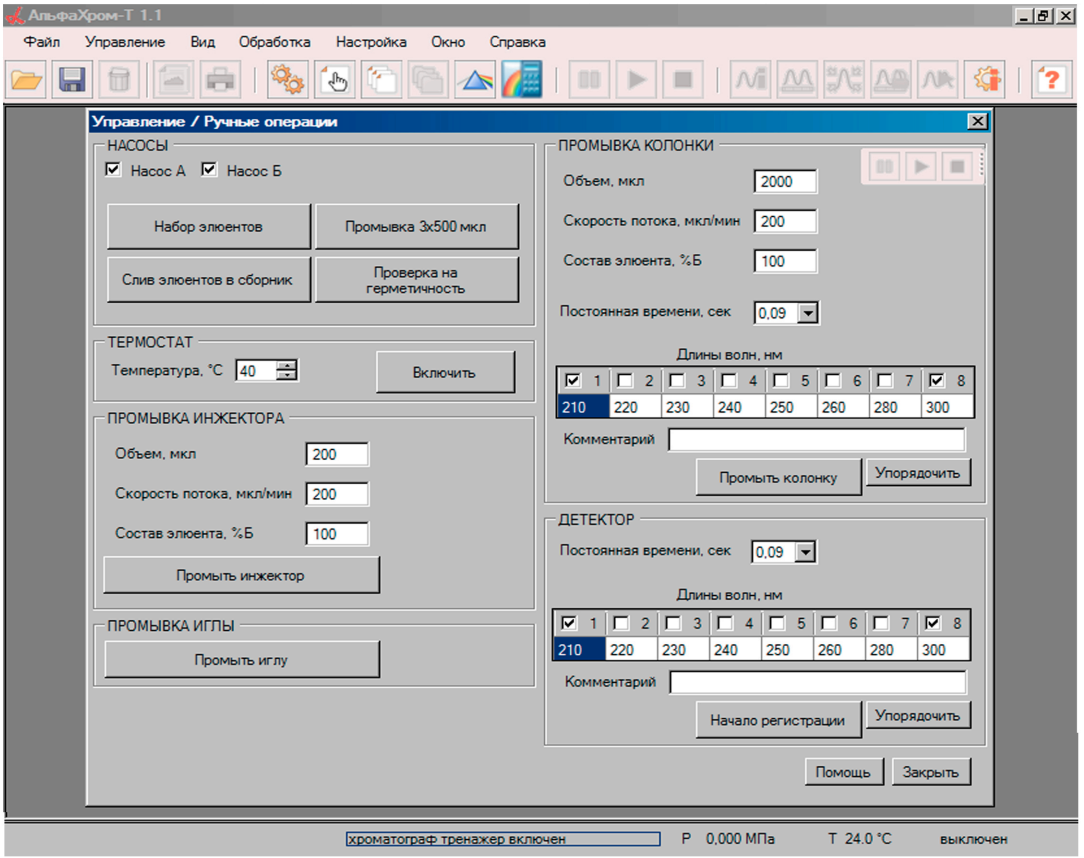
Установим режимы, как показано ниже, и закроем окно. Чтобы можно было автоматически выполнять эксперименты ***с разными*** условиями в одной серии, мы отключили режим “Один метод анализа для всей серии экспериментов”.



После установки “настроек” хроматографа, щелкнув по иконке , переходим в окно “Ручные операции”. Для решения нашей задачи здесь нам надо только включить термостат. Можно, конечно, проверить уровень шумов детектора на разных длинах волн и при разных “постоянных времени”, или исследовать зависимость давления на входе в колонку от состава подвижной фазы, скорости потока и температуры... Но это в другой раз.

Отметим, что такие процедуры как “Проверка герметичности”, “Промывка колонки” и “Детектор” записываются в соответствующие файлы.

Все результаты измерений, поступающие от хроматографа, демонстрируются в строке, расположенной в нижней части окна и в окне “Состояние хроматографа” в меню “Окно”.



Для того, чтобы хроматографировать раствор образца “Нитроанилины”, пробирку с которым мы уже поместили в гнездо № 1 автодозатора, откроем окно “Эксперимент” в меню “Управление”. Фактически ничего не зная о хроматографических свойствах нитроанилинов, сделаем серию из трех экспериментов в режиме изократической элюции со скоростью 200 мкл/мин, в которых подвижная фаза будет содержать 30, 40 и 50% ацетонитрила (элюент Б). После этого, глядя на полученные результаты, мы подберем состав подвижной фазы (%Б) так, чтобы разрешение пиков на хроматограмме удовлетворяло условию задачи (R_S= 2 - 3).

Как говорилось ранее, для детектирования выбираем длины волн 224 и 248 нм (см. стр. 8). Постоянную времени выбираем 0,17 с, чтобы обеспечить достаточно большое количество точек (> 10-15) на пике вещества.

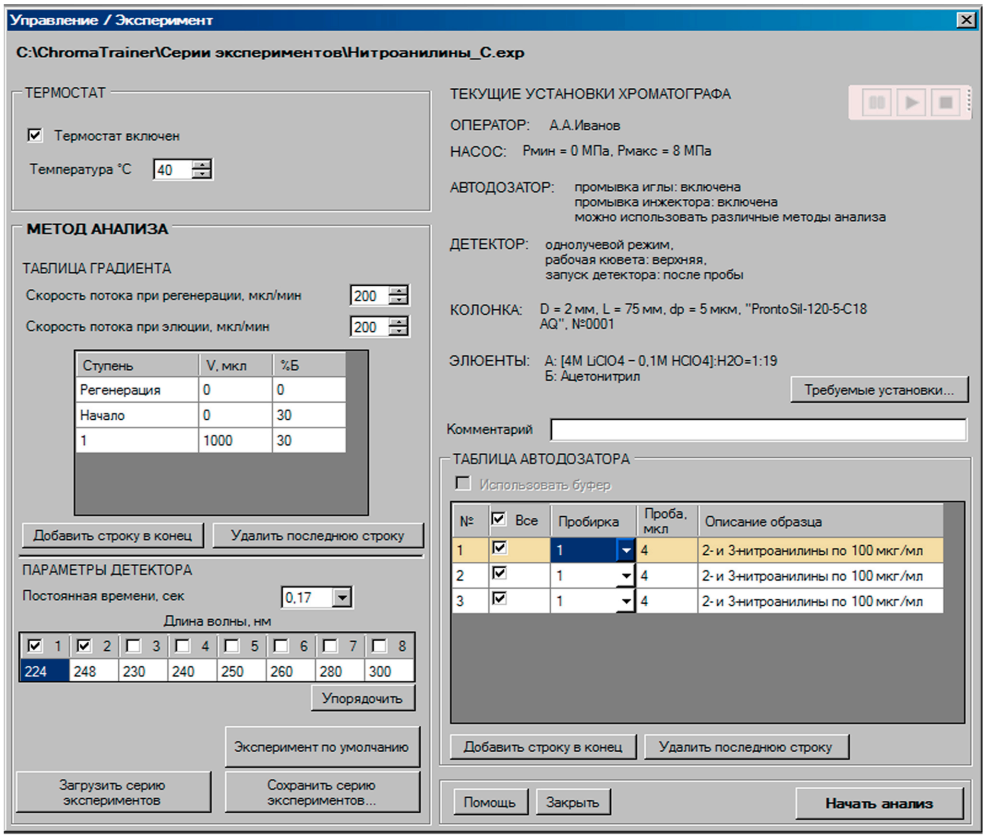
В Таблице градиента объем элюента в строке “Регенерация” равен 0. Это связано с тем, что в Тренажере “колонка хроматографа не помнит свою историю”, перед вводом пробы она всегда “чистая” и “Регенерация” ей не нужна.

Введем название образца в Таблице автодозатора и для всех трех экспериментов в Таблице градиента установим концентрации CH_3CN (%Б) 30% (№1), 40% (№2) и 50% (№3), сохраним серию экспериментов в файл анилины_С.exp и приступим к анализу, нажав кнопку “Начать анализ”.

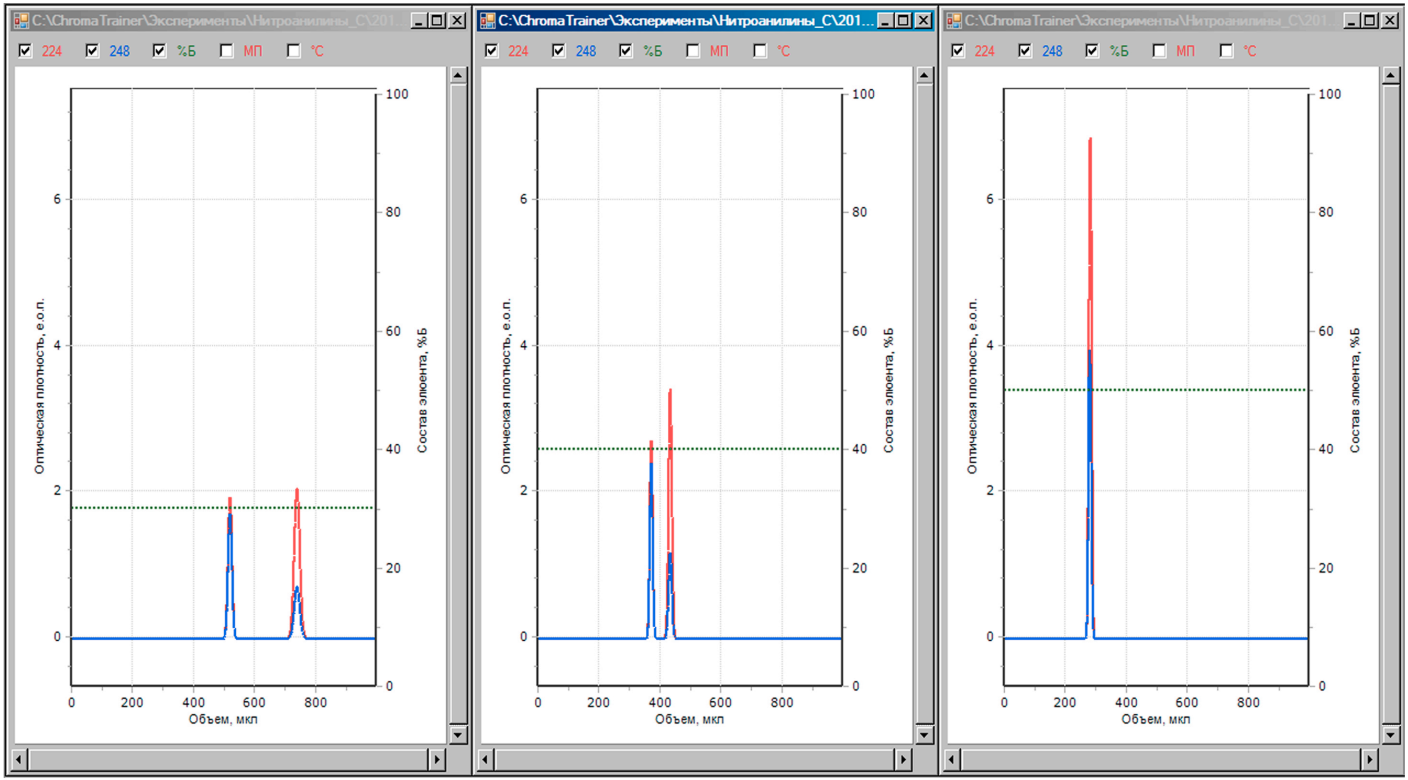
Эксперименты займут всего10-20 с, т.к. в окне “Схема хроматографа” мы установили Скорость эмуляции работы хроматографа в режим “Ускоренная работа”.

* * *

Файлы хроматограмм (*.chrx) будут записаны в папку .../Эксперименты / Нитроанилины_С/yyyy-mm-dd.



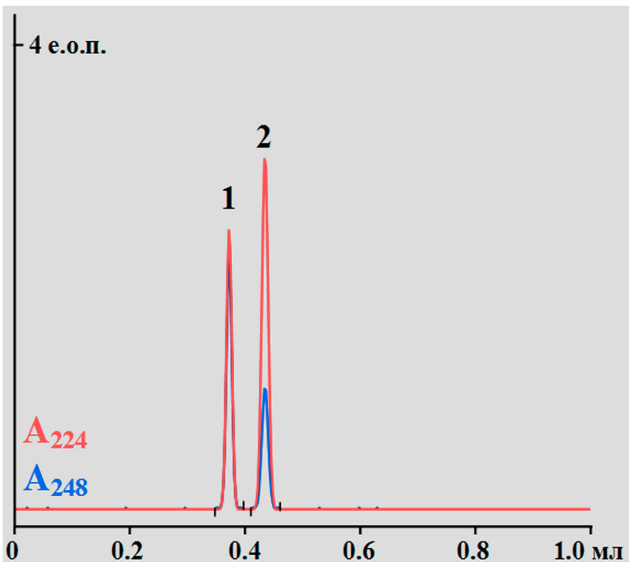
Вот мы и получили свои первые результаты. Пока это лишь хроматограммы, и теперь нам предстоит “извлечь” из них необходимую информацию - величины спектральных отношений S_{248}/S_{224} и величину разрешения пиков $R_{S1,2}$. Начнем со средней хроматограммы, где элюент содержал 40% ацетонитрила.

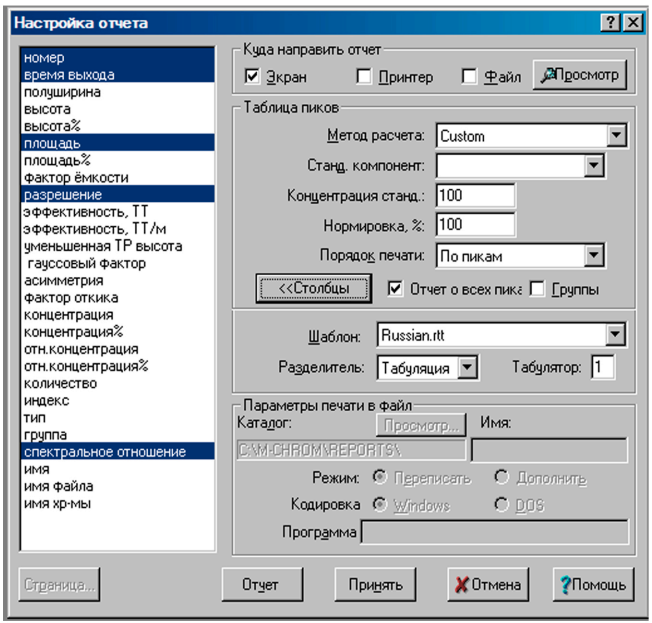


Активизируем окно и отправим хроматограмму на “обработку” в программу МультиХром, щелкнув по иконке , или по команде из меню “Обработка”.

В окне Программы МультиХром-СПЕКТР (СПЕКТР - означает, что в программу включен модуль “База данных ВЭЖХ-УФ”) - мы видим ту же хроматограмму, но пики на ней уже размечены. Для получения необходимых нам данных произведем настройку отчета (Метод/Настройка отчета/<<Столбцы), где отметим пункты ”номер”, “время выхода”, “площадь”, “разрешение” и “спектральное отношение”, а затем нажмем кнопку “Отчет”. В отчете нас интересует пока только информация, приведенная внизу в Таблице пиков, которая свидетельствует, что разрешение пиков на хроматограмме равно 3.14 и вполне соответствует условию Задачи. Величины спектральных отношений S_{224}/S_{248} близки по величине к отношениям A_{224}/A_{248}, найденным для нитроанилинов из их УФ-спектров. Это позволяет сделать вывод о том, что пик №1 на хроматограмме соответствует 3-нитроанилину, а пик №2 - 2-нитроанилину.

Для полного решения задачи нам осталось максимально ускорить анализ, построить калибровочные зависимости “площади пиков - концентрация нитроанилинов в растворе образца” и проверить работоспособность методики на практике.





Пик №	Удерживание, мкл	S_{224}, е.о.п.*мкл	Rs, n, n+1	S_{224}/S_{248}
1	373	31.17	3.14	0.88
2	436	45.94	0.00	0.34

* * *

Вернемся в программу “АльфаХром” и проведем еще несколько экспериментов.

В первой серии экспериментов мы выяснили, что разрешение пиков 2- и 3-нитроанилинов, равное 3.14, достигается при содержании ацетонитрила в элюенте 40% (F = 200 мкл/мин; t = 40° C). Продолжительность анализа при этом составила 2.5 мин. Достаточно быстро, но нам хочется быстрее.

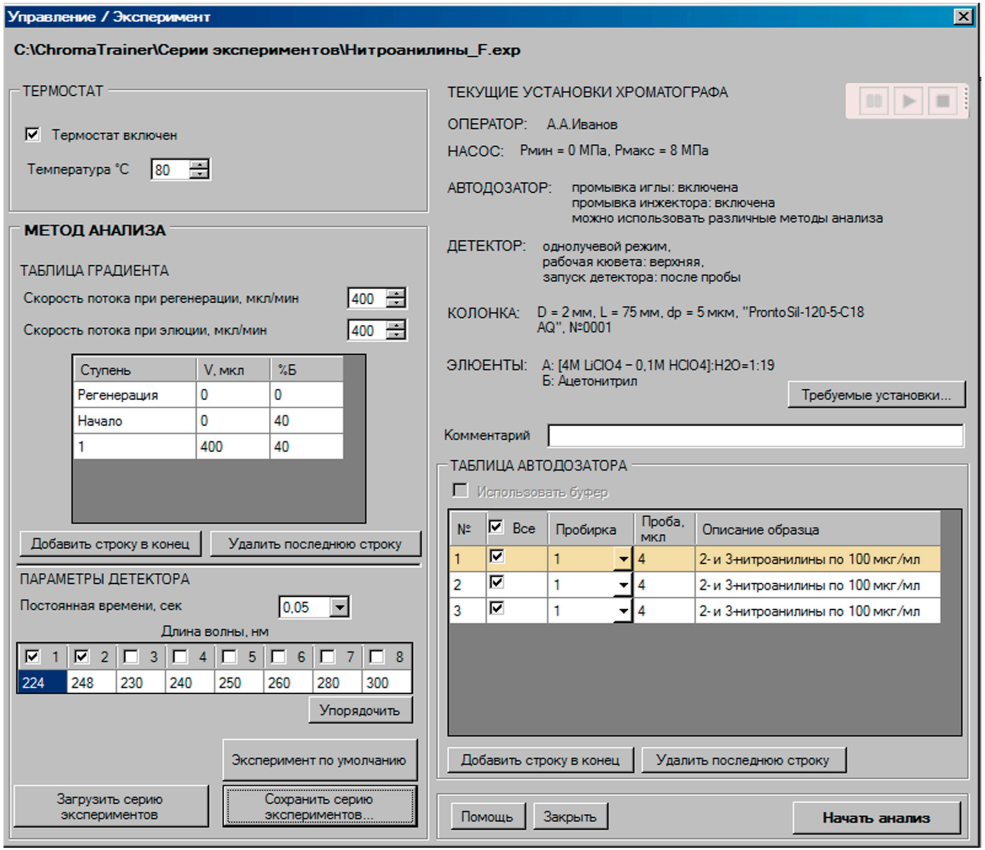
Чтобы максимально ускорить элюирование, максимально снизим вязкость элюента, для чего повысим температуру колонки до 80° C. Это на два градуса ниже температуры кипения ацетонитрила. Далее ускорим работу детектора, уменьшив постоянную времени до 0.05 с, т.к. при увеличении скорости потока элюента пики веществ в единицах времени станут пропорционально более узкими.

Теперь сделаем серию экспериментов, в которых содержание ацетонитрила в элюенте составит 40%, а скорость потока будет разной:

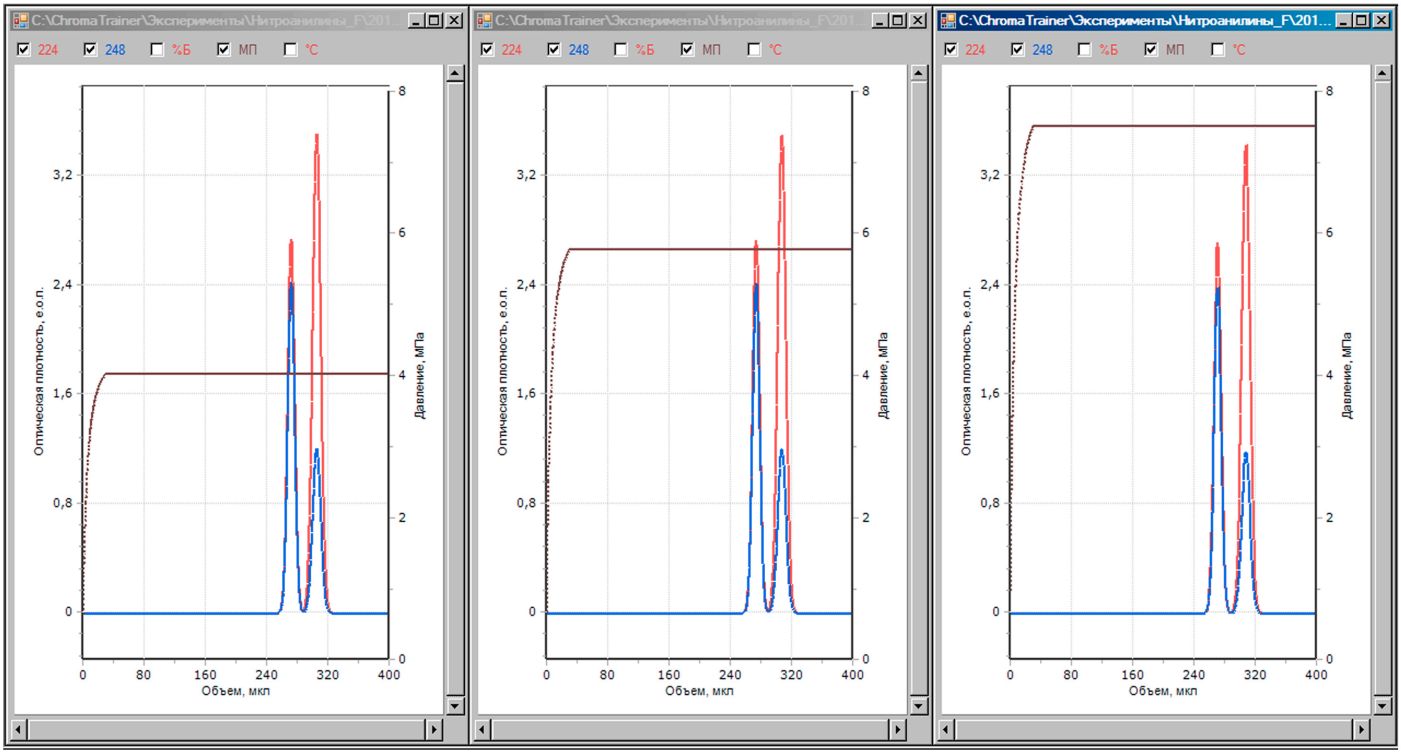
400 мкл/мин - №1
600 мкл/мин - №2
800 мкл/мин - №3

Сохраним серию экспериментов в файл Нитроанилины_F.exp и приступим к анализу, нажав кнопку “Начать анализ”.

Файлы хроматограмм (*.chrx) запишутся в папку ./Эксперименты/Нитроанилины_F/yyyy-mm-dd.



Из трех хроматограмм самая быстрая та, где скорость потока была 800 мкл/мин. Давление при этом приблизилось к максимально допустимому, и дальнейшее ускорение анализа за счет увеличения скорости на Тренажере и на хроматографе “Милихром А-02” невозможно. Отправим эту хроматограмму на “обработку” в программу “МультиХром” и посмотрим, как снизилось разрешение пиков при таком значительном повышении температуры и увеличении скорости потока. Величина R_S действительно уменьшилась с 3.14 до 1.86, но педантично повышать ее до 2, как требует Задача, мы не станем.

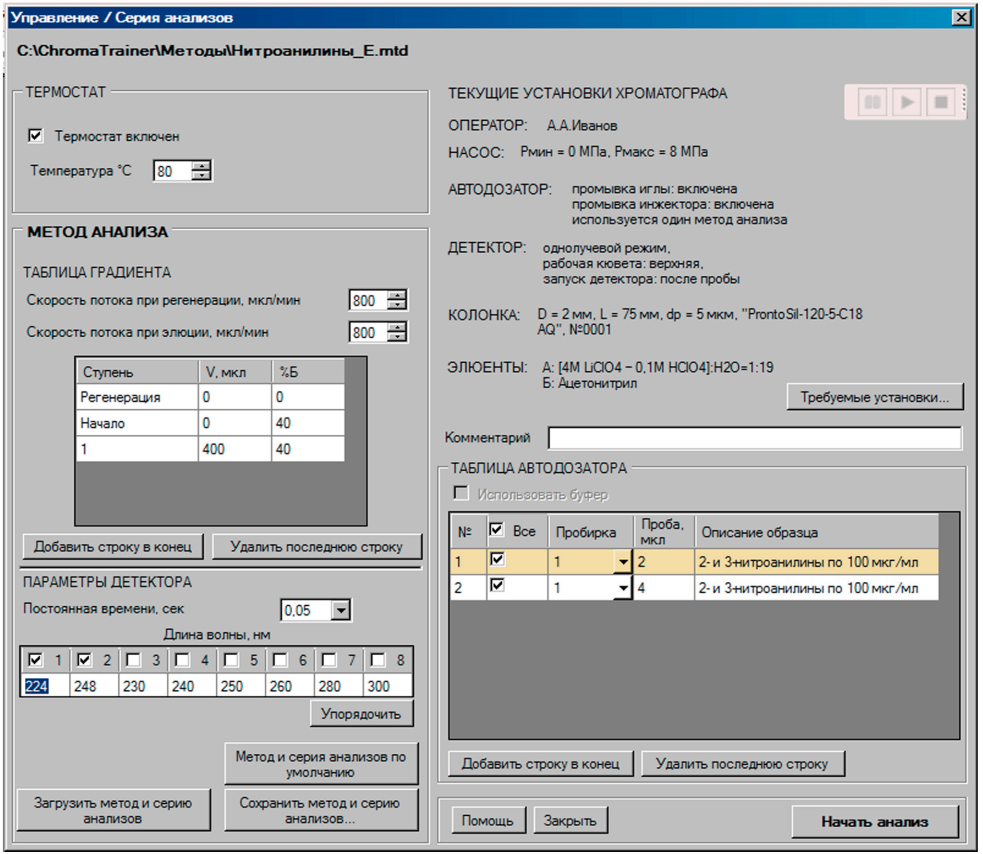


Условия быстрого разделения найдены, и теперь можно приступить к формированию “метода анализа”, включающего в себя возможность количественного определения нитроанилинов. Для этого в окне “Настройки хроматографа” включим режим “Один метод анализа для всей серии экспериментов” и перейдем в окно “Серия анализов” в меню “Управление”.

В окне “Серия анализов” вставим в редактируемые поля значения параметров, которые обеспечивают максимальную скорость, а в Таблице автодозатора “закажем” два эксперимента с различающимися объемами пробы. Это нам потребуется для постороения калибровочной зависимости. Сохраним метод и серию анализов в файл Нитроанилины_E.mtd, после чего начнем анализ.

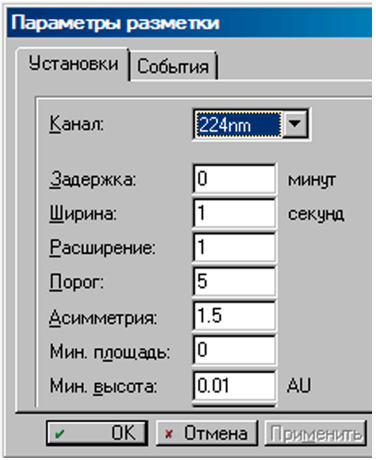
Файлы хроматограмм будут записаны в папку .../Анализы/Нитроанилины_E/yyyy-mm-dd.

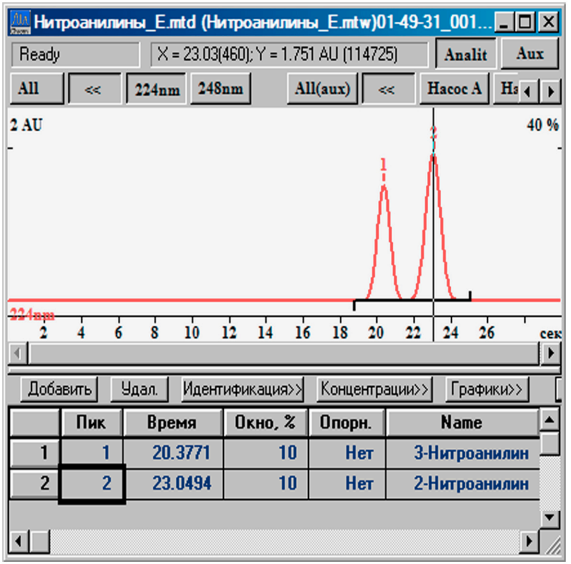
Когда серия анализов закончится, первую хроматограмму отправим в программу МультиХром и приступим к формированию “метотода обработки хроматограмм”.



1

Формирование метода обработки хроматограмм в программе МультиХром начинаем с установки параметров разметки пиков (Метод/Разетка). Т. к. скорость элюции у нас очень высокая, установим минимальную ширину пика, равную 1 с.

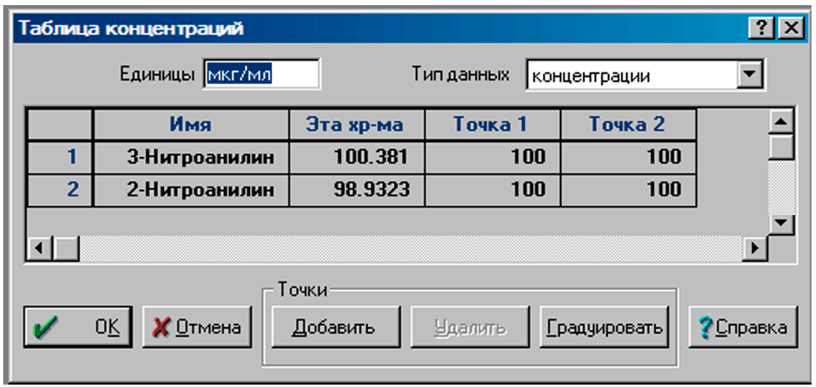




2

В окне Метод/Градуировка.../Компоненты... с помощью кнопки “Добавить” вставляем в Таблицу компонентов номера пиков, их время удерживания, ширину доверительного окна и названия веществ.

Далее в окне “Идентификация пиков”, выбираем “Стандартную схему”, а в качестве единиц - “мкл”.



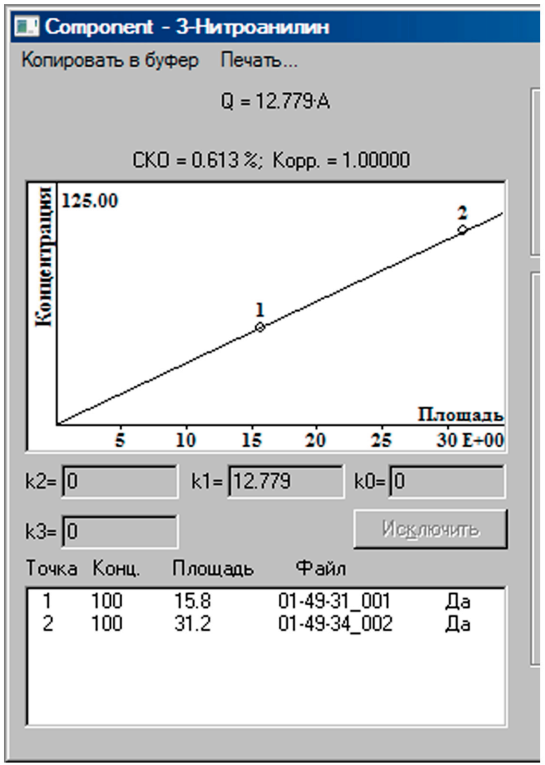
3

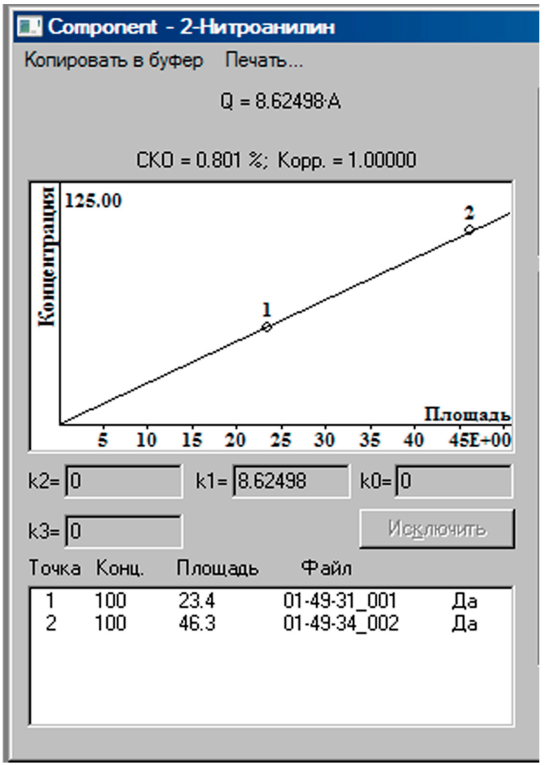
В окне “Таблица концентраций” вводим данные, необходимые для построения градуировочных зависимостей, Данные, соответствующие градуировочной точке 1, взяты из хроматограммы ...001.chrx, а точке 2 - из хроматограммы ...002.chrx.

Графическое представление калибровочных зависимостей для 2-нитроанилина и 3-нитроанилина можно посмотреть в разделе Меню “Метод/Градуировка.../Графики...”. Величина СКО в обоих случаях не превышает 1%, что является типичным для ВЭЖХ.

Метод обработки хроматограмм, включая калибровочные зависимости, записан в файл Нитроанилины_E.mtw и может применяться для работы с хроматограммами, полученными по методу Нитроанилины_E.mtd.

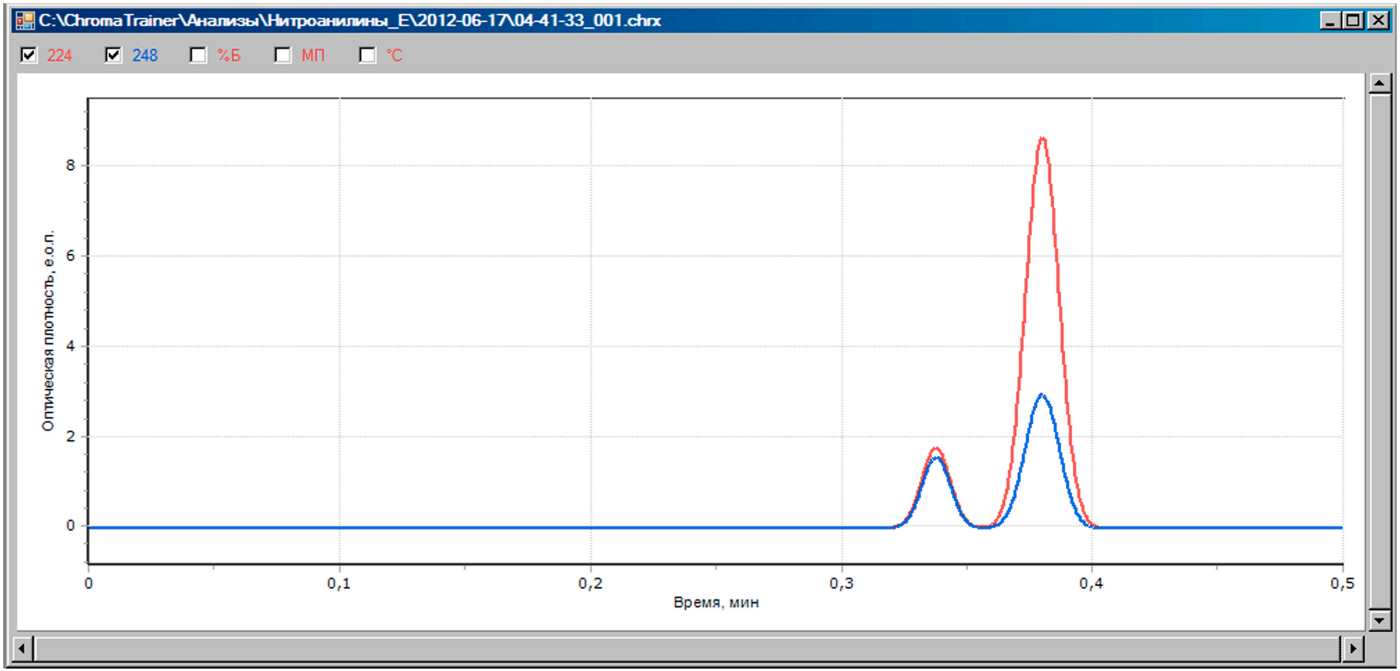
Как это делается, мы продемонстрируем на примере анализа раствора, содержащего 200 мкг/мл 2-нитроанилина и 50 мкг/мл 3-нитроанилина. Раствор приготовлен в мерной колбе на 100 мл из соответствующих навесок. Хроматограмма и Таблица пиков представлены на следующей странице.





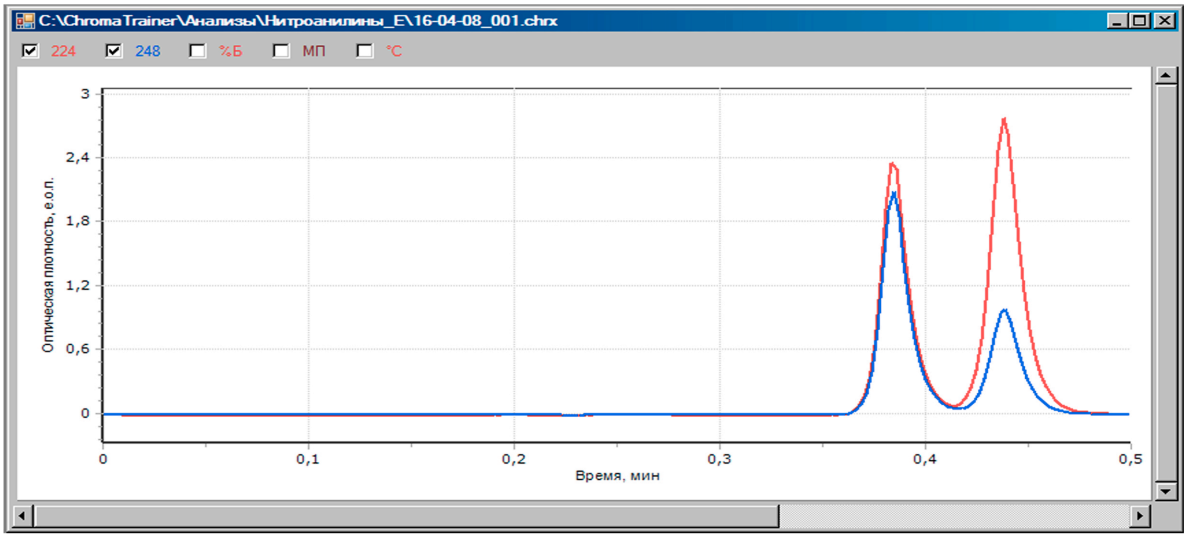
На этой странице показаны результаты экспрессного ВЭЖХ-анализа раствора, содержащего 200 мкг/мл 2-нитроанилина и 50 мкг/мл 3-нитроанилина. Раствор был приготовлен в разделе Тренажера “Мастер приготовления образца” из навесок 20.0 мг и 5.0 мг в мерной колбе на 100 мл. Анализ выполнялся по методу Нитроанилины_E.mtd. Хроматограмма обработана в программе “МультиХром” по методу Нитроанилины_E.mtw. Таблица пиков, приведенная под хроматограммой взята из Отчета, который был создан автоматически.

Найденные концентрации нитроанилинов отличаются от тех, которые были заявлены при приготовлении раствора. Погрешность в данном случае определяется погрешностью приготовления раствора и метрологическими характеристиками хроматографа.



Пик №	Удерж., мкл	Высота, е.о.п.	S_{224}, е.о.п.*мкл	$R_{S1,2}$	Конц., мкг/мл	S_{248}/S_{224}	Название
1	270	1.77	20.29	1.69	52	0.88	3-Нитроанилин
2	304	8.64	114.96		198	0.34	2-Нитроанилин

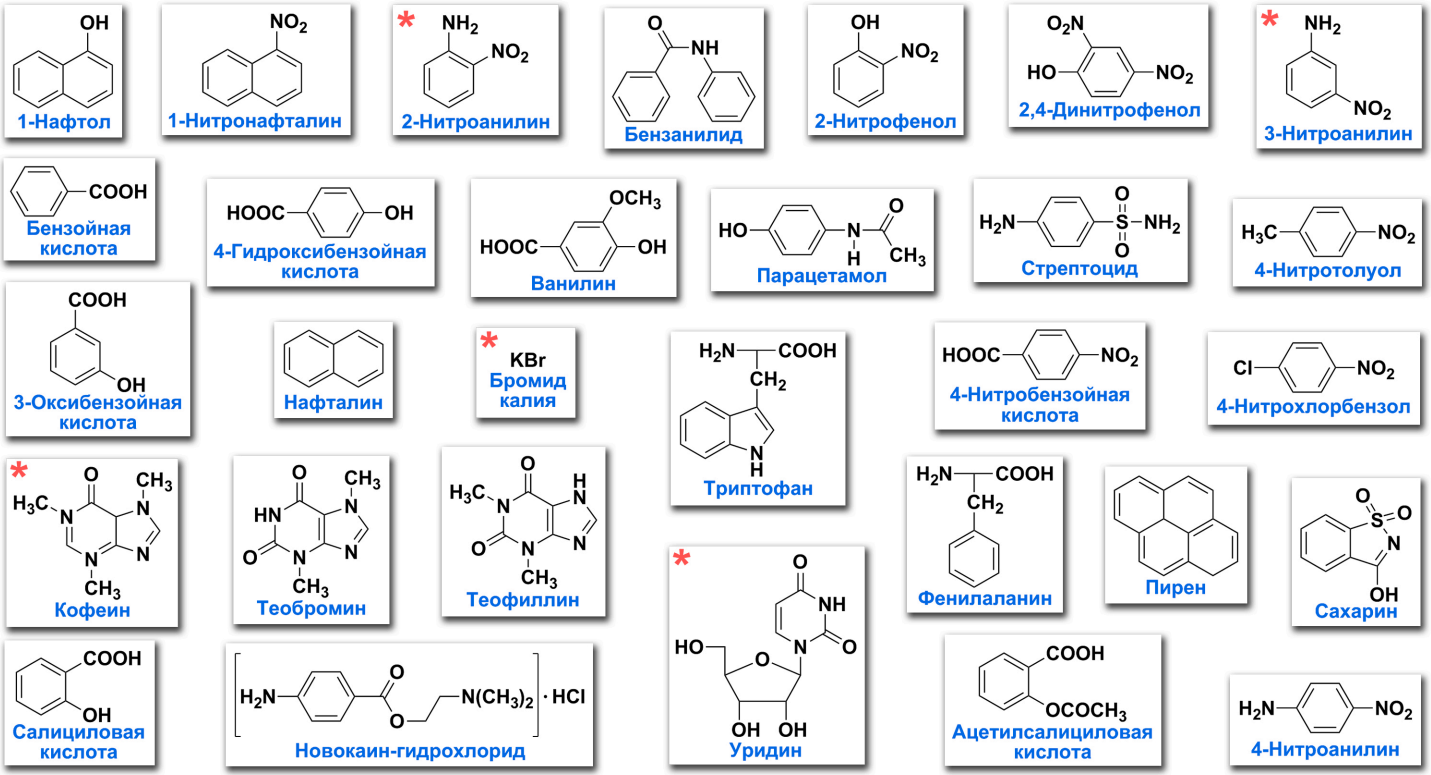
Экспериментальную проверку правильности алгоритмов эмулирования ВЭЖХ-анализа на Тренажере “Жидкостный хроматограф” проводили на хроматографе “Милихром А-02” с колонкой 2х75 мм (ProntoSil-120-5-C18 AQ). По методу Нитроанилины_E.mtd хроматографировали водный раствор, содержащий по 100 мкг/мл 2-и 3-нитроанилина. Хроматограмма показана ниже. В таблице приведены данные, полученные в результате обработки хроматограммы в программе “МультиХром”. Красным цветом выделены данные, полученные для эмулированной хроматограммы такого же раствора.



Пик №	Удерж., мкл	Высота, е.о.п.	S_{224}, е.о.п.*мкл	$R_{S1.2}$	Конц., мкг/мл	S_{248}/S_{224}	Название
1	306 **273**	2.38 **2.72**	32.12 **31.24**	1.79 **1.58**	100	0.873 **0.885**	3-Нитроанилин
2	348 **304**	2.63 **3.46**	42.12 **46.25**		100	0.370 **0.343**	2-Нитроанилин

Несмотря на то, что условия разделения можно отнести к экстремальным, даже в этом случае предсказательные возможности Тренажера оказываются на высоком уровне. Что касается цели, которую мы декларировали в самом начале - научить Вас управлять хроматографом за 1 час, то Вам решать, достигнута она или нет. По крайней мере, за время обучения ни одного миллиграмма химически вредных веществ в окружающую среду не попало, и это мы считаем убедительным доказательством нашей искренней любви к природе.

Программа-тренажер “Жидкостный хроматограф”: 30 веществ для хроматографических экспериментов



В демо-версию Тренажера включены только 5 веществ, отмеченные знаком *

Милихром А-02

•ЖИДКОСТНЫЙ•ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЙ•АВТОМАТИЧЕСКИЙ•ЭКОНОМИЧНЫЙ•ПОРТАТИВНЫЙ

хроматограф

•ДЕТЕКТОР
Двухлучевой спектрофотометр
Спектральный диапазон 190-360 нм
Одновременная детекция на 1-8 длинах волн
Объем ячейки 1.2 мкл
Флуктуация нулевого сигнала <0.0002 е.о.п./см
Дрейф нулевого сигнала <0.0001 е.о.п./см час

•НАСОС
Двухшприцевый, градиентный
Скорость подачи 2-999 мкл/мин
Максимальное давление 8 МПа
Градиент из 1-20 линейных участков

•ДОЗАТОР
Автоматический
Количество пробирок 46
Дозируемый объем 1-99 мкл
Пробирки из стекла на 200 мкл
Пробки из полиэтилена

•КОЛОНКА В ТЕРМОСТАТЕ
Колонка из нержавеющей стали 2х75 мм
Эффективность не менее 4500 т.т.
Термостатирование при 35-90°C
Шаг изменения температуры 1°C
Погрешность термостатирования 0.1^{o}C

•ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
Windows® XP/Vista/7
МилиХром А-02®, АльфаХром®
МультиХром-СПЕКТР®

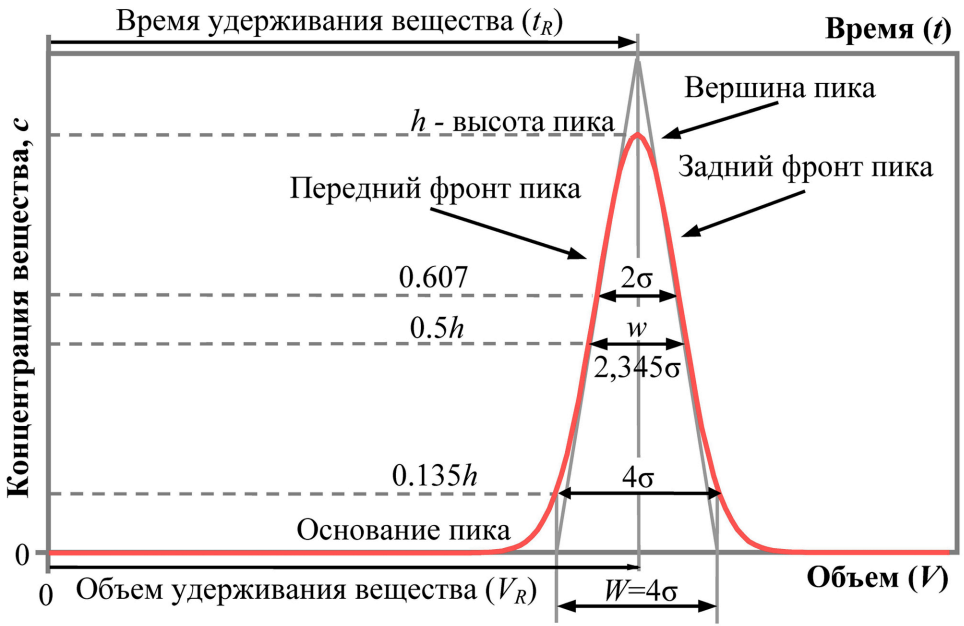
•РАЗМЕРЫ, ВЕС (без компьютера)
53 х 21 х 32 см, 17 кг, 130 ВА

ЭКОНОВА ECONOVA

ЗАО Институт хроматографии “ЭкоНова”

630090, Новосибирск, Академгородок, ул. Николаева, д.8
Тел.: 8(383) 330-95-57
Факс: 8(383) 330-83-21
Эл. почта: info@econova.nsk.su
Сайт: www.econova.ru

Некоторые термины жидкостной хроматографии



Свойства распределения Гаусса

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{x}{2\sigma}\right)^2}$$

$$c(V) = h \cdot e^{-0.5\left(\frac{V - V_R}{\sigma}\right)^2}$$

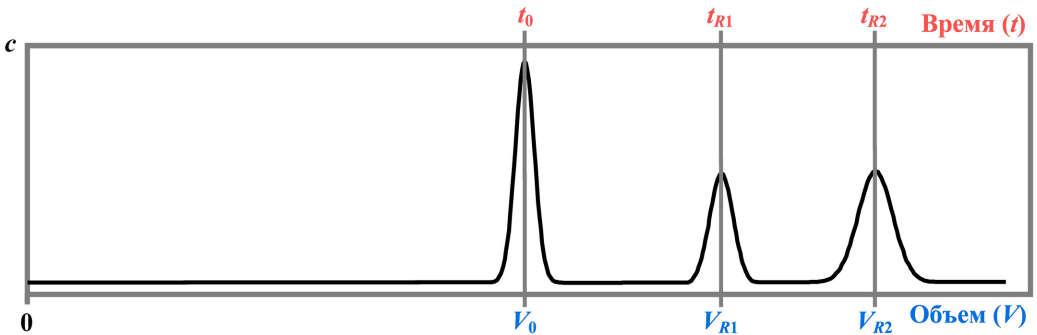
$$c(t) = h \cdot e^{-0.5\left(\frac{t - t_R}{\sigma}\right)^2}$$

$$h = \frac{S}{\sigma\sqrt{2\pi}}$$

t_R – время удерживания вещества
σ – стандартное отклонение гауссова пика
w – ширина пика на уровне 0,5h
c – текущая концентрация вещества в подвижной фазе

V_R – объем удерживания вещества
h – высота пика
W – ширина основания пика
S – площадь пика

Некоторые термины жидкостной хроматографии



V_0 (t_0) – мертвый объем (время) колонки. V_0 равен полному объему находящейся в колонке подвижной фазы.
V_R (t_R) – объем (время) удерживания вещества.
V_0 (t_0) – мертвый объем (время) колонки равны объему (времени) удерживания вещества, которое не удерживается на колонке.

$V_R = V_0 + V_0 \cdot k'$ или $V'_R = V_0 \cdot k'$, где $V'_R = V_R - V_0$ – уменьшенный объем удерживания.
$t_R = t_0 + t_0 \cdot k'$ или $t'_R = t_0 \cdot k'$, где $t'_R = t_R - t_0$ – уменьшенное время удерживания.

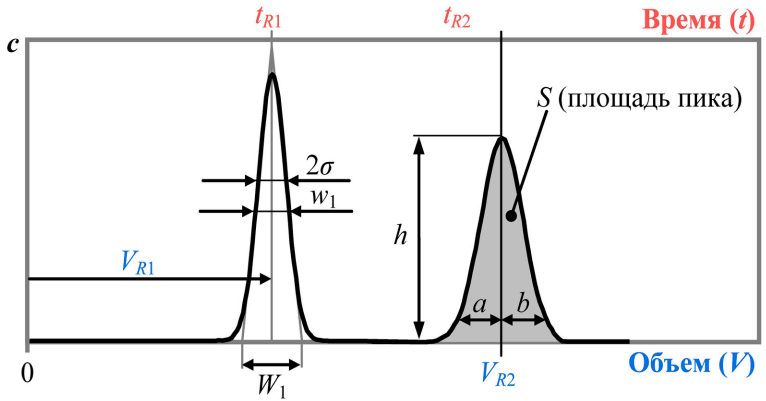
$k' = V'_R / V_0$ – фактор удерживания вещества (*retention factor*).
$\alpha_{2/1} = k'_2 / k'_1$ – фактор разделения (*separation factor*) или селективность колонки для веществ 1 и 2.

Связь между объемом и временем

V – объем;
t – время;
F – объемная скорость потока элюента;
U – линейная скорость потока элюента вдоль колонки (скорость движения фронта элюента вдоль колонки);
s – площадь поперечного сечения колонки.

$$V = F \cdot t \qquad V_R = F \cdot t_R \qquad V_0 = F \cdot t_0 \qquad U = F/s \qquad t_0 = L/U$$

Некоторые термины жидкостной хроматографии



Эффективность колонки $N = \left(\frac{V_R}{\sigma}\right)^2 = \left(\frac{t_R}{\sigma}\right)^2 \approx 5{,}54 \cdot \left(\frac{V_R}{w}\right)^2 \approx 16 \cdot \left(\frac{V_R}{W}\right)^2 \approx 2\pi \cdot \left(\frac{V_R \cdot h}{S}\right)^2$ теоретических тарелок.

Высота, эквивалентная теоретической тарелке (ВЭТТ) $H = L/N$, где L – длина колонки.

Приведенная ВЭТТ $\overline{H} = \frac{H}{d_p}$, где d_p – диаметр зерна адсорбента.

Коэффициент разделения (разрешения) пиков 1 и 2 $R_{1,2} = \frac{2(V_{R2} - V_{V1})}{W_1 + W_2} = \frac{2(t_{R2} - t_{R1})}{W_1 + W_2}$.

Асимметрия хроматографического пика (на уровне 10% h) $A_{10\%} = b/a$.

В Британской и в Европейской Фармакопеях асимметрия пиков измеряется на уровне 5% h как $A_S = (a + b)/2a$.

Как учить ВЭЖХ, не загрязняя природу

GREEN CHROMATOGRAPHY