ООО Амперсенд 2023



# МультиХром ГПХ

Система обработки данных эксклюзионной хроматографии

# РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ



# Оглавление

		0
Раздел I	Для начинающих	8
Раздел II	Клавиатура и мышь	8
Раздел III	Введение	9
1	Общая информация	9
	АМПЕРСЕНД	9
	мультиХром	
	Демонстрационный режим	
	Требования к компьютеру	
2	Установка и удаление программы	11
		11
	Установка программы	11
3	Компоненты системы	12
Ũ		
	Главное окно программы	
	Систе ма меню	
	Меню файл	13
	Меню Файл: Открыть	13
	Меню файл: сохранить	
	Закрыть	
	Удалить хроматограмму	
	Печать хроматограммы	
	Выход	
	Меню Редактирование	14
	Меню таблица	
	Меню Пик	
	Меню Вид	
	Вид	
	Оси хроматограммы	17
	Ось Х	
	Ось Ү	
	Оси: флажки	
	Оси: метки	
	Метки	
	Вид: метки пиков	
	иетки пика: флажки	
	мосовать каждую точку	
	імаркеры капала Вил. цетэ	
	ылд. цвета Выбор	
	ысор Пвет элемента	
	Эпементы окна	
	Образец	
	Соразоц	

	Contents	
	L	
Ширина линии		
По умолчанию-цвета		
Загрузить основные		
Colors		
Все по горизонтали		
Все по вертикали		
Bcë		
Меню Обработка		
Градуировать		
Меню Метод		
Меню настройка		
Шрифты		
Меню Окно		
Справочная система		
Пиктографическое меню		
Просмотр		
Контекстные меню		
Диалоговые окна		
Справка		
Типы файлов		
Клавиатура и мышь		

# Раздел IV Хроматограмма

1	Хроматограмма-определение	29
•	хроматограмма-определение	
2	Хроматограмма: обычная	29
3	Хроматограмма: градуировочная	29
4	Редактор пиков	29
	Курсор	31
5	Работа с файлами хроматограмм	31
	Открыть хроматограмму	31
	Записать хроматограмму	32
	Копировать, удалять, перемещать хроматограммы_2	32
	Экспорт хроматограммы	32
	Экспорт хроматограммы: текстовый формат	33
	Импортировать хроматограмму	33
6	Печать хроматограммы	33

# Раздел V Метод

1	Метод определение	
2	Паспорт	
	Лист Общее	
	Продолжительность хроматограммы	
	Имя файла метода	
	Имя файла хроматограммы	
	Дата и время запуска	
	Дата и время записи	
	Градуировочная точка	
	Имя текущего пользователя	
	Название детектора	
	Номер текущего анализа	
	Номер текущей хроматограммы	

	Описание пробы	
	Общее описание	38
	Объем пробы	
	Разведение	
	Количество образца	
	Дата/время	
	Колонка	
	Серийный номер колонки	39
	Внутренний диаметр колонки	39
	Описание сорбента	
	Зернение сорбента в микронах	40
	Параметры предколонки	40
	Элюент	40
	Состав подвижной фазы	41
	Объемная скорость подвижной фазы	41
	Давление на входе колонки	
	Температура термостата	41
	Комментарии	41
	Новый комментарий	41
	Журнал метода	41
	Журнал хроматограммы	
3	настройка метода	
-		
	Автомасштаоирование	
	Терезапуск метода	
	Закрыть окно	
4	Операции с фаилами методов	44
	Метод: открыть	
	Метод: сохранить	
Разлеп VI	Пакет хроматограмм: общее	45
Паодол и		
1	Пакеты хроматограмм	45
2	2 Пакетный пересчет: открыть	46
3	Окно «Пакетный пересчет»	46
	Пакетный пересчет: общие установки	47
	Использовать метод из файла для пересчета	
	Открыть пример	
	Редактировать таблицу	
	Открыть все файлы	
	Пересчитать обычные	
	Обновить файл метода после пересчета	
	Пересчитать градуировочные	
	Пакетный пересчет: режим пересчета	
	Переразметить	
	Редактировать параметры разметки	
	Переградуировать	
	Только пересчитать	
	Изменить паспорт	
	Редактировать паспорт	

	Contents	
	Изменить вид хроматограммы	
	Редактировать вид	
	Пересчет	
	Объединить	
	Закрыть пакетный пересчет	
4 Г	lакеты хроматограмм: работа с файлами	
	Последний пакет	
	Как открыть пакет хроматограмм	
	Пакеты хроматограмм: создание	
	Как сохранить пакет хроматограмм	
5 Г	lакетный пересчет: Редактор пакета хроматограм	
	Пакетный пересчет: таблица пакета хроматограмм	
	Редактор пакета: меню Файл	
	Редактор пакета: меню Редактор	
6 Г	акетный пересчет: отчет	

# Раздел VII Отчет

Γ

1	Разделы отчета	57
2	Заголовок отчета	57
3	Куда направить отчет	57
	Отчет:параметры печати в файл	. 58
4	Разметка страницы	58
5	Обзор	59
6	Конфигурация принтера	59
7	Принять	59
8	Шаблоны и разделители	59
	RTT файлы	. 59
	Разделитель	. 61
9	кнопка Отчет	61
	Просмотр	. 61

# Раздел VIII Общие настройки

1	Перезаписывать файл данных	63
2	Если метод изменен	63
3	Если метод на диске более свежий	64
4	Настройки: Открытие хроматограммы	64
5	Режим GLP	64
6	Настройки: Сохранение хроматограммы	64
7	Единицы хроматограмы	64
8	Печатать через буфер	65
9	Настройки: GLP	65
Раздел IX	Защита	65
1	Допуск	66
2	Пароль	66

3 Блокировать систему		66
Раздел Х Как выполнить		66
1	Как напечатать отчет	66
2	Как провести пакетный пересчет	67
Раздел XI	Модуль ГПХ	67
1	Введение к ГПХ	68
2		70
2		
	Разметка	
	Разметка хроматограммы ПТХ	
	I lараметры разметки: Установки	
	Число пиков	
	Задержка	
	Ширина	
	Уширение	
	Асимметрия	
	МИН. І ІЛОЩАДЬ И МИН. ВЫСОТА	
	Наездник	
	Отрицательные пики	
	Предложить	
	интерпол.начало/конец оазовои линии	
	Сооытия интерирования	
	удаление сообщия	
	ОТКЛЮЧИТЬ СООБПИЯ	
	Список сообнии интегрирования	
	Базовая Линия	
	шум оазов ои линии	
	Тик	
	идентификация пиков	<b>8U</b>
	интегрирование	
	Окно идентификации	
	Критерии идентификации	
	Первая Градуировка при ГПА	<b>ი2</b>
	ПК Создание Гаолицы компонентов	
	Окно Градуировка ГПА	
	ПТА Получение традуировочной зависимости	
	імет од понодистерсный. Матод Полидисперсный	db
	метод Гюлидисперсный. Матод Химророод и ий	
	иетодуниверсальный.	
	ттъ завершение градуировки и запись метода ГПХ Почать розули татер градиировки	
	тти течать результатов традуировки	
	импорт традуировки	
	Экопорт градуировки	
•		
3	получение хроматограмм с использованием методов ГПХ	90

Contents	7
Определение ММР	
ГПХ Добавление и удаление градуировочных хроматограмм	90
4 Особенности отчетов для ГПХ	93
Индекс	96

г

# <sup>1</sup> Для начинающих

8

Вы приобрели систему **МультиХром**, предназначенную для и обработки данных. Несмотря на интуитивно понятный интерфейс программы, Вам понадобится время для практического освоения ее богатых возможностей. Тем не менее, если Вы провели инсталляцию системы в соответствии с рекомендациями *Руководства пользователя*, можно начать работать с программой, выполнив минимум описанных ниже операций.

Но, прежде всего, прочтите Руководство пользователя для ознакомления с базовыми возможностями системы **МультиХром**. В дальнейшем, по мере необходимости, Вы их будете постепенно осваивать.

Рекомендуется проводить освоение системы в несколько этапов:

- запуск только программы приема данных. Управление насосами или хроматографом производится вручную;

- запуск и настройка системы управления насосами (хроматографом)

- создание метода, способного как управлять хроматографической системой, так и принимать данные.

Программное обеспечение **МультиХром**, версия 1.6х - это специализированный модуль для расчета **молекулярно-массового распределения полимеров** (**ММР**) по хроматограммам, полученным методом **гель-проникающей хроматографии** (**ГПХ**), в дальнейшем именуемый **модуль ГПХ**.

# <sup>2</sup> 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 <u>курсора</u> (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 У;	
[Вниз]	уменьшение чувствительности по оси Y;	
[Вправо]	растянуть хроматограмму по оси Х;	
[Влево]	сжать хроматограмму по оси Х;	
[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 Хи Ү (аналогично	
кнопке <i>Показать все</i> )		
[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] масштаба по Х и Х):	переместиться вправо на одно окно (без изменения
ICtrl]+[Влево]	переместиться влево на одно окно (без изменения
	показать начало хроматограммы (без изменения
масштаба по Хи Y); [End]	показать конец хроматограммы (без изменения
масштаба по Х 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

# 3 Введение

# 3.1 Общая информация

### 3.1.1 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.

#### 10 Справка МультиХром версия1.6

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

телефон	+7 (499) 322-99-61, +7 (916) 675-25-92
почта	117437, г. Москва, ул. Островитянова, д. 25к1, кв. 121.
	ООО "Амперсенд" (С отслеживанием)
офис	г. Москва, ул. Островитянова, д. 25к1, кв. 121.
e-mail	support@ampersand.ru
веб-сайт	multichrom.ru

### 3.1.2 МультиХром

**МультиХром** - это хорошо известный и широко используемый на территории бывшего СССР программный продукт, созданный <u>ООО "АМПЕРСЕНД"</u>. Англоязычная версия программы вышла на международный рынок (под маркой различных западных фирм-производителей оборудования).

Программное обеспечение **МультиХром-ГПХ** решает комплекс общих задач по обработке хроматографических данных: интегрирование, качественный и количественный анализ компонентов анализируемой смеси. Система обеспечивает также пакетную обработку хроматограмм, контроль целостности данных, использование пароля и другие возможности.

Настоящая версия **МультиХром 1.6Х** содержит специализированный <u>модуль для расчета</u> молекулярно-массового распределения полимеров (MMP) по хроматограммам

# <sup>3.1.3</sup> Демонстрационный режим

Программа запускается в **демонстрационном режиме**, если не установлен специальный электронный ключ в любой из портов компьютера.

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

# <sup>3.1.4</sup> Требования к компьютеру

Для установки программы **МультиХром** и комфортной работы с ней рекомендуется следующая минимальная конфигурация компьютера:

Компьютер	х86-совместимый процессор с тактовой частотой не ниже 1 ГГц
Операционная система	Windows XP, Windows Vista, Windows 7, Windows 8, Windows 8.1, Windows 10; 32- или 64-бит.
Свободное место на жестком диске	100 Мб для программных файлов, не менее 200 Мб для хранения файлов данных (в зависимости от требований пользователя к базе данных).
Оперативная	1024 Мб для Windows XP, и 2048 Мб для Windows Vista, Windows 7, Windows

память	8, Windows 8.1, Windows 10
Монитор	разрешение 1280х768 при глубине цвета 16-бит или выше
Принтер	любой принтер, поддерживаемый операционной системой
Мышь	мышь или любое другое Windows-совместимое подобное устройство
CD-ROM	CD-ROM или DVD-ROM любого типа для установки программы; допускается установка с USB флеш диска или путем скачивания файла через Интернет.

#### 3.2 Установка и удаление программы

#### 3.2.1 Установка программы

Для установки ПО МультиХром пользователю необходимо иметь права Администратора

Для установки программы выполните следующее.

 Запустите с поставочного диска файл setup.exe. При этом запустится программа-установщик и откроется окно МультиХром ГПХ.

• Следуйте указаниям установщика. При выборе папки для установки программы МультиХром рекомендуется принять предлагаемый вариант C:\SEC\.

• По окончании установки на рабочем столе будет создан ярлык 🧱

• Щелкните мышью по созданному ярлыку на рабочем столе. Откроется главное окно программы с окном Информация о пользователе. В поле Ключ активации содержится указание: «Введите\_ключ\_из\_файла\_readme.txt»

• Введите информацию в остальные поля и щелкните по кнопке ОК. Пока поле Организация остается незаполненным, окно Информация о пользователе будет появляться при каждом запуске программы. При необходимости это окно можно открыть, нажав кнопку Регистрация в окне. О программе... (команда Справка/О программе).

Если с системой работают несколько пользователей или существует опасность несанкционированного вмешательства в ее работу, а также если в отчетах требуется указывать фамилию автора, можно настроить систему защиты, создав список пользователей (команда Настройка/Защита).

#### 3.2.2 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-ГПХ 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.

# 3.3 Компоненты системы

### 3.3.1 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 <Закрыть>, соответственно).
Главное меню	ниспадающее меню, дающее доступ ко всем функциям системы.
<u>Пиктографическое</u>	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 <u>окон хроматограмм</u>

### 3.3.2 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 <u>клавиатуры и мыши</u>, а также через диалоговое окно <u>Оси</u> из **Меню Вид**. Некоторые функции управления окном собраны в <u>меню</u> <u>Окно</u>.

### 3.3.3 Система меню

#### 3.3.3.1 Главное меню

Меню	главного	окна	прог	раммы
			-	

<u>Меню Файл</u>

Меню Редактирование

<u>Меню Таблица</u>	замещает меню <b>Редактирование</b> , если активна <u>таблица</u>
	<u>КОМПОНЕНТОВ</u>

<u>Меню Пик</u> замещает меню **Редактирование**, если активен <u>редактор</u> пиков

<u>Меню Вид</u>

Меню Обработка

<u>Меню Метод</u>

Меню Настройка

Меню Окно

Меню Справка

#### 3.3.3.1.1 Меню файл

<u>Открыть</u>

<u>Сохранить</u>

Импортировать

Экспортировать

<u>Закрыть</u>

<u>Удалить</u>

<u>Печать</u>

Просмотр

Настройки принтера

<u>Страница</u>

<u>Выход</u>

#### 3.3.3.1.1.1 Меню Файл: Открыть

<u>Хроматограмму</u>	Выбор и открытие выбранных файлов хроматограмм (*.gpc).
<u>Метод</u>	Выбор и открытие файла метода (*.mtw).
<u>Пакетный пересчет</u>	Выбор и открытие пактного файла (*.bar).
<u>Последний пакет</u>	Открытие пакета хроматограмм, который редактировался последний раз (*.bar).

#### 3.3.3.1.1.2 Меню файл: сохранить

<u>Хроматограмму</u>	сохранение текущей хроматограммь
----------------------	----------------------------------

<u>Метод</u>

14

сохранение метода

#### 3.3.3.1.1.3 Закрыть

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.

#### 3.3.3.1.1.4 Удалить хроматограмму

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

#### 3.3.3.1.1.5 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.

#### 3.3.3.1.1.6 Выход

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

#### 3.3.3.1.2 Меню Редактирование

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.

#### 3.3.3.1.3 Меню таблица

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

#### 3.3.3.1.4 Меню Пик

Данное меню содержит все функции <u>редактора пиков</u> 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	Иконк а	"Быстр ая	Выполняемое действие
		клавиц а"	L
Отмена	<b>NO</b>	нет	отмена последней операции
Вставить пик	A	[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	<b>.</b>	нет	выбирает ближайшую к курсору точку начала пика и выбирает пик.
Выбрать вершину пика	<u> </u>	нет	выбирает ближайшую к курсору вершину пика и выбирает пик.
Выбрать конец пика	<b>.</b>	нет	выбирает ближайший к курсору конец пика и выбирает пик
Выбрать долину		нет	выбирает ближайшую к курсору долину между пиками
Снять выделение пика	Δ	[Esc]	снимает выделение пика
Перенести	64	[-]	передвигает выбранную точку
выбранную точку			пика в позицию курсора.
Объединить пики	H	[+]	Объединяет два соседних пика в один пик.
Сделать соседями	<mark>8</mark> 48	[*]	Объединяет начало предыдущего и конец следующего пика в точке нахождения курсора.
Расщепить пик	Δ	[/]	Расщепляет пик на два в позиции курсора.
Уничтожить все пики слева.	<u>X</u>	нет	Уничтожает все пики слева от позиции курсора.
Уничтожить все пики справа	<u>.</u>	нет	Уничтожает все пики справа от позиции курсора.
Скопировать в буфер	нет	нет	Копирует хроматограмму в текущем окне в буфер обмена

#### 3.3.3.1.5 Меню Вид

••	
Вид	
Все по горизонтали	
Все по вертикали	
<u>Bcë</u>	
Компенсация дрейфа	позволяет компенсировать монотонный дрейф базовой линии
	хроматограммы

3.3.3.1.5.1 Вид...

Вид Properties	? ×
Оси хроматограммы Метки Выбрать канал Цвета	
Ось Х	
X or: 0 Y or: 0 o.u.	1 301.000
Хдо: [15] Удо: [7.80803] о.ч.	
Единицы мин	
Показать Все О Относительные	
🔲 Компенсация дрейфа	
Сетка	
OK Cancel Apply	Help

Эта опция из меню Вид открывает окно, состоящее из следующих диалоговых листов:

Оси хр-мы

Метка пика.

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 🖽.

Bug Properties			? X
Оси хроматограммы Меткі	і   Выбрать канал   Цвета	- 1	
ОсьХ	Ось Ү	🗖 Уст. Все	
Хот: О	Y от: 0	o.u.	
Хдо: 15	Yдо: 7.80803	o.u.	
Единицы мин 💌	Метки		
🗖 Показать Все	О Относите	ельные	
🔲 Компенсация дрейфа	C M		
🗖 Сетка	О Абсолютн	ные	
	OK Cancel	Apply Help	

#### Ось Х

Единицы	выбор единиц удерживания по оси абсцисс
Хот	начало окна по оси Х
Х до	конец окна по оси Х
Ось Ү	
<b>Ү от</b> метки	начало окна по оси Ү. Параметр доступен, если используются абсолютные
Ү до	конец окна по оси Ү

#### Метки

⊙ Нет	метки вдоль оси Y отсутствуют. В верхней части шкалы ставится одна метка для информации о выбранном масштабе. Данный режим используется по умолчанию
⊙ Относительн	ные 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 Хи Ү устанавливается таким образом, чтобы показать хроматограмму целиком.
🗹 Компенсация др	рейфа 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.
🗹 Уст. Все	данный флажок позволяет установить выбранный масштаб во всех открытых окнах хроматограмм.

#### 18 Справка МультиХром версия1.6

#### Ось Х

Единицы_	выбор единиц удерживания по оси абсцисс
Х от	начало окна по оси Х
Х до	конец окна по оси Х

#### Ось Ү

Ү от <u>метки</u>	начало окна по оси Ү. Параметр доступен, если используются абсолютные
Ү до	конец окна по оси Ү

#### Вид: флажки

**№** Показать все масштаб по Хи У 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.

#### 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.
<ul> <li>Относительные</li> </ul>	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.

Вид Properties	? ×
Оси хроматограммы Метки Выбрат	ъ канал   Цвета
Метки пиков О Нет • Номер пика	🗖 Уст. Все
<ul> <li>Удерживание</li> <li>Имя компонента</li> <li>Имя + Количество</li> </ul>	<ul> <li>Рисовать каждую точку хром.</li> <li>Не соединять точки</li> </ul>
<ul> <li>Базовая линия и пики</li> <li>Засечки на базовой линии</li> <li>Метка всегда видна</li> </ul>	Маркеры канала При старте В углу
OK	Cancel Apply Help

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

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

#### 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

#### Метки пика: флажки

🗹 Базовая линия и пики	показывается базовая линия под пиками
Засечки на базовой линии Опция пики.	ставятся засечки начала и конца каждого пика. I доступна, если установлен флажок Базовая линия и

✓ 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.

#### Рисовать каждую точку

Рисовать каждую точку хроматограммы

выключается функция аппроксимации хроматограммы в промежутках между точками

#### Не соединять точки

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

#### Маркеры канала

О 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	

Вид Properties		? ×
Оси хроматограммы	Метки Выбрать канал Цвета	
Выбор>>	74.6 mB	🗖 Уст. Все
Нить		Ширина линии
Фон Оси Базовая линия Фон до старта Канал 1 Канал 2		(в % от высоты шрифта)
Канал 3 Канал 4 Канал 5		По умолчанию
Канал 6 Канал 7	8 1 2 3 4 \$ 6 7 8 mm	Загр. основные
	OK Cancel App	ly Help

Данная страница позволяет настроить цвета фона, курсора, осей, а также цвет хроматографической кривой для каждого канала хроматограммы. Внешний вид хроматогаммы 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 <u>шрифта</u> . 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
🗹 Уст. Все	данный флажок позволяет установить выбранные параметры во всех

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

открытых окнах хроматограмм.

#### Выбор

Данная кнопка позволяет выбрать цвет для <u>текущего</u> элемента окна хроматограммы.

#### 22 Справка МультиХром версия1.6

#### Цвет элемента

Данное поле показывает цвет текущего элемента окна

#### Элементы окна

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

Нить	курсор
Фон	фон окна хроматограммы после запуска анализа
Базовая линия	базовая линия (отрезок между началом и концом пика)

#### Образец

Данная часть окна позволяет оценить получившуюся цветовую схему.

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

#### 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.

#### 3.3.3.1.5.2 Все по горизонтали

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

#### 3.3.3.1.5.3 Все по вертикали

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

#### 3.3.3.1.5.4 Bcë

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

Имеется также специальная пиктограмма

#### 3.3.3.1.6 Меню Обработка

<u>Выдать отчет</u> .	вызывает диалоговое окно Опции отчета
Переразметить	вызывает диалоговое окно Параметры разметки
<u>Ручная разметка</u>	активизирует редактор пиков
Градуировать	заносит информацию из текущей хроматограммы на
	указанный градуировочный уровень

#### 3.3.3.1.6.1 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!

#### 3.3.3.1.7 Меню Метод

Позволяет редактировать метод сбора и обработки данных.

Паспорт	редактирование описания хроматограммы.		
<u>Настройка метода</u> .	реда	ктирование наиболее общих установок метода.	
<u>Разметка.</u>	зада	ние параметров разметки хроматограммы.	
Градуировка	вызс градуи	в подменю операций, связанных с процедурой ровки.	
Компоненты	редакти	рование <b>Таблицы компонентов</b>	
Идентификация	установ	ка общих параметров идентификации компонентов	
Графики	просмо	тр и редактирование градуировочных зависимостей	
Прочитать из метода	записые текущий	зает результаты градуировки из текущей хроматограммы в і метод.	
Записать в метод	читает р хромато	езультаты градуировки из текущего метода в текущую грамму.	
Импортировать градуировку		импорт результатов градуировки из файла.	
Экспортировать градуировку		экспорт результатов градуировки в файл.	
<u>Настройка отчета</u> .		конфигурирование и вывод отчета.	

#### 3.3.3.1.8 Меню настройка

#### 3.3.3.1.8.1 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.

#### 3.3.3.1.9 Меню Окно

Каскад	размещает все открытые окна в виде каскада.
Расположить по вертикали	размещает все открытые окна в виде мозаики
Расположить по горизонтали	размещает все открытые окна в виде мозаики
Упорядочить пиктограммы	упорядочивает значки активных хроматограмм
Закрыть все	закрыть 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



#### 3.3.3.1.10 Справочная система

Оглавление	оглавление справочной системы по программе МультиХром
О программе	информационное окно об авторских правах и версии программы <b>МультиХром</b> и номере установленного в принтерный порт защитного ключа. Если ключ установлен и исправен, будет выведен серийный номер ключа типа: <b>WXXXXX</b> .

#### 3.3.3.2 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.

🛄 Мульт	иХром ГПХ 1.64 - [Dextran 40 (7714-4.mtw)m7301338.GPC ] — 🗆 🗙
🏨 <u>Ф</u> айл 🖻 日 🖣	Редактирование Вид Обработка <u>М</u> етод <u>Н</u> астройка <u>О</u> кно <u>С</u> правка <u>Б</u> ×
	Открыть хроматограмму Сохранить хроматограмму Открыть последний пакет
₽ ₽	<u>Просмотреть отчет</u> <u>Печатать отчет</u>
	<u>Паспорт</u> <u>Установки метода</u> <u>Параметры интегрирования</u> <u>Таблица компонентов</u>
	Каскадное расположение окон Вертикальная мозаика Горизонтальная мозаика
₩ * \$	Вид Редактор пиков Показать всё
<b>₽</b>	<u>Справка</u> Блокировать систему

#### 3.3.3.2.1 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.

#### 3.3.3.3 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.

### 3.3.4 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 <b>[Enter</b> ], 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: <b>включено</b> и <b>выключено</b> . 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

© 2021 ООО Амперсенд

выполнена соответствующая операция. В диалоговом окне могут быть и кнопки, открывающие другие диалоговые окна. Наиболее часто встречаются следующие кнопки:

ОК	принимает вс нажатии клави	е сделанные изменения. То же самое происходит при ⊔и [ <b>Enter</b> ]
Отмена	<cancel></cancel>	отменяет все сделанные изменения. Можно также
	закрыть окно, ц углу или нажав	целкнув мышкой по кнопке 🗵 в его правом верхнем в [ <b>Esc</b> ].
Применить	<b><apply></apply></b> окна	сохраняет все изменения без выхода из диалогового
Справка	<help> вызов нажать [F1]</help>	контекстно-чувствительной подсказки. Можно также

#### 3.3.4.1 Справка

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

### 3.3.5 Типы файлов

Программное обеспечение МультиХром-ГПХ 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 <b>Data</b> ).
*.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 <b>Data</b> , хотя может использоваться любая директория. Каталог хроматограмм можно установить в диалоговом окне <b>Метод</b> / <b>Установки метода / Обработка</b>
*.mtw	Файл <u>метода</u> (двоичный формат) Содержит метод сбора и обработки данных. Хранится по умолчанию в каталоге <b>Methods</b> .
*.rtt	<mark>Шаблон отчета</mark> (ASCII файл). Хранится в папке программ ( <b>mIcw15</b> по умолчанию).
*.wmf	Рисунок хроматограммы в формате *.wmf (Windows метафайл). Записывется параллельно файлу отчета, если одновременно выбран раздел отчета <b>График</b> . Используется для экспорт рисунка хроматограмы в другие приложения.

При записи отчета в файл может использоваться любое расширение.

# 3.3.6 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 Х;
[Влево]	сжать хроматограмму по оси Х;
[Ctrl]+[Home]	автомасштабирование по оси Х (показать все по Х);
[Ctrl]+[End] [Alt]+[V]	автомасштабирование по оси Y (показать все по Y); 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] Y);	переместиться вправо на одно окно (без изменения масштаба по Х и
[Ctrl]+[Влево]	переместиться влево на одно окно (без изменения масштаба по Хи Ү);
[Home]	показать начало хроматограммы (без изменения масштаба по Хи Ү);
[End]	показать конец хроматограммы (без изменения масштаба по Хи Ү);
[Z]	установка нуля по низшей точке участка хроматограммы

#### Курсор активен

установка нуля в местоположении курсора
переместить курсор вправо;
быстро переместить курсор вправо;
переместить курсор влево;
быстро переместить курсор влево;
переместить курсор в начало окна;
переместить курсор в конец окна;
установить начало окна в местоположении курсора
установить конец окна в местоположении курсора

# 4 Хроматограмма

# 4.1 Хроматограмма-определение

#### Хроматограмма

Хроматограмма - это данные, представляющие зависимость сигнала детектора от времени. Графическое изображение хроматограммы выводится в <u>окне хроматограммы</u>.

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 <u>Файл</u>.

По умолчанию хроматограммы хранятся в директории .\DATA. Название каталога изменяется в диалоговом окне <u>Настройка метода / Обработка</u>.

#### Типы хроматограмм:

обычные хроматограммы

градуировочные хроматограммы

# 4.2 Хроматограмма: обычная

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

# 4.3 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.

# <sup>4.4</sup> 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" 脂 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 <u>таблица компонентов</u>. 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);
5		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
<b>H</b>		выбрать долину между соседними пиками, ближайшую к положению курсора
		убрать выделение
<u>~</u>		установить новое положение выбранной точки пика;
<mark>eta</mark>	[*]	слить соседние пики (объединить конец предыдущего и начало следующего пика);
	[+]	стереть границу соседних пиков (объединение пиков);
	[/]	расщепить (разделить) пик на два;
<u></u>	[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

### 4.4.1 Курсор

#### К урсор

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

# 4.5 Работа с файлами хроматограмм

### 4.5.1 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 Вид	выборочная информация из Паспорта хроматограммы внешний вид хромтограммы
Кнопки:	

Справка МультиХром версия1.6

<0K>	загружает с диска все выбранные хроматограммы, каждую в своем окне
<Отмена>	закрывает окно без каких-либо действий
<u>&lt;В пакет&gt;</u>	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

### 4.5.2 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. Использующаяся система формирования имени файла обеспечивает нормальную работу системы до 2024 года.

Если хроматограмма уже имеется на диске, появится сообщение:

ххххххх.gpc уже существует. Переписать?

Если Вы желаете ликвидировать старую копию хроматограммы и оставить только последний вариант, выберете 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.

### <sup>4.5.3</sup> Копировать, удалять, перемещать хроматограммы\_2

Файлы хроматограмм, выбранные в диалоговом окне <u>Открытие хроматограммы</u> 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 произольном порядке нажмите клавишу [Ctrl] и, удерживая ее, выделите файлы с с помощью мыши или клавиши [Пробел].

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

Операции с хроматограмами можно также проводить, используя функции контекстного меню

### <sup>4.5.4</sup> Экспорт хроматограммы

Экспортирует "сырые" данные из программы в следующие форматы:

AIA (\*.cdf) формат Analytical Instrument Association.

текстовый текстовый (ASCII) формат

#### 4.5.4.1 Экспорт хроматограммы: текстовый формат

Экспорт хроматографических данных в ASCII файл (\*.txt)

Представить данные как:	нижеследующие параметры определяют формат
выво	одимых данных
Рабочие единицы (десятичн.)	Данные по оси ординат выражены в принятых
физи	ческих единицах (как на хроматограмме)
Значения АЦП (целые)	Данные по оси ординат выражены в дискретах А ЦП (в
битах	;)
Включить время выхода:	установите этот флаг, если требуется добавить столбец
врем	иени для каждой точки, и выберите требуемый формат
чисе	сл.
В секундах (с плав. точкой) Как номер точки	

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

полное число точек хроматограммы (cycl es);

временной интервал между точками (cyct i me);

величину дискрет АЦП в заданных физических единицах (coef);

заданные физические единицы (uni t s).

### 4.5.5 Импортировать хроматограмму

Позволяет импортировать хроматограммы, записанные в форматах .cdf и .txt.

# <sup>4.6</sup> 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.

# 5 Метод

# <sup>5.1</sup> 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.

# 5.2 Паспорт

Паспорт - это составная часть <u>метода</u>, включающая детальное текстовое описание текущего хроматографического разделения.

Составные части паспорта могут быть целиком или выборочно включены в отчет из диалогового окна <u>Настройка отчета</u> в меню Метод.

lacnopt Properties			<b>?</b> ×	
Общие Проба Колонка Элк	рент   Коммент	арий   Журнал метода	Data Log	
Имя НВА		Продолжит.:	14.7467 мин	
METOД: C:\mlcw15rus\M	ethods/mlc1.mtv	N		
ДАННЫЕ: C:\MLCW15RU	S\DATA\973110	307.chw		
Дата/врем: 31/07/1989 13:0	5:10	Записана: 23/01/2000	0 19:48:16	
Градуировочная точка 0		8		
Пользователь: Nagaev		N анализа; I	D	
Детектор Milichrom1		N в очереди: П	0/0	
	ОК	Cancel Apply	Help	
іщее:	СВС	одный лист наиболее	е общих параметров мет	ода
оба:	лист описания пробы.			
 олонка:лис		т описания хромато	графической колонки.	
Юент	лис	т описания данного	анализа	
мментарий:	ОКН	ю для ввода коммен	нтариев.	
бурнал метода окн внесенные		ю, автоматически ф в метод	иксирующее все измене	ния
Курнал Хроматограммы окно, автома в да		иатически фиксирую анную хроматограми	щее все изменения, вне му	ecei

# <sup>5.2.1</sup> Лист Общее

Паспорт Properties ? 🗙		
Общие Проба Колонка Элюент Коммент	арий   Журнал метода   Data Log	
Имя НВА	Продолжит.: 14.7467 мин	
METOД: C:\mlcw15rus\Methods\mlc1.mtv	N	
ДАННЫЕ: C:\MLCW15RUS\DATA\973113	307.chw	
Дата/врем: 31/07/1989 13:05:10	Записана: 23/01/2000 19:48:16	
Градуировочная точка 🛛	8	
Пользователь: Nagaev	N анализа: О	
Детектор Milichrom1	N в очереди: 0/0	
ОК	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.
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 Х (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.
Пользователь:	имя текущего пользователя. Берется системой из списка пользователей.
Детектор:	название детектора. Может быть отредактировано в бланке <b>Метод/Установки/Измерение</b> .
Каналов:	число каналов в данной хроматограмме. Может быть изменено в бланке <b>Метод/Сбор данных</b> .
№ 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.

#### 5.2.1.1 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).

#### 5.2.1.2 Имя файла метода

Полное имя файла метода.

#### 5.2.1.3 Имя файла хроматограммы

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

#### 5.2.1.4 Дата и время запуска

Дата и время запуска хроматограммы.

#### 5.2.1.5 Дата и время записи

Дата и время записи хроматограммы (последняя редакция).

#### 5.2.1.6 Градуировочная точка

Поле Градуировочная точка можно изменить, пока хроматограмма не закончилась. После окончания это можно сделать, обновляя требуемый градуировочный уровень.

#### 5.2.1.7 Имя текущего пользователя

Имя текущего пользователя. Берется системой из списка пользователей.

#### 5.2.1.8 Название детектора

Название детектора. Может быть отредактировано в бланке Метод/Установки/Измерение.
### 5.2.1.9 Номер текущего анализа

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

Этот параметр не может быть изменен пользователем!.

### 5.2.1.10 Номер текущей хроматограммы

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

### 5.2.2 Описание пробы

Пас	nopt Properties		? ×
0	бщие Проба Колонка	Элюент   Комментарий   Журнал метода   Data Log	j
	Инфо 1: HPLC 8wl		
	Инфо 2: [olB+plB+mCl	}+mBB+oBB+pPhB]Me+Bz+To+BPB,0.5ug, in	
	Объем: 1	<sub>мкл</sub> Разведение: 1 N пробирки: 1	
	Количество: 1	Кол-во внутр. стандарта: 100	
	Дата/а времен	ремя получения пробы(если отлично от и инъекции):	
	31	/ 7 / 1989 5 : 32 : 10	
		OK Cancel Apply	Help

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

Инфо1, Инфо2	общее описание пробы, 2 строки по 255 знаков каждая.
Объем	объем пробы в микролитрах, по умолчанию равен 1;
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 <b>Разведение</b> . Если параметр <b>Количество</b> отличен для градуировочных (с)и обычных (s) хроматограмм, концентрация умножается на коэффициент равный <i>Amount(s) / Amount(c)</i>
Кол-во внутр.стандарта	количество <b>внутреннего стандарта</b> 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

### 5.2.2.1 Общее описание

Общее описание пробы, 2 строки по 255 знаков каждая.

### 5.2.2.2 Объем пробы

Объем пробы в микролитрах, по умолчанию равен 1.

### 5.2.2.3 Разведение

Разведение исходного образца, по умолчанию равно 1.

### 5.2.2.4 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.

### 5.2.2.5 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 хроматрграммы, недоступное для редактирования.

© 2021 ООО Амперсенд

### <sup>5.2.3</sup> Колонка

Паспорт Properties	? ×
Общие Проба Колонка Элюент Комментарий Журнал метода Data Log	
Номер: 1112 Вн. Диам.: 2 мм Длина: 60 мм	
Сорбент	
LiChrospher C18	
Размер частиц: <mark>5 </mark> рм Мертвый объем: 0 %	
Предколонка (установить длину = 0 при отсутствии)	
Вн.Диам.: 2 мм Длина: 0 мм	
OK Cancel Apply Help	

Описание колонки - это часть <u>Паспорта</u> хроматограммы. Может быть включено в отчет выбором соответствующих пунктов из диалогового окна <u>Настройка отчета</u> 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. Длина	внутренний диаметр предколонки в миллиметрах. длина предколонки в миллиметрах. Установите значение "0", если предколонка отсутствует.

### 5.2.3.1 Серийный номер колонки

Серийный номер колонки, до 12 символов

### 5.2.3.2 Внутренний диаметр колонки

Внутренний диаметр колонки в миллиметрах.

### 5.2.3.3 Описание сорбента

Описание сорбента колонки, до 255 символов.

### 5.2.3.4 Зернение сорбента в микронах

Зернение сорбента в микронах.

Используется для расчета приведенной высоты теоретической тарелки (ПВТТ).

### 5.2.3.5 Параметры предколонки

Параметры предколонки

Вн.диам.	внутренний диаметр предколонки в миллиметрах.
Длина	длина предколонки в миллиметрах.
	Установите значение "0", если предколонка отсутствует.

# 5.2.4 Элюент

Паспорт Properties	? ×
Общие   Проба   Колонка   Элюент   Комментарий   Журнал метода   Data Log	
Подвижная фаза	
Элюент А: 80% MeOH : 20% water	
B:	
C:	
Поток: 50 мкл/мин Давление: 0 МПа Темп.: 0 °C	
OK Cancel Apply Help	

Описание элюента - это часть <u>Паспорта</u> хроматограммы. Может быть включено в отчет выбором соответствующих пунктов из диалогового окна <u>Настройка отчета</u> 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 <b>единиц удерживания</b> по оси X хроматограммы и для пересчета площадей пиков в объемные единицы.	
Давление	давление на входе колонки, бар	
Темп.	температура термостата колонки, °C	

### 5.2.4.1 Состав подвижной фазы

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

### 5.2.4.2 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.

### 5.2.4.3 Давление на входе колонки

Давление на входе колонки, бар

### 5.2.4.4 Температура термостата

Температура термостата колонки, °С

### 5.2.5 Комментарии

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

### 5.2.5.1 Новый комментарий

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

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

### 5.2.6 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

### 5.2.7 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.

# 5.3 Настройка метода

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

Свойства: Настройка Метода ? 🗘			
Общие Обработка			
Title Dextran 40900	Продолжит.: 40.0053 мин		
МЕТОД: C:\SEC\METHODS\7714-4.mtv	N		
ДАННЫЕ: C:\SEC\DATA\MONODISP\m7	251639.GPC		
Дата/врем: 25.07.2002 16:39:02	Записана: 30.08.2021 18:48:12		
🔽 Эксклюзионная хроматография (ГПХ-SEC)			
Градуировочная точка			
Пользователь:	N анализа: 406		
Детектор ADC7714	N в очереди: 0/1		
ОК Отмена Применить Справка			

Общие

наиболее общие установки. Данный лист полностью дублирует лист Паспорт / Общее.

<u>Обработка</u>

выбор действий, выполняющихся автоматически после завершения хроматограммы.

## 5.3.1 Лист Обработка

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

Свойства: Настройка Метода	?	×	
Общие Обработка Формулы			
Действия во время измерения или сразу после завершения		_ 1	
Вернуться к хроматографии В <u>ь</u> дать отчет			
Сохранить хр-му по окончании С Автоматически показ	ать всё		
во время измер. <u>к</u> аждые 2 мин Перезапустить метод			
□ <u>З</u> акрыть окно			
Каталог хроматограмм:			
C:\SEC\DATA\MONODISP\	<u>0</u> 630p		
Программа до: Программа по <u>с</u> ле:			
ОК Отмена Применить	Спра	вка	

Вернуться к хроматографии	система автоматически переключается в окно программы <b>МультиХром</b> по окончании хроматограммы, если пользователь в этот момент работал с другой программой.
Сохранить хр-му по окончани	и вкл./выкл. автоматическую запись хроматограммы на диск.
во время измер. каждые XXX позво (на сл произ	мин ляет установить периодичность записи хроматограммы на диск учай сбоя) во время приема данных. Ноль - резервная запись не зводится.
🗹 Выдать отчет	вкл./выкл. автоматическую выдачу <u>отчета</u> . 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)
🗹 Закрыть окно	закрывает окно хроматограммы после ее окончания.
🗹 Перезапустить метод	перезапуск метода после окончания хроматограммы.
Каталог хроматограмм	каталог, в который будет записана хроматограмма.
Будьте внимательны: при вводе каталог на диске!	система не проверяет, существует ли указанный

авт. выдача отчета Автомасштабирование

авт. закрытие хр-мы

### 44 Справка МультиХром версия1.6

Перезапуск метода

<u>Каталог</u>

программа до-после

### 5.3.1.1 Выдать отчет

Данный флажок включает автоматическую **выдачу отчета** по окончании импорта данных. **Отчет** выдается в соответствии с установками окна <u>Опции отчета</u>.

### 5.3.1.2 Автомасштабирование

Автомасштабирование рисунка хроматограммы по ее окончании. По умолчанию используются установки из <u>меню Вид</u>.

### 5.3.1.3 Перезапуск метода

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

### 5.3.1.4 Закрыть окно

Автоматически закрывает окно хроматограммы после ее окончания.

### 5.3.1.5 Каталог

Каталог, в который будет записана хроматограмма.

### 5.3.1.6 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.

## 5.4 Операции с файлами методов

### <sup>5.4.1</sup> 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

### <sup>5.4.2</sup> Метод: сохранить

Данная функция сохраняет файл <u>метода</u> 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

### 6 Пакет хроматограмм: общее

## 6.1 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

# 6.2 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**.

# 6.3 Окно «Пакетный пересчет»

Данное окно предназначено для управления процессом пересчета пакета хроматограмм.

Пакетный пересчет: C:\SEC\DATA\M	ONODISP\batc ? X				
Использовать <u>м</u> етод из файла для пересчета	1 (m7251639) Dextran 40900 💌				
От <u>к</u> рыть пример	Открыть все <u>ф</u> айлы				
Пересчитать об <u>ы</u> чные	Редактировать <u>т</u> аблицу				
Пересчитать градуировочные					
Обновить файл метода в каталог	e <methods> после пересчета</methods>				
Режим пересчета					
Переразметить Редак	тировать параметры <u>р</u> азметки				
Переградуировать					
Схема по умолчанию					
🔽 Применить оконч. град. ко всем пересчитанным файлам					
🗹 Забыть точки градуировки перед пересчетом					
🔲 То <u>л</u> ько пересчитать					
Изменить паспорт	Редактировать <u>п</u> аспорт				
Изменить вид хроматограммы	Редактировать <u>в</u> ид				
Создание отчета					
□ <u>Н</u> апечатать отчет Редактировать <u>о</u> пции отчета					
Пересует Объединить	<u>З</u> акрыть <u>С</u> правка				

Общие установки

Режим пересчета

Создание отчета

#### Кнопки:

<Пересчет>	Начинает пересчет в соответствии со сделанными установками
<Объединить>	Объединение всех хроматограмм пакета в одну <b>многоканальную хроматограмму</b> .
<Закрыть>	Закрытие окна «Пакетный пересчет».

См. также: <u>Как создать пакет</u> <u>Редактирование пакета хроматограмм</u>

### 6.3.1 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 очередей 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

### 6.3.1.1 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.

### 6.3.1.2 Открыть пример

#### Открыть пример

Открытие **хроматограммы**, метод которой выбран в качестве прототипа. Данная функция удобна для просмотра и коррекции метода из хроматограммы-прототипа.

### 6.3.1.2.1 Редактировать таблицу

#### Редактировать таблицу

Открытие Редактора очередей для изменения таблицы пакета хроматограмм

### 6.3.1.3 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.

### 6.3.1.4 Пересчитать обычные

### Пересчитать обычные

Установите флажок, если требуется пересчитать обычные хроматограммы (анализ проб неизвестного состава)

### 6.3.1.5 Обновить файл метода после пересчета

Обновить файл метода в каталоге <METHODS>после пересчета

Обновление файла метода после пересчета пакета

### 6.3.1.5.1 Пересчитать градуировочные

#### Пересчитать градуировочные

Установите флажок, если требуется пересчитать только **градуировочные хроматограммы** (обновление градуировки). Можно выбрать обычные и градуировочные хроматограммы одновременно.

### 6.3.2 Пакетный пересчет: режим пересчета

Переразметить	производит переразметку хроматограмм данного пакета. При запуске пересчета для редактирования будет вызвано диалоговое окно Параметры разметки
<Редактировать пар	аметры разметки>
	Вызов окна Параметры разметки для редактирования параметров и
	сооытии 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 умолча	нию выбор схемы по умолчанию для процесса переградировки. В этом случае устанавливаются два следующих флажка.
Применить оконч	. град. ко всем пересчитанным файлам
·	обновляет градуировку во всех пересчиттанных хроматограммах на конечную. Если флажок сброшен, все градуировочные хроматограммы будут содержать т.н. "историческую" градуировку, обычные хроматограммы будут содержать окнчательную градуировку, если установлен флажок Пересчитать обычные
Забыть точки гра	дуировки 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.

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 подвегнувшиеся 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>

#### 6.3.2.1 Переразметить

#### Переразметить

Установите данный флажок для переразметки хроматограмм данного пакета. При запуске пересчета будет вызвано диалоговое окно Параметры разметки для редактирования параметров.

#### 6.3.2.2 Редактировать параметры разметки

### Редактировать параметры разметки

Вызов окна Параметры разметки для редактирования параметров и событий интегрирования.

#### 6.3.2.3 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 переградировки. В этом случае устанавливаются два следующих флажка.
Забыть точки градуиров	ки 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 <b>таблицы пакета хроматограмм</b> .
Приложить оконч. град.	ко всем пересчитанным файлам обновляет градуировку во всех пересчиттанных хроматограммах на конечную. Если флажок сброшен, все градуировочные хроматограммы будут содержать т.н. "историческую" градуировку, обычные хроматограммы будут содержать окнчательную градуировку, если установлен флажок «Пересчитать обычные»

### 6.3.2.4 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.

### 6.3.2.5 Изменить паспорт

### Изменить паспорт

Данная опция позволяет изменить **паспорт** в пересчитываемых хроматограммах пакета. Для этого требуется щелкнуть по кнопке <u><Редактировать паспорт></u> и внести необходимые изменения в **паспорт** хроматограммы. **Паспорт** берется из выбранной хроматограммы-прототипа.

В результате пересчета будут изменены только подвегнувшиеся редактированию поля паспорта.

### 6.3.2.6 Редактировать паспорт

#### Редактировать паспорт

Данная кнопка вызывает для редактирования сокращенный вариант <u>паспорта</u> <u>хроматограммы</u>. В данном режиме имеет смысл редактировать только пустые поля **паспорта**. В результате пересчета будут изменены только подвегнувшиеся редактированию поля.

### 6.3.2.7 Изменить вид хроматограммы

#### Изменить вид хроматограммы

Данная опция позволяет изменить внешний вид пересчитываемых хроматограмм **пакета**. Параметры для пересчета можно установить с помощью кнопки <u><Редактировать вид></u>

### 6.3.2.8 Редактировать вид

### Редактировать вид

Данная кнопка вызывает для редактирования диалоговое окно Вид

### 6.3.3 Пересчет

#### Пересчет

Начинает пересчет пакета хроматограмм в соответствии со сделанными установками.

### 6.3.4 Объединить

#### Объединить

Объединение всех хроматограмм пакета в одну многоканальную хроматограмму.

### 6.3.5 Закрыть пакетный пересчет

Закрыть пакетный пересчет Закрытие окна Пакетный пересчет.

### 6.4 Пакеты хроматограмм: работа с файлами

### 6.4.1 Последний пакет

Открывает для пересчета **пакет** хроматограмм, редактировавшийся **последним**. Данная функция используется, если требуется временно закрыть текущий **пакет** (окно **Пакетный пересчет**).

### 6.4.2 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**».

### <sup>6.4.3</sup> 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 <sup>22</sup>), выберите с помощью мыши требуемые хроматограммы и щелкните по кнопке **<В пакет>**. На запрос системы введите имя очереди и нажмите **<OK>**. 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!

### <sup>6.4.4</sup> 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**.

# 日 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.

# 6.5 Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограм

меню:

Eile	Queue Editor 1 Edit <u>H</u> elp	.0 - C:\mlc	w32\Data\s	ample	e1.bar						- 8	x
		<b>N</b>	< 📭		[	✓	?					
	File Name	Method	Title	Vial	Volume	Dilution	Amount	Internal Standard	Calibration	Sample Info 1	Sample Info 2	
								Amount	LOVOI			
1	d9021259.chw	learn.mtw	Cal.mix.#1	1	10.0	4.0	1.0	Amount 100.0	1	GC capillary	oil refinery fraction	
1 2	d9021259.chw d9021260.chw	learn.mtw learn.mtw	Cal.mix.#1 Cal.mix.#2	1	10.0 10.0	4.0 2.0	1.0 1.0	Amount 100.0 100.0	1 2	GC capillary GC capillary	oil refinery fraction oil refinery fraction	
1 2 3	d9021259.chw d9021260.chw d9021261.chw	learn.mtw learn.mtw learn.mtw	Cal.mix.#1 Cal.mix.#2 Cal.mix.#3	1 2 3	10.0 10.0 10.0	4.0 2.0 1.0	1.0 1.0 1.0	Amount 100.0 100.0 100.0	1 2 3	GC capillary GC capillary GC capillary	oil refinery fraction oil refinery fraction oil refinery fraction	

Для редактирование таблицы пакета хроматограмм используется специальное приложение -Редактор пакета.

В режиме редактирования таблицы пакета хроматограмм активны следующие пункты

<u>Меню Файл</u>	файловые операции
<u>Меню Редактор</u>	операции редактирования <b>таблицы очереди</b> . Меню доступно в режиме редактирования очереди или <b>пакета</b> <b>хроматограмм</b> .
Меню Справка	вызов контекстно-чувствительной справочной системы.

### <sup>6.5.1</sup> 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 весии используются английские названия столбцов:

File name	имя файла хроматограммы
<u>Method</u>	файл метода, который использовался для сбора и обработки данных. В разных строках могут использоваться различные методы.
Title	заголовок хроматограммы. Заносится в <u>паспорт</u> хроматограммы при пересчете.
Vial	номер позиции флакона в автосамплере. Значение заносится в <b>паспорт</b> хроматограммы при пересчете.
Volume	объем пробы в микролитрах. Значение заносится в паспорт хроматограммы при пересчете. Значение по умолчанию - <b>1</b> [мкл].
Dilution	произведенное разведение пробы до анализа. Значение заносится в <b>паспорт</b> хроматограммы при пересчете. Значение по умолчанию - <b>1</b> .
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 - <b>1</b> .
Internal standard amount	концентрация вещества, используемого в качестве внутреннего стандарта в данном анализе. Значение по умолчанию - <b>100</b> .
Level	уровень градуировки для данного анализа. Нулевое значение уровня соответствует нормальному, а больше или равное <b>1</b> - градуировочному разделению. Если соответствующий уровень существует в <b>Таблице</b> концентраций используемого метода, при завершении хроматограммы его данные будут автоматически обновлены.
Sample info 1	Информация о пробе (поле <b>Инфо 1</b> паспорта хроматограммы, до 256 знаков).
Sample info 2	Информация о пробе (поле <b>Инфо 1</b> паспорта хроматограммы, до 256 знаков).

# 6.5.2 Редактор пакета: меню Файл

È	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 « <b>Quebar</b> »
~	Сохранить и выйти	сохраняет текущий пакет хроматограмм с последующим выходом из Редактора очередей.
á,	Печать	Открывает окно <b>Печать</b> для вывода таблицы очереди на принтер.

Справка мультихром версият.	Справка М	<b>ЛультиХром версия1.6</b>	
-----------------------------	-----------	-----------------------------	--

Выход

54

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

# 6.5.3 Редактор пакета: меню Редактор

Хдалить строки       удаляет строки с выделенными ячейками.         Увеличить по порядки       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 выполняет только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке.          Размножить       вводит в выделенные ячейки значения из соответствующих ячеек верхней строки. <ul> <li>Переставить строки</li> <li>Кохранить и выйти</li> <li>сохраняет сделанные изменения, выходит из редакточе очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.</li> </ul>	2	Вернуть	отменяет последнее действие.
<ul> <li>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 выполняет только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке.</li> <li>Размножить вводит в выделенные ячейки значения из соответствующих ячеек верхней строки.</li> <li>Переставить строки меняет местами первую и последнюю строки из выделенного диапазона.</li> <li>Сохранить и выйти сохраняет сделанные изменения, выходит из редакт очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.</li> </ul>	×	Удалить строки	удаляет строки с выделенными ячейками.
Image: Pasmhoжить       вводит в выделенные ячейки значения из сответствующих ячеек верхней строки.         Image: Pasmhoжить строки       меняет местами первую и последнюю строки из выделенного диапазона.         Image: Pasmhoжить и выйти       сохраняет сделанные изменения, выходит из редакт очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.	4	Увеличить по порядку	увеличивает на 1 значения в выделенных ячейках столбца (сверху вниз). Применимо для столбцов <b>Title</b> , <b>Vial</b> , <b>Level. Sample Info 1,Sample Info 2</b> . При отсутствии какого- либо значения в столбцах <b>Vial</b> и <b>Level</b> ввод значений начинается с <b>0</b> . В остальных столбцах процедура выполняется только при наличии числа в последней позиции строки в верхней ячейке.
Переставить строки         меняет местами первую и последнюю строки из выделенного диапазона.           Сохранить и выйти         сохраняет сделанные изменения, выходит из редакт очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.		Размножить	вводит в выделенные ячейки значения из соответствующих ячеек верхней строки.
Сохранить и выйти сохраняет сделанные изменения, выходит из редакт очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.		Переставить строки	меняет местами первую и последнюю строки из выделенного диапазона.
	ť	Сохранить и выйти	сохраняет сделанные изменения, выходит из редактора очередей и возвращается обратно в окно Пакетный пересчет.

# 6.6 Пакетный пересчет: отчет

Напечатать отчет	выводит отчет по каждой хроматограмме очереди, в соответствии с
	установками в диалоговом окне Опции отчета использованного
	метода. Флажки <b>Пересчитать обычные и Пересчитать</b>
	градуирровочные позволяют напечатать отчет по выбранной группе
	хроматограмм.
	Параметры отчетов устанавливаются с помощью кнопки
	<Редактировать опции отчета>

© 2021 ООО Амперсенд

# 7 Отчет

Данное диалоговое окно доступно через пункты меню Обработка / Выдать отчет или Метод / Настройка отчета, а также иконку 🖾 пиктографического меню

Опции отчета	? ×
Разделы отчета	Куда направить отчет
🗹 Общие	🗖 Экран 🔽 Принтер 🔽 Файл Просмотр
🔽 Проба	Таблица пиков
🔽 Колонка	Метод расчета: Настройка 💌
🗹 Элюент	Станд, компонент:
🔽 График	Концентрация станд.: 100
🔽 Таблица пиков	Нормировка: 100
🗖 Комментарий	Порядок печати: По пикам
🗖 Журнал	<<Столбцы 🔽 Отчет о всех пиках 🗖 Группы
– Другие разделы отчета	Шаблон: english.rtt 💌
Измерение	Разделитель: Пробел 💌 Табулятор: 8
🗖 Разметка	Параметры печати в файл
🗖 Градуировка	Каталог: Пролистать Имя:
🗖 Таблица компонентов	C:\MLCW15RUS\REPORTS\
П Результаты градуировки	Режим: 💿 Переписать 🛛 Дополнить
🗆 Таблица канада	Кодировка 💿 Windows 💿 DOS
Спектр. отношения	Программа
Страница	Отчет Принять Отмена Справка

### 56 Справка МультиХром версия1.6

Опции отчета	? ×
Разделы отчета Общие Г Проба Колонка Элюент	Куда направить отчет Вкран Г Принтер Файл Просмотр Определение фракций Тяжелая фракция: 0 % Легкая фракция: 0 %
<ul> <li>График</li> <li>Результаты расчета</li> <li>Комментарий</li> </ul>	Срез-таблица для ГПХ Срез по времени: 0.166667 мин
Другие разделы отчета Журналы GLP Измерение	Шаблон: RUSSEC.RTT ▼ Разделител Пробел ▼ Табулято 8
<ul> <li>Разметка</li> <li>Срез-таблица</li> <li>Таблица компонентов</li> <li>Рез-ты градуировки</li> </ul>	Параметры печати в Файл Каталог: <u>Обзор</u> Имя Фа <u>й</u> ла: С:\SEC\REPORTS\ Режим: © Переписать С Дополнить
Таблица канала Спектр. отношения Страница	Кодировка (© <u>Windows</u> ( <u>C</u> <u>D</u> OS Прогр <u>а</u> мма Отует При <u>н</u> ять <u>О</u> тмена <u>С</u> правка

Диалоговое окно **Опции отчета** разделено на нескольких полей - областей окна, каждое из которых содержит некоторые функции и опции, сгруппированные по назначению.

<u>Разделы отчета</u>	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
<u>Куда направить отчет</u>	поле, определяющее устройство для вывода. Можно выбирать несколько устройств вывода одновременно. Сюда же по назначению относится группа установок Параметры печати в файл.
Определение фракций	
<u>Срез-таблица</u>	поле, содержащее набор параметров, определяющих структуру <mark>срез-таблицы</mark> в отчете.
<u>Шаблоны и разделители</u>	
	выбирается * <b>.rtt файл</b> , содержащий все заголовки отчета на определенном языке
<u>Разделитель</u>	тип разделителя, используемого для разделения колонок таблиц при выводе отчета
<u>Параметры печати в файл</u>	параметры печати в файл становятся доступными, если отчет направляется в файл.

### Кнопки:

Отчет 57

<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

# 7.1 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 <b>.wmf</b> формата (Windows metafile), с тем же именем, что и файл текстового отчета.
☑ Таблица пиков	включает в отчет <b>Таблицу пиков</b> . ( <b>Таблица пиков</b> содержит основные результаты анализа). Если какие-либо компоненты в <b>Таблице</b> компонентов объединены в группы, будут напечатаны также групповые таблицы пиков.
🗹 Комментарий	включает в отчет дополнительное описание анализа в свободной форме. Комментарий заполняется в <b>Паспорте хроматограммы</b> .
🗹 Журнал	включает в отчет <u>Журнал метода</u> и <u>Журнал данных</u> .

# 7.2 Заголовок отчета

Типичный заголовок отчета зависит от опций, выбранных в диалоговом окне <u>Опции отчета</u> из **меню Метод**.

# 7.3 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

### 7.3.1 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 <b>*.wmf</b> .
Режим	режим вывода отчета в файл:
⊙Переписать ⊙Дополнить	файл отчета пишется поверх существующего отчет добавляется к имеющемуся файлу
Кодировка	Используемая таблица кодировки символов. Параметр важен для печати русских букв.
⊙Windows ⊙DOS	использование кодировки ANSI, принятой в оболочке Windows использование альтернативной A SCII 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.

# 7.4 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 <u>Опции отчета</u>

Единицы измерения	выбор единиц измерения ( <b>дюймы</b> или <b>сантиметры</b> ).
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
<b>—</b> ———————————————————————————————————	

Параметры данного диалогового окна сохраняются в методе и хроматограмме

## 7.5 Обзор

Обзор

Данная кнопка позволяет сменить каталог для записи файла отчета.

# 7.6 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.

# 7.7 Принять

Принять

Шаблоны

Прием сделанных установок и выход из диалогового окна Опции отчета

# 7.8 Шаблоны и разделители

	входят шаблоны, расчитанные на различные языки. Кроме того, имеется специальный шаблон <b>export.rtt</b> для экспорта отчетов в электронные таблицы или базы данных.
<u>Разделители</u>	выбор символа-разделителя для таблиц отчета
Табулятор	устанавливает размер табуляции при выводе отчета на экран. Данная установка работает, если выбран тип разделителя <b>Табулятор</b> или символы табуляции содержатся в RTT-файле.

выбор шаблона для отчета. В установочный комплект программы

### <sup>7.8.1</sup> RTT файлы

Программа **МультиХром** имеет гибкую двухуровневую систему настройки отчета. Первый из них - из диалогового окна <u>Опции отчета</u>, 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, использующиеся 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]

•••

60

#### [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 "С".

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
- \р 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.

Отчет	61
-------	----

[.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 " <b>f</b> ", но с возможностью конвертирования в число с порядком
d	двухбайтное целое число
ld	четырехбайтное 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.

### 7.8.2 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

## 7.9 кнопка Отчет

Отчет

Выдача отчета в соответствии с сделанными установками.

### 7.9.1 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.

# 8 Общие настройки

Данное окно содержит настройки, являющиеся общими для программы **МультиХром-ГПХ**. Все программы и методы будут использовать эти установки.

Общие настройки	? ×
— Перезаписывать файл данных Ф. Никогда	🔲 Режим GLP
<ul> <li>Запрашивать*</li> <li>С Воргаз*</li> </ul>	Сохранение хроматограммы
«При изменении исх. данных, в новый файл	Совместимая градуировка
Если метод изменен • Молчать	
С Запросить запись	Единицы хроматограммы
О Перезаписать без запроса	Поток мл/мин 💌
<ul> <li>Если метод на диске более свежий</li> <li>Запросить перезапись</li> </ul>	Давление МПа 💌
С Перезаписать без запроса	
Открытие хроматограммы	🔲 Печатать через буфер
П интерировать последнии каталог данных	
ОК	Отмена <u>С</u> правка

Все параметры собраны в группы.

### 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 ⊙ Всегда	решение о перезаписи файла каждый раз принимает пользователь 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 запро	са измененный метод сохраняется автоматически.

#### Если метод на диске более свежий

Запросить перезапись если дисковая ве Области в собласти в собла С собласти в собла С собласти в собл	ерсия метода является более свежей, система делает		
дополнительный запрос о ее перезаписи.			
⊙Перезаписать без запроса	более свежая версия метода будет перезаписана		
автоматически			

### Открытие хроматограммы

#### **М**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
Если метод изменен
Если метод на диске более свежий

Никогда Запросить запись Запросить перезапись

### Сохранение хроматограммы

🗹 Совместимая калибровка	при установке этого флажка используется старый
формат градуи	ровочных данных. Это дает возможность читать
хроматограммы	ы в более старых версиях программы МультиХром.

#### Единицы хроматограмы

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.

# <sup>8.1</sup> 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.

# 8.2 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.

# 8.3 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

## <sup>8.4</sup> 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.

### <sup>8.5</sup> Режим GLP

Режим GLP

Данный флажок включает набор установок в соответствии с требованиями GLP:

Перезаписывать файл данных Если метод изменен Если метод на диске более свежий Никогда Запросить запись Запросить перезапись

## 8.6 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.

# <sup>8.7</sup> Единицы хроматограмы

#### Единицы хроматограмы

Поток	выбор единиц для потока подвижной фазы: мкл/мин, мл/мин
Давление	выбор единиц для измерения давления: МПа, psi, бар, атм

## 8.8 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.

### <sup>8.9</sup> 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-ГПХ это означает:

Полная конфигурация параметров обработки данных, также как и исходные данные, хранятся в одном файле. Это дает возможность полностью воспроизвести как сам анализ, так и результаты.

Встоенная <u>система безопасности</u> на основе пароля позволяет ограничить <u>уровень доступа</u> 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 <u>Журнала метода</u> и <u>Журнала данных</u> для отслеживания всех изменений, внесенных в метод и хроматограмму.

См.также:

Защита Общие настройки

# <sup>9</sup> Защита

В соответствии с требованиями GLP система Мульти Хром обеспечивает защиту от несанкционированного доступа к программе при помощью 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)**.

### <sup>9.1</sup> Допуск

Уровень допуска является частью <u>защиты</u> системы. Он устанавливается при запуске системы вместе с вводом имени пользователя через диалоговое окно <u>Пароль</u>.

Пользователь может иметь три уровня допуска:

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.

### <sup>9.2</sup> Пароль

Это диалоговое окно появляется при запуске системы, а также при вызове опции <u>замкнуть</u> <u>систему</u>. Пользователь должен ввести свой пароль и нажать [Enter].

Имя пользователя и его уровень допуска будут найдены по паролю в списке пользователей. Допускается длина пароля до 6 знаков.

# 9.3 Блокировать систему

Эта опция позволяет закрыть доступ к системе (через вызов диалогового окна <u>Пароль</u>). Используется для защиты данных в случае временной отлучки пользователя. Опция позволяет также сменить текущего пользователя системы.

# <sup>10</sup> Как выполнить...

## 10.1 Как напечатать отчет

### 1. Откройте хроматограмму.

- 2. Установите требуемый масштаб хроматограммы.
- 3. Если требуется, настройте вид хроматограммы.

4. Вызовите диалоговое окно <u>Опции отчета</u> и, если необходимо, настройте параметры отчета. Для вывода отчета на притер отметьте флажок **Принтер** 

5. Вызовите диалоговое окно <u>Страница</u> для установки полей и размров рисунка. Выбор типа принтера, размера и ориентации бумаги проводится в окне <u>Файл/Настройки принтера</u>.

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

66

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.

# <sup>10.2</sup> Как провести пакетный пересчет

Создайте <u>новый пакет</u> 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 <u>градуировочные</u> или только <u>обычные хроматораммы</u>. 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 <u><Редактировать параметры</u> 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 **СРедактировать паспорт>** и внесите требуемые изменения.

Примечание: Некоторые параметры паспорта берутся из <u>таблицы пакета</u> <u>хроматограмм</u> и могут быть индивидуальными для каждой хроматограммы пакета.

Установите флажок Изменить вид хроматограммы если нужно изменить вид пересчитываемых хроматограмм. Щелкните по кнопке <u><Редактировать вид></u>, 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 <u>СРедактировать опции отчета</u> и внесите требуемые изменения.

Для начала пересчета щелкните по кнопке <Пересчет>.

# 11 Модуль ГПХ

### 11.1 Введение к ГПХ

В состав программного обеспечения программно-аппаратного комплекса **МультиХром-**ГПХ, версия 1.6х включен специализированный модуль для расчета **молекулярно-массового распределения полимеров** (**ММР**) по хроматограммам, полученным методом эксклюзионной хроматографии, 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 1.5х (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 **MMP** 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 MMP, которые характеризуются двумя параметрами – средней молекулярной массой Mn и средневзвешенной молекулярной массой Mw. При этом предполагается линейная связь между логарифмом молекулярной массы Ig(M) и временем выхода T:

$$lg(M) = k0 - k1 \cdot T$$

Коэффициенты **k0** и **k1**, рассчитанные при градуировке, далее используются для определения параметров **MMP** 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:

$$lg(M) = k0 - k1 \cdot T + k2 \cdot T^2$$

$$lg(M) = k0 - k1 \cdot T + k2 \cdot T^{2} + k3 \cdot T^{3}$$

При использовании градуировочной зависимости вида **Ig(M) = F(T)** предполагается, что и градуировка, и последующие измерения выполняются не только в одинаковых условиях, но

Модуль	ГПХ	69
--------	-----	----

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<sup>C</sup> – 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 Mi считается постоянным, а количество вещества – пропорциональным площади Ai, заключенной в пределах этого интервала между хроматографической кривой и базовой линией. Величина интервала задается пользователем, при этом точность расчета MMP возрастает с уменьшением интервала, но одновременно возрастает время расчета.

При проведении градуировки по полидисперсному образцу программа сначала рассчитывает методом последовательных приближений величину **k1** из соотношения

$$Mw/Mn = (\Sigma(Ai \cdot 10^{-k1 \cdot Ti})/\Sigma Ai)/(\Sigma Ai/\Sigma(Ai/10^{-k1 \cdot Ti}))$$

а затем величину к0 из соотношения

Для исследуемого образца программа рассчитывает следующие параметры ММР:

где **Mi** - значение молекулярной массы, рассчитанное по градуировочной зависимости для значения времени удерживания **Ti**, 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 <u>Общие</u> имеет дополнительный флажок<u>Эксклюзионная хроматография</u> (**ГПХ-SEC**). 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

### 70 Справка МультиХром версия1.6

градуировки:

- Не создается Таблица концентраций.
- В результате градуировки получается единственная <u>градуировочная зависимость</u>, а не набор зависимостей для всех компонентов. При этом вместо набора окон Компонент параметры градуировки задаются через единственное окно <u>Градуировка ГПХ</u>.
- 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 **MMP** (для этого в окне <u>Опции отчета</u> добавлен соответствующий раздел).

## 11.2 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.

Паспорт Properties	? ×			
Общие Проба Колонка Элюент Коммент	гарий 🛛 Журнал метода 🗍 Журнал данных 🗎			
itle 10-50ppm Std4	Продолжит.: 20 мин			
METOД: D:\mlcw15r\Methods\dreipunk.mtw				
ДАННЫЕ: d:\mlcw15r\Data\G2291519.CHW				
Дата/врем: 29/02/1996 15:19:14	Записана: 16/05/2000 14:32:54			
🦳 Гель-Проникающая хроматография (ГПХ-SEC)				
Градуировочная точка 3				
Пользователь:	N анализа: 130			
Детектор Leitfдhigkeit	N в очереди: 0/1			
ОК	Cancel Apply Help			

- 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.

### 11.2.1.1 Разметка хроматограммы ГПХ

При создание 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.

### 72 Справка МультиХром версия1.6

#### 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 Али выбрав команду Метод/ Разметка, при этом не экране будет представлен лист Параметры ГПХ.

Тараметры разметки Properties			? ×	
Параметры ГПХ   Установки   События				
Начало базовой линии:	2.9			
Конец базовой линии:	19			
Начало пиков:	3.2	_		
Конец пиков:	18			
	4.2			
Начало области анализа:	4.3	되 		
Конец области анализа:	17	▼		
OK Cano	el	Apply	Help	

- 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 [ТАВ].
- 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 <u>разметке</u> и раздел <u>Интегрирование</u>).

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.

# 11.2.1.2 Параметры разметки: Установки

# Параметры разметки: Установки

ойства: Параме	тры разметкі	1	? ×	7
Іараметры ГПХ	Установки	События		
<u>К</u> анал:	ch4	<b>-</b>	3 пиков	
<u>З</u> адержка:	0	минут		
<u>Ш</u> ирина:	15	секунд		
<u> 9</u> ширение:	1			
Порог:	10			
<u>А</u> симметрия:	1.5		Предложить	
Мин. п <u>л</u> ощадь:	0			
Мин. <u>в</u> ысота:	0	mV		
<u>Н</u> аездник:	0			
🔽 Отрицателн	ные пики			
Интерполь	начало/конец	базовой лин		
		000000000000000000000000000000000000000	]	
ОК	Отмена	При <u>м</u> ен	ить Справка	
ло пиков			информация о чи	ісле найденных <b>пиков</b>
ержка			время (в минута)	
10 p		пики.		
рина		пика, вы отличить начальн узких (пе	Параметр " <i>Шири</i> раженной в секу 5 пики от шума и ого приближения ервых) пиков на :	на" примерно соответствует ширин идах. Данный параметр позволяет и дрейфа базовой линии.В качестве и обычно можно принять ширину са хроматограмме.
ирение		хромато изотермі	во сколько раз о; граммы будет бо ического или изо	жидаемая ширина пика в конце ольше, чем в начале (для кратического анализа).
ог		склоне г	порог срабатыва ика	ния детектора пиков на переднем
иметрия		(значени	Отношение пороі іе по умолчанию	га на переднем и заднем склонах 1.3)
нПлощадь		интегрир	минимальная зна оования	ачимая площадь пика для
нВысота		интегрир	минимальная зна оования	ачимая высота пика для
эздник		должен Наездни спуском определ	параметр, показь быть меньше пер к отделяется от с . Значение по ум яется).	ывающий во сколько раз второй пи ового, чтобы считаться "наездником основного пика тангенциальным иолчанию равно нулю (наездник не

	Модуль ГПХ	75
✓Отрицательные пики	переключатель детектирования отрицательны (Выбор этой опции может снизить устойчивость алгор интегрирования)	х пиков. ритма
🗹 Интерпол.начало/конец (	базовой линии	
	включает функцию интерполяции начала и конца базо при проведении разметки для более точного определ начала и конца пиков в случае невысокого отношени шум.	овой линии ения точек я сигнал/
<Предложить>	специальная процедура для подбора параметров интегрирования, обеспечивающих разметку, близкук имеющемуся образцу.	) К
<u>Число пиков</u>		
<u>Задержка</u>		
Ширина		
<u>Уширение</u>		
Порог		
<u>Асимметрия</u>		
<u>Мин.Площадь и Мин.Высота</u>		
<u>Наездник</u>		
Отрицательные пики		
<u>Предложить</u>		
Интерпол.начало/конец базово	<u>й линии</u>	

# 11.2.1.2.1 Число пиков

Информация о числе найденных на хроматограмме пиков

# 11.2.1.2.2 Задержка

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

# 11.2.1.2.3 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.

## 11.2.1.2.4 Уширение

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

## 11.2.1.2.5 Порог

76

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).

## 11.2.1.2.6 Асимметрия

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

#### 11.2.1.2.7 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.

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**.

#### 11.2.1.2.8 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).

#### 11.2.1.2.9 Отрицательные пики

Отрицательные пики

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

#### 11.2.1.2.9.1 Предложить

Процедура устанавливает подходящие значения параметров <u>интегрирования</u> 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.

## 11.2.1.2.10 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\_

## 11.2.1.3 События интегрирования

Свойства: Параметры разметки	?	×	
Параметры ГПХ Установки События			
Число событий: 1			
0.00 Откл. сквозную базовую линию	Добавить		
	<u>И</u> зменить		
	<u>У</u> далить		
Отключить все события			
	1 0		
Ок Отмена Примени	пь Спра	вка	

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 <u>Разметка</u>. 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:		
<u>&lt;Добавить&gt;</u>	появляется окно Событие разметки, в котором выбирается тип события, время его наступления, и, если необходимо, параметр	

#### Справка МультиХром версия1.6

78

	(значение) данного события.
<Изменить>	редактирование выбранного в списке события
<Удалить>	удаление выбранного в списке события
<apply></apply>	переинтегрировать хроматограмму с учетом сделанных изменений без закрытия окна.
<ok></ok>	переразметка хроматограммы и выход из диалогового окна

<u>Число событий</u> <u>Список событий</u> <u>Удаление события</u> <u>Отключить события</u> <u>Добавить событие разметки</u> <u>Список событий интегрирования</u>

# 11.2.1.3.1 Число событий

Информация о числе установленных событий разметки

# 11.2.1.3.2 Список событий

Список установленных событий разметки

#### 11.2.1.3.3 Удаление события

Удаление выбранного события из списка

#### 11.2.1.3.4 Отключить события

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

## 11.2.1.3.5 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)

## 11.2.1.3.6 Список событий интегрирования

#### Список событий интегрирования Разрешить детектирование возобн

and the second s

Отключить детектирование

возобновляет процесс интегрирования.

приостанавливает процесс поиска новых пиков. Если пик начался до данного события, он либо заканчивается досрочно (пики на стадии спуска)

Разрешить отрицательные пики

Отключить отрицательные пики

Разрешить отбраковку пиков Отключить отбраковку пиков

Разрешить долина-к-долине

Отключить долина-к-долине

Включить режим одного пика

Отключить режим одного пика

Установить горизонтальную базу

Установить нормальную базу Установить начало пика

Установить конец пика

Разделить пик

Установить ширину

Установить порог

Установить минимальную высоту

Установить отношение наездника

Установить горизонтальную базу назад

Установить точку базовой линии

либо не принимаются во внимание.

разрешает детектирование отрицательных пиков.

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

отменяет установку «Запретить отбраковку».

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

запрещает разделение пиков по перпендикуляру. Проводит базовую линию по самым низким точкам между пиками.

разрешает разделение пиков по перпендикуляру.

все пики после данного события будут обработаны, как один слившийся пик.

устанавливает нормальный режим разметки, когда каждый минимум между пиками вызывает деление по перпендикуляру или по наклонной.

устанавливает горизонтальную базовую линию, первая точка которой начинается с началом первого пика после данного события.

устанавливает режим, принятый по умолчанию.

начинает новый пик в этой точке. Если пик уже идет, он или отбрасывается (на подъеме) либо досрочно завершается.

завершает пик в этой точке. Не достигшие максимума пики отбрасываются (кроме начатых по событию Установить начало пика), пики на стадии спуска заканчиваются.

завершает текущий и начинает новый пик.

устанавливает новое значение параметра Ширина. При этом линейное возрастание этого параметра во времени прекращается.

устанавливает новое значение параметра Порог.

устанавливает новое значение параметра МинВыс.

устанавливает новое значение параметра Наездник.

устанавливает горизонтальную базовую линию для второго из двух неразделенных пиков. Линия проводится назад от конечной точки второго пика.

принииает 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	иназад 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	

# 11.2.1.4 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.

# 11.2.1.5 Шум базовой линии

Шум базовой линии оценивается по специальному алгоритму.

#### 11.2.1.6 Пик

#### Пик

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

# 11.2.2 Идентификация пиков

Идентификация пиков - это процесс соотнесения пиков и 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;

Интегрирование

<u>Распознавание</u>

Окно идентификации

Критерий идентификации

# 11.2.2.1 Интегрирование

Процедура интегрирования служит для распознавания <u>пиков</u> на хроматографической кривой и для определения положения <u>базовой линии</u>.

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

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:

Идентификация пиков, События интегрирования

# 11.2.2.2 Распознавание

Данное диалоговое окно служит для настройки алгоритма идентификации пиков.

Число компонентов	информация о числе компонентов в <u>таблице</u> 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:
Единицы	выбор <b>единиц удерживания</b> . 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 <u>окна</u> идентификации.

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

#### 11.2.2.3 Окно идентификации

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

#### 11.2.2.4 Критерий идентификации

Показывает, по какому критерию выбрать пик, соответствующий данному компоненту. В любом случае рассматриваются только пики, попадающие в <u>окно идентификации</u> для данного компонента. В случае ГПХ используется только время:

#### Время

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

См. также: Идентификация пиков

# <sup>11.2.3</sup> 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 <u>ММР</u> (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* (<u>Универсальный</u>).

#### 11.2.3.1 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.



- 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 K = 1, Альфа = 0, или же все фракции имеют различные значения этих параметров, создайте Таблицу компонентов вышеописанным способом, а затем внесите необходимые коррективы в столбцы K 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 <u>Градуировка ГПХ</u>, а затем завершить формирование таблицы. В этом случае требуемые значения К и Альфа будут вводится для всех компонентов по умолчанию.

## 11.2.3.2 Окно Градуировка ГПХ

Данное диалоговое окно включает параметры, определяющие вид градуировочной зависимости по текущему компоненту, а также показывает график **градуировочной зависимости** и **градуировочные коэффициенты**.

Здесь можно:

Пинкты меню:

- 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.

Верхняя строка окна Графики содержит дополнительное меню

Скопировать в буфер	заносит 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

Слева в окне:

<u>Метод градуировки</u>	выбор метода построения градуировки
Опорный канал	выбор канала градуировки в том случае, когда каналов в хроматограмме больше одного
Формула	представляет собой аналитическое выражение градуировочной зависимости в общем виде <b>Q = K3·A^3 + K2·A^2 + K1·A + K0</b>
Данные пробы	Применимы только в методе градуировки <u>Универсальный</u> и позволяют вводить значения справочных параметров К и Альфа, характеризующие анализируемый полимер.
Ки	Альфа параметры Марка – Хаувинка

При методе градуировки <u>Монодисперсный</u> - значения стоят по умолчанию и поле не редактируется

При методе градуировки Полидисперсный этот раздел заменяется на

Параметры градуировки позволяет вводить значения Мп и Мw

Ниже поле самого Графика.

#### Справа наверху окна кнопки:

Добавить к градуировке	добавляет к градуировке текущую хроматограмму
Удалить хр-му	Исключает из градуировки выбранную хроматограмму
Использовать	пересчитывает градуировочные коэффициенты для текущего

компонента, исключив выбранную в **Таблице уровней** точку. Повторное нажатие опять учитывает исключенную точку в расчетах;

#### Таблица уровней градуировки

Включает следующие колонки:

Точка	номер <b>уровня градуировки</b> (?) для точки градуировочной зависимости для текущего компонента.					
Mol.Mass	молекулярная масса					
Ки Alfa	параметры Марка – Хаувинка					
Ret.Time	время удерживания					
File (Файл)	имя файла градуировочной хроматограммы, в котором хранятся данные для данной точки.					
Used (Использ.)	индикатор, показывающий, использована ли данная точка при расчетах градуировочных коэффициентах для текущего компонента (да/нет). Исключение/включение точек производится с помощью кнопки Использовать?					

Ниже приведены коэффициенты градуировочной зависимости К0, К1, К2 и К3

.L=Lg(M)

Значение среднего квадратичного отклонения **СКО** (*RMS*), позволяющее оценить результаты аппроксимации.

Градуировка ГПХ							?	$\times$
Скопировать в <u>б</u> уфер <u>П</u> ечать П <u>р</u> осмотр								
Метод градуировки: Универсальный	Доб	бавить к гра	дуировке		Удалить хр	)-MY	Испол	ьз
	Point	Mol.Mass	К	Alpha	RetTime	File	U	sed
Опорный канал: ch4 Формула: Y=K1:X+K0 Данные пробы: К: 1 Альфа: 0	1/2 2/1	40900.0 70300.0	1.0000 1.0000	0.000	1397.734 1344.637	M7251 M7251	1639.CHW 1726.CHW	Да Да
	k0=  k1=  k2=  k3=	10.804 -0.00443024 0 0		L:	0.0044302 CKO = 0	24 <sup>.</sup> T + 1 .000 %	0.804	
4.55 T(cest) E+02			ОК		Отмена		<u>С</u> правн	ka

#### 11.2.3.3 ГПХ Получение градуировочной зависимости

Перейдите в окно Градуировка ГПХ, нажав кнопку График.

Градуировка ГПХ						? ×
Скопировать в буфер Печать Просмотр						
Метод градуировки: Монодисперсный	Добавить к гра	дуировке		Удалить хр	o-my	<u>И</u> спольз
	Точка Масса	К	Альфа	Время	Файл	Исп.
Опорный к <u>а</u> нал: <a href="https://www.chi.englishington.com">h1</a>						
	k0= 0 k1= 0 k2= 0 k3= 0			L : CKO = 0	= .000 %	
		ОК		Отмена		<u>С</u> правка

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.

#### 11.2.3.3.1 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 Параметры фракций градуировочного образца, указанные в соответствующих Альфа 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** = *k*1•*X* + *k*0). Результаты расчета представляются в окне в следующем виде:

строится график градуировочной зависимости, на котором знаком О отмечаются точки, использованные при его построении;

в полях к0...к3 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	Доба	вить к граду	јировке		Удалить хр	)-MY	<u>И</u> спольз
	Точка	Масса	К	Альфа	Время	Файл	Исп.
Опорный к <u>а</u> нал:	2/1 2/2 2/3	226000.0 64000.0 17500.0			1056.941 1233.588 1440.399	Q829111 Q829111 Q829111	7.CHW Да 7.CHW Да 7.CHW Да 7.CHW Да
Данные пробы: К: 1 Альфа: 0							
5.63 F	k0= 8 k1= -0	.39845 ).00289258	 	L =	- 0.0028925	8 <sup>.</sup> T + 8.39	845
	k2= 0 k3= 0	1			CKO = 0	.613 %	
3.97 T(cex) 11 12 13 14 E+02		01	ĸ		Отмена		<u>С</u> правка

- 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**.

#### 11.2.3.3.2 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 **Мn** 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.

#### 11.2.3.3.3 Метод Универсальный

После выбора в списочном поле **Метод** значения **Универсальный** поля **К** 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 К и К и Альфа.
- Если Таблица компонентов содержит только одну строку, выполните следующее.
- Введите в поля К 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**.

# 11.2.3.4 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 <u>Особенности отчетов для ГПХ</u>.).

- Выберите команду Файл/Сохранить/ Метод и запишите файл метода под новым именем.
- Закройте хроматограмму, сохранив внесенные изменения.

#### 11.2.3.5 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 <u>Вывод на принтер</u>)
- 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.

#### 11.2.3.6 Импорт градуировки

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

См. также: Прочитать из метода

#### 11.2.3.7 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.

# 11.2.3.8 Прочитать из метода

Читает результаты градуировки из текущего метода в текущую хроматограмму. Данная опция предназначена для переноса градуировки из метода в хроматограмму.

# <sup>11.3</sup> Получение хроматограмм с использованием методов ГПХ

# 11.3.1 Определение ММР

Для определения ММР исследуемого образца выполните следующее.

- Откройте ранее созданный <u>метод ГПХ</u>, 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 <u>Разметка хроматограммы ГПХ</u>).
- Если при градуировке был использован метод Универсальный, введите значения параметров К и Альфа для исследуемого образца, выполнив следующее.
- Откройте окно <u>Градуировка ГПХ</u>, 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 <u>Таблицы компонентов</u>, при ее закрытии также необходимо нажать кнопку ОК.

Получите <u>отчет</u> с параметрами MMP, рассчитанными по хроматограмме, в соответствии со стандартной процедурой получения

# <sup>11.3.2</sup> 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 <u>Таблицу компонентов</u> 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**.



- Оцените полученный результат и произведите, если требуется, корректировку, как это делалось при первоначальном получении градуировочной зависимости (см. раздел <u>Метод Монодисперсный</u>).
- Закройте окно Градуировка ГПХ и Таблицу компонентов, нажав в обоих случаях кнопку ОК.
- Сохраните новую градуировку в файле метода, как это описано в разделе <u>Завершение</u> <u>арадуировки и запись метода</u>.

#### 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. <u>предыдущий раздел</u>).
- Откройте <u>Таблицу компонентов</u>. 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.

<u>ک</u>	Все хроматограммы должны быть получены с использованием одного и того же
	метода!

#### Справка МультиХром версия1.6

- 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 <u>Создание таблицы компонентов</u>.
  - Если данные этой хроматограммы не были ранее использованы для построения градуировочной зависимости, выполните процедуры, описанные в разделе <u>Получение</u> <u>градуировочной зависимости</u>, для метода Монодисперсный или Универсальный.

<u>ال</u>	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 <u>Таблицу компонентов</u> 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 низ 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 <u>Memod Monoducnepchый</u>) 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 хр-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**.

# 11.4 Особенности отчетов для ГПХ

• Откройте окно Опции отчета, нажав кнопку 💹 (общую информацию о настройке опций отчета см. <u>Отчет</u>).

Опции отчета	? X
Bassan	Kuna una anna
Разделы отчета	Куда направить отчет
🔽 Общие	🔽 Экран 🗌 Принтер 🗌 🛨 айл 🛛 Просмотр
🗖 Проба	Определение фракций
🔲 Колонка	Тяжелая фракция: 0 %
🗖 Элюент	Легкая фракция: 0 %
🔽 График	Срез-таблица для ГПХ
🔽 Результаты расчета	Срез по времени: 0.1 мин
🗌 Комментарий	
_ Другие разделы отчета	
Г Жирналы GLP	Шаблон: RUSSEC.RTT 💌
П Измерение	Разделител Пробел 💌 Табулято 8
🔽 Разметка	Параметры печати в файл
🔽 Срез-таблица	Каталог: <u>Обзор</u> Имя фа <u>й</u> ла:
🔲 Таблица компонентов	D:\mlcw15r\REPORTS\
🔽 Рез-ты градуировки	Режим: © Переписать С Дополнить
🗖 Таблица канала	Кодировка © <u>W</u> indows C <u>D</u> OS
🗖 Спектр. отношения	Прогр <u>а</u> мма
Страница	Отует Принять <u>О</u> тмена <u>С</u> правка

- 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 <u>ММР</u>, 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

#### Справка МультиХром версия1.6

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:



Для образца с К = 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) 21262.7 MN, тяжелая фракция: MW, тяжелая фракция: 22441.4 MN, легкая фракция: 263.626 286.846 MW, легкая фракция:

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: Омин Конец базовой линии: 20мин Начало пиков: 10мин Конец пиков: 20мин Начало области анализа: 10мин Конец области анализа: 17.2мин

Модуль	ГПХ	95
--------	-----	----

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); Мw – значение средневзвешенной молекулярной массы для интервала; М% – % от общей массы полимера, приходящийся на интервал; М%, 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.

ТАБЛИІ	ЦА ДАННЫХ	ПО СРЕЗАМ				
${\rm N}^{{\rm g}}$	Время	Mw	M%	М%,сумма	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**.



# Индекс

Серийный номер колонки 39 Κ 90 M% 93 М%,сумма 93 93 Mw N% 93 N%,сумма 93 RTT файлы 59 авт. выдача отчета 44 авт. закрытие хр-мы 44 Автомасштабирование 44 автоматическое закрытие хр-мы 44 Альфа 90 Асимметрия 76 Базовая линия 80 Блокировать систему 66 Введение 9 Вид 16 Вид: метки пиков 20 Вид: цвета 21 Внутренний диаметр колонки 39 Время 93 Bcë 23 Все по вертикали 23 Все по горизонтали 22 Выбор 21 Выйти 14 гель-проникающая хроматография 68 Главное меню 13 12 Главное окно программы Глобальные настройки 62 ГПХ 68 ГПХ параметры разметки 71 68 ГПХ Выполнение расчетов ГПХ Добавление градуировочной хроматограммы 90 ГПХ Завершение градуировки и запись метода 82 ГПХ Задание параметров разметки 71 ГПХ Методы градуировки 68 ГПХ окно Параметры разметки 71 82 ГПХ Печать результатов градуировки

82 ГПХ Получение градуировочной зависимости ГПХ Построение базовой линии 71 ГПХ Создание таблицы компонентов 82 ГПХ Удаление градуировочной хроматограммы 90 Градуировать 23 Градуировочная точка 36 84 Градуировочный график 93 Границы интервалов для расчета ММР Давление на входе колонки 41 Дата и время записи 36 Дата и время запуска 36 Дата/время получения пробы 38 Демонстрационный режим 10 Диалоговые окна 26 Добавить событие разметки 78 Единицы хроматограмы 64 Если метод изменен 63 Если метод на диске более свежий 64 Журнал метода 41 42 Журнал хроматограммы Заголовок отчета 57 22 Загрузить основные 75 Задержка Закрыть 14 Закрыть пакетный пересчет 49, 51 Записать хроматограмму 32 Запуск хроматограммы 8 Защита 65 Зернение сорбента 40 80 Идентификация пиков Изменить вид хроматограммы 50 Изменить паспорт 50 Импорт градуировки 89 33 Импортировать хроматограмму Имя текущего пользователя 36 имя файла метода 36 Имя файла хроматограммы 36 Интегрирование 81 Интерпол.начало/конец базовой линии 77 Интерполяция 77 Использовать метод из файла для пересчета 47 Как выполнить... 66 Как напечатать отчет 66 Как открыть пакет хроматограмм 51 67 Как провести пакетный пересчет

Index

Каталог 44 Клавиатура и мышь 8, 28 Кнопка Отчет 61 Количество образца 38 Колонка 39 Комментарии 41 Компоненты системы 12 Конец базовой линии 77.93 Конец области анализа 93 Конец пиков 93 Контекстные меню 26 Конфигурация принтера 59 Коротко об АО "АМПЕРСЕНД" 9 Критерий идентификации 82 Куда направить отчет 57 Курсор 31 Лист Обработка 43 35 Лист Общее Маркеры канала 20 Меню Буфер 14 Меню Вид 16 Меню Метод 23 Меню настройка 24 Меню Обработка 23 Меню Окно 24 Меню Пик 15 Меню таблица 14 Меню файл 13 Меню Файл: Открыть 13 Меню файл: сохранить 14 Метка пика 19 Метки пика: флажки 20 Метод 33.34 Метод Монодисперсный 82 Метод определение 34 Метод Полидисперсный 82 Метод Универсальный 82 Метод: открыть 45 Метод: сохранить 45 Мин.Высота 76 Мин.Площадь 76 Минимальная высота 76 Минимальная площадь 76 MMP 68 Многоканальные хроматограммы-Интегрирование

модуль ГПХ 68 молекулярно-массовое распределение полимеров 68 Монодисперсный метод 82 МультиХром 10 Наездник 76 Название детектора 36 Настройка метода 42 65 Настройки: GLP Настройки: Открытие хроматограммы 64 Настройки: Сохранение хроматограммы 64 начало 77 Начало базовой линии 93 Начало области анализа 93 93 Начало пиков Не соединять точки 20 Новый комментарий 41 Номер текущего анализа 37 Номер текущей хроматограммы 37 область анализа ГПХ 71 Обновить файл метода после пересчета 48 Обработка 43 Образец 22 Общая информация 9 Общее 35 Общее описание пробы 38 Объединение хроматограмм 90 Объединить 50 Объем пробы в микролитрах 38 Объемная скорость подвижной фазы 41 Окно «Пакетный пересчет» 46 окно Градуировка ГПХ 90 81 Окно идентификации окно Компонент 84 Окно хроматограммы. 12 Операции с файлами методов 44 Описание пробы 37 Описание сорбента 40 Определение ММР 90 Оси хроматограммы 17 Оси: метки 18 Оси: флажки 18 Ось Ү 18 Ось Х 18 Отключить события 78 48 Открыть все файлы

97

47 Открыть пример Открыть хроматограмму 31 Отрицательные пики 76 Отчет 55 Отчет: параметры печати в файл 58 Пакет хроматограмм: общее 45 Пакет хроматограмм: сохранение 52 Пакетный пересчет: общие установки 47 Пакетный пересчет: открыть 46 Пакетный пересчет: отчет 54 Пакетный пересчет: Редактор пакета хроматограм 52 Пакетный пересчет: режим пересчета 48 Пакетный пересчет: таблица пакета хроматограмм 52 Пакеты хроматограмм: определение 45 Пакеты хроматограмм: работа с файлами 51 Пакеты хроматограмм: создание 51 параметры ММР 68 Параметры предколонки 40 Параметры разметки 74 Параметры разметки: Установки 74 Пароль 66 Паспорт 34 Первая градуировка 82 Перезаписывать файл данных 63 Перезапуск метода 44 Переразметить 49 Пересчет 50 Пересчитать градуировочные 48 Пересчитать обычные 48 Печатать через буфер 65 Печать хроматограммы 14, 33 Пик 80 Пиктографическое меню 25 По умолчанию-цвета 22 Подсказка 25 Поле Градуировочная точка 36 Полидисперсный метод 82 Помощь 27 Порог 76 Последний пакет 51 Предложить 76 Принять 59 программа до-после 44 Продолжительность хроматограммы 36

59 Пролистать Просмотр 26, 61 процедура определения ММР 68 Прочитать из метода 90 Работа с файлами хроматограмм 31 Разведение исходного образца 38 Разделитель 61 Разделы отчета 57 Разметка 71 Разметка страницы 58 Разметка хроматограммы ГПХ 71 Распознавание 81 Редактировать вид 50 49 Редактировать параметры разметки Редактировать паспорт 50 Редактировать таблицу 47 Редактор пакета: меню Редактор 54 Редактор пакета: меню Файл 53 Редактор пиков 29 Режим GLP 64 20 Рисовать каждую точку Ручная разметка 29 Система меню 12 События интегрирования 77 Создание методов ГПХ 70 Состав подвижной фазы 41 список градуировочных точек 90 Список событий 78 Список событий интегрирования 78 Справка 25.27 Срез по времени 93 Температура термостата 41 Типы файлов 27 Только пересчитать 50 Требования к компьютеру 10 Удаление программы 11 Удаление события 78 Удалить 14 Универсальный метод 82 Уровень доступа 66 Установка и удаление программы 11 Установка программы 11 Установки 74 Установки метода 42 Учиться 76 Уширение 75

флажок Гель-проникающая хроматография 68 флажок ГПХ 70 Хроматограмма 29 Хроматограмма: градуировочная 29 Хроматограмма: обычная 29 Хроматограмма-определение 29 Хроматограммы: как копировать перемещать файлы 32 Цвет элемента 22 Цвета 22 Число пиков 75 Число событий 78 Шаблоны и разделители 59 Ширина 75 Ширина линии 22 широкое ММР 68 Шрифты 24 Шум базовой линии 80 Экспорт градуировки 89 Экспорт хроматограммы 32 Экспорт хроматограммы: текстовый формат 33 22 Элементы окна Элюент 40

