

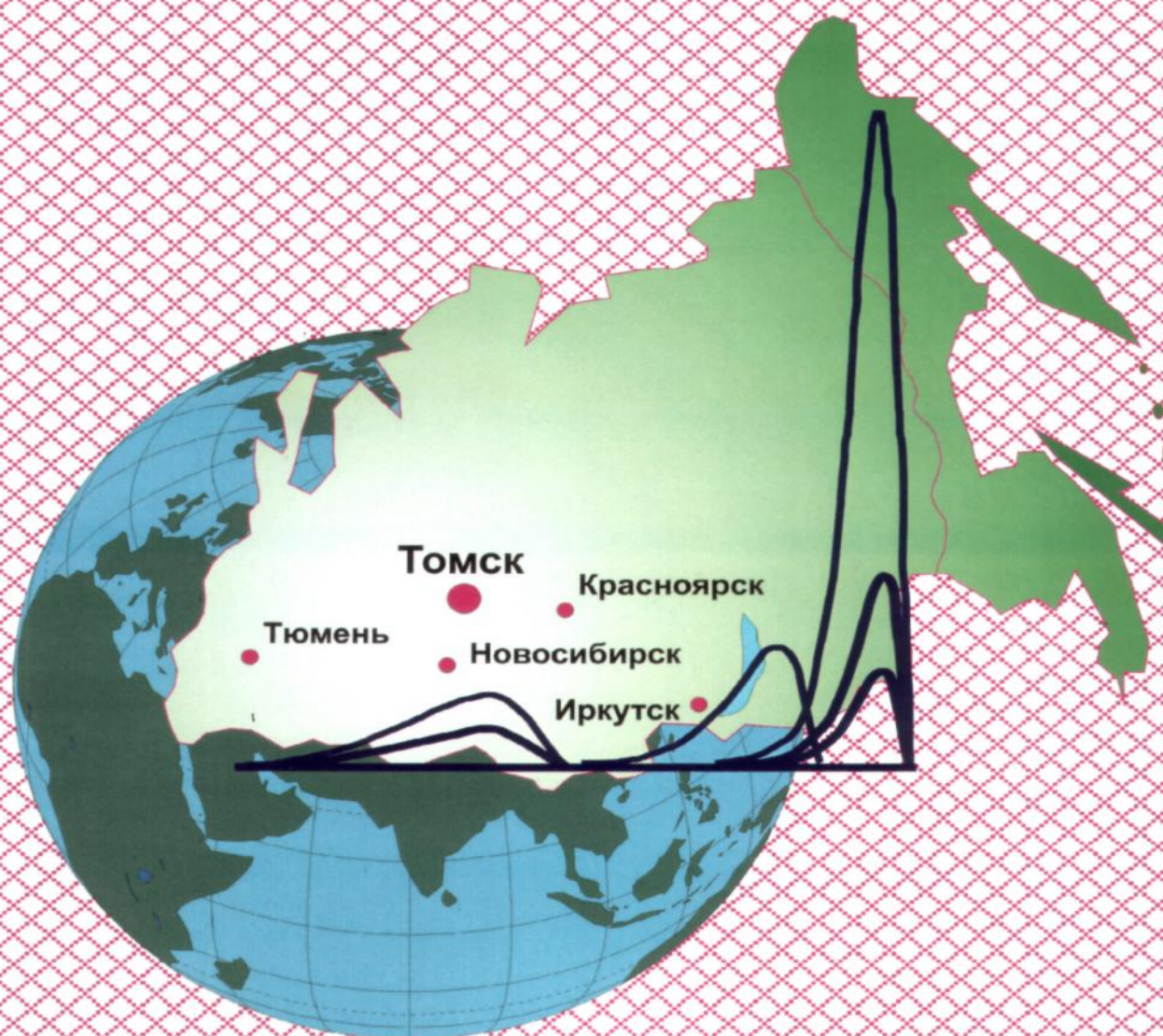
# МАТЕРИАЛЫ



VIII НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ



## «АНАЛИТИКА СИБИРИ И ДАЛЬНЕГО ВОСТОКА»



ТОМСК, 13–18 Октября 2008

## Компьютерный тренажер "ЖИДКОСТНЫЙ ХРОМАТОГРАФ"

Г.И.Барам<sup>1</sup>, И.Н.Азарова<sup>1</sup>, А.П.Петков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ЗАО Институт хроматографии "ЭкоНова", 630090, Новосибирск, ул. Николаева, 8  
<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет

Важнейшей специфической проблемой аналитической химии является подготовка специалистов в области инструментального анализа. В полной мере это справедливо для ВЭЖХ.

Современный жидкостный хроматограф представляет собой сложное устройство, правильное функционирование которого определяет правильность результатов анализа. Обучение работе на этом дорогостоящем приборе требует много времени и расходуемых материалов. Очевидно, что процесс обучения можно существенно ускорить и удешевить с помощью компьютерных тренажеров, достаточно полно эмулирующих работу всех узлов хроматографа с учетом их метрологических характеристик. Такие известные компьютерные программы как DryLab<sup>®</sup>, ChromSword<sup>®</sup> и др. для этих целей не пригодны, т.к. эмулируют только сам хроматографический процесс.

Нами разработаны алгоритмы, необходимые для создания компьютерного тренажера, эмулирующего работу хроматографа "Милихром А-02" (ЗАО Институт хроматографии "ЭкоНова", г. Новосибирск) с колонкой 2x75 мм (ProntoSIL-120-5-C18 AQ) и элюентами А (0.2 М LiClO<sub>4</sub> и 0.005 М HClO<sub>4</sub> в воде) и Б (ацетонитрил). Алгоритмы позволяют генерировать хроматограммы 50 известных веществ и их смесей при фотометрическом детектировании (от 1 до 8 длин волн в диапазоне 190-360 нм) в изократическом и градиентном (до 20 кусочно-линейный участков) режимах во всех диапазонах скорости потока и температуры колонки.

Генерация хроматограмм осуществляется с учетом типичных ошибок оператора и погрешностей самого анализа (погрешность приготовления раствора образца, шум и линейность детектора, концентрационная линейность, "память" инжектора, негерметичность соединений и т.д.).

В тренажер включены анимированная в режиме реального времени схема работы всех узлов хроматографа, база данных "ВЭЖХ-УФ" на 500 веществ и программа предсказания удерживания и УФ спектров пептидов.