

## Компьютерный тренажер "Жидкостный хроматограф"

Барам Г.И.

ЗАО Институт хроматографии "Эконова", г. Новосибирск, [baram@econova.nsk.su](mailto:baram@econova.nsk.su)

Важнейшей специфической проблемой аналитической химии является подготовка специалистов в области инструментального анализа. Это в полной мере справедливо для высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Освоение этого метода требует не только знания его теоретических основ, но и получения практических навыков выбора условий анализа, умения обрабатывать первичные данные, оценивать погрешность анализа и формировать заключительный отчет.

Современный жидкостный хроматограф представляет собой сложное устройство, правильное функционирование которого определяет правильность результатов анализа. Обучение работе на этом дорогостоящем приборе занимает много времени и требует значительных затрат на приобретение расходных материалов и проведение ремонтно-профилактического обслуживания. Данные обстоятельства практически исключают возможность индивидуального обучения студентов химических специальностей и предполагают их занятия в группах по 5-10 человек.

Очевидно, что процесс обучения можно существенно ускорить, удешевить и сделать индивидуальным с помощью компьютерного тренажера, достаточно полно эмулирующего работу важнейших узлов хроматографа с учетом их метрологических характеристик. По нашим данным такого полноценного коммерчески доступного тренажера пока нет. Здесь следует отметить, что хорошо известные компьютерные программы DryLab<sup>®</sup> (Molnár-Institute for applied chromatography, Берлин, Германия), ChromSword<sup>®</sup> (ChromSword Group, Рига, Латвия), ACD/LC and GC Simulator (Advanced Chemistry Development, Inc., Торонто, Канада) и др. для этой цели не вполне пригодны, т.к. эмулируют только сам хромато-графический процесс, а не работу узлов хроматографа.

Нами разработаны алгоритмы, необходимые для создания тренажера, эмулирующего работу хроматографа "Милихром А-02" (ЗАО Институт хроматографии "ЭкоНова", Новосибирск), и создана соответствующая компьютерная программа. "Компьютерный" хроматограф позволяет хроматографировать смеси веществ, составляемые учащимися из 30 соединений. Эмулируются разделения на колонке 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) в изократическом и градиентном режимах во всех диапазонах скорости потока и температуры колонки при фотометрическом детектировании (от 1 до 8 длин волн в диапазоне 200-360 нм). Генерация хроматограмм осуществляется с учетом типичных ошибок оператора и типичных неисправностей хроматографа, погрешностей самого анализа.

Тренажер включает в себя программу управления хроматографом ("АльфаХром") и программу обработки хроматограмм "МультиХром СПЕКТР" (ЗАО "Амперсенд", Москва). В него включены также анимированная схема работы узлов хроматографа, база данных "ВЭЖХ-УФ" на 500 веществ, программа предсказания удерживания и УФ-спектров пептидов, необходимые инструкции и руководства, набор типовых задач.

Нами показано, что в "классе" из 10 тренажеров можно эффективно обучать теории и практике ВЭЖХ группу из 10 студентов в рамках курса, продолжительностью 20 часов.