



Москва,  
14-18 апреля, 2008

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Научный совет по адсорбции и хроматографии  
Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н.Фрумкина

## **ХРОМАТОГРАФИЯ И ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ**

*(К 100-летию со дня рождения профессора А.В. Киселева)*

*Всероссийский симпозиум*

# **ТЕЗИСЫ**

## 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", г. Новосибирск

<sup>2</sup>) Новосибирский государственный университет

Современный жидкостный хроматограф представляет собой сложное устройство, правильное функционирование которого определяет правильность результатов анализа. Обучение работе на этом дорогостоящем при-боре 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. Известные компьютерные программы DryLab<sup>®</sup>, ChromSword<sup>®</sup> и др. для этих це-лей не пригодны, т.к. эмулируют только сам хроматографический процесс.

Нами разработаны алгоритмы, необходимые для создания компью-терного тренажера, эмулирующего работу хроматографа "Миличром А-02" с колонкой 2x75 мм (ProntoSIL-120-5-C18 AQ) и элюентами А (0.2 М LiClO<sub>4</sub>-0.005 М HClO<sub>4</sub>) и Б (ацетонитрил). Алгоритмы позволяют генерировать хроматограммы 50 известных веществ и их смесей при фотометрической детекции (от 1 до 8 длин волн в диапазоне 190-360 нм) в изократическом и градиентном (до 20 кусочно-линейный участков) режимах во всех диапазонах скоростей 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" и программа предсказания удерживания и УФ спектров пептидов.