

# CHROMuLAN

## základní instrukce

### 1. Úvod

---

Jedná se o volně šiřitelný software pro řízení sestav přístrojů a následné vyhodnocování výsledků. Projekt je inicializován a dotován firmou PiKRON, jejíž přístroje podporují komunikaci a řízení přes komunikační protokol  $\mu$ LAN.

V současné době je systém vyvíjen v prostředí DELPHI pro WINDOWS NT nebo WINDOWS 2000 a předpokládá se rozšíření pro LINUX.

### 2. Instalace

---

Program nainstalujeme spuštěním instalačního programu **SetupChromulan**. Dále se řídíme pokyny instalačního software.

Novou odzkoušenou verzi je možno získat na adrese [www.pikron.com](http://www.pikron.com). Vývojová verze je k dispozici na [www.jindrich.com](http://www.jindrich.com).

#### 2.1 Typy datových souborů

Program CHROMuLAN pracuje s těmito základními typy souborů

- .ulf** Datový soubor, obsahuje data analýzy, metodu a další informace o analýze.
- .ulm** Soubor metody. Obsahuje popis píků, parametry pro hledání píků a nulové linie. Je součástí datového souboru (.ulf), ale je možno jej samostatně uložit a načíst do jiné analýzy.
- .ult** Template. Tento soubor obsahuje šablonu pro určitý typ analýzy. Jeho součástí je popis analýzy, metoda a popis přístrojů.
- .uls** Seqence. Tento soubor se používá u sestav s autosamplerem.

Program umí pracovat i s dalšími typy souborů: (asc, dat, txt). Tyto slouží pro přenos dat do jiných systémů.

#### 2.2 Nastavení

##### 2.2.1 Komunikace

Software komunikuje s přístroji po seriové lince RS485, komunikačním protokolem  $\mu$ LAN. Hardwarově může být seriová linka realizována třemi způsoby:

1. Převodníkem RS232 na RS485. Jedná se o speciální konektor, který se připojí na standardní linku RS232. Tento konektor obsahuje elektroniku převodníku. U tohoto převodníku je omezen počet připojených přístrojů a délka kabelů.
2. ISA karta RS485. Tato karta se montuje do ISA slotu počítače. Nelze ji použít pro nové počítače, které nemají ISA slot.

3. PCI karta RS485. Tato karta se montuje do PCI slotu počítače.

Ve všech třech případech je komunikace  $\mu$ LAN softwarově obsloužena speciálním ovladačem. Ovladač pracuje v operačních systémech Linux a Windows NT, 98 a 2000. Pro správnou funkci programu Chromulan je nutno mít tento ovladač správně nainstalován. Popis instalace najdete v manuálu k ovladači.

Chromulan umožňuje nastavit parametry komunikace. Ty se nastavují ve zvláštním dialogu vyvolaném tlačítkami **UL\_DRV setup** v dialogu setup (**Setup**  $\Rightarrow$  **Options**). Toto nastavení má význam pouze pro Win NT. U Win 98 a 2000 je nastavení součástí Windows.

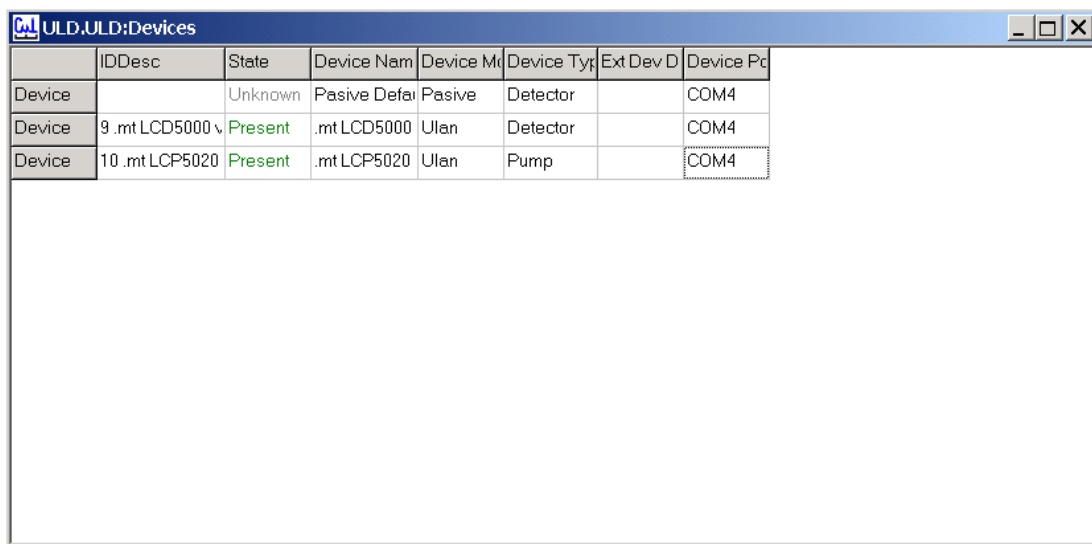
Standardní nastavení komunikační rychlosti je BaudRate=19200. Standardní nastavení adresy a portu je následující:

- Převodník RS232/RS485 připojený na COM1. Port Adres=0x3F8, IRQ=4.
- Převodník RS232/RS485 připojený na COM2. Port Adres=0x2F8, IRQ=3.
- ISA karta RS485. Port Adres=0x2E8, IRQ=5.
- PCI karta RS485. Na nastavení nezáleží.

Přístroje se k počítači připojují seriově, každý přístroj má dva konektory pro připojení komunikace. Komunikační kabel z počítače je zapojen do jednoho konektoru prvního přístroje. Z druhého konektoru prvního přístroje pokračuje další kabel k druhému přístroji a z druhého přístroje další kabel k třetímu přístroji a tak dále až k poslednímu přístroji, u kterého zůstane jeden konektor volný.

Každý přístroj má nastavenou komunikační adresu. Do sítě  $\mu$ LAN nesmí být zapojeny přístroje se stejnou adresou. Nastavení adresy přístroje je popsáno v manuálu k danému přístroji.

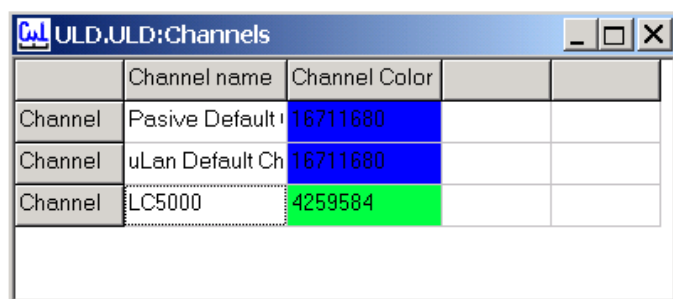
Komunikaci s přístroji lze zkontrolovat příkazem **Setup**  $\Rightarrow$  **Devices**  $\Rightarrow$  **Autodetect** viz obr. 1. Po zadání tohoto příkazu program vyhledá všechny připojené přístroje a zobrazí je. Zobrazení seznamu nalezených přístrojů lze vyvolat kdykoli později příkazem **Setup**  $\Rightarrow$  **Devices**  $\Rightarrow$  **Browse** .



	IDDesc	State	Device Nam	Device Mt	Device Typ	Ext Dev D	Device Pc
Device		Unknown	Pasive Defai	Pasive	Detector		COM4
Device	9 .mt LCD5000	Present	.mt LCD5000	Ulan	Detector		COM4
Device	10 .mt LCP5020	Present	.mt LCP5020	Ulan	Pump		COM4

Obr. 1. List připojených přístrojů

### 2.2.2 Kanály

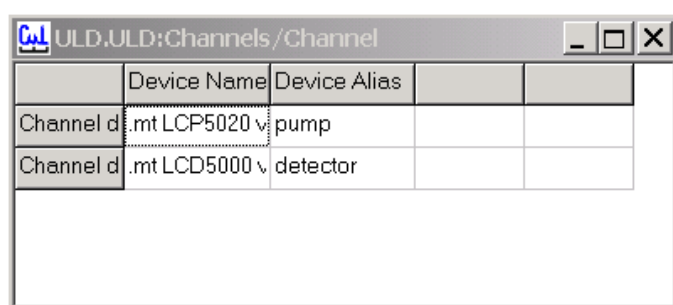


	Channel name	Channel Color		
Channel	Pasive Default	16711680		
Channel	uLan Default Ch	16711680		
Channel	LC5000	4259564		

Obr. 2. Kanály

Program umožňuje obsluhovat současně více sestav přístrojů. Pokud máme připojeno více sestav, je nutno pro každou sestavu vytvořit kanál. Seznam všech kanálů vyvoláme příkazem **Setup** ⇒ **Channels** viz obr. 2. Přidání nového kanálu provedeme klávesou **Insert**.

Pokud označíme některý kanál a pravým tlačítkem myši vyvoláme funkci **Channel** ⇒ **Browse**, otevřeme seznam přístrojů v daném kanálu, viz obr. 3. Přístroje můžeme přidávat a ubírat klávesami **Insert** a **Delete**. Je nutno nastavit první dva sloupce. První je jméno přístroje, které se vybírá ze seznamu přístrojů (**Setup** ⇒ **Devices** ⇒ **Browse**). Druhý je alias, přes který se na daný přístroj odkazuje program. Pro přenositelnost programů mezi jednotlivými kanály je nutno mít pro stejný přístroj stejný alias ve všech kanálech (např. pump, detector apod.).



	Device Name	Device Alias		
Channel d	.mt LCP5020 v	pump		
Channel d	.mt LCD5000 v	detector		

Obr. 3. Nastavení přístrojů v kanálu

Vyběr kanálu, který se pro danou analýzu použije provedeme v dialogu **Setup** v sekci *Instrument*. Výhodné je pro každý kanál vytvořit jiný template. Pak se kanál volí tím, jaký při zakládání nové analýzy zvolíme template (5).

### 3. Ovládací prvky

#### 3.1 Menu

K dispozici je základní pop-up menu:

**File** - práce se soubory  
**Application** - výběr aplikace  
**Edit** - kopírování a vkládání

**Setup** - nastavení  
**Window** - výběr okna  
**Help** - nápověda

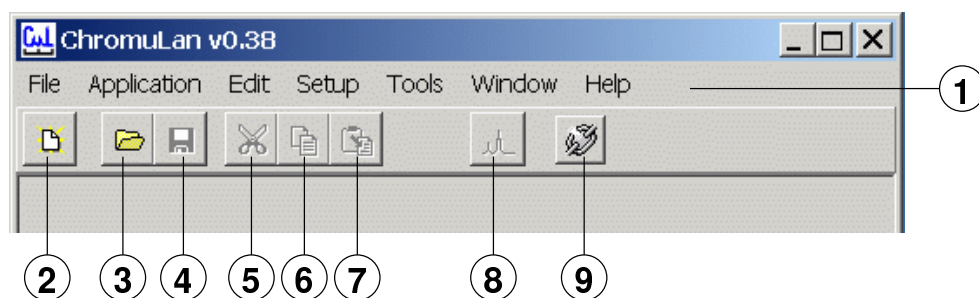
Dále je k dispozici menu chromatogramu. Vyvoláme je pravým tlačítkem v okně chromatogramu nebo buttonem viz obr. 4

**Setup** - nastavení parametrů analýzy  
**Method** - submenu metody  
**Baseline** - submenu nulové linie  
**Peaks** - submenu píků  
**Math** - submenu přepočtů, využívá se při překrývání analýz, viz 8

**View** - nastavení viditelných položek (osy, popis píků, nulová linie a jiné)  
**Scale** - základní měřítko  
**Copy to clipboard** - kopírování grafu do jiných aplikací  
**Print** - tisk

### 3.2 Buttony

Základní funkce z menu lze vyvolat přímo buttony pod hlavním menu, viz obr. 4.



- |                           |                       |
|---------------------------|-----------------------|
| 1. Hlavní menu            | 6. Kopírování         |
| 2. Nový chromatogram      | 7. Vložení            |
| 3. Otevření chromatogramu | 8. Menu chromatogramu |
| 4. Uložení chromatogramu  | 9. Nastavení          |
| 5. Vyřezání               |                       |

Obr. 4. Buttony

Další buttony jsou umístěny ve spodní části okna analýzy. Jejich význam je popsán na obr. 5.

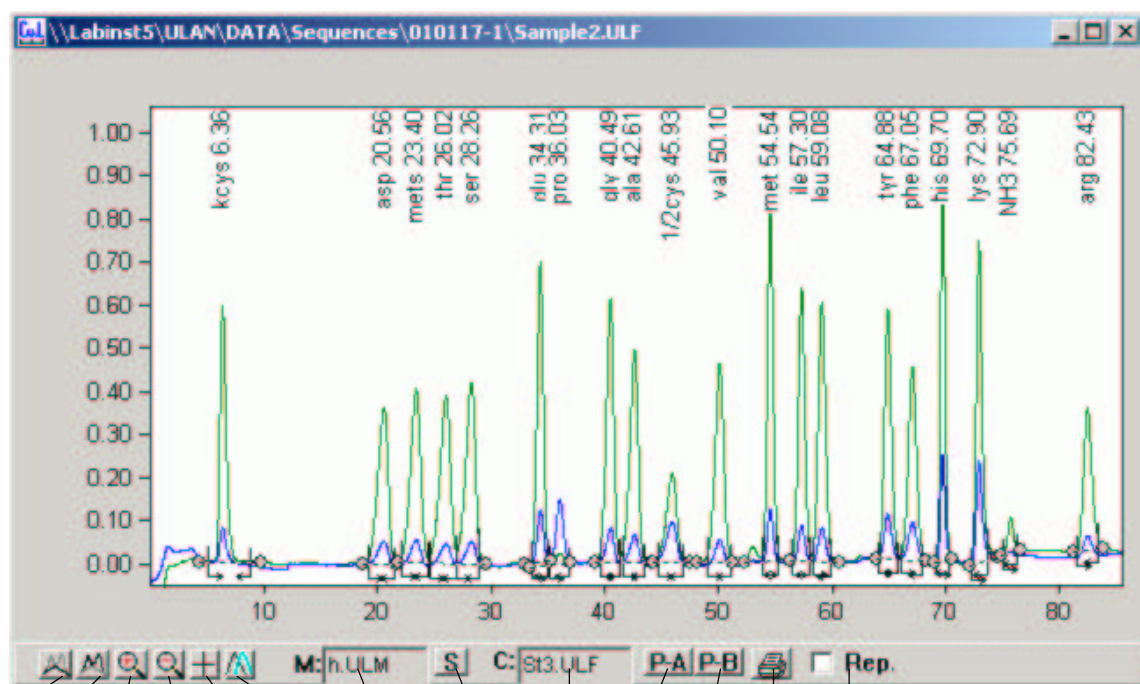
Stisknutím buttonu, můžeme funkci použít jednou, opakované použití se zapne stisknutím buttonu zároveň s klávesou SHIFT.

### 3.3 Výběr

Zobrazené píky a nulovou linii můžeme vybírat jednotlivě kliknutím myši. Pokud chceme vybrat víc píků (úseků nulové linie) označujeme se současným stiskem klávesy CONTROL. Celý úsek můžeme vybrat tak, že klikneme na první a se stisknutou klávesou SHIFT na poslední element.

### 3.4 Editace píků

Parametry píků můžeme editovat přímo v grafu nebo v tabulce píků. V grafu můžeme editovat také nulovou linii a integrační značky píků, viz obr. 6.



- |   |   |
|---|---|
| 1. Ruční vytváření nulové linie (3.4)   | 9. Aktuální standard, kliknutím možno změnit ( <b>Method</b> ⇒ <b>Load Calibration File</b> ) |
| 2. Ruční vytváření píků (3.4)   | 10. Autodetekce píků ( <b>Peak</b> ⇒ <b>Autodetect</b> )                                      |
| 3. Nastavení výřezu   | 11. Zobrazení tabulky píků ( <b>Peak</b> ⇒ <b>Browse</b> )                                    |
| 4. Vrácení předchozího výřezu   | 12. Tisk reportu ( <b>Print</b> ⇒ <b>Report</b> )   |
| 5. Režim zobrazení pozice kursoru   | 13. Zapínání zobrazení reportu  |
| 6. Porovnávání analýz viz 8   |   |
| 7. Aktuální metoda, kliknutím možno změnit ( <b>Method</b> ⇒ <b>Load From</b> ) |   |
| 8. Uložení metody ( <b>Method</b> ⇒ <b>Save To</b> )                            |   |

Obr. 5. Okno chromatogramu

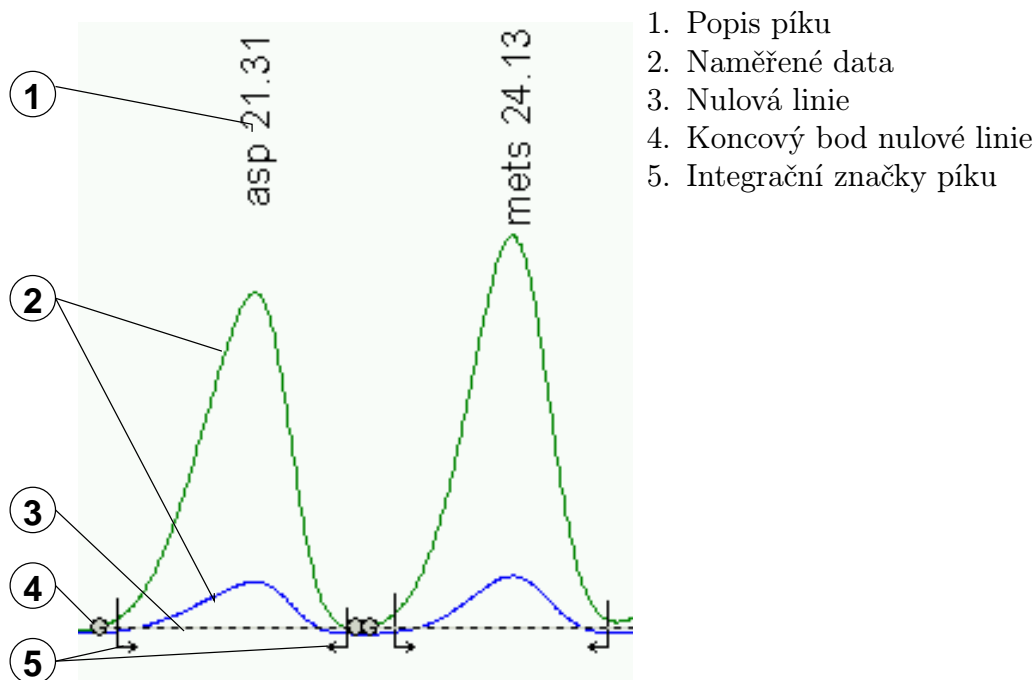
Parametry píku v grafu editujeme tak, že označíme pík kliknutím na popis a dalším kliknutím na popis vyvoláme dialog pro editaci parametrů píku. Polohu koncových bodů nulové linie a integračních značek můžeme měnit přímo myší.

Přidávání dalších píků a úseků nulové linie provádíme pomocí tlačítek ve spodní části okna chromatogramu (3.2).

Tabulku píků vyvoláme funkcí **Peak** ⇒ **Browse**, viz obr. 7

## 4. Program

Program Chromulan umožňuje mimo vyhodnocení analýz i řízení přístrojů. Řízení je realizováno pomocí programu. Program je součástí každého souboru analýzy. Při založení nové analýzy se program přenese ze zvoleného template. Před spuštěním analýzy je možno jej modifikovat.



Obr. 6. Editace píku

	X [min]	Area	Name	Amount	Usr Peak Coef	Window [min]	Response	Data name
Peak	6.36	22.11	kcys	25	1	1.00	0.9222	
Peak	21.32	23.03	asp	24.11	1	2.00	0.9553	
Peak	24.13	25.28	mets	23.7	1	2.00	1.066	
Peak	26.88	25.42	thr	23.74	1	2.00	1.071	
Peak	29.12	25.7	ser	23.9	1	2.00	1.075	
Peak	34.85	28.58	glu	24.83	1	1.00	1.151	
Peak	36.58	6.803	pro	239.1	1	1.00	0.02845	B
Peak	41.07	28.22	gly	23.52	1	1.00	1.2	

1. Retenční čas
2. Plocha píku
3. Jméno píku
4. Množství aminokyseliny
5. Koeficient pro výpočet množství, viz 7
6. Okno pro přiřazení píků metody, viz 6.2
7. Odezva, viz 7
8. Jméno linie, z které se pík vyhodnocuje. Používá se při vícekanálovém záznamu, např. pro analyzátor aminokyselin.

Obr. 7. Tabulka píků

Okno programu (obr. 8) se vyvolá tlačítkem **Program** v sekci *Instrument* dialogu Setup (menu chromatografu funkce **Setup**). Program může obsahovat tři typy řádek: Prg.EventLine Tyto programové řádky se provádí v okamžiku, kdy dojde k události, která je v dané řádce nastavena. Pro systémy bez autosampleru

mají význam pouze řádky *peBeforeStart*, které se provádí v okamžiku stisku tlačítka **Prepare**. Slouží k nastavení výchozích podmínek analýzy.

Dev.Prg.Line Tyto programové řádky se přenesou do daného přístroje, který potom tyto řádky vykonává v daném čase. Používají se pro programování gradientu v čerpadle.

Seq.Prg.Line Tyto programové řádky se vykonávají v nastaveném čase.

	Event	Condition	Script	1st param	2nd param	3rd param	Note	State
Prg.Event	peBeforeStart		PrgAndRunLCP					None
Prg.Event	peBeforeStart		WLen	254				None
Prg.Event	peBeforeStart		MotorStart					None
Prg.Event	peBeforeStart		LampLow					None
Prg.Event	peBeforeStart		Zero	detector				None
Prg.Event	peBeforeStart		CoTemp	20				None
Dev.Prg.L	0.00	pump	GRADBC	40	60			None
Dev.Prg.L	0.00	pump	FLOW	1.000				None
Dev.Prg.L	0.00	pump	WAITSW					None
Dev.Prg.L	0.01	pump	SENDMARK	2				None
Dev.Prg.L	2.50	pump	GRADBC	0	100			None
Dev.Prg.L	3.50	pump	END					None

Obr. 8. Program

Řádky typu Prg.EventLine a Seq.Prg.Line mohou obsahovat dva typy příkazů. První typ jsou vnitřní příkazy chromulanu a druhý jsou skripty.

#### 4.1 Skripty

Jedná se o krátké programy v jazyce *pascal*. Tyto programy jsou interpretovány programem chromulan a mohou vykonávat různé operace. V programové řádce je možno zadat parametry, které se skriptu předávají. Součástí instalace programu jsou základní skripty:

WLen	Nastaví vlnovou délku na detektoru. První parametr je vlnová délka. Jako druhý parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede, použije se implicitně <i>detector</i> .
LampHigh	Zapne lampu na vysoký proud. Jako parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede použije se implicitně <i>detector</i> .
LampLow	Zapne lampu na nízký proud. Jako parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede, použije se implicitně <i>detector</i> .
Zero	Vynuluje absorbanci na detektoru. Jako parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede, použije se implicitně <i>detector</i> .
MotorStart	Zapne motor pumpy. Jako parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede, použije se implicitně <i>pump</i> .
PrgAndRunLCP	Přenesou program do pumpy a spustí jej. Program je definován řádky typu Dev.Prg.Line.

Temp Nastaví teplotu kolony. První paramter je teplota. Jako druhý parametr je možno zadat jméno přístroje, pokud se neuvede, použije se implicitně *temp*.

Další skripty si může uživatel vytvořit sám. Pro testování skriptů slouží okno, které se vyvolá příkazem **Setup** ⇒ **Script**. Pokud současně otevřeme okno kanálu (2.2.2), můžeme označením kanálu určit, s kterým kanálem testovaný skript pracuje.

## 5. Nová analýza

---

1. Vyvoláme příkaz **File** ⇒ **New**.
2. Vybereme template (šablonu) pro daný typ analýzy. Pokud nemáme šablonu vytvořenu, použijme *Default\_ulan*
3. Vyplníme název a popis vzorku.
4. Pokud provádíme kvantitativní výpočet, vyplníme faktory *Multiply Factor* a *DivideFactor*
5. Pokud je to potřeba, můžeme v sekci *Instrument* změnit program, délku analýzy, případně nastavit jiný kanál (2.2.2).
6. Vyplněný formulář odsouhlasíme tlačítkem OK.
7. Stiskneme tlačítko PREPARE. Chromulan nastaví výchozí parametry přístroje, podle toho, jak jsou nastaveny v programu (4).
8. Odstartujeme analýzu, většinou otočením dávkovacího ventilu, případně tlačítkem RUN na počítači nebo MARK na detektoru.
9. Pokud nemáme v metodě nastaveno automatické zastavení, zastavíme po skončení analýzy načítání dat. Menu chromatogramu funkce **Stop**. Po skončení analýzy automaticky proběhne vyhodnocení. Záznam analýzy lze zkrátit funkcí **Truncate**.
10. Pokud je analýza v pořádku, uložíme ji **File** ⇒ **SaveAs**, jinak můžeme analýzu opakovat opětovným spuštěním příkazu **RUN**.

## 6. Příprava vyhodnocení

---

Pokud chceme opakovaně vyhodnocovat vzorky stejného typu, je výhodné připravit pro daný typ analýzy template, podle kterého probíhá vyhodnocení automaticky.

### 6.1 Template

Template slouží jako šablona pro novou analýzu. Součástí template je i metoda, pro praktický provoz není nutno metodu ukládat, stačí uložit template.

Postup vytvoření template je následující

11. Otevřeme výchozí soubor. Může to být jiný template nebo analýza.
12. Funkcí **Setup** nastavíme hlavičku souboru.
13. V sekci *Instrument* nastavíme kanál (Channel Name), délku analýzy (Duration) a program (4).
14. Načteme metodu, viz 6.2.
15. Uložíme template příkazem **File** ⇒ **Save As**, kde vybereme typ souboru **.ult**, aby byl template přístupný při vytváření nové analýzy. Je nutno jej uložit do adresáře **Templates**.



## 6.2 Metoda

Metoda je datová struktura, která obsahuje parametry pro automatickou detekci píků, seznam píků se jmény, retenčním časem a dalšími parametry. V okamžiku vytvoření píku se odpovídající parametry zkopírují z metody do popisu píku.

Píky metody se přiřazují k naměřeným píkům pomocí retenčního času a okna. Pokud se pík nepřihadí správně, změním v tabulce píků metody retenční čas nebo zvětším okno. Při změně okna musíme dbát na to, aby se okna nepřekrývala. Tabulku píků metody vyvoláme funkcí **Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse**. Tato tabulka je stejná jako tabulka popisu píku obr. 7.

Přiřadit naměřený pík k píku metody je možno provést i funkcí **Assign metod peak**. Tuto funkci vyvoláme pravým tlačítkem na retenčním času píku. Pokud je v dialogu výběru píku označeno políčko *Update method*, funkce automaticky opraví i retenční čas v metodě.

Metoda je součástí analýzy, ale je ji možno uložit i samostatně (**Method** ⇒ **Save To**). Takto uloženou metodu je možno načíst do libovolné jiné analýzy (**Method** ⇒ **Load From**). Metodu je možno do analýzy načíst i z jiné analýzy nebo template.

Postup vytvoření metody je následující:

1. Vyvoláme funkci **Method** ⇒ **Edit** a nastavíme následující parametry:
  - 1.1. *Base min. interval*. Tento parametr říká, jak dlouhý musí být rovný úsek, aby se považoval za nulovou linii.
  - 1.2. *Base max. diff*. Tento parametr udává maximální šum, který může být na úseku, jenž se považuje za nulovou linii.
  - 1.3. *Min. peak height*. Minimální výška píku. Píky, které jsou menší se ignorují.
  - 1.4. *Min. peak width*. Minimální šířka píku. Píky, které jsou užší se ignorují.
  - 1.5. *Use negative peaks*. Toto políčko označíme, jestliže chceme vyhodnocovat negativní píky.
  - 1.6. *Calc Amounts*. Toto políčko označíme, pokud chceme automaticky počítat kvantitu, viz 7.2
  - 1.7. *Use Calibration File*. Toto políčko označíme, jestliže chceme použít externí standard, viz 7.3
  - 1.8. *Use Internal Standard*. Toto políčko označíme, pokud chceme použít vnitřní standard, viz 7.4
  - 1.9. *Factor*. Přepočtový faktor viz 7.2
2. Vyvoláme funkci **Peak** ⇒ **Autodetect**.
3. Pojmenujeme píky, které nás zajímají. Případně nastavíme další parametry (*Window*, *Amount*, *Response* a jiné, viz kapitola 7.2)
4. Označíme píky (3.3), které chceme mít v metodě a vyvoláme funkci **Peaks** ⇒ **Copy Selected To Method**.
5. Vyvoláme funkci **Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse** a v tabulce zkontrolujeme píky metody.
6. Pokud máme v metodě některé píky navíc, můžeme je smazat příkazem **Delete**
7. Uložíme metodu **Method** ⇒ **Save To**. Případně můžeme metodu uložit jako součást template, viz 6.1.

## 7. Vyhodnocení

---

### 7.1 Vyhodnocení bez výpočtu

1. Pokud je v template správně nastavena metoda, po ukončení analýzy proběhne automaticky identifikace píků. Pokud chceme metodu změnit postupujeme následovně.
  - 1.1. Funkcí **Method** ⇒ **Load From** načteme metodu.
  - 1.2. Pro nalezení píků použijeme funkce **Peak** ⇒ **Autodetect**.
2. Po proběhnutí automatického vyhodnocení máme možnost ruční editace nulové linie a píků, viz 3.2.
3. Parametry píků je možno si prohlédnout v tabulce která se vyvolá funkcí **Peaks** ⇒ **Browse**. Tyto parametry můžeme editovat v této tabulce pomocí tlačítka edit, případně v okně chromatogramu dvojitým kliknutím na jméno píku.

### 7.2 Vyhodnocení bez standardu

Toto vyhodnocení se používá, pokud z tabulek známe odezvu jednotlivých píků. Výpočet probíhá podle vzorce

$$Amount = \frac{Area}{Response} * UsrPeakCoef * Factor * \frac{MutiplyFactor}{DivideFactor}$$

Podle následujícího postupu připravíme metodu a výpočet probíhá automaticky.

1. Tabelované hodnoty odezvy zadáme v tabulce píků metody (**Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse**) do položky *Response*
2. V okně **Method** ⇒ **Edit** zaškrtneme položku *Calc Amount*
3. Takto připravenou metodu nastavíme jako do template pro daný typ analýzy.

### 7.3 Vnější standard

Vyhodnocení s vnějším standardem se používá, pokud máme standardní vzorek se známým obsahem jednotlivých složek. Výpočet probíhá podle následujících vzorců:

$$Amount = \frac{Area}{Response} * UsrPeakCoef * Factor * \frac{MutiplyFactor}{DivideFactor}$$

kde se *Response* vypočte ze standardu

$$Response = \frac{Area_{std}}{Amount_{std}} * UsrPeakCoef_{std} * Factor_{std} * \frac{MutiplyFactor_{std}}{DivideFactor_{std}}$$

Podle následujícího postupu připravíme metodu a výpočet probíhá automaticky.

1. Provedeme analýzu standardu. Tuto analýzu označíme jako standard, v okně **Header** zapneme položku *Cal. Standard*
2. V tabulce píků (**Peaks** ⇒ **Browse**) zadáme do položky *Amount* množství jednotlivých složek ve standardu.
3. V okně **Method** ⇒ **Edit** zapneme položky *Calc Amount* a *Use Calibration File*.
4. Dále příkazem **Method** ⇒ **Load Calibration File** načteme do metody standard.
5. Takto připravenou metodu nastavíme jako do template pro daný typ analýzy.

### 7.4 Vnitřní standard

Výpočet s vnitřním standardem probíhá podle následujících vzorců:

$$Amount = \frac{Area}{Response} * UsrPeakCoef * Factor * \frac{MutiplyFactor}{DivideFactor}$$

kde se Factor vypočte jako

$$Factor = \frac{Amount_{is} * Response_{is}}{Area_{is} * UsrPeakCoe f_{is}} * \frac{DivideFactor}{MutiplyFactor}$$

Podle následujícího postupu připravíme metodu a výpočet probíhá automaticky.

1. Tabeľované hodnoty odezvy zadáme v tabulce píků metody (**Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse**) do položky *Response*
2. V okně **Method** ⇒ **Edit** zaškrtneme položku *Calc Amount* a *Use Internal Standard*
3. Pro pík který používame jako interní standart vyplníme v tabulce **Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse** položky *Amount* a *Internal standard*.
4. Takto připravenou metodu nastavíme jako do template pro daný typ analýzy.

### 7.5 Vnější i vnitřní standard

Výpočet s vnějším i vnitřním standardem je kombinací dvou předchozích způsobů vyhodnocení, probíhá podle následujících vzorců:

$$Amount = \frac{Area}{Response} * UsrPeakCoe f * Factor * \frac{MutiplyFactor}{DivideFactor}$$

kde se Factor vypočte jako

$$Factor = \frac{Amount_{is} * Response_{is}}{Area_{is} * UsrPeakCoe f_{is}} * \frac{DivideFactor}{MutiplyFactor}$$

a Response se vypočte ze standardu

$$Response = \frac{Area_{std}}{Amount_{std}} * UsrPeakCoe f_{std} * Factor_{std} * \frac{MutiplyFactor_{std}}{DivideFactor_{std}}$$

Podle následujícího postupu připravíme metodu a výpočet probíhá automaticky.

1. Provedeme analýzu standardu.
2. V okně **Method** ⇒ **Edit** zaškrtneme položku *Calc Response*
3. V tabulce píků (**Peaks** ⇒ **Browse**) zadáme do položky *Amount* množství jednotlivých složek ve standardu.
4. Pro analýzu vzorku upravíme metodu tak, že v okně **Method** ⇒ **Edit** zapneme položky *Calc Amount*, *External Calibration* a *Internal standard* a vypneme *Calc Response*.
5. Dále příkazem **Method** ⇒ **Load Calibration File** načteme do metody analýzu standardu.
6. Pro pík, který používame jako interní standart vyplníme v tabulce **Method** ⇒ **Peaks** ⇒ **Browse** položky *Amount* a *Internal standard*.
7. Takto připravenou metodu nastavíme jako do template pro daný typ analýzy.

## 8. Porovnávání analýz

Program umožňuje vložit několik analýz do jednoho grafu. Provedeme to tak, že stiskneme tlačítko pro porovnávání analýz, viz ?? a pak si otevřeme další analýzu funkcí **File** ⇒ **Open**. Jednotlivé analýzy je možno posouvat a zvětšovat funkcemi ze submenu **Math** v menu chromatogramu.

Přepínat aktivní analýzy je možno funkcí **Overlay** z menu chromatogramu.

## 9. Obsah

---

1.	Úvod .....	1
2.	Instalace .....	1
2.1	Typy datových souborů .....	1
2.2	Nastavení .....	1
2.2.1	Komunikace .....	1
2.2.2	Kanály .....	2
3.	Ovládací prvky .....	3
3.1	Menu .....	3
3.2	Buttony .....	4
3.3	Výběr .....	4
3.4	Editace píků .....	4
4.	Program .....	5
4.1	Skripty .....	7
5.	Nová analýza .....	8
6.	Příprava vyhodnocení .....	8
6.1	Template .....	8
6.2	Metoda .....	9
7.	Vyhodnocení .....	9
7.1	Vyhodnocení bez výpočtu .....	10
7.2	Vyhodnocení bez standardu .....	10
7.3	Vnější standard .....	10
7.4	Vnitřní standard .....	10
7.5	Vnější i vnitřní standard .....	11
8.	Porovnávání analýz .....	11
9.	Obsah .....	12