Онлайн-калькулятор расчета массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции версия PRO

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Содержание

1 Назначение
2 Область применения
3 Функциональные возможности
4 Рабочая область 4
4.1 Кнопка очистки содержимого таблицы 5
4.2 Блок калибровки
4.3 Блок испытания образца7
4.4 Кнопка печати таблицы
4.5 Добавление вещества9
5 Сообщения об ошибках 10
6 Принцип расчета 10
6.1 Расчет концентраций летучих компонентов в калибровочной смеси 10
6.2 Расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF 10
6.3 Расчет концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции 11
7 Пример использования программы12
7.1 Установление калибровочных характеристик 12
7.2 Испытание образца 14

1 Назначение

Программа предназначена для выполнения расчетов при проведении хроматографического анализа по определению количественного содержания летучих компонентов в этанолсодержащей продукции.

2 Область применения

Программа разработана для применения в испытательных лабораториях по контролю качества и безопасности алкогольной и спиртосодержащей продукции для расчета значений массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции.

3 Функциональные возможности

Программа позволяет осуществлять расчет значений массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции в режиме онлайн с помощью браузера.

Программа позволяет задать условия, согласно которым будет сгенерирована таблица, отвечающая потребностям пользователя: предоставляет выбор калибровочной смеси, количества измерений калибровочной смеси и испытуемого образца.

Программа позволяет распечатать и сохранить полученный отчет.

4 Рабочая область

Рабочая область программы состоит из двух (блоков: блок калиб	ровки и блок испытания	образца (рис. 1	.)
---	--------------------	------------------------	-----------	--------	----

				Калибровка				Испытуеми	ый образец:	Robin Round 54, Июль 2018	
№ Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентрация, мг/л АА
1 Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684	13.6389	0	0	135.04
2 Изобутиральдеги	1 0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
3 Этилформат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
4 Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810	3.3524	0	0	15.97
5 Диэтилформаль	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
6 Метилацетат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
7 Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065	73.5154	0	0	460.33
В 2-бутанон	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
9 Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254	52.7901	0	0	389.22
0 2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871	0	0	0	0
1 Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000	134245.0	0	0	789300
2 2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677	18.3685	0	0	73.11
3 1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710	78.3424	0	0	327.04
4 Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581	352.2786	0	0	1203.39
5 Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784	1.3134	0	0	6.05
.6 1-бутанол	500.60	1251.50	176.7060	176.5648	176.1465	7.09	0.641	1.9018	0	0	7.17
7 Изоамилол	547.10	1367.80	214.3231	216.2603	214.0679	6.37	0.575	870.5642	0	0	2943.15
8 Этилкапроат	502.00	1255.00	146.1492	148.1989	147.7735	8.52	0.770	1.9627	0	0	8.88
9 Гексанол	498.70	1246.80	185.4982	186.8865	185.9017	6.70	0.606	5.0153	0	0	17.87
0 Этиллактат	503.10	1257.80	67.0605	67.9623	67.7739	18.61	1.682	18.0990	0	0	178.99
1 Этилкаприлат	512.20	1280.50	119.7590	129.8422	133.9246	10.02	0.905	9.1729	0	0	48.81
2 Этилкапрат	518.50	1296.30	74.5870	84.7516	91.7330	15.49	1.400	11.7625	0	0	96.82
3 2-фенилэтанол	513.40	1283.50	159.3048	163.8197	164.9796	7.89	0.713	4.9500	0	0	20.75
			"Вилимос"	а						б	
Информация об образце	Плотность, кг/л 0.90394	Температура, °С	крепость, % об. 62.38	крепость, % об. 61.99		Очистить всё	Печать	Добавить			

Рис. 1. Рабочая область программы: а) блок калибровки, б) блок испытания образца.

Более подробное описание программы представлено в п. 4.1-4.5 настоящего руководства пользователя.

4.1 Кнопка очистки содержимого таблицы

Кнопка «Очистить всё» предназначена для очистки содержимого таблицы. При нажатии на данную кнопку осуществляется полная очистка содержимого таблицы, в результате которой очищаются все ячейки.

					Калибровка				Испытуем	ый образец		
Nº	Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси,мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентрация мг/л АА
1	Ацетальдегид	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
3	Этилформат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
4	Ацетон	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
6	Метилацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
7	Этилацетат	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
8	2-бутанон	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
9	Метанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
10	2-пропанол	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
11	Этанол		789300	0	0	0	-	-	0	0	0	0
12	2-бутанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
13	1-пропанол	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
14	Изобутанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
15	Изоамилацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
16	1-бутанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
17	Изоамилол	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
18	Этилкапроат	0	0	0	0	0	_	-	0	0	0	0
19	Гексанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
20	Этиллактат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
21	Этилкаприлат	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
22	Этилкапрат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
23	2-фенилэтанол	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0

Рис. 2. Внешний вид таблицы после нажатия кнопки «Очистить всё».

4.2 Блок калибровки

Блок калибровки программы предназначен для внесения данных о используемых калибровочных смесях (концентрации, значения откликов) и расчетов калибровочных коэффициентов RF и RRF (рис. 3).

						Калибровка				Испытуеми	ый образец:	Robin Round S	54, Июль 20
N	V₽	Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентраци мг/л АА
1	1	Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684	13.6389	0	0	135.04
2	2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
↗ :	3	Этилформат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
4	4	Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810	3.3524	0	0	15.97
:	5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
	6	Метилацетат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
1	7	Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065	73.5154	0	0	460.33
8	8	2-бутанон	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
9	9	Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254	52.7901	0	0	389.22
1	10	2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871	0	0	0	0
1	11	Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000	134245.0	0	0	789300
1	12	2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677	18.3685	0	0	73.11
1	13	1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710	78.3424	0	0	327.04
1	14	Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581	352.2786	0	0	1203.39
1	15	Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784	1.3134	0	0	6.05

Поле для ввода паспортных значений концентраций калибровочной смеси

Летучие компоненты

Поля для ввода значений откликов калибровочной смеси

Рассчитанные значения калибровочных коэффициентов

Рис. 3. Внешний вид блока калибровки.

6

4.3 Блок испытания образца

Блок испытания образца предназначен для внесения данных, полученных в ходе измерений испытуемого образца и расчетов концентраций летучих компонентов в испытуемом образце (рис. 4).

№ Ком 1 Ацета/ 2 Изобут 3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил					L	Б ИСПЫТУСМОГ	о образца			nonbri	/	us qu
№ Ком 1 Ацетал 2 Изобут 3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил										-		
№ Ком 1 Ацетал 2 Изобут 3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил					Калибровка	ı			Испытуемь	ий образец:	Robin Round 54, Июль 2018	
1 Ацетал 2 Изобут 3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил	омпонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед	Концентрация, мг/л АА
2 Изобут 3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил	альдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684	13.6389	0	0	135.04
3 Этилф 4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил	утиральдегид	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
4 Ацетон 5 Диэти. 6 Метил	формат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
5 Диэти. 6 Метил	он	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810	3.3524	0	0	15.97
6 Метил	илформаль	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
	ілацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
7 Этилан	ацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065	73.5154	0	0	460.33
8 2-бута	ганон	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
9 Метан	нол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254	52.7901	0	0	389.22
10 2-проп	опанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871	0	0	0	0
11 Этанол	ол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000	134245.0	0	0	789300
12 2-бута	ганол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677	18.3685	0	0	73.11
13 1-проп	опанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710	78.3424	0	0	327.04
14 Изобут	утанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581	352.2786	0	0	1203.39
15 Изоам		504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784	1.3134	0	0	6.05

Рассчитанные значения концентрации летучих компонентов в испытуемом образце в размерности 1 мг на 1 л безводного этанола (АА – Absolute Alcohol)

Рис. 4. Внешний вид блока испытания образца.

4.4 Кнопка печати таблицы

Кнопка «Печать» предназначена для печати содержимого таблицы. При нажатии на данную кнопку осуществляется печать содержимого таблицы.

При распечатке страницы необходимо указывать альбомную раскладку листа. При использовании для работы браузеров «Google Chrome», «Opera» или «Mozilla Firefox» необходимо осуществить следующие действия (рис. 5):

a) [Печать Всего: 1 лист бумаги Печать Отмена	В) Печа Пр И Всего: 1 л.	ать × интер мя: Ваш принтер · Свойства остояние: Готов
	Принтер Ваш принтер ; Изменить	Принтер (Изменить	ая установка Главная Страница Обслуживание цеиспользуемые параметры Стандартные Фотопечать Бизнес-документ Сохранение бумаги Конорот
	Страницы Все Например: 1–5, 8, 11–13 Копии 1	Страницы • Все например, 1-5, 8, 11-1.	Содранить Эддлить Предвари ельный просмотр полнительные функции Двухсторонняя печать (Вручную) Оттенки серого Черновик
	Раскладка Альбомная 💌	Число 1 копий 1 Макет Альбомная У Сте	носителя: Размер бумаги: ичная бумага Специальный Ориентация: Окнижная © Альбомная ество печати: индарт У Задний лоток У
i i	Цветная печать Черно-белая печать • Параметры Двусторонняя печать	Цветная Цветная печать У	Копии: 1 (1-999) Зсегда печатать с текущими параметрами По умолч. ОК Отмена Справка

Рис. 5. Установка альбомной раскладки в браузерах: a) «Google Chrome», б) «Opera», в) «Mozilla Firefox».

4.5 Добавление вещества

Кнопка «Добавить» предназначена для добавления вещества в таблицу. При нажатии на данную кнопку можно добавить от 1 до 3 компонентов в таблицу (рис. 6).

				Калибровка				Испытуем	ый образец		
№ Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси,мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентрация мг/л АА
1 Ацетальдегид	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
2 Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
3 Этилформат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
4 Ацетон	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
5 Диэтилформаль	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
6 Метилацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
7 Этилацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
8 2-бутанон	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
9 Метанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
10 2-пропанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
11 Этанол		789300	0	0	0	-	-	0	0	0	0
12 2-бутанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
13 1-пропанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
14 Изобутанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
15 Изоамилацетат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
16 1-бутанол	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
17 Изоамилол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
18 Этилкапроат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
19 Гексанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
20 Этиллактат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
21 Этилкаприлат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
22 Этилкапрат	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
23 2-фенилэтанол	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
24 Вещество 1	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
25 Вещество 2	0	0	0	0	0	-	-	0	0	0	0
26 Вещество 3	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
Информация об образце	Плотность, кг/л	Температура, °С	"Видимая" крепость, % об.	Истинная крепость, % об.		Очистить всё	Печать	Скрыть			
	Вещество 1	Вещество 2	Вещество 3								
Введите плотность в кг/л	0	0	0								

Рис. 6. Внешний вид калькулятора после добавления веществ.

5 Сообщения об ошибках

При использовании программы возможно появление сообщений об ошибках. Примеры подобных сообщений приведены в таблице 1.

Таблица 1.	Сообщения	об	ошибках
------------	-----------	----	---------

Текст сообщения	Причина возникновения ошибки	Решение
Этанол!	Не указаны значения откликов для	Указать значения откликов
Ethanol!	этанола.	для этанола.

6 Принцип расчета

Принцип расчета массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции основан на использовании этанола в качестве внутреннего стандарта.

6.1 Расчет концентраций летучих компонентов в калибровочной смеси

Программа позволяет работать с концентрациями летучих компонентов в калибровочной смеси с размерностью 1 мг на 1 л смеси. При этом производится пересчет значений в размерность 1 мг на 1 л безводного этанола (Absolute Alcohol – AA). Для этого используется следующая формула:

$$C_{i}(\mathrm{M}\Gamma/\mathrm{\pi} \mathrm{A}\mathrm{A}) = \frac{C_{i}(\mathrm{M}\Gamma/\mathrm{\pi})}{\varphi_{\mathfrak{I}_{mahon}}},$$
(1)

где $C_i(M\Gamma/\pi)$ – значение паспортной концентрации *i*-го летучего компонента в калибровочной смеси, MГ/л;

C_i(мг/л AA) – значение паспортной концентрации *i*-го летучего компонента в калибровочной смеси, мг/л AA;

 $\varphi_{_{Этанол}}$ – объемная доля этилового спирта в калибровочной смеси (0,4 для смеси «PB»).

6.2 Расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF

Калибровочный блок программы производит расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF (Relative Response Factor).

Расчет калибровочных коэффициентов RF *i*-ых компонентов осуществляется по формуле:

$$RF_{i} = \frac{C_{i}(M\Gamma/\Lambda)}{\left\langle A_{i}^{Kan} \right\rangle},\tag{2}$$

где $\langle A_i^{Kan} \rangle$ – среднее значение откликов i-ых летучих компонентов, полученных при измерении калибровочной смеси.

После этого производится расчет относительных коэффициентов чувствительности *i*-ых летучих компонентов относительно этанола $RRF_i^{Этанол}$.

$$RRF_{i}^{\Im mahon} = \frac{RF_{i}}{RF_{\Im mahon}},$$
(3)

где *RF_i* – калибровочных коэффициент *i*-го летучего компонента; *RF_{Eth}* – калибровочный коэффициент этанола.

6.3 Расчет концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции

В блоке испытуемого образца программа производит расчет массовых концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции с помощью следующей формулы:

$$C_{i}^{*}(\mathrm{M}\Gamma/\mathrm{\Pi}) = RRF_{i}^{\Im_{mahon}} \cdot \frac{\left\langle A_{i}^{Hcn} \right\rangle}{\left\langle A_{\Im_{mahon}}^{Hcn} \right\rangle} \cdot \rho_{\Im_{mahon}}, \qquad (4)$$

где $\langle A_i^{Hen} \rangle$ – среднее значение откликов i-ых летучих компонентов, полученных при измерении испытуемого образца;

 $\langle A^{Hcn}_{\Im_{mahon}} \rangle$ — среднее значение откликов этанола, полученных при измерении испытуемого образца;

 $\rho_{\mathfrak{S}_{mahon}}$ – плотность этанола, $\rho_{\mathfrak{S}_{mahon}} = 789300$ мг/л.

7 Пример использования программы

7.1 Установление калибровочных характеристик

Паспортные значения концентраций, полученные в результате приготовления калибровочной смеси, заносятся в поле «Паспортное значение концентрации, мг/л» (рис. 6, а). После этого программа осуществляет пересчет значений концентраций летучих компонентов в калибровочной смеси из размерности 1 мг на 1 л смеси в размерность 1 мг на 1 л безводного этанола в поле «Концентрация, мг/л AA*» (рис. 7, б).

		a)	б)		Калибровка	ı			Испь
Nº	Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1,
1	Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684	13.63
2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	_	_	0
3	Этилформат	0	0	0	0	0	_	_	0
4	Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810	3.35
5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0	-	_	0
6	Метилацетат	0	0	0	0	0	_	_	0
7	Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065	73.51
8	2-бутанон	0	0	0	0	0	_	_	0
9	Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254	52.79
10	2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871	0
11	Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000	13424
12	2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677	18.36
13	1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710	78.34
14	Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581	352.2
15	Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784	1.31
		500.00		100.0000	100000	1701107			1.00

Рис. 7. Внешний вид полей: а) «Паспортное значение концентрации, мг/л», б) «Концентрация, мг/л AA*»

На рис. 8 представлена измеренная хроматограмма приготовленной калибровочной смеси в логарифмическом масштабе.



Рис. 8. Хроматограмма калибровочной смеси в линейном масштабе.

Данные значений откликов, полученные в ходе измерений, вносятся в поле «Отклик, произвольные единицы» (рис 9).

					Калибровка	
N⁰	Компонент	Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.
1	Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012
2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0
3	Этилформат	0	0	0	0	0
4	Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382
5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0
6	Метилацетат	0	0	0	0	0
7	Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508
8	2-бутанон	0	0	0	0	0
9	Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141
10	2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828
11	Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8
12	2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566
13	1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069
14	Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627
15	Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089

Рис. 9. Внесение данных о значениях откликов компонентов калибровочной смеси.

После этого программа рассчитывает значения RF и RRF, которые отображаются в полях «RF» и «RRF» соответственно (рис. 10).

	Компонент	Калибровка								
Nº		Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF		
1	Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684		
2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	_	_		
3	Этилформат	0	0	0	0	0	_	_		
4	Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810		
5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0	_	_		
6	Метилацетат	0	0	0	0	0	_	_		
7	Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065		
8	2-бутанон	0	0	0	0	0	_	_		
9	Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254		
10	2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871		
11	Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000		
12	2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677		
13	1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710		
14	Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581		
15	Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784		

Рис. 10. Внешний вид заполненного блока калибровки.

7.2 Испытание образца

В качестве примера приводится испытание образца бренди.

Производится газохроматографическое измерение образца Бренди. В поле «ИСПЫТУЕМЫЙ ОБРАЗЕЦ» указывается название образца «Robin Round 54, Июль 2018» (рис. 11)

Рис. 11. Указание исходных параметров: название испытуемого образца

На рис. 12 представлена измеренная хроматограмма образца бренди «Robin Round 54, Июль 2018» в логарифмическом масштабе.



Рис. 12. Хроматограмма образца бренди.

Данные значений откликов, полученные в ходе измерений, вносятся в поле «Отклик, произвольные единицы» (рис 13).

Испытуемь	ий образец:	Robin Round 54, Июль 2018						
Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентрация, мг/л АА					
13.6389	0	0	135.04					
0	0	0	0					
0	0	0	0					
3.3524	0	0	15.97					
0	0	0	0					
0	0	0	0					
73.5154	0	0	460.33					
0	0	0	0					
52.7901	0	0	389.22					
0	0	0	0					
134245.0	0	0	789300					
18.3685	0	0	73.11					
78.3424	0	0	327.04					
352.2786	0	0	1203.39					
1.3134	0	0	6.05					
1 0010	0							

Рис. 13. Внесение данных о значениях откликов компонентов испытуемого образца.

После этого программа производит расчет значений концентраций летучих компонентов в испытуемом образце в размерности 1 мг на 1 л безводного этанола (рис. 14).

Nº	Компонент	Калибровка							Испытуемый образец:		Robin Round 54, Июль 2018	
		Концентрация калибровочной смеси, мг/л	Концентрация калибровочной смеси, мг/л АА	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн.ед.	Отклик 2, отн.ед.	Отклик 3, отн.ед.	Концентрация мг/л АА
1	Ацетальдегид	487.00	1217.50	65.6267	65.3865	65.1012	18.62	1.684	13.6389	0	0	135.04
2	Изобутиральдегид	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
3	Этилформат	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
4	Ацетон	509.80	1274.50	143.5037	142.3367	140.9382	8.96	0.810	3.3524	0	0	15.97
5	Диэтилформаль	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
6	Метилацетат	0	0	0	0	0	_	_	0	0	0	0
7	Этилацетат	494.80	1237.00	104.6124	105.2537	105.0508	11.78	1.065	73.5154	0	0	460.33
8	2-бутанон	0	0	0	0	0	-	_	0	0	0	0
9	Метанол	494.80	1245.40	89.1723	90.2482	89.8141	13.88	1.254	52.7901	0	0	389.22
10	2-пропанол	504.00	1260.00	130.4189	131.2824	130.5828	9.64	0.871	0	0	0	0
11	Этанол		789300	71417.4	71522.8	71103.8	11.06	1.000	134245.0	0	0	789300
12	2-бутанол	497.00	1242.50	165.7982	166.7296	165.2566	7.49	0.677	18.3685	0	0	73.11
13	1-пропанол	496.00	1240.00	158.1645	158.5877	157.0069	7.85	0.710	78.3424	0	0	327.04
14	Изобутанол	504.00	1260.00	195.9049	196.8453	195.1627	6.43	0.581	352.2786	0	0	1203.39
15	Изоамилацетат	504.00	1260.00	145.0441	145.5742	145.0089	8.68	0.784	1.3134	0	0	6.05
16	1-бутанол	500.60	1251.50	176.7060	176.5648	176.1465	7.09	0.641	1.9018	0	0	7.17
17	Изоамилол	547.10	1367.80	214.3231	216.2603	214.0679	6.37	0.575	870.5642	0	0	2943.15
18	Этилкапроат	502.00	1255.00	146.1492	148.1989	147.7735	8.52	0.770	1.9627	0	0	8.88
9	Гексанол	498.70	1246.80	185.4982	186.8865	185.9017	6.70	0.606	5.0153	0	0	17.87
20	Этиллактат	503.10	1257.80	67.0605	67.9623	67.7739	18.61	1.682	18.0990	0	0	178.99
21	Этилкаприлат	512.20	1280.50	119.7590	129.8422	133.9246	10.02	0.905	9.1729	0	0	48.81
22	Этилкапрат	518.50	1296.30	74.5870	84.7516	91.7330	15.49	1.400	11.7625	0	0	96.82
23	2-фенилэтанол	513.40	1283.50	159.3048	163.8197	164.9796	7.89	0.713	4.9500	0	0	20.75

Рис. 14. Внешний вид заполненной таблицы.