

Анализ итоговых отчетов выполненных измерений для проведения метрологической аттестации МВИ «Продукция спиртосодержащая. Определение летучих компонентов методом газовой хроматографии», сформированных в разных ПО

На основе архива файлов приборных отчетов в формате cdf, переданных НИИ ЯП БГУ в БелГИМ исх. № 01-23/14 от 14.01.2020 года, подготовлены итоговые отчеты выполненных измерений для проведения метрологической аттестации МВИ «Продукция спиртосодержащая. Определение летучих компонентов методом газовой хроматографии. Методика выполнения измерений» в программном обеспечении (далее - ПО) ChemStation (Agilent), LabSolution (Shimadzu), Хроматэк Аналитик (Хроматэк) и UniChrom (New Analytical Systems).

Различия величин площадей пиков исследуемых летучих компонентов в итоговых отчетах, сформированных в ПО ChemStation (inp.bsu.by/structure/lai/method), LabSolution (inp.bsu.by/structure/lai/method), Хроматэк Аналитик (inp.bsu.by/structure/lai/method) и UniChrom (inp.bsu.by/structure/lai/method), обусловлены различием в алгоритмах представления исходных экспериментальных для разных ПО.

Рассчитанные величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартных растворов РВЭ-3, РВЭ-2 РВЭ-1, РВЭ-D, РВЭ-С, РВЭ-В и РВЭ-А. приведены в Таблицах 1-9. Хроматограммы были открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom Сравнительный анализ представленных данных показывает, что различия в рассчитанных величинах концентраций исследуемых летучих компонентов не превышают величины 0,1 % относительных, и, как следствие, не являются значимыми.

Таблица 1. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-3. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-3 | | | | | | | | |
|---|---|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 5,22 | 2,09 | 2,08 | 16,34 | 4,22 | 2,13 | 2,09 | 2,10 | 2,14 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-3 | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 5,22 | 2,09 | 2,08 | 16,34 | 4,22 | 2,13 | 2,09 | 2,10 | 2,14 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 5,22 | 2,09 | 2,08 | 16,34 | 4,22 | 2,13 | 2,09 | 2,10 | 2,14 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 5,22 | 2,09 | 2,08 | 16,34 | 4,22 | 2,13 | 2,09 | 2,10 | 2,14 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 5,22 | 2,09 | 2,08 | 16,34 | 4,22 | 2,13 | 2,09 | 2,10 | 2,14 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 2. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-2. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-2 | | | | | | | | |
|---|---|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 13,4 | 10,5 | 10,4 | 24,7 | 12,5 | 10,6 | 10,5 | 10,5 | 10,7 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-2 | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 13,4 | 10,5 | 10,4 | 24,7 | 12,5 | 10,6 | 10,5 | 10,5 | 10,7 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 13,4 | 10,5 | 10,4 | 24,7 | 12,5 | 10,6 | 10,5 | 10,5 | 10,7 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 13,4 | 10,5 | 10,4 | 24,7 | 12,5 | 10,6 | 10,5 | 10,5 | 10,7 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 13,4 | 10,5 | 10,4 | 24,7 | 12,5 | 10,6 | 10,5 | 10,5 | 10,7 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 3. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-1. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-1 | | | | | | | | |
|---|---|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 27,5 | 24,7 | 24,7 | 39,1 | 26,9 | 25,2 | 24,8 | 24,8 | 25,5 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-1 | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 27,5 | 24,8 | 24,7 | 39,1 | 26,9 | 25,2 | 24,8 | 24,8 | 25,5 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 27,5 | 24,8 | 24,7 | 39,1 | 26,9 | 25,2 | 24,8 | 24,8 | 25,5 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 27,5 | 24,8 | 24,7 | 39,1 | 26,9 | 25,2 | 24,8 | 24,8 | 25,5 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 27,5 | 24,8 | 24,7 | 39,1 | 26,9 | 25,2 | 24,8 | 24,8 | 25,5 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 4. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-D. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-D | | | | | | | | |
|---|---|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 203 | 204 | 203 | 219 | 206 | 209 | 203 | 204 | 210 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-D | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 203 | 205 | 203 | 219 | 206 | 209 | 203 | 204 | 210 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 203 | 205 | 203 | 219 | 206 | 209 | 203 | 204 | 210 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 203 | 205 | 203 | 219 | 206 | 209 | 203 | 204 | 210 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 203 | 205 | 203 | 219 | 206 | 209 | 203 | 204 | 210 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 5. Величины относительных коэффициентов отклика RRF исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-С. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины относительных коэффициентов отклика RRF рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Величины относительных коэффициентов отклика RRF исследуемых летучих компонентов | | | | | | | | |
|---|--|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| RRF* | | 1,257 | 1,556 | 1,069 | 1,252 | 0,803 | 0,681 | 0,571 | 0,617 | 0,564 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Величины относительных коэффициентов отклика RRF исследуемых летучих компонентов | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | RRF(XA) | 1,257 | 1,557 | 1,070 | 1,252 | 0,803 | 0,681 | 0,571 | 0,617 | 0,564 |
| | Относительная разность между RRF* и RRF(XA), % | 0,05 | 0,09 | 0,08 | 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,02 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | RRFC(CS) | 1,257 | 1,557 | 1,070 | 1,252 | 0,803 | 0,681 | 0,571 | 0,617 | 0,564 |
| | Относительная разность между RRF* и RRF(CS), % | 0,05 | 0,09 | 0,08 | 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,02 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | RRF(UC) | 1,257 | 1,557 | 1,070 | 1,252 | 0,803 | 0,681 | 0,571 | 0,617 | 0,564 |
| | Относительная разность между RRF* и RRF(UC), % | 0,05 | 0,09 | 0,09 | 0,00 | 0,02 | 0,05 | 0,02 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | RRF(LS) | 1,257 | 1,557 | 1,070 | 1,252 | 0,803 | 0,681 | 0,571 | 0,617 | 0,564 |
| | Относительная разность между RRF* и RRF(LS), % | 0,05 | 0,09 | 0,08 | 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,02 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 6. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-В. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-В3 | | | | | | | | |
|---|---|---|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 498 | 505 | 504 | 519 | 507 | 514 | 505 | 506 | 519 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-В | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 498 | 505 | 504 | 519 | 507 | 515 | 505 | 506 | 519 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 498 | 505 | 504 | 519 | 507 | 515 | 505 | 506 | 519 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 498 | 505 | 504 | 519 | 507 | 515 | 505 | 506 | 519 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 498 | 505 | 504 | 519 | 507 | 515 | 505 | 506 | 519 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

Таблица 7. Величины концентраций исследуемых летучих компонентов, рассчитанные на основании значений площадей пиков на хроматограммах стандартного раствора РВЭ-А. Хроматограммы открыты в программном обеспечении ChemStation, LabSolution, Хроматэк Аналитик и UniChrom.

| Величины концентраций рассчитаны на основании значений площадей пиков по шкале прибора Хроматэк Кристалл-5000.1 ПМ-2 | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-А | | | | | | | | |
|---|---|--|-------------|------------|---------|------------|------------|------------|-----------|-----------|
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Среднее значение концентрации, С*, мг/л АА | | 4968 | 5071 | 5049 | 5073 | 5068 | 5162 | 5058 | 5063 | 5201 |
| Результаты, полученные при открытии хроматограмм в разных ПО | | Компоненты стандартного раствора РВЭ-А | | | | | | | | |
| | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | изобутанол | 1-бутанол | изоамилол |
| Хроматэк Аналитик | Среднее значение концентрации, С(ХА), мг/л АА | 4969 | 5074 | 5051 | 5074 | 5068 | 5163 | 5058 | 5064 | 5202 |
| | Относительная разность между С* и С(ХА), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| ChemStation | Среднее значение концентрации, С(СS), мг/л АА | 4969 | 5074 | 5051 | 5074 | 5068 | 5163 | 5058 | 5064 | 5202 |
| | Относительная разность между С* и С(СS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| UniChrom | Среднее значение концентрации, С(UC), мг/л АА | 4969 | 5074 | 5051 | 5074 | 5068 | 5163 | 5058 | 5064 | 5202 |
| | Относительная разность между С* и С(UC), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| LabSolutions | Среднее значение концентрации, С(LS), мг/л АА | 4969 | 5074 | 5051 | 5074 | 5068 | 5163 | 5058 | 5064 | 5202 |
| | Относительная разность между С* и С(LS), % | 0,03 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |