

# ӨНДӨР ИДЭВХТ ШИНГЭНИЙ ХРОМАТОГРАФИЙН ӨГӨГДЛИЙГ БОЛОВСРУУЛАХ ЧАНАРЫН ШИНЖИЛГЭЭНИЙ ҮНДЭС

А.Баянмөнх<sup>1</sup>, М.Уранчимэг<sup>2</sup>, Л.Лхагва<sup>1</sup>, Л.Хүрэлбаатар<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Монос групп, Эм судлалын хүрээлэн

<sup>2</sup>Эрүүл мэндийн яам, Эм, эмнэлэгийн хэрэгслийн хэлтэс

## Introduction

A chromatographer always looks forward to getting perfect shaped peaks for each and every analysis but in reality peaks get distorted due to numerous reasons. Distortions are frustrating but if proper corrective steps are taken peak shape distortions can be avoided. Peak purity can be established by taking the ratio of two wavelengths across the peaks of running samples or standard. May, if the peak is pure, then the ratio of wavelengths should be constant across the peak. Otherwise, the peak is impure, then the ratio between two wavelengths will change across the peak as the spectral differences caused by interfering peak change the signal ratio.

**Keywords: peak, wavelength, baseline, signal, time constant, limit of detection (LOD), lowest of detection (LLOQ)**

Сүүлийн жилүүдэд өндөр идэвхт шингэний хроматографийн арга эмийн чанарын болон тоон шинжилгээнд ашиглахтай холбоотойгоор фармакопейн өгүүлэлд уг аргыг өргөн нэвтрүүлж байна. Тухайлбал сүүлийн үед хэвлэгдэн гарч буй улс орны фармакопейд эмийн тооны шинжилгээнд ашиглагдаж буй аргуудын 60 гаруй хувьд нь өндөр идэвхит шингэний арга зүйг оруулсан байна. Манай орны хувьд сүүлийн 8 жилийн хугацаанд үйлдвэрлэгчийн фармакопейд уг арга эрчимтэй нэвтэрч эхэлсэн. Бид энэ өндөр идэвхит шингэний хроматографийн арга зүй сэдэвт цуврал тойм лекцийнхээ хоёр дугаар хэсэгт эмийн шинжилгээнд хроматографийн өгөгдлийн боловсруулалтыг суурь ойлголтоор нь тайлбарлан нийтлүүлж байна. Дараачийн цуврал лекцэнд хроматографийн өгөгдлийг практик талаас нь тайлбарлахаар бэлдсэн бөгөөд энэ хоёр тойм лекцээр өндөр идэвхит шингэний хроматографийн гүйлгэлтэнд задлан шинжилгээ хийх, дүгнэх, аргын баталгаажилтыг боловсруулах тал дээр цогц ойлголт авах боломжтой болохболно.

**Шуугиан ба суурь шугамын дрейфийн шалтгаан. Дохио/шуугианы харьцаа.**

## Илрүүлэх болон тодорхойлох хязгаар

Суурь шугам гэдэг нь детекторын хүлээн авч буй дохионы шугам юм. Хэрэв шинжилгээний баганаас шинжлэх гэж буй бодис угаагдахгүй эсвэл тухайн детектор барьж авч чадахгүй байвал нойл утга буюу тэгш шугам байна. Фотон дохио үелзэлтэй байдаг. Хэрэв хугацааны хоорондох зайг багаар авбал (секунд) өндөр давтамжтай үелзэл байна. Хэрэв хугацааны хоорондох зайг хэдэн секунд эсвэл түүнээс их авбал өндөр давтамжтай ба бага давтамжтай үелзэлийн нийлбэрийг харж болно. Өндөр давтамжтай үелзэлийн давтамж нэгж хугацаандахь нийт цэгээр тодорхойлогдоно. Нэгж хугацаа гэдэг нь тогтмол хугацаа (детекторын параметр) ба өгөгдлийн давтамж (тоон аналог үүсгэгч) хооронд тодорхойлогдоно. Өгөгдлийн давтамж гэдэг нь тоон аналог үүсгэгч детекторын заалтыг тоолж гаргадаг давтамжийг хэлнэ. Тогтмол хугацаа гэдэг нь детектор дохиог цуглуулж дараа нь тоон аналог үүсгэгчид шилжүүлэх хугацаа юм. Хэрэв оператор 2 параметрийг хоуланг нь өөрчлөх боломжтой бол давтамжийг тогтмол хугацаанд тохируулна, жишээ нь, 0.1 секундэд 10Гц (секундэд 10 цэг) эсвэл 0.2 секундэд 5Гц (секундэд 5 цэг).

Тогтмол хугацаа ихсэх нь өндөр давтамжтай үелзэлийн амплитууд буурахад хүргэдэг харин өгөгдлийн давтамж үелзэлийн амплитуудад огт нөлөөлдөггүй. Ийм учраас өгөгдлийн давтамжийг тогтмол хугацаанаас үндэслэн ихээр тохируулж болно (0.1 секундээс их үед 10Гц)-энэ нь үелзэлийн амплитууд ихсэхэд хүргэхгүй. Үүнээс үүдэн өндөр давтамжтай үелзэлийг багасгахын тулд яагаад шууд детектор хангалттай өндөр тогтмол хугацааны утга өгж болдоггүй юм бэ гэх асуудал гарч ирж болно. Ихэвчлэн ийм зарчимаар ажилладаг өөрөөр хэлбэл 0.5-2 секунд, 2-0.5 Гц давтамжтай диапозонд гар аргаар тогтмол хугацааг тохируулдаг. Ийм хувилбар хэрэв шинжлэх бодисыг баганаар

гүйлгэх хугацаа 15 секундээс багагүй байх юм бол ашиглах боломжтой. 1 Гц давтамжтай, 1 секунд тогтмол хугацаатай үед пик тус бүр 15 ширхэг цэгээр зурагддаг. Гэвч 15 секундын гүйлгэлт тийм ч хурдан биш юм. Энэ тохиолдолд бага тогтоох чадвартай шинжлэх бодисын гүйлгэлтийн хугацаа нь 1-2 секунд ба түүнээс бага, хроматограмм дахь нийт цэг 10-с багагүй байна. 10 цэгийн утга нь 10 Гц максимум давтамжтай, минималь 0.1 секунд тогтмол хугацаатай уламжлалт тоон аналог үүсгэгчийн хязгаар нь болж өгдөг. Харьцангуй өндөр тооллын хурдтай үед орчин үеийн 100 Гц давтамжтай, пикийг бүртгэх боломжтой хурдан хроматографийн систем ашигладаг.

Өндөр давтамжтай үелзэлийн эх үүсвэрүүд: төхөөрөмжийн цахилгаан хэрэгсэл, илрүүлэх элемент, ламп, детекторийн кювет зэрэг ордог. Хэрэв ажиглаж буй үелзэлийн нормийг давж байвал энгийн хэд хэдэн ихэссэн шуугианы эх үүсвэрийг шалгах нь зүйтэй. Үүнд нэгдүгээрт: детекторийн кювет хийгүй элюентээр (цэвэр органик уусгагч) дүүргэгдсэн эсэхийг шалгах хэрэгтэй. Агаарын микробөмбөлөг (хий) нь нэмэлтээр гарах үелзэлийн шалтгаан болдог. Микробөмбөлөг үүсэхээс сэргийлж кюветенд элюентийг агаар нэвтрүүлэхгүй болгох эсвэл насосны оролтын хэсэг хийгүйжүүлэгч аппарат залган ашиглах хэрэгтэй. Хоёрт үелзэл диодын гэрлийн тогтворгүй ажиллагаанаас үүсэж болно. Энэ тохиолдолд диодын чийдэнг шинээр солих шаардлагатай. Ультра ягаан туяны ламп 2000 цаг байдаг байна. Гуравт төхөөрөмж газардуулагчгүй залгасан үед өөр нэгэн цахилгаан хэлхээг тохируулахад өндөр давтамжтай үелзэл ихэсдэг байна. Жишээ нь: хэрэв өгөгдөл боловсруулах программ компьютерт суурьлагдсан бол үелзэл компьютерийг тэжээлийн хэлхээнд залган асаах үед ихэснэ. Хэрэв өндөр давтамжтай үелзэл бүхэлдээ хэвийн нормд байна гэж үзье. Тэгвэл тэдгээрийн амплитудыг багасгаж болох уу? Зарчмын хувьд болно гэвч хүчтэй биш: 2 ба 3 дахин багасгаж болно. Нэгт харааны детектор ашиглаж байх үед тогтмол хугацааг ихэсгэж харин тоон аналог үүсгэгчийн давтамжийг багасгах шаардлагатай. Гэвч энэ үйлдэл нэгж хугацаа нь дахь нийт цэгийг багасгахад хүргэдэг иймээс хурдан хроматографийн аргад хэрэглэгдэхгүй. Ийм

үр дүнг минимум тогтмол хугацааны утга ба максимум давтамжтай үеийн хроматограмм гаргаж үүний дараа хроматограммийг шахах үйл ажиллагааг хийнэ. Шахах үйл ажиллагаа гэдэг нь эхлээд хроматограммийг тоон аналог үүсгэгчийн максимум хурдтай (жишээ нь, 10 Гц давтамжтай) гарган авч дараа нь оператор урьдчилсан пикийн заалтыг (маш бага өргөнтэй) харуулдаг ба хамгийн нарийн пик зурагдах (10-с багагүй пик) нийт цэгийг тогтоодог байна. Үүний дараа программ бүх хроматограммийн дундаж үзүүлэлтийг авч хэрэггүй илүү цэгийг орхидог байна. Шахасны дараа үелзэлийн зэргийг шуугианы фильтр ашиглан илүү багасгаж болно. Энэ үйл ажиллагааг тэгшлэх (өнгөлөх) гэдэг. Гэвч энэ арга өргөн хэрэглэгддэггүй учир нь хиймэл гэж үздэг байна. Ямар ч тохиолдолд ямар ч фильтр ашигласан хэт их тэгшлэх юм бол пикийн параметр гажих шинж тэмдэг илэрнэ: пикийн талбай өргөсөх, суурь тэгш бус гарах г.м

Шуугианы амплитудууд дээд болон доод заагийн хоорондох ялгаагаар тодорхойлогдоно. Пикийн өндөр ба үелзэлийн амплитудын харьцааг дохио/үелзэлийн харьцаа гэнэ. Энд энэ харьцааг SN гэж тэмдэглэгддэг. Пикийн өндөр суурь шугамаас (үелзэлийн диапозоны дундаас) пикийн максимум хүртэлх утгаар тодорхойлогдоно.

Дохио/үелзэлийн харьцаа нь пикийн гол тодорхойлолт болдог учир нь энэ нь түүний талбайг оновчтой тодорхойлоход нөлөөлдөг байна. Эцсийн үр дүнд өндөр бус SN-тэй пикийн хувьд дохио/үелзэлийн харьцаа нь үндсэндээ тохирох шинжлэж буй нэгдлийн тооны тодорхойлолтын оновчтой байдлыг тодорхойлдог байна.

Шинжлэж буй бодисыг найдвартай зөв илрүүлэх нөхцөл нь үелзэлийн амплитудыг ашигт дохиогоор гурав нуглан ихэсгэх байдал гэж үздэг. Тухайн гүйлгээр явуулж буй бодисын пикийн сонгосон нөхцөлд дээж дэхь бодисын концентрац  $SN=3$  хүрдэг үүнийг илрүүлэх хязгаар гэнэ. Тохиромжит тооны тодорхойлолтын нөхцөл  $SN \geq 10$  ба үүнийг тодорхойлох хязгаар гэнэ. Өндөр давтамжтай үелзэлээс гадна хроматограмм дээр секундээс хэдэн арван секунд хүртэлхи тодорхой хугацаатай нам давтамжтай үелзэлийг харж

болно. Ер нь нам давтамжтай үелзэл нь хроматографт ямар нэгэн алдаа байна гэсэн үг юм. Ихэвчлэн нам давтамжтай үелзэлийн шалтгаан нь тогтворгүй насосны ажиллагаа байдаг. Нам давтамжтай үелзэл нь өндөр амплитудтай үед тоон хэмжээний шинжилгээ маш хүндрэлтэй харин сул дохионы үед бүр ч боломжгүй. Мөчлөгийн үелзэл үүсэх үед эхлээд тухайн элюентээр 5 мл/мин хурдтай угаана. Энэ арга нь шингэн системээс жижиг агаарын бөмбөлөг хөөсийг зайлуулдаг байна. Хэрэв элюент усан суурьтай бол дахин хийг арилгаж төхөөрөмжийн бүх шингэн системийг дахин дүүргэх шаардлагатай, эдгээр энгийн аргууд тус болохгүй байвал насосны хавхлагийг бохирдуулсан байж болно. Энэ тохиолдолд хавхлагийг задалж хэт авианы ваннд азотын хүчлийн усан уусмалаар цагийн турш угаана. Харамсалтай нь зарим үйлдвэрлэгчид хаалттай, задалж болохгүйгээр үйлдвэрлэсэн байдаг.

Суурь шугам хөндлөн хөдөлгөөнөөс хазайвал үүнийг дрейф гэнэ. Дрейф тоон хэмжээн шинжилгээг хүндрэлтэй болгодог. Яагаад гэдгийг дараах жишээнээс авч үзье. Дрейф байхгүй-тэгш, хөндлөн суурь шугам байна гэж үзье. Тоон хэмжээн шинжилгээ хийхийн тулд түүний талбайг тодорхойлох шаардлагатай. Талбайг тодорхойлохын тулд пикэд тэмдэглэгээ хийдэг: үүний эхлэл ба төгсгөлийг тэмдэглэнэ энэ үед программ өөрөө тэдгээрийн хооронд шугам татдаг ба үүнийг пикийн суурь гэнэ. Дрейф байхгүй үед бид автоматаар фотон дохио өөрчлөгдөхгүй гэж үзнэ: суурь нь суурь шугамын үргэлжлэл өөрөөр хэлбэл хөндлөн тэгш хэрчим байна.

Энэ тохиолдолд эхлэл ба төгсгөлийг тодорхойлоход ямар ч асуудалгүй байна. Үүнийг дагаад пикийн талбай зөв тодорхойлогдсон байх ба тоон хэмжээн шинжилгээ зөв тодорхойлогдоно. Пик хөндлөн суурь шугамд нэг түвшинд бичигдэж эхлээд мөн л хөндлөн суурь шугамд бичигдсэн боловч өөр түвшинд байна гэж үзье. Энд суурь шугам пикийн доор байрлах ба шаталсан байдлаар харагдана. Ингэснээр бидэнд яг хаана пикийн төгсгөлийг тэмдэглэхэд хүндрэлтэй болдог. Мөн хэт шугаман дрейф хүндрэлтэй. Энд пикийн эхлэл ба төгсгөлийг тодорхойлоход хүндрэл гардаг. Үүнийг ямар нэгэн тооцооллын

аргаар шийдэж болдоггүй. Дрейф үүсэж буй шалтгааныг олж дрейфийг багасгах шаардлагатай. Дрейф үүсэх шалтгаан янз янз байдаг. Нэг шалтгаан нь шатлан угаах үед элюентийн найрлага өөрчлөгдөх тохиолдол юм. Зарим детекторууд маш мэдрэмтгий (рефрактометр детектор) харин спектрофотометр детектор шатлан угаах процесс явуулахад тохиромжтой. Уусгагчийн цэвэр байдлыг мөрдөж шатлан угаах үед дундаж дрейф үүсэх нөхцлийг бүрдүүлдэг. Хэт ягаан детекторын хувьд дрейф долгионы уртаас хамаарна: дрейф урт долгионы уртын шингээлтээс бага харин богино долгионы уртын шингээлтээс (230 нм) их байна. Дрейф изократик системд илэрч болно. Жишээ нь элюентийн рецикл схем ашиглах үед. Хэрэв энэ тохиолдолд дрейф критик системд байвал рецикл схемээс татгалзах нь зүйтэй.

Шаталсан дрейф изократик системд рецикл ашиглаагүй бол боловсруулсан арга зүйд ямар нэгэн алдаа байна гэж үздэг. Угаах процесс дуусах үед хэрэв градиент насосны системтэй байвал зайлах болон өтгөрүүлэх шат оруулж болно. Хэрэв насосны систем изократик бол шинжилгээний нийт хугацааг нэмж өгнө.

### **Хроматограммын тэмдэглэгээ**

Тэмдэглэгээ гэдэг нь хроматограмм дахь сонирхож буй пикийн эхлэл ба төгсгөлийг тодорхойлох юм. Хэрэв аналитийн бүх пик сайн хуваагдсан харин суурь шугамын дрейф бага бол тэмдэглэгээ хийхэд амархан байдаг. Хэрэв эдгээр нөхцөлүүд бүрдэхгүй бол тодорхой хүндрэлүүд гарна. Эдгээр хүндрэлүүдийг шийдэж болно хэрэв аль нэгэн илэрсэн тохиолдолд: бүрэн бус хуваагдал, дрейф. Үүний зэрэгцээ аль ч тохиолдолд алдаа илэрдэг.

Бүрэн бус хуваагдалын жишээг авч үзье. Энд хольцтой нэгдлийн угаалт гэсэн ойлголт байхгүй. Бүхэл нэгдлийн алдаа хэр их байна тэр хэрээр задрал болон пикийн тэгш байдал бага байна. Үүнээс гадна хуваагдаагүй пикийн өндөрийн харьцаа алдаа үүсэхэд нөлөөлдөг. Хэрэв пик өндрөөрөө тэнцүү эсвэл нэг пик нөгөөгөөсөө талбайгаараа харьцангуй их бол өндөр минимум байна. Пикийн талбай их ялгаатай байвал бүхэл нэгдлийн алдаа нь

угаах дараалал болон үндсэн пикийн тэгш байдлаас хамаарна.

Хэрэв пикийн талбай бараг тэнцүү бол пикийг перпендикулярын аргаар хуваана: аль аль пикийг эхлээд нэг мэт тэмдэглэж дараа нь доороос нь пикийн хооронд перпендикуляр буулгана. Перпендикуляр нэг пикийг хоёр пик болгон хуваадаг. Хэрэв пикийн талбай ялгаатай ба жижиг пик ташуулдаг гарвал нэмэлт аргаар тэмдэглэнэ: эхлэл ба төгсгөлийг шууд үндсэн пикийн ташуу хэсэгт тэмдэглэнэ. Бүхэл нэгдлийн максимум алдаа нэг пик нөгөө пикээс хэд дахин их байх тохиолдолд гарна. Энэ тохиолдолд перпендикулярын арга жижиг пикийн хувьд нэмэгдсэн үр дүн үзүүлдэг харин нэмэлт арга буурсан үзүүлэлттэй байдаг. Нийцтэй үр дүнг зөвхөн тоон арга болох аппроксимацийг хэрэглэж олно.

Одоо суурь шугамын дрейфээс гарч буй олон пиктэй хроматограммийг авч үзье. Эхлээд салангид ганц шинжилгээ явуулна. Үндсэн пик хугарсан шугамтай нийлж байхаар тэмдэглэгээг хийх ёстой. Үүний зэрэгцээ гарган авсан "хиймэл" суурь шугам пикийн хөндий хэсэгтэй огтолцох ёсгүй өөрөөр хэлбэл сөрөг пик байж болохгүй юм. Жишээ нь, Зураг 1а-д дүрсэлснээр 12 ширхэг пикийг 6 цэгийн хооронд 5 суурь ба 7 перпендикуляр буулгаж тэмдэглэж болно ( $5+7=12$ ). Энэхүү хроматограммд пик ар араасаа угаагдаж цэг тус бүр нэгэн зэрэг нэг пикийн төгсгөл болж дараагийн пикийн эхлэл болдог байна.

хангамжийн хэлбэр нь бланкийг тогтоож дараа дараагийн хроматограмаас хасдаг

Fig 1. Total peaks are detected by UV detector with drift. Бүрэн бус хуваагдсан үед бланк байхгүй байх нь том алдаа. Зарим программ

байна. Иймд гүйлгэлт бүрт бланк тогтмол эсэхийг шалгаж байх ёстой.

### **Чанарын шинжилгээний үндэс. Нэгдлийг таних арга. Таних аргын хуурамч эерэг ба сөрөг үр дүн**

Чанарын шинжилгээ нь дээжид тухайн бодис агуулагдаж байна уу гэсэн асуултанд хариулдаг. Чанарын шинжилгээний үр дүн эерэг (бодис илэрсэн) ба сөрөг (бодис илрээгүй) байж болно. Хроматографи арганд чанарын шинжилгээ хроматограмм дахь пикийг болон цэвэр нэгдлийхтэй (стандарт) харьцуулах замаар тооцдог. Дээжинд тухайн нэгдэл агуулагдаагүй гэдгийг батлах нь агуулагдаж байгааг тодорхойлохоос хялбар байдаг. Энгийнээр үзвэл хроматограммд угааж буй хэсэгт пик байхгүй байвал дээжинд агуулагдаагүй байна гэж үзнэ. Стандарт нэгдэлийн дохио хроматограмм дахь аль нэг дохиотой давхцах үеийг бид илрүүлсэн гэж үзье. 2 хувилбар байж болно: 1) хамгийн сүүлд илэрч буй бодисын дохио 2) төстэй боловч өөр бодисын дохио. 2 дахь хувилбарийг батлахын тулд стандарт болон дээжинд агуулагдах бодисууд ядаж нэг тохиолдолд давхцаагүй байх хэрэгтэй.

Практикт эцсийн бодис дээжинд агуулагдсан агуулагдаагүйг тодорхойлох энгийн арга ашигладаг. Чанарын шинжилгээ бодисын тогтоох (хадгалах) хугацаанд үндэслэгдсэн. Найдвартай чанар давтагдах байдлаас хамаарна. Хэрэв хроматографи аргаар хуваах арга зүй үнэлэгдвэл тогтвортойд тооцогдож дундаж хазайлт 0.2% ба түүнээс бага байна. Практикт  $t_R$  утга зөрөө их байда арга зүй дээр боломжит тогтоох (хадгалах) хугацааны утга изократик системд 2% хүртэл гэж тусгасан байна. Давтамж ямар ч байсан нэг цуврал шинжилгээний турш бодисын тогтоох хугацааг хянаж байх ёстой. Автомат дээж оруулагч нь багананд дээжийг оруулахад ихэвчлэн 1-3 стандарт дээжний шинжилгээ цувралын эхэнд ба нэг стандарт дээжний шинжилгээ цувралын сүүлд хийнэ. Эдгээр нь лабораторийн дотоод чанарын хяналтад хамаарагдана.

Сөрөг гипотезийн хувьд зөв боловсруулсан

шинжилгээний арга зүйд (аналитын алдагдалгүй г.м) хроматограммд аналитын пик байхгүй байх нь чухал бөгөөд сөрөг үр дүнгийн хангалттай нөхцөл болно. Сөрөг үр дүн гэнэтийн үед сөрөг гипотезийг шалгаж болно. Стандарт дээж нэмж нэмэлт дээжний шинжилгээ явуулдаг.

Эерэг гипотезийг батлахын тулд тогтоох хугацааны давхцал чухал юм. Хроматограммд пик байгаа бөгөөд гарах хугацаа нэгдлийн тогтоох хугацаатай давхцаж буй нөхцлийг авч үзье. Үүнд 3 тохиолдол бий: 1. пик бодисын жинхэнэ пик мөн 2. төстэй тогтоох хугацаатай өөр бодисын пик, 3. 2 эсвэл их хэмжээний пик ажиглагдах ба тэдний нэг нь эцсийн бодист хамаарагдана. Эхний үйлдэл үйлчилгээтэй ба энгийн: пикийн хэлбэрийг харах хэрэгтэй. Пик гажаагүй Гауссын муруйтай ижил хэлбэртэй байх ,стой. Хэрэв пик тахийсан байвал пик давхарлан тавигдана. Ийм үед чанарын болон тооны тодорхойлолт хийж болохгүй: илүү сайн хуваах шаардлагатай. Пик гаднаа гажаагүй тахийгаагүй байна гэж бодье. Энэ тохиолдолд стандарт дээж нэмж дахин пикийн хэлбэрийг харна. Гажсан хэлбэрийн пик эсвэл хо,р дахь максимум үүсэх нь пик эцсийн бодист хамаарагдахгүй гэсэн үг юм.

Өөр ялгалттай хроматографийн аргаар туршилт явуулж болно. Хуваах процессийн ялгалтыг багахан өөрчлөхөд жишээ нь, өөр төрлийн хөдөлгөөнгүй фазыг ижилхэн хроматографийн дэглэмд ашиглах ба хроматограммийн төрх өөрчлөгдөхгүй. Хэрэв эерэг гипотез зөв бол шинжилж буй бодис ба стандарт пикийн илрэх хугацаа энэ тохиолдолд давхцана. Нэг эсвэл хэд хэдэн нэмэлт хуваалтын боломжит нөхцөлийг ямар ч тодорхой нөхцөлд хольцтой бодисын угаах боломжийг хасаж болохгүй.

Дээр дурьдсан чанарын шинжилгээ нь хэрэглэж буй детекторийн төрлөөс хамаардаггүй. Тогтсон энгийн шинжилгээ хийхэд бодисын спектр мэдээлэл дээр үндэслэгдсэн өөр төрлийн нэмэлт чанарын шинжилгээ ашигладаг. Хэдэн эгнээ детектор пикийн спектр тодорхойлолтыг өгдөг ба үүнийг бодисыг илрүүлэхэд ашигладаг байна. Угаагдаж буй бодисын талаар ямар нэгэн мэдээлэлийг нэг сувагтай детектор өгдөггүй байна: нэг долгионтой спектрофотометр

детектор, нэг долгионтой флуорометр детектор, рефрактометр детектор, ууршуулах гэрэл сарнилтын детектор, кондуктометр детектор г.м. Эдгээр детекторуудын хувьд пикийн илрэх хугацаа нь дээр үндэслэгдсэн чанарын шинжилгээ хийгдэнэ.

Энгийн чанарын шинжилгээний хувьд хэвлэх(сканердах) спектрофотометр детектор өргөн ашиглагддаг. Хэвлэх (сканердах) гэдэг нь детекторийн дифракцийн тор эргэлдэж өөр өөр долгионы урттай хэд хэдэн байрлалыг хурдан дайран өнгөрөхийг хэлнэ. Үүний үр дүнд детектор шууд хэд хэдэн өөр өөрийн долгионы уртын шингээлттэй хроматограмийг бичдэг байна. Пикийн өндөр долгионы уртын шингээлт бүр дээр өөр байдаг. Нэг долгионы уртын пикийн өндөр энэ пикийн өөр нэг долгионы уртын харьцааг спектрийн харьцаа гэнэ. Спектрийн харьцааг сайн давталттай байлгахын тулд хроматограммийн байнгын тэмдэглэгээг мөрдөж явна. Спектрийн давталт пикийн дохио/үелзэл их байх тусам сайн байна.

Одоо эерэг гипотезийг батлая. Хроматограммд аль нэг пикийн дуусах хугацаа эцсийн нэгдлийн илрэх хугацаатай давхцаж буй үеийн жишээг дахин авч үзье. Одоо бид зөвхөн илрүүлэх хугацаанаас гадна претендент ба стандарт пикийн спектр өгөгдөлийг харьцуулж болохоор боллоо.

Хо,р долгионт спектрофотометр детектор ашиглаж буй тохиолдолд бид илрэх хугацаанаас гадна спектрийг харьцуулна. Хо,р тодорхойлолт эхний үед давхацсан гэж үзье.

Дараагийн алхамаар спектрийн харьцаа пикийн бүх цэгт ижилхэн эсэхийг шалгана. Хэрэв пик нэг бодис таарч байвал өөр цэгийн пикэд спектрийн харьцаа ихбайх ,сгүй. Пикийн янз бүрийн хэсгийн спектрийн харьцааны хоорондох ялгаа хольцтойг баталж байна.

Уг арга зүйг пикийн хольцгүй цэвэр байдлын туршилт гэнэ. Энэхүү туршилт хэрэв детекторын оронд диод матриц байвал автоматаар хийгдэнэ. Гэвч ямар ч илрүүлэх арга бүрэн зөв байдаггүй. Тодорхой бүтцийн томъ,отой химийн нэгдлийн тодорхой пикийг бичихдээ бид хамгийн үнэн зөв гэсэн гипотезийг авдаг. Чанарын шинжилгээний үед

алдах тохиолдол байнга гардаг. Алдаатай үр дүнг 3 хуваана: хуурамч сөрөг, хуурамч эерэг, алдаатай илрүүлэлтийн үр дүн. Хэрэв эцсийн нэгдэл дээжид байгаа гэвч олдоогүй бол хуурамч сөрөг гэнэ. Хэрэв дээжид байхгүй гэвч олдсон бол хуурамч эерэг гэнэ. Эцсийн нэгдэлд өөр нэгдлийн пик бичсэн бол алдаатай илрүүлэлтийн үр дүн гэнэ. Хуурамч сөрөг үр дүн дээж авах болон шинжилгээнд дээж бэлтгэх процесст эцсийн бодис алдагдах үед илэрдэг. Бас нэг боломжит эх үүсвэр бол дээжид эцсийн бодис задрах юм. Хуурамч эерэг үр дүн алдаатай илрүүлэлт, ямар нэгэн гадны нөлөөллөөс дээж эцсийн бодисоор бохирдох үед илэрнэ. Гадны хүчин зүйл гэдэг нь өөр дээж ба хүрээлэн буй орчин байж болно. Өндөр түвшиний алдаа гаргахгүй байх ганц арга нь лаборатори доторхи чанарын хэмжил зүйн хяналт юм. Үргэлжлэл бий.