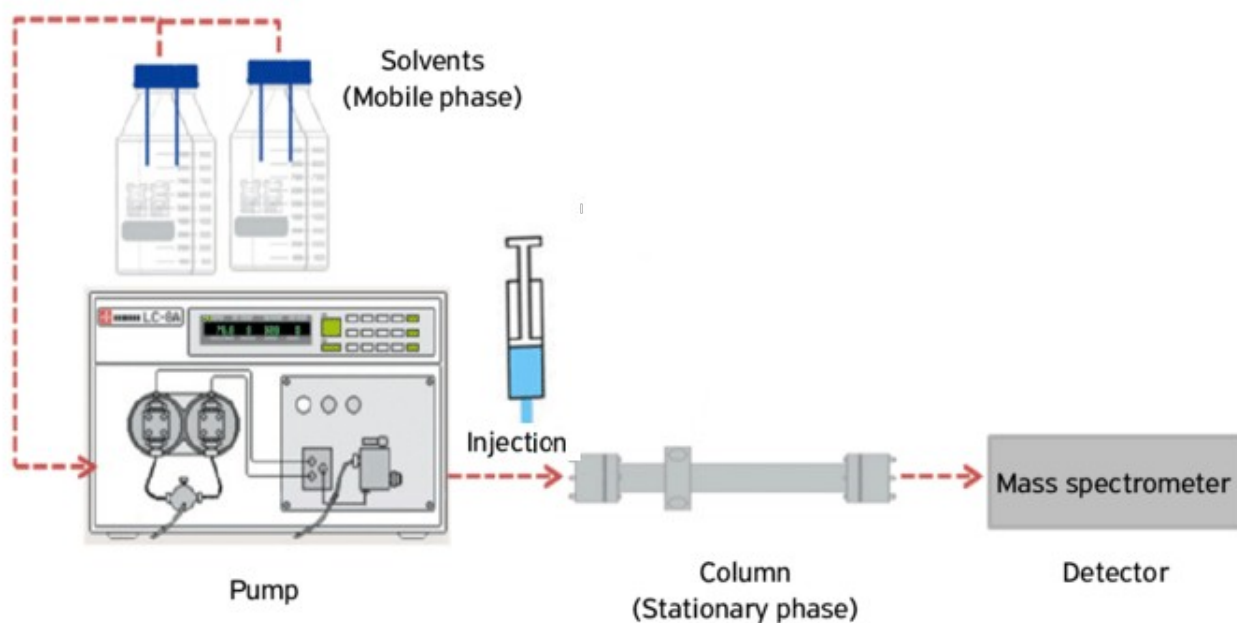


## Materiál k tvorbě UML modelu a testovacího scénáře

Následující kapitola slouží jako úvod do problematiky kapalinové chromatografie s hmotnostně spektroskopickou detekcí (LC-MS). Text si klade za cíl vysvětlit základní pojmy a princip metody, tak aby následně mohl být vytvořen UML model a testovací scénář. Jedná se tedy o velmi zjednodušený popis.

Kapalinová chromatografie patří mezi separační techniky, která se užívá k rozdělení směsi vzorku na jednotlivé analyty (látky). Po rozdělení vzorku následuje detekční technika, která dokáže určit kvalitativní a kvantitativní složení vzorku. V této ukázce je použita jako detekční technika hmotnostní spektrometrie. Uvedený systém se běžně používá v analytických a biochemických laboratořích.

Pro separaci jednotlivých částí vzorku je použit chromatografický systém, který se skládá ze dvou zásobních lahví, které obsahují mobilní fázi (Mobile phase). Mobilní fáze je pomocí pump čerpána do systému. Složení mobilní fáze můžeme ovlivňovat a nastavit tak, poměr jednotlivých složek. Dále můžeme nastavit rychlost průtok mobilní fáze a také teplotu kolony. V dalším kroku je do systému nastříknut vzorek, který je mobilní fází unášen na analytickou kolonu (Column), která obsahuje stacionární fázi. Zde dochází k vlastní separaci na jednotlivé analyty, které jsou následně detekovány. V uvedeném případě se jedná o hmotnostně spektrometrickou detekci.



Obr. 1 převzato z <https://microbenotes.com/types-of-chromatography/>

## Ekvilibrace systému

Příprava vzorku, vlastní měření a následné vyhodnocení naměřených dat, to jsou rutinní kroky laboratorní praxe. Před měřením vzorků je potřeba měřicí systém ekvilibrovat. Tedy nastavit parametry měření. Tento krok slouží ke stabilizaci kolony a také umožňuje operátorovi kontrolu systému a odstranění případné závady před měřením vzorků.

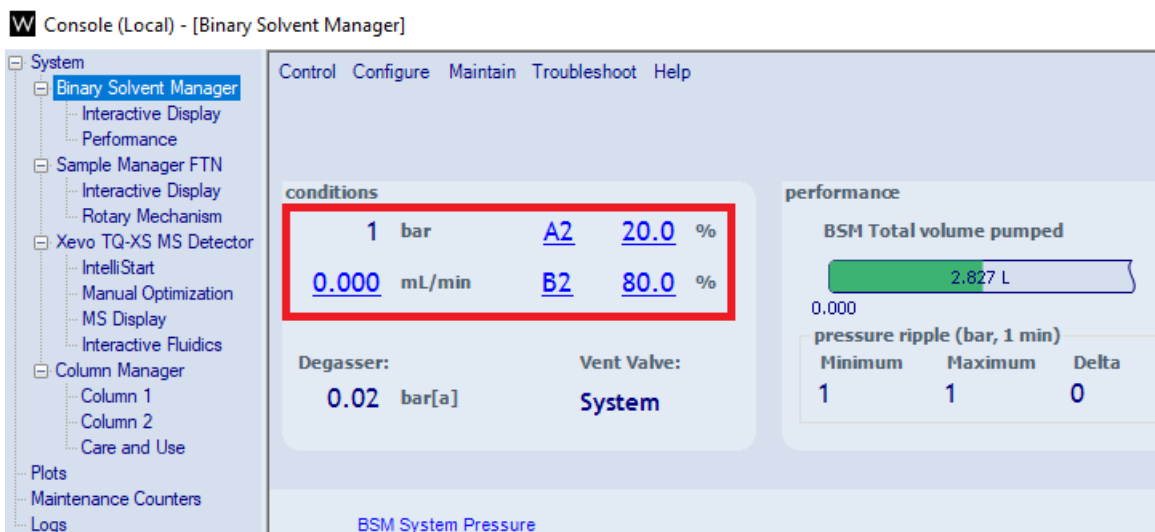
### Popis aplikace a její ovládání

V uvedeném příkladu bude pracováno se **softwarem MassLynx** od firmy Waters, který slouží k obsluze LC-MS systému. Modul Console umožňuje nastavení ekvilibračních parametrů. Po otevření Console se v levé části zobrazí hlavní položky systému. Nyní bude následovat popis jednotlivých částí, v pořadí, které zobrazuje modul Console. S těmito částmi systému bude dále pracováno v diagramech a scénáři.

### Binary Solvent Manager

#### Conditions

Systém umožňuje použití **čtyřech roztoků mobilní fáze**, která je do systému čerpána pomocí pump označených A1, A2, B1 a B2. K měření můžeme použít pumpu označenou písmenem **A** společně s pumpou B1 nebo B2. (Obdobně můžeme kombinovat pumpu **B** s pumpou A1 nebo A2.) (Dvojklikem myši můžeme nastavit příslušné pumpy.) Dále zde můžeme nastavit **složení mobilní fáze**. (Dvojklikem myši na číselnou hodnotu můžeme následně přepsat.) Posledním parametrem, který nastavujeme je **průtok mobilní fáze**. (Dvojklikem přepíšeme na příslušné číslo.)

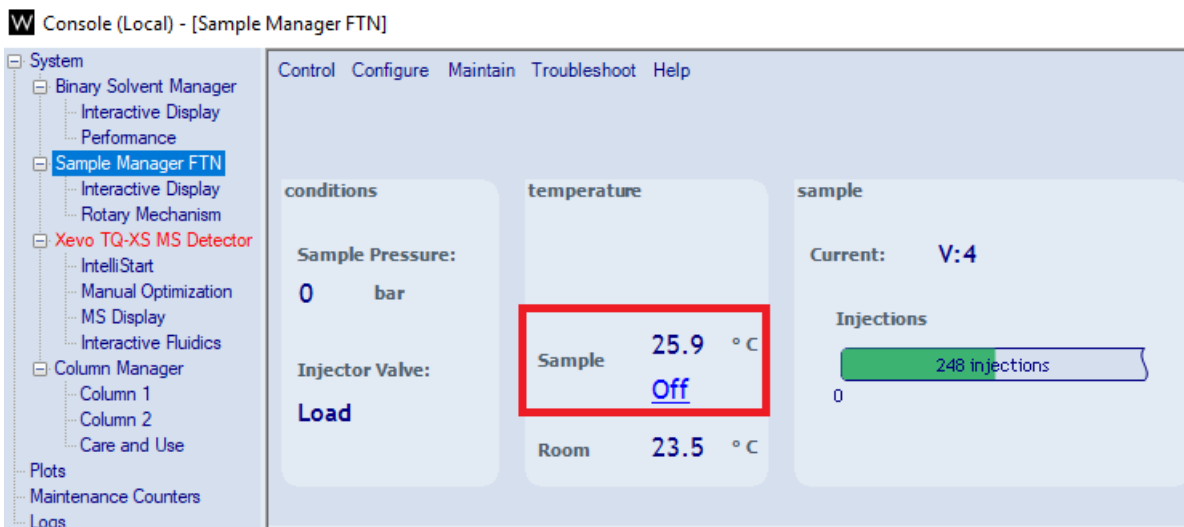


Obr. 2 Printscreen Console **Binary Solvent Manager**

## Sample Manager FNT

### Temperature

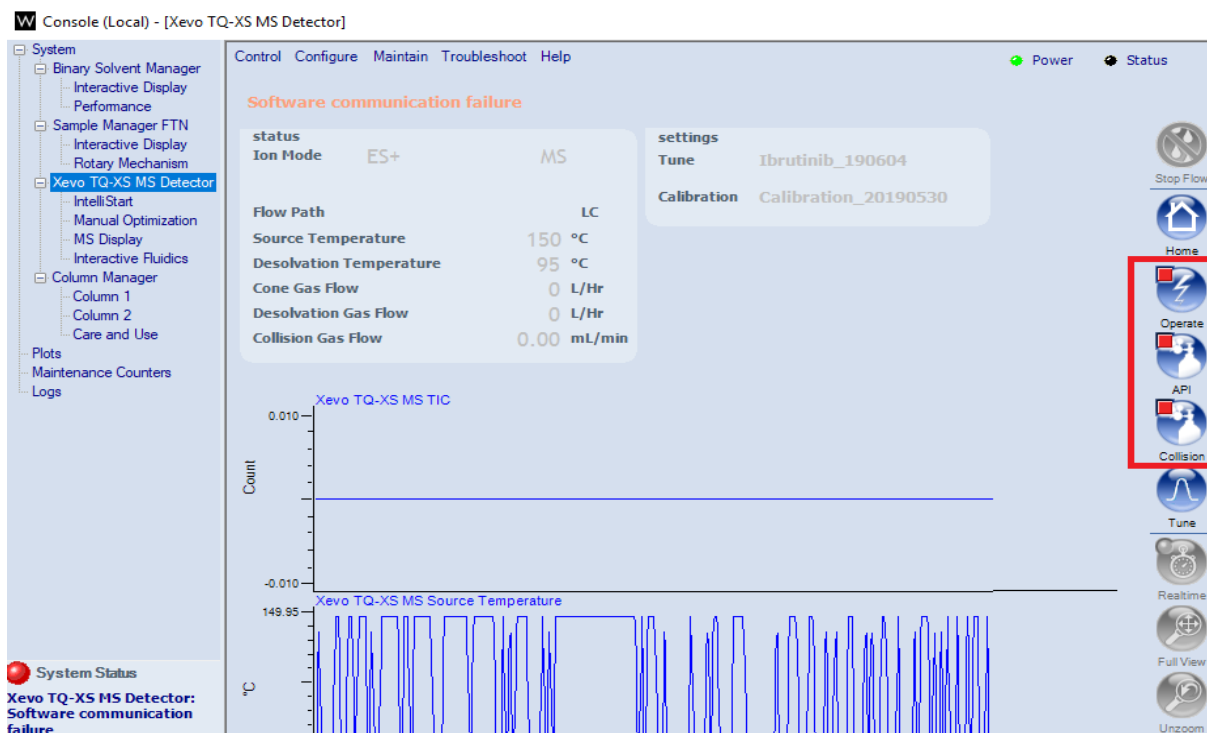
V této části nastavujeme **teplotu autosampleru**. Jedná se o část přístroje, ve které jsou připraveny vzorky k měření. (Dvojklikem myši nastavíme “On”, tím dojde k aktivaci číselné hodnoty teploty, kterou přepíšeme na příslušnou hodnotu.)



Obr. 3 Printscreen Console **Sample Manager FNT**

## Xevo TQ-XS Detector

V této části pro nás budou důležité tři **ikony Collision gas, API, Operate**, které se nachází v pravé liště označené červeným čtverečkem (tato barva signalizuje, že systém je vypnutý, zelená barva značí, že je daná ikona aktivní. Jednotlivé ikony aktivujeme dvojklikem myši.) Zde je nutné poznamenat, že ikona Operate musí být zapnuta jako poslední.



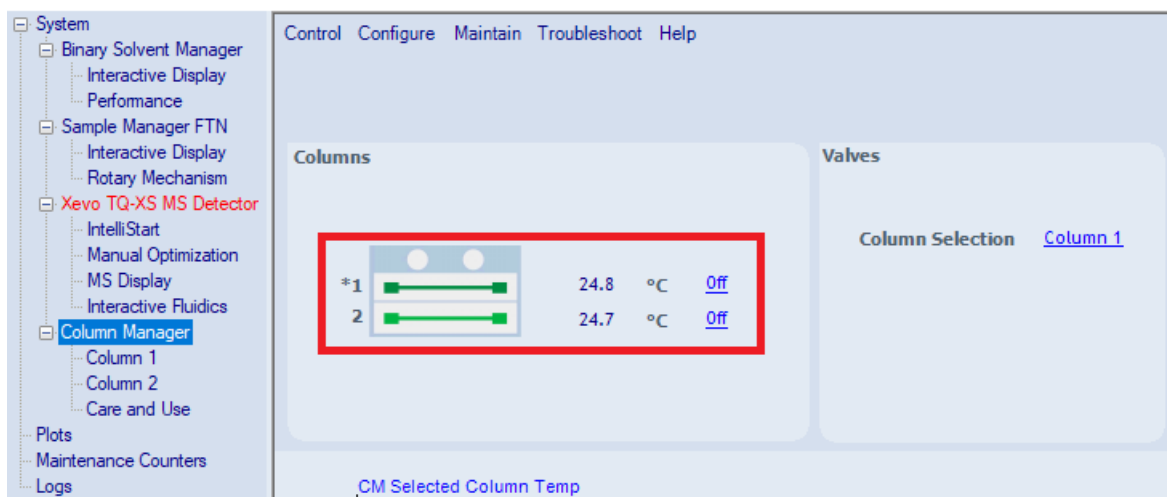
Obr. 4 Printscreen Console **Xevo TQ-MS Detector**

## Column Manager

### Columns

System umožňuje zapojení dvou kolon. K měření však používáme pouze jedno, proto operátor zkontroluje a případně nastaví používanou kolonu. **Aktivní kolona je označena hvězdičkou a tmavě zelenou barvou.** (Nastavujeme dvojklikem myši.) Dále můžeme nastavit **teplotu kolony**. (Nejprve dvojklikem myši nastavíme “On”, tím dojde k aktivaci číselné hodnoty teploty, kterou přepíšeme na příslušnou hodnotu.

W Console (Local) - [Column Manager]



Obr. 4 Printscreen Console **Column Manager**