

PRVNÍ SEZNÁMENÍ

Clarity Software

CZE

Kód/Rev.: M007/100B

Datum: 2025-10-09

Tel: +420 251 013 400
clarity@dataapex.com
www.dataapex.com

DataApex s.r.o.
Petržilkova 2583/13
158 00 Praha 5
Česká Republika

Clarity®, DataApex® a ▲® jsou ochranné známky společnosti DataApex s.r.o. Microsoft® a Windows™ jsou obchodní známky společnosti Microsoft Corporation.
Společnost DataApex si vyhrazuje právo měnit příručky bez předchozího upozornění. Nejnovější verze je možné získat na www.dataapex.com.

Autor: DK

Obsah

1 Seznámení s Clarity	1
1.1 Hlavní vlastnosti	1
1.2 Rozšíření	1
1.3 Řídicí moduly	2
1.4 Hardwarové a softwarové požadavky	2
2 Instalace	4
2.1 Výběr jazyka	4
2.2 Instalace softwaru	4
2.3 Instalace hardwaru	5
2.3.1 Instalace A/D převodníku Colibrick	6
2.4 Zapojení zařízení	6
2.4.1 Standardní kabely pro Colibrick	6
2.4.2 Chromatograf	7
2.4.3 Autosampler	8
2.5 Konfigurace Clarity	8
3 Kvalifikační procedury	12
3.1 Installation Qualification - IQ	12
3.2 Operational Qualification - OQ	13
3.3 Performance Qualification - PQ	14
4 Struktura a ovládání programu	15
5 Prohlídka stanice Clarity	17
5.1 Spuštění Single Analysis	18
5.1.1 Okno Instrument	18
5.1.2 Dialog Single Analysis	19
5.1.3 Okno Data Acquisition	20
5.1.4 Okno Chromatogram	22
5.2 Vytvoření kalibrace	23
5.2.1 Okno kalibrace	23
5.2.2 Připojení kalibrace k metodě	26
5.2.3 Připojení kalibrace ke chromatogramu	26
5.2.4 Připojení kalibrace k sérii již naměřených chromatogramů	28
5.3 Spuštění sekvenčního měření	29
5.3.1 Okno sekvence	29
6 První překážky: Časté problémy	32
6.1 Missing HW key	32
6.2 Neplatný uživatelský kód (User Code)	32

6.2.1 The User Code is not valid for version x.y.	33
6.2.2 Wrong User Code	33
6.2.3 Wrong Software Version	33
6.3 Trial Expired	34
6.4 Data Acquisition - Disabled	34

Ke zjednodušení orientace v příručce **První seznámení** a chromatografické stanici **Clarity** jsou v manuálu používány různé typy písma. Jejich význam je následující:

Otevřít soubor (kurzíva) označuje příkazy a názvy polí v **Clarity**, parametry, které lze do těchto polí zadat, nebo názvy oken a dialogových oken.

NÁZEV1 (velká písmena) označuje název souboru a/nebo složky.

AKTIVNÍ (velká písmena, kurzíva) označuje stav stanice nebo jejích částí.

[Instrument](#) (modrý podtržený text) označuje klikatelné odkazy na související kapitoly.

Tučné písmo je někdy také použito pro důležité části textu a název stanice **Clarity**. Kromě toho jsou některé sekce zobrazeny jiným formátováním než běžný text. Tyto sekce jsou formátovány následujícím způsobem:

.....
Poznámka: Prezentuje čtenáři relevantní informace.

.....
Pozor: Varuje čtenáře před nebezpečnými situacemi, poskytuje velmi důležité informace.

.....
Označuje problémový výrok nebo dotaz.

Popis: Přináší podrobnější informace o problému, popisuje jeho příčiny apod.

Řešení: Obsahuje odpověď na otázku a postup, jak problém odstranit.

1 Seznámení s Clarity

Chromatografická stanice **Clarity** je účinným nástrojem pro sběr, zpracování a vyhodnocení dat z široké škály chromatografů s přímým řízením a z libovolného plynového nebo kapalinového chromatografu s analogovým výstupem.

Clarity poskytuje nástroje pro splnění požadavků směrnice **21 CFR Part 11** amerického úřadu **FDA**.

1.1 Hlavní vlastnosti

- **Měření** - Současný sběr dat až ze čtyř chromatografů, každý s až 32 signály (4×32 signálů).
- **Integrace** - **Clarity** obsahuje dva pokročilé integrační algoritmy a široké možnosti nastavení pro detekci a kvantifikaci píků. Jemně doladěné integrační parametry lze snadno aplikovat i na další chromatogramy, čímž je zajištěno konzistentní a efektivní zpracování dat.
- **Kalibrace** - Podpora výpočtových metod s využitím interního i externího standardu, kalibrace skupin píků a referenčních píků pro přesnější identifikaci.
- **Automatizovaná měření** - Měření vzorků dle sekvenční tabulky, s autosamplerem i bez něj.
- **Audit Trail a GLP** - Vestavěné auditní záznamy a GLP nastavení pro zajištění souladu s GLP a dalšími regulačními normami.
- **Správa uživatelů** - Zavedení politik hesel, omezení přístupových práv a záznamy aktivit jednotlivých uživatelů pro bezpečný a auditovatelný provoz.
- **Post-run funkce** - Automatické zobrazení, tisk, export a spuštění jiných programů po ukončení měření.
- **Souhrnné výsledkové tabulky** - Zobrazení a tisk vybraných výsledků ze všech otevřených chromatogramů.
- **Vlastní reporty** - Přizpůsobitelné šablony a styly pro tvorbu přehledných profesionálních reportů.
- **Výkon kolony** - Výpočty symetrie, účinnosti, rozlišení píků a dalších parametrů kolony.
- **Hromadné zpracování** - Automatické zpracování, zobrazení, export nebo tisk libovolného počtu chromatogramů.
- **Uživatelské výpočty** - Uživatelsky definované sloupce ve výsledkových a souhrnných tabulkách.

1.2 Rozšíření

Rozšíření přidávají specifické funkce pro daný typ analýzy nebo konkrétní úlohu v prostředí **Clarity**.

Každé rozšíření obsahuje vlastní Demo projekt, který umožňuje vyzkoušet si jeho funkce na ukázkových datech. Testování lze provést v Demo verzi programu **Clarity**, která nevyžaduje hardwarový klíč a umožňuje simulovat akvizici pro vyzkoušení rozšíření před jeho zakoupením.

Aktuálně dostupná rozšíření:

- **SST** (System Suitability Test) - Sledování a vyhodnocení kvality měření.
- **GPC** (Gel Permeating Chromatography) - Přizpůsobeno pro analýzu a vyhodnocování dat GPC/SEC.
- **PDA** (Photo-Diode Array) - Navrženo pro vyhodnocování dat z PDA/DAD detektorů.
- **MS** (Mass Spectrometry) - Přizpůsobeno pro vyhodnocování dat z MS detektorů.
- **CE** (Capillary Electrophoresis) - Přidává nástroje a terminologii specifickou pro kapilární elektroforézu.
- **NGA** (Natural Gas Analysis) - Provádí výpočty pro analýzu plynů podle vybraných norem.
- **EA** (Elemental Analysis) - Poskytuje nástroje pro provádění a vyhodnocování analýz prvkového složení.
- **DHA** (Detailed Hydrocarbon Analysis) - Specializuje se na stanovení složek v palivech, jako je PIONA.

Podrobnosti naleznete v příslušných manuálech, které jsou k dispozici na stránkách www.dataapex.com.

1.3 Řídicí moduly

Softwarové moduly, které zajišťují rozhraní pro chromatografická zařízení, jako jsou systémy GC a HPLC, autosamplery, frakční kolektory a ventily. Přímé řízení umožňuje sledovat a ovládat zařízení přímo z prostředí **Clarity**. Instrumentová metoda, která dané zařízení ovládá, je uložena v každém změřeném chromatogramu.

Úplný seznam podporovaných zařízení najdete na www.dataapex.com.

1.4 Hardwarové a softwarové požadavky

Základní hardwarová a softwarová kompatibilita:

Nejnovější informace o požadavcích na hardware a software najdete v dokumentu **D016** nebo na stránkách www.dataapex.com v sekci *Products - Clarity - Compatible Windows OS and Hardware*.

Ověřte, že máte k dispozici:

- Volné USB porty:
 - Jeden pro HW klíč.
 - Jeden pro instalační USB (není potřeba, pokud instalátor stahujete z www.dataapex.com).
 - Další USB port v případě použití A/D převodníku pro analogovou akvizici (nepřipojuje se během instalace).
- Nainstalovaný Microsoft .NET Framework verze 4.8 nebo vyšší.
- Volný a vhodný komunikační port, pokud připojujete řízený instrument (viz manuál konkrétního modulu).

- Pro regulované prostředí:
 - Je vyžadována edice Windows Pro/Professional pro správnou konfiguraci. Podrobnosti naleznete v manuálu [M132: „Clarity in Regulated Environment“](#).

Poznámka: Při použití již nepodporovaného hardware, jako jsou: INT5, INT7, INT9, CB11, CB20, U-PAD, U-PAD2 nebo Net-PAD, nahlédněte do příslušné příručky ohledně systémových nároků a kompatibility.

2 Instalace

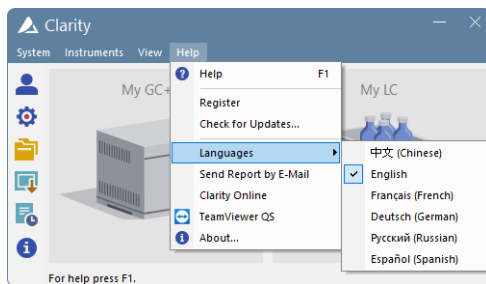
Tato kapitola vás provede procesem instalace **Clarity** a úvodním nastavením připojených zařízení.

Pozor: Před instalací **Clarity** nepřipojujte žádná zařízení, jako například **Colibrick**!

2.1 Výběr jazyka

Clarity je dostupná v *angličtině* a v následujících jazycích: *čínštině*, *francouzštině*, *němčině*, *ruštině* a *španělštině*.

Preferovaný jazyk lze zvolit na začátku instalace nebo později změnit v hlavním okně *Clarity* pomocí příkazu *Help - Languages*.



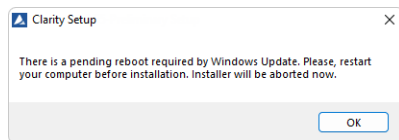
Obr. 1: Přepnutí Clarity do jiné jazykové verze

2.2 Instalace softwaru

Nastavení prostředí Windows:

- Před zahájením instalace se ujistěte, že máte správcovská práva ve Vašem systému. Doporučujeme spustit instalaci pravým tlačítkem myši pomocí volby *Spustit jako správce*. Tím zajistíte, že má daný uživatel systému Windows oprávnění číst a zapisovat do složky **Clarity** (C:\CLARITY a všech jejích podsložek), což je nutné pro správné fungování programu **Clarity**. V opačném případě systém instalaci ukončí, nebo nebude **Clarity** správně fungovat.
- Doporučujeme před instalací vypnout *Řízení uživatelských účtů* (*User Account Control, UAC*) ve **Windows**. Ve **Windows** jděte na *Start – Ovládací panely – Uživatelské účty – Uživatelské účty* a poté klikněte na *Změnit nastavení nástroje Řízení uživatelských účtů*. V dialogovém UAC okně posuňte jezdec dolů na volbu *Nikdy neupozorňovat*.

- Ujistěte se, že je Váš systém Windows plně aktualizován. Pokud jsou k dispozici nevyřízené aktualizace, instalace programu **Clarity** bude ukončena a zobrazí se následující hlášení:



Obr. 2: Hlášení o čekající aktualizaci Windows

- V regulovaném prostředí je třeba nastavit uživatelské účty systému Windows v souladu s příslušnými regulačními požadavky. Více informací naleznete v manuálu [M132: Clarity in Regulated Environment](#).

Instalace Clarity:

- Vložte instalační médium **Clarity** do počítače, nebo si stáhněte aktuální **Clarity** verzi z www.dataapex.com/downloads.
- Spusťte soubor INSTALL.EXE.
- Průvodce instalací Vás provede celým procesem včetně vytvoření zástupce **Clarity** v nabídce *Start* a **Clarity** ikony  na ploše.
- Zadejte uživatelský kód (User Code), který jste obdrželi při nákupu stanice, nebo spusťte program bez něj pro aktivaci zkušebního Trial režimu.

Zkušební Trial režim:

- V dialogovém okně *Clarity User Code* zvolte možnost *Enter User Code later* (zadat uživatelský kód později) a klikněte na tlačítko *Next*. Pokud není uživatelský kód zadán, **Clarity** bude spuštěna v tzv. zkušebním režimu (Trial). Tento režim je funkční po dobu 30 dní nebo 100 spuštění (podle toho, co nastane dříve) a umožňuje využití všech funkcí **Clarity**. Po vypršení zkušební doby budete vyzváni k zadání uživatelského kódu (User Code), který jste obdrželi se svou stanicí, nebo prodlužovacího trial kódu. Pokud kód nebude zadán, program Clarity se nespustí.

Pozor: Důrazně doporučujeme **neinstalovat** program **Clarity** do adresáře PROGRAM FILES.

2.3 Instalace hardwaru

Následující podkapitoly popisují instalaci **HW key** a stručnou instalaci A/D převodníku **Colibrick** (netýká se případů přímého řízení chromatografu).

Podrobný popis hardwaru, jeho instalace a řešení případných problémů je k dispozici v samostatných příručkách (viz www.dataapex.com/downloads).

Pozor: Než připojíte jakékoli externí zařízení k počítači, nainstalujte nejprve **Clarity**.

2.3.1 Instalace A/D převodníku Colibrick

Pozor: Nejdříve nainstalujte **Clarity**, teprve poté zapojte **Colibrick** do **USB** portu. Ovladače budou nainstalovány automaticky během instalace **Clarity**.

- Nainstalujte **Clarity** z instalačního média nebo si stáhněte nejnovější verzi z www.dataapex.com/downloads.
- Připojte **Colibrick** kabelem do **USB** portu v počítači.
- Po připojení bude **Colibrick** automaticky detekován operačním systémem.

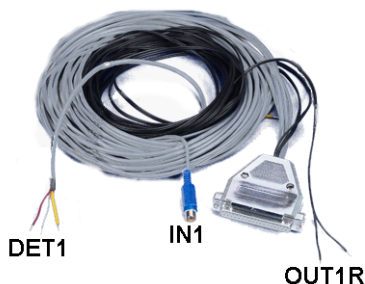
Poznámka: Více převodníků **Colibrick** lze rozlišit podle jejich unikátních sériových čísel. I při zapojení do jiného **USB** portu **Clarity** automaticky přiřadí daný **Colibrick** odpovídajícímu *instrumentu*. Restart počítače není nutný.

2.4 Zapojení zařízení

Zapojení zařízení závisí na konkrétní konfiguraci. Balení stanice **Clarity** s A/D převodníkem **Colibrick** obsahuje **sadu kabelů**, která se skládá ze signálového, startovacího a digitálního výstupního kabelu pro propojení **Clarity** s chromatografem. Součástí sady je také **USB** kabel pro připojení převodníku **Colibrick** k počítači.

Následující podsekcce obsahují informace o zapojení A/D převodníku. Pokud používáte detektory s přímým digitálním řízením, není potřeba A/D převodník – v takovém případě pokračujte kapitolou "**Konfigurace Clarity**" na str. 8. Seznam digitálně řízených přístrojů najdete na stránce www.dataapex.com/controls.

2.4.1 Standardní kabely pro Colibrick



Obr. 3: Standardní kabel Colibrick pro jeden detektor

Signálové kabely

Kabely označené jako „**DET1**“ až „**DET4**“ (dle počtu kanálů) jsou dodávány bez konektorů, s odizolovanými a pocínovanými konci – červený/hnědý (+), bílý (–) a stínění (analogová zem).

Startovací (markerové) kabely

Kabely označené jako „**IN1**“ až „**IN4**“ (dle počtu kanálů) jsou zakončeny konektorem RCA. Každý startovací kabel obsahuje dva další kabely: jeden s

volnými vodiči [červený (+), stínění (digitální zem)] pro přímé propojení s chromatografem nebo s ventilem pro řízené spuštění přes ventil, a druhý zakončený tlačítkem pro případy, kdy není k dispozici startovací kontakt a je nutné zahájit měření ručně.

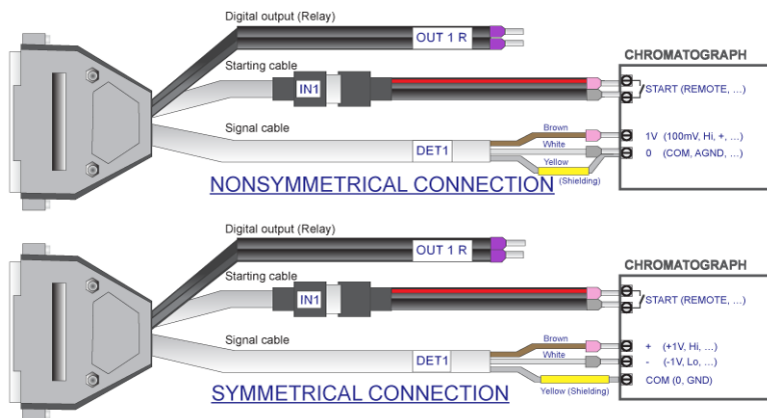
Kabely digitálních výstupů

Reléové kontakty označené jako „**OUT 1R**“ až „**OUT 4R**“ (dle počtu kanálů) jsou zakončeny volnými vodiči. Používají se pro synchronizaci autosamplerů (AS) v aktivní sekvenci bez použití řídícího modulu autosampleru (AS Control modul).

Na straně převodníku **Colibrick** je kabel zakončen 37pinovým konektorem CANNON SUB D (samice).

2.4.2 Chromatograf

Kabely zapojte podle jednoho z diagramů uvedených na "Možné typy propojení stanice Clarity s chromatografem" below Symetrické zapojení použijte pouze v případě, že si jste jisti, že chromatograf/detektor má symetrický výstup – doporučujeme prostudovat manuál k danému přístroji.



Obr. 4: Možné typy propojení stanice Clarity s chromatografem

Poznámka: Od uvedení převodníku **INT7** používají všechny A/D převodníky **DataApex** stejný standardní konektor **INT7**.

Připojení signálových kabelů:

Signálové vstupy převodníku **Colibrick** jsou symetrické: červený/hnědý (+), bílý (-), žluté stínění (= analogová zem/měděné stínění).

Pozor: Stínění musí být zapojeno, protože zároveň slouží jako analogová zem vůči které se signál měří. Pokud má detektor nesymetrický výstup (pouze dva vodiče, svorky, piny nebo šroubky), musí být stínění zapojeno k bílému vodiči! Žádný vodič signálového kabelu nesmí zůstat nezapojen.

Snažte se připojit signálový kabel na výstup detektoru chromatografu s co nejvyšší úrovní signálu. Tento výstup bývá obvykle označen jako **INTEGRATOR** (signál

přibližně 1 V). Úroveň signálu na výstupu označeném **RECORDER** bývá jen asi 10 mV.

Pro snadnější manipulaci s kabeláží nabízíme propojovací krabičku se šroubovacími kontakty **SV9 Terminal board** (p/n **SV9**).

Připojení startovacích kabelů:

Startovací vstup reaguje na změnu TTL logické úrovně (5 V) nebo na sepnutí jakýmkoliv kontaktem (tlačítkem, kontaktem relé). Může být použit např. pro vzdálený start z chromatografu nebo ventilu s kontaktem spínaným při manuální injekci.

Vstup implicitně reaguje na změnu z *HIGH* na *LOW* úroveň (nebo na sepnutí kontaktu). Funkci vstupu lze změnit přepnutím položky *Down* na *Up* v sekci *Ext. Start/Stop* dialogového okna *Method Setup - Measurement* (dostupného z okna *Instrument* pomocí příkazu *Method - Measurement*).

2.4.3 Autosampler

Nejčastější způsoby zapojení autosamplerů jsou popsány v kapitole *Connecting Autosamplers* v [User Guide](#). Zahrnuto je i nastavení synchronizace startu pomocí funkcí *Ext. Start Dig. Input* a *Ready Dig. Output*.

Autosamplery ovládané přímo pomocí modulu **AS Control** (p/n **A26**) jsou popsány ve svých příslušných příručkách.

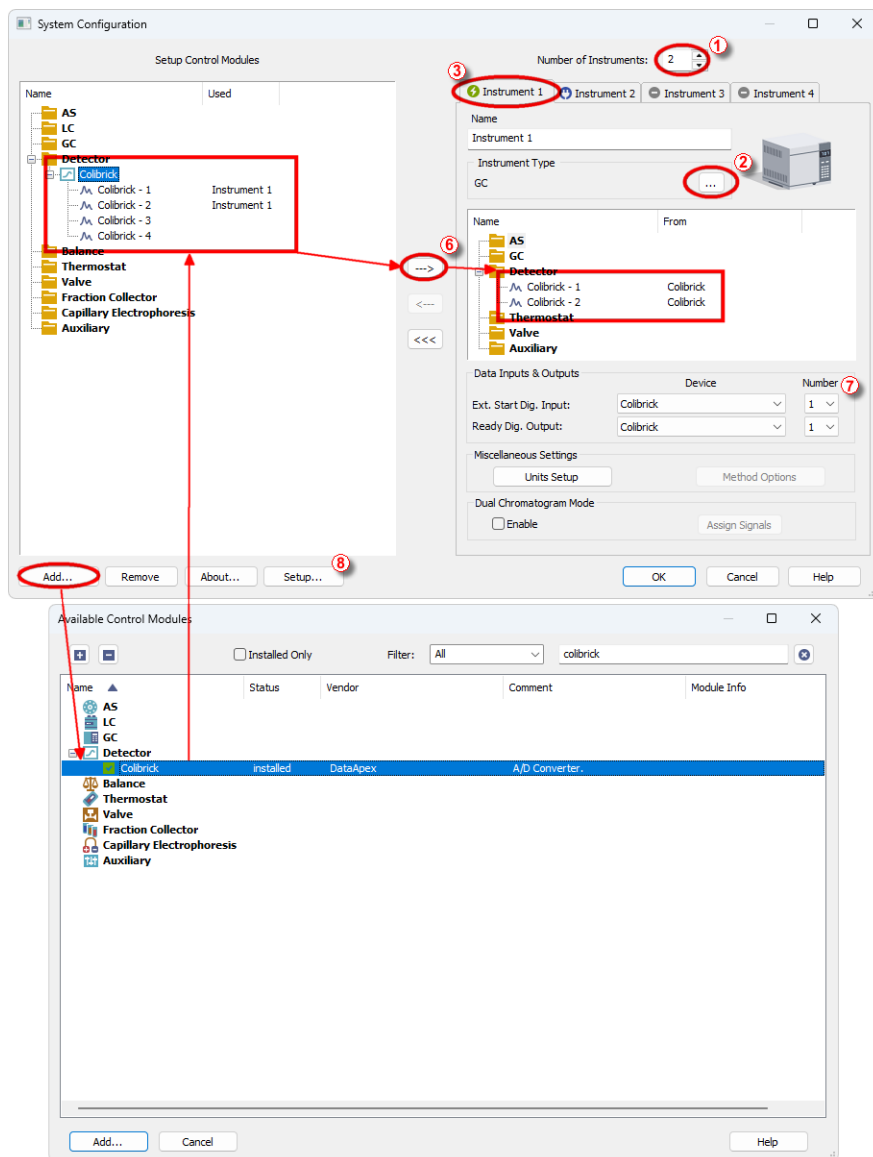
2.5 Konfigurace Clarity

Tato kapitola vás provede základním nastavením instrumentu ve **Clarity**. Postup je podobný pro většinu řídicích modulů, ale pro detailní informace vždy nahlédněte do příručky daného zařízení. Tu lze snadno otevřít stisknutím **F1** ve **Clarity** a následným přechodem do sekce *Control Modules*.

Jako příklad projdeme konfiguraci převodníku **Colibrick**:

1. Otevřete dialog *System Configuration*.

V hlavním okně **Clarity** klikněte na ikonu  na levém panelu nástrojů nebo použijte příkaz *System – Configuration*. Otevře se dialog *System Configuration*, kde se spravují instrumenty a řídicí moduly. Viz **Obr. 5** na str. 9.



Obr. 5: Dialog System Configuration

2. Zadejte hodnotu do pole *Number of Instruments* ① .

V horní části dialogu *System Configuration* nastavte požadovaný počet instrumentů. Každý instrument reprezentuje samostatný chromatografický systém.

Počet lze upravit šipkami nebo přímým zadáním. Maximálně lze nastavit 4 instrumenty.

Na pravé straně dialogu je pod polem *Number of Instruments* každý instrument zobrazen jako samostatná záložka ③ (např. *Instrument 1*, *Instrument 2*). V každé záložce lze nastavit typ instrumentu, přiřadit řídicí moduly a provést další konfigurace.

Poznámka: Měření lze provádět pouze na zakoupených instrumentech. Ostatní lze používat jako „offline“ instrumenty pro vyhodnocování chromatogramů z jiných projektů.

3. Nastavte *Instrument Type* ② .

Klikněte na tlačítko  vedle typu instrumentu a otevře se dialog *Instrument Type*. Zvolte odpovídající typ – obvykle *GC* nebo *LC*.

Další typy a podtypy instrumentů jako *PDA* nebo *GPC* mohou být dostupné, pokud byla zakoupena a aktivována příslušná rozšíření.

4. Otevřete dialog *Available Control Modules*.

Klikněte na tlačítko *Add* ④ ve spodní části dialogu. Otevře se dialog *Available Control Modules* se seznamem podporovaných zařízení.

5. Vyhledejte zařízení.

V dialogu *Available Control Modules* vyhledejte své zařízení. V našem příkladu zadejte do filtru "*Colibrick*".

Vyberte modul a klikněte na *Add*.

6. Nakonfigurujte zařízení.

Po kliknutí na *Add* se otevře dialog *Setup* vybraného řídicího modulu. Každý modul má vlastní nastavení, obvykle je třeba zadat způsob komunikace (např. IP adresu, COM port apod.). Dialog *Setup* lze později znovu otevřít výběrem zařízení a kliknutím na *Setup...* ⑤ .

V našem případě se otevře dialog *DataApex Colibrick Setup*. Nastavení nyní ponecháme ve výchozím stavu.

Dialog potvrďte kliknutím na *OK*.

DataApex Colibrick Setup

Device: Colibrick (Serial No: 6802)

Channel 1

Name: Colibrick - 1 ☐ Inversion of Signal ☒ Bipolar ☐ Synchronize Start with Digital Input

Set Units... Quantity: Voltage Units: mV Digital Input 1:
 Offset: 0 mV Autoprefix: Yes
 Coefficient: 1 mV / 1 mV

Channel 2

Name: Colibrick - 2 ☐ Inversion of Signal ☒ Bipolar ☐ Synchronize Start with Digital Input

Set Units... Quantity: Voltage Units: mV Digital Input 1:
 Offset: 0 mV Autoprefix: Yes
 Coefficient: 1 mV / 1 mV

Channel 3

Name: Colibrick - 3 ☐ Inversion of Signal ☒ Bipolar ☐ Synchronize Start with Digital Input

Set Units... Quantity: Voltage Units: mV Digital Input 1:
 Offset: 0 mV Autoprefix: Yes
 Coefficient: 1 mV / 1 mV

Channel 4

Name: Colibrick - 4 ☐ Inversion of Signal ☒ Bipolar ☐ Synchronize Start with Digital Input

Set Units... Quantity: Voltage Units: mV Digital Input 1:
 Offset: 0 mV Autoprefix: Yes
 Coefficient: 1 mV / 1 mV

Device Setup

Digital Input Names: Supply Frequency:
 Digital Output Names: ☒ 50 Hz
☐ 60 Hz

Obr. 6: Okno pro nastavení Colibrick

7. Přidáte zařízení k *Instrumentu*.

Stále v dialogu *System Configuration* přetáhněte zařízení z levé strany doprava nebo použijte tlačítko .

8. Nastavte Data Inputs & Outputs ⑦.

Zde určujete, jak bude spouštěno měření.

Pro podrobnosti přizpůsobené konkrétnímu zařízení nahlédněte do jeho příručky (stiskněte **F1** v okně *Setup* příslušného zařízení). Pro případy zahrnující autosamplers si prostudujte kapitolu *Connecting Autosamplers* v [User Guide](#).

9. Uložte konfiguraci.

Klikněte na **OK** pro potvrzení a zavření dialogů.

3 Kvalifikační procedury

Mnoho laboratoří klade velký důraz na kvalitu svých analytických dat. Jedním z požadavků pro zajištění spolehlivosti výsledků je validace veškerého vybavení a postupů používaných ke sběru dat. Pro chromatografické stanice bývají obvykle relevantní tři úrovně validace (kvalifikace):

- [Installation Qualification](#)
- [Operational Qualification](#)
- [Performance Qualification](#)

3.1 Installation Qualification - IQ

Installation Qualification (IQ) je procedura, která ověřuje úspěšnost instalace stanice a správnost verzí souborů. **IQ** je nedílnou součástí instalační procedury chromatografické stanice **Clarity**.

Jak provést Installation Qualification

- Nainstalujte **Clarity** podle pokynů *instalačního průvodce*.
- Spustíte **Clarity**.
- Spustíte IQ z hlavního okna **Clarity** pomocí příkazu *Help – IQ Report*.
- Pokud instalace proběhla korektně, zobrazí se stav: "*Installation Qualification Test: Passed*".

Installation Qualification Report

Date	03.05.2023, 00:18
Serial number of application	
User Code	
Version of application	Clarity version 9.0.0.55
Build date of application	29.04.2023, 05:23
Instruments	3
Extensions	SST; GPC; PDA; EA; CE; MS; NGA; DHA; GCxGC; MS-TOF
Controls	GC; LC; AS
Certification file	C:\Clarity\Bin\liq.chk
Checksum of cert. file	4494D5B4E0B603E
Date of cert. file	29.04.2023, 06:41
User	Test
System	Microsoft Windows 11 Professional version 10.0 (Build 22000)
Acquisition and hardware devices	Key Rockety 4ND OQ Validation detector

Core Files, Embedded Components: Passed

Files

[Hide files list](#)

File	Path	Version	Size	File date	Status
advantechcf122acfc.rb	c:\clarity\bin\utils\uni_drivers\advantec	-	35748	29.04.2023, 05:16	Passed
advioncms.dll	c:\clarity\bin	6.4.14.1	487936	29.04.2023, 06:28	Passed
AdvionCommon.dll	C:\Clarity\Bin	6.4.14.1	30208	29.04.2023, 06:28	Passed

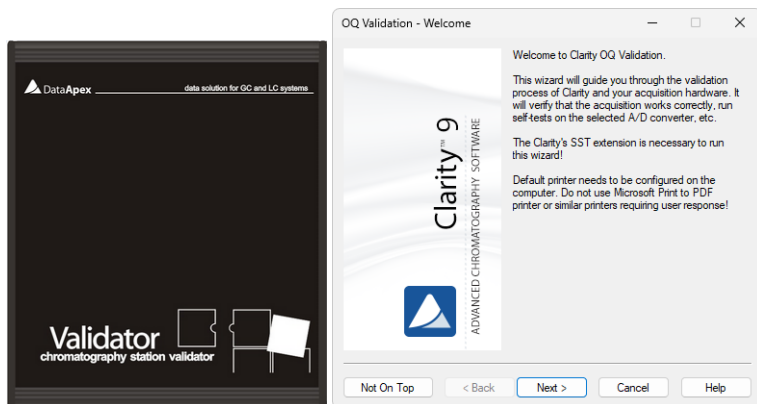
Obr. 7: Okno IQ

- Pokud **Installation Qualification** selže, doporučujeme odinstalovat program pomocí **Uninstall.exe** a poté **Clarity** znovu nainstalovat. Pokud kvalifikace opět nevyjde, kontaktujte podporu DataApex (support@dataapex.com).

Poznámka: Nejčastější příčinou neúspěšné instalační kvalifikace ("Failed") bývá instalace upgradu přes stávající, která byla původně nastavena pomocí volby "Full" v dialogu instalace, a je následně přepsána volbou "Typical" nebo "Custom". Ačkoliv tento postup sám o sobě nezpůsobí žádné chyby, může vést k nesouladu kontrolních součtů souborů, protože některé soubory zůstávají zachovány z původní instalace.

- Report **Installation Qualification** lze vytisknout, zkopírovat do schránky systému, odeslat e-mailem apod. Soubor s reportem je uložen jako **IQ.html** ve složce CFG.

3.2 Operational Qualification - OQ



Obr. 8: DataApex Validator 2 a OQ Validation Wizard

Operational Qualification (OQ) je procedura určená k ověření, že stanice pracuje v souladu se specifikacemi výrobce. **OQ** je zajištěna pomocí validačního balíčku (**Validation Kit**, volitelné příslušenství), který obsahuje přesný generátor píků a sadu metod a reportů používaných v rámci validačního procesu. Pro spuštění **OQ** je nezbytný modul **System Suitability Test (SST)**, což je volitelné rozšíření programu **Clarity**.

Jak použít Operational Qualification

Pro provedení **OQ** spustíte **OQ Validation Wizard** ze složky CLARITY\BIN\OQ_VALIDATION. Průvodce vás provede jednotlivými kroky validační procedury **OQ**.

OQ lze provést dvěma způsoby:

1. Validace pomocí A/D převodníku

Pro tento typ validace je vyžadován **Colibrick** nebo jiný DataApex A/D převodník a **validační generátor píků** (součást validačního balíčku **Validation Kit**, p/n **CVK**).

Signál generovaný **validátorem** je přijat A/D převodníkem a naměřené hodnoty jsou srovnány s očekávanými. Tento validační protokol ověřuje celý akviziční řetězec – od vstupu analogového signálu až po výpočet výsledků.

2. Validace pomocí virtuálního detektoru

Pro systémy s digitální akvizicí je toto jediný možný způsob validace. Vstupní signál je simulován řídicím modulem **virtuálního detektoru**, který je schopen odeslat data do **Clarity** stejně, jako by je posílal opravdový chromatografický instrument. Tím je zajištěno, že digitální signál je po přijetí z detektoru správně zpracován.

Virtuální detektor je součástí softwaru **Clarity**, a pro tento typ validace tedy není zapotřebí žádný dodatečný hardware ani řídicí modul.

Poznámka: Validace **OQ** trvá přibližně 50 minut a během této doby není možné v programu **Clarity** provádět analýzy.

Validační balíček **Validation Kit** (p/n: **CVK**) i rozšíření **SST Extension** (p/n: **A22**) je možné zakoupit samostatně. Celý validační proces je podrobně popsán v manuálu **Validation Kit** (M039).

3.3 Performance Qualification - PQ

Performance Qualification (PQ) je procedura, která ověřuje, zda je analytický systém vhodný pro daný typ analýzy. Celkový výkon systému je testován na základě požadavků stanovených ve specifikacích výrobce. K tomuto účelu lze v programu **Clarity** použít přídatný modul **System Suitability Test (SST)**. **PQ** musí být provedena v souladu s platnými standardními operačními postupy (SOP), zařízeními a metodikou přímo na místě. Z tohoto důvodu DataApex neposkytuje žádné předpřipravené **PQ** procedury.

SST rozšíření (p/n **A22**) je možné dokoupit ke stanici i dodatečně.

4 Struktura a ovládání programu

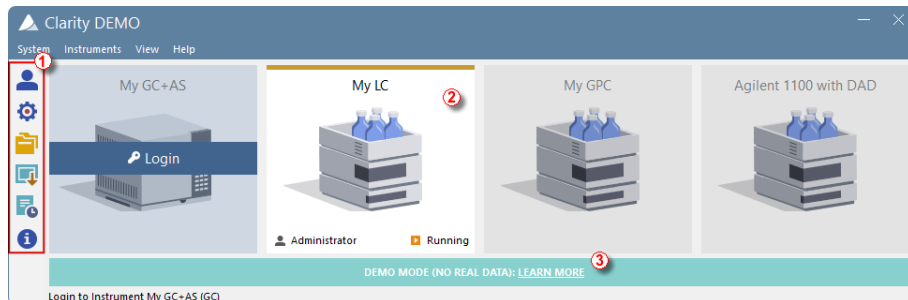
Stanice **Clarity** má hierarchickou strukturu. Pracuje s tzv. instrumenty. Všechny stroje připojené ke stejnému instrumentu fungují jako jeden systém, v případě detektorů mají stejnou časovou osu.

Kliknutím na ikonu *Clarity* se zobrazí hlavní okno *Clarity* se jmény nastavených instrumentů.

Poznámka: Pokud máte speciální verzi **Clarity**, jako např. Demo, Offline nebo Distributor, zobrazí se pod dlaždicemi jednotlivých instrumentů barevný informační pruh

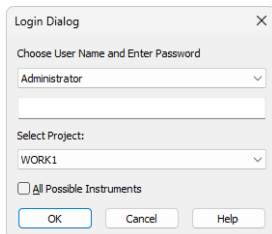
③ .

Hlavní okno *Clarity* je určeno ke konfiguraci chromatografických stanic, správě přístupových práv a volbě základních adresářů pro ukládání dat ① . Zobrazuje také stav přihlášených instrumentů ② .



Obr. 9: Hlavní okno Clarity

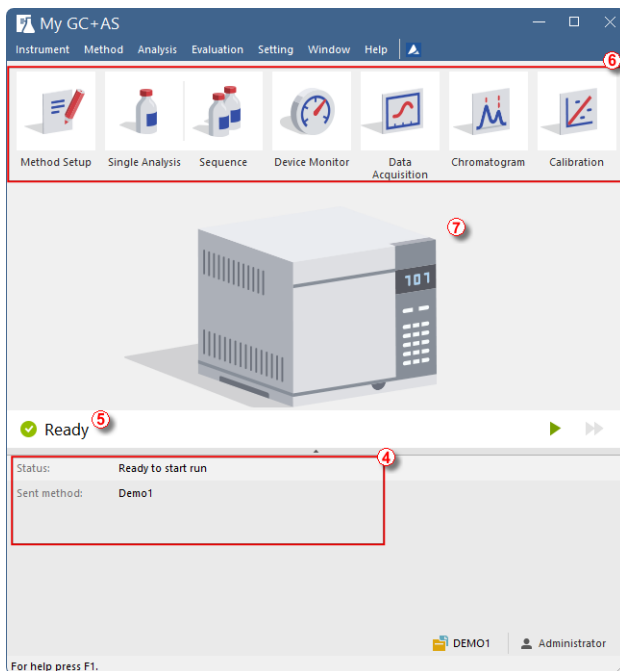
Vyberte *Instrument 1*. Po kliknutí na obrázek chromatografu budete vyzváni k přihlášení zadáním uživatelského jména (*User Name*) a výběrem projektu (ten lze později změnit). Pokračujte stisknutím tlačítka OK.



Obr. 10: Přihlašovací dialog

Může se zobrazit dialog s výzvou k adaptaci metody. Klikněte na Yes a upravte metodu v okně *Method Setup*. Pokud zkoušíte **Clarity** s demo daty, stačí prozatím metodu uložit. Pomocí tlačítka *Help* si můžete zobrazit nápovědu k adaptaci. Poté se zobrazí okno *Instrument*.

Okno *Instrument* slouží ke sběru a vyhodnocení dat na připojeném chromatografu. Zobrazit lze až čtyři nezávislá okna *Instrument*. Jak je vidět na **Obr. 9** na str. 15, *Instrument 2* je otevřen a spuštěn.



Obr. 11: Okno *Instrument*

Každé okno *Instrument* obsahuje informační tabulku ④, stavový řádek ⑤, dlaždice pro Method Setup, Single Analysis, Sequence, Device Monitor, Data Acquisition, Chromatogram a Calibration ⑥ a nakonec obrázek přístroje ⑦ (obrázek je ve výchozí velikosti okna skrytý).

Instrumenty jsou odlišeny barvou záhlaví okna *Instrument* a názvem instrumentu, který je zobrazen v záhlaví každého okna *Instrument*. Tento název odpovídá názvu zobrazenému nad příslušným chromatografem v hlavní okně *Clarity*.

Všechna relevantní okna pro práci v okně *Instrument* jsou přístupná prostřednictvím příkazů z hlavního menu nebo kliknutím na jejich ikony.

5 Prohlídka stanice Clarity

Následující sekce Vás provedou spuštěním jedné analýzy (kapitola "**Spuštění Single Analysis**" na str. 18), vytvořením kalibrace (kapitola "**Vytvoření kalibrace**" na str. 23) a sekvenčním měřením (kapitola "**Spuštění sekvenčního měření**" na str. 29).

Tyto sekce poskytují postup krok za krokem, který by měl být dodržen ve stanoveném pořadí. Některé části mohou být přeskočeny, protože jejich výstupní soubory jsou již součástí příkladů – v takovém případě na to budete upozorněni. Volitelné postupy jsou uvedeny v oblastech „Poznámka“ a pro dosažení cíle je není nutné provádět.

Software **Clarity** je intuitivní a snadno ovladatelný i bez rozsáhlého školení. První analýzu lze spustit během méně než minuty po instalaci stanice a konfiguraci hardwaru.

Tato prohlídka je určena především pro uživatele, kteří nainstalovali **Clarity Demo**, kde je kromě demonstračních dat připravena i konfigurace. Pokud chcete tuto prohlídku absolvovat v plné verzi **Clarity** s demo daty, doporučujeme nastavit Demo Detektor k použitému instrumentu (více informací najdete v tématu [Konfigurace](#)).

Funkce **Clarity** lze samozřejmě testovat i v jiných projektech, ale soubory uvedené v této příručce v nich nebudou dostupné.

Poznámka: Stisknutím klávesy **F1** nebo tlačítka *Help* zobrazíte nápovědu k právě otevřenému oknu nebo dialogu. V nápovědě slouží záložka *Index* pro hledání podle klíčových slov a záložka *Search* pro fulltextové vyhledávání.

5.1 Spuštění Single Analysis

K dispozici je jednoduchý projekt DEMO2, který je zaměřen na základní funkce. Ukazuje, jak spustit jednotlivou analýzu ([Dialog Single Analysis](#)), sledovat sběr dat ([Okno Data Acquisition](#)) a zpracovat výsledný chromatogram ([Okno Chromatogram](#)).

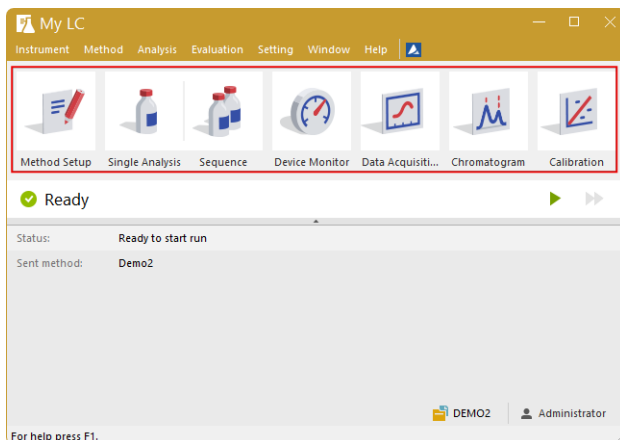
5.1.1 Okno Instrument

1. Spustíte stanici **Clarity**. Zobrazí se hlavní okno.
2. Otevřete **Instrument**, který je připraven k testování analýzy **Single Analysis**. V **Clarity Demo** je to **Instrument 2**. Pro otevření použijte příkaz *Instrument - Login to Instrument X* nebo klikněte na jeho ikonu. Zobrazí se dialog *Login Dialog*.
3. Pole uživatele nechte vyplněné předvoleným jménem *Administrator*. V rozbalovací nabídce *Select Project*: vyberte možnost *DEMO2* a stiskněte **OK**.

Požadovaný demo projekt můžete také načíst do okna *Instrument* pomocí příkazu *Instrument - Project...*, následně klikněte na tlačítko *Open...* a vyberte projekt **DEMO2**. Tímto způsobem se načtou všechny potřebné soubory.

Poznámka: Vlastní uživatelské účty můžete vytvořit z hlavního okna *Clarity* pomocí příkazu *System - User Accounts...*

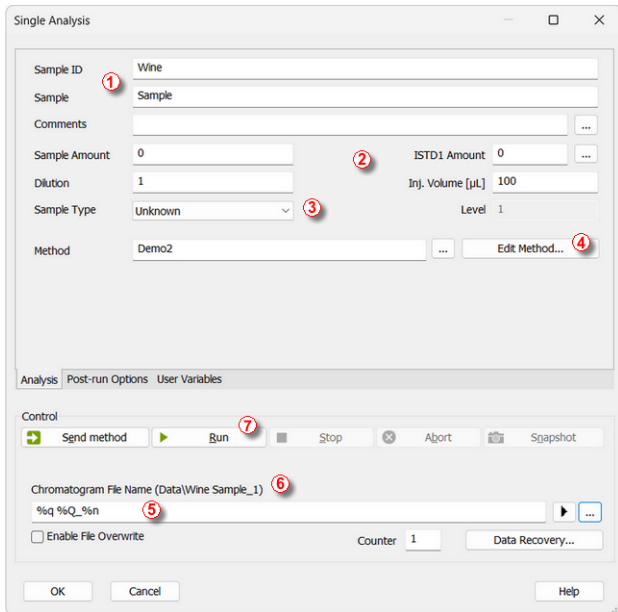
Otevře se okno *Instrument*. **Obr. 12** na str. 18 ukazuje nejdůležitější ikony v okně *Instrument*. Během této prohlídky se postupně podíváme na všechna okna vyvolaná těmito ikonami.



Obr. 12: Okno Instrument

5.1.2 Dialog Single Analysis

Tlačítkem *Single Analysis*  v okně *Instrument* otevřete dialog *Single Analysis*.



Obr. 13: Dialog Single Analysis

- Pole na záložce *Analysis* obsahují informace o vzorku. Můžete nastavit hodnoty podle **Obr. 13** na str. 19 jako typické nastavení analýzy.
- Pole *Sample ID* a *Sample* ① jsou pouze informativní a jejich hodnoty lze pomocí proměnných přenést do názvu chromatogramu.
- Hodnoty v polích *Sample Amount*, *Dilution*, *ISTD Amount* a *Inj. Volume* ② lze využít pro další výpočty.
- Zvolením *Standard* v rozevíracím seznamu *Sample Type* ③ a zadáním hodnoty do pole *Level* označíte vzorek jako kalibrační standard a chromatogram bude uložen do podsložky CALIB.
- Vzorek bude měřen podle metody zvolené v poli *Method*. Metodu lze zvolit tlačítkem .
- Tlačítko *Edit Method...* ④ otevře dialog *Method Setup*, kde můžete upravit parametry metody. Zkontrolujte nastavení parametru *Autostop* (musí být povoleno) a *Run Time* (7.5 minut). Do dialogu *Single Analysis* se vraťte stiskem tlačítka OK.
- Pole *Chromatogram File Name* ⑤ slouží k nastavení názvu výsledného chromatogramu. Můžete kombinovat prostý text s proměnnými, které přidávají

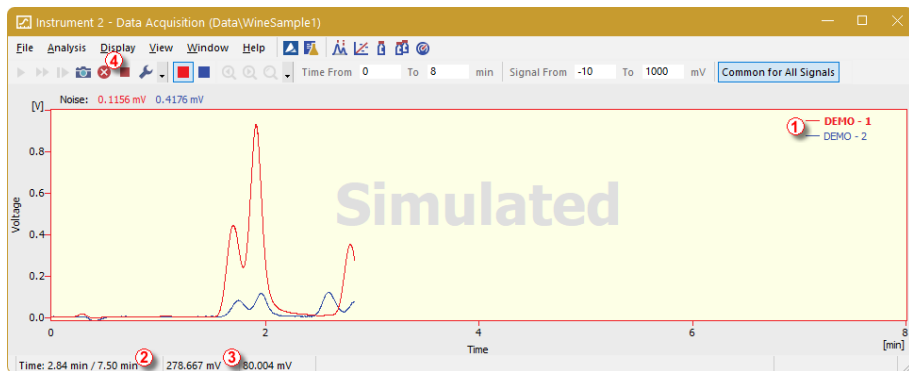
datum, čas, jméno vzorku nebo jiné parametry pro vytvoření jedinečného názvu. Výsledný název se zobrazuje nad tímto polem ⑥ v závorkách.

Poznámka: Kompletní seznam dostupných proměnných se zobrazí po kliknutí do pole a výběru ikony .

- Po nastavení parametrů spusťte analýzu stiskem tlačítka *Run* ⑦. Dialog *Single Analysis* se zavře. Pokud jej otevřete znovu, zobrazí se další tři tlačítka (*Stop*, *Abort*, *Snapshot*) pro zastavení nebo přerušení analýzy, případně vytvoření náhledového chromatogramu (viz kapitola "Okno Data Acquisition" na str. 20).
- Zavřete dialog *Single Analysis* a vraťte se do okna *Instrument*.

5.1.3 Okno Data Acquisition

- V okně *Instrument* sledujte stavový řádek (*Status line*) (viz Obr. 12 na str. 18). Probíhající akvizice je signalizována stavem *RUNNING* a vedle se zobrazuje aktuální čas běhu.
- Pro sledování průběhu a případné ovládání akvizice klikněte na ikonu *Data Acquisition*  (viz Obr. 12 na str. 18), která otevře okno *Data Acquisition*.
- Podle konfigurace vašeho instrumentu se může zobrazit jeden nebo více signálů. Počet detektorů (signálů) a jejich názvy jsou viditelné v pravém horním rohu grafu ①.



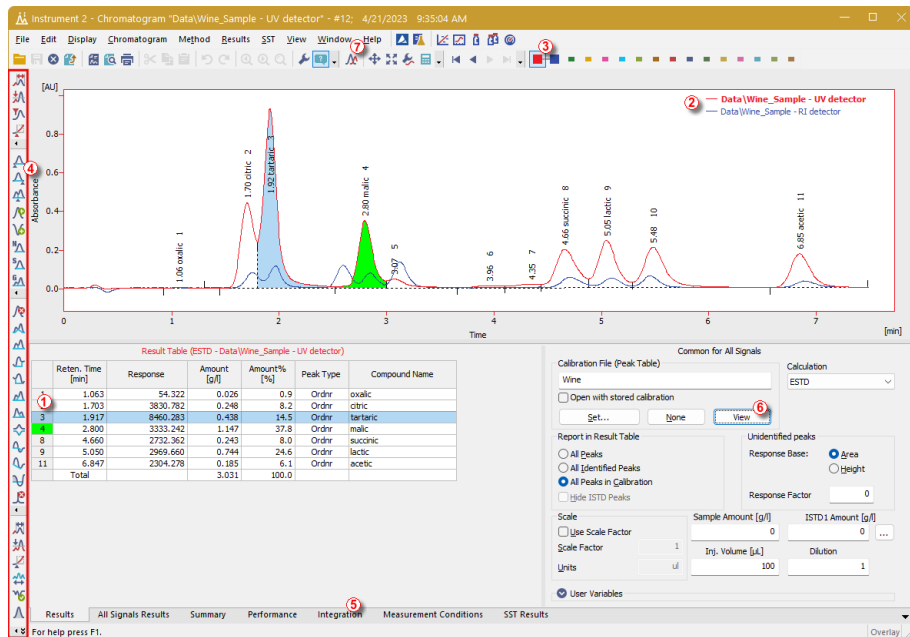
Obr. 14: Okno Data Acquisition

- Ve spodní části okna *Data Acquisition* ve stavovém řádku (*Status bar*) je zobrazen uplynulý čas analýzy ②, hodnoty signálu jednotlivých detektorů ③ a jejich jednotky.
- Ikony *Stop*  a *Abort*  ④ umožňují ukončení analýzy. **Clarity** při *Stop* uloží dosud získaná data a ukončí analýzu. Při *Abort* se akvizice zruší bez uložených dat.

- Ikona *Snapshot*  vytvoří náhled již získaných dat. Po kliknutí se otevře okno *Chromatogram* se snapshot chromatogramem. Pokud není do konce měření uložen pod novým názvem, bude přepsán výsledným chromatogramem.
- Po 7.5 minutách (doba běhu nastavená ve vzorové metodě použité pro měření) se analýza automaticky ukončí a chromatogram se otevře v okně *Chromatogram*.
- Okno *Chromatogram* se otevře automaticky, pokud nebylo otevřeno dříve. Toto chování je nastaveno v dialogovém okně *Single Analysis*. Nastavení se nachází na záložce *Post-run Options*, kde lze také definovat další akce po ukončení analýzy, jako je export dat nebo spuštění externího programu.

5.1.4 Okno Chromatogram

- Okno *Chromatogram* lze otevřít také ručně kliknutím na ikonu *Chromatogram*  v okně *Instrument*.
- Zde můžete vyhodnocovat dříve nasbíraná data nebo si otevřít náš vzorový chromatogram a seznámit se se základními funkcemi, které jsou popsány v této kapitole.
- Použijte příkaz *File - Open Chromatogram...* nebo klikněte na ikonu otevření , vyberte soubor WINE_SAMPLE.PRM a potvrďte tlačítkem OK.
- Okno *Chromatogram* je rozděleno na dvě části: horní část *graf* a dolní část *výsledky*.
- Zvětšit část chromatogramu lze podržením levého tlačítka myši a výběrem oblasti ke zvětšení. Dvojklik do grafu obnoví původní zobrazení celého chromatogramu.



Obr. 15: Okno Chromatogram

- Kliknutím do buňky v *tabulce výsledků (Result Table)*  zvýrazníte pík (nebo více píků při výběru více buněk) odpovídající danému řádku (řádkům).

- V jednom okamžiku může být aktivní pouze jeden signál detektoru. Aktivní signál lze poznat třemi způsoby:
 - v legendě v pravém horním rohu grafu ② (aktivní signál je zobrazen tučně),
 - na liště *Overlay* ③, kde je označen promáčknutou ikonou ,
 - barvou obrysu grafu a záhlaví tabulky.
- Změnu aktivního signálu můžete provést dvojklikem na jeho jméno v legendě. Tabulka **Result table** se příslušně aktualizuje.
- Barvu aktivního signálu změníte kliknutím na požadovanou barvu v liště *Overlay*.
- Integraci píků můžete měnit pomocí interaktivních ikon v levé části okna *Chromatogram* ④, příkazem *Integration* z menu *Chromatogram* nebo přímo v záložce *Integration* ⑤. Všechny změny se projeví v **Integration table** a mohou být zkopírovány do vzorové metody.
- Kliknutím na tlačítko *View* ⑥ otevřete kalibraci spojenou s daným chromatogramem.
- Pokud chcete zobrazit více chromatogramů, aktivujte režim *Overlay mode* ⑦.

Poznámka: Již naměřené chromatogramy lze přepracovat v dialogu *Batch* pomocí nově vytvořené metody, která využívá upravenou tabulku integrace.

5.2 Vytvoření kalibrace

Tato kapitola a připravený projekt **DEMO1** vás provedou procesem vytvoření kalibrace a jejím připojením k metodám a chromatogramům. Poté můžete ve stejném projektu pokračovat kapitolou [Spuštění sekvenčního měření](#), kde si vyzkoušíte, jak funguje automatická kalibrace/rekalibrace v rámci sekvence.

V systému Clarity, pokud je kalibrace připravena (jsou vyplněna jména látek, retenční časy a množství pro každou použitou úroveň), je možné načíst odezvy standardních chromatogramů buď ručně v okně *Calibration*, nebo automaticky při spuštění sekvence. Tím dojde k vytvoření nebo přepočtu kalibračních křivek jednotlivých látek.

5.2.1 Okno kalibrace

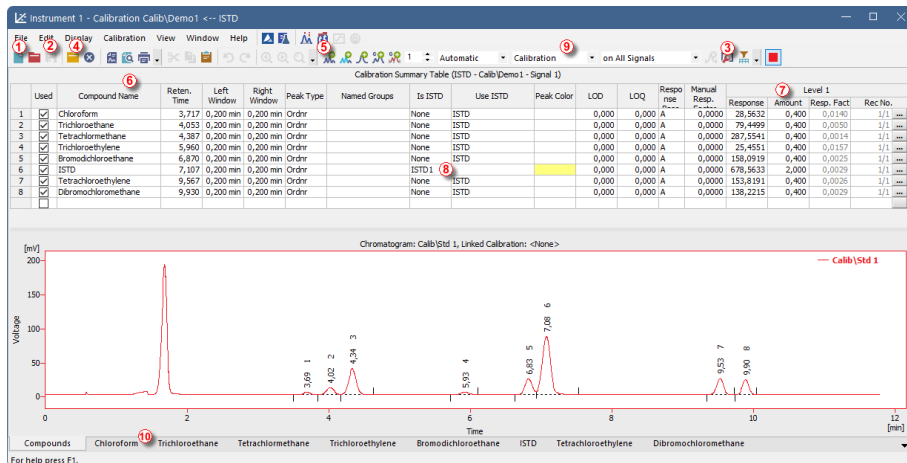
- V hlavním okně *Clarity* otevřete **Instrument**, na kterém chcete testovat funkce Sekvence a Kalibrace. V **Clarity** Demu se jedná o **Instrument 1**. Pro otevření použijte příkaz *Instrument - Login to Instrument X* nebo klikněte na jeho ikonu. Zobrazí se přihlašovací *Login Dialog*.
- Pole uživatele nechte vyplněné předvoleným jménem *Administrator*. V rozbalovacím seznamu *Select Project*: vyberte možnost *DEMO1* a klikněte na tlačítko *OK*.

- Pro otevření okna *Calibration* klikněte na tlačítko Calibration  v okně *Instrument*.

Poznámka: Pokud nechcete vytvářet novou kalibraci, můžete otevřít připravený soubor DEMO1.CAL přes příkaz *File - Open...* a testovat funkce okna *Calibration* na již vytvořené demo kalibraci. V takovém případě můžete přeskočit následující sekci a pokračovat do kapitoly "**Připojení kalibrace ke chromatogramu**" na str. 26.

- Kliknutím na ikonu *New Calibration*  ① vytvořte nový kalibrační soubor. Uložte jej pod libovolným názvem.

Poznámka: Kalibraci lze uložit pomocí ikony *Save Calibration*  ②, nebo pomocí příkazů *File - Save* či *File - Save As...*



Obr. 16: Okno Kalibrace – načtený standard

- Pomocí ikony *Calibration Options*  ③ změňte režim zobrazení (*Display Mode*) v pravém horním rohu dialogu na *ISTD*, protože náš příklad využívá výpočet pomocí vnitřního standardu. Potvrďte tlačítkem *OK*.

Nyní je třeba do kalibrace importovat kalibrační standardy. Tento proces probíhá v několika navazujících krocích:

- Pomocí ikony *Open Standard*  (žlutá) ④ otevřete datový soubor STD 1.PRM. Spodní část okna *Calibration* nyní zobrazí chromatogram tohoto standardu.
- Klikněte na ikonu *Add All*  ⑤ pro přidání všech identifikovaných piků do tabulky *Calibration Summary Table*. Tato tabulka se nachází v okně

Calibration nad grafem standardu a je připravena k doplnění, jak ukazuje **Obr. 16** na str. 24

- Jak ukazuje tabulka Calibration Summary Table a chromatogram, jednotlivé píky jsou nyní identifikovány pouze na základě retenčních časů. Pro jejich označení klikněte do sloupce *Compound Name* ⑥ a upravte názvy podle **Obr. 16** na str. 24.
- Barvu jednotlivých píků lze rovněž nastavit ve sloupci *Peak Color*. Zkuste například nastavit barvu píku ISTD na žlutou.

Poznámka: Změny provedené v kalibraci se okamžitě projeví na chromatogramech, které mají tuto kalibraci připojenou (otevřený standard se nezmění, protože tuto kalibraci připojenou nemá).

- Vyplňte sloupec *Amount* ⑦ koncentracemi jednotlivých látek. V tomto standardním roztoku mají všechny látky kromě píku číslo 6 (ISTD) hodnotu 0.4.
- Pík číslo 6 je náš vnitřní standard. Ve sloupci *Is ISTD* změňte jeho typ na ISTD1 ⑧ a ve sloupci *Amount* nastavte jeho hodnotu na 2.

První kalibrační úroveň je nyní dokončena. Na záložkách jednotlivých látek ⑩ (označených dle názvu v poli *Compound Name*) se zobrazují grafy s jednobodovou lineární kalibrací.

- Pokračujte ve vytváření dalších kalibračních úrovní – operace je jednoduchá a intuitivní.
 - Znovu použijte ikonu *Open Standard*  (žlutá) ④ a otevřete další kalibrační standard STD 2.PRM.
 - Ujistěte se, že je vybraná možnost *Calibration* ⑨ a klikněte na ikonu *Add All*  (modrá) ⑤ (Response budou přidány do první prázdné úrovně (Level) a Calibration Summary table se na danou úroveň automaticky přepne).
 - Do sloupce *Amount* zadejte hodnotu 1.0 pro všechny píky, kromě píku ISTD (č. 6), pro který zadejte hodnotu 2.
- Třetí kalibrační úroveň nastavte obdobně pomocí souboru STD 3.PRM - hodnoty *Amount* 3.0, a následně čtvrtou úroveň ze souboru STD 4.PRM s hodnotou *Amount* 5.0. Pík ISTD vždy ponechte s hodnotou *Amount* 2.

Na záložkách jednotlivých látek ⑩ se nyní zobrazují čtyřbodové lineární kalibrační grafy.

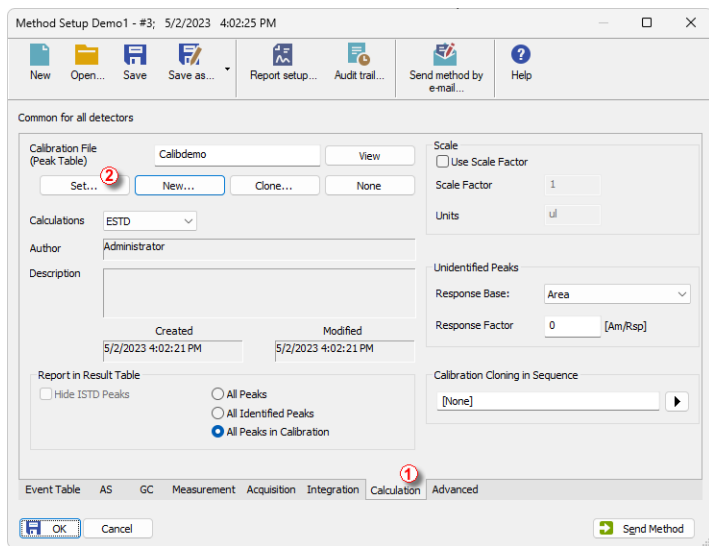
- Nakonec uložte kalibrační soubor pomocí ikony *Save Calibration* .

5.2.2 Připojení kalibrace k metodě

V případě, že máte velké množství vzorků, které budou měřeny a následně vyhodnoceny podle konkrétní kalibrace, bylo by časově náročné připojovat kalibraci ke každému chromatogramu zvlášť. Abyste se tomuto vyhnuli, připojte kalibraci předem k metodě, která bude pro měření použita.

Pokud chcete použít stejnou kalibraci, ale chcete, aby se kalibrace vytvořila pouze ze standardů naměřených v každé sekvenci, je možné použít klonování kalibrace - podrobnosti naleznete v tématu *Calibrating using clone on first recalibration* v [User Guide](#).

- Vraťte se do okna *Instrument* a použijte příkaz *Method - Calculation...* pro otevření dialogu *Method Setup* přímo na záložce *Calculation* ① jak je ukázáno na **Obr. 17** na str. 26. Alternativně můžete otevřít dialog *Method Setup* kliknutím na ikonu  a poté přejít na záložku *Calculation*.
- Pomocí tlačítka *Set...* ② vyberte kalibrační soubor a připojte jej k metodě.
- Opusťte dialog *Method Setup* kliknutím na tlačítko *OK*. Tím se provedené změny uloží do metody.
- Každý chromatogram měřený touto metodou bude mít v budoucnu automaticky připojenou vybranou kalibraci.



Obr. 17: Method Setup – záložka Calculation

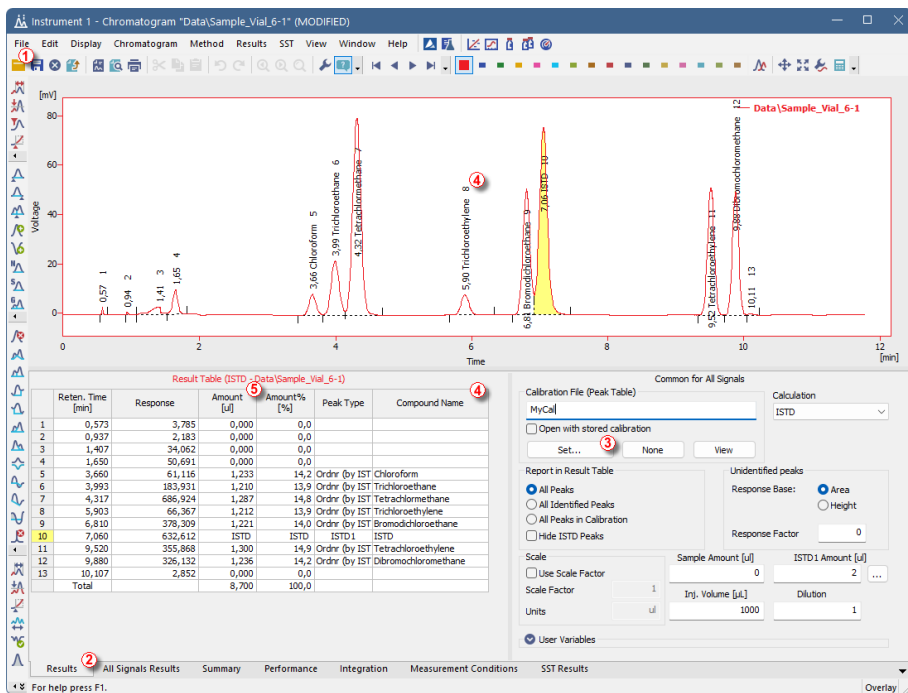
5.2.3 Připojení kalibrace ke chromatogramu

Každý chromatogram může mít připojenou kalibraci, a tím automaticky poskytovat kalibrované výsledky.

- V okně *Instrument* použijte ikonu *Chromatogram*  k otevření okna *Chromatogram*.
- Pomocí ikony *Open Chromatogram*  ① otevřete chromatogram, ke kterému chcete kalibraci připojit. Použijeme soubor *SAMPLE_VIAL_6-1.PRM*, protože se jedná o chromatogram neznámého vzorku ze sady ke standardům, které jsme použili při vytváření kalibrace.

Po otevření chromatogramu jsou data nekalibrovaná a nejsou dostupné žádné informace o názvech jednotlivých látek; píky v tabulce *Result Table* jsou popsány pouze podle svých retenčních časů. Aby se to změnilo, je třeba k datům připojit odpovídající kalibraci.

- Vyberte záložku *Results* ② (měla by se otevřít automaticky) a podívejte se do sekce na pravé straně obrazovky. V sekci *Calibration File (Peak Table)* klikněte na tlačítko *Set...* ③ a vyberte kalibrační soubor vytvořený v předchozí podkapitole. Všechny píky obsažené v kalibraci budou nyní identifikovány ④ a budou jim vypočítána množství ⑤.



Obr. 18: Kalibrace připojená ke chromatogramu v okně *Chromatogram*

Poznámka: Pokud jste přeskočili proces vytvoření vlastní kalibrace, použijte místo toho soubor *DEMO1.CAL*.

5.2.4 Připojení kalibrace k sérii již naměřených chromatogramů

Pokud již máte naměřené chromatogramy a přejete si změnit připojenou kalibraci, můžete to snadno provést pomocí funkce *Batch* pro hromadné přepracování.

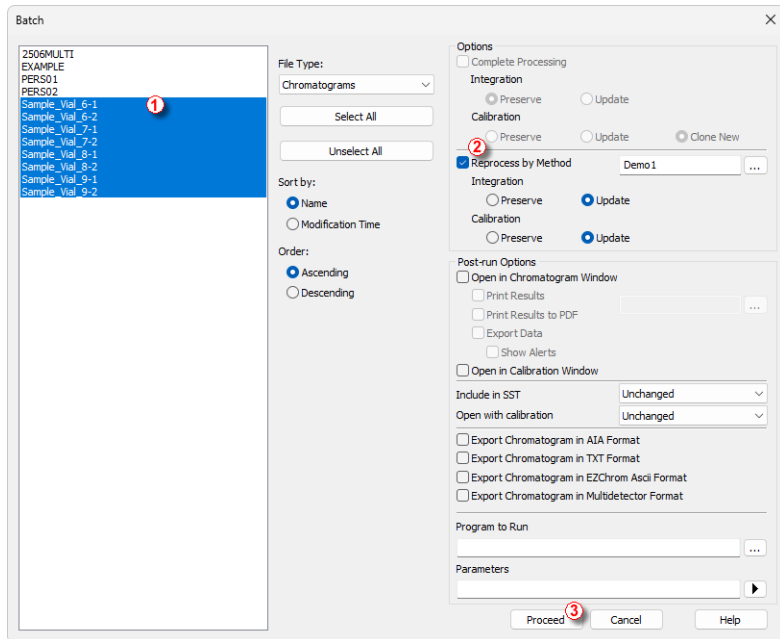
Tento příkaz je obzvláště užitečný, pokud máte velké množství již naměřených chromatogramů, které potřebujete upravit.

Následující kroky popisují, jak změnit kalibraci u již změřených chromatogramů.

- Otevřete okno *Instrument* a spusťte příkaz *Analysis - Batch...*
- V levé části dialogu vyberte soubory, které mají být přepracovány ① (**Obr. 19** na str. 28). Více souborů lze vybrat levým tlačítkem myši při podržení klávesy **Ctrl** nebo **Shift**. Pro demonstraci označte všechny soubory s názvem **SAMPLE_VIAL_X-Y**.
- Zaškrtněte políčko *Reprocess by Method* ②, vyberte metodu, která má být použita při přepracování (musí mít připojenou požadovanou kalibraci), a v části *Calibration* v sekci *Options* zvolte možnost *Update*.
- Klikněte na tlačítko *Proceed* ③.

Všechny vybrané chromatogramy nyní budou mít připojenou kalibraci podle vybrané metody.

Poznámka: Lze přepracovávat pouze soubory z aktuálně otevřeného projektu.



Obr. 19: Dialog *Batch* s vybranými chromatogramy

- Po dokončení přepracování otevřete okno *Chromatogram* a načtěte jeden z přepracovaných souborů (např. *SAMPLE_VIAL_7-2.PRM*). Podívejte se na tabulku *Result Table*. Všechny píky obsažené v kalibraci jsou nyní identifikovány a kalibrovány.
- Může být zobrazeno více chromatogramů najednou. Přepněte do režimu *Overlay* kliknutím na tlačítko *Overlay*  v nástrojové liště *Overlay* (7 na Obr. 15 na str. 22), a poté otevřete všechny přepracované chromatogramy najednou. Tlačítkem *Overlay*  je možné opět zavřít všechny kromě aktivního chromatogramu.

5.3 Spuštění sekvenčního měření

Tato kapitola a připravený projekt **DEMO1** Vás provedou oknem *Sequence*, které slouží pro automatizované měření.

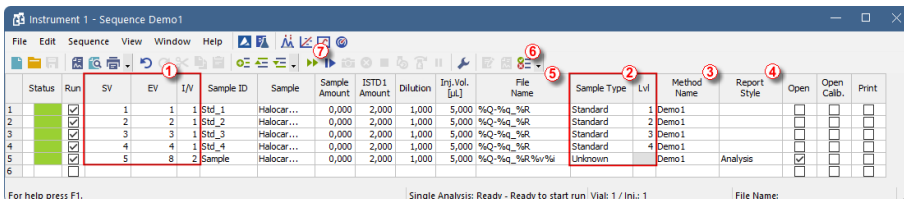
Sekvenční režim umožňuje automatizované měření většího množství vzorků na chromatografech vybavených autosamplery. **Clarity** umožňuje výběr mezi sekvencí *ACTIVE* (spouštěnou stanicí) a *PASSIVE* (spouštěnou autosamplerem).

Již naměřené sekvence je také možné znovu zpracovat v dialogu *Batch*.

Poznámka: Pro použití autosampleru není nutné mít řídící modul **Autosampler (AS) Control**; synchronizační start lze provést i bez něj. Tento modul však umožňuje přímé ovládání z **Clarity**, včetně automatického posílání pozic vialek, objemů nástříků atd., bez nutnosti programování autosampleru přes jeho vlastní panel.

5.3.1 Okno sekvence

- V hlavním okně *Clarity* otevřete **Instrument**, na kterém chcete testovat funkce sekvence. V **Clarity** Demo je to **Instrument 1**. Použijte příkaz *Instrument - Login to Instrument X* nebo klikněte na jeho ikonu. Zobrazí se přihlašovací dialog (*Login Dialog*).
- Ponechte předvyplněné pole uživatele *Administrator*. V poli *Select Project*: zvolte *DEMO1* a stisknete tlačítko *OK*.
- Pomocí ikony *Sequence*  v okně *Instrument* otevřete okno *Sequence*.



Status	Run	SV	EV	I/V	Sample ID	Sample	Sample Amount	ISTD1 Amount	Dilution	Inj. Vol. [µL]	File Name	Sample Type	Lvl	Method Name	Report Style	Open	Open Calib.	Print
1	1	1	1	1	Std_1	Halocar...	0,000	2,000	1,000	5,000	%Q-%q-%R	Standard	1	Demo 1		☐	☐	☐
2	2	2	2	2	Std_2	Halocar...	0,000	2,000	1,000	5,000	%Q-%q-%R	Standard	2	Demo 1		☐	☐	☐
3	3	3	3	3	Std_3	Halocar...	0,000	2,000	1,000	5,000	%Q-%q-%R	Standard	3	Demo 1		☐	☐	☐
4	4	4	4	4	Std_4	Halocar...	0,000	2,000	1,000	5,000	%Q-%q-%R	Standard	4	Demo 1		☐	☐	☐
5	5	8	2	2	Sample	Halocar...	0,000	2,000	1,000	5,000	%Q-%q-%R-%q-%v-%R	Unknown	4	Demo 1	Analysis	☒	☐	☐
6																☐	☐	☐

Obr. 20: Okno *Sequence*

- Podívejte se na tabulku *Sequence Table*. Každý řádek definuje jednu nebo více analýz podle polí *SV* (Starting vial / startovní vialka), *EV* (Ending vial /

- koncová vialka) a *I/V* (Injections per vial / počet nástřiků z vialky) ① . První čtyři řádky obsahují každý po jednom měření (*SV* a *EV* jsou totožné, *I/V* je 1), zatímco pátý řádek představuje osm analýz (*SV* je 5, *EV* je 8; tedy budou měřeny 4 vzorky ze 4 po sobě jdoucích vialek a protože parametr *I/V* je 2, každý vzorek bude měřen dvakrát) .
- V polích *Sample Type* a *Lvl* ② jsou první čtyři vzorky označeny jako standardy pro kalibraci na úrovních 1-4. Chromatogramy z těchto řádků budou automaticky použity ke kalibraci, která je propojena s metodou.
 - Sloupec *Method Name* ③ určuje měřicí metodu pro daný řádek.
 - Sloupec *Report Style* ④ definuje tiskový styl pro výstupní zprávu.
 - Ve sloupci *File Name* ⑤ určíte název výstupního chromatogramového souboru. Doporučujeme použít proměnné jako např. *%Q*, která vloží text z pole *Sample*. K dispozici jsou i další proměnné - seznam zobrazíte kliknutím do pole a výběrem ikony . Je možné kombinovat několik těchto proměnných s běžným textem nebo symboly a vytvořit tak jedinečný název souboru pro každý chromatogram.
 - Ke kontrole správnosti sekvence klikněte na ikonu *Check Sequence*  ⑥ . Stanice **Clarity** změní všechny symboly na začátcích řádků na zelená pole () , což znamená, že řádky jsou připravené. Pokud se vyskytne chyba, zobrazí se chybová nebo varovná zpráva   s popisem problému a návrhem řešení.

Poznámka: Pro demonstrační účely zkuste udělat chybu a znovu zkontrolovat sekvenci. Například zaškrtněte políčko *Print* v prvním řádku. Objeví se varování, že není vybrán *Report Style*. Po stisknutí ikony  se zobrazí varovná zpráva informující, že se pokoušíte vytisknout chromatogram, aniž by byl zvolen styl reportu. Při podržení myši nad status polem, kde je hlášena chyba, zobrazí se nápověda s příčinou problému. Nastavte sekvenci zpět do původního stavu a pokračujte dalším krokem.

- Spustíte sekvenční měření ikonou  ⑦ . Stav sekvence se změní z *ACTIVE* na *WAITING FOR INJECTION*. Jakmile je detekován signál *Ready* z autosamplu, měření začne.

Poznámka: I když není autosampler připojen, **Clarity** přijme signál *Ready* a spustí sekvenci. Není však možné vygenerovat samostatná demo data pro každý chromatogram, protože všechny chromatogramy by byly stejné. Pro účely demonstrace obsahuje složka projektu příklady výsledných souborů. Sekvenci můžete zastavit nebo přerušit nyní či později z okna *Data Acquisition* nebo přímo z okna *Sequence*. Před pokračováním zavřete okno *Sequence*.

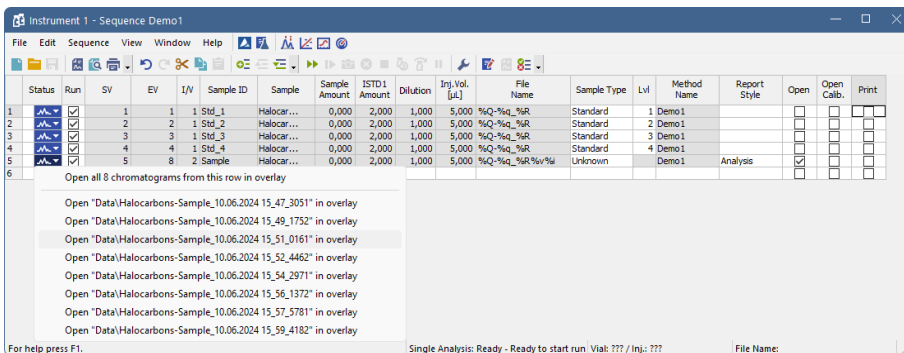
- Po změření prvního řádku z tabulky *Sequence Table* se instrument opět přepne do stavu *WAITING FOR INJECTION* a autosampler spustí nové měření odesláním signálu *Ready*. Sekvenci lze kdykoliv zastavit z okna *Data*

Acquisition nebo *Sequence* stisknutím tlačítka *Stop*  (jedno kliknutí znamená, že se dokončí aktuálně měřená analýza a poté se sekvence zastaví; dvojklik zastaví sekvenci okamžitě). Všechna dosud naměřená data budou uložena. Místo zastavení lze měření také přerušit tlačítkem *Abort* .

Poznámka: Sekvenci lze upravovat i během měření. Pokud se však měření pozastaví kvůli chybě, je nutné ho po jejím odstranění znovu spustit.

- Již naměřené řádky změní svůj *Status* ze zeleného pole () na modrou ikonu s malým chromatogramem (). Během měření je ikona oranžová.
- Pokud byl na daném řádku vytvořen chromatogram, zobrazí se v ikoně  malý trojúhelník. Kliknutím levým tlačítkem na trojúhelník se otevře nabídka, kde lze naměřený chromatogram (nebo chromatogramy) otevřít. Můžete kliknout na název chromatogramu pro jeho otevření, nebo vybrat možnost otevřít všechny chromatogramy do překryvu, jak je ukázáno na

Obr. 21 na str. 31.



Obr. 21: Otvírání chromatogramů z nabídky

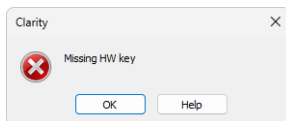
- Na pravé straně okna *Sequence* lze u každého řádku zkontrolovat, zda se má příslušný chromatogram otevřít, vytisknout nebo načíst do okna kalibrace. Tyto sloupce jsou součástí nastavení tzv. *Post-run Options*.
- V okně *Sequence* existuje mnoho dalších skrytých sloupců včetně zbytku nastavení z *Post-run Options*. Zobrazit je lze kliknutím pravým tlačítkem na tabulku sekvence a výběrem možnosti *Setup Columns*. V následujícím dialogu přesuňte sloupce, které chcete zobrazit, do seznamu *Show Columns*.

6 První překážky: Časté problémy

Tato kapitola popisuje několik nejběžnějších problémů, se kterými se můžete setkat při seznamování se s **Clarity**. Pro podrobnější seznam možných problémů a jejich řešení přejděte do sekce *Troubleshooting* v [User Guide](#), kde najdete další problémy a jejich vysvětlení.

Při potížích doporučujeme nejprve použít kontextovou nápovědu (dostupná klávesou F1) nebo vyhledat informace v online dokumentaci **Clarity** [documentation](#). Vyhledávat můžete pomocí klíčových slov, například názvu **dialogového okna** nebo **okna**, ve kterém k problému došlo, textu zobrazeného **chybového hlášení**, nebo typu použitého **hardwaru**.

6.1 Missing HW key



Obr. 22: Chybové hlášení "Missing HW key"

Pokud se pokusíte spustit **Clarity** bez připojeného hardwarového klíče, zobrazí se chybové hlášení "Missing HW key" a **Clarity** se nespustí. Klíč musí být zapojen do USB portu a jeho ovladač musí být správně nainstalován. Za běžných okolností se ovladače USB nainstalují automaticky po vložení klíče do USB portu.

■ Důvod 1: HW klíč nemusí být správně připojen.

Řešení: Zkontrolujte, zda je klíč správně zasunut do USB portu. Ověřte, že port funguje (například připojením jiného zařízení). Zkontrolujte, zda na HW klíči svítí dioda. Pokud bliká nebo nesvítí, vyzkoušejte jiný USB port.

Pokud problém přetrvává, pokračujte na téma *Missing HW key* v [User Guide](#), kde jsou popsány i složitější příčiny této chyby.

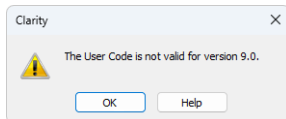
6.2 Neplatný uživatelský kód (User Code)

Zadaný uživatelský kód (User Code) není přijat a **Clarity** nelze spustit. Pokud byl uživatelský kód určen k odemknutí rozšíření nebo přídatných modulů stanice, původně přijatý kód zůstává uložen.

V případě potřeby kontaktujte výrobce nebo svého distributora a požádejte o správný uživatelský kód. Připravte si přitom sériové číslo (S/N) stanice.

Poznámka: Dialogové okno *User Code* nerozlišuje velká a malá písmena. Dávejte však pozor, abyste si nespletli písmeno "l" s číslicí "1".

6.2.1 The User Code is not valid for version x.y.

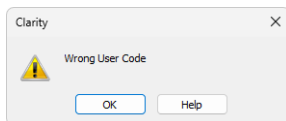


Obr. 23: Chybové hlášení "The User Code is not valid for version x.y."

■ Důvod: Pravděpodobně jste zadali uživatelský kód pro jinou verzi.

Řešení: Je nutné zadat uživatelský kód odpovídající vaší aktuální verzi. Například při zakoupení rozšíření nebo dalších licencí ovládacích instrumentů, je vygenerován nový uživatelský kód pro danou stanici. Tento nový kód je platný pouze pro nejnovější hlavní verzi programu **Clarity**, proto může být nutné nainstalovat její aktuální verzi.

6.2.2 Wrong User Code

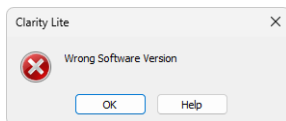


Obr. 24: Chybové hlášení "Wrong User Code"

■ Důvod: Zadali jste uživatelský kód, který neodpovídá sériovému číslu HW klíče připojeného k počítači.

Řešení: Zadejte správný uživatelský kód. Tento kód najdete na zadní straně plastové karty dodané s instalačním USB.

6.2.3 Wrong Software Version

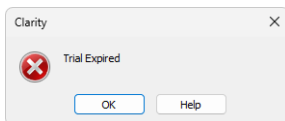


Obr. 25: Chybové hlášení "Wrong Software Version"

■ Důvod: Pravděpodobně jste nainstalovali jiný program, než který jste si zakoupili. Například byla nainstalována verze Clarity Lite místo Clarity.

Řešení: Nainstalujte správnou verzi programu, kterou jste si zakoupili. Pokud nemůžete najít správný instalační soubor, kontaktujte výrobce nebo svého distributora.

6.3 Trial Expired



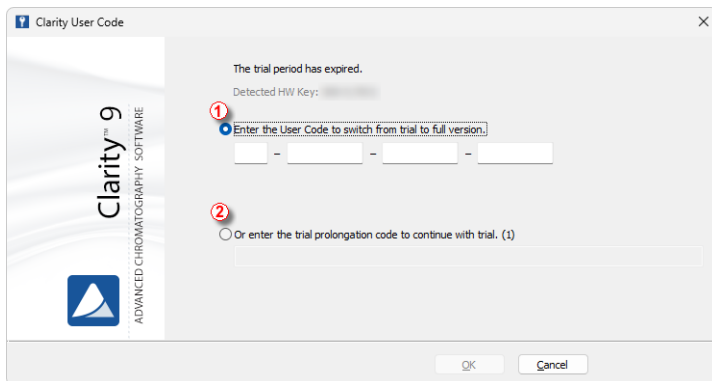
Obr. 26: Chybové hlášení "Trial Expired"

Zkušební Trial období, během kterého **Clarity** funguje bez uživatelského kódu, skončilo. Zadejte uživatelský kód (User Code) nebo prodlužovací kód (Trial Prolongation Code).

■ Důvod: Stanici Clarity právě vypršelo zkušební období.

Řešení:

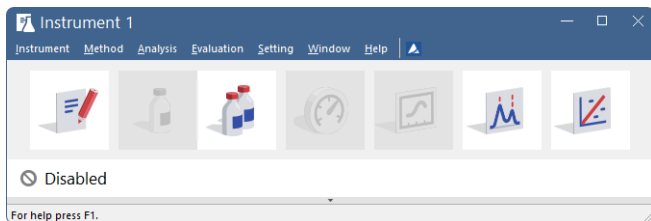
- a) Zadejte User Code, který přepne **Clarity** z Trial režimu do plné verze ① .
 - b) Nebo v sekci ② zadejte Trial Prolongation Code, kterým prodloužíte dobu zkušební režimu. Zkušební kódy je třeba vyžádat od vašeho distributora nebo od DataApex.
- Po zadání platného kódu klikněte na tlačítko OK pro spuštění **Clarity**.



Obr. 27: Dialog Clarity User Code

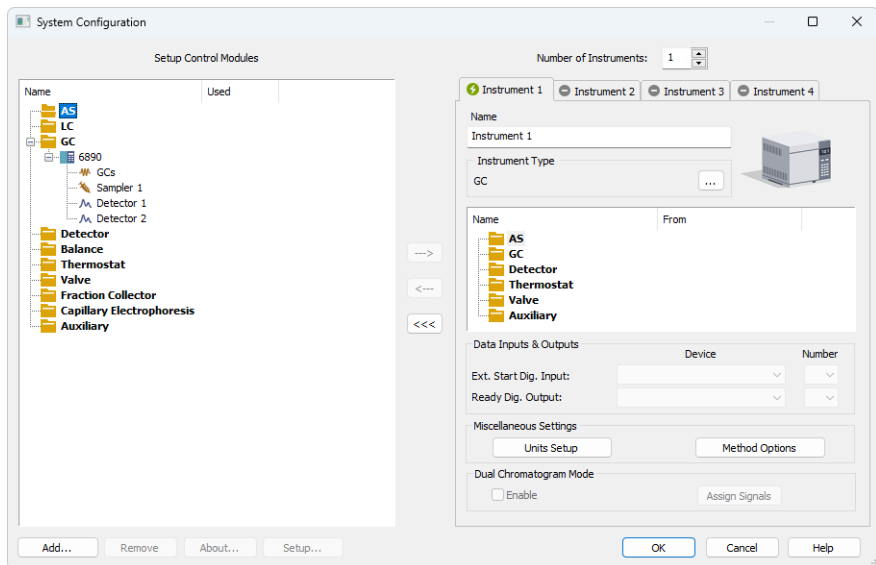
6.4 Data Acquisition - Disabled

Zobrazí se označení "**Disabled**" a dialogové okno *Single Analysis* a okno *Data Acquisition* nejsou dostupná. Mezi další projevy tohoto problému patří: chybějící záložka *Method Setup – Acquisition*, nefunkční příkazy *Run*, *Stop* a *Abort* v okně *Sequence*.



Obr. 28: Funkce Data Acquisition je zakázána (Disabled)

Důvod 1: K Instrumentu Clarity není přiřazen žádný detektor.



Obr. 29: Detektor není přiřazen k Intrumentu

Řešení: Otevřete dialogové okno *System Configuration* z hlavního okna *Clarity* pomocí příkazu *System – Configuration...* a zkontrolujte záložku odpovídajícího Instrumentu – **Instrument X**. Pokud nemá přiřazené žádné detektory, přiřaďte je. V levé části okna *Setup Control Modules* vyberte ze seznamu správný detektor a přetáhněte jej do sekce odpovídajícího Instrumentu vpravo. Pokud detektor v seznamu chybí, přidejte jej pomocí tlačítka *Add* a předchozí postup opakujte.

Pokud to nepomůže, pokračujte na téma *Data Acquisition – Disabled* v [User Guide](#), kde jsou popsány i složitější příčiny tohoto problému.