

Протокол приготовления градуировочных растворов (ГР) летучих компонентов и расчёт значений их концентрации в водно-этанольных смесях с применением файла-шаблона «StandSolutions_2025.xlsx»



Оглавление

Аннотация	2
Список сокращений и обозначений	3
Справочные таблицы	4
1. Приготовление растворов, внесение в таблицы значений масс	5
1.1. Подготовка ВСР	5
1.2. Приготовление ГР «А» (базового для «В», «С», «D», «1»)	6
1.3. Приготовление ГР «В»	8
1.4. Приготовление ГР «С» (базового для «2» и «3»)	10
1.5. Приготовление ГР «D»	11
1.6. Приготовление ГР «1»	13
1.7. Приготовление ГР «2»	14
1.8. Приготовление ГР «3»	16
2. Расчёты концентраций и RRF в первом и втором приближениях	18
2.1. Расчёт массы и концентрации компонентов в градуировочном растворе «С» в нулевом приближении	18
2.2. Расчёт градуировочного коэффициента RRF и концентраций компонентов в растворах ВСР, «А» и «С» в первом приближении	18
2.3. Расчёт концентраций компонентов в растворах ВСР, «А» и «С» во 2-м приближении	19
Лист «Концентрации на печать»	20

Аннотация

Градуировочные растворы (ГР) – смеси летучих соединений ($i = 1, \dots, 9$) в водно-этанольных растворах (ВСР – водно-спиртовой раствор, тоже, что и ВЭС – водно-этанольная смесь). Наборы ГР приготавливаются гравиметрическим (весовым) методом с применением аналитических весов и включают несколько уровней концентрации ($j = 1, \dots, 7$), в мг/дм³ безводного этанола (мг/л АА).

Назначение ГР. В модифицированном методе внутреннего стандарта (ММВС) для установления градуировочной (калибровочной) характеристики прибора используется один из ГР – раствор «С». Остальные ГР (растворы «А», «В», «D», «1», «2», «3») можно использовать для проверки линейности отклика детектора, контроля стабильности, оценки точности.

«Исходные», «базовые» реактивы и растворы. Для изготовления раствора «А» в качестве исходных применяются реактивы «0_i» ($i = 1, \dots, 9$): ацетальдегид (этаналь), метилацетат, этилацетат, метанол, спирт изопропиловый (2-пропанол), спирт пропиловый (1-пропанол), 2-метил-1-пропанол (изобутанол), спирт бутиловый (1-бутанол), 3-метил-1-бутанол (изоамилол) со значениями массового содержания основного вещества (компонента i) не менее 99,0 %, г/г. Для приготовления набора ГР используется ВСР с объемной долей этилового спирта ABV (40 ± 1) % об. Плотность ВСР $\rho_{ВСР}$ определяют согласно разделу 3 ГОСТ 3639 пикнометрическим методом.

Для изготовления растворов «В», «С», «D» и «1» в качестве «базового» применяется раствор «А», смешиваемый в разных количествах с чистым ВСР (без добавок). Для изготовления растворов «2» и «3» в качестве «базового» применяется раствор «С», смешиваемый в разных количествах с чистым ВСР. Ориентировочные значения объемов V' и масс M' , которые вносят при приготовлении СО, указаны в таблице 1. Следует подчеркнуть, что величины V' и M' являются лишь вспомогательными и используются для приблизительной оценки концентрации C' .

Взвешивание (гравиметрический метод) и расчёт «аттестованных» значений. Для расчёта «аттестованных» значений концентраций компонентов в ГР является необходимым точное определение значений масс вносимых в ГР веществ (в г, с точностью до 0,001 г) с применением аналитических весов. Именно на основании точных значений массы для каждого i -го летучего компонента m^i и ВСР $m^{ВСР}$ в конкретном ГР рассчитываются «аттестованные» значения концентрации C^i летучих соединений в мг/дм³ безводного этанола (мг/л АА).

Нулевое приближение. В нулевом приближении при расчётах полагают, что ВСР состоит только из воды и этанола, а токсичные примеси ($i = 1, \dots, 9$) отсутствуют и их доли $W_{\text{пр}}^i(ВСР) = 0$.

Первое и второе приближения – расчёты с учётом содержания примесей в ВСР.

«Аттестованные» значения концентрации используются для установления значений градуировочных (калибровочных) параметров $RRF_i^{\text{этанол}}$ (относительный фактор отклика, RRF от англ. Relative Response Factor), представляющих собой относительные коэффициенты отклика ПИД газового хроматографа на каждый исследуемый i -й летучий компонент относительно отклика на внутренний стандарт (этанол, содержащийся в образце) в зависимости от отношения концентраций компонента и этанола. Также знание «аттестованных» значений C^i летучих соединений в ГР «А», «В», «D», «1», «2», «3» необходимо для оценки линейности отклика детектора.

Список сокращений и обозначений

ГР – градуировочный раствор;

ВСП – водно-спиртовой раствор;

ММВС – модифицированный метод внутреннего стандарта;

АА – безводный этиловый спирт (от англ. Anhydrous Alcohol или Absolute Alcohol);

$0_{\text{пр}}$ – индекс, показывающий, что расчёт выполняется в нулевом приближении;

$1_{\text{пр}}$ – индекс, показывающий, что расчёт выполняется в 1-м приближении;

$2_{\text{пр}}$ – индекс, показывающий, что расчёт выполняется во 2-м приближении;

ABV – объемная доля этилового спирта (от англ. Alcohol by volume), в % об.;

C^i – концентрация компонента i в растворе (в мг/л АА);

Eth – тоже, что *этанол*, индекс у параметров, относящихся к этанолу;

i – индекс, показывающий номер летучего компонента ($i = 1, \dots, 9$);

j – индекс, показывающий номер концентрационного уровня ГР ($j = 1, \dots, 7$);

k – индекс, показывающий номер повторного измерения раствора;

M – масса всего раствора (в г);

m^{BSP} – масса ВСП, внесённого при приготовлении раствора (в г);

m^i – масса компонента i , внесённого при приготовлении раствора (в г);

m^{Eth} – масса этанола, внесённого при приготовлении раствора (в г);

N – число повторных хроматографических измерений определенного раствора ($N \geq 2$);

RRF – относительный фактор отклика (от англ. Relative Response Factor);

RRF_i^{Eth} – тоже, что и $RRF_i^{этанол}$. Это градуировочный коэффициент RRF для компонента i при использовании этанола в качестве внутреннего стандарта, безразмерная величина (характеристика линейной зависимости хроматографических данных при выборе осей: ось X – отношение площади пика i -го компонента к площади пика этанола на хроматограмме, ось Y – отношение концентрации i -го компонента к концентрации этанола, выраженных в мг/л АА), рассчитывается по методу наименьших квадратов;

W^i – массовая доля компонента i в растворе (г/г);

ρ_{Eth} – тоже, что и $\rho_{этанол}$, значение концентрации этанола в растворе, выраженное в мг/л АА, равно значению плотности безводного этанола (789270 мг/л при температуре 20 °С).

Справочные таблицы

Таблица 1. Рекомендуемые объёмы (массы) реагентов, которые вносят при приготовлении ГР

<i>j</i>	Название раствора	Вносимый объём V' «базового» раствора компонента, см ³ (мл) и соответствующее приблизительное значение массы M' (г)	Вносимый объём ВСР, см ³ (мл)	Уровень концентрации, мг/дм ³ АА (мг/л АА)	Назначение СО
1	A	0,250 мл 0_i (около 0,2 г)	97,8 мл (92,5 г)	4000-6000	контроль линейности
2	B	10 мл A (около 9,5 г)	90 мл (85,1 г)	400-600	контроль линейности
3	C	5 мл A (около 4,75 г)	95 мл (90 г)	240-300	градуировка
4	D	4 мл A (около 3,8 г)	96 мл (90 г)	180-240	контроль линейности, контроль стабильности
5	1	0,5 мл A (около 0,48 г)	99,5 мл (94 г)	25-40	контроль линейности
6	2	4 мл C (около 3,8 г)	96 мл (90 г)	10-25	контроль линейности
7	3	0,8 мл C (около 0,76 г)	99,1 мл (94 г)	2,0-5,0	контроль линейности
-	ВСР	водно-спиртовой раствор (водно-этанольная смесь) без добавок летучих компонентов			
-	0_i	исходные реагенты (летучие вещества с чистотой не менее 99,0%)			

Таблица 2. Обозначения точных значений массы, установленных с помощью аналитических весов, и концентраций

Номер уровня концентрации <i>j</i>	1	2	3	4	5	6	7
Наименование ГР	A	B	C	D	1	2	3
Точное значение массы «базового» раствора, внесённого в ГР, по итогам взвешивания, г	m_A^i	m_B^A	m_C^A	m_D^A	m_1^A	m_2^C	m_3^C
Точное значение массы ВСР, внесённого в СО, и всего ГР по итогам взвешивания, г	m_A^{BCP}, M_A	m_B^{BCP}, M_B	m_C^{BCP}, M_C	m_D^{BCP}, M_D	m_1^{BCP}, M_1	m_2^{BCP}, M_2	m_3^{BCP}, M_3
Рассчитанное значение массы ВСР и этанола в ГР с учетом их содержания в «чистом» ВСР и в исходном растворе, г	$m^{Eth}(A)$	$m^{Eth}(B)$	$m^{Eth}(C)$	$m^{Eth}(D)$	$m^{Eth}(1)$	$m^{Eth}(2)$	$m^{Eth}(3)$
Рассчитанное значение концентрации компонентов в ГР с учетом содержания в «чистом» ВСР и в исходном растворе, г	$m^i(A)$ $C^i(A)$	$m^i(B)$ $C^i(B)$	$m^i(C)$ $C^i(C)$	$m^i(D)$ $C^i(D)$	$m^i(1)$ $C^i(1)$	$m^i(2)$ $C^i(2)$	$m^i(3)$ $C^i(3)$

Таблица 3. Характеристики ВСР

Определение	Обозначение	Ед. измерения
Температура, при которой проводится определение плотности ВСР	t_0	°C
Плотность ВСР (от 0,778 до 0,99988)	ρ_{BCP}	г/см ³
Объемная доля этилового спирта в ВСР	ABV	% об.
Массовая доля этилового спирта в ВСР	W_{BCP}^{Eth}	г/г
Площадь пика <i>i</i> -го компонента на <i>k</i> -й хроматограмме	$A_k^i(BCP)$	ед.площади пика
Площадь пика <i>этанола</i> на <i>k</i> -й хроматограмме	$A_k^{Eth}(BCP)$	ед.площади пика

1. Приготовление растворов, внесение в таблицы значений масс

1.1. Подготовка ВСР

1.1.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ВСР: ячейки строк 1-7 столбцов А-С.

	А	В	С	Д
1	ПОДГОТОВКА ВСР.		ВВЕДИТЕ:	
2	Дата приготовления ВСР, д-мм-гггг			
3	Температура в комнате, t_0 , °C			по термометру, от 8 до 40 °C
4	Масса пикнометра, г			
5	Плотность ВСР при t_0 , г/см ³			от 0.772 до 0.99988
6	Крепость ВСР при 20 °C, ABV , % об.		#N/A	
7	Массовая доля этанола W_{BCP}^{Eth} , г/г		#N/A	

1.1.2. В ячейки **C2** и **C3**, отмеченные заливкой, вносят значения: дату определения параметров ВСР и температуру t_0 (в °C), при которой измеряют плотность ВСР ρ_{BCP} .

1.1.3. Определяют плотность ВСР ρ_{BCP} (в г/см³) согласно разделу 3 ГОСТ 3639 пикнометрическим методом и вносят полученное значение в ячейку **C5**.

1.1.4. С учётом введённых значений t_0 (в °C), ρ_{BCP} (в г/см³) и справочных данных водно-этанольных таблиц [1] в программе автоматически определяется значение «крепости» – объёмной доли этанола в ВСР ABV (в % об.). Результат появится в ячейке **C6**.

1.1.5. В ячейке **C7** отобразится значение массовой доли этилового спирта в ВСР W_{BCP}^{Eth} (г/г), рассчитанное по формуле:

$$W_{BCP}^{Eth} = \frac{ABV\%}{100\%} \cdot \frac{\rho_{Eth}}{\rho_{BCP}}, \quad (1.1.1)$$

где ρ_{Eth} – плотность безводного этилового спирта при 20 °C, г/см³, 0,78927 г/см³ [1].

1.1.6. Прописывают хроматограммы для ВСР 2-3 раза ($k = 1, 2, 3$). Проводят разметку и интегрирование пиков на каждой k -ой хроматограмме и полученные значения площади пиков летучих компонентов $A_k^i(BCP)$ и этанола $A_k^{Eth}(BCP)$ вносят в ячейки столбцов **M**, **N**, **O** строк 25-34.

	К	Л	М	Н	О
23			ВВЕДИТЕ значения площади пиков для ВСР:		
24	№-ва, i	Компонент	$A^i_1(BCP)$, мВ·мин	$A^i_2(BCP)$, мВ·мин	$A^i_3(BCP)$, мВ·мин
25	1	ацетальдегид			
26	2	метилацетат			
27	3	этилацетат			
28	4	метанол			
29	5	2-пропанол			
30	<i>Eth</i>	<i>этанол</i>			
31	6	1-пропанол			
32	7	изобутанол			
33	8	бутанол			
34	9	изоамилпол			

1.2. Приготовление ГР «А» (базового для «В», «С», «D», «1»)

1.2.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «А»: ячейки строк 1-7 столбцов E-I, а также строки 1-25.

	E	F	G	H	I	J
1	СОЗДАНИЕ ГР "А".			ВВЕДИТЕ значения:		
2	Дата создания ГР "А", д-ммм-гггг			→		
3	Температура в комнате при приготовлении ГР "А", $t_{комн}$, °C			→		
4	Масса пустой колбы с крышкой, г			→		
5	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г			→	1-я порция	2-я порция
6	Масса 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_A , г			→		
7	Масса всего ГР "А", M_A , г			0.000		

	A	B	C	D	E	F	G	H
8			ВВЕДИТЕ:					ВВЕДИТЕ:
9	ГР "А"	Компонент	Чистота реагента "0 _i ", г/г	Вносимый объем (при 20°C), мл	Плотность вещества при 20°C, мг/л	Ожидаемая масса вещества, г	Ожидаемая концентрация вещества при 20°C, мг/л АА	Масса вещества при взвешивании при $t_{комн}$, г
10	№в-ва, i		W_i^j	$V_A^i(V^{ЭА}_A, V^{BCP}_A)$, мл	$\rho_{i(ЭА, ВСР)}$, мг/л	$M^i_A(M^{ЭА}_A, M^{BCP}_A)$, г	$C^i_A(M^{ЭА}_A, C^{BCP}_A)$, мг/л АА	$m^i_A(m^{ЭА}_A, m^{BCP}_A)$, г
11								
12	1	ацетальдегид	0.995	0.250	783400	0.1959	#N/A	
13	2	метилацетат	0.995	0.250	934200	0.2336	#N/A	
14	3	этилацетат	0.995	0.250	900300	0.2251	#N/A	
15	4	метанол	0.995	0.250	791800	0.1980	#N/A	
16	5	2-пропанол	0.995	0.250	785000	0.1963	#N/A	
17	Eth	этанол		#N/A	789270	#N/A	789270	#N/A
18	6	1-пропанол	0.995	0.250	803000	0.2008	#N/A	
19	7	изобутанол	0.995	0.250	801800	0.2005	#N/A	
20	8	бутанол	0.995	0.250	809800	0.2025	#N/A	
21	9	изоамилпол	0.995	0.250	815200	0.2038	#N/A	

1.2.2. В ячейки H2 и H3, отмеченные заливкой, вносят значения: дату приготовления раствора «А» и температуру $t_{комн}$ (в °C).

1.2.3. В ячейках C12-C16 и C18-C21, отмеченных заливкой, корректируют значения массовой доли W_i^j , (в г/г, $i = 1, \dots, 9$) основных веществ (летучих компонентов) в исходных реагентах 0_i. Массовая доля W_i^j при содержании основного вещества по массе в процентах составит: при чистоте реагента 99,0% - доля 0,99, при чистоте 99,5% - доля 0,995, при чистоте 99,9% - доля 0,999. По умолчанию в ячейках шаблона введены значения 0,995.

1.2.4. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точностью до 0,001 г. Значение массы вносят в ячейку H4. После этого выполняют тарирование.

1.2.5. Затем в колбу наливают около 40 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку H6. После этого выполняют тарирование.

1.2.6. Затем с использованием дозатора в колбу с 1-й порцией ВСР добавляют 3-метилбутан-1-ол (изоамиловый спирт, изоамилпол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку H21 (m^j_A , $i = 9$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.

- 1.2.7. В колбу с помощью дозатора добавляют бутан-1-ол (н-бутиловый спирт, 1-бутанол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H20** ($m_A^i, i = 8$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.8. В колбу с помощью дозатора наливают 2-метилпропан-1-ол (изобутиловый спирт, изобутанол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H19** ($m_A^i, i = 7$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.9. В колбу с помощью дозатора наливают пропан-1-ол (н-пропиловый спирт, 1-пропанол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H18** ($m_A^i, i = 6$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.10. В колбу с помощью дозатора добавляют пропан-2-ол (втор-пропиловый спирт, 2-пропанол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H16** ($m_A^i, i = 5$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.11. В колбу с помощью дозатора наливают метиловый спирт (метанол) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H15** ($m_A^i, i = 4$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.12. В колбу с помощью дозатора добавляют этилэтаноат (этилацетат) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H14** ($m_A^i, i = 3$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.13. В колбу с помощью дозатора наливают метилэтаноат (метилацетат), в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H13** ($m_A^i, i = 2$). Наконечник дозатора меняют. Выполняют тарирование.
- 1.2.14. Последним в колбу добавляют самый летучий компонент – этаналь (ацетальдегид) в количестве 0,250 мл (0,2 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H12** ($m_A^i, i = 1$). Выполняют тарирование.
- 1.2.15. Далее, в колбу с 1-й порцией ВСР и всеми добавленными летучими компонентами ($i = 1, \dots, 9$) доливают 2-ю порцию ВСР (около 57,8 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **I6**.
- 1.2.16. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «А», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «А» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **H5**. В результате точное значение массы ГР «А» без тары **М_А** вычислится автоматически и появится в ячейке **H7**.
- 1.2.17. Колбу с раствором ГР «А» выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

1.2.18. Значение всей массы ВСР, внесенного в раствор ГР «А», m^{BCP}_A вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке H22.

1.2.19. В ячейке H17 отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «А» (за счёт ВСР), m^{Eth}_A , вычисленное автоматически по формуле:

$$m^{Eth}_A = m^{BCP}_A \cdot W^{Eth}_{BCP} \quad (1.2.1)$$

1.2.20. В ячейках I12-I21 будут автоматически рассчитаны значения масс летучих компонентов и этанола $m^i_{0np}(A)$ (с учётом их содержания в исходных реактивах) и в ячейках J12-J21 – их массовые доли $W^i_{0np}(A)$ в растворе ГР «А» в нулевом приближении по формулам:

$$m^i_{0np}(A) = W^i_i \cdot m^i_A \quad (1.2.3)$$

$$W^i_{0np}(A) = \frac{m^i_{0np}(A)}{M_A} \quad (1.2.4)$$

1.3. Приготовление ГР «В»

1.3.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «В»: строки 126-150.

	A	B	C	D	E	F
126	СОЗДАНИЕ ГР "В" на основе ГР "А". ВВЕДИТЕ:					
127	Дата создания ГР "В", д-мм-гггг			➡		
128	Масса пустой колбы с крышкой, г			➡		
129	Объём ВСР в ГР "В" (вносимый дозатором), мл			90.0	1-я порция	2-я порция
130	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
131	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_B , г			➡	➡	0.000
132	Объём ГР "А" в ГР "В" (вносимый дозатором), V^A_B , мл			10.0		
133	Масса ГР "А" в ГР "В", m^A_B , г			➡		
134	Масса ГР "В", M_B , г			0.000		
135	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г			➡		

1.3.2. В ячейку D127, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «В».

1.3.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точностью до 0,001 г. Значение массы вносят в ячейку D128.

1.3.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 45 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D131.

1.3.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу добавляют «базовый» раствор ГР «А» в количестве 10 мл (около 9,5 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D133 (m^A_B).

- 1.3.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 45 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку E131.
- 1.3.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «В», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «В» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D135. В результате точное значение массы ГР «В» без тары M_B вычислится автоматически и появится в ячейке D134.
- 1.3.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «В», m^{BCP}_B вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке F131.
- 1.3.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

- 1.3.10. В ГР «В» будет присутствовать ВСР, добавленный как «чистый» ВСР, а также добавленный при внесении «базового» раствора ГР «А». Общее количество ВСР в составе ГР «В» $m^{BCP}(B)$ (в г) отобразится в ячейке G149, автоматически вычисленное в программе по формуле:

$$m^{BCP}(B) = m^A_B \cdot W^{BCP}(A) + m^{BCP}_B \quad (1.3.1)$$

- 1.3.11. В ячейке G144 отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «В» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $m^{Eth}(B)$ (в г), вычисленное автоматически по формуле:

$$m^{Eth}(B) = m^{BCP}(B) \cdot W^{Eth}_{BCP} \quad (1.3.2)$$

- 1.3.12. В ячейках G139-G143 и G145-G148 появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «В» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $m^i(B)$ (в г), вычисленные автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$m^i(B) = m^A_B \cdot W^i_{2np}(A) + m^{BCP}_B \cdot W^i_{2np}(BCP) \quad (1.3.3)$$

- 1.3.13. В ячейке J144 отобразится точное значение объёма этанола в ГР «В» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $V^{Eth}(B)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(B) = \frac{m^{Eth}(B)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (1.3.4)$$

- 1.3.14. В ячейках I139-I143 и I145-I148 отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «В», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(B)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C^i(B) = \frac{m^i(B)}{V^{Eth}(B)} \cdot 10^6 \quad (1.3.5)$$

1.4. Приготовление ГР «С» (базового для «2» и «3»)

1.4.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «С»: строки 26-50.

	A	B	C	D	E	F
26	СОЗДАНИЕ ГР "С" на основе ГР "А". ВВЕДИТЕ:					
27	Дата создания ГР "С", д-ммм-гггг					
28	Масса пустой колбы с крышкой, г					
29	Объём ВСР в ГР "С" (вносимый дозатором), мл		95.0	1-я порция	2-я порция	
30	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
31	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_C , г					0.000
32	Объём ГР "А" в ГР "С" (вносимый дозатором), V^A_C , мл		5.0			
33	Масса ГР "А", m^A_C , г					
34	Масса ГР "С", M_C , г		0.000			
35	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г					

1.4.2. В ячейку D27, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «С».

1.4.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точности до 0,001 г. Значение массы колбы вносят в ячейку D28.

1.4.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 45 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D31.

1.4.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу с 1-й порцией ВСР добавляют «базовый» раствор ГР «А» в количестве 5 мл (около 4,75 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D33 (m^A_C).

1.4.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 50 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку E31.

1.4.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «С», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «С» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D35. В результате точное значение массы ГР «С» без тары M_C вычислится автоматически и появится в ячейке D34.

1.4.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «С», m^{BCP}_C вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке F31.

1.4.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

1.4.10. Далее, прописывают хроматограммы для раствора ГР «С» 2-3 раза ($k = 1,2,3$). Проводят разметку и интегрирование пиков на каждой k -ой хроматограмме и полученные значения площади пиков летучих компонентов $A^i_k(C)$ и этанола $A^{Eth}_k(C)$ вносят в ячейки столбцов P, Q, R строк 25-34.

	K	L	P	Q	R
23			ВВЕДИТЕ значения площади пиков для образца С:		
24	№в-ва, i	Компонент	$A^i_2(C)$, мВ·мин	$A^i_2(C)$, мВ·мин	$A^i_2(C)$, мВ·мин
25	1	ацетальдегид	↓	↓	↓
26	2	метилацетат			
27	3	этилацетат			
28	4	метанол			
29	5	2-пропанол			
30	Eth	этанол			
31	6	1-пропанол			
32	7	изобутанол			
33	8	бутанол			
34	9	изоамилпол			

1.4.11. В ячейках I 39-I 43 и I 45-I 48 отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «С», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(C)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически (описание расчётов – в п.2).

1.5. Приготовление ГР «D»

1.5.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «D»: строки 151-175.

	A	B	C	D	E	F
151	СОЗДАНИЕ ГР "D" на основе ГР "A".		ВВЕДИТЕ:			
152	Дата создания ГР "D", д-мм-гггг		→			
153	Масса пустой колбы с крышкой, г		→			
154	Объём ВСР в ГР "D" (вносимый дозатором), мл			96.0	1-я порция	2-я порция
155	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
156	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_D , г		→		→	0.000
157	Объём ГР "A" в ГР "D" (вносимый дозатором), V^{A}_D , мл			4.0		
158	Масса ГР "A" в ГР "D", m^A_D , г		→			
159	Масса ГР "D", M_D , г			0.000		
160	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г		→			

1.5.2. В ячейку D152, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «D».

1.5.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точности до 0,001 г. Значение массы колбы вносят в ячейку D153.

1.5.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 46 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D156.

1.5.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу с 1-й порцией ВСР добавляют «базовый» раствор ГР «А» в количестве 4 мл (около 3,8 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и

взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D158 (m^A_D).

1.5.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 50 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку E156.

1.5.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «D», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «D» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D160. В результате точное значение массы ГР «D» без тары M_D вычислится автоматически и появится в ячейке D159.

1.5.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «D», m^{BCP}_D вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке F156.

1.5.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

1.5.10. В ГР «D» будет присутствовать ВСР, добавленный как «чистый» ВСР, а также добавленный при внесении «базового» раствора ГР «A». Общее количество ВСР в составе ГР «D» $m^{BCP}(D)$ (в г) отобразится в ячейке G174, автоматически вычисленное в программе по формуле:

$$m^{BCP}(D) = m^A_D \cdot W^{BCP}(A) + m^{BCP}_D \quad (1.5.1)$$

1.5.11. В ячейке G169 отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «D» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «A»), $m^{Eth}(D)$ (в г), вычисленное автоматически по формуле:

$$m^{Eth}(D) = m^{BCP}(D) \cdot W^{Eth}_{BCP} \quad (1.5.2)$$

1.5.12. В ячейках G164-G168 и G170-G173 появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «D» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «A»), $m^i(D)$ (в г), вычисленные автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$m^i(D) = m^A_D \cdot W^i_{2np}(A) + m^{BCP}_D \cdot W^i_{2np}(BCP) \quad (1.5.3)$$

1.5.13. В ячейке J169 отобразится точное значение объёма этанола в ГР «D» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «A»), $V^{Eth}(D)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(D) = \frac{m^{Eth}(D)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (1.5.4)$$

1.5.14. В ячейках I 164-I 168 и I 170-I 173 отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «D», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(D)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C^i(D) = \frac{m^i(D)}{V^{Eth}(D)} \cdot 10^6 \quad (1.5.5)$$

1.6. Приготовление ГР «1»

1.6.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «1»: строки 51-75.

	A	B	C	D	E	F
51	СОЗДАНИЕ ГР "1" на основе ГР "А". ВВЕДИТЕ:					
52	Дата создания ГР "1", д-ммм-гггг			➡		
53	Масса пустой колбы с крышкой, г			➡	1-я порция	2-я порция
54	Объём ВСР в ГР "1" (вносимый дозатором), мл			99.5		
55	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
56	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_1 , г			➡	➡	0.000
57	Объём ГР "А" в ГР "1" (вносимый дозатором), V^A_1 , мл			0.5		
58	Масса ГР "А", m^A_1 , г			➡		
59	Масса ГР "1", M_1 , г			0.000		
60	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г			➡		

1.6.2. В ячейку D52, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «1».

1.6.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точности до 0,001 г. Значение массы вносят в ячейку D53.

1.6.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 40 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D56.

1.6.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу добавляют «базовый» раствор ГР «А» в количестве 0,5 мл (около 0,48 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D58 (m^A_1).

1.6.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 59,5 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку E56.

1.6.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «1», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «1» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D60. В результате точное значение массы ГР «1» без тары M_1 вычислится автоматически и появится в ячейке D59.

1.6.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «1», m^{BCP}_1 вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке F56.

1.6.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

1.6.10. В ГР «1» будет присутствовать ВСР, добавленный как «чистый» ВСР, а также добавленный при внесении «базового» раствора ГР «А». Общее количество ВСР в составе ГР «1» $m^{BCP}(1)$ (в г) отобразится в ячейке G74, автоматически вычисленное в программе по формуле:

$$m^{BCP}(1) = m_1^A \cdot W^{BCP}(A) + m_1^{BCP} \quad (1.6.1)$$

1.6.11. В ячейке **G69** отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «1» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $m^{Eth}(1)$ (в г), вычисленное автоматически по формуле:

$$m^{Eth}(1) = m^{BCP}(1) \cdot W_{BCP}^{Eth} \quad (1.6.2)$$

1.6.12. В ячейках **G64-G68** и **G70-G73** появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «1» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $m^i(1)$ (в г), вычисленные автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$m^i(1) = m_1^A \cdot W_{2np}^i(A) + m_1^{BCP} \cdot W_{2np}^i(BCP) \quad (1.6.3)$$

1.6.13. В ячейке **J69** отобразится точное значение объёма этанола в ГР «1» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А»), $V^{Eth}(1)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(1) = \frac{m^{Eth}(1)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (1.6.4)$$

1.6.14. В ячейках **I 64-I 68** и **I 70-I 73** отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «1», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(1)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C^i(1) = \frac{m^i(1)}{V^{Eth}(1)} \cdot 10^6 \quad (1.6.5)$$

1.7. Приготовление ГР «2»

1.7.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «2»: строки 76-100.

	A	B	C	D	E	F
76	СОЗДАНИЕ ГР "2" на основе ГР "С". ВВЕДИТЕ:					
77	Дата создания ГР "2", д-мм-гггг					
78	Масса пустой колбы с крышкой, г					
79	Объём ВСР в ГР "2" (вносимый дозатором), мл		96.0		1-я порция	2-я порция
80	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
81	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_2 , г					0.000
82	Объём ГР "С" в ГР "2" (вносимый дозатором), V^C_2 , мл		4.0			
83	Масса ГР "С", m^C_2 , г					
84	Масса ГР "2", M_2 , г		0.000			
85	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г					

1.7.2. В ячейку **D77**, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «2».

1.7.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точностью до 0,001 г. Значение массы вносят в ячейку **D78**.

- 1.7.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 40 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **D81**.
- 1.7.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу добавляют «базовый» раствор ГР «С» в количестве 4 мл (около 3,8 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **D83** (m^C_2).
- 1.7.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 56 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **E81**.
- 1.7.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «2», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «2» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку **D85**. В результате точное значение массы ГР «2» без тары M_2 вычислится автоматически и появится в ячейке **D84**.
- 1.7.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «2», m^{BCP}_2 вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке **F81**.
- 1.7.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

- 1.7.10. В ГР «2» будет присутствовать ВСР, добавленный как «чистый» ВСР, а также добавленный при внесении «базового» раствора ГР «С». Общее количество ВСР в составе ГР «2» $m^{BCP}(2)$ (в г) отобразится в ячейке **G99**, автоматически вычисленное в программе по формуле:

$$m^{BCP}(2) = m^C_2 \cdot W_{2np}^{BCP}(C) + m^{BCP}_2 \quad (1.7.1)$$

- 1.7.11. В ячейке **G94** отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «2» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $m^{Eth}(2)$ (в г), вычисленное по формуле:

$$m^{Eth}(2) = m^{BCP}(2) \cdot W_{BCP}^{Eth} \quad (1.7.2)$$

- 1.7.12. В ячейках **G89-G93** и **G95-G98** появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «2» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $m^i(2)$ (в г), вычисленные автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$m^i(2) = m^C_2 \cdot W_{2np}^i(C) + m^{BCP}_2 \cdot W_{2np}^i(BCP) \quad (1.7.3)$$

- 1.7.13. В ячейке **J94** отобразится точное значение объёма этанола в ГР «2» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $V^{Eth}(2)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(2) = \frac{m^{Eth}(2)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (1.7.4)$$

- 1.7.14. В ячейках **I 89-I 93** и **I 95-I 98** отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «2», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(2)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C^i(2) = \frac{m^i(2)}{V^{Eth}(2)} \cdot 10^6 \quad (1.7.5)$$

1.8. Приготовление ГР «З»

1.8.1. В шаблоне «StandSolutions_2025.xlsx» (лист «Расчёты») область параметров ГР «З»: строки 101-125.

	A	B	C	D	E	F
101	СОЗДАНИЕ ГР "З" на основе ГР "С". ВВЕДИТЕ:					
102	Дата создания ГР "З", д-ммм-гггг					
103	Масса пустой колбы с крышкой, г				1-я порция	2-я порция
104	Объём ВСР в ГР "З" (вносимый дозатором), мл			99.2		
105	Объёмы 1-й и 2-й порций ВСР, мл					
106	Массы 1-й и 2-й порций ВСР, m^{BCP}_3 , г					0.000
107	Объём ГР "С" в ГР "З" (вносимый дозатором), V^C_2 , мл			0.8		
108	Масса ГР "С", m^C_2 , г					
109	Масса ГР "З", M_3 , г			0.000		
110	Масса колбы с крышкой со всеми веществами, г					

1.8.2. В ячейку D102, отмеченную заливкой, вносят дату изготовления ГР «З».

1.8.3. Мерную колбу вместимостью 100 см³ (мл) закрывают стеклянной крышкой, помещают на аналитические весы и взвешивают в точности до 0,001 г. Значение массы вносят в ячейку D103.

1.8.4. Выполняют тарирование. Затем в колбу наливают около 40 мл ВСР (1-я порция), закрывают колбу стеклянной крышкой и проводят взвешивание. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D106.

1.8.5. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР. Затем с использованием дозатора в колбу добавляют «базовый» раствор ГР «С» в количестве 0,8 мл (около 0,76 г), закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D108 (m^C_2).

1.8.6. Выполняют тарирование колбы с 1-й порцией ВСР и добавленным «базовым» раствором. Далее, в колбу доливают 2-ю порцию ВСР (около 59,2 мл, до метки объема 100 мл). Закрывают колбу крышкой, перемешивают и взвешивают. Полученное точное значение массы (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку E106.

1.8.7. Колбу снимают с весов, значение массы на весах обнуляют. Колбу, содержащую весь приготовленный ГР «З», закрытую крышкой, снова ставят на весы и взвешивают. Полученное точное значение массы ГР «З» с тарой (в г, с точностью до 0,001 г) вносят в ячейку D110. В результате точное значение массы ГР «З» без тары M_B вычислится автоматически и появится в ячейке D109.

1.8.8. Значение всей массы «чистого» ВСР, внесенного в раствор ГР «З», m^{BCP}_3 вычислится автоматически путем сложения и отобразится в ячейке F106.

1.8.9. Колбу выдерживают при температуре окружающей среды в течение 25 мин.

1.8.10. В ГР «З» будет присутствовать ВСР, добавленный как «чистый» ВСР, а также добавленный при внесении «базового» раствора ГР «С». Общее количество ВСР в составе ГР «З» $m^{BCP}(3)$ (в г) отобразится в ячейке G124, автоматически вычисленное в программе по формуле:

$$m^{BCP}(3) = m^C_3 \cdot W_{2np}^{BCP}(C) + m^{BCP}_3 \quad (1.8.1)$$

1.8.11. В ячейке G119 отобразится значение массы этанола, внесенного в ГР «З» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $m^{Eth}(3)$ (в г), вычисленное автоматически по формуле:

$$m^{Eth}(3) = m^{BCP}(3) \cdot W_{BCP}^{Eth} \quad (1.8.2)$$

1.8.12. В ячейках G114-G118 и G120-G123 появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «З» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $m^i(3)$ (в г), вычисленные автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$m^i(3) = m^C_3 \cdot W_{2np}^i(C) + m^{BCP}_3 \cdot W_{2np}^i(BCP) \quad (1.8.3)$$

1.8.13. В ячейке J119 отобразится точное значение объёма этанола в ГР «З» (суммарно: за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «С»), $V^{Eth}(3)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(3) = \frac{m^{Eth}(3)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (1.8.4)$$

1.8.14. В ячейках I 114-I 118 и I 120-I 123 отобразятся «аттестованные» значения концентраций летучих компонентов в ГР «З», установленные с применением весового (гравиметрического) метода $C^i(3)$ (в мг/л АА), вычисленные в программе автоматически по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C^i(3) = \frac{m^i(3)}{V^{Eth}(3)} \cdot 10^6 \quad (1.8.5)$$

2. Расчёты концентраций и RRF в первом и втором приближениях

2.1. Расчёт массы и концентрации компонентов в градуировочном растворе «С» в нулевом приближении

2.1.1. В ячейках L39-L43 и L45-L48 рассчитываются значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «С» за счёт «базового» раствора ГР «А», в 0-м приближении $m_{0np}^i(C)$ (в г) по формуле:

$$m_{0np}^i(C) = W_{0np}^i(A) \cdot m_C^A \quad (2.1.1)$$

2.1.2. В ячейке L44 рассчитывается значение массы этанола, внесенного в ГР «С» суммарно за счёт ВСР и «базового» раствора ГР «А», $m^{Eth}(C)$ (в г) по формуле:

$$m^{Eth}(C) = m_C^A \cdot W^{Eth}(A) + m^{BCP} \cdot W^{Eth}(BCP) \quad (2.1.2)$$

2.1.3. В ячейках N39-N43 и N45-N48 рассчитываются значения концентраций летучих компонентов в ГР «С» в 0-м приближении $C_{0np}^i(C)$ (в мг/л АА) по формуле:

$$C_{0np}^i(C) = \frac{m_{0np}^i(C)}{m^{Eth}(C)} \cdot \rho_{Eth} \quad (2.1.3)$$

2.1.4. В ячейках M39-M48 рассчитываются значения массовой доли летучих компонентов и этанола в ГР «С» в 0-м приближении $W_{0np}^i(C)$ и $W^{Eth}(C)$ (г/г) по формулам:

$$W_{0np}^i(C) = \frac{m_{0np}^i(C)}{M_C}; \quad W^{Eth}(C) = \frac{m^{Eth}(C)}{M_C} \quad (2.1.4)$$

2.2. Расчёт градуировочного коэффициента RRF и концентраций компонентов в растворах ВСР, «А» и «С» в первом приближении

2.2.1. В ячейках O39-O48 рассчитываются значения градуировочных коэффициентов в 0-м приближении $RRF_{i,0np}^{Eth}$ по формуле:

$$RRF_{i,0np}^{Eth} = \frac{C_{0np}^i(C)}{\rho_{Eth}} \cdot \frac{\sum_{k=1}^N (A_k^i(C) / A_k^{Eth}(C))}{\sum_{k=1}^N (A_k^i(C) / A_k^{Eth}(C))^2} \quad (2.2.1)$$

2.2.2. В ячейках M12-M21 рассчитываются значения концентраций компонентов в ВСР в 1-м приближении $C_{1np}^i(BCP)$ (в мг/л АА) по формуле:

$$C_{1np}^i(BCP) = RRF_{i,0np}^{Eth} \cdot \rho_{Eth} \cdot \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (A_k^i(BCP) / A_k^{Eth}(BCP)) \quad (2.2.2)$$

2.2.3. В ячейках K12-K21 рассчитываются значения массовой доли компонентов в ВСР в 1-м приближении $W_{1np}^i(BCP)$ (г/г АА) по формуле:

$$W_{1np}^i(BCP) = \frac{ABV\%}{100\%} \cdot \frac{C_{1np}^i(BCP)}{\rho_{BCP}} \quad (2.2.3)$$

2.2.4. В ячейках **O12-O21** рассчитываются значения масс летучих компонентов и этанола $m_{1np}^i(A)$ (в г) с учётом их содержания в исходных реактивах и в ВСР, а в ячейках **Q12-Q21** – их массовые доли $W_{1np}^i(A)$ в растворе ГР «А» в 1-м приближении по формулам:

$$m_{1np}^i(A) = m_{0np}^i(A) + W_{1np}^i(BCP) \cdot m_A^{BCP} \quad (2.2.4)$$

$$W_{1np}^i(A) = \frac{m_{1np}^i(A)}{M_A} \quad (2.2.5)$$

2.2.5. В ячейках **P39-P43** и **P45-P48** появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $m_{1np}^i(C)$ (в г), вычисленные по формуле:

$$m_{1np}^i(C) = m_C^A \cdot W_{1np}^i(A) + m_C^{BCP} \cdot W_{1np}^i(BCP) \quad (2.2.6)$$

2.2.6. В ячейках **Q39-Q43** и **Q45-Q48** рассчитываются значения массовых долей летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $W_{1np}^i(C)$ (г/г), по формуле:

$$W_{1np}^i(C) = \frac{m_{1np}^i(C)}{M_C} \quad (2.2.7)$$

2.2.7. В ячейках **R39-R48** вычисляются значения концентраций летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $C_{1np}^i(C)$ (в мг/л АА), по формуле:

$$C_{1np}^i(C) = \frac{m_{1np}^i(C)}{m^{Eth}(C)} \cdot \rho_{Eth} \quad (2.2.8)$$

2.2.8. В ячейках **S39-S48** рассчитываются значения градуировочных коэффициентов в 1-м приближении $RRF_{i,1np}^{Eth}$ по формуле:

$$RRF_{i,1np}^{Eth} = \frac{C_{1np}^i(C)}{\rho_{Eth}} \cdot \frac{\sum_{k=1}^N (A_k^i(C) / A_k^{Eth}(C))}{\sum_{k=1}^N (A_k^i(C) / A_k^{Eth}(C))^2} \quad (2.2.9)$$

2.3. Расчёт концентраций компонентов в растворах ВСР, «А» и «С» во 2-м приближении

2.3.1. В ячейках **N12-N21** рассчитываются значения концентраций компонентов в ВСР во 2-м приближении $C_{2np}^i(BCP)$ (в мг/л АА) по формуле:

$$C_{2np}^i(BCP) = RRF_{i,1np}^{Eth} \cdot \rho_{Eth} \cdot \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (A_k^i(BCP) / A_k^{Eth}(BCP)) \quad (2.3.1)$$

2.3.2. В ячейках **L12-L21** рассчитываются значения массовой доли компонентов в ВСР во 2-м приближении $W_{2np}^i(BCP)$ (в г/г) по формуле:

$$W_{2np}^i(BCP) = \frac{ABV\%}{100\%} \cdot \frac{C_{2np}^i(BCP)}{\rho_{BCP}} \quad (2.3.2)$$

2.3.3. В ячейках **P12-P21** рассчитываются значения масс летучих компонентов и этанола $m_{2np}^i(A)$ (в г) с учётом их содержания в исходных реактивах и ВСР, а в ячейках **S12-S21** – массовые доли $W_{2np}^i(A)$ в растворе «А» во 2-м приближении по формулам:

$$m_{2пр}^i(A) = m_{0пр}^i(A) + W_{2пр}^i(BCP) \cdot m_A^{BCP} \quad (2.3.3)$$

$$W_{2пр}^i(A) = \frac{m_{2пр}^i(A)}{M_A} \quad (2.3.4)$$

2.3.4. В ячейках **G39-G43** и **G45-G48** появятся значения масс летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $m_{2пр}^i(C)$ (в г), вычисленные по формуле:

$$m_{2пр}^i(C) = m_C^A \cdot W_{2пр}^i(A) + m_C^{BCP} \cdot W_{2пр}^i(BCP) \quad (2.3.5)$$

2.3.5. В ячейках **K39-K43** и **K45-K48** рассчитываются значения массовых долей летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $W_{2пр}^i(C)$ (г/г), по формуле:

$$W_{2пр}^i(C) = \frac{m_{2пр}^i(C)}{M_C} \quad (2.3.6)$$

2.3.6. В ячейке **J44** отображается точное значение объёма этанола в ГР «С» (суммарно: за счёт BCP и «базового» раствора ГР «А»), $V^{Eth}(C)$ (в мл), вычисленное по формуле:

$$V^{Eth}(C) = \frac{m^{Eth}(C)}{\rho_{Eth}} \cdot 10^6 \quad (2.3.7)$$

2.3.7. В ячейках **I39-I48** вычисляются значения концентраций летучих компонентов, внесенных в ГР «С», $C_{2пр}^i(C)$ (в мг/л АА), по формуле для $i = 1, \dots, 9$:

$$C_{2пр}^i(C) = \frac{m_{2пр}^i(C)}{V^{Eth}(C)} \cdot 10^6 \quad (2.3.8)$$

Лист «Концентрации на печать»

№в-ва, i	Дата создания	10-Фев-2025	Дата создания	10-Фев-2025	Дата создания	10-Фев-2025	Крепость, ABV, об. %	39.59
	ГР "А"	Концентрация по результатам взвешивания	ГР "В"	Концентрация по результатам взвешивания	ГР "D"	Концентрация по результатам взвешивания		
	5000-6000 мг/л АА		400-600 мг/л АА		180-240 мг/л АА			
	Компонент	C ⁱ (A), мг/л АА	Компонент	C ⁱ (B), мг/л АА	Компонент	C ⁱ (D), мг/л АА	Component	CAS
1	ацетальдегид	4978	ацетальдегид	490.9	ацетальдегид	196.4	acetaldehyde	CAS 75-07-0
2	метилацетат	5240	метилацетат	516.6	метилацетат	206.6	methyl acetate	CAS 79-20-9
3	этилацетат	5240	этилацетат	516.6	этилацетат	206.6	ethyl acetate	CAS 141-78-6
4	метанол	5253	метанол	530.4	метанол	220.4	methanol	CAS 67-56-1
5	2-пропанол	5242	2-пропанол	519.3	2-пропанол	209.3	propan-2-ol	CAS 67-63-0
Eth	этанол	789270	этанол	789270	этанол	789270	ethanol	CAS 64-17-5
6	1-пропанол	5213	1-пропанол	514.0	1-пропанол	205.6	propan-1-ol	CAS 71-23-8
7	изобутанол	5185	изобутанол	511.1	изобутанол	204.4	2-methylpropan-1-ol	CAS 78-33-1
8	бутанол	5134	бутанол	506.2	бутанол	202.4	butan-1-ol	CAS 71-36-3
9	изоамилол	5120	изоамилол	504.8	изоамилол	201.9	3-methylbutan-1-ol	CAS 137-32-6
	Диапазон	5000-6000 мг/л АА	Диапазон	400-600 мг/л АА	Диапазон	180-240 мг/л АА		
№в-ва, i	Дата создания	10-Фев-2025	Дата создания	10-Фев-2025	Дата создания	10-Фев-2025	Дата создания	10-Фев-2025
	ГР "С"	Концентрация по результатам взвешивания	ГР "1"	Концентрация по результатам взвешивания	ГР "2"	Концентрация по результатам взвешивания	ГР "3"	Концентрация по результатам взвешивания
	240-300 мг/л АА		25-40 мг/л АА		10-25 мг/л АА		2-5 мг/л АА	
	Компонент	C ⁱ (C), мг/л АА	Компонент	C ⁱ (1), мг/л АА	Компонент	C ⁱ (2), мг/л АА	Компонент	C ⁱ (3), мг/л АА
1	ацетальдегид	243.2	ацетальдегид	24.9	ацетальдегид	10.34	ацетальдегид	2.136
2	метилацетат	255.9	метилацетат	26.1	метилацетат	10.75	метилацетат	2.119
3	этилацетат	255.9	этилацетат	26.1	этилацетат	10.74	этилацетат	2.109
4	метанол	269.7	метанол	39.9	метанол	25.12	метанол	16.025
5	2-пропанол	258.6	2-пропанол	28.8	2-пропанол	13.55	2-пропанол	4.835
Eth	этанол	789270	этанол	789270.0	этанол	789270	этанол	789270
6	1-пропанол	254.6	1-пропанол	25.9	1-пропанол	10.64	1-пропанол	2.060
7	изобутанол	253.2	изобутанол	25.8	изобутанол	10.59	изобутанол	2.049
8	бутанол	250.7	бутанол	25.6	бутанол	10.48	бутанол	2.029
9	изоамилол	250.0	изоамилол	25.5	изоамилол	10.45	изоамилол	2.023
	Диапазон	240-300 мг/л АА	Диапазон	25-40 мг/л АА	Диапазон	10-25 мг/л АА	Диапазон	2-5 мг/л АА