



简约 智能 法规依从



首届赛默飞变色龙软件用户会

# 使用技巧集锦

**ThermoFisher**  
S C I E N T I F I C



# 目 录

C O N T E N T S

一、国内 Chromeleon 变色龙用户使用心得 / 小技巧分享	1
不得不说，因为太强大	3
巧用审计追踪功能与报告功能	6
功能无所不有，满足我的各种需求	8
丰富的功能带来极大的便利	9
离线帮助，想用就用	12
报告设计随心随想，方便自由	13
自由的复制和粘贴使工作更加轻松	15
我来教你功能模块添加方法	17
重做标准系列原来可以这样快速简便	22
色谱方法调整优化——快速、准确	25
昼夜运行亦可放心下班	26
二、国外 Chromeleon 变色龙用户案例分享	29
Chromeleon 报告显著降低了新西兰药品制造商的时间和成本投入	31
Regis Technologies 在制药 / 生物制药生产领域显著提高了效率	35
Sigma-Aldrich CMO 使用 Chromeleon 变色龙色谱数据系统帮助客户满足 21 CFR Part11 要求	39
三、Chromeleon 变色龙软件部分产品亮点	43
确保合规性	45
简化工作流程	49
提高分析“一次成功率”	51
操作简便	55
SmartLink：简化数据处理	57
加速数据分析	59

发布结果 .....	61
实验室联网 .....	63

#### **四、Chromeleon 变色龙软件部分典型技术简介 .....**

65

运用色谱软件自动进行系统适应性测试 .....	67
使用 Cobra 和 SmartPeaks 实现智能积分 .....	75
交互图表：理解色谱数据的强有力的新工具 .....	95
通过 Chromeleon 变色龙色谱数据系统（CDS）软件实现第三方仪器控制 .....	101

#### **附录**

Chromeleon 变色龙软件快速入门指南	
参考卡	

一

国内 Chromeleon 变色龙用户使用心得 / 小技巧分享



# 不得不说,因为太强大

姓名：牛锐恒

单位：上海诺凯生物医药有限公司

地址：上海市闵行区北松公路588号12号楼4楼

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon7.0

## 使用心得/小技巧介绍——操作简便、功能丰富、报告交付

在这里分享以下4点使用技巧，这些技巧是在Agilent、岛津等液相色谱工作站使用中都无法体现的，这也是Chromeleon的强大之处。

### 1、“处理方法”和“仪器方法”的灵活运用

一个序列里面可以根据需要建立不同的“处理方法”和“仪器方法”，这一特点在某些产品做有关物质检查时是十分有用的，毕竟有关物质检查，不同批次的样品杂质响应也不一样，一般的积分设置不能完全适用于所有样品。尤其是在方法开发过程中，想建立一个系统的分析方法方案，Chromeleon7能做到在一个序列里面不同的处理方法和仪器方法并用，很大程度上省去了数据处理的繁琐性，如下图1和图2：

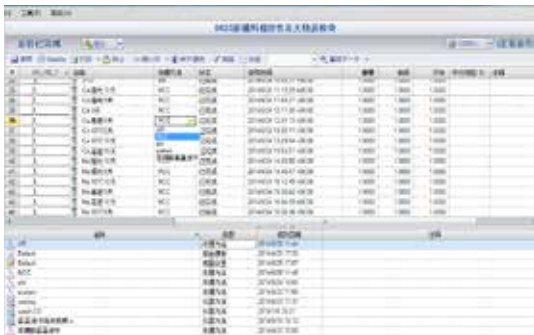


图1

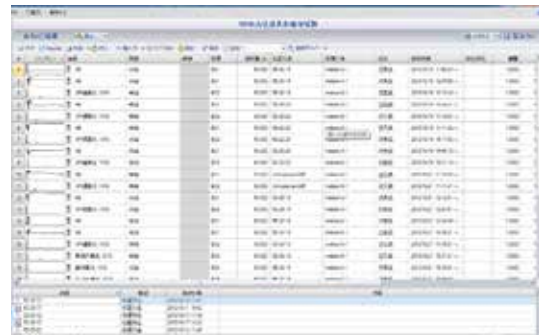


图2

### 2、数据报告的巧妙应用

如图3，要导出当前“0218有关物质分析方法验证-线性”的所有原始数据图谱，



图3

随便打开一张图谱，点击“报告设计器”如图4，在该界面点击左上角变色龙图标，如下图5，

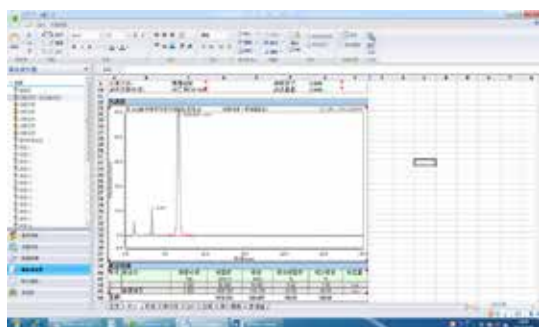


图4

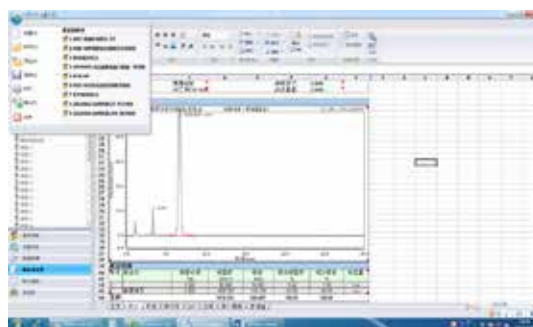


图5

点击“导出”，出现导出对话框，如图6，

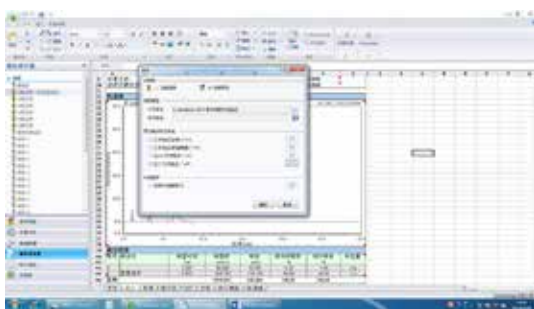


图6

点击图7中“Excel 文件格式”或“PDF 文件格式”设置需要导出的内容，最后生成的报告就是一个有连续图谱编号的 PDF 报告，这一点在写申报资料时，非常实用。尤其是在做含量分析时，在“总结”一栏里，可以直接粘贴峰面积使运算变的非常快速。

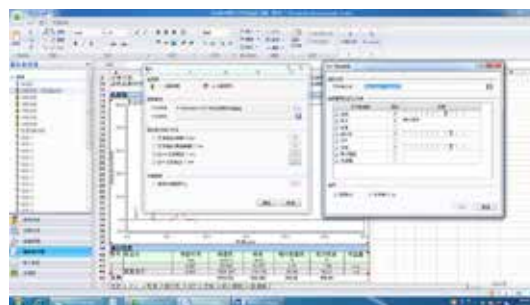


图7

### 3、便捷的数据导出功能

如图8，点击“发送到”出现如下图9界面，轻松搞定数据的备份。

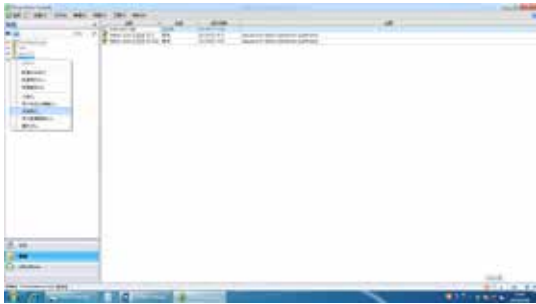


图8



图9

### 4、“管理控制台”的管理功能应用技巧

可以根据需要设置多种管理功能，尤其是“角色”这一项，非常重要，对于刚接触Chromeleon7的人可能很多东西都不熟悉，需要设置“角色”，以防改动了其他相关研究人员的数据。简洁操作如图10,11,12。

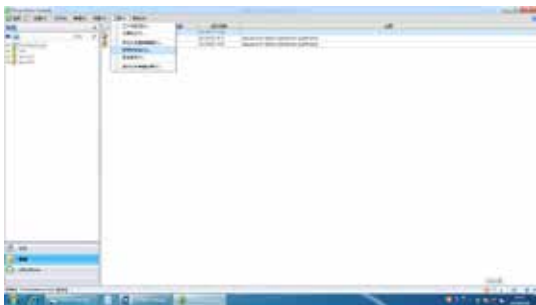


图10



图11

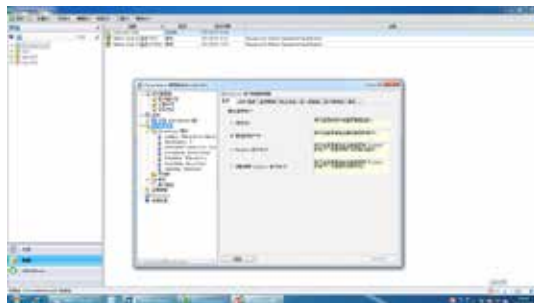


图12

# 巧用审计追踪功能与报告功能

姓名：张峰

单位：开封市食品药品检验所

地址：河南省开封市宋门关中街188号

邮编：475000

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon6.8

## 使用心得/小技巧介绍——法规依从、报告交付

在日常的实验中，不但可以使用Chromeleon®变色龙色谱数据系统进行仪器控制，还可以利用变色龙软件具备的功能提升实验室效率，例如仪器审计追踪功能，可以帮助我们更好地了解仪器工作的状态，而软件丰富的报告功能则可以帮我们更快地得到想要的结果。

### 1、巧用审计追踪功能

在Chromeleon®变色龙色谱数据系统中，有几种审计追踪记录，包括仪器的审计追踪、数据的审计追踪等。

#### 1) 仪器审计追踪记录

仪器的详细审计追踪不但包括了仪器与软件的连接情况，还记录了仪器的状态，如果了解如何查阅仪器的审计追踪就可以很方便地在实验时出现问题的查找原因。例如：在某次实验中实验人员发现柱压突然非正常增高导致后继实验无法顺利进行。后仪器维护人员检查时发现，该实验人员使用缓冲盐为流动相进行实验以后，并未用水冲柱子进行过渡，直接使用有机相致使盐析出堵塞管路。在其它的色谱工作站中，由于仪器的审计追踪并不详细，或者仅仅以使用日志的方式存在，最多只能查看到系统压力升高，而无法查看到仪器所使用的流动相是哪个流路以及流动相之间的比例，或者无法观察到未调用仪器方法进行系统冲洗、平衡时的仪器工作状态，因此不能快速判断故障来源。通过变色龙软件详细的仪器审计追踪，这些都可以进行查看。

#### 2) 数据与方法的审计追踪记录

如果需要对实验室的方法进行完全控制，还可以启用变色龙色谱数据系统的版本控制功能。通过版本控制功能，我们可以看到方法的历史版本与修改记录。而其它软件审计追踪只显示谁修改了什么方法，至于这个方法怎么改的只能去翻阅实验原始记录。使用变色龙色谱数据系统，在检验出现了偏差时，我们就可以轻松地查看方法与数据的修改记录，判断是检测时的参数改变导致结果与预期不符还是样品本身的问题。

### 2、使用报告功能编辑公式

在检验《中国药典》2010版二部项下的消旋山莨菪碱片的含量均匀度、溶出度和含量测定时，按照药典要求，需要以消旋上莨菪碱顺、反式异构体峰面积的加和进行含量计算。在使用其它各公司软件时，

如果需要出具多个色谱图数据结果叠加的报告，只能分别显示顺、反式异构体峰面积数据和结果，不能显示其峰面积的和。虽然EMPOWER软件可以在线计算峰面积的和，但需要自行编写自定义字段，操作比较麻烦。因此我们通常是根据纸质报告的数值用计算器或者excel进行离线计算。但是由于数据量很多，手工离线计算非常容易出错。

使用Chromeleon<sup>®</sup> 变色龙色谱数据系统时，只需在系统提供的模板上稍微修改一下就可完成峰面积和的计算。报告的编辑非常简单，和我们惯于使用的excel非常相似，只须先在报告中设置两列分别显示消旋上莨菪碱顺、反式异构体峰面积，随后输入诸如“=D5+E5”的公式（见下图）即可，不需要特别的公式语法或宏命令之类的知识。一旦报告里的公式编辑成功，就可以作为报告模板反复使用。

峰名	峰面积	保留时间	峰面积	保留时间	峰面积	保留时间
1	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
2	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
3	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
4	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
5	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
6	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
7	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
8	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
9	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
10	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
11	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
12	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
13	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
14	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
15	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
16	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
17	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
18	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
19	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
20	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
21	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
22	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
23	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
24	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
25	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
26	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
27	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
28	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
29	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
30	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
31	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
32	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
33	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
34	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
35	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
36	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
37	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
38	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
39	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
40	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
41	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
42	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
43	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
44	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
45	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
46	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
47	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
48	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
49	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
50	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
51	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
52	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
53	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
54	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
55	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
56	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
57	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
58	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
59	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
60	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
61	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
62	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
63	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
64	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
65	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
66	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
67	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
68	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
69	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
70	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
71	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
72	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
73	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
74	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
75	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
76	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
77	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
78	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
79	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
80	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
81	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
82	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
83	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
84	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
85	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
86	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
87	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
88	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
89	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
90	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
91	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
92	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
93	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
94	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
95	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
96	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
97	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
98	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
99	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111
100	10.211	18.2111	10.211	18.2111	10.211	18.2111

### 3、结论

药检系统实验的第一个特点是样品种类比较多，仪器使用时可能会有各种状况出现；第二个特点就是样品数据量比较大，处理数据需要花费很多的时间。使用变色龙色谱数据系统，我们不仅可以方便地监控仪器的使用情况，还可以使用其特有的简洁的报告编辑功能更快地得到实验结果，这些对于实验人员来说都是非常有用的功能。

# 功能无所不有，满足我的各种需求

姓名：黄玉瑶

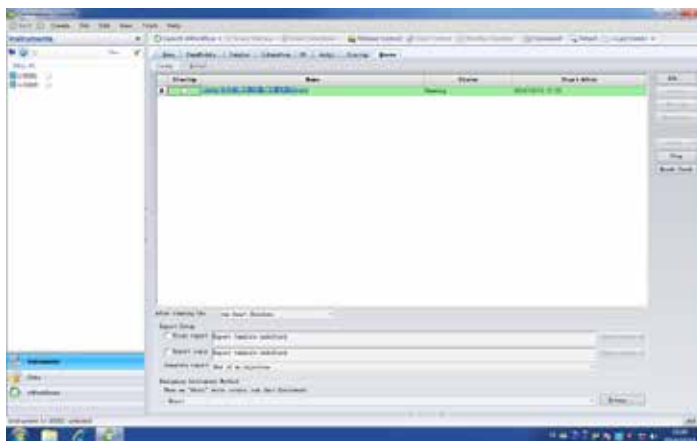
单位：广州市香雪制股份有限公司

地址：广州市萝岗区科学城金峰园路2号

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon7.2

## 使用心得/小技巧介绍——功能丰富

举例：使用变色龙仪器控制系统时，基于变色龙色多功能设置，可在“Quene”下的“Start After”处进行延迟进样设置；在“Quene”下的Emergency Instrument Method”处进行出现错误警报时将运行的方法，如可在系统报中断序列的情况下运行停流速方法，以防流动相走空。



(软件使用截图)

# 丰富的功能带来极大的便利

姓名：王文斌，尹先清

单位：长江大学化学与环境工程学院

地址：湖北省荆州市学苑路1号，邮编434023

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon 7.1 SR2

## 使用心得/小技巧介绍——数据处理、报告交付

离子色谱(IC)是一种新型的高效液相色谱(HPLC)技术，其在环境、食品卫生、石油化工和生命科学等领域均有广泛的应用。本文使用的为ICS-2100 RFIC 离子色谱仪，结合Chromeleon® 变色龙色谱数据系统，对油田采出水离子浓度进行检测并预测其结垢趋势。

Chromeleon® 变色龙色谱数据系统拥有丰富的智能功能，操作简单，界面直观，通过对其摸索和学习，总结了一些软件使用过程中的一些心得。

### 1. 操作心得

#### 1) 数据处理

在每天的实验过程中，我们要面对大量的数据处理。尤其是针对样品色谱图，溶剂峰等的干扰需要我们频繁设置、修改积分参数才能达到理想的效果。变色龙软件的Cobra积分工具有效地解决了繁琐的积分操作。

在使用“Cobra向导”进行组分检测时，可以使用“基线噪声范围”这一工具把不想在结果中显示峰信息的杂质峰去掉，这个操作通常使用鼠标在色谱图上拖拽一个范围进行取值而进行。但是使用鼠标拖动选择范围，如果所选择的区域不够典型或者不合理，往往会造成不在选中范围内的峰也消失了。这时就可以使用“手动添加Cobra参数”进行调整。

Cobra 积分工具提供了很多的参数可设置，如果发生了上述现象，只需要在不想显示的峰前将“抑制积分”参数设为“on”，在之后设置为“off”就可以让指定的峰不再被积分。

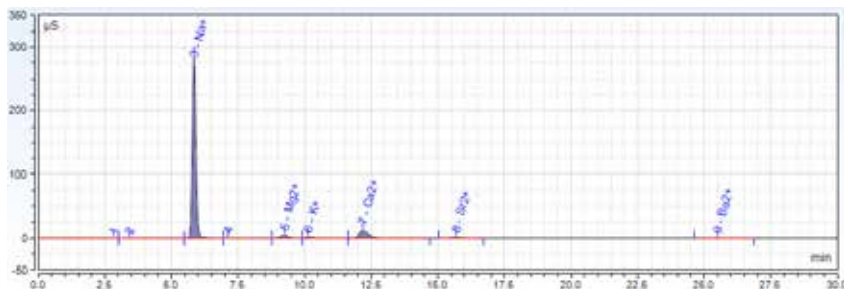


图1 使用“基线噪声范围配置”前

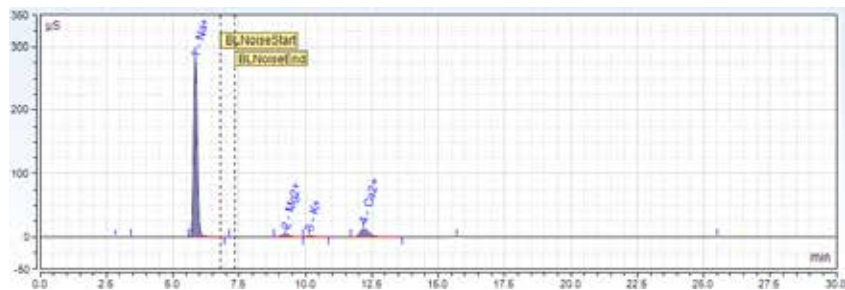


图2 使用“基线噪声范围配置”除去4号峰后



图3 使用“手动添加Cobra参数”后抑制了不需要的峰

## 2) 数据报告

在变色龙软件中内置了很多的报告模板。由于这些默认的“报告模板”的通用性，它们会详细的列出一种离子的所有检测结果。但在实际实验中，我们往往只关心最终计算的所有离子浓度。变色龙软件也可以进行报告模板的编辑工作。如有需要，可以在“报告设计器”中的任意单元格双击调出“属性报告列”，在“类别”中选择“峰结果”，在“变量”中选择“样品量”，并且在窗口下部“组分”选项卡中选定需要显示的组分，即可在一张表中列出所有的离子浓度（图4）。

一旦报告模板编辑完毕并进行了保存，以后直接使用就可以得到所要的信息，非常方便。

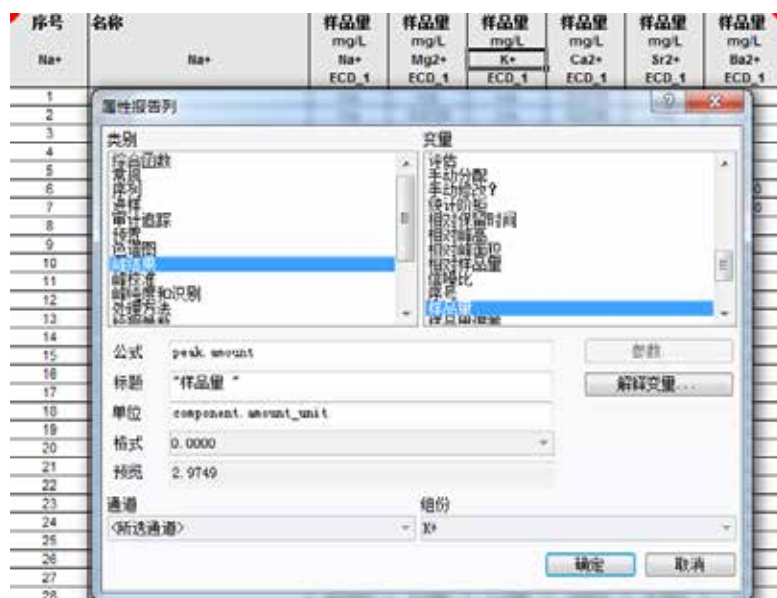


图4 在同一张表中列出所有的离子种类

### 3) 数据导出

在实验结果分析中，我们有时候要借助Excel等软件对数据（例如离子浓度等）进一步的分析。以往我们通常使用手工输入的方式将变色龙软件中的结果转移至excel中。

随着对变色龙软件的了解，我们发现可以通过导出功能将所需要的数据以特定的文件格式，例如excel和txt文件的形式导出，并且导出的数据可以使用报告模板进行定义。现在我们均使用已编写好的报告模板直接将离子浓度等信息导出，不但减少了手工操作所花费的时间，还大大减少了出错的可能性。

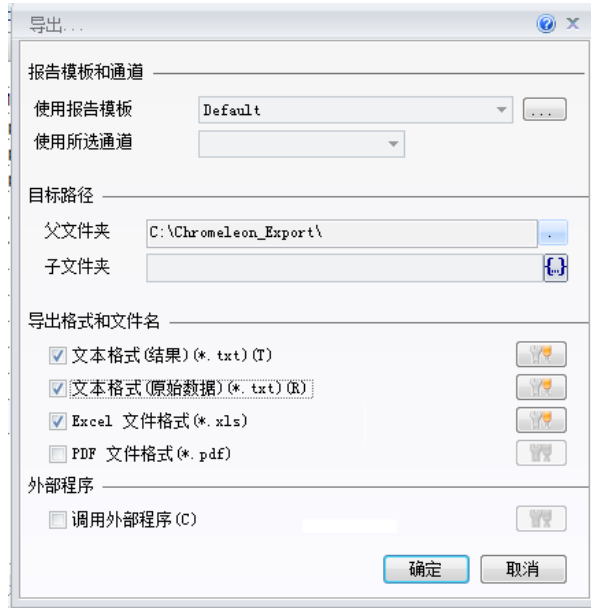


图5 选择导出的文件类型

## 2. 结论

作为一个色谱数据系统，变色龙软件不但可以进行仪器控制与数据处理，还有很多有用的功能，通过掌握变色龙软件的操作技巧，会给我们的分析过程、数据处理等带来极大的方便。

# 离线帮助，想用就用

姓名：廖树清

单位：揭阳市食品药品检验所

地址：广东省揭阳市榕城区东山广德商业城内

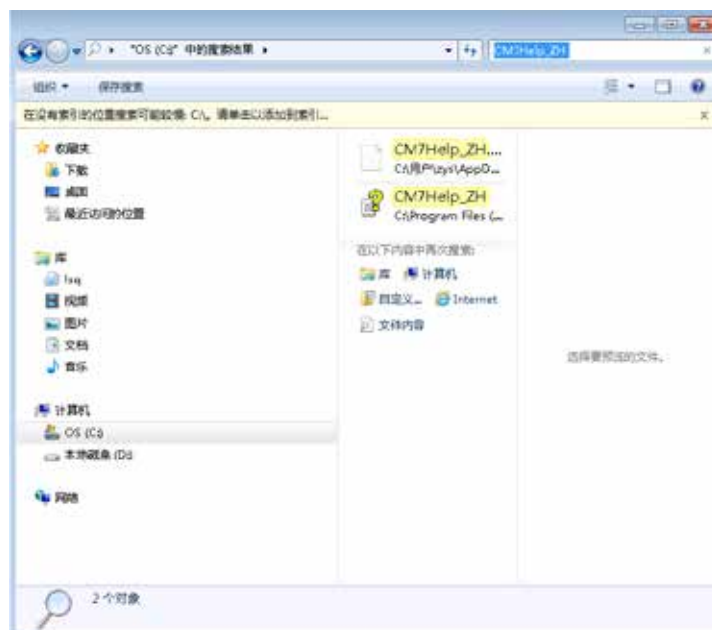
Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon7.0

## 使用心得/小技巧介绍——功能丰富

使用Chromeleon® 变色龙色谱数据系统时，需要点击F1调用“Dionex Chromeleon 7 帮助”以便查询各类术语的解释，但是这个帮助正常情况下只能在装有 Chromeleon 7 变色龙系统的计算机，才可以查找，这对经常要使用的用户，造成很大的不方便。

解决方法：调取 Chromeleon 7 的离线帮助文件，拷贝到自己所用的计算机，以便随时使用。

打开工作站安装的所在盘，按Ctrl+F，输入“CM7Help\_ZH”搜索，即可找到。



# 报告设计随心随想，方便自由

姓名：廖树清

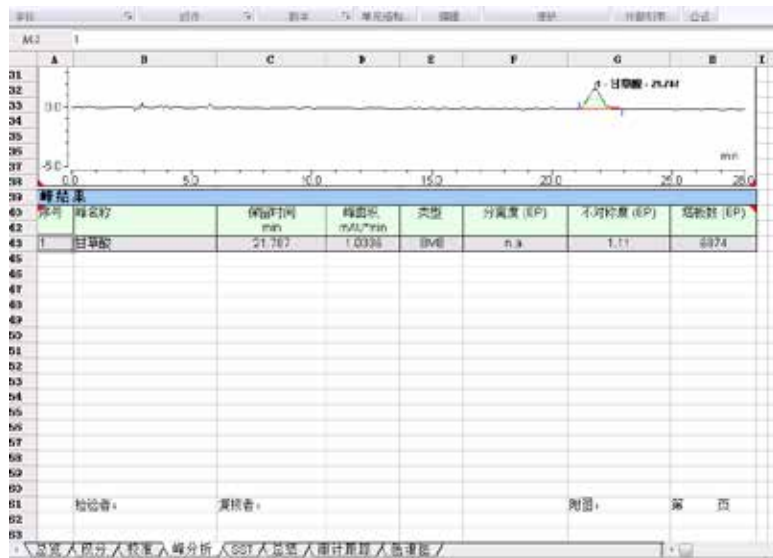
单位：揭阳市食品药品检验所

地址：广东省揭阳市榕城区东山广德商业城内

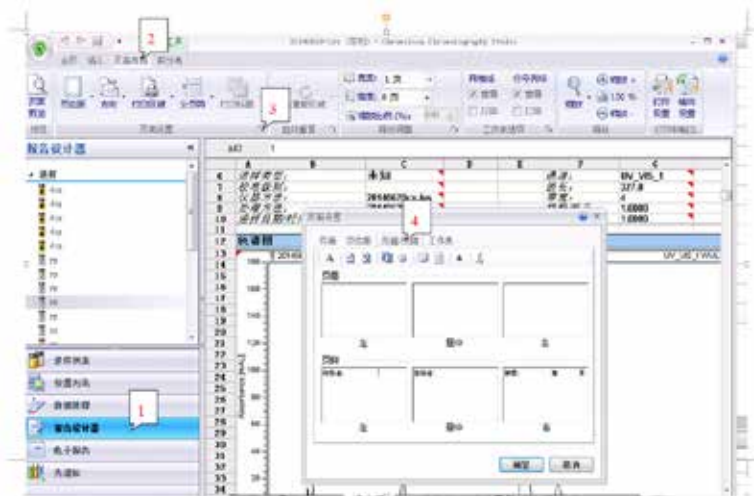
Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon7.0

## 使用心得/小技巧介绍——报告交付

没有LIMS系统的药检所和药厂在打印液相色谱图时，常常需要在底边加上“检验者”，“复核者”，“附图”，“第 页”等词语，方法就是直接在报告模式下的表格上直接添加所需要的东西。会遇到的麻烦就是遇到色谱峰数量多时，稍不注意，所添加的东西，经常打印到下一页，还要再重打。



解决方法：进入 1：“报告设计器”，→2：“页面布局”→3：“页面标题”→4：“页面设置”最后在“页眉/页脚”那里设置即可。见下图



# 自由的复制和粘贴 使工作更加轻松

姓名:赵阳

单位:上海诺凯生物医药有限公司

地址:上海市闵行区中春路988号12号楼四楼

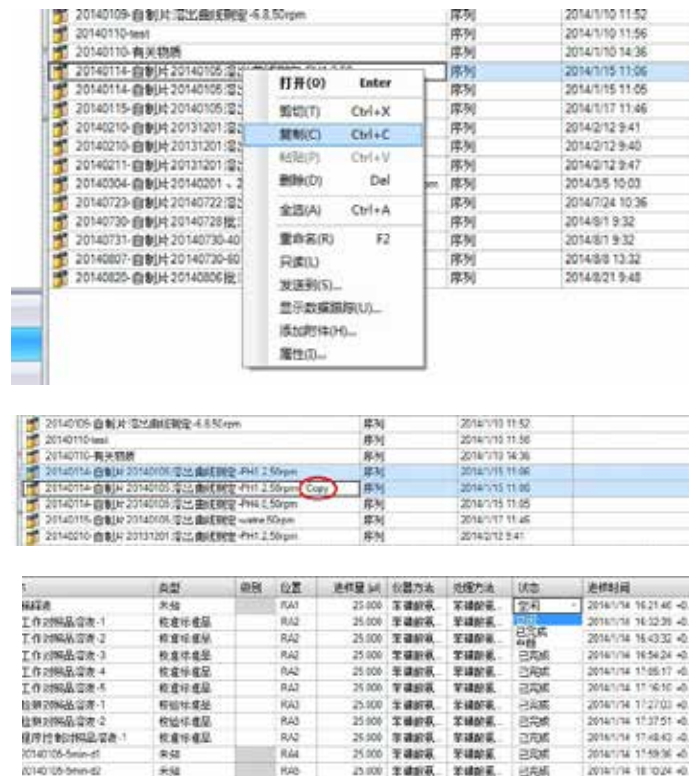
邮编:201109

Chromeleon® 变色龙版本: Chromeleon7.0

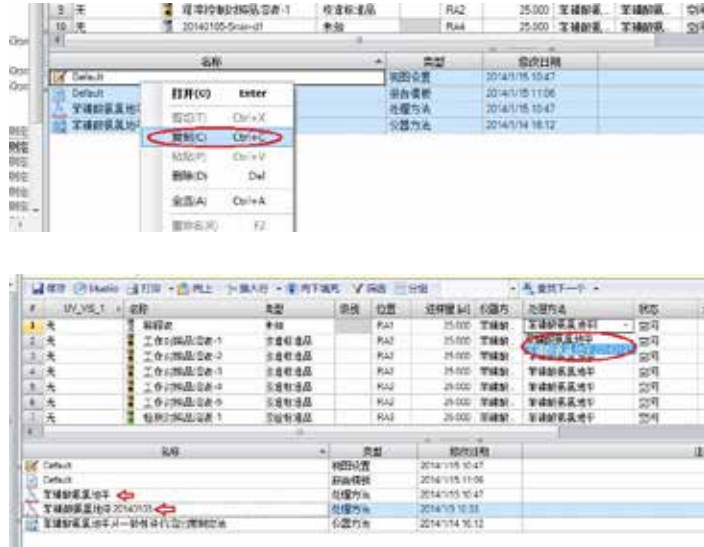
## 使用心得/小技巧介绍——操作简单

使用Chromeleon7.0已经有20个月的时间了, 随着对该软件使用程度的加深, 感觉Chromeleon是一款人性化的自由度特别高的软件, 熟练的使用Chromeleon, 能够使分析工作如鱼得水, 如虎添翼; 现将使用过程中非常实用的却容易被忽略掉的复制粘贴的情况作一小结:

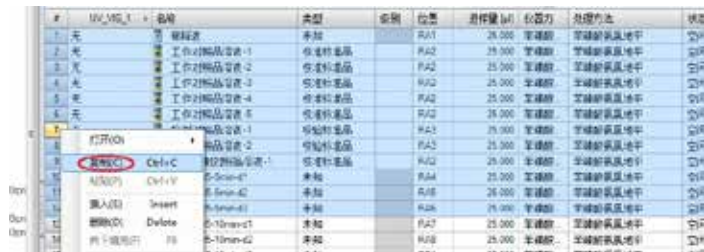
变色龙中的序列是可以随意复制和黏贴的, 比如, 做溶出曲线样品的测定时, 需要新建一个序列, 这个序列的内容是和一個現成的序列相同或相似的, 这个时候就可以将这个現成的序列复制, 粘贴到你需要的地方, 然后重命名, 打开序列, 稍作修改, 这样一个新的序列就很轻松的建好了。



在一个序列下面，变色龙会把该序列对应的处理方法、仪器方法、报告模板、视图设置都列出来，这些东西都是可以随意复制、移动和添加的，只要你愿意，一个序列下你可以添加n多个处理方法，然后在序列处理方法下拉菜单中就可以选择需要的处理方法了，当然，仪器方法、报告模板和视图设置页都可以这样操作，这样一个序列中就可以包含了不同的仪器方法、处理方法等，这样就给检测或研究的工作带来了极大的便利。



在一个序列中，其中的样品我们也可以随意复制和粘贴，任意选择某几行和某几列，复制，然后粘贴到本序列或其他序列相应的位置即可，需要注意的是，当涉及到复制仪器方法和处理方法这些框框时，粘贴的序列中应包含相对应的这些文件；可以自由的复制和粘贴给我们的工作带来了极大的便利。



在工作过程中，我们可能会用到截图，以便分析和讨论，当然截图的方法有很多种，由于不放心在装有变色龙软件的电脑上装各种来路不明的截图软件，所以，我一直在使用一种很简便，但可能不太常用的方法，将电脑停留在需要截图的界面，按PrtScn SysRq键，然后打开电脑附件中的画图，点粘贴，然后再根据需要裁剪，亦可以对画面进行圈点强调和批注，然后保存为需要的格式就可以了，本篇文章中图片均是通过该方法获取，当然，在电脑附件中，一般都会会有一个系统自带的截图工具，在截图过程中也非常好用。

强大的变色龙软件给用户提供了多种可能，还有许多地方，我们可以通过简单的复制和粘贴使工作更加便利；当然，在其他方面，在使用的过程中各种大大小小的方面，无不体现出变色龙软件的便利性高效性和专业型。

# 我来教你功能模块添加方法

姓名：姜川 (手机13615841510)

单位：丽水市质量技术监督检测院

地址：丽水市中山街北395号 (511室)

邮编：323000

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon6.8

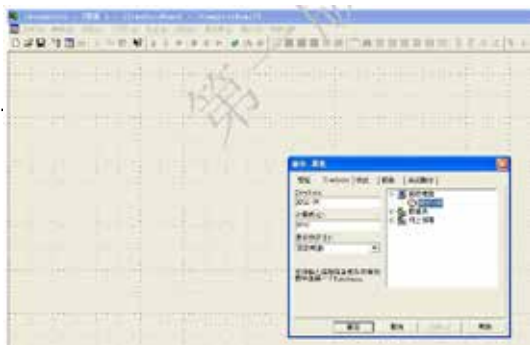
## 使用心得/小技巧介绍——功能丰富

通过一段时间对变色龙软件的使用，发现有些控制面板中的功能模块需要调整或增加，通过一段时间自己尝试着练习使用了一下。下面就以增加“流动相剩余量监控模块”为例说明变色龙软件自定义功能模块设置方法。希望能对各位“龙友”有所帮助，不涉及商业活动。文中所涉及软件均为美国 Thermo Fisher 公司产品。

- 1、点击“文件”——“新建”选择“控制面板”点击“确定”。



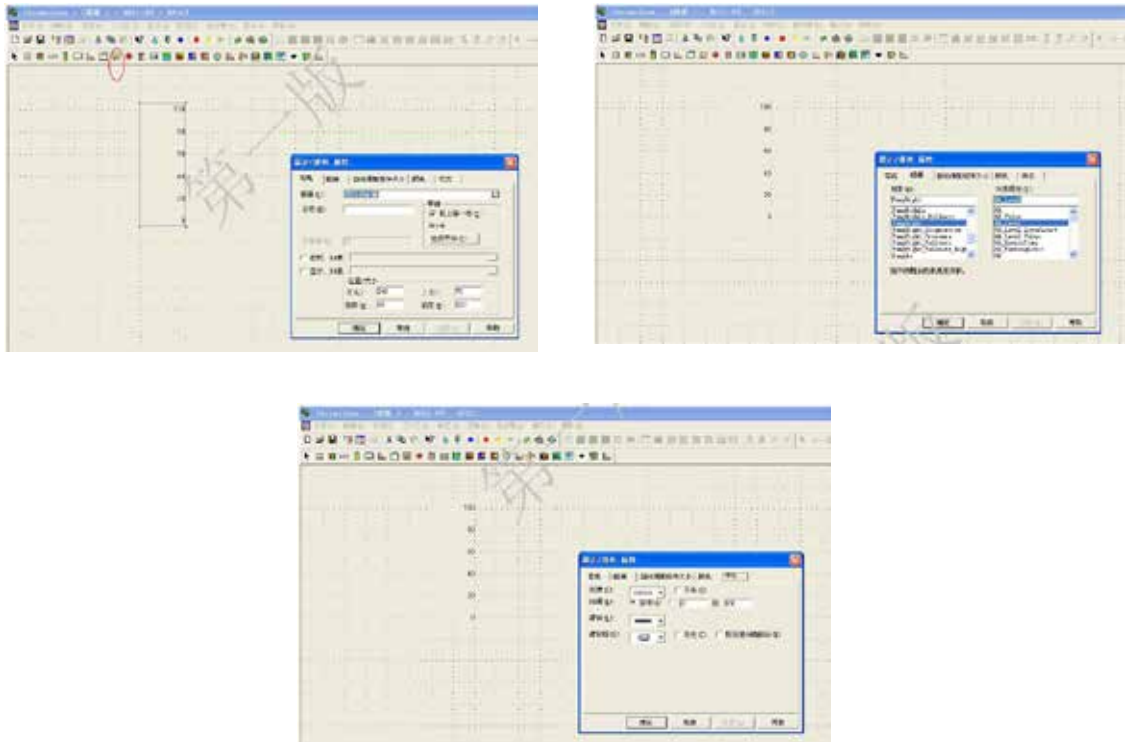
- 2、在弹出窗口中选择合适的 Timebase



- 3、在“视图”中选择“布局”则可以在工具栏中显示出相应的工具条。



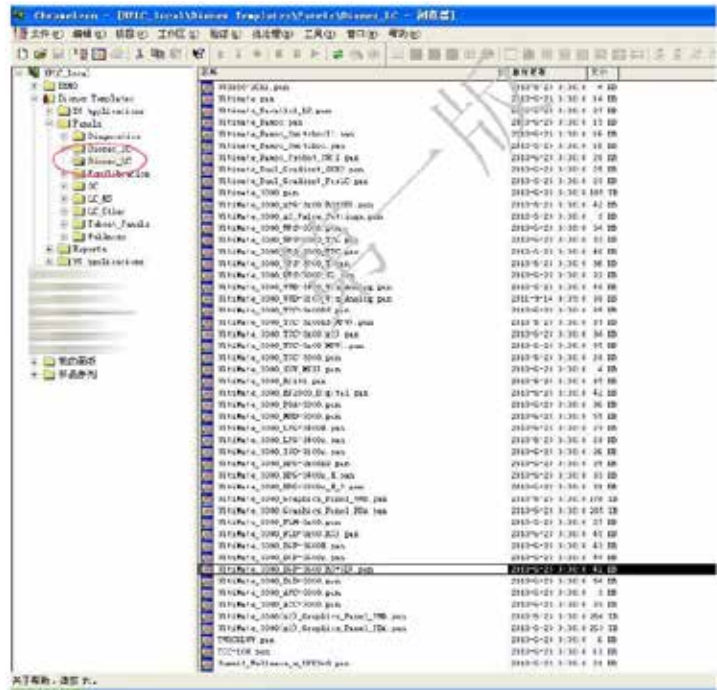
4、在工具条中选择“量计/滑块”，在工作区拉出相应形状区域，在区域中点击右键，选择“属性”依次设定选项中内容。其中“链接”是关键，需要从命令集中选择需要功能模块可以对应的软件功能。（每种模块可对应的功能是一定的，不是全能的）。



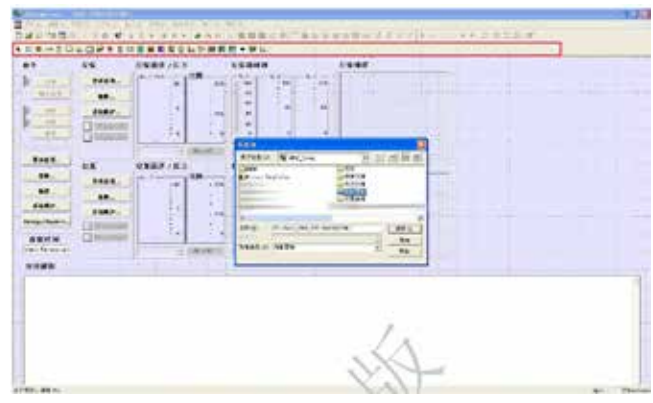
5、在工具条设置中选择“组框”，在工作区拉出相应形状区域，在区域中点击右键，选择“属性”依次设定选项卡中设置文字字体和字号。并以此类推完成所需功能模块的编辑工作。



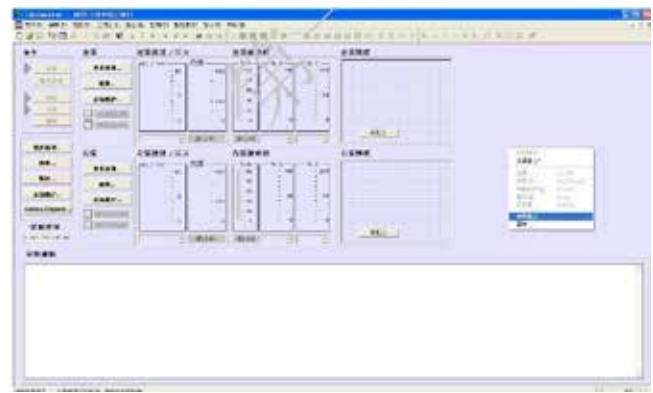
6、在浏览器中红圈所对应区域中找到所使用仪器对应的默认控制面板，打开。



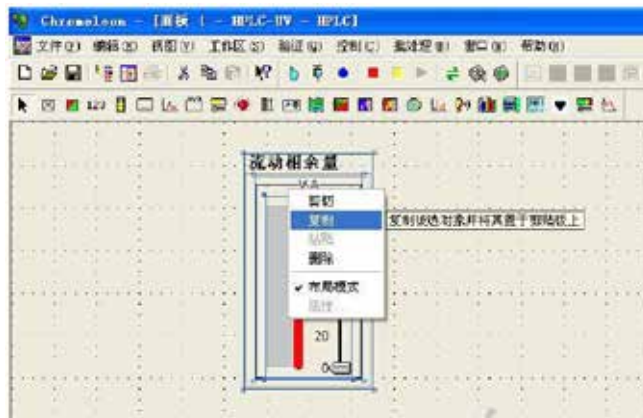
7、将该控制面板另存于一自定义文件夹中，以免更改失败后源面板损坏，或者因源文件夹上锁而不能保存。以后编辑另存后的面板而不是默认的源面板。此图中红色框所示即为布局模式工具条。



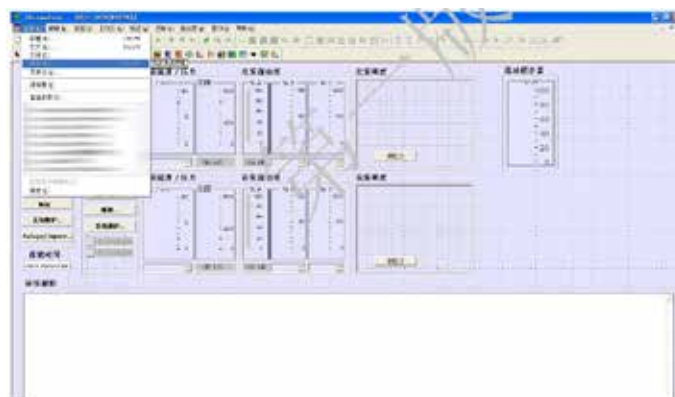
8、在另存后的控制面板空白处点击右键，选择“布局模式”。



9、将此前已编辑好的模块框选后点击右键选择“复制”。



10、将复制后的模块粘贴入处于布局模式的控制面板中，拖动到合适的位置。并将控制面板进行保存。



11、打开一个已经配制好的面板集，在空白处点击右键选择添加面板。



12、找到此前添加过功能模块的控制面板。



13、移除原有面板集中的相应的未添加模块的面板。如需调整面板顺序，则可以先删除预定位置后面的几个模块，后依次重新添加模块即可。下图是我已经设好的一个泵控制面板。



# 重做标准系列 原来可以这样快速简便

姓名：吴福静

单位：浙江省乐清市环境保护局监测站

地址：浙江省乐清市乐成镇民丰路

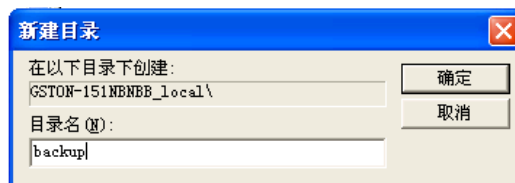
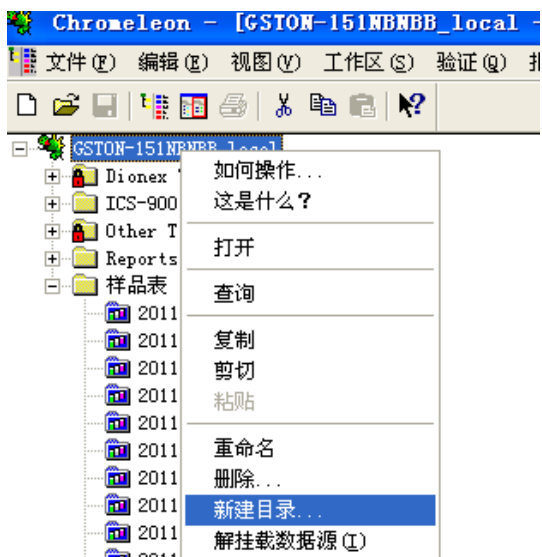
邮编：325600

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon6.8

## 使用心得/小技巧介绍——数据处理

使用Chromeleon® 变色龙色谱数据系统时，可按以下方法快速重做标准系列：

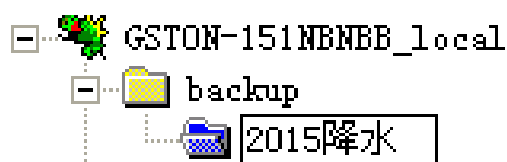
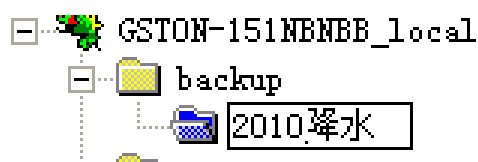
- 1、在变色龙界面根目录下新建目录backup:



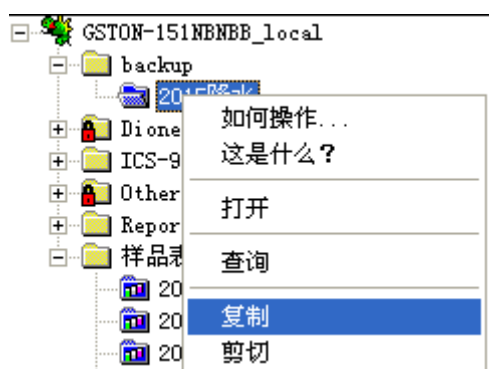
2、在样品表目录下选中已有的样品目录，复制后粘贴至上述 backup 目录：



3、在backup目录下将样品目录名称改成新的样品目录名：



4、将新的样品目录复制到样品表目录下：



5、打开新的样品目录，将其中标准系列的状态从“完成”全部改为“待测”，保存后即可进样开始构建新的标准系列。

序号	名称	类型	位置	进样量	程序	方法	状态
1	blank	标准	1	10.0	test	test	完成
2	std-1	标准	2	10.0	test	test	待测
3	std-2	标准	3	10.0	test	test	多次
4	std-3	标准	4	10.0	test	test	完成
5	std-4	标准	5	10.0	test	test	中断
6	std-5	标准	6	10.0	test	test	完成

序号	名称	类型	位置	进样量	程序	方法	状态
1	blank	标准	1	10.0	test	test	待测
2	std-1	标准	2	10.0	test	test	待测
3	std-2	标准	3	10.0	test	test	待测
4	std-3	标准	4	10.0	test	test	待测
5	std-4	标准	5	10.0	test	test	待测
6	std-5	标准	6	10.0	test	test	待测

# 色谱方法调整优化——快速、准确

姓名：段琼

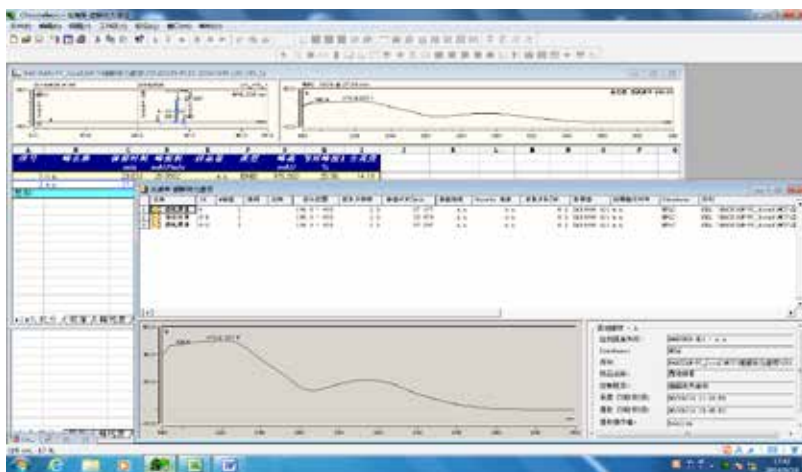
单位：河北省药品检验研究院

地址：河北省石家庄市富强大街16号

Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon6.8

## 使用心得/小技巧介绍——数据处理

使用Chromeleon® 变色龙色谱数据系统进行数据采集时，同时采集标准物质的光谱数据，建立数据库。在后续工作中，因变色龙数据系统可以进行成分自动与数据库匹配，进而对于目标成分可以进行快速定性定量检查，对色谱方法的分离度、理论塔板数进行考察。不同基质的样品引起的色谱条件不适用等问题可以进行快速的优化，大大节约时间，可以解决每次色谱方法调整后，目标成分保留时间不确定而无法判断调整后看方法是否适用等问题。



( 软件使用截图 )

# 昼夜运行亦可放心下班

姓名：马春艳

单位：河北省药品检验研究院

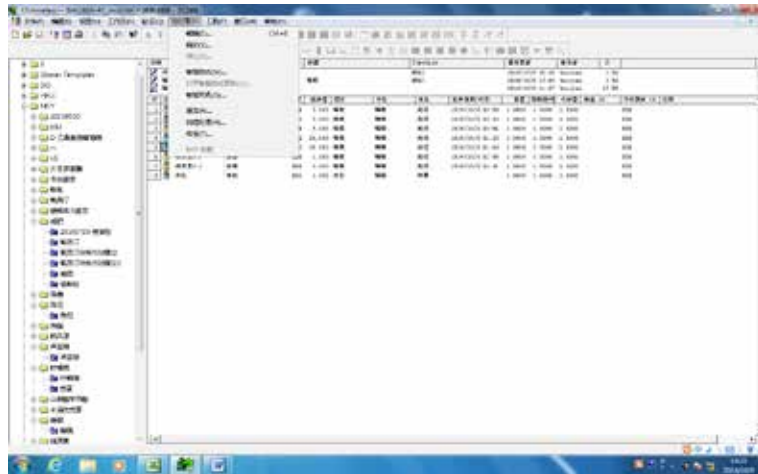
地址：河北省石家庄市富强大街16号

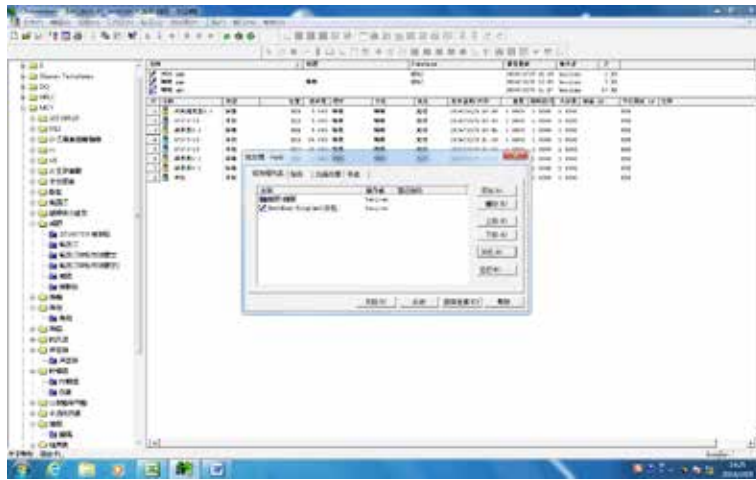
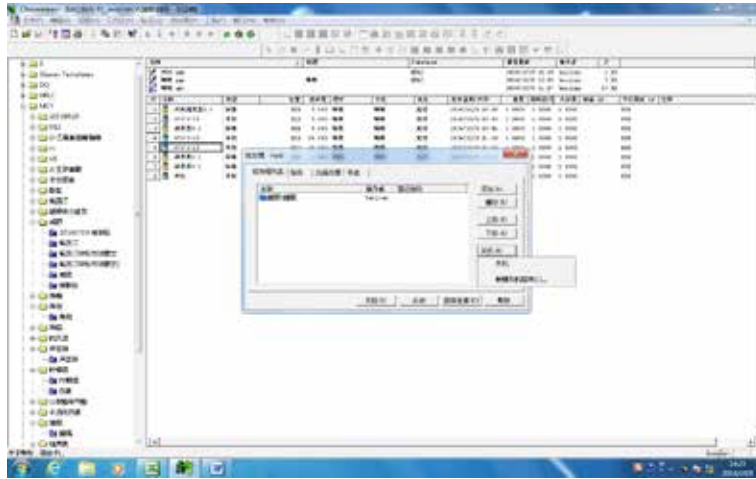
Chromeleon® 变色龙版本：Chromeleon6.8

## 使用心得/小技巧介绍——功能丰富

使用Chromeleon® 变色龙色谱数据系统，发现其功能丰富，尤其是在样品量多，需要昼夜运行时，排好序列，设置好冲柱程序方法以及关机程序，做到人放心下班，仪器仍然工作。具体操作是：

- 1、编辑冲柱程序，用此程序运行水（或者甲醇）；
- 2、点击批处理—编辑—新建关机程序；
- 3、把新建的关机程序添加到样品批处理之后。







二

国外 Chromeleon 变色龙用户案例分享



# Chromeleon 报告显著降低了新西兰药品制造商的时间和成本投入

“ Chromeleon 报告设计器是一款用于计算和显示数据的强大工具，据我们所知，此工具远胜于其它任意一种软件包……根据每月的工作量，使用 Chromeleon 报告所节约的时间和成本相当于节省 4 - 5 名全职雇员。其节约的时间和成本高于预期。”

Bernd Boscolo  
QC 改进项目组长和 CDS 管理员  
道格拉斯制造有限公司  
奥克兰，新西兰



## 简介

道格拉斯制造有限公司成立于 1967 年，是道格拉斯制药公司的一家子公司。该公司管理着位于新西兰和斐济的生产基地，遵守药品生产制造管理规范（GMP），通过了食品和药物管理局（FDA）的认证并采用最先进的生产技术。两个基地都生产药品、保健品、膳食补充剂、化妆品和动物保健品并对产品进行包装。除符合 FDA 法规要求之外，道格拉斯制造有限公司还得到了新西兰卫生部以及新西兰初级产业部的授权。为增强生产能力，公司继续利用先进的实验室进行分析试验以及新产品研发。

道格拉斯制造有限公司对原料药、中间体和成品进行稳定性试验、微生物检验及各种分析。该公司根据相应的药典指南（美国、英国和欧洲）对辅料和活性药品成分进行各项试验。

对于原料药，该公司对其残留溶剂、纯度和杂质、水分、pH 值、比旋光度、密度和其它相关参数进行检测。成品和中间体的分析包括限度试验、片剂溶出度 / 崩解度试验以及众多利用超高效液相色谱、高效液相色谱以及气相色谱的方法。

Bernd Boscolo 毕业于德国伊斯尼应用科学大学，获得了化学工程学位。在加入道格拉斯制造有限公司前（八年前），在瑞士基希贝格私营药品制造商 Swiss Caps AG 工作了三年多。在其最近的任职经历中，担任公司 QC 改进项目组长，负责监督 Chromeleon CDS 在公司的质量控制和新产品研发实验室中的运行。他的职责为设计并验证 Chromeleon 报告模板。

## 样品处理量得到改进

道格拉斯制造有限公司利用 Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 色谱数据系统 (CDS) 软件控制 35 台以上的气相色谱仪和液相色谱仪, 这些色谱仪中近三分之二来自 Dionex。

在道格拉斯每月进行的 500 - 600 次分析运行中, 约有 90% 的分析使用 Chromeleon CDS 软件中的 Chromeleon 报告模板直接计算出结果。

在没有使用此方式之前, 该公司使用经过验证的外部电子表格计算来自某些测试的结果。

“以往, 我们手动计算并手工检查所有结果。针对我们大批量产品的已验证的计算模板显著地改变了这一状况。但是这种计算模板无法适用于大部分试验。虽然利用计算模板得到的结果无需手工检查, 但抄录错误仍普遍存在。

目前, 我们有二个用于特定产品的和三个通用的 Chromeleon 报告用于计算 13 个不同的 GC 和 LC 试验结果。所有结果均在 Chromeleon 内计算, 无需第三方电子表格。这五个报告取代了我们 30 多个计算模板, 所以维护工作大大减少。尤其值得我们骄傲的是我们用于有关物质/已知杂质含量的报告。该报告可单独替代我们大批量产品用的 20 个产品专用计算模板, 也可用于那些之前无法使用 Excel 模板的大部分原料方法。

“我们报告的起始点是 Chromeleon 扩展包中的模板; 这些模板提供了关于如何修改公式以满足我们需求的有用信息。”

Chromeleon 扩展包是免费提供的一套模板, 包括样品序列、方法和报告模板。该扩展包可使用户轻松快捷地执行和报告需要大量时间处理的常用测试。此模板自动地将分析结果与指标进行比较, 让用户立即知道测试是否通过或失败。

## 选择正确的 CDS

每个公司都有选择 CDS 的理由。一些组织完全基于样品通量和仪器数量来决定; 其他组织则期望实现方法与仪器一致性。

在不进行集中控制和数据存储的情况下, 每个的独立操作的计算机 (工作站可以控制一台到多台仪器。但是键盘、显示器和外围设备的使用顺序以及调度问题出现的频率会成倍增加, 例如当两名分析员需在由同一台电脑控制的不同仪器上进行操作时。通过多台色谱仪进行方法操作必须通过手动输入或传递, 这样的分散控制意味更多的手工操作并带来更大的人为错误风险。

“在安装 Chromeleon CDS 前, 我们在连接仪器的 PC 本地存储了 HPLC 数据。安装在客户端/服务器环境中的 CDS 提供了安全的存储数据。我们的生产厂符合 GMP 且通过了 FDA 认证, 与此同时我们所有的 Chromeleon 报告都根据 GAMP5 进行了确认。”

或许不采用中心化的色谱数据系统的最昂贵的后果就是需要在多种仪器软件操作平台上培训工作人员。

“对于使用源自多个供应商的 LC 和 GC 的实验室, 其学习曲线 (learning curve) 有时使人崩溃。理论上, 未经过特定仪器模块培训的工作人员工作效率极低。而使用 Chromeleon 软件的科学家和员工仅需学习一种软件平台”。

道格拉斯制造有限公司通过一种典型方式成为了 Chromeleon CDS 的用户。起初, 公司从一家顶级供应商处购买了 HPLC 仪器和软件。

“虽然硬件本身足够耐用, 但是我们发现软件非常不直观, 所以我们开始寻找其它控制程序包。当时, Agilent 和 Waters 公司的产品太昂贵了, 而相比之下, Chromeleon CDS 恰好在价格、性能和人性化方面比较合适。”

Bernd 还表示, “Chromeleon CDS 为第三方仪器提供最好的支持; 竞争对手的软件仅为少数第三方仪器提供有限支持。”

“我们报告的起始点是 Chromeleon 软件扩展包中的模板……”

“Chromeleon CDS 为第三方仪器提供最好的支持; 竞争对手的软件仅为少数第三方仪器提供有限支持。”

## 实现企业即期效益

在安装网络版 CDS 前，道格拉斯通过传统工作站形式的软件控制对应的分析仪器。Chromeleon CDS 提供先进的网络功能，改善了实验室数据流。

“现在，我们无需大量精力维护数据和系统，还能远程处理数据。由于数据检查员和审核员在他们的个人计算机中安装了 Chromeleon CDS，所以他们不再需要与仪器处于同一房间内。”

根据 Bernd 所述，建立分析序列和方法非常简单且极其灵活。

“设置序列、处理方法和仪器控制程序非常简单，且能在设置过程中提供很大的灵活性。我们使用自己的序列模板，它们运行得非常完美。”

Chromeleon CDS 还简化了道格拉斯制造有限公司数据查询和数据趋势分析的方式。目前该公司普遍依靠软件内置的数据查询功能准备每月的报告。

Bernd 最近还设计了一个用于检测其公司数百根高效液相色谱柱性能的报告。

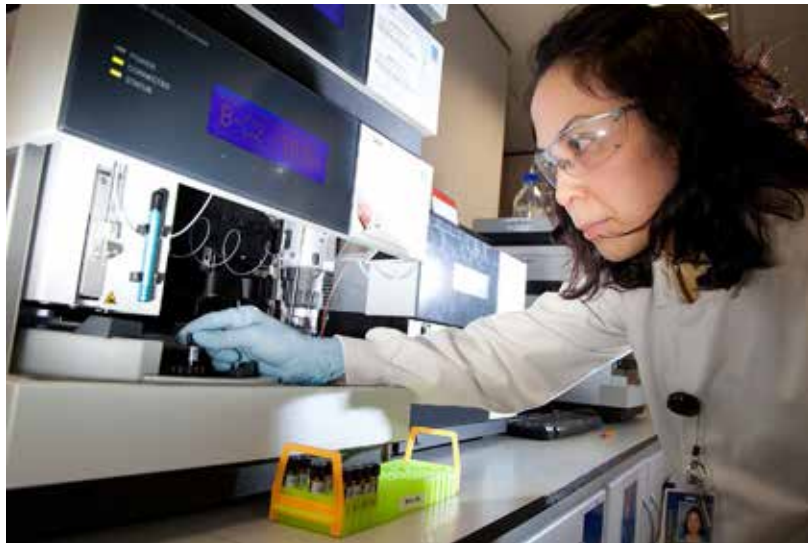
“以往的步骤需要手动将结果输入到 Excel 电子表格中。每个色谱柱有自己的工作簿。现在，简单地针对每根高效液相色谱柱进行查询就可将数据从 Chromeleon CDS 数据库中提取出来，并提供压力、分离度、塔板数、不对称性以及保留时间的趋势图。我们还使用一个仪器利用率的报告监控我们每台仪器的工作量。”

Chromeleon CDS 为道格拉斯制造公司提供大量时间节省和成本节约所带来的效益，包括 21 CFR Part11 法规遵从性。Bernd 在完全服从电子签名法规方面的经验非常典型。

在安装 CDS 之前，道格拉斯员工手写签发关键性的文件。一段时间之后，公司过渡到印刷文件和电子签名的组合的，被 Bernd 称为“混合系统”的时代。

“这种混合方式让我们仔细地检查电子签名以及如何最好地推动电子签名向前发展。在不久的将来，我们将改为仅使用电子签名。我们立即意识到了电子签名的安全性效益，它可保护序列和所有计算出的数据。当然，我们还节约了大量的纸张，这降低了成本并保护了环境。”

“现在，我们无需耗费大量精力维护数据和系统，还能远程处理数据。我们的数据检查员和审核员不再需要与仪器处于同一房间内……”



“我们立即意识到了电子签名的安全性效益，其可保护序列和所有计算数据。当然，我们还节约了大量纸张……”

## 减少维护和误差

根据 Bernd 所述，与许多繁忙的药学服务实验室一样，道格拉斯制造有限公司要维持非常多的试验方法和分析程序——约 500 种。以前，需要三名全职人员维持这些方法，其中一名工作人员专门设计和验证用于大批量产品试验方法的计算模板。

“现在，Chromeleon 报告考虑到了这一点。由于我们保留了绝大多数的通用报告，所以维护工作很少，并且这些报告还可用于无计算模板的小批量产品。”

如前文所述，工作人员一度手工计算并检查结果。实验室工作人员需要在存有试验数据的仪器旁，并不得不手动将数字输入计算器。

“在我们使用已验证的报告前，只能通过手动计算的方式确定峰面积和保留时间百分比差异、重复进样次数，以及校验与校准标准品色谱峰响应的百分比差异。在运行期间，我们必须检查一些关键参数，这些参数是我们的系统适应性要求的一部分。如果在系统运行结束后将数据输入 Excel 中，对于采取纠正措施来说为时已晚。如果在那时发现一个参数未达到要求，我们需要完成一份耗时的实验室调查报告。”

现今，Chromeleon 报告模板可立刻显示结果，使 Bernd 和他的同事能够针对问题几乎是实时做出反应。Chromeleon CDS 会通知工作人员样品需要重新进样，例如，当二针进样的峰面积差异大于百分之二时。

“有时很难量化效益，但是我知道，有了 Chromeleon，我们可避免许多实验室调查报告。”

## 技术支持能力

没有高水平的客户支持，通过一个色谱数据系统将多个仪器网络化是一项艰巨的工作。与 Thermo Fisher Scientific 总部相距甚远的道格拉斯制造有限公司体验到了直接支持与培训的价值所在。

“总的来说，我们自始至终都获得良好支持，特别是在安装阶段，当时技术人员常到访公司。Thermo Fisher Scientific 甚至在收购 Dionex 期间还为我们安排来自工厂的支持。”

## 结论

选择色谱数据系统，涉及到对实验室的工作流程、通量、人员和现有仪器的全面评估。与道格拉斯制造有限公司一样，大型和小型实验室均报告了其切实的好处，如中心化的仪器控制、网络化的可访问性、自动化数据报告与存储、更低的成本和更高的效率。

使用 Chromeleon 报告模板，根据月工作量统计，道格拉斯制造有限公司节约了相当于 4 - 5 个全职员工的时间和成本根据月工作量。

“节约的时间和成本比我们预期的要高得多。基于我们的经历，我们希望看到 Chromeleon 成为最优秀的色谱数据系统。”

“有时很难量化效益，但是我知道，有了 Chromeleon，我们可避免许多实验室调查报告。”



# Regis Technologies 在制药 / 生物制药生产领域显著提高了效率

将 Chromeleon 变色龙 7.1 色谱数据系统整合到其大批量合同制造运营中

“我们根据以下三个特性选择了 Chromeleon 变色龙色谱数据系统：(1) Cobra 向导积分工具；(2) 包含在处理方法内的系统适应性测试 (SST)；(3) 色谱仪运行的实时 MiniPlot 缩略图像。对我们而言，最省事的是使用软件的 SST 特色功能。但我想说，对于我们的客户而言，最大益处是报告。所有东西都在一份报告中，点击鼠标可将报告转换成几种不同的查看风格。”

Maurice Andrew (Andy) Hippleheuser  
Regis Technologies, Inc. 质量控制主管  
地址：Morton Grove, IL, USA



Andy Hippleheuser 是合同管理组织 (CMO) 的重要人物之一。他是 Regis Technologies 公司的质量控制主管，Regis Technologies 是一家总部设在芝加哥的公司，在药品研发的整个过程中为制药和生物技术公司提供合成和分离服务。“我们帮助客户加快药品的上市进程，” Andy 说。“我们的专业知识，使我们能够简化最佳流程并避免推迟上市时间和造成收入损失的问题的发生。”

公司开发出了活性药物成分从初始工艺开发、验证到商业化生产放大所需的专门技术。

Andy 与质量保证部合作，为生产、过程研究、超临界流体色谱 (SFC)、分析方法开发、稳定性和色谱部门提供分析质量控制 (QC) 支持。与其他药品质量控制实验室一样，大多数分析工作主要是采用高效液相色谱系统 (HPLC)，

其次是采用气相色谱系统 (GC)。Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 变色龙 7.1 色谱数据系统 (CDS) 同时连接了 14 套高效液相色谱系统和 6 套气相色谱系统，其在该组合中起到了非常重要的作用。以下是我们近期对 Andy 所做的一次采访，询问了他们在升级软件时为何会选择 Chromeleon 变色龙色谱数据系统，他们怎样使用该软件以及他们有什么体会等问题。

## Regis Technologies公司为什么会选择Chromeleon变色龙色谱数据系统?

### 特色功能1: Cobra 向导积分工具

Cobra™是确保多个色谱图之间峰的检测和积分一致、可靠的一种峰检测算法。色谱峰的积分决定了峰面积、峰高和保留时间。

Cobra向导界面可引导您按三个简单的步骤来完成峰检测参数的正确设置: 1) 定义积分范围, 2) 规定平滑宽度, 3) 确定要积分的最小峰值。这些设置将为Cobra峰检测算法能在一个序列范围内准确而简明地积分各色谱峰提供所需的全部信息。

### 特色功能2: 自动系统适应性测试

Chromeleon 变色龙色谱数据系统能自动执行系统适应性测试计算。在受到美国食品药品监督管理局 (US FDA)、美国药典 (USP) 和欧洲药典 (EP) 监管的实验室, 需要提供系统适应性测试以确保色谱系统(仪器、试剂、色谱柱和分析员)适合于预期用途。总目标是监控色谱分析结果, 从而确保色谱适应性(例如, 通过测试拖尾因子、色谱柱柱效、分离度和稳定的系统性能(例如, 通过使用重复注入测试标准样品)。

未受到监管的实验室也可受益于自动系统适应性测试。有成百上千种计算可供选择。除了美国食品药品监督管理局建议的关键值外, Chromeleon 变色龙色谱数据系统还可自动执行进样重复性、容量因子、拖尾因子、相对保留时间、面积%、峰宽、浓度和其他许多标准的系统适应性测试。也可在序列采集期间执行系统适应性测试, 如果有其中任何一个参数不符合要求, 则该序列将自动中断。

## 对Regis Technologies公司Andy Hippleuseur 的采访

问: 您肯定比较过了其它色谱数据系统。您为什么考虑采用Chromeleon变色龙7.1色谱数据系统?

Andy: 我们的确为我们的旧软件系统考虑了多个替代方案。我们以前的系统已经使用了很多年, 要保持它正常运行需要投入大量资金。有了2000S早期使用Dionex提供的正版PeakNet软件的经验, 我根据供应商团队的评价选择了Chromeleon变色龙软件。

完成供应商初选后, 我们依据以下三个具体项目选择了Chromeleon变色龙: Cobra向导积分工具、包含在处理方法内的系统适应性测试和色谱仪运行的实时MiniPlot缩略图展示。

问: 您在设置和学习使用软件上有何体验?

Andy: 决定选配哪个色谱数据系统后, 就轮到学习使用该系统了。作为Chromeleon变色龙软件执行项目组的负责人, 我必须得对软件系统了如指掌。根据我以前在Regis公司执行其他三个软件系统的经验, 我知道准备工作是关键。我只有3个月时间来学习使用系统和参加培训课程。此后, 我就能编制所有程序文件并制定安装完成后将由质量控制部门采用的结构组织。

我们将安装分成三个阶段, 每个阶段花一周时间:

- 第一阶段: 将一半的质量控制仪器转换成使用Chromeleon变色龙控制, 同时, 我就该系统与Regis使用相关的具体程序文件开展了为期四天的培训课程。
- 第二阶段: 将另一半质量控制仪器转换成使用Chromeleon变色龙控制。
- 第三阶段: 致力于方法开发和超临界流体色谱组。
- 第4周: 通过质量保证(QA)部, 我们执行了验证, 证明软件满足21 CFR的规定, 符合我们使用的要求。

接下来一周我们运作正常。让每个独立的分析员完全能够操作系统花了约4周时间。此后, Regis公司选择赛默飞来提供Chromeleon变色龙色谱数据系统的用户一级和二级现场培训。

问: 您执行了多少种方法?

Andy: Regis公司拥有基于不同实验室部门的多个数据仓(Data Vault)。数据仓是Chromeleon变色龙软件所用信息和流程的独有存储位置。Regis公司各数据仓具有提供给用户的独有特权, 经验证适用于21 CFR环境。Regis公司目前在用的测试方法有约800种, 经验证的方法有约300种。我们已将约30种测试方法和20种经确认的测试方法转换为使用Chromeleon 变色龙7.1色谱数据系统。转换是一个不断进行的过程, 当需要或创建了新方法时, 转换就会继续。

作为合同管理组织, 我们进行了许多变化的方法。Chromeleon变色龙能让我们为每个方法、过程和报告创建并“锁定”单个模板。我们甚至可以锁定视图, 从而每次都能显示相同的比例。该系统有15名分析员和5名质量保证评审员。我们的15个许可全都用上了。



问: Chromeleon变色龙软件是否改变了您在实验室工作的方式?

Andy: 当然改变了! 我们已经改用电子签名, 这可让我们节省了时间和纸张。只有经最终确认的报告才会打印出来并纳入各个批次记录。通过使用方法模板, 我们节省了时间, 因为分析人员无需建立方法, 这还减少了内部错误的出现。

更大的改变是使用报告设计器(Report Designer)特色功能创建报告时所产生的效率增益, 因为报告可以锁定, 所以系统可自动处理诸如面积数值等数据的录入。以往需要2-3小时完成的工作, 现在大多数情况下只用不到1小时即可完成。这包括创建模板的前期成本, 而Regis公司可多次使用此模板。

最大的节约是在处理方法中使用Chromeleon变色龙软件的系统适应性测试特色功能。由于Regis公司实行两班工作制, 过去每天总有8小时的时间在分析运行但却无法监控。由于您无法实际查看系统适应性标准, 这意味着运行最后存在着风险。现在, 系统适应性测试数据允许我将标准置于运行中, 软件可决定继续或中止任何运行。现在, 我可充分利用一个完整的额外班次。

问: 您实验室的推动因素、问题和担忧是什么?

Andy: 和任何实验室一样, 效率后面紧跟着的问题是审计追踪。甚至在非GMP活动中, 您也想要更快并能够跟踪系统范围内的事件。

问: Chromeleon变色龙软件如何帮助实现合规?

Andy: Chromeleon变色龙包含软件合规的必要内容: 独特的登录控制、个人安全性特权和等级、完整的审计追踪和服务器安全。

问: 对您实验室产生的主要益处是什么? 为什么它对您的客户非常重要?

Andy: 我想说, 对客户而言, 最大的益处就是报告。Regis公司每年有20~30个不同的项目/客户。每个项目/客户想在报告中强调的重点不尽相同。这会让以往系统完成的工作变得棘手, 且在许多情况下, 报告的不同部分需要源自操作软件、Microsoft Word®和Excel®等各种格式的文件。现在, 报告内容全部源自Chromeleon变色龙软件中的报告设计器(Report Designer)和电子报告(Electronic Report)等特色功能。所有东西都在一份报告中, 点击鼠标可将报告转换成几种不同的查看风格。”

问: 您对Chromeleon变色龙软件发展的计划是什么?

Andy: 面向未来的计划已在执行。正在使用该系统来取代对不同实验室的跟踪和趋势化分析, 以通过使用限值来提供分析运行“准备就绪”的信息。将面积、保留时间、理论塔板数和其他参数放入模板中, 以便在遇到任何有必要使用跟踪和采集的方法时即可调用。由于从操作系统获取的数据不再通过手动方式转移到另一系统, 因而, 效率提高。

另外, Regis公司正在直接与赛默飞工作团队合作, 以使用Chromeleon变色龙来采集由不受软件控制的仪器所提供的电子数据, 例如: FTIR、UV-VIS、NMR等。进一步的研究也正在进行中, 看哪些数据类型甚至可在报告设计器专业版(Report Designer Pro)特色功能范围内进行评价。我们当前正在购买一款新的Thermo Scientific™ TRACE™ 1310气相色谱系统并研发适用于其数据采集的过程。

此后, 会按年为单位考虑执行计划。接下来的几年中, 这些新功能在未来升级的年度项目中将继续执行。

## Regis Technologies公司为何会选择Chromeleon变色龙色谱数据系统?

### 特色功能3: 使用MiniPlot 可立即将数据可视化

Chromeleon变色龙色谱数据系统中的MiniPlot数据可视化工具是我们客户最喜欢的特色功能之一。它可同时用图形清晰地显示大量数据。例如, MiniPlot可立即显示与列表中各次进样相对应的色谱详细微型缩略图——您可立即扫描数十个进样, 并立即比较和识别总的差别。该新工具是一种快速且便捷的方式, 以适应今天对大量数据进行更快更大的数据集分析的要求。

### Chromeleon变色龙色谱数据系统遵循了下面Operational Simplicity的这些“简单”原则:

- 将执行任何任务所需的步骤减至最少。
- 让所有步骤都易于理解和使用。
- 将执行任何任务所需的时间减至最少。



# Sigma-Aldrich CMO 使用 Chromeleon 变色龙色谱数据系统帮助客户满足 21 CFR Part11 要求

“短暂熟悉后，感觉您就可以使用该系统，无需经历过多的环节便可完成需要做的事情。您可看出该软件是为方便用户使用而创立的。”

Michael Faley  
分析主管  
SAFC, Inc. (Sigma-Aldrich®的全资子公司)  
地址: Madison, Wisconsin, USA



SAFC Madison是Sigma-Aldrich公司众多合同生产组织(CMO)中向负责研发和大规模生产活性药物成分(API)的制药和生物制药组织供应设施的组织之一。Madison设施专门用于高效活性药用成分(HPAPI和HPAI)。Michael负责监督从客户到SAFC Madison的分析技术的转移。他的分析实验室可从事定量分析的方法转换、开发和资格认定，这些分析旨在测量成品和中间产品的纯度，主要是通过液相色谱(LC)和气相色谱(GC)完成。支持合成开发和大规模生产不仅需要分离化合物阶段的分析，而且还需要化学转化期间的分析。实验室不仅负责执行各个合成阶段的这些分

析，而且还要负责详细审查可能包括系统适用性测试(SST)、线性和特异性测试的分析技术，确保所用方法适合于产品。分析组与过程开发组紧密合作，以创建一个后续可过渡到GMP生产和质量控制的完整信息包。

两年前，SAFC Madison安装了Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™变色龙7.1色谱数据系统(CDS)，控制约45台液相色谱和气相色谱系统，这个数量将近整栋楼的一半色谱系统。为他们提供分析/过程开发组和制造/质量控制组的解决方案。

Michael Faley是SAFC® Madison的分析主管，SAFC® Madison是Sigma-Aldrich公司的众多合同生产组织(CMO)之一。他获得了分析化学理学硕士(MS)学位，并曾在制药、无机物和造纸行业的分析过程组工作过。Michael在被提升为分析主管前，最初在Sigma-Aldrich从事原材料和产品测试工作。他是该公司有13年工作经验的老员工。

“我们需要色谱数据系统 (CDS) 来协助符合适用于分析仪器数据完整性的 21 CFR Part 11 的规定。在我们以往所用数据系统中存在的其他问题中，缺乏完整的数据审计追踪是个大问题。我们需要能够跟踪何人在何时、何地、对色谱数据做了何事。这意味着得有具有中央数据存储的网络化解决方案。”

Chromeleon 变色龙色谱数据系统遵循了下面 Operational Simplicity 的这些“简单”原则：

- 将执行任何任务所需的步骤减至最少。
- 让所有步骤都易于理解和使用。
- 将执行任何任务所需的时间减至最少。

## 使用 Chromeleon 变色龙色谱数据系统前的仔细调研

安装 Chromeleon 变色龙色谱数据系统前，来自不同制造商的每两台仪器已配有各自的计算机和软件。其系统未联网的事实将产生几个问题，并造成明显的效率损失：

- 最大的问题是对多名分析员登录并使用由一台计算机控制的两台仪器的情况缺乏足够的灵活性。

“为了遵守公司规章制度，计算机在有一段时间不使用后将被锁定，需要由同一人再次登录。如果色谱运行跨越两个班次，或运行结束后需用仪器，则只有一人可访问系统。其他任何人无权查看所生成的数据或使用由同一计算机控制的任一仪器。”
- 每次开发出一个新方法时，他们不得不将该方法手动输入各个色谱系统中，这样既费时，又会增加出错的可能性。
- 由于数据存储在无中央访问的单独色谱系统中，所以收集数据和生成报告极为耗时。使用以往的软件时，他们要将数据手动输入 Microsoft Excel® 电子数据表中，然后计算系统适用性结果和定量分析结果，这也容易产生转录错误。

“以往所使用的所有手动数据录入，为了确保数据准确，不仅在分析，而且在审查时也需要大量的时间。”
- 不同仪器品牌的不同色谱数据系统为培训带来巨大的障碍。培训用户在多个软件系统上的操作、分析和报告变得既复杂，又费时。

## 选择色谱数据系统软件的标准

虽然采购色谱数据系统的主要推动因素是为了合规和确认，而 SAFC Madison 选择 Chromeleon 变色龙色谱数据系统的主要原因之一是该系统非常直观，并且有一个易于使用的界面。这是软件开发遵循 Operational Simplicity™ 原则的一个有力证明。

“短暂熟悉后，感觉您就可以使用该系统，无需经历过多的环节便可完成需要做的事项。您可看出，软件是为方便用户使用而创立的。该软件，色谱仪列表放在左侧，这是一个让人感觉熟悉的布局。我们首先注意到的就是将报告模板放在一起以及搜索数据、设置序列、在序列范围内的样品和标准样品之间进行指定生成标准曲线是多么的容易。”

## 审计追踪——已完成的任务

Chromeleon 变色龙色谱数据系统可控制由多家制造商提供的不同类型的色谱系统（例如液相色谱 (LC)、气相色谱 (GC)、离子色谱 (IC)），其联网能力解决了他们所面临的许多分析挑战。分析员们报告称，最方便的一项优势是能够在他们的电脑上使用该软件。拥有预定访问权限的员工可从任何位置控制仪器，评审数据，生成报告并将信息从一台仪器转移到下一台仪器，从一个实验室转移到另一个实验室。

然而，对于 Michael 而言，更为重要的是解决了审计追踪问题。

“现在，每个人都可作为个人登录，这样我们就能够知道何人在何时生成了数据。Chromeleon 变色龙会跟踪每项更改。”

审计追踪不仅有助于合规。

“我们发现，其对方或仪器的故障排查真的非常管用。如果有一台仪器未按预期工作，使用 Chromeleon 变色龙提供的审计追踪则可非常轻易地完成故障排查。”



## 效率提高了!

网络数据系统本身就是一次升级。

“与我们以往使用的独立数据系统相比，Chromeleon变色龙的效率高很多。我们可一次开发一种方法，并将其与其他文件一起拷贝到我们需用的任何系统中，而不是手动地为每个系统的计算机编写方法，这明显降低了出错的几率并大大节省了时间。现在，我们不必再做无用功。”

Chromeleon变色龙色谱数据系统的报告设计器(Report Designer)也可提高效率。这个强大的基于电子表格的报告功能采用公式、图表以及其他功能来定义数据如何显示、打印或导出。其包括现代的报告模板，并可让您创建自己的定制报告。

“我们始终想更快地做事，Chromeleon变色龙的报告为我们节省了大量时间。例如，以前如果我们要对七八种溶剂进行残留溶剂分析，我们需要将所有系统适用性测试、校准和浓度数据转移到受控的Excel电子数据表中以进行计算。每个序列会费时多达1小时。现在Chromeleon变色龙将信息直接拉入报告中，我们要做的就是检查并打印报告。通过内置的Excel可无需导出数据，我们节省了大量时间并降低了出错几率。所有数据可在Chromeleon变色龙中评审。报告中的数据更让人放心。它让分析员有更多时间去做其它更有价值的工作。”

因为这样做非常容易，所以Michael正继续寻求改进报告模板，以更新、修改和改进数据报告。因此，SAFC Madison将Chromeleon变色龙色谱数据系统用于包括线性、特异性和重现性的仪器验证报告，且他们已创建了可以计算结果的报告。Chromeleon变色龙色谱数据系统还包括有扩展包，其中附带有用于验证和确认报告的设计模板，这可进一步简化过程。

报告对SAFC Madison的客户而言也是一个主要益处。从一台仪器到另一台仪器，甚至从液相色谱仪到气相色谱仪，所有数据的报告均实现了标准化。

“这不仅对SAFC，而且对我们的客户，以及想每次都看到一致的报告的人而言都是有益的。当你确切地知道报告中的数据来自哪里时，这让您审核报告变得非常容易。我们已生成了涵盖我们绝大多数定量分析的通用报告模板，使用者只需简单地在他们的进样序列列表中更改序列列表的要求，即可将所有需要的数据拉入到报告中。”

## 培训明显简化

只需学习Chromeleon变色龙色谱数据系统，培训工作现在变得简单多了。所有使用者均可在现场接受Chromeleon变色龙色谱数据系统的一级和二级培训——分析组/过程开发组约10人，质量控制组约15-20人。

“开展培训工作的北美卓越中心支持团队非常出色。售后支持工作做得非常好，我们在熟悉Chromeleon变色龙的设置时，花了相当多的时间来与他们沟通。”

## 接下来的步骤——

### 电子签名、eWorkflow 和延伸至质谱的Chromeleon变色龙色谱数据系统

现在，Chromeleon变色龙色谱数据系统已部署到位且经确认，SAFC Madison很快将执行电子签名。

“我们当前正在测试他们是否在按预期工作和运行。我们的最终目标是让每个人从分析员到质量保证评审员都能够对数据进行签字，然后才生成将使用主要批记录进行归档的硬拷贝。”电子签名真的将为我们节省很多时间。它将取代并简化数据打印以及将其交由下一人审核的过程。

“我们的客户积极地要求使用符合 21 CFR Part 11 规定的系统来进行纯度分析。现在，该系统已到位，在得知他们的数据很安全，且我们可以做到充分的审计追踪，可为每个色谱图记录用户的操作后，他们感觉更有保障。当需要汇总数据包以交监管机构备案时，这对他们也非常有帮助。”

继电子签名后, SAFC Madison计划执行的下一个特色功能为 eWorkflow™。

eWorkflow 可捕捉并自动执行色谱细节——例如, 仪器状况、进样序列要求和结果计算。因此, 自动化的 eWorkflow 可提高效率并减少差错。

“将Chromeleon变色龙应用到建筑内的每台仪器上, 让所有数据保存在一台服务器上, 并使用权限和访问控制隔离每个实验室的数据, 我设想能够使用 eWorkflow 将方法转移到质量保证/质量控制的实验室。报告设计器(Report Designer)是该特色功能的一部分, 简化了从数据录入到最终报告生成的步骤, 让过程变得更快, 其中包括基于系统适用性测试结果的操作。eWorkflow 是确保每种方法均按其应有方式正确运行的另一种检查。”

新发布的 Chromeleon 变色龙 7.2 色谱数据系统是第一个在企业 (客户端 / 服务器) 环境中整合了色谱仪器 (气相色谱 / 液相色谱 / 离子色谱) 和质谱 (MS) 的色谱数据系统。Chromeleon 变色龙 7.2 色谱数据系统是第一个将质谱完全整合到日常和定量工作流程中的色谱数据系统。

“目前, 质谱是识别和测量低含量杂质的理想检测方法。随着对 ppm 和 ppb 级分析需求的增加, 这方面我们将做的更多, 同时也是我们努力的方向。同一色谱数据系统中拥有所有的数据, 将保持我们的合规性, 提高我们的易用性, 并增加培训和报告方面的优势。”

### 网络化系统意想不到的优势——节省30%的实验室工作台空间

安装 Chromeleon 变色龙色谱数据系统前, 其他每台仪器均配有计算机、显示器、键盘和鼠标。有 7 个实验室工作台上摆满了仪器和计算机系统。

安装了Chromeleon变色龙色谱数据系统后, 计算机系统被撤除, 每个实验室工作台只需要一个用户界面, 空出了两个实验室工作台用作其他用途。这节省了30%的空间。



三

**Chromeleon 变色龙软件部分产品亮点**



# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 确保合规性

### 产品亮点

使用 Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7 色谱数据系统 (CDS) 软件中集成的安全系统、审计追踪和版本管理工具, 用户可在不牺牲效率的情况下满足法规的要求。Chromeleon 7 CDS 可使客户简单便捷地获取样品结果, 从而全面提高实验室的工作效率。

### 控制并管理实验室操作

现代实验室必须符合内部准则和外部法规以确保数据的完整性。合规性要求一般涉及四个方面: 安全、验证、审计追踪及电子签名。在提高生产力的同时, Chromeleon 7 CDS 提供了所需的所有工具以确保合规性。

#### 安全

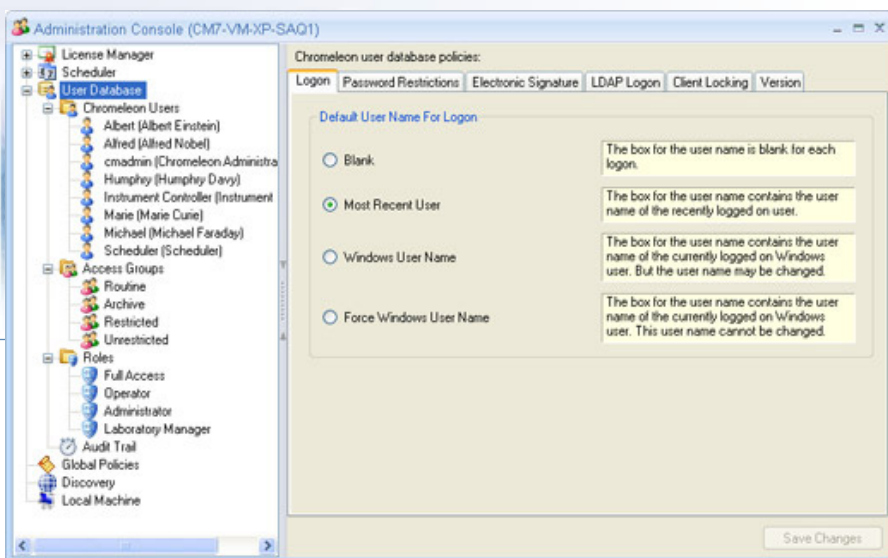
安全的 CDS 需要两个主要元素: 稳健性及访问控制。Chromeleon 7 CDS 是一个稳健的系统, 提供一系列出色的访问控制功能。

#### 稳健性

Chromeleon 7 CDS 基于现代 Microsoft Windows 技术, 具有最佳的可靠性、性能及向前兼容性。所有数据存储在数据仓中, 该数据仓是基于数据库 (SQL Server Express、SQL Server 或 Oracle) 和安全文件存储系统的安全存储容器。文件系统中的对象仅可通过数据仓服务进行访问, 其控制相关事务并确保仅授权人员可访问该对象。Chromeleon 7 CDS 对并发事务进行粗放管理, 确保多个用户同时访问同一对象时, 数据不受损。

#### 访问控制

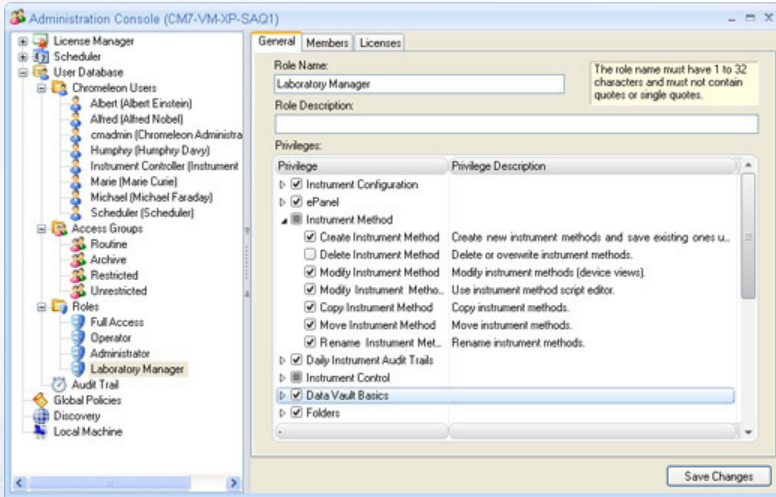
用户管理系统提供的访问控制功能灵活、安全且可自定义。用户管理系统可定义用户的权限、角色和访问组。权限决定用户可以做什么。角色是一系列分配给用户的权限集合。访问组控制用户行使权限的位置。



可根据客户的要求, 实施各种不同的密码规则。这些规则包括密码长度、强制密码更改周期、多次登录失败后锁定账户以及 LDAP 支持 (在操作系统水平上管理密码)。

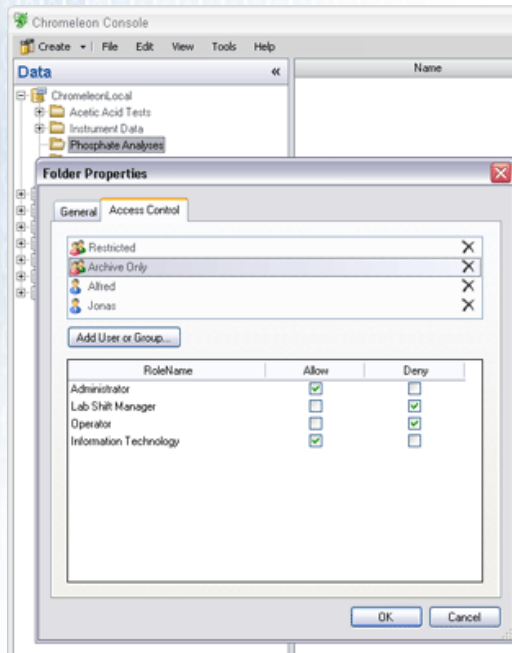
# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 确保合规性



用户管理系统可分配超过一百多个权限，因此管理员控制用户可以做什么。这些权限从简单的创建 / 修改 / 移动 / 删除操作到与职位相关的动作，诸如归档和管理。

角色为管理员提供管理用户权限的直接方法。管理员可根据工作需要决定角色。登录时，变色龙为用户提供可用的角色。选择角色后，用户的活动就受到该角色的控制。该功能允许实验室经理（可能拥有报告修改权限的角色）使用常规操作者角色登录运行方法，不必担心误修改已提交的报告。



访问组可用于控制访问特定的数据仓、文件夹和仪器。而且，每个对象都可定义不同的权限。这使得管理员能够灵活快速地向“沙盒”或测试区域授予较大的权限，同时限制其他数据仓或文件夹的权限。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 确保合规性

### 验证

Chromeleon 7 CDS 随带一套自动化工具，加速软件与仪器安装验证的进程。

### 证书

软件介质上提供了软件验证和 21 CFR Part11 的证书。

### 安装验证

作为软件安装的一部分，Chromeleon 7 CDS 自动执行安装验证并生成详细的报告，显示所有已安装的文档和服务，且是否符合预期。

### 操作验证和性能验证

Chromeleon 7 CDS 中的自动化工具帮助用户轻松设置并运行序列，测试所有色谱组件的性能。工具自动生成详细的报告，报告中显示实际的性能以及与可接受范围的对比。

### 系统适应性试验 (SST)

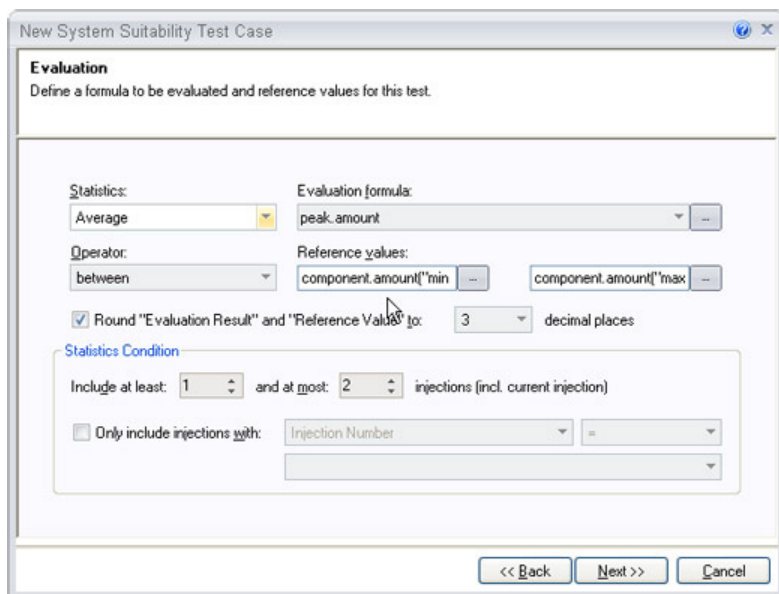
Chromeleon 7 CDS 提供了完整、灵活的 SST，用户可容易地将性能检查合并到日常序列中。除了一些常见测试（峰形和重现性试验）之外，还可包括基于 Chromeleon 7 CDS 结果变量的自定义测试。

Chromeleon 7 CDS 中的 SST 可自动验证色谱分析结果在给定的范围内。

### 审计追踪和版本控制

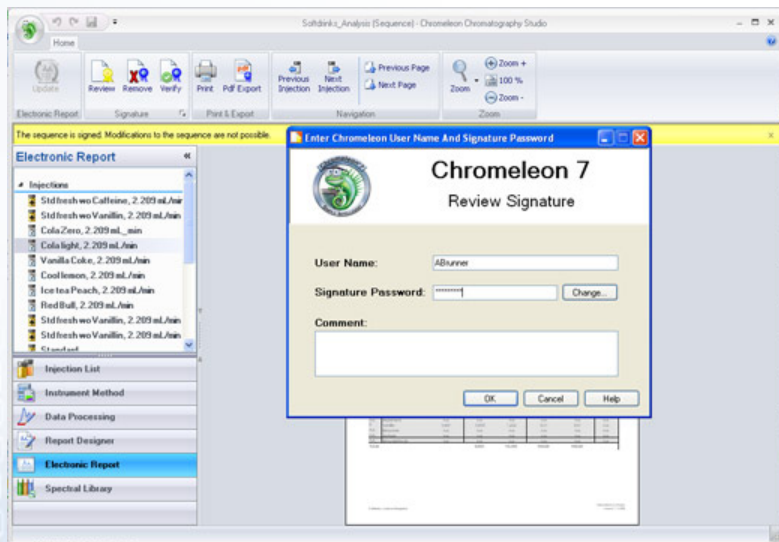
Chromeleon 7 CDS 为所有的数据对象和仪器提供详细、全面的审计追踪。每天的仪器控制器日志显示仪器相关的所有活动。用户可对审计追踪进行排序、分组和 / 或筛选，以便快速审核相关信息。管理员可强制要求用户在提交更改时使用注释。这样审计追踪包含何物、何时、何人以及为何的信息。

此外，每个数据仓提供了版本控制的功能。版本启用后，用户可通过并排显示来比较不同的版本，并标记插入、删除和更改的图标。正常情况下，授权用户可将对象还原至任意先前版本。



# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 确保合规性



如果签名要求包括审核或批准步骤，实验室主管采用相同方式对电子报告进行签名。

## 电子签名

无纸化记录需要遵循 21 CFR Part 11 的功能无缝集成到 Chromeleon 7 CDS 中。在用户管理系统中设置签名权限及密码。每个序列最多定义三级签名（提交、审核和 / 或批准）。用户可分别对单个序列定义签名要求，或通过 eWorkflow™ 来预定义签名要求。

要对序列进行电子签名，操作者仅需单击提交，即可生成一份电子报告，该报告会成为序列的一部分。查看报告正常后，操作者输入签名密码，以提交者的身份签名。签名生效后，序列中的所有内容处于锁定状态，无法修改，且加密的签名应用于该序列。

用户可轻易地检查序列的签名状态，还可通过查询功能来定位等待审核或批准的序列。对序列签名的真实性可通过简单的命令验证。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 简化工作流程

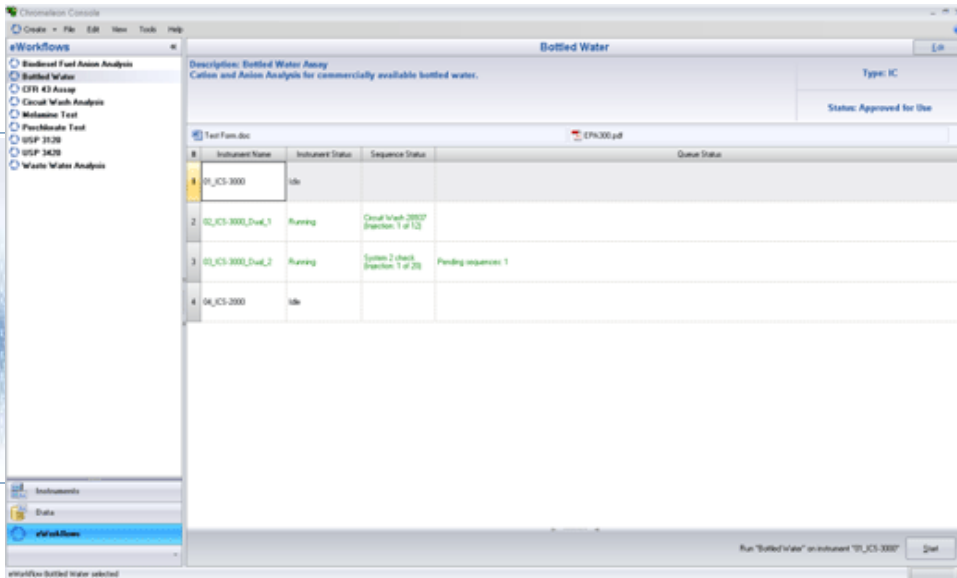
### 产品亮点

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7 色谱数据系统 (CDS) 软件简化用户的分析过程, 采用创新的 eWorkflow™ 功能, 只需点击几下鼠标, 即可简化您的分析过程, 且丝毫不失灵活性。Chromeleon 7 CDS 帮助用户快速轻松完成从样品到结果的过程, 从而全面提高实验室的工作效率。

### 简化色谱分析流程的工具

从根本上说, 所有的色谱分析工作流程都是相似的: 进样 - 色谱分离 - 采集信号 - 生成结果。工作流程的不同之处在于仪器方法、进样序列要求以及数据处理方法等细节。正是这些差异给操作者带来了操作的复杂性, 降低了工作效率, 增加了出错风险。

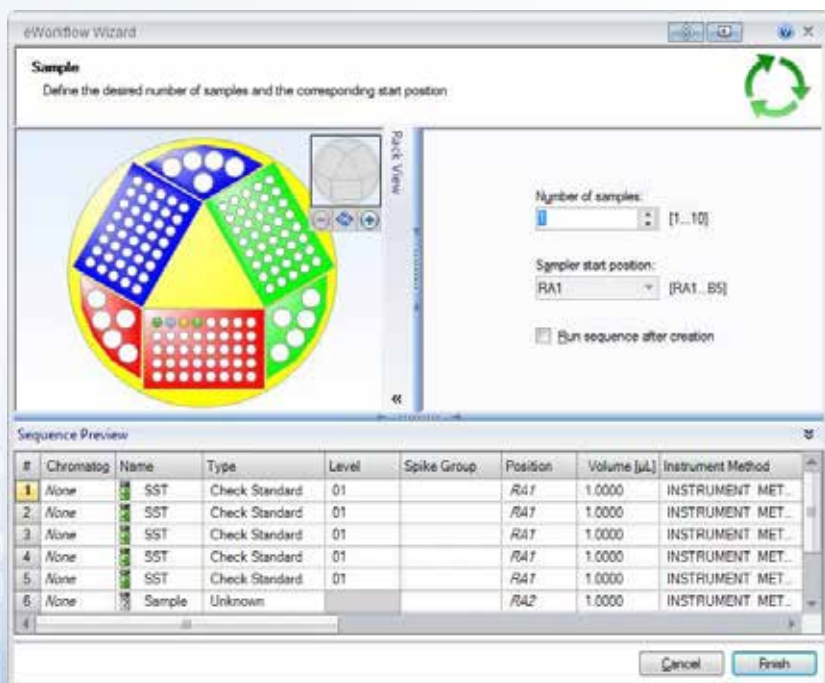
Chromeleon 7 CDS 系统的 eWorkflow 解决了以上问题。eWorkflow 包含色谱工作流程中的各个方面, 引导操作者通过几步就可运行序列。操作者只需选择一个仪器, 指定样品数和起始位置, 就可开始分析。然后, 软件运行色谱分析、处理数据, 并生成最终结果。



eWorkflow 提供 Operational Simplicity™ 的工作流程。只需点击几下鼠标, 用户即可创建和启动运行, 处理数据, 并生成结果。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 简化工作流程



过程简明直接：

1. 选择 eWorkflow
2. 选择仪器
3. 输入样品数和起始位置
4. 单击“开始”



序列自动创建和运行。软件包含完整解决方案的所有相关文件。

Chromeleon 7 CDS eWorkflow 减少了色谱分析工作流程的步骤，同时确保符合测试流程和准则。这给质量控制和法规检测中的常规分析带来很多好处；eWorkflow 也利于常规研发和方法开发任务，如色谱柱筛选、梯度方法开发和方法验证。

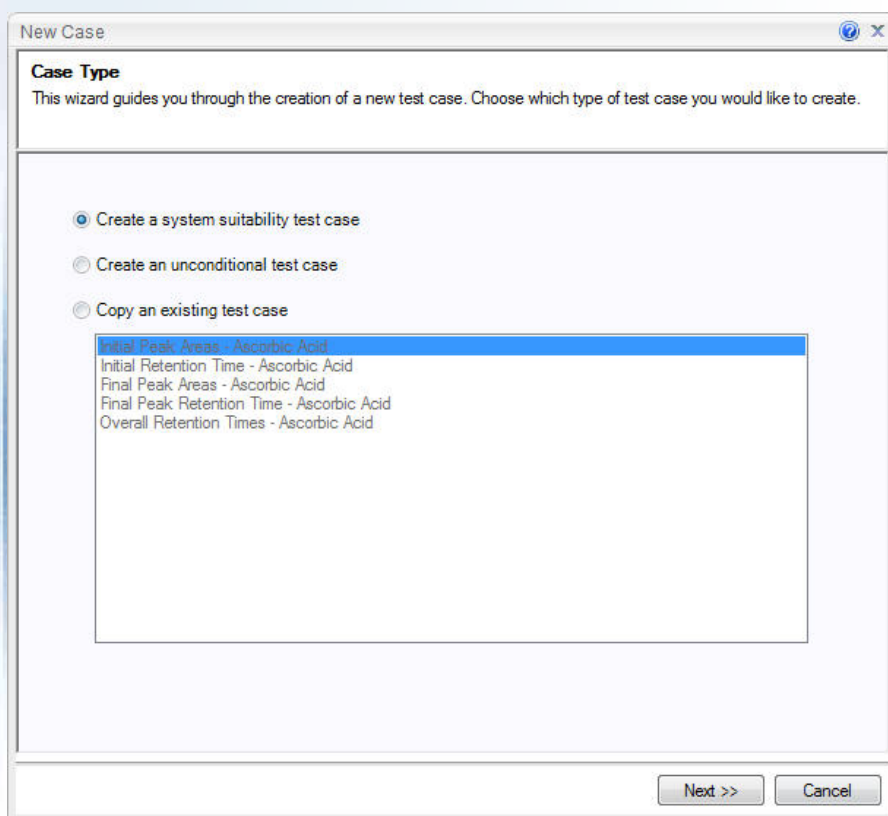
# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

提高分析“一次成功率”



## 产品亮点

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7.2 色谱数据系统 (CDS) 软件具有全新的智能运行控制 (IRC) 功能，可帮助您完全控制运行序列。该功能为标准功能，不需要额外许可。



用于创建测试用例的向导。

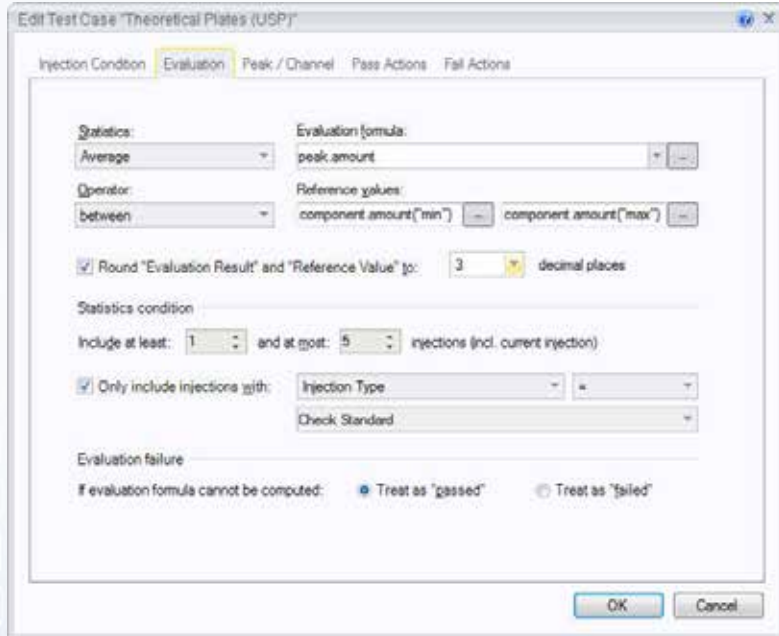
通过简单的向导引导用户设置条件型系统适应性测试 (SST) 或无条件行用例，并在每次进样后执行。现有的测试用例可以用作模板，省时省力。



**ThermoFisher**  
SCIENTIFIC

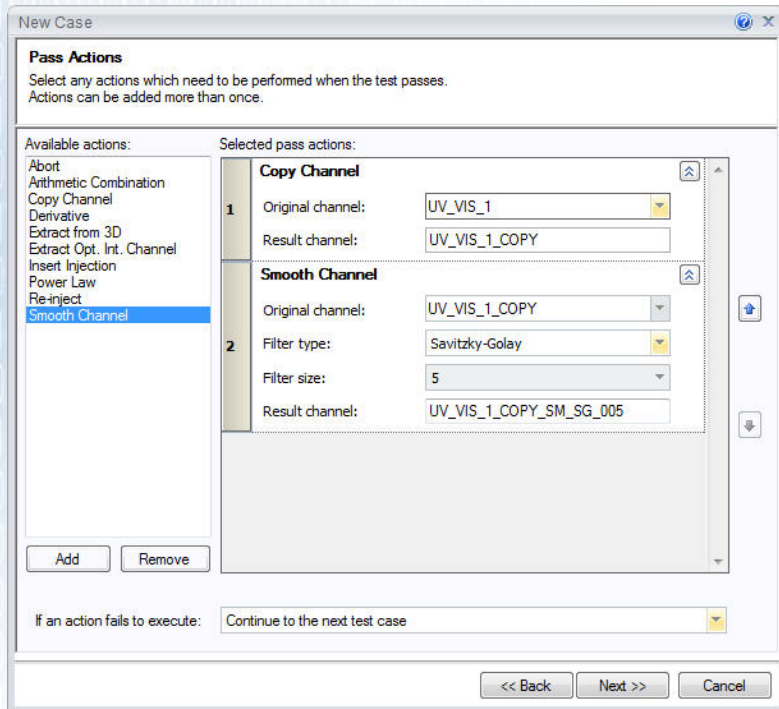
# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 提高分析“一次成功率”



包括计算值在内的任何变量均可用于条件评估。

对于条件型 SST 实例，可以监视包括计算值在内的任何变量，允许用户在运行过程中执行参数检查，并做出相应的动作。参考值可以是固定值，也可以是变量，为创建 SST 提供了极大的灵活性。

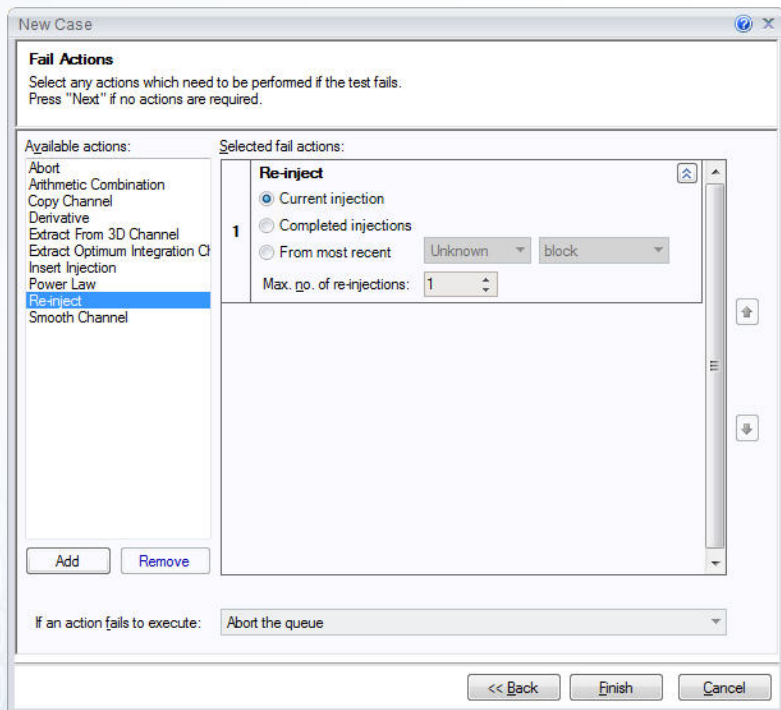


定义通过和失败的动作。例如，如果测试通过，用户可以创建色谱图经平滑处理后的副本。如果测试失败，用户可以重复上一次进样。直观的对话框可以让用户重新选择、定义通过和失败对应的动作，并将其重新排序。

定义通过动作的对话框...

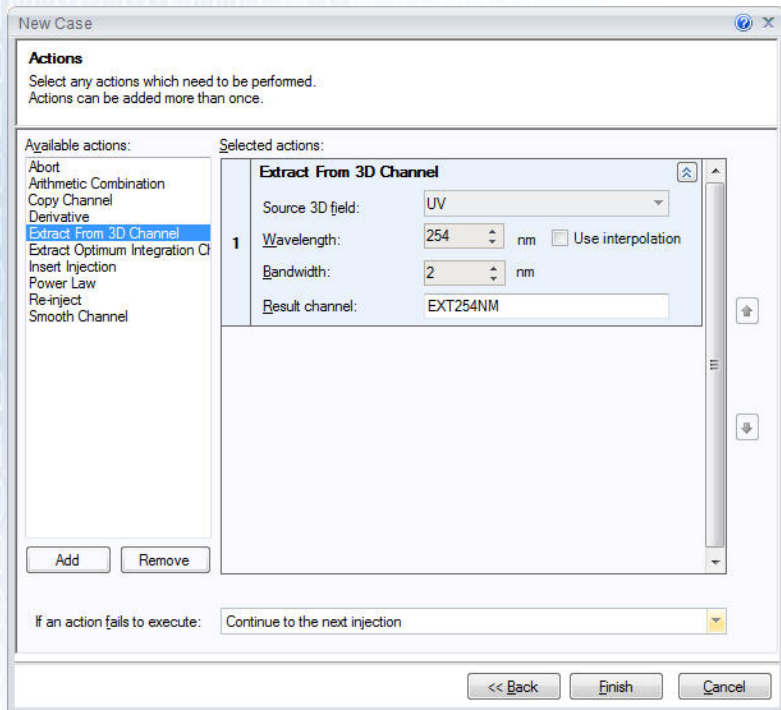
# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 提高分析“一次成功率”



…以及失败动作的对话框

无条件型测试的情况下无需定义条件（假定结果为通过），在所选进样结束后自动发生。



设置无条件型动作。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 提高分析“一次成功率”



If an action fails to execute:	Abort the queue
	Continue to the next action
	Continue to the next test case
	Continue to the next injection
	Abort the queue

内置错误处理方案，确保持续运行。

如果其中一个动作无法执行，内置的错误处理方案可确保 SST 和无条件型测试实例继续操作。可选项为：继续该测试用例的下一个动作，该进样的下一个测试用例，下一个进样，或中止正在运行的队列。



# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 操作简便

### 产品亮点

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7 色谱数据系统 (CDS) 软件基于 Operational Simplicity™ 提供丰富的智能功能。您可以看到精心设计的用户界面和视觉提示如何引导您实现色谱分析。Chromeleon 7 CDS 可以让您轻松实现从样品到结果的过程, 全面提高实验室的工作效率。

### 控制台和色谱工作室：访问和管理仪器和数据的工具

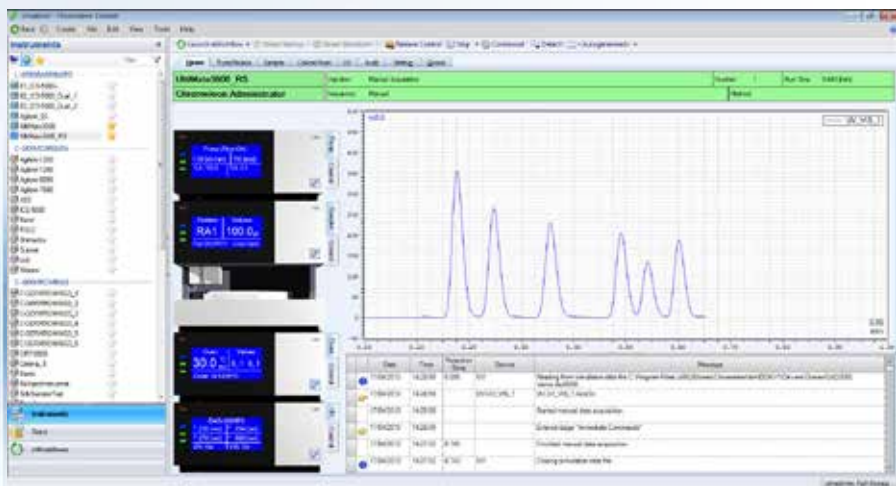
Chromeleon 7 CDS 用户界面遵循了以下设计理念, 实现操作简便:

- 最小化执行任务的步骤
- 所有步骤简单易懂, 操作方便
- 最小化执行任务的时间

该软件在主流功能和特殊功能、注重眼前任务和创造更大可能性的意识之间实现了平衡。该系统的顶层用户界面(控制台)可以直接访问工具、数据和 eWorkflow™。工具类别栏显示用户可访问的所有仪器列表, 并自动生成所选仪器的实时控制面板。可即时访问进样序列的队列, 审计追踪显示了仪器的事件历史。控制面板可与控制台分离开来, 以便在使用控制台其他区域时监视和控制仪器。

控制台的数据栏显示标准的树状导航窗格。文件夹易于整理和重新编排, 以满足项目的需要。特殊图标表示进样序列。当选定序列时, 该序列的全部内容随即显示在集成的序列编辑器上。

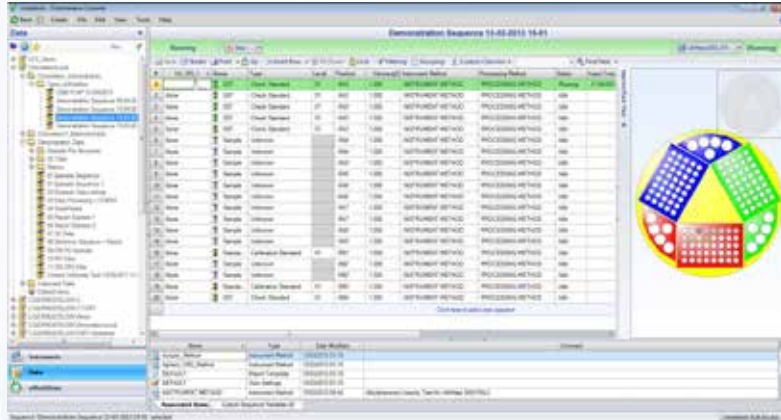
单击类别栏, 将显示所有可访问的仪器。每个仪器的控制面板(电子面板)均可自动加载并连接。用户还可一键进入仪器审核追踪和队列。用户可以修改电子面板, 并根据需要和访问级别进行自定义设置。众多诸如显示、开关、按钮和刻度选项都便于用户浏览, 更快速地学会操作。



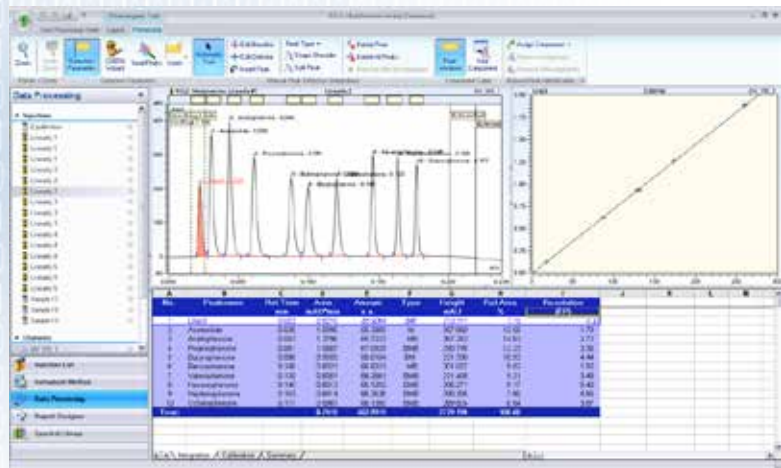
可从控制台左下角的类别栏立即访问仪器、数据和 eWorkflow。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 操作简便



控制台的数据类别栏提供文件夹树以便浏览，还包括集成的序列编辑器，显示已采集色谱图的缩略图。



使用色谱工作室，可简便高效地在单个窗口内访问进样序列的各个子项。采用集成设计，因此无需启动和管理不同的窗口就可处理数据集。

进样旁边的缩略图显示已采集色谱图的即时可视化概貌，让分析员初略评估数据。例如，无需打开色谱图，QC 化验员即可发现异常，方法开发人员也能看到哪些进样分离正常，研究人员可检查样品中是否有目标化合物。

当然，色谱工作人员需要的往往不只是粗略地浏览数据，有时需要做修改。为完成这些任务，Chromeleon 7 CDS 软件提供色谱工作室，一个丰富数据的数据查看器，可立即访问与数据集相关的关键项目，如仪器条件、数据处理参数和报告。色谱工作室的用户界面为用户提供与当前任务相关的功能，并隐藏其他功能（但需要时触手可及）。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

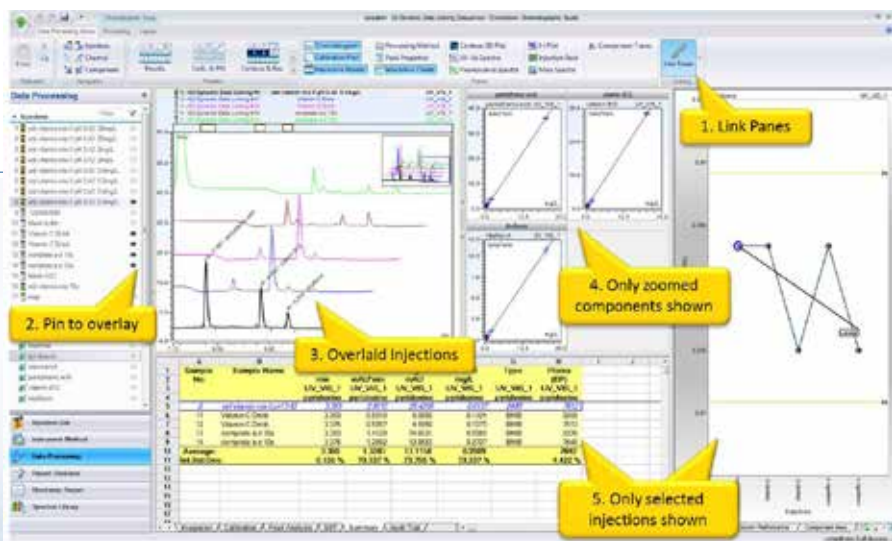
## SmartLink: 简化数据处理

### 产品亮点

处理数据时，分析员往往面临显示过多或不足的数据，无法有效地分析样品。这导致在打开和关闭数据文件、元数据以及相关报告时耗时过长。将屏幕上的窗格与色谱图和 / 或所选的进样链接，Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7.2 色谱数据系统 (CDS) 软件向分析员提供处理数据所需的所有相关信息，从而使数据分析更快速、更简便。

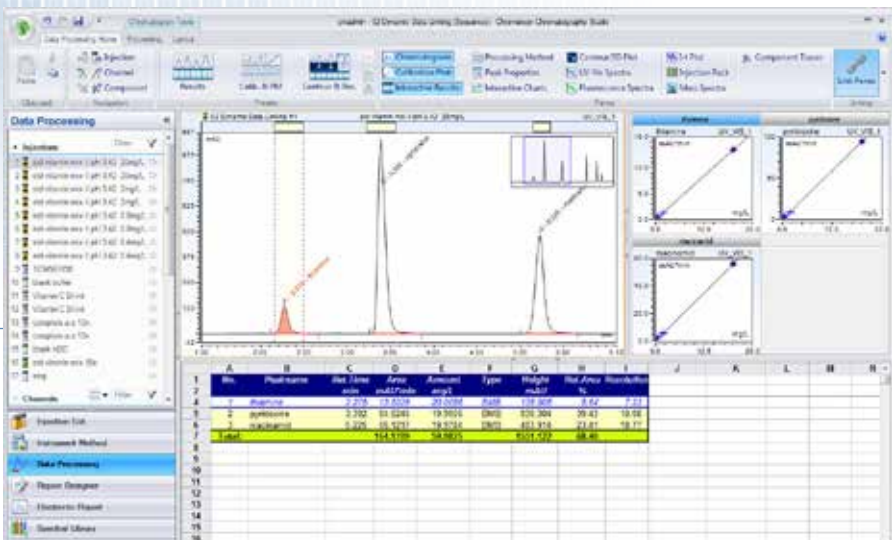
单击鼠标激活链接，所有活动窗格立即反应当前色谱图和叠加进样中显示 / 所选的峰。当改变缩放或叠加进样时，窗格自动更新为新的设置。

链接确保分析员总是可以看到所有相关的信息。实例：



单击鼠标激活 SmartLink。

对色谱图进行缩放，变色龙仅显示可见组分的校准曲线和积分表。



**Thermo Fisher**  
SCIENTIFIC



# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 加速数据分析

### 产品亮点

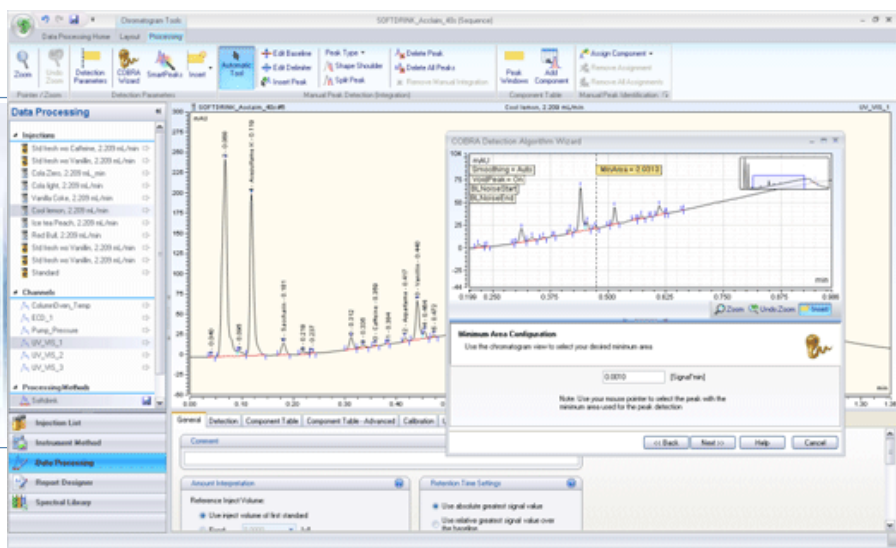
Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7 色谱数据系统 (CDS) 软件采用 Cobra™ 峰检测算法、SmartPeaks™ 积分助手和动态交互数据处理，可节省您的宝贵时间。Cobra 检测算法可准确地检测峰起始和终止的时间，并正确地确定峰基线，无需输入一系列检测参数。独一无二的 SmartPeaks 积分助手帮助用户快速、直观地确定基线。Chromeleon 7 CDS 帮助用户快速完成从样品到结果的过程，从而全面提高实验室的工作效率。

### 无与伦比的数据处理工具

Cobra 峰检测算法和 SmartPeaks 积分助手可帮助用户轻松处理色谱图。Cobra 算法采用先进的信号处理技术从噪声中区分真实的峰，还运用尖端的曲线拟合技术准确定位峰顶点和拐点。只需几个简单的参数，用户就可正确地积分所有类型的色谱图。使用以下向导，用户可以快速轻松地设置参数：

- 定义积分范围
- 选择要积分的最窄峰
- 定义基线噪声范围
- 选择要积分的最小峰

完成上述四项设置后，Cobra 算法立即对序列中的每个色谱图进行积分。



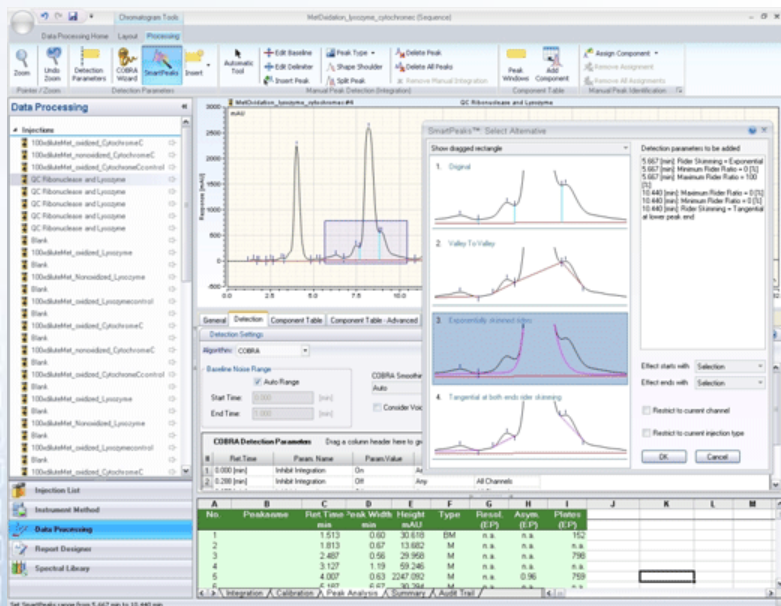
在 Cobra 向导中设置基本积分参数。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 加速数据分析



当需要作特殊处理时（例如，对未完全分离的峰组做不同的基线），SmartPeaks 积分助手能够快速直观地生成期望的结果。用户只需选择色谱图上的一个区域，SmartPeaks 就能以图形方式显示可用的方案，例如，谷到谷基线或指数撇去。当用户选择其中一个选项后，SmartPeaks 将添加相应的参数到处理方法中。因此，所需的处理方法将自动应用到多个色谱图。这个过程只需要几秒，并且消除了调整积分的试错过程，该过程是大多数色谱软件的主要弱点。



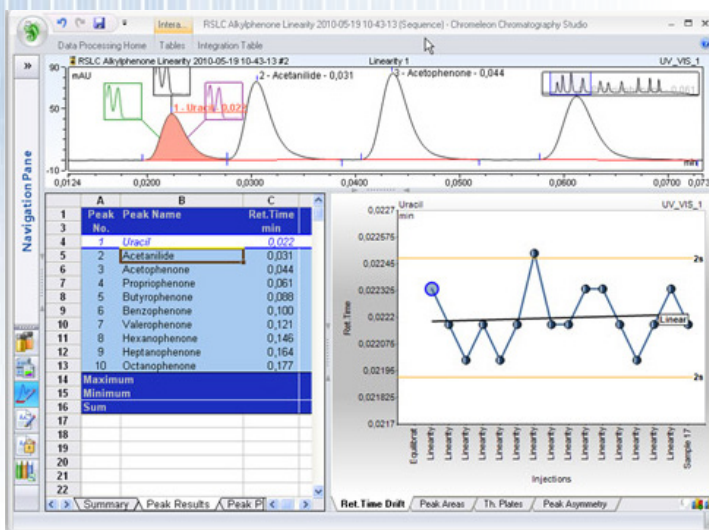
SmartPeaks 提供多个积分方案，并自动添加参数到处理方法中。

### 卓越的图表功能

如果需要快速查看一个序列或数月中组分的保留时间的数据趋势，交互图表是最简单的方法。用户只需选择交互结果表中的一个或多个列，然后单击功能区中的结果图表。

Chromeleon 7 CDS 立即创建与色谱图、结果表交互关联的图表。

图表可进行自定义。软件附带的预定义图表能够满足最常用的图表要求。



多种预定义的结果图表，使人一目了然。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 发布结果

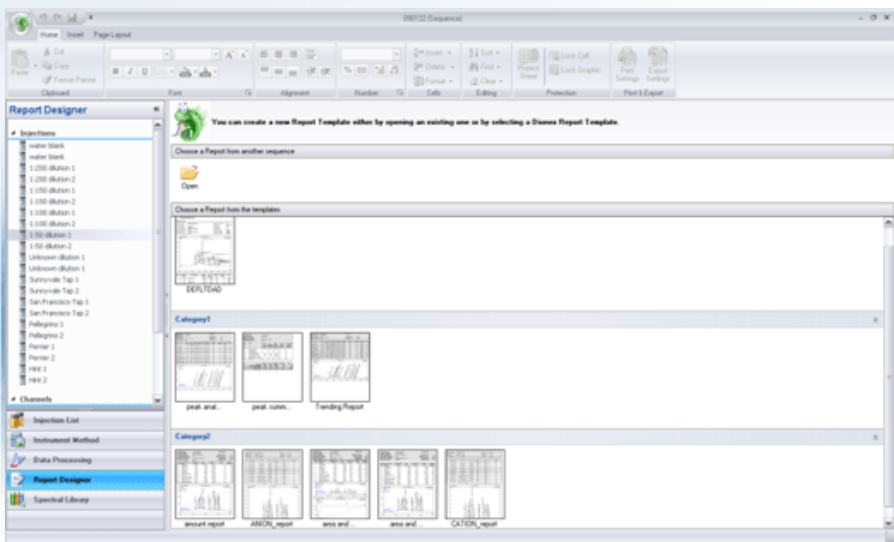
### 产品亮点

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7 色谱数据系统 (CDS) 软件提供必要的报告选项, 以满足客户的需要。可使用提供的模板直接创建报告, 也可以根据自身需要在电子表格中自定义报告。Chromeleon 7 CDS 可让您简便快捷地获取样品结果, 从而全面提高实验室的工作效率。

### 充分利用数据, 简便快捷

所有 Chromeleon 7 CDS 都预装了报告模板, 以满足现代实验室多样化的需求。电子表格为用户提供了舒适、熟悉的界面。Chromeleon 7 CDS 内置的用户管理工具授予管理员决定谁有自定义报告的权限。自定义报告可加上公司标识、附加运行、样品和仪器变量、文字和图片, 以满足客户的不同要求。

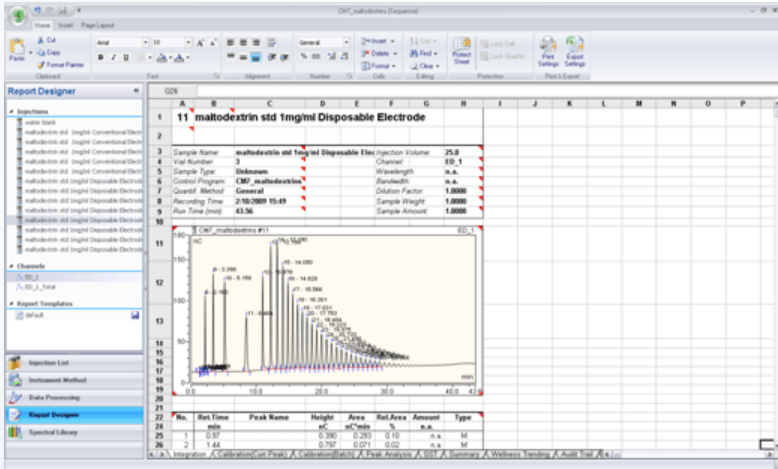
打印、导出和共享结果均十分简便。



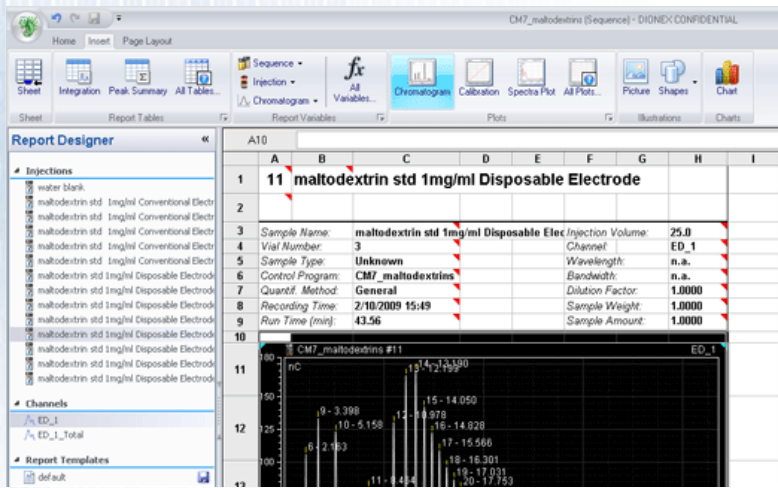
使用报告模板 MiniPlot, 便于从庞大的数据库中选择合适的模板。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 发布结果



包括色谱图、峰分析、校准曲线、验证结果、序列总览等。



Chromeleon 7 CDS Report Publisher Pro 中的高级报告选项，报告设计者可以灵活地创建全面的自定义报告。设计者可以插入专业的图表对象，使用公式和函数（包括用户自定义的公式）。

使用 Ribbon 控件，可方便地添加报告元素。选定电子表格上的某一区域，并选取要插入的对象。

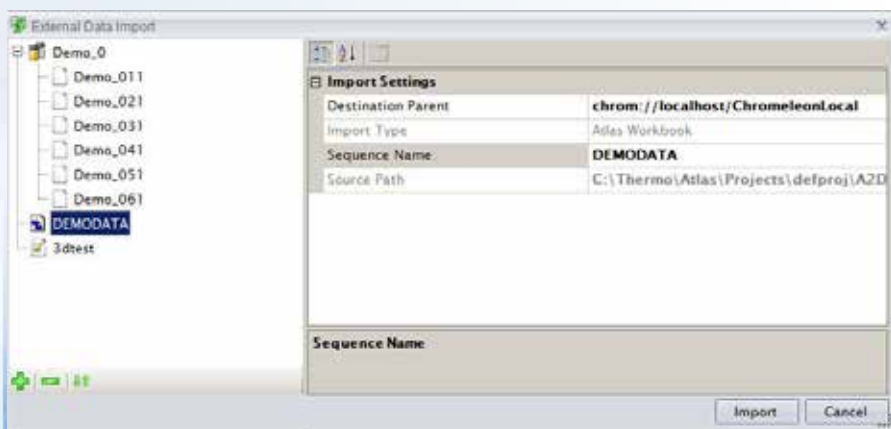
# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 实验室联网



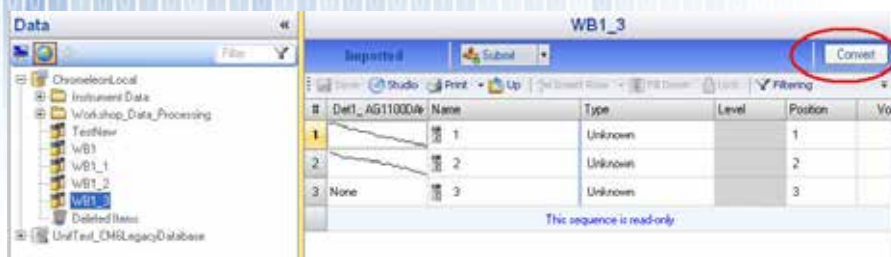
### 产品亮点

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7.2 色谱数据系统 (CDS) 软件新增了导入和导出选项, 现在, 在实验室系统之间传输数据比以往任何时候都更加容易。旧版的 CDS 数据可直接导入 (Chromeleon 6 CDS 和 Atlas), 或通过 GAML/netCDF/AnDI 导入, 无需保留多个 CDS。



采用自动递归报告, 导入外部数据简单易行。

导入单个文件或整个文件夹都非常简单, 而且能够一次导入多个不同类型的文件。单个数据文件可以组合成一个或多个序列。

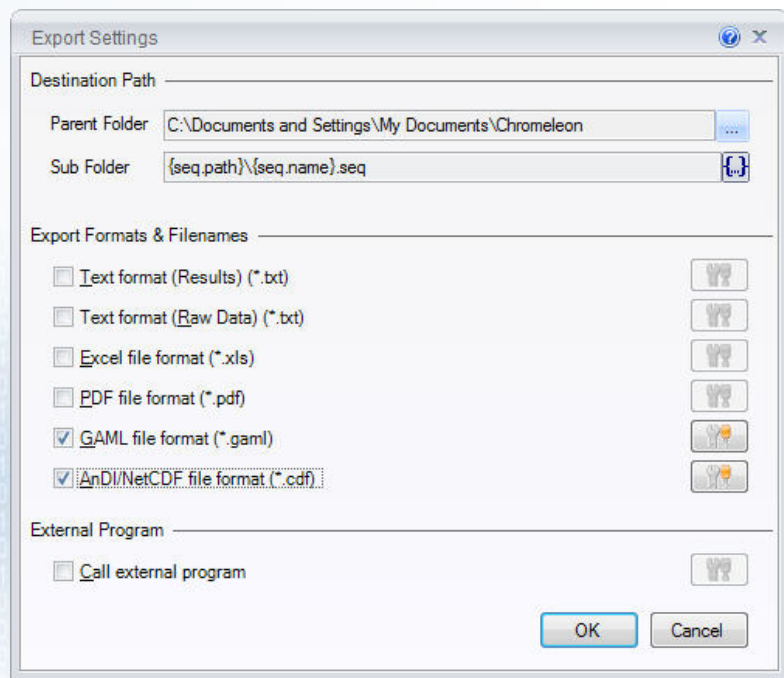


导入的数据序列都明确标识为导入, 积分和结果将被保留。只单击鼠标选择相应的选项, 即可使用 Chromeleon 7.2 CDS 处理数据。导入的结果将会显示出来, 就好像是能够用导入数据和 / 或本地数据的组合创建查询和报告的 Chromeleon 7.2 CDS 变量。

导入序列明确标识, 且能转换为 Chromeleon 7.2 CDS 处理方法。

# Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统

## 实验室联网



导出设置允许将数据传输到其他实验室系统。

同样，可以将数据导出为 PDF、GAML 和 AnDI/NetCDF 等多种格式，确保其它实验室系统可以访问。



## 四

### Chromeleon 变色龙软件部分典型技术简介



## 运用色谱软件自动进行系统适应性测试

Frank Tontala, Thermo Fisher Scientific, Germering, Germany

### 关键词

Chromeleon 色谱数据系统 (CDS)、系统适应性测试、色谱适应性、SST

### 目标

阐述 Chromeleon 色谱数据系统 (CDS) 在进行自动系统适应性测试过程中所使用的工具。

### 简介

实验室通常使用系统适应测试 (SST) 来确保整个分析系统 (包括仪器、试剂、色谱柱和分析员) 适应分析。

美国药典 (USP) 色谱通则描述:

“系统适应性测试是气相和液相色谱法中不可或缺的一部分, 用来验证色谱系统的分离度和重现性能否完成当前的分析。测试基于的原则是, 整个系统是由仪器、电路, 分析方法和样品所组成的, 我们将其作为一个整体去测试, 从而验证整个系统。”



系统适应性测试的总体目标是监视色谱结果, 确保色谱适应性 (例如: 通过测试拖尾因子、柱效和关键峰对的分离度) 和稳定的系统性能 (例如: 使用标准品的重复进样)。

SST 通常在样品分析之前基于标准品计算, 确保未知样品不注入到不适合的系统中。手动环境下, 用户需要处理每个批次的样品, 导致结果延迟。此外, 如果采用手动计算, 可能导致误差或不正确的结果。

为了克服这些问题, Thermo Scientific Dionex Chromeleon 7 色谱数据系统包含了自动系统适应性测试, 作为序列采集和处理的一部分。使用 Chromeleon™ 后, 所有 SST 计算都可由软件自动完成。

根据用户定义的标准, Chromeleon 可决定该系统是否适合, 若需要, 如果任一测试失败, 可以终止分析运行。

系统适应性测试不限于需要符合 FDA 和其他监管机构所设法规的实验室。Chromeleon 7 可对数以百计不同类型的计算结果进行自动化 SST (系统适应性测试), 因此任何实验室都可从中受益。可使用的测试标准包括确保样品浓度在预期范围内、设定检测器信噪比的范围、限制杂质的可接受水平, 等等。

### FDA 对系统适应性测试的指南

关于色谱方法法验证的 FDA (CDER) 1 指南推荐使用下列测试和参数:

表 1. FDA 推荐的 SST 参数

测试	参数
容量因子 (k')	$k' > 2$
精度 / 进样重复性 (RSD)	$RSD \leq 1\%$ ( $n \geq 5$ )
分析物与相邻峰的分离度 (R <sup>s</sup> )	$R_s > 2$
拖尾因子 (T)	$T \leq 2$
理论塔板数 (N)	$N > 2000$

这些参数可能依实际情况有所不同, 但提供了一定的参考。FDA 还建议至少需要 5 个进样来确定重复性。通常, 所有其它测试也根据这 5 个进样检查结果, 这为系统适合进行分析提供了更多信心。

### Chromeleon 7 中的系统适应性功能

在 Chromeleon 7 中设置自动化系统适应性测试很简单。向导引导用户选择测试标准, 计算自动进行, 而预定义的报告模板则简化了报告结果的过程。

### 可计算哪些参数?

Chromeleon 可计算的任何参数都可在自动系统适应性测试中使用。这其中包括了 FDA 推荐的主要参数, 以及诸如相对保留时间、面积百分比、峰宽和浓度等其他参数。

### 可视化测试和结果

图 1 所示为 Chromeleon 色谱工作室, 显示色谱图、处理方法 (中间窗格) 以及计算结果 (底部窗格)。

处理方法已进行过配置以便进行 FDA 所推荐的 5 个系统适应性测试。例如, 测试 1 检查乙酰苯峰与下一个峰的分离度  $> 2$ 。

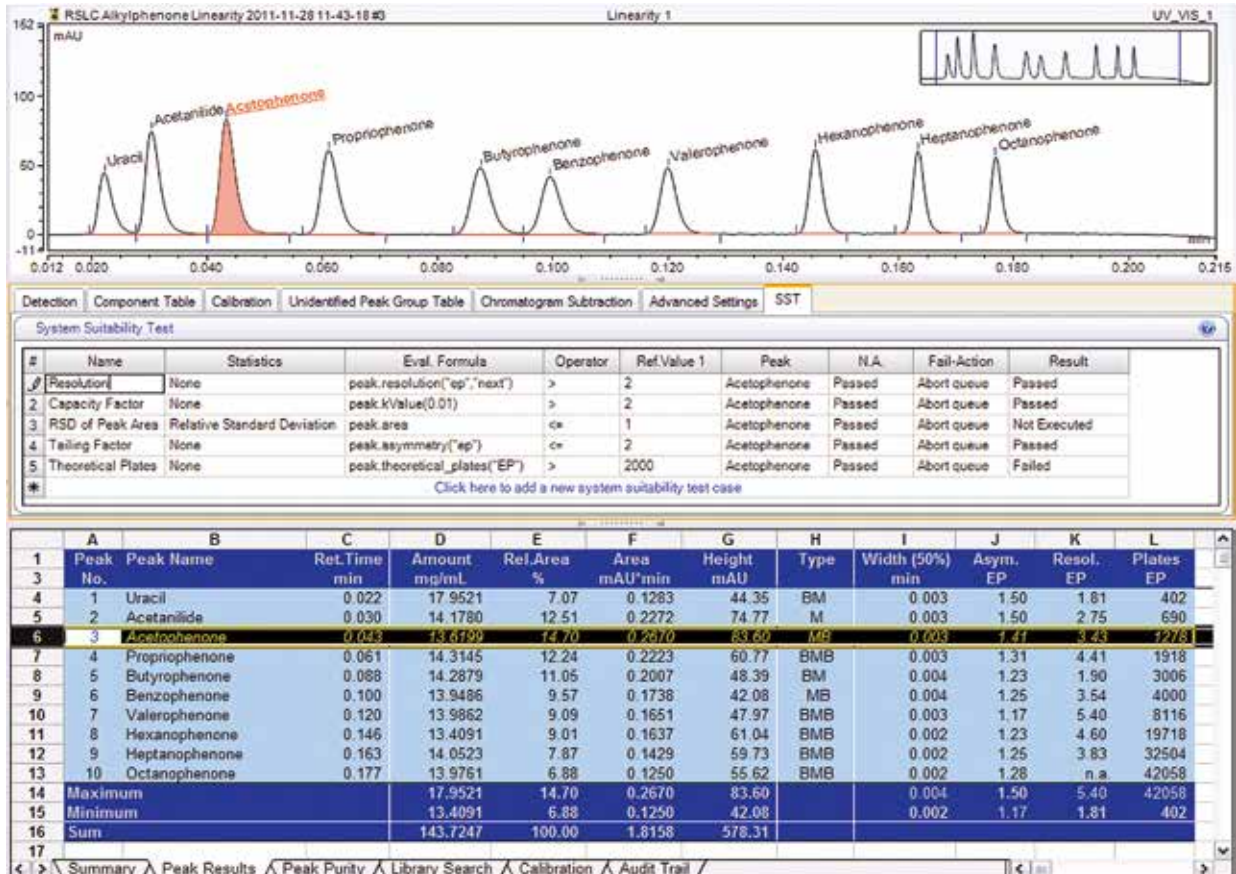


图 1. 上图为 Chromeleon 处理方法, 按照 FDA 推荐的适应性测试配置

使用此处理方法采集样品时，“失败动作”列指示，如果测试未能满足本标准，则将会停止序列采集。

方法面板中的“结果”列显示每个测试的后采集结果。请注意，%RSD 测试的结果是“未执行”，因为所示的进样仅为序列的第二个进样，这意味着已分析的样品数（5 个中的 2 个）不足。另请注意，因为计算值（1278）低于测试标准值（2000），理论塔板数测试失败。

### 报告结果

Chromeleon 自带了默认报告，可按照原样使用，或自定义以满足实验室的专业需求。可将包含系统适应性相关信息的预定义报告表插入到任何报告中。图 2 显示包含 SST 结果和总体通过 / 失败结论的自定义系统适应性进样报告。

### 采集期间的系统适应性测试

序列采集期间，Chromeleon 在每次进样完成后自动计算系统适应性结果。自动系统适应性测试可配置为如果测试失败，Chromeleon 则终止序列采集。这确保样品不会注入到不适合样品分析的系统上，且不会浪费宝贵的样品和试剂。

所有与采集相关的系统适应性事件都记录在仪器审计追踪中。

图 3 显示审计追踪中记录的详细信息，描述了所执行的测试、所获得的结果以及所采取的动作。

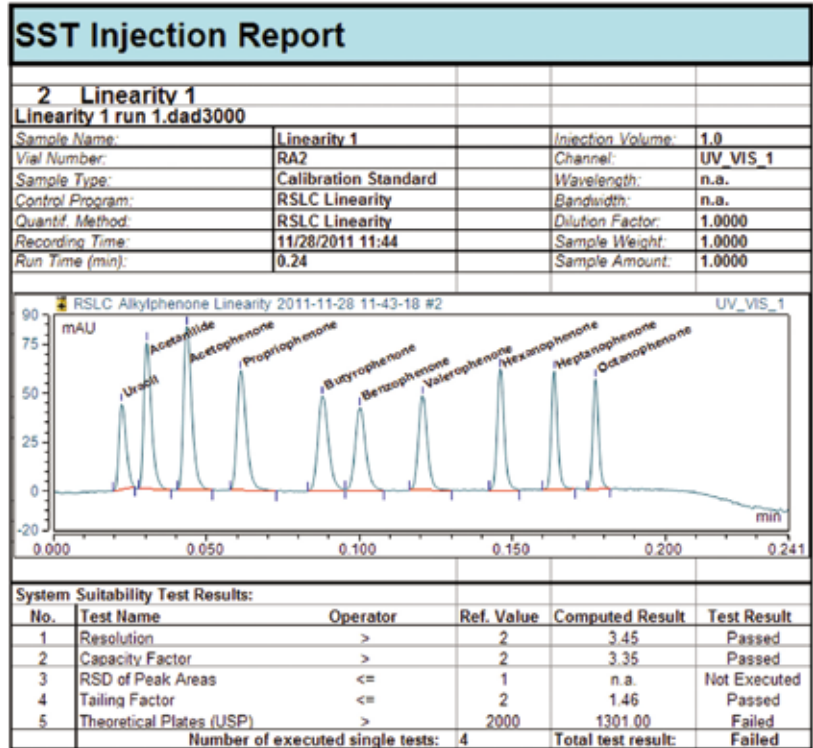


图 2. 上图为 SST 报告示例

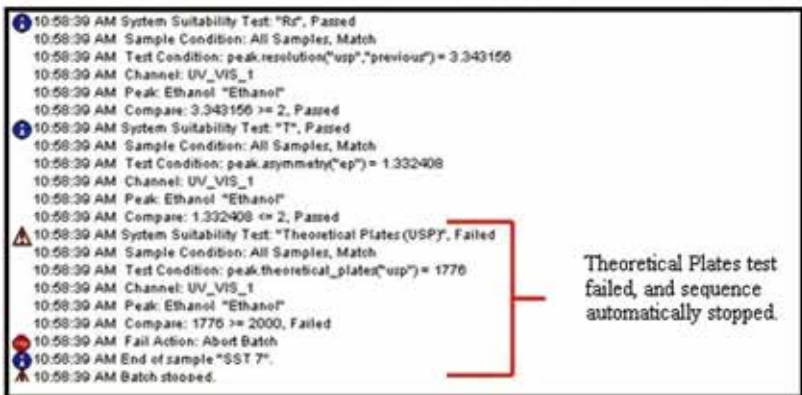


图 3. 该表描述显示序列终止的仪器审计追踪报告

### 自动系统适应性测试计算的其他用途

Chromeleon 中的系统适应性测试功能不限于 FDA 所涉及的系统性能值。Chromeleon 可计算的色谱参数均可成为测试标准的一部分。这意味着自动系统适应性测试可用于其他用途，如测试产品质量。

### 将规格参数与结果比较

在该实例中，对含有活性成分的片剂进行分析以获取 % 标示量 (%LS)，即片剂中活性成分的含量对标示含量的百分比。公布的片剂标示量为  $50\text{mg} \pm 5\%$ 。此外，杂质总量（色谱图中所有其他峰的峰面积百分比）必须小于 2%。

为实现这些标准，在 Chromeleon 中定义了两个测试。第一个测试检查活性成分的 %LS 值是否在 95-105 之间。第二个测试检查活性成分的峰面积是否大于或等于 98%（相当于所有其他峰总和小于 2%）。

图 4 显示 Chromeleon 色谱工作室，展示色谱图、带有 2 个 SST 项（中间面板）的处理方法和计算结果（底部面板）。

### 利用控制图表来监控实验室性能和数据质量

如果经常使用 Chromeleon 系统适应性测试，用户可轻易监控 SST 结果中的趋势。Chromeleon 包括可生成控制图的工具，以便随时监控色谱结果。这些图表可用来识别系统性能、方法或用户的趋势或异常情况。根据这些信息就可能确定故障的原因并采取适当的纠正措施，随之产生更高的数据质量和更高的实验室效率。

实验室性能不一致的常见原因：

- 仪器不适合该分析方法。例如，将样品注入到加热色谱柱上的仪器，

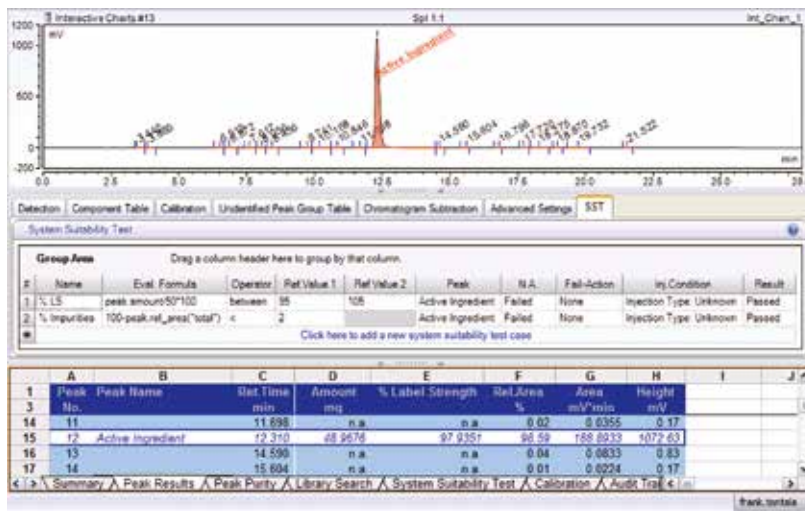


图 4. Chromeleon SST 可用与测试片剂纯度和标示量百分比

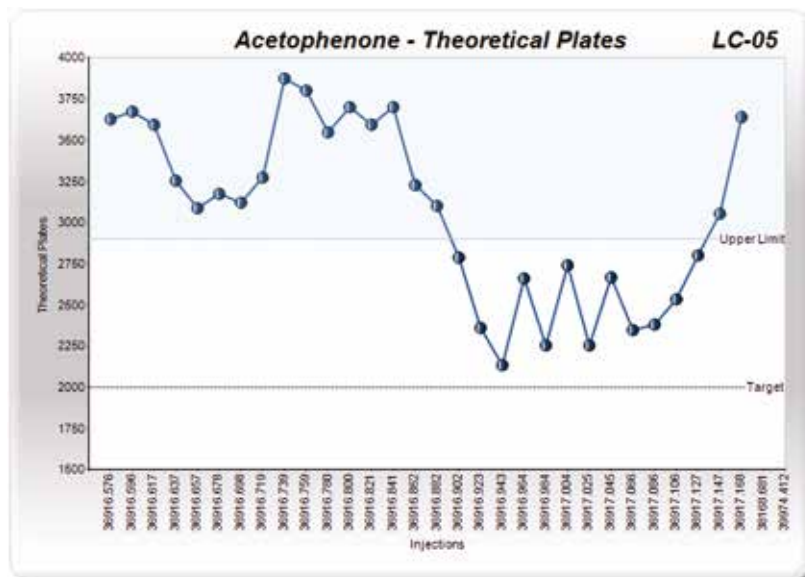


图 5. Chromeleon 控制图表用于随时监控理论塔板数

但是流动相并未预热，有时可能产生较低的理论塔板数。

- 需对仪器进行维修。例如，检测器灯可能接近其额定寿命，需更换。
- 未优化分析方法，导致其性能不佳。
- 未对分析员进行足够的分析方法和仪器培训。

图 5 显示利用 Chromeleon 内置的查询

和交互图表工具自动创建的控制图表。该图展示一段时间内在系统上获得的理论塔板数。该实例中，尽管系统适应性检查通常均通过，但很明显一段时间内色谱性能不是最佳的。

单击图表中的任一数据点将会打开源数据，允许对潜在原因进行进一步调查。

## 在 Chromeleon 中建立自动系统适应性测试

Chromeleon 提供了向导 (SST 向导) 来帮助用户轻松地定义自动系统适应性测试。该向导指导用户完成每个步骤, 如下所示:

### SST 向导对话框 1 — 选择测试参数

在第一向导页上, 用户可选择待测试的参数 (见图 6)。除了通常使用的系统性能参数外, 可使用 <自定义测试> 项来指定任何色谱或计算结果。

### SST 向导对话框 2 — 指定适用的进样

在下一向导页上, 用户定义测试所应用的进样 (图 7)。例如, 系统适应性测试一般不会对空白进样 (除非评估信号噪声) 或未知样品上进行。准确的说, 通常应用到 5 个或更多的系统适应性测试进样。

或者, 可通过进样类型、其他进样属性或是序列中的位置定义进样。

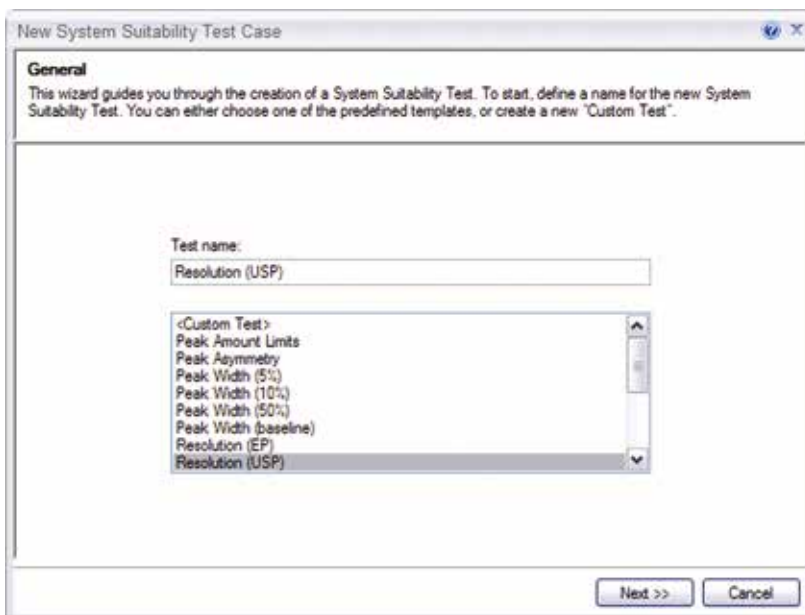


图 6. 选定系统适应性测试

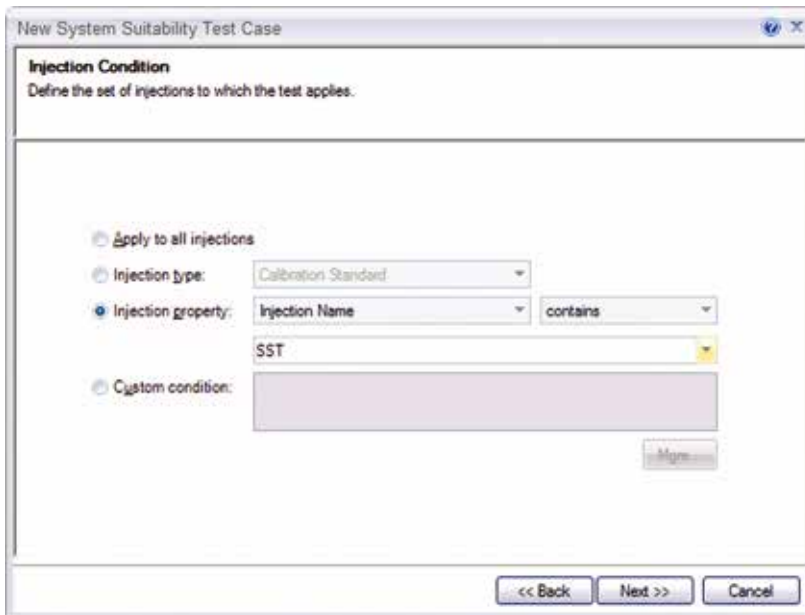


图 7. 指定测试所用的进样

### SST 向导对话框 3 — 规定测试标准

评估页面（图 8）定义了如何确定通过 / 失败结果。对于单个进样的测试（图 9），用户只需指定运算符和阈值。对于基于多次进样的测试（如重复进样的 %RSD），还要定义统计计算的类型、所需的进样类型和重复进样组。这将自动延迟测试评估，直至完成所需数量的进样。

### SST 向导对话框 4 — 指定色谱峰和通道条件

在峰 / 通道页面上（图 10），用户定义测试所应用的组分和通道。如果峰名称已知，则可直接选择。否则，可通过它在色谱图上的位置（峰序号）或属性（例如最大峰面积或最小峰宽）来选择峰。或者，应用到所有色谱峰。

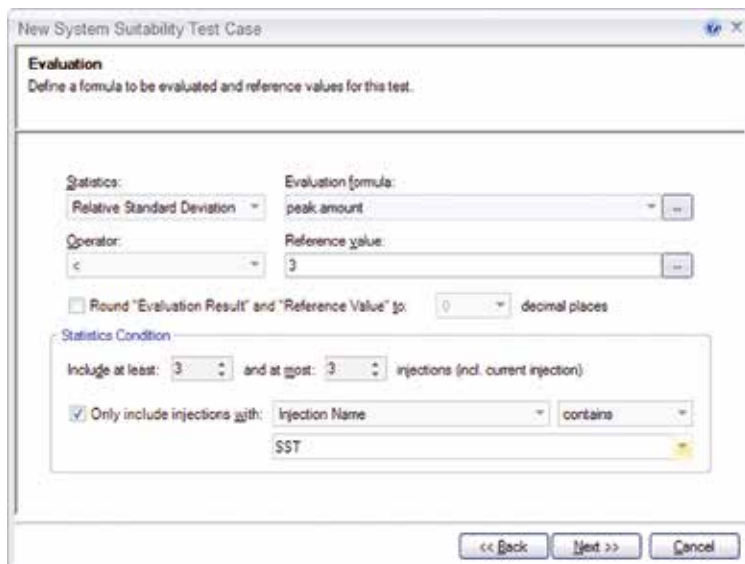


图 8. 评估标准可用于单次进样测试

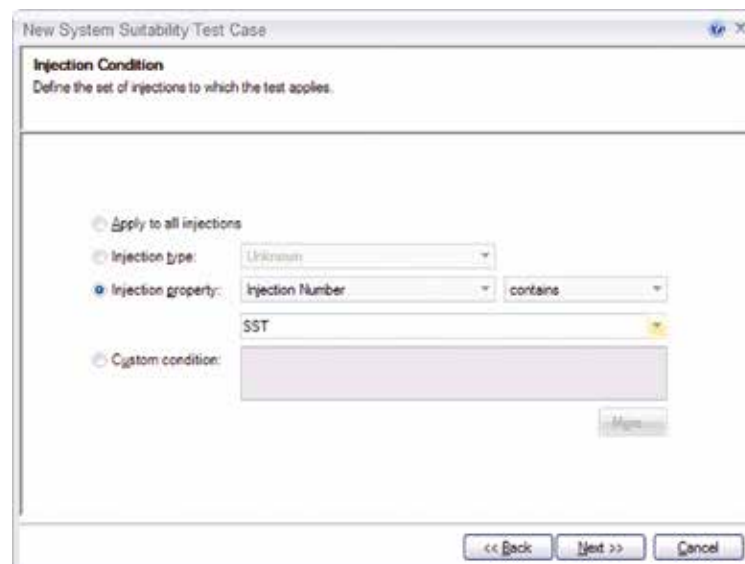


图 9. 评估标准可用于多次进样测试



图 10. 测试可应用到指定色谱峰和通道

## SST 向导对话框 5 — 定义失败动作

最后的向导页（图 11）允许用户定义如果无法评估测试，应报告何种测试结果，以及在序列采集过程中，如果试验失败，Chromeleon 应采取何种措施。

### 完成向导

完成该向导后，新的测试可添加到方法的 SST 表中。双击测试队列中的任意一项将会重新打开对应的向导页面（图 12）。

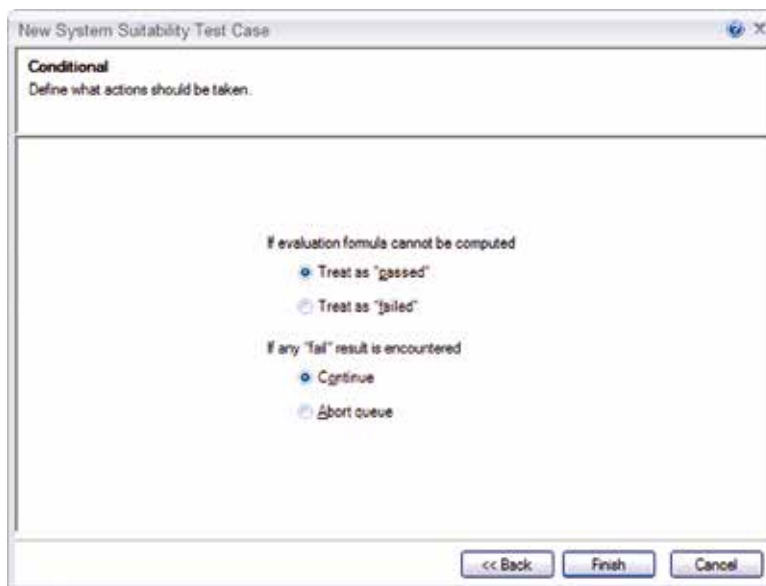


图 11. 定义基于测试结果的条件型行动

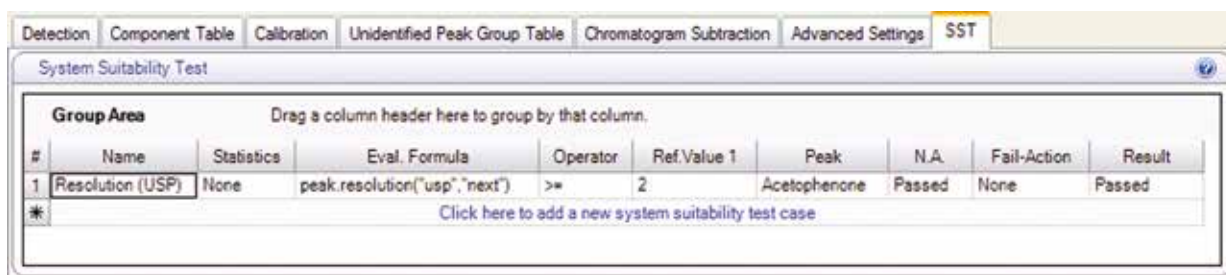


图 12. 新的测试添加到 SST 表

## 结论

Chromeleon 7 的系统适应性测试有以下众多显著的优势：

- 提高了系统适应性测试结果的可靠性。Chromeleon 执行所有的计算，从而消除因手动计算步骤而导致的误差。
- 更快生成系统适应性测试的结果。检测到峰后，Chromeleon 将会自动重新计算系统适应性结果。通过减少手动重新计算结果而产生的延迟，提高实验室通量。
- 降低样品损耗。一旦检测到系统适应性失败，Chromeleon 可自动终止序列。这可防止样品注入到不适合该分析方法的系统上，从而避免了样品损耗。
- 可扩展自动 SST 功能以便执行其他类型的测试，例如将结果与规格参数比较。
- 该功能还可用于生成控制图表以便监控实验室中的系统性能，并快速识别产生高故障水平的系统。
- 通过自动化实验室中一些高重复性且耗时的步骤，自动系统适应性测试功能不仅节省时间和金钱，还提高了实验室的生产力。

## 参考文献

1. 药品评价与研究中心（CDER）评审官指南《色谱分析方法的验证》，1994 年 11 月。



## 使用 Cobra 和 SmartPeaks 实现智能积分

### 介绍

色谱峰检测和积分是色谱分析法中的基本任务，通常是通过色谱数据系统（CDS）完成的。让软件能够按要求（或按照实验室规定）进行色谱峰检测与积分，既富有挑战性且又费时。色谱峰检测中的常见挑战包括：

- 从噪音中识别出色谱峰
- 正确识别潜在基线
- 在一系列色谱图中保持正确的色谱峰和基线检测
- 正确处理驼峰以及其它未分离的色谱峰

理想状态下，使用处理方法中的检测参数可以应对这些挑战，以便在多个色谱图间自动应用相同的处理方式，从而将不同操作人员所带来的变化降至最低。但是，找到能够生成所需结果的参数组合常常是一个枯燥的过程，导致很多色谱分析人员不得不放弃，转而求助于易受人为影响且耗时的手动积分。

### 色谱峰积分

可靠的色谱定量分析取决于准确和可重现的色谱峰积分。色谱峰积分决定色谱峰面积、峰高和峰的保留时间。这些信息被用于所有的后继计算，例如校准或未知物的分析。

简单地说，积分包括了从色谱峰起点到色谱峰终点的检测器输出的总合。为了实现这个目标，积分由二个独立的事件组成：积分开始和结束。色谱峰起点和终点定义了积分的开始和结束，并可通过检测器输出的显著变化或检测器输出的变化率来加以识别。然而，定义色谱峰边界仍是非常复杂的。

在理想状态下，色谱峰（图1）应完全对称，具有明显的检测器信号变化，可清楚地识别色谱峰起始点和终点。

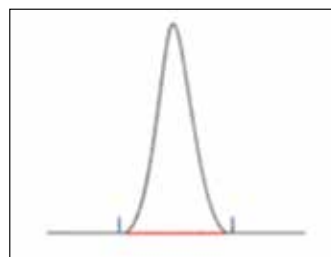


图 1. 理想的色谱峰

事实上，积分极其复杂多变。色谱数据系统必须识别众多的变化以及变化导致的影响，例如：对称性不同的峰、重叠峰、谷点、大小和大小比例不同的峰、低矮峰的起点和落点、色谱峰前延或拖尾、峰顶点和未分离峰谷的漂移，在倾斜的背景吸收和背景噪音情况下的基线等（图2）。

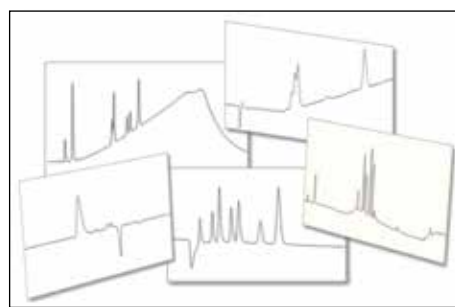


图 2. 典型的色谱图

### Cobra 色谱峰检测算法

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 色谱数据系统版本 7 的 Cobra™ 色谱峰检测算法为所有色谱分析人员简化了积分过程，使完成色谱图处理所需要的工作量降至最低，并在多个色谱图间提供了一致且可靠的峰检测。

Corba 算法使用先进的信号处理系统以从噪音中辨别出真正的色谱峰，以复杂的曲线拟合技术准确定位色谱峰最大值和拐点。仅使用几个简单的参数就能够对所有类型色谱图进行积分。利用智能向导，可以快速轻松地设置这些参数的数值，Cobra 算法随后可立即对样品序列中的每个色谱图进行积分。

为了充分表征组分峰的色谱检测信号，Cobra 的基本要求是每个峰都有一组 10 到 40 个数据点。有鉴于此，对从 Chromeleon6 中导入的、使用“自动”的数据采集速率设置而记录的数据，不建议使用 Cobra 对其进行重新积分。

Cobra 采用一系列算法来分析色谱图，确定真正的底层的基线，并正确识别色谱峰的起始和终止。这些算法仅用于色谱图的积分，不影响基本数据，描述见第 7.1 部分。

简而言之，Cobra 使用了自适应的 Savitzky-Golay 平滑功能，随后转换成二阶导数，再根据信号特性依照自动阈值来评估此二阶导数。

计算导数时，由于噪音会被放大，因此使用足够的平滑来优化信噪比并确保正确识别色谱峰的起始点和终点是非常重要的。Cobra 采用自适应 Savitzky-Golay 平滑函数来消除噪音，同时不会丢失重要信息。

Cobra 之所以使用色谱信号的二阶导数，是因为这样可识别组分色谱峰。此外，评估色谱峰的二阶导数能够减少背景吸收的影响，当背景有比待测物色谱峰更低的曲率时，可确保能准确、一致地识别拐点和色谱峰最大值。

例如，以下二张色谱图显示了同一待测物的色谱峰，但其中一张色谱图有较大的倾斜背景吸收（图 3）。中间的是这二个信号的一阶导数（图 4）。

可以看出，纯待测物的色谱图（灰色）和有干扰色谱图（蓝色）之间的差异已减小。该效果在二阶导数（图 5）中会大大加强。

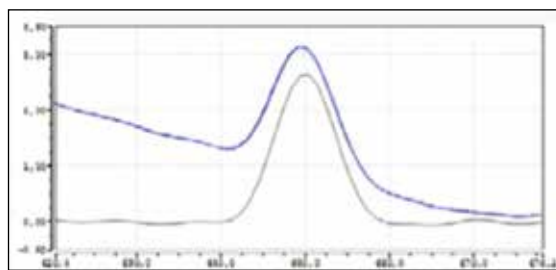


图 3. 重叠的色谱图

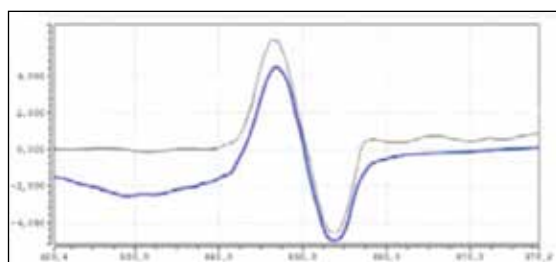


图 4. 一阶导数

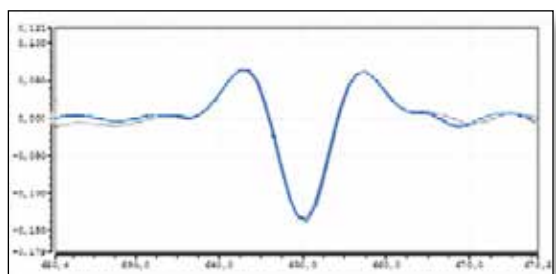


图 5. 二阶导数

这种情况下，纯待测物的色谱图与有干扰的色谱图几乎相同。

在色谱图的二阶导数中，噪音阈值是自动确定的（见图 6 和图 7 中的红色虚线）。阈值下限之下的区间最小值就是色谱峰顶点。拐点或阈值上限之上的区间最大值是色谱峰的起点和终点（图 6）。基线是那些横跨超过噪音阈值限度的曲率的点的插值。（图 7）。

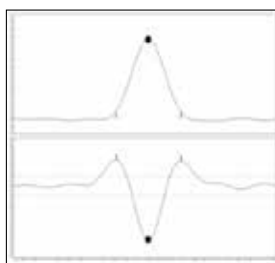


图 6. 定位最小值和最大值

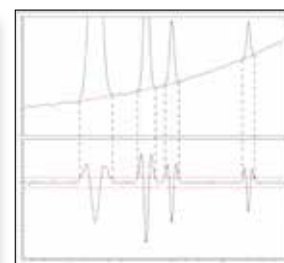


图 7. 基线插值

## Cobra 向导

Cobra 向导通过将用户输入操作最少化，智能地改善了分析人员的体验。该向导用于指导操作人员正确指定初始色谱峰检测参数，以在必要时帮助优化积分。积分更具结构性和直观性，可以放心操作，因此排除了边试边改的办法和手动积分操作。关于 Chromeleon CDS 如何确定设置这些参数所用值的详情，见第 7.1 部分。

Cobra 向导可协助分析人员定义 Cobra 所要求的 4 个关键参数：

### 积分范围

除非分析人员另有规定，默认情况下整个色谱图都会被积分。仅需点击拖拽鼠标，划过色谱图，应被积分的区域将会被高亮标记（见图 8）。同时，三个检测设置参数也会被创建：Inhibit On（开启禁止积分），Inhibit Off（关闭禁止积分），second Inhibit On（再次开启禁止积分）。

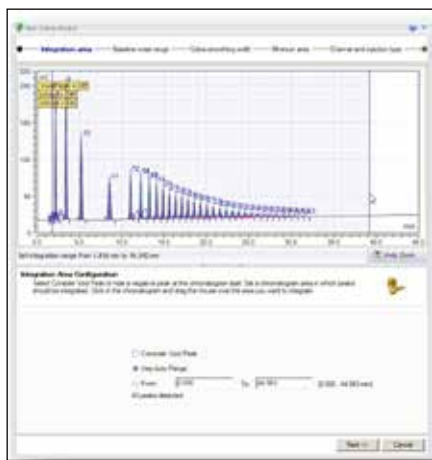


图 8. 定义积分区域

对于离子色谱，在所谓的“水负峰”或“死体积峰”的情况下，还存在其它的色谱测定问题。该负峰（与水相关）在需要检测的色谱峰之前出峰，并且需要特别处理以避免影响到其它色谱峰的积分。使用者可以通过复选框定义是否要考虑死体积峰。

## 基线噪音范围

Cobra 将自动尝试从色谱图中选择一个平坦的“无峰”区域来测量基线噪音（详述见第 7.1 部分）。但分析人员可通过简单地点击并拖曳鼠标选中应使用的区域以特别指定一个不同的范围。大多数情况下，默认选择是可接受的（见图 9）。二个检测参数被创建：BLNoiseStart（基线噪音起点）和 BLNoiseEnd（基线噪音终点）。



图 9. 定义基线噪音范围

## Cobra 平滑宽度

Cobra 会自动确定色谱图中最窄峰的峰宽，并用该值设置 Cobra 的平滑宽度（详见第 7.1 部分）。不过，使用者可以简单地通过选择色谱图中的另一个色谱峰（见图 10）来指定一个不同的值，或点击并拖拽鼠标来高亮显示应使用的峰宽。大多数情况下，默认选择是可接受的。一个检测参数被创建：Smoothing（平滑）。

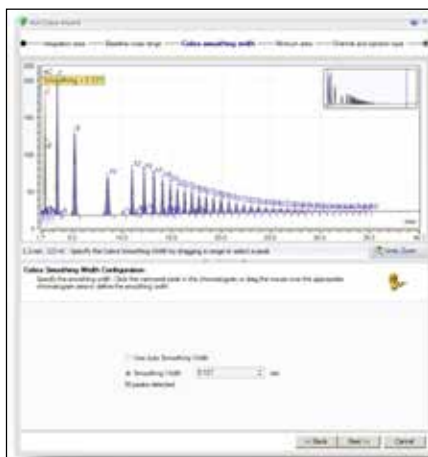


图 10. 定义 Cobra 平滑宽度

## 最小峰面积

Cobra 会自动确定所积出的最小峰的面积，并相应设置最小峰面积数值（详见第 7.1 部分）。不过，操作人员可以通过简单选择色谱图中应求积分的最小峰来轻松指定一个不同的值（详见图 11）。大多数情况下，自动确定的值都可以接受。检测表中会添加一个参数：Minimum Area（最小峰面积）。检测设置支持在不同保留时间段内设置多个最小峰面积参数，但通过向导只支持设置第一个最小峰面积参数。

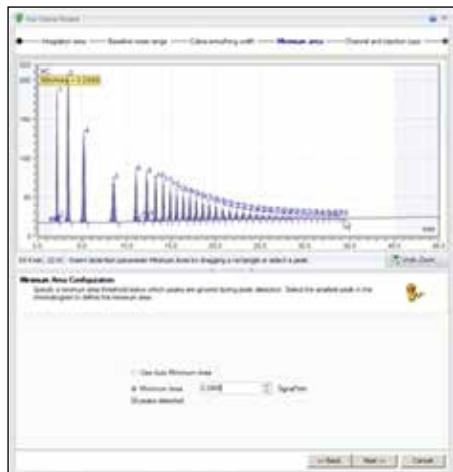


图 11. 定义最小峰面积

最终，用户可决定将这些 Cobra 检测参数用于所有或仅指定的通道或进样类型（图 12）。这样可以轻松快速地将不同的检测参数用于不同的检测器或进样类型。

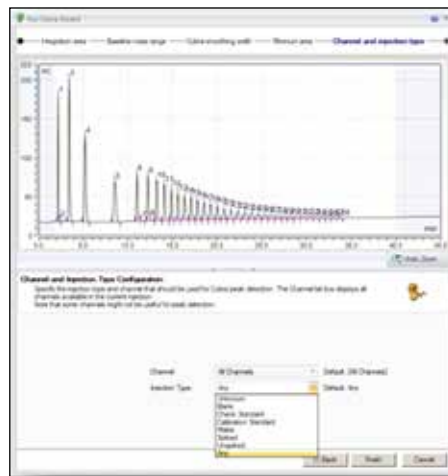


图 12. 定义进样和通道类型

使用这些简单的步骤，任何分析人员均可快速、轻松而自信地指定初始色谱峰检测参数，确保积分一致性、准确性，而无需费力地从失败的尝试中找到解决办法，从而消除了对手动积分的依赖。

## 常见积分问题

当基线不稳定或色谱峰分离不彻底的时候，会出现一些常见积分问题。例如，图 13A 中，数据系统选择从第一个色谱峰之前的负峰最低处到该色谱峰后的区域绘制基线。问题无疑就是在特征峰之前的负峰被误判为真正基线。使用 Cobra 算法中的“考虑死体积峰”选项可以轻松予以纠正（图 13B）。

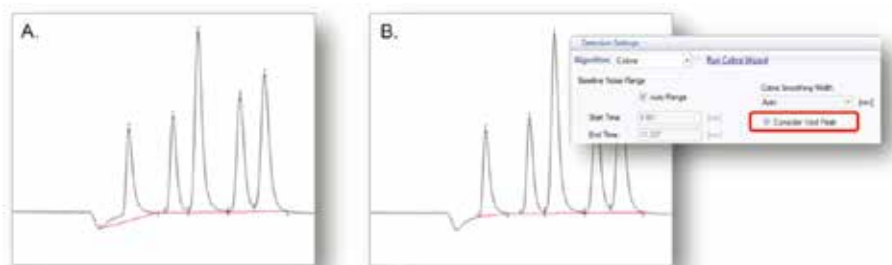


图 13. A) 由于负峰导致的不正确的基线，B) 使用 Cobra 得到的正确积分

图 14A 显示了另一个常见积分错误。在该图中，色谱峰终点被误判，导致色谱峰基线绘制错误。这个问题通常发生在色谱峰拖尾严重，峰比较小，而基线发生漂移的时候。存在这种情况时，不仅色谱峰会被错误积分，而且在两次运行结果中的色谱峰终点会显著变化。Cobra 算法通过基于色谱峰基线的斜率自动计算阈值，实现了具备一致性的适当的积分，见图 14B。



图 14. A) 由于拖尾导致的不正确积分，B) 使用 Cobra 得到的正确积分

积分难题的另一个来源是未分离的色谱峰组的色谱峰基线位置的多种选择。绘制二个色谱峰之间基线的最常见选项为垂直分割、谷到谷，切线切削、指数切削和高斯切削（图 15）。每种选择都各有利弊。

## 垂直切割

垂直切割法（图 15A）需要从色谱峰之间的峰谷和水平基线之间绘制一条。如色谱峰大小几乎相同，而且没有拖尾或前伸现象，这样计算而得的色谱峰面积应该是相当准确的。

但如有显著的第一个峰拖尾，或第二个峰前伸，则面积将失真，而积分得到的面积也会产生相应错误。此外，如果色谱峰比例悬殊，例如 20:1 时，则较小的峰将受主峰影响得到明显的过多的峰面积。这种情况下，较大的峰的准确性将远好于较小的峰。最后，当色谱峰之间的分离度太小，以致没有明显峰谷时，垂直切割将导致较小的“肩峰”的积分面积过大。这种情况下，可能更合适选择其它方法。

## 谷到谷

谷到谷法（图 15B）将起点和终点设置于色谱峰之间的峰谷点，以此方式对每个色谱峰单独积分。该方法通常不是最佳方式，因为其通常会低估真实色谱峰面积，然而，如果一组流出峰下出现了一个已知基线干扰，或者在某些梯度洗脱的情况下，基线有较小持续宽幅上扬时，可以使用这种方法。

## 切线或指数切割

图 15（C 和 D）中的两种切割方式使用独立基线把第一个峰和第二个峰分开。第一个峰的积分从其起点开始到峰组的明显终点为止。第二个峰基线从色谱峰之间的峰谷开始，在信号靠近基线时结束。切割色谱峰“下方”的面积被加到首峰上，而非切割色谱峰上。该方法也被称为切线积分法，而小峰则被标记为切割峰、肩峰或驼峰。

切割过程可能有若干变化：

- 切线切割法；从峰谷到色谱峰终点（或色谱峰起始点）画一条直线（图 15C）。通常有两种选择：在较低色谱峰终点上的切线或同时二个色谱峰终点上的切线。
  - 在较低色谱峰终点的切线意味着该直线是在上升驼峰起始点，或在下降驼峰终点，即色谱峰信号最低的部分，在色谱图上正切划线。
  - 在二个色谱峰的终点处的切线意味着色谱峰起点和终点均是按直线与色谱图正切的方式确定的。
- 指数切割法；使用一个指数函数来创建弯曲的切割线，以尝试得出近似的第一个峰潜在基线（图 15D）。

无论使用哪种切割，得到的始终是一个峰面积估计值，通常，积分法的一致性比切线切割还是指数切割都重要。作为第一守则，如较小的峰小于主峰高度的 10%，则切割色谱峰就是合适的积分方式。如较小的峰大于主峰高度的 10%，则最好采用垂线法。

即便是经验最丰富的色谱分析人员，理解所有这些不同的方法和技巧，并能够指定正确的检测参数来实现理想的积分也是非常艰巨的任务。Chromeleon CDS 通过为色谱分析人员提供 SmartPeaks™ 积分助手解决了这些问题。

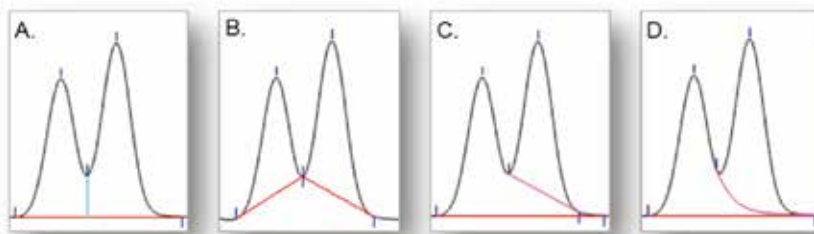


图 15. 基线的类型。A) 垂直切割，B) 谷到谷，C) 切线切割，D) 指数切割

## SmartPeaks 积分助手

SmartPeaks 积分助手为分析人员提供了最简单的界面，快速直观地对未分离峰组进行积分。用户只需激活 SmartPeaks 工具并选择一个色谱图区域。SmartPeaks 随后会以图形的方式显示可用的积分选项，如谷到谷基线或指数切削（图 16）。

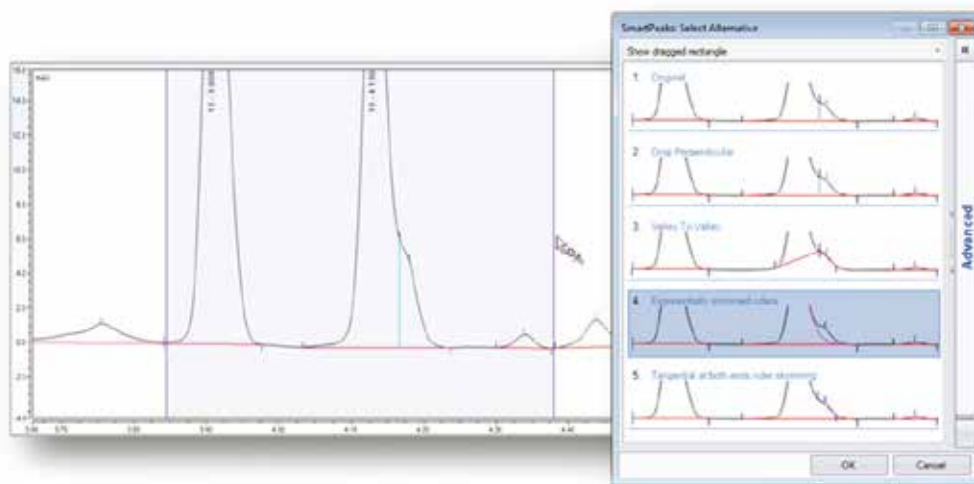


图 16. SmartPeaks 积分助手 - 显示积分选项

使用者随后选择想要的选项，SmartPeaks 将相应的参数和值添加到处理方法中，以便对序列中的所有色谱图自动应用所要求的积分形式（图 17）。更多选项（通过高级侧边栏，图 16）允许使用者定义将这些参数应用到色谱图的哪一部分、哪些检测通道和 / 或进样类型。

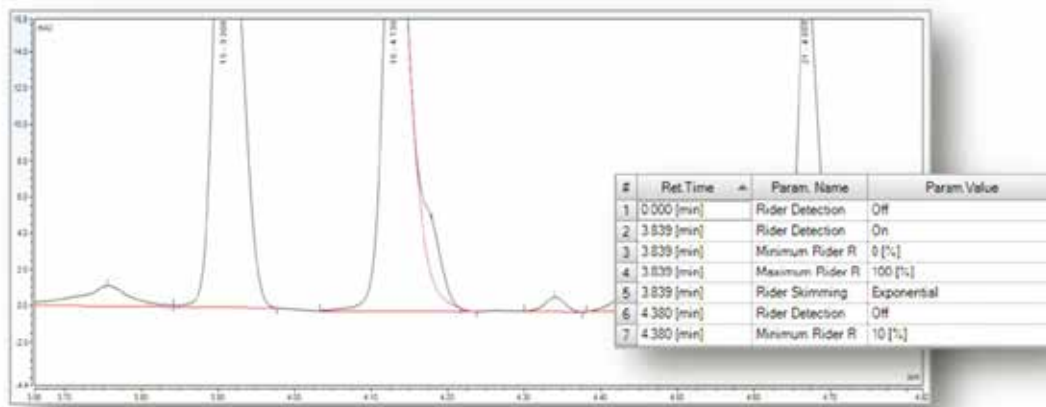


图 17. SmartPeaks 积分助手 - 显示积分选项

该过程只需几秒，消除了调整积分中的边试边改过程，使任何使用者都能设置合适的参数，以确保未分离色谱峰的正确积分。

## Cobra 检测参数

积分是相当复杂且具有挑战性的，但对于准确的定量分析至关重要。Cobra 检测算法、Cobra 向导和 SmartPeaks 积分助手简化了色谱法检测和积分过程。但对于某些复杂色谱图而言，仍有必要提供更多的积分参数，从而实现正确积分。Chromeleon CDS 版本 7 全面提供了一整套可适用的、灵活的参数，以协助色谱分析人员实现其积分目标。

这些参数可分为 4 类：

- 禁止对不需要的色谱峰积分的参数
- 影响基线的参数
- 帮助界定色谱峰起始点和终点的参数
- 影响驼峰和肩峰检测的参数

检测参数会影响其所应用到的所有色谱图的积分。每个检测参数均被赋予了一个默认值，即使是在处理方法中未明确规定的检测参数，也始终用此默认值应用到色谱图上。

任何时候，每个参数均可采用新值，但只有最后指定的值才有效，而且仅针对所指定的色谱时间段。随后这些参数会重新设定为默认值。

理解这些参数的目的和应用对任何色谱分析人员而言都是非常重要的，唯有如此，才能将这些参数成功应用于处理方法，以实现最佳结果。

### 7.1 使用 Cobra 参数的“自动”设置功能

#### Cobra 平滑宽度

如果用户启用“自动”选项，则会为整个色谱图动态设置平滑宽度，因此每个数据描点均会使用独立宽度。执行以下算法以自动计算初始滤波器宽度，随后将其用于进一步计算。

- 首先，Cobra 通过使用当前信号值和之前信号值的差减，例如数据点 4 的信号值 - 数据点 1 的信号值等，评估每个点的斜率。
- 其次，Cobra 分析该斜率的集合，寻找紧跟最小值之后的最大值。如果两者之间过零点（即最大值在 0 以上，最小值在 0 以下），则计算出与峰顶点相应的点。该点会给出色谱峰两个拐点之间的宽度（ $w$ ）和峰高（ $h$ ）的估算值。

- 这些点将根据宽度（ $w$ ）进行分类，构建一条将具有最小宽度的点连接至具有最大宽度的点的直线（见图 18）。标出该条线下方具有最大偏差的点（ $j$ ），而所有相对较小的点则被忽略，因为这些点可能与信号噪音相关。对其余点则计算用峰高（ $h$ ）加权的平均峰宽（图 18 中的阴影区域）。
- 最后，用此平均宽度乘以一个因子（默认值为 1.5），计算得出滤波宽度。

然后，将此滤波宽度进一步用于以下两个步骤：重采样和平滑。

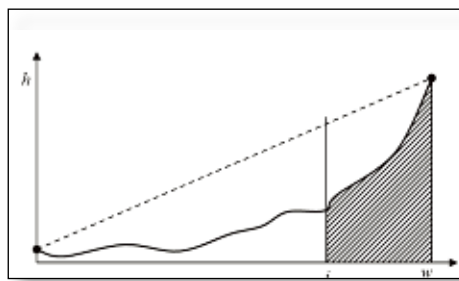


图 18. 来自峰评估的滤波宽度选择

#### 重采样

重采样有几个目的：

- 消除或抑制噪音
- 减少数据量，加快更多处理的速度
- 确保获得随后的算法中需要的等距数据点

Cobra 在现有数据点之间取一个最小时间间隔（步长），并计算一个新步长。重采样因子用于限制所要考虑的数据点（默认值为 50）：

$$\text{新步长} = \text{初始步长} \div \text{重采样因子} \times \text{滤波宽度的最大值} / \text{初始步长或 } 3$$

如原始数据为非等距，或计算得出的新步长大于初始步长，则色谱图随后会使用三次插值重新取样，以按新步长计算新信号值。

## 平滑

基线和色谱峰检测基于(重采样而得的)色谱图的曲率,但色谱图可能包含大量噪音,因此需要采取额外的处理步骤来平滑数据,实现信号和噪音的区分。

Cobra 使用 Savitzky-Golay 算法平滑数据。该算法把一个二次多项式用于接近目前数据描点的数据描点集合(按上一步计算的滤波宽度和(可能是新的)步长来进行定义)。但使用固定滤波宽度会导致某些色谱峰被过度平滑,或经过平滑后的信号可能过冲,见图 19。这在色谱峰切削时明显是有问题的,因为这些处理集中地使用斜率和平滑后的信号。可以看到,经过切削的基线(红色)过早停止,因为切线在最小的平滑信号处与基线是平行的。

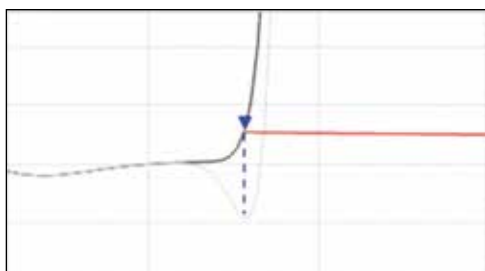


图 19. 原始信号(黑色)与经过平滑的信号(灰色)不能重现

通过减少滤波宽度来避免此问题会导致在色谱峰检测过程中忽略小峰,因为较小的滤波宽度导致了较高的噪音,从而掩盖真峰曲率。因此,解决方案是要检测过高的信号,并相应调整对色谱图中每个数据点的滤波宽度。因此在整个色谱图上,要动态设置滤波器宽度,以便在评估每个数据描点(斜率和曲率)时使用独立的宽度。

在图 20 中,蓝色曲线显示了若干具有固定滤波宽度的经平滑后信号与组合在一起的色谱图(黑色)自调节平滑后的信号(红色)。对组合图中各个信号的加权会及时显示在色谱图上三个不同点的小方框中,加权后的平均滤波宽度标为垂直蓝线。

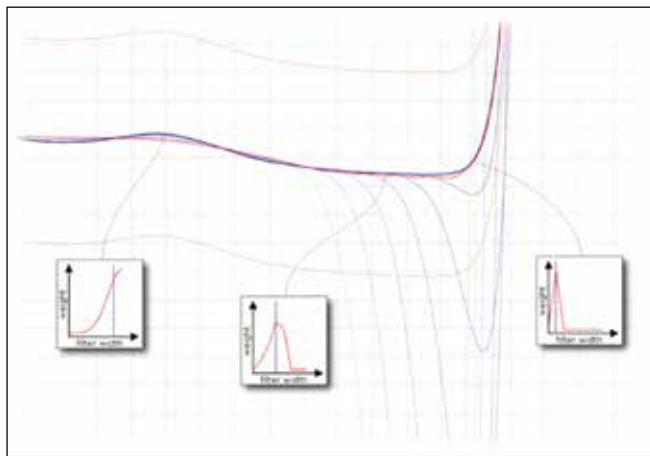


图 20. 自适应平滑处理总览

图 21 显示了滤波(或平滑)宽度如何自动进行调整以适应于平滑色谱图。这也适用于一阶导数和二阶导数。

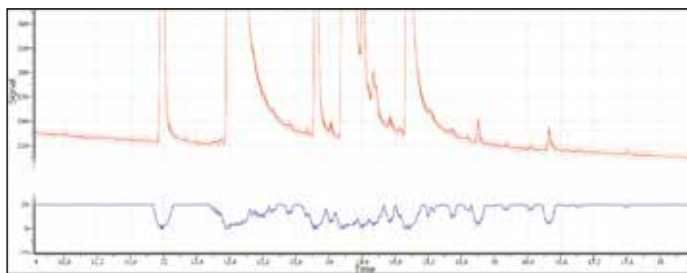


图 21. 色谱峰(黑色,几乎完全被在平滑后信号的红色曲线所掩盖)范围内平均平滑宽度(蓝色)的变化。噪音水平边界用桔黄色显示。

总之,如果用户启用了“自动”选项,就会对整个色谱图动态设置平滑宽度。重要的是要注意色谱图的平滑和求导仅在色谱峰检测和积分期间内部使用。所有其它积分结果,例如峰高或面积,始终依照原始信号进行计算。

### 基线噪音范围

如用户选择了“自动”选项，会自动使用一种算法来计算合适的时间范围。使用美国材料与试验协会（ASTM）方法 E685-93 时，色谱的噪音信号时会使用一个为 Cobra 平滑宽度倍数的宽度，在窗口中多次计算色谱图信号噪音（图 22 中的 dt），从而得出系列信号噪音水平的估计值，当一个窗口叠加在一个真峰上时，这些值已被异常值污染。

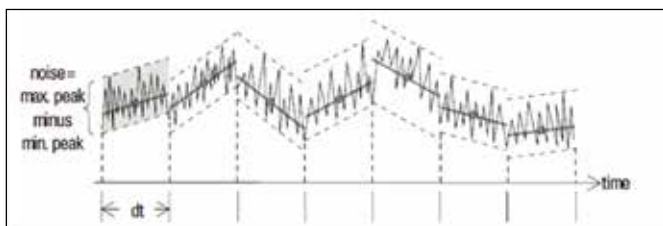


图 22. ASTM E 685-93 关于信噪比计算

从统计学上看，这些估值的相当一部分属于基线，因此可使用具有可配置百分比或“数字排位”的值（如中位为 50%）作为信号噪音水平的有效估计。该排名要求给定百分比的色谱图未被色谱峰覆盖。但该百分比会随色谱图长度而改变，如短色谱图的无峰时间百分比比较小。

为对此予以补偿，使用了以下方程式来计算排名。

$$\text{排名} = 30 \times \text{色谱图长度 (分钟)} / 10.0$$

(至少 30, 最多 100)

通过将此排名应用于信号噪音估计值集，Cobra 能够计算信号噪音的可靠数据。

接下来，Cobra 会使用 RDP 算法以得出近似的色谱图（图 23）。该算法以递归方式划分色谱图“线”。

起初，其包括了第一点和最后一点间的所有数据描点（图 23A）。其会自动将第一点和最后一点标记为要保留的点。随后，其会查找离以第一点和最后一点为端点的线段最远的点（标记为绿色）。如比起之前计算的信号噪音（蓝色区域），该点离上述线段更远，则必须保留该点。

随后，用第一点和最差点重新执行该算法（图 23B）。如果偏离最远的点现在比之前计算的信号噪音更靠近上述线段，在近似线不比信号噪音更差的情况下，这些点之间目前未标记为“保留”的任何点均可剔除（标记为红色）。

继续用最差点和最后一点执行该算法（图 23C），并以递归方式运行，直至处理完整个色谱图（图 23D 到 G）。当递归完成后，可生成一张新的色谱图，其中仅包含已标记为保留的点（蓝线 图 23G）。

最后，取用该算法计算出的最长片段的时间范围（开始和结束时间）作为“Cobra 基线噪音范围”的范围。

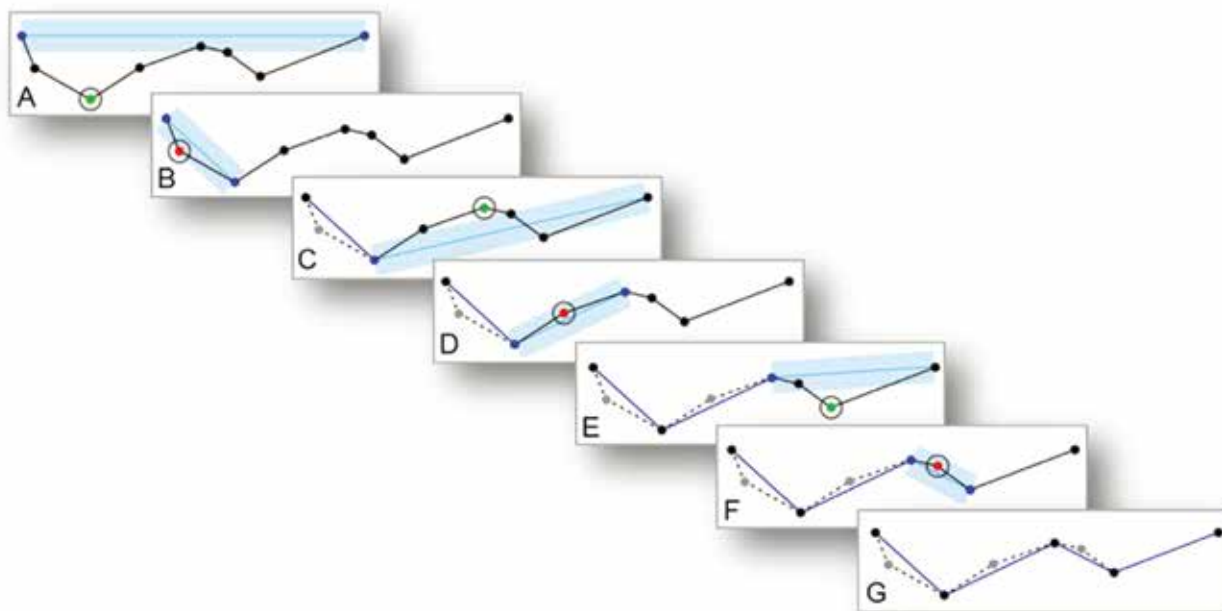


图 23. 拉默 - 道格拉斯 - 普克算法

### 最小峰面积

如在 Cobra 向导中选择了“使用自动最小峰面积”选项，则用“最小信噪比”参数来确定检测限。这种情况下，Chromeleon CDS 会使用以下方程式来计算最小峰面积的阈值：

$$\text{最小信噪比} \times \text{基线信号噪音} \times \text{最小峰宽}$$

基线信号噪音值源自于 Cobra 基线噪音范围规定的色谱图部分。如未规定最小峰宽，则使用 Cobra 平滑宽度参数进行替代。

### 最小高度

如该参数设置为“自动”，则用“最小信噪比”参数确定检测限。这种情况下，Chromeleon CDS 会使用以下方程式来计算最小高度的阈值：

$$\text{最小信噪比} \times \text{基线信号噪音}$$

基线信号噪音值源自于 Cobra 基线噪音范围规定的色谱图部分。

## 7.2 禁止不需要的色谱峰积分的参数

### 检测负峰

“检测负峰”参数能够启用或禁止负峰的检测。当参数启用时，会检测负峰和正峰(图 24)。该参数有 3 个选项：

- 关闭：不检测负峰（默认）。
- 开启：检测负峰，自动开启“锁定基线”参数。在结果列表中，负峰面积会显示为正值。
- 开启但不标记：检测负峰，但不标记，或不在结果之中。

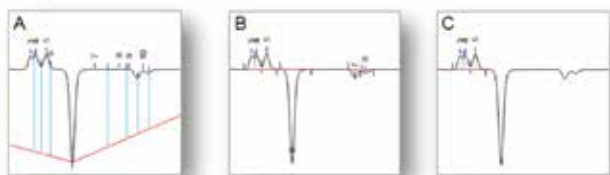


图 24. 检测负峰。A) 开启, B) 关闭, C) 开启但不标记

### 检测肩峰

该参数可以用来启动 / 禁止肩峰检测。鉴于没有严格的数字表示方法来描述肩峰，大部分色谱分析人员都公认肩峰是主峰和较小峰之间没有峰谷的一种驼峰（例如较小峰顶点低于其起始点，图 25）。该参数只有两个选项可用：

- 开启：把肩峰当作正常峰（默认）。
- 关闭：不识别肩峰。关闭肩峰检测不会禁用所有驼峰检测。

如检测到肩峰，则如何进行积分（或不积分）将由各种驼峰和最小参数的设置决定。有关驼峰参数的更多信息，请参见第 7.5 部分。

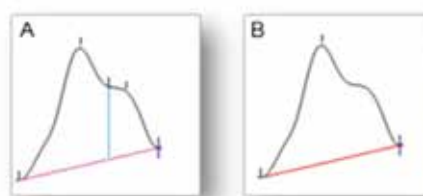


图 25. 检测肩峰。A) 开启, B) 关闭

### 禁止积分

“禁止积分”参数可用以从积分中排除特定色谱图面积。在忽略不感兴趣或含有不需要分析的色谱峰的色谱图面积时，例如，色谱图开始时的大溶剂峰，或进样结束时的梯度洗脱导致的峰时，禁止积分非常有用。该参数有两个选项可用：

- 开启：禁用色谱峰检测。
- 关闭：启用色谱峰检测（默认）。

设置为“开启”时，唯有参数被重新设置为“关闭”后，才会重新激活色谱峰检测。在禁用积分 = 开启和禁用积分 = 关闭之间的区域内，色谱峰检测被禁用，即在该区域内不对色谱峰进行识别。屏幕上会显示色谱图，但不进行积分（图 26）。

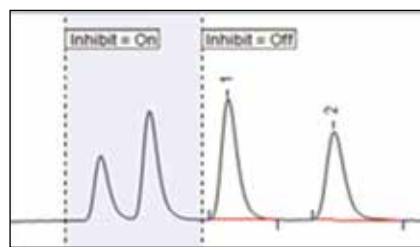


图 26. 禁止积分

### 最小峰面积

该检测参数用来确定最小面积阈值，面积低于此值的色谱峰均会被忽略，这是从已积分色谱图中忽略小峰的最常用参数。它是 Cobra 算法使用的参数之一，可用设置有：

- 自动：如选择自动（默认），Chromeleon 会自动计算检测限，如第 7.1 部分中所述。
- 0 - 1E+15：以 <信号单位> × 分钟（如 mAU\*min）的形式设置一个绝对阈值

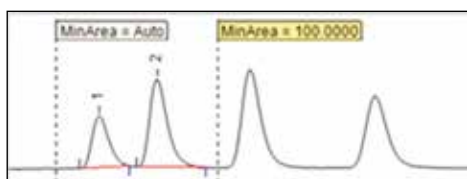


图 27. 最小峰面积

### 最小峰高

“最小峰高”检测参数被用来确定最小高度阈值，峰高低于此值的色谱峰均则会被忽略。每个色谱峰的峰高是相对于其各自的基线进行测量的。对于驼峰而言，这意味着峰高测定是相对于切削基线进行的，因此未分离色谱峰的基线类型会强烈影响到峰高。可用设置有：

- 自动：如选择自动（默认），则会计算检测限，如第 7.1 部分中所述。
- 0 - 1E+12：以 <信号单位>（如 mAU）的形式设置一个绝对阈值

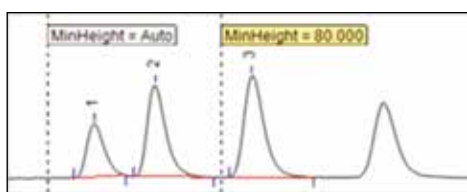


图 28. 最小峰高

### 最小相对面积

如色谱峰面积低于特定阈值会被拒绝。在一次通过基础上测量色谱峰，与色谱图内所有色谱峰的总值（总面积）相对。在待测物浓度可发生变化，且主要待测物色谱峰面积会降至绝对最小面积阈值（用于拒绝较小、不想要的色谱峰）之下的序列中，该参数很有用。

使用“最小相对面积”参数后，降至指定最小面积值之下的相关峰仍将进行检测和求积分，因为它们比当前色谱图总面积的最小相对面积阈值大。可用设置有：

- 关闭：检测所有色谱峰（默认）。
- 0 - 100：以百分比为单位（%）

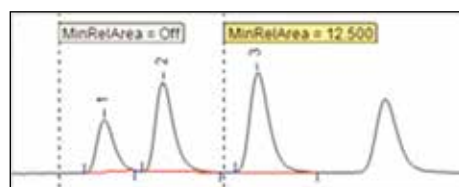


图 29. 最小相对面积

### 最小相对高度

如色谱峰的最小相对高度低于特定的阈值会被拒绝积分。最小高度是相对于色谱图中最高峰进行测定的，而高度是依照最小峰高进行测定的。该参数可按与最小相对面积相似的方式使用。可用设置有：

- 关闭：检测所有色谱峰（默认）。
- 0 - 100 百分比（%）

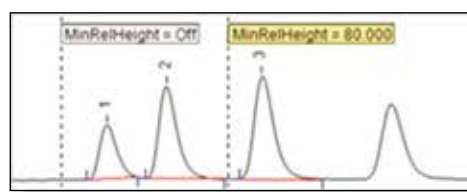


图 30. 最小相对峰高

### 最小信噪比

该参数可设置计算检测限所需的信噪比，因此可在“最小面积”和“最小峰高”参数中使用。检测限是最小信号高度，也就是刚能够与零点区分的信号高度。信噪比越低，则检测限越低，从而识别的色谱峰就越多。如“最小峰面积”或“最小峰高”=自动，该参数会自动生效。可用设置有：

- 1 - 100：（默认值 = 2）

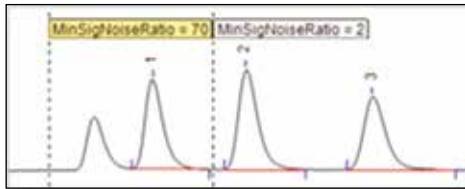


图 31. 最小信噪比

### 最大峰宽

“最大峰宽”检测参数定义若干分钟内的最大峰宽，任何峰宽大于该参数的色谱峰将在峰检测期间被忽略。峰宽是按基线测量的。对于未达到基线的色谱峰，峰宽是推算值。可用设置有：

- 关闭：考虑所有色谱峰（默认）。
- 0 - 1000：若干分钟内的最大峰宽值。

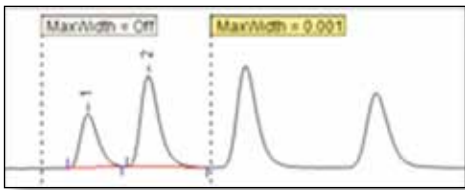


图 32. 最大峰宽

### 最小峰宽

“最小峰宽”检测参数定义了最小峰宽，在峰检测期间，任何峰宽低于此值的色谱峰都会被忽略。峰宽是按基线测量的。对于未达到基线的色谱峰，峰宽是推算值。可用设置有：

- 关闭：所有峰宽 > 0 分钟的色谱峰均被检测（默认）。
- 0 - 1000 分钟。

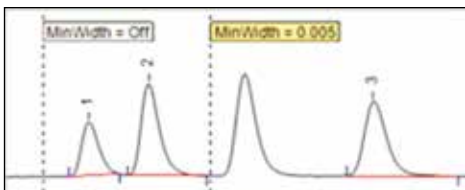


图 33. 最小相对峰宽

## 7.3 影响基线的参数

### 基线点

“基线点”检测参数被用来设置特定时间的基线点。如积分开始过早或色谱峰结束延迟，可能需要修改基线。这种情况下，可以通过插入一个合适的基线点来强制色谱峰起点推迟，或终点提前。可用设置有：

- 固定：在所选定的保留时间添加一个固定的基线点（默认）。

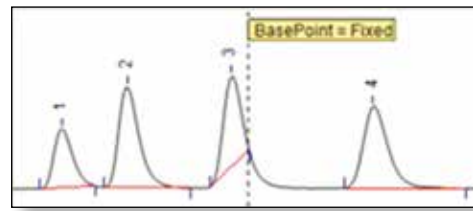


图 34. 基线点

### 基线类型

“基线类型”参数由“谷到谷”和“锁定基线”参数组成。可用设置有：

- 谷到谷：启用谷 - 谷的基线处理，即从一系列未分离峰的最低点到最低点，
- 垂直切割：（默认）对于未分离峰而言，基线是从峰组起始点画到终点，且未提升至相对最小值（谷点）。基线将第一个未分离峰的起始点连接至最后一个未分离峰的终点。如其中有一个峰谷位于基线以下，则将基线连接至最小值，以避免峰的底部被切割。
- 以当前水平锁定：把基线固定在当前信号水平，且向右水平外推（图 35A）。
- 以整体最小值锁定：Chromeleon 向右搜索色谱图中的最小绝对信号值。该搜索既可向色谱图尾部也可向下一个基线点推进（见前述参数），基线水平锁定在已发现的最低水平上（图 35B）。

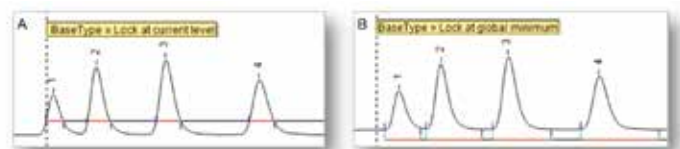


图 35. 基线类型。A) 以当前水平锁定，B) 以全局最小值锁定

### 最小基线框宽度

整个色谱峰检测过程中的一个关键部分就是确定色谱图的哪些部分为基线（例如色谱峰外侧）。为了达成这一目的，采用了一独立于主要色谱峰检测算法的附加算法来识别色谱图的哪些部分为基线。该附加算法计算色谱图的二阶导数上的阈值，以选择绝对弧度较小的区域。为避免误测，只有宽度大于“最小基线框宽度”参数所设阈值的区域才会被使用。将参数设为关闭，会关闭基线线段的独立于色谱峰的检测。如图 36 所示，以这种方式检测的基线起止点和终点被用来构建每个色谱峰下的基线线段。可用设置有：

- 关闭（默认）。
- 0 - 1000 分钟。

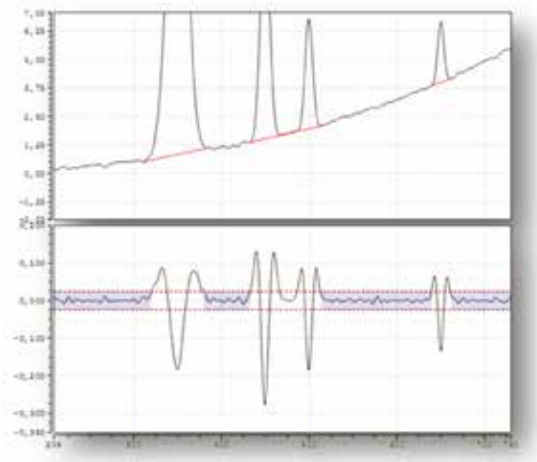


图 36. 基线片段的检测（蓝色区域 - 二阶导数）以及通过线性片段（红色实线 - 色谱图）填充的空隙

### 基线对齐

设置为开启状态时，当临近的色谱峰不积分，自动“拉升”基线，以连接所选色谱峰的起始点和终点。从图 37A 上可以看出，第一个峰未积分，第二个峰的基线被连接（或对齐）至峰起始点。参数设为关闭时（图 37B），原始基线得到保持。可用设置有：

- 开启：基线对齐至峰起始点（默认）。
- 关闭：基线维持在原始水平。

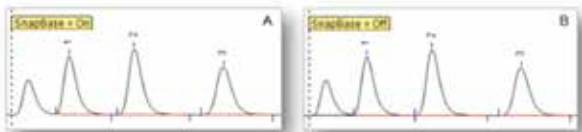


图 37. 基线对齐，A) 开启，B) 关闭

### 7.4 定义峰起始点和峰终点的参数

#### 组峰起始点 / 组峰终点

“组峰起始点和组峰终点”检测参数用于把若干连续色谱峰识别为一个组峰。随后把该组峰当做一个色谱峰来处理。在组峰中，任何其他检测参数均不适用，比如用于检测驼峰的参数。最大色谱峰的最大峰值成为整个组峰的最大峰值。Chromeleon CDS 在色谱图和成分表中仅显示一个名称和数量。检测结果，如面积值和峰高，均是为整个组峰计算。“组峰启动”参数标记了一个组峰的开始，“组峰结束”参数标记了该组峰的开始。可用设置有：

- 自动：组峰基线从首峰的峰起始点画至尾峰的峰结束点（图 38A）。色谱峰定界符和基线水平由色谱峰检测算法确定。
- 固定：基线从组峰起始点的保留时间信号值画至组峰终点的保留时间信号值（图 38B）。

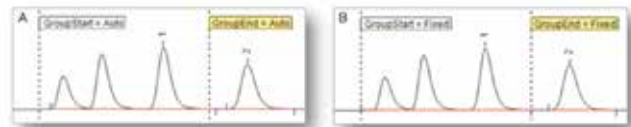


图 38. 峰组起始点 / 终点。A) 自动，B) 固定

#### 前伸 / 拖尾灵敏度因子

前伸灵敏度因子和拖尾灵敏度因子分别是为峰起始点和峰终点设置的信任阈值。如色谱峰起始点设置过早或峰终点设置过晚（通常可在色谱峰有显著前伸或拖尾时看到），设置这些参数可以修改检测峰起始点及 / 或峰终点的灵敏度。前伸 / 拖尾灵敏度因子的值越大，峰起始点 / 峰终点离色谱峰最大值也就越近。可用设置有：

- 关闭：自动检测峰起始点和峰终点（默认）。
- 1 - 100：寻找最佳前伸 / 拖尾灵敏度因子时，通常把相应起始点设为 1。

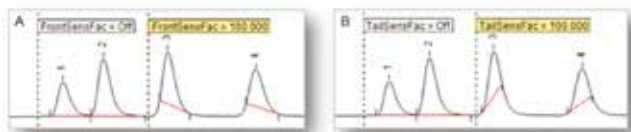


图 39. A) 前伸灵敏度因子，B) 拖尾灵敏度因子

## 7.5 影响驼峰和肩峰检测的参数

### 最大驼峰比率

如在一系列未分离峰中，有一个或多个色谱峰（h1 到 h4，图 40）高于“最小驼峰比率”（见下文），则使用“最大驼峰比率”检测参数来确定一个色谱峰应划分为主峰还是驼峰。待划分色谱峰高度（如 h2）将与该系列中最高色谱峰的高度（即图 40 中的 b）进行对比。如该比率产生的值比最大肩峰比大，则该色谱峰为主峰。如该比率产生的值比最大肩峰比小，则该色谱峰为驼峰。从系列中最大的色谱峰开始，所有临近色谱峰都可以进行分类。可用设置有：

- 百分之 0 - 100（%）（默认值 =20）

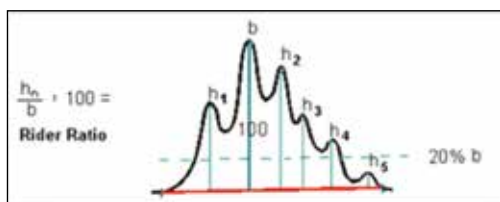


图 40. 最大驼峰比率

### 最小驼峰比率

单个色谱峰高度(图 41 中 h1 到 h5)与最大色谱峰高度(图 41 中的 b)之间的比率决定了一个色谱峰应划分为驼峰还是主峰。如高度比的结果低于定义的“最小驼峰比率”，则把该色谱峰定义为主峰。图 41 中，只有 h5 色谱峰为这种情况。如果高度比的结果比定义的最小比大，则计算“最大驼峰比率”参数，由此产生的值可用来将其余色谱峰分类为驼峰或主峰。

可用设置有：

- 百分之 0 - 100（%）。（默认值 =10）

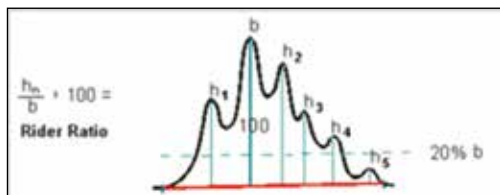


图 41. 最小驼峰比率

### 驼峰检测

该参数仅用于启用或禁用驼峰检测。可用设置有：

- 开启：与“最小 / 最大驼峰比率”参数匹配的所有驼峰均予以检测（默认）。
- 关闭：禁用驼峰检测，识别所有色谱峰为主峰。
- 仅前伸：只有色谱峰前伸边缘的驼峰被识别。
- 仅拖尾：只有色谱峰拖尾边缘的驼峰被识别。

### 驼峰切削

“驼峰切削”参数可确定如何切削驼峰。可用设置有：

- 在色谱峰低端正切：取决于色谱峰是上升还是下降，色谱峰起始点或终点的定义是否能使驼峰切削与色谱图正切。
- 在色谱峰的两端正切：确定色谱峰起始点和终点以让驼峰切削与色谱图两端正切。
- 指数：通过一个指数函数得出近似色谱图。大多数情况下，指数可非常精确地描绘出曲线的实际轨迹，而驼峰通常会获得一个更为真实的面积。

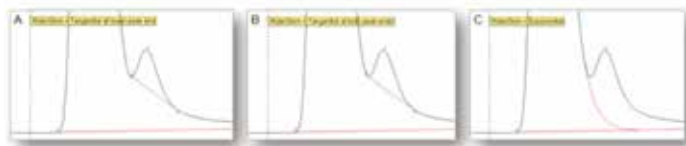


图 42. A) 在较低峰结束处进行切线切削，B) 在两个峰共同结束处切线切削，C) 指数切削

## 添加和编辑 Cobra 检测参数

Cobra 检测参数用来确定色谱图如何进行积分，例如，在哪些区域色谱峰要被禁止积分，或如何检测色谱峰起始点和终点。因此，可以根据分析人员要求来调整积分，从而在实际上消除对单个色谱图进行手动积分的需要。

Chromeleon CDS 会根据处理方法中规定的 Cobra 检测参数自动确定色谱峰面积并求其积分。但在处理方法中添加或编辑参数会给色谱分析人员带来一些挑战：

- 如何确保参数是在正确的保留时间时添加（如两个色谱峰之间）？
- 如何查看添加或改变参数对色谱图的影响？
- 如何快速轻松地确定参数的敏感值？

Chromeleon 提供了一个简单、直观的界面，以协助分析人员直接在色谱图上添加和编辑检测参数。这确保了能以最小工作量和最少延迟来实现参数的添加、定位和编辑。

## 8.1 添加检测参数

检测参数可以通过与色谱图的直接图形交互来添加。这显著促进了定义检测参数的流程。

为了直接在色谱图上添加检测参数，分析人员只需要选择“处理”工具栏中的“检测参数”组中的“插入”选项（图 43A）。然后就可可在下拉菜单中直接找到最常用的参数（图 43B）。分析人员选择要插入的参数后，鼠标指针会变为如下外观：

分析人员随后将鼠标指针准确移动到需要使用该参数的位置，点击色谱图（图 43C）。定义的参数直接加入到处理方法中，同时在色谱图上的所选保留时间处显示一个旗标。动态数据链接可确保将该新参数会依次迅速应用到所有色谱图中。

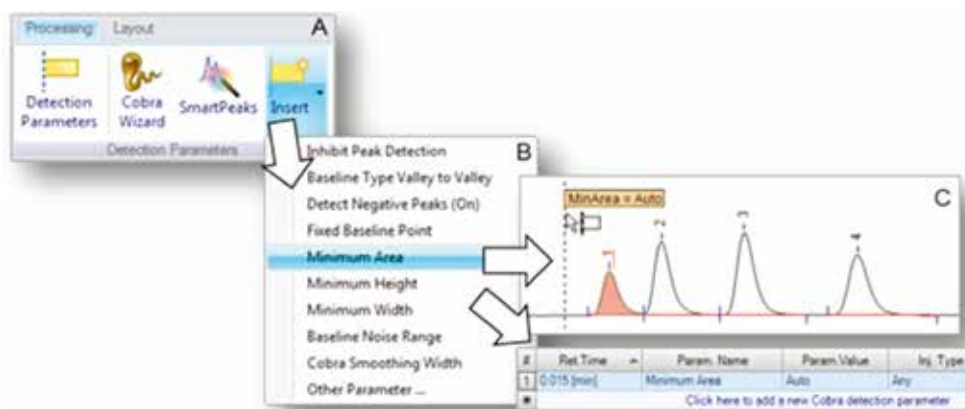


图 43. A) 在处理方法工具栏上插入选项，B) 参数列表，C) 点击以插入

作为在色谱图中直接添加检测参数的备选方法，分析人员可仅将鼠标指针移到要插入参数的位置，然后点击鼠标右键。

随后出现一个弹出菜单，该菜单提供了插入检测参数的选项（图 44A）。选择该选项后，分析人员可立即访问所有可用检测参数，并能规定要求的设置（图 44B）。定义参数再次直接加入处理方法，同时在色谱图上的所选保留时间处显示一个旗标（图 44C）。

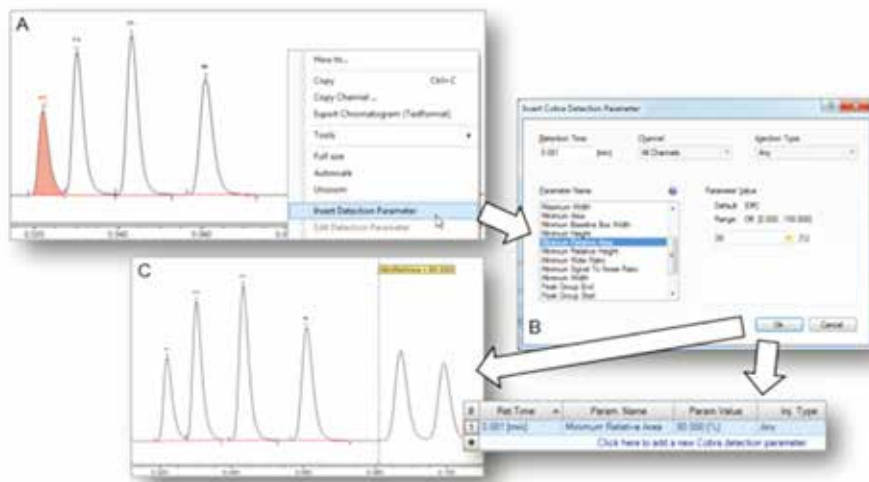


图 44. A) 右键插入一个检测参数, B) 定义参数, C) 参数应用

使用鼠标右键，拖出一个方框覆盖色谱图上的某个区域，就可以添加其他检测参数。例如，设置基线噪音范围时，拖出一个方框覆盖某个基线区域（图 45 A），并选择相关参数（图 45B）以便添加参数（图 45 C），就是这么简单。

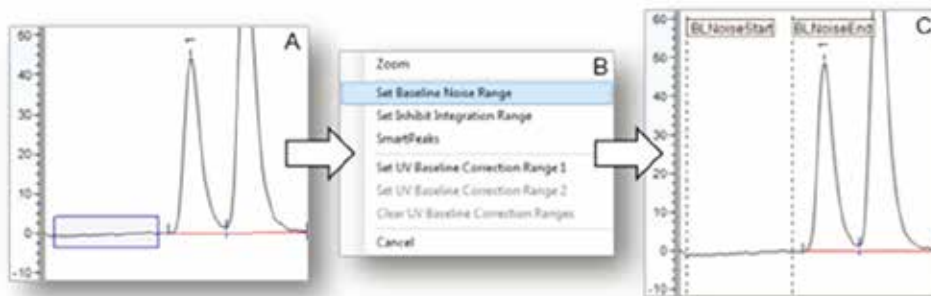


图 45. A) 选择区间, B) 选择参数, C) 参数已被插入

如果添加参数后发现结果不理想，可以使用快速访问工具条上的取消按钮轻松移除设置。



这允许

操作人员按顺序逐项取消所做的全部改变。

## 8.2. 编辑检测参数

现有检测参数的编辑可以直接在色谱图上完成，换言之，可以在色谱图上修改参数值或把一个参数移到不同位置。

### 编辑参数值

分析人员只需双击所需检测参数上的标记（图 46A 和 B）即可编辑现有参数。当标记中的参数值改变后，Chromeleon CDS 会立即更新色谱图视图，以显现更改值可能导致的影响（图 46C），而无需使用者发出改变命令，这使分析人员能快速找到正确的值，以实现要求的积分，同时避免增加不必要的处理方法版本。点击“Esc（退出）”键，将放弃任何更改，同时，分析人员只需点击“Enter（输入）”或点击标记以外的地方就可赋予新值（图 46D）。

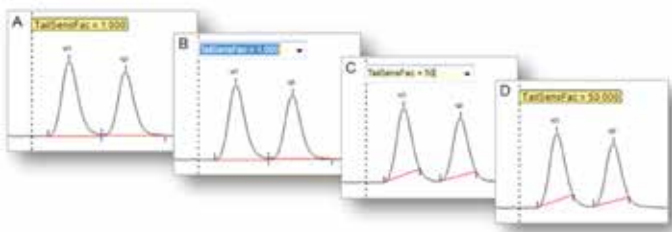


图 46. A) 检测参数标记, B) 双击进行编辑, C) 在提交之前实时更新, D) 新的数值被提交

对于某些参数，可以通过点击标记的箭头查看其固定选项（见图 46B），并从下拉列表中选择一个参数值（图 47）。

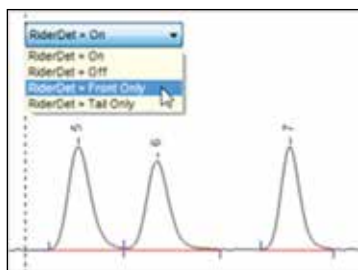


图 47. 在积分标记中的下拉选项

### 编辑参数位置

要改变特定参数的对应的保留时间，只需把鼠标移动到标记的虚线上，鼠标指针会变为如下外观：

然后只需点击并拖拽参数到新的保留时间处（图 48）。Chromeleon 会在处理方法中更新保留时间，并立即显示改变后的色谱图。

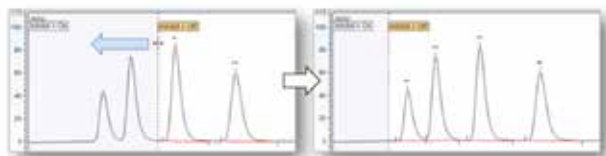


图 48. 移动一个单独的参数

如在同一保留时间处有多个参数，可以移动全部或是单个参数。需同时移动全部参数时，可使用上述步骤选择虚线，然后拖拽至所需要的保留时间处（图 49）。

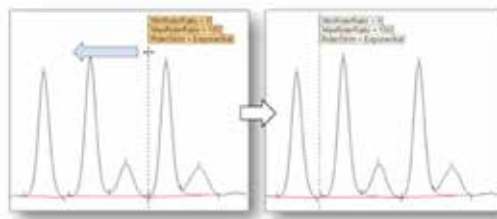


图 49. 移动一组参数

若只需从该组中移动一个标记，把鼠标移到所需标记上，直至其变色，然后只需点击并拖拽，即可重新定位该参数（图 50）。

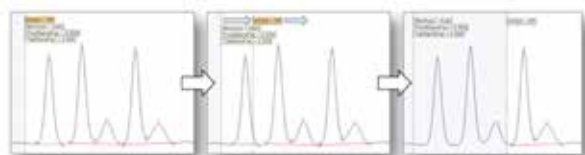


图 50. 从一组参数中移动一个参数

## 9 总结

Chromeleon CDS 强大且智能化的色谱峰检测与积分功能可以应对色谱峰检测过程中的常见困难：

- Cobra 算法能成功从噪音中区分出色谱峰，并正确识别基线。
- Cobra 向导可引导操作人员正确指定初始色谱峰检测参数。
- SmartPeaks 积分助手可协助并引导色谱分析人员正确处理驼峰和其它未分离峰。
- 使用简单的色谱图内嵌式编辑工具，任何色谱分析人员都可以轻松、直观、迅速插入新参数，并修改现有参数。

所有这些积分任务均可在无需色谱分析人员打开处理方法（尽管参数已加入处理方法）的情况下完成，从而可在一系列色谱图中保持正确的色谱峰和基线检测，将不同操作者和手动积分操作带来的差异降至最低。

使用 Chromeleon CDS，实验室能够显著提高整体效率和生产力。





## 交互图表：理解色谱数据的强有力的新工具

Jay Lorch 和 Ryo Komatsuzaki;  
Thermo Fisher Scientific, Sunnyvale, CA, USA

### 摘要

多数实验室都面临着不断提高生产率的压力，所谓生产率，可定义为每单位时间内可交付的结果。方法的改进、仪器的进步和自动化水平的提高已大大减少了分析时间，通常会使得每日生成的数据量更大。这就迫切需要有一种快速高效的数据管理工具来帮助分析人员处理数据，从而跟上这一海量数据的产生速度。

现代色谱数据系统中提供的一种新的交互式绘图功能有助于结果的快速可视化筛选，使分析人员快速了解变化趋势和模式概况，发现异常结果或其它感兴趣的特定项。一键式切换到不同的图表类型或源数据，结合瞬时重绘，可对大量数据进行快速扫描。这些绘图值和它们的源数据之间的动态链接能够提供一种互动体验，在这里分析人员可以立即访问这些数据点背后的具体细节内容，选择不同的数据集进行绘图，并了解所选数据不同方面的相互关系。

与传统工具相比，此解决方案在查看数据方面具有更多优势，如可列表显示结果或在外部生成图表。下面列举了用于数据管理和色谱故障排除的交互式制图的各种应用实例。



### 成功应对海量数据

相比几年前，现今大多数色谱分析工作者都需要处理更多数据。对更高生产率和更高结果可信度的需求，加上更快速的仪器分析法的使用，已大大提高了平均每日的数据量，使得数据管理比以往更具挑战性。为跟上这一发展趋势，色谱分析工作者需要采用新的工具对更大的数据集进行更快速的分析。由于不再有足够的时间来审视每一张色谱图，分析人员需要采用有效方法来查看大图，从更大的数据集中发现重要项目，并快速分析需仔细检查的特定项目。

应对挑战的一种自然而有效的方法就是使用图表来显示数据。图形化能够以紧凑的布局显示大量数据，它们能利用人脑的快速视觉处理系统（这比需要解释文本和数字的语言处理方式要快得多）快速传达信息。图形也便于比较，且更易检测到异常结果。

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 色谱数据系统中的缩略图 † MiniPlot 特性（图 1）就是基于这些原则的一个例子。通过在列表中对每个进样相应的色谱图展示一份详细的微型缩略图，此软件可使用户快速扫描数十次进样，并立即发现与其它进样不同的任何偏离（不同的峰个数、不同峰大小、倾斜的背景噪音等）。缩略图使分析人员抽查原始数据的速度比以前只能逐个访问色谱图的速度加快了很多倍。

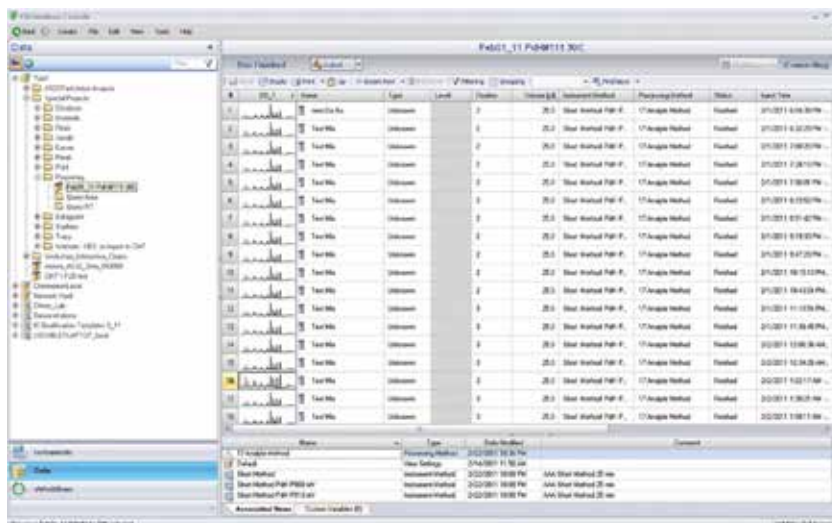


图 1. 缩略图提供每个进样序列中的每一次进样或查询结果所对应的原始数据的即时可视化汇总，可快速调查和比较大量的色谱图，甚至可轻易发现细微差异（注意 16 号进样）。缩略图可在两个维度上重新设置大小范围，以便于显示复杂色谱图中的更多细节，或将更多缩略图纳入可视区域。可双击相应的缩略图立即查看任何感兴趣的色谱图，色谱图将在一个较大的色谱数据处理区（Chromatography Studio）窗口显示以便进行仔细检查。

对于结果数据，Chromeleon 7.1 色谱数据处理区具有丰富的交互式图表功能集合（见图 2）。图表可以使用任何可报告的参数作为独立或非独立的变量，并可通过单次进样或一系列进样展示这些参数。支持基于鼠标控制的缩放使细节的检查更加快速简便，有多种不同的图表类型可供选择，包括折线图、柱状图、饼状图、散点图、面积图、气泡图以及更多图表类型；多个交互图可被配置在一个工作簿中，随后可通过在工作簿上单击相应的标签页进行访问。

图表也可包含在报告中（如图 6）。这些结果图虽然没有互动选项和缩放功能，但它们能提供与交互图完全相同的格式功能，并也可在数据改变时动态更新。

包含在交互图和结果图中的可报告参数是：

- 数百种常见的色谱变量（如含量、面积、峰高、保留时间、峰宽、保留因子）
- 仪器参数（如背景信号、压力、温度）和其它记录在审计追踪中的数据
- 任意数量的用户自定义变量（对应于序列、进样或组份）

基本数学公式适用于以上任何参数，以提供更多的灵活性（图 3）

这种广泛的灵活性使得色谱软件能直接满足大多数与色谱图相关的图表制作需求。

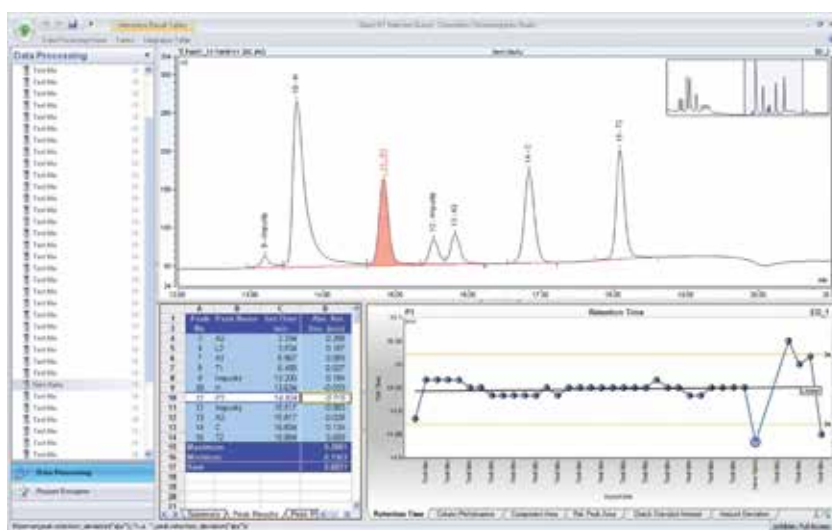


图 2. 在 Chromeleon 7.1 色谱数据处理区中，交互图（右下）可立即绘制出从单次进样或一系列进样中选出的一个或多个变量的结果。在处理区中，每个图都动态链接到其它窗口：当在一个窗格中选择一个项目时，所有链接的窗格会立即更新，并显示相关选择的数据。因此，在图表中选择一个数据点后，对应的进样会高亮显示，并显示相关色谱峰的对应该色谱图，在互动结果表中高亮显示相应结果等等。同样地，选择一个不同的进样，一个不同的色谱峰或一个不同的结果都会立即显示更新后的交互图。

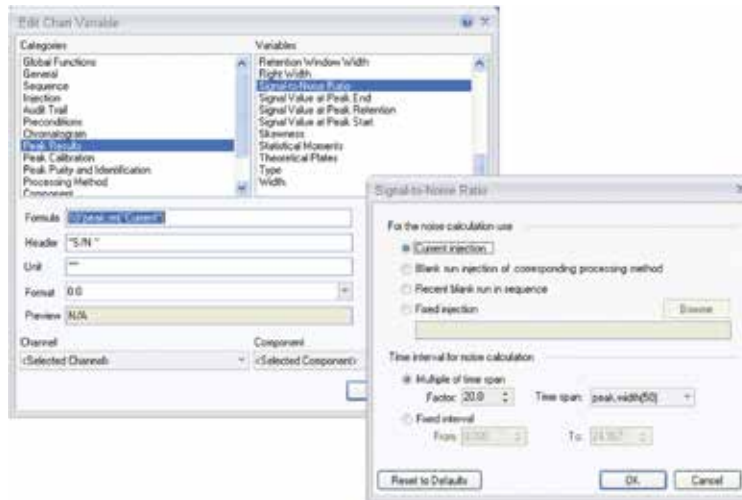


图 3. 可用图表显示的参数包括由 Chromeleon 色谱数据系统软件自动计算的数百个的常见色谱变量。这些变量中许多都可以使用内置选项定制（如此处所示的信噪比）。许多仪器参数可通过从审计追踪类别中选择数值来实现图表化。可通过创建与各序列、进样或组分相对应的用户自定义变量提供更多的灵活性。任何这些变量均可使用简单的数学公式进一步自定义（注意公式字段中的 10<sup>\*</sup>）。

### 集成图表相对于外部创建图表的优势

使用图表表达和解释色谱数据当然不是全新的想法；因为科学家多年来早已采用商业成品软件对来自色谱数据

系统的结果进行分析。其创新之处在于将制图功能完整无缝地集成到色谱软件中。这比采用外部程序创建的图表具有更多优势：

集成的图表	外部创建的图表
无需额外软件	必须购买、学习和维护额外软件
统一的单一集成用户界面	用于制图表的第二用户界面，带有一些与目的无关的附加功能
一键制图表	需要输出 / 输入步骤，会花费更多时间并产生出错的风险
瞬时动态更新	更新时需要重新导出和重新导入数据
图表总是与源数据一致	结果可以改变而图表不会反映更新
即时钻研源数据和元数据。	定位源数据和元数据是一个繁琐的手动过程，且无法保证成功

外部绘图软件可能具备集成图表不具备的其它功能，如宏 / 脚本功能以及合并色谱数据系统之外其它来源数据的工具。然而，对一个大比例的色谱图表应用而言，集成图表可提供所有需要的功能，相对于外部创建的图表来说，它们的优势是令人信服的。

### 交互图表应用示例

#### 趋势图和控制图

图 2 显示了一个典型的趋势图的例子，此例中显示了穿插了水空白样品的一系列混合标准品进样的色谱峰保留

时间与进样名称。图中水平线定义了平均值附近  $\pm 2$  标准差单位 ( $2\sigma$ ) 的一组区间，以便于发现异常值。统计覆盖选项包括平均值、线性趋势线、 $1\sigma$ 、 $2\sigma$  和  $3\sigma$ 。

可通过定义每个绘图变量的目标值、上限和下限来创建控制图（图 4）。这些值可使用静态值或使用包含 Chromeleon 色谱数据系统软件扩展选项中的任何变量的公式来定义。处于可接受范围外的结果能被轻易识别，并只需点击离散的结果即可马上对其进行调查。

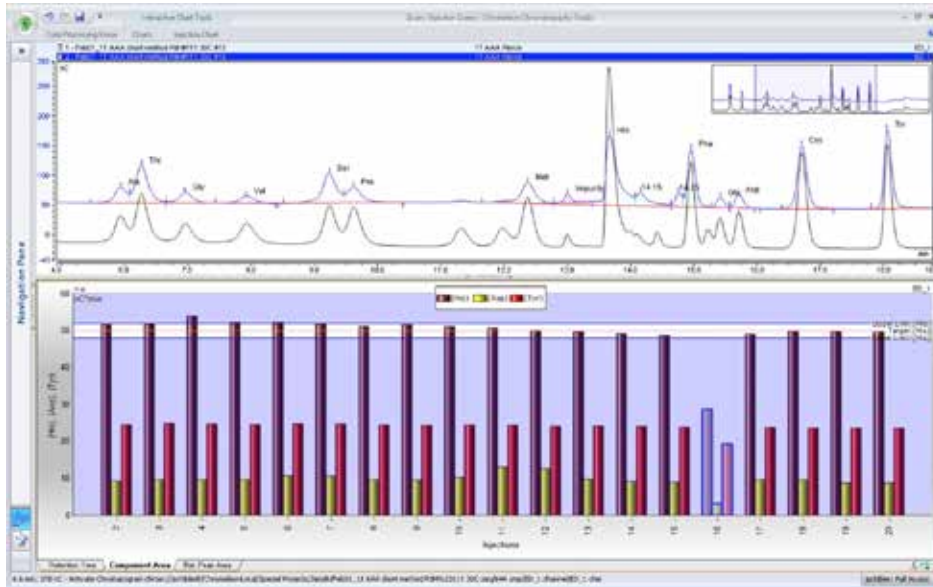


图 4. 控制图中的任何色谱变化都能被监测。每个组分的目标值、上限和下限均可以采用静态值或任何采用色谱变量的公式（例如不同组分的结果比例）进行单独设置。此例中，为了测试实验电极，使用柱状图监测一系列标准溶液进样中三种所感兴趣的化合物色谱峰面积。图中清楚地显示了 16 号进样中所有三种化合物的低值（对应重叠区域中的蓝色色谱图），表明存在进样问题，例如有气泡。然而，该图还显示了 4 号进样中一个细微的异常之处：H 峰面积超过其上限，而 A2 和 T2 峰面积接近它们的平均值。

### 色谱柱性能图表

Chromeleon 7.1 色谱数据系统软件中提供了若干预置图表，色谱柱性能图表是其中之一，该图标出了色谱图中所有

色谱峰的效能、不对称性和分离度。这些分离效率的常规测定可以用于快速评估此色谱柱的性能如何，并可用于诊断诸如固定相填充不良等常见问题（图 5）。

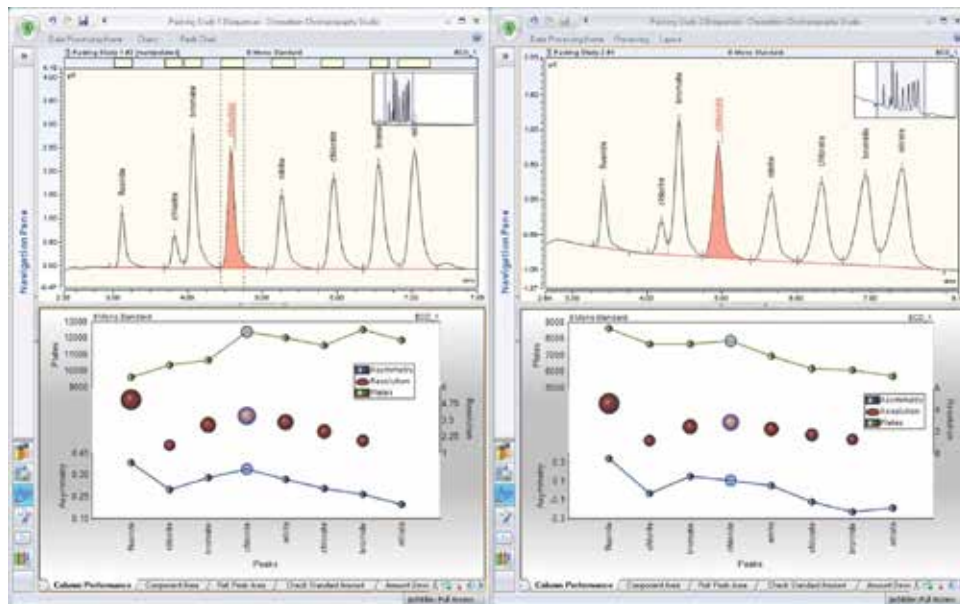


图 5. 左侧的色谱柱性能图显示的是离子交换色谱分离单价离子的典型模式。对于洗脱的第一种化合物，受柱外死体积的影响，峰值效率（塔板数）最低，然后，后继化合物的柱效增加，而且形成了一个稳定的平台。右侧图中，随着保留时间的增加，分析物的效率降低，这表明色谱柱柱床填充存在问题或流动相传质非常缓慢。

### 组分比例分析

在许多应用中，掌握样品组分的比例比知道它们的绝对浓度更重要。例如，在食品工业中，多糖、有机酸或其

它成分之间的比例通常用于区分正宗原料和廉价替代品。饼状图（图 6）对一目了然地显示样品组分的相对比例非常有用，有助于食品化学家快速发现掺假成分。

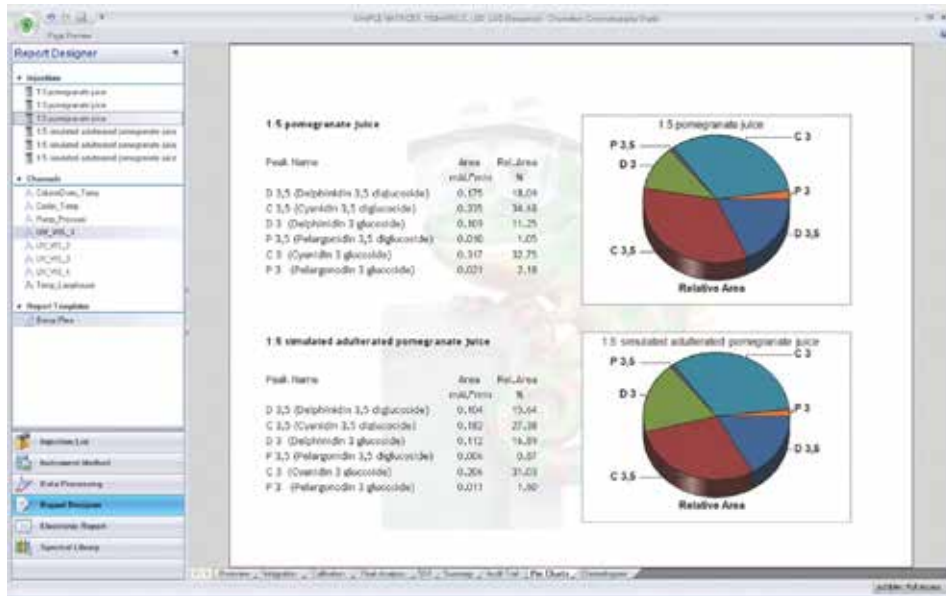


图 6. 报告模板中可以放置任何数量的结果图表，以便于进行比较。此例中，饼状图提供果汁中主要的抗氧化剂比例的一个快速视觉图象。掺有葡萄汁的石榴汁（下）与纯石榴汁（上）相比显示出不同的花青素比例——注意绿色 D3 和红色 C3、5 部分的相对大小。

### 柱外体积估计

估计进样器和检测器之间的体积（这不包含在色谱柱柱体积范围之内）是交互图表功能的一种创造性使用方式。柱外体积过大会导致过度的峰展宽并干扰分离。这项评估技术需要在能够完全分离色谱峰的等度条件下，进样一系列同系化合物，同时保持低的保留因子  $k'$  值和小峰

洗脱体积。构建一个峰宽的平方与保留时间的平方的曲线，得到一个线性回归方程（图 8）。柱外体积可用公式  $V_{ec} = f \sqrt{y_0}$  来估计（其中  $f$  是流量， $y_0$  是图中  $y$  轴的截距），色谱柱柱效可由斜率的倒数估算。此技术存在诸多局限性，且依赖于许多假设，因此使用时必须慎重，但它可作为了解系统性能和色谱柱性能的一个有用的工具。

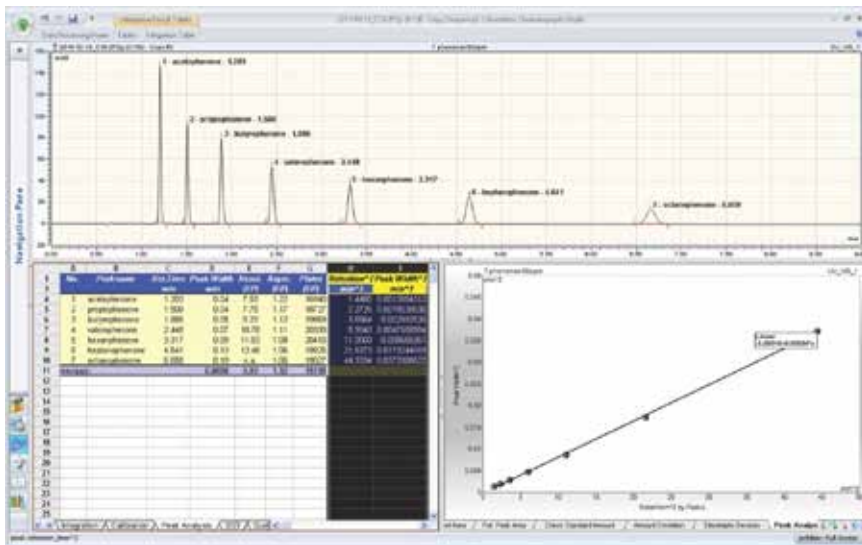


图 8. 可用一系列具有低的保留因子  $k'$  和相似柱效的同系物等度分离的色谱峰的峰宽平方与保留时间平方绘制出的曲线的截距来估算柱外死体积。此例中，这些平方值是在互动结果表中计算的（见黑色高亮显示区域），并在交互图中绘制二者的曲线图。线性回归叠加的图例给出了这些数据点拟合的斜率和截距。

## 结论

集成在 Chromeleon 7.1 色谱数据系统软件中的交互图表功能，为化学家们提供了能更有效地分析色谱数据的强有力的全新工具。结果即时成图便于分析人员观察趋势并发现异常结果。与色谱图、统计结果和其它相互关联的数据显示的动态交互式链接都可引发探索，并允许快速深入钻研数据。

利用交互图表，色谱分析人员可更加迅速地解释结果，并更好地应对他们需要管理的数据的不断增加。

## 致谢

作者非常感谢 Petr Jandik、Jun Cheng、Chris Pohl、Pranathi Perati、Bob Stathers 和 Mark Tracy 为文中例子提供的数据。



## 通过 Chromeleon 变色龙色谱数据系统 (CDS) 软件实现第三方仪器控制

### 概要

在过去几十年里，色谱仪器和分离技术已成为多数实验室的主流技术。气相色谱（GC）和高效液相色谱（HPLC）是主要的技术。在过去三十年间，色谱数据系统（CDS）获得了显著发展，现在所有这些色谱仪器都可以使用色谱数据系统操作来实现仪器控制和数据处理。赛默飞世尔科技 Dionex™ Chromeleon™ 变色龙色谱数据系统（CDS）软件是实现第三方仪器控制的先驱，并一直稳居多厂商控制市场领先者地位，提供操作简易性™。

### 关键词

色谱数据系统, Chromeleon, CDS, 变色龙, 多厂商, 仪器控制, GC-MS, LC-MS, LC, IC, GC, 驱动开发程序包 (DDK)



### 色谱数据系统的仪器控制

利用色谱数据系统实现仪器控制可追溯至 20 世纪 80 年代初期个人计算机（PC）的发展，当时引入了基于个人计算机的色谱数据系统。操作上与 20 世纪 70 年代开发的基于微处理器的积分器相似，但一次运行中所有进样的数据文件都可以进行重新处理。当时只有将模拟输出信号转换为能被 CDS 读取的数字信号（模数转换），才能进行读取从仪器上采集的数据。这种模数转换只能记录来自仪器的单一数据通道，根本不涉及仪器控制。

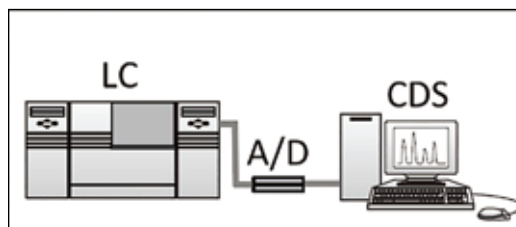


图 1. 早期色谱数据系统——数据收集无控制功能

随着高性能个人计算机的普及，除了已有的数据处理和报告工具，制造商可以在色谱数据系统中增加仪器控制功能。即便如此，在随后的十年里，CDS 仅能对与 CDS 同一制造商生产的仪器实现全数字控制，因此一家厂商通常既提供色谱数据系统又提供色谱仪器，并且多数情况下，一台电脑只能连接一台色谱仪。随着色谱数据系统的进一步发展，一台电脑可以控制多台仪器，但仍未打破与 CDS 相同制造商的单一来源的局限。这种安装形式可以描述为“工作站式 CDS”。

实验室购置的色谱仪通常来自于不同的厂家。若使用单一厂商工作站式 CDS，实验室则需要安装不同的 CDS，从而要在分析效率、数据处理、培训、验证以及法规方面面临与生俱来的各种复杂情况。减少 CDS 数量的唯一方法是采用模数转换产生能够被选定色谱数据系统读取并导出的数字信号，放弃伴随着超出范围或平头色谱峰、过量噪声以及完全缺乏可追溯性等基本性问题的仪器控制。

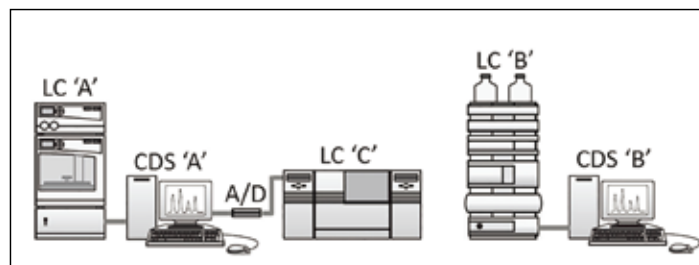


图 2. 不同色谱仪的工作站式色谱数据系统

20 世纪 90 年代，个人计算机结合改进的网络标准的发展使得色谱数据系统可以实现网络化。实现网络化之后，数据处理变得更加高效，仪器使用也得以优化。此外，还更容易满足法规要求，因为允许将数据处理操作从数据存储中物理分离，从而增强了已采集的数据的安全性。这些具有物理分离数据处理和存储功能的网络化色谱数据系统，通常被称之为“企业版”或“客户端/服务器”系统。

借助于使用具备可扩展性的企业版色谱数据系统，当采用一种方法时，从仪器采集的所有数据均为同一种格式，无论使用何种仪器生成的结果均以同一种报告形式呈现，大大提高了分析效率和实验室的生产力。

### 确立对多厂商仪器控制的需求

随着企业版色谱数据系统配置的增加，事实上存在的仪器与 CDS 厂商的关联开始被弱化。一些供应商开始着重开发 CDS 解决方案，另一些供应商则专注开发色谱仪。市场份额较小和 / 或无意开发自身 CDS 的色谱仪供应商开始寻求与无竞争关系、专做软件的 CDS 供应商合作，以实现其仪器在数据系统中的控制。反之，CDS 供应商意识到他们的产品对色谱实验室高效运作发挥着越来越重要的作用，对其他主要供应商仪器（第三方仪器）的控制就成为了一个非常诱人的市场机遇。因此利用 CDS 实现第三方仪器控制（多厂商控制）的需求出现了。

然而，起初，虽然中央数据管理和存储的优势超越了来自于第三方仪器的数据模数转换中的固有限制性，1997 年美国食品和药物管理局（FDA）颁布了针对电子记录和电子签名的指令（21 CFR Part 11），明确指定此类仪器控制（或缺乏仪器控制）不符合法规。

该指令确立了对 CDS 中第三方仪器控制的需求，而对自有和第三方仪器实现全数字控制的需求变得越来越迫切。对符合 21 CFR Part 11，具备全数字仪器控制功能的数据系统的市场需求还引发了市场中的快速兼并，从而使市场中仅剩下了三家具有较大市场占有率（> 10% 的安装量和年度许可证销售）的全球性 CDS 供应商。鉴于市场占有率大于 5% 的色谱仪器供应商远远多于企业版 CDS 供应商，第三方仪器控制的必要性愈发显而易见。

1993 年，世界上第一款市售色谱数据系统 Gynkrosoft 面世，如今以 Chromeleon 变色龙 CDS 品牌进行销售。Gynkrosoft 是首个来自于全球领先第三方供应商提供全数字化仪器控制的 CDS 方案。

直到 20 世纪 90 年代晚期，具有大量第三方仪器控制的 CDS 仍极为罕见。在此期间，CDS 通常可以控制其自身制造商的仪器，能够建立方法和分析运行信息，采集、处理、报告和保存数据，甚至可以传输至其他实验室系统，如实验室信息管理系统（LIMS）。而这时的 Chromeleon 变色龙 CDS 已经可以支持 60 多款第三方仪器，且有更多的仪器正在等待添加。

随着数字化第三方仪器控制的可行性得以证实，市场对具备多厂家仪器控制功能的 CDS 的兴趣越发浓厚。Chromeleon 变色龙 CDS 确立了自己在多厂家仪器控制上的市场领袖地位，其能够控制 540 多个自有和来自 25 家厂商的第三方模块，使得如今多厂家仪器控制成为了任何 CDS 的必备标准功能。

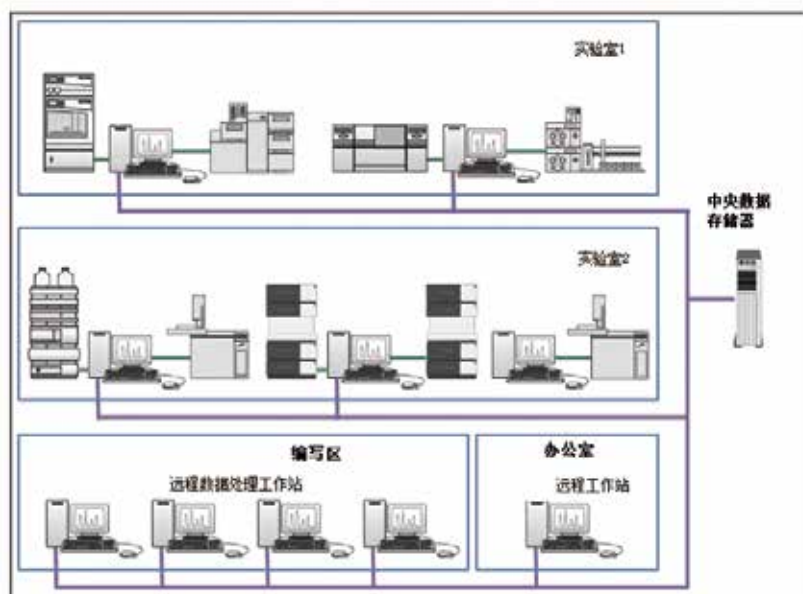


图 3. 具有多厂商仪器控制功能的客户端 / 服务器系统或企业版 CDS

### 从早期试用到主流市场：战胜挑战

当实验室很快接受了具有第三方仪器控制功能的 CDS，在第三方控制功能完全成熟，真正被广泛接受之前，还需要战胜一些挑战。

要应对的第一个挑战是最初的第三方控制是 CDS 公司根据有限的信息开发的，主要关注的是涉及控制第三方仪器的一般命令。程序员无需深入了解仪器的常规操作，即可编写仪器的驱动程序。而对于 Chromeleon 变色龙 CDS，初期的第三方仪器控制功能的开发过程都是通过对仪器的控制协议进行分析，再使用 Chromeleon 变色龙 CDS 兼容的控制语言编写仪器控制“驱动程序”，即“原生驱动程序”来完成的。

即使双方之间建立了合作，在 CDS 供应商编写仪器控制和第三方提供控制代码之间的沟通往往是漫长而枯燥的。这是因为大多数 CDS 供应商作为仪器供应商也是直接的竞争对手。此外，同一个 CDS 供应商既为其自身仪器也为竞争对手的第三方仪器开发驱动程序，会导致优先次序冲突以及推迟提供用于第三方仪器控制的代码。

第二个挑战是仪器配置日益复杂，数量也不断增加。一款新仪器的面市，推出了新技术和新功能，便出现了控制新仪器和新功能的市场需求，这增加了第三方仪器控制编程的复杂程度和工作量。

20 世纪中期，超高效液相色谱仪（UHPLC）作为传统 HPLC 的延伸而出现，使得对仪器控制的需求变得更加复杂。有更多功能要加入仪器控制驱动程序，如从传统液相色谱到 UHPLC 的方法转换。重新创建这种复杂的功能既费时又费资源，导致第三方硬件厂商仪器发布和在 CDS 中实现仪器控制之间存在明显的滞后。与此同时，需要控制的第三方仪器的数量也大幅增长——一些大型厂商投入使用的模块超过一百个（HPLC 和 UHPLC）。

### 第三方仪器“打印机驱动程序”理念——从原生仪器驱动程序到插件式仪器驱动程序

在应对这些挑战的过程中，引发了第三方仪器控制理念的转变。主要的仪器供应商开始探索为仪器配置菜单式驱动程序，以便快速方便地插入第三方 CDS。用于色谱仪器控制的“打印机驱动程序”理念可提供直接来自仪器供应商的仪器控制驱动程序，并以可实现与第三方 CDS 轻松整合的方式来交付。

这使得开发过程变得更加高效，从而带来了明显收益——现在（仪器制造商）只需为所有 CDS 编写一个驱动程序，而不用让每家 CDS 公司为同一款第三方仪器各编写一个驱动程序，从而加快了第三方数据系统对新仪器的控制。为使这种方法奏效，需要仪器供应商开发并维护驱动程序架构，该架构不仅可提供实际仪器控制，还可做为标准化框架，以提供可在第三方数据系统上使用的插件和必要改进。

但是，不是所有的仪器供应商都能够或愿意提供这种基础框架。规模较小或注重硬件的供应商通常需要一种简单的方式，利用第三方 CDS 实现仪器的数字化控制。

### Chromeleon 变色龙 CDS 提供了第三方驱动程序的终极解决方案

Chromeleon 变色龙 CDS 为第三方仪器控制提供了终极解决方案，通过同时采用“打印机驱动程序”插件式理念和驱动程序开发包（DDK）的方式，满足了规模较小或注重硬件的制造商的需求。

Chromeleon 变色龙 CDS 内部整合了由主要仪器制造商，包括安捷伦仪器控制框架（ICF）和沃特世仪器控制软件（ICS）等提供的打包驱动插件解决方案。这确保了发布到插件的所有仪器和功能的快速、全面支持。

Chromeleon 变色龙色谱数据系统驱动程序开发包为驱动程序开发人员和仪器厂家提供了执行仪器驱动程序、配置的直接方法，并为 Chromeleon 变色龙 CDS 提供了编辑器插件。赛默飞提供的所有新驱动程序均使用了驱动程序开发包。驱动程序开发包是针对跨版本兼容而设计的——编写一个驱动程序后，其通常可在所有更新版本的 Chromeleon 变色龙 CDS 上使用，而无需进行进一步开发。程序中要加入的“必备”代码很少，因此可快速、方便地学会如何执行仪器驱动程序——创建基础驱动程序框架仅需几个小时，而创建原生驱动程序通常需要花费几天或几周。这大大缩短了驱动程序的开发周期。

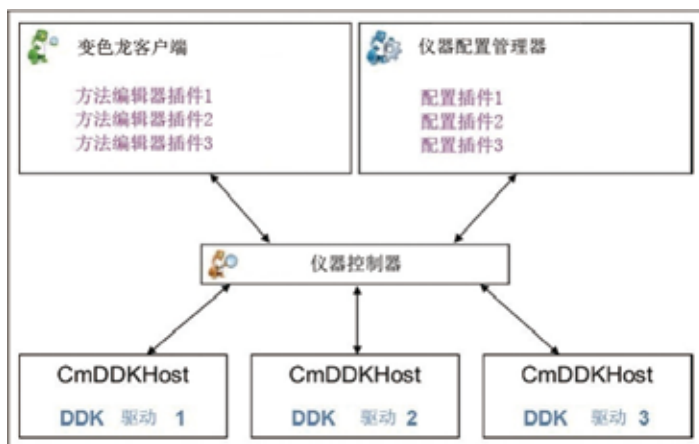


图 4. Chromeleon 变色龙驱动开发程序包插件简化驱动程序的开发

驱动程序的质量是通过验证和确认过程而得到确保的。新的驱动程序必须满足验证过程的要求，并通过一系列确认测试，才能纳入 Chromeleon 变色龙 CDS。

Chromeleon 变色龙 CDS 驱动程序开发包依靠一套完整文件（包括驱动程序“烹饪手册”，包含代码示例和验证过程）和程序员培训课程支持，并支持第三方公司直接开发 Chromeleon 变色龙可兼容的驱动程序。对于不想自己开发驱动程序的供应商，可通过经认证的 Chromeleon 变色龙 DDK 开发合作伙伴，快速开发 Chromeleon 变色龙 CDS DDK 驱动程序。

#### 成功的第三方仪器控制还需要什么？

为确保驱动程序的及时发行和高品质，尤其是针对新仪器，仪器厂商和 CDS 厂商务必要组织定期会议，分享技术知识、规划下一版本的蓝图，商讨并解决技术问题。这需要双方共同努力，定期维护并改进已打包的驱动程序包并将其集成到 CDS 中同时进行维护和改进，对于 Chromeleon CDS 而言，就是 DDK。

#### 总结

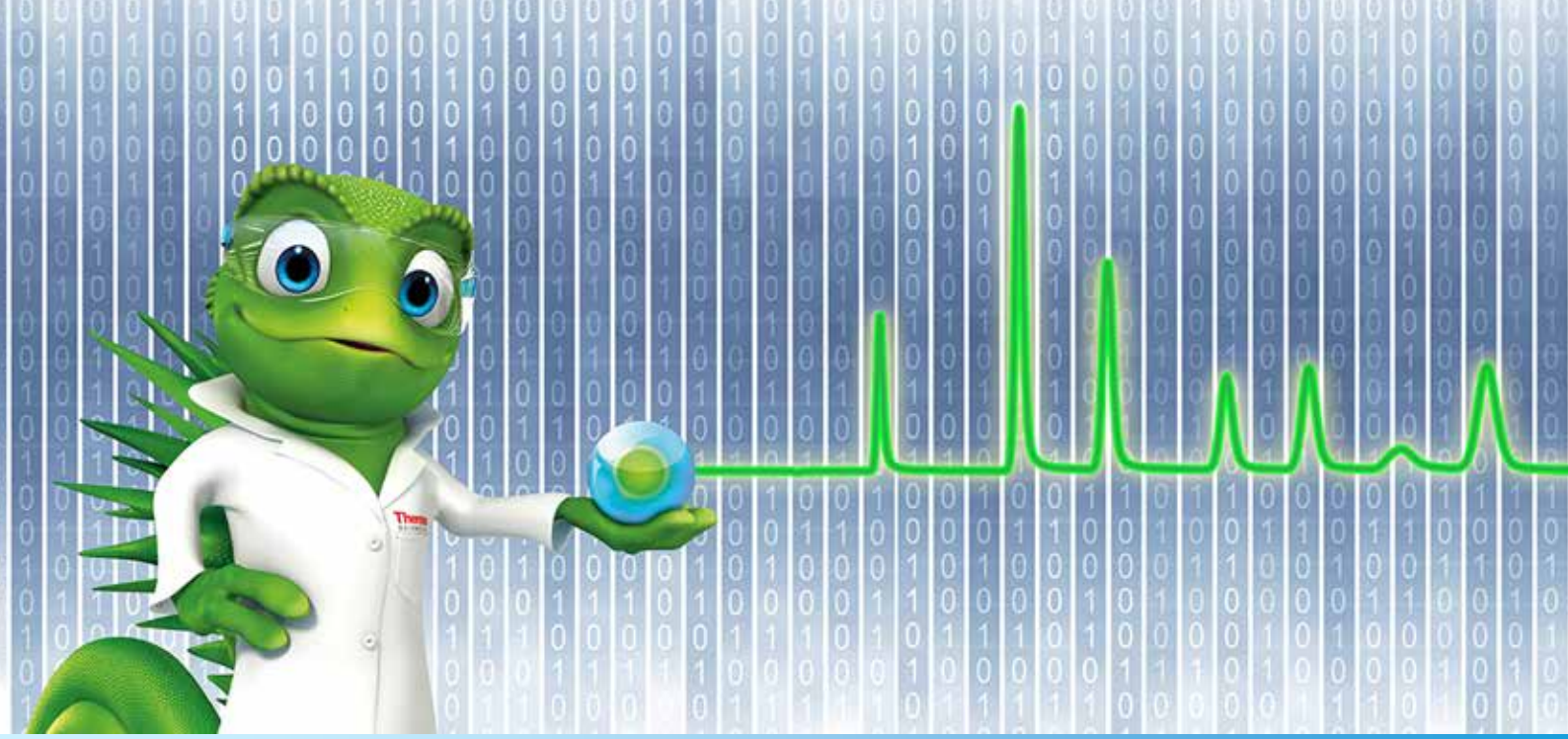
Chromeleon 变色龙 CDS 首创第三方仪器控制功能，并稳居市场领导地位，如今，Chromeleon 变色龙 CDS 已经成为多厂商控制的代名词，并使第三方仪器控制成为任何色谱数据系统的必备功能。凭借 20 年的开发历史，Chromeleon 变色龙 CDS 为对第三方仪器控制感兴趣的仪器供应商提供所有工具。Chromeleon 变色龙 CDS 是目前市场上最适应未来需求的、最符合企业环境的多厂商色谱数据系统。



## 附录

### Chromeleon 变色龙软件快速入门指南及参考卡





# 快速入门指南

## Chromleon 7.2

7229.0004 修订版 1.0 • 2013 年 7 月

<b>1 简介</b> .....	1
1.1 关于本文档 .....	1
1.2 其它文档 .....	1
<b>2 Chromeleon 使用方法</b> .....	1
2.1 总览 .....	1
2.2 启动 Chromeleon .....	1
2.3 启动仪器 .....	2
2.3.1 确保仪器控制器服务正在运行 .....	2
2.3.2 建立连接 .....	2
2.3.3 控制并监视仪器 .....	3
2.4 创建序列 .....	3
2.4.1 创建仪器方法 .....	4
2.4.2 创建处理方法 .....	4
2.4.3 创建报告模板 .....	4
2.4.4 创建序列 .....	4
2.5 采集数据 .....	5
2.5.1 启动分析 .....	5
2.5.2 监视正在进行的分析 .....	6
2.6 处理数据 .....	6
2.6.1 在 Chromatography Studio 中复核数据 .....	7
2.6.2 使用色谱图 .....	7
2.6.3 对峰进行检测和积分 .....	8
2.6.4 识别峰 .....	11
2.6.5 校准和定量 .....	12
2.7 复核并报告结果 .....	14
2.7.1 复核结果 .....	14
2.7.2 打印结果 .....	14
2.8 Chromeleon 中的 MS .....	15

2.8.1 MS 仪器控制 .....	15
2.8.2 使用 MS 采集数据 .....	15
2.8.3 MS 数据可视化 .....	15
2.8.4 MS 数据处理（处理方法） .....	16
<b>3 附录：Chromeleon 概述 .....</b>	<b>19</b>
3.1 简介 .....	19
3.2 仪器控制器服务 .....	20
3.3 Chromeleon 客户端 .....	20
3.3.1 Chromeleon Console .....	20
3.3.2 Chromatography Studio .....	22

## **版权所有**

版权所有 © 2013 Thermo Fisher Scientific

本档中包含的信息如有更改，恕不另行通知。

保留所有权利，包括照相制版和在电子媒体上进行存储。未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 的明确书面许可，本出版物的任何部分不得复制或分发、传播、转录、存储在检索系统中，或以任何形式或任何手段（电子、机械、磁性、手册或其它方式）传播到任何人类或计算机语言，或透露给第三方。

## **商标**

Windows、Windows Vista、SQL Server 2008、SQL Server 和 Microsoft 是 Microsoft Corporation 的注册商标。

所有其它商标均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 及其子公司的资产。

# 1 简介

## 1.1 关于本文档

本快速入门指南为初次使用 Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 的用户提供了快速参考。建议您在使  
用 Chromeleon 前通读快速入门指南。

快速入门指南由以下两部分组成：

**Chromeleon 使用方法** 对启动简单分析、处理数据和报告结果的指导。

**附录：Chromeleon 总览** Chromeleon 界面和常用功能的总览。

本快速入门指南按现状提供。务求尽可能提供完整且准确的信息，所有技术规范 and 程序均经过悉心开发。然而，  
对于因使用本手册或本手册所包含信息而引起的任何错误、疏忽、损坏或损失，Thermo Fisher Scientific 概不负责，  
并且不承担法律责任。

## 1.2 其它文档

Chromeleon 随附的一些其它文档有助于用户了解更多有关该软件的信息。这些文档所涉及的范围将在文档总  
览中进行介绍，其印刷版本随 Chromeleon 安装媒体一起提供，电子版本可在安装盘的 Documents 文件夹中找到。  
Chromeleon 在线帮助的电子版本可在 Online Help 文件夹中找到。

# 2 Chromeleon 使用方法

## 2.1 总览

使用 Chromeleon 进行的每次分析均需遵循以下 6 个基本步骤：

1. 启动 Chromeleon
2. 启动仪器
3. 创建序列
4. 采集数据
5. 处理数据
6. 复核并报告结果

本快速入门指南提供了充足的信息，以便用户按照这 6 个步骤执行简单分析。有关 Chromeleon 的更多高级应  
用，包括执行更复杂的分析，请参阅 Chromeleon 帮助。

**注意：**其前提是已安装 Chromeleon，并且已连接并配置至少一台仪器。有关安装、连接和配置仪器的详细信息，  
请参阅**安装指南**。

## 2.2 启动 Chromeleon

要启动 Chromeleon 软件，请执行以下操作：

- 双击桌面上的 **Chromeleon 7** 图标：



- 或者 -

- 使用 Windows® 开始菜单：

选择开始 > 所有程序 > Chromeleon 7 > Chromeleon 7

Chromeleon Console 窗口将打开。如果用户管理处于活动状态，则系统会提示用户登录软件；输入 Chromeleon 管理员提供的凭据以继续操作。

## 2.3 启动仪器

要在 Chromeleon 中控制并监视仪器，必须：

- 确保仪器控制器服务正在运行。
- 建立连接。

### 2.3.1 确保仪器控制器服务正在运行

Chromeleon 仪器控制器服务可处理仪器通讯、控制和数据采集。它可在与仪器物理连接的任一 PC 上作为 Windows 服务在后台运行。其状态由 Windows 任务栏通知区域中的图标表示（图 1）。



图 1. Windows XP 和 Windows 7 的 Windows 任务栏通知区域



仪器控制器服务已停止



仪器控制器服务正在运行

如果仪器控制器服务已停止，请通过执行下列步骤进行启动：

1. 右键单击 Windows 任务栏通知区域中的 Chromeleon 托盘图标。
2. 单击启动 **Chromeleon 仪器控制器**。

**提示：**如果任务栏上没有显示 Chromeleon 托盘图标，请单击开始，指向程序（或所有程序，具体取决于操作系统），打开 Chromeleon 7 文件夹并单击服务管理器。

**注意：**可以配置 Chromeleon 仪器控制器服务，以使其在每次计算机开机时自动启动。有关详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的*控制仪器和模块*部分。

### 2.3.2 建立连接

控制仪器前，必须在模块与 Chromeleon 仪器控制器之间建立通讯。这称为*连接模块*。

要连接模块，请遵循以下步骤：

1. 在 **Console** 中，选择**仪器类别**，并在**导航窗格**中单击仪器名称。
2. 在工作区中，选择所需模块的 ePanel 选项卡（例如，**泵**）。
3. 在 **ePanel** 上，单击**连接**。


**注意：** ePanel 集将自动生成，用于支持来自特定仪器系列（如 UltiMate 3000、ICS-5000）的模块。将来自这些仪器的模块结合在一起时，一些模块的 ePanel 可能不会自动显示。有关将 ePanel 手动添加到集的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的管理 ePanel 集和 ePanel。

### 2.3.3 控制并监视仪器

通常，使用仪器方法中存储的预定义仪器命令组将样品作为序列的组成部分进行分析。有时（通常在序列运行之间）需要向仪器模块发出各种命令，例如启动或停止泵、设置流动相组成、打开或关闭检测器灯或监视基线。要发出仪器命令，请遵循以下步骤：

1. 在 **Console** 中，选择**仪器类别**。在**导航窗格**中，通过单击仪器名称选择仪器。
2. 在工作区中，选择所需模块的 ePanel 选项卡。
3. 使用 **ePanel** 上的控件发出仪器命令（例如，设置紫外 / 可见光检测器的波长或启动泵）。

当分析正在运行时，可以从模块的 ePanel 监视仪器参数和输出，例如检测器信号输出或泵压力。要在不启动序列的情况下监视检测器信号，请在 ePanel 集的工具栏上单击**监视基线**。再次单击同一按钮可停止监视基线。还可以保存监视基线数据。有关详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的**监视基线**。

**注意：** ePanel 提供了最常用的命令。如果需要执行不可用的命令，可以通过单击仪器工具栏中的命令按钮  访问一个对话框，从该对话框即可访问所有可用的仪器命令。

**提示：** 对于某些仪器，Chromeleon 提供了用于自动启动或关闭色谱系统，或将其设置为待机模式的程序。这些程序分别称为智能启动、智能关机和智能待机。有关可通过该方式控制的仪器以及如何使用该功能的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的智能启动、智能关机和智能待机。

## 2.4 创建序列

序列确定一组进样的处理方法。进样列表是序列的首要元素。列表按处理顺序对进样进行分组，并且包括了表征每次进样的进样变量（名称和类型等）。

序列可在 **Console** 中创建，或使用 **eWorkflow** 创建。**eWorkflow** 是一款简单易用但功能强大的工具，用于以预定义的模板和规则为基础创建序列。有关创建和使用 **eWorkflow** 的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的**创建 eWorkflow**。

可使用 **Console** 中的序列向导创建序列。但首先应准备下列文件：


- 仪器方法
- 处理方法

- 报告模板

### 2.4.1 创建仪器方法

1. 在 **Console** 的**仪器类别**中，从导航窗格中选择要创建仪器方法的仪器。
2. 在**创建**菜单上，单击**仪器方法**。
3. 完成所有向导步骤，然后单击**完成**。

创建的仪器方法将在 Chromatography Studio 中打开。

4. 在导航窗格中选择模块视图，复核仪器方法。根据需要编辑设置。
5. 使用快速访问工具栏中的**保存**图标  保存仪器方法，并指定位置和对象名称。
6. 关闭 Chromatography Studio。

### 2.4.2 创建处理方法

1. 在 **Console** 的**创建**菜单上，单击**处理方法**。
2. 选择预定义的布局之一，然后单击**下一步**。
3. 输入名称，选择文件位置，可选择输入注释。
4. 单击**完成**以保存处理方法，然后关闭向导。

新的处理方法将在 Chromatography Studio 中打开。

### 2.4.3 创建报告模板

1. 在 **Console** 的**创建**菜单上，单击**报告模板**。
2. 选择预定义的模板之一，然后单击**下一步**。
3. 选择文件位置并输入文件名。
4. 单击**完成**以保存报告模板，然后关闭向导。

### 2.4.4 创建序列

要使用 **Console** 中的序列向导创建序列：

1. 在 **Console** 的**仪器类别**中，从导航窗格中选择要创建仪器方法的仪器。
2. 在 **Console** 的**创建**菜单上，单击**序列**。
3. 完成进样的进样配置设置：

**进样名称的** 指定进样的命名方式。

**格式：** 这是可添加代码 #n、#p、#i 和 #r 的自由文本字段。

(单击进样名称的格式字段右侧的  按钮可查看这些代码的定义)

**样品瓶数量：** 指定分析中的样品瓶总数。

**进样次数：** 指定分析中每个样品瓶的进样次数。

**起始位置：** 指定分析序列的序列起始位置。这将指定自动进样器中第一个样品瓶的位置。向导自动递增后续样品瓶的位置。

**进样量：** 指定进样量。

**样品架视图** (图 2)： 如果自动进样器支持预览功能，则样品架视图将提供安装在所选仪器上的样品盘和样品架的图形表示。预览功能还可以便于用户确定自动进样器样品盘中第一个样品的位置。只需单击样品瓶即可指定所需的起始位置。起始位置编辑字段中的信息将自动更新。

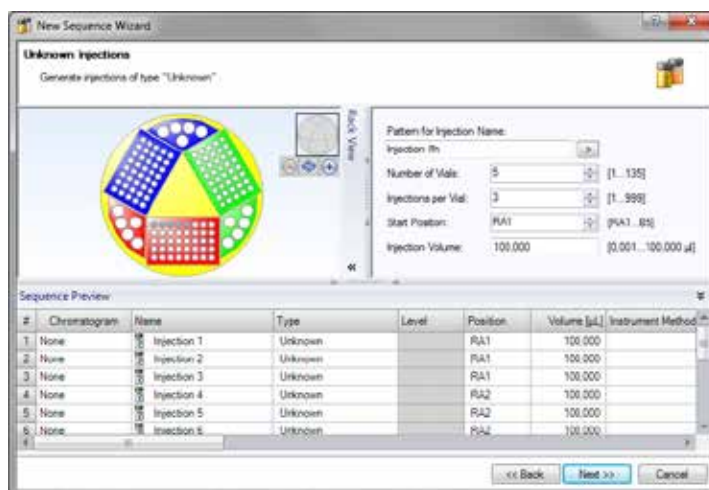


图 2. 样品架视图

4. 单击下一步。

**注意：**使用向导创建序列时，只能添加未知类型的进样。创建序列后，可修改进样类型和位置。

5. 选择方法和报告参数：对于每个字段，使用 **Browse** 按钮导航到要使用的文件并选择该文件。完成所有字段后，单击下一步。

6. 输入序列的注释（可选），然后单击**完成**。

7. **保存对话框**将打开。

8. 指定保存序列的位置，输入文件名并单击**保存**。

9. 如有必要，可更改进样名称、进样类型、进样位置和其它条目。有关进样类型的总览，请参阅第 3.3.1.2 节。此时，序列显示在 Chromeleon Console 的**导航窗格**中。

## 2.5 采集数据

### 2.5.1 启动分析

创建序列且仪器就绪后，可启动数据采集。

#### 2.5.1.1 检查仪器是否就绪

1. 在 **Console** 中，选择**仪器类别**。在导航窗格中，通过单击仪器名称选择仪器。
2. 在工作区中，选择所需模块的 ePanel 选项卡。例如，要检查基线，请选择检测器的 ePanel，然后单击**监视基线**按钮。

确信仪器已准备好进行分析之后，启动序列。

#### 2.5.1.2 启动序列

1. 在 Console 中，选择**数据类别**。
2. 在导航窗格中，通过单击选择要运行的序列。

序列随后将在工作区中打开。

3. 执行下列操作之一：

- 单击开始按钮的向下箭头。单击**添加到队列**。

– 或者 –

- 单击进样列表上方序列控制栏中的  **Start** 按钮，将序列添加到队列中并立即启动队列。

序列将添加到队列中。如果队列为空，执行就绪检查，如果没有错误，则启动队列（图 3）。



图 3. 运行序列

**注意：** Chromeleon 队列可用于安排将要连续运行的多个序列。有关使用队列的信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的管理队列。

**提示：** 使用 Chromeleon，可以自动启动或关闭色谱系统，或者将色谱系统设置为待机模式。这称为智能启动、智能关机和智能待机。有关该功能支持的仪器和如何使用该功能的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的智能启动、智能关机和智能待机。

## 2.5.2 监视正在进行的分析

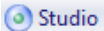
在分析过程中，建议对检测器信号和其它仪器参数（如压力和温度）进行监视。要监视正在进行的分析：

1. 在 **Console** 中，选择**仪器**类别，并在导航窗格中单击仪器名称。
2. 在工作区中选择**主页** ePanel，以监视检测器信号和审计追踪。

**注意：** 其它模块的设置可在其各自的 ePanel 中进行监视。

## 2.6 处理数据

采集色谱或质谱数据之后，可对其进行处理。所有处理步骤均在 **Studio** 中执行并保存在处理方法中。

要从 Console 打开 Studio，请双击序列中的任何对象，或单击 Studio  **Studio** 按钮。

Chromeleon 拥有多种可简化或加快数据处理任务的工具，例如 **SmartPeaks**，但本快速入门指南仅介绍了最常用的处理步骤。

**注意：** 更改处理方法时，将会立即重新计算使用该处理方法的序列中的所有进样的结果。无需“重新处理”序列或手动更新结果。

## 2.6.1 在 Chromatography Studio 中复核数据

采集到序列中所有样品的数据后，建议在报告结果前对色谱图和峰数据进行复核。通常，在报告结果前需要对峰检测、积分和校准设置进行修改。请参阅第 2.6.2 章及该章之后的内容。

1. 在 Chromeleon Console 中，选择**数据**类别。
2. 双击 Chromeleon Console 工作区中的进样，打开 Chromatography Studio 中序列的第一个进样。

Chromatography Studio 将打开。

3. 打开**数据处理**类别，然后在导航窗格中选择要查看的进样。

该进样的数据采用默认预置视图显示于工作区中。

**提示：**Chromeleon 中提供有多种视图，可以从数据处理主页选项卡的预置组中进行选择。还可以新建视图并将其存储以便再次使用。有关设置自定义视图的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的新建视图设置。

4. 可通过以下方式浏览数据：

- 使用**数据处理**主页选项卡的**导航**组中的按钮。
- 在**导航窗格**中选择进样、通道或组分。
- 或者 –
- 在**交互结果窗格**的**积分**或**总结**表中双击组分或进样（图 4）。

A	B	C	D	E	F
Inj. No.	Injection Name Selected Peak:	Type	TIC		
			Peak:chloroform 4.3 Dichlorobenzene 4.4 Dichlorobenzene		
1	cal_std_0	Calibration Standard	4.0	4.4	n.a.
2	cal_std_55	Calibration Standard	4.0	4.4	n.a.
3	cal_std_20	Calibration Standard	4.0	4.3	4.4
4	cal_std_50	Calibration Standard	4.1	4.4	n.a.
5	cal_std_100	Calibration Standard	4.1	4.4	n.a.
6	matrix_blank	Unknown	4.1	4.3	4.4
7	solvent_blank	Unknown	4.1	4.4	n.a.
8	solvent_blank	Unknown	n.a.	n.a.	n.a.
9	unknown1	Unknown	4.0	4.4	n.a.
10	unknown2	Unknown	4.1	4.4	n.a.
11	unknown3	Unknown	4.1	4.4	n.a.
Maximum			4.094	4.303	4.375
Average			4.057	4.367	4.369
Minimum			4.036	4.320	4.363
Standard Deviation			0.018	0.023	0.000
Relative Standard Deviation			0.44%	0.53%	0.21%

图 4. 在交互结果表中进行选择

本节涵盖以下内容：

- 使用色谱图
- 对峰进行检测和积分
- 识别峰
- 校准和定量

## 2.6.2 使用色谱图

可以在色谱图中查看当前进样的积分色谱图（图 21）。如果不需要进行数据评估，可以（例如）在色谱图中直接更改峰定界符和基线。当然，可以修改色谱图的布局以满足您的需要。还可以叠加其它色谱图以便进行比较。

有关详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的*使用色谱图*。

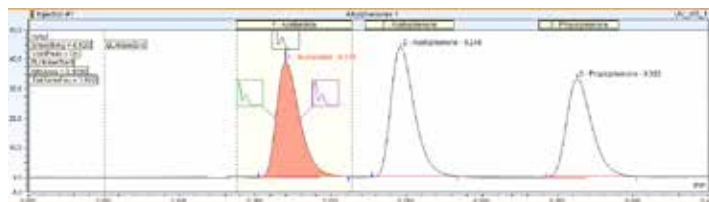



图 5. 色谱图

**提示：**可使用导航窗格中的图钉图标  或通过选择导航窗格中的通道（要选择两个或更多个通道，请按下 CTRL 或 SHIFT，然后单击通道），对不同进样或通道的色谱图进行叠加。

### 2.6.3 对峰进行检测和积分

要对色谱图进行正确定量或定性，必须检测所有目标峰并正确积分。为了实现这一点，您可以：


- 新建一组检测参数。
- 或者 -
- 修改现有的处理方法

出于本指南的目的，假定用户首先会新建一组检测参数（使用 Cobra 检测算法），然后作出修改以改善峰的积分和检测。

**注意：**在*处理方法*的 **MS 检测**选项卡页面上，可选择 MS 数据的峰检测算法（Chromeleon 6、Cobra、Genesis 或 ICIS）。可以将峰检测设置应用于整个色谱图和 / 或可以为单独的提取离子色谱图定义不同的峰检测设置。定义的算法和设置将只应用于该提取离子色谱图。对于除 MS 数据以外的所有其它数据，可以在*处理方法*的**检测**选项卡页面上设置检测算法。

#### 2.6.3.1 新建一组 Cobra 检测参数

本节提供了有关如何设置新处理方法和使用 **Cobra™ 峰检测向导**来确定色谱图的初始积分设置的信息。有关创建处理方法的详细信息，请参阅第 2.4.2 节。

1. 在 Chromatography Studio 中打开序列（通过双击 Console 中的进样），然后打开**数据处理**类别。
2. 单击色谱图区域中的某处，选中色谱图。
3. 单击**处理**选项卡，并通过在**检测参数**组中选择 **Cobra** 向导  激活 Cobra™ 峰检测向导。  
Cobra 向导将打开。
4. 选择要进行积分的色谱图区域。

如果所选部分包含负峰（例如，溶剂峰），可以选中**考虑负峰**复选框，以指定在 Cobra 峰检测过程中忽略这些峰。在其它情况下，该复选框保持为未选中状态。单击**下一步**。

5. 选择下列可选方式之一，确定基线噪声的范围：
  - 选择**使用自动范围**选项（默认），系统将计算合适的时间范围。

– 或者 –

- 手动输入基线。

单击下一步。

6. 选择下列可选方式之一，对色谱数据进行平滑处理：

- 选择使用**自动平滑宽度**选项（默认），自动对数据进行平滑处理。

– 或者 –

- 选择色谱图中的最窄峰，以便定义用于峰检测的 Cobra 平滑宽度。

单击下一步。

7. 选择下列可选方式之一，定义峰面积阈值，确定最小峰面积。任何峰面积小于该阈值的峰在检测或积分过程中将被忽略：

- 选择使用**自动最小峰面积**（默认）选项，系统将自动计算最小峰面积。


– 或者 –

- 选择色谱图中要检测的最小峰（最小峰面积将设置为所选峰的面积 90%）。

单击下一步。

8. 使用**通道**下拉菜单选择通道，并通过**进样类型**字段指定将要应用积分设置的数据。

单击完成。



9. 单击 Chromeleon 图标 ，从菜单中选择**保存 > 保存**，以保存更新后的处理方法。

**Cobra™ 峰检测向导**可确定色谱图的最佳初始积分设置。对于简单的色谱图，当所有峰都充分分离时，这些设置是理想的。对于复杂的色谱图或在峰仅部分分离的情况下，可能需要增加另外的检测参数。

## 2.6.3.2 修改现有的处理方法

### 2.6.3.2.1 插入新检测参数

要插入新检测参数，请遵循下列步骤：

1. 单击色谱图。
2. 单击**处理**选项卡。
3. 如果尚未显示检测参数，则在**检测参数**组中单击**检测参数** ，以便在色谱图中显示检测参数。
4. 单击**插入**  按钮上的箭头。
5. 从列表中选择适当的检测参数。

该列表列出了最常用的参数。如果需要其它检测参数，请选择**其它参数**。



有关所有 Chromeleon 检测参数的列表和更多详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的**检测参数（总览）**。

6. 将光标移至色谱图中要插入该参数的位置并单击。

新检测参数出现在色谱图中，峰积分将自动更新。

检测参数具有可显示参数详细信息的标记，以及显示检测参数在色谱图中的准确位置的垂直虚线。

### 2.6.3.2.2 移动、修改和删除检测参数

1. 单击色谱图。
2. 单击处理选项卡。
3. 如果尚未显示检测参数，则在检测参数组中单击检测参数 ，以便在色谱图中显示检测参数。
4. 在指针 / 缩放组中，确保已选择自动  工具。

#### 要移动检测参数：

- 将检测参数拖动至所需位置（可拖动检测参数的标记或虚线）。

#### 要编辑检测参数的值：

- 双击标记并从列表中选择新设置。

#### 要更改检测参数的类型：

- 右键单击检测参数并选择编辑检测参数。

编辑 Cobra 检测参数对话框将打开。


- 从参数名称字段中选择新检测参数类型，并设置所需的任意参数值。
- 单击确定保存更改，然后关闭编辑 Cobra 检测参数对话框。

#### 要删除检测参数：

- 右键单击检测参数并选择删除检测参数。

### 2.6.3.2.3 对未分离峰进行积分

对部分分离的峰进行积分可能会很困难。SmartPeaks™ 积分助手可帮助您对这些峰进行积分：

1. 单击色谱图。
2. 单击处理选项卡。
3. 在检测参数组内，单击 SmartPeaks 。
4. 使用光标在色谱图中包含部分分离峰的区域周围画矩形。

SmartPeaks：选择备选方案对话框将打开（图 6）。

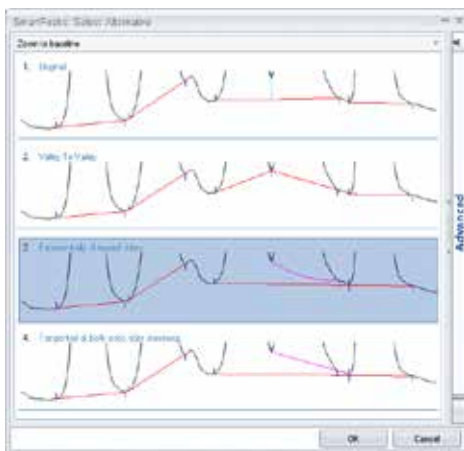


图 6. SmartPeaks：选择备选方案对话框

**提示：**有关更多选项，可以单击 SmartPeaks；选择备选方案对话框中的高级选项卡。有关如何使用这些设置的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的 SmartPeaks：选择备选方案。

5. 选择优选的峰检测，并单击**确定**。
6. 处理方法中的检测参数现已更新，新检测参数显示于色谱图中。

## 2.6.4 识别峰

检测到峰并获得令人满意的积分结果后，可使用这些峰进行报告或结果计算。在报告时对色谱图中的组分进行命名很有用。执行校准和定量时，至少应为色谱图中的校准峰进行命名。

为组分分配名称的过程称为识别。命名组分的名称和预期保留时间存储在 Chromeleon 组分表中。下面的章节介绍了如何：

- 创建组分表。
- 更新预期保留时间和窗口。



### 2.6.4.1 创建组分表

创建组分表的方式有三种：

- 通过组分表向导
- 在色谱图窗格中进行交互式创建
- 通过组分表（处理方法）

#### 2.6.4.1.1 通过组分表向导

要使用组分表向导创建组分表：

1. 单击色谱图。
2. 单击**处理**选项卡。
3. 如果尚未显示峰窗口，则在**组分表**组中单击**峰窗口** ()，以便在色谱图中显示峰窗口。
4. 单击**组分表向导**按钮 ()。

组分表向导对话框将打开。

这一包含 5 个页面的向导将引导您完成对组分的命名。在前 4 页，可指定是否保留现有的组分（将新组分添加到现有组分中）、考虑组分的时间范围，以及最小峰面积（小于该值的组分将被忽略）。在最后一页，可对发现的所有组分进行命名、修改保留时间和峰窗口并添加注释。

5. 单击**完成**，保存组分表更新，然后关闭组分表向导。

Chromatography Studio 工作区中的色谱图视图将自动更新，以显示新的组分窗口。

#### 2.6.4.1.2 在色谱图窗格中进行交互式创建

要添加色谱图中的组分：

1. 单击色谱图。
2. 单击**处理**选项卡。
3. 激活**组分表**组中的**峰窗口**选项和**添加组分**选项。

4. 在要添加至组分表的峰周围画矩形。

峰将以通用名称（例如，**组分 1**）添加到组分表中，并且峰窗口显示于色谱图中。

5. 双击峰窗口标记并输入组分名称。

#### 2.6.4.1.3 通过组分表（处理方法）

要在处理方法中创建组分表：

1. 单击**数据处理**主页选项卡。
2. 在**窗格**组中，单击**处理方法**以显示处理方法。

**提示：**可隐藏其它窗格使屏幕空间最大化，并且仅可查看处理方法。在窗格组中，禁用当前不需要的窗格。

3. 在处理方法中，选择**组分表**选项卡。
4. 单击组分表底部的**单击这里以添加新的组分**链接。

**新建组分**对话框将打开。

5. 在**名称**字段中键入组分的名称，然后单击**创建**。

将会创建新组分，并显示在组分表中。

6. 在组分表的**保留时间**和 / 或**窗口**列中更新组分的保留时间和窗口。

**提示：**经过一段时间后，峰的保留时间可能会与其预期值产生漂移。为此，在组分表中设置宽峰窗口有时会非常有用。当峰保留时间的漂移量过大以至于该方法无法完全补偿时，可以使用前一个峰的保留时间进行峰识别。有关修正保留时间漂移的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的识别峰。

#### 2.6.4.2 修改保留时间和窗口

可以通过在组分表中修改属性或在色谱图上拖动峰窗口，从而修改保留时间和峰窗口的宽度。

#### 2.6.5 校准和定量

如果要将在峰下方的面积或峰高转换为绝对样品量或浓度值，需要在分析前进行**校准**。校准过程中得到的校准系数随后可用于计算未知样品量。本节将指导您完成执行简单外标校准所需的步骤（使用多种浓度的单一组分标准品）。Chromeleon 支持多种校准方法，包括内标校准法和标准加入法。有关使用这些校准方法的信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的**校准和样品量计算**。

要在 Chromeleon 中执行简单的校准，需要执行以下操作：

- 指定作为校准标准品的进样。
- 创建校准级别并将其分配到校准标准品。
- 输入校准标准品的样品量或浓度。
- 复核校准曲线。

### 2.6.5.1 指定作为校准标准品的进样

在进样列表中校准标准品的标记方式如下：

1. 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中，单击**进样列表**类别。
2. 对于每个校准标准品进样，在**类型**字段中单击并从类型列表中选择**校准标准品**。

### 2.6.5.2 创建并分配校准级别

1. 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中，单击**进样列表**类别。
2. 单击第一校准标准品的**级别**单元格，并选择**新建级别**。将会添加值 01。将此级别分配到该校准标准品的所有进样。
3. 针对所有校准级别重复步骤 2。

### 2.6.5.3 输入校准标准品的样品量或浓度

1. 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中，单击**数据处理**类别。
2. 在**数据处理**主页选项卡的窗格组中，单击**处理方法**。
3. 在处理方法中，选择**组分表**选项卡（图 7）。

#	Name	Ret. Time	Level '01'	Level '02'	Level '03'
1	Pentachloroethane	4.090	5.000000	10.000000	20.000000
2	1,3-Dichlorobenzene	4.380	5.000000	10.000000	20.000000
3	1,4-Dichlorobenzene-ol	4.455	5.000000	10.000000	20.000000
4	1,4-Dichlorobenzene	4.460	5.000000	10.000000	20.000000
5	1,2-Dichlorobenzene	4.650	5.000000	10.000000	20.000000
6	Hexachloroethane	5.060	5.000000	10.000000	20.000000

图 7. 组分表

4. 在相应的单元格中输入每种级别（级别“01”、级别“02”等等）的校准组分的标准品样品量。  
对校准标准品作出更改时，校准曲线将自动更新。

### 2.6.5.4 查看校准曲线

可在 Chromatography Studio 的数据处理类别中查看校准曲线（图 8）：

1. 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中，单击**数据处理**类别。
2. 转到**数据处理**主页选项卡。
3. 执行以下任一操作：
  - 从**预置组**中选择包含校准窗格的预置工作区布局。
  - 或者 –
  - 在**窗格组**中选择**校准图**（图 8）。

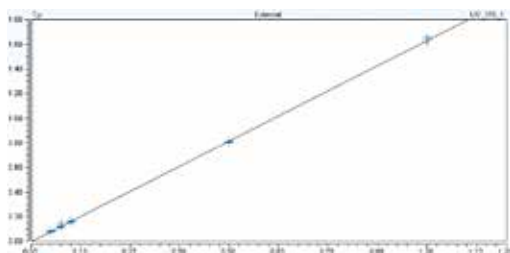



图 8：校准曲线

提示：通过双击校准表中的组分、选择色谱图中的峰或使用数据处理主页选项卡的导航组中的  Component 按钮，可以查看多组分标准品的每种组分的校准曲线。

## 2.7 复核并报告结果

数据采集完毕且已执行校准后，可复核并报告结果。

用户可创建任何所需格式和布局的报告模板（输出结果和其它数据），或可使用 Chromeleon 的默认模板之一。本快速入门指南仅提供有关使用默认模板的信息；有关修改报告模板或新建模板的信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的 *设计报告*。要复核并报告结果，必须首先将模板与序列相关联。完成该关联后，可以执行以下操作：

- 复核结果。
- 打印结果。
- 导出报告。

在 Chromeleon 中，可以创建电子报告，该报告可包括由色谱图、表格、图表、校准曲线和其它仪器或结果值组成的工作表。这些电子报告可能还需要通过电子签名过程进行批准。有关创建和使用电子报告和电子签名功能的详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的 *电子报告*。

### 2.7.1 复核结果

通过单击报告模板工作区底部的相应选项卡，可对结果进行复核。

可通过以下方式浏览序列：

- 使用主页选项卡的导航组中的上一个和下一个按钮。
- 在导航窗格中选择要查看的进样和 / 或通道。

### 2.7.2 打印结果

打印结果时，可以执行以下操作：

- 仅打印当前所选的进样。
- 打印整个序列。

这两种过程将在下面的章节中进行介绍。提示：使用自动重复区域功能，可以创建适用于一系列方法的单一报告模板，无论方法使用一个还是多个数据通道，分析一种还是多种化合物。Chromeleon 将自动报告相关结果。有关详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的定义自动重复区域。

#### 2.7.2.1 打印单次进样的结果

要打印当前所选进样的结果：

1. 从 Chromatography Studio 中选择 **报告设计器** 类别。
2. 在导航窗格中选择要打印的进样。
3. 在 Studio 菜单中，选择 **打印** 以打开 **打印** 对话框。
4. 在 **打印** 对话框中选择：
  - 应用到当前进样。
  - 要使用的打印机。
  - 要打印的当前进样的工作表。

将会打印当前进样的结果。

### 2.7.2.2 打印整个序列的结果

要打印整个序列的结果，请遵循“打印单次进样的结果”的步骤，但在**打印**对话框中：

- 选择**应用到当前序列**。
- 选择要打印的工作表时，可单击**条件**列中的**向下箭头**，将打印条件应用于所选工作表。

**提示：**要打印序列中的多个进样，首先请选择要打印的一个或多个进样行，右键单击，然后单击打印。

## 2.8 Chromeleon 中的 MS

从 Chromeleon 7.2 开始支持 MS 仪器控制和数据可视化 / 处理。LC、IC 和 GC 分析可用的许多功能也可以用于 MS 分析。本节描述了 MS 所独有的功能。

### 2.8.1 MS 仪器控制

直接仪器控制由 MS 硬件随附的 MS 驱动程序和外部程序所决定。有关如何使用外部程序的说明，请参阅特定 MS 型号所对应的用户手册。

#### 2.8.1.1 创建 MS 仪器方法

请参阅特定硬件随附的用户手册。

### 2.8.2 使用 MS 采集数据

在创建 MS 仪器方法后用 MS 进行数据采集的过程与采用非 MS 仪器配置进行数据采集是相同的。有关详细信息，请参阅第 2.6 节。

### 2.8.3 MS 数据可视化

MS 数据可视化可通过独立于或取决于色谱图的光谱图实现。本节介绍了基本功能。

#### 2.8.3.1 质谱图

质谱图可通过单击**数据处理**主页选项卡的窗格组中的  **Mass Spectra** 按钮启用（图 9）。

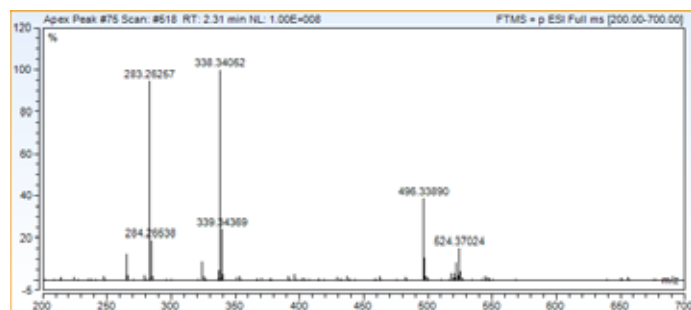


图 9. 质谱图

要显示光谱，用户需选择下列选项之一：

- 色谱图中的峰。
- 导航窗格中的组分。
- 或者 –
- 使用**数据处理**类别的**布局**选项卡上**峰纯度**组中的**时间光谱**工具的数据点。

**谱图模式：**可在剖面（连续）或中心（离散）模式下采集 MS 数据。剖面数据可通过算法转换为中心格式，但中心数据无法转化为剖面数据。选择质谱图，显示光谱图工具功能区。然后单击布局选项卡。要在中心模式下查看数据，请在谱图模式组中单击中心单选按钮，或者单击自动以查看原始采集的所有数据。

**叠加：**要查看补充光谱，请在叠加组中单击 **Uncorrected**、**Background** 或 **Reference**。叠加组等同于光谱图工具功能区布局选项卡页面上的谱图模式。单击参比以查看用于选择所需参比光谱的更多选项。某些叠加功能（例如背景叠加）要求在处理方法中定义相关设置。

**提取离子色谱图 (XIC)：**采集色谱 MS 数据时，提取离子色谱图显示为总离子流色谱图 (TIC)，TIC 通过对所有质谱峰的各个数据点求和而创建得到。为提高组分的特异性并减小背景噪声的影响，从而创建了 XIC。

可采用两种方式创建 XIC：

- 显示光标时，在质谱图中左键单击质谱峰。

– 或者 –

- 右键单击质谱图中的质谱峰，并从上下文菜单中选择提取离子色谱图…。提取质谱通道对话框将打开（图 10）。

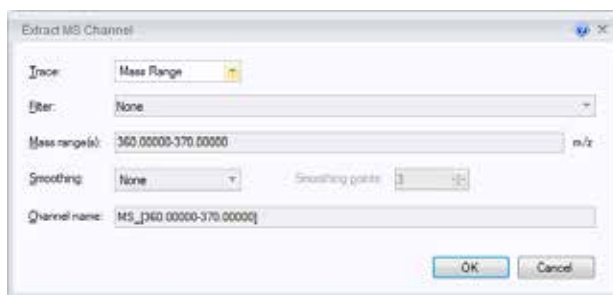


图 10. 提取质谱通道对话框

两种操作都将导致以所选质荷比或范围新建色谱通道。

## 2.8.4 MS 数据处理（处理方法）

MS 数据处理的基本原则与非 MS 数据处理的原则相似。本节将介绍 MS 数据处理的不同之处。有关数据处理的常规信息，请参阅第 2.6 节。

要显示 MS 数据处理设置，请单击数据处理类别的处理方法选项卡，并在布局组中选择全部设置布局（图 11）。



图 11. 布局组中的全部设置选项


### 2.8.4.1 MS 峰检测算法

除 COBRA 和 Chromeleon 6 算法之外，还介绍了两种新算法 – Genesis 和 ICIS。

- **Genesis：**该算法通常用于处理基线噪声较高的数据，例如 MS 全扫描数据。在某些实例中，该算法也可用于非 MS 数据的处理。这些数据包括但不限于 UV、CD 和 ED 数据。

- **ICIS**: 当处理噪声极低的数据或提取的数据（例如，在 SIM 或 SRM 模式下采集的数据或 XIC 等采集后提取的数据）时，推荐采用该算法。

#### 2.8.4.2 MS 检测选项卡

在处理方法的此选项卡页面上，可定义默认的 MS 检测设置或基于组分的检测设置。在提取离子色谱图下拉菜单中，具有  标记的所有组分均使用特定于该组分的检测设置。所有其它组分使用默认的 MS 检测参数。首次选择 ICIS 和 Genesis 算法时，所有参数均采用推荐的默认值。

#### 2.8.4.3 组分表 - 高级选项卡

要使用 XIC 根据 MS 数据对组分进行处理和定量，需要为所需组分定义特定通道。

在组分表的**通道**列中，使用 XIC 进行定量的所有组分都必须通过下拉菜单设置为 MS 定量（图 12 和图 13）。

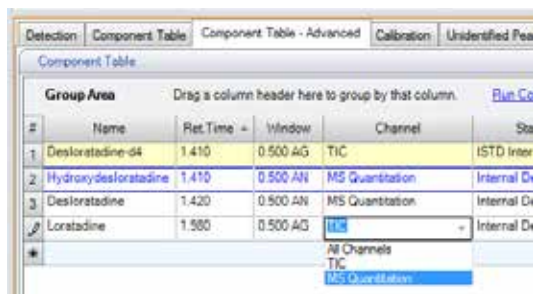


图 12. 组分表中的 MS 定量选择

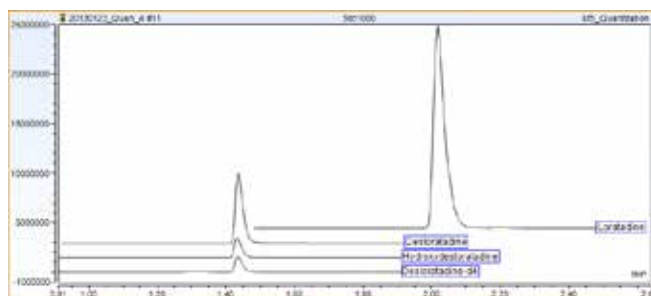



图 13. MS 定量通道

#### 2.8.4.4 组分表属性 - 提取离子色谱图

1. 通过突出显示组分表中的整行选择某一组分，单击**显示属性**以显示属性对话框，然后在属性导航窗格中选择**提取离子色谱图**（图 14）。
2. 单击  以新建定量 XIC。如果当前未定义 XIC，则添加 **MS 定量峰**选项卡页面。否则，将创建 **MS 确认峰**选项卡页面。

为帮助用户定义更多的检测参数，Chromleon 显示了指定保留时间处的质谱图。请注意，确切保留时间处可能不存在质谱图。在这种情况下，MS 定量峰选项卡将显示 XIC 中与所定义的保留时间最接近的质谱图。

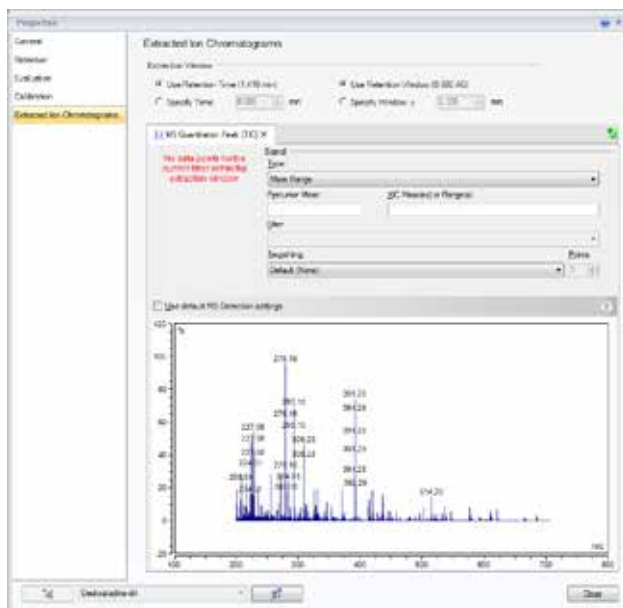


图 14. 提取离子色谱图属性页面

3. 在类型字段中，选择合适的选项
  - a. TIC – 通常用于处理非多元 SIM 或 SRM 实验的采集结果。
  - b. 质量范围 – 通常用于处理全扫描实验结果。

**注意：** 如果选择 TIC，则跳过步骤 4 和 5。

4. (可选) 如果采集 SRM 数据，请在母离子质量字段中键入质量。如果存在大量采集筛选条件，这将帮助用户将可选的筛选条件限制在目标离子的范围内 (图 15)。

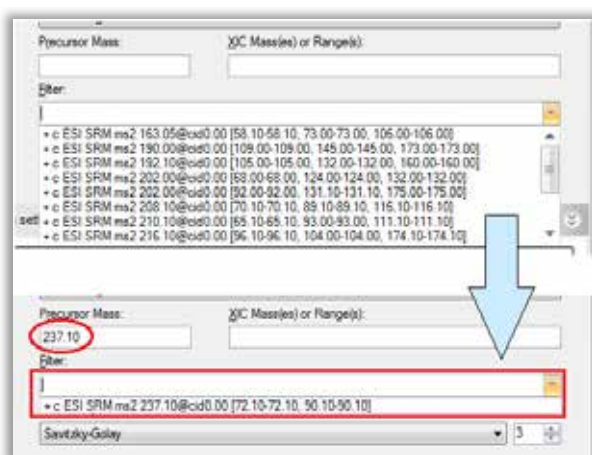


图 15. 通过输入 SRM 母离子质量筛选扫描列表

5. 在 XIC 质量或质量范围字段中键入 SIM/SRM 产物离子质量或质量范围。与母离子质量字段类似，该字段将有助于将可选的筛选条件限制在目标离子的范围内。此外，该字段还将定义用于创建 XIC 的质量。

6. 从筛选字段下拉列表中选择合适的筛选条件。通过**筛选条件**和**XIC 质量或质量范围**的组合，将在此 UI 中创建待评估的 XIC（图 16）。

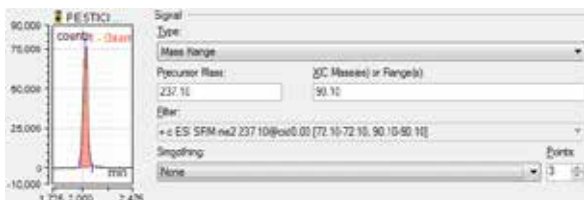



图 16. 基于参数显示的 XIC（用于设置组分的确认 XIC 的可选步骤）

7. 单击  以新建确认 XIC。
8. 重复步骤 3 至 6，设置确认峰的 XIC。
9. 单击比值表头下方的启用。
10. 设置相对于定量峰的预期目标比值 %（峰面积）。
11. 选择目标比值窗口类型的**相对容差**或**绝对容差**。
12. 选择容差窗口 %。

如果目标比率设置为 50%、窗口设置为 10%，则处于以下窗口内的峰面积比值将得到确认组分：

**绝对值：40 – 60%**

**相对值：45 – 55%**

13. 在**离子共洗流出峰**字段中设置用于确认峰的绝对容差分钟数。

完成这些步骤后，结合第 2.6 节所概述的步骤，可以复核并报告结果数据。有关详细信息，请参阅 Chromeleon 帮助中的提取离子色谱图部分。

## 3 附录：Chromeleon 概述

### 3.1 简介

Chromeleon 是可用于控制色谱仪器并评估、处理、报告和备份数据的色谱数据系统。Chromeleon 拥有多种软件组件：

**仪器控制器服务：**仪器控制器服务可处理与所连接仪器的通讯和来自这些仪器的数据采集。

**客户端：**Chromeleon 客户端提供与仪器操作、数据分析和数据管理相关的所有任务的用户界面。

**服务管理器：**显示 Chromeleon 仪器控制器服务的状态，并提供用于控制该服务的用户界面。还显示所有其它 Chromeleon 服务的状态。

**仪器配置管理器：**可对连接到仪器控制器 PC 的仪器进行配置。

**管理控制台：**管理任务的中心接入点，这些任务如：

- **许可协议管理器：**提供管理 Chromeleon 工作站和用户的许可协议的工具。
- **计划程序：**提供数据传输的计划工具。
- **用户数据库：**提供管理系统策略、用户和角色、访问权限以及操作权限的工具。
- **全局策略：**提供 Chromeleon 全局策略的设置。

- **Discovery:** 包含关于可用仪器和数据仓的信息的中央存储库。
- **本地机器:** 提供用于管理 Chromeleon 7 本地数据仓（创建、挂载和解挂载）和管理 Chromeleon 6 数据源（挂载和解挂载）的工具，使用户能够更改 Chromeleon 域控制器。

### 3.2 仪器控制器服务


Chromeleon 仪器控制器服务可处理所有实时的仪器过程（通讯、控制和数据采集）。它可在与仪器物理连接的 PC 上作为 Windows 服务在后台运行。其状态由 Windows 任务栏通知区域中的图标  表示（图 17）。



图 17. Windows XP 和 Windows 7 的 Windows 任务栏通知区域

可以从仪器配置管理器添加、配置或删除仪器和模块，连接到仪器并跟踪对仪器所作的更改。

### 3.3 Chromeleon 客户端

Chromeleon 客户端提供与仪器操作、数据分析和数据管理相关的所有任务的用户界面。

Chromeleon 客户端包含以下两个窗口：

**Chromeleon Console:** Chromeleon 主窗口，在该窗口中可以控制仪器、浏览所有数据以及使用或管理 eWorkflow。

**Chromatography Studio:** 从 Console 启动的独立窗口，在该窗口中可以处理与所选序列相关的数据和对象。在此可以查看和优化数据的所有方面、修改仪器方法和处理方法、定义和生成报告，以及管理光谱库。

#### 3.3.1 Chromeleon Console

启动 Chromeleon 7 时，Console 是最先出现的窗口。Console 窗口分为三个主要部分（图 18）。



图 18. Chromeleon Console

1. **类别栏**：使用类别栏在以下三个类别之间进行切换：**仪器**、**数据**和 **eWorkflow**（图 19）。







图 19. 类别栏

2. **导航窗格**：在此可以导航与所选类别相关的对象。

3. **工作区**：该区域显示导航窗格中所选对象的内容。在此可以对 Chromeleon 对象进行各种操作。

此外，还有另外三个用于用户交互的部分：

导航窗格具有顶级筛选器，可使您控制显示的仪器、数据仓或 eWorkflow。

- a.  **本地**：本地 Chromeleon 工作站中的可用项。
- b.  **全部**：Chromeleon 域中的可用项。
- c.  **收藏夹**：用于显示常用项的筛选器。
- d.  **自定义**：基于文本输入的筛选器。

进样列表上方的**序列控制栏**指示序列的状态（**新建**、**正在运行**、**已完成**、**已中断**、**未完成**），并可用于启动和停止序列。在导航窗格中选中某一序列后，序列工具栏才可用。

**注意**：当序列配置为已完成电子签名时，将提供另外的状态以便指示。

**状态栏**显示常规信息，例如当前登录的用户。

### 3.3.1.1 仪器

**仪器**类别提供对网络上所有仪器的访问（这可能会受到用户权限的限制）。


选定仪器类别后，已配置的仪器将显示在导航窗格中。工作区提供有关导航窗格中所选仪器的详细信息。







用户可在工作区中复核仪器状态，以及修改仪器参数。工作区的顶部显示有一系列 ePanel 选项卡。ePanel 可用于监视仪器的操作并可直接控制仪器。

**注意**：从导航窗格中选择当前离线的仪器时，工作区中将显示一条信息。








### 3.3.1.2 数据

**数据**类别可提供对存储在每个已连接的数据仓（，用于存储所有数据）中的所有数据的访问。

**注意**：Chromeleon 6 数据源  显示于 Chromeleon 7 中。无法对这些数据源作出更改，但是可将其中的数据复制到 Chromeleon 7 数据仓中。可从导航窗格访问并组织数据。工作区显示所选对象的内容并允许用户编辑对象。数据仓可包含下列对象：

-  **文件夹**：用于存储对象。使用文件夹可以组织数据仓库中的数据。
-  **序列**：归属相同的进样集合。典型的序列包含仪器方法、处理方法、报告模板以及视图设置文件。
-  **仪器方法**：在色谱分析过程中仪器执行的时控命令的集合。
-  **处理方法**：评估色谱图时使用的参数（包括用于峰检测和校准的参数）的集合。
-  **报告模板**：定义数据显示、打印或导出方式的文件。报告模板也可以包含计算。将该模板应用于序列时（用以查看、打印或导出结果），所得结果称为报告。
- **电子报告**：序列结果的电子版。
- **视图设置**：用于定义数据在屏幕上的显示方式。
- **UV 光谱库**：用于色谱峰识别的光谱集合。
-  **查询**：对数据仓库进行搜索。
- **仪器审计追踪**：诸如系统设置、执行的命令和错误信息等仪器事件的日志。

序列是一起进行连续分析和处理的进样集合。每个进样由序列中的一行表示（重复进样使用多个行表示）。进样可以是以下**进样类型**之一：

-  **未知**：将在分析过程中对某些组分进行定量或确定是否含有某些组分的样品。
-  **校准标准品**：含有已知浓度的一种或多种组分的样品。校准标准品用于绘制校准曲线。
-  **校验标准品**：具有已知组分浓度的样品。校验标准品用于确认校准。
-  **空白**：用于表征背景信号（基线）和 / 或确保未检测到不需要的组分的进样。空白“进样”可在未执行实际进样时进行。
-  **基质**：样品基质。基质的峰面积可从序列中所有其它进样的相应峰面积中扣除。
-  **未加标**：需要用标准加入法分析的未知样品。
-  **加标**：需要用标准加入法分析并且含有添加的已知量组分的未知样品。

### 3.3.1.3 eWorkflow

eWorkflow 是自动处理与色谱分析相关的实验室流程的电子程序。

eWorkflow 包含一组模板（例如仪器方法、处理方法、报告模板、视图设置和 / 或光谱库）和一组规则。规则可定义（例如）序列布局（如，在校准标准品之间允许的未知进样的最大数目）和网络中适合进行分析的仪器的列表。启动 eWorkflow 时，将创建一个具有相关预定义文件和明确定义结构的序列。

可用 eWorkflow 的列表在导航窗格中可见。可用于所选 eWorkflow 的仪器（包括其状态）的总览将显示在工作区中。在此可以启动 eWorkflow，并可以在引导下创建相应的序列。

### 3.3.2 Chromatography Studio

在 Chromatography Studio 中，可以编辑与所选序列相关的所有对象：

- 进样列表
- 仪器方法
- 处理方法
- 视图设置
- 报告模板

- 电子报告
- 光谱库

在 Console 中打开序列时，Chromatography Studio（图 20）将会打开。

**注意：** 打开序列上下文以外的对象时，仅 Studio 的对应类别可用。



图 20. Chromatography Studio

Chromatography Studio 的结构类似于 Chromeleon Console，其由以下主要部分组成：

- 类别栏 (图 21)：使用类别栏可在以下六个类别之间切换显示：**进样列表、仪器方法、数据处理、报告设计器、电子报告和 UV 光谱库。**

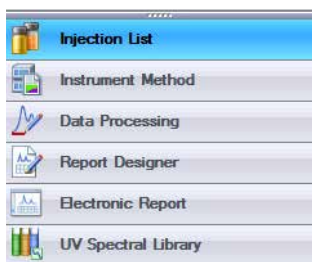



图 21. 类别栏

- **导航窗格：**可浏览所选类别中可用对象的区域。
- **工作区：**内容根据所选类别而变化。

此外，还有另外两个用于用户交互的部分：

- **功能区：**Studio 中主要命令的菜单工具。将命令按组进行组织，集中于选项卡下。为使界面简洁，一些选项卡仅在需要时显示。
- **Studio 菜单：**要访问 Studio 菜单，请单击 Chromatography Studio 窗口左上角的 Chromeleon 图标 。在该菜单中，可以访问常规任务，例如打印、导出和保存。

### 3.3.2.1 进样列表

选择进样列表类别后，可以编辑、打印和导出进样列表。导航窗格提供了序列中所用的所有文件的总览。工作区显示有关每个进样（例如样品类型，如校准标准品）和进样状态的详细信息。

**注意：**还可以直接在 Console 中编辑进样列表。如果序列同时在 Console 和 Studio 中打开，则在任一窗口中作出的更改将自动应用于另一窗口，使得序列的副本保持同步。

### 3.3.2.2 仪器方法

选择仪器方法类别时，可以编辑仪器方法。导航窗格列出了序列中的仪器方法，并提供仪器模块的总览。在工作区中，可编辑仪器方法。

### 3.3.2.3 数据处理

选择数据处理类别时，可以查看色谱和质谱结果、编辑处理方法以及对色谱图进行手动积分。导航窗格提供了序列中使用的所有进样、通道、处理方法和视图设置的总览。色谱结果显示在工作区中。

通过在数据处理主页选项卡上选择或隐藏窗格组中的每一个窗格，可以自定义在功能区上显示的窗格（例如色谱图、交互结果、校准图和处理方法窗格）（图 22）。

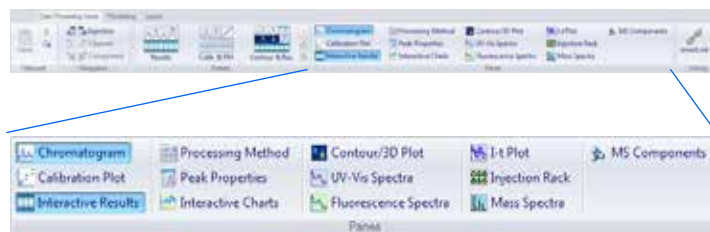


图 22. 功能区中的窗格选择

**提示：**预置组（位于数据处理主页选项卡中窗格组的左侧）提供了窗格的典型组合。

### 3.3.2.4 报告设计器

在报告设计器类别中，可以查看报告和编辑报告模板。导航窗格显示序列中可用的所有通道、进样和报告模板的列表。在工作区中，可以查看和修改报告。


### 3.3.2.5 电子报告

在电子报告类别中，可以创建和管理电子报告。电子报告是电子捕获的结果快照。导航窗格显示电子报告中可用的所有进样和工作表的列表以及电子报告本身。工作区显示电子报告，或者在没有可用的电子报告时显示新建报告的选项。

### 3.3.2.6 UV 光谱库

Chromatography Studio 的 UV 光谱库视图提供用于管理和比较从 3D Field 数据中提取的光谱的工具。

### 3.3.2.7 菜单

通过功能区或 Studio 菜单可以访问 Chromeleon 7 Studio 命令。要访问 Studio 菜单，请单击 Chromeleon 图标 。

# 索引

管理控制台	20	数据仓管理器	20
Cobra	8, 9	数据处理	7, 24
Console	1, 21	服务管理器	19
Discovery 服务	20	未分离峰	10
eWorkflow	21, 23	未加标	22
Genesis	17	未知进样	22
ICIS	17	查询	22
MS 仪器控制	15	校准	12
MS 仪器方法	15	校准曲线	13
MS 数据可视化	15	校准标准品	13
SmartPeaks	10	校准级别	13
Studio	7, 21, 23	校验标准品	22
Studio 菜单	24	样品架视图	4
TIC	18	检测参数	8
XIC	17, 18, 19	模块	2
交互结果	7	母离子质量	18
仪器	2, 21	用户管理器	19
仪器控制器服务	20, 21	电子报告	22, 23
仪器方法	4, 22, 24	监视	3, 6
仪器配置管理器	20	目标比值	19
保留时间	12	确认峰	19
光谱库	22, 24	离子共洗脱	19
功能区	23	积分	7
加标	22	空白	22
叠加	16	类别栏	21, 23
启动	1	组份表	11, 12, 17
基质	22	色谱图	7
处理方法	4, 13, 16, 22	计划程序	19
复核数据	7, 14	许可协议管理器	19
定量	12, 17	识别峰	11
客户端	19, 20	谱图模式	16
导航窗格	5, 21, 23	质谱仪	15
峰检测	8, 17	质谱图	15
工作区	22, 24	质谱通道	16
序列	3, 4, 15, 22	质量范围	18
打印	14, 15	进样列表	24
报告	4, 14, 22, 24	进样类型	22
报告设计器	24	连接	2
提取离子色谱图	17	采集数据	5, 15
数据仓	21	队列	6





## Chromeleon 软件组件

其中一些 Chromeleon 组件是用户可以实现直接交互式操作的可见应用程序，其它组件则不可见，作为 Windows 服务运行；这些组件负责稳定的仪器控制和安全数据传输之类的任务。

图例: **蓝色** = 基本功能/组件      **红色** = 高级功能/组件

### Console

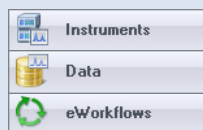


启动: • 双击桌面上的图标 • 开始 > 所有程序 > Chromeleon 7 > Chromeleon 7

Console 是 Chromeleon 的访问入口。

单击类别栏:

- 控制并监视**仪器**
- 组织**数据**
- 使用 **eWorkflow**



### Studio



启动: • 双击 Console 中的进样 • 使用序列工具栏中的 Studio 按钮

Studio 用于处理数据。

单击类别栏:

- 查看/编辑**进样列表**
- 查看/编辑**仪器方法**
- 动态**复核和处理数据**, 例如: 色谱积分, 输入校准数据, 检查校准曲线
- **报告结果**
- 创建/查看**电子报告**
- 使用**光谱库**



**提示:** **快速入门指南**将逐步描述所有的基本工作流程, 并提供说明。

**术语表**提供有快速参考信息。

### 服务管理器



启动: • 双击 Windows 任务栏通知区域中的图标 • 开始 > 所有程序 > Chromeleon 7 > 服务管理器

服务管理器可用于监视 Chromeleon 的服务组件。通过服务管理器, 用户可以:

- 启动/停止**仪器控制器服务**
- 启动**仪器配置管理器**



## Chromeleon 对象

**文件夹:** 用于存储对象。文件夹可帮助用户在数据仓中组织数据

**查询:** 数据仓搜索功能, 用于寻找符合指定条件的数据

**序列:** 归属相同的**进样**集合

**仪器方法:** 仪器方法是在色谱分析过程中仪器执行的时控命令组

**处理方法:** 用于评估色谱图的参数集。包括色谱峰检测和校准的参数

**报告模板:** 类似电子表格的文件, 用于定义如何打印或导出数据。将模板应用至序列用于查看、打印或导出结果后, 所得输出称为报告

**视图设置:** 定义数据在屏幕上的显示方式。包括交互结果表、色谱图、校准曲线等的设置

**电子报告:** 序列结果的电子快照

**光谱库:** 用于色谱峰识别的光谱集

**注意:** Chromeleon 中的基本数据单元是**序列**。

序列包含重新创建结果所必需的全部数据和元数据。

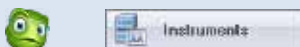
## 使用 eWorkflow 生成并开始序列

### 使用任何 eWorkflow 开始分析



1. 在 **Console** 中，单击 **eWorkflow** 类别
2. 在 **导航窗格** 中，单击选择的 **eWorkflow**
3. 在 **工作区** 中，单击选择的 **仪器**
4. 在 **eWorkflow** 工具栏（仪器列表上方），单击 **启动**

### 使用特定仪器的 eWorkflow 开始分析



1. 在 **Console** 中，单击 **仪器** 类别
2. 在 **导航窗格** 上，选择 **仪器**
3. 在 **ePanel** 工具栏（ePanel 上方）中，单击 **启动 eWorkflow** 按钮 (Launch eWorkflow)
4. 选择您所选择的 **eWorkflow**

### 编辑 eWorkflow



1. 在 **Console** 中，单击 **eWorkflow** 类别
2. 在 **导航窗格** 中，单击选择的 **eWorkflow**
3. 在 **eWorkflow** 工具栏（仪器列表上方），单击 **编辑**
4. 根据需要修改 **eWorkflow**

5. 按照向导，提供必须输入的内容
  6. 查看/编辑向导生成的序列
  7. 在序列工具栏（进样列表上方）中，单击 **开始**
- 现在可以 → 从仪器类别中监视正在运行的序列。

## 直接生成方法和序列



1. 在 **Console** 中，单击 **数据** 类别
2. 在 **菜单** 中，单击 **创建**

**Create**

### 创建方法

3. 按照各自向导中的步骤创建 **仪器方法**、**处理方法**、**视图设置** 和 **报告模板**

### 创建并开始序列

3. 选择 **序列**
4. 按照向导，提供必须输入的内容
5. 查看/编辑生成的序列
6. 在序列工具栏（进样列表上方）中，单击 **开始**

## 控制仪器



1. 在 **Console** 中，单击 **仪器** 类别
2. 在 **导航窗格** 中，单击选择的 **仪器**

### 通过 ePanel 直接控制/监视



3. 在 **工作区** 中，单击 **选项卡**，查看相应的 **ePanel**
4. 使用 **ePanel** 上的 **控制** 监控并控制仪器

### 控制队列



3. 在 **工作区**，单击 **队列选项卡** 查看当前等待分析的序列列表
4. 现在可以对序列进行 **添加/移除/排序**，并开始/停止队列

### 检查仪器审计追踪



3. 在 **工作区** 中，单击 **审计选项卡** 查看 Chromeleon 发送的所有命令和从仪器接收的参数
4. 用户可根据偏好对命令进行 **分组、筛选和搜索**

查看数据		
  <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 在 <b>Studio</b> 中打开序列</li> <li>2. 单击<b>数据处理</b>类别</li> <li>3. 单击<b>数据处理主页</b>功能区选项卡</li> </ol>		
<b>查看色谱图和结果</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>4. <ul style="list-style-type: none"> <li>• 使用功能区<b>导航</b>组中的<b>上一步</b>和<b>下一步</b>按钮</li> <li>• 在<b>导航窗格</b>中，选择进样和/或要评估的通道</li> </ul> </li> </ol>	<b>调整视图</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>4. <ul style="list-style-type: none"> <li>• 使用<b>窗格</b>组中的按钮显示/隐藏不同的窗格，以便显示所需信息</li> <li>• 从设计用于特定任务的<b>预置</b>库中选择其中一个窗格预置组</li> </ul> </li> </ol>	
数据处理 — 峰检测		
  <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 在 <b>Studio</b> 中打开序列</li> <li>2. 单击<b>数据处理</b>类别</li> <li>3. 单击<b>色谱图工具/处理</b>功能区选项卡</li> </ol>		
<b>设置检测参数</b>  <ol style="list-style-type: none"> <li>4. 在<b>检测参数</b>组中选择 <b>Cobra</b> 向导</li> <li>5. 按照向导步骤定义<b>积分范围</b>、<b>基线噪声范围</b>、<b>Cobra 平滑宽度</b>和<b>最小峰面积</b></li> </ol>	<b>对未分离峰进行积分</b>  <ol style="list-style-type: none"> <li>4. 在<b>检测参数</b>组中选择 <b>SmartPeaks</b>（注意鼠标光标会发生变化）</li> <li>5. 在色谱图中选择含有未分离峰的区域</li> <li>6. 选择所需积分</li> </ol>	<b>修改检测参数</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>4. 激活<b>检测参数</b>组中的<b>检测参数</b>选项</li> <li>5. 要移动检测参数，请选中参数标签或检测参数线，并将其移动到所需位置</li> <li>6. 要编辑参数值，请双击标签并进行更改</li> </ol>
数据处理 — 色谱峰识别		
  <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 在 <b>Studio</b> 中打开序列</li> <li>2. 单击<b>数据处理</b>类别</li> <li>3. 单击<b>色谱图工具/处理</b>功能区选项卡</li> <li>4. 激活<b>组分表</b>组中的<b>色谱峰窗口</b>选项</li> </ol>		
<b>创建组分表</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>5. 在<b>组分表</b>组中选择<b>组分表向导</b></li> <li>6. 按照向导定义<b>时间范围</b>和<b>峰筛选</b></li> <li>7. 在<b>复核</b>阶段向表格中输入组分名称或单独添加</li> </ol>	<b>分配各个峰</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>5. 激活<b>组分表</b>组中的<b>添加组分</b>选项</li> <li>6. 在峰附近拖出一个矩形，并将其添加到组分表</li> <li>7. 在色谱图中双击<b>色谱峰窗口</b>，并输入组分名称</li> </ol>	<b>更新保留时间</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>5. <ul style="list-style-type: none"> <li>• 在色谱图中用鼠标左键选中<b>色谱峰窗口</b>，并将其移至正确位置</li> <li>• 选中其中一个<b>定界符</b>以扩展或缩小色谱峰窗口</li> </ul> </li> </ol>

## 数据处理 — 校准



1. 在 **Studio** 中打开序列

### 定义标准品和校准级别



2. 单击**进样列表**类别
3. 为所有校准标准品分配进样类型 — **校准标准品**
4. 对于每一个校准标准品，单击**级别**字段，然后：
  - 分配合适的级别，或者
  - 单击**新建级别...**，创建新的校准级别

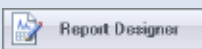
### 输入标准品含量



2. 单击**数据处理**类别
3. 单击**数据处理主页**功能区选项卡
4. 激活**窗格**组中的**处理方法**
5. 在**处理方法**中选择**组分表\***选项卡
6. 在**校准级别**列中更新浓度

\* 处理方法可能具有不同的布局，由不同的选项卡和名称组成。因此，一些选项所在位置可能与此处描述有所不同。

## 报告



1. 在 **Studio** 中打开序列
2. 单击**报告设计器**类别

### 预览报告

3.
  - 在工作区中，单击**报告工作表**，预览并选择在**导航窗格**中要评估的进样和/或通道，或者
  - 从 **Studio 菜单**的**打印**区域中选择**打印预览**

### 打印/导出报告

3. 从 **Studio 菜单**中选择**打印或导出**
4. 选择**当前进样**，打印/导出一个进样的报告，或者选择**当前序列**，打印/导出整个序列的报告

### 编辑报告

3. 在工作区中，单击要更改的**对象**并进行必要的编辑

动态 Chromeleon 对象以红色三角形 (▲) 标示。包含文本或电子表格公式的单元格无此类标示。

## 功能键

F1	打开上下文相关帮助
F2	启用编辑模式（例如，更改表格单元格中的文本）
Ctrl + I	Console: 选择仪器类别
Ctrl + D	Console: 选择数据类别
Ctrl + W	Console: 选择 eWorkflow 类别
F4	Studio: 进入下一个进样
Shift+F4	Studio: 进入前一个进样
F9	向下填充: 使用当前单元格的内容向下填充列，直至该列最后一个单元格或所选区域的最后一个单元格
F10	Studio: 进入下一个通道
Shift+F10	Studio: 进入前一个通道
Ctrl + C	复制选中内容到剪贴板
Ctrl + V	将剪贴板内容粘贴到所选位置
ALT+TAB	在任务栏上的打开项之间切换，可用于在 Console 和 Studio 之间随意切换



更安全

**ThermoFisher**  
S C I E N T I F I C

更清洁

更健康

赛默飞致力于帮助您使世界变得

### 关于赛默飞世尔科技

赛默飞世尔科技（纽约证交所代码：TMO）是科学服务领域的世界领导者。公司年销售额 170 亿美元，在 50 个国家拥有员工约 50,000 人。我们的使命是帮助客户使世界更健康、更清洁、更安全。我们的产品和服务帮助客户加速生命科学领域的研究、解决在分析领域所遇到的复杂问题与挑战，促进医疗诊断发展、提高实验室生产力。借助于 Thermo Scientific、Life Technologies、Fisher Scientific 和 Unity™ Lab Services 四个首要品牌，我们将创新技术、便捷采购方案和实验室运营管理的整体解决方案相结合，为客户、股东和员工创造价值。

欲了解更多信息，请浏览公司网站：[www.thermofisher.com](http://www.thermofisher.com)

### 赛默飞世尔科技中国

赛默飞世尔科技进入中国已超过 30 年，在中国的总部设于上海，并在北京、广州、香港、台湾、成都、沈阳、西安、南京、武汉等地设立了分公司，员工人数超过 3800 名。为了满足中国市场的需求，现有 8 家工厂分别在上海、北京和苏州运营。我们在全中国共设立了 7 个应用开发中心，将世界级的前沿技术和产品带给国内客户，并提供应用开发与培训等多项服务；位于上海的中国创新中心结合国内市场的需求和国外先进技术，研发适合中国的技术和产品；我们拥有遍布全国的维修服务网点和特别成立的中国技术培训团队，在全国有超过 2000 名工程师提供售后服务。我们致力于帮助客户使世界更健康、更清洁、更安全。

欲了解更多信息，请登录 [www.thermofisher.cn](http://www.thermofisher.cn)

赛默飞世尔科技(中国)有限公司

免费服务热线：800 810 5118  
400 650 5118 (支持手机用户)

**ThermoFisher**  
S C I E N T I F I C