

HPLC 1100 ChemStation

高级操作培训

2011年11月19
日

授课教师

纪学海



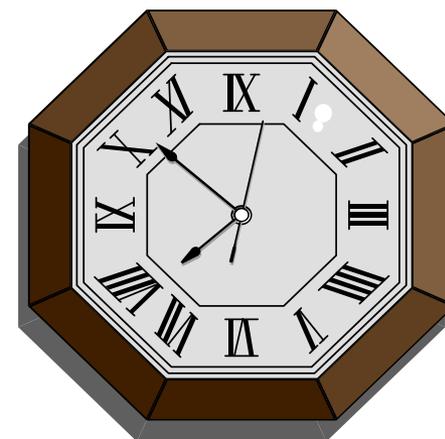
HPLC 1100 Advance操作培训日程安排

第一天 上午：**1** 课程简介及相互介绍
2 化学工作站各个工作界面介绍
3 完整方法的编辑、修改、存储及运行
4 HPLC 1100 仪器配置及参数设置

下午：**1** 数据分析参数设置
2 色谱图的优化处理
3 积分事件及手动积分的选择和应用
4 高级校正表的编辑和设置

第二天 上午：**1** 报告格式的选择及设定
2 光谱的提取、光谱库的建立及检索
3 色谱峰纯度检测
4 色谱条件的优化及色谱图的提取

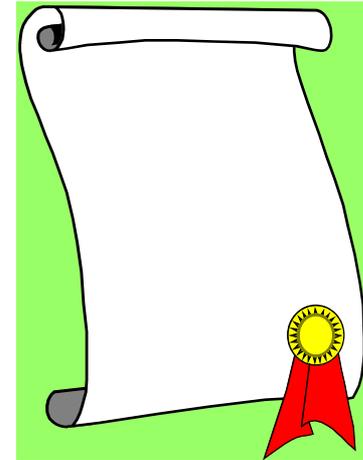
下午：**1** 序列参数的设置以及统计功能的使用
2 批处理功能的设置及应用



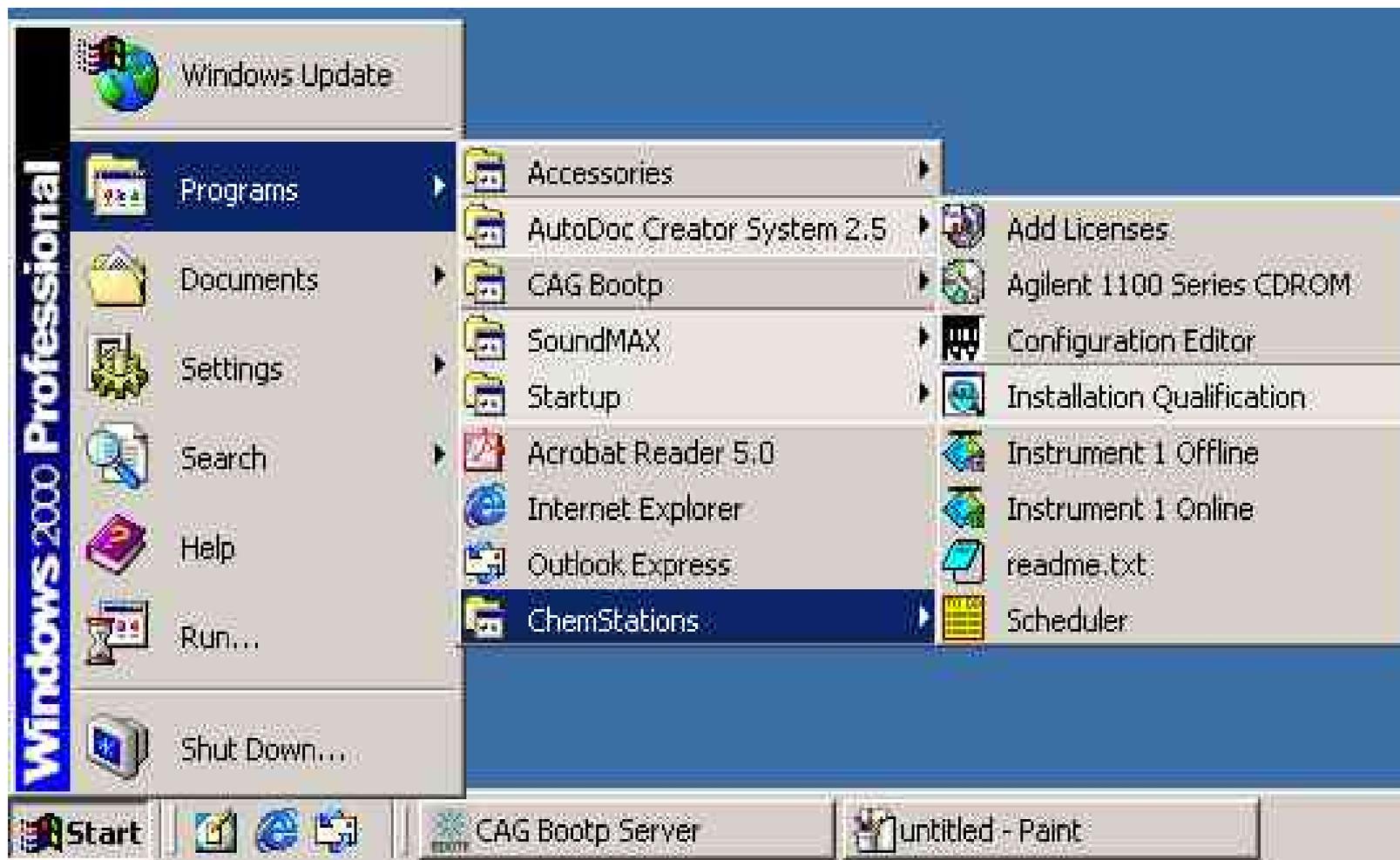
第三天 上午：**1** 个性化报告的设定与编辑
2 工作站故障诊断功能的应用
3 结业考试

结业午餐

下午：**1** 化学工作站的重新安装、配置及启动(选修)
2 发结业证
3 自由练习、讨论



第一章 化学工作站各个工作界面介绍



化学工作站各个工作界面的切换

切换工作界面



化学工作站Views菜单

The screenshot displays the 'Instrument 1 (online): Method & Run Control' window. The 'Views' menu is open, listing options such as '1 Method and Run Control', '2 Data Analysis', '3 Report Layout', '4 Verification (OQ/PV)', '5 Diagnosis', 'Show Top Toolbar', 'Show Status Toolbar', 'Reprocessing Copy', 'Change Access Level...', 'ChemStation Scheduler', 'Online Signals', 'Sampling Diagram', 'System Diagram', 'Instrument Actuals', 'Online Spectra', 'ChemStation Status', 'Command Line', 'Logbook', and 'Short Menu'. The 'Logbook' sub-menu is also visible, showing options like 'Current Logbook', 'Sequence Logbook', 'Open Logbook...', 'Save as...', 'Clear Logbook', and 'Print Logbook'. The main interface includes a 'Ready' status bar, a 'Start' button, a '5.00 µl' sampling diagram, a 'DAD' chromatogram, and a 'Logbook' table with parameters like 'Temp', 'Sig A', 'Sig B', 'Sig C', 'Sig D', 'Sig E', 'Ref', and 'Spectra'. A blue arrow points from the 'Logbook' menu item to the table, with the text '显示当前日记本, 察看错误信息等内容' (Display current logbook, check error information, etc.). Another blue arrow points from the 'Short Menu' menu item to the bottom of the window, with the text 'Full menu/short menu切换' (Full menu/short menu switch). The bottom of the window shows keyboard shortcuts: [F1=Help] [F3=Recall] [F5=StartRun] [F6=StartSeqRun] [F8=Stop] [F11=NextWindow].

化学工作站的Change Access Level功能

Instrument 1 (online): Method & Run Control

File: RunControl Instrument Method Sequence View Abort Help

Method and Run Control 444.M

Ready Last Run

Start Stop

5.00 μ l

bcvzb

Change Access Level: ChemStation

Access level: Manager

Operator name: LU

Password:

Prompt for access level at startup?
If not, the Manager level will automatically be enabled.

OK

Cancel

Help

Set Password

View

- 1 Method and Run Control
- 2 Data Analysis
- 3 Report Layout
- 4 Verification (OQ/PV)
- 5 Diagnosis

Reprocessing Ccopy

Change Access Level...

ChemStation Scheduler

Online Signals

- Sampling Diagram
- System Diagram

Instrument Actuals

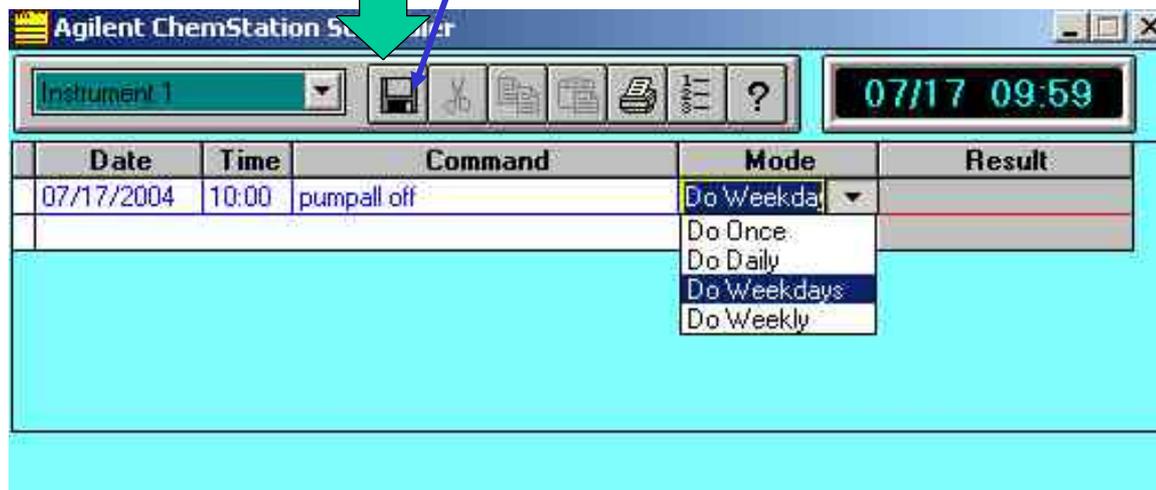
Online Spectra

如果要使用密码保护化学工作站，请选中此选项。

化学工作站Scheduler的使用



使用时要注意保存，否则工作站不予以执行。



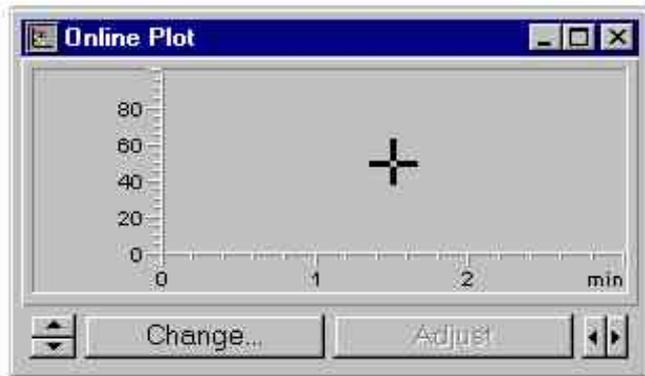
化学工作站Scheduler的使用

Date	Time	Command	Mode	Result
07/19/2004	10:00	pumpall off	Do Weekday	
07/17/2004	10:00	pumpall off	Do Weekday	Accepted
07/17/2004	10:01	standby	Do Once	Accepted
07/17/2004			Do Once	

Result栏中可以显示化学工作站执行**Command**的结果

选择在线信号

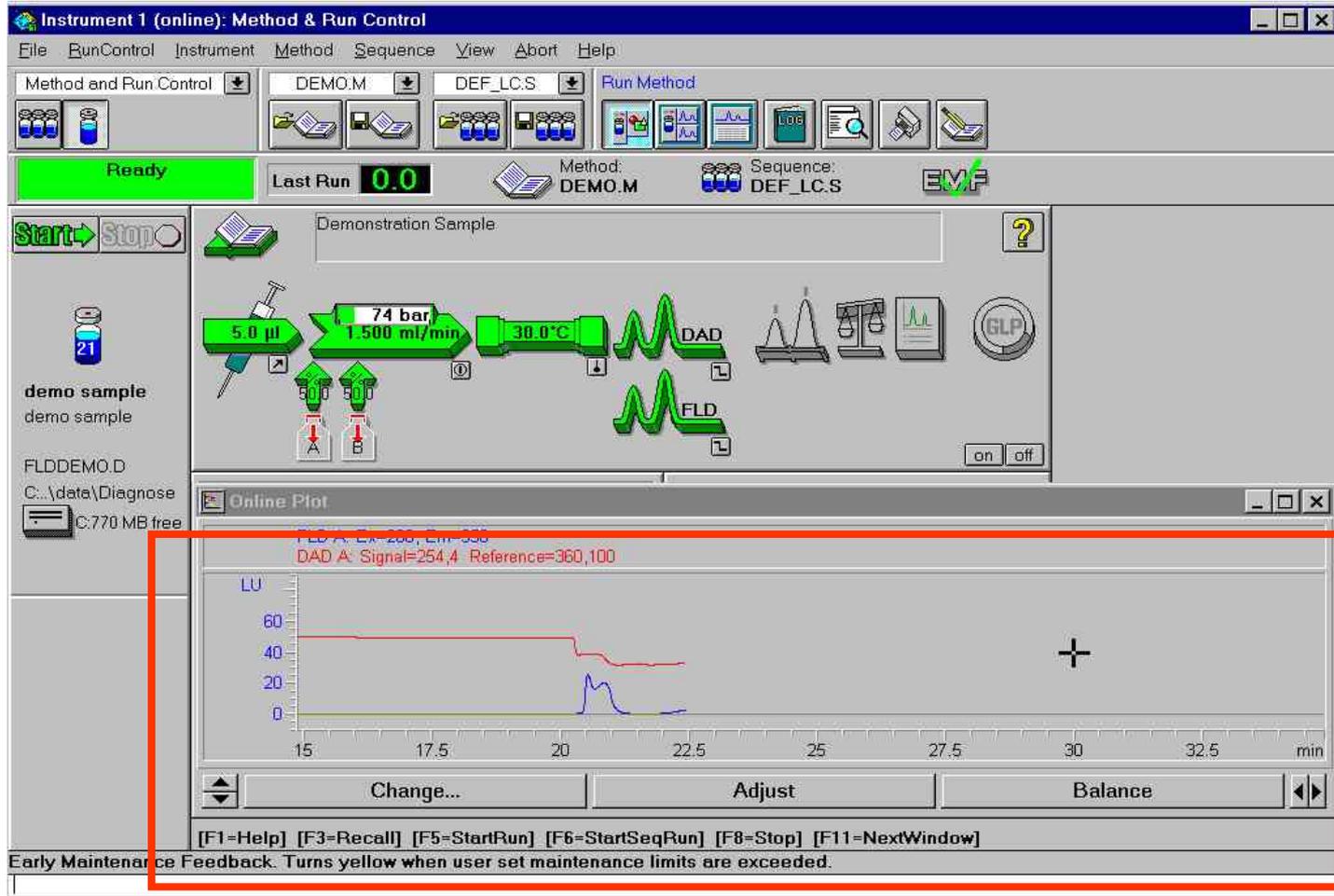
从 *View* 菜单, 选择 *Online Signals*, 单击 *Change*, 在 *Edit Signal Plot* 窗口中选择要监控的信号。



The Edit Signal Plot dialog box is divided into several sections:

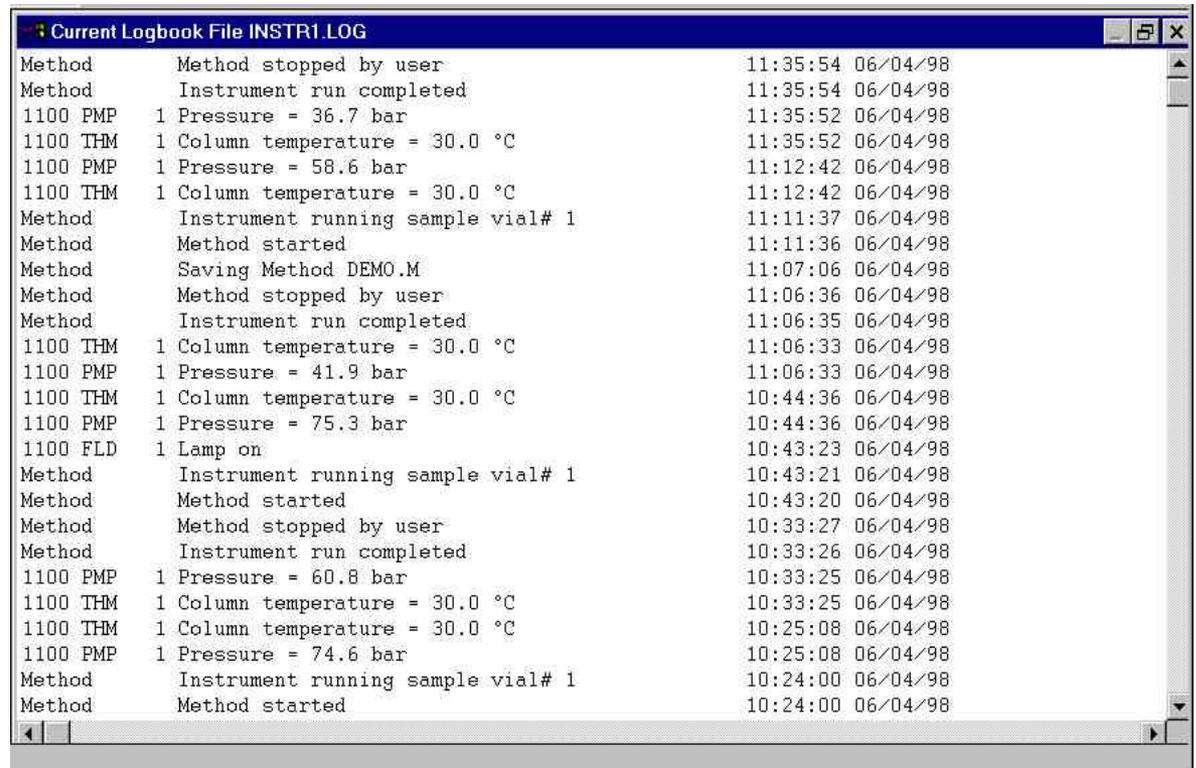
- Available Signals:** A list of signals including DAD B, DAD C, DAD D, DAD E, and Quaternary Pump parameters (Pressure, Flow, %A, %B).
- Selected Signals:** A list containing 'DAD A: Signal=250,100 Reference=360,100'.
- Window:** Includes 'x-axis range' (7 min), 'y-axis range' (100 mAU), and a 'draw zero line' checkbox.
- Method Settings:** Includes a 'Use method settings' checkbox.
- Buttons:** 'Add', 'Remove', 'Apply to Method', 'OK', 'Cancel', and 'Help'.

在线信号显示



查看Logbook

从View菜单选择Logbook，单击Current Logbook显示当前Logbook内容。

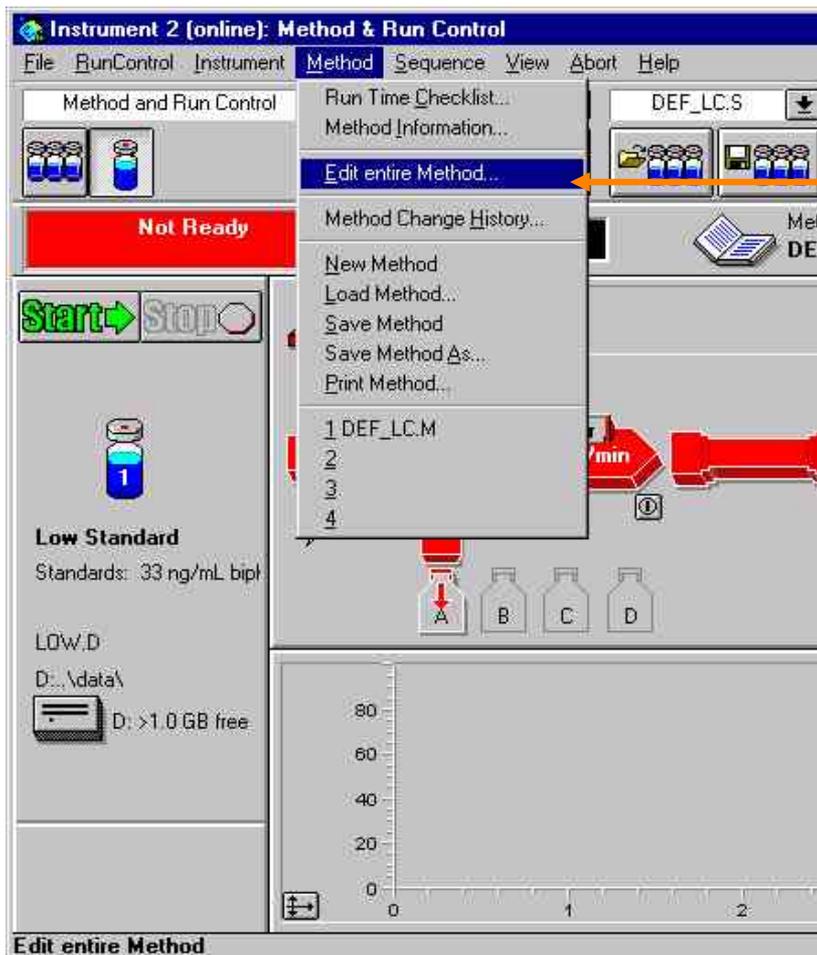


第二章 方法编辑、保存

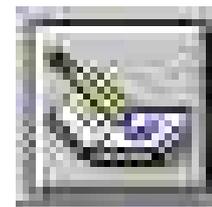
- 方法的概念: 方法是一个参数集, 它包括分析一个样品所需要的所有参数。
- 方法文件名: xxx.m。
- 方法的组成:
 - 方法信息(Method information)
 - 仪器参数及采集参数(Instrument/Acquisition)
 - 数据分析参数(Data Analysis)
 - 运行时间表(Run Time Checklist)



编辑一个完整的方法

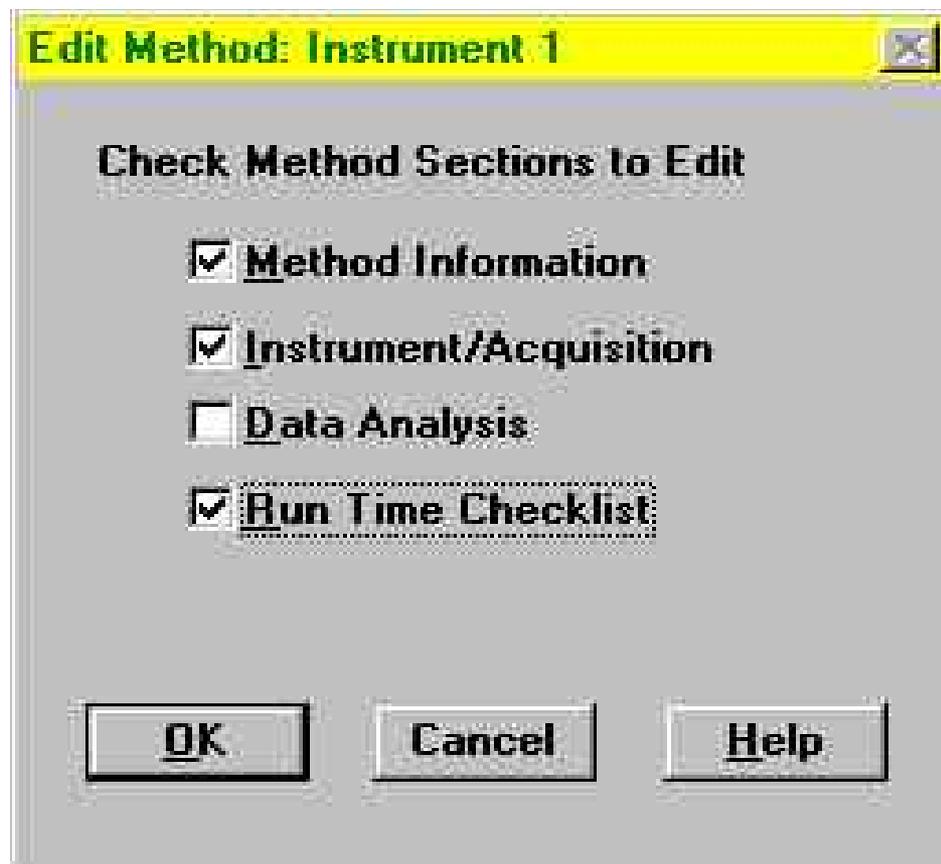


使用 *Edit Entire Method*
编辑一个完整的方法



单击图标，也可以开始
编辑一个完整的方法。

选择所要编辑的内容



方法信息 (Method Information)



泵的操作参数

Control

Flow: 1.500 ml/min

StopTime: 10.00 min

PostTime: Off min

Solvents

A: 35.0 % H2O

B: 65.0 % ACN

C: 0.0 %

D: 0.0 %

Pressure Limits

Max: 400 bar

Min: 10 bar

Timetable

	Time	%B	%C	%D	Flow	Max. Press.
1	8.00	100.0	0	0		
2	10.00	100.0	0	0		

Buttons: Insert, Append, Cut, Copy, Paste

Display: Timetable

Buttons: OK, Cancel, Help

包括：流量(Flow)，流动相组成(Solvents)，停止采集时间(Stop Time)，后运行时间(Post Time)，梯度编程(Timetable)，压力限制设定(Pressure Limits)等

标准自动进样器参数

Setup Injector : Instrument 1

Injection

Standard Injection Injection Volume: 5.0 μ l

Injection with Needle Wash Wash Vial: 0

Use Injector Program Total Lines: 0 Edit...

Optimization: none 0.00 min. after Injection

- none
- Overlap Injection Cycle
- Prefetch Sample Vial

Auxiliary

Draw Speed: 100 μ l/min

Eject Speed: 100 μ l/min

Draw Position: 0.0 mm

Store Temperature

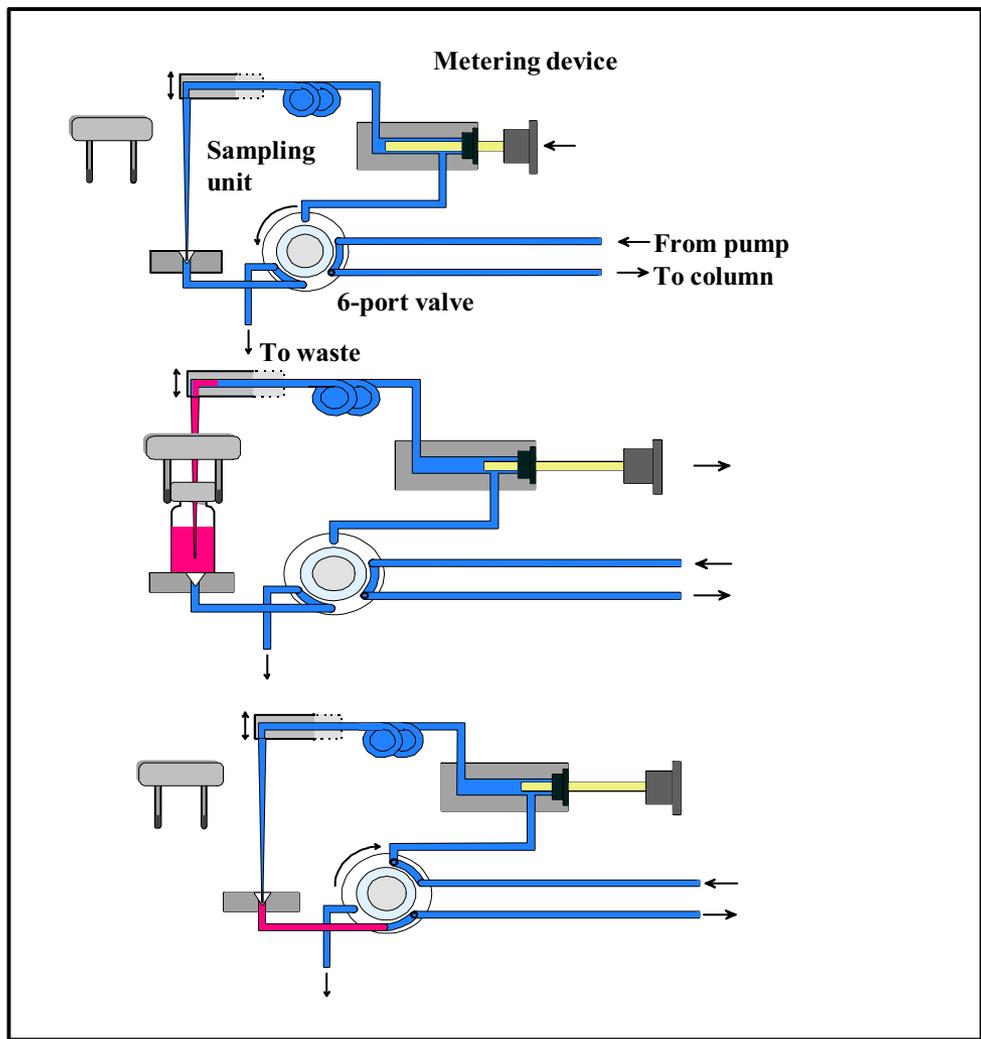
Time

Stoptime: as Pump no Limit min

Posttime: Off min

OK Cancel Help

标准进样过程原理示意图



准备位置

抓取样品瓶
吸取样品

进样和运行位置

标准自动进样器的程序进样

Set up Injector : Instrument 1

Injection

Standard Injection Injection Volume: 5.0 襖

Injection with Needle Wash Wash Vial: 0

Use Injector Program Total Lines: 10 Edit...

Optimization: none

Auxiliary

Draw Speed: 100 襖

Eject Speed: 100 襖

Draw Position: 0.0 ml

Store Temperature

OK

Injector Program : Instrument 1

#	Function	Wash Vial	Repeat
2	NEEDLE	WASH	10

Change
Insert
Append

Program Table:

#	Command
1	DRAW 5.0 襖 from sample
2	NEEDLE wash in vial 10, 3 times
3	DRAW 5.0 襖 from sample+1
4	NEEDLE wash in vial 11, 3 times
5	DRAW 5.0 襖 from sample
6	NEEDLE wash in vial 12, 3 times
7	MIX 20.0 襖 in seat, 5 times
8	EJECT 10.0 襖 into sample+2
9	WAIT 2.00 min
10	INJECT

OK Cancel Help

Sequence: DEF_IC.S

Wellplate自动进样器参数

Set up Injector : Instrument 1

Injection

Injection Volume: 5.0 μ l

Standard Injection

Injection with Needle Wash

Injection with Lowest Carry Over

Use Injector Program (0 lines)

Time

Stoptime: as Pump no Limit min

Posttime: Off min

High Throughput ★

Automatic Delay Volume Reduction

Enable Overlapped Injection

when Sample is flushed out

after 2.0 min

Minimized Carry Over

Needle Wash

in Flushport ★

Time: 1.0 sec

Location: Vial 1 repeat 1 times

Auxiliary

Draw Speed: 200.0 μ l/min

Eject Speed: 200.0 μ l/min

Draw Position: 0.0 mm

Equilibration Time: 2.0 sec

Sample Flush-Out Factor: 5.0 times Injection Vol.

Store Temperature

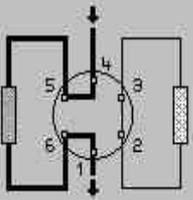
Vial/Well bottom sensing

柱温箱参数设置

Column Thermostat Method : Instrument 2

Temperature
 40 °C
 Not controlled

Time
Stoptime:
as Pump min
no Limit
Posttime:
Off min

Column Switching Valve
Column 1


Temperature (right)
 20.0 °C
 Not controlled
 Same as left

Timetable:

Line	Time	Column	Temp.(left)	Temp.(right)
1	5.50	Column 2		

Table Graphic

Store
 Temperature (left)
 Temperature (right)

Enable Analysis
 With any Temp.
 When Temperature is within Setpoint
+/- 0.8 °C

- 控温范围：低于室温10℃~80℃
- 两个单独的加热区
- 安装切换阀可以进行柱切换
- 可以容纳30 cm长色谱柱
- 安装柱识别可以自动记录进样次数

DAD检测器参数设置

The screenshot shows the 'DAD Signals: Instrument 2' dialog box. It is divided into several sections:

- Signals:** A table with columns for 'Store', 'Sample, Bw', and 'Reference, Bw'. It lists five signals (A-E) with their respective parameters.
- Time:** Fields for 'Stoptime' (set to 'as Pump no Limit') and 'Posttime' (set to 'Off').
- Required Lamps:** Checkboxes for 'UV' (checked) and 'Vis' (unchecked).
- Spectrum:** Fields for 'Store' (set to 'All'), 'Range' (190 to 400 nm), 'Step' (2.0 nm), and 'Threshold' (1.000 mAU).
- Peakwidth (Responsetime):** A dropdown menu set to '> 0.1 min (2 s)'. Below it are 'Autobalance' checkboxes for 'Prerun' (checked) and 'Postrun' (unchecked), and a 'Slit' dropdown set to '4 nm'.
- Margin for negative Absorbance:** A field set to '100 mAU'.
- Buttons:** 'Timetable ...', 'Total Lines: 1', 'OK', 'Cancel', and 'Help'.

Store	Sample, Bw	Reference, Bw
A: <input checked="" type="checkbox"/>	254 20	450 100 nm
B: <input checked="" type="checkbox"/>	230 20	360 100 nm
C: <input type="checkbox"/>	210 8	360 100 nm
D: <input type="checkbox"/>	230 16	360 100 nm
E: <input type="checkbox"/>	280 16	360 100 nm

- 可以选择存储 5 个信号
- 信号波长范围 191 - 949 nm
- 可变狭缝: 1, 2, 4, 8, 16 nm
- 可以时间编程
- 可以保存数张或所有光谱

DAD参数优化

Step and Slit:

Agilent 1100 DAD 狭缝宽度可以程序变化，变化步径1, 2, 4, 8, 16nm。如果样品浓度较高，而需要精细的光谱结构，建议使用1或2nm的狭缝宽度。如果样品浓度较稀，建议使用8或16nm宽度狭缝。采集样品的谱带宽度至少要与狭缝宽度一样。

Peak Width:

增加响应时间（峰宽）可以增加组成色谱信号中每个数据点的采集次数。因为检测器的噪音与采集次数平方根成反比，所以增加响应时间可以降低噪音。但增加响应时间（峰宽）会降低定量分析的重复性。一般对于精确的定量分析，一个色谱峰要求采集20个数据点。沿器峰宽的选取，沿器峰宽等于实际色谱峰的最窄峰宽。

Peak Width (min)	Response Time (sec)	Data Rate (Hz)
<0.01	0.1	20
>0.01	0.2	20
>0.03	0.5	10
>0.05	1.0	5
>0.10	2.0	2.5
>0.20	4.0	1.25
>0.40	8.0	0.62
>0.85	16.0	0.31

Sample Signal and Reference Signal:

设置样品吸收波长与参比波长遵从下列规则：

- 样品吸收波长选择在样品的最大吸收波长，而且在此吸收波长下没有流动相吸收的干扰。
- 选择样品信号的谱带宽度应覆盖样品吸收谱带的半峰宽（假设样品吸收谱带为高斯峰）。
- 参比吸收谱带应选择在尽量靠近样品吸收谱带，而且在此区域没有或尽量低的吸收强度。
- 参比峰谱带宽度要大于或等于样品谱带宽度。

注意：增加样品谱带宽度，会降低样品的吸收强度，但会降低噪音。

选择合适的参比吸收波长可以减小梯度洗脱过程中的基线漂移。

Peak Supression (峰抑制) :

DAD检测器一个非常有趣的功能是进行峰抑制。例如有两个样品没有分开，共同洗脱出来，可以设置某一个样品的等吸收波长为参比波长，则被设为参比峰的样品被抑制，而另一个样品峰被分离。不过，此样品峰的吸收强度要损失**10%~30%**。

VWD检测器参数设置

The image shows two overlapping software windows from Agilent Technologies. The background window is titled "VWD Signal : Instrument 1" and contains several configuration panels:

- Signal:** Wavelength: 254 nm; Peakwidth (Responsetime): > 0.1 min (2 s)
- Time:** Stoptime: as Pump no Limit min; Posttime: Off min
- Analog Output:** Zero Offset: 5 %; Attenuation: 1000 mAU
- Timetable:** A table with columns for Line, Time, Wavelength, Balance, and Scan. A blue star is placed over the "Time" column header.
- Store additionally:** Signal w/o Reference (unchecked); Reference only (unchecked)
- Autobalance:** Prerun (checked); Postrun (unchecked)
- Special Setpoints:** A "Setup ..." button.

The foreground window is titled "VWD Special Setpoints : Instrument 1" and contains:

- Margin for negative Absorbance: 100 mAU
- Signal Polarity: Positive (selected) Negative (unselected). A blue star is placed over the "Negative" radio button.
- Enable analysis when lamp is off (checked). A blue star is placed over the checkbox.
- Scan Range: 190 to 400 nm; Step: 2 nm
- Buttons: Restore Defaults, OK, Cancel, Help.

A large green arrow points from the "Special Setpoints" window towards the "OK" button of the "VWD Signal" window.

运行时间表(Run Time Checklist)

Run Time Checklist: Instrument 2

Check Method Sections to Run

- Pre-Run Command / Macro
- Data Acquisition
- Standard Data Analysis
- Customized Data Analysis Macro
- Save GLP Data
- Post-Run Command / Macro
processexcelfile "hpestd00.xls"

Save Method with Data

OK Cancel Help

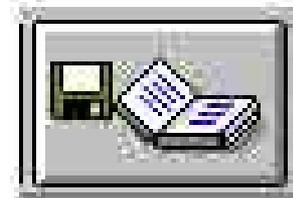
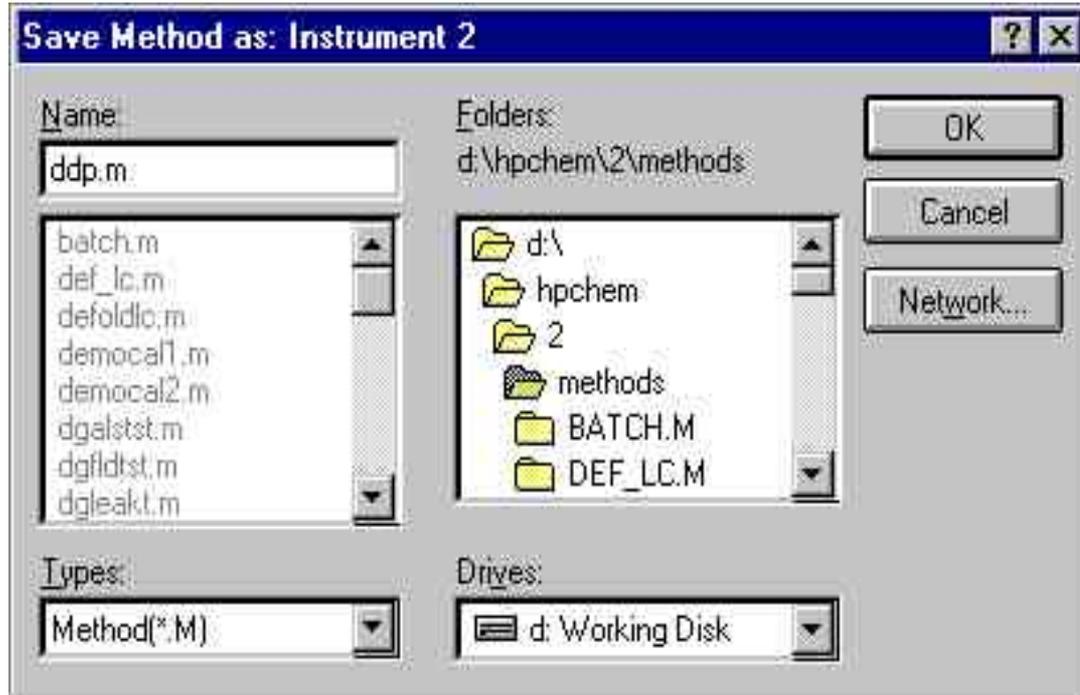
选择在方法中要执行的项目

可以选择保存GLP数据

可以将方法和数据保存在一起

存储方法

从Method菜单选择*Save Method / Save Method as*或从存贮方法工具图标存贮方法。



单击本图标可以保存方法，务必注意不要发生方法覆盖、丢失

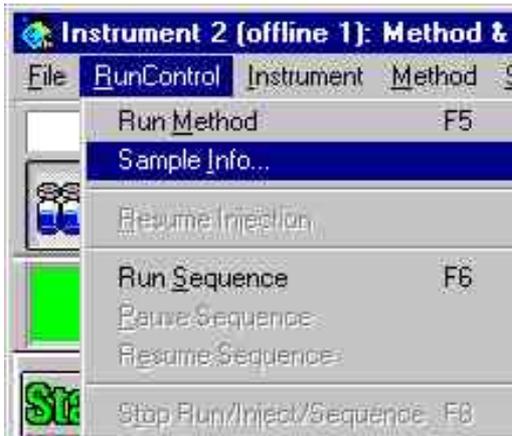
运行方法

要分析单个样品，先从RunControl菜单选择 *Sample Info...*，输入样品信息。

样品信息包括：

操作者姓名(Operator Name)，存盘数据文件(Data File)，样品参数(Sample Parameters)
样品评述(comment)。

然后运行方法(*Run Method*)。



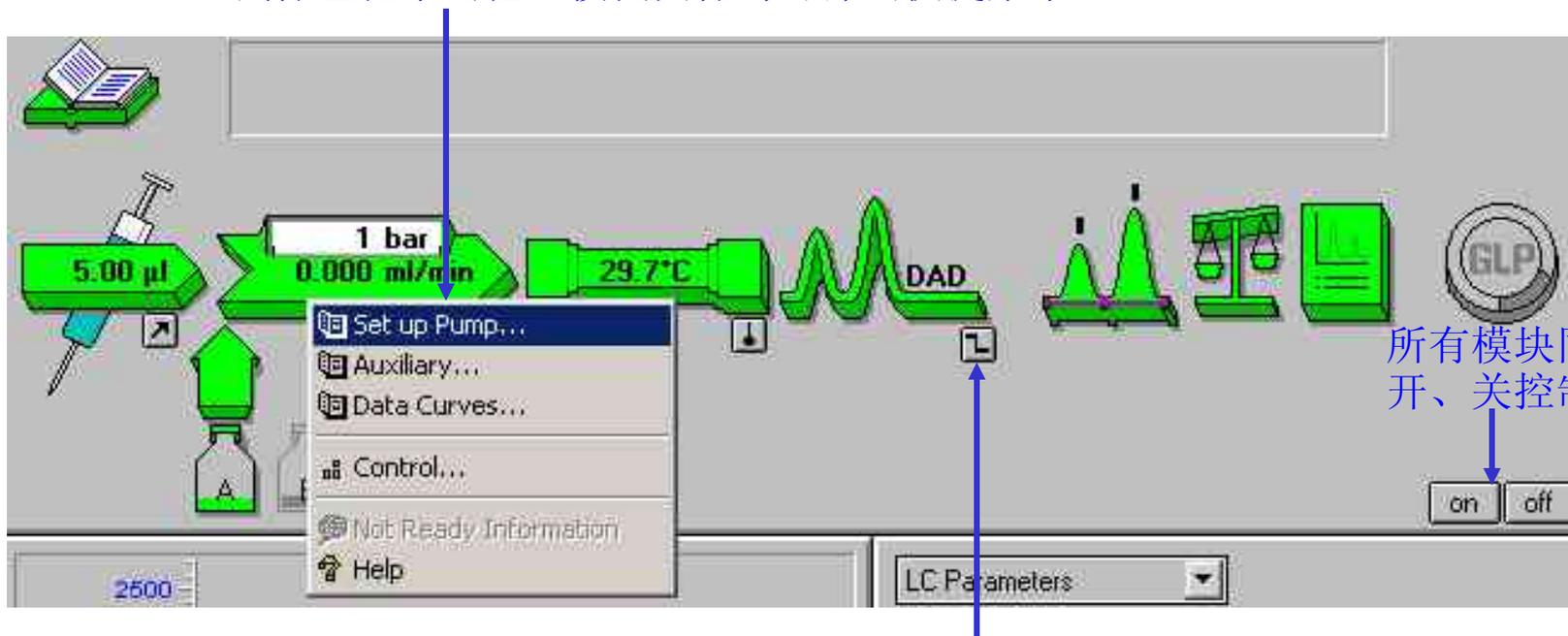
The image shows a screenshot of the 'Sample Info: Instrument 2' dialog box. The dialog box is titled 'Sample Info: Instrument 2' and has a close button (X) in the top right corner. It contains several fields and sections:

- Operator Name:** Perkins
- Data File:**
 - Prefix/Counter Manual
 - Filename: low.d
 - Subdirectory: 06_06_98
 - Path: D:\HPCHEM\2\DATA\
- Sample Parameters:**
 - Vial: 1 (blank run if no entry)
 - Sample Name: Low Standard
 - Sample Amount: 0
 - Multiplier: 1
 - ISTD Amount: 0
 - Dilution: 1
- Comment:**
 - Standards: 33 ng/mL biphenyl
 - 83 ng/mL o-terphenyl

At the bottom of the dialog box, there are four buttons: 'Run Method', 'OK', 'Cancel', and 'Help'.

用户图形友好界面(GUI)

鼠标左键单击任一模块图标均可弹出快捷菜单



所有模块同时开、关控制

使用鼠标左键单击各个模块右下角图标均可对该模块进行控制：开、关或实现基线调零等功能。

用户图形友好界面——各个模块的控制

The screenshot displays the 'Pump Control: Instrument 1' dialog box. The background interface shows a virtual laboratory setup with a syringe (5.00 µl), a flow rate of 0.000 ml/min at 1 bar, and a bottle labeled 'A'. A menu is open with 'Control...' selected, and a green arrow points to the dialog box.

Pump Control: Instrument 1

Pump

- On
- Off
- Standby

Error method

- Take current method

Automatic Turn On

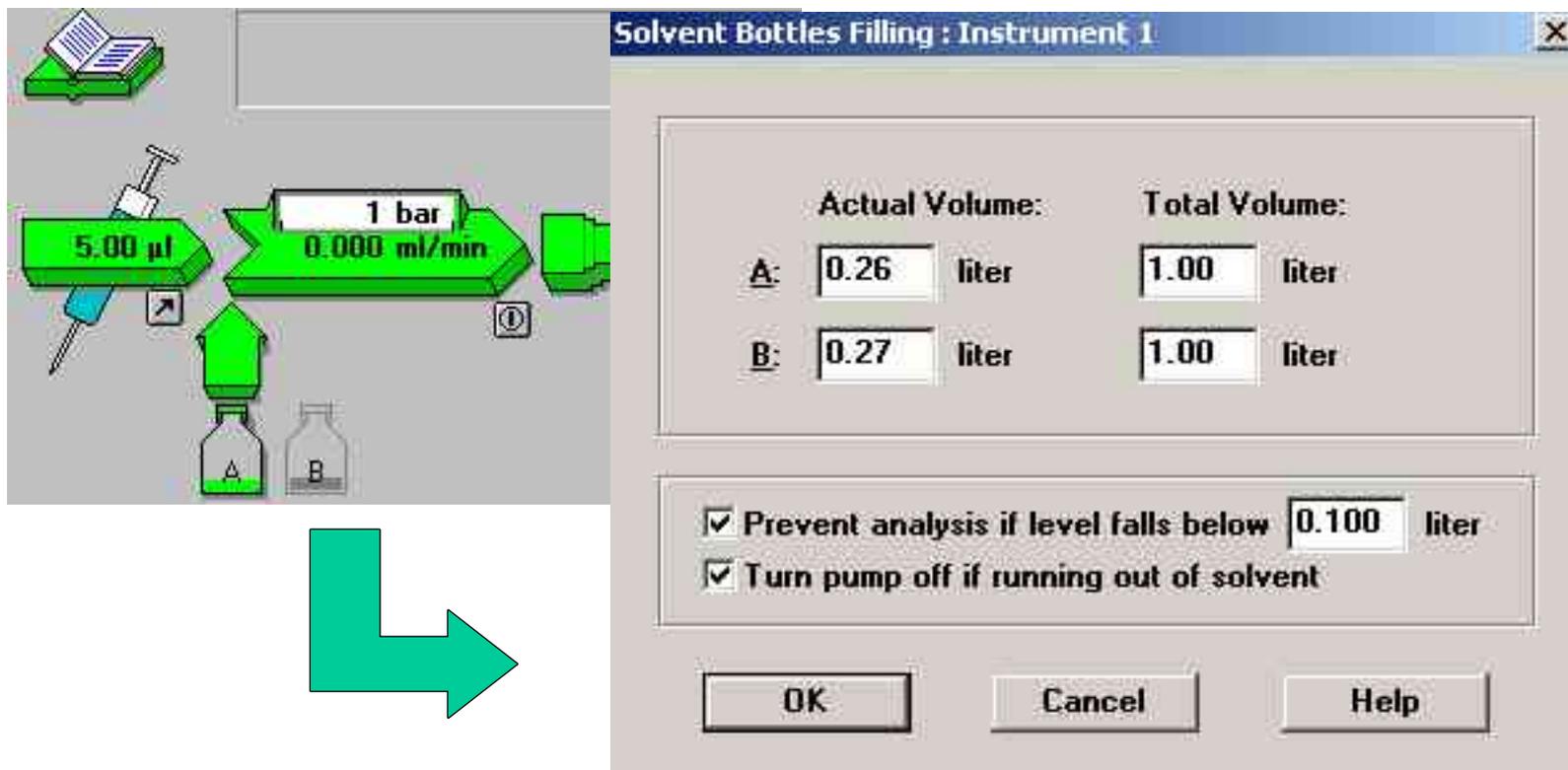
- Turn pump on at:

Date: *mm/d/yyyy*

Time: *hh:mm:ss>*

OK **Cancel** **Help**

用户图形界面——溶剂瓶的填充量



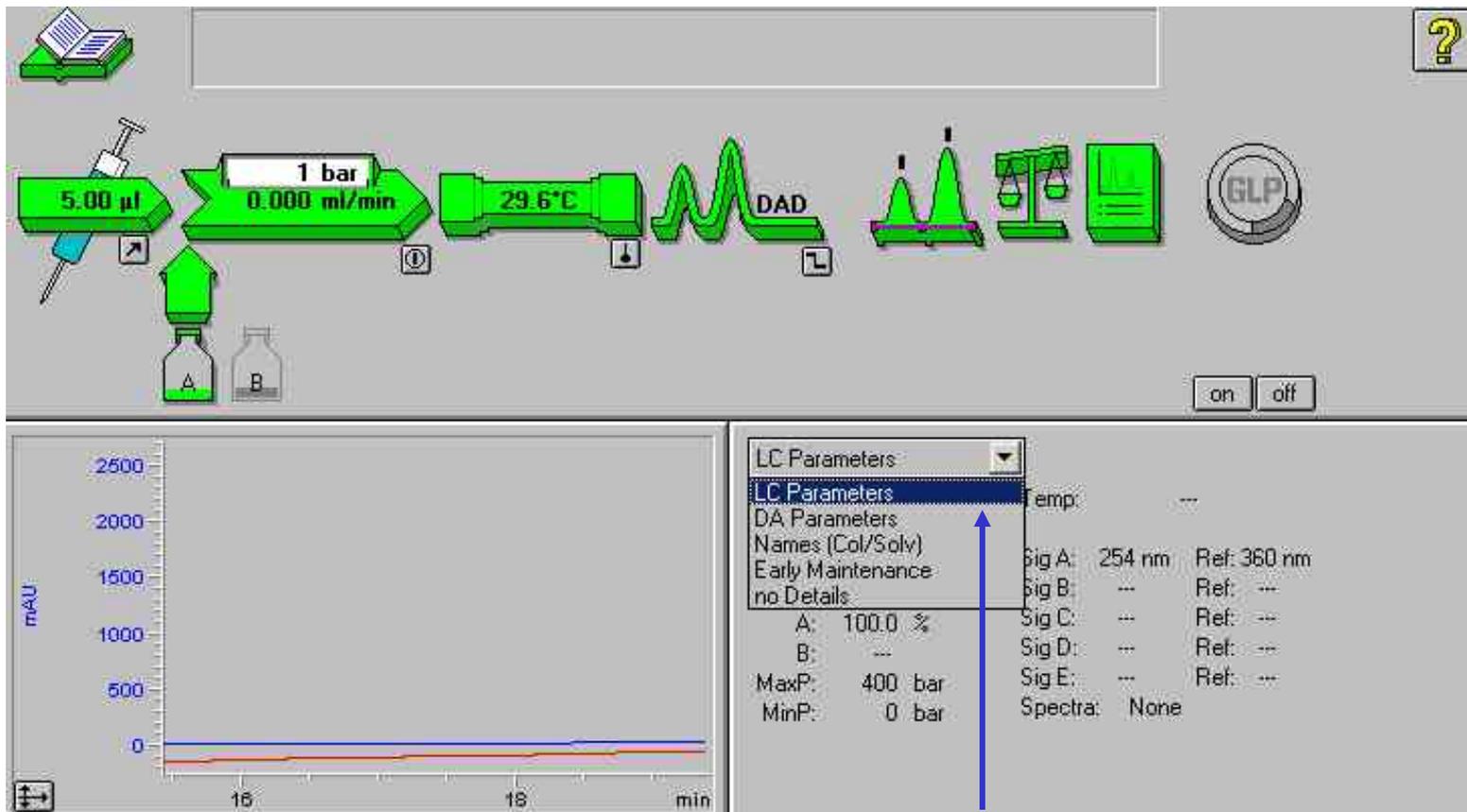
Solvent Bottles Filling : Instrument 1

	Actual Volume:	Total Volume:
A:	<input type="text" value="0.26"/> liter	<input type="text" value="1.00"/> liter
B:	<input type="text" value="0.27"/> liter	<input type="text" value="1.00"/> liter

Prevent analysis if level falls below liter

Turn pump off if running out of solvent

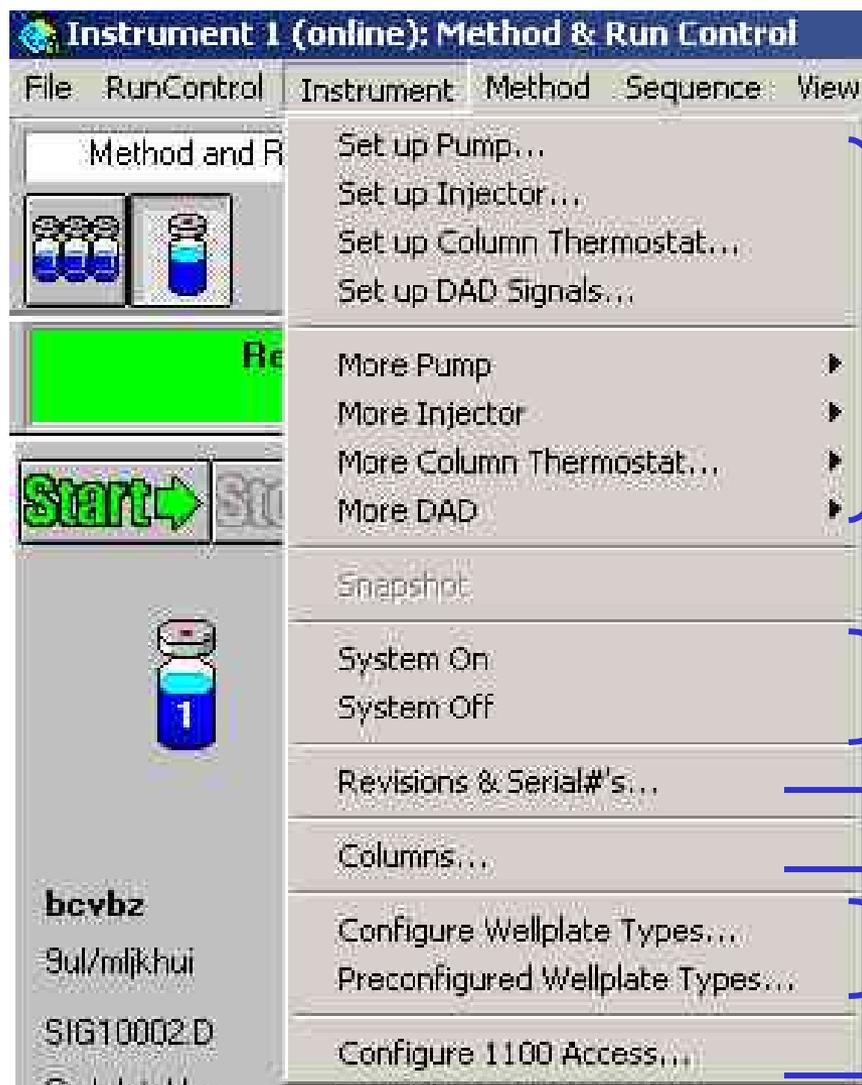
用户图形友好界面——各种参数的显示



点击下拉菜单，可以分别显示各种所需的参数：

LC采集参数、数据分析参数等，且便于用户改动。

Instrument菜单简介



设置各个模块的参数

开启、关闭整个系统

查看仪器 **Firmware** 及序列号

查看、输入色谱柱信息

使用了 **Wellplate** 自动进样器才出现该菜单

对化学工作站进行仪器配置

泵的辅助功能

选择**Instrument** → **More Pump** → **Auxiliary...**菜单，即可弹出下图窗口。

Pump Auxiliary : Instrument 1

Maximum Flow Gradient
100.0 ml/min per minute

Minimum Stroke
Channel A: Auto μl
Channel B: Auto μl

Compressibility
Channel A: 50 $\times 10^{-6}$ /bar
Channel B: 115 $\times 10^{-6}$ /bar

OK Cancel Help

在该窗口可以设置泵的最大升流速率、泵冲程大小以及设置溶剂的压缩补偿因子。

自动进样器的扩展功能

The image shows a software interface with a menu on the left and a dialog box on the right. The menu path is: [online]: Method & Run Control > Instrument > Method Sequence > Set up Injector... > More Injector > Configuration... A green arrow points from the 'Configuration...' option in the sub-menu to the 'Injector Configuration: Instrument 1' dialog box.

Injector Configuration: Instrument 1

Volumes

- Syringe: 100.0 µl
- Seat Capillary: 2.3 µl
- Max. Inj. Volume: 100 µl
- Multiple Draw: disabled

external Contacts

not installed

use BCD port for

- Vial Number
- Binary Output

Trays

A: 100 Vials

Buttons: OK, Cancel, Help

Menu items (from top to bottom):
Set up Pump...
Set up Injector...
Set up Column Thermostat...
Set up DAD Signals...
More Pump
More Injector (selected) > Contacts...
More Column Thermostat... > Configuration... (highlighted with green arrow)
More DAD > Reset Injector
Snapshot
System On
Gripper Home
Release Vial

色谱柱信息的输入

(online): MetEdit Column Identification Modules: Instrument 1

#	Position	Description	Batch#	Serial#	Product#	# Injections	Max. p [bar]	Max. T [°C]	Max. pH	Length	Diameter	Size	Void [ml]
1	Right	ZORBAX Eclipse	B03018	USRK032464	993967-906	41	350	60	9.0	150.0	4.6	5	2.00

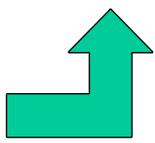
Instrument

- Set up Pump
- Set up Inje
- Set up Colu
- Set up DAD
- More Pump
- More Inject
- More Colum
- More DAD
- Snapshot
- System On
- System Off
- Revisions & Serial#'s...
- Columns...**

Edit Columns: Instrument 1

Insert Append Delete Print OK Cancel

#	Installed	Description	Batch#	Serial#	Product#	Max. p [bar]	Max. T [°C]	Max. pH	Length	Diameter	Size	Void Unit	Comment
1	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	
2	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	
3	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	
4	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	
5	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	
6	no	ODS Hypersil				0	0	0.0	100.0	2.1	5	68.00 %	




VWD停泵扫描采集光谱

使用VWD停泵扫描的功能，可以采集样品的吸收光谱，主要操作步骤如下：

- 1.在Online工作站界面的View菜单下打开VWD Scans窗口；
- 2.按照正常的进样方式采集样品色谱数据，并保证能够在Online Signal窗口中观测到色谱信号；
- 3.进样后，色谱图上出现基线时，扫描空白吸收光谱
在Instrument菜单下，选择More VWD中的Blank Scan
- 4.色谱图上出现色谱峰时，扫描样品吸收光谱
在Instrument菜单下，选择More VWD中的Sample Scan
此时得到的是自动扣除空白吸收后的样品吸收光谱。

可变波长检测器VWD的停泵扫描功能

The screenshot displays the 'Instrument 1 (online): Method & Run Control' window. The 'View' menu is open, showing various options. The 'VWD Scans' option is highlighted in blue. The interface includes a toolbar with icons for vials and a document, a status bar showing 'Ready' and 'Last Run', a central diagram of the instrument with flow rates (0 bar, 0.000 ml/min) and a syringe icon, and an 'Online Plot' section at the bottom showing 'VWD A: Absorbance at 254 nm' with a scale of mAU and a value of 120.

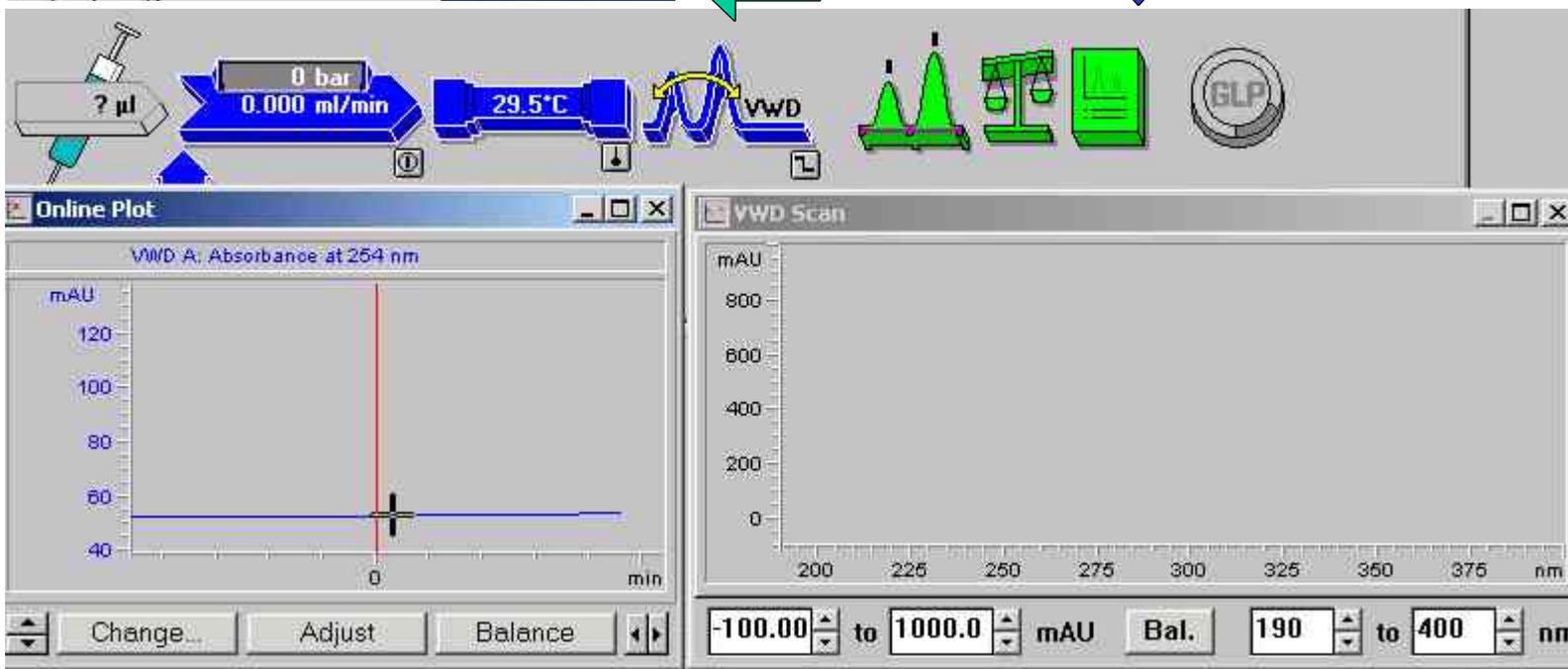
进样之前选择**VWD Scans** 菜单，打开**VWD**光谱扫描窗口



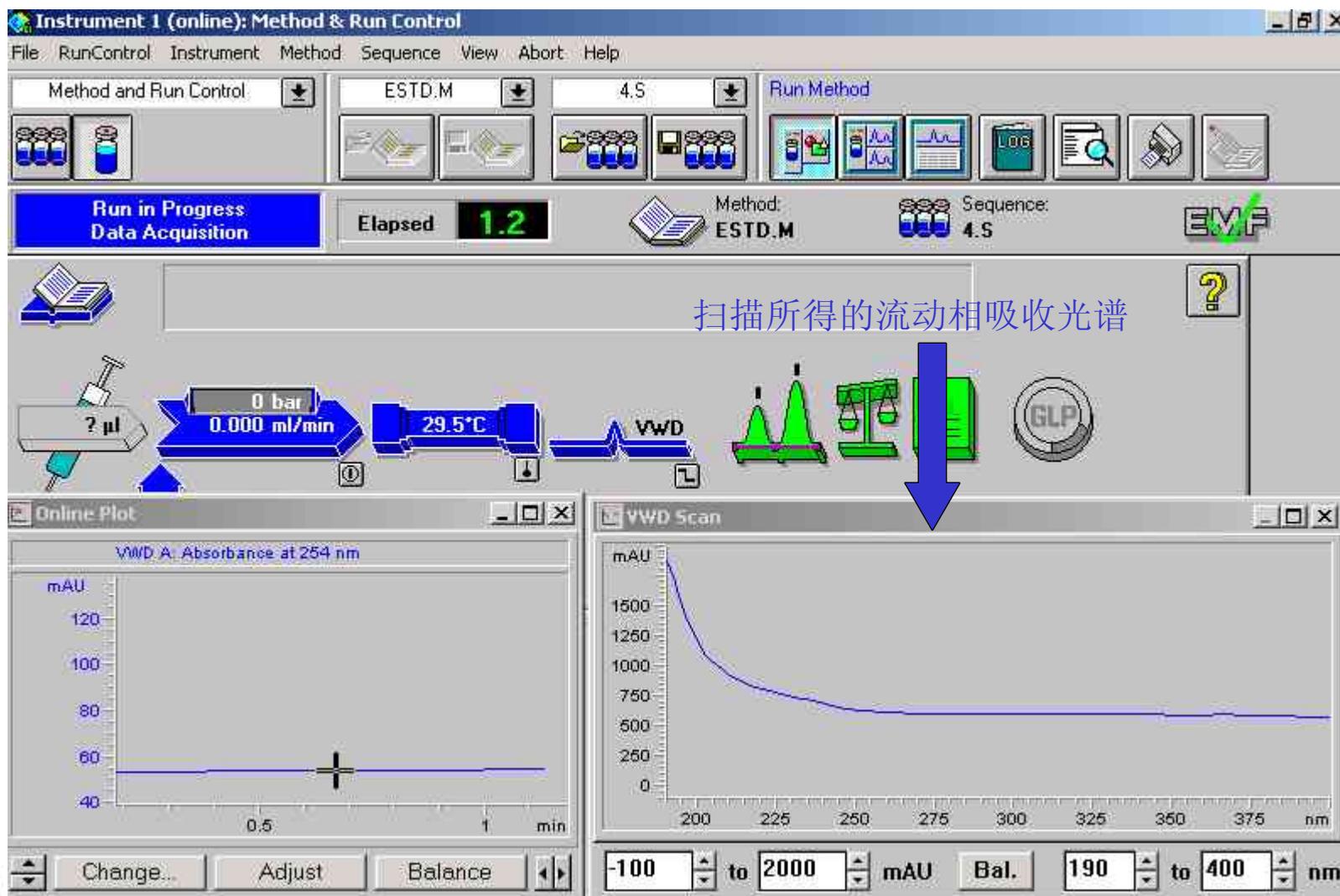
可变波长检测器VWD的停泵扫描功能



进样后，流动相流经流通池，给出色谱基线信号时，点击**More VWD**菜单中的**Blank Scan**，扫描空白流动相的吸收光谱，如下图所示。



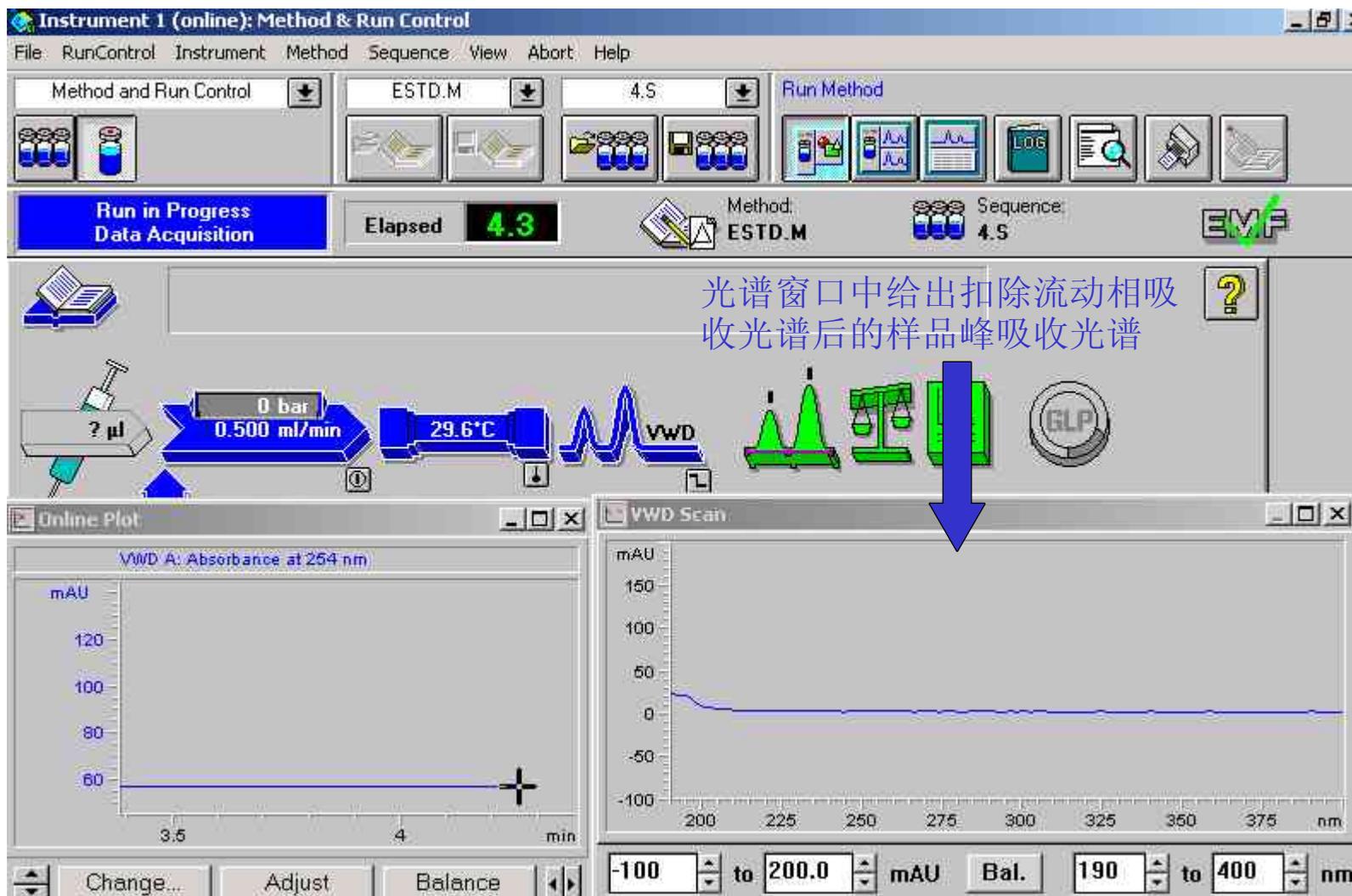
可变波长检测器VWD的停泵扫描功能



可变波长检测器VWD的停泵扫描功能

The screenshot displays the 'Instrument 1 (online): Method & Run Control' software interface. The 'Method and Run Control' menu is open, showing options like 'Set up Pump...', 'Set up Column Thermostat...', and 'Set up VWD Signal...'. The 'More VWD' option is selected, leading to a sub-menu with 'Control...', 'Sample Scan', and 'Blank Scan'. A blue arrow points to the 'Sample Scan' option. A text overlay in Chinese reads: '出现色谱峰时，点击 Sample Scan，扫描样品峰的吸收光谱' (When a chromatogram peak appears, click Sample Scan to scan the absorption spectrum of the sample peak). Below the menu, there are icons for 'VWD' and 'GLP'. The 'Online Plot' window shows 'VWD A: Absorbance at 254 nm' with a y-axis in mAU (0 to 120) and an x-axis in minutes (0 to 3). The 'VWD Scan' window shows a graph of absorbance (mAU) versus wavelength (nm) from 200 to 375 nm, with a y-axis from 0 to 1500. The graph shows a sharp peak at approximately 200 nm and a relatively flat baseline thereafter. The 'VWD Scan' window also has controls for mAU range (-100 to 2000) and wavelength range (190 to 400 nm).

可变波长检测器VWD的停泵扫描功能



第三章 谱图优化

本章内容：

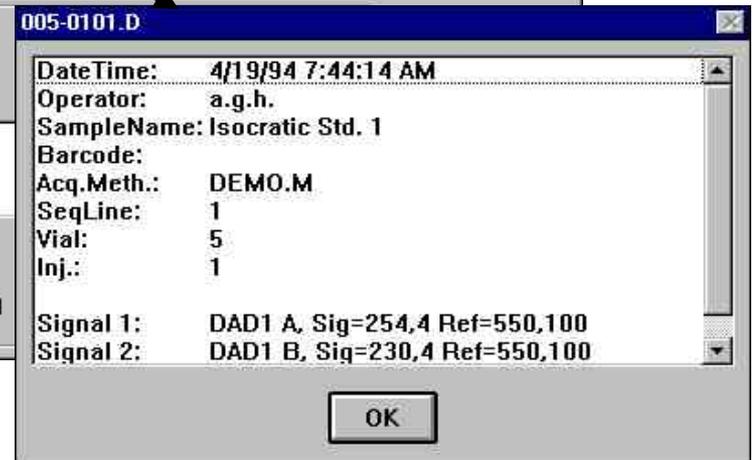
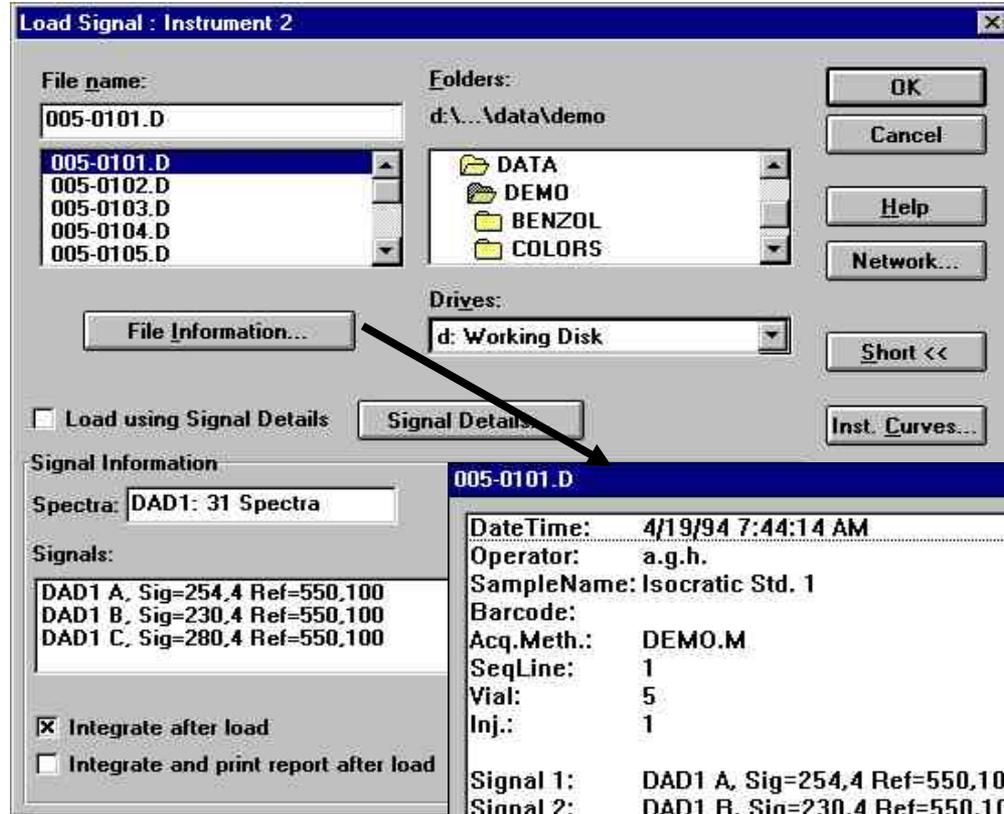
- 谱图调用
- 空白谱图的扣除
- 谱图优化
- 谱图加标注
- 谱图比较、处理



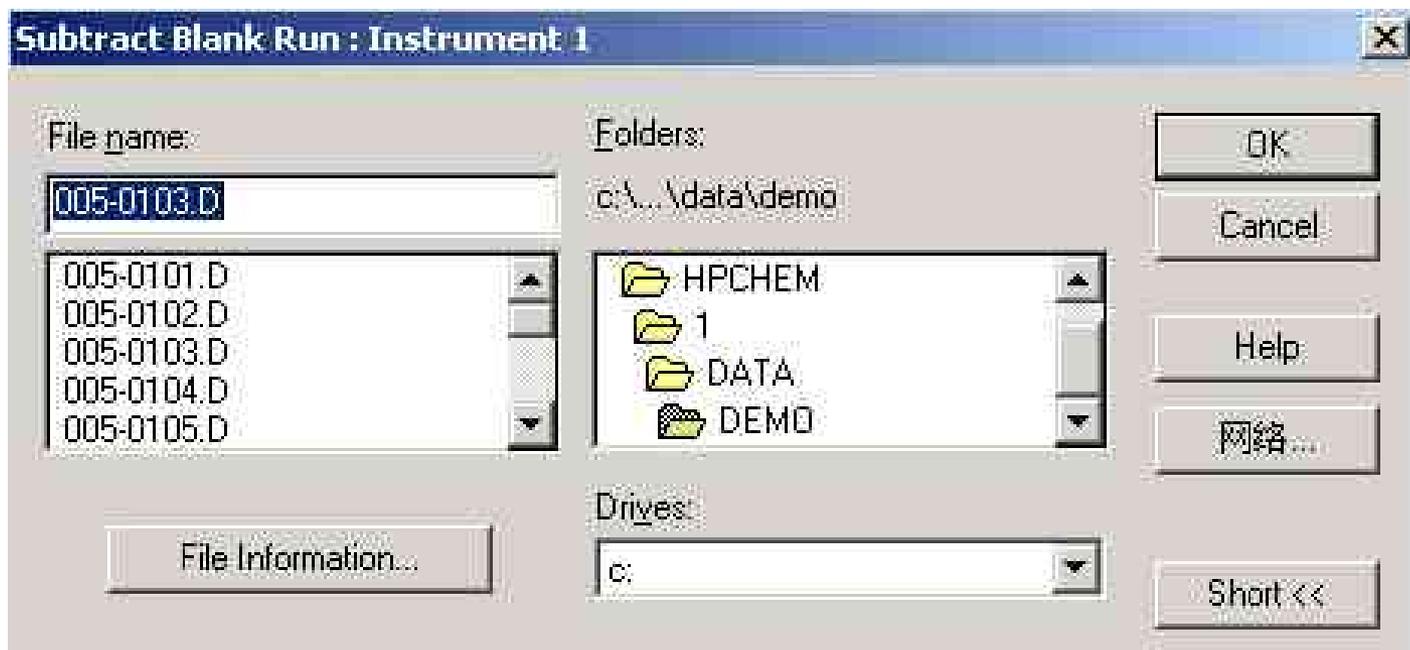
调用数据文件

在Data Analysis界面，File菜单下选择Load Signal。

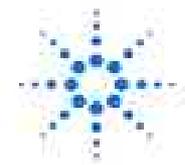
扣除空白谱图



扣除空白谱图



选择需要扣除的空白运行色谱文件



Signal Details

Signal Details: Instrument 2

Available Signals

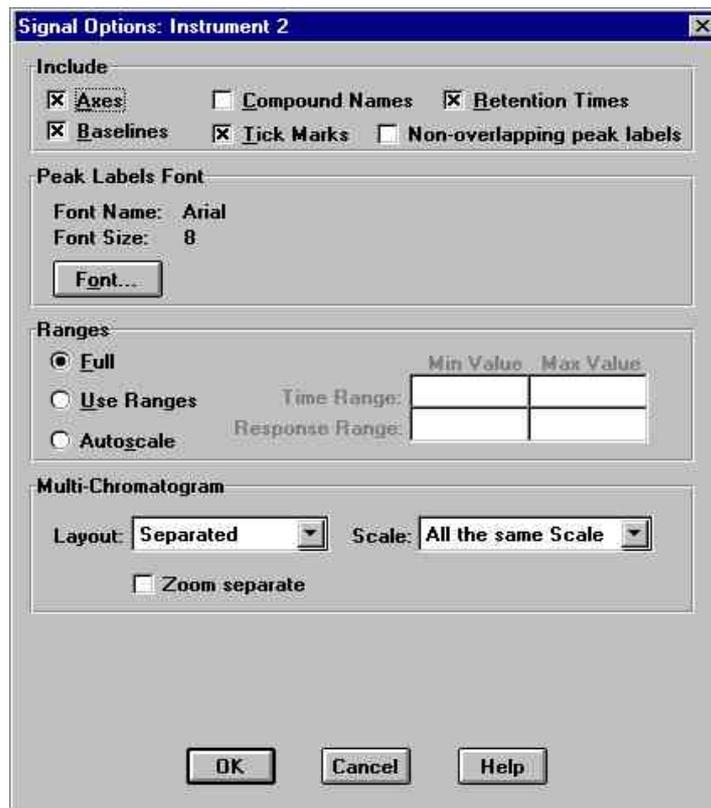
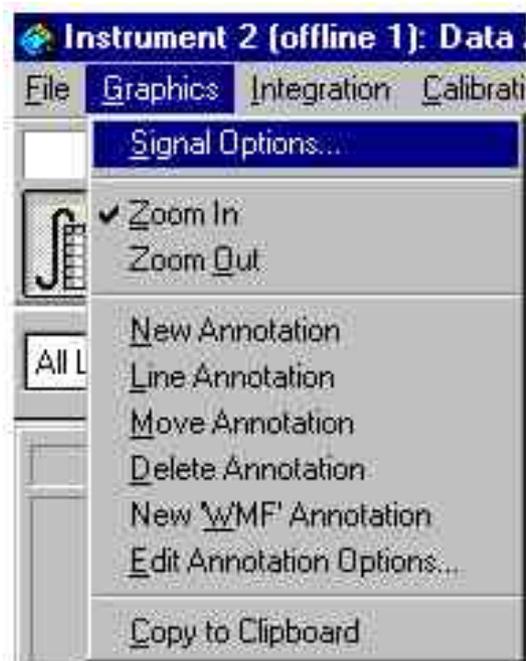
DAD1 B, Sig=230,4 Ref=550,100

Signal Description	Start	End	Delay	Align	Peak 1	Peak 2	Align Window
DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100	0.000	0.000	0.000	No Alignment	0.000	0.000	0.000
DAD1 B, Sig=230,4 Ref=550,100	0.000	0.000	0.000	No Alignment	0.000	0.000	0.000

选择、规定一个方法中要进行调用、处理的信号

谱图优化

在Data Analysis界面下，Graphics菜单下选择Signal Options...

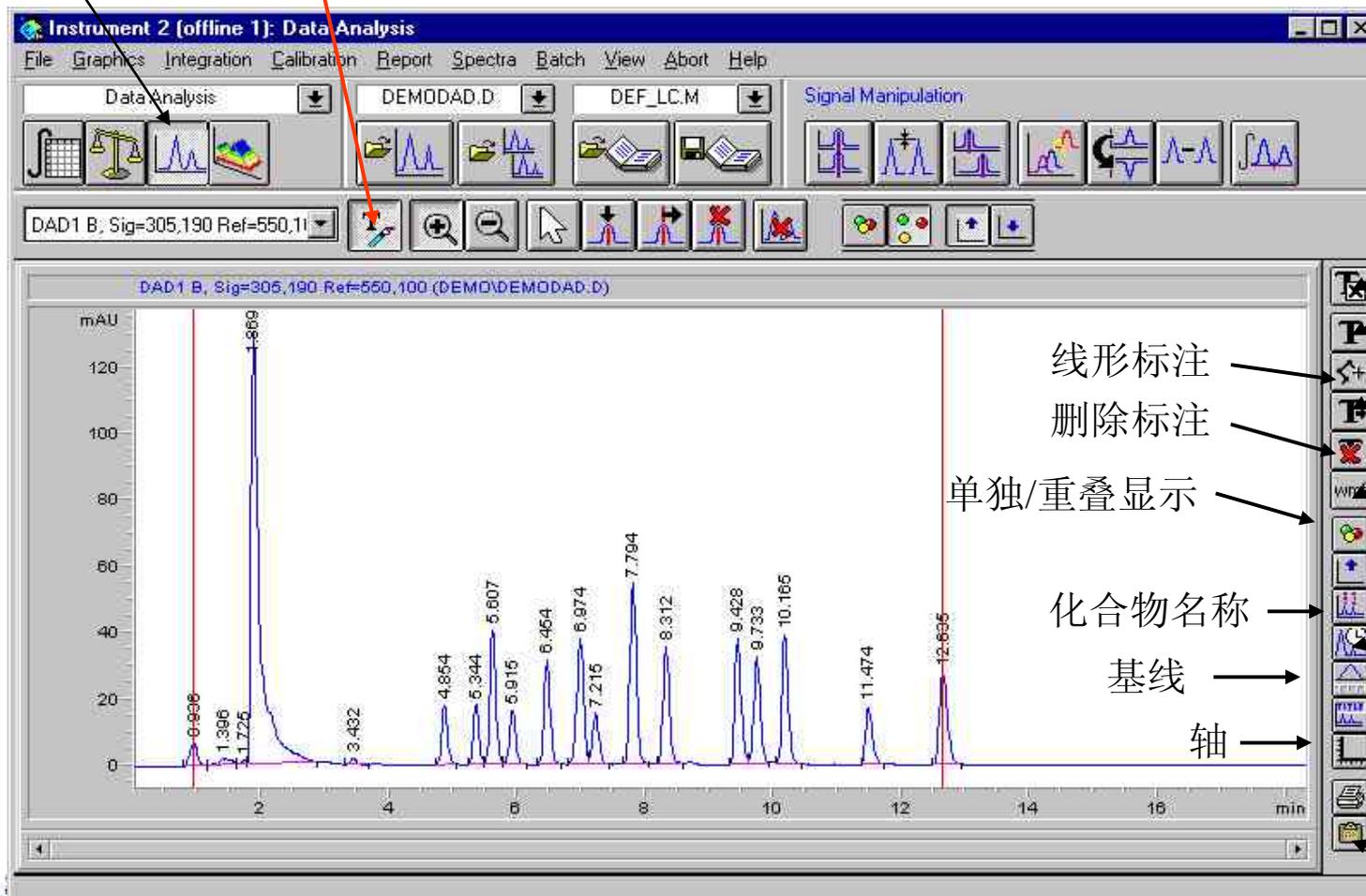


使用 *Signal Options...* 功能来优化色谱图的显示

谱图优化工具

色谱图控制
图标

谱图优化图标



设置标注格式

文字标注

移动标注

删除标注

WMF图标注

单独/重叠显示

谱图显示方式

化合物名称

保留时间显示

基线

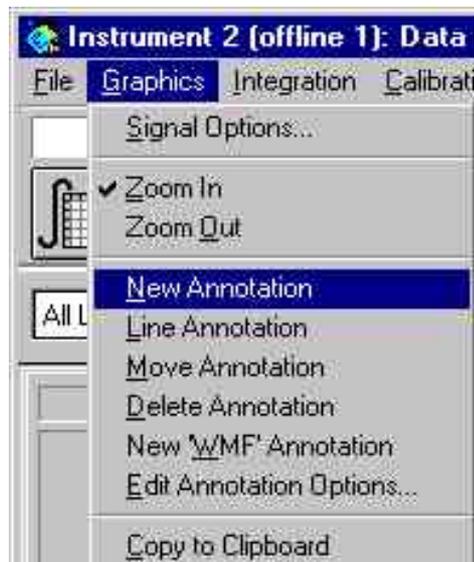
标题显示

打印窗口

拷贝



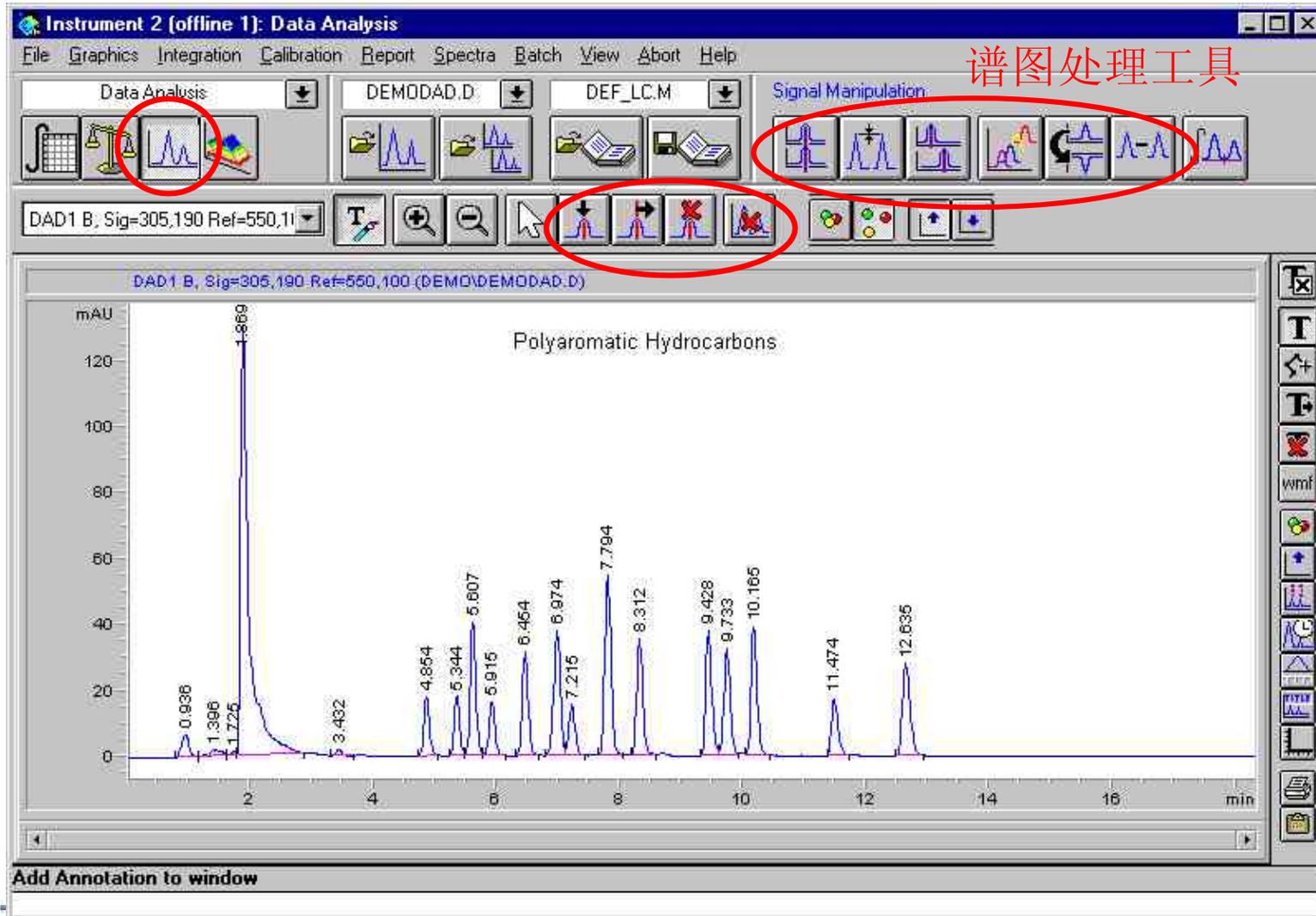
在色谱图上加标注



选择:

- 字体和字型
- 字体大小
- 字体颜色、旋转角度等

谱图处理工具



谱图处理工具

第四章 积分优化

本章内容：

- 如何执行积分
- 自动积分
- 如何建立积分事件表
- 如何使用积分事件表
- 手动积分

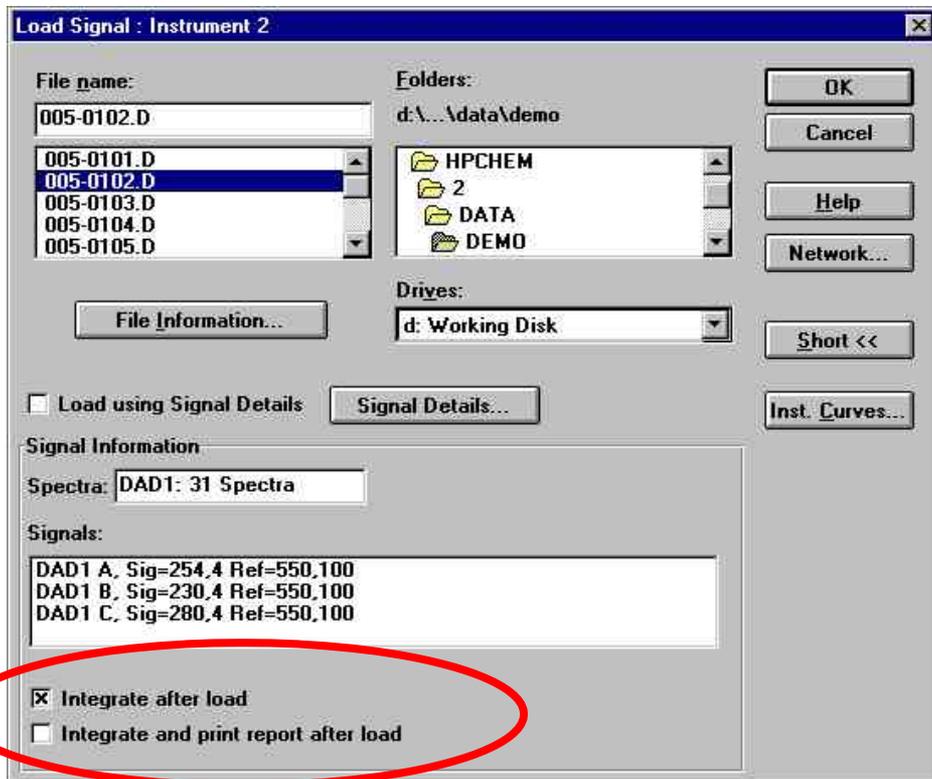


增强积分方式

增强积分方式可以提供：

- 当基线波动时，基线的定位。
- 使用初始峰高参数去除噪音峰。
- 控制积分开始和结束的标识。
- 在噪音中定位信号峰。
- 使用二阶导数确定肩峰。

如何执行积分

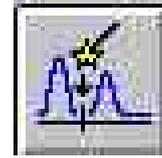


当调用信号时，可以通过Integrate after load选项自动积分。

您也可以通过以下方式进行积分：

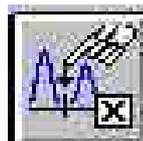
- 从 *Integration* 菜单选择积分或自动积分
- 选择积分工具。
- 运行一个包括数据分析的完整方法。

自动积分



- 检查开始和结束区域，确定噪音。
- 赋予初始Slope Sensitivity和Height Reject值。
- 对第一次积分赋予一个临时峰宽值。
- 设置Area Reject为0。
- 执行测试性积分，有可能重复几次。
- 基于较早洗脱出的色谱峰宽计算峰宽值。
- 优化Slope Sensitivity和Height Reject。
- 从初始的峰宽和噪音水平计算Area Reject。

积分事件



Instrument 2 (offline 1): Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Data Analysis 005-0101.D DEF_LC.M Integration / Report Short

DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550.100

Manual Events
Advanced Baseline
Events Table

DAD Default

Time	Integration Events	Value
Initial	Slope Sensitivity	5
Initial	Peak Width	0.05
Initial	Area Reject	5
Initial	Height Reject	1
Initial	Shoulders	OFF

mAU

min

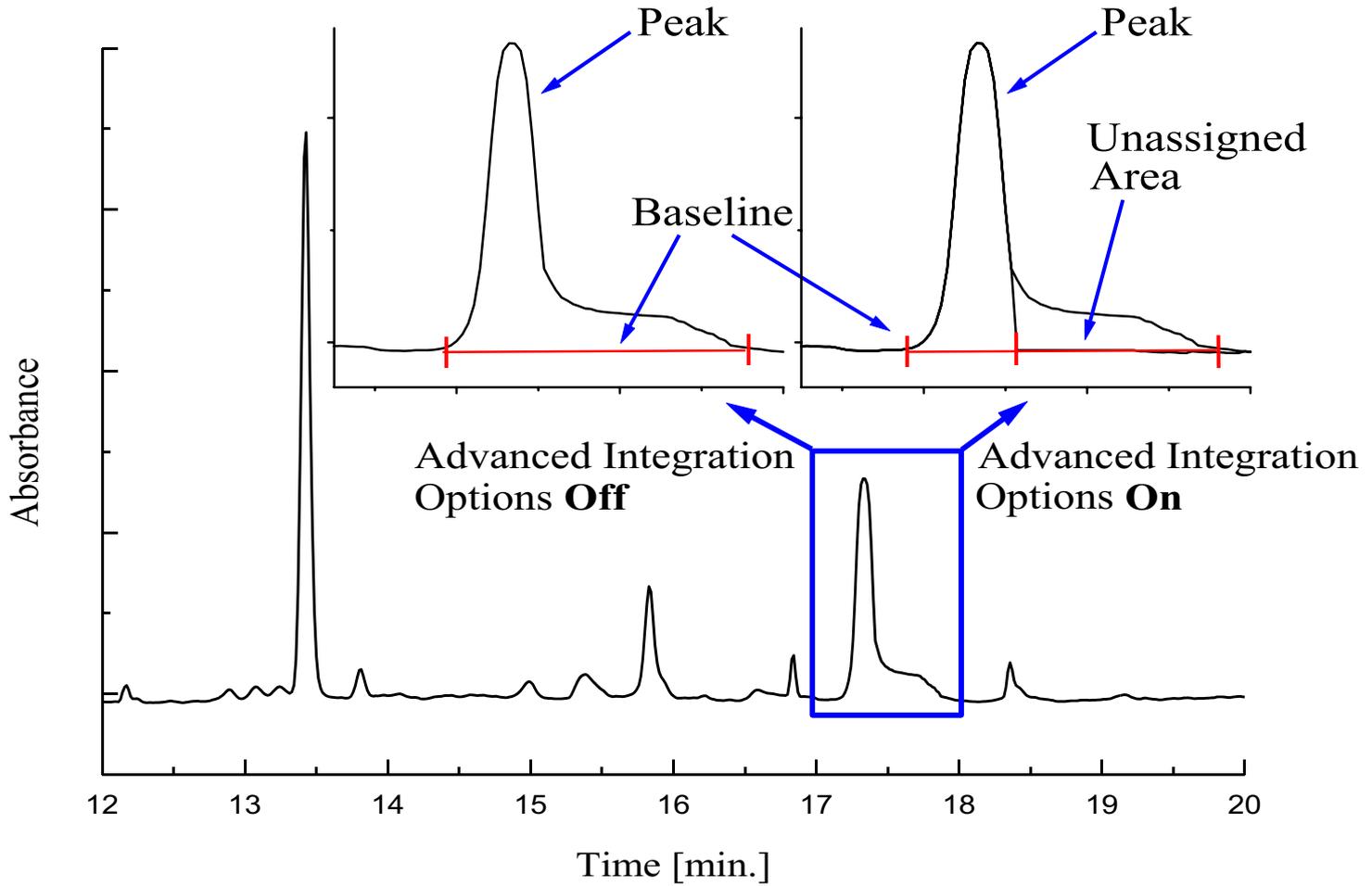
#	Time	Area	Height	Width	Symmetry
1	0.747	294.7	104.9	0.0448	0.717
2	1.021	260.8	76.5	0.0518	0.705
3	2.565	176.3	26.8	0.0966	0.643
4	5.837	251.2	16.9	0.2219	0.67

信号选项框

高级基线选择

初始值

高级基线



积分事件表

添加积分事件功能

删除积分事件功能

The screenshot displays the 'Integration / Report' window in the software. On the left, the 'Integration Events' table is visible, showing various parameters and their values. A dropdown menu is open, showing options for adding or removing events. On the right, a chromatogram plot shows the detector response (mAU) over time (min) with four distinct peaks labeled with their retention times: 0.747, 1.021, 2.565, and 5.837. Below the plot is a summary table of the integrated peaks.

Time	Integration Events	Value
Initial	Slope Sensitivity	5
Initial	Peak Width	0.05
Initial	Area Reject	5
Initial	Height Reject	1
Initial	Shoulders	OFF
0.000	Baseline Now	-

#	Time	Area	Height	Width	Symmetry
1	0.747	294.7	104.9	0.0448	0.717
2	1.021	260.8	76.5	0.0518	0.705
3	2.565	176.3	26.8	0.0966	0.643
4	5.837	251.2	16.9	0.2219	0.67

积分工具栏

积分任务

对当前色
谱图积分

自动积分

积分事件



设置Baseline Now

设置Baseline Hold

设置拖尾
切线撇去

积分器开关

设置斜率

设置固定峰宽

设置最小峰面积

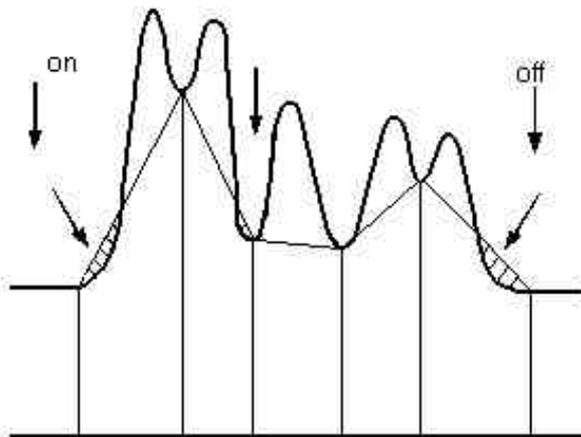
设置肩峰检测

Peak width: (半峰宽)

如果没有设置半峰宽的时间积分表，半峰宽在整个积分过程中自动变化，变化遵从 $0.75 \times \text{exiting peak} + 0.25 \times \text{current peak}$ 。

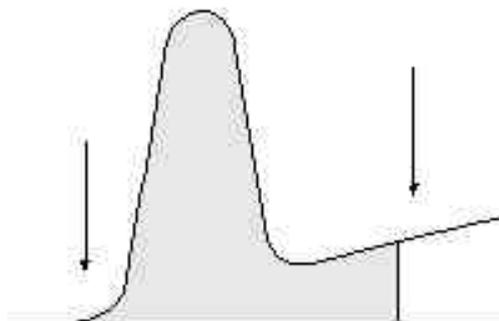
Timed Events :(时间性积分事件)

- **Area Sum ON or OFF:** 设定某一时间段内进行峰面积加和，加和后保留时间被分配到第一个峰的保留时间上。
- **Baseline All Valleys On or OFF:** 设定是否进行峰谷积分。



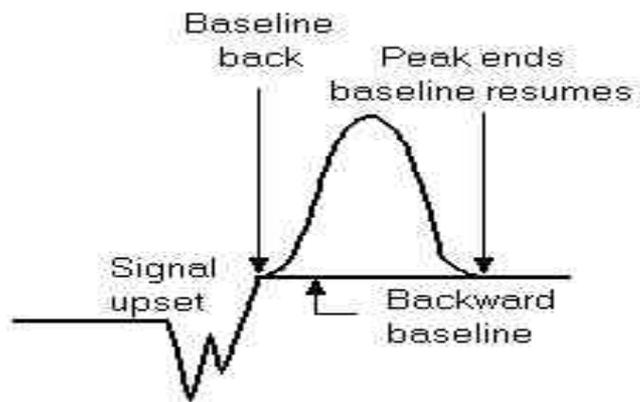
Baseline Hold ON or OFF:

在Baseline Hold ON与Baseline Hold OFF两点间做水平基线。



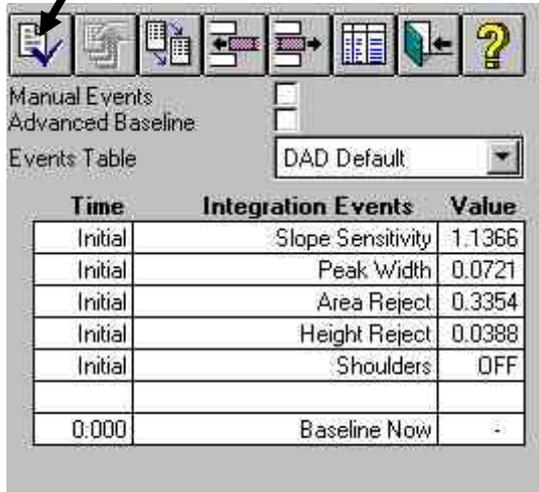
Baseline Now: 在某一时刻点重新设置基线。

Baseline Back: 设置某一时刻点，从检测到的基线向此点做水平基线。



作为方法的一部分存贮积分参数

存贮积分事件到方法

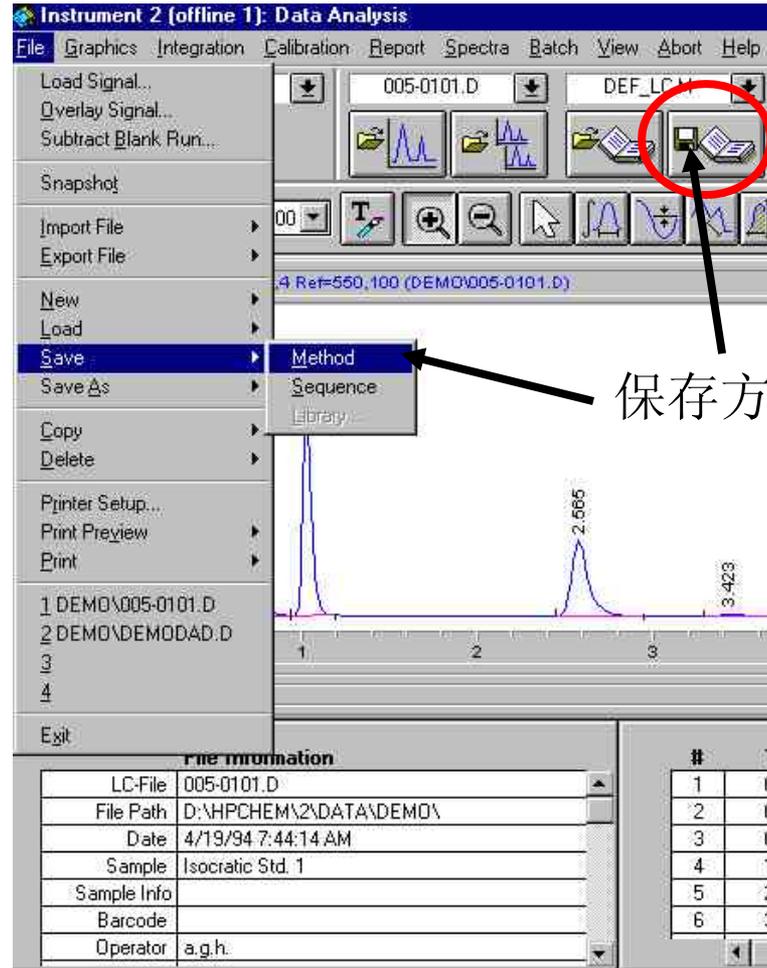


Manual Events

Advanced Baseline

Events Table DAD Default

Time	Integration Events	Value
Initial	Slope Sensitivity	1.1366
Initial	Peak Width	0.0721
Initial	Area Reject	0.3354
Initial	Height Reject	0.0388
Initial	Shoulders	OFF
0:000	Baseline Now	-



Instrument 2 [offline 1]: Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Load Signal... 005-0101.D DEF_LCM

Overlay Signal...

Subtract Blank Run...

Snapshot

Import File

Export File

New

Load

Save Method Sequence Library

Save As

Copy

Delete

Printer Setup...

Print Preview

Print

1 DEMO\005-0101.D

2 DEMO\DEMODAD.D

3

4

Exit

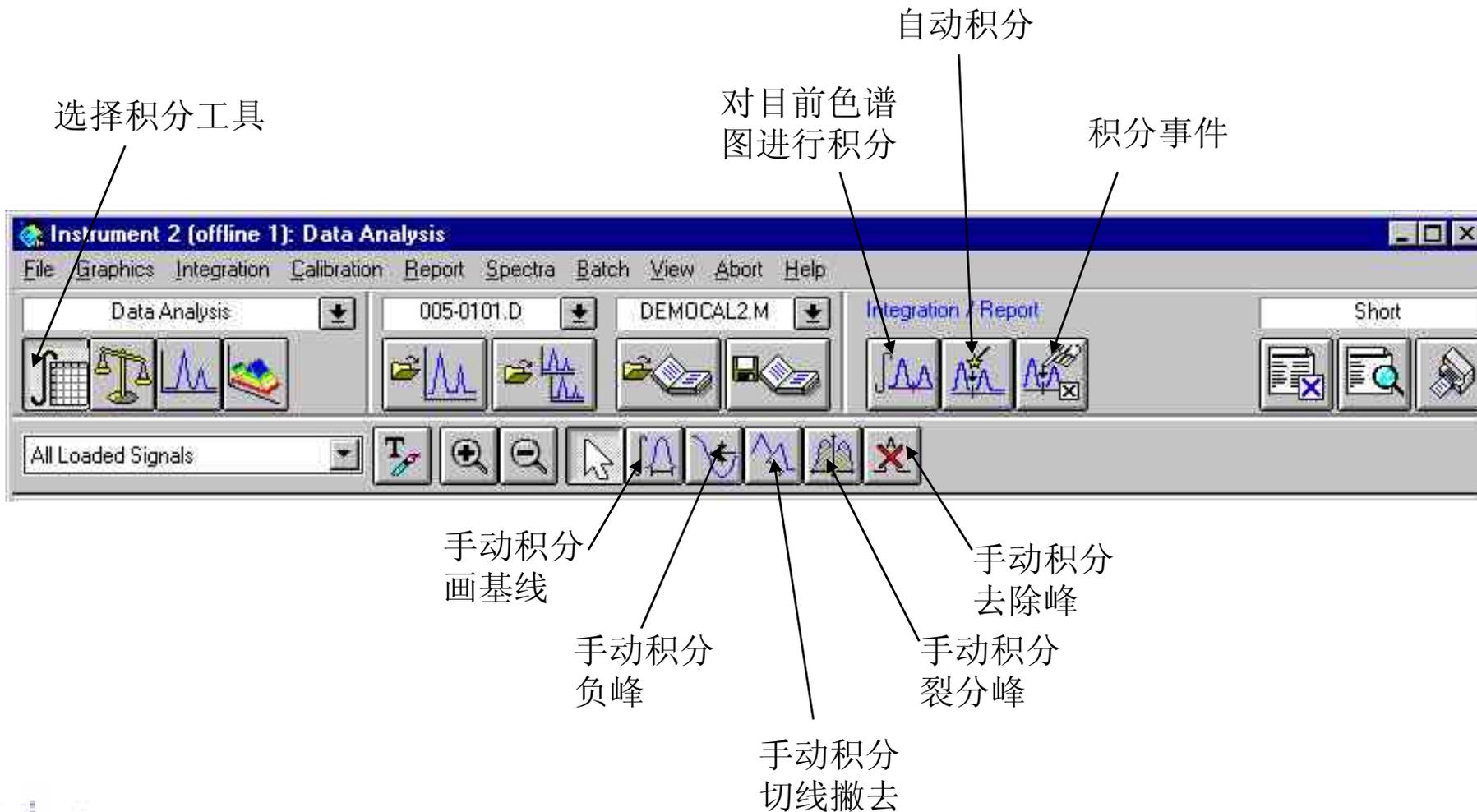
Time Information

LC-File	File Path	Date	Sample	Sample Info	Barcode	Operator
005-0101.D	D:\HPCHEM\2\DATA\DEMO\	4/19/94 7:44:14 AM	Isocratic Std. 1			a.g.h.

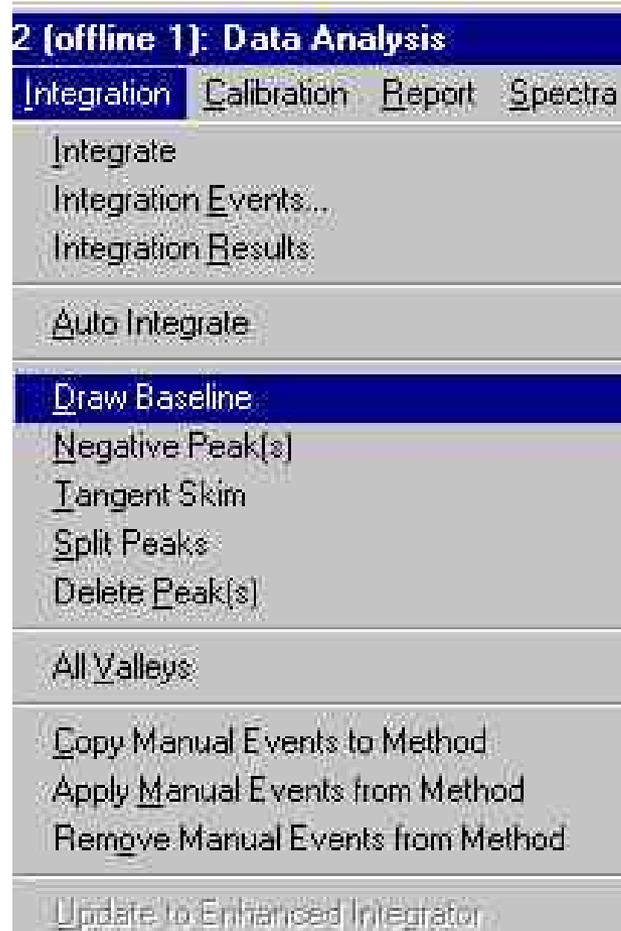
#	T
1	0
2	0
3	0
4	1
5	2
6	3

保存方法

手动积分工具



手动积分



- Draw Baseline
- Negative Peak(s)
- Tangent Skim
- Split peaks
- Delete Peak(s)
- All Valleys

峰类型符号

峰起止点符号

B 基线

P 基线渗透

V 峰谷点

H 水平基线

M 手动积分

T 切线撇去

其它符号

+ 参考峰

I 内标峰

A+ 面积加和峰

N 负峰

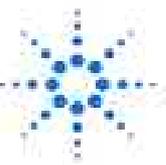
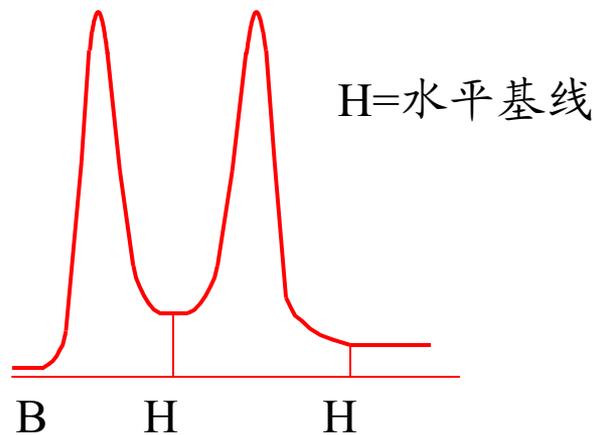
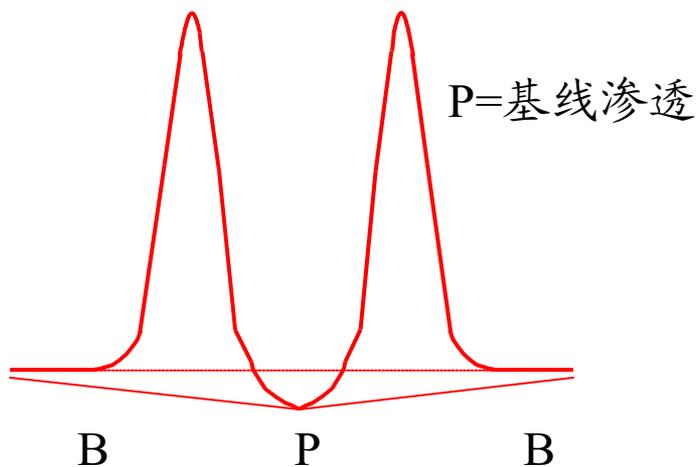
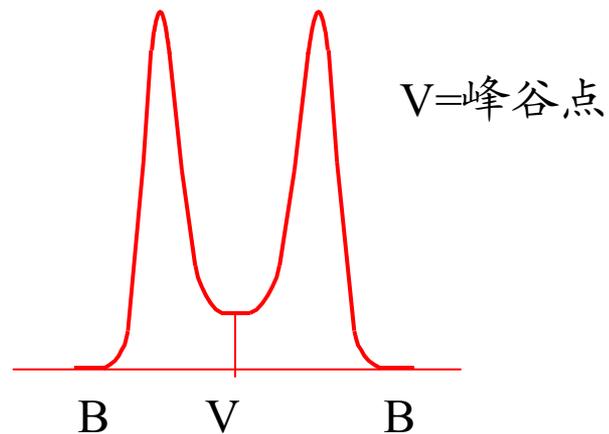
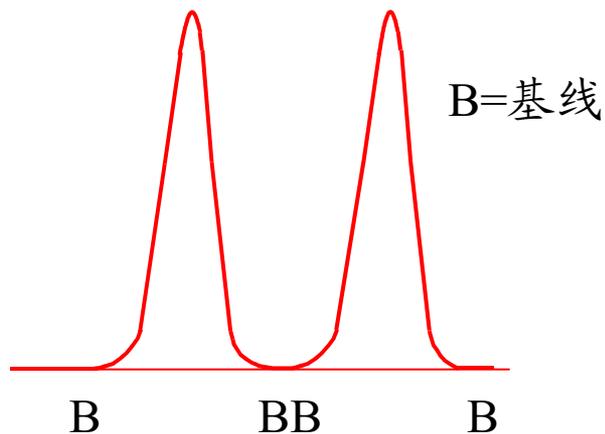
S 溶剂峰

警示符号

+ 高于含量上限

- 低于含量下限

基线符号



第五章 高级校正表的建立

本章内容：

- 如何建立校正表
- 如何选择校正表的设置
- 如何进行再校正
- 如何使用峰识别工具

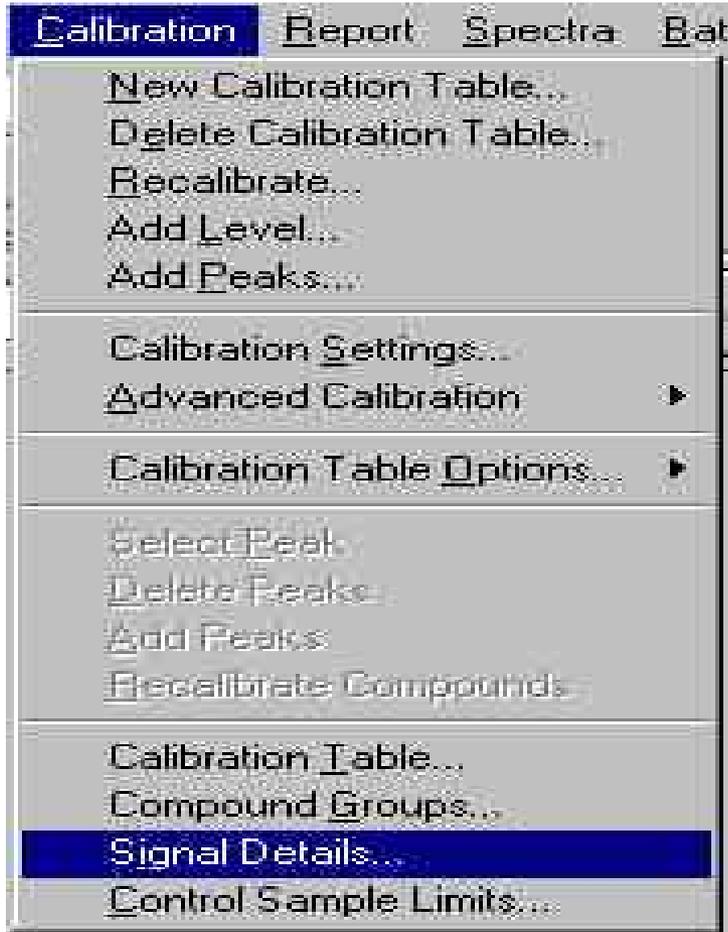


建立校准表的过程

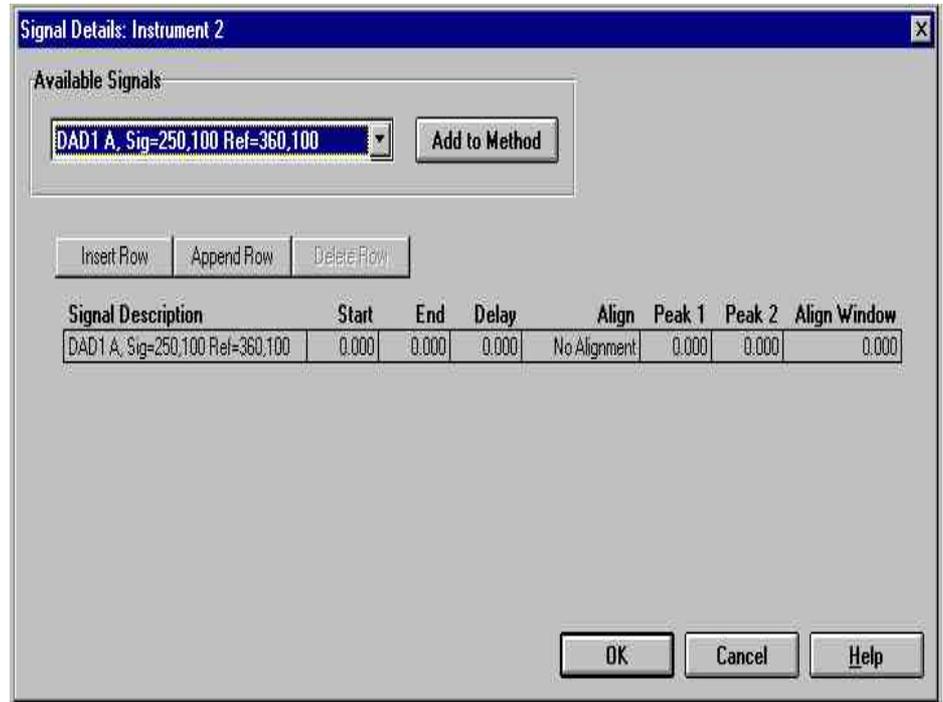
- 配置系列标样*，然后逐一进样分析。
 - *系列标样浓度范围要包含未知样品浓度。
- 调用低浓度标样数据，优化谱图显示。
- 优化积分参数，获得满意的积分结果，然后存贮积分事件到方法。
- 用最低浓度标样数据建立一级校正表。
- 逐个对每个标样进行优化谱图，优化积分后，分别加入校正表。
- 检查校正曲线，把校正曲线存入方法。



校正参数的建立



Signal details



Available Signals

此框包括了所有要被处理的信号，可从此框选择被处理的信号，通过Add to Method 按钮拷贝到方法中。拷贝之后可以编辑初始时间(Start)和中止时间(End)。只有在此时间范围内的信号才被处理。如果初始时间和中止时间及延迟时间(Delay Time) 均设置为0，被选定信号的所有数据均被处理。

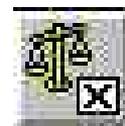
Delay

可以通过设置时间延迟(Delay)来补偿检测器信号的延迟。例如：串联使用两个检测器，对于同一信号会有时间延迟。通过设置Delay来补偿时间延迟，这样可以进行峰识别。通过时间延迟，还可以修改某个色谱数据的保留时间。保留时间设置区域没有限制，而且数值可正可负。

Align

此功能用于LC/MSD。

Calibration Settings



Data Analysis

Calibration Report Spectra

New Calibration Table...
Delete Calibration Table...
Recalibrate...
Add Level...
Add Peaks...

Calibration Settings...

Advanced Calibration ▶

Calibration Table Options... ▶

Select Peak
Delete Peaks
Add Peaks
Recalibrate Compounds

Calibration Table...
Compound Groups...
Signal Details...
Control Sample Limits...

Calibration Settings: Instrument 1

Title: _____

Use Sample Data: From Data File 

Sample Defaults: From Sample Defaults Below
From Data File 

Amount: 0.000 # Compound: _____ ISTD Amount: _____
Amount Units: ppm 
Multiplier: 1.000
Dilution: 1.000 Enter

Default RT Windows  Default Calibration Curve 

	Minutes	+	%
Reference Peaks	0.00	+	5.00
Other Peaks	0.00	+	5.00

Type: Linear
Origin: Include
Weight: Equal

Calculate Uncalibrated Peaks

For Signal: FID1 A.

Using Compound: None
 With Rsp Factor: 0.000
Use ISTD: None
 No

If Peaks Missing
 Partial Calibration
 Correct All RTs

ISTD Correction
 Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

OK Cancel Help

校正参数的设置

Title

输入校正表的标题。

Use Sample Data

此对话框有两种选择：

From Sample Defaults Below: 选择此项后，可以设置下面Sample Defaults各参数，所有在Sample Info.中所设置的参数均被新参数替代。

From Data File: 所有涉及到的参数在数据处理过程中均以Sample Info.表中参数为准。

Amount

此处浓度只在计算ESTD%和ISTD%时有效。Amount输入样品总浓度。

Sample ISTD

未知样品中内标浓度。可以输入几个内标。

I #

用于识别内标物。此处I #与校正表中I #一致。

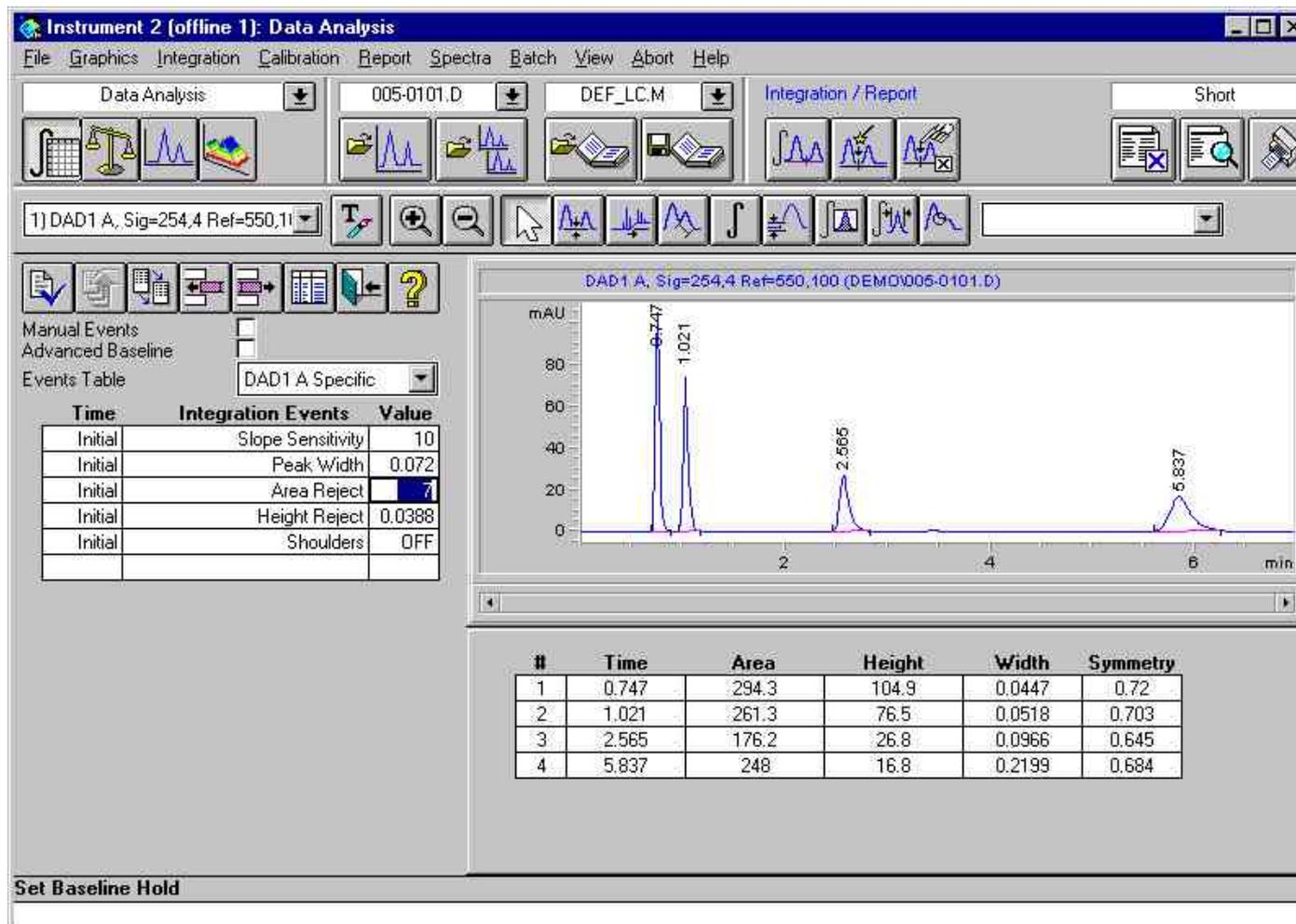
Calculate Uncalibrated Peaks

此选项用于定义未校正峰的反应因子。校正因子可以使用某一校正化合物的校正因子(Using Compound)，也可以输入某一响应因子数值(With Rsp Factor)。

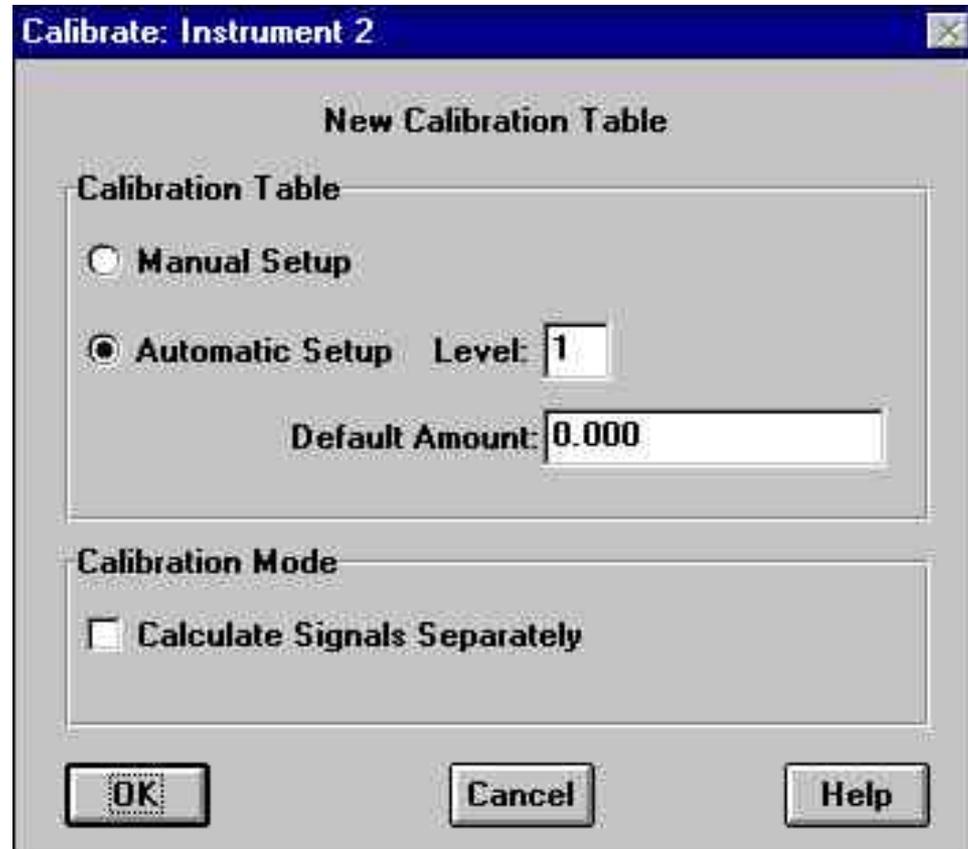
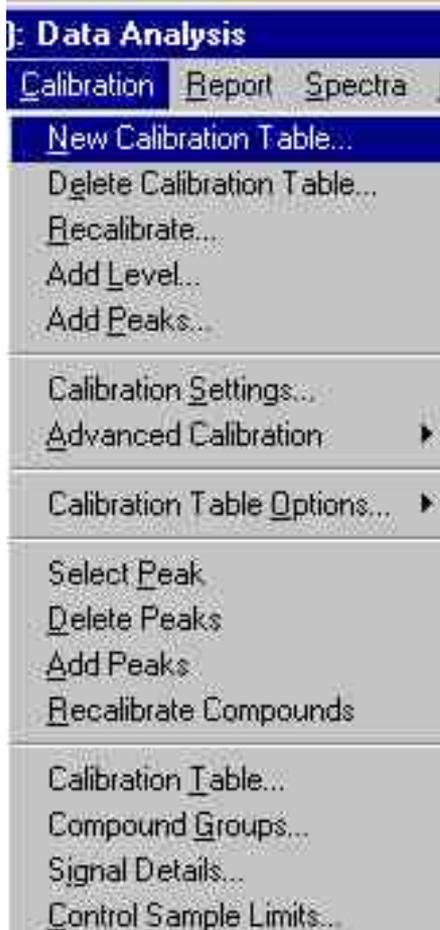
Weight

作标准曲线时，定义不同校正点的权重（重要性）。

调用标样进行积分参数优化



建立一级校正表



Calibration Table

可以通过两种方法建立新校正曲线表：

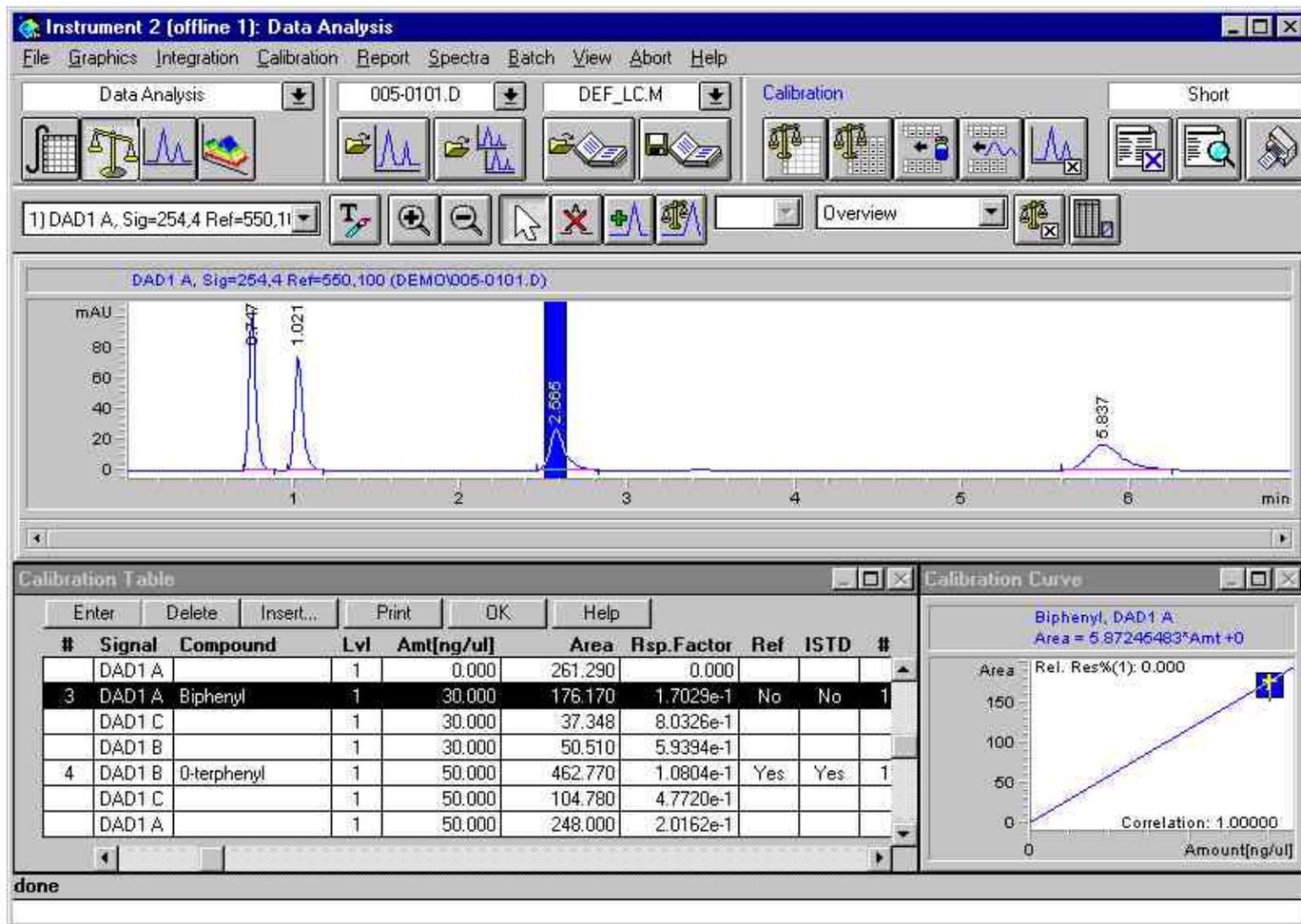
Manual Setup: 手工输入保留时间和响应因子。

Automatic Setup Level: 工作站自动将保留时间及其它色谱参数输入校正表，用户只需输入标样浓度，工作站自动计算响应因子。

Calibration Mode

此项选择只在归一化法(Norm%)中有效。选择Calculate Signals Separately后，在计算时，每个信号被独立报告。否则所有的信号均被归一化。

校正表的建立



填入：
化合物名称
浓度

选择：
参比峰
内标
内标标号#

校正表的选择

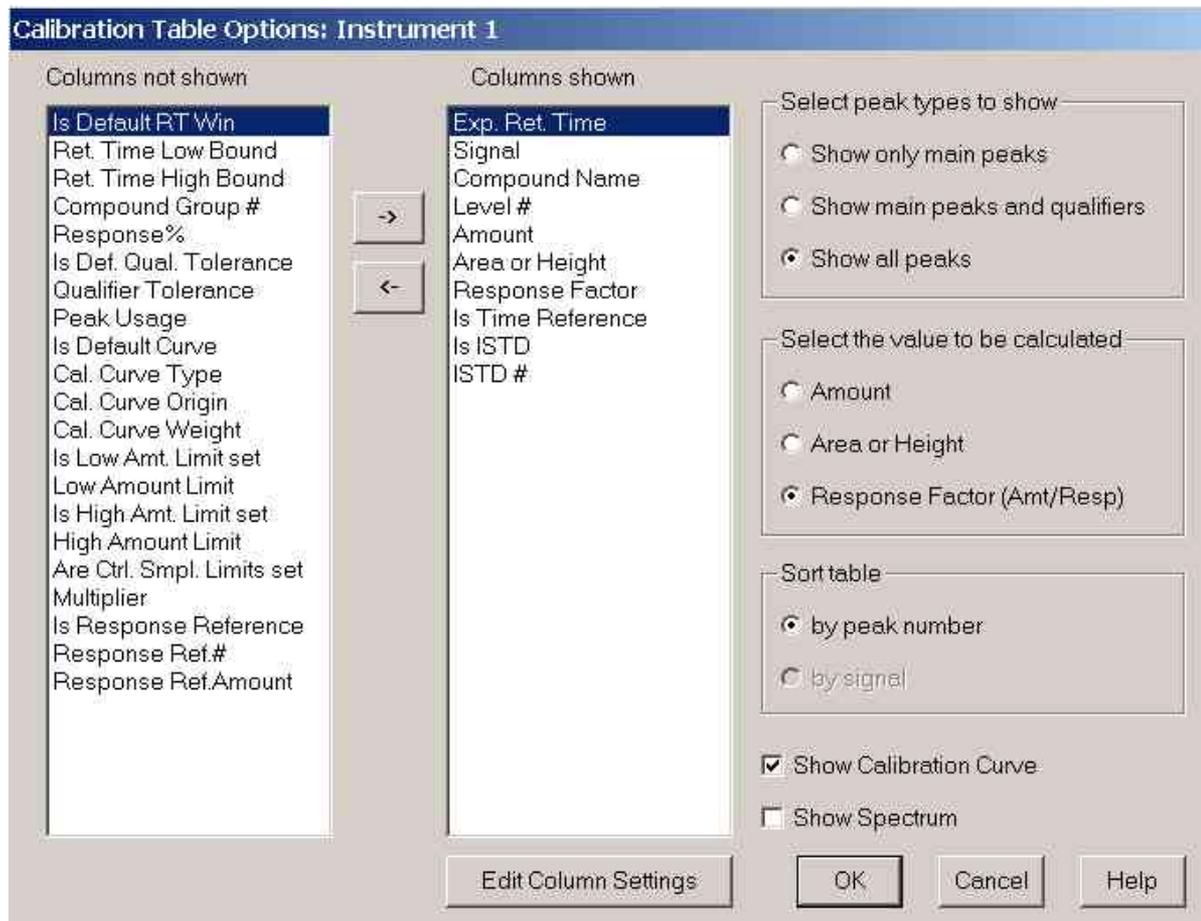
The image shows a screenshot of the 'Calibration Table Options' menu in a software application. The menu is open, and several options are visible. Arrows point from these options to descriptive text on the right side of the slide.

- Overview**: Compound, Amt, Area, Rsp Factor, Ref, ISTD, #
- Compound Details**: Compound, Grp, Amt, Low Limit, High Limit
- Peak Details**: Compound, Amt, Area, Def, Curve Type, Origin
- Identification Details**: Compound, Area, Rsp%, Def, +/-, PK Usage
- Edit Options...**: 编辑校准表的内容
- Peak Summing**: 峰加和



每种校正表方式都有各自的缺省方式，用户可根据自己的需要使用Edit Options...对每种方式进行编辑。

在左侧Columns not shown框中选择所需内容后按“→”键，所需内容加到右侧Columns shown框中。



Compound Details

Calibration Table										
Enter		Delete		Insert...		Print		OK		Help
#	RT	Signal	Compound	Grp	Lvl	Amt[ng/ul]		Low Limit		High Limit
1	0.747	DAD1 A			1	10.000	<input checked="" type="checkbox"/>	8.000	<input checked="" type="checkbox"/>	12.000
2	1.021	DAD1 A			1	10.000	<input type="checkbox"/>	0.000	<input type="checkbox"/>	0.000
3	2.565	DAD1 A			1	10.000	<input type="checkbox"/>	0.000	<input type="checkbox"/>	0.000
4	5.837	DAD1 A			1	10.000	<input type="checkbox"/>	0.000	<input type="checkbox"/>	0.000

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100

RetTime [min]	Type	Area [mAU*s]	Amt/Area	Amount [ng/ul]	Grp	Name
0.747	BB	294.70596	3.39321e-2	10.00000-		
1.021	BB	260.76071	3.83493e-2	10.00000+		
2.565	BB	176.27490	5.67296e-2	10.00000		
5.837	BB	251.17810	3.98124e-2	10.00000		

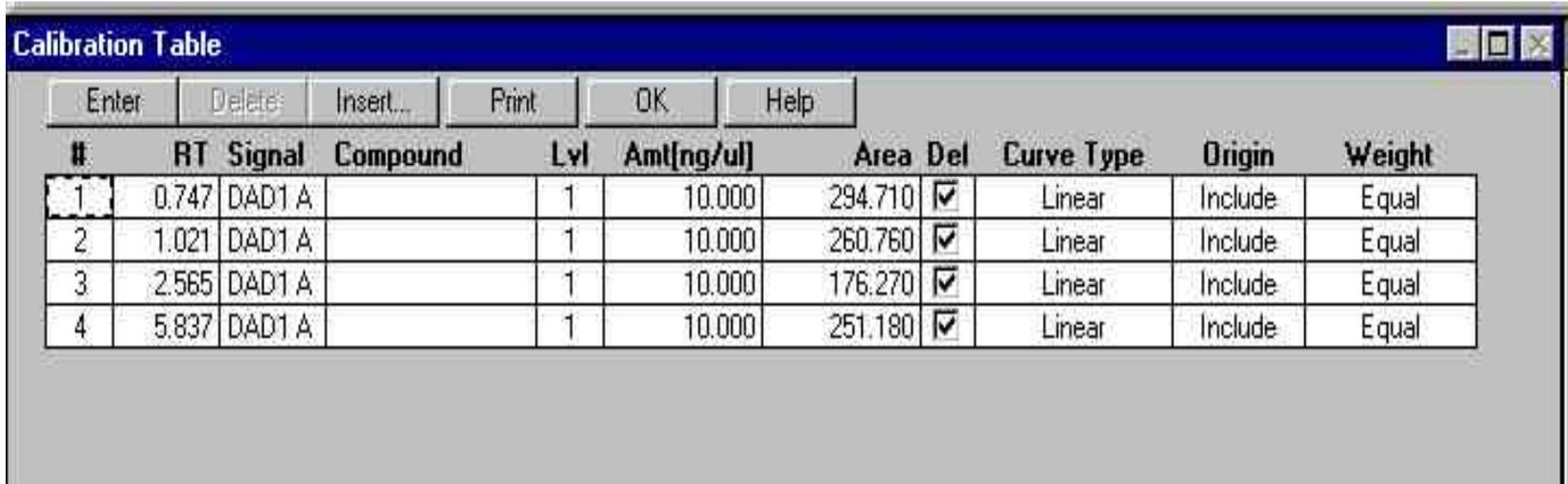
Totals : 40.00000

2 Warnings or Errors :

Warning : Calibration warnings (see calibration table listing)

Warning : Amount limits exceeded

Peak Details



#	RT	Signal	Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Del	Curve Type	Origin	Weight
1	0.747	DAD1 A		1	10.000	294.710	<input checked="" type="checkbox"/>	Linear	Include	Equal
2	1.021	DAD1 A		1	10.000	260.760	<input checked="" type="checkbox"/>	Linear	Include	Equal
3	2.565	DAD1 A		1	10.000	176.270	<input checked="" type="checkbox"/>	Linear	Include	Equal
4	5.837	DAD1 A		1	10.000	251.180	<input checked="" type="checkbox"/>	Linear	Include	Equal

Peak Details表包含了校正曲线的信息。

如果Def栏被选择，校正曲线参数由Calibration Settings中的参数决定。如果校正曲线参数在Calibration Settings中发生改变，则Calibration Table会自动更新。

校正曲线参数包含：校正曲线类型、原点的选定以及各校正点的权重。

Identification Details

Calibration Table										
<input type="button" value="Enter"/> <input type="button" value="Delete"/> <input type="button" value="Insert..."/> <input type="button" value="Print"/> <input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="Help"/>										
#	RT	Del	From	To	Signal	Compound	Area	Rsp%	Del	+/- Pk Usage
1	0.747	<input checked="" type="checkbox"/>	0.728	0.765	DAD1 B		968.290	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0 Main
	0.747	<input checked="" type="checkbox"/>	0.728	0.765	DAD1 C		156.350	16.1	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Qualifier
	0.747	<input checked="" type="checkbox"/>	0.728	0.765	DAD1 A		294.710	30.4	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
2	1.021	<input type="checkbox"/>	0.996	1.047	DAD1 A		260.760	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0 Main
	1.021	<input type="checkbox"/>	0.996	1.047	DAD1 C		135.800	52.1	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
	1.021	<input type="checkbox"/>	0.996	1.047	DAD1 B		852.450	326.9	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
3	2.565	<input checked="" type="checkbox"/>	2.501	2.630	DAD1 A		176.270	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0 Main
	2.565	<input checked="" type="checkbox"/>	2.501	2.630	DAD1 C		37.348	21.2	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
	2.566	<input checked="" type="checkbox"/>	2.502	2.630	DAD1 B		50.510	28.7	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
4	5.837	<input checked="" type="checkbox"/>	5.691	5.983	DAD1 B		462.770	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0 Main
	5.837	<input checked="" type="checkbox"/>	5.691	5.983	DAD1 C		104.780	22.6	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore
	5.837	<input checked="" type="checkbox"/>	5.691	5.983	DAD1 A		251.180	54.3	<input checked="" type="checkbox"/>	20.0 Ignore

Identification Details中定义了每个峰的作用，并允许用户定义特征峰。每个峰的最大吸收总被定义为主峰。

Rsp%: 显示响应比率（特征峰/主峰）。

Def Qualifier Tolerance(Def): 选择此栏使用缺省的响应比率偏差。

+/-: 特征峰的响应占主峰响应的百分数。此栏设置用户期待的响应比率偏差。例如此栏设置20，则偏差窗口为 -10%~10%。

Peak Usage

显示峰的选择——Main, Qualifier或Ignore。仪器设定的缺省值为：化合物最大峰为Main（主峰），其它峰为Ignore。

Main:

主峰。此峰用作定量计算。主峰和特征峰一起用作定性。只能选择一个主峰。

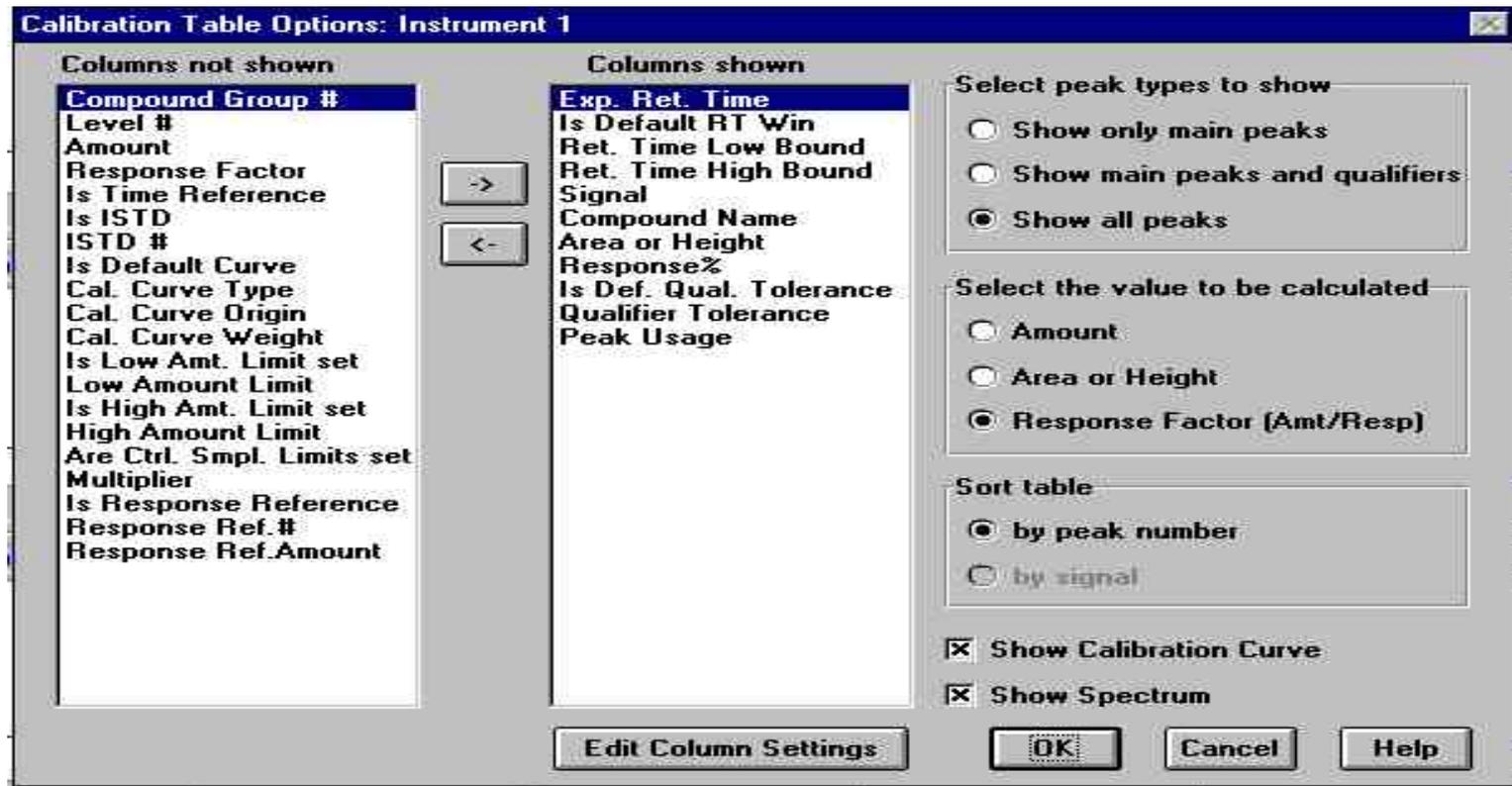
Qualifier:

特征峰。特征峰用于确定主峰属于哪一期望化合物。一般情况下：一个化合物在不同的波长范围有一恒定的响应比率。因此对于一个化合物，其特征峰的响应与主峰的响应为一恒定比率。可以通过+- 栏设置允许的响应比率偏差。如果某一化合物的响应比率超出此设定值，则此化合物峰不被定量。

Ignore:

如果峰选择此项，则此峰既不用于定量，也不用于定性。此峰在校正表中留作将来使用。可以用Delete键删除此峰。

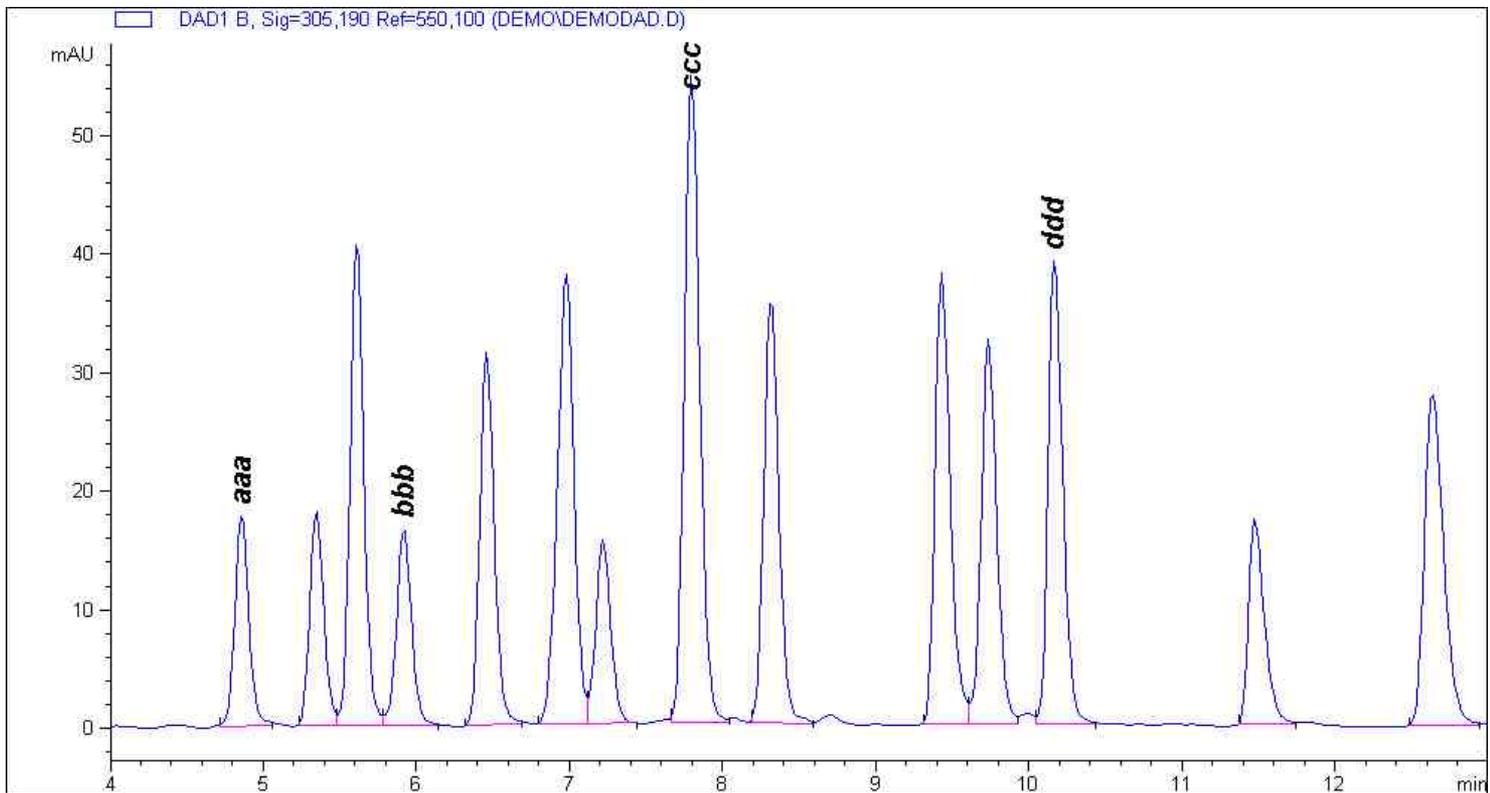
Calibration Table option



Calibration Table Option让用户选择校正表中显示哪些内容。Calibration Table Option包括两部分内容：Columns not shown显示了哪些内容可以加到校正表中；Columns shown显示校正表中的内容。要选择哪些内容加到校正表中，只需选择Columns not shown中的内容，单击->键把所需内容加Columns shown中。

Peak Summing

峰加和功能主要用于石化或制药行业某些特殊应用，该功能可以对某个时间段内连续或不连续的色谱峰进行总含量定量计算。如下图所示，需要测量除四个主要目标化合物峰aaa、bbb、ccc、ddd以外的所有4~13min时间段内的杂质峰总含量时，即可使用Peak Summing功能。



- 调用标样数据，并对所有峰(包括杂质峰)进行积分参数优化，得到各个峰的准确峰面积。
- 在Calibration菜单下，建立标准的校正表，即在校正表中输入aaa、bbb、ccc、ddd四个标准化化合物的含量。
- 选择Calibration Table Option...选项中Peak Summing。此命令执行后，校准表变成峰加和型校正表，如下所示。
- 输入4~13min时间段的片断名称，如impurity，并指定所需的RF因子。如果Use Reference项中选择None，则可以在Response Factor栏中手工输入所需的RF数值。

#	Start Time	End Time	Use Reference	Response Factor	Multiplier	ISTD Ref
1	4	13	None	0.001	1	None

- 峰加和表编辑好，选择Report菜单下Specify Report选项，在Specify Report窗口，选中Add Summed Peaks Table选择，并规定使用外标法定量。
- 调用未知样品，选择Report菜单下Print Report，发现得到的报告中除正常的外标报告以外还有如下内容：

Summed Peaks Report

Signal 1: DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100

Name	Start Time [min]	End Time [min]	Total Area [mAU*s]	Amount [ng/ul]
impurity	4.000	13.000	2098.37931	2.0984
Totals :				2.0984

注：此处用于杂质定量计算的RF值为手工输入的0.001。

调用信号——加入二级校正



- Data Analysis
- Calibration Report Spectra
- New Calibration Table...
- Delete Calibration Table...
- Recalibrate...
- Add Level...
- Add Peaks...
- Calibration Settings...
- Advanced Calibration
- Calibration Table Options...
- Select Peak
- Delete Peaks
- Add Peaks
- Recalibrate Compounds
- Calibration Table...
- Compound Groups...
- Signal Details...
- Control Sample Limits...

Instrument 2 (offline 1): Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Data Analysis 005-0105.D DEF_LC.M Calibration Short

All Loaded Signals Overview

DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100 (DEMO005-0105.D)

输入二级标样含量

#	RT	Signal	Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Resp.Factor	Ref	I
1	2.571	DAD1 A	Biphenyl	1	30.000	174.290	1.7212e-1	No	
				2	50.000	312.650	1.5992e-1		
	2.571	DAD1 B		1	30.000	50.232	5.9723e-1		
				2	50.000	241.480	2.0705e-1		
	2.571	DAD1 C		1	30.000	37.190	8.0666e-1		
				2	50.000	256.860	1.9466e-1		
2	5.855	DAD1 B	0-terphenyl	1	50.000	457.210	1.0936e-1	Yes	
				2	50.000	189.230	1.0936e-1		

done

Calibration Curve

Biphenyl, DAD1 A:
Area = 8.21804468 * Amt - 3.49954

Area Rel. Res%(2): 1.708

Correlation: 0.99881

25 Amount[ng/ul]



加入更多的级别输入对应标样含量



Instrument 2 (offline 1): Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Data Analysis 007-0301.D DEF_LC.M Calibration Short

All Loaded Signals Overview

DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550,100 (DEMO\007-0301.D)

Calibration Table

#	RT	Signal	Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Rsp.Factor	Ref	I
1	2.580	DAD1 A	Biphenyl	1	30.000	174.290	1.7212e-1	No	
				2	50.000	312.650	1.5932e-1		
				3	75.000	446.990	1.6779e-1		
	2.580	DAD1 C		1	30.000	37.190	8.0666e-1		
				2	50.000	256.860	1.9466e-1		
				3	75.000	81.502	9.2022e-1		
	2.580	DAD1 B		1	30.000	50.232	5.9723e-1		

Calibration Curve

Biphenyl, DAD1 A
Area = 6.02757163 * Amt - 0.08416

Area Rel. Res(1): -3.569

Correlation: 0.99911

Amount[ng/ul]

线性相
关系数

把校正表存入方法

The screenshot shows the 'Instrument 2 (offline 1): Data Analysis' software interface. The 'File' menu is open, and the 'Save' option is selected, which has opened a sub-menu with 'Method', 'Sequence', and 'Library...' options. A red circle highlights the 'Save Table to Method' icon in the toolbar, and an arrow points from this icon to the 'Method' option in the sub-menu. The main window displays a chromatogram with a peak at 2.580 minutes. Below the chromatogram is a table with the following data:

Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Rsp
Biphenyl	1	30.000	174.290	1
	2	50.000	312.650	1
	3	75.000	446.990	1

Save Table to Method

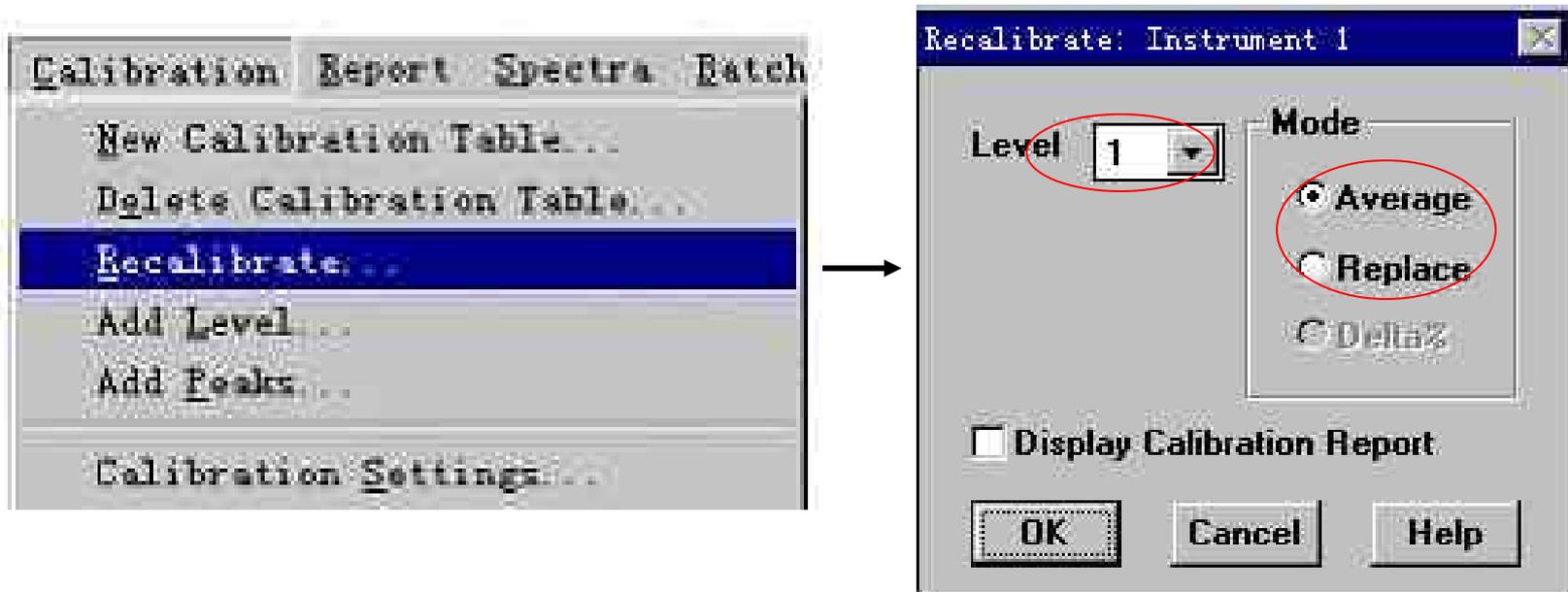


再校正

当校正曲线上的点发生偏移，需要对相应的浓度点做再校正。

再校正过程如下：

- 进一针相应浓度的标样。
- 调用此数据文件。
- 在Calibration 菜单下，选择Recalibrate...，选择需要再校正的级别，然后选择如何再校正—Average或Replace。工作站自动进行再校正。



Advanced Calibration



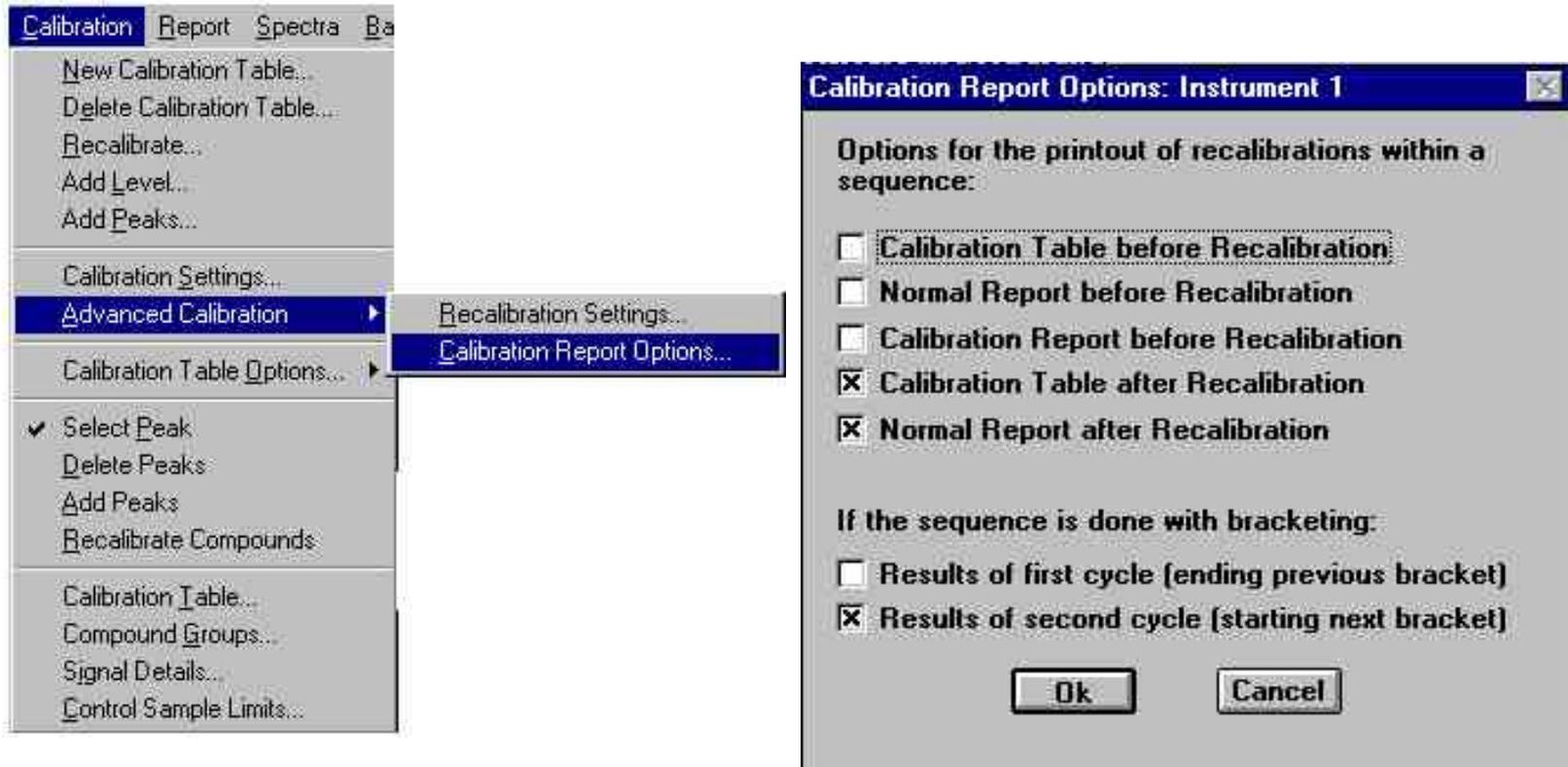
此项功能让用户设置如何对现有校正表进行再校正。

No Update: 不进行再校正。

Average All Calibrations: 与原有的校正表进行平均。

Floating Average New % : 新的校正数据在平均时所占的比例。

Calibration Report Option



此项功能可以设置再校正报告在序运行过程中如何打印。

第六章 设定报告格式

本章内容:

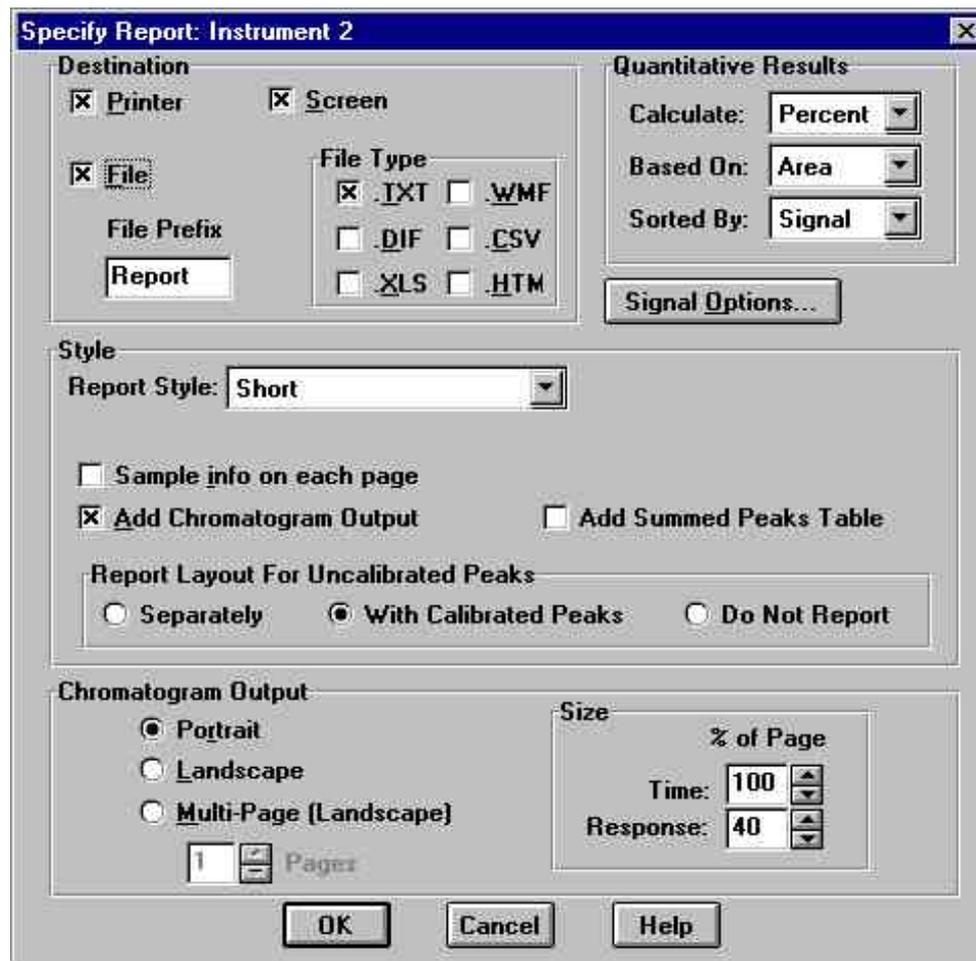
- 如何定义一个报告类型
- 报告文件的存贮方式
- 报告类型选择
 - 如何使用系统适用性报告
 - GLP报告中内容
 - 如何存贮GLP数据
 - 如何执行自动库检索
 - 如何获得峰纯度信息



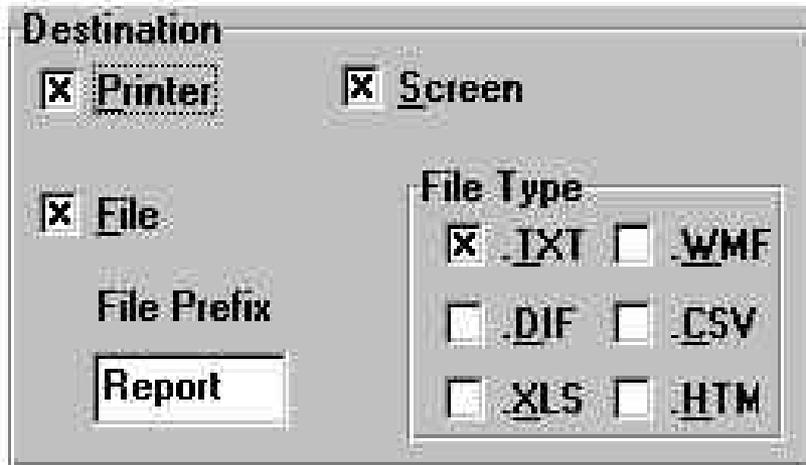
定义报告



From Data Analysis:



定义报告：报告输出目的地



报告的输出目的地可以是打印机、屏幕或者存储成报告文件。

报告可以存储成下列文件格式：

.TXT - 只有报告文本，存储成纯文本文件

.WMF - 每个报告的图形存储成meta file

.DIF - 数据存储成 EXCEL的DIF格式(Data Interchange Format)只适用于短报告格式

.CSV - 数据存储成数据库文件(Comma Separated Values),适用于短报告

.XLS - EXCEL报告格式

.HTM - 超文本格式,可以使用Internet浏览器浏览

使用网络浏览器IE查看报告

Netscape - [Mainpage]

File Edit View Go Bookmarks Options Directory Window Help

Back Forward Home Reload Images Open Print Find Stop

Location: file:///D:/HPCHEM/2/DATA/DEMO/005-0102.D/index.htm

What's New? What's Cool? Destinations Net Search People Software

Data File D:\HPCHEM\2\DATA\DEMO\005-0102.D Sample Name: Isocratic Std. 1

Injection Date : 4/19/94 7:52:24 AM	Seq. Line : 1
Sample Name : Isocratic Std. 1	Vial : 5
Acq. Operator : a.g.h.	Inj : 2
Acq. Instrument : HP LC 1050	Inj Volume : 2 µl
Acq. Method : DEMO.M	
Analysis Method : D:\HPCHEM\2\METHODS\DEMOCAL1.M	
Last changed : 8/7/98 4:16:52 PM by Your Name	
(modified after loading)	

this method is used to check linearity

DAD1 A, Sig=254.4 Ref=550,100 (DEMO\005-0102.D)

DAD1 B, Sig=230.4 Ref=550,100 (DEMO\005-0102.D)

Page 1 Page 2 Page 3

Document: Done

报告类型选择

None

Short

Detail

Header + Short

GLP + Short

GLP + Detail

Short + Spectrum

Detail + Spectrum

Full

Library Search

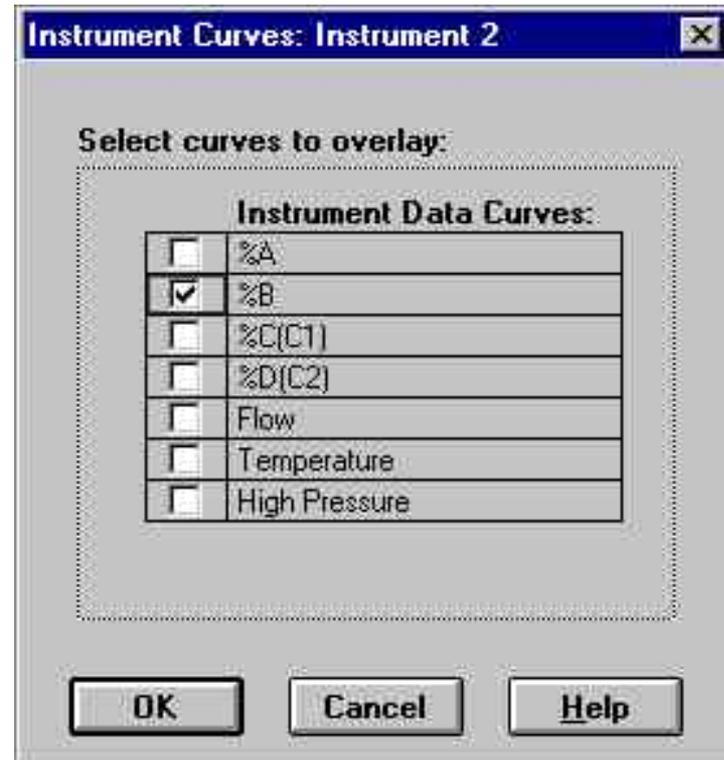
Performance

Performance + Noise

Performance + Library Search

Extended Performance

仪器参数曲线编辑



报告格式存贮到方法中

The screenshot shows the 'Instrument 2 [offline 1]: Data Analysis' software interface. The 'File' menu is open, and the 'Save' option is highlighted with a red oval. The 'Save' submenu is also visible, showing 'Method', 'Sequence', and 'Library...' options. The main window displays a chromatogram with peaks at 2.580 and 5.875 minutes. Below the chromatogram is a data table with columns: Compound, Lvl, Amt[ng/ul], Area, Rsp.Factor, Ref, and IS. The table contains data for Biphenyl at three levels (1, 2, 3) and two different methods (DAD1 C and DAD1 B). To the right of the table is a 'Calibration Curve' plot for Biphenyl, DAD1 A, showing a linear relationship between Area and Amount[ng/ul] with a correlation of 0.99911.

Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Rsp.Factor	Ref	IS
Biphenyl	1	30.000	174.290	1.7212e-1	No	
	2	50.000	312.650	1.5992e-1		
	3	75.000	446.990	1.6779e-1		
	3	75.000	81.502	9.2022e-1		
	3	75.000	241.400	2.0205e-1		
	1	30.000	37.190	8.0666e-1		
	2	50.000	256.860	1.9466e-1		
	3	75.000	81.502	9.2022e-1		
	1	30.000	50.232	5.9723e-1		
	2	50.000	241.400	2.0205e-1		
	3	75.000	446.990	1.6779e-1		



打印报告



Instrument 2 [offline 1]: Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Data Analysis

Print Report
Specify Report...
Edit Instrument Curves...
System Suitability
Automated Library Search...

C.M

Calibration

Short

All Loaded Signals

Overview

DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100 (DEMO\007-0301.D)

mAU

min

Calibration Table

#	RT	Signal	Compound	Lvl	Amt[ng/ul]	Area	Rsp.Factor	Ref	IS
1	2.580	DAD1 A	Biphenyl	1	30.000	174.290	1.7212e-1	No	
				2	50.000	312.650	1.5992e-1		
				3	75.000	446.990	1.6779e-1		
	2.580	DAD1 C		1	30.000	37.190	8.0666e-1		
				2	50.000	256.860	1.9466e-1		
				3	75.000	81.502	9.2022e-1		
	2.580	DAD1 B		1	30.000	50.232	5.9723e-1		
				2	50.000	241.400	2.0705e-1		

Calibration Curve

Biphenyl, DAD1 A
Area = 6.02757163 * Amt - 0.09416

Area

Rel. Res%(1): -3.569

Correlation: 0.99911

Amount[ng/ul]

Identify Peaks, calculate Results, print Report

打印报告

报告工具

选择校正工具

打印预览
定义报告
打印报告

显示/隐藏当前色谱图



系统适用性报告

化学工作站一共有四种系统适用性报告格式：**Performance**, **Performance+Noise**, **Performance+Lib Search**, **Extended Performance**。每种报告格式包含不同的报告内容。

Performance: 根据Edit Performance Limits对话框中设定的限度给出系统适用性报告。对于未校正的方法，报告结果包括：峰号，保留时间，峰面积，峰高，信号描述，半峰宽，对称性， K' ，塔板数和分辨率；对于校正的方法，报告结果包括：峰号，保留时间，化合物名称，浓度，信号描述，半峰宽，对称性， K' ，塔板数和分辨率。

Performance+Lib Search: 包括Performance报告及库检索报告。

Performance+Noise: 包括Performance报告及噪音检测报告。

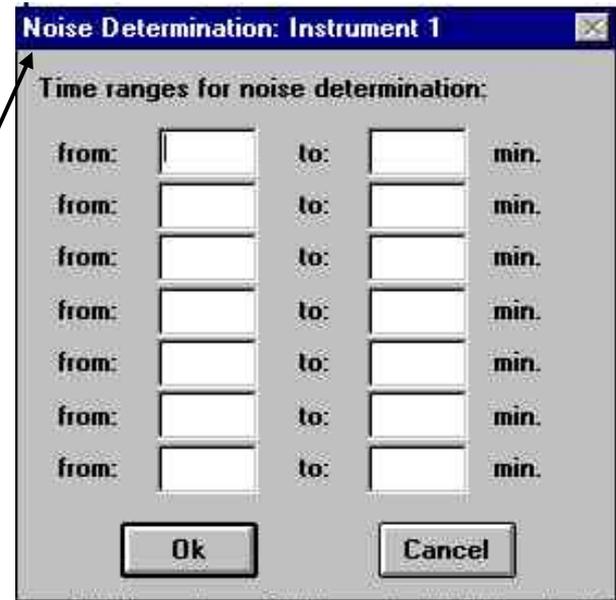
Extended Performance: 包括Performance报告格式及每个峰的色谱图。此报告格式只用于校正峰。

系统适应性报告(System Suitability)

在日常分析前或分析中，您可以用系统适用性报告检查分析系统的性能。此报告允许用户设定保留时间、峰高、峰面积、浓度、半峰宽、K'、塔板数、分辨率、选择性、库匹配以及校正峰纯度的上下限。同时可以测量基线噪音和基线漂移。

噪音检测：

选择Edit Noise Ranges命令进入噪音编辑对话框，在此对话框内可以编辑7组噪音检测区间。噪音检测区间不要选在有色谱峰出现的区域。



在Specify Report中选择Performance + Noise报告格式，噪音检测报告会单独给出。噪音检测报告包括三种噪音计算方法的结果（六倍标准偏差法，峰对峰测量法及ASTM测量法），噪音的来回漂移(wander)及噪音漂移(drift)。同时计算每个峰的信噪比。噪音检测方法原理见《了解您的化学工作站》第249页。

Noise determination:

Time range		Noise	Noise	Noise	Wander	Drift
from	to	(6*SD)	(PtoP)	(ASTM)		
[min]	[min]	[mAU]	[mAU]	[mAU]	[mAU]	[mAU/h]
3.000	5.000	0.8355	0.7291	3.496e-2	0.5758	-5.964

RetTime	k'	Area	Height	Symm.	Width	Plates	Resol	Signal
[min]		[mAU*s]	[mAU]		[min]		ution	/Noise
0.747	0.87	294.70596	104.85095	0.72	0.0496	1254	-	125.5
1.021	1.55	260.76071	76.47234	0.70	0.0570	1776	3.02	91.5
2.565	5.41	176.27490	26.84432	0.64	0.0945	4079	11.97	32.1
5.837	13.59	251.17810	16.85114	0.67	0.2107	4253	12.59	20.2

编辑系统性能限度:

选择Edit Performance Limits命令进入编辑系统性能限度对话框。此框内可以设定不同系统参数的上下限。例如在Retention time参数设置框内输入期望保留时间范围（下限和上限）。

Set range limits for quality criteria acceptance: Instrument 1

Note: Values falling outside any defined range will be indicated in the report!

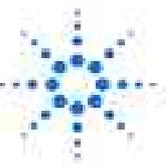
	low	high		low	high
Retention time	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Peak area	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Peak height	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Amount	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Peakwidth at half height	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Tangent Peakwidth	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Sigma Peakwidth	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Peakwidth at tailing	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Peak symmetry	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Tailing factor	<input type="text"/>	<input type="text"/>
k'	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Plates (sigma method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Plates (tangent method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Plates (statistic method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Plates (halfwidth method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Resolution (sigma method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Resolution (tangent method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Resolution (statistic method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Resolution (halfwidth method)	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Selectivity	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Skew	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Excess	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Library match factor	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Peak purity	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Measured mobility	<input type="text"/>	<input type="text"/>			

OK Cancel Help

在Specify Report报告中选择Performance报告格式，如果样品测量值超出设定的限制范围，报告中会用>或<标记。>代表测量值超出设定上限，<代表测量值低于下限。

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100
 Results obtained with enhanced integrator!

RetTime [min]	k'	Area [mAU*s]	Height [mAU]	Symm.	Width [min]	Plates	Resol ution	Select ivity
0.747<	0.87	294.70596>	104.85095	0.72	0.0496	1254	-	-
1.021	1.55	260.76071	76.47234	0.70	0.0570	1776	3.02	1.79
2.565	5.41	176.27490<	26.84432	0.64	0.0945	4079	11.97	3.49
5.837>	13.59	251.17810	16.85114	0.67	0.2107	4253	12.59	2.51



GLP报告类型

化学工作站中有两种GLP报告格式：GLP+Short，GLP+Detail。

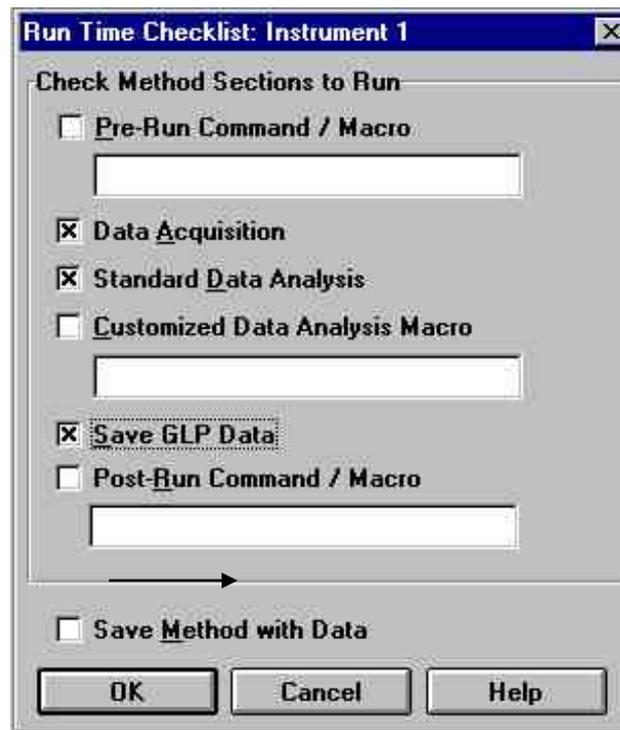
GLP+Short: 包括标题页，样品信息，操作条件，Logbook，色谱图和定量结果。标题页存贮在Method子目录下，文件名为RPTHEAD.TXT，可以对其进行修改。

GLP+Detail: 包括标题，样品信息，操作条件，Logbook，色谱图，定量结果和校正曲线。标题存贮在Method子目录下，文件名为RPTHEAD.TXT。可以对此文件进行修改。

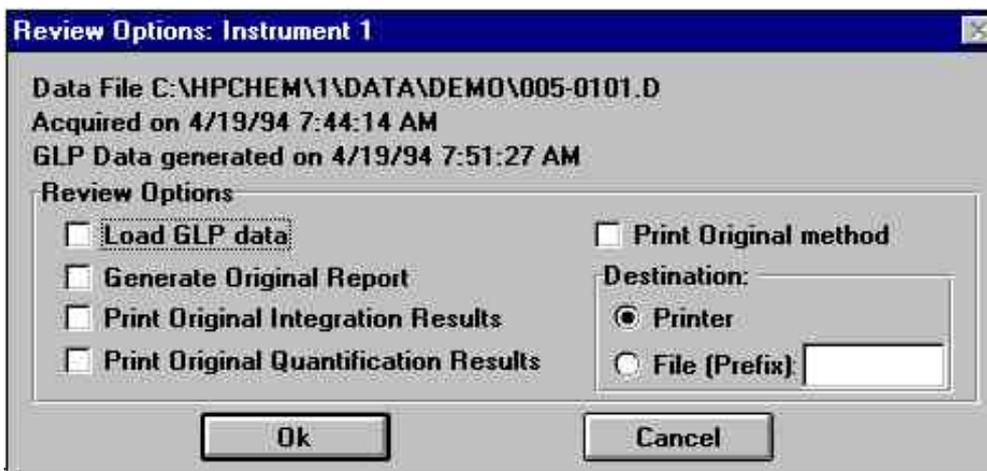
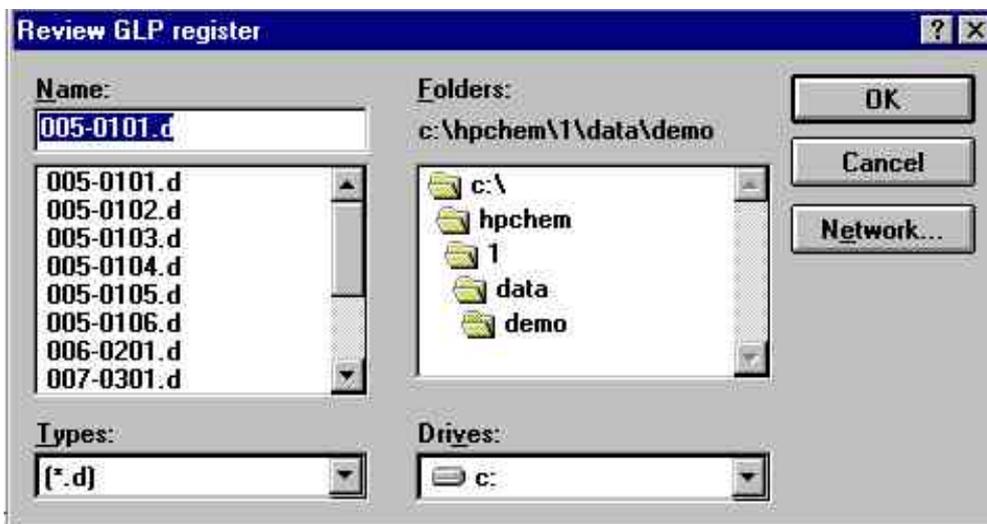
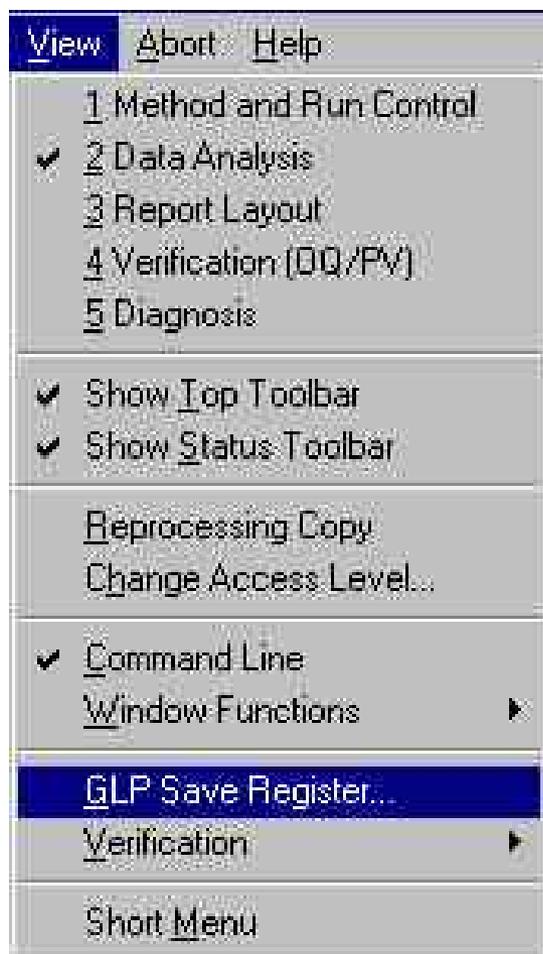
存贮GLP数据

在运行时间表(Run Time Checklist)中，选择Save GLP Data。GLP数据与分析方法以二进制方式记录在GLPSave.Reg文件中。此文件不可修改。GLPSave.Reg中包括以下信息：

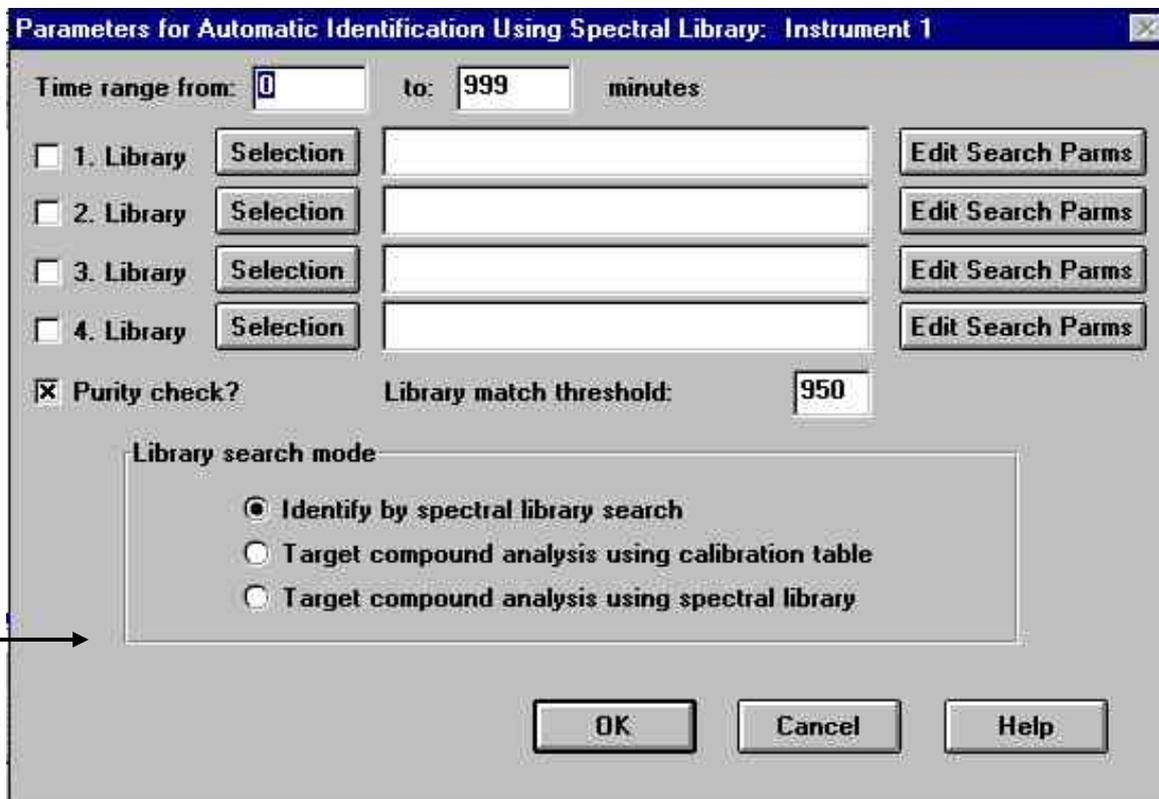
仪器设定参数；仪器性能参数；信号；积分结果；定量结果；数据分析方法；**Logbook**



查看GLP数据



自动库检索



要得到一个库检索报告，首先从Specify Report中选择Library Search或Performance+Lib Search报告形式。

选择Automated Library Search命令，进入自动检索编辑对话框，通过此对话框可以编辑检索参数。



自动库检索参数设置

Time Range: 定义检索时间范围。

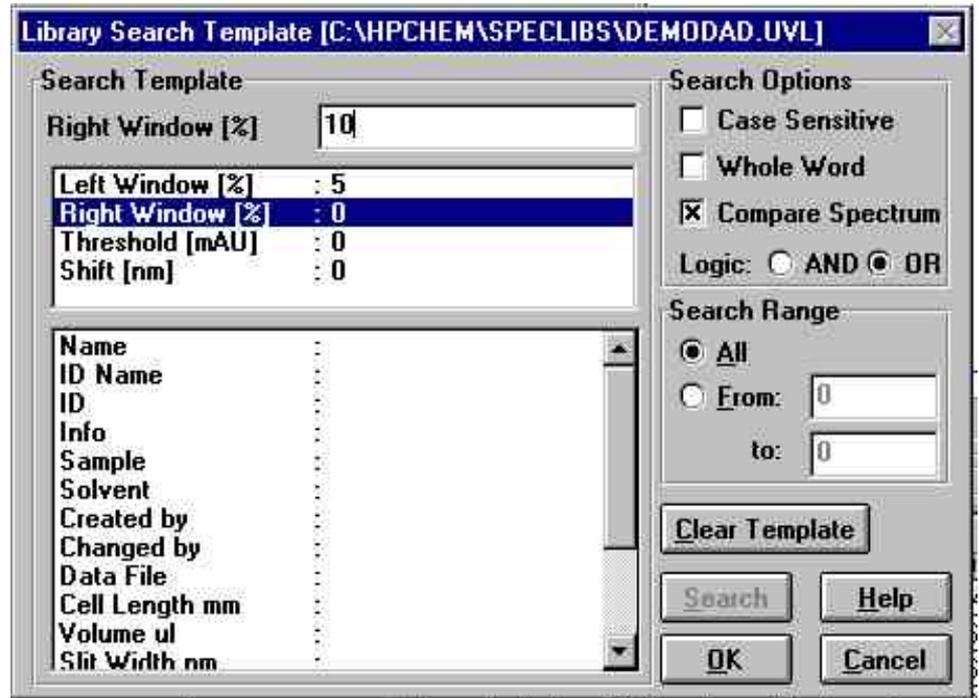
Library: 选择标准谱库，可以同时选择四个谱库。

Edit Search Params: 编辑检索参数。利用 Left Window[%]和Right Window[%]可以定义检索区间。

Peak Purity Check: 是否进行峰纯度检测。如果进行峰纯度检测，还可以设置库检索匹配阈值。库检索匹配阈值决定样品的检索结果。如果样品的库检索匹配阈值低于设定值，则此样品与标准谱库检索谱图不匹配。

Library Search Modes: 有三种库检索方式：

- **Identification by spectral library search:** 在设定检索区间内对每个化合物进行库检索。
- **Target compound analysis using the calibration table:** 在规定检索区间内对校正表给定的化合物进行检索。
- **Target compound analysis using the spectra library:** 在检索区间内对校正表给的化合物进行检索。校正表内给定的化合物名称一定要与标准谱库中检索到的标准物名称一致以保证匹配度。



库检索报告

Meas. RetTime [min]	Library RetTime [min]	CalTbl RetTime [min]	Sig	Area %	Purity Factor	Library #	Match	Name
0.936	2.857	-	1	0.869045	1000	1	839	x Naphthalene
1.396	5.211	-	1	0.419714	943	u	1	- ?? Cyclopenta[c,d]pyrene
1.396	12.077	-	1	0.419714	943	d	1	848 x Perylene
1.725	5.484	-	1	0.111711	-	1	897	x Phenanthrene
1.869	4.544	-	1	19.944410	946	u	1	589 x Fluorene
1.869	1.570	-	1	19.944410	946	d	1	280 x Biphenyl
3.432	7.284	-	1	0.195060	1000	1	778	x Fluoranthene
4.854	4.727	-	1	1.820254	1000	1	1000	Triphenylene
5.344	5.211	-	1	1.828405	1000	1	999	Cyclopenta[c,d]pyrene
5.607	5.632	-	1	4.095749	1000	1	995	Benz[a]anthracene

检索报告中不同栏中有不同的标记，这些标记解释如下：

u: 化合物在峰上坡处检测到不纯。

d: 化合物在峰下坡处检测到不纯。

X: 匹配因子低于设定阈值。

?: 搜索到的化合物名称已经分配给另一个匹配度更好的色谱峰。对于该色谱峰，无法找到一个匹配度更好的化合物与之对应。

自动峰纯度分析

化学工作站有三种报告格式可以进行峰纯度分析：

- ***Short+Spectra:***

包括仪器操作条件，定量结果以及峰纯度谱图。

- ***Detail+Spectra:***

包括标题，仪器操作条件，定量结果，校正曲线和峰纯度谱图。

- ***Full:***

包括标题，样品信息，仪器操作条件，Logbook，色谱图定量结果以及峰纯度谱图。

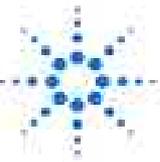
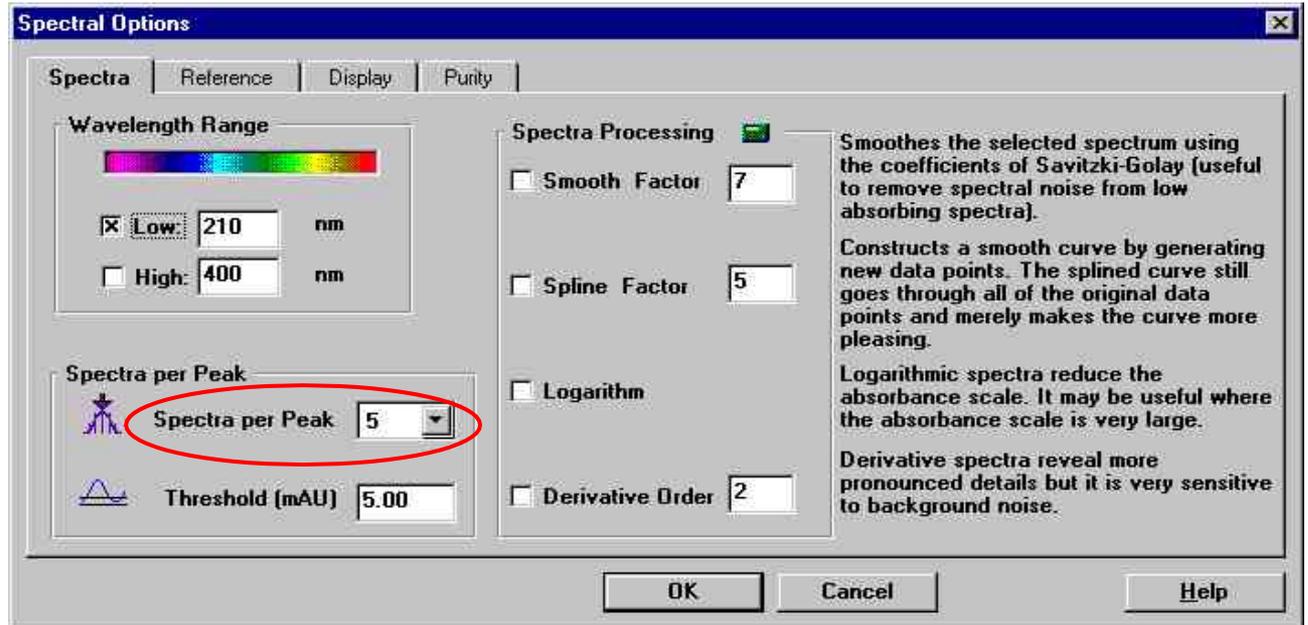
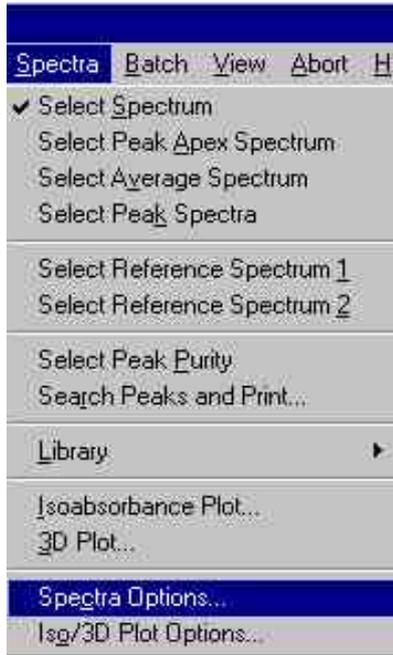
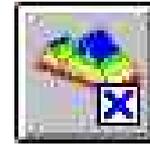
第七章 DAD高级功能

The screenshot shows the 'Instrument 2 (offline 1): Data Analysis' software interface. The 'Spectra' menu is open, with 'Select Spectrum' highlighted. Other menu items include 'Select Peak Apex Spectrum', 'Select Average Spectrum', 'Select Peak Spectra', 'Select Reference Spectrum 1', 'Select Reference Spectrum 2', 'Select Peak Purity', 'Search Peaks and Print...', 'Library', 'Isoabsorbance Plot...', '3D Plot...', 'Spectra Options...', 'Purity Options...', and 'Iso/3D Plot Options...'. The main window displays two chromatograms: one on the left with peaks at 0.936, 1.396, 1.725, and 3.432 minutes, and one on the right with peaks at 9.428, 9.733, 10.165, 11.474, and 12.835 minutes. The y-axis is labeled 'mAU' and the x-axis is 'min'. Below the software window, the text 'Display Options' and '显示紫外谱图' is displayed, with an arrow pointing from the 'Spectra' menu to this text.

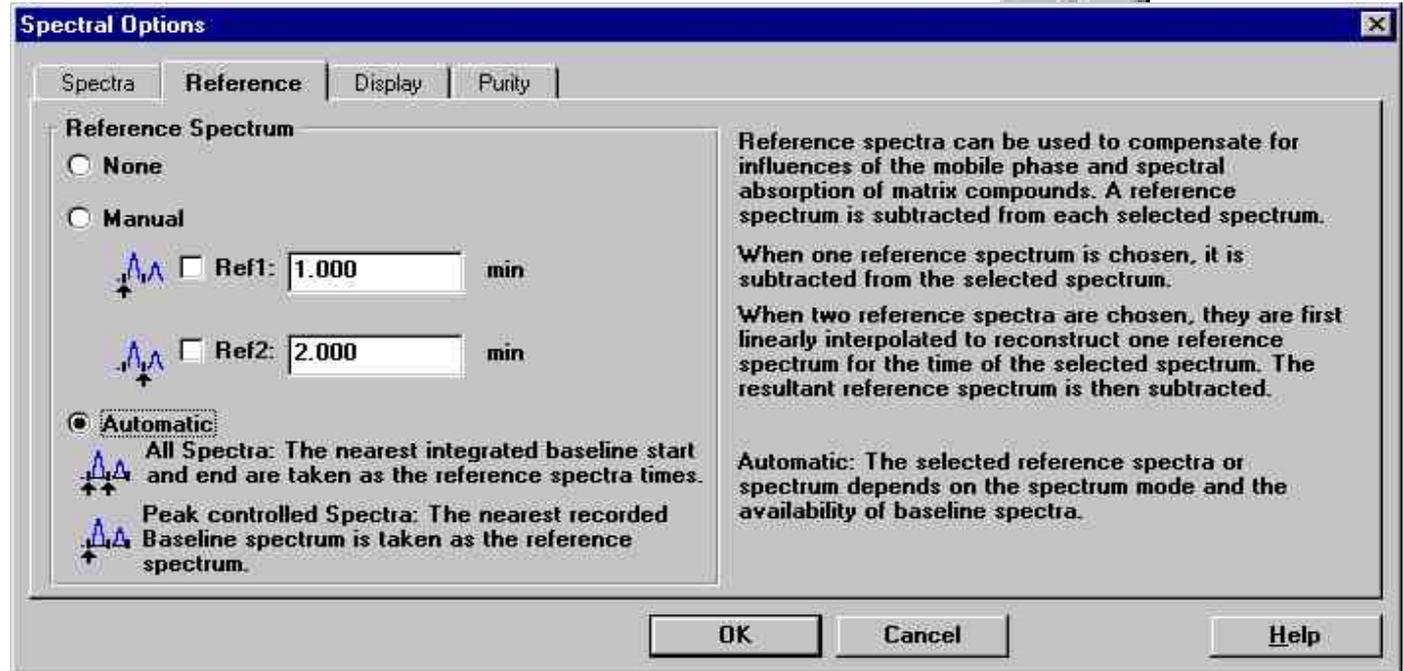
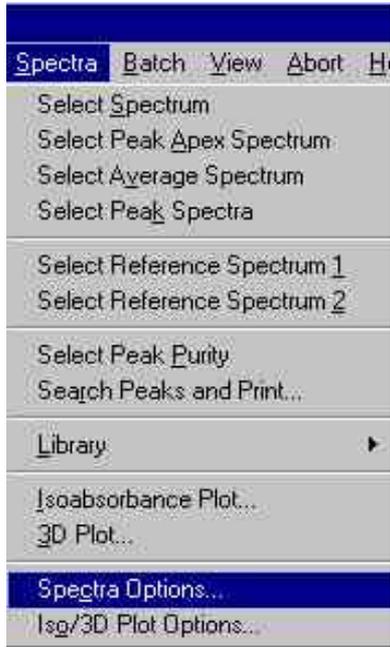
Display Options

显示紫外谱图

光谱选项 - 紫外谱图



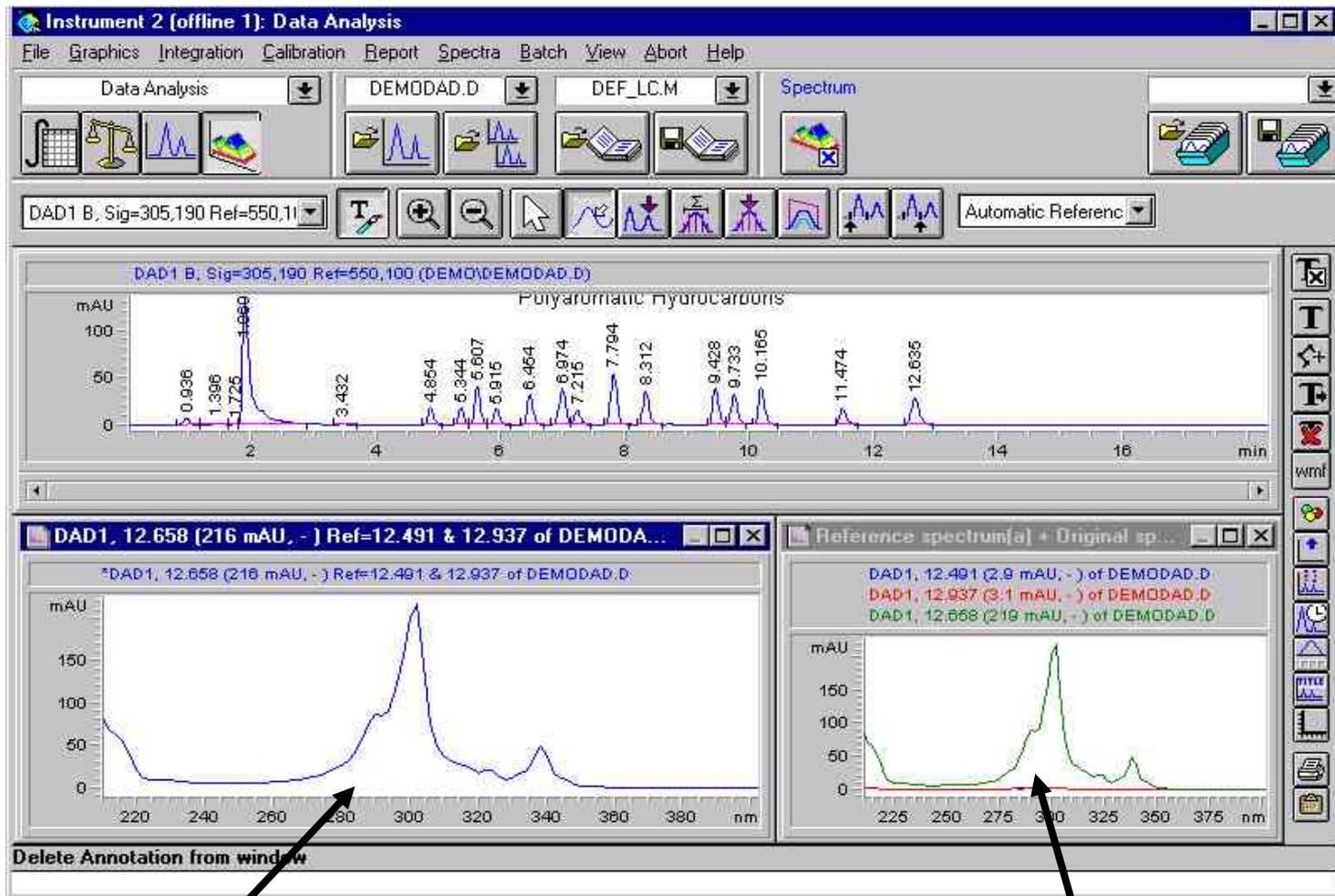
光谱选项



- 自动扣除背景
- 平滑谱图
- 使用导数谱图



紫外谱图显示



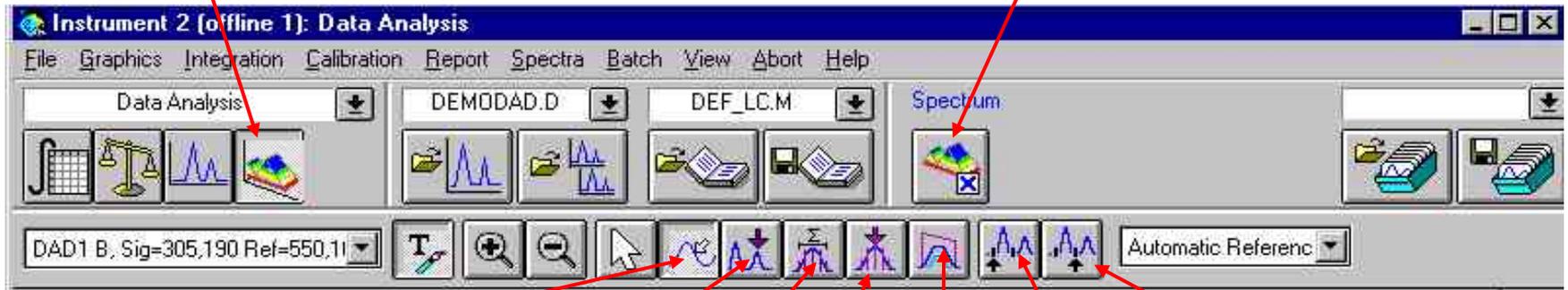
扣除背景的紫外谱图

紫外谱图和参比谱图

谱图处理工具

谱图处理工具图标

光谱选项



选择色谱图上任意一点紫外谱图

选择峰顶紫外谱图

平均谱图

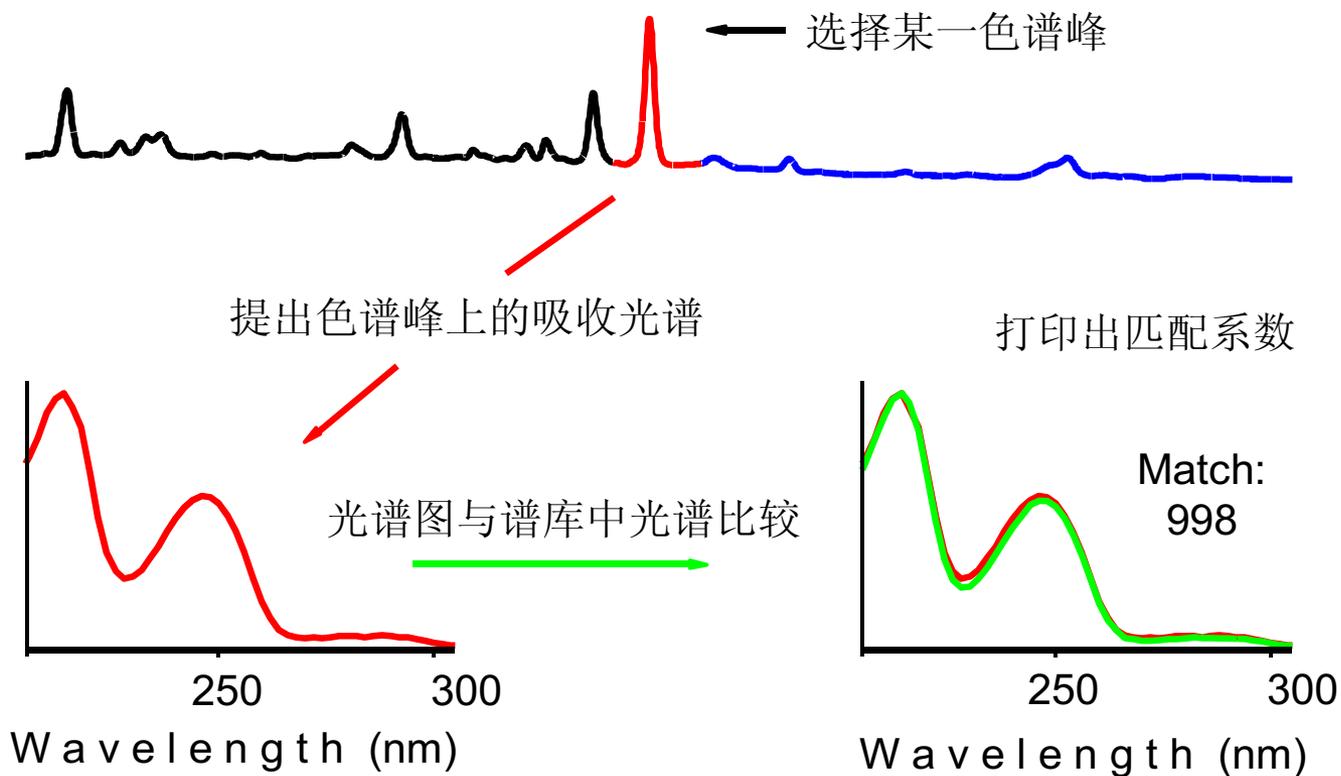
选择一组紫外谱图

选择峰纯度

选择第一个参比

选择第二个参比峰

紫外谱库：原理



紫外谱库: 当前的局限性

- 紫外谱图不特征。
- 紫外谱图依赖于流动相的变化而变化。
- 未分离开的峰会给出错误结论。
- 重叠峰会给出错误结论。
- 没有商业谱库。

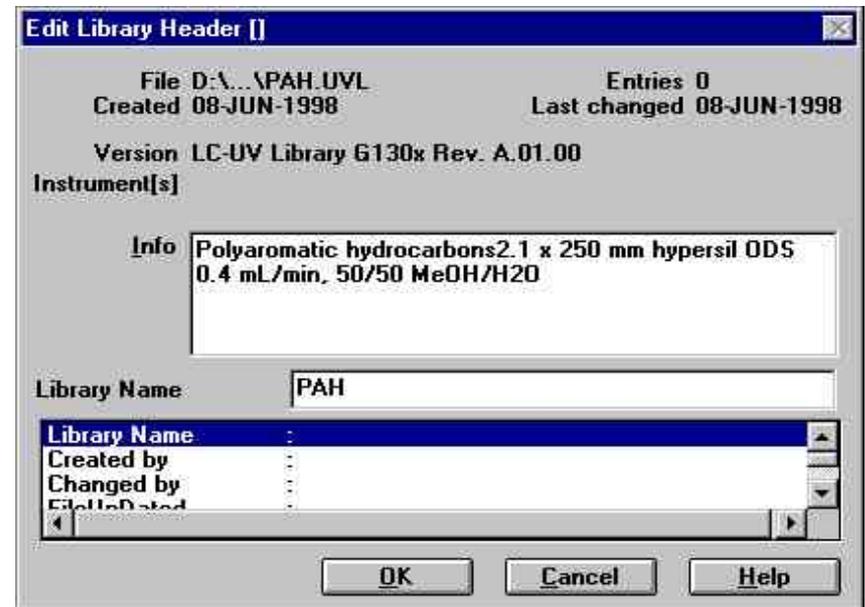
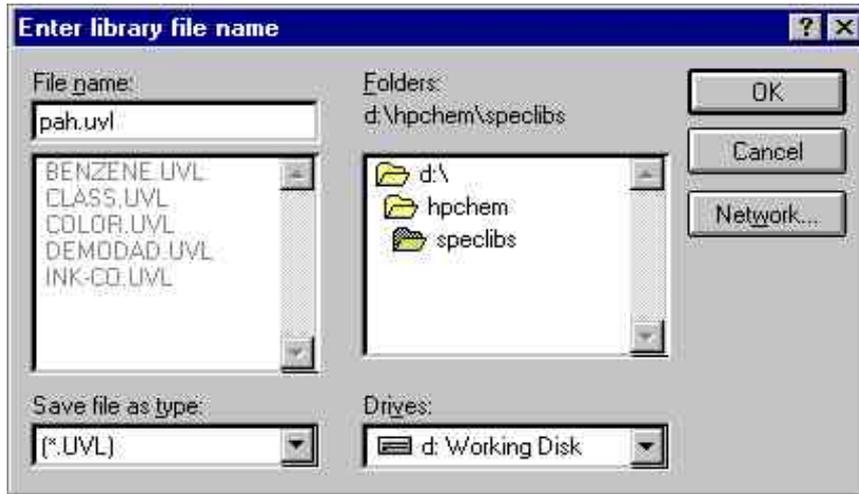
影响谱图匹配的因素

- 狭缝宽度
- 步径
- 保留时间窗口
- 吸收阈值
- 背景噪音
- 谱图噪音
- 导数谱图

创建谱库

The screenshot shows the 'Instrument 2 (offline 1): Data Analysis' software interface. The 'Spectra' menu is open, and the 'Library' option is selected, which has opened a sub-menu. The sub-menu contains the following options: 'New Library...', 'Open Library...', 'Save Library...', 'Save Library As...', 'Library Info...', 'Manage Entries...', 'Add Entries...', 'Print Library Entry...', 'Search Spectrum', 'Show Search Results...', 'Print Search Results...', 'Edit Search Template...', and 'Delete Library...'. The main window displays a chromatogram with peaks labeled at retention times 0.836, 1.396, 1.726, and 3.432. The y-axis is labeled 'mAU' and ranges from 0 to 100. The x-axis is labeled 'min' and ranges from 0 to 16. The status bar at the bottom shows keyboard shortcuts: [F1=Help] [F3=Recall] [F5=StartRun] [F6=StartSeqRun] [F8=Stop] [F11=NextWindow] and the text 'Create new Spectra Library'.

输入谱库名称及描述



提取化合物光谱图

The screenshot displays the 'Instrument 2 (offline 1): Data Analysis' software interface. The 'Spectra' menu is open, showing options like 'Select Spectrum', 'Select Peak Apex Spectrum', and 'Automatic Reference'. The 'Automatic Reference' option is circled in red. The main window shows a chromatogram with peaks at retention times 0.936, 1.396, 1.725, and 3.432. A spectrum plot is also visible, showing peaks at 9.428, 9.733, 10.165, 11.474, and 12.635 minutes. The y-axis is labeled 'mAU' and the x-axis is labeled 'min'.

Instrument 2 (offline 1): Data Analysis

File Graphics Integration Calibration Report Spectra Batch View Abort Help

Data Analysis DEMO

1) DAD1 B, Sig=305,190 Ref=55C

DAD1 B, Sig=305,190 Ref=55C

mAU

100

50

0

0.936 1.396 1.725 3.432

2.5

Spectrum PAH.UVL

Automatic Reference

9.428 9.733 10.165 11.474 12.635

10 12.5 15 17.5min

pyrocarbons

[F1=Help] [F3=Recall] [F5=StartRun] [F6=StartSeqRun] [F8=Stop] [F11=NextWindow]

Select spectrum at peak apex position

把谱图加入谱库



Spectra Batch View Abort Help

- Select Spectrum
- Select Peak Apex Spectrum
- Select Average Spectrum
- Select Peak Spectra
- Select Reference Spectrum 1
- Select Reference Spectrum 2
- Select Peak Purity
- Search Peaks and Print...

Library

- New Library...
- Open Library...
- Save Library...
- Save Library As...
- Library Info...
- Manage Entries...
- Add Entries...**
- Print Library Entry...
- Search Spectrum
- Show Search Results...
- Print Search Results...
- Edit Search Template...
- Delete Library...

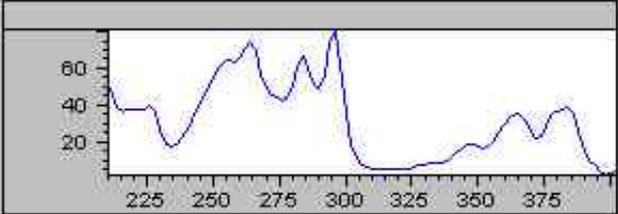
Add Library Entry [D:\HPCHEM\SPECLIBS\PAH.UVL]

Entry #: 1 Created: 24-APR-1998 Changed: 24-APR-1998

Name: benzo(a)pyrene

Name :
ID Name :
ID : 0
Time min : 8.328
Info :
Sample :
Solvent :

DAD1, 8.328 (78.5 mAU, -) of D



60
40
20

225 250 275 300 325 350 375

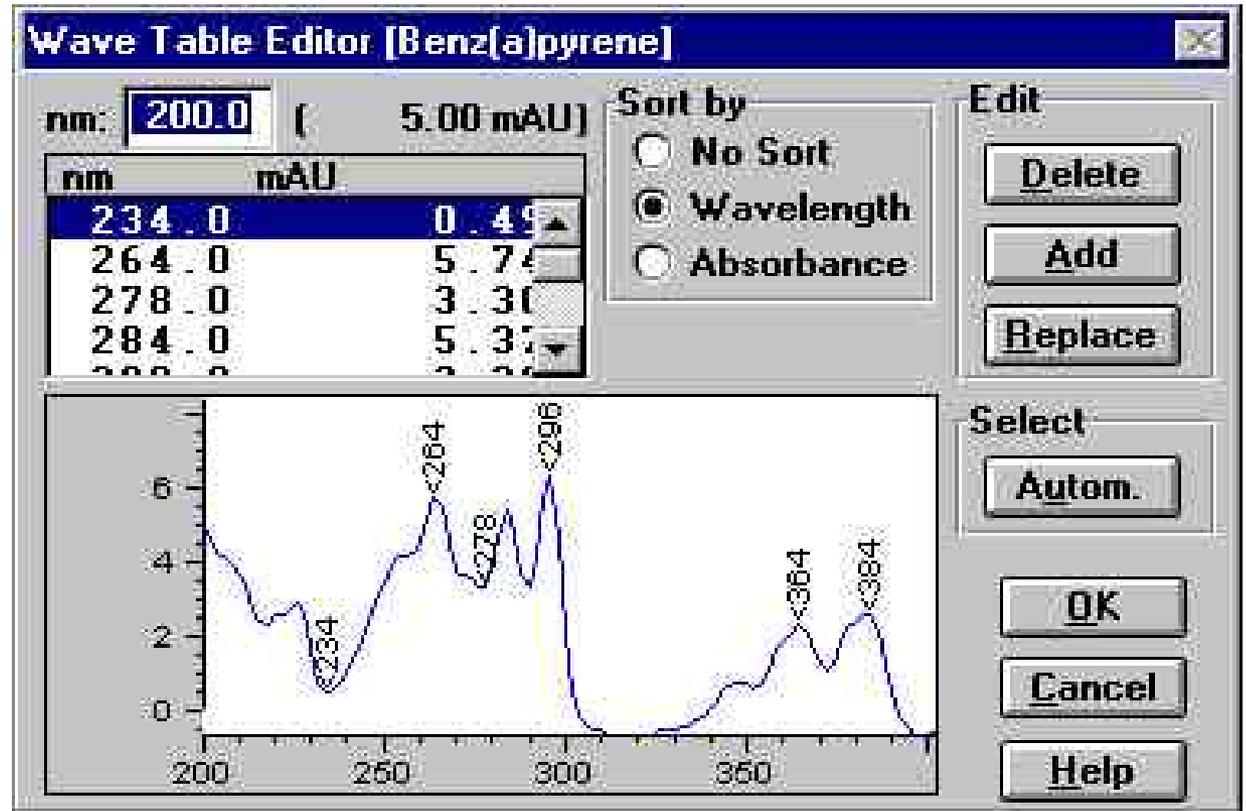
Add Edit Wavetable Cancel OK Help



波长表

Edit Wavelength

工作站自动标出物质的最大吸收和最小吸收波长。



谱图管理



Spectra Batch View Abort Help

- Select Spectrum
- Select Peak Apex Spectrum
- Select Average Spectrum
- Select Peak Spectra
- Select Reference Spectrum 1
- Select Reference Spectrum 2
- Select Peak Purity
- Search Peaks and Print...
- Library**
- Isoabsorbance Plot...
- 3D Plot...
- Spectra Options...
- Purity Options...
- Iso/3D Plot Options...

- New Library...
- Open Library...
- Save Library...
- Save Library As...
- Library Info...
- Manage Entries...**
- Add Entries...
- Print Library Entry...
- Search Spectrum
- Show Search Results...
- Print Search Results...
- Edit Search Template...
- Delete Library...

Spectra Library Manager [C:\... \DEMODADN.UVL]

Component ID Name

- 2,2'-binaphthyl (21)
- ACENAPHTHALENE (18)
- Acenaphthene (16)
- Anthanthrene (15)
- Anthracene (3)
- ANTHRACHINONE (19)
- BENZ(a)ANTHRACENE (11)
- Benz(a)pyrene (12)**
- Benz(e)pyrene (8)
- BENZENE (20)
- Benzo(b)fluoranthene (9)
- Benzo(g,h,i)perylene (13)
- Benzo(k)fluoranthene (10)
- Chrysene (7)
- Fluoranthene (4)
- Fluorene (2)
- Indeno(1,2,3-cd)pyrene (14)

Edit Entry

Delete Entry

Show Spectra

Copy Spectra

Select All

OK Help



存贮谱库文件



Spectra Batch View Abort He

- ✓ Select Spectrum
- Select Peak Apex Spectrum
- Select Average Spectrum
- Select Peak Spectra
- Select Reference Spectrum 1
- Select Reference Spectrum 2
- Select Peak Purity
- Search Peaks and Print...

Library

- New Library...
- Open Library...
- Save Library...
- Save Library As...
- Library Info...
- Manage Entries...
- Add Entries...
- Print Library Entry...
- Search Spectrum
- Show Search Results...
- Print Search Results...
- Edit Search Template...
- Delete Library...

Enter library file name

File name: pah.uvl

Folders: d:\hpchem\spectlibs

BENZENE.UVL
CLASS.UVL
COLOR.UVL
DEMODAD.UVL
INK-CO.UVL

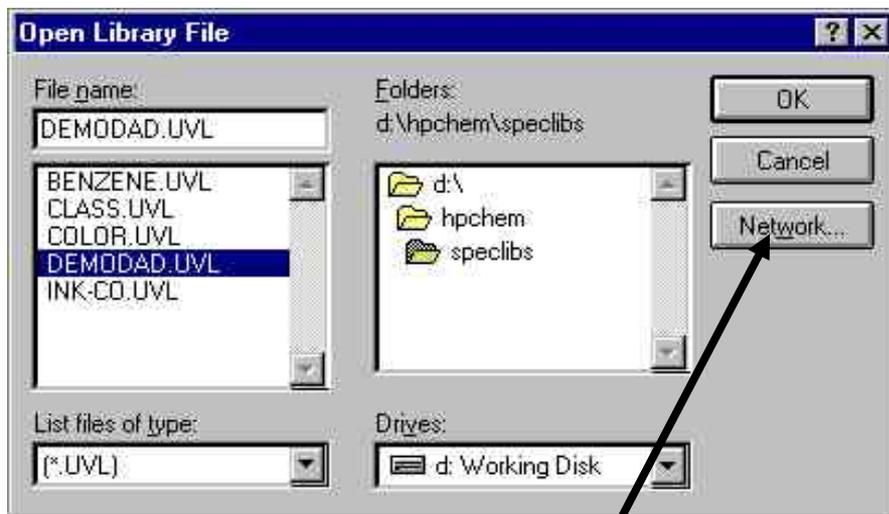
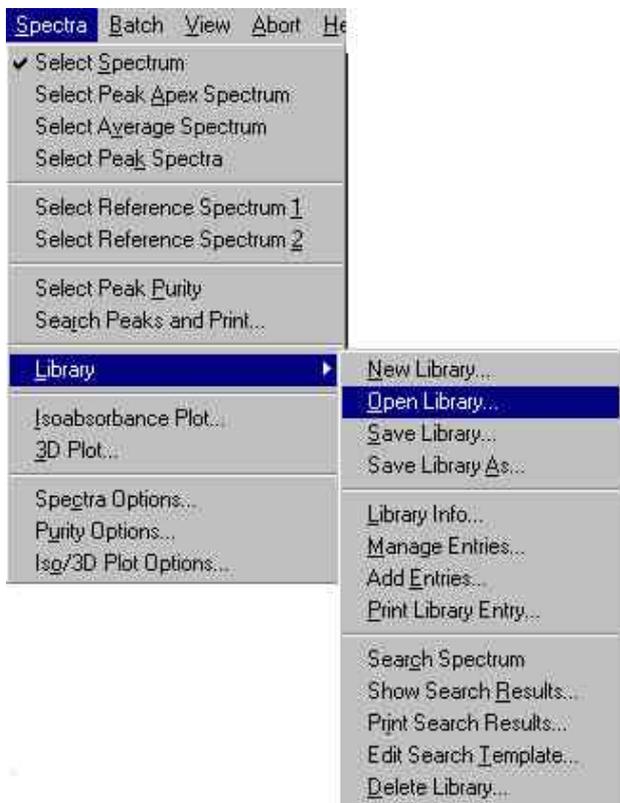
d:\
hpchem
spectlibs

Save file as type: (*.UVL)

Drives:

OK
Cancel
Network...

开始谱图检索 - 打开谱库



可以打开自己工作站中的谱库，
也可以通过网络调用网上的谱库。



检索模板



Spectra Batch View Abort He

- Select Spectrum
- Select Peak Apex Spectrum
- Select Average Spectrum
- Select Peak Spectra
- Select Reference Spectrum 1
- Select Reference Spectrum 2
- Select Peak Purity
- Search Peaks and Print...

Library

- New Library...
- Open Library...
- Save Library...
- Save Library As...
- Library Info...
- Manage Entries...
- Add Entries...
- Print Library Entry...
- Search Spectrum
- Show Search Results...
- Print Search Results...
- Edit Search Template...**
- Delete Library...

Library Search Template [D:\HPCHEM\SPECLIBS\PAH.UVL]

Search Template

Threshold [mAU] : 2

Left Window [%]	: 5
Right Window [%]	: 5
Threshold [mAU]	: 0
Shift [nm]	: 0

Name
ID Name
ID
Info
Sample
Solvent
Created by
Changed by
Data File
Cell Length mm
Volume ul
Slit Width nm

Search Options

- Case Sensitive
- Whole Word
- Compare Spectrum

Logic: AND OR

Search Range

- All
- From: 0 to: 0

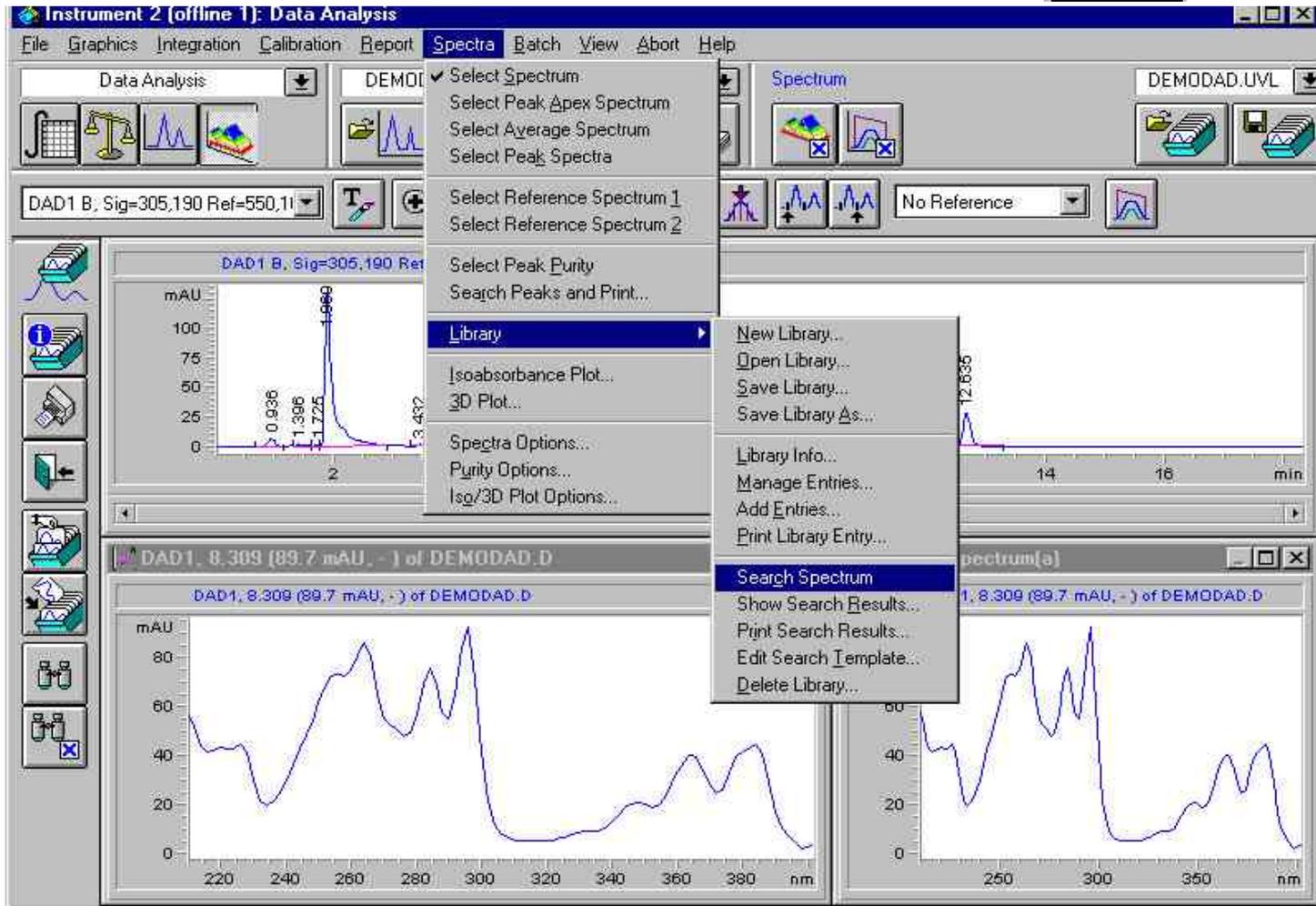
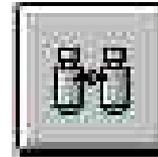
Clear Template

Search Help

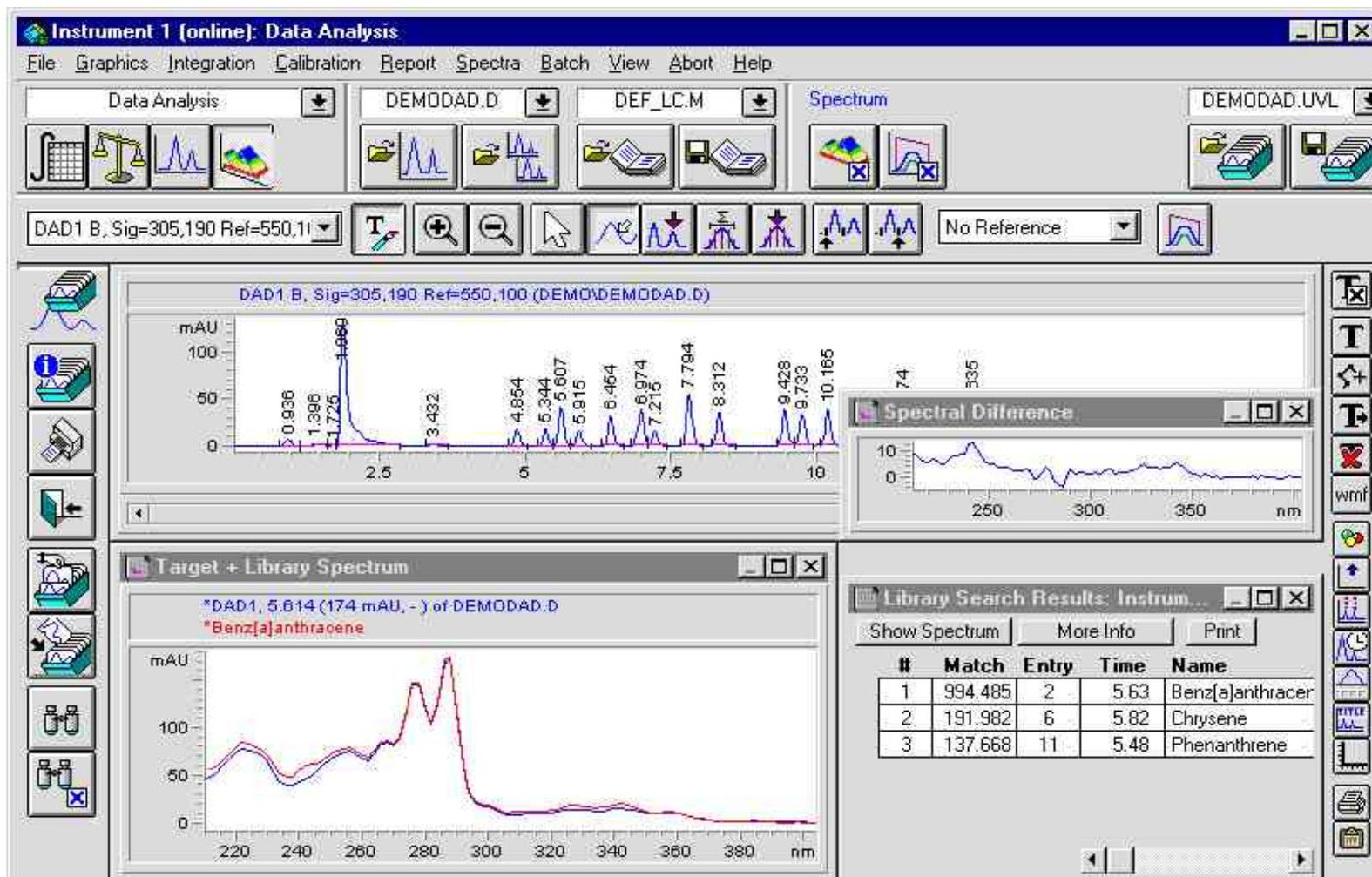
OK Cancel



检索谱图



检索结果



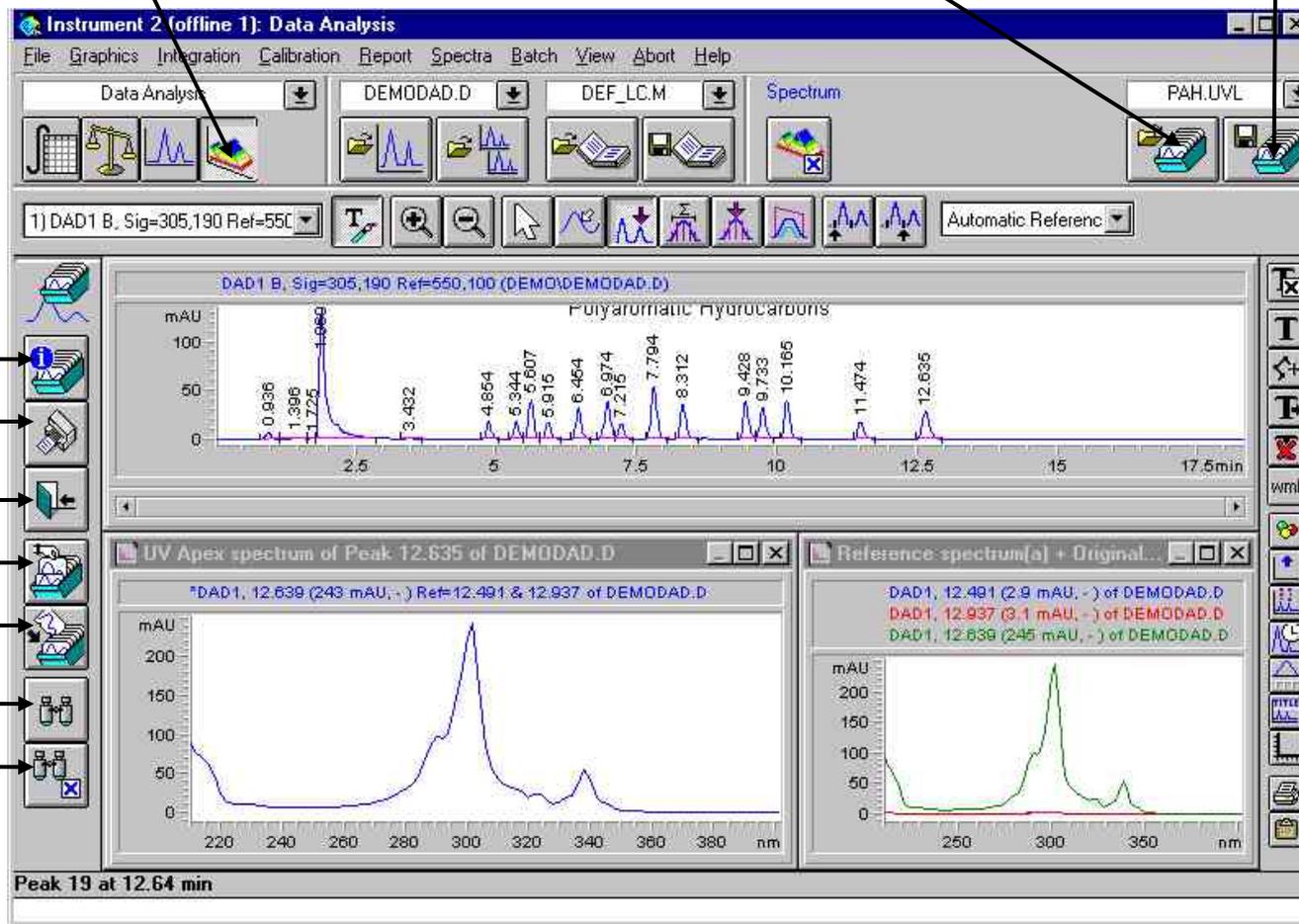
检索工具

谱图处理工具

调用谱库

保存谱库

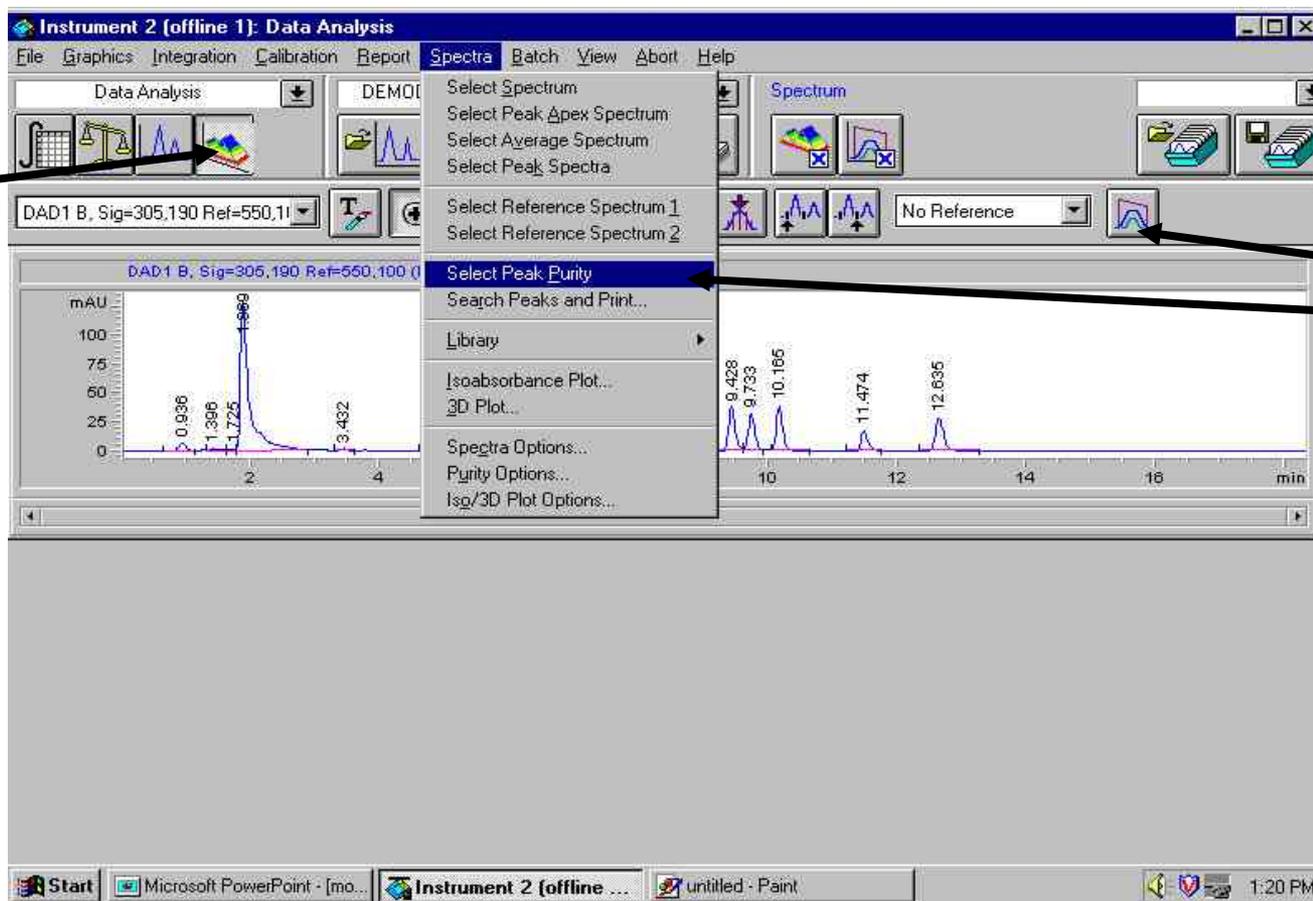
- 编辑谱库标题信息
- 打印谱库中谱图
- 退出当前谱库
- 编辑谱库中谱图
- 向谱库添加光谱
- 进行谱库检索
- 编辑谱库检索条件



峰纯度检测

在峰的洗脱过程中，可以通过比较所记录的吸收光谱图来评估色谱峰是否包含不纯的物质。

光谱处理工具图标



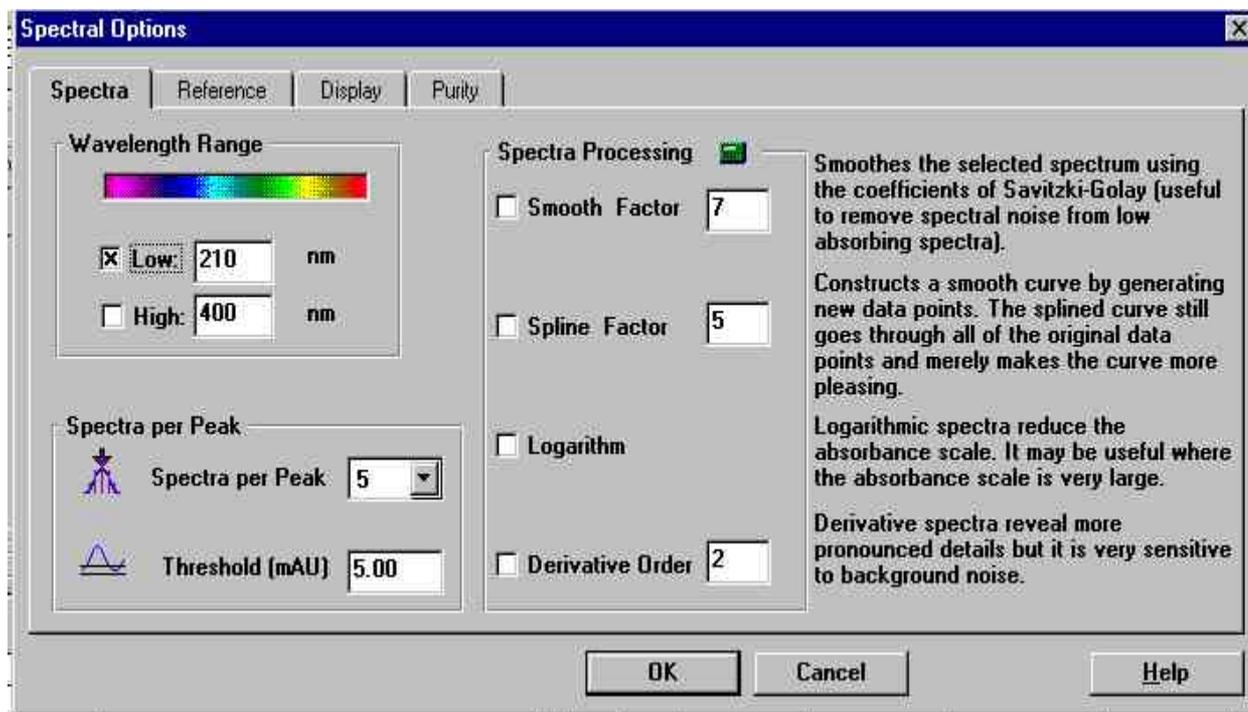
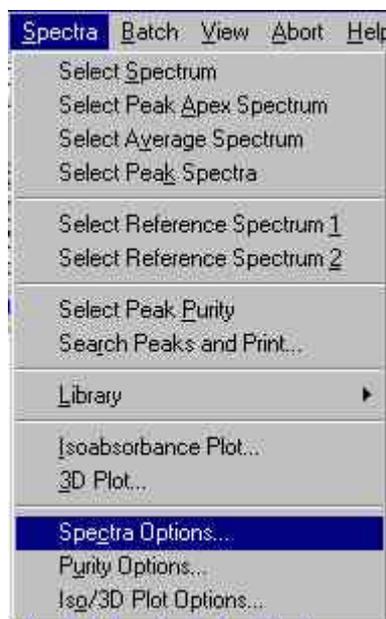
峰纯度检测

峰纯度检测

峰纯度检测就是确认一个色谱峰是纯物质还是含有其它物质的过程。这个过程是要依靠峰流出中所记录到的光谱进行比较而实现的。通常对每个峰以三个光谱图来确认纯度。其中两个光谱取自于固定点（斜率上升点和斜率下降点），另一个取自于最高点（最高点或顶点光谱）。如果需要，还可以选择5、7、9或All 光谱图来进行纯度计算。

如果这些光谱不相同，理论上讲这个峰含有不纯物。这种光谱不纯可能是由一个或多个化合物引起的，也可能是由背景吸收引起的。

要进行峰纯度检测，首先选择Spectra菜单下Spectra Option，进行峰纯度参数编辑。



峰纯度参数设置

Spectra: 此选项允许用户选择光谱处理参数，工作站按用户选择的参数进行谱图处理，然后显示在屏幕上。此选项共有三组参数：

Wavelength Range: 设定光谱在屏幕上的显示范围。并且可通过此参数范围的设定去除流动相或背景噪音吸收的干扰。

Spectra Per Peak: 选择从色谱峰上提取光谱图个数。例如选择7，则从色谱峰上等距离选择7个点进行处理。同时选择Threshold, 去除杂质峰——只有高于设定Threshold值的峰才被显示。

Spectra Processing: 选择光谱处理过程。

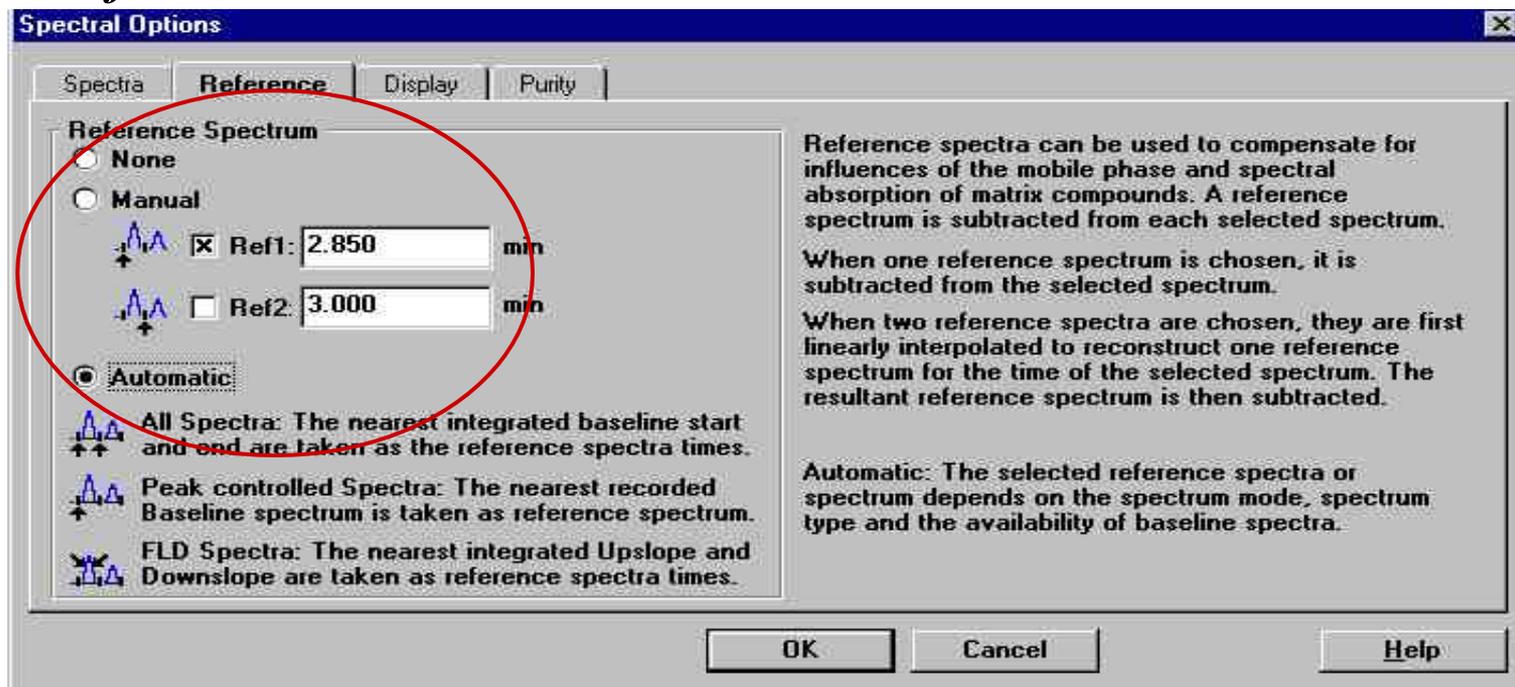
Smooth Factor: 当噪音干扰非常利害，即噪音光谱与样品光谱吸收强度相近时，峰纯度检测的可靠性受到限制，选用平滑参数处理谱图，可以降低系统噪音，使得平滑后的光谱图更可靠，同时改变谱图轮廓。此值越高，谱图平滑越利害。建议在作谱图间比较时，使用相同的平滑参数。

Spline Factor: 当采集谱图时使用低灵敏度，得到的谱图可能象个多边形。通过Spline Factor选择，在原始数据点之间加入新数据点进行数学处理，产生一条平滑的曲线，使谱图更美观。此值越大，新增数据点越多。

Logarithm: 对每张谱图取对数，以缩小显示比例。

Derivative Order: 对选择的谱图取导数，以揭示谱图更细节的信息。

Reference: 设定参比吸收，然后从选择的样品谱图中扣除参比吸收。

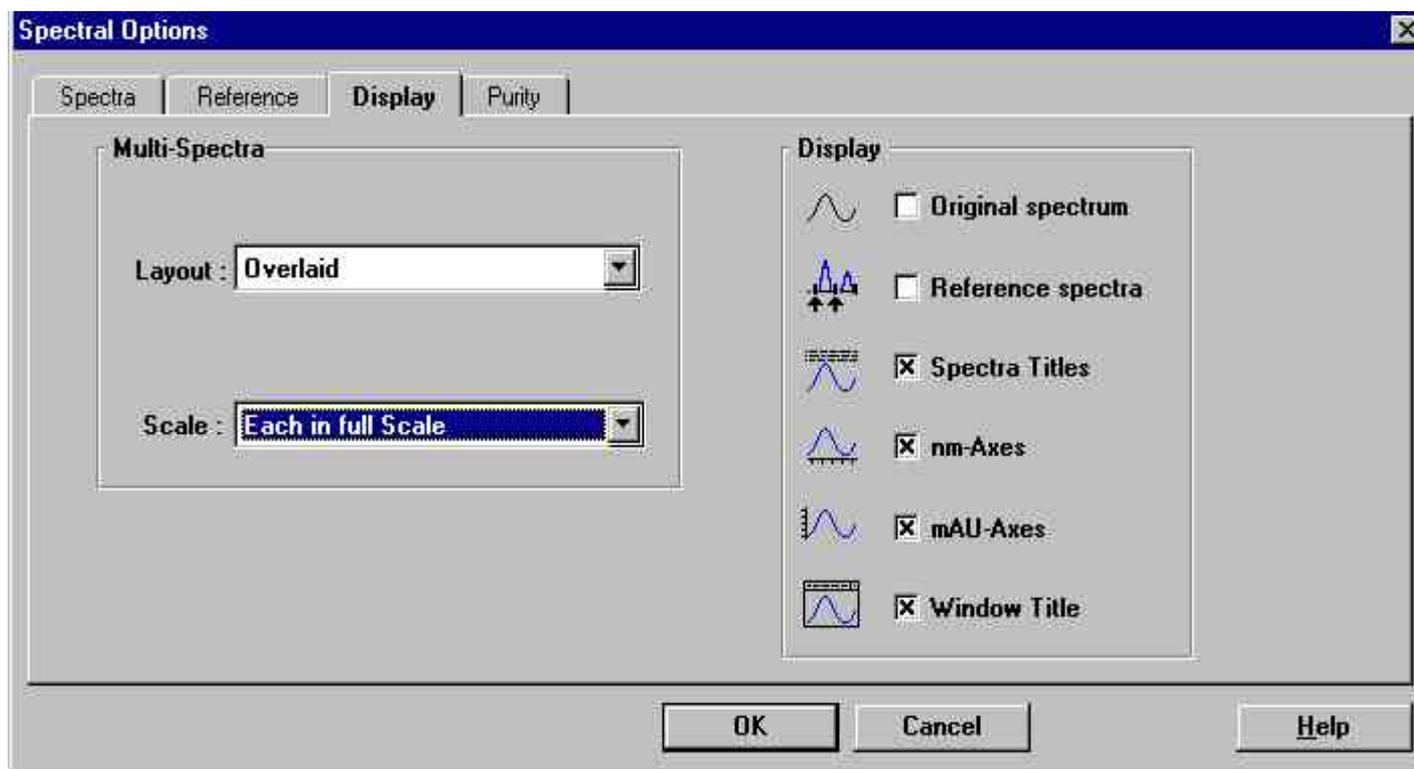


None: 不设置参比波长。

Manual: 当选择一个参比时间时，此参比时间的光谱被所选择的样品谱图扣除。当选择两个参比时间，两个参比时间的参比光谱用内插法重建一个参比光谱，然后被所选择的样品光谱扣除。

Automatic: 工作站自动选择参比光谱。

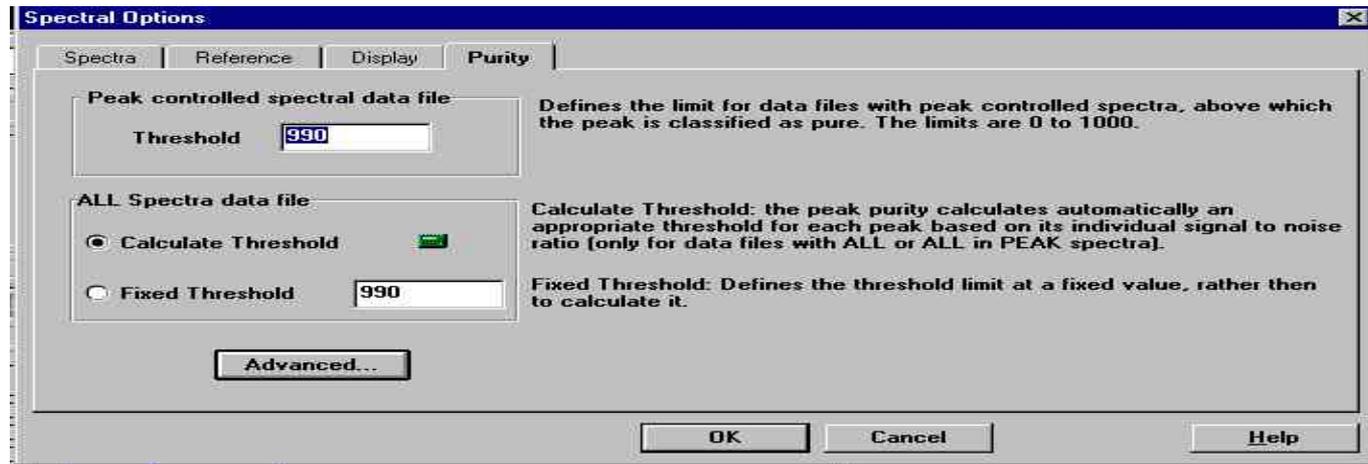
Display: 规定谱图显示的格式。



Multi-Spectra: 显示重叠谱图还是分别显示谱图。

Display: 显示谱图的内容。

Purity: 允许用户选择适当的阈值或通过工作站自动计算阈值。



Peak controlled spectral data file

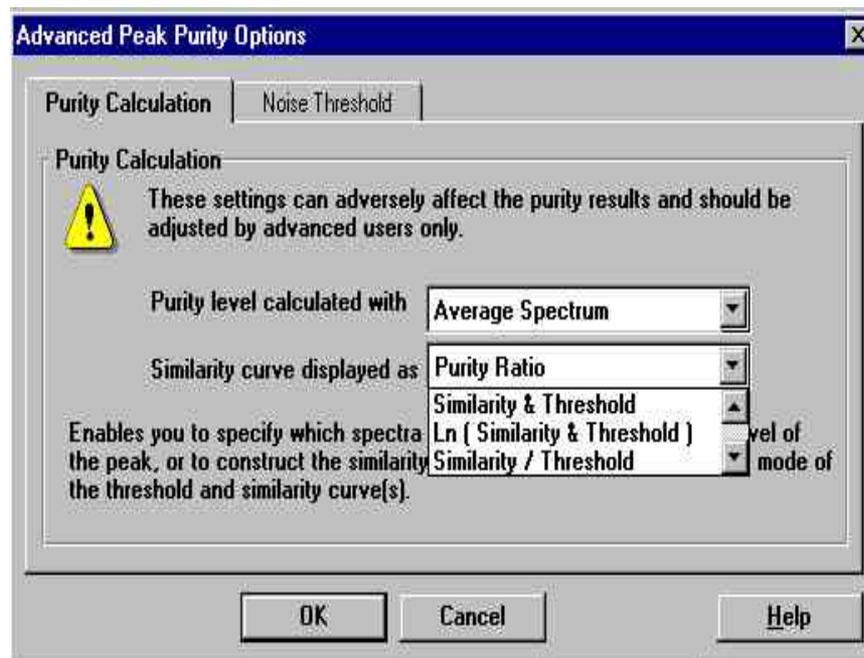
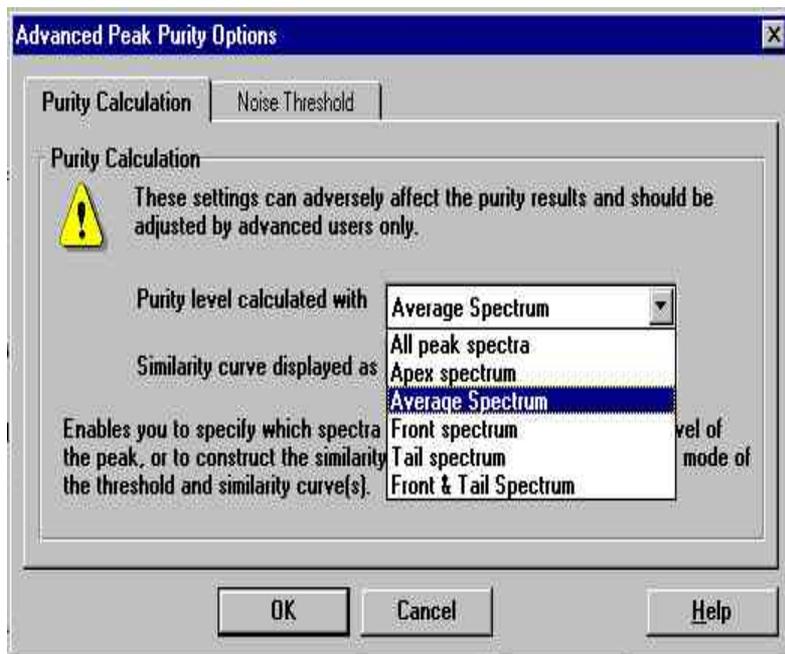
Threshold: 定义控制谱图的限制，高于此限制的色谱峰则为纯峰。限制范围为0~1000。

All Spectra data file

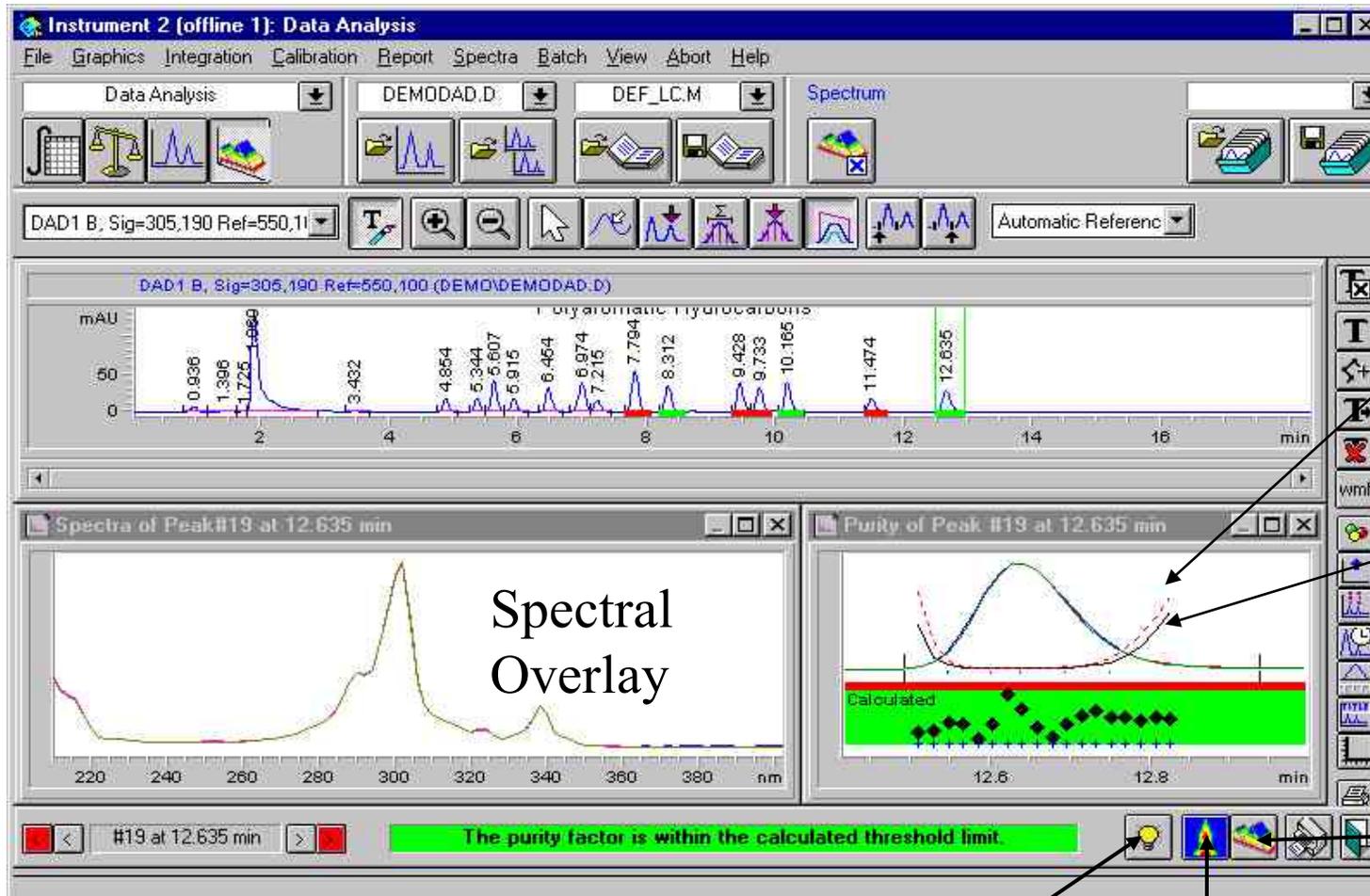
Calculate Threshold: 基于每个峰的信噪比，工作站自动计算每个峰的峰纯度阈值。（只适应于数据文件中用ALL或ALL in PEAK存贮的样品）

Fixed Threshold: 用户自己设定阈值限制，而不用计算机自动计算。

Advanced: 选择峰纯度计算方法及拟合曲线的显示方式。



峰纯度分析窗口



阈值曲线

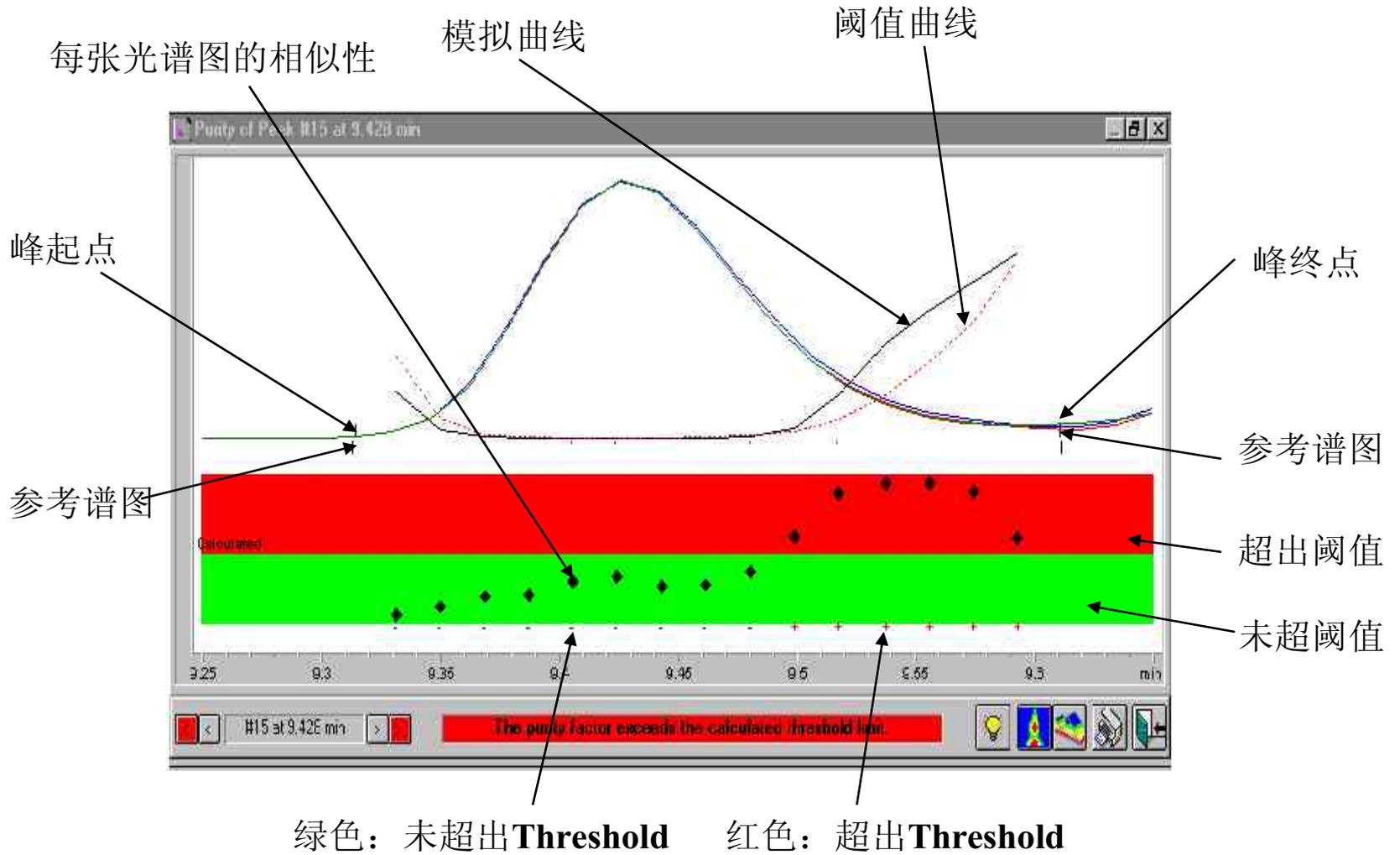
模拟曲线

3D 显示

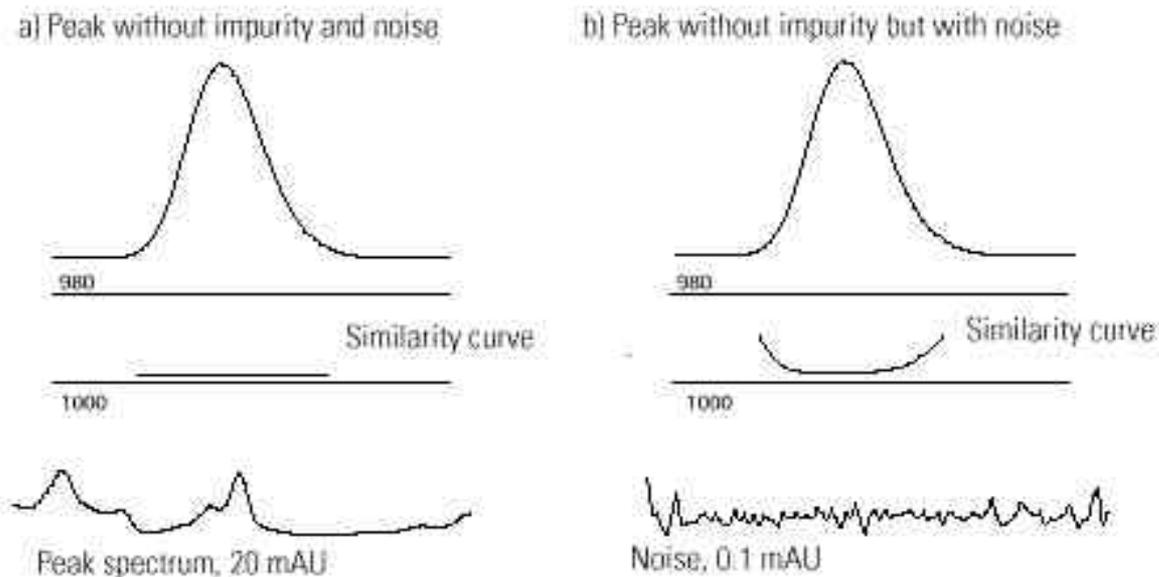
等高图

峰纯度信息

峰纯度检测屏幕显示



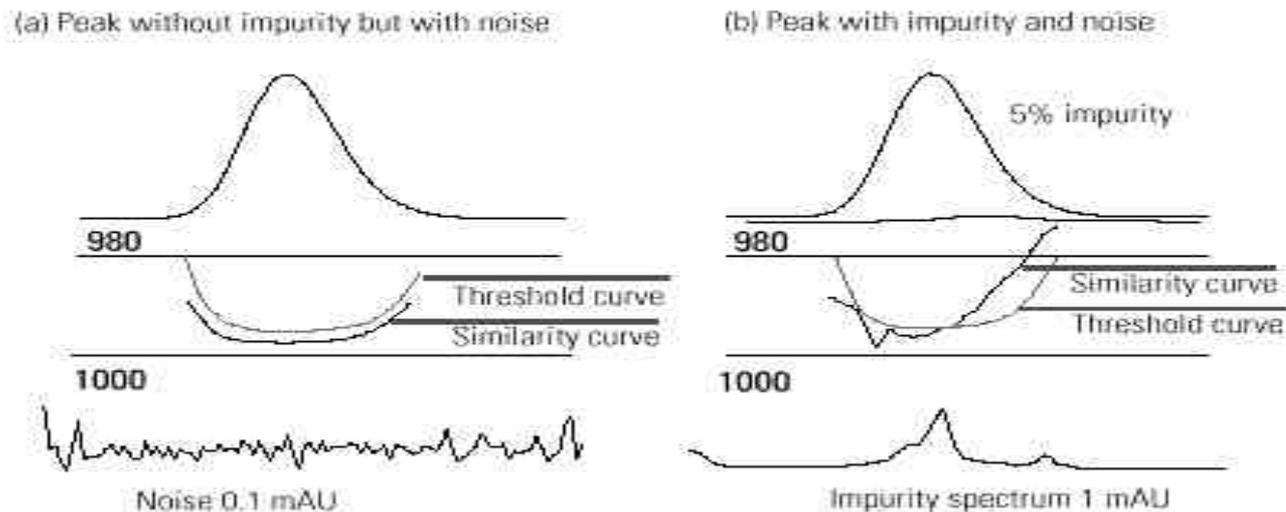
Spectra Similarity Curve: 给出峰纯度的详细信息。一个色谱峰上所有光谱图与某一个或多个谱图（缺省值为平均谱）。理想的绝对纯的色谱峰的Similarity Curve为在1000处一平坦的直线。（见下图左侧图）



由于在峰的起始和终止位置信噪比下降，背景噪音对峰谱图的影响非常明显，致使Similarity Curve 变成右侧图形状。

Threshold Curve: 显示给定Similarity Curve的噪音效果。实际上 Threshold Curve是一条受到背景噪音影响的纯色谱峰的相似曲线。

下图给出峰纯度高的两条曲线（左侧）和不纯峰的曲线（右侧）。



峰纯度判别：

- Threshold Curve和Similarity Curve非常平滑，没有交叉，且 Threshold Curve 位于Similarity Curve之上。
- Purity Factor值大于Threshold。

匹配因子的计算:

$$\text{Match Factor} = \frac{10^3 \times \left\{ \sum x \times y - \left(\frac{\sum x \times \sum y}{n} \right) \right\}^2}{\left\{ \sum x^2 - \left(\frac{\sum x \times \sum x}{n} \right) \right\} \times \left\{ \sum y^2 - \left(\frac{\sum y \times \sum y}{n} \right) \right\}}$$

x and y are measured absorbances in the first and second spectrum respectively, at the same wavelength;

n is the number of data points

\sum is the sum of the data.

At the extremes, a match factor of 0 indicates no match and 1000 indicates identical spectra. Generally, values above 990 indicate that the spectra are similar.

Values between 900 and 990 indicate there is some similarity, but the result should be interpreted with care.

All values below 900 indicate the spectra are different.

匹配因子受很多参数影响, 这些参数由样品和分离方法决定。它们包括化合物特性, 流动相波谱吸收, 噪音干扰水平以及背景吸收和谱图漂移等。

峰纯度信息 - 纯峰



Peak Purity Information of peak #19 at 12.635 min

Purity | Peak Spectra | Calculations | Purity Curve | More Purity Curves

Purity factor: This is the mean purity value of those spectra of the recorded spectra which are within the calculated threshold limit (18 out of 18). The purity value is calculated between each spectrum and the Average Spectrum of the selected 5 peak spectra.

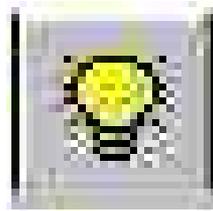
Threshold: This is the mean threshold value for the same 18 spectra which are within the calculated threshold limit. The threshold value is based on the absorbance height of each spectrum and a set of noise spectra at the start of the data file.

Additional Information:

The purity factor is within the calculated threshold limit.



峰纯度信息 - 不纯峰



Peak Purity Information of peak #18 at 11.474 min

Purity | Peak Spectra | Calculations | Purity Curve | More Purity Curves

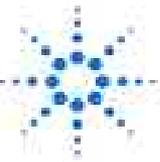
Purity factor: This is the mean purity value of those spectra of the recorded spectra which exceed the calculated threshold limit (3 out of 12). The purity value is calculated between each spectrum and the Average Spectrum of the selected 5 peak spectra.

Threshold: This is the mean threshold value for the same 3 spectra which exceed the calculated threshold limit. The threshold value is based on the absorbance height of each spectrum and a set of noise spectra at the start of the data file.

Additional Information:

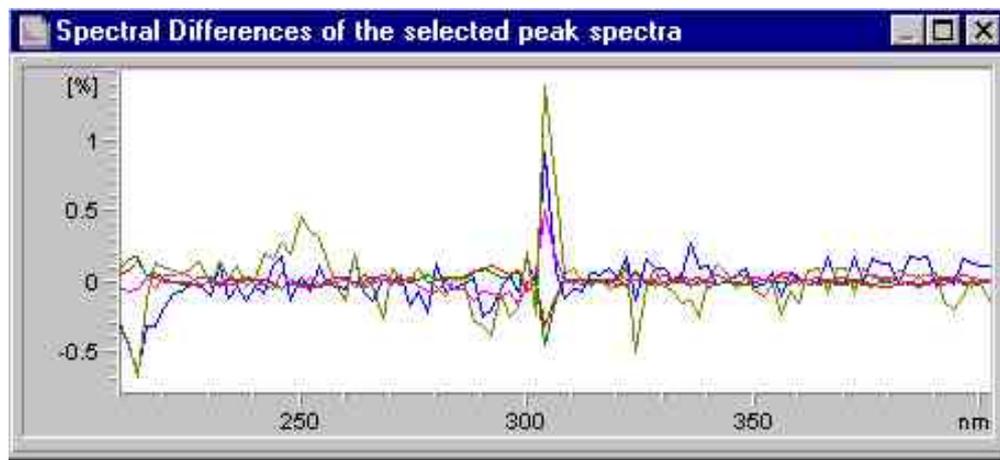
The purity factor exceeds the calculated threshold limit.

OK Help

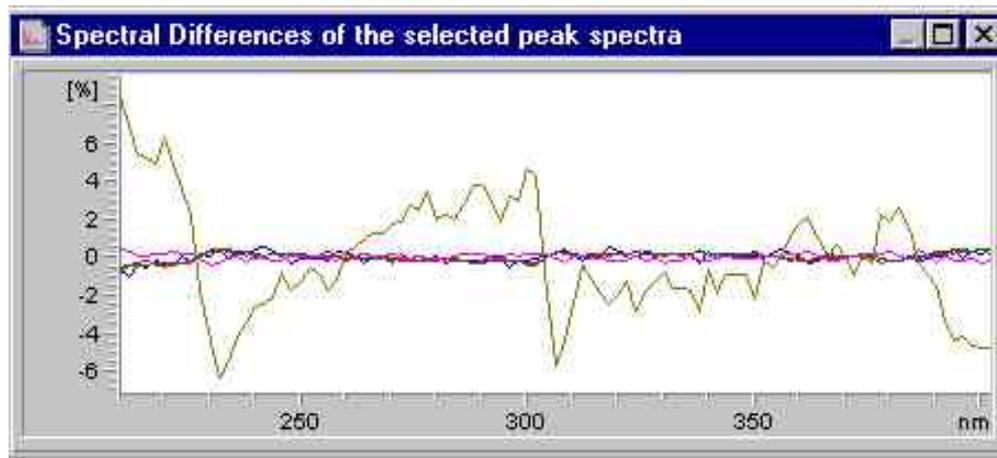


附加信息 - 差谱

差谱 - 纯峰



差谱 - 不纯峰



峰纯度性能

影响峰纯度的因素:

- 化合物特征。
- 媒介化合物（溶剂）的吸收。
- 噪音大小。
- 化合物的波谱范围。

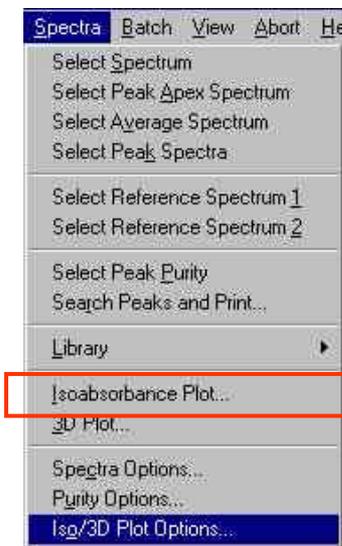
优化条件:

- 使用光强度大的光源，对检测器进行常规维护。
- 选择合适的流动池和狭缝。
- 采集足够的数据点。
- Peakwidth设置值合理。
- 样品浓度应在检测器的线性范围内。

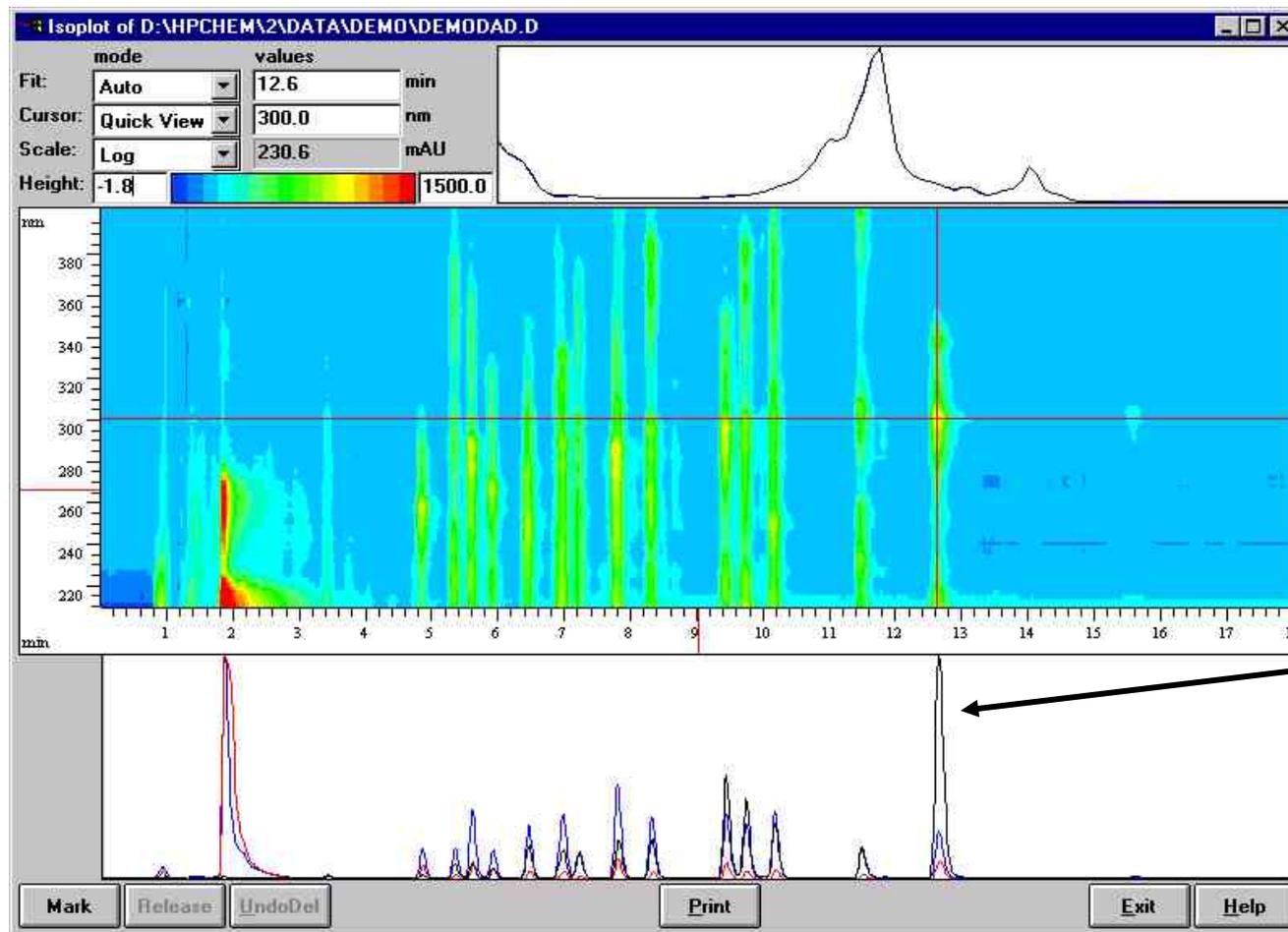
选择最大吸收波长

等高图（**Isoabsorbance Plot**）

吸收强度、波长和保留时间作为等吸收的曲线图。



等吸收图 (Isoabsorbance Plot)



Cursor

Quick View

Zoom

Signal

Spectrum

黑色色谱图表示当前波长下的色谱图



•最大吸收波长的选择:

在命令选项框中选择Cursor为Quick View方式，把十字光标放置在某一保留时间，然后垂直移动光标，观察mAU数值的变化，此数值越大，则说明吸收越强。同时下面的显示区可得到分离良好的色谱图。

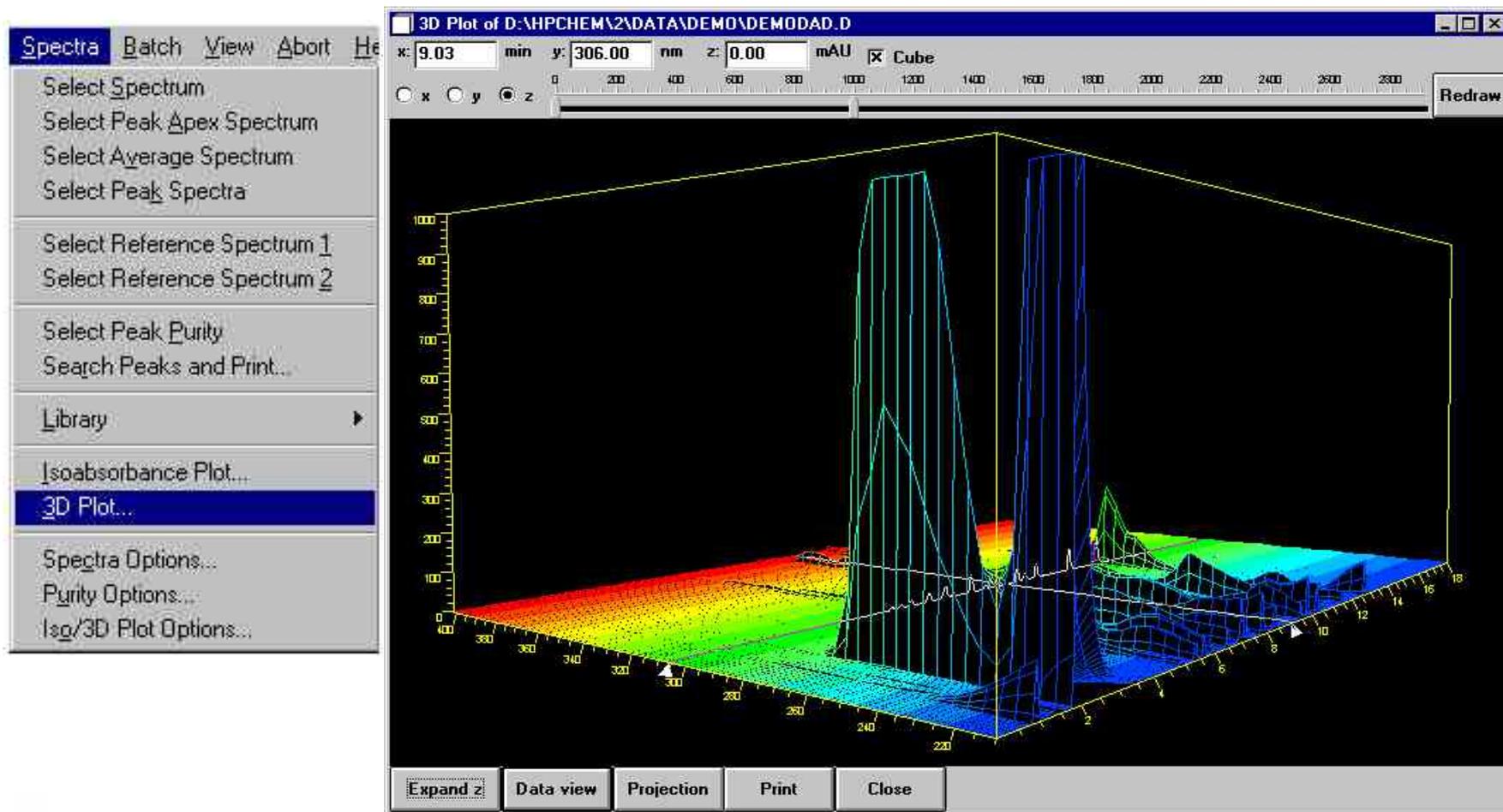
•某一特定波长色谱图的优化：（此功能可以对某一波长吸收的色谱图进行优化）

- 1.选择Cursor为Quick View方式。
- 2.移动十字光标直至屏幕下方的色谱图达到最佳。
- 3.在此位置用Mark键作标记。
- 4.把Cursor的状态改为Signal方式，移动光标至标记位置。
- 5.选择参比谱带宽度。
- 6.用Copy键拷贝优化后的色谱图。
- 7.最小化等高图，查看提取的色谱图。
- 8.如果需要，用窗口拷贝存贮此色谱图。

•提取特定波长紫外谱图:

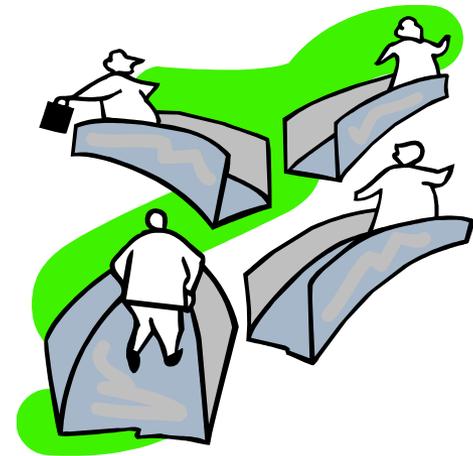
选择Cursor状态为Spectrum方式，选择某一保留时间的紫外谱图后，用Copy键拷贝此紫外谱图。最小化等高图，可以在屏幕左下方窗口查看此紫外谱图。

3D Plot

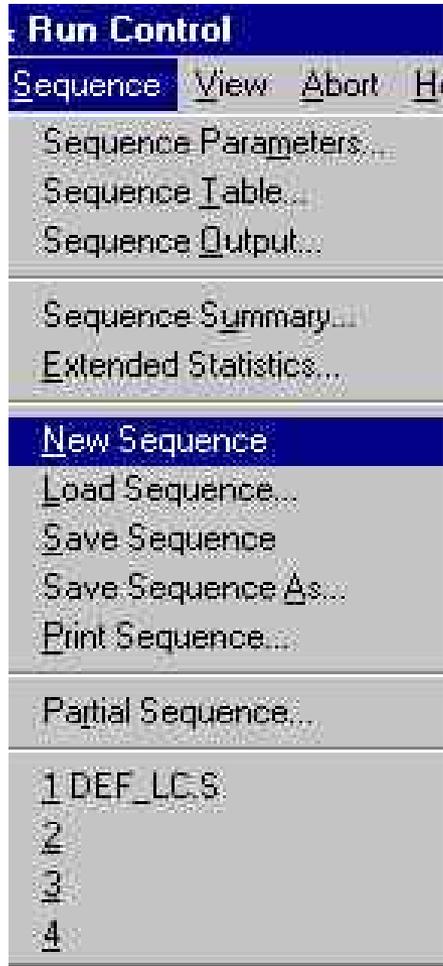


第八章 序列及批处理

- 本章内容
 - 如何建立序列表
 - 如何执行自动再校正
 - 如何作循环再校正
 - 数据文件如何命名
 - 如何使用 Sequence Summary
 - 如何执行序列文件的批处理



编辑序列进行自动分析



1 进入 *Method and Run Control* 界面。

2. 从 *Sequence* 菜单，选择 *New Sequence*。

3 编辑 *Sequence Parameters*。

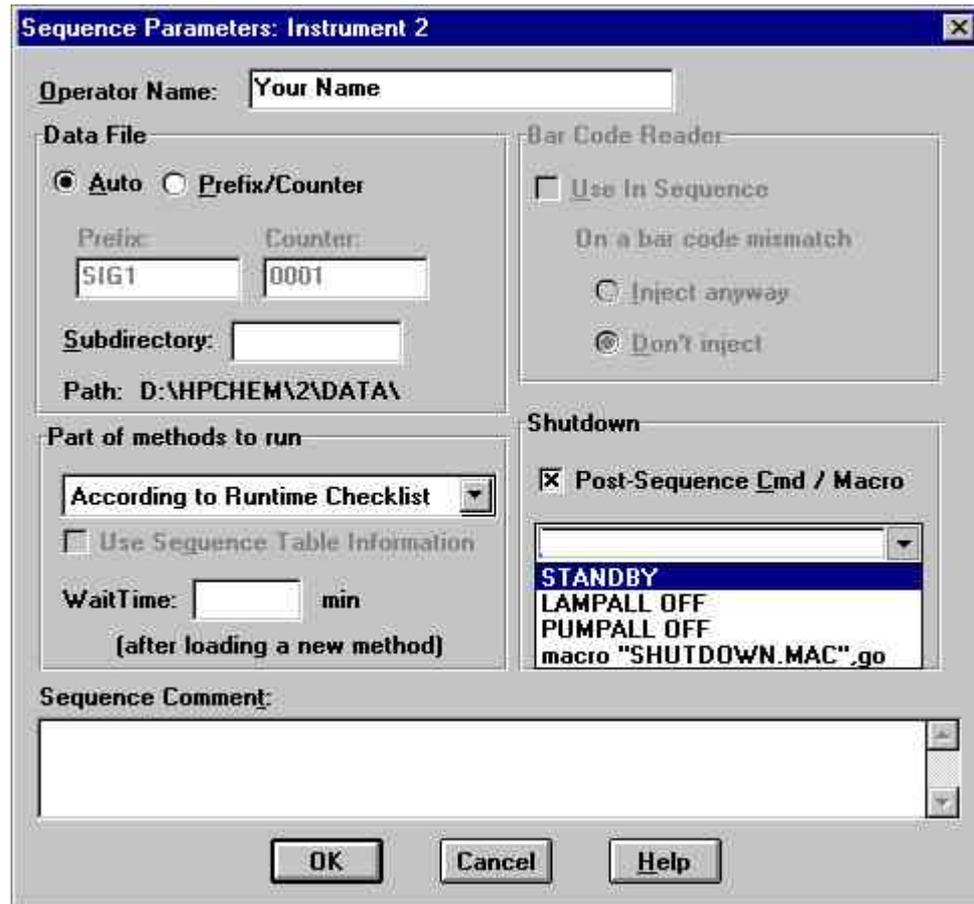
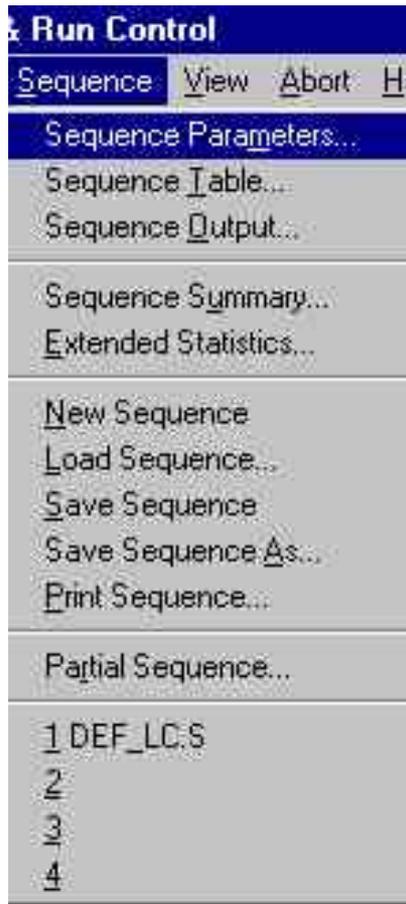
4. 编辑 *Sequence Table*。

5. 选择 *Sequence Output*。

6. 存贮序列。

7. 从 *RunControl* 菜单或从 *Sequence Table* 运行序列。

编辑Sequence Parameters



序列参数设置

Operator Name:

建立序列表人的姓名。姓名最多可以输入29个字母，此姓名将在报告中打印出来。

Data File:

序列表运行过程中各采集样品的存盘数据名。可以设置自动存贮或以Prefix/Counter形式存贮。还可以设置存盘路径。

Part of Method to Run:

此栏可选择序列的运行方式：用户可以选择运行整个方法，或只做数据采集，或者对已有的数据进行数据再分析。

According to Runtime Checklist: 遵从序列表中所用方法的运行时间对照表的规定。

Acquisition Only: 只对序列表中指定的样品进样，采集数据，但不进行数据分析。

Reprocessing Only: 只对已有数据进行数据处理并打印报告，并不采集新的数据。

Use Sample Table Information:

使用序列表中的样品信息。如果选择此项，则报告中按序列表中的样品信息打印，否则按原来采集样品时的样品信息打印。

Wait time:

运行序列当中，调用另一个新方法后，仪器所需的平衡时间。

Shutdown:

选择Post-sequence Cmd/Macro，用户可以输入command 或macro。如果序列运行过程中出现错误，则仪器执行设置的命令或macro。

STANDBY：系统处于待命状态，泵和灯均关闭；

LAMPALL OFF：关闭所有的灯；

PUMPALL OFF：关闭泵；

macro “SHUTDOWN.MAC”,go：关闭整个系统。

如果没有输入command或macro，仪器执行nRdy Timeout。

序列数据文件格式

自动进样格式: 003-0101

003 样品瓶号 (Vial Number)

01 序列表中的行号(Sequence Line)

01 进样次数(Replicate)

前缀(Prefix)

Prefix01

Prefix02, etc. 共8个字符。

循环标样格式: C1-02001

C 表明使用循环标样

1 标样浓度级别

02 序列表中的行号

001 进样次数

序列表中再校正

Sequence Table: Instrument 2

Currently Running
Line: Method: Vial: Inj:

Sample Info for Vial 6:

Line	Vial	Sample Name	Method Name	Inj/Vial	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Interval	Sam
1	1	calib. level 1	DEMOCAL1	1	Calibration	1	Replace	Replace		
2	2	calib. level 2	DEMOCAL1	1	Calibration	2	Replace	Replace		
3	3	calib level 3	DEMOCAL1	1	Calibration	3	Replace	Replace		
4	4	control	DEMOCAL1	1	Control Sample					
5	5	aa16	DEMOCAL1	1	Sample					
6	6	aa17	DEMOCAL1	1	Sample					
7	7	aa18	DEMOCAL1	1	Sample					
8	8	aa19	DEMOCAL1	1	Sample					
9	9	aa20	DEMOCAL1	1	Sample					
10	10	aa21	DEMOCAL1	1	Sample					
11	11	aa22	DEMOCAL1	1	Sample					
12	12	aa23	DEMOCAL1	1	Sample					
13	13	aa24	DEMOCAL1	1	Sample					

Insert Cut Copy Paste Append Line
Insert Vial Range... Run Sequence Read Bar Code OK Cancel Help

Calibration table level updated during calibration run

序列表中各参数含义

Currently Running:

在序列执行过程中，可以通过此栏观察序列的运行状态，也可以对还未运行的样品进行编辑。

Sample Info:

用Sample Info显示、记录、编辑序列表中样品的信息。最多可输入4K的文本信息（大约4100个字符）。在Sequence Parameters画面的Part of Method to Run选项中选择“Use Sequence Table Info”。序列表中的样品信息将替代原来样品的样品信息。

- **Sample Type:** 选择样品类型以决定被分析样品是标样、控制样品还是未知样品。
- **Cal Level:** 选择序列运行过程中对哪一浓度的标样进行再校正。
- **Update RF:** 确定对再校正的标样如何进行再校正。不校正(No Update)、平均(Average)、取代(Replace)、循环校正(Bracket)。
- **Update RT:** 确定是否对保留时间进行再校正。
- **Interval:** 决定标样的再校正周期。
- **Sample Amount:** 输入样品的浓度。此值用于ESTD%或ISTD%定量方法。

循环再校正

Sequence Table: Instrument 2

Currently Running
Line: Method: Vial: Inj:

Sample Info for Vial 9:
sample 8-7-98-301

Line	Vial	Sample Name	Method Name	Inj/Vial	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Interval	Sam
1	1	calib level 1	DEMOCAL1	1	Calibration	1	Replace	Replace		
2	2	calib level 2	DEMOCAL1	1	Calibration	2	Replace	Replace		
3	3	calib level 3	DEMOCAL1	1	Calibration	3	Replace	Replace		
4	1	calib level 1	DEMOCAL1	1	Calibration	1	Average	No Update	3	
5	2	calib level 2	DEMOCAL1	1	Calibration	2	Average	No Update	3	
6	3	calib level 3	DEMOCAL1	1	Calibration	3	Average	No Update	3	
7	4	sample 1	DEMOCAL1	1	Sample					
8	5	sample 2	DEMOCAL1	1	Sample					
9	6	sample 3	DEMOCAL1	1	Sample					
10	7	sample 4	DEMOCAL1	1	Sample					
11	8	sample 5	DEMOCAL1	1	Sample					
12	9	sample 6	DEMOCAL1	1	Sample					

Insert Cut Copy Paste Append Line

Insert Vial Range... Run Sequence Read Bar Code

OK Cancel Help

Sample Name (up to 16 characters)

Bracketed 序列

Sequence Table: Instrument 2

Currently Running
 Line: Method: Vial: Inj:

Sample Info for Vial 3:

Line	Vial	Sample Name	Method Name	Inj/Vial	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Interval	Sam
1	1	calib. level 1	DEMOCAL1	1	Calibration	1	Bracket	Average	3	
2	2	calib. level 2	DEMOCAL1	1	Calibration	2	Bracket	Average	3	
3	3	calib level 3	DEMOCAL1	1	Calibration	3	Bracket	Average	3	
4	5	aa16	DEMOCAL1	1	Sample					
5	6	aa17	DEMOCAL1	1	Sample					
6	7	aa18	DEMOCAL1	1	Sample					
7	8	aa19	DEMOCAL1	1	Sample					
8	9	aa20	DEMOCAL1	1	Sample					
9	10	aa21	DEMOCAL1	1	Sample					
10	11	aa22	DEMOCAL1	1	Sample					
11	12	aa23	DEMOCAL1	1	Sample					
12	13	aa24	DEMOCAL1	1	Sample					

Calibration table level updated during calibration run



使用Insert/FillDown Wizard填写序列表

Insert/Filldown Wizard

Action

Append
 Insert
 Fill down

Every ... line(s)

Number of lines to insert

List of detected ranges:

-> All 1 lines <-

Locations assignments

Starting location

Increment by

Fields

Omit other sample types
 Overwrite existing values

Sample name Cal Level Sample amount

Method name Update RF ISTD Amount

Inj./Location Update RT Multiplier

Sample type Interval Dilution

Inj. volume

序列输出

Sequence Output: Instrument 2

Sequence Summary

Print Sequence Summary Report Setup ...

Report to Printer

Report to File:

Report to HTM

Print individual reports for each run as well

Destination of individual reports for each run

as specified in each Method

as specified here

Printer

Screen

File

File Prefix:

File Type

.TXT .WMF

.DIF .CSV

.XLS .HTM

OK Cancel Help

通过序列的Summary Report，您可以选择简单的一页总结报告或复杂的总结报告。

编辑Sequence Summary

Sequence Summary Parameters: Instrument 2

Activate report: Style:

1. One page header

2. Configuration

3. Sequence

4. Logbook

5. Methods

6. Analysis reports

7. Statistics calib. runs

8. Statistics sample runs

9. Summary

Standard Statistic

Extended Statistic

Sample Summary

OK Cancel Help

标准或扩展统计

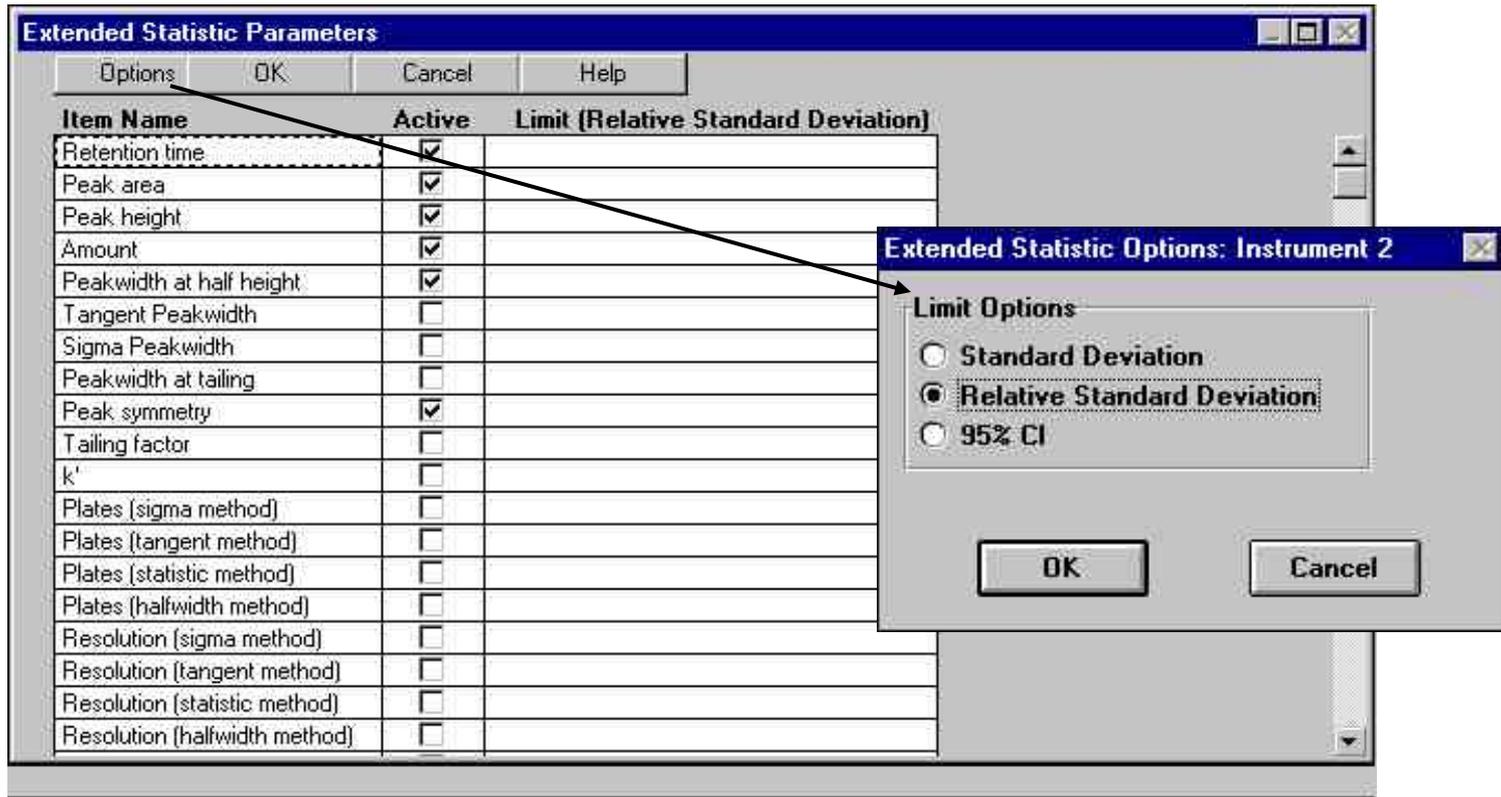


编辑Sequence Summary Parameter

通过此对话框可以定义Sequence Summary的报告形式，化学工作站共有九种Sequence Summary的报告形式可供选择。

- **One page header:** 序列总结报告标题页。此标题存贮在hpchem\core\sshead.txt文件中，用户可先把此文件拷贝到hpchem\1\sshead.txt中，然后进行修改。
- **Configuration:** 仪器配置信息。
- **Sequence:** 序列表信息。
- **Logbook:** 打印工作站的Logbook。
- **Method:** 打印整个方法参数。
- **Analysis reports:** 每个样品的分析报告，此报告不是方法中定义的报告。
- **Statistic calib. Runs:** 标样的统计报告。有Standard Statistic和Extended Statistic两种报告形式。
- **Statistic sample runs:** 样品的统计报告。有Standard Statistic和Extended Statistic两种报告形式。
- **Summary:** 有两种报告形式: Sample Summary style和Compound Summary style。Sample Summary style打印每个分析样品的信息。Compound Summary style打印每个分析样品的含量及化合物的详细信息。

扩展统计



Sequence菜单中的Extended Statistics...选项允许用户输入再现性统计的限度。再现性是针对一个样品重复进样，观察保留时间、峰面积等的重复性，以确定泵和自动进样器的精确度。如果统计计算结果超出设定限度，报告结果中会在超限处用“>”做出标记。

部分序列及预览模式 Partial Sequence

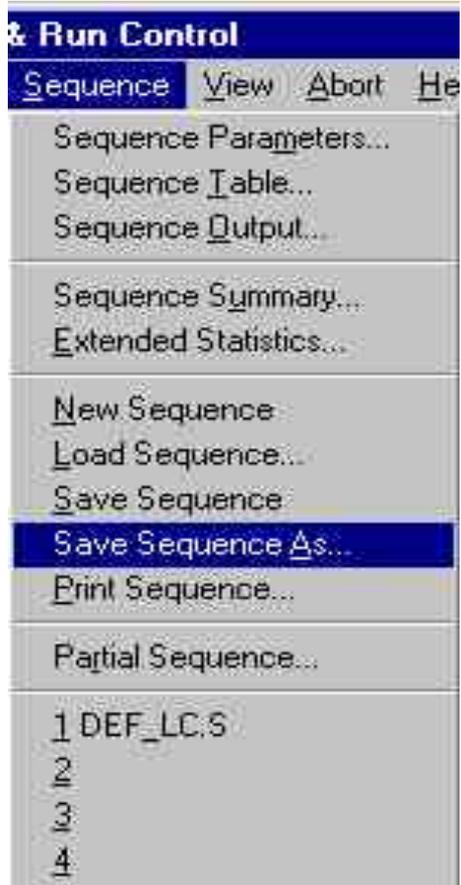
Partial Sequence: Instrument 2

Preview mode. Bracketing selected in the sequence recalibration table.

Sel	Run	Vial	Method	Data File	Seq Tb	Calib:RF:RT	Sample Name
<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	DEMOCAL1	C1-04001	01:01	01:BR:RE	calib. level 1
<input type="checkbox"/>	2	4	DEMOCAL1	004-0401	04:01		control sample
<input type="checkbox"/>	3	5	DEMOCAL1	005-0501	05:01		aa16
<input type="checkbox"/>	4	6	DEMOCAL1	006-0601	06:01		aa17
<input type="checkbox"/>	5	2	DEMOCAL1	C1-07001	01:01	01:BR:RE	calib. level 1
<input type="checkbox"/>	6	7	DEMOCAL1	007-0701	07:01		aa18
<input type="checkbox"/>	7	8	DEMOCAL1	008-0801	08:01		aa19
<input type="checkbox"/>	8	9	DEMOCAL1	009-0901	09:01		aa20
<input type="checkbox"/>	9	3	DEMOCAL1	C1-10001	01:01	01:BR:RE	calib. level 1
<input type="checkbox"/>	10	10	DEMOCAL1	010-1001	10:01		aa21
<input type="checkbox"/>	11	11	DEMOCAL1	011-1101	11:01		aa22
<input type="checkbox"/>	12	12	DEMOCAL1	012-1201	12:01		aa23
<input type="checkbox"/>	13	1	DEMOCAL1	C1-13001	01:01	01:BR:RE	calib. level 1
<input type="checkbox"/>	14	13	DEMOCAL1	013-1301	13:01		aa24
<input type="checkbox"/>	15	14	DEMOCAL1	014-1401	14:01		aa25
<input type="checkbox"/>	16	2	DEMOCAL1	C1-14001	01:01	01:BR:RE	calib. level 1

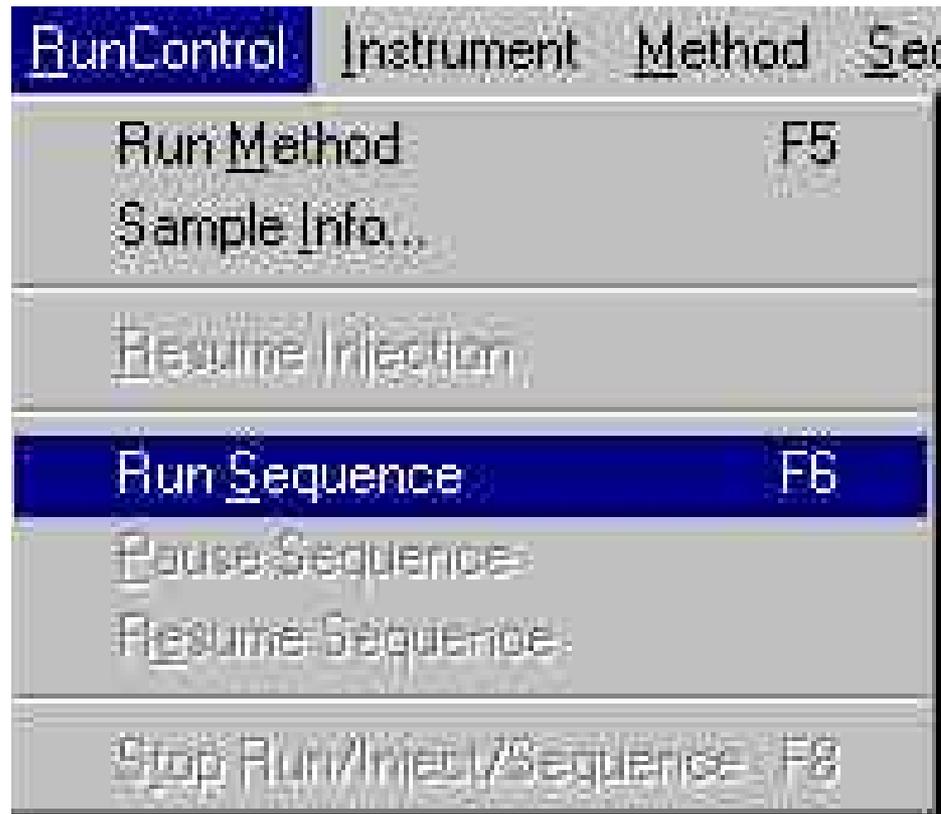
Select All Clear Selections Run Sequence Cancel Help Print

存贮序列文件



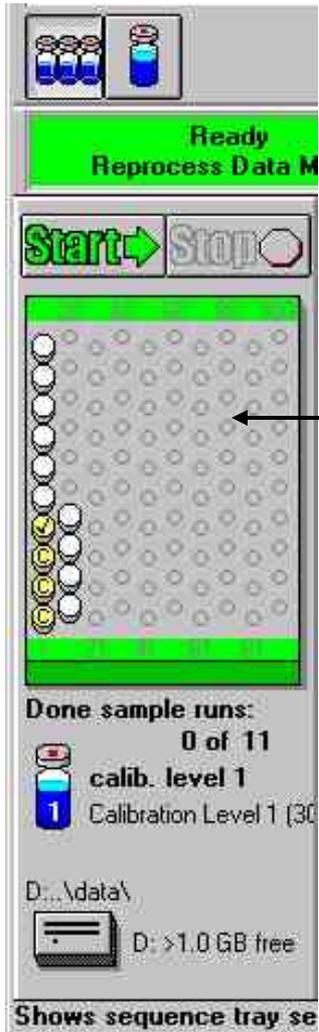
存贮当前的序列

运行序列



- 从RunControl菜单选择Run Sequence或按F6键运行序列
- 从Sequence Table运行

自动进样器图标显示



显示序列表中样品瓶的位置及序列表的运行状态，单击此图标建立序列表。

从 *View* 菜单选择 *Sampling Diagram* 即可显示样品视图

批处理



Batch 的优点:

- 可以快速、方便地检查序列所采集的数据质量和结果;
- 打印报告前检查校正的准确性、仪器性能和积分参数的设置;
- 存贮积分参数以便后面样品的分析。

如果在日常分析中要处理大量数据，希望有一条快速、方便的方法检查每一个数据的质量和结果，Batch是最有效的方法。

Batch允许用户改变校正表、控制样品、调整未知样品的积分参数并预览序列所产生数据的报告结果。

执行Batch

- 运行序列，序列会自动产生一个扩展名为.b的文件存贮在hpchem\1\data子目录中，Batch文件的名称与序列的文件名称相同。
- 进入Data Analysis画面，调用batch文件。
- 选择所要浏览的数据。
- 检查校正表是否合适。
- 检查控制样品。
- 检查积分参数是否合适。
- 检查未知样品的结果是否满意。
- 如果需要，更改校正表、控制样品或积分参数。
- 重新浏览。
- 如果结果满意，打印报告。

Setup Batch

Method to Process Batch Data

STD20.P.M Other Method

Select Runs for Batch Processing

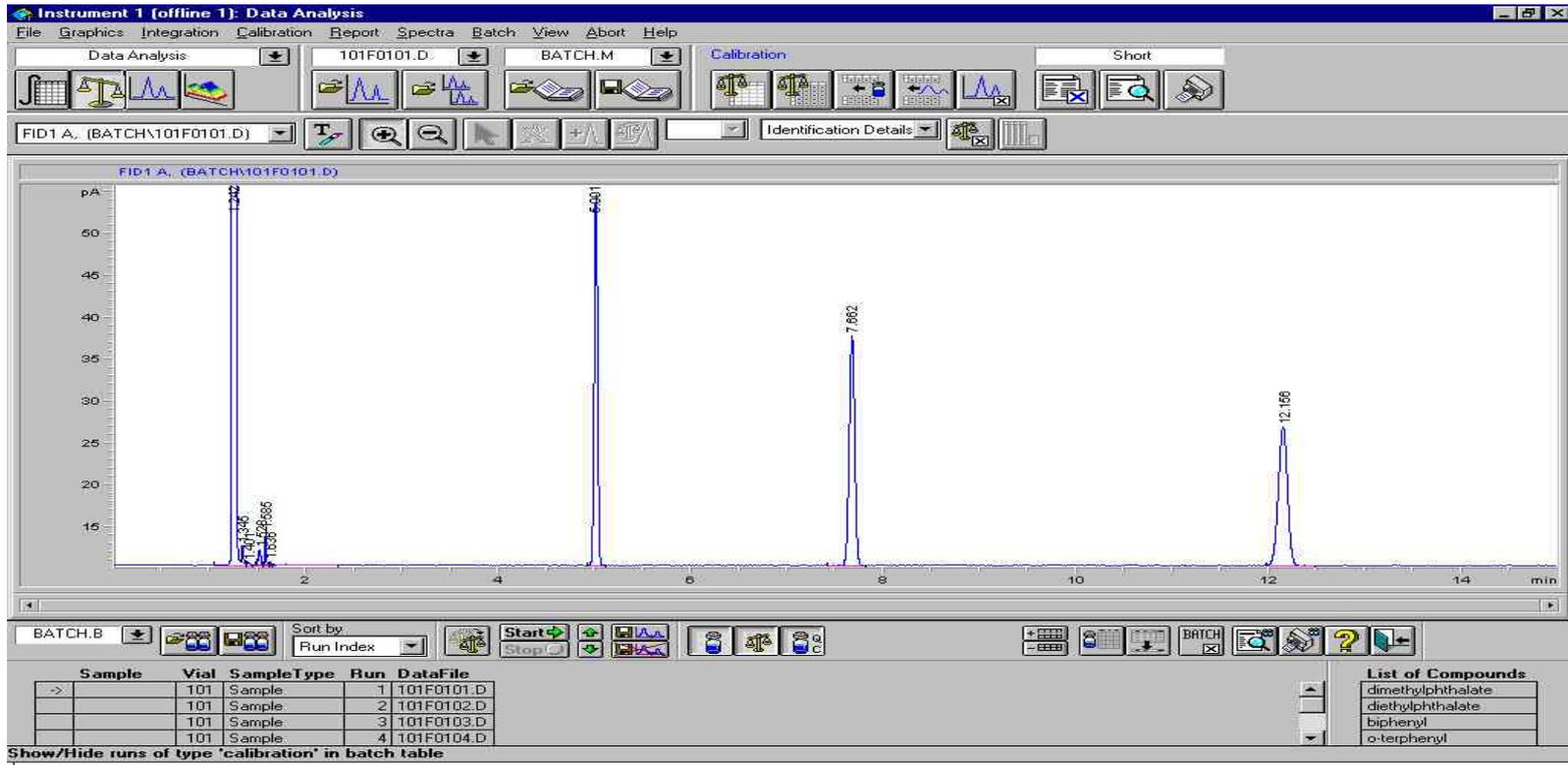
Select All Clear Selections

Use	Sample	Vial	SampleType	Run	DataFile
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	1	101F0101.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	2	101F0102.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	3	101F0103.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	4	101F0104.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	5	101F0105.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	6	101F0201.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	7	101F0202.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	8	101F0203.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	9	101F0204.D
<input checked="" type="checkbox"/>		101	Sample	10	101F0205.D

OK Cancel Help

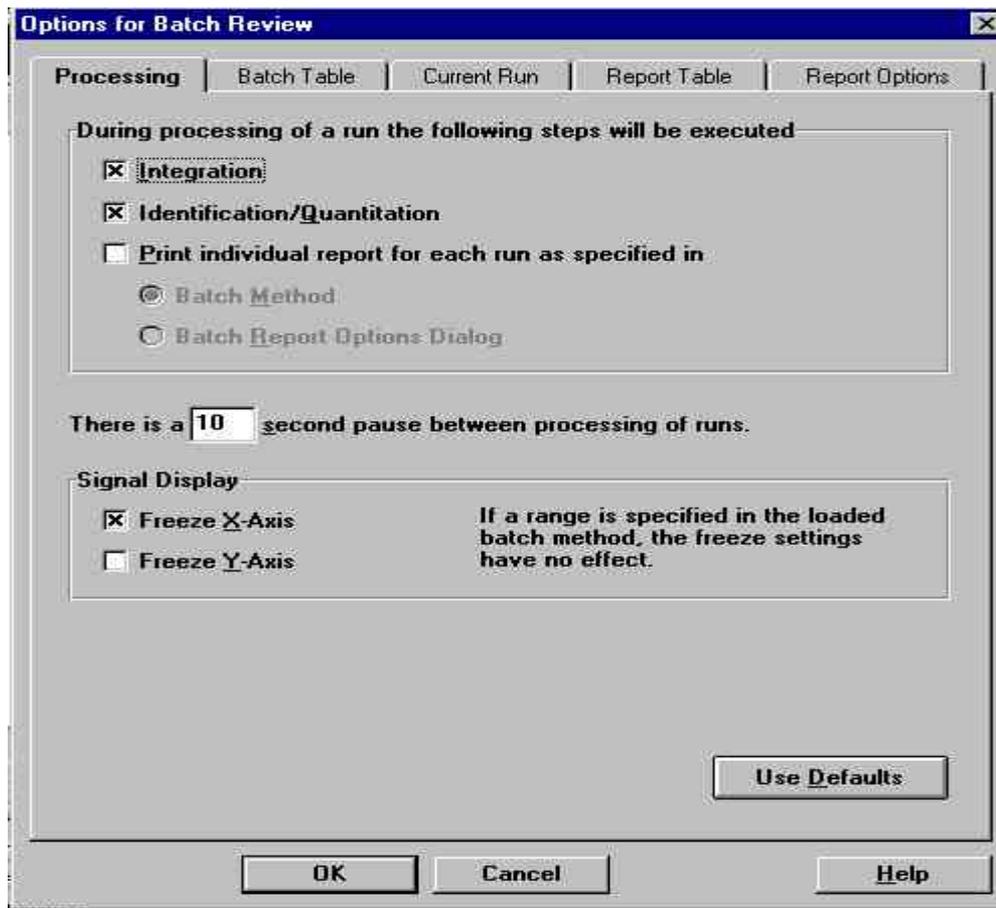
一旦调用了batch文件，Setup Batch对话框会出现。在此对话框中可以选择处理数据所需的方法以及要处理哪些数据。

Batch 的执行过程



用户可以通过单击Start键自动执行数据处理过程。数据大约每10秒钟处理一个。如果在执行过程中，想改变积分参数，按Pause键，让数据处理暂停后，改变积分参数。参数被改变后，一个字母会在第一列显示，例如S，表示积分参数已经被改变。然后再按Pause键，继续处理数据。如果不想自动处理，用户只须单击数据表中的文件，此文件则被处理。

Batch Review Option



通过选择Batch菜单下的Option选项，选择Batch浏览内容及报告输送的目的地。

第九章 个性化报告的设定

本章内容:

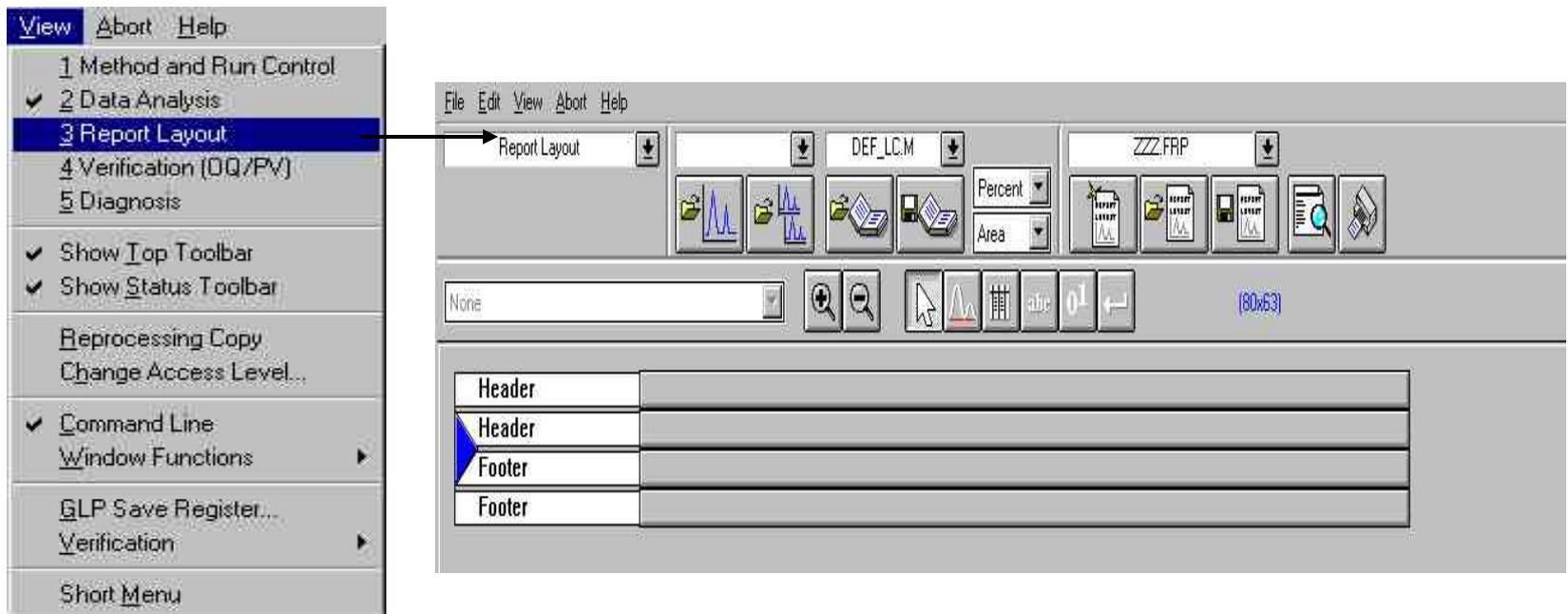
- 如何使用个性化报告模板
- 如何编辑报告内容及参数设定
- 如何存储模板
- 如何将个性化报告添加到工作站报告类型中去



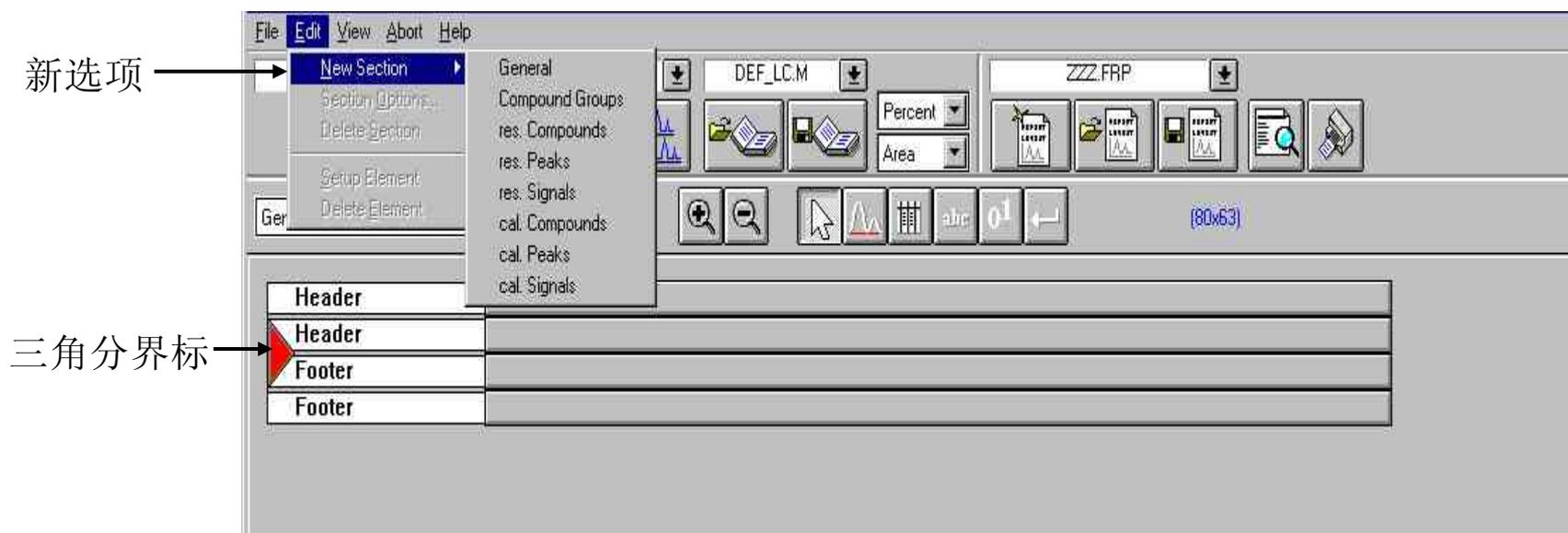
化学工作站为用户提供了一系列的标准报告格式。但有些用户可能需要一些特殊的报告格式，系列标准报告格式不能满足他们的要求。Customer Report界面为用户提供了编辑特殊报告的模板。用户可以把编辑好的报告模板添加到Specify Report选项中，并作为工作站的一种标准报告格式。

本章主要介绍如何使用用户报告模板生成一个报告。

Report Layout: 在View菜单下选择Report Layout，进入用户报告编辑画面。



当您首次打开Report Layout画面，屏幕显示一个空白模板，模板包括一个Header，一个Footer和一个蓝色（红色）三角分界标。您可以在三角分界标处插入新选项。若三角分界标为蓝色，此时不能插入任何新选项，必须单击此三角分界标，使之变成红色后，才可插入新选项。



三角分界标变红后，选择Edit菜单下New Section中所需选项，插入到模板中。一共有八个选项可供插入。



Report Layout的选项设置

General:

此选项包括数据文件中所有的分析参数。例如：色谱图、报告表格以及样品信息等。

Compound Group:

此选项只涉及校正表中定义的分组化合物。例如：分组化合物名称、面积加和等。报告结果会给出每个化合物的分组情况。

Result Compounds:

此选项包括在数据文件中已确证的化合物的各参数。例如：色谱图、校正曲线以及化合物名称。报告结果会给出每个确证化合物的情况。

Result Peaks:

此选项包括在数据文件中所发现峰的各参数。例如：信号描述、化合物名称、峰类型。报告结果会打印出每个已发现峰的情况。

Report Layout的选项设置

Result Signals:

此选项包括在数据文件中信号的各项参数。例如：色谱图、积分结果、峰面积之和。报告结果会打印出每个信号的情况。

Calibrated Compounds:

此选项只涉及在校正表中定义的各项化合物信息。例如：校正曲线、保留时间、ISTD量、浓度限度。报告结果会打印出每个校正化合物的情况。

Calibrated Peaks:

此选项涉及校正表中各校正峰的各项参数。例如：半峰宽、峰对称性、保留时间。报告结果会给出校正表中各校正峰的信息。

Calibrated Signals:

此选项涉及校正表中各校正信号的各项参数。例如：色谱图、信号描述和峰面积。报告结果会给出校正表中各校正信号的信息。

编辑Report Layout

使用报告编辑工具可以在报告模板中插入相关内容。选择编辑工具非常简单，只需单击工具条中工具图标。



箭头图标 图形图标 表格图标 文本图标 数字图标 分页图标

Report Layout编辑过程:

- 确认选择项有足够的空间插入相关内容。
- 单击适当的编辑工具图标，选择编辑工具。
- 选择插入内容的起始位置，按住鼠标左键进行拖拽，此时出现插入位置安放框，待安放位置满意后，松开鼠标左键，插入内容选择框立即出现。
- 在插入内容选择框内选择所需插入的内容。单击OK键。

图形工具：在新选项插入图形

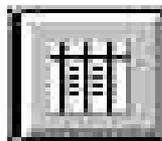


图形插入过程：

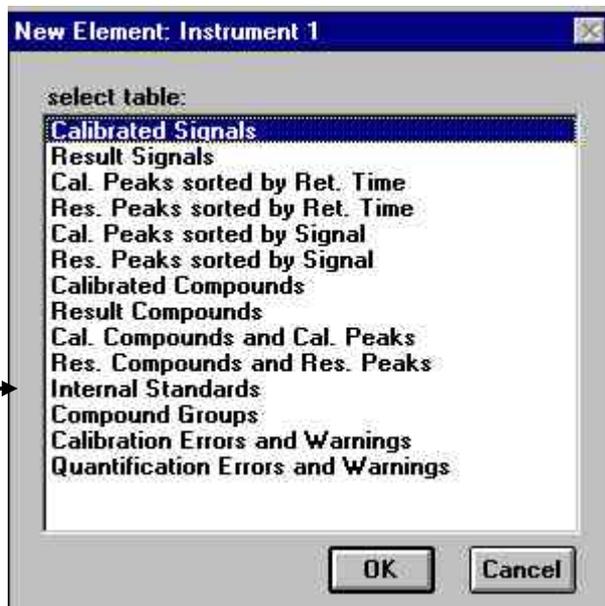
- 创建足够的插入空间。
- 选择图形工具图标。
- 按住鼠标左键，拖拽鼠标，摆放好图形安放框。
- 松开鼠标左键，在插入图形选择框中选择所需图形。
- 编辑所插入的图形。例如：图形摆放的方向等。
- 如果要对图形进行重新编辑，双击图形。
- 如果要删除图形，单击图形后，按Del键。



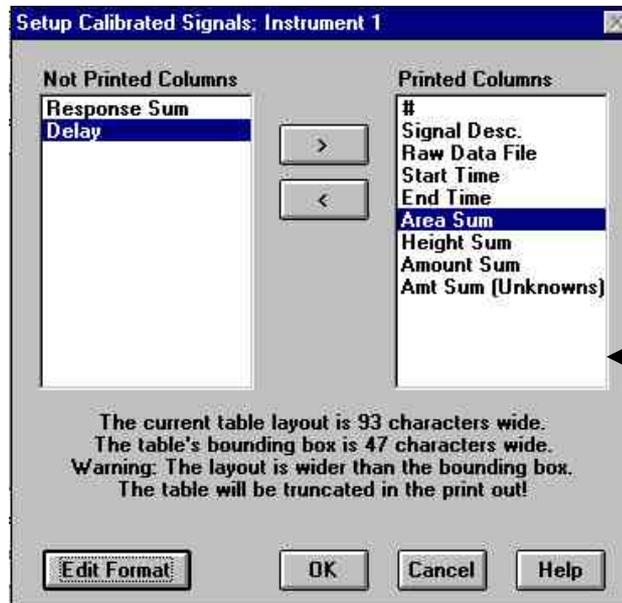
表格工具：在新选项插入表格



表格选项对话框



表格编辑对话框



表格工具允许用户在报告模板的新选项内插入相关表格。要插入表格，单击表格工具图标，按下鼠标左键拖拽鼠标，创建表格安放框。待位置合适后，松开鼠标左键，表格选项对话框自动弹出。选择所需插入的表格，单击OK键，表格编辑对话框自动弹出。对话框左侧为Not Printed Column为供选择加入的内容，对话框右侧为Printed Column，是所插入表格中要打印的内容。如果要在表格中加入新内容，先选中Not Printed Column中的内容，然后单击“>”键，所需内容便加到Printed Column中。如果要删除表格中的内容，单击Printed Column中所要删除内容，单击“<”键，内容即被删除。

如果要对所选择的表格格式进行编辑，单击表格编辑对话框的Edit Format键，进入表格格式编辑框，在此对话框内可以编辑编辑栏的长度、标题等内容。

表格格式编辑框

表格标题编辑框

	Width	Align left right	Fixed Point	Exp. Format	mixed Format	Precision	Exponent Characters
#	3	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	0	2
Signal Desc.	20	<input checked="" type="radio"/> left <input type="radio"/> right	string column				
Raw Data File	20	<input checked="" type="radio"/> left <input type="radio"/> right	string column				
Start Time	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
End Time	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Delay	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Area Sum	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Height Sum	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Response Sum	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Amount Sum	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2
Amt Sum (Unknown)	7	<input type="radio"/> left <input checked="" type="radio"/> right	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	3	2

First Delimiter Delimiter Last Delimiter

Caution: Setting up delimiters makes the table wider. Blanks are allowed. The width of the table layout is computed from the width of the columns + the width of all delimiters.

Header Footer OK Cancel Help

	Line 1	Line 2	Line 3
#	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Signal Desc.	Signal Desc.	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Raw Data File	Raw Data File	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Start Time	Start Time	<input type="text"/>	<input type="text"/>
End Time	End Time	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Delay	Delay	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Area Sum	Area Sum	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Height Sum	Height Sum	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Response Sum	Response Sum	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Amount Sum	Amount Sum	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Amt Sum (Unknown)	Amt Sum (Unkn	<input type="text"/>	<input type="text"/>

No Header
1 Line
2 Lines
3 Lines

use Delimiters no Delimiters

Show Header OK Cancel Help

Width: 定义表格中每栏的宽度。

Align: 规定表格栏中的文字靠左还是靠右。

Fixed Point, Exp. Format, Mixed Format: 规定表格栏中数字的显示方式。

Precision: 用Fixed Point方式显示时，规定小数点后数字位数。

Exponent Characters: 用Exp. Format显示时，数字的显示形式。

0 = 1.0e+001

1 = 1.0e001

2 = 1.0e01

3 = 1.0e1

当数字栏宽度有限时，可以选择合适的显示参数使显示数字充满数字栏。

First Delimiter: 表格第一栏的标识符。可以选择字母、符号(#,\$等)或空格。标识符占用表格栏宽度。

Delimiter: 表格栏的标识符。

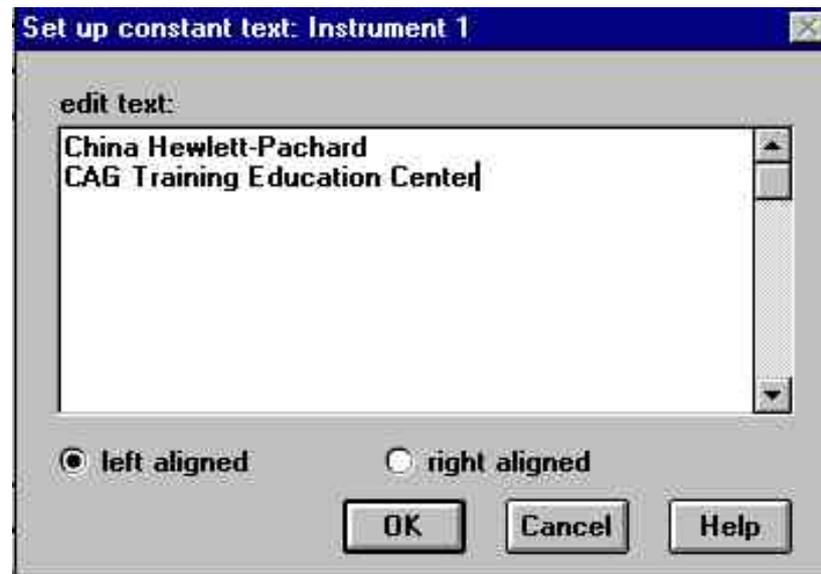
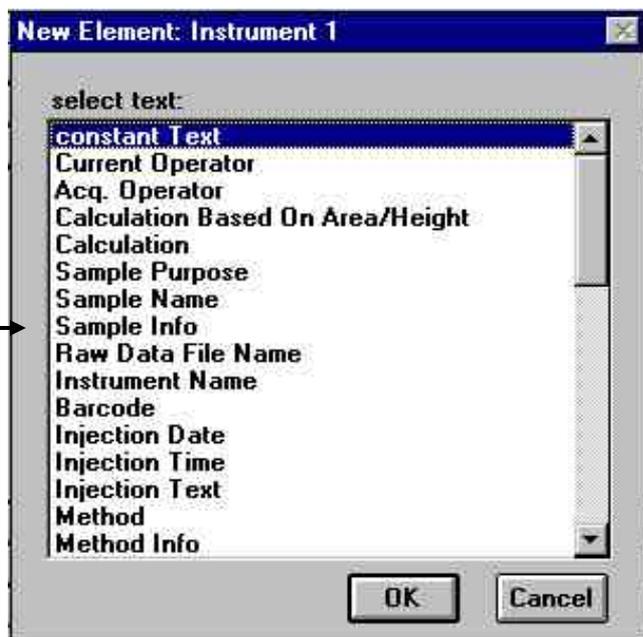
Header: 编辑表格标题。单击表格格式编辑框中Header键。

Footer: 编辑表格脚注。单击表格格式编辑框中Footer键。

文本工具：在新选项插入文本



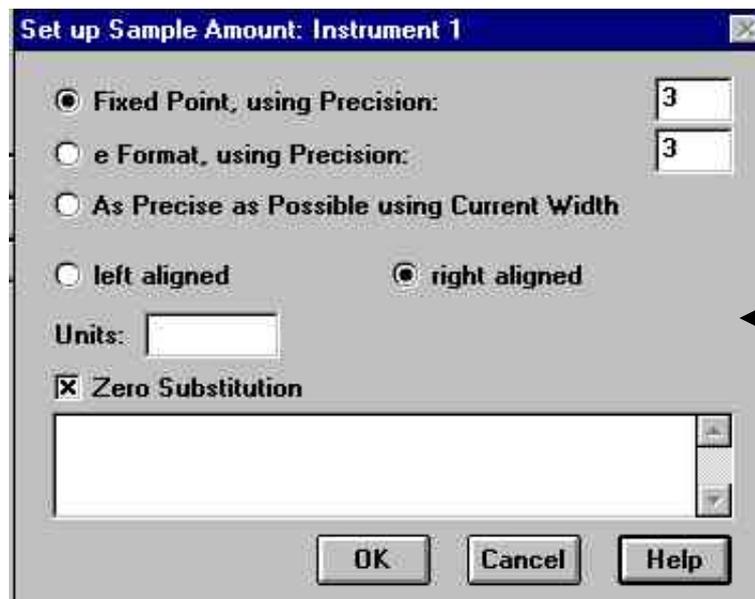
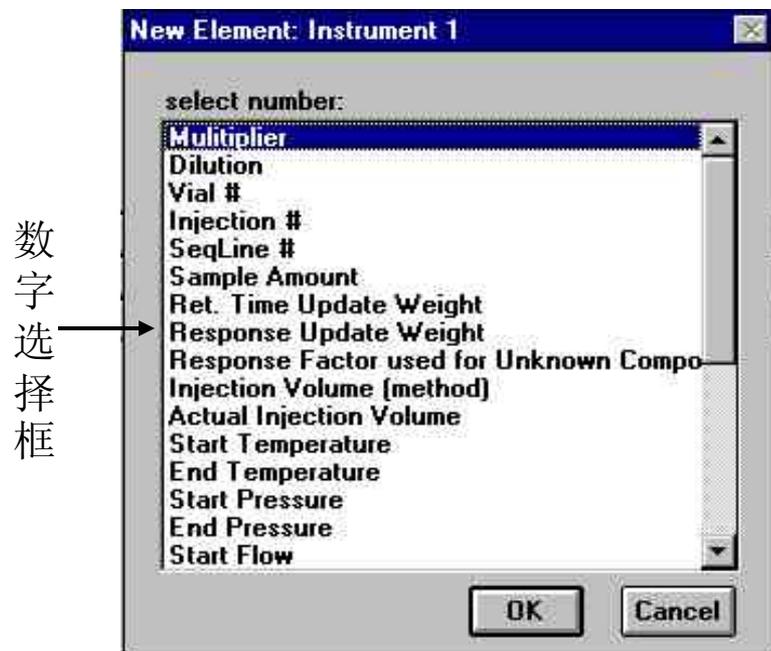
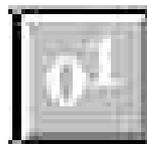
文本选项对话框



文本工具允许用户在报告模板的新选项内插入预先定义的文本。

要插入文本，首先单击文本工具图标。然后按下鼠标左键，拖拽鼠标，创建文本安放框，待位置合适后，松开鼠标左键，文本选项对话框自动弹出，选择所需插入的文本，单击OK键。如果要对文本重新进行编辑，只需双击文本即可。若要删除文本，单击文本后，按Del键即可。

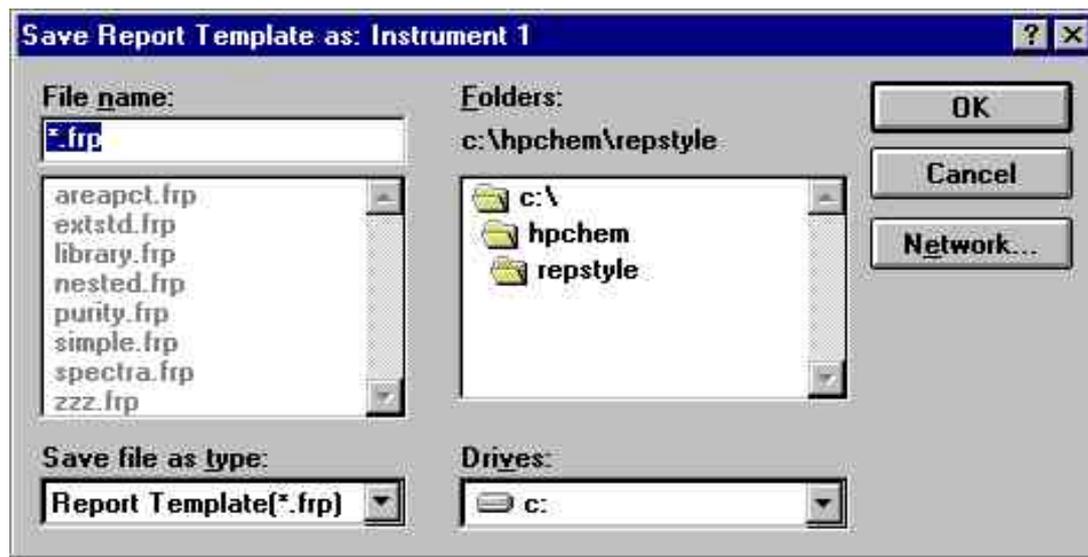
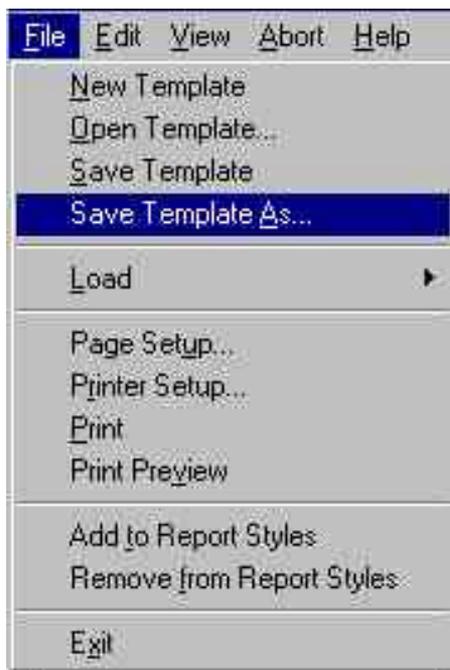
数字工具：在新选项插入数字



数字工具允许用户在模板新选项中插入适当的数字，例如样品浓度、保留时间等。

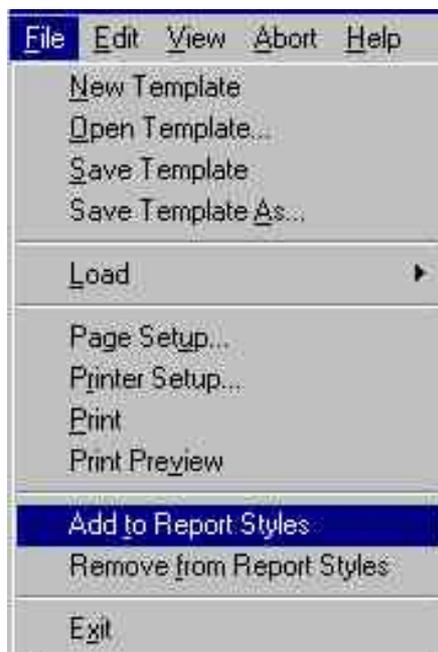
要插入数字，首先单击数字图标。然后按下鼠标左键，拖拽鼠标，创建数字安放框，待位置合适后，松开鼠标左键，数字选择对话框自动弹出，选择所需插入的数字，单击OK键，数字编辑框自动弹出，选择数字显示形式等内容。若所选数字为0，则可以在Zero Substitution框中输入相应信息，以替代0。如果要对数字重新进行编辑，只需双击数字即可。若要删除数字，单击数字后，按Del键即可。

模板的存贮



当用户编辑好自己的报告模板，可以通过Save Template As...存贮模板。模板文件的扩展名为.FRP。

把存贮的模板格式加到Specify Report标准格式选项中



用户可以通过Add to Report Style把存贮好的模板加到Specify Report中，作为一种可以选择的标准报告格式。如果在打印报告时，用户想用自己的报告格式打印，只需在Specify Report中选择相应的模板文件即可。若想把此报告格式从Specify Report中去除，选择Remove From Report Style即可。



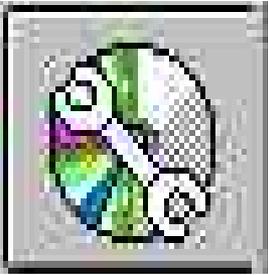
第十章 故障诊断与系统维护

本章内容：

- 诊断工具
- 仪器详细信息
- 进入logbooks
- EMF（Early Maintenance Feedback）
- 内置仪器诊断功能
- 如何使用维护光盘



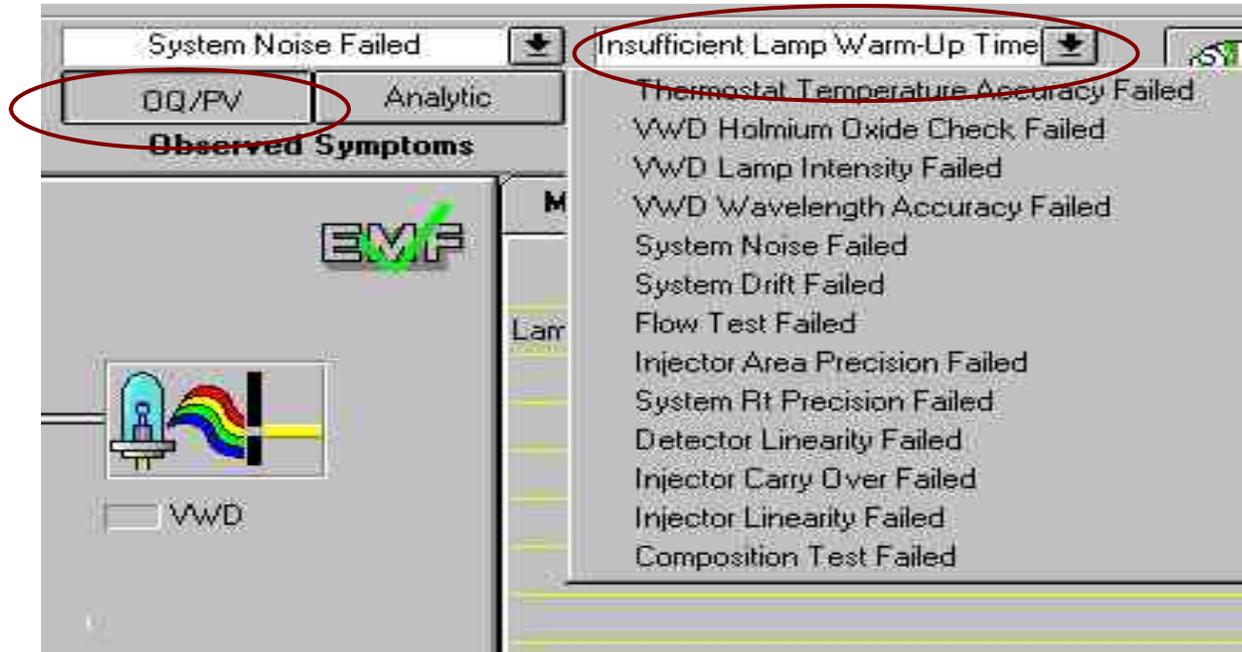
维护光盘



维护光盘包括：

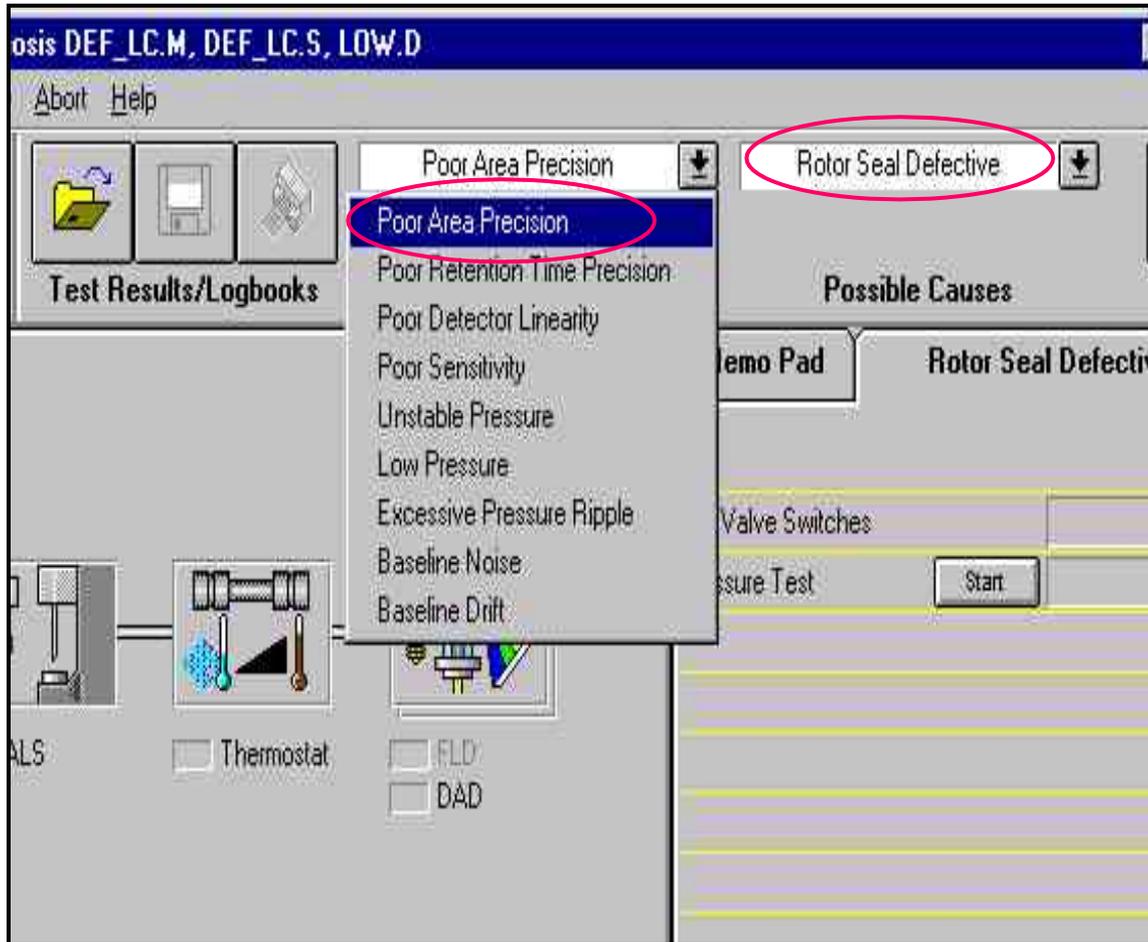
- 各个模块的维护过程（多媒体）说明
- 查询部件号、显示示意图
- 给出帮助信息

OQ/PV认证过程故障分析



1. 从左侧下拉菜单中寻找OQ/PV过程中您所遇到的问题。
2. 在右侧的下拉菜单中，选择可能的原因。
3. 按提示执行测试。
4. 使用Maintenance and Repair CD-ROM，可以快速查找如何进行测试和维修。

分析问题诊断



1. 从左侧下拉菜单中寻找分析过程中您所遇到的问题。
2. 在右侧的下拉菜单中，选择可能的原因。
3. 按提示执行测试。
4. 使用Maintenance and Repair CD-ROM，可以快速查找如何进行测试和维修。

早期维护反馈 (EMF)

	Limit	Actual
Seal wear (A)	1500	11157
Liquimeter (A)	none	7.488 l
Seal wear (B)	none	13580
Liquimeter (B)	none	8.383 l
Accum. UV On Time	none	122.74 h
Accum. VIS On Time	none	78.09 h
No. Needle Down	none	317
No. Valve Switches	20000	318

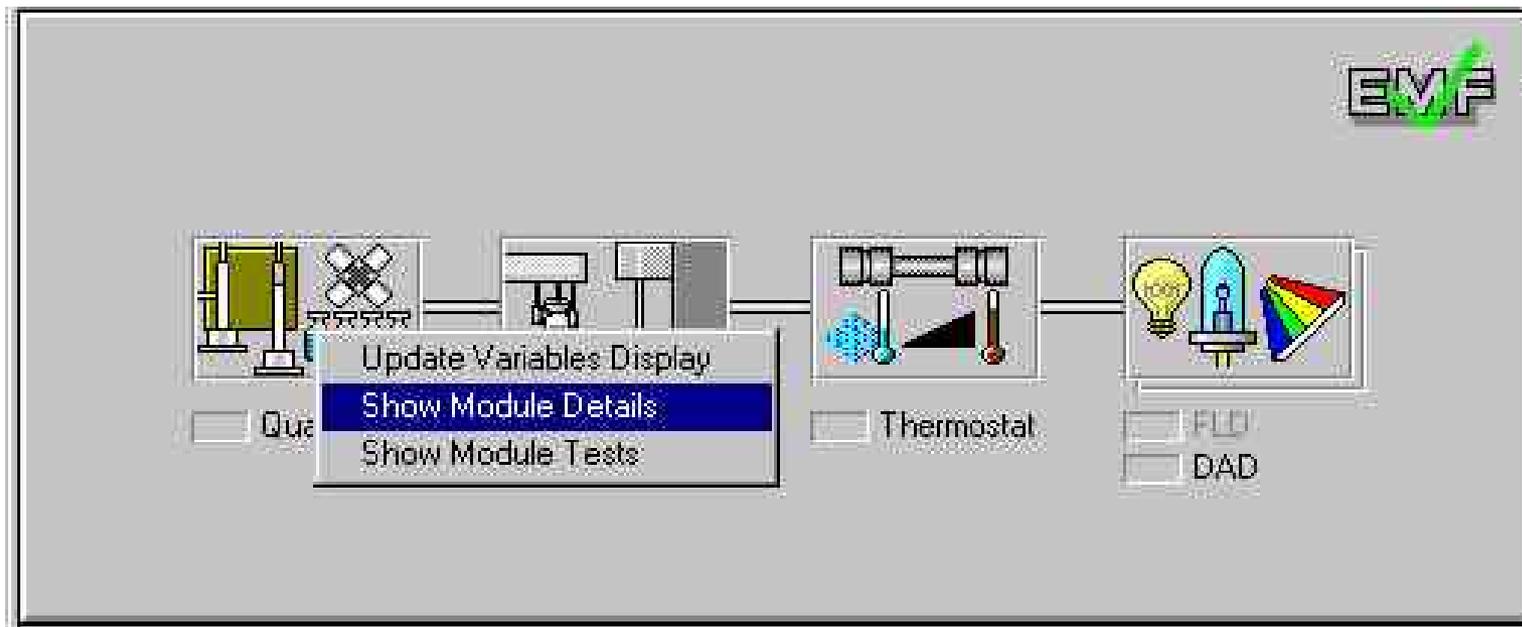
Send Changes Critical Changes



使用EMF功能:

- 应该基于仪器的使用情况，计划仪器维护的周期；
- 根据以前的使用经验，输入需要维护的限制值，并单击Send Changes键确认；
- 当实际值达到需要维护的限制值时，EMF图标上的绿色对勾标记变成黄色问号。

仪器详细信息



- 选择 *Update Variables Display* 显示仪器某一组件的详细信息，例如：仪器生成日期、firmware 版本号，仪器序列号等。
- 选择 *Show Module Details* 可以显示仪器的细节结构图。

进入Logbooks

The screenshot displays the 'Instrument 2 (offline 1): Diagnosis DEF_LC.M, DEF_LC.S, LOW.D' software window. The interface is divided into several sections:

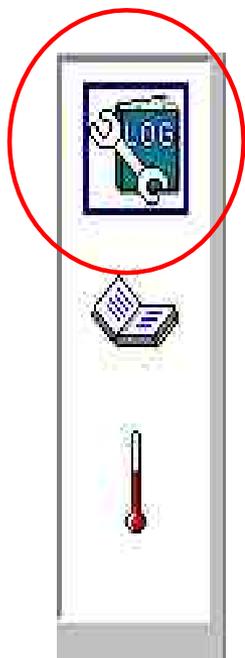
- Top Bar:** Contains the title bar and a menu bar with 'File', 'Diagnosis', 'Maintenance', 'View', 'Abort', and 'Help'. Below the menu bar are dropdown menus for 'Diagnosis' and 'Thermostat Temperature', and a 'Defective Heater' dropdown.
- Toolbar:** Includes icons for 'Test Results/Logbooks', 'Observed Symptoms', and 'Possible Causes'. There are also buttons for 'OQ/PV' and 'Analytic'.
- Central Area:** Features a schematic diagram of a quaternary pump system with four sample bottles labeled 'A', 'B', 'C', and 'D'. To the right, a 'Memo Pad' is open, showing a context menu with options: 'Update Variables Display', 'Switch to Toplevel Instrument Panel', 'Show Module Tests', and 'Maintenance Logbook Entry'. A black arrow points from the 'Maintenance Logbook' entry in the menu to the 'Maintenance Logbook' button in the 'Quaternary Pump - Logbooks' section.
- Bottom Section:** Titled 'Quaternary Pump - Logbooks', it contains buttons for 'Error Logbook', 'Runs Logbook', 'Maintenance Logbook', and 'Date Changes Logbook', each with a 'Show' button. At the bottom, there are buttons for 'Copy to Memo Pad', 'Send Changes', and 'Cancel Changes'.

Error Logbook



Date	Time	Event message
6/12/98	3:41:35 PM	Pressure above upper limit
6/9/98	1:25:24 PM	Synchronization lost
6/4/98	1:02:32 PM	Synchronization lost
6/1/98	9:27:40 AM	Pressure above upper limit

Runs Logbook



Run started	Run stopped
6/12/98 11:16:16 AM	6/12/98 11:39:16 AM
6/12/98 11:01:54 AM	6/12/98 11:14:24 AM
6/12/98 10:57:44 AM	6/12/98 10:58:26 AM
6/12/98 10:46:24 AM	6/12/98 10:49:24 AM
12/31/69 11:03:20 PM	12/31/69 11:00:00 PM
6/11/98 4:38:54 PM	6/11/98 5:01:54 PM
6/11/98 4:20:13 PM	6/11/98 4:32:43 PM
6/11/98 3:44:44 PM	6/11/98 3:48:20 PM
6/11/98 3:35:52 PM	6/11/98 3:39:52 PM
6/11/98 3:12:52 PM	6/11/98 3:16:52 PM
6/10/98 4:51:37 PM	6/10/98 5:04:07 PM
6/10/98 3:55:59 PM	6/10/98 3:56:33 PM
6/10/98 3:31:58 PM	6/10/98 3:32:41 PM
6/10/98 1:32:25 PM	6/10/98 1:55:26 PM
6/10/98 1:16:41 PM	6/10/98 1:29:11 PM



维护Logbook

Date	Time	Maintenance Activity	Operator
3/31/98	4:31:01 PM		LCN-MB
9/23/97	4:10:33 PM	Pump (B) seals replaced	linda/judy
9/23/97	4:10:00 PM	Pump (A) seals replaced	linda/judy
7/29/97	5:24:14 PM	Pump (A) seals replaced	2413
11/6/96	3:17:25 PM	Pump (B) pistons replaced	perkins
11/6/96	12:07:46 PM	Pump (A) seals replaced	perkins

维护 **logbook** 文件存贮在仪器某一组件内，而不是存贮在计算机内。

诊断测试

开始测试

测试解释

Result Status		
Pressure Test		
Expected total time: approx 10 min. w/o flushing degasser		
Expected total time: approx 20 min. incl. flushing degasser		
Test Procedure:		
1. Connect bottle with isoprop. (G1311A: D/G1312A: A(2))		
2. Block system with blank nut (01080-83202)		
3. Open purge valve		
4. Start flushing vacuum degasser for about 10 min. (optional)		
5. Start flushing channel for about 2 min.		
6. Close purge valve		
7. Running pressure test (about 4.5 min.)		
8. Evaluating pressure test		

测试过程

测试选择

Test Selection

Pump | Sampler/Injector | Thermostat | Detector

Procedures List

- Pressure Test
- Leak Test

Description:

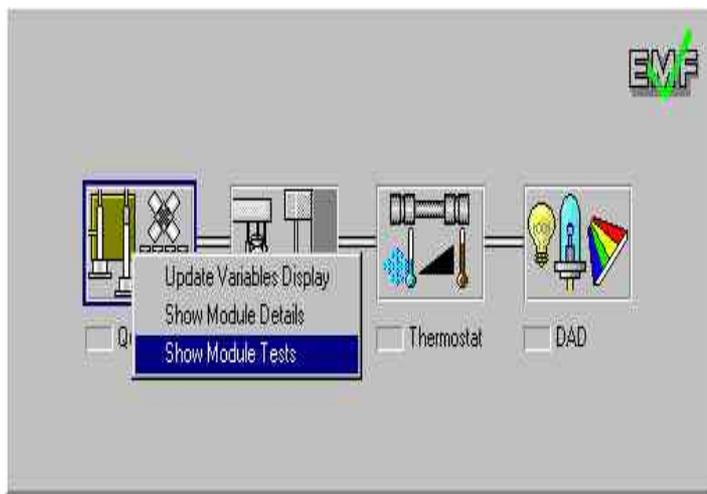
Fast test for verifying tightness of complete chromatographic system. The system is blocked and pressure drop at 390 bar is measured over 3 min.

Start | Copy to Memo Pad | Close

泵故障诊断



要进行泵故障诊断，用鼠标单击Quat. Pump图标，然后选择Show Module Test选项，进入泵诊断画面。



泵诊断有两个内容：Pressure Test和Leak Test.

Pressure Test: 可以诊断整个色谱系统的密封情况。当您怀疑系统有小的泄漏或在维修之后（例如：更换泵的密封垫或进样阀的转动密封之后）应该执行本测试。测试时，给整个系统加压至390bar，持续3min，泵的压力降低速率不应大于2bar/min。

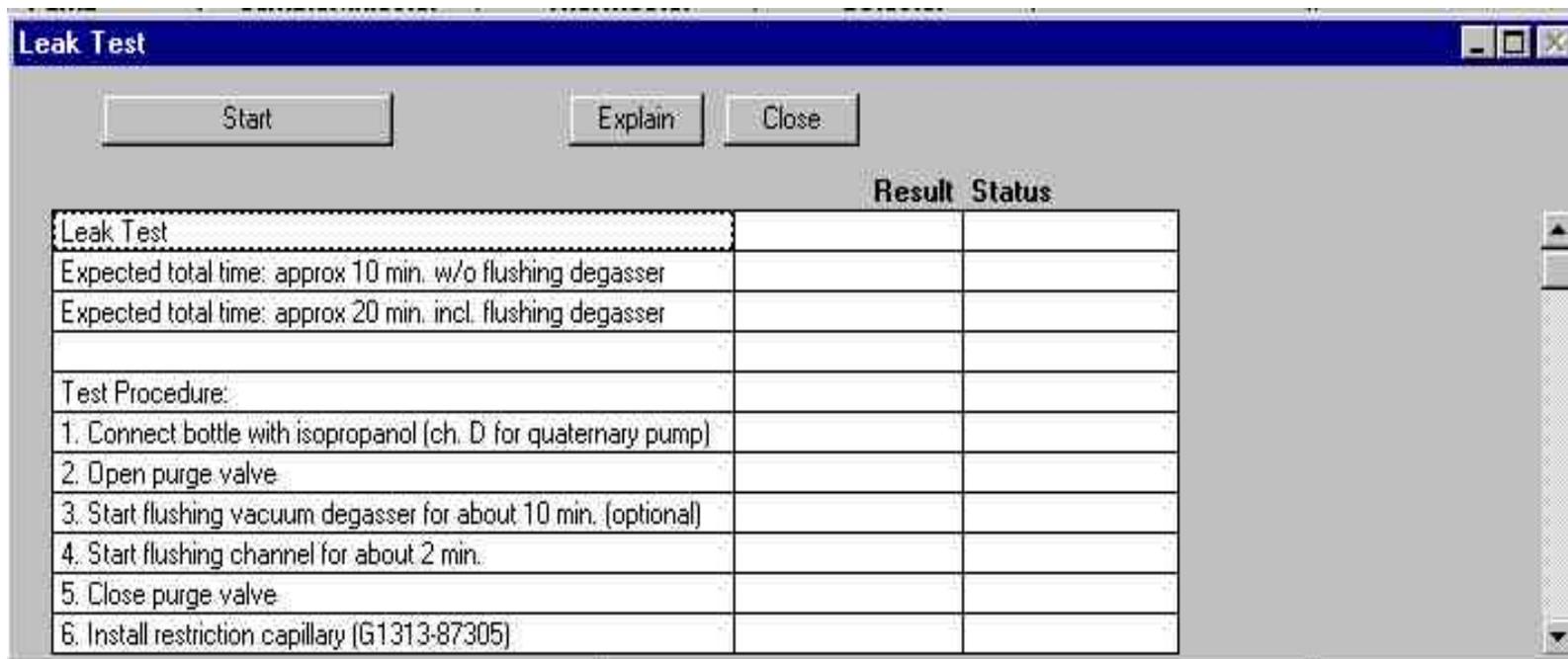
选择**Pressure Test**后，单击**Start**键，开始**Pressure Test**。

	Result	Status
Pressure Test		
Expected total time: approx 10 min. w/o flushing degasser		
Expected total time: approx 20 min. incl. flushing degasser		
Test Procedure:		
1. Connect bottle with isoprop. (G1311A; D/G1312A; A(2))		
2. Block system with blank nut (01080-83202)		
3. Open purge valve		
4. Start flushing vacuum degasser for about 10 min. (optional)		
5. Start flushing channel for about 2 min.		
6. Close purge valve		
7. Running pressure test (about 4.5 min.)		
8. Evaluating pressure test		
9. Open purge valve to release pressure		

按照工作站的提示进行测试即可，测试结束工作站会自动给出测试结果及评价。



Leak Test: 测试泵系统的密封状况。工作站利用内置程序，检测泵在非常低的流量下，两个活塞传输流动相时压力升高的情况。在非常低的流量下，非常小的泄漏将被检测到。

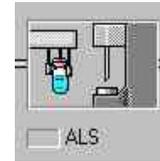


选择**Leak Test**测试项，用鼠标单击**Start**，开始**Leak Test**测试。

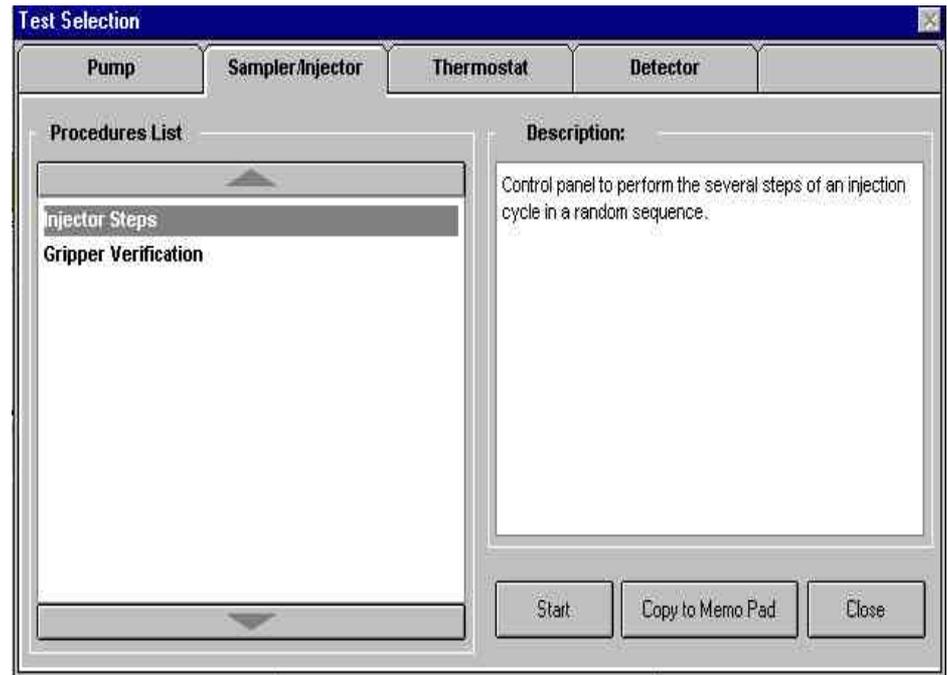
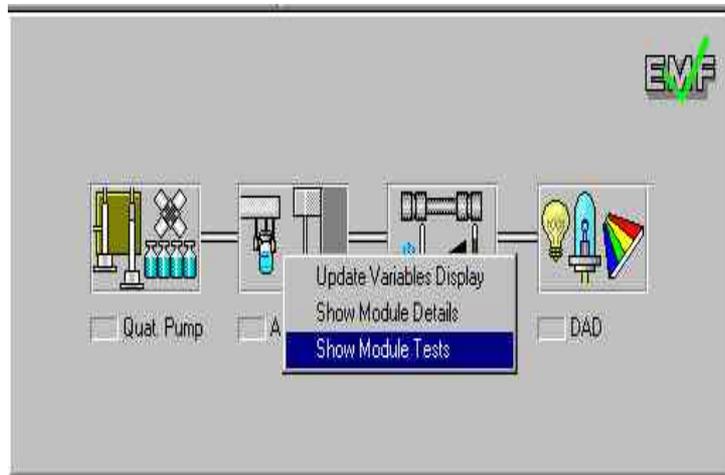
Leak Test共有**14**项测试内容，按照工作站的提示进行测试即可。

测试结果的详细信息见**Explain**信息中**Test Result**。

自动进样器故障诊断



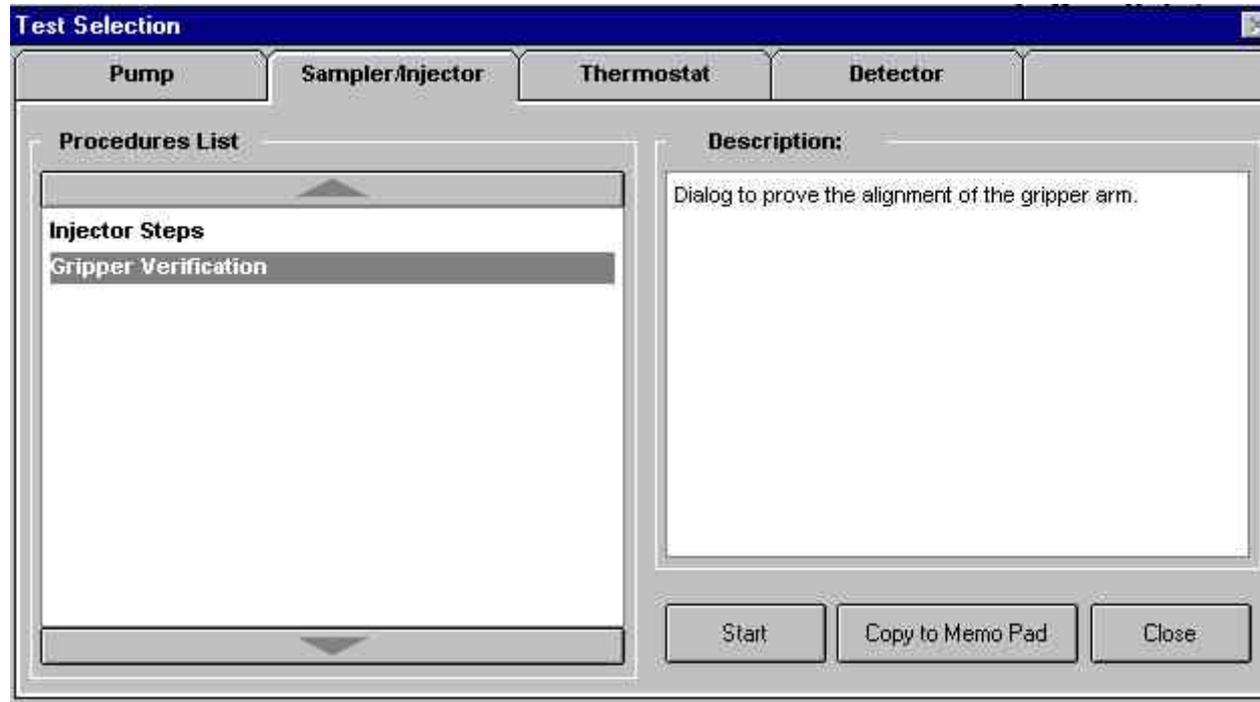
要进行自动进样器故障诊断，用鼠标单击ALS图标，然后选择Show Module Test选项，进入自动进样器诊断画面。



自动进样器测试分两部分：**Injector Steps**和**Gripper verification**。

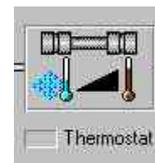
Injector Steps: 工作站把整个进样过程分成几个步骤完成，用户可以随意选择进样步骤，测试究竟是自动进样器哪一步出现故障。

Gripper Verification: 诊断自动进样器的工作状况。

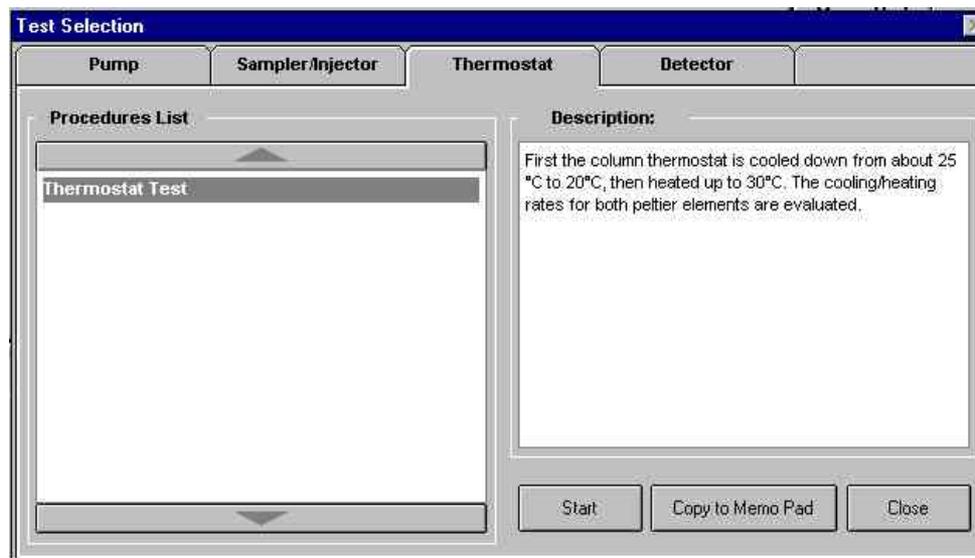
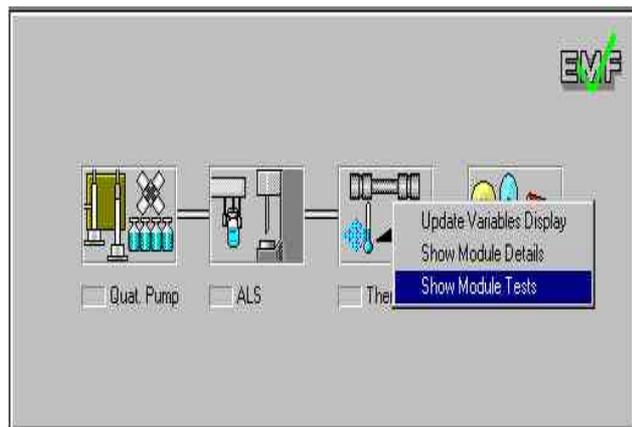


选择 **Injector Steps** 或 **Gripper verification** 后，单击**Start**键，即可开始检测。

柱温箱故障诊断



要进行柱温箱故障诊断，单击Thermostat图标，然后选择Show Module Test选项，进入柱温箱诊断画面。



柱温箱故障诊断用于测试两个加热块的冷却和加热性能。当测试开始，两个加热块温度都设置在大约25℃。此温度持续12秒，然后温度降至20℃，从25℃到20℃的降温时间被测量，工作站根据降温时间计算冷却速率，仪器的冷却速率应 $\geq 2^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 。3.5min时，温度设置到30℃，两个加热块开始加热，从20℃到30℃的加热时间被测量，工作站根据加热时间计算加热速率，仪器的加热速率应 $\geq 3^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 。测试结果及故障的可能性见Explain信息中的Test Result。

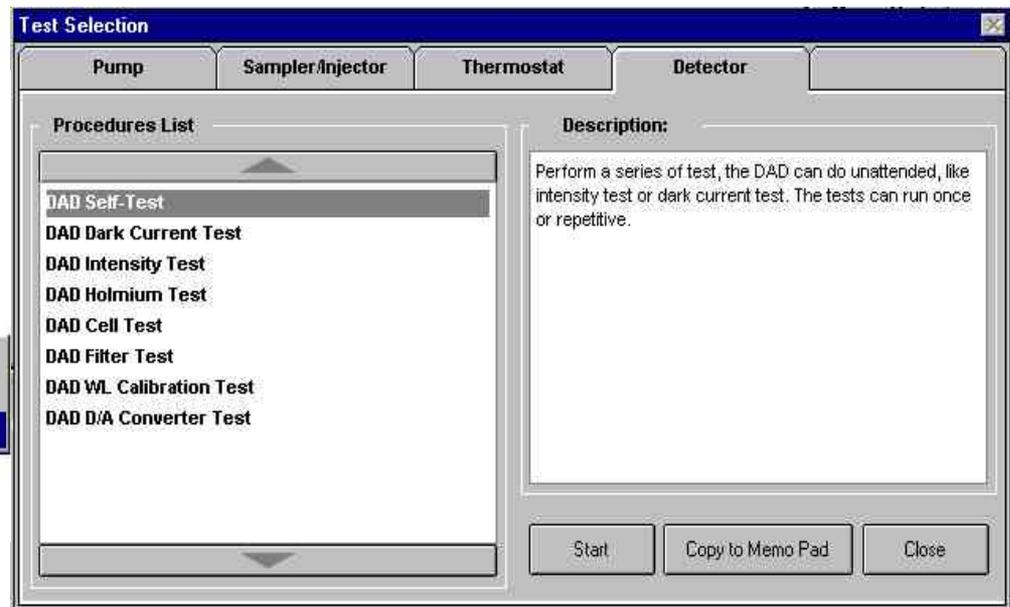
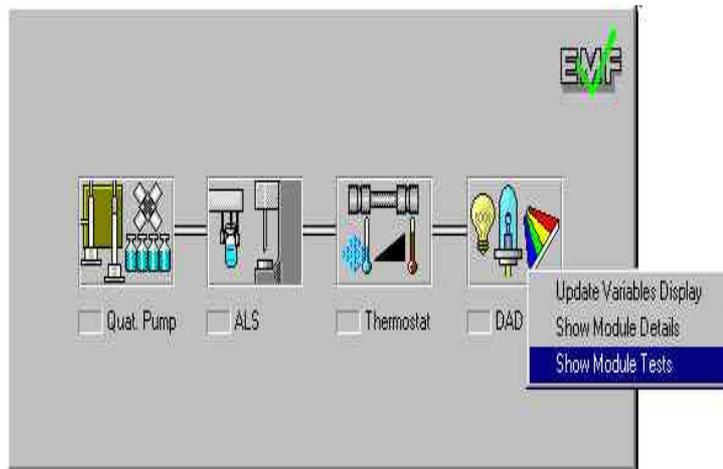
检测器故障诊断



用户安装的检测器不同，检测器故障诊断内容也不同。用户应根据自己检测器的配置进行检测。下面只对DAD和VWD的诊断过程进行说明。

DAD 故障诊断

要进行DAD故障诊断，单击DAD图标，然后选择Show Module Test选项，进入DAD测试选项画面。



DAD故障诊断测试共有8项内容：

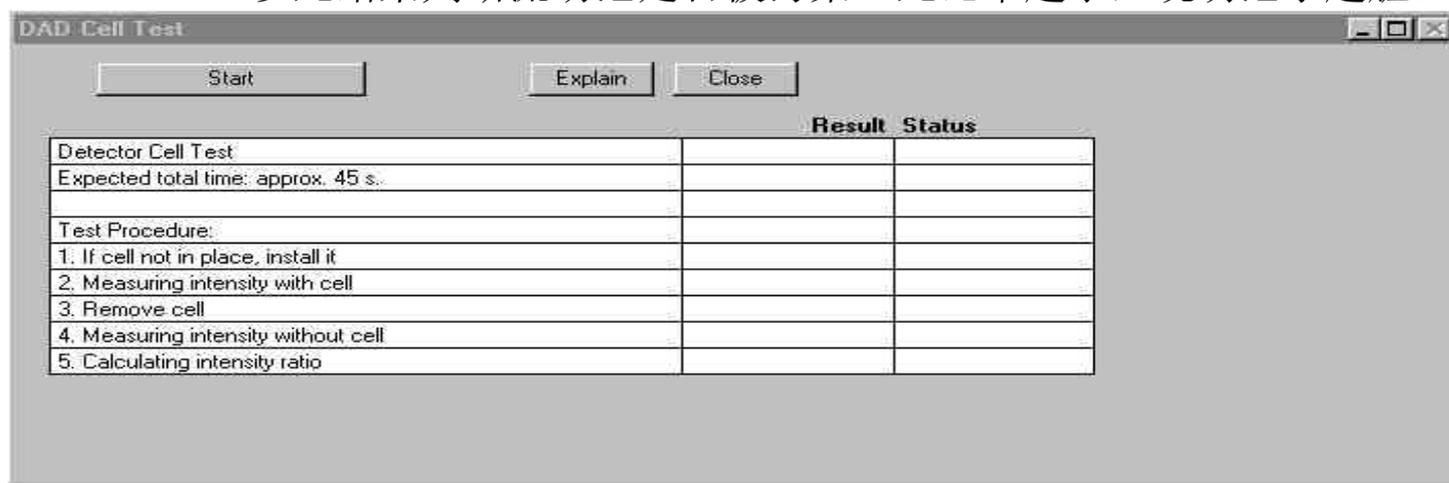
⇒**DAD Self-Test**: DAD检测器进行自测（在进行DAD Self-Test测试之前，应先把流动池从光路中取走）。

⇒**DAD Dark Current Test**: DAD暗电流检测。

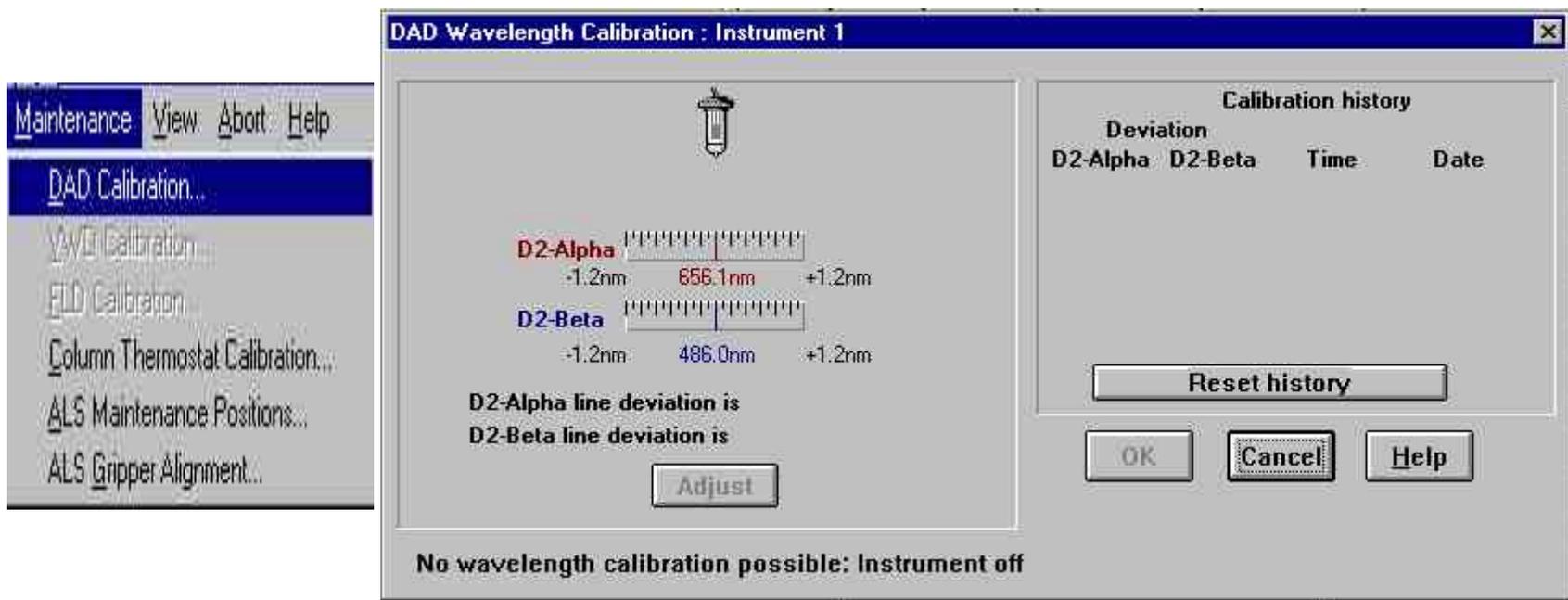
⇒**DAD Intensity Test**: DAD光强度检测。检测分4个波长范围，检测器测量每段波长的最小值（流动相使用HPLC级纯水）。

⇒**DAD Holmium Test**: DAD波长准确性检测。

⇒**DAD Cell Test**: 测量氙灯和钨灯在整个DAD检测波长范围内的光强度，一次在安装流动池情况下测量，一次是在没有流动池的情况下测量。工作站计算两次测量光强度的比率（ $\text{Intensity}_{(w/cell)} / \text{Intensity}_{(w/o cell)}$ ）。以此结果判断流动池是否被污染。此比率越小，说明池子越脏。



如果DAD WL Calibration Test测试失败，则需要对DAD的波长进行校准。



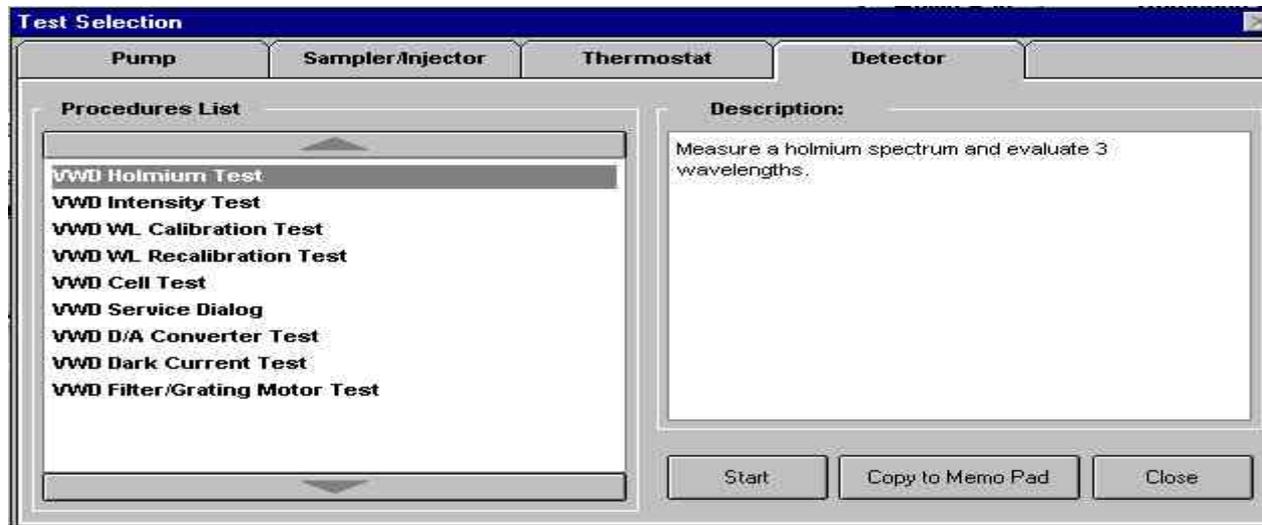
选择Maintenance菜单下DAD Calibration，工作站自动检测目前检测器在656.1nm和486nm处的波长。如果检测值与仪器设定值有差异，工作站会自动给出偏差结果，如果想校准，单击Adjust键，仪器自动进行校准。

⇒**DAD D/A Converter Test:** 检测数/模转换板的工作状况。DAD检测器提供一个模拟色谱输出信号，在积分仪或记录仪上绘出检测器的输出信号。以输出信号强度判断数/模转换板是否工作正常。

VWD 故障诊断



要进行VWD故障诊断，单击VWD图标，选择Show Module Tests，进入测试选项对话框：

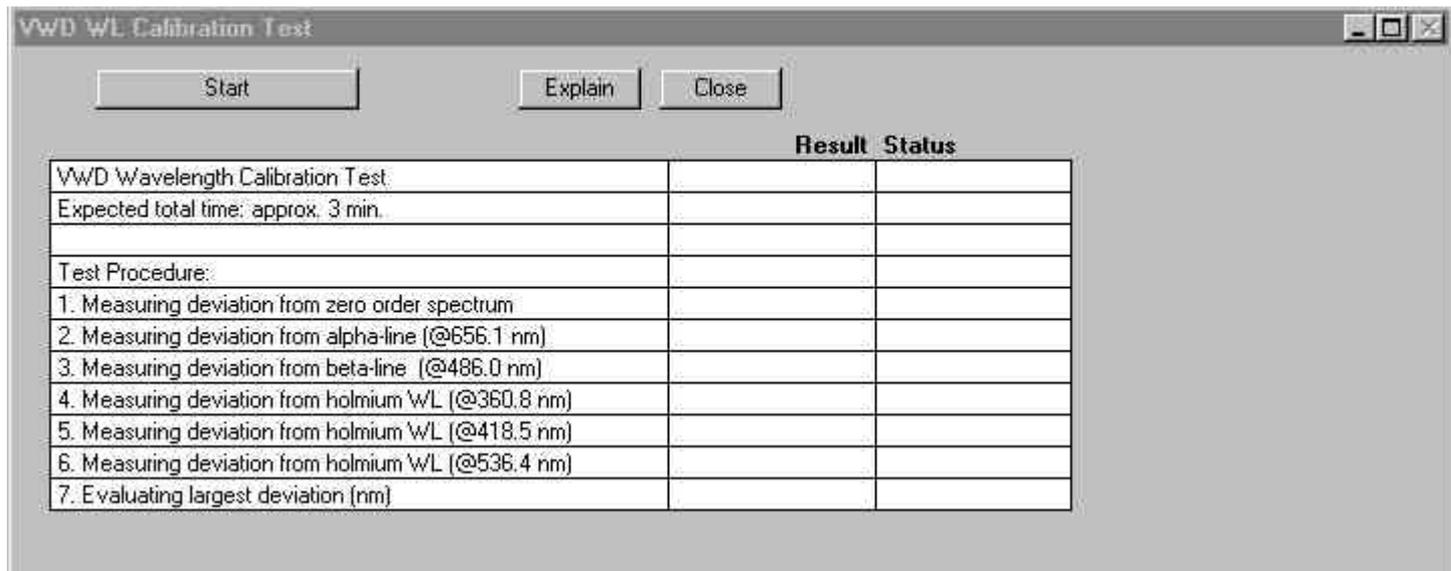


VWD故障诊断共有9项内容：

⇒ **VWD Holmium Test:** 使用内置钬玻璃，对钬玻璃的3个特征波长（360.8nm, 418.5nm, 536.4nm）进行检测，以确定波长的准确性。波长准确性的限制在每个特征波长 $\pm 2\text{nm}$ 。测试时，使用纯水作流动相。完成此项测试，报告结果会自动显示在屏幕上。

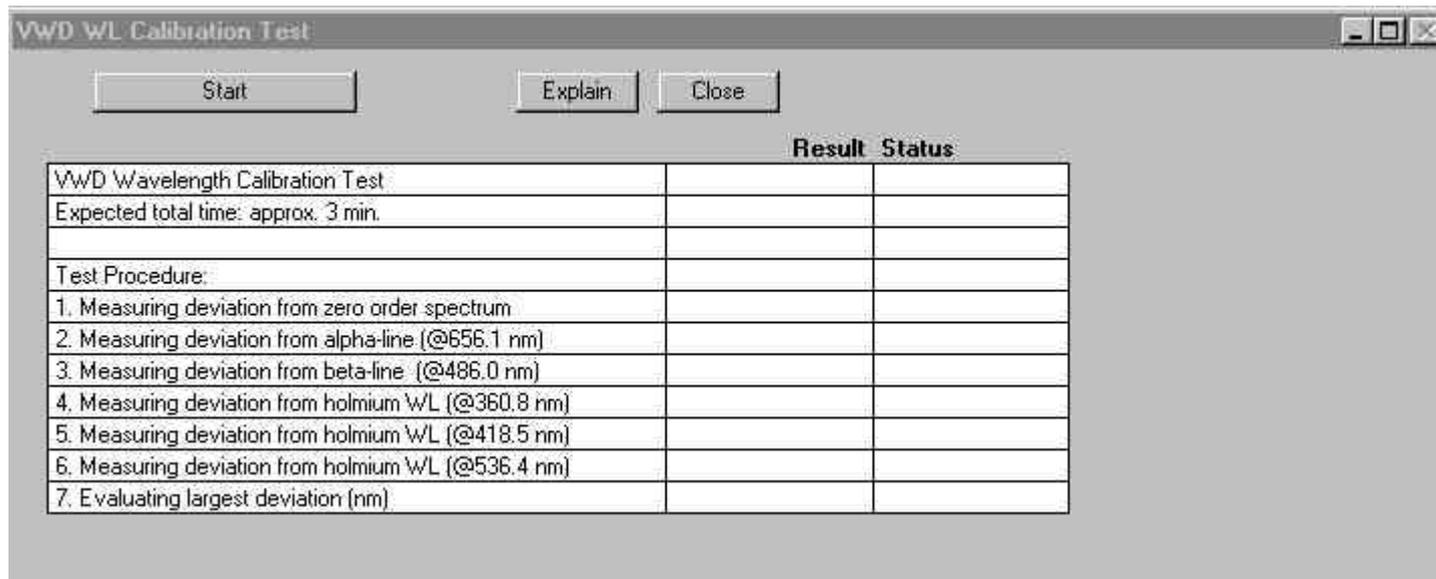
⇒ **VWD Intensity Test:** 在UV灯的整个波长范围（190~800nm），检测UV灯的光强度。测试时使用水作流动相。测试结果自动显示在显示器上。测试结果要求：最大显示强度>10000counts；平均吸收强度>5000counts；最小吸收强度>200counts。如果检测结果不在上述范围内，可能UV灯老化，检测池脏或检测池内有气泡，或UV灯没有开启。

⇒ **VWD WL Calibration Test:** 检测器使用零级位置，对钛玻璃的三个特征波长360.8nm, 418.5nm, 536.4nm及氙灯的两个特征发射波长656.1nm及486nm进行检测。检测结果自动显示在显示器上。测试时使用纯水作流动相。



如果VWD WL Calibration Test检测结果超出规定的限制，则要进行VWD WL Recalibration Test。

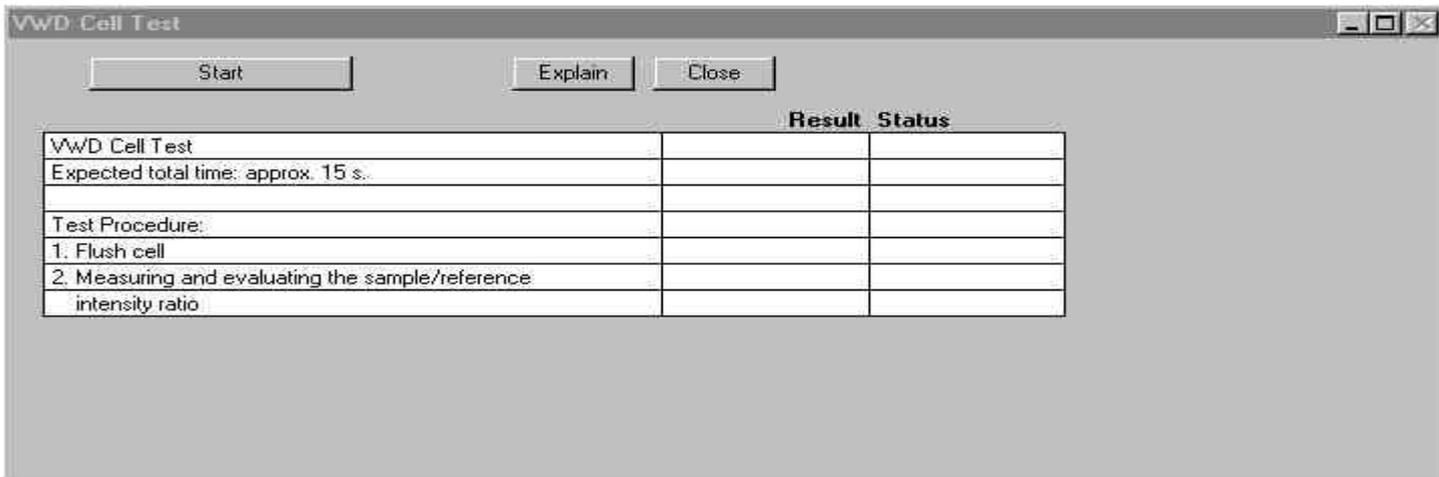
⇒ **VWD WL Recalibration Test:** 对检测器波长进行再校准。再校准后，波长偏差为0。



⇒ **VWD Cell Test:** 比较光栅在零级位置时，样品二极管和参比二极管的光强度，光强度比值结果（样品:参比）作为衡量流动池吸收光大小的一个尺度。此测试可作为判断流动池是否受到污染的一个根据。

VWD Cell Test过程:

- 1.用脱过气的纯水冲洗流动池。
- 2.开始测量样品光强与参比光强的比率。



- ⇒ **VWD Service Dialog:** 为用户提供一个对话框，控制光栅，滤光器，选择预放大器增益，监测选择信号。
- ⇒ **VWD D/A Converter Test:** 测试VWD数/模板的工作状况。测试过程与DAD D/A Converter Test测试过程一样。
- ⇒ **VWD Dark Current Test:** 关闭氙灯，测量系统电子噪音。
- ⇒ **VWD Grating/Filter Motor Test:** 快速测试光栅和滤光器马达的工作状况。

附录 重新安装化学工作站

如果您的化学工作站在操作过程中被误删某些执行程序或使用其它软件与化学工作站发生冲突，致使化学工作站不能正常运行，那么就需要对化学工作站软件进行重新安装。

重新安装化学工作站分**四步**进行：

▲ 拷贝：

- ▲ 拷贝有用的文件—包括数据文件，方法文件及序列文件。
 - 数据文件在 C:\HPCHEM\1\DATA子目录下；
 - 方法文件在 C:\HPCHEM\1\METHODS子目录下；
 - 序列文件在 C:\HPCHEM\1\SEQUENCE子目录下。
- ▲ 拷贝Winnt子目录下win.ini文件。

▲ 删除：

- ▲ 删除HPCHEM子目录及子目录下所有文件。
- ▲ **修改**Winnt子目录下win.ini文件：删除win.ini文件中以[PCS], [PCS1] 为标题的程序段。
- ▲ 删除所有的（包括桌面、菜单中的）快捷方式。

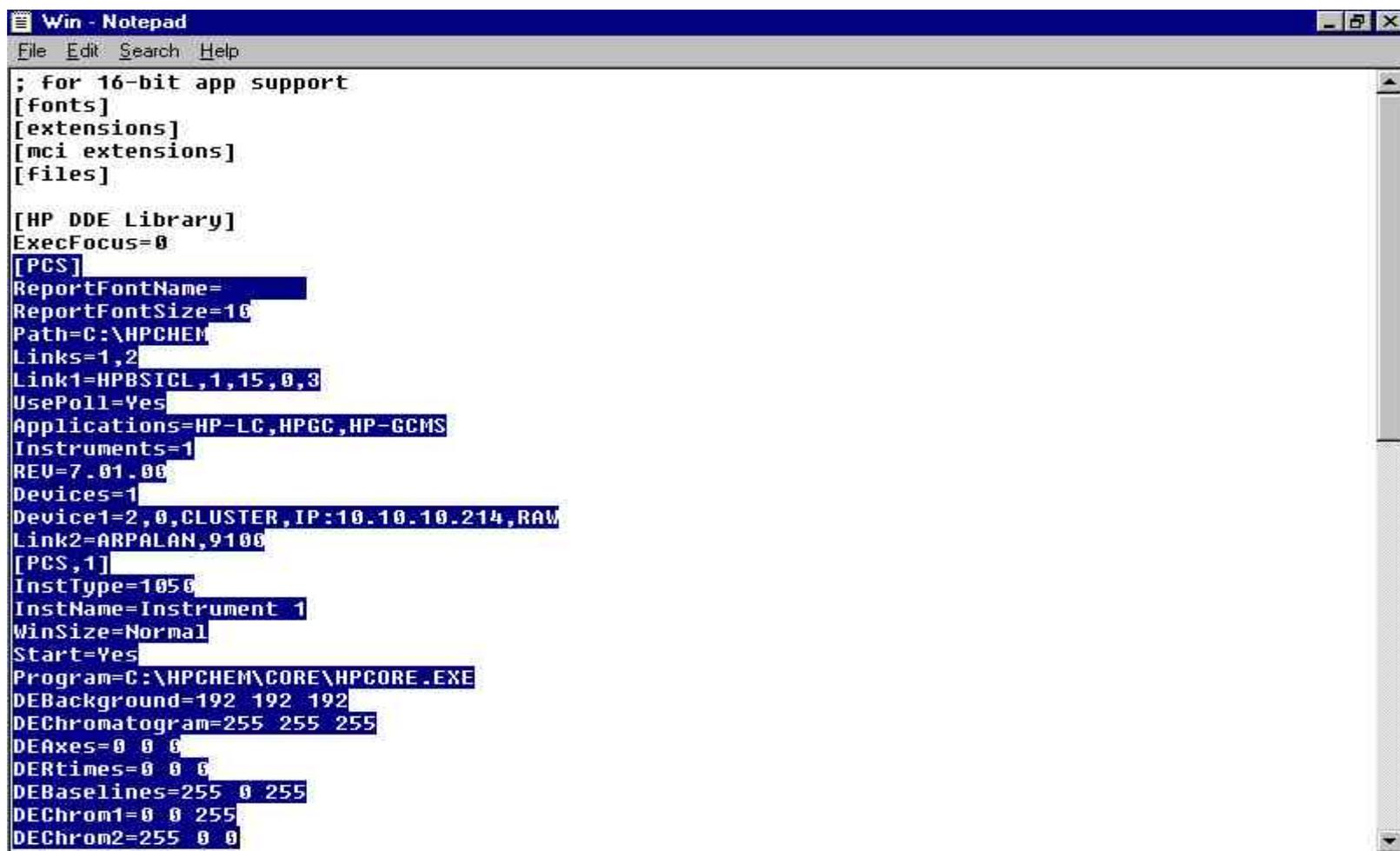
▲ 安装：

- ▲ 运行光盘上的Setup.exe文件；
- ▲ 选择需要安装的软件并输入其序列号，执行安装。

▲ 配置：

- ▲ 选择仪器的工作状态；
- ▲ 配置仪器的IP地址。

修改win.ini文件



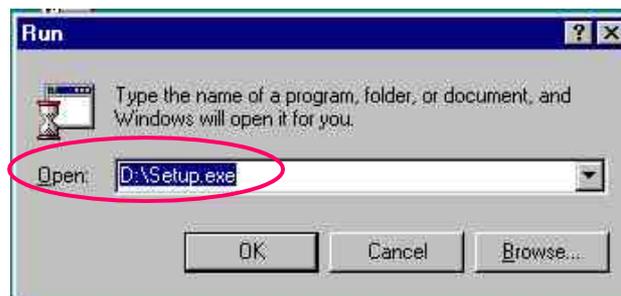
```
Win - Notepad
File Edit Search Help
; for 16-bit app support
[fonts]
[extensions]
[mci extensions]
[files]

[HP DDE Library]
ExecFocus=0
[PCS]
ReportFontName=
ReportFontSize=16
Path=C:\HPCHEM
Links=1,2
Link1=HPBSICL,1,15,0,3
UsePoll=Yes
Applications=HP-LC,HPGC,HP-GCMS
Instruments=1
REV=7.01.00
Devices=1
Device1=2,0,CLUSTER,IP:10.10.10.214,RAW
Link2=ARPALAN,9100
[PCS,1]
InstType=1050
InstName=Instrument 1
WinSize=Normal
Start=Yes
Program=C:\HPCHEM\CORE\HPCORE.EXE
DEBackground=192 192 192
DEChromatogram=255 255 255
DEAxes=0 0 0
DETimes=0 0 0
DEBaselines=255 0 255
DEChrom1=0 0 255
DEChrom2=255 0 0
```

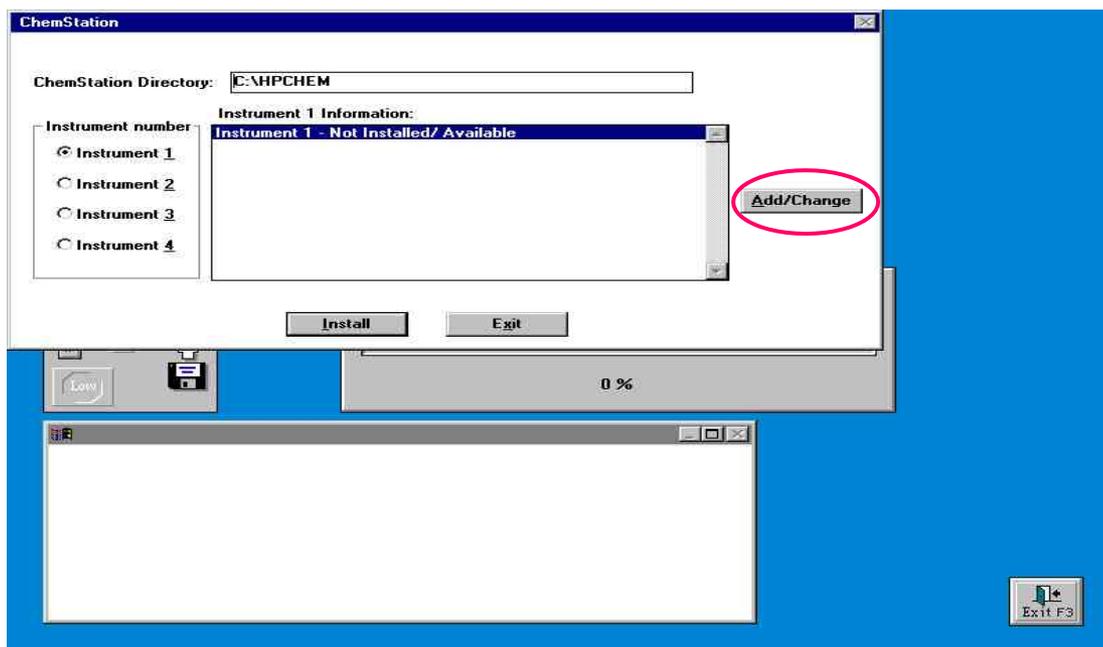
修改完毕，存贮并退出win.ini编辑。

安装软件

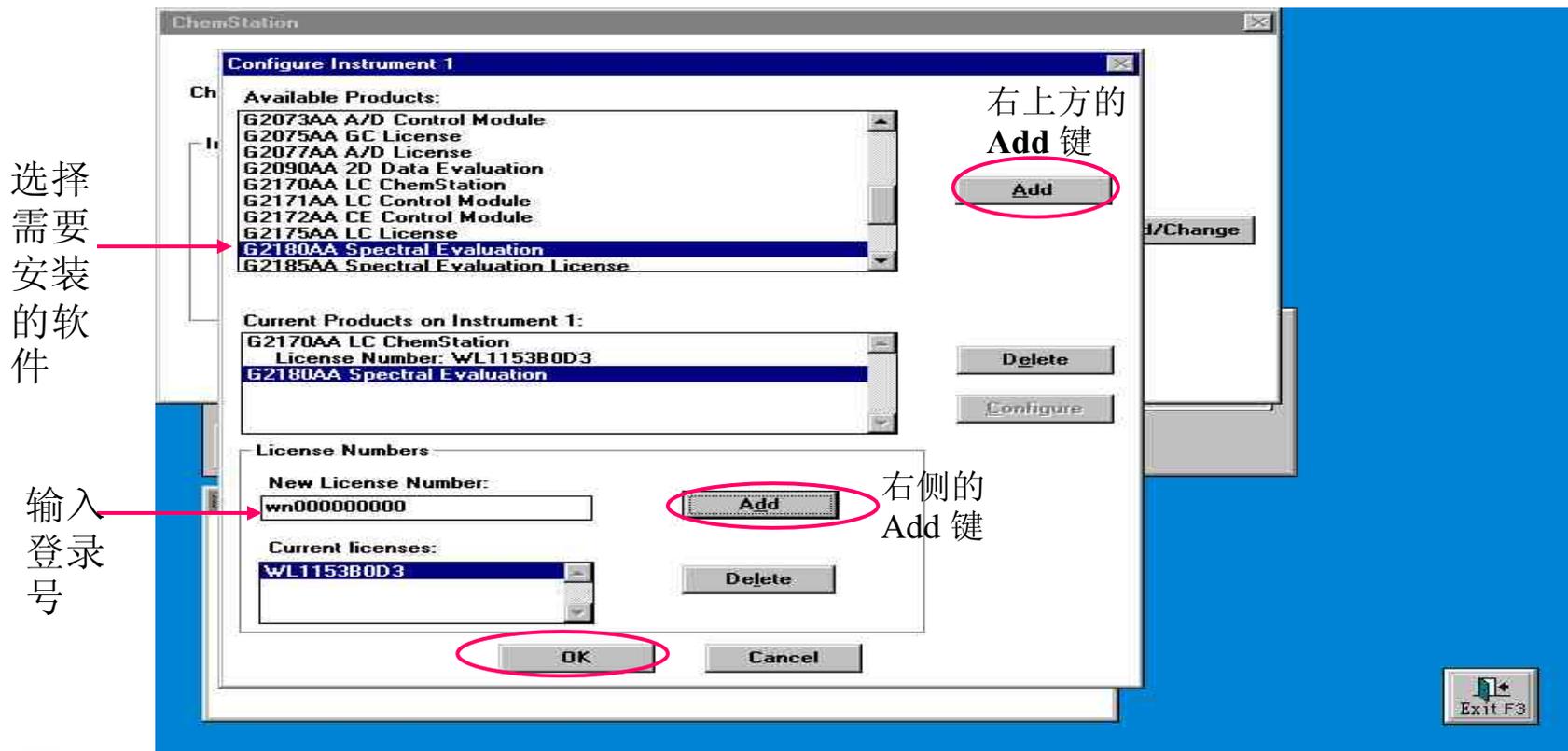
把化学工作站软件CD-ROM盘放入光驱，用鼠标单击Start键，选择Run命令，在Run对话框Open右侧空白栏中输入D:\setup.exe（假设D为光驱）后用鼠标单击OK键，进行化学工作站的安装。



•计算机启动工作站安装程序，进入工作站安装画面。单击Add/Change键，选择需要安装的软件名称。

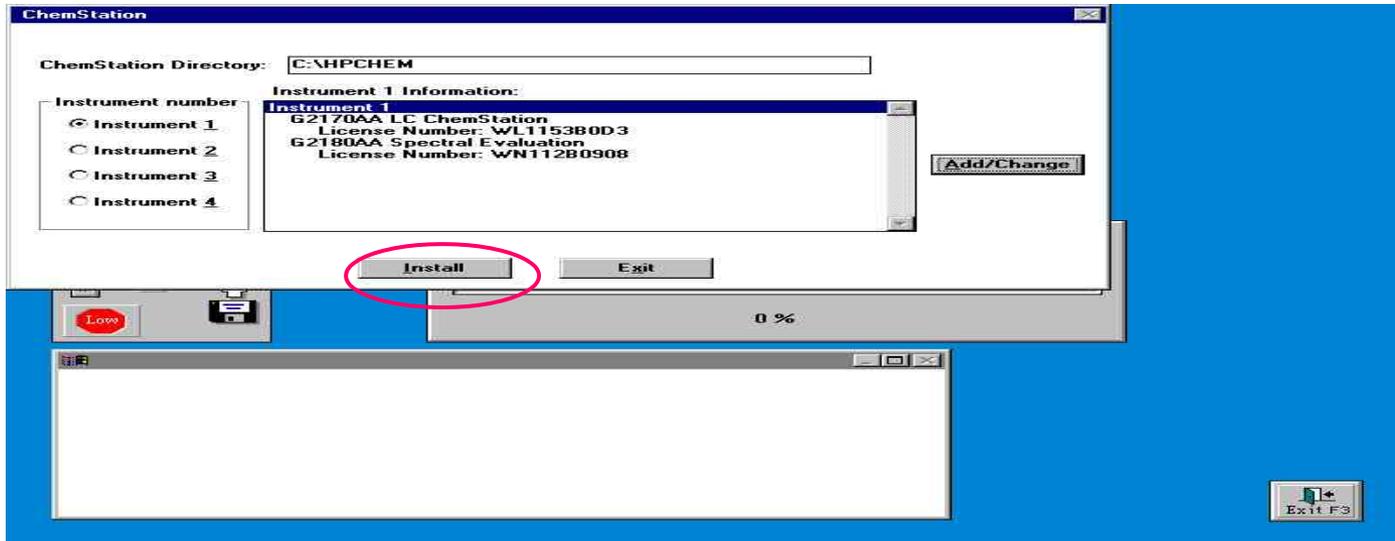


- 选择G2170AA LC ChemStation软件，单击右上方的Add键，然后在New License Number框输入G2170AA软件的登录号，再单击右侧的Add键；
如果有DAD检测器，在完成上述操作后，再选择G2180AA Spectra Evaluation软件，单击右上方的Add键，然后在New License Number框输入G2180AA软件登录号，再单击右侧的Add键。

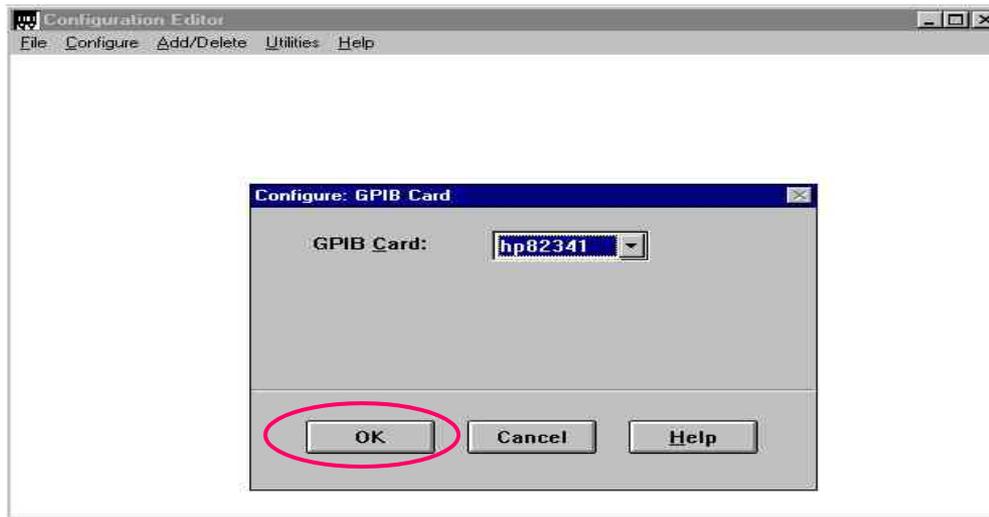


选择完毕，单击OK。

- 单击Install键进行安装。

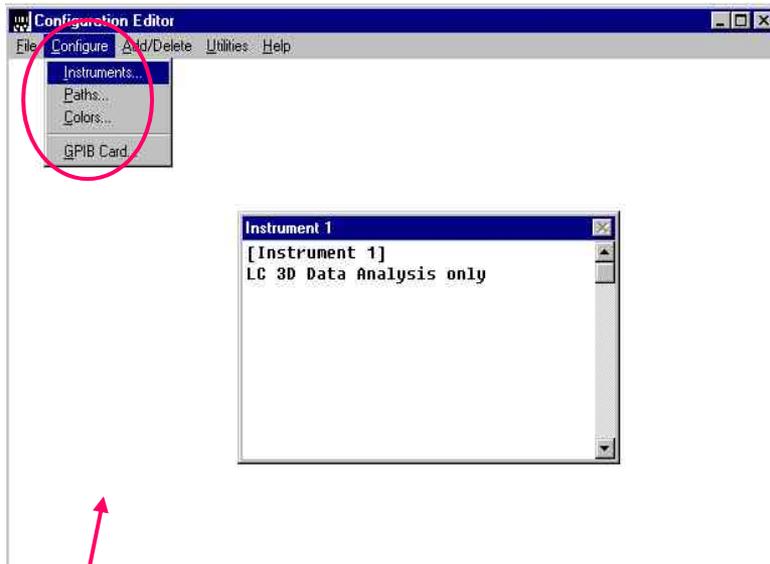


仪器配置



待软件安装完毕进行
仪器配置。

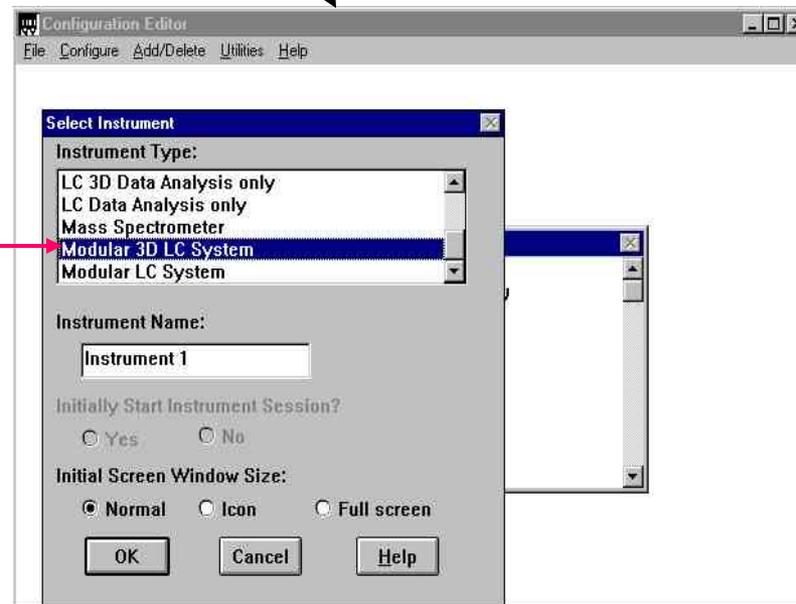
单击OK，确认GPIB
卡类型(旧的通讯方
式，现在很少使用)。



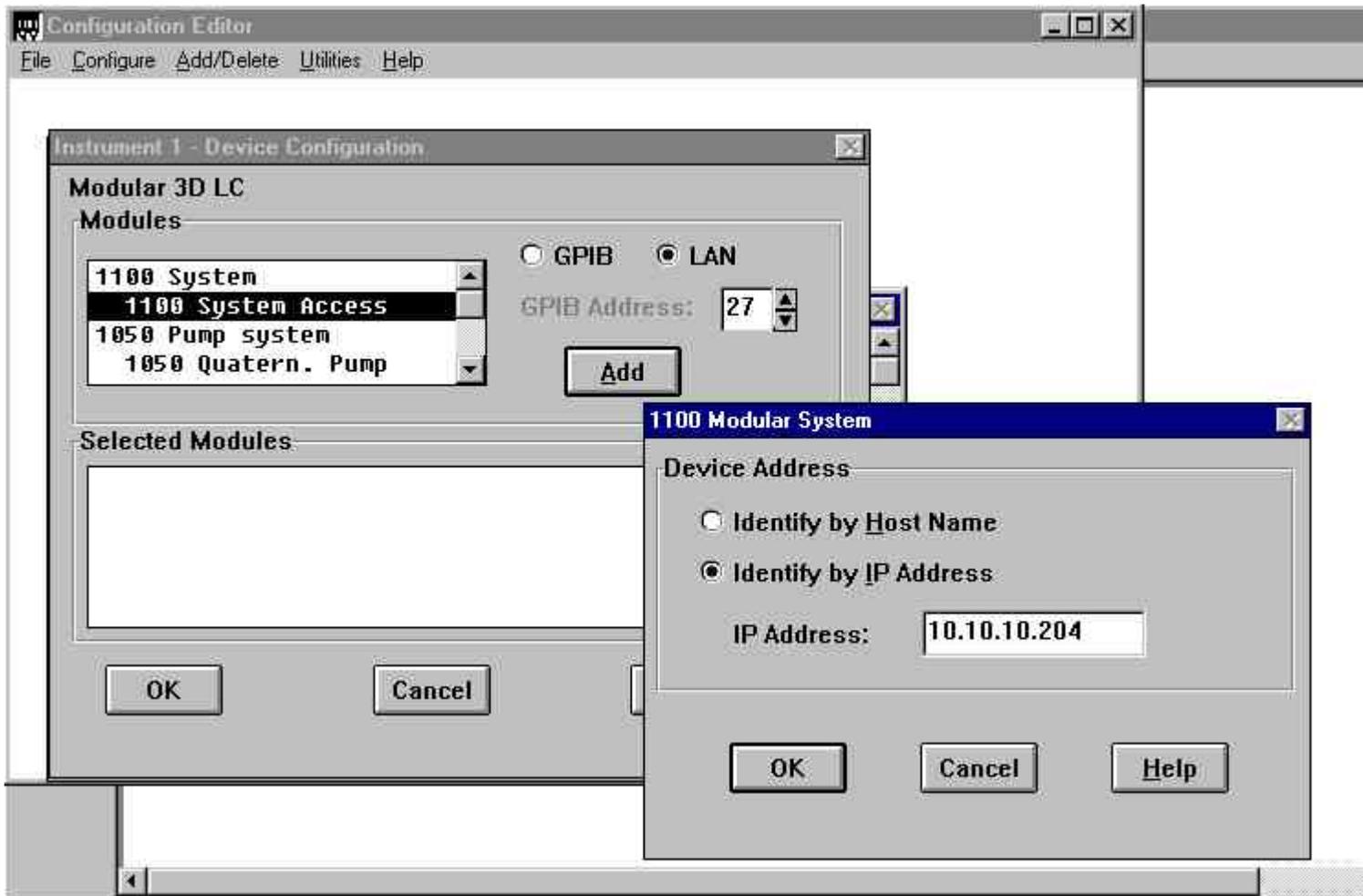
Configuration Editor界面

- 选择 Configuration Editor 界面中 Configure 菜单下 Instrument 选项，进入仪器选择界面。
VWD: 选 Modular LC System;
DAD: 选 Modular 3D LC System。
- 选择完毕，单击 OK。

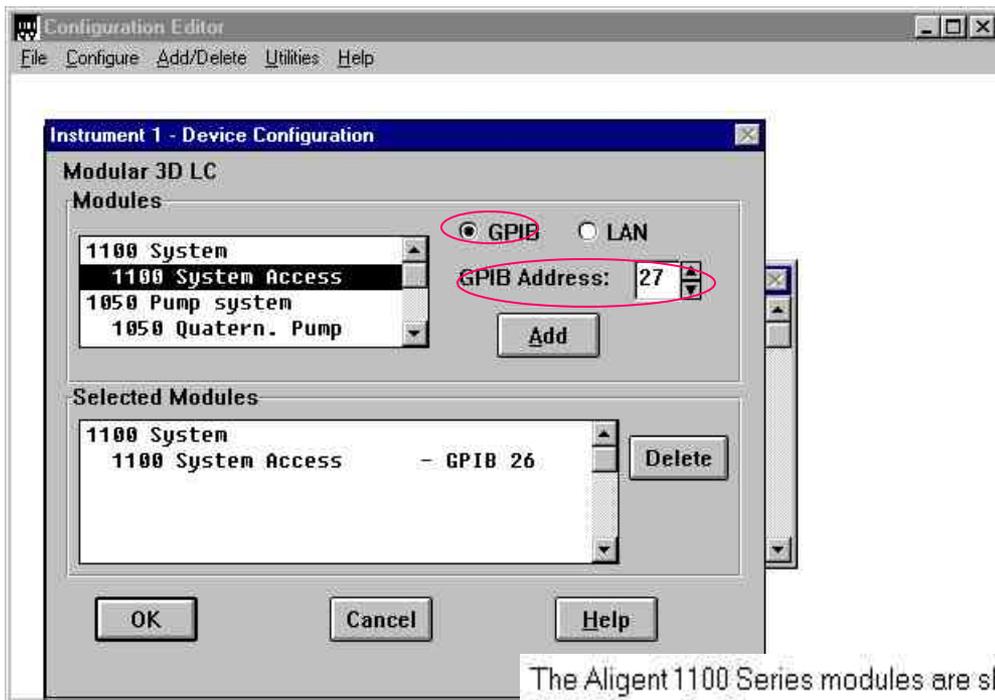
仪器选择界面



- 1) 对于使用网络(LAN)连接进行通讯的仪器，需要选择LAN通讯方式，然后单击Add键，在Device Address设置界面选择Identify by IP Address，在IP Address右侧框输入IP地址后，单击OK



2) 对于使用HP82341c卡进行通讯的仪器，需要选择 GPIB 通讯方式，在 GPIB Address 右侧框输入 GPIB 地址，然后单击 Add 键。



- GPIB 地址的选择取决于计算机与 1100 哪一个部件连接。例如：计算机与四元泵连接通讯，则 GPIB 地址选择 22。有关 1100 GPIB 地址的详细信息见下表。

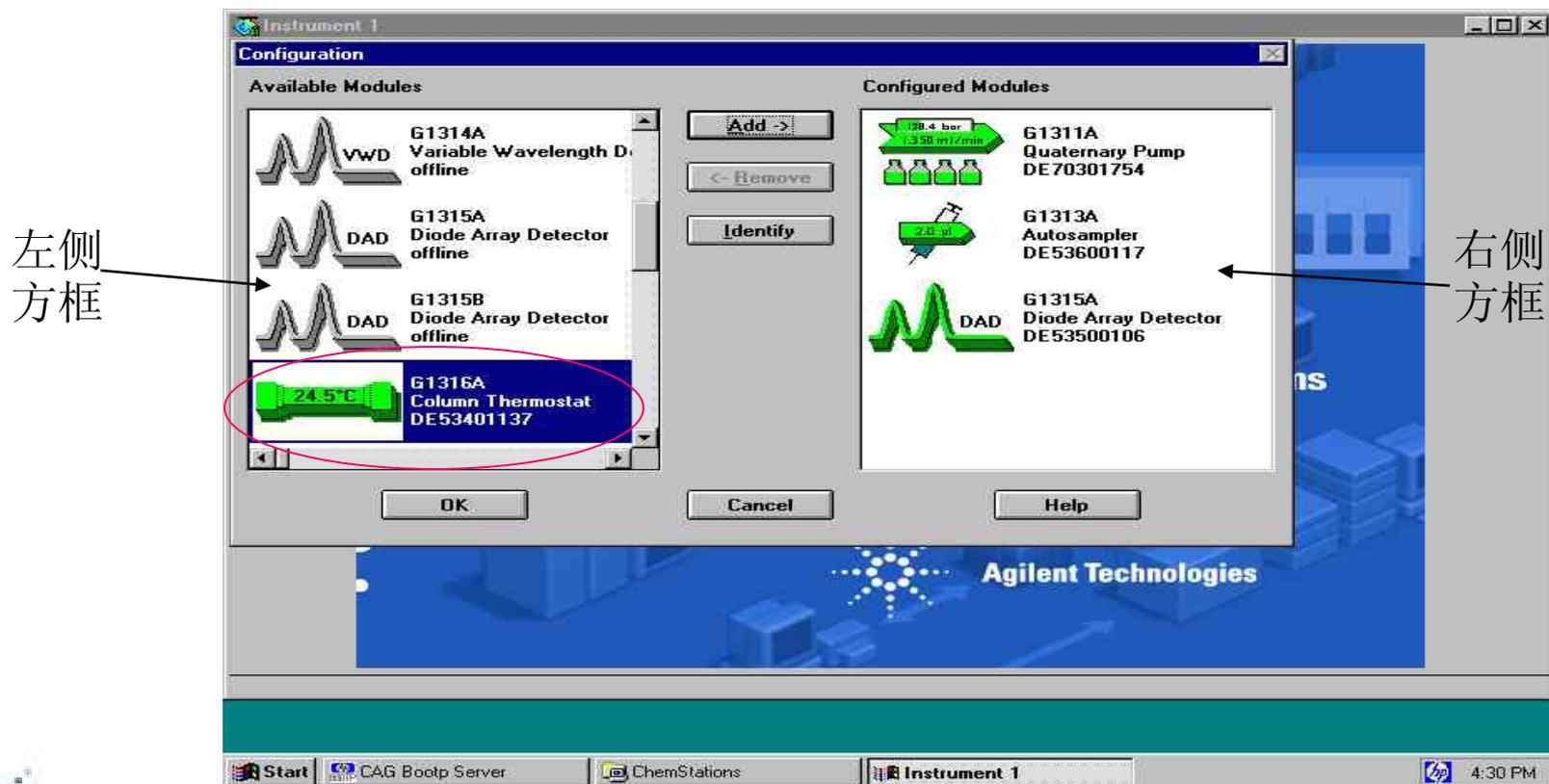
- 旧的通讯方式，现在很少使用！

The Agilent 1100 Series modules are shipped with the following default GPIB addresses:

G1310 Isocratic Pump	22
G1311 Quaternary Pump	22
G1312 Binary Pump	22
G1313 Autosampler	28
G1314 Variable Wavelength Detector	24
G1315 Diode Array Detector	26
G1316 Column Compartment	27
G1321 Fluorescence detector	23
G1362 Refractive index detector	29
39500 Dual Channel Interface	13

3) 无论以哪一种方式进行通讯, 按1)或2)步骤设置完毕, 存贮设置结果后退出 Configuration Editor界面。

当安装完工作站, 第一次启动**Instrument 1 Online**时, 工作站自动检测哪些部件已经成功地进行通讯。如果通讯成功, 在左侧方框中被检测到的部件图标为绿色。双击左侧方框中所有绿色图标后, 绿色图标移到右侧方框中。至此, 工作站地安装彻底完成。



用LAN卡配置化学工作站

1. 操作系统的要求

- ♣ 英文版Microsoft Windows NT 4.0 (SP6a) 或Microsoft Windows 2000 (SP2)
- ♣ TCP/IP(Transmission control protocol/Internet Protocol) Protocol
- ♣ CAG Bootp Server 程序
- ♣ A.06.0x或更高版本化学工作站软件

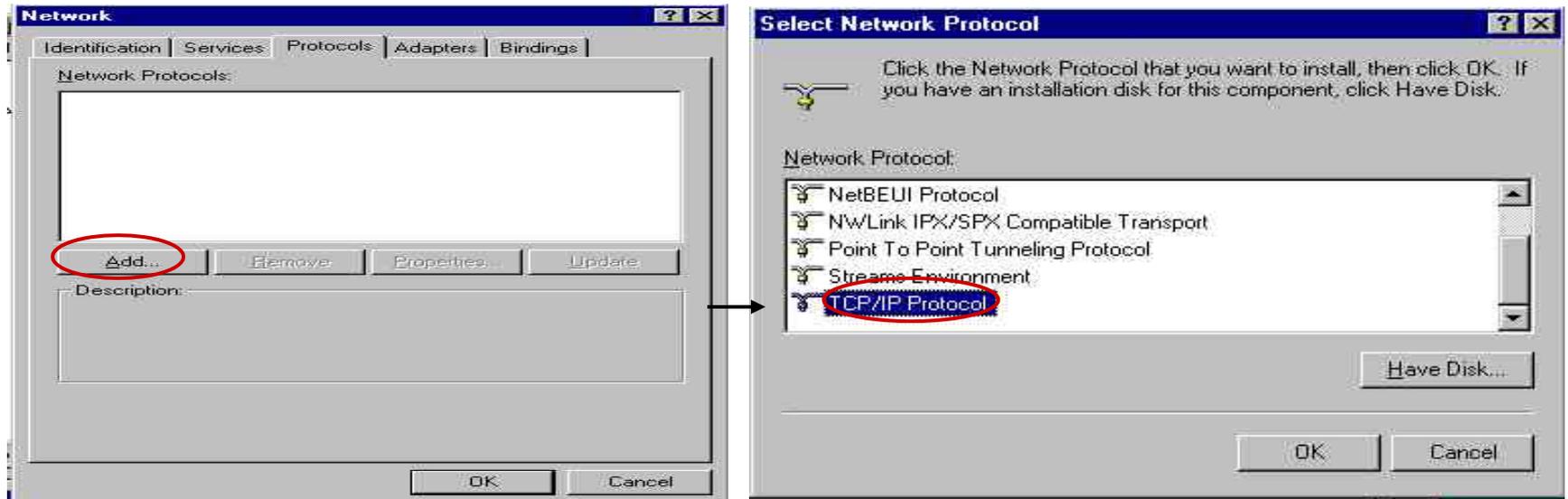
2. 安装TCP/IP Protocol

如果工作站通过标准LAN卡控制HP1100系统，一定要保证PC与HP1100之间常的通讯。这种通讯通过TCP/IP协议来完成，所以首先要在PC上安装TCP/IP Protocol。

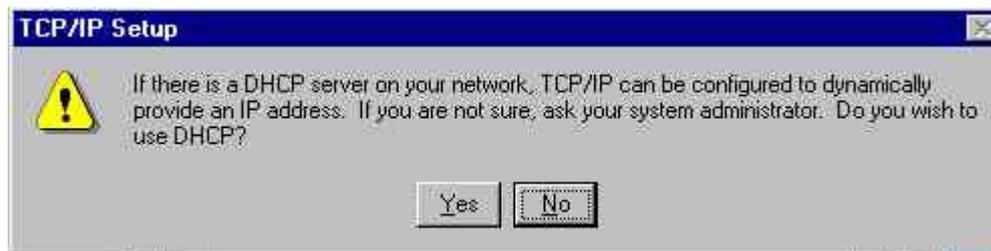
安装TCP/IP Protocol步骤

- 在Windows NT 4.0下安装TCP/IP Protocol步骤:

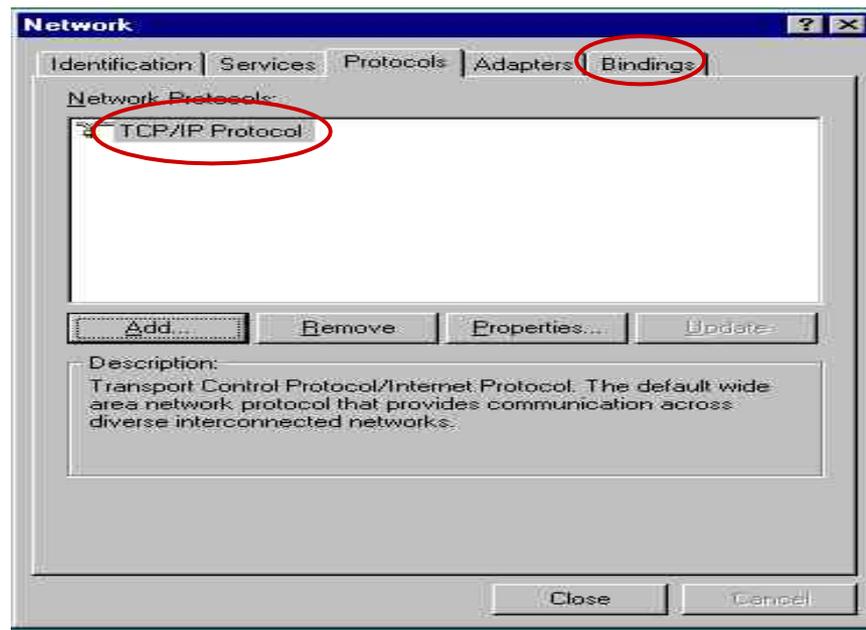
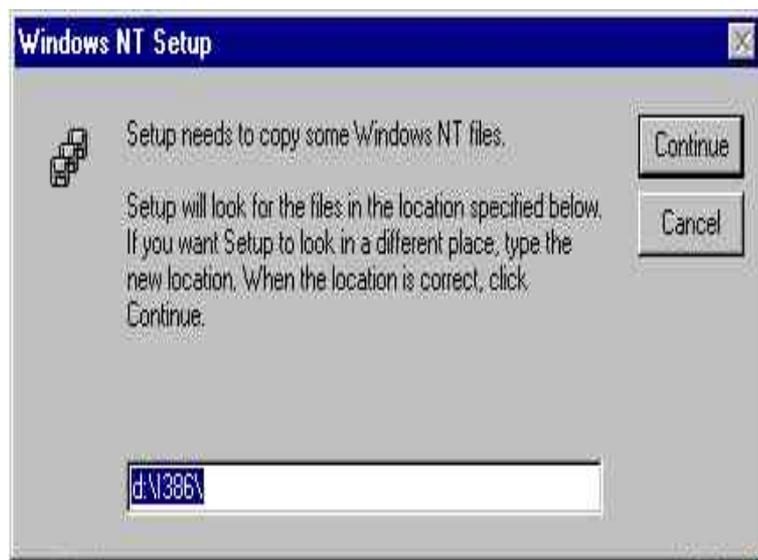
- 1) 在Windows NT 4.0操作环境下，单击Start键，选择Setting菜单中Control Panel选项进入Control Panel窗口。
- 2) 在Control Panel窗口中双击Network图标进入Network窗口。
- 3) 在Network窗口下，单击Protocol菜单，如果在Network Protocol方框中出现TCP/IP Protocol，则跳到第7步进行TCP/IP Protocol设置。如果没有，单击Add键，选择TCP/IP Protocol，单击OK，进行安装。



4) 计算机提示是否要安装DHCP Server, 选择No。

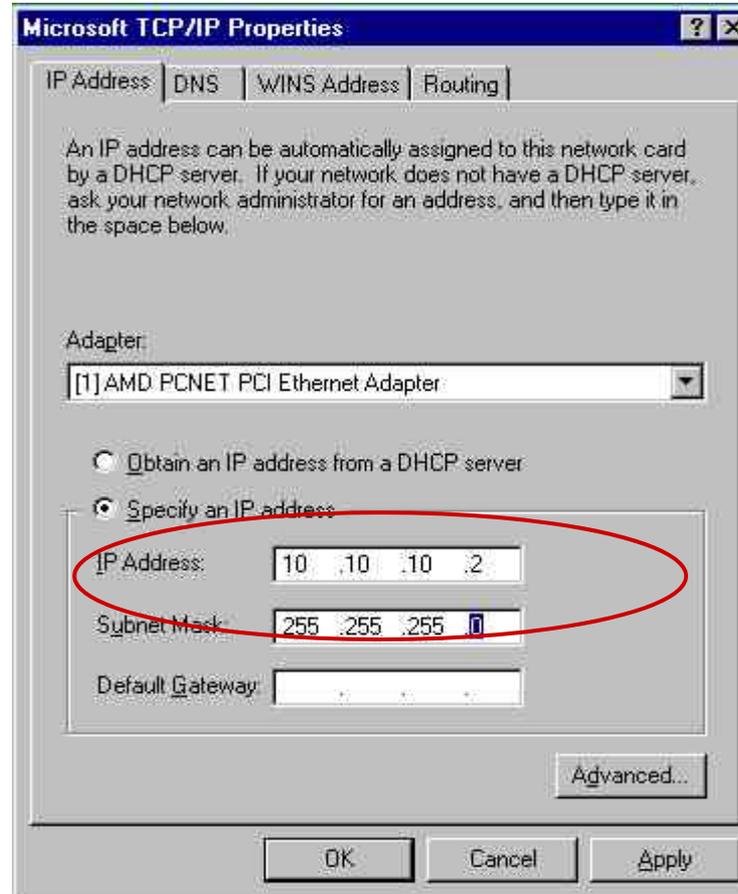


5) 在Windows NT Setup窗口输入 d:\i386\ (假设D盘是光驱), 把Windows NT 4.0光盘放入光驱, 单击Continue键, 进行TCP/IP Protocol安装。安装完毕, TCP/IP Protocol会在Network窗口显示出来。



6) 单击Network窗口中Bindings键, 使所安装的TCP/IP Protocol与网络适配器绑定。

7) 选择TCP/IP Protocol，单击Properties键，对TCP/IP进行设置。在IP Address 右侧方框中输入计算机IP地址：如，10.10.10.2；在Subnet Mask右侧方框中输入子网掩码：例如，255.255.255.0。然后单击OK键确认。

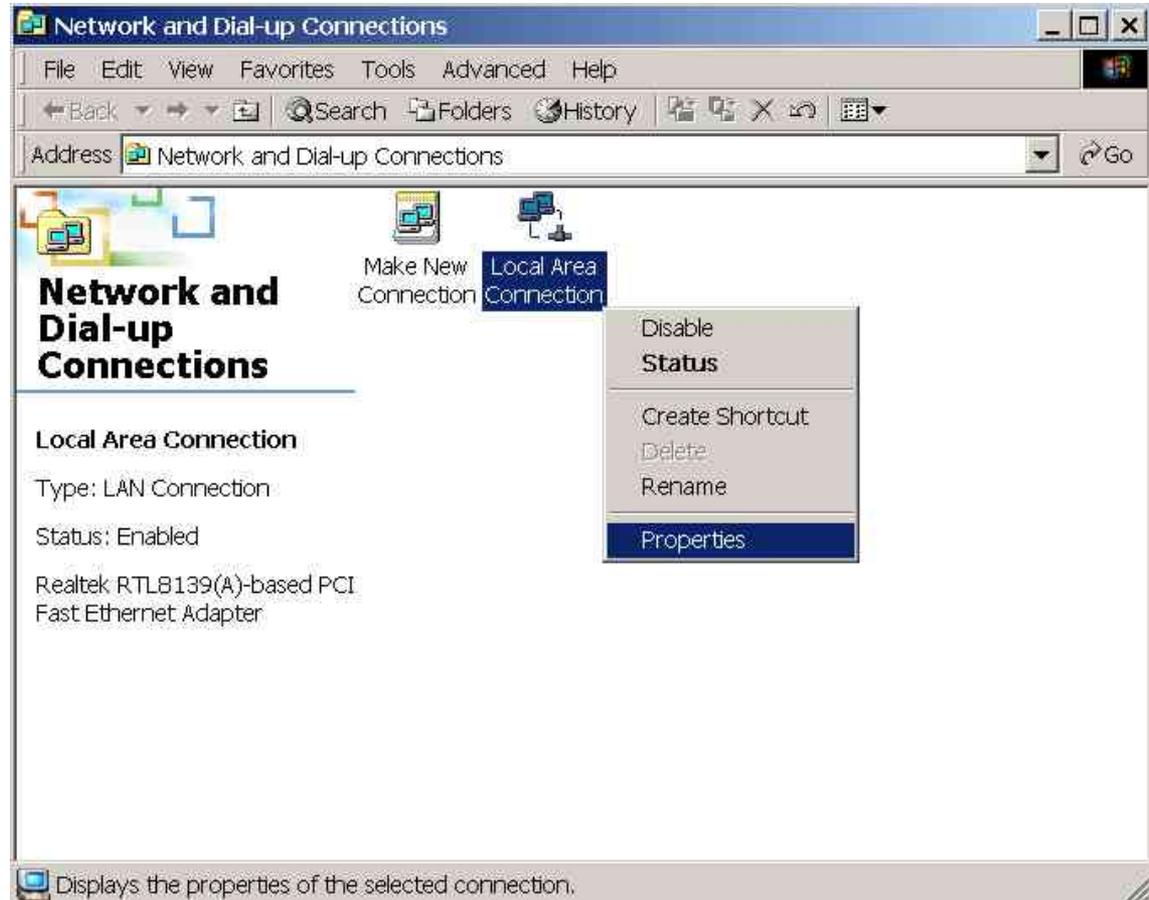


8) 单击Bindings键，让操作系统绑定TCP/IP的设置。然后重新启动计算机。

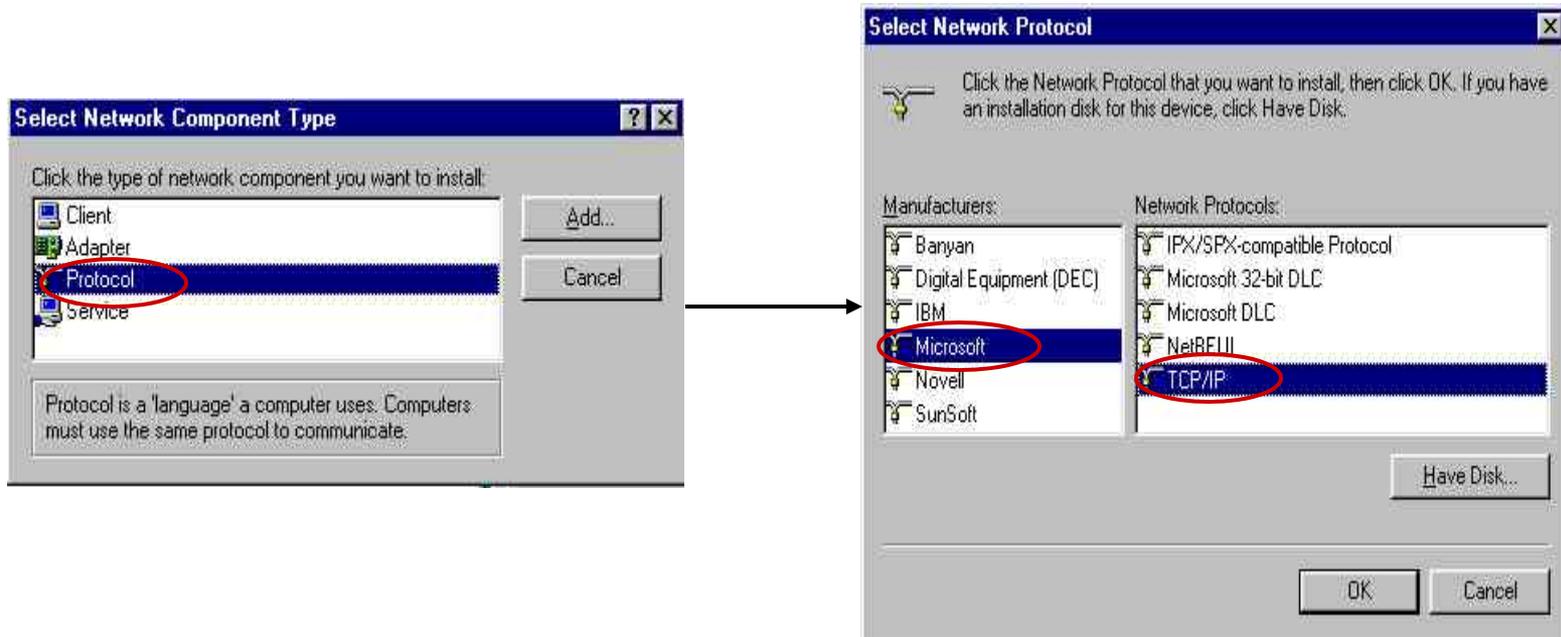
•在Windows 2000环境下安装TCP/IP Protocol

1) 在Windows 2000操作环境下，用鼠标右键单击My Network Places图标，然后选择弹出菜单中的Properties选项。

2) 在弹出窗口中以鼠标右键单击Local Area Connection图标，选择弹出菜单中Properties选项，进入网络设置窗口。

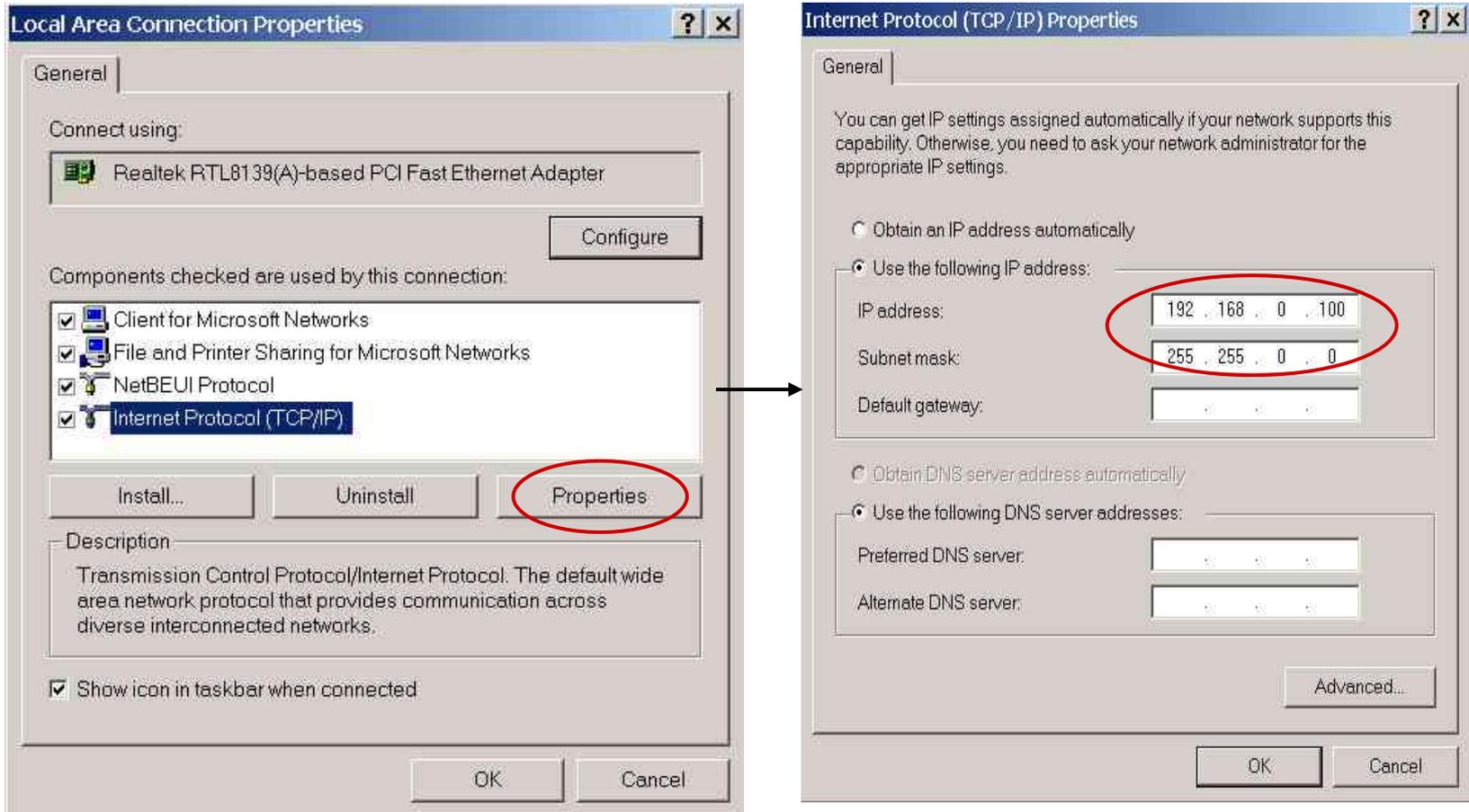


- 3) 在网络设置窗口下，所有已经安装的网络均显示在Components checked are used by this connection:方框中，查找是否安装了TCP/IP，如果已经安装了TCP/IP, 则跳到第6步进行TCP/IP设置。如果没有，单击Install.....键，进入Select Network Component Type窗口，在此窗口下，选择Protocol，单击Add，进入Select Network Protocol窗口。



- 4) 在Select Network Protocol窗口，选择Microsoft的TCP/IP，单击OK进行安装。安装完毕，TCP/IP会在Network窗口显示出来。
- 5) 根据需要决定是否重新启动计算机。

6) 按照步骤1), 2)进入到Local Area Connection Properties窗口, 选择TCP/IP选项后, 单击Properties键, 进入TCP/IP Protocols窗口, 在此窗口下, 选择Use the following IP address, 输入计算机IP Address及Subnet Mask地址。

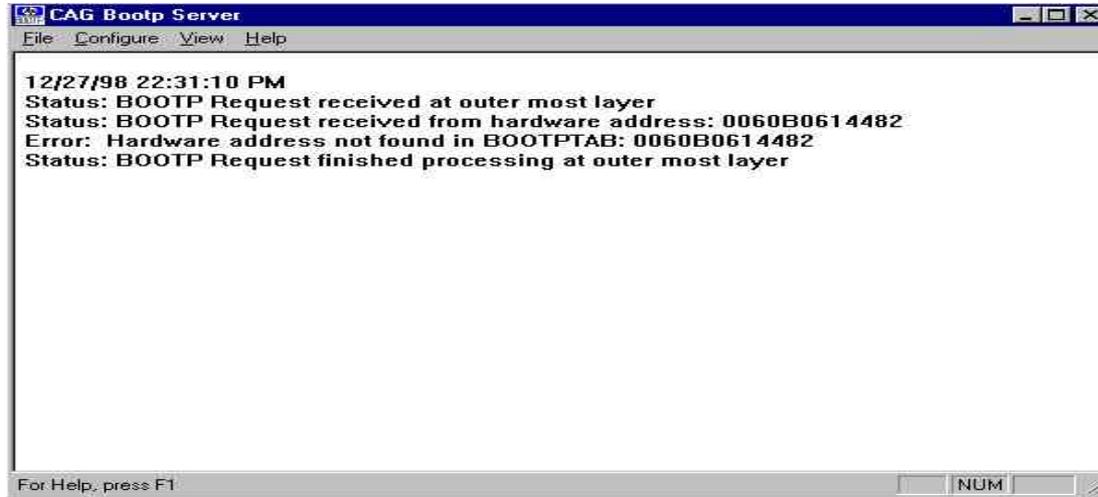


7) 单击OK退出网络设置(如果需要, 可重新启动计算机), TCP/IP Protocol安装完毕。

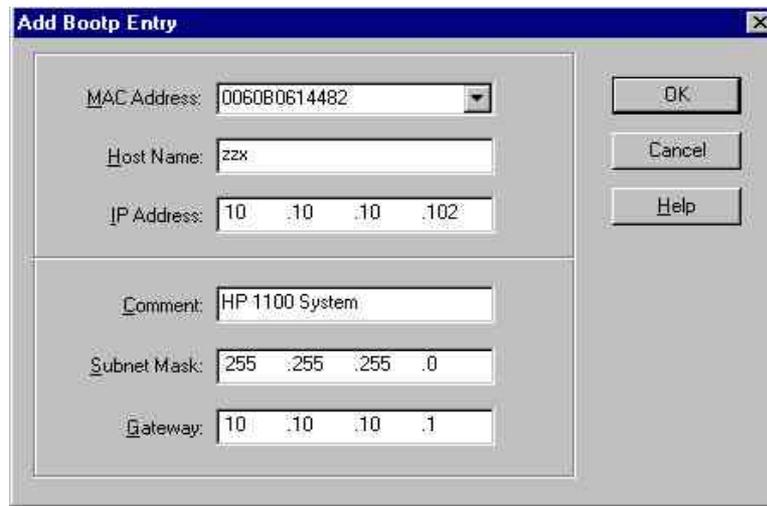
3. 安装CAG Bootp Server程序

要使Agilent 1100与LAN卡通讯，还需对JETDIRECT卡进行设置。所以需要安装CAG Bootp server程序。CAG Bootp Server安装程序在A.06.0x以上版本软件光盘Bootp子目录下。安装过程如下：

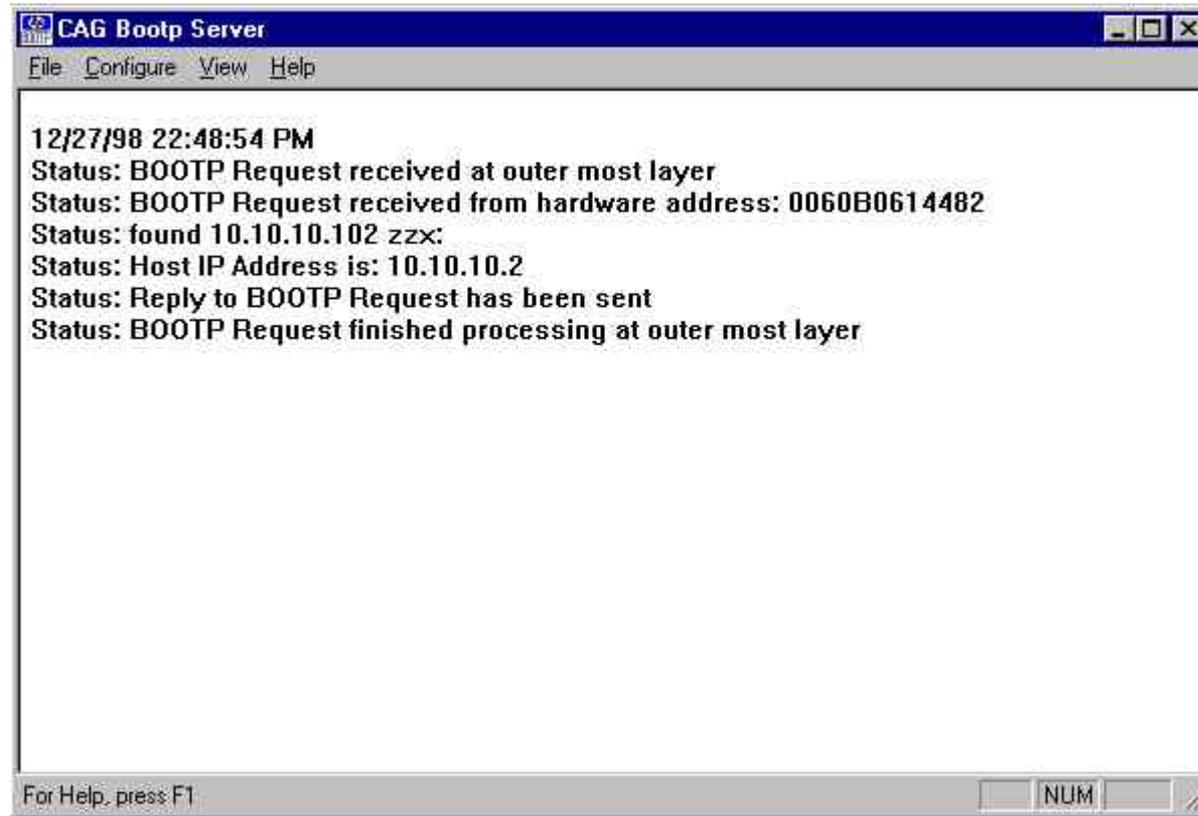
- 1) 在Windows系统下选择Start菜单下RUN命令，输入D:\BOOTP\Setup.exe，然后单击OK。
- 2) 根据计算机提示安装CAG Bootp Server程序。
- 3) 安装完毕，在Start/Programs菜单下自动生成CAG Bootp菜单（无需先安装Chemstation工作站软件），单击Bootp图标，运行CAG Bootp Server程序。
- 4) 设置CAG Bootp Server参数。
 - 关闭Agilent 1100各组件电源开关。
 - 按照步骤3)运行CAG Bootp Server程序，进入CAG Bootp Server参数设置窗口。
 - 打开Agilent 1100检测器电源开关。（建议JETDIRECT卡安装在检测器上）
 - 大约2—10秒钟后，Bootp Server窗口会显示从JETDERECT卡获取的硬件地址（MAC Address）。



- 单击Configure菜单，选择Add Entry选项，进入Add Bootp Entry对话框，MAC Address显示从JETDIRECT卡检测到的硬件地址，参考下图输入其它参数（每台计算机的Host Name不一样）



- 关闭Agilent 1100检测器电源开关，稍后重新打开检测器开关，强迫JETDIRECT卡重新发送一次信息。CAG Bootp Server 窗口显示下列信息：



- CAG Bootp Server安装完毕。

4. 化学工作站仪器配置

- 如果操作系统中没有化学工作站软件，首先安装化学工作站软件。
- 选择Start/Programs/ChemStation/Configuration Editor，进入Configuration Editor对话框。
- 在Configuration Editor窗口下，选择Configure/Instrument，进入Select Instrument对话框。
- 在Select Instrument对话框下选择合适的仪器类型(例如 Modular 3D LC System)，然后单击OK，进入Instrument 1-Device Configuration对话框。选择LAN后，单击Add键，进入1100 Modular System对话框，在IP Address右侧方框中输入仪器IP地址：如，10.10.10.102。单击OK。存盘退出Configuration Editor对话框。设置完毕。

