

快速入门指南

Chromeleon 7.2 色谱数据系统

7229.0004CN修订版 1.1 • 2014年 12月



目录

1. 育	育介		7
1.	1 关	于本文档	7
1.	2 其	它文档	8
2. C	hrom	eleon 使用方法	9
2.	1 总	览	9
2.	2 启	动 Chromeleon	10
2.	3 启	动仪器	11
	2.3.1	确保仪器控制器服务正在运行	11
	2.3.2	建立连接	12
	2.3.3	控制并监视仪器	12
2.	4 创	建序列	14
	2.4.1	创建仪器方法	14
	2.4.2	创建处理方法	15
	2.4.3	创建报告模板	15
	2.4.4	创建序列	15
2.	5 采	集数据	18
	2.5.1	启动分析	18
	2.5.2	监视正在进行的分析	19
2.	6 处	理数据	20
	2.6.1	在 Chromatography Studio 中复核数据	20
	2.6.2	使用色谱图	22
	2.6.3	对峰进行检测和积分	23
	2.6.4	识别峰	29
	2.6.5	校准和定量	32
2.	7 复	核并报告结果	35
	2.7.1	复核结果	35
	2.7.2	打印结果	36

2.8 Chromeleon 中的质谱仪 (MS)	. 38
2.8.1 MS 仪器控制	. 38
2.8.2 使用 MS 采集数据	. 38
2.8.3 MS 数据可视化	. 38
2.8.4 MS 数据处理(处理方法)	. 41
3. 附录: Chromeleon 总览	. 47
3.1 简介	. 47
3.2 仪器控制器服务	. 48
3.3 Chromeleon 客户端	. 49
3.3.1 Chromeleon Console	. 50
3.3.2 Chromatography Studio	. 54

版权所有

版权所有 © 2014 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

商标

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

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

Thermo Fisher Scientific Inc. 将在客户购买产品时提供本文档,以供 客户操作产品时使用。本文档受版权保护:未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 的书面授权,严禁复制本文档的全部或任何部分。

本手册按现状提供。在未来的版本中,本手册的内容如有更改,恕不 另行通知。

Thermo Fisher Scientific Inc. 并未就本文档的完整性、准确性和无误性作出任何声明。即使在使用过程中正确遵循了本文档中的信息,但对于因使用本文档而引起的任何错误、疏忽、损坏或损失,ThermoFisher Scientific Inc. 概不负责,并且不承担法律责任。

本文档并不是 Thermo Fisher Scientific Inc. 与购买方之间的任何销售合同的一部分。本文档不能以任何形式约束或修改任何销售条款和条件。两份文档之间所有相冲突的信息应以销售条款和条件为准。

1. 简介

1.1 关于本文档

本快速入门指南为初次使用 Thermo Scientific[™] Chromeleon™ 色谱数据系统 (CDS) 的用户提供了快速参考。请在使用 Chromeleon 前通读快速入门指南。

快速入门指南由以下两部分组成:

- Chromeleon 使用方法:对启动简单分析、处理数据和报告结果的指导。
- 附录 Chromeleon 总览: Chromeleon 界面和常用功能的 总览。

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

1.2 其它文档

Chromeleon 随附的一些其它文档有助于用户了解更多有关该 软件的信息。这些文档所涉及的范围将在**文档总览**中进行介 绍,其印刷形式随 Chromeleon 安装介质一起提供,电子形式 可在安装盘的 Documents 文件夹中找到。Chromeleon 在线帮 助的电子版本可在 Online Help 文件夹中找到。

2. Chromeleon 使用方法

2.1 总览

使用 Chromeleon 进行的每次分析均需遵循以下六个基本 步骤:

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

本快速入门指南提供了充足的信息,以便用户按照这六个步骤执行简单分析。有关 Chromeleon 的更多高级应用,包括执行更复杂的分析,请参阅 Chromeleon 帮助。

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

2.2 启动 Chromeleon

要启动 Chromeleon 软件,请执行以下操作:



• 双击桌面上的 Chromeleon 7 图标:

-或者-

• 使用 Windows[®] 开始菜单:选择**开始 > 所有程序 >** Chromeleon 7 > Chromeleon 7。

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

2.3 启动仪器

要在 Chromeleon 中控制并监视仪器,请执行以下操作:

- 确保仪器控制器服务正在运行。
- 建立连接。

2.3.1 确保仪器控制器服务正在运行

Chromeleon **仪器控制器服务**可处理仪器通讯、仪器控制和数 据采集。它可在与仪器物理连接的任一台 PC 上作为 Windows 服务在后台运行。**仪器控制器服务**状态由 Windows 任务栏通 **知区域**中的图标表示:

- 🖉 仪器控制器服务正在运行。
- 💥 仪器控制器服务已停止。

如果仪器控制器已停止,请通过执行下列步骤进行启动:

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

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

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

2.3.2 建立连接

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

要连接模块,请遵循以下步骤:

1. 在 Console 中,选择**仪器**类别,并在**导航窗格**中单击仪器 名称。

2.在工作区中,选择所需模块(例如,泵)的 ePanel 选项。

3. 在 ePanel 上,单击**连接**。

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

2.3.3 控制并监视仪器

通常,使用预定义仪器命令组将样品作为序列的组成部分进 行分析。这些仪器命令保存在仪器方法中。有时(通常在序 列运行之间)需要向仪器模块发出各种命令,例如启动或停 止液流或监视基线。 要发出仪器命令,请遵循以下步骤:

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

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

注意: ePanel 提供了最常用的命令。如果需要执行不可用的命令,可以通过单击**仪器**工具栏中的命令 ^{② Command} 按钮访问一个对话框,从该对话框即可访问所有可用的 仪器命令。

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

2.4 创建序列

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

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

要使用 Console 中的序列向导创建序列,应准备下列文件:

- 仪器方法
- 处理方法
- 报告模板

2.4.1 创建仪器方法

要创建仪器方法,请遵循以下步骤:

- 1. 在 Console 的**仪器**类别中,从**导航窗格**中选择要创建仪器 方法的仪器。
- 2. 在创建菜单上,单击仪器方法。
- 3. 完成所有向导步骤,然后单击**完成**。创建的仪器方法将 在 Chromatography Studio 中打开。
- 4. 在**导航窗格**中选择模块视图,复核仪器方法。根据需要 编辑设置。
- 5. 使用**快速访问工具栏**中的**保存** 🗾 图标保存仪器方法,并 指定位置和对象名称。
- 6. 关闭 Chromatography Studio。

2.4.2 创建处理方法

要创建处理方法,请遵循以下步骤:

- 1. 在 Console 的创建菜单上,单击处理方法。
- 2. 选择预定义的布局之一,然后单击下一步。
- 3. 输入名称,选择文件位置并输入注释(可选)。
- 4. 单击完成以保存处理方法,然后关闭向导。

新的处理方法将在 Chromatography Studio 中打开。

2.4.3 创建报告模板

要创建报告模板,请遵循以下步骤:

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

2.4.4 创建序列

要使用 Console 中的序列向导创建序列:

- 1. 在 Console 的仪器类别中,从导航窗格中选择要创建仪器 方法的仪器。
- 2. 在 Console 的创建菜单上,单击序列。

3. 完成进样的进样配置设置:

讲样名称的 指定讲样的命名方式。 格式: 这是可添加代码 #n、#p、#i 和 #r 的 自由文本字段。 (单击**讲样名称的格式**字段右侧的 按钮可查看这些代码的定义) 样品数: 指定分析中的样品总数。 指定分析中的进样次数。 进样次数: 起始位置: 指定分析序列的起始位置。这将指定 自动进样器中第一个样品瓶的位置。 向导自动递增后续样品瓶的位置。 讲样量: 指定讲样量。 样品架视图: 如果自动进样器支持预览功能,则样 品架视图将提供安装在所选仪器上的 样品盘和样品架的图形表示。预览功 能还可以便干用户确定自动进样器样 品盘中第一个样品的位置。只需单击 样品瓶即可指定所需的起始位置。起 **始位置编辑**字段中的信息将自动更新。

1	New Sequence W	izard					? ×
Ur	Known Injections Generate injections	s of type "Unknown"					1
Pattern for hybridion Name: Pattern for hybridion Name: </th							
#	Chromatogram	Name	Туре	Level	Position	Volume (µL)	Instrument Method
1	None	Injection 1	Unknown		RA1	100,000	
2	None	Injection 2	Unknown		RA1	100,000	1
3	None	Injection 3	Unknown		RA1	100,000	
4	None	Injection 4	Unknown		RA2	100,000	
5	None	Injection 5	Unknown		RA2	100,000	
6 ∢	None	7 Injection 6	Unknown		RA2	100.000	•
<< Back Next >> Cancel							

图 1: 样品架视图

4. 单击下一步。

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

- 选择方法和报告参数:对于每个字段,使用 Browse 按钮 导航到要使用的文件并选择该文件。完成所有字段后, 单击下一步。
- 6. 输入序列的注释(可选),然后单击完成。
- 7. 保存对话框将打开。
- 8. 指定保存序列的位置,输入文件名并单击保存。
- 如有必要,可更改进样名称、进样类型、进样位置和其 它条目。有关进样类型的总览,请参阅第 3.3.1 节。

此时,序列显示在 Chromeleon Console 的导航窗格中。

2.5 采集数据

2.5.1 启动分析

创建序列且仪器就绪后,可启动数据采集。

检查仪器是否就绪

要检查仪器是否就绪,请执行以下操作:

- 1. 在 Console 中,选择数据类别。
- 在导航窗格中,通过单击选择要运行的序列。序列随后 将在工作区中打开。
- 3. 执行下列操作之一:
 - 单击开始按钮的向下箭头。单击添加到队列。
 -或者-
 - 单击进样列表上方序列控制栏中的 ▶ Stat
 ▶ 好钮,将
 序列添加到队列中并立即启动队列。

序列将添加到队列中。如果队列为空,请执行**就绪检查**。如果不存在错误,将启动队列。



图 2: 运行序列

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

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

2.5.2 监视正在进行的分析

在分析过程中,建议对检测器信号和其它仪器参数(如压力和温度)进行监视。

要监视正在进行的分析:

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

注意: 其它模块的设置可在其各自的 ePanel 中进行监视。

2.6 处理数据

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

要从 Console 打开 Studio,请双击序列中的任意对象,或单击 ③ Studio 按钮。

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

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

2.6.1 在 Chromatography Studio 中复核数据

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

要在 Chromatography Studio 中复核数据,请执行以下操作:

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

3. 打开**数据处理**类别,然后在**导航窗格**中选择要查看的进 样。该进样的数据采用默认预置视图显示于**工作区**中。

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

- 4. 可通过以下方式浏览数据:
 - 使用**数据处理主页**选项卡的**导航**组中的按钮。
 - 在**导航窗格**中选择进样、通道或组分。

-或者-

 在交互结果窗格(图 3)的积分或总结表中双击组分 或进样图。

Α	В	C	D	E	F
Inj. No.	Injection Name Selected Peak:	Туре			
		-	TIC		
			Pentachloroethan	1,3-Dichlorobenzen	1,4-Dichloroben
1	cal_std_5	Calibration Standard	4,0	4,4	n.a.
2	cal_std_10	Calibration Standard	4,0	4,4	n.a.
3	cal_std_20	Calibration Standard	4,0	4,3	4,4
4	cal_std_50	Calibration Standard	4,1	4,4	n.a.
5	cal_std_100	Calibration Standard	4,1	4,4	n.a.
6	matrix_blank	Unknown	4,1	4,3	4,4
7	qc_std_50	Unknown	4,1	4,4	n.a.
8	solvent_blank	Unknown	n.a.	n.a.	n.a.
9	unknown1	Unknown	4,0	4,4	n.a.
10	unknown2	Unknown	4,1	4,4	n.a.
11	unknown3	Unknown	4,1	4,4	n.a.
Maximum			4,094	4,388	4,375
Average			4,057	4,367	4,369
Minimum			4,038	4,320	4,363
Standard De	eviation		0,018	0,023	0,009
Relative Sta	andard Deviation		0,44%	0,53%	0,21%

Summary AMS Device Information A Peak Results A Peak Purity A Library Search A Sy

图 3: 在交互结果表中进行选择

本节涵盖以下内容:

- 使用色谱图
- 对峰进行检测和积分
- 识别峰
- 校准和定量

2.6.2 使用色谱图

可以在色谱图中查看当前进样的积分色谱图(图4)。

如果不需要进行数据评估,可以(例如)在色谱图中直接更改峰定界符和基线。当然,可以修改色谱图的布局以满足您的需要。还可以叠加其它色谱图以便进行比较。有关详细信息,请参阅 Chromeleon 帮助中的使用色谱图。



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

2.6.3 对峰进行检测和积分

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

• 新建一组检测参数。

-或者-

• 修改现有的处理方法

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

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

新建一组 COBRA 检测参数

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

要新建一组 Cobra 检测参数,请执行以下操作:

- **1.** 在 Chromatography **Studio** 中打开序列(通过双击 **Console** 中的进样),然后打开**数据处理**类别。
- 2. 单击色谱图区域中的某处,选中色谱图。

- 3. 单击**处理**选项卡,并通过在**检测参数**组中选择 Cobra 向
 导 [™] 激活 Cobra™ 峰检测向导。Cobra 向导将打开。
- 4. 选择要进行积分的色谱图区域。如果所选部分包含负峰 (例如,溶剂峰),可以选中考虑塌陷峰复选框,以指 定在 Cobra 峰检测过程中忽略这些峰。在其它情况下, 该复选框保持为未选中状态。单击下一步。
- 5. 选择下列可选方式之一,确定基线噪声的范围:
 - 选择使用自动范围选项(默认),系统将计算合适的时间范围。

-或者-

▪ 手动输入基线。

单击下一步。

- 6. 选择下列可选方式之一,对色谱数据进行平滑处理:
 - 选择使用自动平滑宽度选项(默认),自动对数据进行平滑处理。

-或者-

 选择色谱图中的最窄峰,以便定义用于峰检测的 Cobra 平滑宽度。

单击下一步。

- 选择下列可选方式之一,定义峰面积阈值,确定最小峰 面积。任何峰面积小于该阈值的峰在检测或积分过程中 将被忽略:
 - 选择使用自动最小峰面积(默认)选项,系统将自动 计算最小峰面积。

-或者-

 选择色谱图中要检测的最小峰(最小峰面积将设置为 所选峰的面积的90%)。

单击下一步。

- 8. 使用**通道**下拉菜单选择通道,并通过进样类型字段指定 将要应用积分设置的数据。单击**完成**。
- 9. 单击 Chromeleon 图标 ,从菜单中选择**保存 > 保存**,以保存更新后的处理方法。

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

修改现有的处理方法

插入新检测参数

要插入新检测参数,请遵循下列步骤:

- 1. 单击色谱图。
- 2. 单击处理选项卡。
- 如果尚未显示检测参数,则在检测参数组中单击检测参 数 → ,以便在色谱图中显示检测参数。
- 4. 单击插入 按钮上的箭头。
- 5. 从列表中选择适当的检测参数。该列表列出了最常用的 参数。

如果需要其它检测参数,请选择**其它参数**。有关所有 Chromeleon 检测参数的列表和更多详细信息,请参阅 Chromeleon 帮助中的*检测参数(总览)*。 将光标移至色谱图中要插入该参数的位置并单击。
 新检测参数出现在色谱图中,峰积分将自动更新。

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

移动、修改和删除检测参数

要移动、修改和删除检测参数,请执行以下操作:

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

要移动检测参数:

 将检测参数拖动至所需位置(可拖动检测参数的标记或 虚线)。

要修改检测参数的值:

• 双击标记并从列表中选择新设置。

要修改检测参数的类型:

- 1. 右键单击检测参数并选择**编辑检测参数**。编辑 Cobra 检 **测参数**对话框将打开。
- 从参数名称字段中选择新检测参数类型,并设置所需的 任意参数值。

3. 单击**确定**保存更改,然后关闭**编辑 Cobra 检测参数** 对话框。

要删除检测参数:

• 右键单击检测参数并选择**删除检测参数**。

对未分离峰进行积分

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

- 1. 单击色谱图。
- 2. 单击处理选项卡。
- 3. 在**检测参数**组内,单击 SmartPeaks 🥂 。

使用光标在色谱图中包含部分分离峰的区域周围画矩形。
 SmartPeaks:选择备选方案对话框将打开(图 5)。



图 5: Smart Peaks — 选择备选方案对话框

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

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

2.6.4 识别峰

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

为组分分配名称的过程称为识别。命名组分的名称和预期保 留时间存储在 Chromeleon 组分表中。

下面的章节介绍了如何:

- 创建组分表。
- 更新预期保留时间和窗口。

创建组分表

创建组分表的方式有三种:

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

通过组分表向导

要使用组分表向导创建组分表:

- 1. 单击色谱图。
- 2. 单击**处理**选项卡。
- 如果尚未显示色谱峰窗口,则在组分表组中单击色谱峰 窗口(¹/₁),以便在色谱图中显示色谱峰 窗口。

4. 单击**组分表向导**按钮()。

组分表向导对话框将打开。

这一包含 5 个页面的向导将引导您完成对组分的命名。 在前四页,可指定是否保留现有的组分(将新组分添加 到现有组分中)、考虑组分的时间范围,以及最小峰面 积(小于该值的组分将被忽略)。在最后一页,可对发 现的所有组分进行命名、修改保留时间和峰窗口并添加 注释。

5. 单击完成,保存组分表更新,然后关闭组分表向导。

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

在色谱图窗格中进行交互式创建

要添加色谱图中的组分:

- 1. 单击色谱图。
- 2. 单击处理选项卡。
- 3. 激活组分表组中的色谱峰窗口选项和添加组分选项。
- 在要添加至组分表的峰周围画矩形。峰将以通用名称 (例如,组分1)添加到组分表中,并且峰窗口显示于色 谱图中。
- 5. 双击峰窗口标记并输入组分名称。

通过组分表 (处理方法)

要在处理方法中创建组分表:

- 1. 单击数据处理主页选项卡。
- 2. 在窗格组中,单击**处理方法**以显示处理方法。

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

- 3. 在处理方法中,选择组分表选项卡。
- 单击组分表底部的单击这里以添加新的组分链接。
 新建组分对话框将打开。
- 5. 在**名称**字段中键入组分的名称,然后单击**创建**。 将会创建新组分,并显示在组分表中。
- 6. 在组分表的**保留时间**和/或**窗口**列中更新组分保留时间和 组分窗口。

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

修改保留时间和窗口

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

2.6.5 校准和定量

如果要将峰下方的面积或峰高转换为绝对样品量或浓度值, 需要在分析前进行校准。校准过程中得到的校准系数随后可 用于计算未知样品量。

本节将指导您完成执行简单外标校准所需的步骤(使用多种浓度的单一组分标准品)。Chromeleon 支持多种校准方法,包括内标校准法和标准加入法。有关使用这些校准方法的信息,请参阅 Chromeleon 帮助中的校准和样品量计算。

要在 Chromeleon 中执行简单的校准,需要执行以下操作:

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

指定作为校准标准品的进样

在进样列表中校准标准品的标记方式如下:

- 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中,单击进样 列表类别。
- 对于每个校准标准品进样,在类型字段中单击并从类型 列表中选择校准标准品。

创建并分配校准级别

- 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中,单击进样 列表类别。
- 在第一校准标准品的级别单元格中单击并选择新建级别。
 将会添加值 01。将此级别分配到该校准标准品的所有进样。
- 3. 针对所有校准级别重复步骤 2。

输入校准标准品的样品量或浓度

- 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中,单击数据处 理类别。
- 2. 在数据处理主页选项卡的窗格组中,单击处理方法。
- 3. 在处理方法中,选择组分表选项卡(图6)。

Det	tection MS Detection	Component Table	Calibration	Unidentified Pea	k Group Table	Chromatogram Subtraction			
	Component Table								
	Group Area Drag a column header here to group by that column. Run Component Table Wizard								
#	Name	Ret.T	ïme	Level "01"	Level "02"	Level "03"			
1	Pentachloroethane	4,090	5,0	000000	10,000000	20,000000			
2	1,3-Dichlorobenzene	4,380	5,0	000000	10,000000	20,000000			
3	1,4-Dichlorobenzene-de	4 4,455	5,0	000000	10,000000	20,000000			
4	1,4-Dichlorobenzene	4,460	5,0	000000	10,000000	20,000000			
5	1,2-Dicholorobenzene	4,650	5,0	000000	10,000000	20,000000			
6	Hexachloroethane	5,050	5,0	000000	10,000000	20,000000			

图 6: 组分表

 在相应的单元格中输入每种级别(级别"01"、级别 "02"等等)的校准组分的标准品样品量。

对校准标准品作出更改时,校准曲线将自动更新。

查看校准曲线

可在 Chromatography Studio 的数据处理类别中查看校准曲线 (图 7):

- 在 Chromeleon Chromatography Studio 窗口中,单击数据 处理类别。
- 2. 转到数据处理主页选项卡。
- 3. 可以:
 - 从预置组中选择包含校准窗格的预置工作区布局。
 -或者-



■ 在**窗格**组中选择**校准图**(图 7)。

提示:通过双击校准表中的组分、选择色谱图中的峰或使用**数据处理主页**选项卡的**导航**组中的 ³³ ³⁵ Component 按钮,可以查看多组分标准品的每种组分的校准曲线。

2.7 复核并报告结果

数据采集完毕且已执行校准后,可复核并报告结果。

用户可创建任何所需格式和布局的报告模板(输出结果和其 它数据),或可使用 Chromeleon 的默认模板之一。本*快速入 门指南*仅提供有关使用默认模板的信息;有关修改报告模板 或新建模板的信息,请参阅 Chromeleon 帮助中的*设计报告*。

要复核并报告结果,必须首先将模板与序列相关联。完成该 关联后,可以执行以下操作:

- 复核结果。
- 打印结果。
- 导出报告。

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

2.7.1 复核结果

通过单击报告模板工作区的相应选项卡,可对结果进行复核。 可通过以下方式浏览序列:

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

2.7.2 打印结果

打印结果时,可以执行以下操作:

- 仅打印当前所选的进样。
- 打印整个序列。

这两种过程将在下面的章节中进行介绍。

提示: 使用自动重复区域功能,可以创建适用于一系列 方法的单一报告模板。这与方法使用一个还是多个数据 通道,分析一种还是多种化合物无关。Chromeleon 将自 动报告相关结果。有关详细信息,请参阅 Chromeleon 帮 助中的*定义自动重复区域*。

打印单次进样的结果

要打印当前所选进样的结果:

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

将会打印当前进样的结果。

打印整个序列的结果

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

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

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

2.8 Chromeleon 中的质谱仪 (MS)

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

2.8.1 MS 仪器控制

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

创建 MS 仪器方法

请参阅特定硬件随附的用户手册。

2.8.2 使用 MS 采集数据

在创建 MS 仪器方法后用 MS 进行数据采集的过程与采用非 MS 仪器配置进行数据采集是相同的。有关详细信息,请参阅 第 2.5 节。

2.8.3 MS 数据可视化

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

质谱图

质谱图可通过单击**数据处理主页**选项卡的**窗格**组中的



要显示质谱,用户需选择下列选项之一:

- 色谱图中的峰
- 导航窗格中的组分
 -或者-
- 使用数据处理类别的布局选项卡页面上峰纯度组中的时间质谱工具的数据点。

谱图模式:可在剖面(连续)或中心点(离散)模式下采集 MS 数据。剖面数据可通过算法转换为中心点格式,但中心点 数据无法转化为剖面数据。选择质谱图,显示**质谱图工具**功 能区。然后单击**布局**选项卡。要在中心点模式下查看数据, 请在**谱图模式**组中单击**中心点**单选按钮,或者单击**自动**以查 看原始采集的所有数据。 **叠加:** 要查看补充质谱,请在**叠加**组中单击 └───────、 └──Background 或 └──Reference · 。**叠加**组等同于**质谱图工具**功能区 **布局**选项卡页面上的**谱图模式**。单击参比以查看用于选择所 需参比质谱的更多选项。某些叠加功能(例如背景叠加)要 求在处理方法中定义相关设置。

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

可采用两种方式创建 XIC:

- 显示 头光标时,在质谱图中左键单击质谱峰。
- -或者-
- 右键单击质谱图中的质谱峰,并从上下文菜单中选择提取离子色谱图...。提取 MS 通道对话框将打开(图 9)。

Extract MS Cha	Extract MS Channel						
<u>T</u> race:	Mass Range						
<u>F</u> ilter:	None	~					
<u>M</u> ass range(s):	360.00000-370.00000	m/z					
Smoothing:	None Smoothing points: 3						
Channel name:	MS_[360.00000-370.00000]						
	ОК	ancel					

图 9: 提取质谱通道对话框

两种操作都将导致以所选质荷比或范围新建色谱通道。

2.8.4 MS 数据处理(处理方法)

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

要显示 MS 数据处理设置,请单击**数据处理**类别的**处理方法**选项卡,并在**布局**组中选择**全部设置**布局(图 10)。



图 10: 布局组中的全部设置选项

MS 峰检测算法

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

- Genesis: 该算法通常用于处理基线噪声较高的数据,例如 MS 全扫描数据。在某些实例中,该算法也可用于非MS 数据的处理。这些数据包括但不限于 UV、CD 和 ED 数据。
- ICIS: 当处理噪声极低的数据或提取的数据(例如,在 SIM 或 SRM 模式下采集的数据或 XIC 等采集后提取的数据)
 时,推荐采用该算法。

MS 检测选项卡

在处理方法的此选项卡页面上,可定义默认的 MS 检测设置 或基于组分的检测设置。在提取离子色谱图下拉菜单中,具 有 → 标记的所有组分均使用特定于该组分的检测设置。所 有其它组分使用默认的 MS 检测参数。

首次选择 ICIS 和 Genesis 算法时,所有参数均采用推荐的默认值。

MS 组分表选项卡

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

在组分表的通道列中,使用 XIC 进行定量的所有组分都必须通过下拉菜单设置为 MS 定量(图 11 和图 12)。

MS	Detection MS Compo	onent Table MS Settings		s Calibration	Unidentified	Peak Group		
(Component Table							
	Group Area	Drag a colu	umn header h	ere to group b	y that column.	Run C		
#	Name	Ret.Time	Window	Cha	nnel	Sta		
1	Desloratadine-d4	1.410	0.500 AG	TIC		ISTD Intern		
2	Hydroxydeslortadine	1.410	0.500 AN	MS Quantitat	ion	Internal De		
3	Desloratadine	1.420	0.500 AN	MS Quantitat	ion	Internal De		
Ì	Loratadine	1.980	0.500 AG	TIC	•	Internal De		
*		<u>.</u>		All Channels				
	4			MS Quantitati	on			

图 11: 组分表中的 MS 定量选择



组分表属性-提取离子色谱图

- 通过突出显示组分表中的整行选择某一组分,单击显示 属性以显示属性对话框,然后在属性导航窗格中选择提 取离子色谱图(图 13)。
- 2. 单击 📶 以新建定量 XIC。

如果当前未定义 XIC,则添加 MS 定量峰选项卡页面。否则,将创建 MS 确认峰选项卡页面。

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

perties				۲
aral	Extracted Ion Chromatog	grams		
ntion	Extraction Window			
uation	Use Retention Time (1.4)	() min) (• Us	e Retention Window (0.500 AG)	
oration	C Specify Time: 0.000) 🗄 min C.So	ecify Window: ± 0.100 🚔 min	
cted Ion Chromatograms	- opening rande			
	MS Quantitation Peak [TIC	1×		
	No data points for the	Signal Type:		
	extraction window.	Mass Range		•
		Precursor Mass:	XIC Mass(es) or Range(s):	
		hiter:		-
		Smoothing:		Points:
		Default (None)		▼ 3 ÷
	80 60-227 40-227 40-222 208,04 208,04 20-224	293.10 3912 273.16 3912 0.08 293.10 3912 0.08 309.23 3912 0.08 309.23 3912 0.01 279.16 3912 284.05 3962 01 279.16 3962	28 29 28 29 514 29 514 29	
	•	unaran na ar an	. Mohite and Analy, I	m/z

图 13: 提取离子色谱图属性页面

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

注意:如果选择 TIC,则跳过步骤 4 和 5。

4. (可选)如果采集 SRM 数据,请在母离子质量字段中键入质量。如果存在大量采集筛选条件,这将帮助用户将可选的筛选条件限制在目标离子的范围内(图 14)。



图 14: 通过输入 SRM 母离子质量筛选扫描列表

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

6. 从筛选字段下拉列表中选择合适的筛选条件。通过筛选条件和 XIC 质量或质量范围的组合,将在此 UI 中创建待评估的 XIC (图 15)。

	PESTICI	Signal		
90,000 -	counter - Oxam	<u>Type:</u>		
75,000 -		Mass Range		•
1		Precursor Mass:	XIC Mass(es) or Range(s):	
50,000 -		237.10	90.10	
1		<u>Filter:</u>		
25,000 -		+ c ESI SRM ms2 237.10@cid0.	00 [72.10-72.10, 90.10-90.10]	-
		Smoothing:		Points:
0-	min	None		3 🌲
-10,000 - 1.	725 2.000 2.475			

图 15: 基于参数的 XIC

(用于设置组分的确认 XIC 的可选步骤):

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

如果目标比率设置为 50%、窗口设置为 10%,则以下峰面 积比率将得到确认组分:

绝对值: 40-60%

相对值: 45-55%

13. 在**离子共洗脱**字段中设置用于确认峰的绝对容差(以分 钟为单位)。

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

3. 附录: Chromeleon 总览

3.1 简介

Chromeleon 是可用于控制色谱仪器并评估、处理、报告和备份数据的色谱数据系统。

Chromeleon 拥有多种软件组件:

- **仪器控制器服务**: 仪器控制器服务可处理与所连接仪器 的通讯和来自这些仪器的数据采集。
- **客户端**: Chromeleon 客户端提供与仪器操作、数据分析 和数据管理相关的所有任务的用户界面。
- **服务管理器**:显示 Chromeleon 仪器控制器服务的状态, 并提供用于控制该服务的用户界面。还显示所有其它 Chromeleon 服务的状态。
- **仪器配置管理器:** 可对连接到仪器控制器 PC 的仪器进行 配置。
- 管理控制台:管理任务的中心接入点,这些任务如:
 - **许可管理器**:提供管理 Chromeleon 工作站和用户的 许可的工具。
 - **计划程序**:提供数据传输的计划工具。
 - 用户数据库:提供管理系统策略、用户和角色、访问 权限以及操作权限的工具。
 - **全局策略**:提供 Chromeleon 全局策略的设置。
 - Discovery: 包含关于可用仪器和数据仓的信息的中央 存储库。

 本地机器:提供用于管理 Chromeleon 7 本地数据仓 (创建、挂载和解挂载)和管理 Chromeleon 6 数据 源(挂载和解挂载)的工具,使用户能够更改 Chromeleon 域控制器。

3.2 仪器控制器服务

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

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

3.3 Chromeleon 客户端

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

Chromeleon 客户端包含以下两个窗口:

- Chromeleon Console: Chromeleon 主窗口,在该窗口中可以控制仪器、浏览所有数据以及使用或管理 eWorkflow。
- Chromatography Studio: 从 Console 启动的独立窗口,在 该窗口中可以处理与所选序列相关的数据和对象。在此 可以查看和优化数据的所有方面、修改仪器方法和处理 方法、定义和生成报告,以及管理光谱库。

3.3.1 Chromeleon Console

启动 Chromeleon 7 时, Console 是最先出现的窗口。Console 窗口分为三个主要部分(图 16)。



• **类别栏**:使用类别栏在以下三个类别之间进行切换: **仪器**、 数据和 eWorkflow(图 17)。



图 17: 类别栏

- **导航窗格**:在此可以导航与所选类别相关的对象。导航 窗格具有顶级筛选器,可使您控制显示的仪器、数据仓 或 eWorkflow。
 - **▶★地**:本地 Chromeleon 工作站中的可用项
 - **●全部**: Chromeleon 域中的可用项
 - ★ 收藏夹: 用于显示常用项的筛选器
 - 》自定义:基于文本输入的筛选
- **工作区**: 该区域显示导航窗格中所选对象的内容。在此可以对 Chromeleon 对象进行各种操作。
- 序列控制条:进样列表上方的栏指示序列的状态(新建、 正在运行、已完成、已中断和未完成),并可用于启动 和停止序列。在导航窗格中选中某一序列后,序列工具 栏才可用。

注意: 当序列配置为已完成电子签名时,将提供另外的 状态以便指示。

• 状态栏:状态栏显示常规信息,例如当前登录的用户。

仪器

仪器类别提供对网络上所有仪器的访问(这可能会受到用户 权限的限制)。

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

用户可在**工作区**中复核仪器状态,以及修改仪器参数。工作 区的顶部显示有一系列 ePanel 选项卡。可使用 ePanel 监视仪 器的操作,并直接控制仪器。

注意:从导航窗格中选择当前离线的仪器时,工作区中将显示一条信息。

数据

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

注意:从导航窗格中选择当前离线的仪器时,工作区中将显示一条信息。

可从**导航窗格**访问并组织数据。**工作区**显示所选对象的内容 并允许用户编辑对象。

数据仓可包含下列对象:

- **二** 文件夹:用于存储对象。使用文件夹可以组织数据仓中的数据。
- **戶列**: 归属相同的进样集合。典型的序列包含仪器方法、处理方法、报告模板以及视图设置文件。

- <u>人</u>处理方法:评估色谱图时使用的参数(包括用于峰检测和校准的参数)的集合。
- 报告模板:定义数据显示、打印或导出方式的文件。
 报告模板也可以包含计算。将该模板应用于序列时(用以查看、打印或导出结果),所得结果称为报告。
- 🔤 电子报告:序列结果的电子版。
- 9 视图设置:用于定义数据在屏幕上的显示方式。
- **III UV 光谱库**:用于色谱峰识别的光谱集合。
- 📮 查询:对数据仓进行搜索。

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

- **2** 未知:将在分析过程中对某些组分进行定量或确定是 否含有某些组分的样品。
- 校准标准品: 含有已知浓度的一种或多种组分的样品。
 校准标准品用于绘制校准曲线。
- **校验标准品**:具有已知组分浓度的样品。校验标准品 用于确认校准。
- 空白:用于表征背景信号(基线)和/或确保未检测到 不需要的组分的进样。空白"进样"可在未执行实际进样 时进行。

- **基**质:样品基质。基质的峰面积可从序列中所有其它 进样的相应峰面积中扣除。
- **基本加标**:需要用标准加入法分析的未知样品。
- **团 加标:** 需要用标准加入法分析并且含有添加的已知量 组分的未知样品。

EWORKFLOW

eWorkflow 是自动处理与色谱分析相关的实验室流程的电子 程序。

eWorkflow 包括一组模板(如仪器方法、视图设置或报告模板)和一组规则。规则可定义(例如)序列布局(如,在校准标准品之间允许的未知进样的最大数目)和网络中适合进行分析的仪器的列表。启动 eWorkflow 时,将创建一个具有相关预定义文件和明确定义结构的序列。

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

3.3.2 Chromatography Studio

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

- 进样列表
- 仪器方法
- 处理方法
- 视图设置

- 报告模板
- 电子报告
- 光谱库

在 **Console** 中打开序列时,**Chromatography Studio** (图 18) 将会打开。

注意:打开序列上下文以外的对象时,仅 Studio 的对应 类别可用。

Studio 菜单



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

类别栏 (图 19):使用类别栏可在以下六个类别之间切换显示:进样列表、仪器方法、数据处理、报告设计器、电子报告和 UV 光谱库。



图 19: 类别栏

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

此外,还有另外两个用于用户交互的部分:

- 功能区: Studio 中主要命令的菜单工具。将命令按组进行组织,集中于选项卡下。为使界面简洁,一些选项卡 仅在需要时显示。
- Studio 菜单:要访问 Studio 菜单,请单击 Chromatography
 Studio 窗口左上角的 Chromeleon 图标 ③。在该菜单中,可以访问常规任务,例如打印、导出和保存。

进样列表

选择进样列表类别后,可以编辑、打印和导出进样列表。

导航窗格提供了序列中所用的所有文件的总览。**工作区**显示 有关每个进样(例如样品类型,如校准标准品)和进样状态 的详细信息。

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

仪器方法

选择仪器方法类别时,可以编辑仪器方法。

导航窗格列出了序列中的仪器方法,并提供仪器模块的总览。 在**工作区**中,可编辑仪器方法。

数据处理

选择**数据处理**类别时,可以查看色谱和质谱结果、编辑处理 方法以及对色谱图进行手动积分。

导航窗格提供了序列中使用的所有进样、通道、处理方法和 视图设置的总览。色谱结果显示在**工作区**中。

通过在**数据处理主页**选项卡上选择或隐藏**窗格**组中的每一个 窗格,可以自定义在**功能区**上显示的窗格(例如**色谱图、交** 互结果、校准图和处理方法)(图 20)。



图 20: 功能区中的窗格选择

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

报告设计器

在报告设计器类别中,可以查看报告和编辑报告模板。

导航窗格显示序列中可用的所有通道、进样和报告模板的列表。在**工作区**中,可以查看和修改报告。

电子报告

在**电子报告**类别中,可以创建和管理电子报告。电子报告是 电子捕获的结果快照。

导航窗格显示电子报告中可用的所有进样和工作表的列表以 及电子报告本身。**工作区**显示电子报告,或者在没有可用的 电子报告时显示新建报告的选项。

UV 光谱库

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

菜单

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

索引

保留时间.31 报告.15.35.36.53 报告设计器.56.58 Cobra. 25 Console. 10. 49. 50 采集数据, 18, 38 查询.53 处理方法.15.31.41.53 Discoverv 服务.47 打印.36 导航窗格.17.51.56 电子报告.53.58 定量, 32, 42 队列.18 eWorkflow, 49, 54 峰检测.23.41 服务管理器.47 复核数据.20.35 Genesis, 41 工作区, 51, 56 功能区.56 管理控制台.47 光谱库, 53, 58 ICIS, 41 积分,23 基质.54 计划程序,47

加标,54 监视. 12. 19 检测参数.23 校验标准品,53 校准.32 校准标准品, 32, 53 校准级别,33 校准曲线.34 讲样类型.53 讲样列表.57 客户端, 47, 49 空白,53 类别栏,51,56 离子共洗脱,46 连接,12 MS 数据可视化, 38 MS 仪器控制.38 模块,12 母离子质量,45 目标比值.46 谱图模式.39 启动.10 确认峰.46 Studio. 20, 49, 54 Studio 菜单, 56, 58 色谱图.22 识别峰.29

数据仓,52 数据仓管理器,48 数据处理,20,57 TIC,44 提取离子色谱图,40 未分离峰,27 未加标,54 未知进样,53 XIC,40 许可管理器,47 序列,14,52 仪器, 11, 52 仪器方法, 14, 53, 57 仪器控制器服务, 47, 48 仪器配置管理器, 47 用户管理器, 47 质量范围, 44 质谱通道, 42 质谱图, 39 质谱仪, 38 组分表, 29, 31, 42, 43

www.thermoscientific.com

澳大利亚 +61 3 9757 4486 奥地利 +43 1 333 50 34 0 比利时 +32 53 73 42 41 巴西 +55 11 3731 5140 中国 +852 2428 3282 丹麦 +45 70 23 62 60 法国 +33 1 60 92 48 00 德国 +49 6103 4080

印度 +91 22 2764 2735 意大利 +39 02 51 62 1267 日本 +81 6 6885 1213 韩国 +82 2 3420 8600 荷兰 +31 76 579 55 55 新加坡 +65 6289 1190 瑞典 +46 8 473 3380 瑞士 +41 62 205 9966 中国台湾 +886 2 8751 6655 英国/爱尔兰 +44 1442 233555

