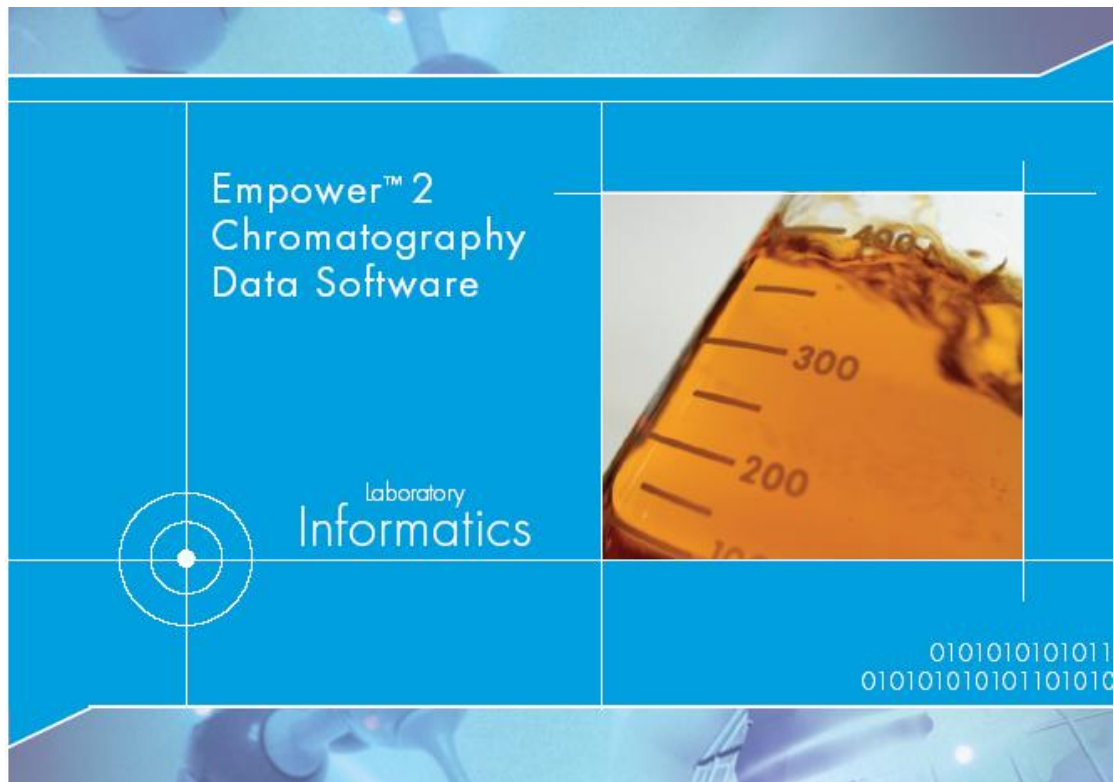


# Empower 2 软件现场培训教材

(第二版)



Waters 中国有限公司  
沈晓峰  
2006 年 12 月



---

# 目录

<b>EMPOWER 软件概述</b>	<b>1</b>
一. 登录	1
二. PRO 界面主要组件的介绍	3
三. 新建项目	6
<b>EMPOWER 软件数据采集与处理</b>	<b>11</b>
一. 概述	11
(一) 方法组	11
(二) 数据采集与处理的流程	12
二. 数据的采集	14
(一) 平衡系统样	14
(二) 单个运行样品	19
(三) 样品组运行样品	20
三. 数据的处理	24
(一) 利用处理方法向导建立处理方法	24
(二) 修改样品信息	30
(三) 定量计算	34
四. 数据报告的打印	39
<b>系统管理</b>	<b>42</b>
一. 系统配置	42
(一) 查看色谱系统	42
(二) 色谱系统管理	42
二. 数据管理	47
(一) 项目的备份	47
(二) 项目的还原	50
<b>附录 3D 数据的处理</b>	<b>54</b>
(一) 建立处理方法	54
(二) 修改样品信息	61
(三) 定量计算	66

# Empower软件概述

## 一. 登录

1. 双击电脑桌面上的Empower图标 ，或点击“开始>Empower>Empower”，出现Empower登录窗口。



提示：每次登录前必须输入用户名和密码。出厂设置的默认用户帐号为 system，密码为 manager。每个系统都必须建立自己的用户帐号和密码，并使用自己的用户帐号和密码进入系统。如何建立用户帐号和密码,请参考“Empower 帮助”。

2. 输入用户名和密码，单击确定，出现Empower Pro界面窗口。



3. 如果在输入用户名和密码之后，单击“高级”，则出现下面的窗口。



选择用户类型（提示：Empower 2 可以为一个用户分配多种角色，如果您在建立用户的时候为该用户分配了多个角色，在每次登录的时候可以选择进行本次任务所使用的用户类型。系统默认的用户System只有一个“管理员”的角色。），输入您所在的时区（提示：如果您初次登录 Empower，中国的时区为“PRC”），并选择所需的登录界面，然后单击确定。

关于不同的用户界面，请参阅下面的说明：

- 1 QuickStart 为单一窗口界面，它将用户需要使用的所有功能置于同一个单一界面中，以简洁明确的方式提供了进行色谱分析需要的所有功能。用户甚至可以用QuickStart 界面进行包括PDA和质谱数据提取在内的分析方法开发工作，还能灵活地定制报告和管理数据。
- 1 Pro 界面是进行系统管理的完美界面，可以控制所有软件功能。
- 1 Open Access 界面适合没有任何色谱经验的初学者使用，使用者只需要选择方法、样品数，然后点击鼠标运行即可。
- 1 Web 界面可以使远程用户或移动用户通过互联网或企业内部网方便地访问色谱系统中的信息。

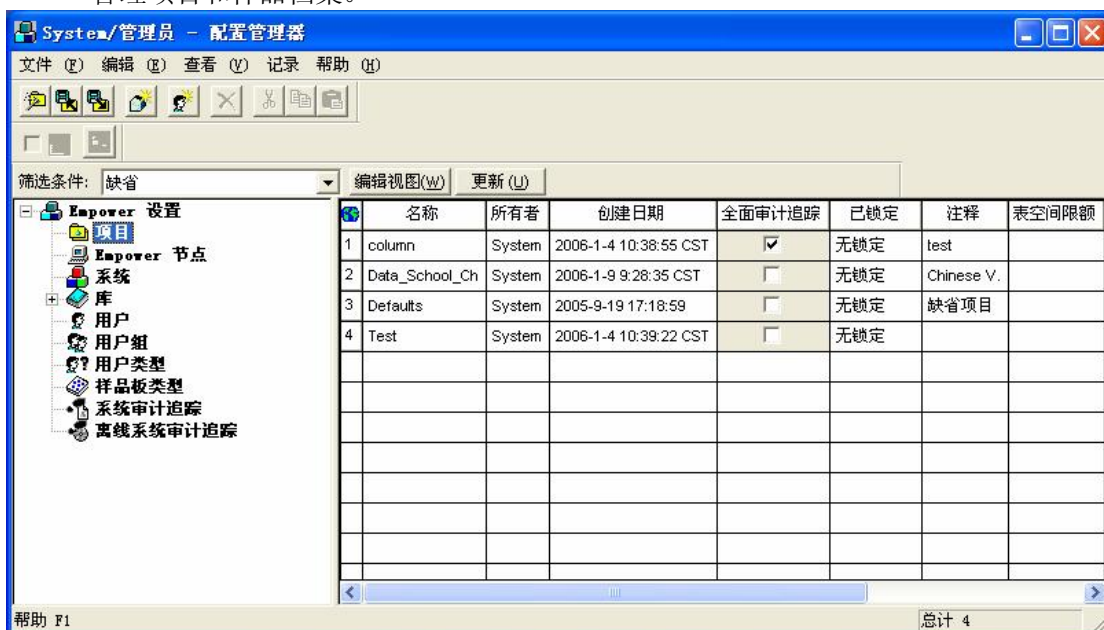
本教程使用Pro 界面，请选择登录“Pro 界面”完成随后的操作。

## 二. Pro 界面主要组件的介绍

### (一) “配置系统”界面



选择“Pro 界面”上的“配置系统”窗口，即可进入“配置管理器”界面，该界面用于执行系统管理任务（例如创建项目和自定义字段、配置采集服务器和色谱系统、管理光谱和化学结构库、管理用户、备份及还原项目和 Empower 数据库、定义样品板的物理属性（用于进样），管理电子记录和签名设置（审计追踪），以及管理项目和样品档案。



### (二) “浏览项目”界面



单击Pro界面中的“浏览项目”，即可进入“浏览项目”界面，该界面可提供对每个项目的访问并充当关系数据库和 Empower 之间的链接。使用“项目”窗口中的菜单、筛选视图和工具，可以处理、查看、报告和项目管理数据。

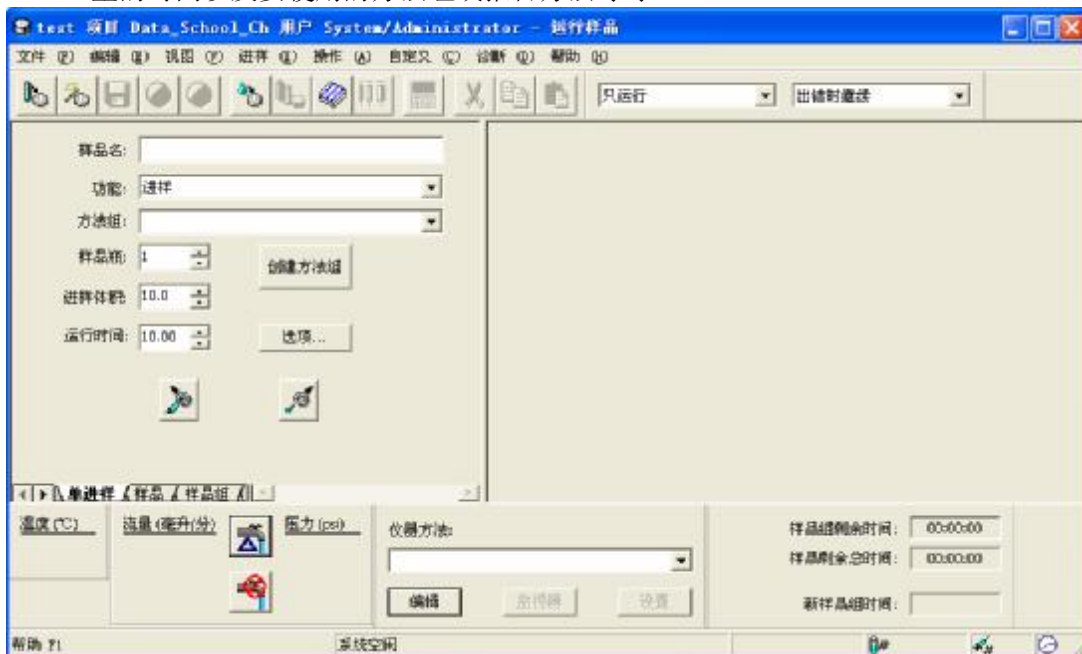
样品组	进样	通道	方法	结果组	结果	峰	签署	曲线	视图筛选器	自定义字段
样品名称	样品瓶	进样	样品类型	采集日期	通道					
9	1PST	3	2	窄分布标准样	1992-10-29 10:49:47 CST	410				RI AT 32 RR
10	2PST	4	1	窄分布标准样	1992-10-29 11:38:38 CST	410				RI AT 32 RR
11	Std_2	26	2	标准样	2003-8-7 16:24:46 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
12	Std_3	27	1	未知	2003-8-7 16:32:31 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
13	Std_3	27	2	未知	2003-8-7 16:40:12 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
14	Std_4	28	1	未知	2003-8-7 16:47:57 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
15	Std_4	28	1	未知	2003-8-7 16:47:57 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
16	Std_4	28	2	未知	2003-8-7 16:55:38 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
17	Std_4	28	2	未知	2003-8-7 16:55:38 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
18	Std_1	25	1	标准样	2003-8-7 16:01:36 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
19	Std_1	25	2	标准样	2003-8-7 16:09:17 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
20	Std_2	26	1	标准样	2003-8-7 16:17:03 CST	W2996				PDA 210.0 到 400.0 纳
21	标样_2	1	1	标准样	1999-9-14 17:30:04 CST	996				PDA 210.0 to 350.0 nm e
22	未知样	1	1	未知	1999-9-14 17:35:50 CST	996				PDA 210.0 to 350.0 nm e
23	标样_1	1	1	标准样	1999-9-14 17:24:20 CST	996				PDA 210.0 to 350.0 nm e
74 合计										

### (三) “运行样品”界面

单击Pro界面的“运行样品”窗口，即可进入“运行样品”界面。



该界面用于运行样品以采集数据。Empower 依靠方法组（其中包括仪器方法）将控制和采集参数传递给已配置的色谱系统中的仪器，例如泵的流量或检测器的波长。它还依靠样品组方法来指定要运行的样品的数量和顺序，每个样品要应用的功能（如“标准进样”或“样品进样”），样品的运行模式，进行平衡、校正和定量的时间以及要使用的方法组或报告方法等等。





### 三. 新建项目

项目是方法、结果、自定义字段、视图筛选器和原始数据的集合，由用户定义。该集合驻留在Empower数据库中并在“浏览项目”中显示。

建立项目是为了方便用户归类、管理和检索相应的数据，所以需根据实际情况来决定是否建立，而并不是每次开机都要创建。

1. 进入到Empower 2 的Pro 界面，双击“配置系统”窗口。



2. 出现配置管理器窗口。



3. 选择菜单“文件—新建—项目”。



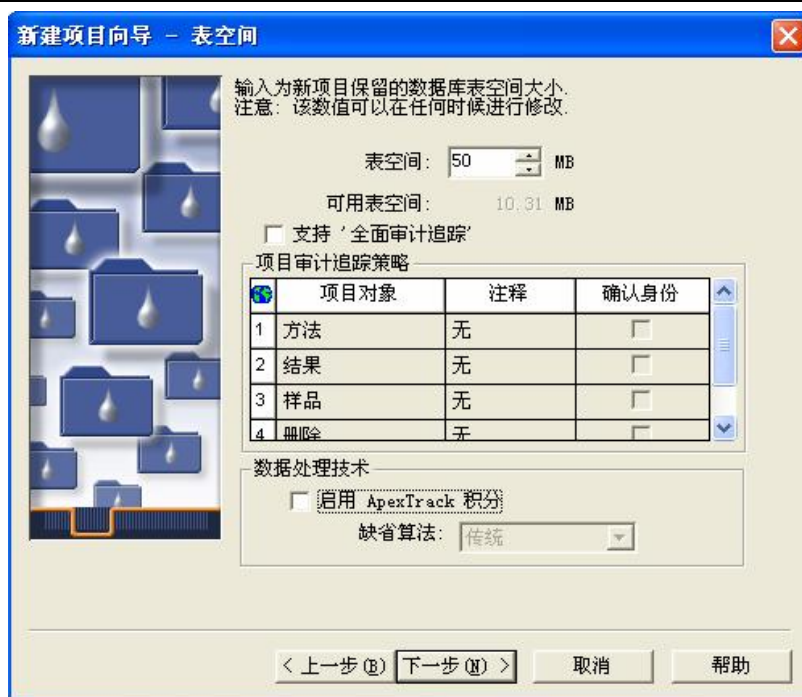
4. 出现“新项目向导”的对话框:



在此对话框, 需要确定项目是位于项目根目录中, 还是为项目层次结构的一部分 (作为父项目的一个子项目)。这种层次结构允许您将多个项目组织在一个公用项目结构中。备份父项目及子项目时, 该层次结构保持不变。

**提示:** 在项目层次结构中选择要创建新项目的位置。要将项目创建为新的顶级项目, 请单击“项目”文件夹。要将项目创建为现有项目的子项目, 请单击一个现有项目文件夹。该现有项目即被指定为父项目, 而新项目即作为该父项目的子项目进行创建。

5. 单击“下一步”, 出现“新建项目向导—表空间”, 如下图所示:



在此向导步骤中，“表空间”中接受50MB的表空间缺省设置。

在该向导步骤中，系统默认设置了“支持‘全面审计追踪’”。“审计追踪”将对项目元素（如方法和样品）的所有修改进行记录。选中该复选框之后，还要再选择是否需要“方法”、“结果”、“样品”和“删除”等更改进行记录。

提示：“完全审计追踪”功能用于符合法规的要求，如果有法规要求必须选择。

在数据处理技术区域，可以设定允许使用该项目的 ApexTrack 积分与否，并可选择数据处理积分的类型——ApexTrack 或“传统”，以用作缺省算法。小

如果不需要，可取消“支持‘全面审计追踪’”复选框，以取消对项目元素（如方法和样品）所做的所有修改的记录。如需要，则选中该复选框之后，还再选择是否需要“方法”、“结果”、“样品”和“删除”等的更改进行注释。

提示：Empower 提供两种数据处理技术，传统积分和 ApexTrack 积分。每种技术都使用专用的积分算法，因此处理数据时各不相同。ApexTrack 在峰的顶点而非峰起点检测峰值。ApexTrack 根据曲率检测顶点（二阶导数）。反之，传统积分在峰起点通过斜率检测峰值（一阶导数）。

ApexTrack 积分检测峰和定位基线的方法与“传统”积分方法的不同之处主要体现在以下几个方面：

- ApexTrack 使用色谱的二阶导数检测峰。（传统积分使用斜率阈值（一阶导数）检测峰。）
- 峰检测参数独立于基线位置参数。（对于“传统”积分则不是这样。）
- 搜索算法从每个峰的顶点开始，向下向外计算，画出基线。当展开的基线相遇并融合时，簇即被确定。
- ApexTrack 提供肩峰检测、改进的负峰检测和积分以及高斯切割。

设置完成后，单击“下一步”。

6. 出现“新建项目向导—选项”页。选择用于本项目的选项。单击“下一步”。



Waters 提供扩展 Empower 功能的多种选项。除 PDA 和 MS 选项之外，这些选项均需要用另外的密钥盘进行安装。安装了这些选项后，您可以在项目中启用它们。  
**提示：** 如果无法确定适当的设置，请接受默认选项。

7. 出现“新建项目向导—访问控制”页。



根据需要选择设置对您所创建的项目具有访问权限的用户和用户组，或者接受缺省的选项，然后单击“下一步”。  
**提示：** 如果无法确定适当的设置，请接受默认选项。

8. 在“复制”页中，



接受默认选项，然后单击“下一步”。

此页的复制是指从另一个项目复制现有设置。可以复制项目的“视图筛选器”、“自定义字段”、“方法”和“参数”。

关于视图筛选器和自定义字段的含义，请参阅Empower 帮助的“处理项目”与“自定义项目”内容。

9. 在“新建项目向导—输入名称”页中，



输入项目的名称，最后单击“完成”来结束新项目的创建。

提示：项目名中不能出现空格。可使用下划线(\_)分隔词。另外，名称不能以数字和中文字符开头。如果在前面选中了“完全审计追踪”选项，则需要在注释框输入注释。

# Empower软件数据采集与处理

## 一. 概述

### (一) 方法组

在 Empower 软件中，必须在建立了适当的方法组后，才能采集数据。

方法组是用户定义的方法和数据通道的集合。方法组可以包括：

- 用于采集数据以收集数据的仪器方法（“只运行”模式）
- 用于收集并处理数据的仪器和处理方法（“运行并处理”模式）
- 用于收集、处理并报告数据的仪器、处理和报告方法（“运行并报告”模式）
- 用于导出数据的 ASCII 或 AIA 数据文件（可选）的导出方法

对于不同的方法类型的详细说明如下：

**仪器方法**用于指定仪器控制和数据采集参数，如流量和波长。仪器包括泵、溶剂管理系统、检测器、自动进样器、样品管理系统和气相色谱仪。可设置仪器方法以执行以下任务：

- 采集数据
- 设置初始条件以平衡系统
- 平衡色谱柱
- 清洗自动进样器管路和检测器流动池
- 通过设置清洗条件、关闭灯等来关闭系统

**样品组**方法包含一组函数和相关信息，用于指定从一组样品瓶中的每个样品瓶（标准样或未知样）采集数据的参数。

**提示：**如果每天都运行同一类型的样品，则可创建一个样品组，这样每次运行时只需修改其中具有新样品名的样品。

**处理方法**包括一组指令，用于定义 Empower 如何对来自 2D 通道或 3D 提取通道的数据进行处理。可选择是使用 ApexTrack 还是“传统”积分处理数据。处理方法用于执行以下任务：

- 通过确定每个峰的峰开始和峰结束（“传统”积分）或者确定峰顶点（ApexTrack 积分）对峰积分
- 定义软件如何校正标准样和定量未知样
- 校正标准样并为色谱中每个组份生成校正曲线和结果
- 定义被校正组份的组份含量或浓度
- 定量未知样品（和 QC 控制样品）并生成结果。
- 将要对其峰进行积分的组份分组为一个组份
- 为测试定义系统适应性计算，并为每一组份定义允许值范围
- 定义 PDA 处理参数以生成峰纯度和谱库匹配结果
- 定义色谱匹配处理参数，将选定的 2D 色谱指定为色谱匹配参比，并启用色谱匹配处理
- 定义 MS 处理方法参数，以生成库匹配结果并执行 MS 内标校正
- 定义 GPC、GPCV 或 GPC-LS 处理参数，以计算样品的分子量分布、粘度通道的固有粘度、长链、短链以及星形聚合物分支。
- 计算检测器噪音和漂移参数

**报告方法**作为在生成的报告中组织数据、结果、校正曲线及方法内容的模板。报告方法与报告包含的任何数据无关。报告可包括已处理的或未处理的数据。

**提示：**可使用单个或综合报告方法来创建报告。单个报告为每个选定数据类型创建一个报告。综合报告则将一组选定数据的信息合并到一个报告中。该报告取决于要报告的数据。可用不同的报告方法组合相同的数据以创建不同的报告。例如，一个报告可以包含自己文件所要的信息，另一个报告可以记录法规符合性信息并设定其格式。

导出方法指定要用于导出数据的数据文件格式。已处理或未处理的数据均可以导出。文件格式包括 ASCII、AIA、OpenLynx、PDF 或 EMF。

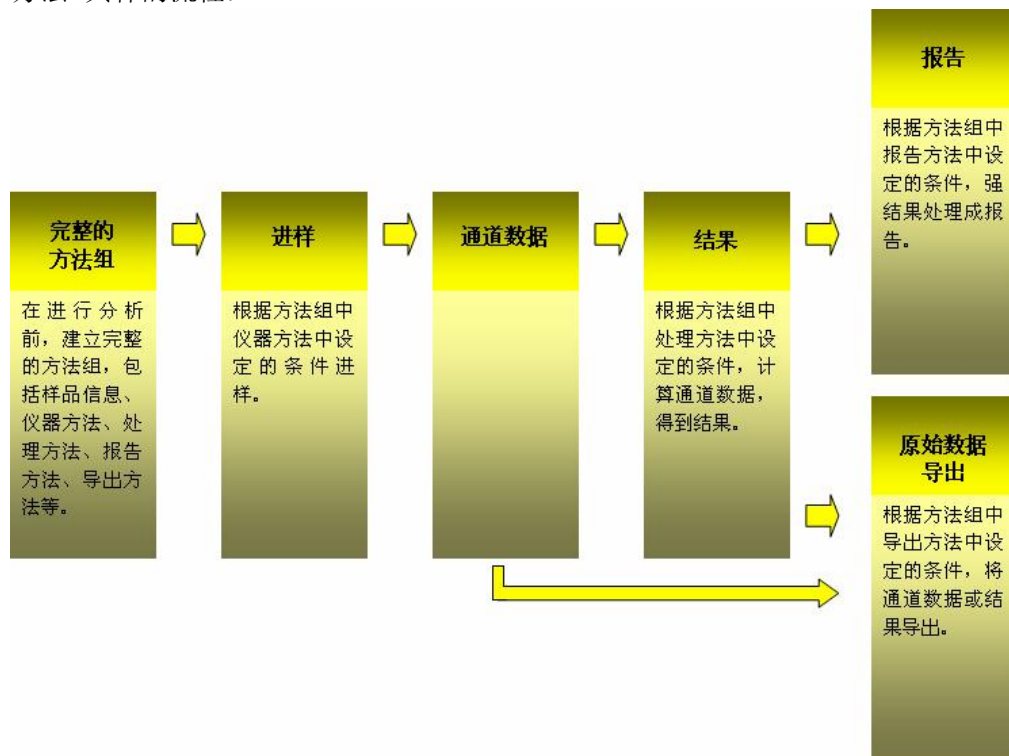
## (二) 数据采集与处理的流程

对样品的结果处理和报告可以通过两种方式进行：

方法 A：先建立方法组再进样，由系统自动进行结果处理和报告等操作。

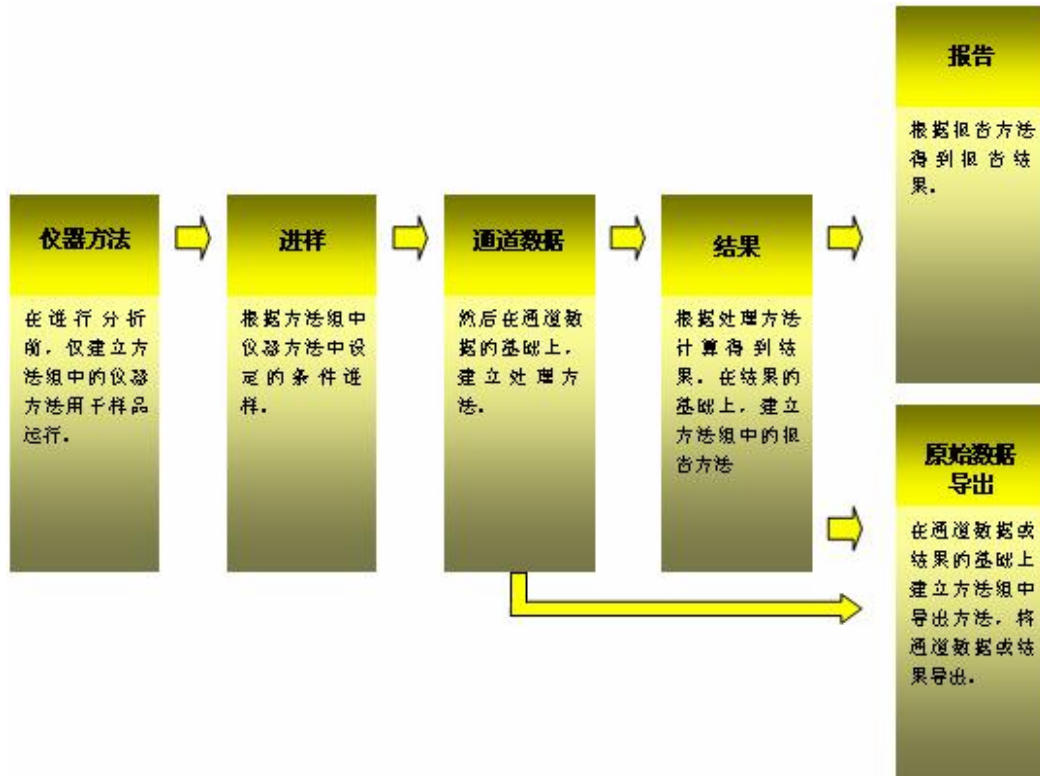
方法 B：先建立方法组中的仪器方法，然后进样，再在所得的结果的基础上建立结果处理、报告方法等，计算出结果，打印报告

### 1. 方法A具体的流程：



这种方法的逻辑关系比较明确，非常容易理解，适用于进行大量重复分析工作的实验室，例如质量控制（QC）实验室。

## 2. 方法B具体流程:



方法 B 的关键在于不是一下子建立好所有的方法，而是逐步地建立起方法组中的各个方法。但对于一些研究性的实验室，由于在开始分析的时候，对被分析的样品产生的结果还不了解，无法预先设定好所有的方法。在这种情况下，就可以采用方法 B 中的流程。

### 注意:

以下我们都将会按照方法 B 的流程进行相关的介绍。如果您需要按照方法 A 的流程进行工作，只需要参照后面的介绍，在运行样品前建立好所有的方法即可。



## 二. 数据的采集

使用“运行样品”可完成下列任务:

控制仪器、更改仪器参数以及将更改保存到仪器方法中。

监视基线并查看数据（波长或光谱）的实时图。

加载样品（单个样品或样品组）。

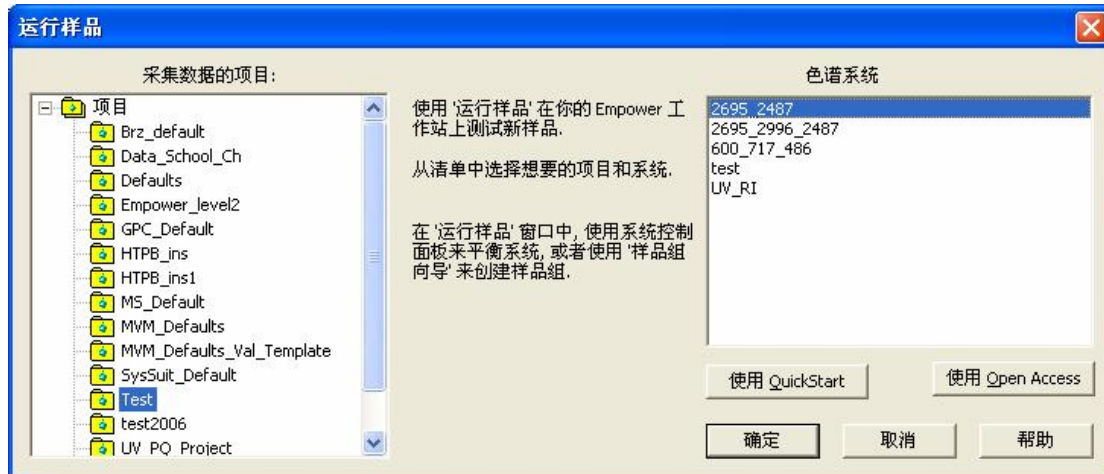
从单一进样或样品组采集数据。

### (一) 平衡系统样

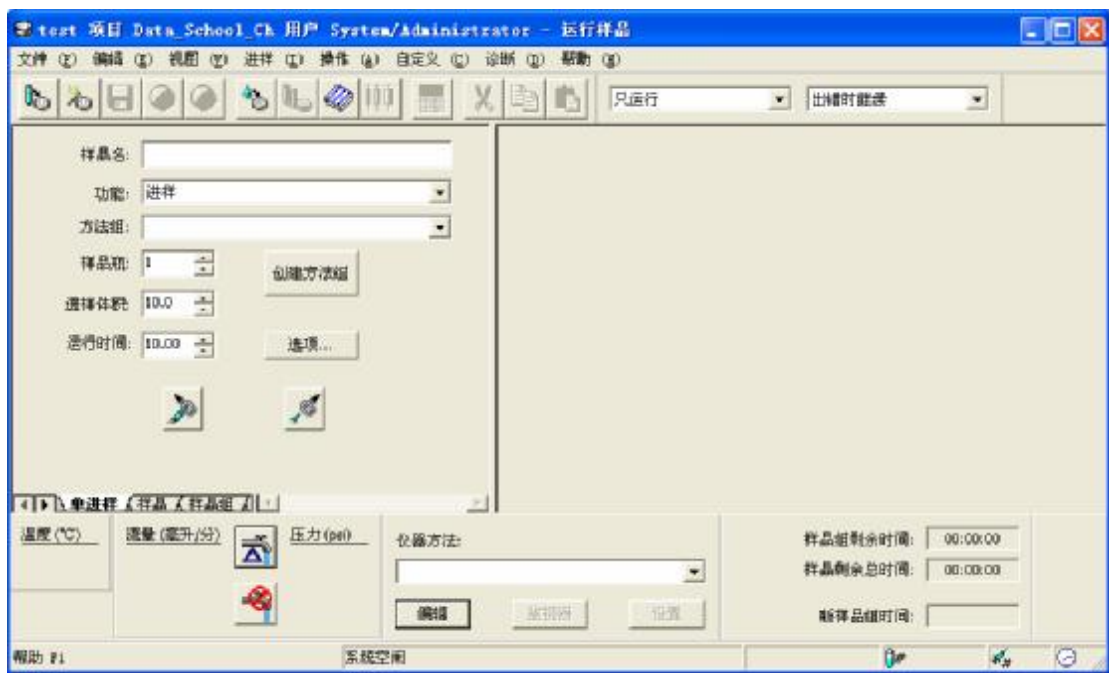
1. 登录Empower2 的Pro 界面，选择运行样品窗口。



2. 出现如下对话框，在左侧选择项目，在右侧选择对应的色谱系统，然后单击“确定”。



3. 进入运行样品窗口。



4. 选择 **创建方法组** ， 调用方法组编辑器向导。
5. 出现“新方法组—选择仪器方法”。



可以在现有的仪器方法中选择一个（转至步骤5），或者单击 **新建** “新建”来创建新的仪器方法。

- a. 如果单击了 **新建** “新建”，会出现仪器方法编辑器。



- b. 窗口会为所选色谱系统中的每个仪器显示一个图标。选中不同的图标，即可编辑相应的仪器参数。请根据您的实验方法设置相应的每个仪器具体参数。
- c. 编辑仪器参数完成后单击“文件”>“另存为”，出现“保存仪器方法”对话框。



输入仪器方法名，单击“保存”，保存该仪器方法。



- d. 关闭“仪器方法编辑器”窗口。
  - e. 新建的仪器方法出现在仪器方法列表中。
6. 选中所要的仪器方法，单击“下一步”。

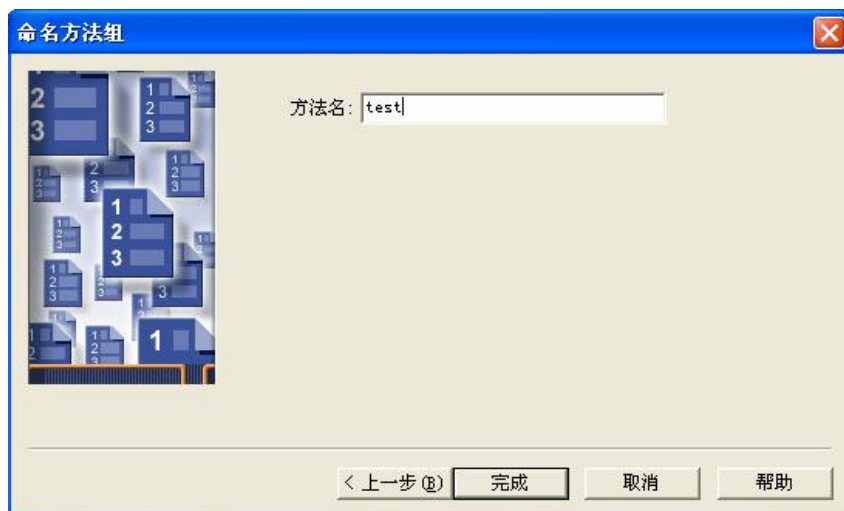


7. 出现“选择缺省方法”页。



选择“处理方法”与“报告方法”（按照方法B的流程，接受默认设置，先不建立这两种方法；如果按照方法A的流程，可以在此处先建立“处理方法”、“报告方法”和“导出方法”），单击“下一步”。

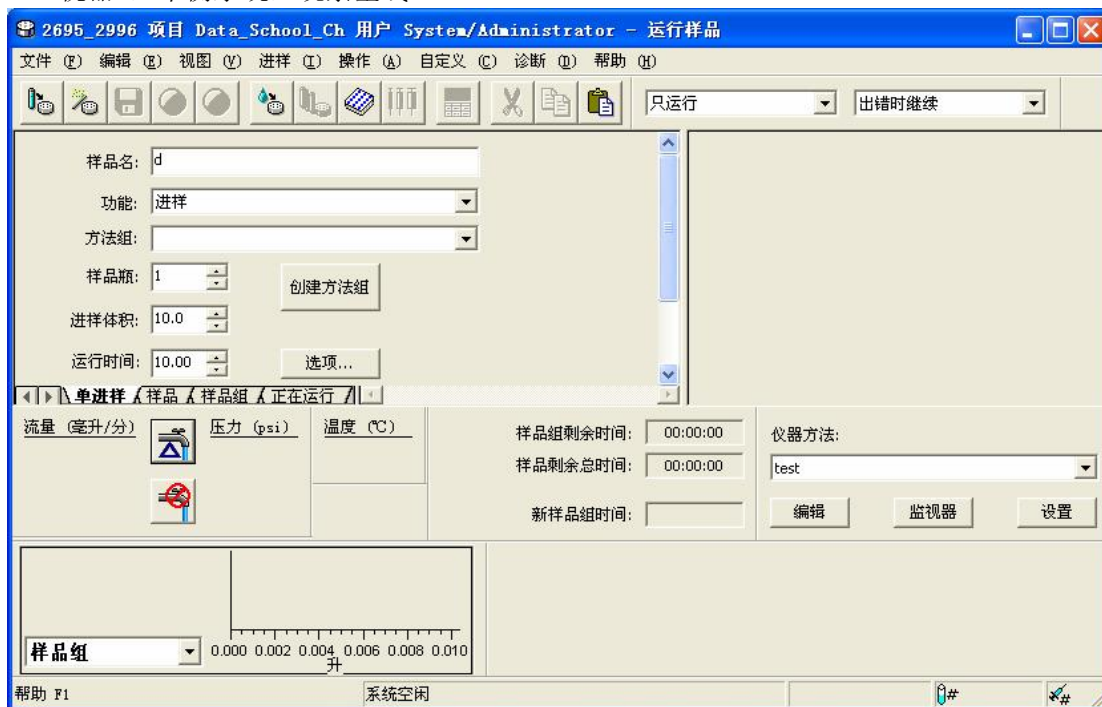
8. 出现“命名方法组”页。



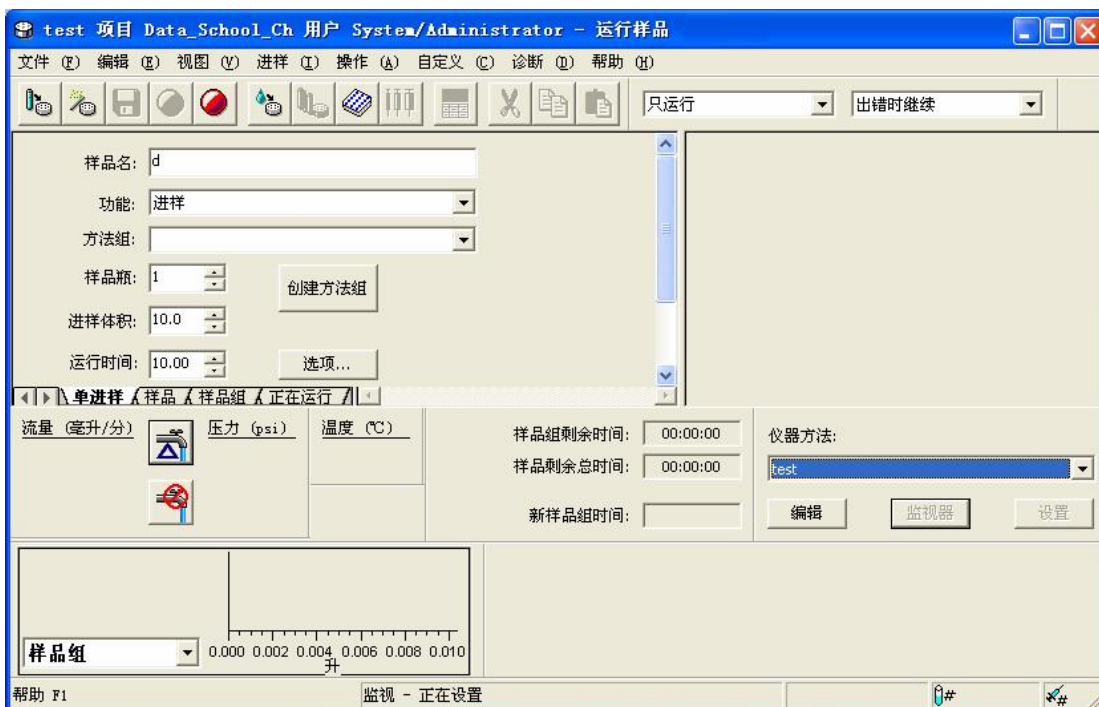
输入方法组名（缺省设置成与刚建立的仪器方法名相同，但方法组的名字可以和方法的名字不同），单击“完成”。



9. 在“仪器方法”中选择刚建立的仪器方法，并点击“监视器”，平衡系统，观察基线。




待系统平衡后，即可单击  “中断”键，终止观察基线。

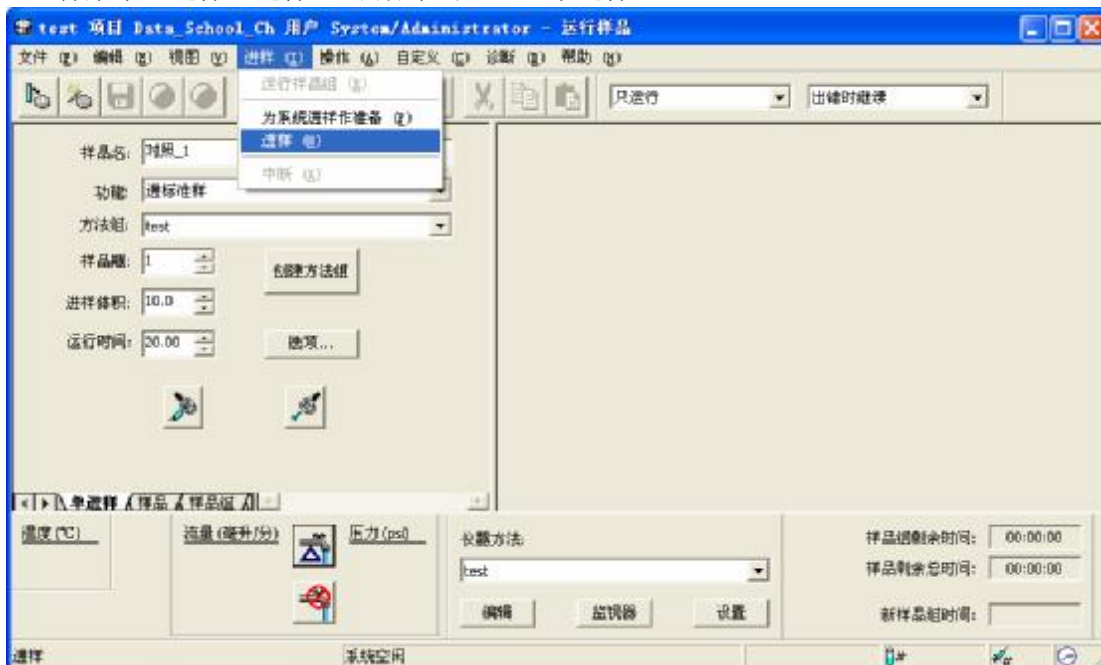


## (二) 单个运行样品

可以一次进行一个样品的进样和数据采集。通常，在需要迅速分析样品时执行此操作。

1. 等到系统达到平衡状态，终止了观察基线，系统空闲后，写入样品名称，选择对应的方法组，确定运行时间。如果是自动进样器，则同时需选定样品瓶号与进样体积，然后选

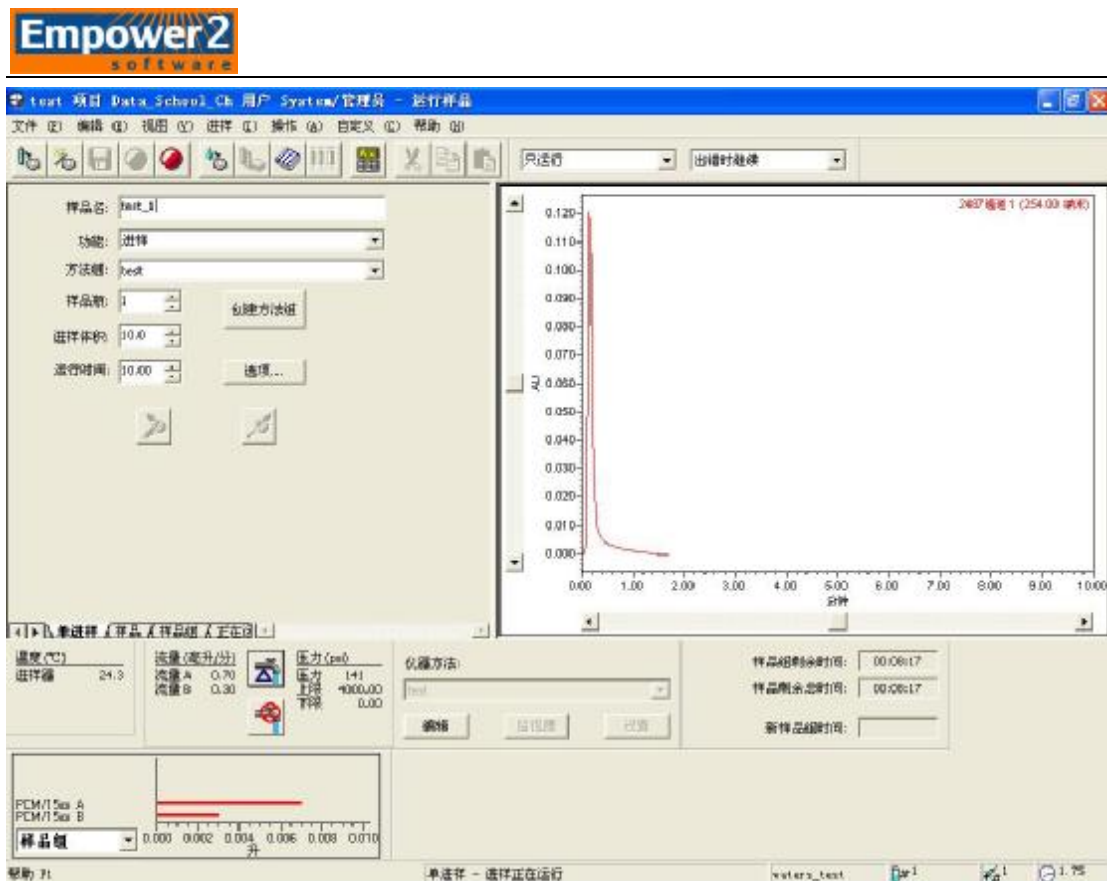
择菜单“进样—进样”，或者单击“单进样”。



提示：建议即使在采用手动进样方式的时候，也如实填写进样体积。



一旦所有的采集参数被设定，单击“进样”键，开始采集数据。进样时状态条会做出指示。色谱数据被采集并显示在“实时”图中。

提示：如果不知道运行时间，第一次进样时间应设长一些，如填60min，进样确认后，进第二针时再改回适合的时间。以确保数据采集的有效性。Empower软件支持提前中止数据的采集，中止采集不会造成数据的丢失。



↑  
系统状态条

提示：如果是手动进样器，要注意采样界面下方的系统状态条显示为**等待进样**时，才可以扳动手动进样阀开始进样。

2. 如果需要在采集数据的同时，放大查看数据，可单击  “传送数据到查看”来进行具体的查看，乃至数据的数据处理。（关于数据的数据处理，请参见第五部分，数据的数据处理。）
3. 如果需要终止数据的采集，可单击  “中断”键，或者选择菜单“进样—中断”。

### （三）样品组运行样品


当您希望从多个样品采集数据时，可使用一组条件或指令（称为样品组）。这些条件和指令可指定如何及何时从样品瓶组的每个样品瓶采集数据。样品可包括用于校正的标准样（内部和外部）、未知样和控制样。

采集数据前，必须定义样品组，方法是指定样品的数量和顺序、要在样品上执行的功能、方法组以及样品组中每个样品的运行时间。对于整个样品组，必须指定运行设置，是否交互式监视分析及是否在运行样品组前暂停采集。如果希望再次使用该样品组，可将其保存为样品组方法，或者可以使用样品组仅运行并采集数据。

1. 等到系统达到平衡状态，终止观察基线。
2. 随后等到系统空闲后，选择“运行样品”中的“样品队列”，填写样品表：首先选择“样品组方法”的功能栏，在下拉菜单中选择进标准样或进样品，然后在“方法组 / 报告方法”栏下拉菜单中选定所用的方法组，再逐一设定其它采集参数——样品瓶、样品名、样品体积、进样数以及运行时间。

提示：有关“功能”等参数的具体意义，请参见Empower软件的帮助文件。

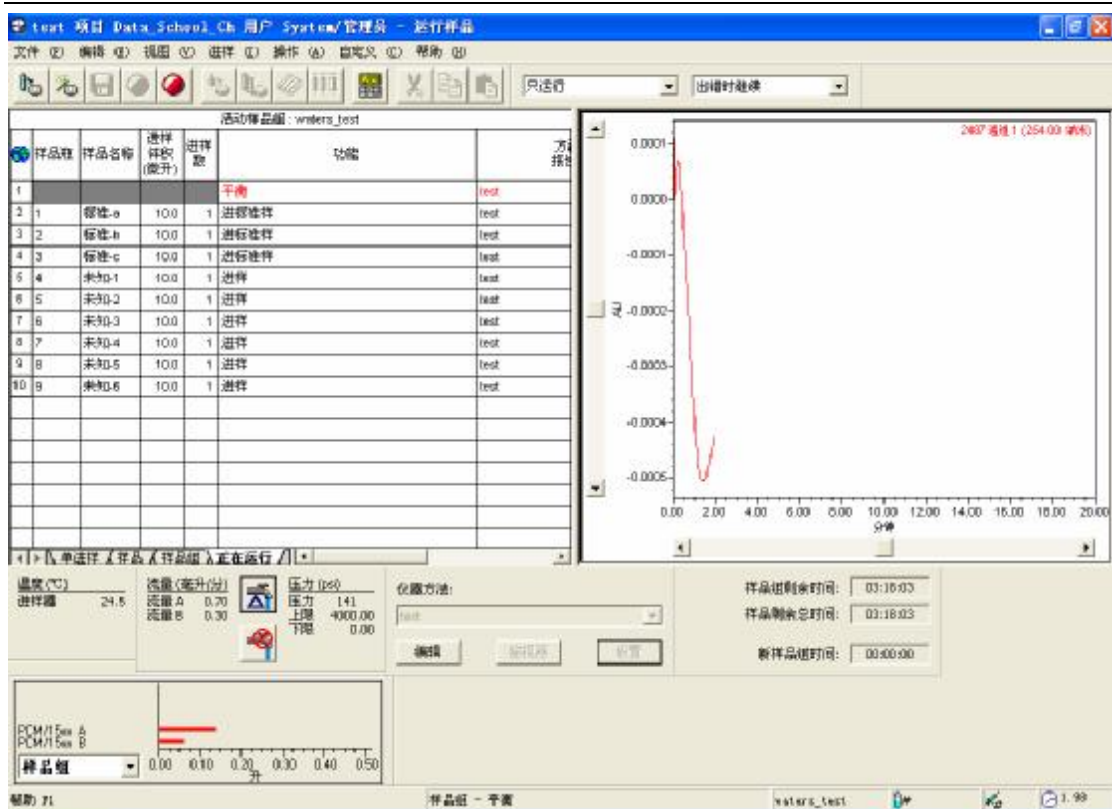


3. 选择菜单“进样—运行样品组”，或者单击  开始运行。
4. 出现“运行样品组”对话框：

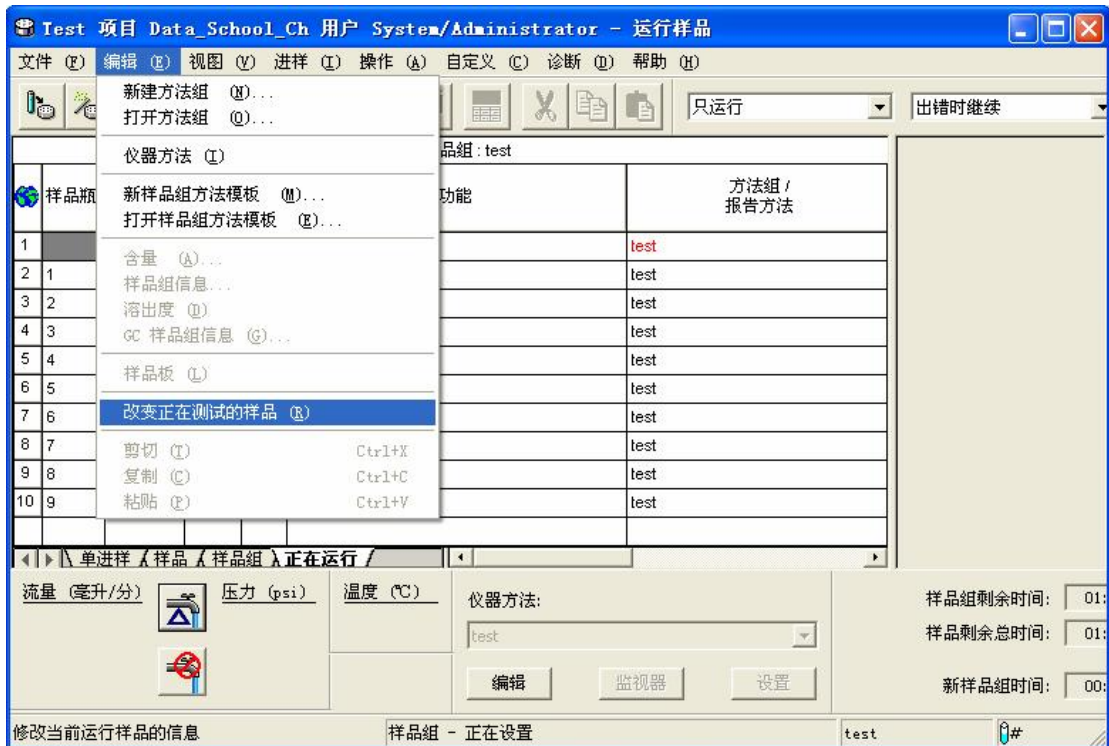


5. 输入该样品组的名称。保持其它选项为默认设置。单击“运行”键。
- 一旦开始运行样品组，画面将自动切换到“正在运行”窗口。

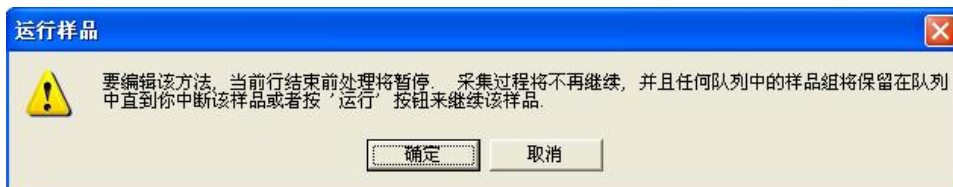




提示：此时若要中断运行，可单击“中断”键。  
 如果有另外一组样品需要运行的话，也可返回“样品”表单继续编辑新的一组样品，随后单击“运行”，即可在此样品组结束后继续运行新的一组。  
 若要修改正在运行的样品组中的测试样品，可在“正在运行”表单中，单击“编辑”菜单中的“改变正在测试的样品”，（见下图）然后进行修改。




当出现下面对话框，单击“确定”。



修改完成后, 单击  “运行”继续运行样品组。

需要注意的是, 一旦某行变成红色, 即处于正在运行状态, 因此不能进行修改, 只有在该行处于正常的黑色时, 才能够进行改变。

4. 如果需要在采集数据的同时, 放大查看数据, 可单击  “传送数据到查看”来进行具体的查看, 乃至数据的数据处理。(关于数据的处理, 请参见第五部分, 数据的处理。)

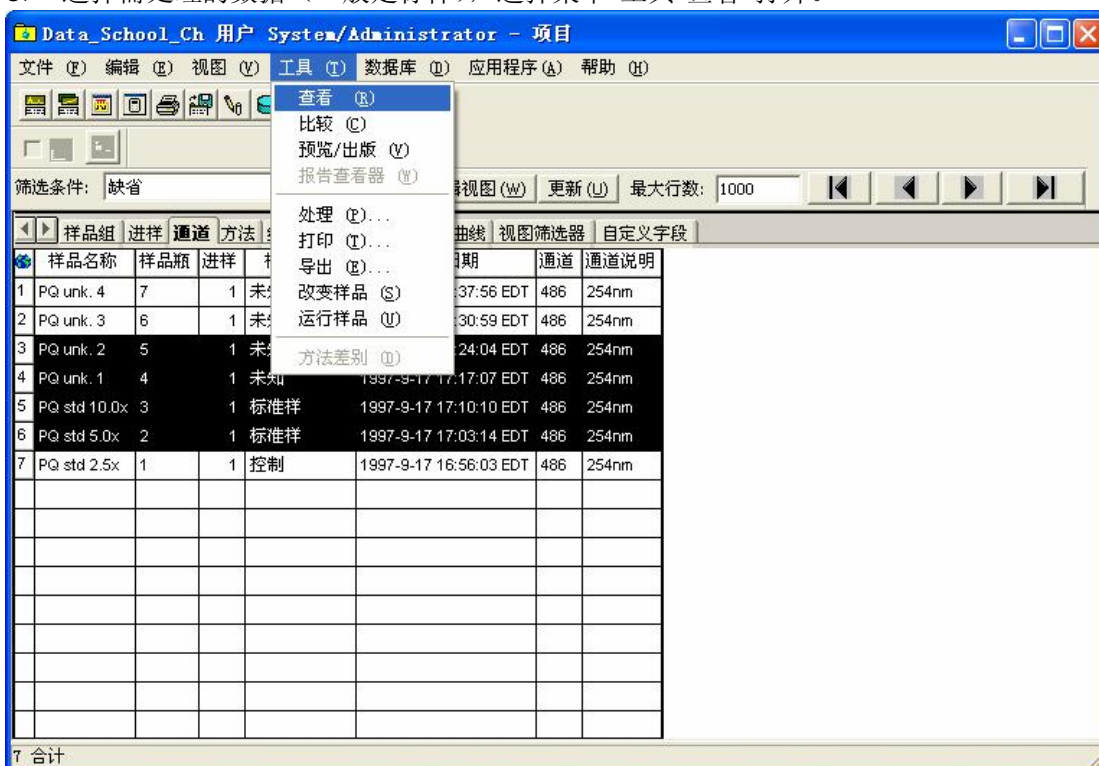
### 三. 数据的处理

此部分内容主要包括:

- 建立处理方法及方法组
- 修改样品 - 填入标样中组分的浓度/含量
- 处理标样和未知样 - 生成校正曲线并对未知样定量
- 查看处理结果

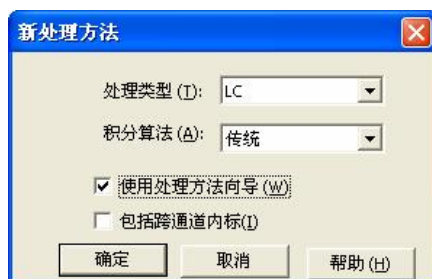
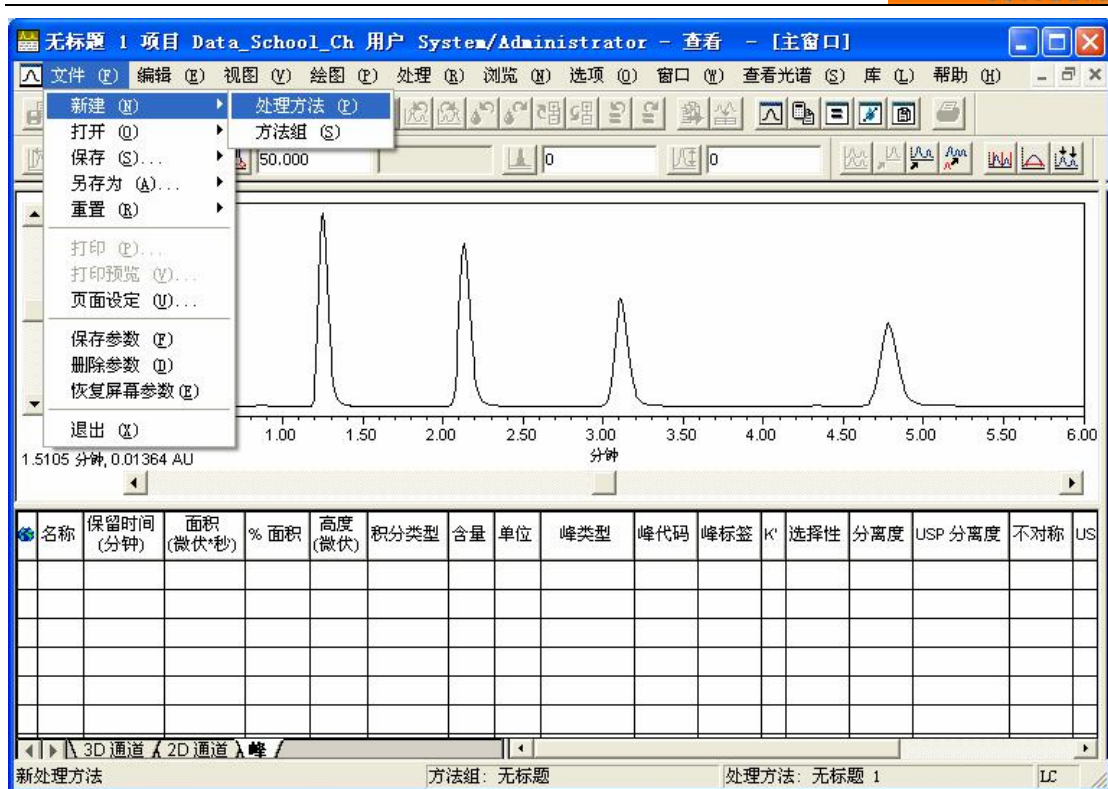
#### (一) 利用处理方法向导建立处理方法

1. 单击Empower软件Pro界面中的“浏览项目”进入数据浏览画面，开始查找数据。
2. 通过单击选项卡 样品组 进样 通道 方法 结果组 结果 签署 曲线 上的“通道”，进入通道画面。
3. 选择需处理的数据（一般是标样），选择菜单“工具-查看”打开。



提示：建议使用**最低浓度**的标准样建立处理方法，以确保所有感兴趣的峰都能被检测到。

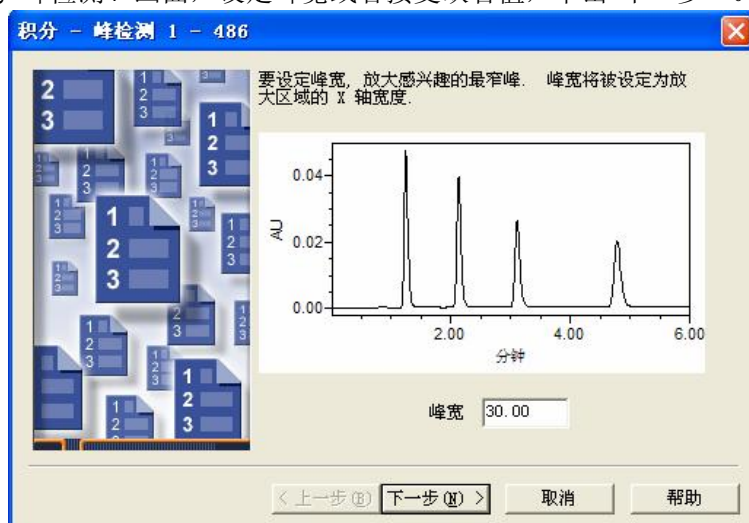
4. 出现“查看—主窗口”:
5. 单击菜单“文件-新建-处理方法”，出现新建处理方法对话框。



勾选“使用处理方法向导”，然后单击“确定”。

提示：对于PDA检测器的三维数据，请在该对话框选择处理类型为“PDA”。而对于非3D方式采集的液相二维数据，如2487紫外检测器、示差、荧光等则选择“LC”。

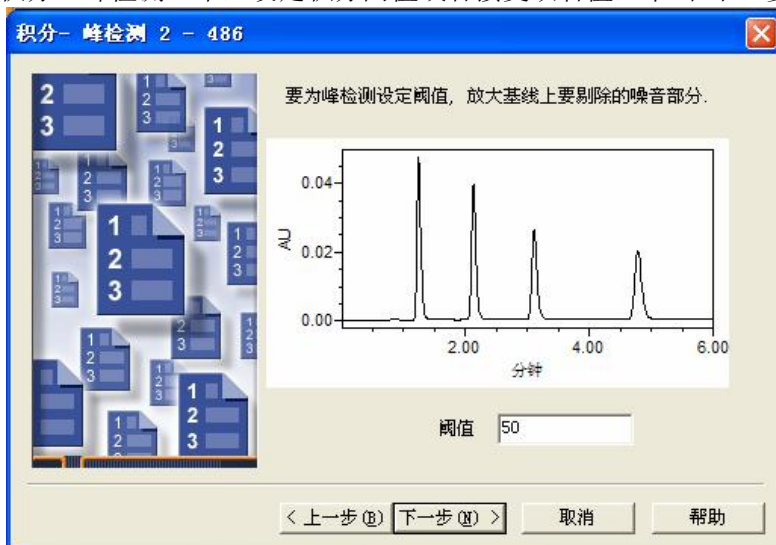
- 出现“积分-峰检测1”画面，设定峰宽或者接受缺省值，单击“下一步”。



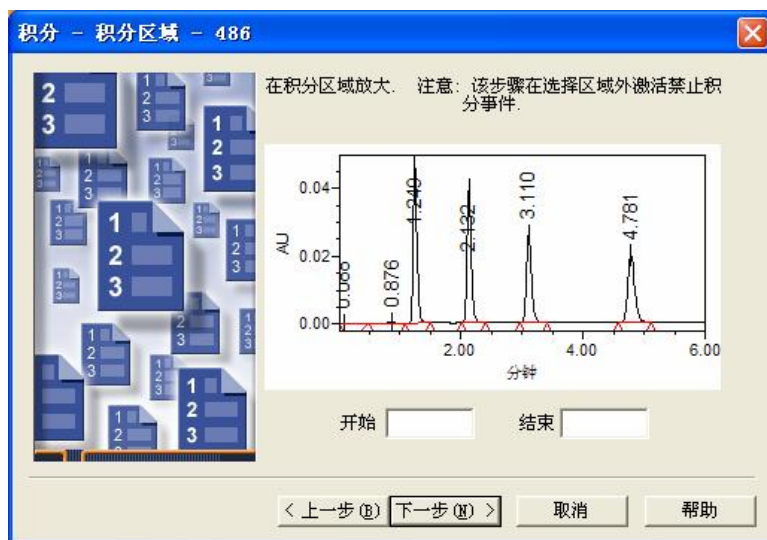
提示：在以下各步骤中，如无法确定适当的设置，请接受缺省值。

有关处理原理的详细信息，请参阅 Empower 软件数据采集和处理原理指南。

在“积分-峰检测2”中，设定积分阈值或者接受缺省值，单击“下一步”。

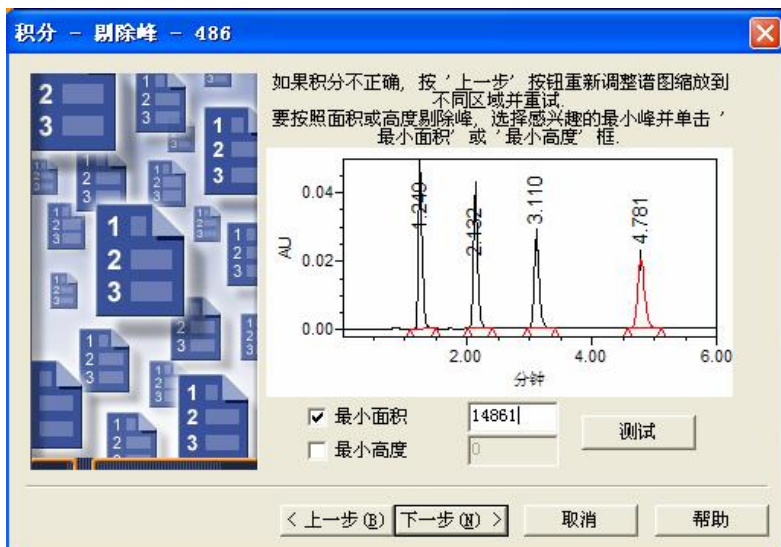


7. 在“积分-积分区域”中，直接输入保留时间或者用鼠标左键拖拽放大选定积分区域。单击“下一步”。



提示：如果对放大谱图后的参数不满意，可以点击鼠标右键，选择“全视图”或“不缩放”命令，再重新放大谱图。

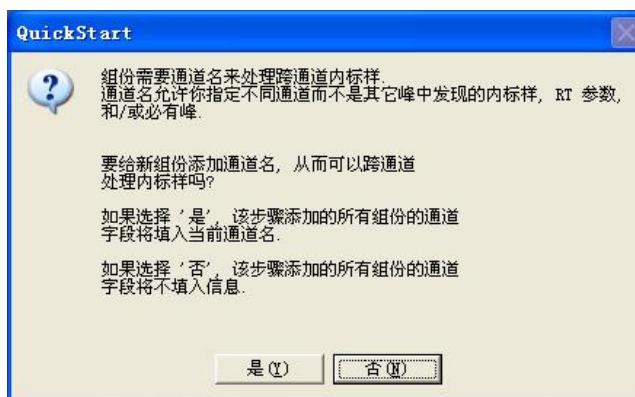
8. 在“积分-峰剔除”中，根据需要设定最小面积和/或最小高度，或者不作任何改动。单击“下一步”。



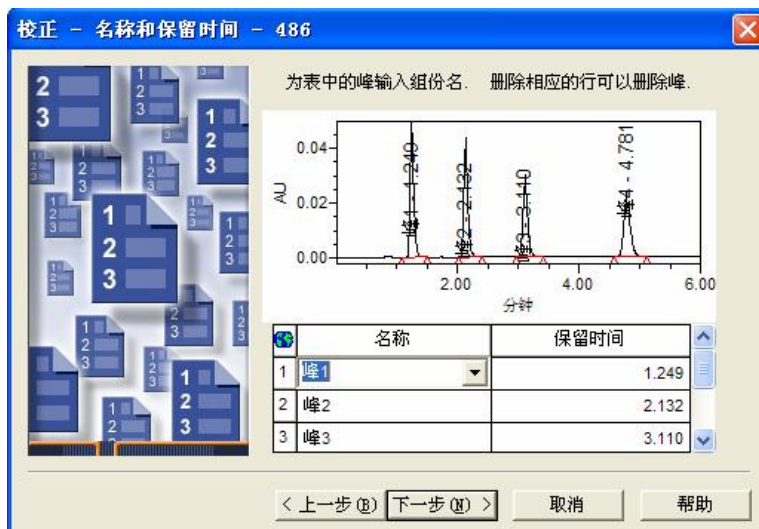
9. “校正—普通”页中, 除有特定要求外, 接受缺省选项, 单击“下一步”。



10. 出现如下对话框, 选择“否”。



11. 在“校正—名称和保留时间”页中, 在“名称”栏中, 输入组分的名称, 或不作改动, 单击“下一步”。



12. “校正—缺省量”页中，“含量”和“单位”栏不填，单击“下一步”。



13. “校正—内标样”页中，接受缺省选项（外标校正），单击“下一步”。

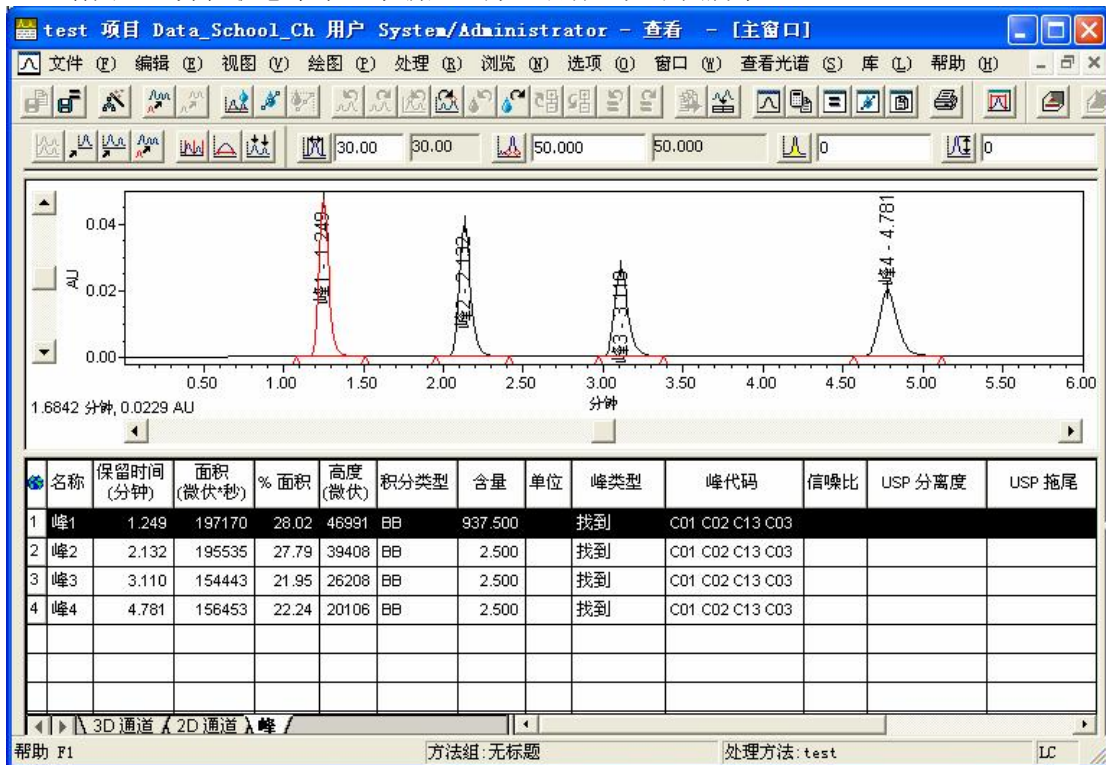


14. 出现处理方法名对话框



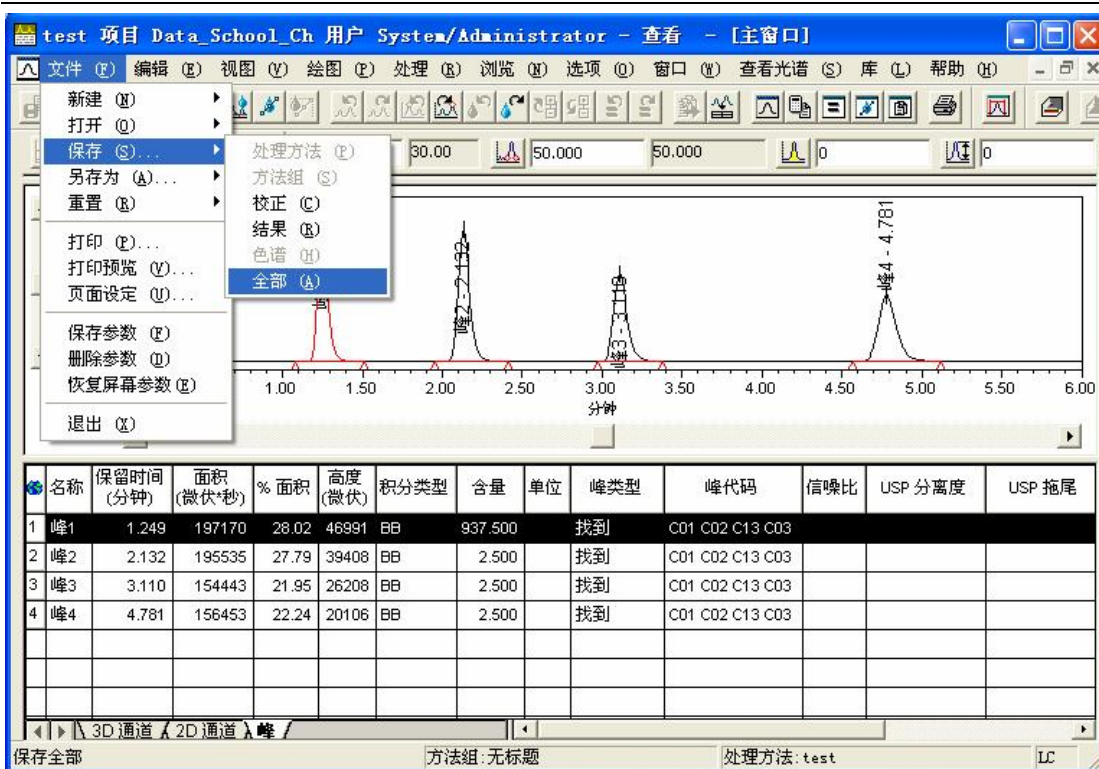
在“处理方法名”中输入方法名，然后单击“完成”结束处理方法向导。

- 再次出现主窗口，下部的“峰”表中出现积分结果，同时将组分名称及保留时间标记在色谱图上，并在状态条中显示新处理方法名称。如下图所示：



- 打开菜单“文件—保存—保存全部”，进行保存。





17. 关闭窗口。

## (二) 修改样品信息

在创建校正曲线前，必须加载组份含量或浓度。

1. 如果没有在进样时，填写有关样品的信息，在此则需对样品信息进行修改。

在 **样品组** 进样 **通道** 方法 **结果组** **结果** **签署** **曲线** “通道”选项卡中，选中欲修改的标样的，然后选择菜单“工具-改变”样品。

The screenshot shows the 'Data\_School\_Ch 用户 System/Administrator - 项目' window. The '样品组' (Sample Group) tab is active, displaying a table with columns: 样品名称, 样品瓶, 进样, 日期, 通道, 通道说明. A context menu is open over the table, with '改变样品' (Change Sample) selected.

样品名称	样品瓶	进样	日期	通道	通道说明
1 PQ unk. 4	7	1	未	486	254nm
2 PQ unk. 3	6	1	未	486	254nm
3 PQ unk. 2	5	1	未	486	254nm
4 PQ unk. 1	4	1	未	486	254nm
5 PQ std 10.0x	3	1	1997-9-17 17:03:14 EDT	486	254nm
6 PQ std 5.0x	2	1	标准样	486	254nm
7 PQ std 2.5x	1	1	控制	486	254nm

若数据的采集是以样品组进样的方式实现的，需要回到样品组选项卡中，选中相应的样品

组，再进行修改样品信息的步骤：单击菜单“工具—改变样品”。



2. 出现“修改样品”窗口。



提示：在Empower进行处理时，只有标样能够生成校正曲线，然后才能对未知样进行定量计算。如果在进样时没有正确设置样品类型，可在此窗口直接进行修改。也可针对具体情况，修改样品名称、样品重量以及稀释倍数。

3. 单击菜单“编辑-含量”，出现组份编辑器。



注意：此处选择“全部样品”表单。

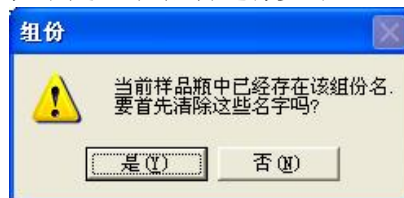
4. 在该选择菜单“编辑-从处理方法复制组份”或者单击 图标。



5. 在“打开现有的处理方法”对话框中，选中指定的处理方法，单击“打开”。



如果出现以下对话框，则单击“是”，随后再进行步骤6。



- 在“全部样品”表单中，针对对照品的每一组分，填写“数值”，必要时填写“单位”后，关闭组分编辑器。



提示：在填写“值（标准样）”列下标准样组份的含量时，将“组份编辑器”界面与“修改样品”界面相比较，在“值（标准样）”下光标所在列的含量即为“修改样品”界面中显黑的标准样品的含量。

- 修改完毕后，选择菜单“文件-保存”。



8. 单击“文件-退出”，然后关闭窗口。



此时所有的样品变成红色，提示进行了修改。

提示：如果需要继续修改样品信息，则必须关闭窗口后，再次进入“改变样品”对话框。

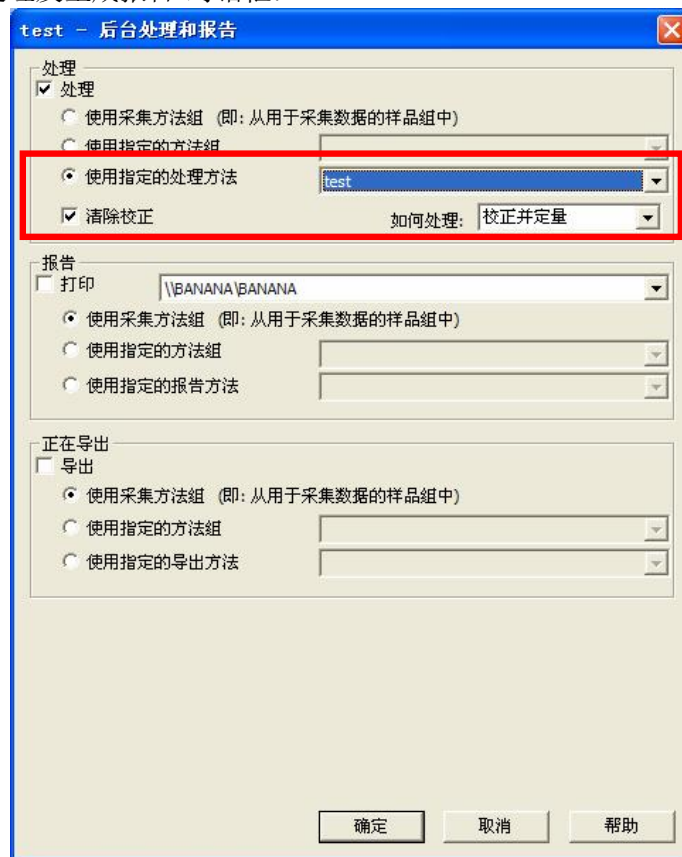
9. 回到通道选项卡，选择“菜单-更新”或者单击 “更新”键，更新通道表单，完成修改样品的操作。

### (三) 定量计算

1. 回到“通道”选项卡，选中要处理的全部样品，（注意先选择标样，再选择未知样。）然后单击 “处理”。



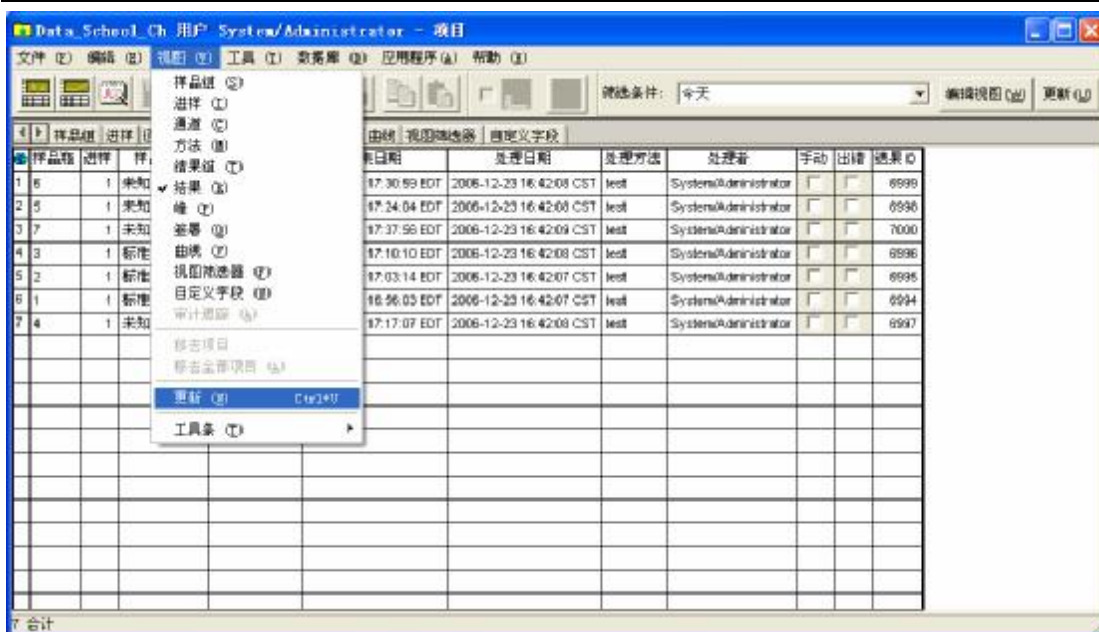
2. 出现“后台处理及生成报告”对话框：



3. 在“处理”中，选“使用指定的处理方法”，并在下拉菜单中选择刚才利用向导建立的处理方法。在“清除校正”方框中打勾，并使“打印”和“导出”方框中为空。单击“确定”。

4. 选中“结果”选项卡 **样品组 进样 通道 方法 结果组 结果 签署 曲线**。

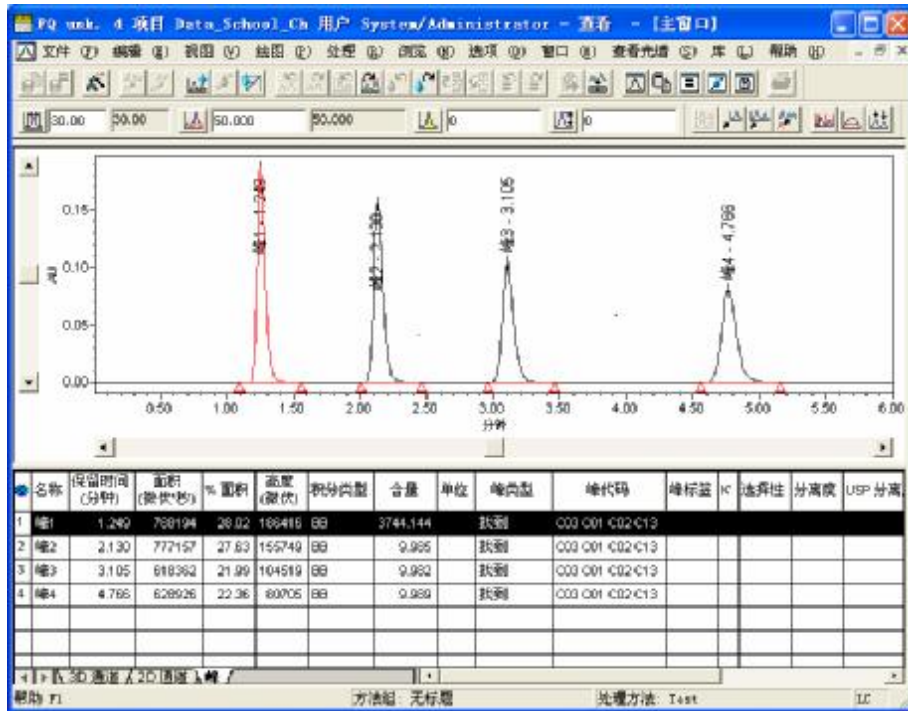
选择菜单“视图—更新”或者单击 **更新(U)** “更新”键更新结果。



5. 选中欲浏览的结果，单击 (查看)，出现查看主窗口。



6. 在打开的“查看”窗口中可以浏览色谱图和“峰”结果表，查看计算的“含量”结果。



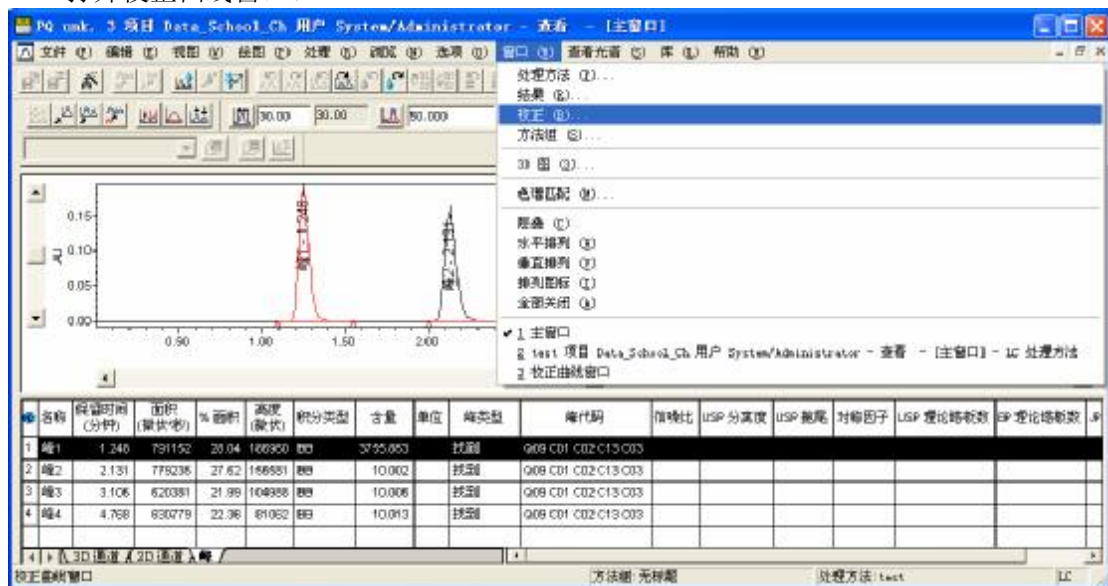
提示：如果此时出现的是校正曲线或者其它窗口，单击 回到主窗口。

提示：可以选择‘窗口 - 2 结果窗口’（或者‘使用快捷图标 ’）浏览计算结果、样品信息和标准曲线方程；选择‘窗口 - 3 处理方法’（或者使用快捷图标 ）浏览用于计算的处理方法；选择‘窗口 - 4 标准校正曲线窗口’（或者使用快捷图标 ）浏览校正曲线及其方程。

提示：如果在“项目”窗口结果表中选中了多个样品来查看结果，则选择菜单栏下“浏览 - 前一个2D通道”或“下一个2D通道”（或者在查看窗口中使用快捷图标

）等命令来浏览不同样品的计算结果。

7. 例如查看校正曲线：选择菜单栏下“窗口—校正”或者单击工作栏中的 （校正曲线），打开校正曲线窗口。



8. 窗口的上部为曲线的方程、回归系数等内容。可通过“组分”下拉菜单查看不同组分的相



关信息。

PQ unk. 4 项目 Data\_School\_Ch 用户 System/Administrator - 查看 - [校正曲线窗口]

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 绘图(D) 处理(R) 浏览(N) 选项(O) 窗口(W) 帮助(H)

方法 Test 日期/时间 2006-10-5 16:09:53 CST

系统 Alliance 通道 486

组份 **峰1** 时间(分) 1.249

方程  $Y = 2.09e+002 X + 6.28e+003$

R<sup>2</sup> 1.000000 R 1.000000 标准误差 0.000000e+000

RSS 0.000000e+000 RSD 46.641558 加权 无

代码

级别	X 值	响应	计算值	% 偏差	手工点	忽略	结果 ID	通道 ID	
1	2	1875.000000	397849.750000	1875.000000	0.000	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6105	6047
2	3	3750.000000	769417.000000	3750.000000	0.000	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6106	6050

校正 /

帮助 F1 方法组: 无标题 处理方法: Test LC

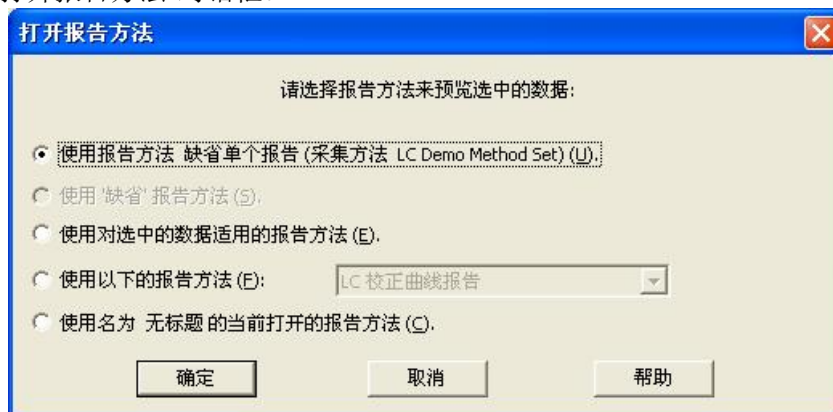
## 四. 数据报告的打印

- 单击Empower软件的Pro界面的“浏览项目”，选择所要打印数据所在的项目后，单击“确定”，进入项目浏览画面。
- 在“结果”选项卡 **样品组 进样 通道 方法 结果组 结果 签署 曲线** 中选择欲打印的结果，选择菜单“工具—预览”。

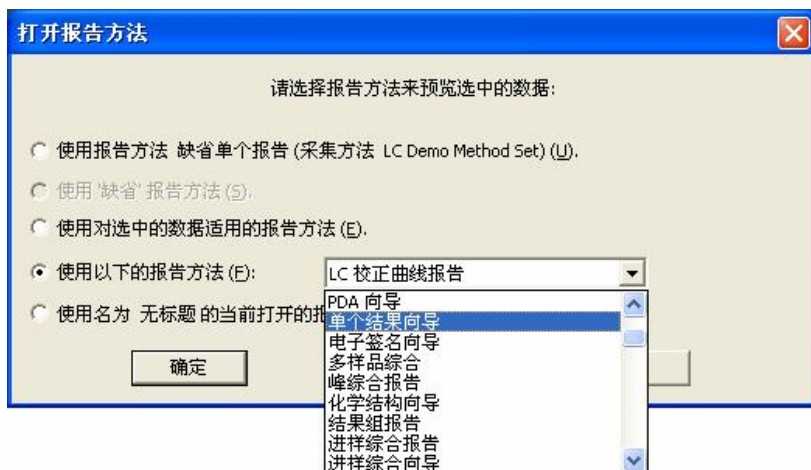


提示：如果在非“结果”选项卡（例如通道）中单击预览出版，则无法查看到积分结果。


- 出现“打开报告方法”对话框。

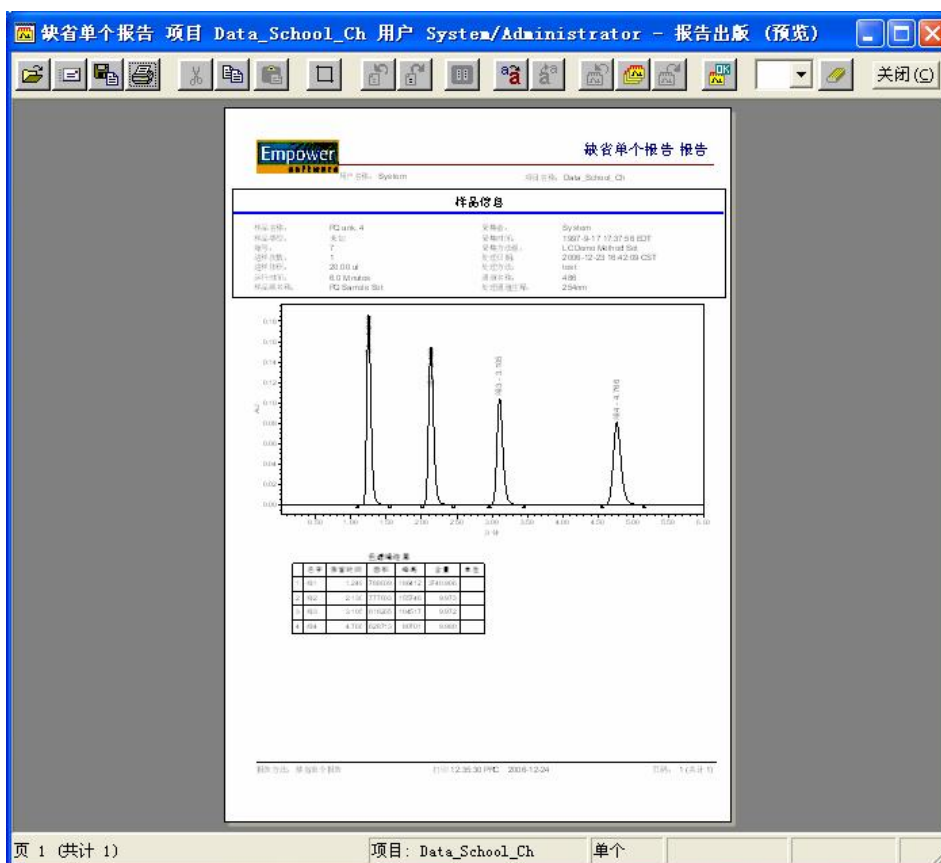



- 选择“使用对选中的数据适用的报告方法”，或者在“使用以下的报告方法”下拉菜单中选择适当的报告方法，然后单击“确定”。  
如果在采集方法组中，已经指定了合适的报告方法，也可选择第一项来自于采集方法的“使用报告方法XXXXXXXX”。

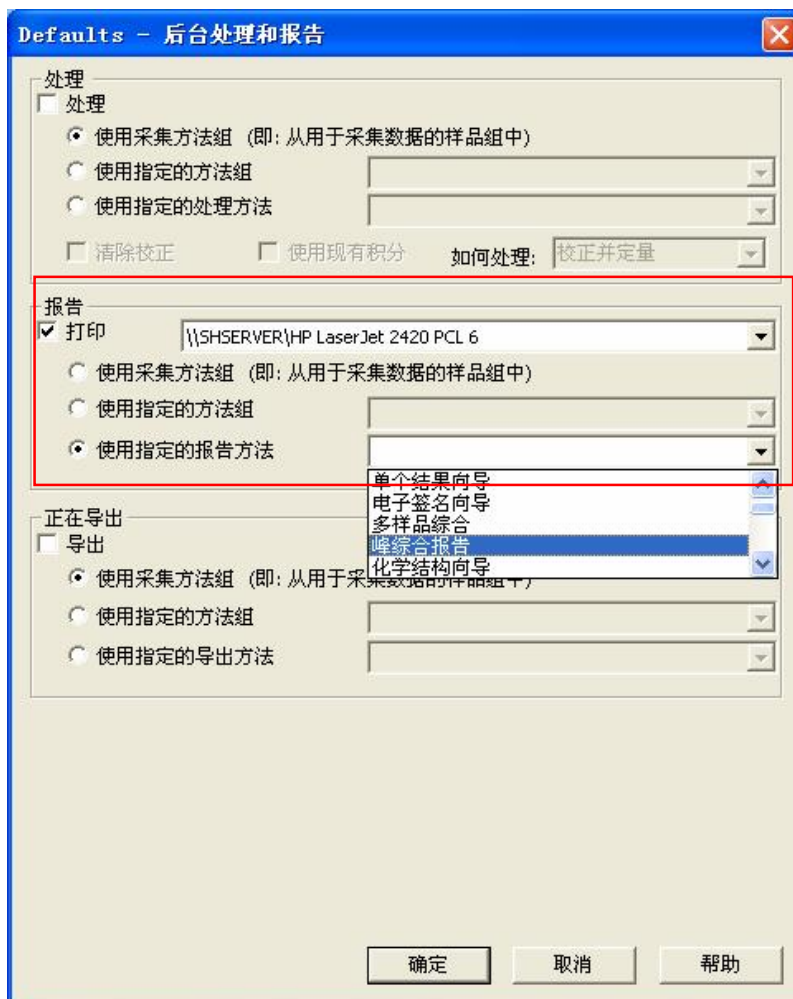


此时若选择“峰综合报告”格式，可计算峰面积/保留时间的重现性等统计信息。如果只需要峰面积等信息，则可选择“单个结果向导”。

5. 在屏幕上即出现报告预览窗口。
6. 如预览后无误，选择菜单“文件—打印”，或者单击（打印），打印报告。



7. 关闭窗口。
8. 如果想批处理打印结果，可以在导航条中，选择浏览项目后，在“结果”选项卡 **样品组 进样 通道 方法 结果组 结果 签署 曲线**，用“键盘Ctrl + 鼠标左键”选中要出报告的样品，单击（打印）在随后出现的“后台处理及生成报告”页面中（见下图），确认“打印”方框中打勾，“处理”和“导出”方框中为空。选中‘使用指定的报告方法’，在其下拉菜单中选择所需的报告方法，点击‘确定’即可。



提示：在“报告出版”窗口中，用户可以自己编辑个性化的报告格式，保存后即可成为新的报告方法，有关编辑报告方法的内容请参照相关的帮助文件多加练习。

# 系统管理

## 一. 系统配置

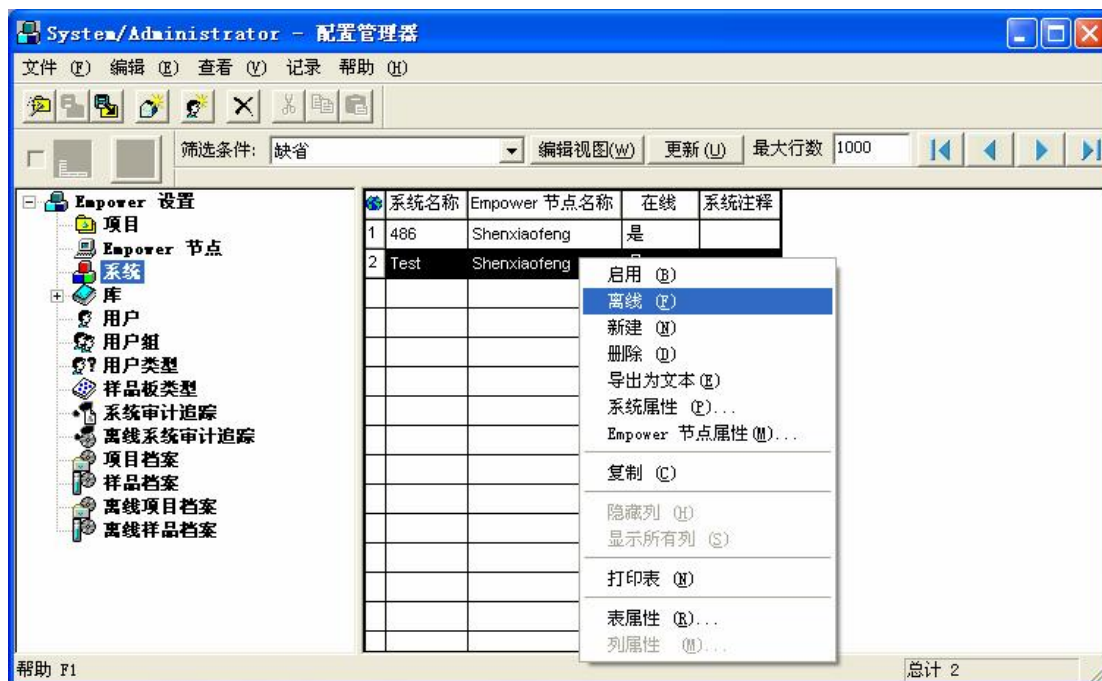
### (一) 查看色谱系统

1. 进入到Empower 2 的Pro 界面，双击“配置系统”窗口。



2. 选择系统，并在右面对应的表格中可以查看所有的色谱系统。
3. 如果建立有多个系统，可以通过选中某个系统后，单击鼠标右键，然后选择“启用”或者“离线”，以确定当前在线的色谱系统。

对于仅购买了单系统许可的，而同时又建立了多个色谱系统的用户，可能需要通过此种方式选择欲使用的色谱系统。



### (二) 色谱系统管理

创建的色谱系统起到软件与仪器间接口的作用，可以从 Empower 控制和采集数据。

色谱系统由通过 Empower 配置的一个或多个仪器组成。各仪器的控制协议是 IEEE-488（通过 Waters busLACE/E 卡连接）、串行（通过 Waters busLAC/E 卡、PC 通讯端口或 8 口串行卡连接）或 Ethernet（通过 PC 网络接口卡 (NIC) 连接）。

创建色谱系统的过程会根据涉及的仪器和控制接口的类型不同而有所差异。

## 1. 仪器硬件连接

在根据您的需要配置色谱系统前，确保仪器已进行如下设置：

- 连接到 Waters busLAC/E 卡、8 口串行卡、NIC、网络交换机或通讯端口。有关详细信息，请参阅 Empower 帮助“连接到仪器”主题或相应的仪器操作员手册。

**注意：**连接仪器时，请确定使用的硬件项目要与 Empower 仪器控制兼容。Waters 提供与 Empower 配合使用的电缆、接头和接口卡。

- 以唯一的仪器地址标识（有关设置仪器地址的说明，参阅相应的仪器操作员指南）。
- 仪器已通电，且校正和诊断例程成功运行完毕。

**限制：**您的系统许可决定了同时可以有多少个系统在线。对于 Empower 工作站，最多可有 4 个系统在线。对于 BusLAC/E 系统，还需要一个多系统 busLAC/E 卡。

## 2. 创建或连接到新的色谱系统

- 在系统配置界面，选择菜单“新建-新建系统”。



- 出现“新建色谱系统向导-输入类型”页面，选择系统类型为“新建系统”。然后单击“下一步”。



- c. 出现“新建色谱系统向导-选择系统”页面，在“可用仪器”组中，选中新系统的组件，然后用鼠标拖拽至右侧“新系统仪器”组中。选择完毕，单击“下一步”。如有误选，则如法，将误选的新系统仪器，用鼠标拖拽回“可用仪器”组中。



提示：可重复使用已配置系统中的仪器，但一次只能有一个使用共享仪器的系统可以在线。

- d. 出现“新建色谱系统向导-访问控制”页面。



提示：您创建系统时，您即为系统的所有者。系统创建后，可以修改系统的属性及更改所有者、访问权限和配置等详细信息。

### 3. 删除色谱系统

- a. 在系统配置界面，单击“系统”。
- b. 在“系统”表中，右键单击要删除系统的行号，然后在菜单中选择“编辑—删除”，或者右键选择某系统后，单击“删除”。

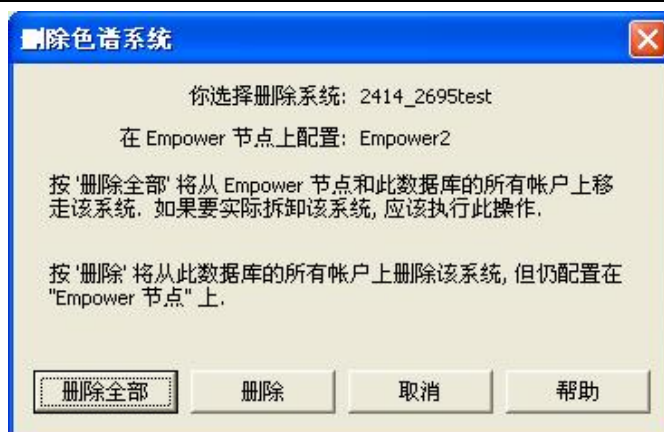


- c. 出现“确认删除”提示框，单击“是”。



- d. 再次出现“删除色谱系统”提示框，此时需要选择“删除全部”。





- 删除全部– 从 Empower 数据库、Empower 节点和 Empower 数据库上的所有用户帐号中删除选定色谱系统。当不再配置实际系统时，请使用此选项。
- 删除– 从此数据库上的所有用户帐号中删除选定色谱系统，但保留采集服务器上配置的系统。Empower 节点继续运行该系统，可于稍后重新与其连接。当您不再需要该系统但其他用户仍需要它时，请使用此选项。
- e. 如果出现如下对话框，请单击“确定”。待仪器空闲后，即可通过前述步骤，将系统删除。



**规则：**不能删除 MS 系统。即使该系统不再出现在列表中，它仍会出现在“仪器”选项卡中。物理连接到 Empower 节点的所有仪器将出现在该节点的仪器列表中。

**提示：**当应用程序不再需要色谱系统或 Empower 节点上不再配置实际系统时，请务必删除该色谱系统。

**注意：**删除色谱系统前，以确定要删除的系统是否正在使用。否则，可能会导致数据丢失。

## 二. 数据管理

### (一) 项目的备份

当您出于安全保护原因想要保留项目的复制本，或者为释放磁盘空间而想要删除项目时，请创建一份项目备份。 可以将当前项目备份到另一个介质（磁带、CD 或 DVD）中、硬盘驱动器上的另一个文件夹中或当前项目目录中（如果可用）。

提示：库和光谱不随项目一起备份。

1. 在配置系统界面，切换到项目视图。
2. 选择菜单“文件-备份项目”。



3. 出现“项目备份向导”，单击下一步。



4. 出现“项目备份向导-选择目的地”



通过浏览选择目的地。建议选择在非操作系统安装的硬盘分区内。



一旦选择完成，单击“确定”关闭后，回到项目备份窗口，单击“下一步”。

5. 出现“项目备份向导-备份显示”。



确认数据的复制已经成功，再单击“下一步”。

6. 出现备份数据向导-开始画面。



提示: 在卸载或重装Empower软件之前, 请确认已经将相关的项目数据进行了正确的备份操作, 以确保数据的安全与完整。

建议进行周期性的有目的的项目备份来保证数据的安全性。

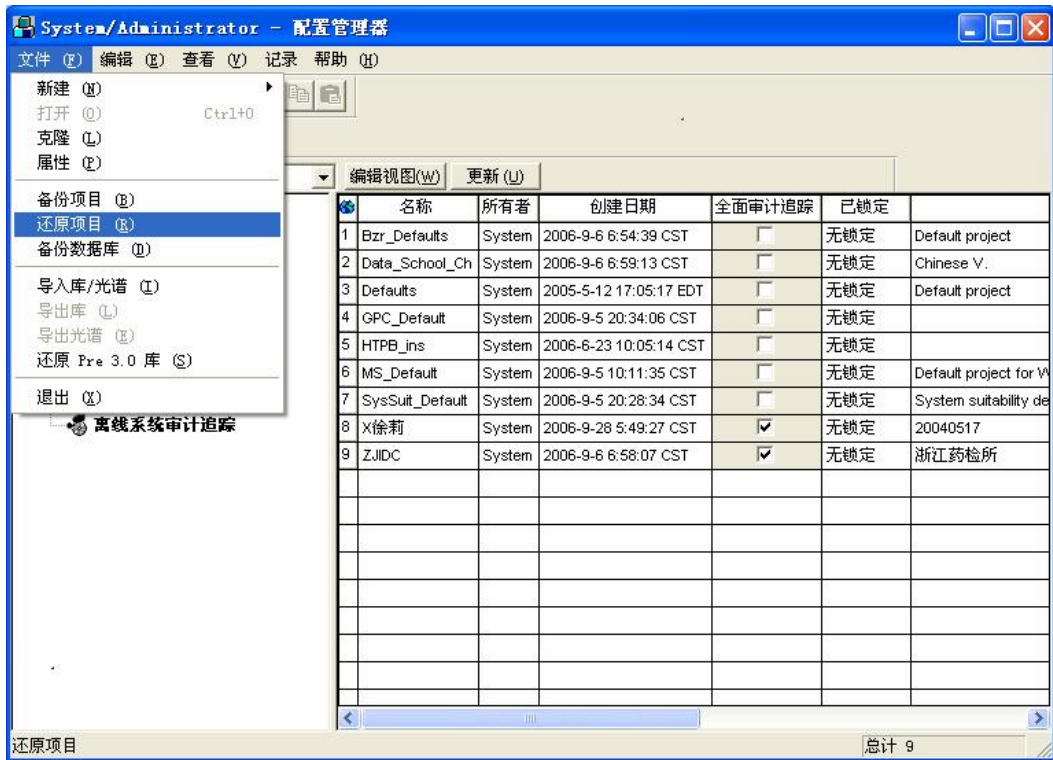
备份具有子项目的项目时, 会出现一条消息, 询问是否也要备份子项目。如果备份了子项目, 则项目层次结构将保持原样。需要具有子项目的相应访问权限。

尽管可以选择将项目备份至原始数据文件所在的当前目录, 但建议不要这样做。如果使用的是 Empower Enterprise 版中的远程备份设备, 则可以指示 Empower 将项目文件复制到该网络。然后, 系统管理员可从该网络驱动器备份这些文件。在此种情况下, 无需单击“启动备份软件”。

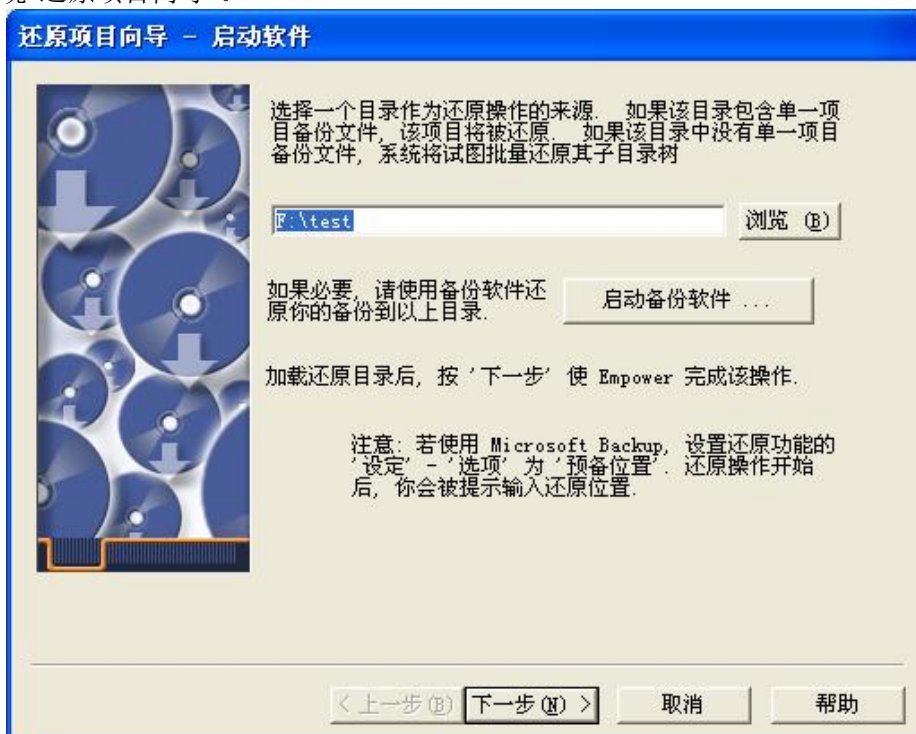
如果将项目备份至硬盘驱动器, 还应考虑将数据存档至其它介质, 这样, 假如硬盘驱动器发生故障, 仍能够检索该数据。

## (二) 项目的还原

1. 在配置系统界面，选择菜单“文件—还原项目”。



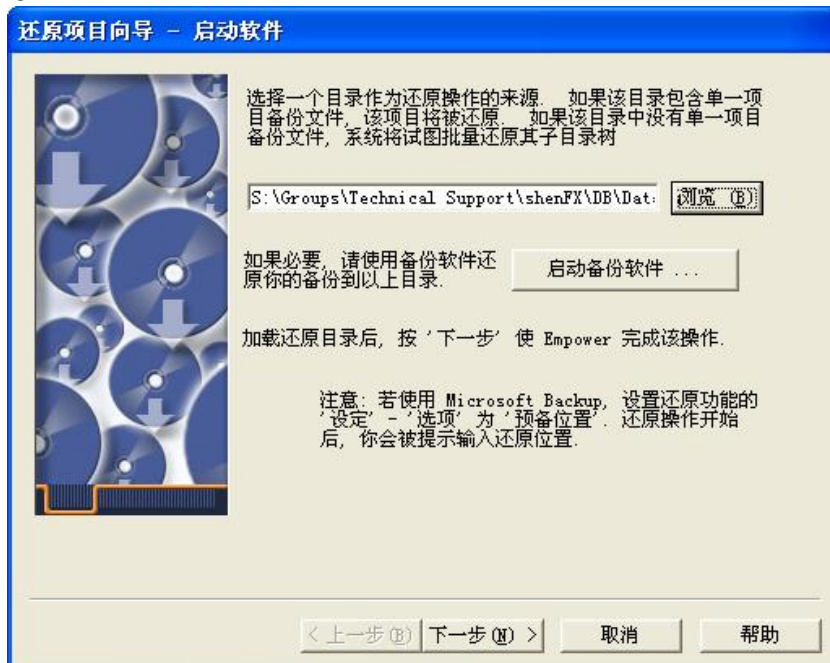
2. 出现“还原项目向导”。



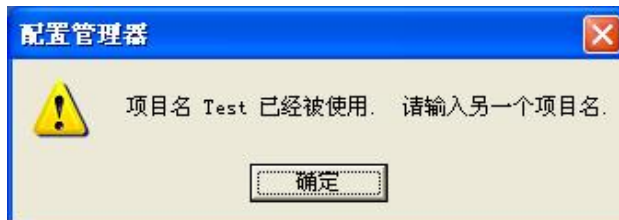
3. 通过“浏览”选择被还原的项目所在的路径，单击“确定”。



- 单击下一步。



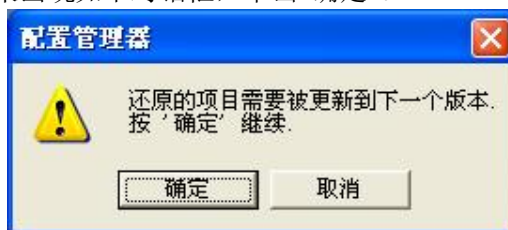
- 如出现类似以下内容的对话框，则需为还原的项目另起一个名字。



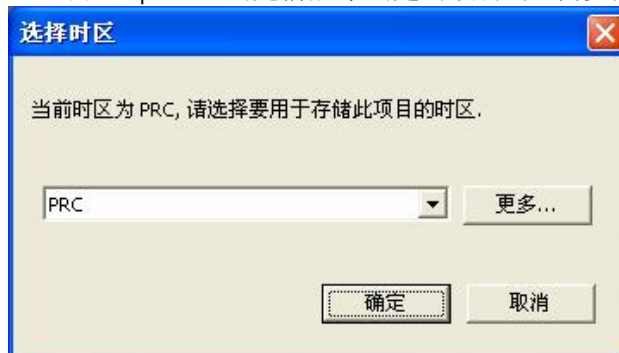
- 在“输入磁盘空间配额”页中，输入项目名，并注意此处的“表空间配额”应不得小于欲还原的项目原有的配额（数据文件大小），然后单击“下一步”。
- 如果需要，可以在此页面中，选择该项目是否属于某个父项目。



8. 在“还原显示”中，如果出现如下对话框，单击“确定”。

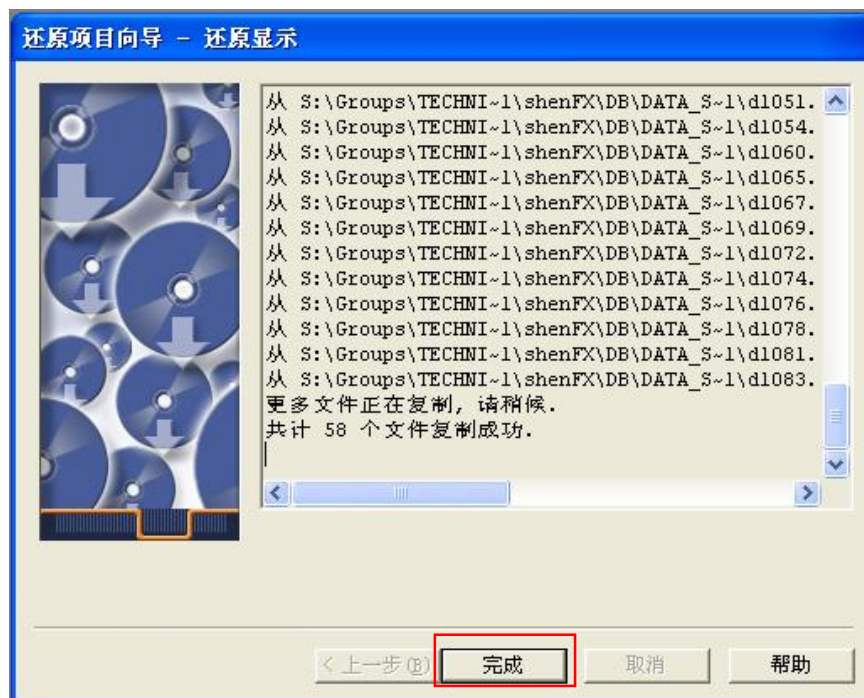


当还原由 Millennium 或 Empower 的先前版本创建的项目时，需要为该项目选择时区。



在选择时区的画面，如果是在中国大陆地区，建议选择“PRC”时区。然后单击“确定”。

9. 在“还原显示”中，等待数据还原结束后，单击“完成”。



10. 被还原的项目将出现在项目列表中。

提示：在重装Empower软件之后，可以通过还原项目将相关的项目数据进行复原。

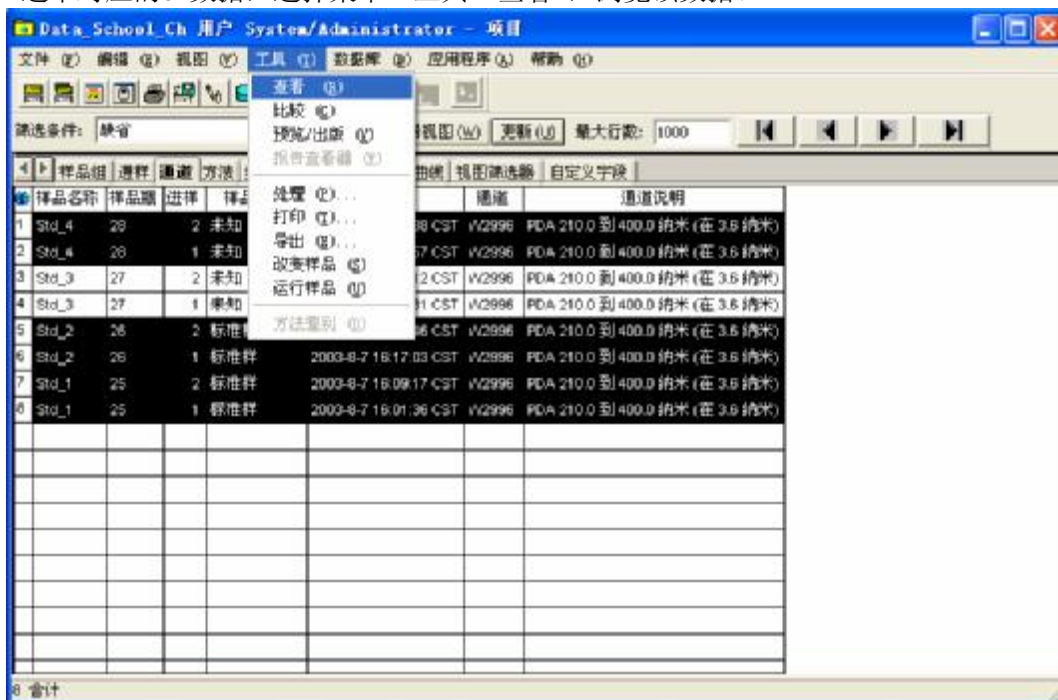


## 附录 3D数据的处理

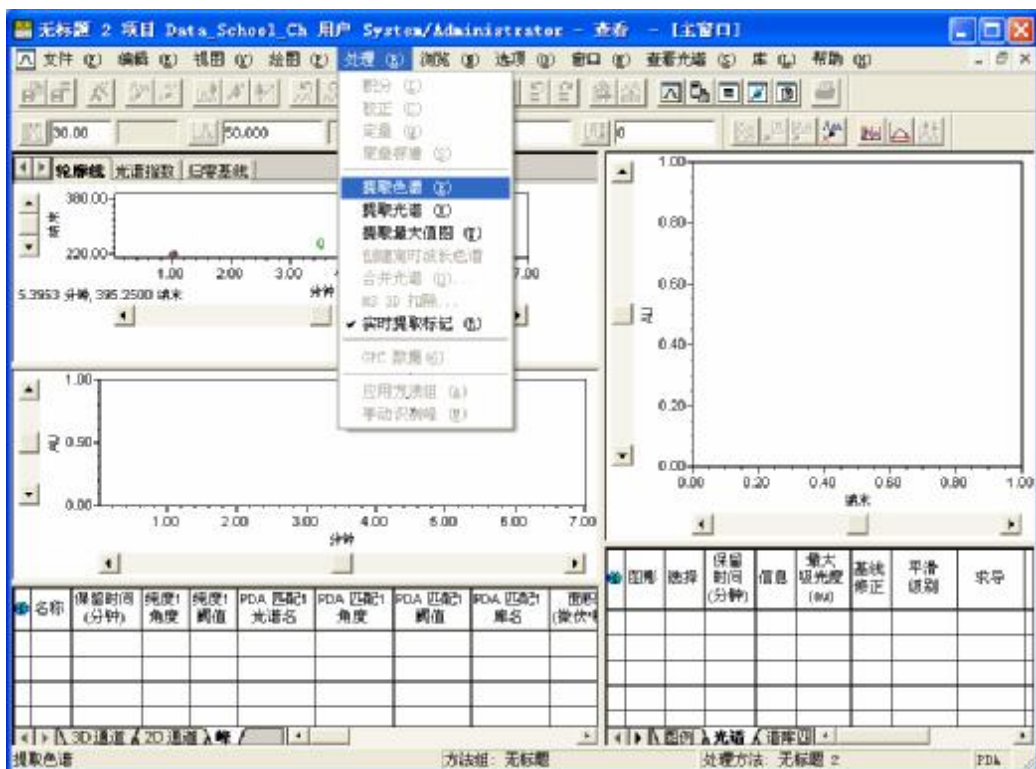
若要对已经采集好的三维 PDA 数据进行处理，其基本步骤与二维数据处理稍有不同。现简述如下：

### (一) 建立处理方法

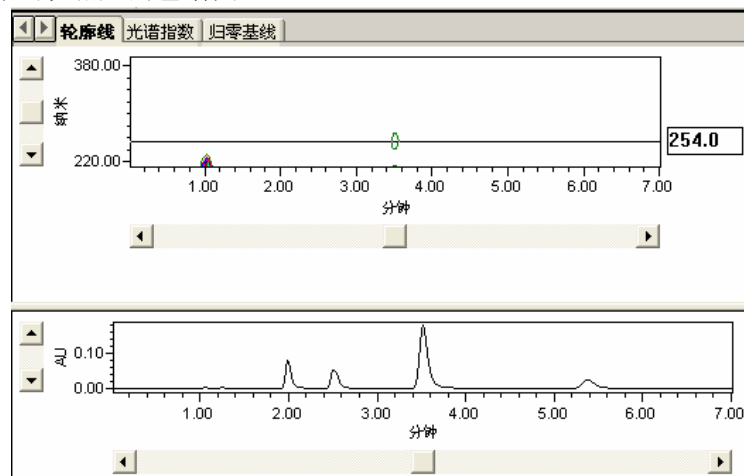
1. 通过Pro界面之“浏览项目”，选择相应的项目，单击确定打开之。
2. 通过单击选项卡上的 样品组 进样 通道 方法 结果组 结果 签署 曲线 “通道”，进入通道画面。
3. 选中对应的3D数据，选择菜单“工具—查看”，浏览该数据。



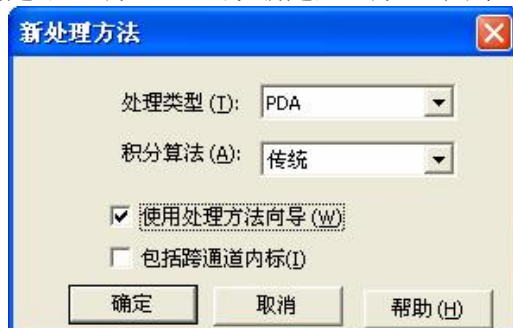
4. 从3D数据中提取2D色谱图：
  - a. 选择菜单“处理—提取色谱”或者单击 (提取色谱)，出现波长编辑框。



- b. 鼠标左键双击波长编辑框，根据需要设定提取色谱图的波长并回车确定。在色谱图显示区即出现相应的色谱图。



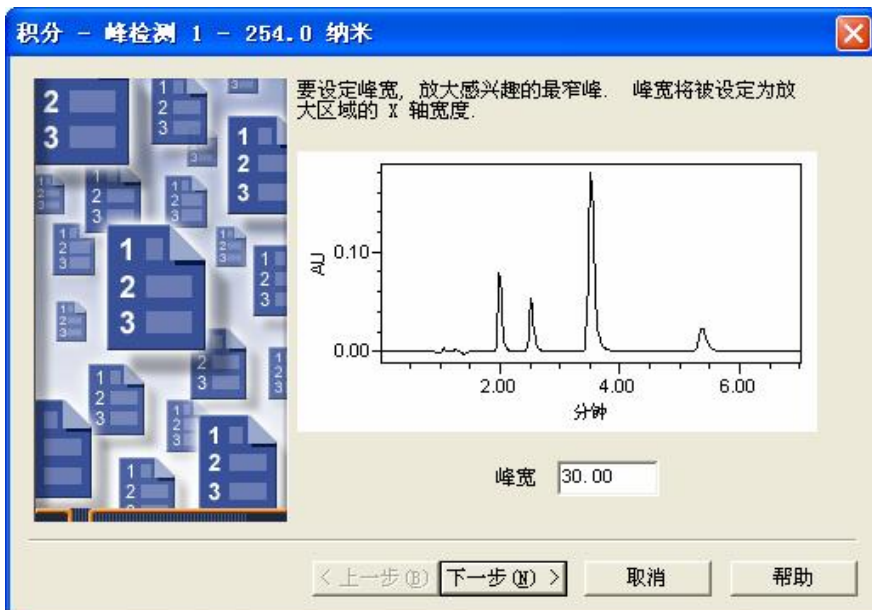
5. 单击菜单“文件-新建-处理方法”，出现新建处理方法对话框。



勾选“使用处理方法向导”，然后单击“确定”。

提示：对于PDA检测器的三维数据，务必选择处理类型为“PDA”。

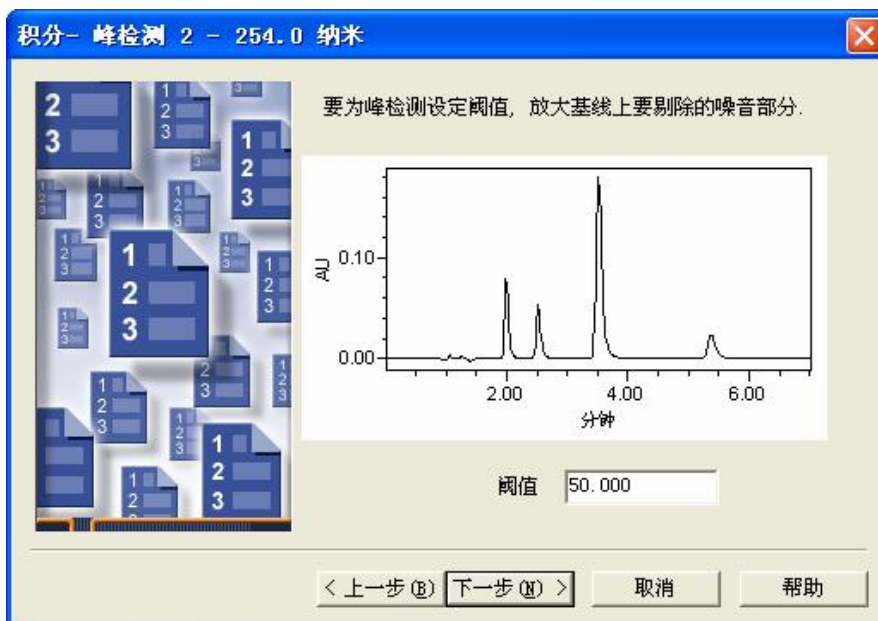
6. 出现“积分-峰检测1”画面，设定峰宽或者接受缺省值，单击“下一步”。



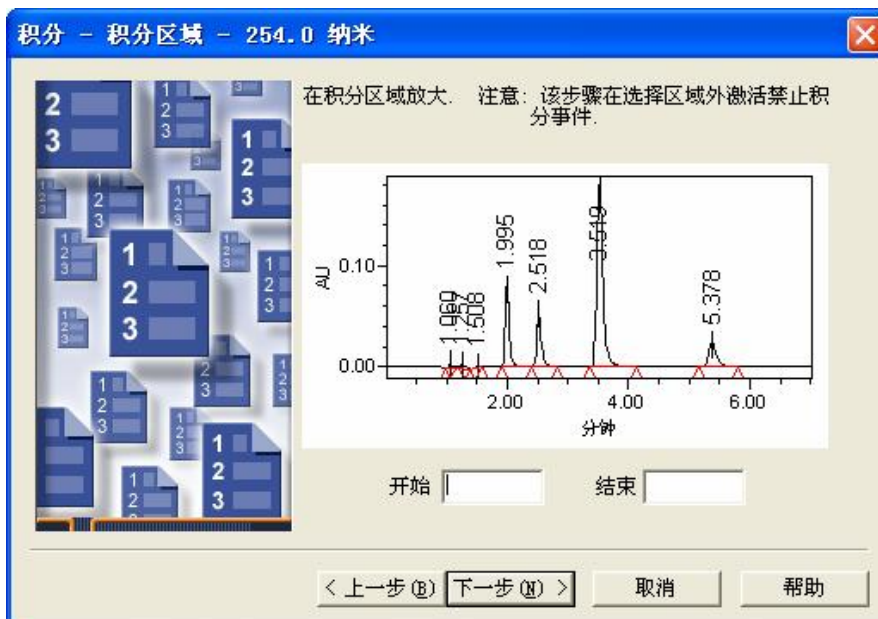
提示：在以下各步骤中，如无法确定适当的设置，请接受缺省值。

有关处理原理的详细信息，请参阅 [Empower 软件数据采集和处理原理指南](#)。

在“积分—峰检测2”中，设定积分阈值或者接受缺省值，单击“下一步”。

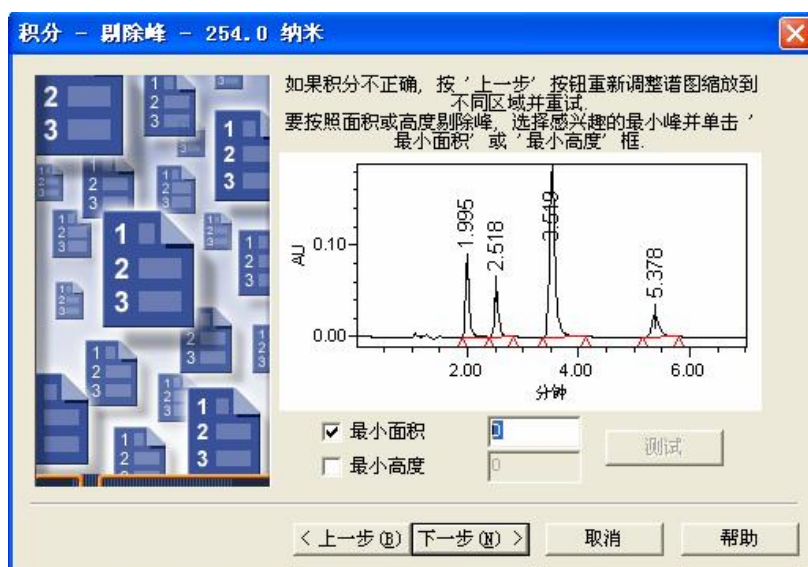


7. 在“积分—积分区域”中，直接输入保留时间或者用鼠标左键拖拽放大选定积分区域。单击“下一步”。



提示：如果对放大谱图后的参数不满意，可以点击鼠标右键，选择“全视图”或“不缩放”命令，再重新放大谱图。

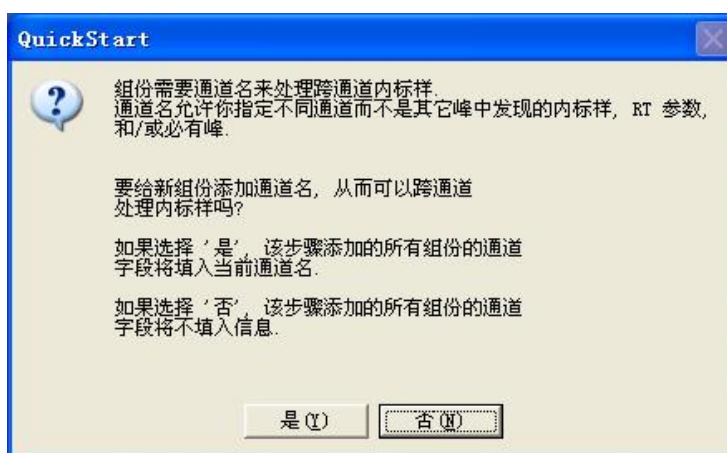
- 在“积分-峰剔除”中，根据需要设定最小面积和/或最小高度，或者不作任何改动。单击“下一步”。



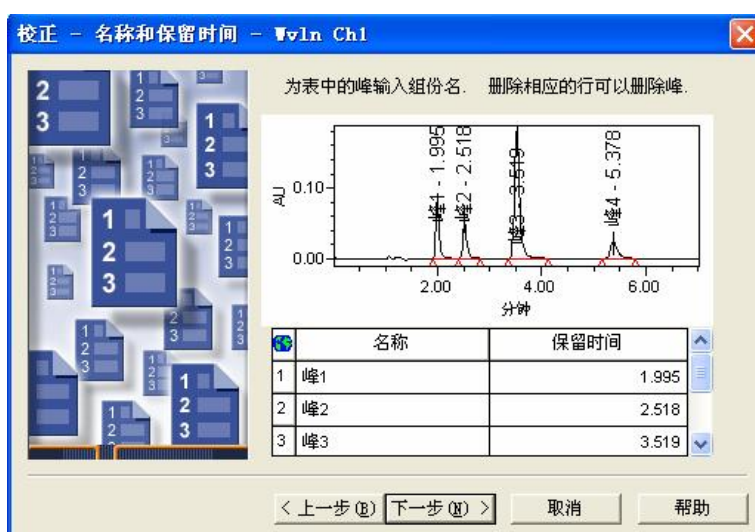
- “校正-普通”页中，除有特定要求外，接受缺省选项，单击“下一步”。



10. 出现如下对话框，选择“否”。



11. 在“校正—名称和保留时间”页中，在“名称”栏中，输入组分的名称，或不作改动，单击“下一步”。



12. “校正—内标样”页中，接受缺省选项（外标校正），单击“下一步”。

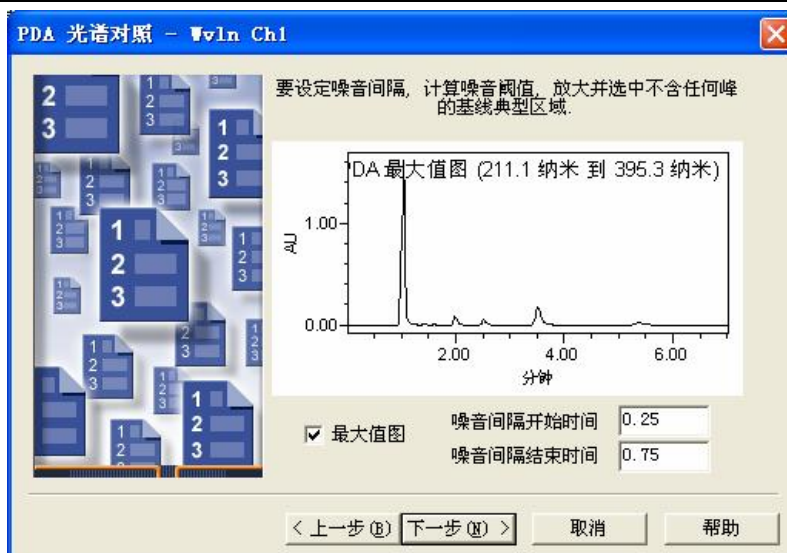


13. 出现如下对话框，



如果不需要对所有的峰进行峰纯度测试，则在相应的选项处选择“否”，并转至步骤 15。  
如果需要进行纯度测试，则在相应的选项处选择“是”。  
在光谱匹配选项处选择“否”，单击“下一步”。

14. 出现 PDA 光谱对照窗口。



在此窗口中，需要选择进行峰纯度测试需要的一段基线。可以通过拖拽鼠标左键选定，也可在噪音间隔开始以及结束时间的空格处填入具体的数值。

提示：请确认勾选了“最大值图”的选项，且选择的噪音开始与结束时间间隔不小于 0.5 分钟。

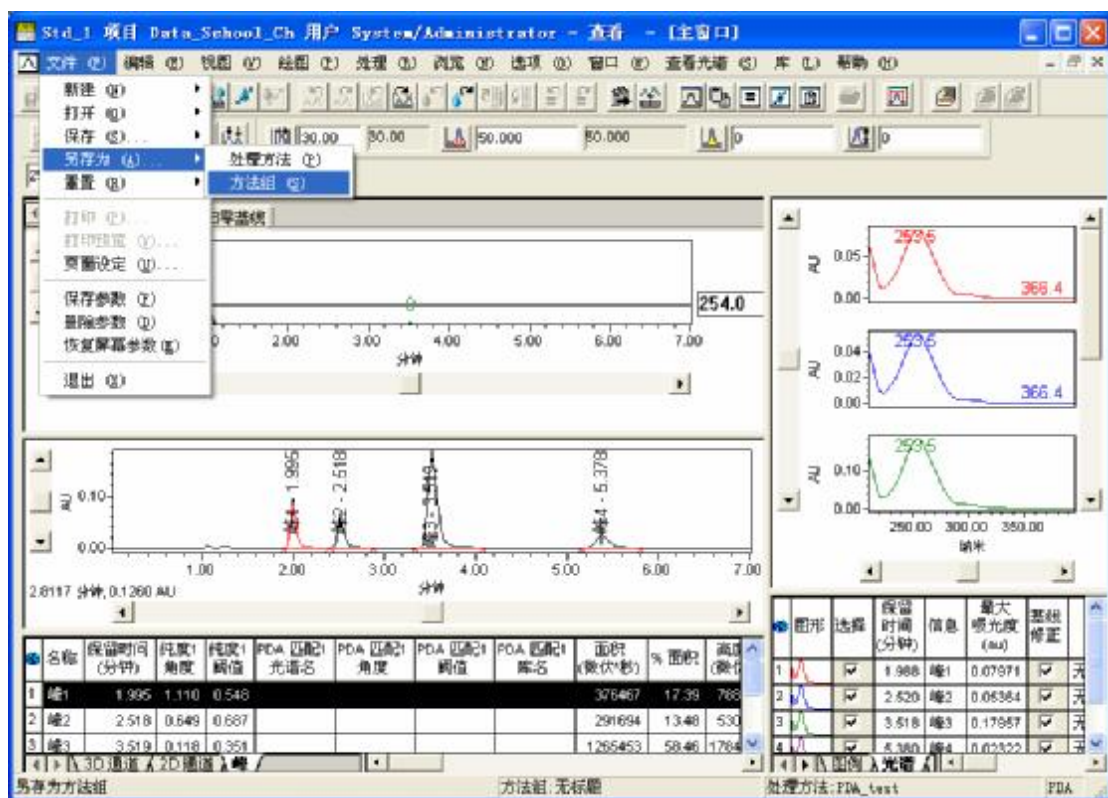
15. 出现处理方法名对话框



在“处理方法名”中输入方法名，然后单击“完成”结束处理方法向导。

16. 再次出现主窗口，下部的 **3D通道 / 2D通道 / 峰** “峰”表中出现积分结果，同时将组分名称及保留时间标记在色谱图上，并在状态条中显示新处理方法名称。

17. 单击菜单“文件—另存为—方法组”。



18. 出现对话框，输入方法组的名称，单击保存即可。



19. 单击“文件”－“保存－全部”。关闭窗口。

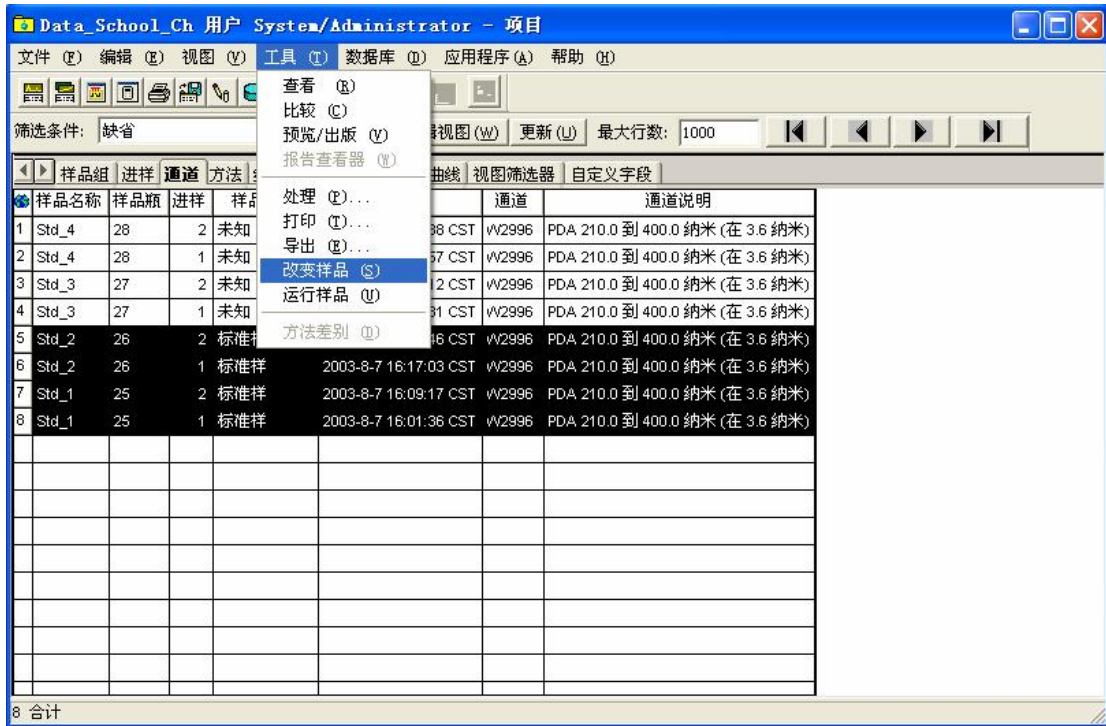
## (二) 修改样品信息

在创建校正曲线前，必须加载组份含量或浓度。

10. 如果没有在进样时，填写有关样品的信息，在此则需对样品信息进行修改。

在 **样品组** **进样** **通道** **方法** **结果组** **结果** **签署** **曲线** “通道”选项卡中，选中欲修改的标样，然后选择菜单“工具-改变样品”。





若数据的采集是以样品组进样的方式实现的，需要回到样品组选项卡中，选中相应的样品组，再进行修改样品信息的步骤，单击菜单“工具-改变样品”。



11. 若数据采集是以单针进样的方式实现的，则会直接出现“修改样品窗口”。

样品瓶	标签	功能	样品类型	样品名称	方法组 报告方
1	25	进标准样	标准样	Std_1	Int_Std
2	25	进标准样	标准样	Std_1_1	Int_Std
3	26	进标准样	标准样	Std_2	Int_Std
4	27	进标准样	未知	Std_3	Int_Std
5	28	进标准样	未知	Std_4	Int_Std

提示：在Empower进行处理时，只有标样能够生成校正曲线，然后才能对未知样进行定量计算。如果在进样时没有正确设置样品类型，可在此窗口直接进行修改。也可针对具体情况，修改样品名称、样品重量以及稀释倍数。

12. 单击菜单“编辑-含量”，出现组份编辑器。

样品瓶	标签	功能	样品类型	样品名称	方法组 报告方
1	25	进标准样	标准样	Std_1	Int_Std
2	25	进标准样	标准样	Std_1_1	Int_Std
3	26	进标准样	标准样	Std_2	Int_Std
4	27	进标准样	未知	Std_3	Int_Std
5	28	进标准样	未知	Std_4	Int_Std

组份编辑器


当前样品瓶 行: 2 样品瓶: 25 级别: 1 类型 标准样

组份	值 (标准样)	值 (标准样)	单位 (样品瓶)
1 峰1	20.000000		ug/ml
2 峰2	20.000000		ug/ml
3 峰3	20.000000		ug/ml

当前 \ 全部样品 /

上一个 (P) 下一个 (N) 确定 取消

注意：此处选择“全部样品”表单。

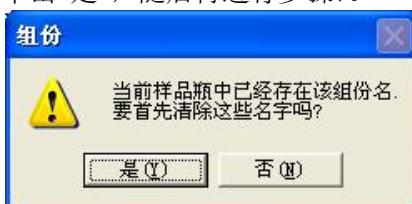
13. 在该选择菜单“编辑-从处理方法复制组份”或者单击图标。



14. 在“打开现有的处理方法”对话框中，选中指定的处理方法，单击“打开”。



如果出现以下对话框，则单击“是”，随后再进行步骤7。



15. 在“全部样品”表单中，针对对照品的每一组分，填写“数值”，必要时填写“单位”后，关闭组分编辑器。



提示：在填写“值（标准样）”列下标准样组份的含量时，将“组份编辑器”界面与“修改样品”界面相比较，在“值（标准样）”下光标所在列的含量即为“修改样品”界面中显黑的标准样品的含量。

16. 修改完毕后，选择菜单“文件-保存”。



17. 单击“文件-退出”，然后关闭窗口。




此时有的样品变成红色，提示进行了修改。

提示：如果需要继续修改样品信息，则必须关闭窗口后，再次进入“改变样品”对话框。

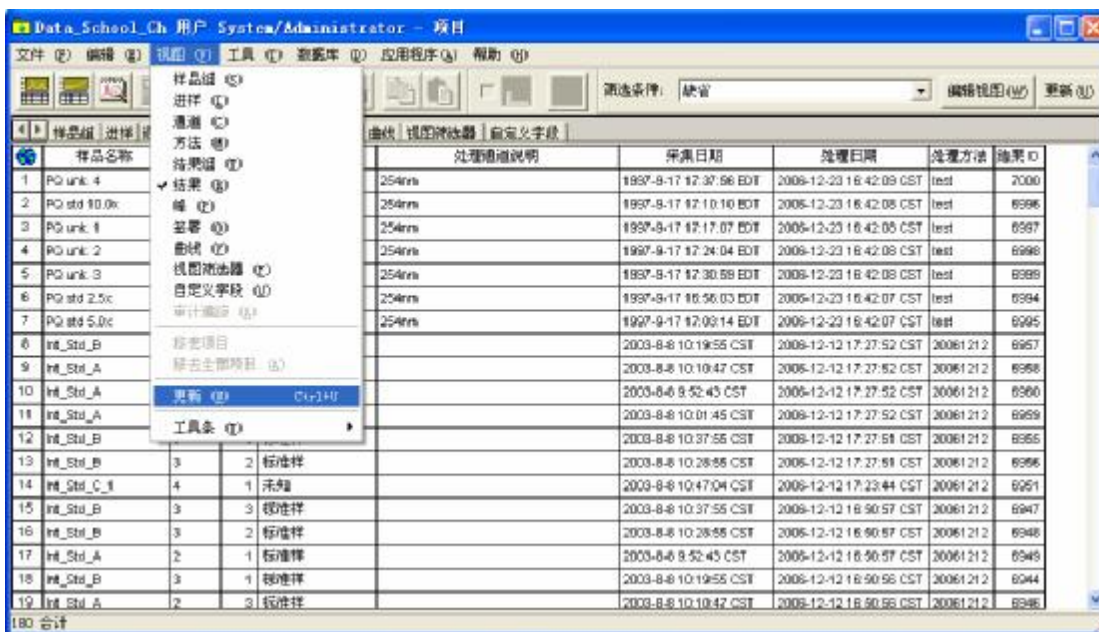
18. 回到通道选项卡，选择“菜单-更新”或者单击 “更新”键，更新通道表单，完成修改样品的操作。

### (三) 定量计算

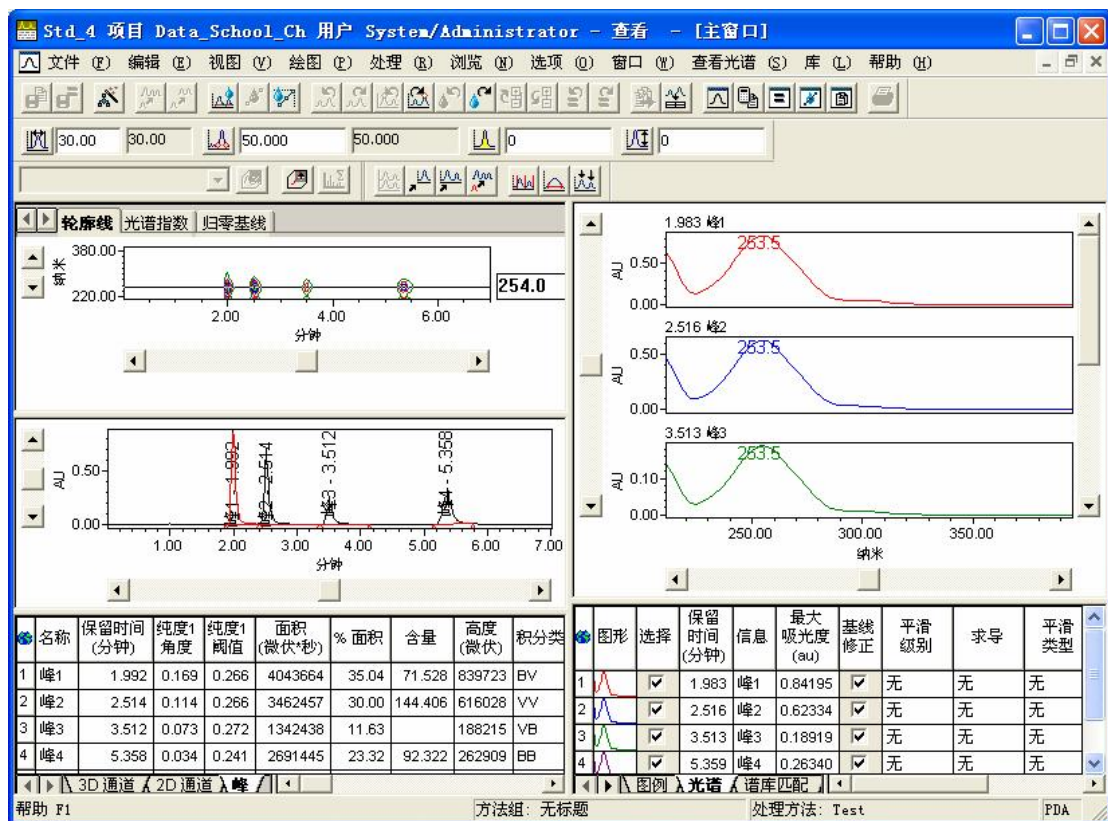
1. 回到“通道”选项卡，选中要处理的全部样品，（注意先选择标样，再选择未知样。）然后选择菜单“工具—处理”，或者单击“处理”快捷键。



2. 出现“后台处理及生成报告”对话框：



3. 选中欲浏览的结果，单击（查看），出现查看主窗口。



4. 在打开的“查看”窗口中可以浏览色谱图和“峰”结果表，查看计算的“含量”结果。

提示：如果此时出现的是校正曲线或者其它窗口，单击 回到主窗口。

提示：可以选择‘窗口 - 2 结果窗口（或者使用快捷图标 ）浏览计算结果、样品信息和标准曲线方程；选择‘窗口 - 3 处理方法’（或者使用快捷图标 ）浏览用于计算的处理方法；选择‘窗口 - 4 标准校正曲线窗口’（或者使用快捷图标 ）浏览校正曲线及其方程。

提示：如果在“项目”窗口结果表单中选中了多个样品来查看结果，则选择菜单栏下“浏览 - 前一个2D通道”或“下一个2D通道”（或者在查看窗口中使用快捷图标

）等命令来浏览不同样品的计算结果。

- 例：查看校正曲线：选择菜单栏下“窗口—校正”或者单击工作栏中的 （校正曲线），打开校正曲线窗口。
- 窗口的上部为曲线的方程、回归系数等内容。可通过“组分”下拉菜单查看不同组分的相关信息。

Std\_4 项目 Data\_School\_Ch 用户 System/Administrator - 查看 - [校正曲线窗口]

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 绘图(P) 处理(B) 浏览(O) 选项(O) 窗口(W) 帮助(H)

方法: Test 日期/时间: 2006-10-9 10:33:10 CST  
 系统: 2695\_2996 通道: 254.0 纳米  
 组份: 峰4 时间(分): 5.378  
 方程:  $Y = 3.95e+004 X - 9.54e+005$

R<sup>2</sup>: 0.999964 R: 0.999982 标准误差: 1.675167e+003  
 RSS: 5.612370e+006 RSD: 53.260548 加权: 无

代码: 0.001261

校正

级别	X 值	响应	计算值	% 偏差	手工点	忽略	结果 ID	通道 ID
1 1	30.000000	230017.340259	29.985030	-0.050	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6166	1288
2 1	30.000000	231199.515707	30.014970	0.050	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6167	1292
3 2	40.000000	623897.742654	39.960304	-0.099	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6168	1295
4 2	40.000000	627032.579211	40.039696	0.099	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6169	1297

单个点 / 平均点 /

方法组: 无标题 处理方法: Test FDA