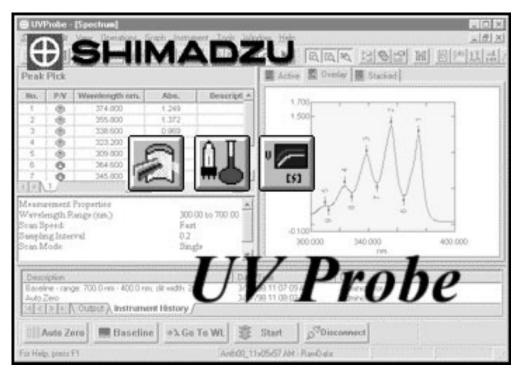


UVProbe

教 程

请仔细阅读本说明书,正确使用本产品。 请妥善保管本说明书以备随时查阅。





关于光谱模块,光度测定模块,动力学模块以及报告生成器模块教程。

重要事项

- 如果用户或使用场所发生改变,请将本说明书转交给后续用户。
- 如果本说明书或本产品警告标签丢失或损坏,请立即与您所在区域内的岛津分公司联系。

声明

- 本说明书内容如有改动恕不另行通知。
- 本说明书内容力求准确,如有错误或遗漏敬请谅解。
- 本说明书版权归株式会社岛津制作所所有。未经本公司许可不得转载、复制部分或全部内容。
- Microsoft[®] 和 Windows[®] 是美国 Microsoft Corporation 在美国及其他国家的注册商标。在本说明书中记载的其他公司名及产品名是各公司的商标及注册商标。此外,本说明书中不对 TM、®标记做明确说明。

©2008-2014 Shimadzu Corporation. All rights reserved.

本说明书是英文版《[UVProbe] 教程》(206-94459)(修订版 L 2014 年 7 月)的译文。

UVProbe 教程

保修

本产品的保修内容如下:

1. 保修期

请咨询您所在区域内的岛津分公司。

2. 保修内容

对保修期内因本公司原因造成的故障将免费维修或免费更换零部件。但 对计算机及其外围设备、零部件等短寿命产品可能无法提供同一型号的 产品。

3. 责任范围

- (1) 任何情况下本公司均不对用户的误工费、间接性损害和衍生性损害 负任何责任。也不对因第三方向用户提起的损坏赔偿负任何责任。
- (2) 任何情况下本产品的最高赔偿金额均以出厂价格或销售价格为限。

4. 责任免除

- 下列故障不属于保修范围:
- 操作不当。 1)
- 2) 非本公司或本公司指定的其他公司对本产品进行的维修或改装。
- 3) 与非本公司指定的硬件或软件一起使用。
- 因计算机病毒造成的本产品故障和包括基本软件在内的软件及数 据损坏。
- 因停电或电压突然降低等电源故障引发的故障和包括基本软件在 5) 内的软件及数据损坏。
- 错误关机造成的故障和包括基本软件在内的软件及数据损坏。 6)
- 非产品本身原因造成的故障。 7)
- 因在高温高湿、腐蚀性气体或震动等恶劣环境中使用本产品而造成 的故障。
- 因火灾、地震、其他自然灾害、放射性物质和有害物质的污染,以 9) 及战争、暴乱和犯罪等不可抗拒事故造成的故障。
- 10) 安装后自行移动或运输产品时造成的故障。
- 11) 消耗品或等同于消耗品的零部件。

注意: 软盘和 CD-ROM 等记录介质也属于消耗品。

如果产品附带保修单或单独签署了包括保修事项在内的合同,则应遵守该文件记载的保修内容。

目录

第一章	绪论		
1.1	UVPro	be 简介	1-2
1.2		书	
1.3		· be 安装要求	
	1.3.1	最小软件要求	
	1.3.2	安装 UVProbe	
	1.3.3	第一步 - 安装 Shimadzu 用户认证工具	
	1.3.4	第二步 - 安装 UVProbe	
	1.3.5	第三步 - USB 虚拟串口驱动程序的安装	
	1.3.6	升级 (更新) USB 虚拟串口驱动程序	
	1.3.7	卸载 UVProbe	
1.4		式	
1.5		VProbe	
1.6		VProbe	
1.7		be- 基本界面	
• • •	1.7.1	输出窗口	
	1.7.2	仪器栏	
	1.7.3	光度计状态栏	
	1.7.4	标准工具栏	
1.8		理	
1.0	1.8.1		
	1.8.2	权限	
	1.8.3	添加组	
	1.8.4	赋予组权限	
	1.8.5	除去组	
	1.8.6		
	1.8.7	编辑用户	
	1.8.8	激活 / 停用用户	
	1.8.9	改变密码	
1.9		块	
	1.9.1	模块之间的面板的区别	
	1.9.2	专用菜单和工具栏	
1.10	UVPro	be 功能	
		与分光光度计的通讯	
		快捷菜单和属性页	
		图象方式	
		文件、储元和数据集	
		内部数据处理的精确度	
		点灯时间:显示及重置功能	
1.11		mm	
		第一部分 - 光谱模块	
		第二部分 - 光度测定模块	
		第三部分 - 动力学模块	
		第四部分 - 报告生成器	
第二章	光谱	莫块 第一课	
2.1		口	2-2
		具栏	
2.3		- 基本测定	
		第一步 - 建立数据采集方法	
		第二步 - 存储数据采集方法	
		第三步 - 执行基线校正	
	2.3.4	第四步 - 采集数据	2-6

	2.3.5	第五步 - 存储数据	2-8
2.4	练习二	- 基本光谱操作	2-9
	2.4.1	第一步 - 调节峰值检测表的参数	2-9
	2.4.2	第二步-建立峰面积表	2-14
	2.4.3	第三步 - 处理峰面积表和图象	2-15
	2.4.4	第四步 - 建立新的区域	2-16
	2.4.5	处理数据集	2-17
2.5	练习三	- 高级技巧	
		<第一部分 - 通过池定位装置采集数据 >	2-19
	2.5.1	第一步 - 加载和修改存储在磁盘中的数据采集方法	2-20
	2.5.2	第二步 - 配置定位装置	2-21
	2.5.3	第三步 - 从内存除去数据	2-21
	2.5.4	第四步 - 采集数据	
		< 第二部分 - 使用 UVProbe 和视窗软件的写字板 >	2-23
	2.5.5	第一步 - 复制和粘贴一个位图到写字板	2-23
	2.5.6	第二步 - 复制和粘贴表格到写字板	2-24
第三章	光度》	则定模块 第二课	
3.1		定窗口	
3.2	光度测	定工具栏	3-3
3.3	设置和	编辑光度测定方法	3-4
3.4	练习一	基本测量	3-7
		<第一部分 - 建立标准曲线 >	3-7
	3.4.1	第一步 - 建立数据采集方法	3-7
	3.4.2	第二步 - 保存数据采集方法	
		<第二部分 - 测量标准样品 >	3-9
	3.4.3	第一步 - 输入文件信息	3-10
	3.4.4	第二步 - 填充标准表	3-10
	3.4.5	第三步 - 读取 标准样品	3-11
	3.4.6	第四步 - 查看 标准曲线	3-12
	3.4.7	第五步 - 保存标准表	
		<第三部分 - 读取未知样品 >	3-13
	3.4.8	第一步 - 建立 样品表	3-13
	3.4.9	第二步 - 读取 样品表	
	3.4.10	第三步 - 查看样品图象	3-15
	3.4.11	第四步 - 保存数据	
3.5	练习二	- 基本光度测定操作	
	3.5.1	第一步 - 使用 自动填充标准表	
	3.5.2	第二步 - 使用 重复功能填充标准表	
	3.5.3	第三步 - 使用不同的标准曲线 计算未知样品浓度	
	3.5.4	第四步 - 显示统计	
	3.5.5	第五步 执行 数据的倒数转换	
3.6	练习三	- 光度测量高级技巧	
		<第一部分 - 自定义方程式 >	
	3.6.1	第一步 - 建立使用自定义方程式的数据采集方法	
	3.6.2	第二步 - 保存数据采集方法	
	3.6.3	第三步 - 填充样品表	
	3.6.4	第四步 - 确认 计算结果	
	3.6.5	第五步 - 显示 / 隐藏列	
		<第二部分 - 使用 抽吸单元采集数据 >	
	3.6.6	第一步 - 安装抽吸单元附件	
	3.6.7	第二步 - 修改数据采集方法,使用抽吸单元	
	3.6.8	第三步 - 采集未知样品数据	3-30

第四章	动力学模块 第三课	
4.1	动力学窗口	4-2
4.2	动力学工具栏	4-3
4.3	练习一 - 基本测定	4-4
	4.3.1 第一步 - 建立数据采集方法	4-4
	4.3.2 第二步 - 准备粉末样品	4-5
	4.3.3 第三步 - 读取时间扫描值	4-5
4.4	练习二 - 动力学的基本操作	
	4.4.1 第一步 - 进行选点检测	
	4.4.2 第二步 - 将选点检测表作为模板存储	
	4.4.3 第三步 - 进行池空白操作	
	4.4.4 第四步 - 采集另一个数据集	
	4.4.5 第五步-打开一个以前保存的选点检测模板	
	4.4.6 第六步 - 修改主表	
4.5	练习三 - 动力学高级技巧	
	4.5.1 第一步 - 进行 Michaelis-Menten 计算	
	4.5.2 第二步 - 配置自定义动力学图像	
	4.5.3 第三步 - 建立和填充 Inhibitor 表	4-15
第五章	报告生成器 第四课	
5.1	对象的操作方式 (选择对象)	5-2
0.1	5.1.1 编辑方式	
	5.1.2 选择方式	
	5.1.3 未选择方式	
5.2	嵌入对象和链接对象	
	5.2.1 嵌入对象	
	5.2.2 链接对象	5-3
5.3	报告生成器的主窗口	
5.4	报告生成器工具栏	
5.5	报告生成器对象工具栏	
	5.5.1 文本对象	5-6
	5.5.2 动力学对象	5-6
	5.5.3 光度测定对象	5-7
	5.5.4 光谱对象	5-7
5.6	练习一-建立带有嵌入对象的基本报告	5-8
	5.6.1 第一步 - 设定栅格间距和页边距	5-8
	5.6.2 第二步 - 嵌入图象	5-8
	5.6.3 第三步 - 建立报告表头	5-9
	5.6.4 第四步 - 打印和存储报告	
5.7	练习二-建立带有链接对象的简单报告	5-12
	5.7.1 第一步 - 链接一个图象到现有的光谱模块	5-12
	5.7.2 第二步 - 链接一个峰值检测表到现有光谱模块	
	5.7.3 第三步 - 建立表头和打印报告	
5.8	练习三 - 高级技巧	
	5.8.1 第一步 - 在每页重复插入文本对象	
	5.8.2 第二步 - 配置快速打印功能	5-17

索引

空白页

第一章 绪论

目录

1.1	UVProbe 简介	1-2
	关于本书	
1.3	UVProbe 安装要求	1-4
	应用方式	
1.5	关于 UVProbe	1-9
	启动 UVProbe	
1.7	UVProbe- 基本界面	1-11
1.8	系统管理	1-13
1.9	使用模块	1-27
	UVProbe 功能	
1.11	UVProbe 教程	1-37

欢迎使用 UVProbe 个人软件包。UVProbe 的标准组件能进行数据采集、分析和报告,操作简单,功能 强大。

UVProbe 包括四个基本组成部分:

- 扫描和分析波长的光谱模块。
- 对时间变化和 Michaelis-Menten 计算的动力学模块。
- 分析定量数据的光度测定模块。
- 功能强大并可改变格式的报告生成器,可通过使用链接或嵌入数据建立并打印自定义报告,报告在 任何模块内均可立即打印。

其他特色:

- 界面布局直观。既可自定义包含单个图象和光度计控制键的简单布局,也可自定义类似多图象和表 的包含仪器履历和状态显示的复杂布局。
- 能在屏幕上实时显示吸光度、透射率、能量值或反射率,并可即时控制仪器。
- 灵活输出到文件或打印机。
- 用于显示、采集和控制数据的各种表格。
- 正在采集数据或采集完成后的三种图象方式。
- 众多的后处理程序,如选点检测、峰值检测和峰面积检测。
- 通过输入和输出变换来与其他的 WINDOWS 应用程序共享数据。
- 全面的在线帮助,包括每个对话框的上下文相关的帮助。

1.2 关于本书

本书的目的是帮助用户熟练使用 UVProbe。本书简要地介绍了主要的概念,说明软件的界面布局,并通过四个章节指导您有关的基本使用方法。

指南包括每个模块的主要的基本使用方法和一些高级技巧。在开始阅读指南之前,请先浏览下列内容, 更详细的内容或过程请参考在线帮助。

本节主要介绍运行 UVProbe 需要的最小软件要求,及怎样在系统里安装和卸载之。

最小软件要求 1.3.1

Microsoft Windows 7 Professional

1.3.2 安装 UVProbe

安装 UVProbe 如下:

按照下列步骤 1 到步骤 2 安装 Shimadzu 认证工具和 UVProbe。

注释

如果启动程序没有自动运行,双击 CD-ROM 中的 Autorun.exe 图标 🛀。





按第一步 \rightarrow 第二步 \rightarrow 第三步的顺序安装 "Shimadzu 用户认证工具"、"UVprobe" 和 " 用于 USB 的虚拟 COM 端口驱动程序"。

1.3.3 第一步 - 安装 Shimadzu 用户认证工具

- 1. 点击 [Shimadzu 用户认证工具]。
- 2. 出现欢迎对话框。仔细阅读说明后点击 [Next]。
- 3. 安装完成后,出现安装完毕对话框。然后点击 [Finish]。

1.3.4 第二步 - 安装 UVProbe

- 1. 点击「UVProbe]。
- 2. 阅读欢迎窗口中显示的信息后点击 [下一步]。
- 3. 输入您的用户名、公司名称和序列号到用户信息框中,点击 [下一步]。(产品序列号在本教程的封面上。)
- 4. 在选择目标位置对话框中,使用浏览键选择安 UVProbe 的文件夹,或接受默认的文件夹 (Program File\Shimadzu\UVProbe)。点击 [下一步]。
- 5. 在 [选择应用模式] 选项选择对话框中,选择希望安装的 UVProbe 应用方式并点击 [下一步],各方式的详细情况,见本书的 [应用模式] 以及 [UVProbe 帮助]。
- 6. 显示 [开始复制文件] 窗口后,单击 [下一步]。
- 7. 软件完全安装后,选中并阅读 [ReleaseNote] 文件。点击 [完成] 键完成安装。阅读完 [ReleaseNote] 后,关闭记事本。
- 8. 重启电脑, UVProbe 的图标应该显示在 windows 桌面上。

1.3.5 第三步 - USB 虚拟串口驱动程序的安装

- 1. 如果仪器与 PC 已通过 USB 连接,请拔掉 USB 缆线。
- 2. 单击"用于 USB 的虚拟 COM 端口驱动程序"按钮。
- 3. 按窗口指示进行安装。

注释

如果在已安装了旧版本 USB 驱动程序的 PC 中安装了新版本,请按以下步骤对驱动程序进行更新。

1.3.6 升级 (更新) USB 虚拟串口驱动程序

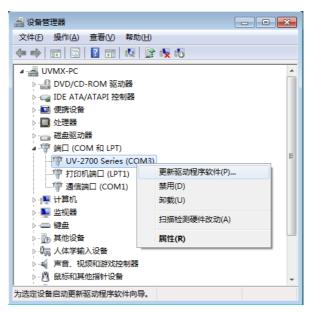
- 1. 用 USB 缆线连接仪器和 PC 后打开仪器电源开关。
- 2. 按以下步骤更新驱动程序。

自动显示硬件更新向导窗口时

按窗口指示自动搜索计算机中的设备驱动程序。 搜索到上一步骤安装的 USB 驱动器后自动更新。

非自动显示硬件更新向导窗口时

- 1. 通过控制面板打开设备管理器。
- 2. 从 [端口 (COM 和 LPT)]中选择需要连接的仪器后,执行 [更新驱动程序]。



- 3. 按窗口指示自动搜索计算机中的设备驱动程序。 搜索到上一步骤安装的 USB 驱动器后自动更新。
- 4. 在设备管理器中选择需要连接的仪器后打开属性。 选择"驱动程序"选项卡,确认"版本"已更新。

1.3.7 卸载 UVProbe

- 1. 选中 Windows 「开始] 「控制面板]。
- 2. 点击 [程序和功能]。
- 3. 在程序列表中选中 [UVProbe], 然后点击 [卸载]键。
- 4. 点击「是〕确认删除程序。

注释

当 UVProbe 被删除时,所有样品数据将一起被删。不过,已经创建并保存在硬盘上的文件不 会被一起删除。

5. 程序完成后,点击 [确定]。

1.4 应用方式

软件提供三种应用方式:常规、安全和GLP。

不同的方式,功能有所区别。

功能	常规	安全	GLP 功能
安全功能	停用	激活	激活
GLP 功能	停用	停用	激活

安全功能

当安全功能被激活时,注册进入系统需要输入用户名和密码,限制对系统的访问。给不同的用户赋予权限,限制可用的 UVProbe 功能。此外,用户注册进入时使用的用户名自动用作分析者名,而且此分析者名不能更改。

具体细节,见 [绪论]一章的 [UVProbe 功能]和 [系统管理]。

注释

当安全功能生效时,在默认的状态下光度测定模块中没有覆盖文件的权限。

UVProbe 教程 1-7

GLP 功能

GLP 功能支持系统遵循 GXP 的要求 (GLP: Good Laboratory Practices, GMP: Good Manufacturing Practices,等)。当 GLP 功能激活时,下列限制应用到各模块中。

共同的

- UVProbe 系统可使用下拉菜单 [窗口] [锁定] 指令加以锁定。
- 仪器履历的信息可发送到数据库中。
- 退出 UVProbe 时,将自动在磁盘内保存文件。
- 未保存打印目标数据时,打印结果内将出现 "Status: Temporary"。

动力学 / 光谱模块

- 新测定得到的和通过数据计算得到的数据集自动保存到磁盘中。
- 缝纫盒功能停用。
- 禁止重命名数据文件、储元和数据集,除非是酶文件。
- 禁止删除包含储元和数据集的数据文件,除非是酶文件。
- 禁止用已经存在的文件名保存文件。

光度测定模块

- 禁止删除样品行和标准行, 只能排除。
- 禁止删除样品列和标准列。
- 不能选择 [用户输入]作为样品表的数据采集方法。
- 禁止用已经存在的文件名保存文件。
- 文件保存后,标准表和样品表中的因子不能改变。

确认和更改应用方式

在下拉菜单 [编辑] - [选项] 中可以确认安装的 UVProbe 的应用方式。

常规方式和安全方式之间还可以切换。

从常规方式切换到安全方式

- 1. 点击 UVProb 的下拉菜单 [编辑] [选项]。
- 2. 点击选中 [安全模式 (S)]。
- 3. 点击 [确定]键,关闭对话框。
- 4. 显示所选择的应用方式将于下一次启动时生效的信息。
- 5. 当 UVProbe 重新启动时,会显示注册进入的对话框,要求输入用户名和密码。
- 6. 管理员作为用户名之一,已经登录并且拥有所有的权限,密码未设置。输入 admin 作为用户名,点 击 [确定]键。

注释

其他方式与 GLP 方式之间不能相互转换。此时,必须先卸载后重新安装 UVProbe 才可重新选 择。

尽管 UVProbe 是一个支持文件共享的统一的软件包,还是可以把它看作是四个程序合一的软件,分别是光谱模块,光度测定模块,动力学模块和报告生成器模块。每一个模块都将其指令放置在大的 UVProbe 平台上,并各有特定的用途和性能。每一个模块均有各自的工具栏、菜单、表格、图象和屏面排列,界面类似但作用不同。

下列的内容将指导您一些从共通到独特的基本操作。至于程序更详细的说明,请参照1-29页的UVProbe功能。

当 UVProbe 启动后,界面会显示与上次退出程序时相同的设置。例如:工具栏和窗口恢复到相同的位 置;但数据不会显示。

- 1. 打开显示器,计算机和分光光度计的电源。
- 2. 点击 [开始] [所有程序] [Shimadzu] [UVProbe], 或双击桌面上的 [UVProbe]图标。



3. 当安全方式被激活时,在[用户登录]对话框内输入用户名和密码,再点击[确定]。当安全方 式没有激活时,不出现该对话框。

注释

安装后首次启动时,管理员的用户名是 [admin],不必输入密码。



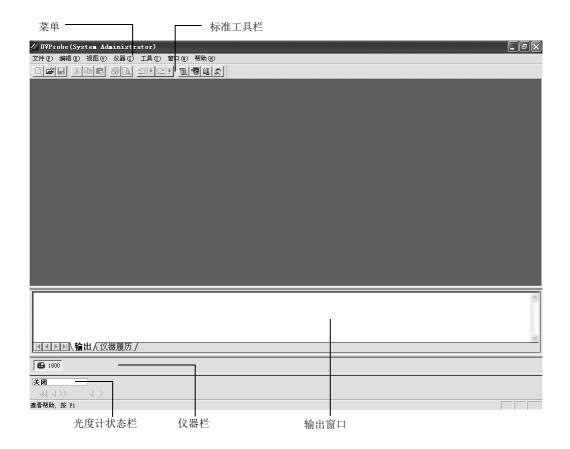
打开一个模块

在 [窗口] 菜单上,点击一个模块。

所有的模块可同时打开。使用窗口菜单可快速地进行模块间的切换,或使用层叠和平铺安排多个模块。 模块可以拖曳和改变大小。

1.7

UVProbe-基本界面



上图是没有打开任何模块的 UVProbe 的基本窗口图形。这里包括菜单、标准工具栏、输出窗口、仪器栏和光度计状态栏。下列功能在打开任何模块或报告生成器之前都能使用。

- 设置选项
- 执行系统管理功能
- 增加、设定或删除仪器
- 在工具菜单添加自定义工具

执行以上功能的详细步骤,请参考在线帮助。

1.7.1 输出窗口

输出窗口可固定在 UVProbe 工作区的任意位置、输出窗口在 UVProbe 窗口底部显示有用的系统信息, 并包括两个标签 —— 输出和仪器履历。

- 输出选项显示软件在运行时的概要信息。这些信息是临时性的,在下一次系统重启时会被清除。
- 仪器履历选项显示当前正使用的仪器的信息,如初始化时间,基线信息等等。当仪器转换时该项的 信息也将转变以显示当前正在使用的仪器的信息。

输出和仪器履历窗口的信息不能被打印或保存。

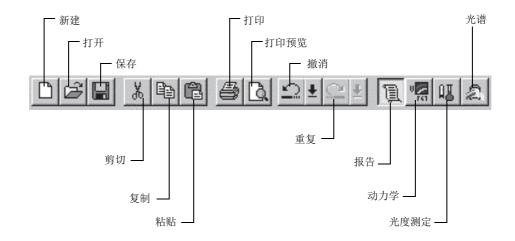
1.7.2 仪器栏

仪器栏可固定在 UVProbe 工作区的任意位置。每一个键对应一台可用的仪器,点击仪器栏上的按键, 可在相应的仪器间转换。

1.7.3 光度计状态栏

光度计状态栏可固定在 UVProbe 工作区的任意位置。通过光度计状态栏可完成许多仪器操作功能。可 以通过改变字体的风格、大小和颜色,还有状态栏的颜色来改变状态栏的外观,在光度计状态栏上单击 右键并选择属性即可执行上述外观的更改。详情请参考 UVProbe 帮助。

1.7.4 标准工具栏



1.8 系统管理

本节阐述了基本的系统管理。当安全管理被取消且不再使用时,请跳至 1-29 页的 *与分光光度计通讯*。安全管理主要是使系统管理员对每个用户访问系统的权限进行设定。依次有三个步骤:增加组,分配组权限,添加用户。

当 UVProbe 初次安装完成,系统有四个设定的组一管理员,开发者,操作者和访客。管理员拥有所有的访问权限,例如: 当一个用户被增加到该组后,该用户可无限制地访问 UVProbe 系统。

为有效的控制对系统的访问,一般采取建立不同级别的组,再将用户分配到相应的组中。例如:某个组可能无法使用峰面积表或者报告生成器。组不能被取消对单个模块的所有访问权限。

使用安全管理控制对系统的访问,跟踪用户以及单独用户完成的操作。安全管理被激活时,自动输入用户名到和数据(在新数据集信息对话框)一起被保存的分析域。在输出窗口的仪器履历页,或文件属性对话框的履历页能查看用户和操作信息。在报告生成器模块下,登录的用户能被打印成报告。

在编辑菜单上点击安全管理对话框。使用该对话框对系统进行控制。

对于登录在管理员组中的用户,可以使用除了更改密码标签以外的所有标签(页)。

1.8.1 赋予用户的权限

为了管理的方便,每个用户必须属于一个组。组内用户使用系统权限可被仔细地加以控制。用户和组应用下列规则:

- 组是用户的组合。
- 每个用户必须属于一个组,并且只能属于一个组。
- 组拥有特定权限。
- 组内成员权限相同。

1.8.2 权限

限制操作的权限分成 18 种。 UVProbe 已经编好了这 18 种权限或权限组合,具体说明如下: 此外, UVProbe 未给访客组任何操作权限。

岛津活度表控件 (动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	功能: 复制活度表的行或列到剪贴板。	0	0	0

岛津通用容器

权限	说明	管理员	开发者	操作者
编辑选项	权限:使用编辑菜单中的选项。该功能可切换 UVProbe 应用方式(仅限常规方式和安全方 式)。	0		
访问报告生成器	权限:使用报告生成器模块。该功能可建立/保存/读出报告文件和报告模板,在此模板中对象可以任意布局。	0	0	0
修改工具菜单	权限:使用工具菜单。该功能可插入其他应用软件到 UVProbe 的菜单指令中,插入程序到工具菜单。	0	0	0

岛津数据打印控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限: 复制数据打印表的行或列到剪贴板。	0	0	0

岛津动力学主表控件

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	复制主表的行或列到剪贴板。	0	0	0
修改	权限:进行输入编辑,输入系数/注释到主表。还包括切换"显示/不显示"表中的列的权限。	0	0	0

岛津动力学模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
保存文件	权限:使用文件菜单中的保存功能。该功能可保存动力学文件、酶文件、方法文件和各种模板。	0	0	0
编辑方法	权限:在编辑菜单中使用方法功能。该功能可以 建立/编辑测定方法。	0	0	
编辑设置	权限:在视图菜单中使用设置功能。该功能可设置显示数据位数,报告和模板的链接设置,是否显示信息,数据集名显示的格式,设置保存文本使用的分隔符等	0	0	
采集数据	权限: 执行测定	0	0	0
池空白	权限: 使用池空白功能	0	0	0
处理	权限: 使用数据处理。	0	0	0
打印报告	权限:使用文件菜单中的打印预览和打印功能。 这些功能可进行使用链接到各面板的报告模板打 印。	0	0	0
到波长	权限: 进行波长移动	0	0	0
峰面积检测	权限:建立峰面积表。	0	0	0
峰值检测	权限:使用操作菜单中的峰值检测功能。	0	0	0
缝纫盒	权限: 使用缝纫盒功能。	0	0	0
活度表	权限:建立活度表	0	0	0

权限	说明	管理员	开发者	操作者
加载文件	权限:使用文件菜单中的打开功能。该功能可读出动力学文件、酶文件、测定方法和各种模板。	0	0	0
酶表	权限:建立酶文件。	0	0	0
属性	权限:使用在视图菜单中的属性功能。该功能可编辑或设置各面板中显示的图象和表格。	0	0	0
数据打印	权限: 使用数据打印功能	0	0	0
文件属性	权限:使用文件属性。文件属性是一种功能,确 认加载到 RAM 文件和更改名称,诸如文件名称, 储元名称和数据集名称。	0	0	0
选点检测	权限: 使用选点检测功能。	0	0	0
执行基线校正	权限: 使用基线校正功能。	0	0	0
执行自动调零	权限: 使用自动调零功能。	0	0	0
主表	权限:建立主表	0	0	0

注释

在 GLP 方式中数据处理功能停用。

注释

在 GLP 方式中文件名、储元名和数据名不能更改。

岛津处理控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
归一化	权限:使用归一化功能,该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能使用户在重叠图象观察不同种类的测定值数据集时变得容易。	0	0	0
扣空白	权限:使用扣空白功能,该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过指定数据集的空白校正建立新的数据集。	0	0	0
内插法	权限:使用内插法功能,该功能是操作菜单中的 处理功能之一,该功能可以任意步长内插数据集 和建立一个新的数据集。	0	0	0
数据集间运算	权限:使用数据集间运算功能,该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过数据集间四则运算可建立新的数据集。	0	0	0
四则运算	权限:使用四则运算功能,该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过指定的数据集与常数之间的四则运算,建立新的数据集。	0	0	0
转换	权限:使用转换功能,该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能可建立新的数据集使用不同的转换,倒数转换和 ABS/T% 转换。	0	0	0
总平均	权限:使用总平均功能,该功能是操作菜单中的 处理功能之一。该功能对两个或两个以上指定的 数据集,使用每点的平均值建立一个数据集。	0	0	0

岛津 Michaelis-Menten 控件 (动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
编辑	权限: 更改 Michaelis-Menten 表中的数值。	0	0	0
剪贴板操作	权限: 复制 Michaelis-Menten 表的行和列到剪贴板。	0	0	0
建立新数据	权限: 建立新的 Michaelis-Menten 表。	0	0	0
删除行	权限: 删除 (剪切) Michaelis-Menten 表的列。	0	0	0

岛津峰面积控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
编辑	权限: 更改峰面积表中的数值和注释。	0	0	0
剪贴板操作	权限: 复制峰面积表的行和列。	0	0	0
删除区域	权限: 删除峰面积表中的面积。	0	0	0

岛津峰值检测控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
编辑	权限: 更改峰值检测表的注释。	0	0	0
剪贴板操作	权限: 复制峰值检测表的行或列。	0	0	0

岛津光度测定模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
保存文件	权限:使用文件菜单上的保存和另存为功能。该功能可保存/覆盖光度测定文件,标准文件,ASCII文件,方法文件,等	О	0	0
编辑方法	权限:在编辑菜单中使用的方法功能。该功能可建立/编辑测定方法。	0	0	
编辑设置	权限:使用设置功能在视图菜单中。该功能可进行设置诸如报告模板的链接设置,是否显示信息,数据集名称显示格式和保存文本时使用的分隔符。	0	0	
采集数据	权限:进行测定。	0	0	0
池空白	权限: 使用池空白功能。	0	0	0
处理	权限:使用在操作菜单中的处理功能。	0	0	0
打印报告	权限:使用文件菜单中的打印预览和打印功能。 该功能可进行链接到各面板上的报告模板打印。	0	0	0
到波长	权限:进行波长移动。	0	0	0
覆盖文件	权限: 使用文件菜单上的保存功能。			
加载文件	权限:使用文件菜单中的打开功能。该功能可加载光度测定文件,标准文件,方法文件,等	0	0	0
属性	权限:使用视图菜单中的属性功能。该功能可进 行各面板上图象和表的编辑/显示设置。	0	0	0
统计分析	权限:在操作菜单中使用统计分析功能。该功能可插入列,显示样品表统计分析的计算结果(标准偏差和平均)。	0	0	0
做标准	权限:使用操作菜单的做标准功能。该功能可移 动样品表上的数据到标准表。	0	0	0
执行自动调零	权限: 使用自动调零功能。	0	0	0
执行基线校正	权限: 使用基线校正功能。	0	0	0

岛津选点检测控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
编辑	权限: 更改选点检测表的波长和注释。	0	0	0
除去点	权限:删除选点检测表的行。	0	0	0
剪贴板操作	权限: 复制选点检测表的行或列到剪贴板。	0	0	0

岛津报告生成器

权限	说明	管理员	开发者	操作者
保存文件	权限:使用文件菜单的保存和另存为功能。该功能可保存建立的报告文件。	0	0	
打印	权限:使用文件菜单中的打印预览和打印功能。 从报告生成器打印报告的功能。	0	0	0
修改	权限:建立/编辑报告文件。该功能可插入对象 到报告中或更改对象的位置。	0	0	

岛津样品表控件 (光度测定模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限: 复制行或列的样品表到剪贴板。	0	0	0
删除行	权限: 删除样品表中的行。	0	0	0

注释

GLP 方式下样品表的行不能删除。

岛津 SEP 表控件 (光度测定模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限: 复制 S.E.P. 表的行或列到剪贴板。	0	0	0
删除行	权限:删除 S.E.P. 表的行。	0	0	0

注释

GLP 方式下的 S.E.P. 表的行不能删除。

岛津缝纫盒控件 (光谱/动力学模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
缝合	权限:使用缝合功能,是操作菜单中缝纫盒的功能之一。该功能可连接两个数据集建立一个新的数据集。	0	0	0
修剪	权限:使用修剪功能。是操作菜单中缝纫盒的功能之一。该功能可剪切一部分选择的数据集。	0	0	0

岛津光谱仪器栏

权限	说明	管理员	开发者	操作者
除去仪器	权限:使用仪器菜单的配置功能。该功能可进行从系统中除去仪器(仅限于 UV-1600/1700 系列)。	0		
加入仪器	权限:使用仪器菜单的增加功能。该功能可增加 要用的仪器到系统中。	0		
配置仪器	权限:使用仪器菜单的配置功能。该功能可进行登录仪器的 COM 口更改和仪器基线校正(仅限于 UV-1600/1700 系列)。	0		

岛津光谱模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
保存文件	权限:使用文件菜单中的保存,保存全部和另存为功能。该功能可保存/覆盖光谱文件,测定方法,各种模板和各种文件。	0	0	0
编辑方法	权限:在编辑菜单中使用的方法功能。该功能可建立/编辑测定方法。	0	0	
编辑设置	权限:使用设置功能在视图菜单中。该功能可设置显示数据位数,报告和模板的链接设置,是否显示信息,数据集名显示的格式,设置保存文本时使用的分隔符,等	0	0	
采集数据	权限: 进行测定。	0	0	0
处理	权限: 使用在操作菜单中的处理功能。	0	0	0
打印报告	权限:使用文件菜单中的打印预览和打印功能。这 些功能可进行使用链接到各面板的报告模板打印。	0	0	0
到波长	权限:进行波长移动。	0	0	0
峰面积检测	权限:建立光谱模块的峰面积表。	0	0	0
峰值检测	权限:使用操作菜单中的峰值检测功能。	0	0	0
缝纫盒	权限: 使用缝纫盒功能。	0	0	0
加载文件	权限:使用文件菜单中的打开功能。该功能可读出 ASCII 文件,测定方法和各种模板。	0	0	0
属性	权限:使用在视图菜单中的属性功能。该功能可 编辑或设置各面板中显示的图象和表格。	0	0	0
数据打印	权限:使用数据打印功能。	0	0	0
文件属性	权限:使用文件属性。文件属性是一种功能,确 认加载到 RAM 文件和更改名称,诸如文件名称, 储元名称和数据集名称。	0	0	0
选点检测	权限: 使用选点检测功能。	0	0	0
执行基线校正	权限: 使用基线校正功能。	0	0	0
执行自动调零	权限: 使用自动调零功能。	0	0	0

注释

在 GLP 方式下,数据处理功能停用。

注释

在 GLP 方式下,文件名、储元名、数据集名不能更改。

岛津标准表控件 (光度测定模块)

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限: 复制标准表的行和列。	0	0	0
删除行	权限:删除标准表的行。	0	0	0

注释

在 GLP 方式下,标准样品的行不能删除。

1.8.3 添加组

「组〕在「管理」对话框中的标签页内。



可添加已经存在的用户组以外的新的组。有两种添加组的方法: 其一是建立新的组; 其二是利用已存在的组的权限。

建立一个新的组:

- 1. 点击组标签页的[加入]键,打开[编辑组]对话框。
- 2. 输入添加的组的名称和说明到对应的编辑框中。
- 3. → (参见 1.8.4 赋予组权限 的第 3 步。)

利用已经存在的组的权限:

- 1. 点击 [组]标签页中列出组中的一个组。
- 2. 点击 [复制] 键查看复制组对话框。
- 3. 输入添加的组的名称和说明到对应的编辑框中。
- 4. → (参见 1.8.4 赋予组权限 的第 3 步。)

1.8.4 赋予组权限

组的权限在 [管理] 对话框的 [组] 标签页内设置。 有两种设置组的方法: 其一是使用编辑对话框; 其二是利用当前的权限目录。 使用编辑对话框:

- 1. 在[组]标签页中点击组目录内希望设置的组。
- 点击 [属性] 键打开 [编辑组] 对话框。
- 3. 从对象框选择目标。
- 点击目标权限,然后点击箭头键在[可用功能]目录和[选择功能]目录之间转移权限。 4.
- 5. 重复第3步和第4步设置权限。
- 6. 设置完成后,点击[确定]键确认设置。



使用当前的权限目录:

- 1. 在[组]标签页中点击组目录内希望设置的组。
- 2. 点击目标模块边上的「+]标记或当前权限目录中的对象。
- 3. 在各权限勾选框作标记和如下图赋予权限。
- 4. 重复第2步和第3步设置权限。
- 5. 设置完成后,点击[确定]键确认设置。



1.8.5 除去组

删除组在 [管理] 对话框的 [组] 标签页中进行。

- 1. 点击 [组] 标签页内希望删除的组。
- 2. 点击 [除去]键并确认,该目标组从组目录中被删除。
- 3. 点击 [关闭] 键确认删除。

注释

当组内有用户时,该组不能删除。

当前登录的组不能删除。

管理员组不能删除。

1.8.6 添加用户

添加用户在 [管理] 对话框的 [用户] 标签页中进行。



可添加已经存在的用户以外的新用户。

- 1. 在[用户]标签页中点击[加入],查看加入用户对话框。
- 2. 输入用户名,全名及用户密码。
- 3. 从组的组合框中选择用户所属的 [组]。
- 4. 点击 [确认] 键关闭对话框。
- 5. 点击 [关闭] 键确认用户已被添加。

注释

一旦登录进入, 当前用户不能删除。



1.8.7 编辑用户

在[管理]对话框中的[用户]标签页内可进行用户的编辑。此处可改变用户所属的组和密码。

- 1. 在 [用户] 标签页的用户目录中,点击希望编辑的用户。
- 2. 点击 [属性]键打开 [编辑用户]对话框。
- 3. 编辑希望改变的项目。从组的组合框选择用户所属的组。欲更改用户密码,输入新密码即可。
- 4. 点击 [确认] 键。
- 5. 点击 [关闭] 键关闭管理对话框。

注释

当 UVProbe 设置为 GLP 方式时,用户名和全名不能更改。 此功能只有系统管理员可以使用。 同一用户不能属于多个组。

1.8.8 激活 / 停用用户

激活 / 停用用户在 [管理]对话框的用户标签页中切换。 此处,注册用户可以停用,停用的用户可以激活。

注释

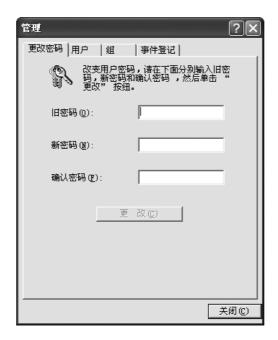
注册用户不能删除。

要切换激活 / 停用用户, 需要输入理由。

- 1. 在[用户]标签页的用户目录中点击希望停用/激活的用户。
- 2. 点击 [激活 (停用)] 键打开输入 [理由] 对话框。
- 3. 在[编辑]对话框输入激活或停用用户的理由。
- 4. 点击 [确定]键关闭对话框。
- 5. 确认目标用户已经激活或停用,然后点击 [关闭]键确认变化。

1.8.9 改变密码

[管理]对话框中的[更改密码]标签页内可改变密码。



- 1. 输入当前用户使用的密码。
- 2. 输入[新密码]。
- 3. 再次输入第2步中输入的密码加以确认。
- 4. 点击 [更改]确认密码改变。

注释

Shimadzu 用户认证工具中设定了密码的最少字符数。

密码需要由数字或字符组合。

密码字符区分大小写。

1.9

使用模块



上图是打开 UVProbe 光谱模块后出现的窗口。UVProbe 的光谱模块在大的窗口下又有几个窗口,包括菜单栏、标准工具栏、仪器栏、光度计按键栏和光度计状态栏。使用视图菜单可激活 / 停用工具栏或显示元件。

1.9.1 模块之间的面板的区别

光谱窗口分割为几个面板,操作面板在左上方,方法面板在左下方,图象面板在右侧。动力学和光度测定模块也一样包含面板。

各面板均有其特定的功能或功能组合。例如,光谱模块的图象面板显示三种不同类型的图象:方法面板显示当前的数据集的采集参数信息;操作面板显示采集的数据或经过各种处理后的数据,如峰值检测或峰面积。

使用视图菜单可激活 / 停用面板。可用拖曳鼠标来改变面板的大小,以及改变水平和垂直分割栏。

1.9.2 专用菜单和工具栏

虽然模块上有各种菜单,但是不同的模块其可用的菜单也可能会有不同。例如,光谱和动力学模块各有 图象菜单,而光度测定模块则没有。而且,光谱和动力学模块中的图象也有区别,取决于激活的是什么 模块。

模块也有自己的工具栏,这些工具栏也分成共有的和专用的。

各模块详细的说明和其用途的说明,请见各模块的前言。

本节说明的部分功能是用户在开始本教程前必须了解的基本知识,包括:

- 与分光光度计的通讯
- 快捷菜单和属性页
- 图象方式

1.10.1 与分光光度计的通讯

当计算机和分光光度计已硬件连接(参考仪器安装说明书),且 UVProbe 系统已经安装和启动,此时软件已基本就绪,最后一步是在 UVProbe 中增加和配置仪器。

增加和配置仪器

- 1. 选择 [视图] [仪器栏]。
- 2. 选择 [仪器] [加入], 启动 [加入仪器向导]。
- 3. 点击 [下一步], 查看仪器列表。

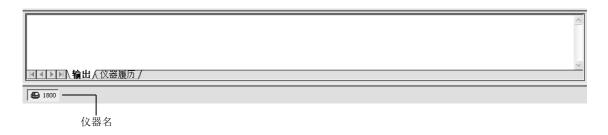


- 4. 选定,点击[下一步]。
- 5. 在仪器名输入框中输入仪器名,仪器名将显示在仪器栏上。
- 6. 点击「配置」,然后选择仪器的通讯端口,点击「确定」。
- 7. 点击 [下一步]。
- 8. 输入仪器的型号名称和序列号。要分别输入,就如各数据集不同的信息记录 (汇总)。

注释

序列号在输入后不能更改。当序列号不正确时,删除该仪器,然后重新增加。 某些型号的仪器包含内在的序列号。此时 UVProbe 将自动输入此项信息。

9. 点击 [完成], 仪器栏上将显示刚安装的分光光度计的名称的按键, 屏幕如下图所示。



注释

在仪器栏上沿着按键移动鼠标将会显示一个工具栏提示,表示该仪器的型号。

联机

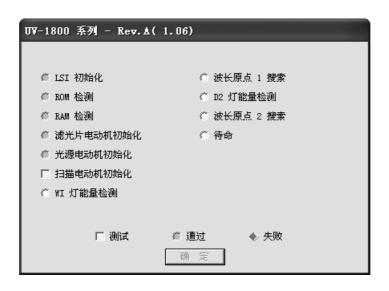
- 1. 选择[窗口]-[光谱],[动力学]或[光度测定]。必须先运行一个模块,才能和分光光度计联机。
- 2. 在仪器栏上,选择希望联机的仪器。当只安装了一台仪器时,将自动选择该仪器。
- 3. 确认光度计已经打开电源,点击 [连接]键。



当与仪器连接后, [连接] 将变为显示 [开始], 并且光度计键将变为有效按键, 如下图所示。 现在可以为任何模块建立数据采集方法并开始读取数据。



在联机时,如果仪器的初始化正在进行,则会显示如下窗口:



注释

对于某些型号的仪器,电源打开时已完成初始化。如果初始化在软件与仪器连接之前已经完成,此窗口将不会出现,而且仪器履历也不会被保存。为保证仪器履历被存储,在电源打开后应立即联机。

需要时可在完成初始化后点击「确定」。 UVProbe 将在仪器履历中保存初始化信息以备用。

1.10.2 快捷菜单和属性页

快捷菜单就是与上下文有关并能通过单击鼠标右键访问的菜单。属性页是一个专用的面板对话框,可对当前面板和情况,或特定的操作进行设置。

例如,在光谱图象上单击鼠标右键以显示光谱图象特定选项的快捷菜单。或者,在光谱的操作面板中右键单击激活的峰值检测表,显示快捷菜单,点击 [属性]选项显示峰值检测属性页如下:



使用属性页

属性页能固定显示在某一地方。固定属性页请点击左上角的 ___ 。当在窗体或模块之间切换时,属性页仍将显示,并根据当前活动窗体的信息动态更新。

属性页可以象其他的窗体和对话框一样任意移动。关闭属性页请单击 图,或者,当属性页不固定时,在属性页框体外单击。当数据输入到属性页时,按下 [回车]键、 [Tab]键在属性页窗体外单击,输入项都将有效。

1.10.3 图象方式

每一个模块都包含跟踪数据的图象。在光谱和动力学模块中有三种方式:激活、重叠和堆叠。在动力学 模块中还有自定义图象方式。光度测定模块只有两个图象:标准曲线图象和样品图象。

激活图象方式显示描绘当前活动的数据集的单线。数据只有在采集后才能以该种方式显示,如需查看 UVProbe 采集数据时图象的更新,请切换到重叠或堆叠方式下。该方式只能查看或操作在存储器内的 数据。

重叠图象方式

该方式同时显示存储器内的所有数据集。例如,存储器内有三个数据集,该图象将显示为每一个数据集 的描绘线。常常适用于在快捷键菜单上的自动标尺功能以使所有数据都显示在图象中。该方式还包括了 一个图例图象以区别图象中不同的线。当图例不用时可以隐藏起来并可从快捷菜单中访问。

当使用光度计采集数据时, UVProbe 自动切换到重叠方式并在采集的同时实时显示。

堆叠图象方式

堆叠方式分开显示存储器中的每一个数据集。图象一层层堆叠。加载到存储器中的数据集越多,每个图 象越小,直至右边出现滚动条。那时,将需要卷动滚动条来查看图象。可将该滚动条失效以压缩图象到 整个测绘区域。X轴将消失以留出空间。详细信息请查看在线帮助。

自定义图象方式

自定义图象方式仅仅在动力学模块的酶面板中显示自定义图象。该方式主要用于同时观察通过几个线形 转换类型所获得的 Michaelis-Menten 数据。

标准曲线

标准曲线基于标准表的数据。 UVProbe 使用标准表中的点计算出曲线并使用该曲线计算出样品表中未 知样品的浓度值。Y轴表示吸收值,X轴表示浓度值。通过设置[光度测定]-[方法]-[仪器参数] 的测量方式, Y轴能显示透过率,能量和反射率。

样品图象

样品图象将样品表中的每一个输入项作为一个点显示。X轴显示表中包含的每一个点的序号,Y轴显示 每一个点的浓度值。在图象菜单中图象的 Y 轴能改为显示每一个点的吸光度。

1.10.4 文件、储元和数据集

存储到文件中的数据被划分并存储在称为储元的采集单元内。每个储元包含一个或多个数据集。数据集包含所有方法,履历和概要信息外,还包括实际的数据。

最基本的数据容器是文件,所有的数据都存储到文件内;文件可细分为储元,储元可再细分为数据集。 每个文件最少包括一个储元,每个储元最少包括一个数据集。

为更好地理解,请看下面的例子,该例子显示一个包含多个储元和数据集的文件的对话框。



文件属性

在文件菜单中,属性指的是文件性质对话框 (不同于属性页)。详细信息请参考在线帮助。

从该对话框中可以:

- 确定加载的光谱文件。
- 在文件中列出储元和数据集。
- 查看方法,履历和概要信息。
- 重命名储元或数据集。
- 隐藏数据集。
- 显示隐藏的数据集。
- 在单个文件中存储所有数据。
- 从存储器中删除文件,储元和数据集。

储元

储元是包含在文件中的数据单元。每一次扫描都对应一个储元,每个储元有一个或多个数据集,包括原 始数据集 (在扫描中采集的原始数据)和所有处理数据时建立的数据集。

数据集

数据集是文件的一部分,包含扫描时采集的数据或通过其他途径建立的数据,如处理扫描数据。多个数 据集可组成储元。

优点

当需要将所有数据存储到一个文件中时,文件、储元和数据集这种结构显示出很大的优点。如果采取这 种存储方式,可以进行的选项如下:

- 用池定位测量的数据可存储在一起。
- 任何一天的每个测量值可存储在同一文件下的不同储元内, 从而减少硬盘内文件的数目。
- 类似样品的测量结果可存储在同一磁盘文件内。

1.10.5 内部数据处理的精确度

UVProbe 使用双精度浮点数进行计算。存储在文件中的数据采用同样的精确度。

显示或打印的数据以用户定义或缺省的位数方式进行四舍五入。该处理仅用于显示或打印图象,并且不 影响存储的数据或以后的计算。例如,根据窗口内数据或表格内打印数据手动计算的结果与使用 UVProbe 通过双精度浮点数计算的结果存在偏差。

注释

双精度浮点:

使用 IEEE 标准。尾数: 53 位,指数: 11 位。

换算成十进制: 16 位 * 10 ± 308

舍入处理:数字大于或等于5时进位,小于5时舍去。

例如,根据窗口内数据或表格内打印数据手动计算的结果与使用 UVProbe 通过双精度浮点数 计算的结果存在偏差。

对于 Ver.2.50 以后的版本,光度测定模块支持使用小数点后显示位数舍入处理后的值进行计 算。

关于支持的计算类型及设置方法,请参考本软件的帮助文档。(输入关键词"设置",选择 "设置-光度测定"。)

1.10.6 点灯时间:显示及重置功能

UVProbe 软件自 2.2 版本以后可记录点灯时间。支持的机型如下所示。

- UV-1800
- UV-2600/2700
- UV-2450 (固件版本高于 2.50)
- UV-2550 (固件版本高于 2.50)
- UV-3600/3600Plus
- SolidSpec-3700 (固件版本高于 2.14)

点灯时间

打开[仪器]-[配置]-[点灯时间]标签页, WI 灯和 D2 灯的点灯时间将会显示,这个时间是前次 重置后总的点灯时间。但是这个时间仅只是显示,并不能输入数据来校正,即使是相同的数字。 重置后重新打开此页面会看到校正后的值。

如何显示点灯时间

- 1. 在光度计按键栏点击 [连接]。
- 2. 点击「仪器]菜单下的「配置]。



3. 点击 [点灯时间] 标签页,WI 灯和 D2 灯的使用时间将会显示。 (下图所示是 UV-1800。)



提示: 点灯时间是在初始化时自动读取的,并记录在输出窗口的仪器履历下。

重置点灯时间

在[点灯时间]标签页中,点击[重置灯时间]按键后点灯时间会重置为0,每一盏灯均需各自操作。请注意此重置操作不可撤销。另外,不能手工输入时间值。

点灯时间重置后,图框显示「0小时]表明操作生效,点灯时间重新计时。

如何重置点灯时间

- 1. 点击光度计按键栏上的 [连接]。
- 2. 点击仪器菜单的「配置]。
- 3. 点击 [点灯时间] 标签页, WI 灯和 D2 灯的点灯时间会显示出来。
- 4. 点击「重置 WI (D2) 灯时间〕按键。
- 5. 将会弹出信息确认重置点灯时间,点击 [确定]。
- 6. 点灯时间将重置为 0。

提示: 重置点灯时间操作将记录到仪器履历中。

注释

点灯时间是记录在光度计的记忆体中。当仪器电源关闭时,此记录仍由备用电池保存。所以, 请留意当电池更换或别的原因可能引起记录的部分或全部遗失。当点灯时间需要管理时,我们 建议作定期记录。

注释

某些型号的仪器可能不支持记录点灯时间。在这种情况下,不会显示点灯时间标签页。

注释

有可能虽然该型号仪器支持记录点灯时间,但是其记忆体的版本不适用,此时虽能显示点灯时 间,但不能作任何设置。

软件安装完毕后,您可以开始阅读本指南,指南分为四部分,分别是:光谱模块、光度测定模块、动力学模块和报告生成器模块。建议按照章节的顺序依次阅读;也可直接阅读您需要的章节。特别注意的是第四部分报告生成器用到第一部分中建立的文件,因此,第四部分不能与第一部分分开。

UVProbe 功能 一节也很重要,请仔细阅读 (见 1-29 页)。这对理解整个指南很有必要。

指南中需要的数据文件都可在 UVProbe 安装目录中找到,例如:

C:\Program Files\Shimadzu\UVProbe\Data

注释

该指南的所有过程均处于 GLP 和安全方式停用的状态下。

1.11.1 第一部分 - 光谱模块

基本测定

练习1,执行基线校正,建立和保存数据采集方法,采集和保存光谱数据。

基本光谱操作

练习 2,包含基本光谱操作,包括如何显示和设置峰值检测表,如何建立和处理峰面积表,如何对光谱数据集完成基本算术运算。

高级技巧

练习3,利用池定位器获得数据。同时,位图图象从光谱模块中拷贝并粘贴在写字板上。

1.11.2 第二部分 - 光度测定模块

基本测定

练习 1,利用分光光度计的读取数据或用手工输入数据到标准表中,并建立标准表和标准曲线。

基本光度测定操作

练习 2,使用各种标准曲线计算未知浓度。使用自动填充建立标准表并完成数据的倒数操作。

高级技巧

练习 3,通过分析 Hops 酸建立自定义方程式。使用附件抽吸装置测量未知样品。

1.11.3 第三部分 - 动力学模块

基本测定

练习 1, 在动力学模块下, 建立动力学数据采集方法和采集时间扫描数据。

基本动力学操作

练习 2, 建立峰值检测表, 将选点检测数据保存为模板, 然后打开模板。同时, 完成池空白操作, 说明 并管理活度表和主表。

高级技巧

练习 3, 建立 Michaelis-Menten 表计算 KM 和 Vmax,根据计算的 KM 和 Vmax 值建立抑制剂表,并建 立一个自定义动力学图象结构。

1.11.4 第四部分 - 报告生成器

建立含嵌入对象的简单报告

练习 1,建立含有嵌入对象的简单报告。报告包括标题和光谱模块下的重叠图象。保存和打印报告。

建立含链接对象的简单报告

练习 2, 建立含有链接对象的简单报告。报告包括链接到正在使用的光谱模块中的图象对象和峰值检测 表对象。

高级技巧

练习 3, 在报告中链接自定义设置的对象和插入各种文本对象。在光谱模块下设置快速打印。

第二章 光谱模块 第一课

光谱模块的基本功能是控制分光光度计和扫描指定范围内的波长,并记录下扫描范围内各波长的吸收值、透射率、反射率或能量读数。

光谱模块操作简单灵活,允许设计简单的或复杂的数据采集方法。可采用不同类型的仪器和附件采集数据。用户可保存数据采集方法的参数,通过各种图象方式查看采集的数据,并按特定的方式处理数据,如数据打印、峰值检测、保存数据和在模块中直接打印报告。

注释

从 2.40 版本后,实现了从数据采集到数据处理的连续操作。数据处理参数在测定方法中设置。可处理的数据类型和设置方法请参考本软件的在线帮助。(输入关键字"数据处理"后选择"测定方法(光谱)"。)

该模块包含三个窗口:操作,方法,和图象。

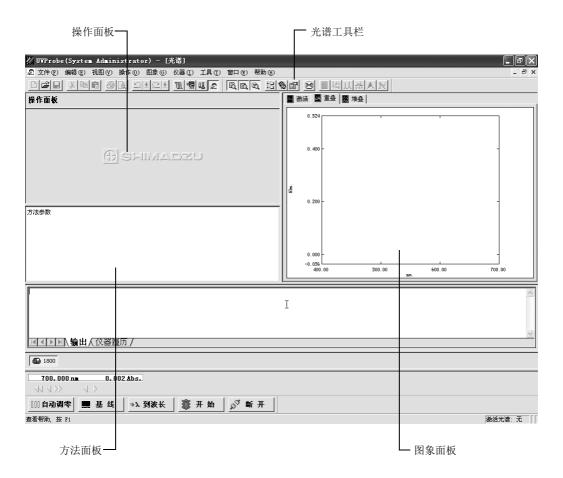
- 操作面板位于左上角,包含查看和操作所有数据的功能,如数据打印,峰面积,峰值检测。
- 方法面板位于操作面板下放,显示激活数据集的数据采集方法信息。
- 图象面板位于右方,包含激活、重叠图象和堆叠图象。

本章节包含下列练习:

- 基本测定
- 基本光谱操作
- 先进的光谱技术

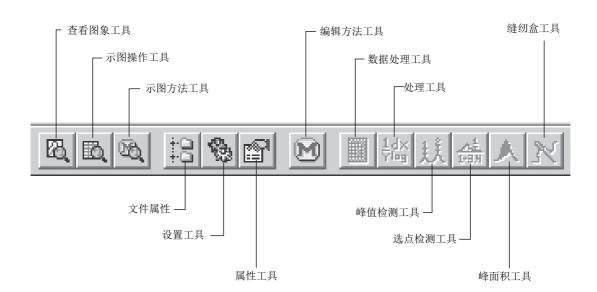
目录

2.1	光谱窗口	2-2
	光谱工具栏	
	练习一 - 基本测定	
	练习二 - 基本光谱操作	
	练习三 - 高级技巧	
	<第一部分 - 通过池定位装置采集数据 >	
	< 第二部分 - 使用 UVProbe 和视窗软件的写字板 >	



2

2.2 光谱工具栏



在这个练习中:

- 执行基线校正
- 建立数据采集方法
- 保存数据采集方法
- 采集数据
- 保存数据

开始之前,最大化 UVProbe 窗口,确保光度计状态光度计栏、仪器栏和输出窗口都显示在屏幕上。当 需要时,可使用视图菜单。

注释

如果尚未添加仪器,需要重新配置见简介。请参考第1-29,与分光光度计的通讯。

2.3.1 第一步 - 建立数据采集方法

建立一个数据采集方法,波长范围: 600-450 nm; 扫描速度: 中; 取样间隔: 1.0 nm。测定镨汝滤光 片的吸收。(可用任何其他滤光片或样品替代。)

1. 选择 [编辑] - [方法],或点击 [方法]图标显示 [光谱方法]对话框。



- 2. 设置 [波长范围],在 [开始]框和 [结束]框中分别输入 600 和 450。
- 3. 在[扫描速度]列表框中选择[中速]。
- 4. 在[采样间隔]列表中选择[1.0],使仪器每1.0 nm 采集一次数据。
- 5. 在「扫描方式]下选择「单个]。表示在指定波长范围内单次测定。

6. 点击 [仪器参数]标签。



- 7. 在[测定方式]目录中选择[吸收值]
- 8. 点击 [确定],将参数传给仪器。注意光度计状态栏上显示的 [光度计设置]信息 (显示时间比较短暂)。

其他方法设置都处于默认值。有关这些设置的详细信息请参考在线帮助。要查询上下文相关帮助,在对话框的选项上单击右键,然后再点击 [这是什么?]即可。

2.3.2 第二步 - 存储数据采集方法

数据采集方法可以进行存储,用于以后采集新的数据。根据本章节练习 3 的内容将当前方法保存为一个 *.smd 文件。

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 在[文件名]输入框中,输入SpecMeth。
- 3. 在 [保存类型]列表框中,点击 [方法文件 (*.smd)], 然后点击 [保存]。

2.3.3 第三步 - 执行基线校正

基线校正设定当前选择的波长范围内的背景为零,在此范围内的所有的后续的读数受其影响。基线校正确保在采集数据时有较好的参照点。

注释

定期基线校正可补偿漂移。

完成基线校正后, UVProbe 将基线校正后的信息存储到仪器履历中,包括分析者、日期和时间。

注释

在开始基线校正之前,确认样品和参比光束上无任何障碍物,并且样品室中无样品。如何辨别 样品或参比光束请参考仪器使用指南。

进行基线校正和查看仪器履历

1. 选择 [窗口] - [光谱], 打开光谱模块。

注释

当安装了多个仪器时,点击仪器栏上的键,选择需要的仪器。

- 2. 点击光度计按键栏中的 [连接] 来连接仪器。
- 3. 点击光度计按键栏中的 [基线]来进行基线的初始化操作。
- 4. 当[基线参数]对话框弹出时,在[开始]波长和[结束]波长中分别输入700和300。
- 5. 点击 [确定]。注意基线校正过程中光度计状态窗口的读数变化。
- 6. 当完成扫描后,点击输出窗口的[仪器履历]标签。查看列出的基线校正信息。

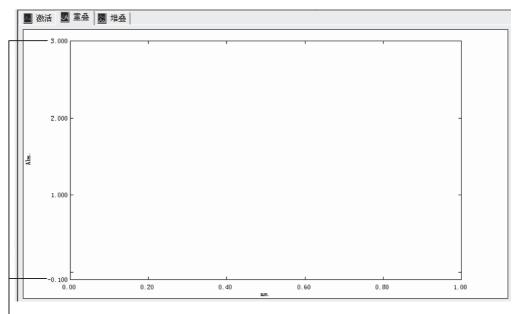


2.3.4 第四步 - 采集数据

使用上述方法测定镨汝滤光片的吸收光谱。首先,设置重叠图象 Y- 轴来显示采集的数据。一旦有数据 传送过来, UVProbe 自动刷新图象,并将 X-轴设定为方法中指定的波长范围。注意,可能需要手工调 整 Y- 轴以适当的显示数据。

设置重叠图象

- 1. 点击 [重叠图象]标签,显示重叠方式图象。
- 2. 在 Y- 轴上点击最小吸光度值,将它改为 -1。
- 3. 在 Y- 轴上点击最大吸光度值,将它改为 3。



└点击 Abs 值改变范围

注释

在扫描完成后可采用下列技术

- 确认所有测得的数据是否适当的显示在图象上,可使用 [自动标尺] 功能。扫描结束后,单击右键并在快捷菜单中选取自动标尺选项,自动调节图象尺寸使坐标数据合适。
- 要放大图象的某个区域,按住鼠标左键,在图象上拖拽出需要范围的方框,松开鼠标后图象立刻自动调整,显示刚才定义的大小。

执行光谱扫描

- 1. 将镨汝滤光片放入分光光度计样品室中。有关仪器详细信息请参考仪器说明书。
- 2. 单击仪器控制按钮栏上的 [开始] 按钮。
- 3. 将打开 [新数据集] 对话框,在 [文件] 文本框内输入 "Didymium"。



4. 在 [数据储元] 文本框内输入 "Data1", 单击 [确定] 后, 开始扫描。

2.3.5 第五步 - 存储数据

至此,数据已被采集并命名,但数据仅仅存储在内存中,而没有存储到磁盘上。如果此时关闭 UVProbe, 数据将会丢失。要保存数据, 应将其保存到文件中。

当保存一个光谱文件时。 UVProbe 将在文件中以数据集的方式分别保存下列内容。

- 峰面积表
- 选点检测表
- 峰值检测表
- 方法信息
- 概要信息
- 履历信息

存储数据

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 在对话框顶部的位置选择适当的数据保存路径。
- 3. 输入 Didymium 作为文件名。
- 4. 在 [保存类型] 中选择 [光谱文件 (*.spc)]。
- 5. 点击 [保存]。

注释

选择 [文件] - [保存] 来存储文件; 但是存储文件到一个指定的文件夹中需要使用 [另存为] 指令

注释

可以通过两种方式显示数据集的参数。

- 1. 打开 [文件属性] 对话框并选择数据集图表,参数将显示在方法框架中。
- 2. 在图例窗口双击数据集,参数将显示在方法窗格中。

2.4 练习二 - 基本光谱操作

在本练习中:

- 打开峰值检测表,调整阈值,修改表格使之对图象进行标注。
- 建立一个峰面积表。
- 使用四则运算和转换处理类型处理数据集来建立两个新的数据集。

2.4.1 第一步 - 调节峰值检测表的参数

峰值检测表显示在操作面板上,用来显示数据集中的所有的峰和谷,以及每个峰和谷处的波长,吸收值,透射率或者反射率的值。

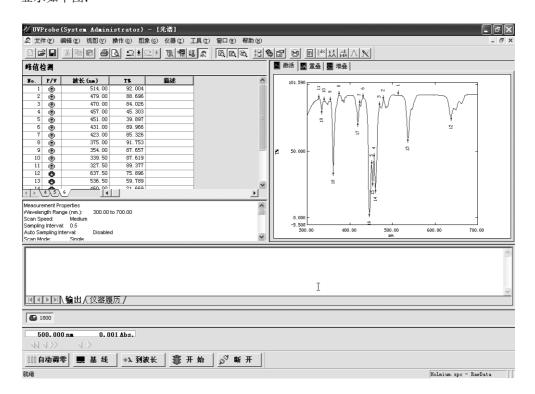
在这个练习中,查看峰值检测表,调节阈值,和使用峰值检测表属性页,通过即或和停用标注来标记图象。

打开文件并显示激活图象

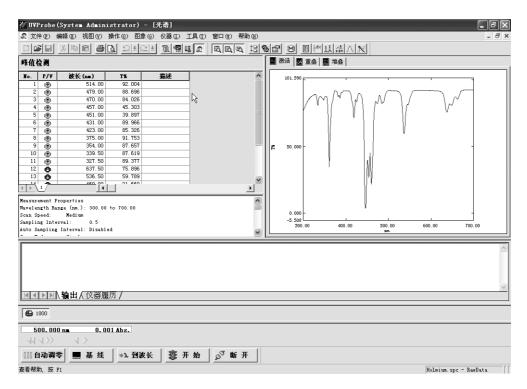
- 1. 点击图象面板上的激活图象标签。
- 2. 选择 [文件] [打开]。
- 3. 双击 [文件数据] 文件夹中的 [Holm ox.spc]。
- **4.** 在图象上单击右键,选择 [自动标尺]设置图象显示所有的数据。注意,图象上的峰和谷的编号。

显示峰值检测表

1. 选择 [操作] - [峰值检测]。 如果需要,使用视图菜单隐藏方法面板和输出窗口使屏幕上有更大的空间显示峰值检测表。屏幕 显示如下图:



在「峰值检测]表中单击右键,选取快捷菜单上的「标记峰]。重复以上步骤标记谷。注意,此 时图象上的峰和谷的标记将消失,如下图。



改变峰值检测的阈值

- 1. 在[峰值检测]表中单击右键,选取快捷菜单中的[属性]选项。
- 2. 点击 [属性]页的 平 来固定属性页。



3. 在阈值输入框内键入 10,按 [回车]键,观察峰值检测表的变化。改变后的表如下图。

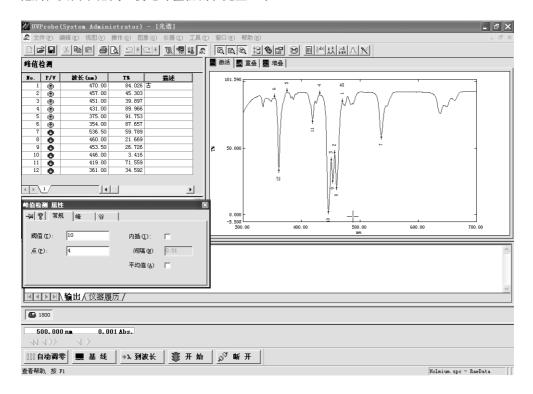


4. 在[阈值]框键入 20,按[回车]键,可发现随着阈值的增加,表中的条目随之减少。阈值越大,检测到的峰和谷越少。

更详细的关于峰值检测阈值的运算,请参考在线帮助。

图象上峰和谷的标注

1. 把属性页向下拖拽,使之峰值检测表完全显示。



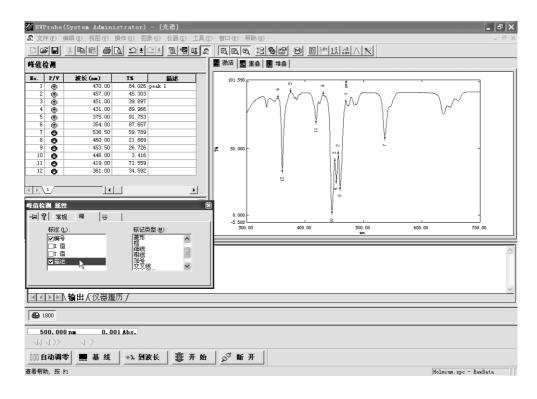
2. 在[峰值检测]表的[描述]列中,输入下列信息。当标记峰和标记谷激活时,这些输入信息将 显示在图象上。

No.	峰	No.	 谷
1	Peak A	13	Valley A
2	Peak B	14	Valley B
3	Peak C	15	Valley C
4	Peak D	16	Valley D
5	Peak E	17	Valley E
6	Peak F	18	Valley F
7	Peak G	19	Valley G
8	Peak H	20	Valley H
9	Peak I	21	Valley I
10	Peak J	22	Valley J
11	Peak K		
12	Peak L		

- 3. 点击 [峰值检测属性]页中的 [峰]标签。
- 4. 点击 [描述] 选项框。注意输入的说明显示在图象中的峰上。
- 点击 [编号] 选项框。注意图象上的峰的编号不再显示。

- 6. 点击 [峰值检测属性]页中的 [谷]标签。
- 7. 点击 [描述] 选项框。注意输入的说明显示在图象的谷上。
- 8. 点击「编号]选项框。图象上谷的编号不再显示。

经过上述操作屏幕上的图象如下。注意激活图象,每个峰和谷都标注了刚刚输入到峰值检测表中的说明。



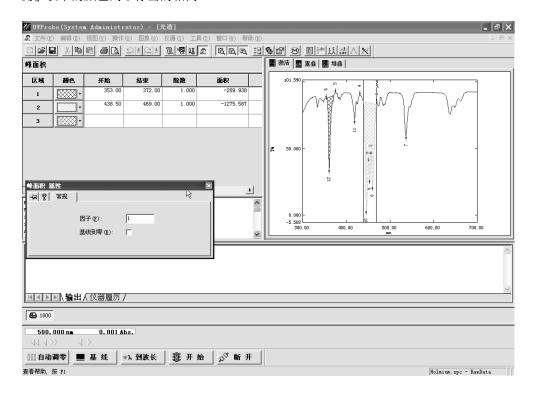
2.4.2 第二步 - 建立峰面积表

峰面积用于计算曲线下的区域。峰面积包含一个或多个区域,每个区域相当于表中的一列,并且包含定 义一个区域的开始波长和结束波长。输入定义一个区域开始波长和结束波长,峰面积将返回区域值。每 一个打开的数据集均可定义不受数目限制的区域。

现在,将图象的 X 轴的范围改变为 300 到 400 nm,如何改变图象范围请参考 2-7 页。

在峰面积上定义区域

- 1. 选择[操作]-[峰面积],调整图象尺寸以在图象上显示峰面积表的每列(最后一列是描述列)。
- 2. 选取「峰面积检测〕表,点击「开始〕列作为区域 1。
- 在开始波长中输入 350,按 [Tab]或 [回车],然后在结束波长中输入 365。
- 4. 按下 [回车] 键定义峰面积范围。屏幕的外观类似下图。注意,读数条恰好在开始和结束波长的 位置上,曲线下的面积涂有颜色并有一定的格式。区域1的[颜色]和涂色类型将与[峰面积检 测]表中的颜色列中标出的相同。



2.4.3 第三步 - 处理峰面积表和图象

峰面积表和峰面积图象都可进一步被处理。在这一部分,改变表中的除数,观察其对结果列的影响。然后在图象上设置[基线到零]。

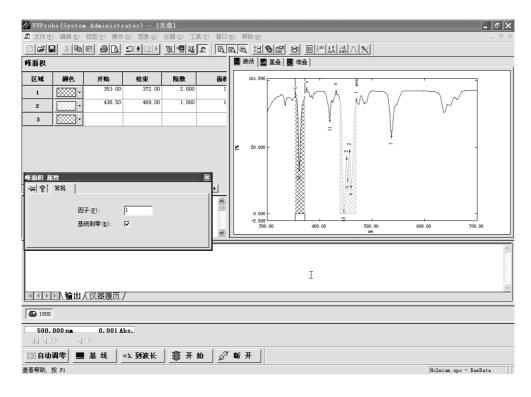
改变 除数

- 1. 将峰面积表中 [除数]列的 [除数]改为 2。
- 2. 按下回车键。观察除数的变化对峰面积表中结果列的影响。结果将是面积将除以 2, 是面积值的一半。

区域	靜色	开始	结束	除数	面积	结果	描述
1	- T	353.00	372.00	2.000	-289. 938	-144. 969	
2	-	438.50	469.00	1.000	-1275, 587	-1275, 587	
3	- T						

改变 基线到零

- 1. 将 Y 轴的最小值改为 -10, 便于观察操作的结果。
- 2. 点击 [峰面积检测]表,更新销入的 [属性]页。
- 3. 在峰面积属性页中,点击 [基线到零]核选框。注意计算得到的面积和结果将同时更新,图象上峰面积区域的基线变成零。



2.4.4 第四步 - 建立新的区域

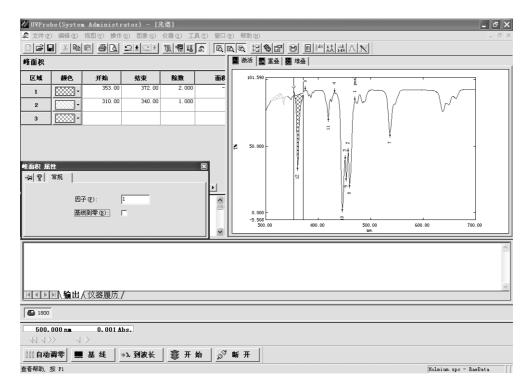
可在图象上使用读数条定义区域,而不必在峰面积表上手动键入开始和结束值。

使用读数条建立 区域

- 1. 点击「属性〕页中的「基线到零〕使基线返回原先的值。
- 2. 点击 [峰面积检测]表中的区域 2。
- 3. 在图象中,拖拽左边的读数条到波长读数 310。
- 4. 拖拽右边的读数条到340。至此,在图象上定义了一个新的区域。

定义颜色和涂色类型

- 1. 在 [峰面积检测] 表的区域 2 中,点击 [颜色] 列中的颜色键或颜色键边上的向下箭头。
- 2. 选择与先前区域不同的颜色和涂色类型。点击「确定」。
- 3. 点击 [基线到零] 复选框。注意图象上区域 2 的颜色和涂色类型的变化。见下图。



注释

自定义颜色可通过 颜色菜单中的 C(自定义)选项定义。如果定义的区域较多的话此功能有用。

保存数据

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 输入峰作为文件名。
- 3. [文件类型]选择为[光谱文件(*.spc)],点击[保存]。

2.4.5 处理数据集

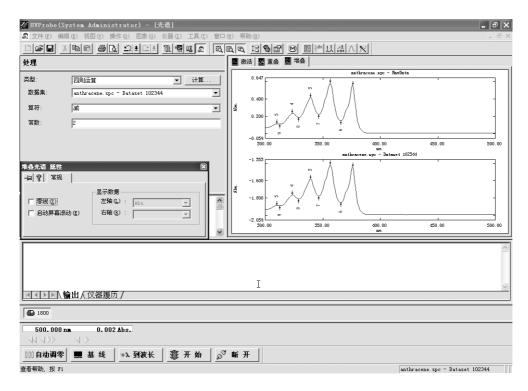
把文件 anthracene.spc 中的原始数据集处理建立两个新的数据集,并用堆叠图象方式显示这些数据集。 首先,先除去当前内存打开文件,使堆叠图象只显示 anthracene.spc 的数据集。

从内存中删除文件

- 1. 选择 [文件] [属性]。
- 2. 选择 [文件属性] 对话框,轮流点击各文件,然后点击 [删除]。
- 3. 当最后一个文件被删除后出现对话框,点击 [是]。
- 4. 当所有文件都从内存中删除后点击 [关闭]。

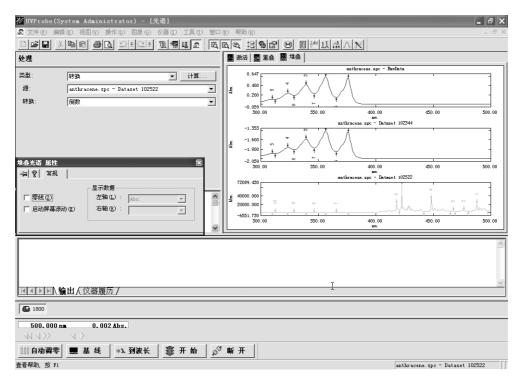
打开新文件和进行四则运算处理

- 1. 选择 [文件] [打开]。
- 2. 在数据路径中,选择打开文件 [anthracene.spc]。
- 3. 选择 [操作] [处理]。
- 4. 确认操作面板上的 [类型] 是 [四则运算]。
- 5. 在 [数据集]列表中,检查是否选择了 [anthracene.spc-RawData]。
- 6. 在[算符]目录中,选择[减]。
- 7. 在[常数]输入框中输入2,点击[计算]。
- 8. 在 [新数据集] 对话框中输入 SubTwo 作为数据集名。点击 [确定]。
- 9. 点击图象中 [堆叠]标签以显示所有打开的数据集。注意,现在图解面板显示两个图象。一个图显示原始数据,另个显示处理得到的数据,其吸收值在整个波长范围内比原始数据的吸收值小 2。



使用倒数转换建立数据集

- 1. 在 [类型] 列表框中选择 [转换]。
- 在「源〕列表中选择「anthracene.spc-RawData]。
- 3. 在 [转换] 列中选择 [倒数]。
- 4. 点击 「计算]。
- 在 [新数据集] 对话框中,输入倒数作为 [数据集名], 然后点击 [确定]。 5.
- 如下图所示。注意到有三个图象,每个数据集一个图象。



存储数据为别的文件

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 输入处理作为文件名。
- 3. 点击 [保存]。存储的文件有三个数据集。

2.5 练习三 - 高级技巧

在这个练习中

- 使用池定位装置和自动扫描功能采集数据。
- 使用 UVProbe 复制和粘贴位图和表格到写字板 (视窗软件包括的字处理功能)。

<第一部分-通过池定位装置采集数据>

使用练习中存储的数据采集进行池定位装置和使用自动扫描功能采集数据, 当设有池定位装置附件时,可跳过此练习。

制备三个光谱特性接近的样品。

2.5.1 第一步 - 加载和修改存储在磁盘中的数据采集方法

此处,打开一个先前存储的数据采集方法文件,然后把方法修改成使用多联池定位装置和自动扫描功能 的方法采集数据。当自动扫描激活时,只要输入一个文件名, UVProbe 自动在此文件名后加上数字的 后缀并把每次扫描得到的数据存储到该文件中。

加载数据采集方法

- 1. 选择「文件]-「打开]。
- 2. 在 [文件类型] 列表框中,选择 [方法文件 (*.smd)]。
- 3. 选择文件 [SpecMeth.smd]。
- 4. 点击 [打开]。

修改采集方法

- 1. 如果尚未连接仪器点击 [连接]。
- 2. 选择「编辑]-「方法]。

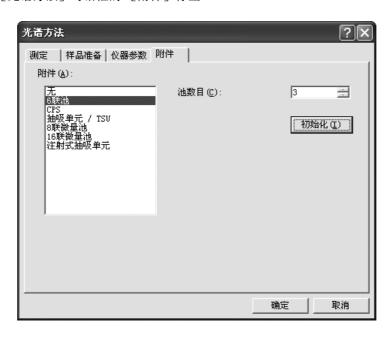


- 3. 选择 [测定] 标签,确认下列各项:
 - 开始波长: 600
 - 结束波长: 450
 - 扫描速度: 中速
 - 采样间隔: 1.0
- 4. 在扫描方式下,点击[自动]切换到自动扫描方式。
- 5. 在文件名框中,输入自动池作为扫描得到数据的基础文件名。
- 6. 点击 [仪器参数]标签。
- 7. 确定[测定方式]是[吸收值]。

2.5.2 第二步 - 配置定位装置

下面将配置池定位装置,指定使用的池的个数并初始化附件。初始化池定位装置,准直和移动到正确的采集数据的位置。

1. 点击 [光谱方法] 对话框的 [附件] 标签。



- 2. 选择附件列表中的定位装置。
- 3. 输入3,指定使用的池数。
- 4. 点击 [初始化],注意此时分光光度计移动池定位装置到适当的位置。
- 5. 当池定位装置定位完毕,点击 [确定],光度计按键栏上将包含两个用于移动池的键。



2.5.3 第三步 - 从内存除去数据

内存中的文件 [anthracene.spc] 应该除去,这样只留下使用池定位装置采集的数据集。

- 1. 选择 [文件] [属性]。
- 2. 在[文件属性]对话框的[加载数据]框内,展开数据树,轮流点击每个文件并点击[删除]。
- 3. 当最后一个数据集被删除时将弹出一个提示对话框,点击 [是]。
- 4. 当从内存中删除所有的文件后,点击 [关闭]。

2.5.4 第四步 - 采集数据

选择将使用池定位装置采集三个样品的数据。

用池定位装置采集数据

- 把三个样品放入池定位装置样品室最前面池架中。更详细的信息请参考分光光度计的仪器说明书。
- 2. 点击光度计按键栏上的 [开始]键,启动扫描。当扫描完成后,池定位装置将移动到下一个池。 此时不会显示 [新数据集]对话框,因为不是采用单次扫描方式。
- 重复上述步骤,测定其余样品。 3.
- 4. 当所有的扫描完成后,在重叠图象上点击鼠标右键,然后选择 [自动标尺],显示全部数据。
- 5. 选择[文件]-[属性]。注意在加载数据列表中有三个文件。每个文件名均包含基本名和时间标 志。



6. 点击 [关闭]。

保存所有数据

• 选择 [文件] - [全部保存]。

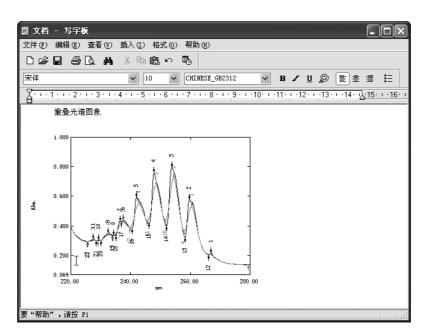
< 第二部分 - 使用 UVProbe 和视窗软件的写字板 >

在本节中,数据从光谱模块输出到写字板。写字板是视窗 9X/NT 操作系统中包括的一般目的的字处理器。写字板中使用的一些操作技巧与多数字处理软件相同。

2.5.5 第一步 - 复制和粘贴一个位图到写字板

现在将重叠图象复制到写字板。从 UVProbe 复制的图象可以粘贴到其他文档中,UVProbe 把图象转换成位图(*.bmp)文件。

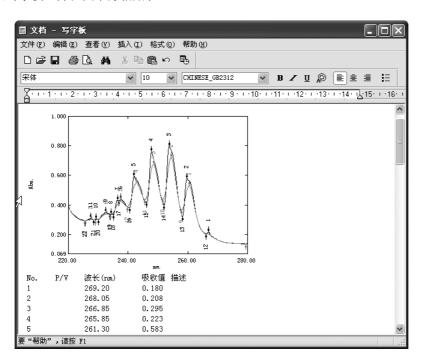
- 1. 选择 [开始] [程序] [附件] [写字板]。
- 2. 键入重叠光谱图象到空白的写字板文档中,按返回键。
- 3. 返回光谱模块中并点击 [重叠]图象。
- 4. 选择[编辑]-[复制],复制图象。
- 5. 返回写字板。选择 [编辑] [粘贴] 来将一个光谱的位图图象粘贴到写字板文档中。如下图所示。



2.5.6 第二步 - 复制和粘贴表格到写字板

现在将把峰值检测表复制到写字板。在 UVProbe 中, 当一个表格复制和粘贴到其他文档时, UVProbe 把表格转换成文本的形式。

- 1. 返回光谱模块。
- 2. 选择 [操作] [峰值检测]。
- 3. 在表上单击鼠标右键,显示快捷菜单并选择 [全选]选项以选择整个峰值检测表。
- 4. 选择[编辑]-[复制],或使用快捷菜单。
- 5. 返回写字板,并在图下方粘贴表。



注释

数据也许需要进行适当的处理,使各列与其标题对准。

至此光谱讲座完毕。

第三章 光度 测定模块 第二课

光度测定模块主要用于测试样品中某种物质的浓度;使用分光光度计测定并建立工作曲线,利用工作曲线计算未知样品的浓度值或者通过建立与自定义方程获得推导值。

注释

如果采集数据的仪器型号与 UVProbe 设置的不符,请勿打开该数据文件 (参考以下内容)。由于无法加载仪器型号固有的信息,文件中的测定参数 (狭缝宽等)被复位,将失去测定时的信息。

- 光度测定文件 (*.pho)
- 测定方法文件 (*.pmd)

• 标准样品文件 (*.std)

- UVPC 相关软件文件 (*.std、*.mwg、*.gnt、*.pho)
- 样品 (未知样品) 文件 (*.unk)

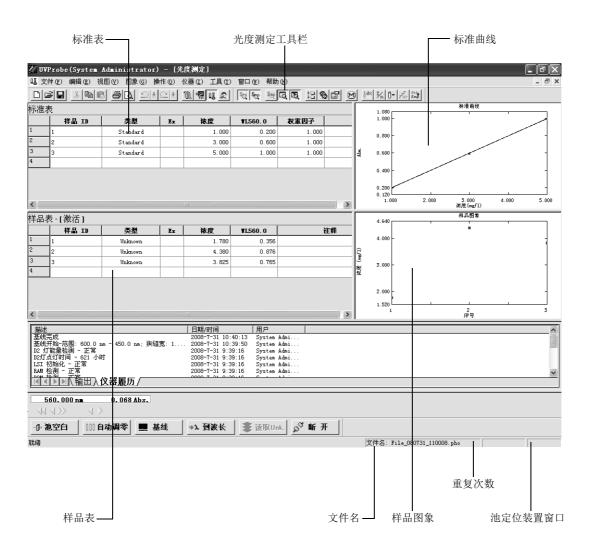
这种情况下,请先在主窗口的仪器切换栏中选择型号(仪器),然后再打开文件。仪器切换栏的显示 / 隐藏可通过"视图"菜单更改。详细内容请参考在线帮助。(在关键字中输入"仪器"后选择"切换栏"。)如果该型号尚未登记到 UVProbe,按本使用说明书中"绪论"-"UVProbe 功能"-"与分光光度计的通讯"-"增加和配置仪器"顺序添加。

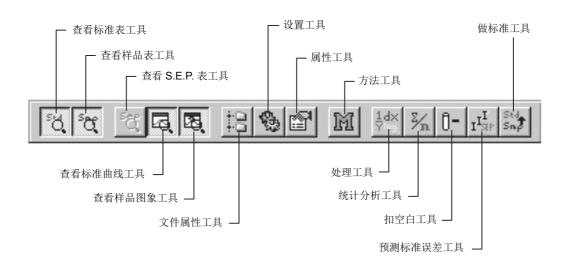
该模块包括四个区域 — 标准表、标准曲线、样品 /S.E.P. 表、样品图象。每个区域具有其独特的功能,只有样品 /S.E.P. 表面板除外,该面板可以显示样品表或预测标准误差表 (两个表的切换方法参考在线帮助。) 本课程包含三个练习:

- 基础测试
- 基础光度测定操作
- 高级光度测定技术

目录

3.1	光度测定窗口	3-2
3.2	光度测定工具栏	3-3
3.3	设置和编辑光度测定方法	3-4
3.4	练习 一 - 基本测量	3-7
	<第一部分-建立标准曲线>	
	< 第二部分 - 测量标准样品 >	3-9
	<第三部分 - 读取未知样品 >	3-13
3.5	练习二-基本光度测定操作	3-16
3.6	练习三 - 光度测量高级技巧	3-23
	< 第一部分 - 自定义方程式 >	3-23
	<第二部分 - 使用 抽吸单元采集数据 >	3-28





当新的光度测定方法建立时, 光度测定向导启动。 根据向导的提示完成方法的设定。

如果光度测定方法已经建立或者打开方法文件时,向导并不启动,而是打开光度测定方法属性页。已 建立的测试方法可以在此处编辑。但是,在测定开始后禁止编辑参数。

新建测定方法

编辑测定方法

建立新的测定方法

当新的光度测定方法建立时, 光度测定向导启动。

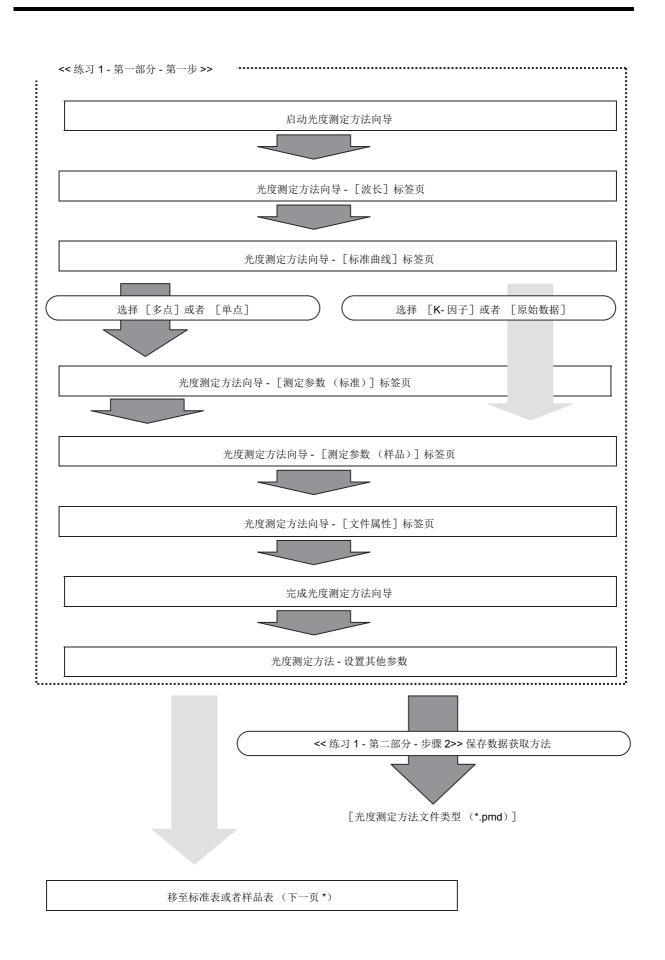
根据向导的提示完成方法的设定。

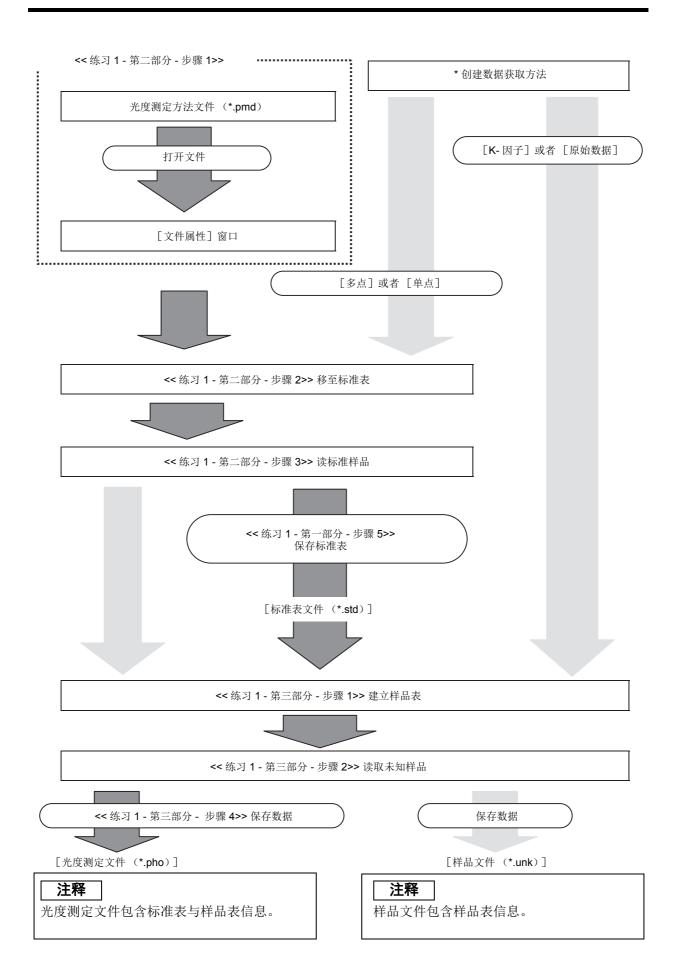
- 1. 当光度测定窗口未打开时,在窗口菜单下选择光度测定以激活光度测定模块。
- 2. 选择 [文件] [新建]。
- 3. 选择 [编辑] [方法]。
- 4. [光度测定方法向导]启动。

设置波长

此窗口设置测定用波长与波长范围。设置的波长或者波长范围作为一列添加到表中。测量值将在波长 列或者波长范围列中显示。

- 1. 在 [波长类型]选择框中选择 [点]或者 [范围]。
- 2. 如果您选择的是 [点],请按以下内容设置: 添加点波长(测定用波长)
- 3. 如果您选择的是「范围」,请按以下内容设置: 添加波长范围(测试用波长范围)
- 4. 单击 [下一步]。





3.4 练习一-基本测量

在这个练习中:

- 建立标准曲线
- 读取未知样品

<第一部分-建立标准曲线>

开始之前:

- 选择 [窗口] [光度测定] 打开光度测定模块。
- 确认仪器已经连接。
- 执行基线校正 (参考第一课 2-1 页)。
- 建立数据采集方法

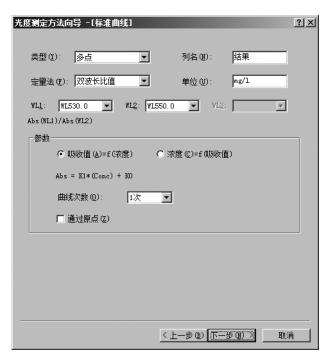
3.4.1 第一步 - 建立数据采集方法

建立一个多点标准曲线的数据采集方法,这个方法将测定 530 nm 550 nm 的吸光度,并将计算这两个波长的吸光度比值。

- 1. 选择 [文件] [新建],或者单击工具栏上的 [新建]图标。
- 2. 选择[编辑]-[方法],或者单击工具栏上的[方法]图标。
- 3. [光度测定方法向导]将启动。
- 4. 在 [波长] 输入框中键入测量时指定波长 530 , 然后选择 [加入]。接着, 输入 550, 选择 [加入]。



5. 其余参数为默认值,单击 [下一步]。



- 6. 在 [类型]选择框中选择 [多点],标准曲线将基于多个数据点建立。
- 7. 在[公式]选择框中选择[双波长比值]。
- 8. 在 [WL1] 选择框中选择 [WL530.0]。
- 9. 在 [WL2] 选择框中选择 [WL550.0]。
- 10. 确认 [列名] 框中输入的为 [结果] 以保证 [结果] 列加入到在表中。当读取每个样品后, [结果] 列显示的是 530 nm 下的吸光度除以 550 nm 下的吸光度的结果。
- 11. 在 [曲线次数]选择框中选择 [3次]。
- 12. 单击 [下一步] 键。
- 13. 将出现[测定参数(标准)]标签页。在此页中可以设置标准样品数据的采集方法(用户输入或 仪器测量)。此练习不做任何更改,直接点击[下一步]键。
- 14. 将出现 [测定参数 (样品)]标签页。在此页中可以设置未知样品数据的采集方法 (用户输入或 仪器测量)。此练习不做任何更改,直接点击[下一步]键。
- 15. 将出现 [文件属性]页。不做任何更改,点击 [完成]键。

注释

此标签页设置的是待测数据的文件信息。在依据建立的测量方法执行测量时,在此标签页中输 入文件名称等相关信息。本章讲解的是测量方法的建立与保存,因此此标签页的设置不在此处 说明。



16. [光度测定方法]窗口出现,点击[仪器参数]选项卡。

- 17. 在「测定方式]选择框中,选择「吸收值]。
- **18**. 在 [狭缝宽] 选择框中 选择 [2.0]。(如果使用固定狭缝的仪器测量请跳过此操作)。此标签页中的其他参数保留默认值。

关闭

19. 点击 [关闭]。确认标准表与样品表中均含有 [WL530.0]、[WL550.0] 和 [结果] 列。

3.4.2 第二步 - 保存数据采集方法

将建立的数据采集方法保存起来,以便以后测量使用。当前的方法将保存为后缀为*.pmd 的文件。依照以下步骤练习。

- 1. 选择 [文件] [另存为],确认存储目录在 Data 文件夹下。
- 2. 在文件名输入框中输入 PhotoMeth。
- 3. 在 [保存类型] 选择框中 选择 [方法文件 (*.pmd)],点击 [保存]。

< 第二部分 - 测量标准样品 >

使用第一部分建立的测量方法执行以下操作,建立并查看校准曲线。

- 输入文件信息
- 建立标准样品表
- 测量标准样品
- 查看校准曲线

开始之前,请先准备不同浓度的5个标准样品。

注释

如果您选择的是手动输入的方式,就没必要准备标准样品了。此外,输入数据时,请输入与测定结果显示实例相同的值。

3.4.3 第一步 - 输入文件信息

设置诸如文件名称等与测试数据相关的信息。如果使用保存的方法执行测量时,请在测量之前输入文 件信息。

注释

当创建新的测量方法并执行测量时,请在测量方法向导中输入文件信息。 本节将对调用保存的测量方法执行测量测量的过程中输入文件信息进行说明。

- 1. 选择 [文件] [新建] 关闭已经存在的测量方法。
- 2. 选择 [文件] [打开]。确认文件夹列表中显示的是 Data 文件夹。
- 3. 选择 [文件类型]选择框 [方法文件 (*.pmd)]。在文件列表中双击 [PhotoMeth.std] 打开 文件。
- 4. [文件属性]窗口出现,在[文件名]对话框中输入 Photo 1。文件扩展名可以忽略。
- 5. 当需要输入标题与注释时,请分别在[标题]对话框与[注释]对话框中输入。此练习保留空白 不输入。
- 6. 点击「确定〕按钮。

3.4.4 第二步 - 填充标准表

标准表是已知浓度物质在指定波长或几个波长下采集得到的数据(吸收值、透射率、能量或反射率) 的结果表。WL530.0, WL550.0 和结果列已经加入到表中。下面将要加入样品标识符和浓度值列建立 完整的标准表。

输入标准表中的 样品 ID 与 浓度

1. 双击标准表中的任意位置激活标准表,在表头位置将显示激活。

标准表	₹-[激活]								
	样品 ID	类型	Ex	袜度	TL530.0	¥1.550.0	结果	权重因子	注释
1									

2. 在标准表中输入下表中的样品 ID 与浓度值。

样品 ID	浓度
DyeA	0.0
DyeB	25.0
DyeC	50.0
DyeD	75.0
DyeE	100.0

填充后的表如下图所示

标准表	長-[激活]								
	√ 样品 10	类型	Ex	浓度	¥L530.0	¥1.550.0	结果	权重因子	注释
1 *	DyeA			0.000				1.000	
2	DyeB			25.000				1.000	
3	DyeC			50.000				1.000	
4	DyeD			75.000				1.000	
5	DyeE			100.000				1.000	
6									

3.4.5 第三步 - 读取 标准样品

使用分光光度计测量每一个标准样品, UVProbe 将使用获得的数据建立校准曲线。

注释

如果使用手动输入的方式代替仪器读取的方式,请参考下面关于手动输入标准曲线数据的相关页说明。

读取样品

1. 点击 光度计按钮栏 的 [连接]按钮。按钮栏如下图所示。



2. 将第一号标准样品放入样品室中,点击[读取 Std.],或者按下键盘上的 F9 键。

注释

当出现"这个标准没有关联的空白,是否继续?"提示时,点击 [是 (Y)]。

分光光度计旋转到每个波长下,测量样品的吸光度, UVProbe 将得到的值在标准表中的 WL530.0, WL550.0 与 结果列中显示。

3. 依次将余下的样品放入样品室,并完成测量。

注释

完成方法设定 (如波长,狭缝宽等),在标准表中输入样品 ID 与浓度后,将激活 [读取 Std.]按钮,即可读取标准样品。

手动输入标准曲线数据 (附加操作)

注释

使用分光光度计读取数据时跳过此节。

- 1. 选择[编辑]-[方法]-[测定参数 (标准)]标签页,确认数据采集方式选择的为[用户输入],保证可以直接在标准表中的波长列输入数据。
- 2. 点击 [关闭]。

将下表中的数据输入到标准表中:

样品 ID	浓度	WL530.0	WL550.0
DyeA	0	0.040	0.040
DyeB	25	0.300	0.050
DyeC	50	0.520	0.030
DyeD	75	0.920	0.175
DyeE	100	1.080	0.070

UVProbe 教程 ■■■■■ 3-11

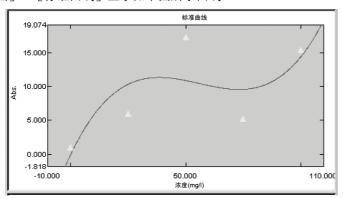
输入后 UVProbe 会计算出 [结果] 列的值,如下表所示。

	样品 ID	类型	Ex	浓度	¥L530.0	TL550.0	结果	权重因子	注释
1	DyeA	Standard		0.000	-0.000	-0.000	-0.000	1.000	
2	DyeB	Standard		25.000	0.388	0.066	0.322	1.000	
3	DyeC	Standard		50.000	0.462	0.139	0.322	1.000	
4	DyeD	Standard		75.000	0.838	0.506	0.332	1.000	
5	DyeE	Standard		100.000	1.211	0.872	0.340	1.000	
6									

3.4.6 第四步 - 查看 标准曲线

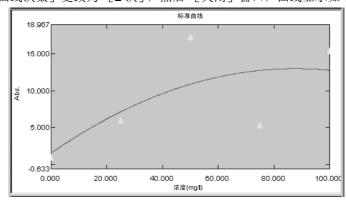
现在曲线已经依照标准表中的数据创建,可以查看工作曲线,同时也可以变更工作曲线方程的次数。 观察由此对曲线产生的影响。

1. 选择 [视图] - [标准曲线] 显示如下图所示曲线:



请注意每一个点对应一个样品 ID。

2. 改变曲线方程的次数。[选择编辑] - [方法],或者点击 [方法]图标。点击 [标准曲线]标签 页。将 [曲线次数] 更改为 [2次], 然后 [关闭] 窗口, 曲线显示如下图所示:



- 3. 重复以上操作步骤,将曲线次数更改为 [1次]。 如图所示,第3次曲线最接近数据点,而第1次曲线是一条直线。
- 4. 将 [曲线次数] 更改回 [3次]。

3.4.7 第五步 - 保存标准表

本课程后面的讲解将会使用现在保存的标准表。

- 1. 选择 [文件] [另存为],确认保存路径为 Data 文件夹。
- 2. 在[文件名]输入框中输入 Standard1, 然后在[保存类型]框中选择[标准文件(*.std)]。
- 3. 点击 [保存]。

< 第三部分 - 读取未知样品 >

现在,标准曲线将被用来计算未知样品的浓度:

- 填充样品表
- 读取未知样品
- 查看样品图象

开始之前,请准备5个性质相近的未知样品。

3.4.8 第一步 - 建立 样品表

样品表记录的是一种物质未知浓度的样品的测量值(吸光度、透过率、能量或者反射率)。 UVProbe 通过标准曲线计算样品表中每个条目的浓度。

标准表与样品表数据采集方法设置应该是相同的,除了测量参数信息以外。为每一个将被测量的未知样品输入「样品 ID]。

- 1. 点击样品标准的任意位置,将在样品表头的位置显示激活。
- 2. 在样品表中的样品 ID 列中输入以下信息: DyeF、DyeG、DyeH、DyeI、DyeJ。样品表显示如下 图:

样品表	長-[激活]							
	样品 ID	类型	Ex	浓度	TL550.0	¥L530.0	结果	注释
1	DyeF							
2	DyeG							
3	DyeH							
4	DyeI							
5	DyeJ							
6								

3.4.9 第二步 - 读取 样品表

现在可以开始读取未知样品了,手动输入除外。手动输入代替仪器测量的操作过程参考下面的手动输入样品表数据。

注释

使用手动输入数据的方式完成标准表的采集。

在样品表中,在[光度测量方法]标签页下的[测定参数(标准)]标签页设置数据获取方法为「手动]。

- 1. 将未知样品放入到分光光度计的样品室中。
- 2. 点击 [读取 Unk.] 按钮。



仪器将读取每个波长的数据,并根据计算结果对照标准曲线得到样品的浓度。

3. 重复以上操作,测试余下的四个样品。注意查看结果。浓度值基于标准曲线获得。

注释

保存样品用于练习2。

注释

当完成方法设置后(诸如波长、狭缝宽等),在样品表中输入样品 ID。此操作将激活 [读取 Unk.],可以读取未知样品数据。

手动输入样品表数据

如果已经取得了未知样品的数据,跳过此步骤,然后查看样品图象。

- 1. 选择 [编辑] [方法]。
- 2. 在[测定参数(样品)]标签页,选择[用户输入],直接在[波长]列中输数据。
- 3. 点击 [关闭]
- 4. 在样品表中输入下表中的数据:

样品 ID	WL530.0	WL550.0
DyeF	0.150	0.035
DyeG	0.400	0.031
DyeH	0.650	0.095
Dyel	0.840	0.130
DyeJ	1.000	0.068

样品表如下图所示:

样品表	長-[激活]							
	样品 ID	类型	Ex	浓度	¥L550.0	₩L530.0	结果	注释
1	DyeF	Unknown		7.009	0.035	0.150	4. 286	
2	DyeG	Unknown		96.163	0.031	0.400	12.903	
3	DyeH	Unknown		12.503	0.095	0.650	6.842	
4	DyeI	Unknown		11.580	0.130	0.840	6. 462	
5	DyeJ	Unknown		100.827	0.068	1.000	14.706	
6				9				

注释

当曲线次数不是3次,结果将会不同。

3.4.10 第三步 - 查看样品图象

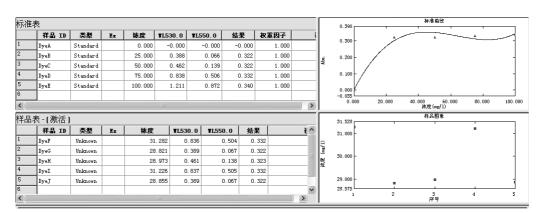
改变曲线次数,查看由此对样品表与样品图象产生的影响。

改变 曲线次数

- 1. 选择[编辑]-[方法]
- 2. 点击 [校准曲线]标签页,然后将 [曲线次数]更改为 [1次]。
- 3. 点击 [关闭]。注意浓度数值的变化。

样品表	長-[激活]							
	样品 ID	类型	Ex	浓度	TL550.0	TL530.0	结果	注释
1	DyeF	Unknown		7.009	0.035	0.150	4. 286	
2	DyeG	Unknown		96.163	0.031	0.400	12.903	
3	DyeH	Unknown		12.503	0.095	0.650	6.842	
4	DyeI	Unknown		11.580	0.130	0.840	6.462	
5	DyeJ	Unknown		100.827	0.068	1.000	14.706	
6			0					

4. 重复以上操作,将[曲线次数]改为[2次]。注意第五个点将不能被输出。Dye J 的浓度无法通过二次曲线计算出来。



5. 将[曲线次数]更改为[3次]。

3.4.11 第四步 - 保存数据

标准表与样品表的数据将被保存。光度测定文件包含了标准表与样品表的信息。如果在打开测试方法时设置了文件名称,覆盖保存。

1. 选择 [文件] - [保存]。

在这个练习中

- 使用自动填充与重复扫描建立标准表
- 使用重复测定建立标准表
- 使用不同的工作曲线计算未知样品的浓度
- 显示统计数据
- 执行倒数操作

注释

在这个练习中使用练习1中建立的样品。

3.5.1 第一步 - 使用 自动填充标准表

打开前面保存的方法,使用自动填充功能填充标准,并保存该表以便以后的练习使用。

打开保存的方法

- 1. 选择 [文件] [新建]
- 2. 选择 [文件] [打开],确认 Data 文件夹打开。
- 3. 在 [文件类型]框中,选择 [方法文件(*.pmd)],双击 [PhotoMeth]。 [文件属性] 窗口被打开。在此步骤中,文件没有被保存。不做任何修改,直接点击 [确定] 按钮。

使用自动填充名称 样品 ID

- 1. 点击 [方法]图标
- 2. 点击 [测定参数 (标准)]标签,在 [数据采集由]部分,点击 [仪器]按钮,点击 [关闭]。
- 3. 在标准表上点击右键,在快捷菜单中选择 [属性]。
- 4. 选中 [自动填充]选择框。注意 [样品 ID 名称] 与 [步长值]将被激活。
- 5. 在 [样品 ID 名称] 中输入 Batch, 然后点击 [标准表], 关闭属性页。



- 6. 在标准表中的 [Batch] 行的 [浓度] 列输入 1.0。
- 7. 将标准样品放入到样品室中。

8. 点击 [读取 Std.]

注释

出现以下提示信息时,点击 [是 (Y)]。"这个标准没有关联的空白。是否继续?"

注意,当读取完成后下一个样品的样品 ID 将自动填充。

9. 重复以上操作,依次完成浓度为 2-5 的四个样品的读取。

保存标准表

- 1. 选择 [文件] [另存为],确认在 [保存]框中打开的是 Data 文件夹。
- 2. 在「文件名]输入框中,输入 Auto Fill,在「保存类型]中选择 「标准文件(*.std)]。
- 3. 点击 [保存]。

3.5.2 第二步 - 使用 重复功能填充标准表

使用 PhotoMeth.pmd 建立另外一个标准表,并采用重复测定功能。

打开已保存的方法

- 1. 选择 [文件] [新建]。
- 2. 选择 [文件] [打开]。确认打开的是 Data 文件夹。
- 3. 在 [文件类型]框中,选择 [方法文件 (*.pmd)],然后双击 [PhotoMeth]。 文件属性窗口被打开。在此步骤中,文件没有被保存。不做任何修改,直接点击 [确定]按钮。

使用重复测量

- 1. 选择[编辑]-[方法]。确认[数据采集由]设置的为[仪器]。
- 2. 点击 [测定参数] 标签页,将样品的 [重复次数] 更改为 3 次,然后点击 [关闭]。

注释

如果每次测量结束需要显示提示信息,在[测定参数]标签页上选中[重复前提示!]

3. 在标准表中输入如下的样品 ID 与浓度值。

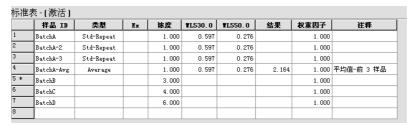
样品 ID	浓度
BatchA	1
BatchB	3
BatchC	4
BatchD	6

- 4. 将标准样品放入到样品室中。
- 5. 点击 [读取 Std.] 按钮。

注释

出现以下提示信息时,点击 [是 (Y)]。"这个标准没有关联的空白。是否继续?"

注意仪器将读取三次,并自动更新样品 ID。



重复4和5的操作测量其他3个样品。

注释

在 [光度测定方法]属性页的 [测定参数 (样品)]中设置未知样品的重复次数和数量。

隐藏重复

- 1. 在标准表上点 右键。
- 点击 [显示重复]。注意在类型列中只显示每个样品的平均值。



保存 标准表

- 1. 选择 [文件] [另存为],确认 [保存]路径为 [Data]文件夹。
- 2. 在[文件名]输入框中输入 Repetition, 然后在[保存类型]中选择[标准文件(*.std)]。
- 3. 点击 [保存]。

3.5.3 第三步 - 使用不同的标准曲线 计算未知样品浓度

未知样品的浓度根据标准曲线计算得到,如果使用不同的标准曲线,浓度同样也会不同,请观察使用 不用标准曲线对样品浓度的影响。

注释

此步骤使用练习1中建立的未知样品。

打开标准表

- 1. 选择 [文件] [新建],清楚已经存在的标准表。
- 2. 选择 [文件] [打开]。
- 在文件类型列表中,选择 [标准文件 (*.std)],然后双击 [标准文件 (*.std)]文件。
- 文件属性窗口打开,在 [文件名] 输入框中输入浓度。扩展名不是必须的。
- 当给测量数据添加标题或注释信息时,在[标题]与[注释]对话框中输入即可。现在保留空 白。
- 点击[确定]按钮。

读取未知样品

注释

手动输入样品表参照练习 1, 3-14 页的手动输入样品表数据。

- 1. 将未知样品放入到分光光度计的样品室中。
- 2. 在 [样品 ID] 列中依次输入 SampleA 、SampleB 、SampleC 、SampleD 。
- 3. 点击 [读取 Unk.] 按钮。仪器将采集各波长的读数,然后计算结果并与标准曲线比较得到未知样品的浓度。
- 4. 重复以上步骤,完成所有样品的读取。

文件保存

注释

当加载标准样品表时设置了文件名,覆盖保存即可。

1. 选择 [文件] - [保存]

比较不同标准表中的浓度

- 1. 选择 [文件] [打开]。
- 2. 在文件类型中选择 [标准文件 (*.std)], 然后双击 [AutoFill.std] 打开。
- 3. 文件属性窗口打开,此步骤未保存文件,不做任何改变,点击 [确定]按钮。
- 4. 注意样品表中浓度列数值的变化。

样品ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	注释
Sample A	Unknown		10.120	0.120	0.030	4.000	
Sample B	Unknown		10.488	0.155	0.035	4.429	
Sample C	Unknown		10.828	0.185	0.038	4.868	
Sample D	Unknown		10.761	0.215	0.045	4.778	

- 5. 选择 [文件] [打开]
- 6. 在文件类型中选择 [标准文件 (*.std)],双击 [AutoFill.std] 打开文件。
- 7. 文件属性窗口打开,此步骤未保存文件。不做任何更改,点击 [确定]按钮。
- 8. 注意样品表浓度列数值的变化。

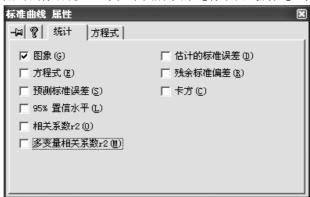
样品ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	注释
Sample A	Unknown		12.605	0.120	0.030	4.000	
Sample B	Unknown		13.116	0.155	0.035	4.429	
Sample C	Unknown		13.586	0.185	0.038	4.868	
Sample D	Unknown		13.493	0.215	0.045	4.778	

3.5.4 第四步 - 显示统计

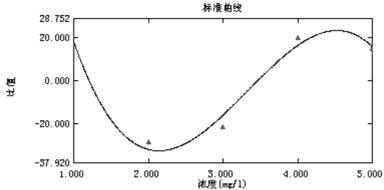
数字方程和图像统计 (95% 置信水平和预测标准误差) 可以使用标准取向图像属性页显示。95% 置 信水平 (也称为95%置信带)的定义是:如果重复测定100次,将有95次的结果位于该范围之内。 预测的标准误差 (S.E.P.) 是非标准曲线点已知浓度 (湿化学分析结果) 的样品与使用的标准曲线预 测得到的浓度之间的差别。

显示 标准曲线方程式

- 1. 选择 [文件] [打开]。
- 2. 在 Data 文件夹中,双击 [Photo1.pho]。
- 3. 选择 [视图] [属性]。
- 4. 在标准曲线上点击鼠标右键,显示如下图所示的[标准曲线属性]对话框。



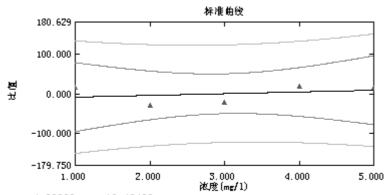
5. 选择 [方程式] [相关系数 r2] 和 [残余标准偏差]。注意显示在标准曲线左下方的统计结果。



y = -8.20627 x3 + 82.07172 x2 - 238.63684 x + 182.88736 相关系数x2 = 0.08675 残余标准偏差 = 3.62263

显示 标准曲线的统计结果

- 1. 更改曲线次数。在[编辑]菜单中选择[方法],显示[光度测定方法]对话框,点击[标准曲线]标签。在[曲线次数]列表中选择更改为[1次]后点击[关闭]。
- 2. 打开属性页,点击 [95%置信水平]和 [预测标准误差]复选框。
- 3. 在标准曲线上点鼠标右键,选择 [自动标尺]。注意图像上出现 4 条新的曲线,如下图所示



y = 4.32280 x = 12.48489 相关系数r2 = 0.08675 残余标准偏差 = 22.17600

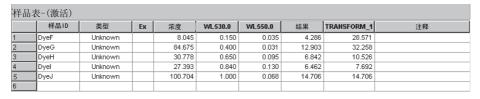
3.5.5 第五步 - 执行 数据的倒数转换

使用前面建立的 Photo1.pho 文件,增加新列,并进行数据处理操作。

- 1. 点击 [样品表] 使其激活。
- 2. 选择 [操作] [处理]
- 3. 点击 [转换式]标签页
- 4. 在 [源列] 框中选择 WL550。
- 5. 在「转换]选择框中选择 1/Y, 然后点击「加入]。



点击 [关闭]。注意结果已经计算出结果,并添加到样品表中的 [TRANSFORM 1] 列中。



7. 选择 [文件] - [保存]。

注释

如果不能完整的看到列名、扩展列,详细参考在线帮助。

在这个练习中:

3.6

- 建立自定义方程
- 使用抽吸单元附件采集数据

<第一部分-自定义方程式>

下面将进行啤酒花酸分析,把啤酒和类似的饮料如 a 酸,除去二氧化碳后分析其中的啤酒花酸或其他类似的饮料。此过程便于用户进一步理解建立自定义方程式的数据采集方法。如果不想使用自定义方程式可以跳过此节!

注释

在这部分的练习中, 手动输入的方式将代替仪器测量。

本练习中的自定义方程式及因子如下:

Dilution Factor (Dil) = vol dil A (L) * vol dil B (mL) * vol dil C(mL)

Sample weight(mg) * aliquot dil A(mL) * Aliquot dil B(mL)

此处

A [VA] = 初始样品总量

B [VB] = 第一次稀释的总体积

C [VC] = 第二次稀释的总体积

Sample Weight [SW] mg = 样品的重量 (单位: mg)

Aliquot dilA [ALQA] mL = A 的等分试样 (单位: ml)

Aliquot dilB [ALQB] mL = B的等分试样 (单位: ml)

 α 酸 mg/L , β 酸 mg/L , 背景 mg/L 使用以下方程:

 $\alpha \otimes (mg/L) \text{ [Aacids]} = ((-51.56*WL1)+(73.79*WL2)-(19.07*WL3))$

β (mg/L) [Bacids] = ((55.57*WL1)-(47.59*WL2)+(5.10*WL3))

背景 (mg/L) [Bkg] = ((8.34*WL1)-(15.74*WL2)+(37.19*WL3))

最终浓度的计算公式:

% α 酸 (mg/L) [%Aacids] = Aacids*Dil*100

%β酸 (mg/L) [%Bacids] = Bacids*Dil*100

% 背景 (mg/L) [%Bkg] = Bkg*Dil*100

啤酒花储存指数 [HIS] = WL3/WL2

3.6.1 第一步 - 建立使用自定义方程式的数据采集方法

- 1. 选择「文件]-「新建],清除现有的样品表。
- 2. 在「视图]菜单下设置隐藏本练习使用不到的标准表、标准曲线和样品图。屏幕最终显示如下:



- 3. 选择[编辑]-[方法],或者单击[方法]图标。
- 在 [波长 (nm)]输入框中输入 350。
- 5. 将[列名]输入框中的 WL350 改为 WL1, 然后点击[加入], 将在 总列表中增加 WL1。(由于 该表中将有很多列,减少列名的字符有助于减少每列的列宽。)
- 6. 在 [波长] 输入框中输入 325 nm,将 [列名] 改为 WL2,点击 [加入]。
- 7. 在「波长]输入框中输入 275 nm,将「列名]改为 WL3,点击「加入]。屏幕显示如下:



- 8. 点击 [下一步], 打开 [标准曲线]页。
- 9. 在 [类型]框中选择 [原始数据]。

- 10. 点击 [下一步], 打开 [测定参数 (样品表)]。
- 11. 在 [数据采集由]选择框选择 [用户输入]。
- 12. 点击 「下一步」, 打开 「文件属性」页。
- 13. 在 [文件名] 框中输入 HopsAcid。无需输入扩展名。
- 14. 如果需要输入标题及注释信息,请在「标题]框与「注释]框中输入。此处保持空白即可。
- 15. 点击 [完成] 按钮。

添加 因子

- 1. 点击 [方程式] 标签页,点击 [因子] 按钮。
- 2. 输入 VA 作为列名,选择 [加入]。列名区分大小写,因此输入大写字母。
- 3. 重复第二步输入以下列名: VB、VC、SW、ALQA、ALQB。屏幕显示如下:



4. 点击 [关闭],保持方程式标签页处于激活状态。

创建 自定义方程式

- 1. 在[方程式]页的[类型]列表中选择[定制]。
- 2. 在[列]名中输入 Dil。
- 3. 在 [方程式] 输入框中输入: ((VA*VB*VC)/(SW*ALQA*ALQB))。确认方程式中没有空格。方程式的两个字符间不允许有空格。

注释

另外,双击 [列名] 与 [算符] 也可以建立方程式。

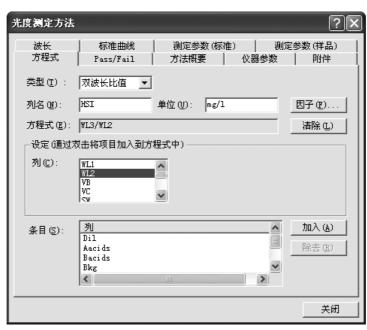
- 4. 点击 [加入],将 Dil 列加入表中。
- 5. 参考以上过程输入如下方程式。

名称	方程式
Aacids	((-51.56*WL1)+(73.79*WL2)/(19.07*WL3))
Bacids	((55.57*WL1)/(47.59*WL2)+(5.10*WL3))
Bkg	((8.34*WL1)/(15.74*WL2)+(37.19*WL3))
%Aacids	Aacids*Dil*100
%Bacids	Bacids*Dil*100
%Bkg	Bkg*Dil*100

屏幕显示如下:



- 在 [类型] 框中 选择 [双波长比值]。
- 在 [列名] 中输入 HSI。
- 8. 在 [列] 框中双击 [WL3]。
- 在 [列] 框中双击 [WL2]。



10. 点击 [加入], 然后点击 [关闭]。

3.6.2 第二步 - 保存数据采集方法

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 在文件名输入框中输入 HopsAcid。
- 3. 在[保存类型]框中,选择[方法文件(*.pmd)]。
- 4. 点击 [保存]。

3.6.3 第三步 - 填充样品表

表已经建立了, 所有的列均已定义。现在将因子值填充到表中。

- 1. 在样品表中的第一行的 样品 ID 列输入 Example1。
- 2. 在样品表中输入如下的因子:

列	值
VA	0.01
VB	50
VC	25
SW	166.5
ALQA	1
ALQB	2

3. 在波长列中输入下表中的值。正常情况下,这些值应该使用仪器读取。

列	值
WL1	0.833
WL2	0.833
WL3	0.195

保存文件

注释

当调用标准样品表时设置了文件名,保存文件时将被覆盖。

1. 选择 [文件] - [保存]。

3.6.4 第四步 - 确认 计算结果

1. 将样品表中的结果与下表进行比较,确认结果。

列	结果值
Dil	0.038
Aacids	14.80
Bacids	7.64
Bkg	1.09
%Aacids	55.56
%Bacids	28.68
%Bkg	4.09
HSI	0.234

2. 如果两者不同时,双击检查输入的数据、方程式是否输入正确。

注释

小数位数设置的不同不引起数据的不同。详细信息参照在线帮助。

3.6.5 第五步 - 显示 / 隐藏列

现在,不必要的列将被隐藏。有一些计算属中途计算步骤,因此,这些无需查看这些列。

隐藏列

- 1. 在样品表上点右键,在弹出菜单中选择「属性」。
- 2. 在属性页上选择 [列]标签页。
- 3. 在[列]的列表中,点击[Aacids],然后点击[隐藏]。此时 Aacids 列已经隐藏了,如下图:



4. 依照以上的步骤隐藏 [Bacids]与 [Bkg]列。

注释

双击 [列名] 亦可显示或隐藏列。

< 第二部分 - 使用 抽吸单元采集数据 >

现在,抽吸单元附件将被安装,然后使用此装置采集未知数据。当没有抽吸单元附件时,跳过此步。 开始之前,请准备三个未知样品用于测量。

在这个练习中:

- 安装抽吸单元附件
- 调用光度测定文件
- 改变数据采集方法
- 采集未知样品数据

3.6.6 第一步 - 安装抽吸单元附件

- 1. 选择 [文件] [新建]。
- 2. 将样品室的标准样品室移去后安装抽吸单元,然后对好位置并小心的安装好。详细的操作过程,请查看用户手册。
- 3. 选择[编辑]-[方法]。
- 4. 光度测定方法向导打开。依据向导点击 [下一步], 直至完成。无需更改任何默认设置。
- 5. 点击 [仪器参数]页,然后在 [狭缝宽]选择最大值。狭缝越大,光斑越大。
- 6. 使用名片或这厚纸片挡住检测器。
- 7. 选择 [仪器] [配置] [维护]

注释

维护页只有在联机的状态下被激活。



- 8. 点击 [设置零次光]。
- 9. 在检测器被遮挡的状态下点击 [确定]。

注释

不是所有的仪器都有设置零次光的功能。此时该选项发灰,不能使用。没有此功能时,使用[到波长]设置波长为540 nm。参考上面的步骤7、8、9。

- 10. 检查光斑照射在抽吸单元的中心位置。
- 11. 准直完成后点击 [确定]。对话框关闭后零次光将自动消失。

注释

如果抽吸单元的流通池需要调整,调节池子前的最大螺丝。滑动池子,使光斑照射到池子的中

3.6.7 第二步 - 修改数据采集方法, 使用抽吸单元

- 1. 选择 [文件] [打开]。在文件类型选择框选择 [光度测定文件 (*.pho)] 文件。
- 2. 打开 Photo1.pho 文件。
- 3. 仪器未连接时,在光度按钮栏上点击「连接]。
- 4. 选择[编辑]-[方法],或者点击[方法]图标。
- 5. 点击「附件〕页。
- 6. 在附件列表中选择 [抽吸单元/TSU]或者 [注射式抽吸单元]。
- 7. 保留默认设置,点击 [关闭]。

3.6.8 第三步 - 采集未知样品数据

抽吸单元的自动调零

1. 点击 光度计按钮的 [抽吸]键,使用纯水检查抽吸速度与时间是否足够。确保池子中没有气泡。



- 2. 点击 [自动调零]。使用流通池中的纯水执行自动调零。
- 3. 点击 [样品表],激活样品表。
- 4. 在表中输入 3 个样品 ID: Sample1、Sample2、Sample3。
- 5. 将抽吸单元的吸样管插入未知样品容器中,按下抽吸单元的按键开始采集数据。 (点击「读取 Unk.] 不能启动抽吸单元)

重复第五步,测量另外两个样品。

注释

当 [方法属性]对话框关闭时,不能改变光度测定方法的单色器波长。请使用 [λ到波长]按 钮移动单色器到指定波长后, 执行「自动调零」。

光度测定课程结束。

第四章 动力学模块 第三课

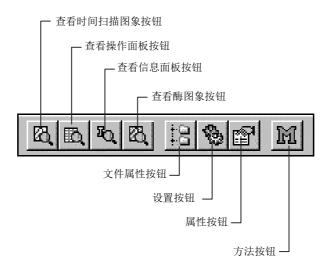
本部分介绍动力学模块,通过分光光度计观测吸收值、透过率、反射率和能量随时间的改变而发生的变化。该模块比较灵活且使用方便:

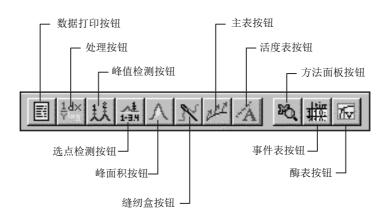
- 设计简单或复杂的数据采集方法
- 为数据采集配置不同仪器型号和附件类型。
- 处理数据功能强大如: 数据打印和峰值检测、保存数据,并且可直接从模块打印。
- 这个模块包括四个面板: 操作、信息、时间扫描图、酶图。
- 操作面板 显示在左上角,包含查看和处理所以数据的功能,如数据打印、峰面积和峰值检测,操作面板同时也显示主表和活动表。
- 信息面板 在操作面板的下方,显示测定方法、事件表、酶表。
- **时间扫描图** 面板在屏幕右上角,显示样品随时间变化的测定值(吸收值、透过率、反射率和能量)。 X 轴显示时间, Y 轴显示测定值。
- **酶图面板** 在时间扫描图面板下方,显示 Michaelis-Menten、 Hill 或 Inhibitor 的关系。 这部分包括三个部分:
- 基本测定
- 基本动力学测定
- 先进的动力学技术

内容

4.1	动力学窗口	. 4-2
	动力学工具栏	
	练习一 - 基本测定	
	练习二 - 动力学的基本操作	
	练习三 - 动力学高级技巧	







UVProbe 教程 ■■■■■ 4-3

本练习中:

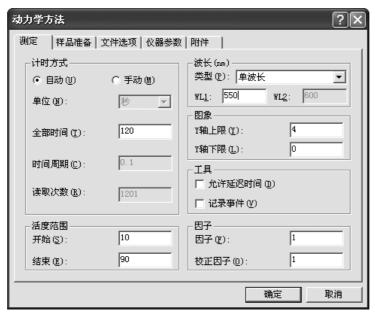
- 建立数据采集方法
- 准备乙二胺四乙酸 (EDTA) 粉末样品和去离子水。
- 测定时间曲线数据。

确保仪器正常连接,当没有仪器,按照第一部分那样被添加和设置,请看 1-29 页,与分光光度计的通 讯。

4.3.1 第一步 - 建立数据采集方法

使用自动定时方式,建立测定粉末样品在波长 550 nm 处吸收值的数据采集方法。

- 1. 选择 [窗口] [动力学] 打开动力学模块
- 2. 选择 [编辑] [方法],或点击 [方法]图标显示 [动力学方法]对话框。
- 3. 在[计时方式]下,选择[手动],当[时间周期]和[读取次数]被输入,[全部时间]不再 处于活动状态,而[时间周期]和[读取次数]是活动的。



- 4. 点击 [自动] 时间模式,设定 [全部时间],时间周期跟读取次数将自动计算,下面练习使用自 动模式。
- [全部时间] 对话框输入 120。
- 6. 在波长 [类型]框中选择 [单波长],这意味着 UVProbe 只读取一个波长数值。
- 7. 在 [WL1] 对话框中输入 550, 其余选项默认, 测定样品在 550 nm 处的吸收值。

8. 点击 [仪器参数]属性页。



- 9. 在[测定方式]下拉框中选择[吸收值]。
- 10. 点击 [确定], 光度计状态栏将显示 "回转", 随即显示当前波长值 550 nm。

4.3.2 第二步 - 准备粉末样品

下一步,小量 EDTA 跟去离子水混合形成一个粉末样品。使用 [自动调零]来对光度计单元在指定波长进行调零和校正细微的变化,如热效应引起的偏差。既然这样,在仪器的样品室中放置去离子水并对 550 nm 波长进行自动校零。

- 1. 将装有去离子水的试管放到分光光度计的样品室中。
- 2. 确认波长在 550 nm (可以使用 λ 到波长按钮完成),点击光度计键条上的[自动调零]或按 [F6] 键。
- 3. 自动调零结束后,光度计状态栏的吸收值读数应为零。将试管从样品室中取出。



- 4. 在有去离子的试管中加入少量的 EDTA。
- 5. 搅匀样品并将试管放在分光光度计的样品室中。
- 6. 使光度计状态栏上的吸收值的初始值接近 1.5, 如果吸收值偏低, 加入 EDTA; 如果吸收值偏高, 加入去离子水稀释。

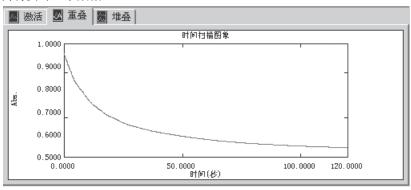
4.3.3 第三步 - 读取时间扫描值

按照目前方法测量粉末样品的吸收值,测定的数据将保存在一个时间扫描文件中。

- 1. 在 Y 轴上,点击最小吸收值的值,将值改变为 0.0,点击最大吸收值的值,将值改为 4.0。
- 2. 搅匀样品并将试管放在分光光度计的样品室中。
- 3. 单击仪器控制按钮栏上的 [开始] 按钮 (或按下 [F9] 键)。 将打开[新数据集]对话框,在[文件]文本框内输入"EDTA",在[数据储元]文本框内输入"Test"。



4. 单击 [完成] 按钮后,将开始时间扫描。每次采样,仪器状态栏内将显示测定的吸光度,时间扫 描图内将实时显示数据。



可在内存中保存获得的数据。

保存时间扫描数据

- 1. 选择 [文件] [保存]。
- 2. 在 [激活文件选择] 对话框中选择 [时间扫描文件 (*.kin)] 作为 [数据类型]。
- 3. 点击 [确定]。

4.4 练习二 - 动力学的基本操作

在本练习中:

- 进行选点检测并保存选点检测模板。
- 进行池空白操作。
- 采集第二组数据集来观测池空白操作的影响。
- 打开以前保存的选点检测模板。
- 修改主表重新计算数据集的活度。

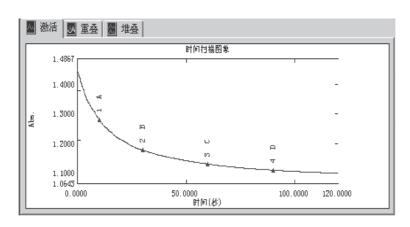
4.4.1 第一步 - 进行选点检测

现在,利用间隔为30秒的选点检测来建立选点检测表。如果前一个练习已关闭EDTA文件,重新打开它。

1. 选择 [操作] - [选点检测],并将下列值输入到表中。

时间 (秒)	描述
10	A
30	В
60	С
90	D
120	E

- 2. 在选点检测表上单击右键,并选择快捷菜单中的「属性」选项。
- 3. 在标签列表中,点击 [描述](当某选项被选中时将被打上标记)。
- 4. 在标记类型列表框中,选择一种类型。
- 5. 在选点检测表中再次单击右键,点击 [标记点]并观察图像中的标记。



4.4.2 第二步 - 将选点检测表作为模板存储

选点检测表将存储成模板形式并在本章的后面部分使用。选点检测模板保存了输入表中的时间和描述但没有吸收值。当模板被打开时,将根据现有数据集重新计算吸收值的数值。

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 检查保存路径。
- 3. 输入 Point1 作为文件名,选择 [选点检测模板 (*.kpt)] 作为文件类型,再点击 [保存]。

4.4.3 第三步 - 进行池空白操作

现在将进行池空白的操作。当点击光度计按键栏上的「池空白」时,分光光度计测得一个读数,以后的 检测中分光光度计测得读数都将减去该数。池空白操作的目的在于消除试管对测量结果的影响。一个池 空白的测量值在进行新的池空白测量或自动调零前将一直有效。

注释

确认分光光度计已经连接,光度计按键栏已显示出来。在采集数据时首先进行池空白操作。

- 1. 将一个空的试管放到分光光度计的样品室中。
- 2. 点击[池空白]键或按[F5]键以显示含池空白数据的对话框。点击[确定],结束池空白操作。

4.4.4 第四步 - 采集另一个数据集

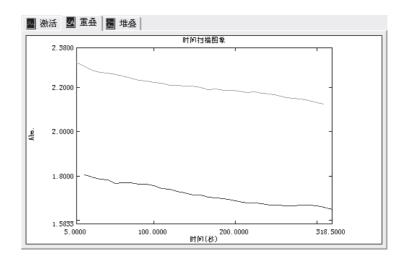
利用本章练习 1 的数据采集方法和信息采集并保存另一个数据集。尽管池空白操作排除了试管对读数的 影响,但对同一样品使用同一种数据采集方法其结果测出的吸收值仍有差别。

注释

如果完成练习1后改变了数据采集方法,请重新改回在练习1中使用的方法。

采集数据

- 1. 摇动或搅拌粉末样品并将其放到分光光度计的样品室。
- 2. 点击光度计按键栏上的 [开始],在重叠时间扫描图像上显示实时数据。
- 3. 在 [保存] 对话框中输入 EDTA2 作为文件名。
- 4. 输入 Test2 作为数据 [储元] 名。
- 5. 点击「完成」。观察到本次读数图像于第一次读数图像不同,这是进行了池空白操作的缘故。



保存数据

- 1. 选择 [文件] [保存]。
- 2. 在 [选择激活文件]对话框中选择 [时间扫描 (*.kin)] 作为数据类型,点击 [确定]。

4.4.5 第五步 - 打开一个以前保存的选点检测模板

现在,对 EDTA2 使用在练习 1 中保存的选点检测模板。

- 1. 选择「操作]-「选点检测]显示空表。
- 2. 选择 [文件] [打开]。
- 3. 选择 [选点检测文件 (*.kpt)]作为 [文件类型]。
- 4. 双击 [Point1.kpt]。

注释

鼠标可以在选点检测表下方的索引标签的编号上移动以显示数据集的名称。

注意到选点检测表中已填入保存过的时间和描述,并且在吸收值列中包含从现有数据集中得到的新的数据。

4.4.6 第六步 - 修改主表

现在将从存储器删除不需要的文件;修改主表,隐藏不必要的列以提供更多的屏幕空间。同时开始值和结束值也将改变,并且改变因子重新计算数据集的活度。

从存储器中删除文件

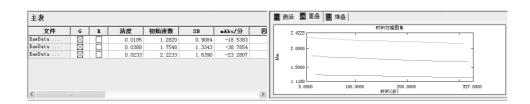
- 1. 选择 [文件] [属性]。
- 2. 在 [文件属性]对话框中,依次点击每一个要删除的文件,然后点击 [删除]。
- 3. 完成删除后点击「关闭]。

在主表中隐藏列

- 1. 选择 [文件] [打开]。
- 2. 在文件类型框中,选择 [时间扫描类文件(*.tmc)]。
- 3. 在数据目录选项选取 UVProb\Data\old Data\UVPC 目录中的 [Achn00.tmc], [Achn01.tmc], [Achn02.tmc] 和 [Achn03.tmc] (在选取文件的同时按下 Shift 键)。点击 [打开]
- 4. 选择 [操作] [主表]。
- 5. 在主表中单击右键,从快捷菜单中选取 [属性]选项。
- 6. 在属性页中,通过双击隐藏下面这些列: [样品 ID], [波长], [初始读数], [SD], [mAbs/分], [注释]。而以下列应该保留: [G]、[R]、[活度]、[开始]、[结束]、[因子]和[校正因子]。
- 7. 关闭属性页。不能点击重新设置,否则将恢复到上一次的设置。

重新计算数据集的活度

- 1. 通过点击 [R] 列的核选框以查看数据集的活度范围,在图像中显示为一条虚线。
- 2. 将表中四个数据文件的 [开始] 值改为 200, [结束] 值改为 600。注意到活度表被重新计算并且 图像部分的活度范围也被更新。在活度图像面板中可通过读数条来修改开始值和结束值。
- 3. 将 [因子] 改为 1、4.5、9 和 11 并按回车键,注意表中活度值的变化。



保存数据

- 1. 选择 [文件] [另存为],显示 [动力学模块文件保存]对话框
- 2. 点击 [选择]显示 [数据集选定]对话框并选取一个文件。(每次只能选取一个文件,文件将按照 字母顺序排列并且当文件加入或被重新命名时顺序也将改变。必须读取文件名)
- 3. 输入 Kinetics1 作为文件名,点击 [保存]。
- 4. 按照步骤 1-3,分别以 Kinetics2, Kinetics3, Kinetics4,来保存文件。

注释

有两种显示数据集的参数的途径。

- 1. 打开 [文件属性] 对话框和 [数据集选定] 图标。参数将显示在方法标签中。
- 2. 在图例窗口,双击 [数据集]。参数将显示在方法面板中。

4.5 练习三 - 动力学高级技巧

在这个练习中:

- 进行 Michaelis-Menten 计算
- 配置自定义动力学图像
- 使用 Michaelis-Menten 表的数据建立抑制剂表
- 用池定位器获得数据

4.5.1 第一步 - 进行 Michaelis-Menten 计算

现在,用四个样品时间扫描文件建立和填入 Michaelis-Menten 表并计算 Km 和 Vmax。

在开始之前,确保文件 Kinetics1, Kinetics2, Kinetics3, and Kinetics4 都已打开。

Michaelis-Menten 表包含底物浓度和速度值,需要通过实验并通过 Michaelis-Menten 方程式计算出 Km 和 Vmax。 Michaelis-Menten 表计算基于选择的转化类型 Km (the Michaelis 常量)和 Vmax 值。

- Km 是实验条件下初始速度为最大反应速度一半时的底物浓度。
- Vmax 是最大初始速度。

Km 值和底物的稳定性相互影响。然而,使用 Michaelis-Menten 方程的线性表来计算,如 Lineweaver-Burk 或 Hanes,Km 可以更精确。使用 Michaelis-Menten 表在四个转换类型中快速转换并观察 Km 和 Vmax 的变化。

建立 Michaelis-Menten 表

注释

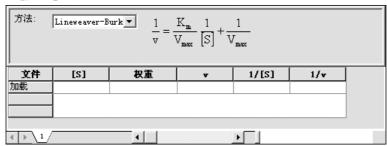
当文件没有被打开时,菜单中的主表选项无法使用。

- 1. 选择 [操作] [主表]
- 2. 选择 [操作] [酶表],在信息面板上显示 Michaelis-Menten 信息。
- 3. 在信息面板上单击右键,显示快捷键菜单,选择 [Michaelis Menten]。

提示: UVProbe 的酶表中有 [Michaelis-Menten]、[Inhibitor]、[Hill] 三个表。

通过在快捷键菜单中选择 (勾选)即可以切换显示在信息面板上的表

- 4. 在信息面板单击右键,然后点击快捷菜单中的 [新建]选项。弹出 [新数据集信息] 对话框以开始建立新的 Michaelis-Menten 表。
- 5. 输入 MM1 作为文件名, Kinetics 作为储元名, Dataset1 为数据集名。
- 6. 点击 [完成],建立空的 Michaelis-Menten 表。



注释

要显示不同类型的酶表,可以从快捷菜单中选择抑制剂或Hill来改变当前活动表的类型。

用加载键 填充 Michaelis-Menten 表

1. 在 Michaelis-Menten 表中,在文件列中点击 [加载]。

注释

数据文件也能从主表中拖到 Michaelis-Menten 表。详细用法请参考在线帮助。



2. 在[选择活度数据集]对话框中,展开文件[Kinetics1]的树结构直至出现数据集[RawData]。

注释

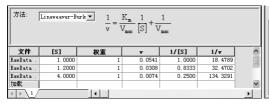
如不能显示完整文件名,可通过拖拉对话框右下角的边界来放大尺寸。

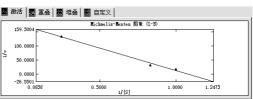
- 3. 点击关联 Kinetics1 的数据集 RawData, 再点击 [确定]。
- 用相同的方法分别加载与 Kinetics2、 Kinetics3 和 Kinetics4 文件关联的数据集。 4.
- 分别 C 用值 0.3、3.0、15.0、45.0 来代替 Michaelis-Menten 表底物浓度 ([S]列)。

注释

底物浓度也可以输入上面选择的活度数据对话框中。

观察表底部计算出来的 Km 和 Vmax 值。



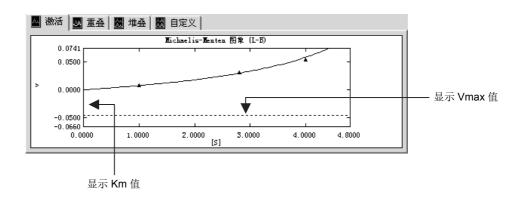


Michaelis-Menten 图轴转换

- 1. 右击酶活动图显示快捷菜单,选择 [自定义]。
- 2. 点击 [自定义图像] 对话框上的 [轴] 选项。
- 3. 在[轴类型]列表选择正常,在[在图象中显示酶信息]选项上打勾,点击[确定]按钮。



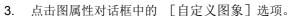
4. 图像上的 X,Y 轴分别从 1/V 到 V 、1/[S] 到 [S],双击图或右击图显示的快捷菜单。选择 [自 动标尺] 调节图标尺。



4.5.2 第二步 - 配置自定义动力学图像

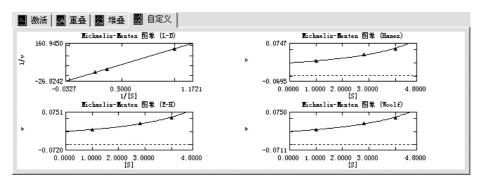
现在,酶图像面板将被自定义成显示当前数据的每个线性转换类型: Lineweaver–Burk、 Hanes、 Woolf 和 Eadie-Hofstee。

- 1. 点击酶图像面板的 [自定义] 标签。
- 2. 在图像中单击右键,然后选取快捷菜单中的[自定义]选项。





- 4. 校验数据类型是否为 [Michaelis-Menten]。
- 在 [变换式类型] 下拉框中, 点取 [Hanes], 然后点击 [增加]。从 [变换式类型] 下拉框中 选择 [Woolf] 和 [Eadie-Hofstee] 重复相同过程。
- 6. 校验 [排列方向] 是否平铺,点击 [确定]。
- 在酶图像面板中依次选择每个图像,单击右键并在快捷菜单中选择[自动标尺],以显示包含一个 图像的所有转换类型的图例面板,如下图所示



4.5.3 第三步 - 建立和填充 Inhibitor 表

现在,将使用 Michaelis-Menten 表的 Km 值和 Vmax 值来建立 Inhibitor 表。Inhibitor 表类似于 Michaelis-Menten 表,包含一个替代酶 [S] 列的 Inhibitor [I] 列。可用不同的底物浓度来改变 KI 值。

建立 Inhibitor 表

- 1. 在 Michaelis-Menten 表中单击右键,选择快捷菜单上的 [Inhibitor]选项。
- 2. 重新在 Michaelis-Menten 表中单击右键,选择快捷菜单中的 [新建]选项来显示 [新数据集信息]对话框以建立一个空的 Inhibitor 表。
- 3. 输入 MM2 作为文件名, Kinetic 作为储元, Dataset2 作为数据集名,点击 [下一步]。

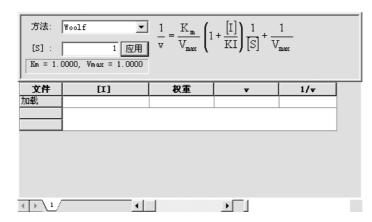


4. 从 Michaelis-Menten table 表中选取 Km 值和 Vmax 值,点击 MM1 和 Kinetic 旁边的 및 然后点击 Dataset1。

注释

如要手工输入 Km 值和 Vmax 值,在对话框顶部的「源]列表框中选择编辑 Km 和 Vmax。

5. 在转换选项中选择 Hanes,点击下一步。当出现设置公用酶作用物浓度对话框时,接受缺省值,点击完成,将出现如下图所示的空 Inhibitor 表。



6. 在酶图像面板中点击 [重叠]标签显示 Dixon 图像。

填充抑制剂表

1. 在抑制剂表中,点击[加载]键

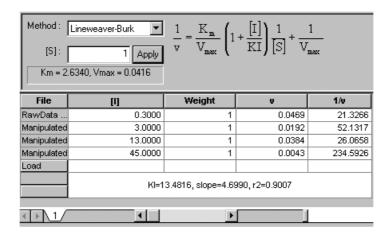
注释

数据文件也能从主表中拖拽到抑制剂表。详细用法请参考在线帮助。

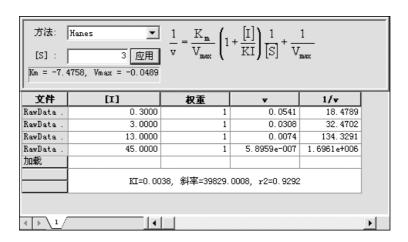
- 在 [选择活度数据集]对话框中,展开文件 [Kinetics1] 直到出现数据集 [RawData]。
- 点击于 [Kinetics1] 的数据集 [RawData]。



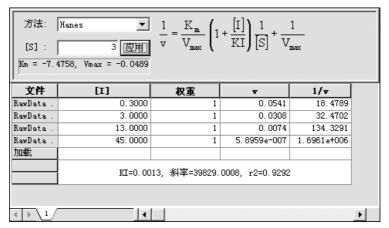
- 点击「确定」。
- 5. 用同样的方法分别加载与 Kinetics2、 Kinetics3、和 Kinetics4 相关联的数据集。
- 分别用下列各值 0.3、3.0、13.0 和 45.0, 改变每个数据集的抑制剂浓度([I]列)。所得表类似下 图。



7. 在 [方法] 框中,将 [方法] 改为 [Hanes]。注意 KI 值的变化。



8. 在底物浓度 [S] 框中输入 3, 然后点击 [应用], 注意 KI 值的变化。



动力学模块部分结束。

空白页

第五章 报告生成器 第四课

报告生成器是一个报告式化工具,可用来生成、自定义格式、保存和打印用户自定义报告。报告可以含有图形、文本和嵌入对象,就象从 UVProbe 中链接数据一样。

本章节包含下列练习:

- 建立一个有嵌入对象的简单报告
- 建立一个有链接对象的简单报告
- 高级技巧

内容

5.1	对象的操作方式 (选择对象)	5-2
5.2	嵌入对象和链接对象	5-3
	报告生成器的主窗口	
	报告生成器工具栏	
	报告生成器对象工具栏	
	练习一-建立带有嵌入对象的基本报告	
5.7	练习二-建立带有链接对象的简单报告	5-12
	练习三 - 高级技巧	

对象的操作方式 (选择对象)

用报告生成器建立一个报告,并插入一个对象(图象、表或文本对象)。报告生成器中的对象的操作状 态有三种:编辑、选择和未选择



5.1.1 编辑方式

当对象被插入时,将自动进入编辑方式。编辑框的边框是细切线,四角和每边中间各有一个尺寸控点, 并且对象的内容是可编辑的,例如:改变文本对象的文本,或改变图象对象的参数或外观。 双击对象可使对象进入编辑状态。即使对象已处于选择状态,单击也不能使其进入编辑状态,对象要进 入编辑状态必须对其双击(没有必要先退出选择状态)。要使对象退出编辑状态,可在报告的其它地方 单击或点击其它对象。

在编辑状态下,当鼠标靠近对象边框时将变成 , 这时对象可被移动。

5.1.2 选择方式

要选择对象,先点击对象外围使其退出编辑方式,然后点击未选取对象。对象的边框将变成实线并且在 四角和每边中间有尺寸控点。在这个状态下,对象的内容不能被编辑,但能被剪切或拷贝,属性菜单能 进行对象特定操作。通过这种方法能在 Shimadzu 操作实例中链接现有数据。

5.1.3 未选择方式

要取消选择的对象,可在报告的其它地方或其它对象上点击。对象的边框将变成光滑线条组成的四边 形。

5.2 🕸

嵌入对象和链接对象

在开始之前,应了解嵌入对象和链接对象的含义。一般来说,可通过不同的途径在报告中放置对象以及确定对象如何包含数据。

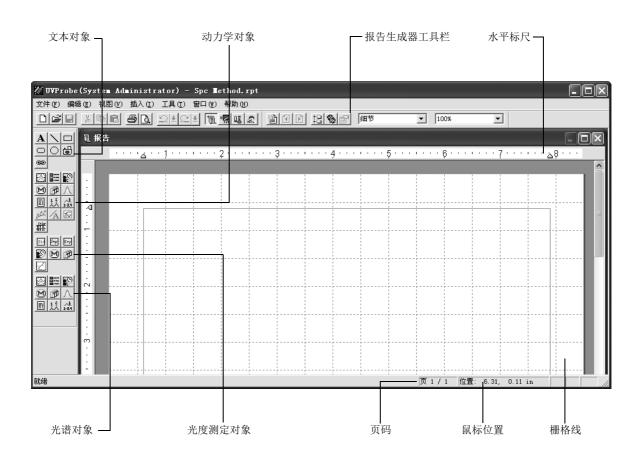
5.2.1 嵌入对象

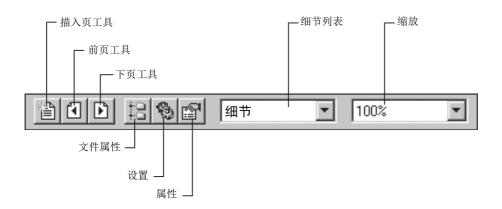
嵌入对象到报告中,即是将对象复制到报告中并且复制后的对象不再与对象的源模块有任何联系。当修 改模块中的对象时,报告中的复制对象不受影响;且当保存报告时仍旧保存复制的数据。嵌入对象是一 个拥有自己数据的独立实体。

5.2.2 链接对象

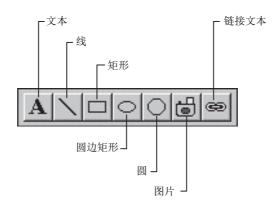
当在报告中对象被链接时,将依赖于链接对象的模块。该对象只有在打印或预览时才从模块中接受数据,除此之外它没有自己的数据也不显示任何数据。在保存报告时,没有实际的数据被保存,而是保存对象的描述和如何链接。

例如,在报告中加入光谱图象对象并且图象对象与现有数据集链接,链接的对象将随着光谱模块中的源图象的变化而变化。在打印时, UVProbe 从光谱模块中获得链接数据并将数据输入到图象中,也就是每次均用同一个报告打印不同的数据。

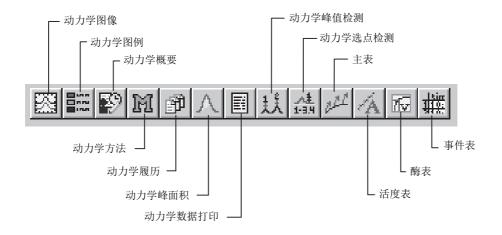




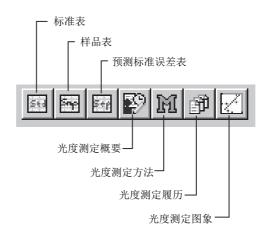
5.5.1 文本对象



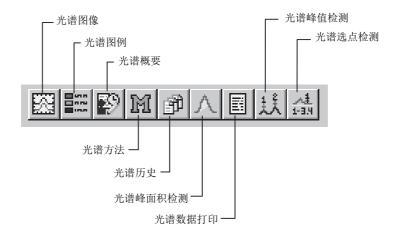
5.5.2 动力学对象



5.5.3 光度测定对象



5.5.4 光谱对象



5.6

练习一-建立带有嵌入对象的基本报告

现在,利用在光谱模块章节的练习1中采集的数据,我们将建立带有嵌入对象的报告。 关闭仪器栏,光度计状态栏和输出窗口。通过检验视图菜单确保所有的工具栏都已显示。 在这个练习中:

- 自定义栅格间距为 0.5 英寸的空白报告页
- 从光谱模块中复制重叠图象,并将其嵌入到报告中
- 建立报告表头
- 打印报告

5.6.1 第一步 - 设定栅格间距和页边距

首先,将通过报告生成器设定一个栅格间距为 10 mm、页边距为 10 mm 英寸的报告。

设定栅格

- 1. 选择「视图]-「设置]。
- 2. 检验测量单位是否为 mm。
- 3. 在间距输入框中输入10,点击「确定]。

设定页边距

- 1. 选择 [文件] [页面设置]。
- 2. 在页边距部分,将所有的页边距 ([左]、[右]、[上]、[下]) 改为 **10**,点击 [确定]。

注释

水平标尺的标记也能用来改变页边距

5.6.2 第二步 - 嵌入图象

打开指南中光谱模块部分保存的 Didymium.spc 文件, 拷贝重叠图象并将其嵌入报告。

打开一个光谱文件 并拷贝一个重叠图象

- 1. 选择 [窗口] [光谱]。
- 2. 选择「文件]-「打开]。
- 3. 点击 [数据] 目录中的 [Didymium1], 再点击 [打开]。
- 4. 在图象窗口,点击 [重叠]图象标签。
- 5. 在图象上单击右键,选择[自动标尺]。
- 6. 选择[编辑]-[复制]。

注释

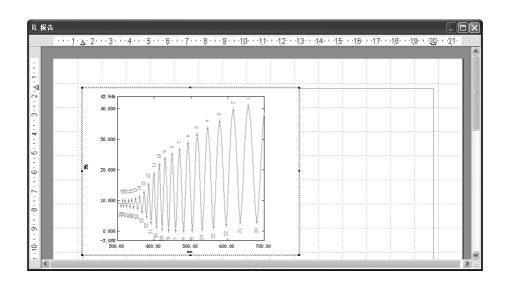
当光谱窗口和报告生成器窗口都被打开时,也可以将光谱方式的图象拖曳到报告中。详细信息 请参考在线帮助。

在报告中粘贴图象

- 1. 选择 [窗口] [报告生成器],或点击工具栏中的图标。
- 2. 选择[编辑]-[粘贴]将重叠图象嵌入到报告中。注意到粘贴后的图象类似于光谱模块中具有编辑方式外形的图象。图象嵌入到报告中并与光谱模块不再有任何联系。
- 3. 在图象以外的地方单击使图象进入未选择方式,单击图象使其进入选择状态。按下 Shift 键,将鼠标放到右下角并拖曳鼠标使图象扩展为 10 个栅格宽。左对齐图象并将图象下移两个栅格以放置表头。

注释

在选择方式下按下 Shift 键可使图象按比例扩展大小。(必须在选择方式下进行)



5.6.3 第三步 - 建立报告表头

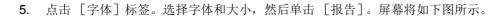
用报告生成器对象工具栏中的文本键来建立放置表头的文本框。

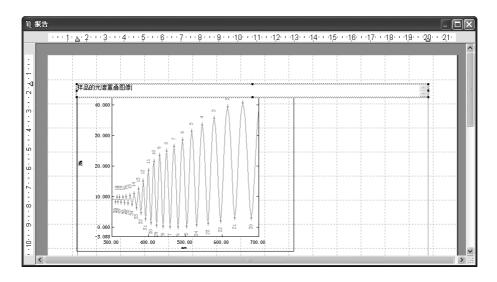
- 1. 点击「文本〕图标
- 2. 在文本框中输入重叠光谱图象报告作为表头。
- 3. 将文本框放置在图象上方并与之左对齐,扩展文本框以显示所有文本。如下图所示。.

注释

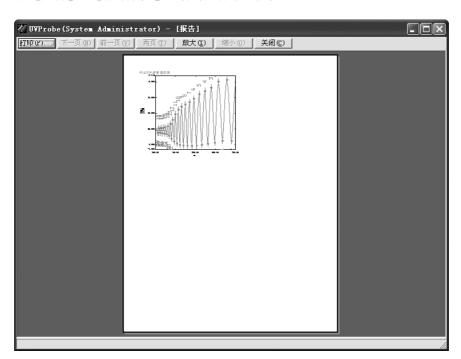
在每页重复建立表头,请点击 [插入] - [表头]。

4. 在文本对象上单击右键并选择 [属性]选项。





6. 选择 [文件] - [打印预览] 查看将要打印的报告。



7. 点击 [关闭],返回报告生成器。

5.6.4 第四步 - 打印和存储报告

现在可以打印报告并存储报告以备后用。

打印报告

• 选择 [文件] - [打印]或点击 [打印]图标。

注释

当点击打印图标时,报告生成器将立即打印而不显示打印对话框,即不能选择打印某页或某几页。

存储报告

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 输入 Report1 作为文件名。
- 3. 点击 [保存]。

5.7

练习二-建立带有链接对象的简单报告

下一步,利用在光谱模块章节的练习1中采集的数据,我们将建立带有链接对象的报告。 在这个练习中:

- 链接一个图象对象到光谱模块
- 链接一个峰值检测表对象到光谱模块
- 建立一个报告的表头
- 打印报告

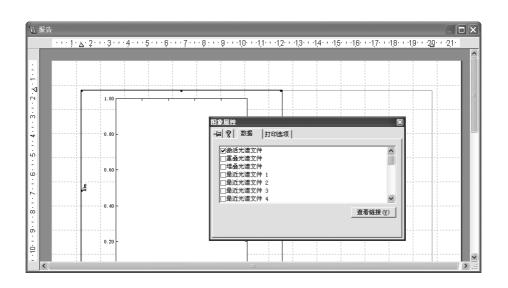
5.7.1 第一步 - 链接一个图象到现有的光谱模块

当一个图象链接到现有光谱模块,它将与光谱模块建立一个永久的链接。当进行打印或打印预览时,无 论包含图象的报告何时打开,图象将从现有的光谱模块中获得数据。

- 1. 选择 [文件] [新建]。
- 2. 通过点击对象工具栏中的 [光谱图象]图标,放置一个空的图象。此时图象中没有包含数据是因 为还没有被链接到数据源。即使链接以后,在打印或打印预览以前图象仍显示为空。只有在打印或 打印预览时才从光谱模块中获得现有数据。
- 3. 在对象处于选择方式下单击鼠标右键,选择「属性]选项。
- 4. 点击「属性」页的左上角的 ** 来固定销入属性页。

注释

在下面三个练习中属性页保持销入状态。



- 5. 检查数据标签是否被激活。
- 点击激活光谱核选框。现在图象已链接到激活光谱模块。选择「文件〕-「打印预览〕来查看打印 时图象的样式。注意到由于图象已链接到活动光谱模块所以在预览中图象已显示数据。当打印报告 时,报告生成器将根据活动光谱模块修改数据并打印数据。点击 [关闭]返回原界面。

注释

以上步骤仅在光谱模块中有文件打开时有效。当未打开文件时,没有数据被链接。

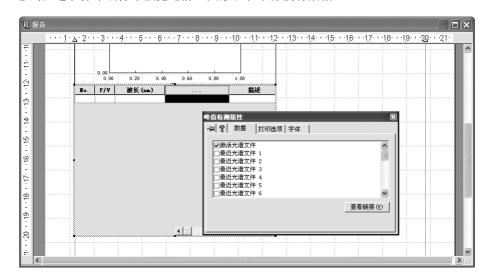
7. 在图象上单击使其进入选择方式,然后将图象下移两栅格并左对齐。

5.7.2 第二步 - 链接一个峰值检测表到现有光谱模块

峰值检测表显示被选择的数据集的所有的峰和谷的顶点。插入峰值检测表并链接到现有光谱模块。有关峰值检测表的详细信息请参考在线帮助。

链接峰值检测表

- 1. 拖动滚动条到页底部。
- 2. 点击对象工具栏中的光谱峰值检测图标,以放置一个空的峰值检测对象到报告中。注意到现在峰值 检测表不含有数据。
- 3. 将峰值检测表移到图象下方,拖曳对象右边界直至表宽度为 13 个栅格宽。页面将如下图所示。注 意到在选取打印或打印预览之前,图象和表中都没有数据。



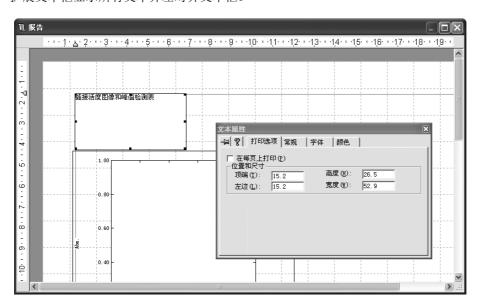
4. 在属性页的[数据]标签,点击选取[激活光谱文件],表将链接到现有光谱模块。选择[文件]-[打印预览]来查看打印的图象的形状。注意到现在表中包含从现有光谱模块中得来的数据。点击 [关闭],退出打印预览状态。

5.7.3 第三步 - 建立表头和打印报告

用报告生成器对象工具栏的文本图标建立表头,然后打印报告。打印时图象和峰值检测 表都包含数据。

建立表头

- 1. 卷到页面顶端,点击 [文本]键。
- 2. 点击 [文本框],输入表头链接活度图象和峰值检测表。
- 3. 扩展文本框显示所有文本并左对齐文本框。



注释

可在属性页的 [打印选项] 标签中输入文本框的精确的位置和尺寸。

打印报告

• 选择 [文件] - [打印] 或 [打印] 图标。

保存报告

- 1. 选择 [文件] [保存]。
- 2. 输入 Report2 作为文件名。
- 3. 点击 [保存]。

在这个练习中:

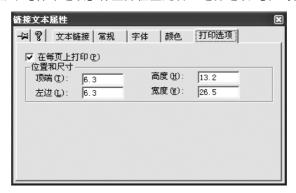
- 向报告中增加页,数字及链接文本对象
- 在光谱模块中用保存过的报告配置快速打印
- 在光谱模块中快速打印

5.8.1 第一步 - 在每页重复插入文本对象

首先,在报告的每一页插入页码和日期。然后,增加一个可标识仪器类型的文本对象。

插入页码

- 1. 卷动到页面底部。
- 2. 选择 [插入] [页码]。
- 3. 在属性页中,点击[打印选项]标签并检查是否已选择选项[在每页上打印]。



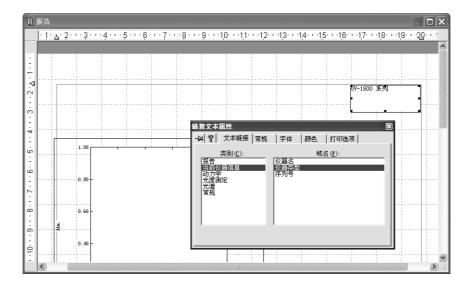
4. 将文本框移到页面底部。报告中每页的相同部位将出现页码。

插入日期

- 1. 选择 [插入] [日期]。
- 2. 在[链接文本属性]页中,点击[打印选项]标签,再点击选项[在每页上打印]。
- 3. 将文本框移到页面右下角。在报告每页的相同部位将出现日期。(属性页可能需要移动位置)

插入仪器类型

- 1. 卷动到页面顶部并点击对象工具栏的「链接文本]键。
- 2. 在 [链接文本属性]页中,点击 [文本链接]标签。
- 3. 在仪器类别列表框中,点取[当前仪器信息]。
- 4. 在[域名]列表框中,双击[仪器类型]。注意到仪器类型出现在文本框中。
- 5. 如下图所示,调整文本框使其正好显示所有文本并将其移到页面的右上角。



注释

报告生成器提供其它类型的文本链接,如用户日志、注册公司。详细信息请参考在线帮助的链 接文本对象。

存储报告

- 1. 选择 [文件] [另存为]。
- 2. 输入 Report4 作为文件名。
- 3. 点击 [保存]。

5.8.2 第二步 - 配置快速打印功能

现在,使用 Report2 配置光谱模块的快速打印功能。快速打印不用返回到报告生成器中选择报告,而能在模块中立即打印。

UVProbe 系统带有一系列预定义报告,在模块中选择 [文件] - [打印] 时将打印这些报告。每个报告都有特定对象,如动力学模块中的光谱图象、峰值检测,光度测定模块中的标准表。

使用关联特定对象的自定义报告比使用系统自带的报告要好。本节将介绍关联光谱模块图象面板的自定义报告。

配置光谱图象面板的快速打印

- 1. 选择 [窗口] [光谱]。
- 2. 选择 [视图] [设置],选择 [快速打印]标签。



- 3. 在[打印项目]框中,点击[光谱图象]图标。
- 4. 点击 [浏览],选择 Report2,再点击 [打开]。
- 5. 点击 [确定]。
- 6. 点击 [图象] 面板,再点击 [打印] 图标。
- 7. 到打印机中取回报告。当图象面板已激活时,选择[文件]-[打印]将从模块中打印报告 Report2。

祝贺你, 你已读完 UVProbe 教程!

空白页

索引

Numerics		
95% 置信水平	3	3-20
В		
报告		
保存/存储	5-11. 5	5-14
表头		
插入日期	Ę	5-15
插入页码		
插入仪器类型	5	5-15
打印	5-11, 5	5-14
拷贝图象		
设定删格		
页边距		
粘贴图象		
变换式		
表头		. 5-9
标准	,	
读取样品		
标准表		
保存		
打开		
浓度 填充		3-1U 2-17
央元 样品 ID		
标准曲线		
方程式		
统计		
统计结果		
波长范围		
		. –
C		
菜单		
快捷菜单		
颜色		
采样间隔		
操作方式		
编辑方式		. 5-2

未选择方式	5-2
选择方式	5-2
操作面板	
测定方式	2-5
池定位装置	2-19
采集数据	2-19
池空白操作	
重叠图像	
	2-6
重复功能	3-17
隐藏重复	3-18
处理	
数据集	
源列	
转换	
转换式标签页	3-22
初始化	1-31
除数	2-15
储元	1-33, 1-34
从内存中删除文件	
存储	
池空白操作	4-8
D.	
D	
打印预览	5-12
倒数转换	2-18, 3-22
登录对话框	1-10
底物浓度	4-12, 4-17
定时方式	4.4
手动	
自动	4-4
动力学 采集数据	4.0
米集蚁姑 窗口	
	4-2
动力学方法	4-5
读数条	
. I do	
对象 链接	5-3
嵌入	5-3
多个数据点	
タ 奴út	0 0
F	
方程式类型	3-26
方法	
窗口	2-1
分光光度计	
联机	1-30
通讯	1-29
粉末样品	4-5
峰面积表	2-14
处理	2-15
除数	
定义区域	
定义颜色和涂色类型	
峰面积检测表区域	2-16

峰值检测表	2-0
峰和谷的标注	2-12
链接报告	5-13
调节参数	2-9
阈值	2-11
G	
光度测定方法	
因子	
工具栏	1-28
报告生成器	5-5
报告生成器动力学对象	5-0
报告生成器对象	5-7 5-7
报告生成器光谱对象	5-7
报告生成器文本对象	5-6
标准	1-12
动力学	4-3
光度测定	3-3
光谱	2-3
光度测定 保存	3_10
窗口	
存储	
光谱	2-4
光度测定方法	
法不必要的	3-1
抽吸单元附件 打开保存的方法	3-28
方程式	
方程式类型	3-26
公式	
建立	3-7
曲线次数	3-8
狭缝宽	3-9
仪器参数	ناد کر ع کار است
自定义方程式	
按键	1-30
按钮栏	3-11
状态	2-5
状态栏	1-12
光谱方法 波长范围	2 /
波长氾围	
测定方式	2-4 2-5
加载存储的方法	2-20
建立	2-4
扫描方式	2-4
扫描速度	2-4
修改	2-20
光谱扫描	2-1
H	
汗 度	1_C

J	2 20
计算结果 基线到零	3-20 2 ₋ 15
- 基线校正	2-13 2-5
加载键 / 加载	2. 4-16
Inhibitor 表	4-15
建立	4-15
填充	4-16
K	
Ki 值	4-17
Km 值4-11, 4-1	2, 4-15
快捷菜单	1-31
快速打印	F 47
配置	5-17
L	
链接	
对象	5-3
峰值检测表	5-13 5-13
图象	5-12
	3-28
32711099	0 _0
M	
Max 值4-11, 4-1	2 / 15
max 但	
酶图面板 / 酶图象面板	 1 1 4-14
密码	1-10
面板1-	27, 2-1
操作	2-1
方法	2-1
图象	2-1
Michaelis-Menten 表	4-11 4 42
填充Michaelis-Menten 计算	4-12
Hanes4-1	1. 4-14
Lineweaver-Burk	
模块	1-27
打开	
P	
· 排列方向	4-14
啤酒花酸分析	3-23
1 17 1900/V VI	5 _5
Q	
	1 10
启动 UVProbe 嵌入对象	I-IU 5_3 5 0
嵌入对家	7-0, 0-0 2-3-15
ш <i>жүүж</i>	_, 0 10
R	
日期	E 4 F
插入到报告	5-15

软件	需求	·	1-4
S			
扫描 扫描	速度		2-4
时间	曲线 读取		4-5
抽吸	单元 安装		3-28 3-29
	窗口	调零	
数据	采集 集		. 1-33, 1-34
属性	页 打印i	选项标签	. 1-31, 3-16 5-15
	固定. 运算	[/销入 [
T 统计			
	残余标 方程:		3-20
图		系数 r2	2-1
	链接 嵌入 属性		5-8
	方式 标准I 重叠	``: i曲线	1-32 1-32
	一堆叠 游活		1-32 1-32
		图象 义	
W			
位图		和粘贴到写字板	2-23
未知	样品		3-13
未知	样品; 比较相	浓度	3-18 3-19
文件			1-33
UVP	robe	存中删除文件 / 从存储器中删除文件 e 安装	1-4
UVP	robe	e 功能	1-29
Χ			
吸光		[/吸收值的值]	

狭缝宽		3-9
卸载 UVProbe		1-6
信息面板		
选点		
を		. 4-7
将表作为模板存储		
14 1411 / 4 1/2 1/2 1/3		
Υ		
颜色菜单		
样品表		
浓度列		
填充		3-27
样品 ID		
自动填充		
样品 /S.E.P 表		. 3-1
页码		
がら 插入到报告		5-15
仪器		
初始化		
栏	1-12,	1-30
履历		
配置		
序列号		
增加		
仪器参数	2-5, 3-9), 4-5
仪器类型		
插入到报告		
抑制剂浓度		
因子		3-25
预测的标准误差 (S.E.P.)		3-20
Z		
—		4.0
主表		
显示 / 隐藏列		. 4-9
转换		
转换式标签页		3-ZZ
自定义方程式		
自动标尺		
自动填充		3-16
字体		
组		
访客		