

岛津高效液相色谱
LC 工作站
[LabSolutions/LCsolution]
操作说明书

请仔细阅读本说明书，正确使用仪器。
请妥善保管本说明书以备今后使用。

岛津制作所
分析计测事业部

本页空白。

为确保设备的安全使用，请务必查看以下要点。

- ◆ 遵循仪器说明书中的步骤。
- ◆ 查看所有警告和注意信息。
- ◆ 不要在未许可的情况下拆卸或改装本产品。
- ◆ 可以在我们的办事处和经销商处订购产品的修理。

Microsoft 和 Windows 是 Microsoft Corporation 在美国和其他国家 / 地区的注册商标。

Acrobat 和 Adobe 是 Adobe Systems Incorporated 的注册商标。

本说明书中的其他公司名和产品名分别是各自公司的商标或注册商标。

Microsoft® Windows® XP Professional Edition 称为 Windows XP。

Microsoft® Windows Vista® 称为 Windows Vista。

<< 注意 >>

- 本说明书的版权由岛津公司所有。严格禁止在没有公司许可的情况下再造或复制内容的全部或部分。
- 基于改进的目的，对本手册内容的更改恕不另行通知。
- 在编撰时，已经尽力保证本说明书内容的正确性。但是，如果发现了任何错误或疏漏，可能无法立即更正。
- 请注意，我们对本说明书中所述操作的后果不承担任何责任。
- 请注意，我们对使用本设备的后果不承担任何责任。
- 此产品的维护部件将提供至产品停产后七年。请注意，我们在此期限后可能无法提供维护部件。但是，对于非原厂真品部件，其供应期限由其生产商决定。
- 计算机硬盘中的数据可能会由于意外而丢失。要保护您的重要数据免受意外，请务必备份数据。

© 2006-2008 岛津公司。保留所有权利。

介绍

感谢您购买岛津高效液相色谱工作站的 **LCsolution** 软件（以下简称为 **LCsolution**）。

使用 **LCsolution**，您可以从计算机控制高效液相色谱（以下简称为 **LC**），采集色谱图和各种类型的数据，并在各种条件下重新分析采集的数据。

本说明书说明 **LCsolution** 的基本操作。请在使用 **LCsolution** 前仔细阅读本说明书。请在安全的地方保管本说明书，以便在对产品的操作有疑问时可以随时参考。

另外还提供了《**LCsolution** 管理说明书》。

《管理说明书》说明用于系统管理的软件功能，例如 **GLP/GMP** 支持功能，对 **US FDA** 的 **21 CFR Part 11** 中关于电子记录和支持功能的支持功能。有关 **LCsolution** 的系统管理功能的详细信息，请参见该说明书。

本说明书假定读者已具备了 **Windows**[®] 的基本操作知识。有关如何操作 **Windows**[®] 的详细信息，请参考该产品附带的说明书。

产品保证

我公司提供对此产品的担保，如下所述。

详细信息

1. 担保期限： 有关保修范围的信息，请向岛津办事处咨询。
2. 担保描述： 如果在担保期间由于我公司的原因而造成故障，我们将提供免费维修或更换部件（包括 USB 软件狗）。但是，对于具有较短市场寿命的计算机及其外设和部件，我们可能无法提供完全一致的产品。
3. 担保例外条款： 即使在担保期内出现以下事件，它们所引起的故障也不在担保范围内。
 - 1) 以不正确的方法拿放产品。
 - 2) 由非我公司或指定公司的其他公司或人员进行了维修或更改。
 - 3) 此产品与非我公司指定的硬件和软件一起使用。
 - 4) 由于计算机病毒造成设备故障并损坏了数据和软件（包括基本软件）。
 - 5) 由于断电和电压突然下降等电源故障造成设备故障并损坏了数据和软件（包括基本软件）。
 - 6) 由于采取了不正确的关机步骤给设备断电而造成设备故障并损坏了数据和软件（包括基本软件）。
 - 7) 由于非设备本身原因造成的故障。
 - 8) 由于苛刻的环境，如高温或高湿、腐蚀气体或震动等，造成的故障。
 - 9) 由于火灾或地震或任何其他自然事件、无线电活动物质和危险物质的污染、或任何其他不可抗力（包括战争、暴乱和犯罪行为）造成的故障。
 - 10) 由于在安装后移动或运输设备而出现的问题。
 - 11) 可扩展项目和部件
注意：软盘和 CD-ROM 等记录介质被认为是可扩展的。

* 如果产品附带有担保书文档，或者有包括担保条件的单独合同，则应遵守那些文档中的规定。具有特定规格和系统的产品的担保期单独提供。

* 如果您丢失了随此产品提供的许可协议密钥软盘或 USB 软件狗，将不能重新颁发许可协议。

说明书

说明书列表



LCsolution 包装附带有以下说明书。PDF 说明书包含在安装光盘中。还提供了在线帮助，用以说明操作和配置设置。请在需要时参考。

名称	内容
安装说明书 (手册 /PDF)	说明了 LCsolution 的基本安装方法。请务必首先阅读此说明书。 有关高级设置的信息，请参见“操作说明书”和“管理说明书”。您可以通过本 PDF 说明书中的链接转到“操作说明书”和“管理说明书”中的适用章节。
快速说明书 (PDF)	以指南向导的格式说明 LCsolution 的操作。您可以通过实际地分析数据了解如何操作应用程序。
操作说明书 (手册 /PDF) (本文档)	说明了各种目的的 LCsolution 数据采集和分析步骤。还提供了 PDF 版本，供您在计算机上查看。
管理说明书 (手册 / PDF)	说明了系统的基本概念和操作步骤以及使用 LCsolution 进行数据管理。 还提供了 PDF 版本，供您在必要时查看。
帮助	提供了有关每个 LCsolution 功能参数及其设置范围的详细信息。 可以从 LCsolution [帮助] 菜单使用在线帮助。有关如何使用在线帮助的信息，请参考“操作说明书”中的“13.1.1 使用帮助”。

说明书中使用的符号

在说明书中使用的标记和符号具有以下含义。

说明书中使用的标记

符号	含义
 注意	记载了仪器正确使用的有关信息。
 参考	说明书中相关信息的位置指示
' '	说明书的名称
" "	程序和产品名称

屏幕上的按钮和菜单项

符号	含义
[]	屏幕上显示的文本，例如按钮、菜单项、设置、屏幕和图标的名称。 示例：单击 [确定]。
[] - []	当连续执行几个操作时，使用连字符显示顺序。 示例：选择 [文件] - [打印]。 单击 [文件] 菜单并选择 [打印]。

目录

1 什么是 LCsolution?

1.1 LCsolution 的特性	1
--------------------------	---

2 软件概览

2.1 LCsolution 基本知识	5
2.1.1 启动“LCsolution Launcher”	5
2.1.2 启动“LC 实时分析”	7
2.1.3 数据管理器的文件类型和文件标签	9

3 开始分析

3.1 阅读本章之前	11
3.1.1 本章描述的“分析仪器”和“分析条件”	11
3.1.2 LCsolution 的数据结构	11
3.1.3 LCsolution 操作流程	12
3.2 准备分析	13
3.2.1 启动分析仪器并登录“LC 实时分析”	13
3.2.2 设置分析仪器的系统配置	14
3.2.3 检查分析仪器	16
3.2.4 设置仪器参数	17
3.2.5 监视分析仪器	19
3.3 执行单次分析	21
3.3.1 执行单次分析	21
3.3.2 设置积分参数	22
3.3.3 设置柱效参数	25
3.4 执行批处理分析	26
3.4.1 创建批处理表	26
3.4.2 执行批处理分析	27
3.5 生成校准曲线	28
3.5.1 创建数据分析参数	28
3.5.2 将数据分析参数应用到原始方法	31
3.5.3 执行批处理	32
3.5.4 查看校准曲线	34
3.5.5 使用校准曲线计算数据浓度	36
3.6 创建报告格式	38

3.7	创建汇总报告	41
3.8	查看数据	42
3.8.1	查看和使用 [数据管理器]	42
3.8.2	查看数据	44
3.8.3	使用 CLASS-Agent 查看数据	46

4 数据采集

4.1	使用和查看 [数据采集] 窗口	49
4.2	更改分析结束时间	53
4.2.1	设置分析结束时间	53
4.2.2	停止分析	53
4.2.3	更改分析过程中的分析结束时间	54
4.3	更改数据采样间隔	55
4.3.1	与数据采样相关的参数类型	55
4.3.2	设置检测器 [基本周期]	56
4.3.3	设置检测器的采样间隔	57
4.4	LC 系统的开机 / 关机设置	58
4.5	记录色谱柱信息	60

5 LC 数据分析

5.1	使用和查看 [LC 数据分析] 窗口的方式	63
5.2	使用数据文件操作	64
5.2.1	导出 / 导入数据分析参数	64
5.2.2	导入 / 导出报告格式	65
5.2.3	导出批处理表	66
5.3	设置积分参数	66
5.3.1	设置积分参数以检测峰	66
5.3.2	设置积分时间程序	68
5.3.3	设置手动积分 (处理)	70
5.4	设置峰识别参数	73
5.5	设置定量参数	77
5.5.1	设置定量参数	77
5.5.2	设置化合物表	78
5.5.3	保存 (导出) 到方法文件	79
5.6	在 [LC 校准曲线] 窗口中的操作	80
5.6.1	显示 [LC 校准曲线] 窗口	80
5.6.2	生成校准曲线	82

5.7	[LC 数据比较] 窗口中的操作	82
5.7.1	显示 [LC 数据比较] 窗口	82
5.7.2	在色谱图之间计算	84
5.7.3	移动色谱图	84

6 PDA 数据分析

6.1	使用和查看 [PDA 数据分析] 窗口	87
6.2	从不同的视图中提取	90
6.2.1	在 [等高线视图] 中提取	90
6.2.2	在 [色谱图视图] / [光谱视图] 中提取	92
6.3	记录色谱图	93
6.3.1	在多色谱图表中记录色谱图	93
6.4	为数据分析调整多色谱图	96
6.4.1	从识别和定量处理中调整	96
6.5	记录光谱	97
6.5.1	在 [光谱表] 中记录光谱	97
6.6	计算峰纯度	99
6.6.1	设置纯度参数	99
6.6.2	显示峰纯度计算结果	100
6.7	从光谱指定化合物	101
6.7.1	设置库搜索标准	101
6.7.2	执行库搜索	102
6.8	编辑光谱库	105
6.8.1	创建新 UV 库文件	105
6.8.2	保存 UV 库文件	105
6.8.3	记录光谱到 UV 库文件	105
6.8.4	编辑 UV 库文件	106
6.9	使用光谱进行峰识别	106
6.10	执行其他操作	108
6.10.1	保存 (导出) 到方法文件	108
6.10.2	导出色谱图 / 光谱	108
6.10.3	更新快照	109
6.10.4	执行色谱图 / 光谱计算	109

7 批处理

7.1	执行连续数据采集	111
7.1.1	显示并编辑 [批处理表]	111
7.1.2	使用向导	113

7.1.3	编辑批处理表.....	114
7.1.4	执行批处理	115
7.2	执行连续数据分析.....	116
7.2.1	显示 [批处理表] 以打开批处理文件	116
7.2.2	使用选定的数据文件添加行	117
7.2.3	执行批处理	119
7.2.4	停止 / 暂停批处理	119
7.3	批处理参数	119
7.3.1	批处理的参数.....	119
7.3.2	设置分类校准.....	121
7.3.3	配置开机 / 关机条件.....	122
7.3.4	设置背景数据文件	123
7.4	执行其他分析（批处理队列功能）.....	124

8 浏览器功能

8.1	使用 [定量浏览器] 显示定量计算结果。.....	125
8.1.1	显示 [定量浏览器].....	125
8.1.2	显示必要的信息	127
8.2	执行多个数据的再解析.....	127
8.2.1	使用 [定量浏览器] 更改数据分析条件。.....	127
8.2.2	根据定量计算的值，执行统计计算	128
8.3	集中显示多个数据.....	128
8.3.1	显示 [数据浏览器].....	128
8.3.2	提取必要数据.....	130
8.3.3	删除不需要的提取数据	131
8.3.4	更改显示的数据类型.....	132
8.3.5	排列布局.....	133
8.3.6	保存布局.....	133
8.3.7	执行库搜索	133

9 报告功能

9.1	打印分析结果.....	135
9.1.1	数据采集中的报告输出	135
9.1.2	批处理中的报告输出.....	136
9.1.3	缺省报告格式文件	137
9.2	重新打印数据处理结果.....	137
9.3	创建报告格式文件.....	141
9.4	创建报告布局的示例	143

9.5	调整报告布局	145
9.5.1	编辑打印项目	145
9.5.2	将打印项目放置在多个页面上	146
9.5.3	设置页面大小和边距	147
9.5.4	设置页眉 / 页脚	147
9.5.5	查看打印图像	148
9.5.6	打印的内容	149

10 窗口一般操作

10.1	显示窗口和功能栏	151
10.1.1	程序窗口的窗口类型	151
10.1.2	显示应用程序窗口	152
10.2	定制窗口	155
10.2.1	更改视图大小	155
10.2.2	更改应用程序窗口的显示格式	155
10.2.3	更改公共窗口的显示格式	157

11 表的一般操作

11.1	选择表列	159
11.1.1	选择表列	160
11.1.2	更改表列宽度	160
11.1.3	更改表列的显示（表样式设置 1）	161
11.2	操作表行	162
11.2.1	选择表行	162
11.2.2	添加或删除表行	163
11.2.3	更改表中显示的行数（表样式设置 2）	163
11.3	编辑单元格	164
11.3.1	选择多个单元格	164
11.3.2	编辑单元格内容	164
11.4	设置单元格中的值	165
11.4.1	用特殊的输入格式设置单元格中的值	165

12 文件一般操作

12.1	在应用程序窗口中的文件操作	167
12.1.1	创建新文件	167
12.1.2	打开文件	168
12.1.3	保存文件	169
12.1.4	查看文件历史记录	169
12.2	有效的文件管理	170

12.2.1	使用 [数据管理器].....	170
12.2.2	项目.....	171
12.2.3	创建新项目（文件夹）.....	172
12.2.4	删除项目（文件夹）.....	173
12.3	[数据管理器] 中的文件操作.....	174
12.3.1	打开文件.....	174
12.3.2	复制文件.....	175
12.3.3	移动文件.....	175
12.3.4	删除文件.....	176
12.3.5	重命名文件.....	177
12.3.6	查看文件历史记录.....	177
12.3.7	转换文件格式.....	178

13 附录

13.1	当操作遇到问题时.....	181
13.1.1	使用帮助.....	181
13.1.2	使用在线说明书.....	183
13.2	如何使用 LC Maintenance Tools.....	184
13.3	维护 PDA 检测器.....	186
13.3.1	启动 PDA Utility.....	186
13.3.2	使用波长检查.....	187
13.3.3	使用波长校准.....	189
13.3.4	使用漏液传感器检查 / 调整.....	192
13.3.5	使用池温度检查.....	193
13.3.6	使用吸光度准确度检查 / 校准.....	193
13.3.7	使用仪器信息.....	196
13.4	LCsolution 的规格.....	196

索引

1

什么是 LCsolution?

LCsolution 是岛津高效液相色谱的工作站软件。

通过 LCsolution 您可以从个人计算机控制液相色谱并执行各种任务，如色谱图的数据采集、LC 分析、报告创建和数据管理等。LCsolution 运行于 Windows，使用户能够通过熟悉的 Windows 操作步骤执行数据采集和 LC 分析。

本章介绍了 LCsolution 的特性和操作性能。

1

1.1 LCsolution 的特性

LCsolution 支持联网环境，配备有 GLP/GMP 支持和系统管理功能。除了涉及广泛的功能外，LCsolution 也使工作更加直观和容易，它仅显示手头任务所必需的信息。

■ 增强的 GLP/GMP 支持功能

LCsolution 配备的功能能够满足 GLP/GMP 和 21 CFR Part 11 的可靠性要求。GLP/GMP 支持功能为达到 21 CFR Part 11 和 GLP/GMP 兼容要求提供了坚实的、有效的帮助。

符合 US FDA 的 21 CFR Part 11

LCsolution 的电子记录和签名功能完全符合 21 CFR Part 11 的要求。

诸如数据测量方法、计划、日期 / 时间、操作员名称和色谱图等信息都能立即保存，人机可读数据可以按 Part 11 的兼容要求一样一起保存。

注意

当与可选的 CLASS-Agent 管理器组合使用时，LCsolution 满足 Part 11 用于复查与审批的电子记录和签名的要求，以及长期存储数据的要求。

安全性支持

系统管理功能可满足各种工作流程的安全性需求。

这些功能提供了对数据库中存储的分析数据的多级访问管理和电子审批。

审查追踪支持

可以保存详细的用户信息（如方法、数据和系统操作），用以创建和管理适当的审查历史记录。

认证支持

系统检查和 QA/QC 功能提供了有效而准确的硬件 / 软件 / 方法认证。

■ 支持联网环境

数据统一管理

当与可选的数据库管理 / 注册网络工具“CLASS-Agent”一起使用时，可以构建客户机 / 服务器数据管理系统。由于可以合并所有仪器上的数据，因此这样便能简单地从网络上的其他计算机中获取数据。

All-in-One 的文件结构（复合结构系统）

数据文件包含数据相关的所有信息，包括方法、批处理和报告格式，因而可以方便地对文件进行管理。而且您也可以分析来自网络计算机的数据。

LAN 兼容的系统管理

系统管理信息可以在 LAN（局域网）上的 LCsolution 系统之间共享。



使用“岛津用户认证工具”对用户进行管理。可以对 LCsolution 和 CLASS-Agent 实施公共用户管理，而且通过设置帐户策略，例如最小密码长度、最长密码期限和登录尝试次数，可以有效地阻止未授权的访问。

■ 确保文件兼容性

CLASS-LC10 格式兼容性

可以导出和按原样使用 CLASS-LC10 的方法文件和数据文件。

CLASS-VP 格式兼容性

CLASS-VP 的方法文件和数据文件可以转换为 LCsolution 格式后使用。

AIA ANDI 格式兼容性

通过此软件用户可以读取及写入 AIA ANDI 格式的文件，此格式是数据的国际标准格式。



此功能可用于把数据文件从 LCsolution 传输到 CLASS-LC10 和 CLASS-VP。

以通用数据格式输出结果

数据可以以文本格式保存，以便在商用的电子表格软件中使用。另外，与 21 CFR Part 11 的兼容使得在功能上更容易地将报告图像保存为 PDF 格式（Acrobat 链接）。



必须单独安装 Acrobat 以使用“Acrobat”链接。

■ 极其灵活的报告格式

极其灵活的报告格式功能

您可以用各种灵活的格式有效地创建高质量的报告，其中的技巧与 Microsoft Word 等常用应用程序类似。

增强的报告项目

依照使用目的可以定制报告，可组合 23 种不同的项目，例如色谱图、校准曲线、定量结果、光谱索引和汇总报告。

■ 增强的识别与定量处理功能

用于识别和定量计算的各种方法

本软件支持各种识别方法，包括时间窗 / 时间带、光谱识别、绝对保留时间、相对保留时间，以及外标法和内标法等六种不同的计算方法。

多种类型的校准曲线

本软件支持七种类型的校准曲线，包括线形、点对点、指数。

灵活地创建校准曲线

除了从连续分析和批处理分析中创建校准曲线外，也可以手动添加或删除数据以生成最优的校准曲线。

深受赞誉的算法

本软件使用了来自 Chromatopac 积分仪系列设备的积分算法。

1

■ 丰富的功能只需简单操作

使用最新的 Windows 技术

本软件运行于 Windows Vista Business 并且与 Windows 常用的操作技巧相同，例如多任务和拖放功能。软件中的其他功能还包括先进的安全性以及对长文件名的支持。

助手栏

即使是初学者也能通过简单地在助手栏上单击功能图标轻松地执行分析。

数据管理器

通过拖放文件到操作窗口，“数据管理器”可以轻松地打开文件。它支持诸如复制、转移和删除等文件管理功能，并涉及历史记录信息。

快速仪器设置屏幕

根据分析条件和用途，可以应用“快速”和“详细”两种模式。它们支持广泛的分析条件，为日常操作增添了便利。

批处理表向导

“批处理表向导”提供了一系列简单的屏幕指导，帮助创建用于连续分析的批处理表。

化合物表向导

“化合物表向导”提供了一系列简单的屏幕指导，帮助创建用于定量计算的化合物表。

这些功能已经被有效地安排，使得大量的功能可以在使用中得以实现。

本页空白。

2

软件概览

2

本软件由以下四个应用程序组成。

- “**LC 实时分析**”
执行单次或批处理分析，以及控制和调节仪器的设定。
- “**LC 分析编辑器**”
在分析中编辑方法文件和批处理文件。
- “**LC 再解析**”
创建校准曲线并处理采集的分析数据。
- “**LC 浏览器**”
执行多组分析数据的分析并显示分析数据。

本章提供了软件的概述。

2.1 LCsolution 基本知识


本软件的四个应用程序都可以从 “LCsolution Launcher” 启动。

本节提供的指导说明了如何启动 “LCsolution Launcher”、[管理] 菜单和 “LC 实时分析”，并介绍了软件中使用的文件类型。

2.1.1 启动 “LCsolution Launcher”

若要使用任何应用程序，您必须首先通过单击  (LCsolution) 图标启动 “LCsolution Launcher”。

■ 启动 “LCsolution Launcher”



一旦在计算机上安装此软件后，即在桌面上出现  (LCsolution) 图标。

1 双击  (LCsolution) 图标。
“LCsolution Launcher” 启动。

2 单击屏幕左侧的 [操作] 标签。
出现 [操作] 菜单。







注意

- 仅在安装了可选的“CLASS-Agent”软件后才会启用  (数据库) 图标。
- 要退出“LCsolution Launcher”，单击屏幕右上角的  (退出)。

■ [操作] 菜单中的图标

[操作] 菜单包含下列图标。单击图标可启动该图标对应的特定应用程序。

	分析	此图标启动“LC 实时分析”应用程序，该程序执行单次和批处理分析，并且能控制和调节仪器的设定。 (“LC 实时分析”可在联机模式中使用。)
	脱机编辑	此图标启动“LC 分析编辑器”，通过该程序您可以编辑未当前分析中使用的方法文件和批处理文件。 (此应用程序与“LC 实时分析”类似，但是它处于编辑模式。)
	再解析	此图标启动“LC 再解析”，该程序导入采集的分析数据用以校准曲线和处理数据。
	浏览器	此图标启动“LC 浏览器”，该程序执行多组分析数据的分析并显示分析数据。

注意

- 当每个 LC 系统连接计算机时，启用 [分析] 图标和 [脱机编辑] 图标。
- 当鼠标光标指向 [分析] 图标或 [脱机编辑] 图标时，记录在 [系统配置] 中的仪器名称作为工具提示显示。
- 当另一程序正在以全屏方式运行时，“LCsolution Launcher”图标隐藏在背景中。此时，您可以减小全屏程序窗口的大小或最小化其窗口以显示出图标，或者也可以从启动菜单的 [LCsolution] 菜单启动“LC Launcher”。

■ 显示 [管理] 菜单

单击 [管理] 标签以显示 [管理] 菜单。






■ [管理] 菜单中的图标

[管理] 菜单包含下列图标。单击图标可启动该图标对应的特定应用程序。

参考

有关 [管理] 菜单的详细信息，请参考《管理说明书》的“2.2 系统管理工具的功能”。

	系统策略	当使用系统管理功能时（如登录方法和密码限制）应设置系统管理策略。
	用户管理	执行用户注册并定期更改密码。而且，要根据他们的操作特权建立组。
	日志浏览	显示使用指定的日志搜索标准（例如操作历史记录）的搜索结果列表。

2

2.1.2 启动“LC 实时分析”

在您确认已经开启 LC 系统后，启动“LC 实时分析”。

1 单击 [分析 1] 图标。



出现 [登录] 屏幕。

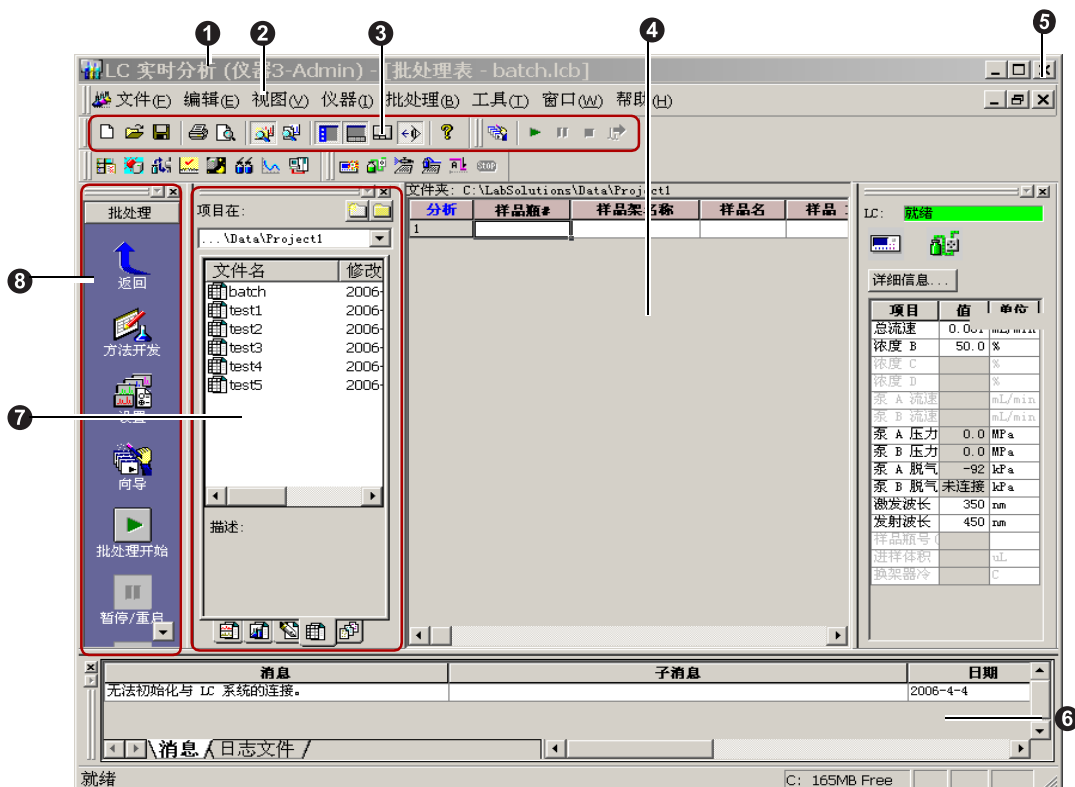
2 对于 [用户 ID]，选择 [Admin] 并保留 [密码] 为空白。单击 [确定]。



注意

可以在 [用户管理] 中设置 Admin 用户的密码或添加新用户。

“LC 实时分析”启动。







编号	名称	描述
①	标题栏	显示信息，例如正在运行的应用程序名称、已使用文件的名称、以及登录的用户名。
②	菜单栏	显示当前窗口启用的菜单，以及当前登录用户的特权。
③	工具栏	包含经常使用的菜单以及控制分析仪器的功能。
④	应用程序窗口	显示应用程序窗口，例如数据采集窗口。
⑤	“退出”按钮	单击此处退出应用程序。
⑥	输出窗口	显示消息日志以及登录/注销的历史记录。当出现错误时，自动弹出此窗口并显示错误消息。
⑦	数据管理器	下列特性提供了简单易用的文件管理：每个文件类型一个标签，通过在应用程序窗口上的简单拖放操作导入文件，以及文件夹之间的快速切换。
⑧	助手栏	应用程序的图标与通常工作流程的顺序一样排列。使用这些图标执行此软件的主要操作。

注意

- [LC 分析编辑器] 的屏幕与“LC 实时分析”相同，但是它不包括实际分析操作的布局功能。[LC 再解析] 屏幕和 [LC 浏览器] 屏幕也类似于“LC 实时分析”。
- 当启动“LC 分析编辑器”、“LC 再解析”或“LC 浏览器”时，无需开启 LC 系统。

2.1.3 数据管理器的文件类型和文件标签

在此软件中使用下列文件。

文件类型	数据管理器中的文件标签	详细信息
数据文件 (扩展名 .lcd)		在此文件中保存采集的色谱图及以下信息： <ul style="list-style-type: none"> • 包括面积值与浓度的计算结果。 • 在数据采集时 HPLC 仪器的操作日志或错误日志。 • 分析中使用的方法文件的内容（包括分析时的系统配置）。 • 报告格式文件的内容（当输出报告时）。 • 批处理文件的内容（当执行批处理操作时）。
方法文件 (扩展名 .lcm)		方法文件包含有关分析条件和数据分析参数的所有信息。 分析条件包括分析仪器及其参数的设置信息。 数据分析参数包括色谱图积分参数、定量计算方法和校准曲线信息。 它也记录编辑方法时的系统配置，并且在导入方法文件时，软件将检查它是否匹配当前的系统配置。 由于可以在批处理表中指定方法文件并将方法参数导入到数据文件中，因此通过适当的方法文件用户能够在相同的条件下方便地执行分析。
报告格式文件 (扩展名 .lcr)		保存有关报告格式的信息，当输出时，包含报告的布局以及报告中项目的详细设置。 “LC 实时分析”和“LC 再解析”都有“创建报告”功能。
批处理文件 (扩展名 .lcb)		保存数据的连续分析和再解析的批处理表。 同一文件既可以在“LC 实时分析”中使用也可以在“LC 再解析”中使用。

本页空白。

3

开始分析

本章提供了帮助您了解如何操作 LCsolution 指导教程。为了帮助您深入理解，我们建议您实际操作 LCsolution，并按照本章的分析步骤使用。

有关在 LCsolution 中执行的常见操作的详细信息，请参见第 151 页的“窗口一般操作”、第 159 页的“表的一般操作”和第 167 页的“文件一般操作”。

3.1 阅读本章之前

3

3.1.1 本章描述的“分析仪器”和“分析条件”

本章描述在列出的条件下使用以下仪器的分析步骤。

■ 分析仪器配置

高压梯度 UV 检测系统

泵:	2 LC-10ADvp 泵
自动进样器:	SIL-10ADvp
柱温箱:	CTO-10A(C)vp
检测器:	SPD-10A(V)vp


■ 分析条件

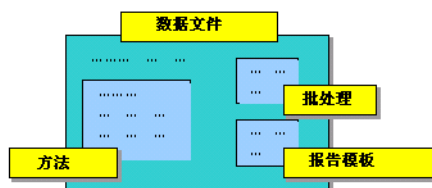
色谱柱:	Shim-pack VP-ODS (150mm x 4.6mm 内径 5 μm)
流动相:	泵 A: 水 泵 B: 乙腈
流动相比:	浓度 B = 50%
色谱柱温度:	40 摄氏度
检测波长:	254nm
样品:	对羟基苯甲酸酯混合物*

* 由甲基、乙基、丙基酯化合物组成。但是，丙基酯被视为内标。

3.1.2 LCsolution 的数据结构

本节简要描述了 LCsolution 的数据结构。

数据文件中存储了各种 LCsolution 数据参数，如数据采集和数据分析（元数据）过程中的仪器和分析条件。（《管理说明书》的“4.1.5 数据文件”）因为可以根据数据文件本身参照分析条件和参数，所以这样可以确保数据的可追查性。此外，仅使用数据文件即可重新分析数据。

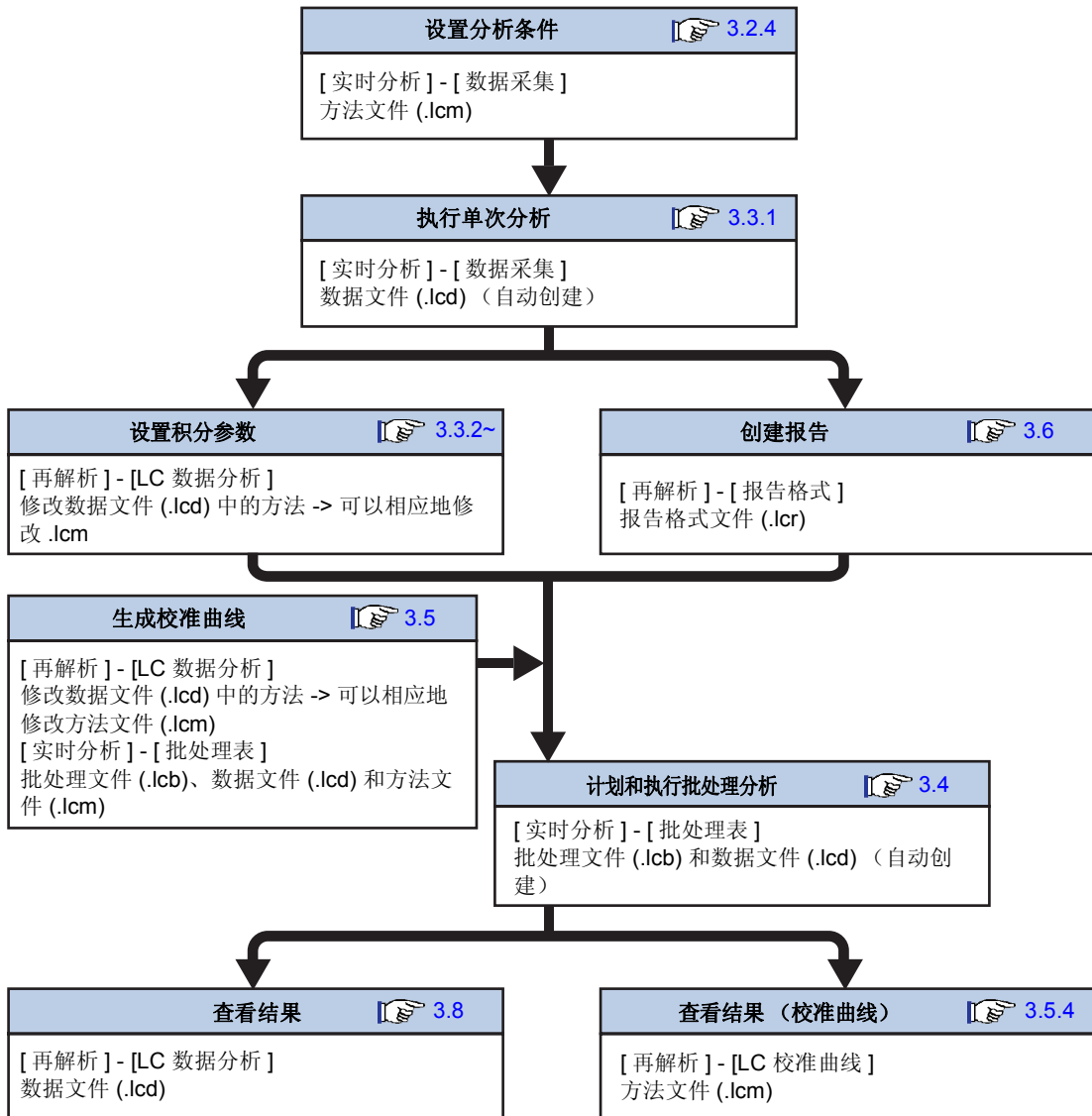


注意

数据文件中存储的方法信息，是在数据采集和分析过程中所用的方法文件的副本。因此，当修改数据文件中的方法参数时，只能修改“数据中的方法”而不能更改原始方法文件。但是，通过使用“应用到方法文件”（另存为方法文件）功能，可以使用数据文件中修改的方法相应地更新原始方法文件。

3.1.3 LCsolution 操作流程

本章按以下顺序说明 LCsolution 的操作流程。



注意

- 在批处理表中，为每一特定数据文件 (.lcd) 指定方法文件 (.lcm) 和报告格式文件 (.lcr)。当批处理分析完成时，创建一个数据文件 (.lcd)，该数据文件包含存储在批处理表中设置的每行的 (.lcb)、.lcm 和 .lcr（输出报告时）的相同信息。
- 当在 [LC 校准曲线] 窗口中打开方法文件 (.lcm) 时，含有校准曲线的方法文件 (.lcm) 所包含的所有校准级别的数据文件 (.lcd) 同时被加载。如果在此处编辑方法文件 (.lcm)，可以使用每个导入的数据文件 (.lcd) 的新分析条件，重新计算数据。在添加和删除校准级别数据的同时，还可以优化定量方法和校准曲线类型。

3.2 准备分析

在分析开始前，启动分析仪器并登录“LC 实时分析”，然后配置并认证每一分析仪器。必要时，设置仪器参数，以确定分析条件。

3.2.1 启动分析仪器并登录“LC 实时分析”

准备分析仪器并登录“LC 实时分析”。



■ 准备分析仪器

- 1 请确保分析仪器的所有单元（泵、自动进样器、柱温箱和检测器）都已连至系统控制器。
- 2 打开每一单元电源。
初始化每个单元。
- 3 确保所有单元上都没有显示任何错误消息。

3

■ 登录“LC 实时分析”

启动“LC Launcher”并登录“LC 实时分析”。
请确保在启动 LCsolution 之前已启动了分析仪器。如果在 LCsolution 启动之后启动分析仪器，则 LCsolution 不能识别分析仪器。

- 1 双击  (LCsolution)。
启动“LCsolution Launcher”。
- 2 单击屏幕左侧的 [操作] 标签。
出现 [操作] 菜单。
- 3 单击要使用的仪器的  (分析)。



出现 [登录] 屏幕。

4 输入用户 ID 和密码并单击 [确定]。



注意

初始登录过程中，使用 Admin 作为 [用户 ID]，保留密码为空。

启动“LC 实时分析”，出现 [LC 实时分析] 窗口（初始设置）。


3.2.2 设置分析仪器的系统配置

设置系统，以便该系统与仪器的实际配置相匹配。

仅当第一次将 LCsolution 连接到分析仪器，或仪器的配置发生变化时，才需要下列设置。如果仪器的配置没有任何变化，请转至第 16 页的“3.2.3 检查分析仪器”。

1 单击 [LC 实时分析] 窗口（初始设置）左侧助手栏中的 （系统配置）图标。出现 [系统检查] 屏幕。

注意

如果未显示 [实时] 助手栏，单击 （顶部）以显示。

2 在 [用于分析的模块] 列表中，双击 [仪器]。



3 在 [仪器] 屏幕中，选择仪器类型和通信设置，然后单击 [确定]。



注意

使用光电二极管阵列检测器时，还要选择仪器类型和 PDA 的通信设置。

4 检查 [系统配置] 屏幕中的仪器模块。

连接的仪器模块自动添加到 [用于分析的模块] 中。

5 双击每一模块的图标以查看它的属性屏幕。

6 检查每一模块的属性之后，单击 [确定] 并退出 [系统配置] 屏幕。


如果系统已正确配置，状态显示为 [就绪]。

注意

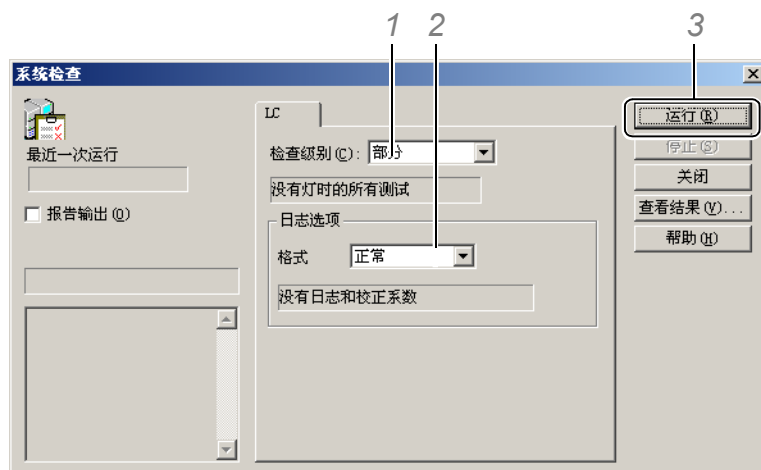
当从系统控制器使用开始信号控制光电二极管阵列检测器时，应在 [系统控制器] 属性中正确设置 [继电器输出端子]。

3.2.3 检查分析仪器

检查每一模块的仪器。

1 单击助手栏中的  (系统检查) 图标。
出现 [系统检查] 屏幕。

2 设置每一项并单击 [运行]。



- 1 选择要检查的项。
- 2 设置输出格式。
- 3 单击 [运行]。

注意

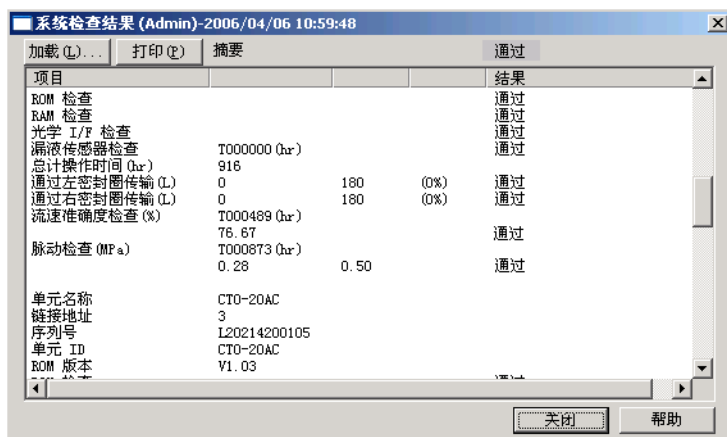
- 要检查检测器光源的“灯能量”和“波长准确度”，请将 [检查级别] 设置为 [完全]。否则请选择 [部分]。
- 要输出仪器日志（操作日志、维护日志和错误日志）及各种校正因子，请在 [格式] 中选择 [详细]。否则请选择 [正常]。

系统检查开始。显示指明检查进度的屏幕。请稍候。
一旦系统检查完成，结果（通过或失败）显示在屏幕左下方。

3 当进度条显示系统检查已 100% 完成后，单击 [查看结果]。
显示包括最近检查结果的结果报告。

4 请确保没有任何仪器故障。

自动将系统检查结果以包含分析日期的文件名保存在安装 LCsolution 的 “LCsolution\Log\Syscheck” 文件夹中。



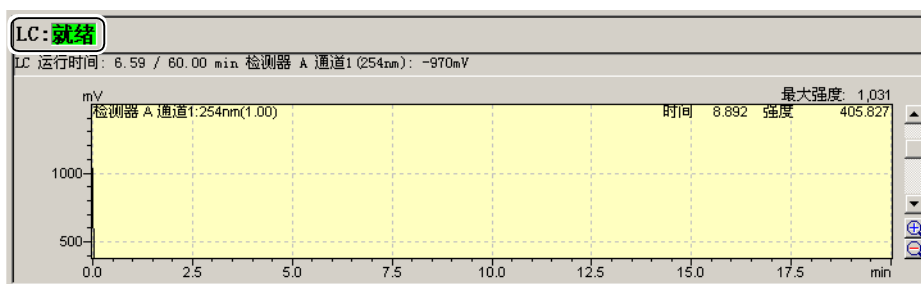
注意

要修改系统检查的标准，请参见第 14 页的“3.2.2 设置分析仪器的系统配置”并打开每一仪器模块的属性屏幕。单击 [系统检查] 并更改标准。

3.2.4 设置仪器参数

可以在 [数据采集] 窗口的 [仪器参数视图] 中设置分析条件（仪器参数）。在方法文件中保存仪器参数，并在执行分析时使用它。

1 请确保在 [LC 实时分析] 窗口的状态显示区域中显示为 [就绪]。

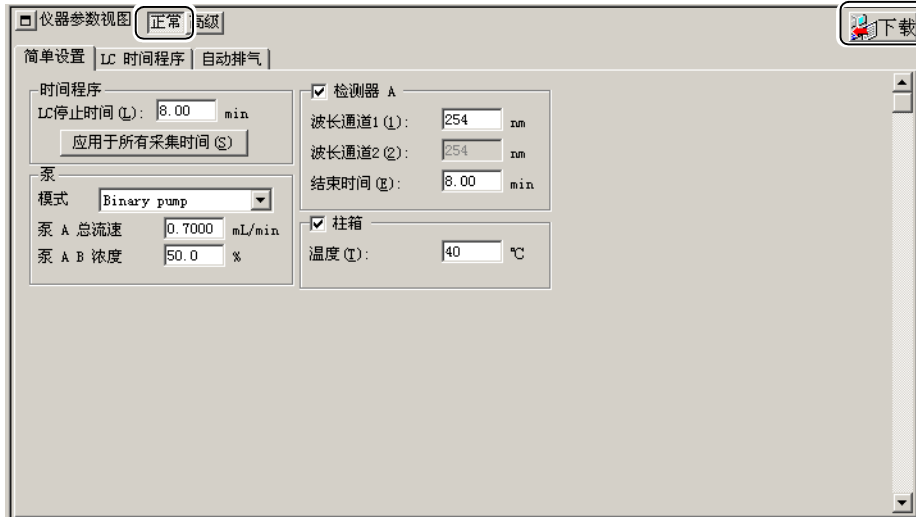


注意

如果显示为 [未连接]，请参见第 14 页的“3.2.2 设置分析仪器的系统配置”，并根据需要调整系统配置。

2 在 [仪器参数视图] 中，设置在分析中要使用的仪器参数。

单击 [正常] 显示一个标签，可以在其中输入分析条件，例如测量时间、泵流速、检测器波长和柱温箱温度等。请确保为每一检测器设置了 [LC 停止时间] 和 [结束时间]（测量结束时间）。



注意


- [LC 停止时间] 是控制仪器的持续时间。如果时间程序或馏份收集器时间程序都没有设置，则将其保留为 0.01 min。
- 请确保在自动进样器的高级设置中设置了 [检测样品架]。如果样品架类型设置不正确，则会出现错误，并且不能完成分析。

3 使用新名称保存方法文件。

出现保存设置（方法文件的设置）的屏幕。

4 一旦设置了仪器参数，单击 [下载] 将设置传输到仪器。

将参数传输到仪器。

如果在传输过程中激活系统控制器，则每个仪器模块按照新的参数开始运行。如果没有激活系统控制器，则单击 （仪器开 / 关）按钮以激活仪器。

5 当分析条件变化时，单击工具栏中的 （保存）按钮覆盖方法文件的设置。

因为方法文件用于连续分析，所以建议您将该方法文件保存在易于找到的位置（文件夹）中。

注意

通过从 [文件] - [选择项目（文件夹）] 中选择项目文件夹，可以指定保存文件的缺省位置。（[第 42 页的“3.8.1 查看和使用 \[数据管理器 \]”](#)）

■ 使用仪器控制工具按钮（仪器控制栏）的方式

当运行仪器时，可以使用“仪器控制工具按钮”。

按钮	名称	描述
	仪器开 / 关	激活或不激活系统控制器。 在使用 CBM-20A/20A lite 时，使用此按钮控制泵和柱温箱。
	控制器开 / 关	打开 / 关闭系统控制器的 LCD。
	控制器锁定 / 解锁	锁定解锁系统控制器控制台上的按钮。 在锁定时，仅能够通过 LCsolution 软件进行控制。这样有助于防止操作错误。
	泵开 / 关	开始 / 停止泵操作。
	进样器排气	开始执行自动进样器排气。 通过选择 [仪器参数视图] 中的 [高级]，在 [自动进样器] 标签中设置自动进样器的排气时间。
	清洗进样器	开始清洗自动进样器。 该操作清洗采样针管。
	柱温箱开 / 关	打开 / 关闭柱温箱。
	检测器 A 归零	单击此按钮，将检测器的信号强度校正为零。

注意

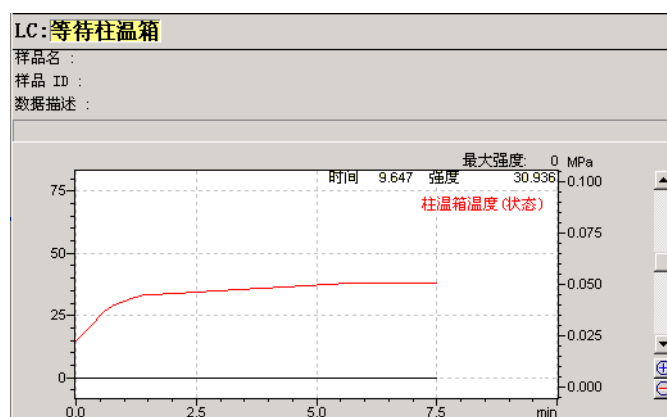
可以在 [视图] 菜单中显示 / 隐藏仪器控制栏。

3.2.5 监视分析仪器

当正确连接仪器且正确设置 [系统配置] 时，每台仪器的当前状态信息显示在“仪器监视栏”和 [色谱图视图] 中，他们位于 [LC 实时分析] - [数据采集] 窗口。

■ [色谱图视图]

可以监视检测器信号强度、压力、柱温箱温度、室温和检测器池温度。



■ 仪器监视栏

每台仪器模块的参数以数字值显示。



LC: 等待柱温箱

详细信息...

项目	值	单位
总流速		mL/min
浓度 B		%
浓度 C		%
浓度 D		%
泵 A 流速	0.000	mL/min
泵 B 流速	0.000	mL/min
泵 A 压力	0.0	MPa
泵 B 压力	0.0	MPa
泵 A 脱气机	-92	kPa
泵 B 脱气机	未连接	kPa
柱温箱温度	36.6	°C
最高温度	85	°C

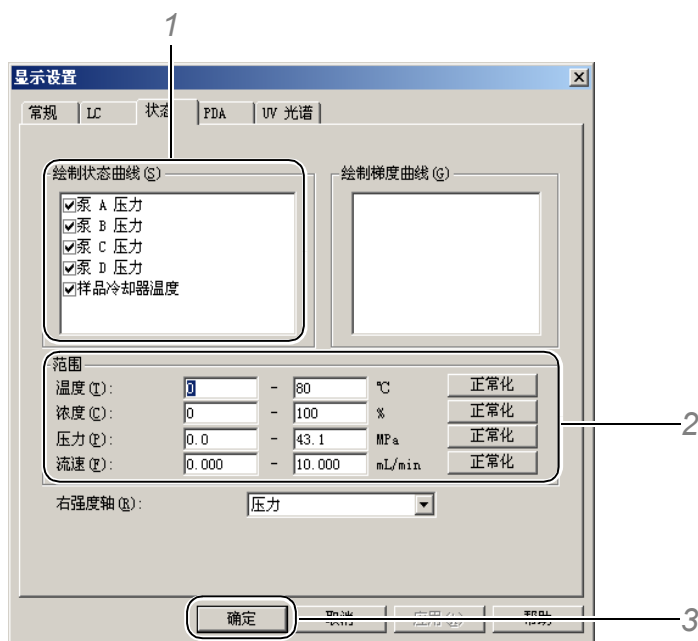
注意

通过在仪器监视栏中输入值，可以修改参数。

■ 为 [色谱图视图] 中的图表设置轴的类型和范围

可以为 [色谱图视图] 中的图表设置轴类型和轴范围。

- 1 在图表上用鼠标右键单击，从显示的菜单中选择 [显示设置]。出现 [显示设置] 屏幕。
- 2 设置每一项并单击 [确定]。




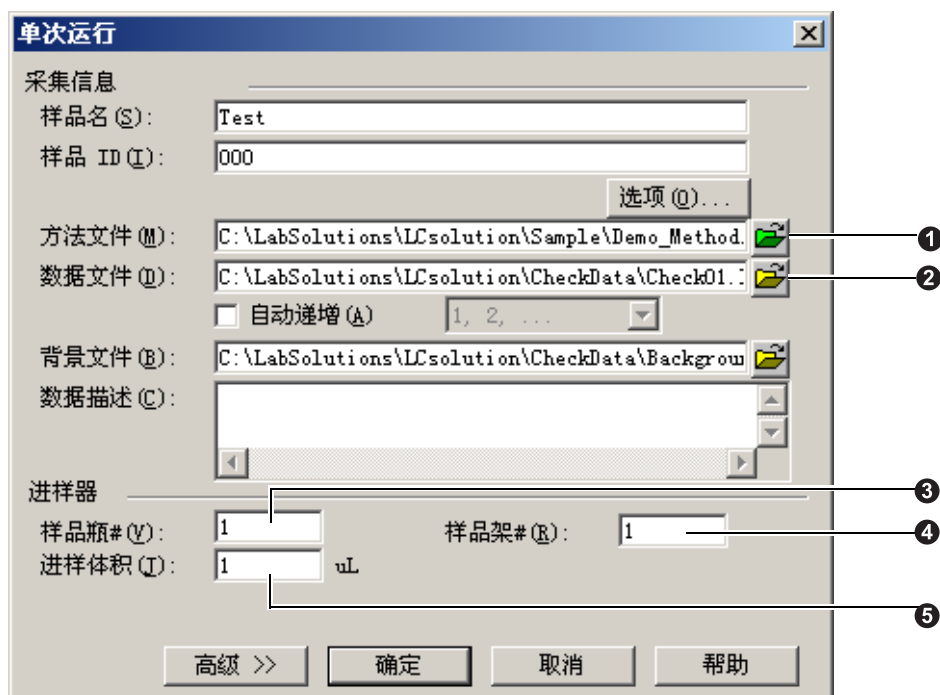
- 1 选中要显示的状态项。
- 2 设置每一状态项的显示范围。
- 3 单击 [确定]。


3.3 执行单次分析

当色谱峰的位置和最佳峰检测条件都未知时，必须提前测量样品色谱图，并用它设置数据分析参数。本节通过实际执行单次分析，描述设置最佳分析参数的步骤。

3.3.1 执行单次分析

- 1 请确保显示了 [就绪]，且 [色谱图视图] 中的基线稳定。
- 2 单击 [LC 实时分析] 窗口助手栏上的  (单次开始) 图标。出现 [单次运行] 屏幕。
- 3 设置每一项。



编号	描述
①	指定用于分析的方法文件。
②	输入创建的数据文件的名称。 通常创建数据文件的位置是当前浏览的项目（显示在 [数据管理器] 中的文件夹。）如果要指定文件夹，单击  (浏览) 按钮打开当前指定的目标文件夹。指定数据文件的文件夹和的名称。
③	输入自动进样器要注入样品的样品瓶号。 如果不注入任何样品，则输入“-1”。
④	输入自动进样器要注入样品的样品架编号。
⑤	指定注入的样品体积。

4 单击 [确定]。

单次分析开始，并且 [LC 实时分析] 窗口中的状态从 [就绪] 变为 [运行]。

3.3.2 设置积分参数

通过调整积分参数，可以设置最适合的值。

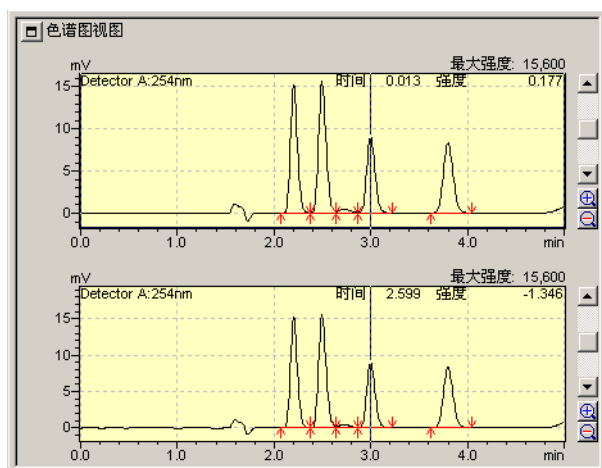
1 单击 [采集] 助手栏中的 (数据分析) 图标。

导入采集的数据文件后，启动“LC 再解析”的“LC 数据分析”。

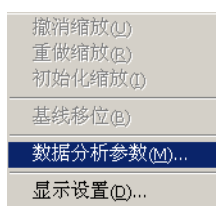
2 打开作为分析结果创建的另一数据文件。

可以从 [文件] 菜单打开数据文件。

打开数据文件，以在 [色谱图视图] 中显示色谱图。



3 用鼠标右键在 [色谱图视图] 上单击，从显示的菜单中选择 [数据分析参数]。



出现 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 屏幕。

4 单击 [积分] 标签，输入适当的积分参数值。然后单击 [应用]。



在 [积分] 标签中，可以调整积分参数，并确定最适合的值。可以在 [色谱图视图] 中检查更改的结果。更改每一字段的值，并找出最适合的积分参数。

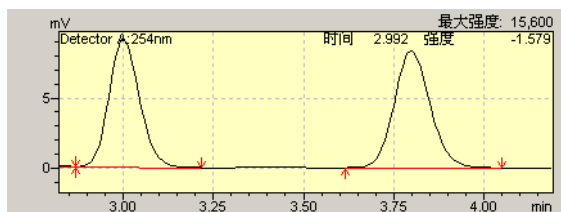
编号	描述
①	输入要检测的最小半峰宽。 通过设置要检测的峰的最小半峰宽，可以排除噪音峰。半高峰宽等于或大于 [宽度] 值大约 1/4 的峰被识别为峰。
②	输入值以确定峰的起点和终点。还可以执行斜率测试，从数据中获取最佳斜率值。 色谱图斜率的绝对值为 [斜率] 值的位置是峰检测的起点和终点。
③	要分割两个或多个重叠峰时，输入 [漂移] 参数值，以调整基线设置。
④	一般地，在色谱图中，半峰宽随保留时间增加而变宽。[T.DBL] 是自动更改 [半峰宽] 和 [斜率] 值的参数，用它可以检测保留时间较长的宽峰。在 [T.DBL] 中设置的时间之后，自动加倍 [半峰宽] 值并减少 [斜率] 值的 1/2。
⑤	输入要检测的峰的最小面积或最小高度。 小于最小值的峰不是要检测的峰。
⑥	选择是按面积或是按高度指定峰的最小值。

注意


以下是设置积分参数的方法。

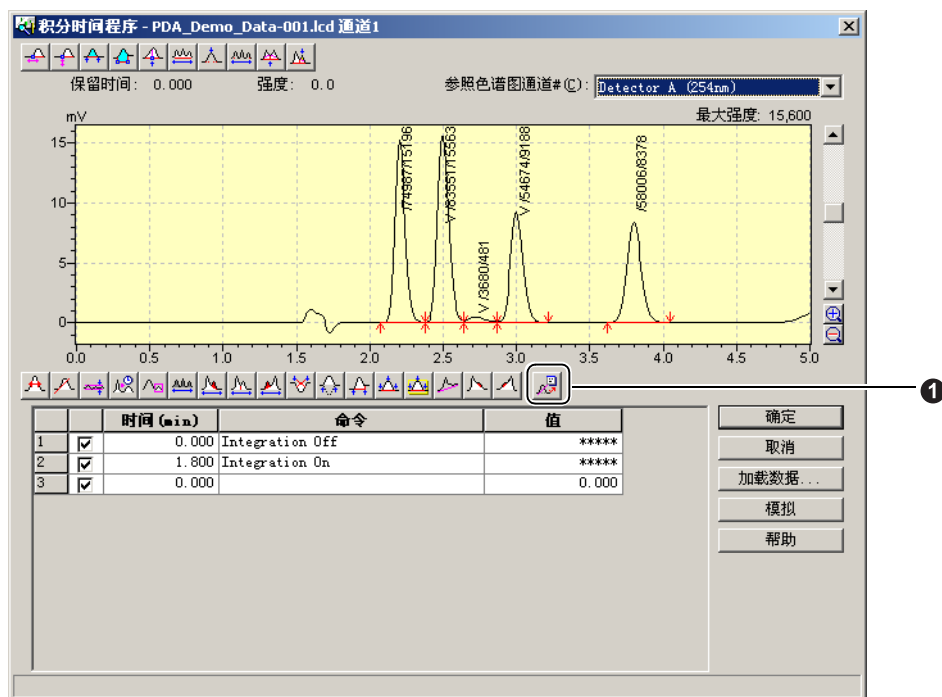
首先设置 [半峰宽] 和 [斜率] 的较低值。例如，将 [半峰宽] 值设置为 3，将 [斜率] 值设置为 1000（可以根据目标峰更改这些值）然后将“半峰宽”和“斜率”的初始值同时加倍，并检查峰检测状态。当 [半峰宽] 增大时，有微小噪音的峰检测为不需要的峰。另外，当 [斜率] 增加时，有滚动基线的峰检测为不需要的峰。重复上述过程，直到检测不到不需要的峰，然后使用那些积分参数。

5 一旦获取了适合的积分结果，单击 [确定]。




注意

如果在此时无法获取适合的积分结果，则可以使用“积分时间程序”执行积分，这样具有更大的灵活性。通过单击 [积分] 标签上的  (时间程序) 按钮可以启动“积分时间程序”。



斜率测试

通过执行斜率测试，根据分析之前色谱图上出现的噪音和漂移的状态，自动设置 [斜率] 值（峰检测灵敏度）。

- 1 单击  按钮，如上面屏幕的 ① 所示。
- 2 单击基线上斜率测试的起点。
- 3 单击斜率测试的终点。
执行斜率测试。
- 4 检查 [斜率] 值。要将此值设置为参数，请单击 [设置为参数]。

在“积分时间程序”中，可以随时使用任意积分命令。有关每一命令的详细说明，请参见帮助。

3.3.3 设置柱效参数

柱效计算是支持系统适用性测试的功能之一。
计算柱效时，完成下列设置。

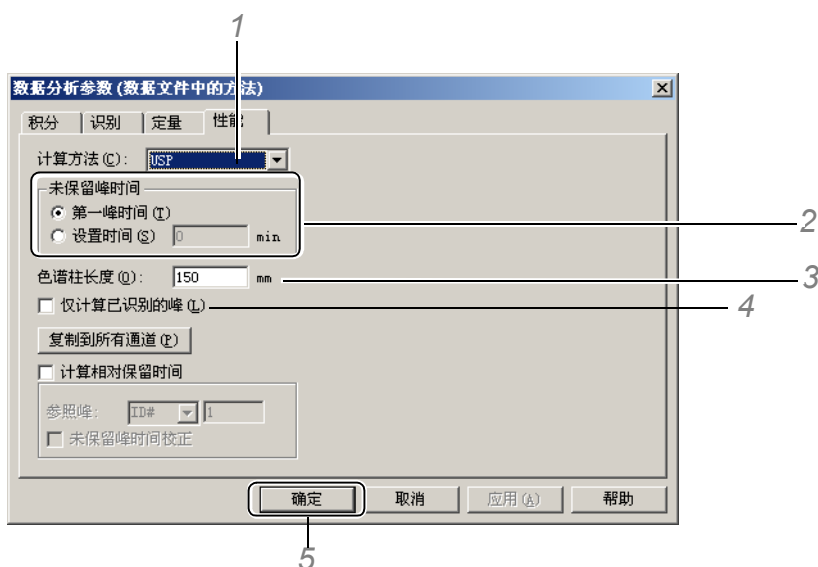
注意

- LCsolution 支持各种计算，包括 USP/JP/JP2/EP/BP/DAB/EMG/EMG(50%)/面积/高度，以及用户定义的方程式。有关详细信息，请参见《管理说明书》的“5.1.1 计算柱效”。
- 为每一识别的峰或检测的峰计算柱效。可以在化合物表或峰表（均位于 [LC 数据分析] 窗口中）中查看计算结果。

1 显示柱效参数设置屏幕。


- 1 在“LC 再解析”中打开一个数据文件。
- 2 用鼠标右键在 [色谱图视图] 上单击，从显示的菜单中选择 [数据分析参数]。
出现 [数据分析参数 (数据文件中的方法)]。
- 3 单击 [柱效] 标签，可以在此处设置柱效参数。

2 设置柱效参数并单击 [确定]。



- 1 选择柱效计算方法。
- 2 指定未保留峰时间。
既可以使用第一个检测的峰的保留时间，也可以输入自己选择的时间。
- 3 输入色谱柱长度。
该值用于计算理论塔板高度。

- 4 指定是计算所有峰，还是仅计算识别的峰。
当选中此对话框时，使用与化合物表中的峰相匹配的检测的峰计算柱效。
- 5 单击 [确定]。
完成柱效设置。


- 3 一旦设置了柱效，单击工具栏中的  (保存) 按钮。
覆盖并保存数据文件。

3.4 执行批处理分析

本节描述执行批处理分析的步骤。

3.4.1 创建批处理表

设置持续分析的计划时间。

- 1 单击“LC 实时分析”助手栏中的  (批处理) 图标。
显示批处理表。
- 2 从 [文件] 菜单中选择 [新建批处理文件]。
- 3 在批处理表中输入批处理分析计划时间。

下面列出了可以在批处理表中输入的主要项目：


分析	样品瓶	样品架名称	进样体积	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别#
1	1	1	10	0:未知	IT QT	Method1.lcm	Unknown1.lcd	0
2	2	1	10	0:未知	IT QT	Method1.lcm	Unknown2.lcd	0
3	3	1	10	0:未知	IT QT	Method1.lcm	Unknown3.lcd	0
4			1	0:未知	IT QT			0

样品瓶	输入自动进样器要注入样品的样品瓶号。如果不注入任何样品，则输入“-1”。
样品架名称	输入自动进样器要注入样品的样品架号。如果使用的自动进样器没有多个样品架设置，则无需输入。
进样体积	输入进样体积（单位： μL ）。
样品类型	选择样品类型。 为样品选择 [标准] 以创建校准曲线，选择 [未知] 以定量样品。 对于用于创建校准曲线的第一个标准样品，启用 [初始化校准曲线]。
分析类型	指定是否执行分析处理。 [IT] 表明执行积分，[QT] 表明执行定量计算。
方法文件	指定用于分析的方法文件。
数据文件	为将要作为分析结果保存的数据命名。 当输入文件名而不指定路径时，在当前浏览的项目文件夹（以前指定的）中创建数据。
级别 #	使用标准样品时，输入校准级别编号。

注意

如果批处理表中未显示所需的输入项，用鼠标右键单击批处理表，并从弹出菜单中选择 [表样式]。将所需的项添加到 [显示项目] 中。

4 命名批处理表并保存。

单击工具栏中的 （保存）按钮并使用新名称保存该批处理表。
保存批处理表的内容。

参考

有关详细信息，请参见第 111 页的“7.1.1 显示并编辑 [批处理表]”和第 113 页的“7.1.2 使用向导”。



3.4.2 执行批处理分析

基于批处理表设置执行分析。

1 在“LC 实时分析”中打开批处理表时，单击 [批处理] 助手栏中的 （批处理开始）。

从第一行开始逐行执行批处理分析。

注意

- 如果暂停批处理分析，在继续当前分析的同时，可以修改随后的批处理表。
- 要暂停当前正在分析的行的批处理分析，或者要重新开始暂停的批处理分析，单击 [批处理] 助手栏中的 （暂停 / 重新开始）图标。
- 要停止批处理分析，单击 [批处理] 助手栏中的 （停止）图标。

■ 在批处理分析过程中查看积分结果

使用快照功能可以临时显示 [再解析] 中的数据，并查看积分结果。当要确保在指定方法范围内使用需要的方式积分批处理分析的数据时，该功能十分有用。

1 在分析过程中，[数据采集] 处于激活状态时，单击 [采集] 助手栏中的 （快照）图标。

显示数据的“快照”。

■ 检查批处理分析的进度

消息	子消息	日期	时间	代码	
无法初始化与 LC 系统的连接。		2006-4-3	11:32:08	0x23e8	Admin
初始化连接 FDA 失败。		2006-4-3	11:32:12	0x240d	Admin

消息 / 日志文件 /

可以在输出窗口中检查批处理分析的进度。一旦批处理分析完成，即可检查消息以查看分析过程中是否有任何错误。当批处理分析不成功时，检查日志的内容。

3.5 生成校准曲线

通过批处理，LCsolution 生成校准曲线。

本节描述如何使用预测量数据，通过再解析的批处理生成校准曲线。

以下是生成校准曲线的步骤：

- 1 创建方法文件。**
设置识别 / 定量参数，如峰识别方法、定量计算方法以及校准曲线类型，然后将其另存为方法文件。
- 2 运行批处理表。**
使用方法文件，创建批处理表并运行批处理。




无论是执行实时分析，还是执行再解析批处理分析，都可以使用相同步骤生成校准曲线。


3.5.1 创建数据分析参数

根据预测量的色谱图数据，设置峰识别方法、定量计算方法以及校准曲线类型。

- 1 单击“LCsolution Launcher”中的 （再解析）。**
“LC 再解析”开始。
- 2 单击 [再解析] 助手栏中的 （LC 数据分析）图标。**
出现 [LC 数据分析] 窗口。



当使用来自光电二极管阵列检测器的数据时，单击 [再解析] 助手栏中的 （PDA 数据分析）图标，以打开 [PDA 数据分析] 窗口。

- 3 选择 [文件] 菜单中的 [打开数据文件]，然后选择预测量的数据文件。**
数据文件打开。
- 4 单击助手栏中的 （向导）图标。**
出现 [化合物表向导]。
- 5 请确保设置了正确的积分参数，然后单击 [下一步]。**



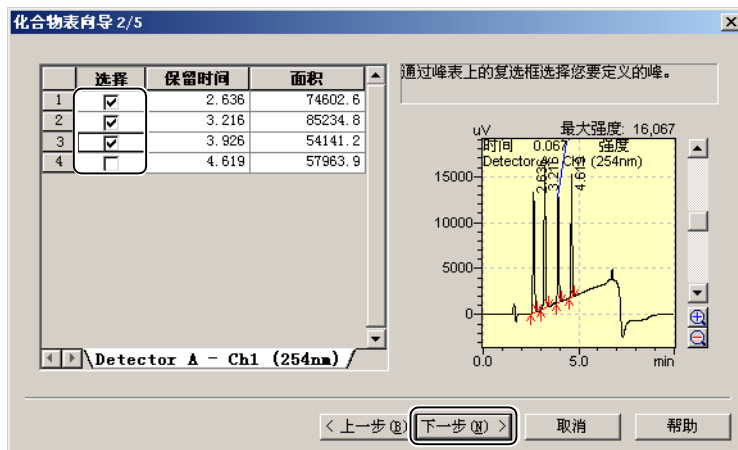
也可以在此处修改积分参数。有关设置积分参数的详细信息，请参见第 22 页的“3.3.2 设置积分参数”。

出现 [化合物表向导 2/5] 屏幕。

6 记录要识别的峰的保留时间，然后单击 [下一步]。

根据要记录的峰在化合物表位置进行检查。

在此处设置的保留时间范围内检测到的峰将在实时和再解析过程中定量。



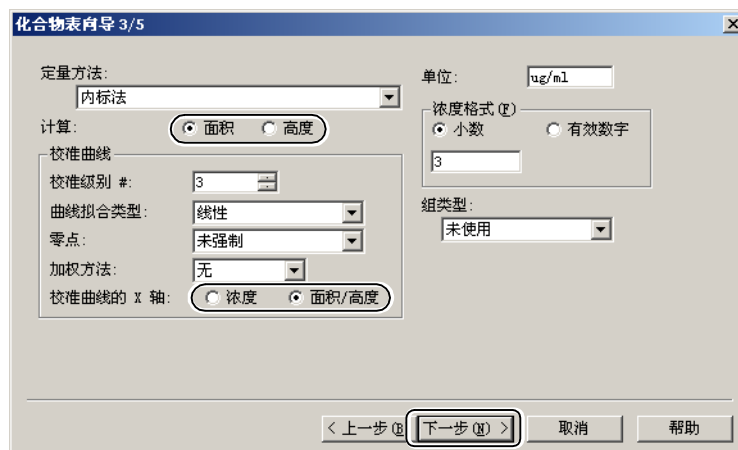
注意

可以在 [化合物表向导 4/5] 屏幕中设置保留时间范围。

出现 [化合物表向导 3/5] 屏幕。

7 指定定量计算方法和校准曲线类型，然后单击 [下一步]。

设置应该与以下屏幕中显示的设置相同。



注意

当指定 [组类型] 时，除了每个峰的定量计算外，还可以完成以下组定量计算。

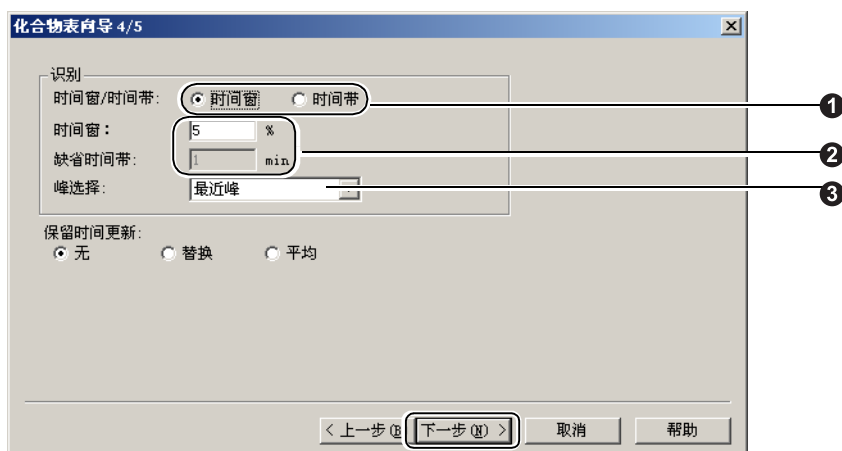
- [组校准] 通过使用同一组中设置的峰面积的总值生成校准曲线，定量数据。
- [浓度总和] 输出同一组中设置的峰的定量计算浓度的浓度总和。

出现 [化合物表向导 4/5] 屏幕。

3

8 设置识别峰的方法，然后单击 [下一步]。

不要更改此处的设置。继续。

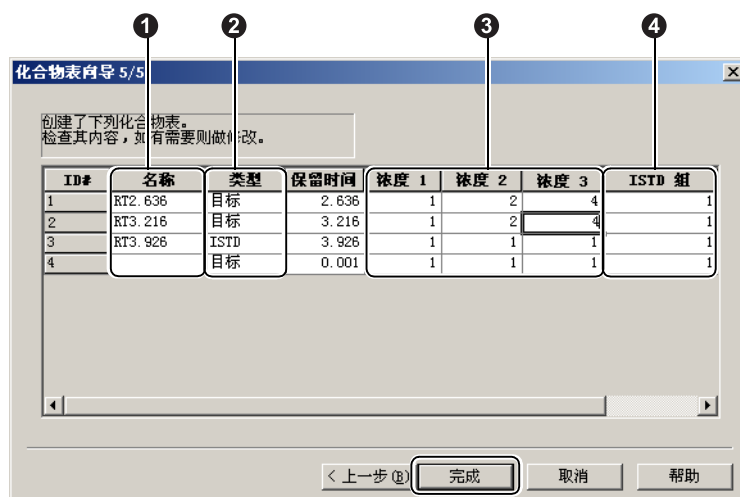


编号	描述
①	可以选择 [时间窗] 或 [时间带]。 当选择 [时间窗] 时，识别 “指定保留时间 ± (输入值) % + 0.02” 范围内的峰。 当选择 [时间带] 时，识别 “指定保留时间 ± 最小 (输入值)” 范围内的峰。
②	可以输入 [时间窗] 或 [时间带] 的值。
③	可以选择要识别的峰。 当在此处选择 [所有峰] 时，如果一个保留时间的范围内有两个或多个峰，则将这些峰识别为一个峰。

出现 [化合物表向导 5/5] 屏幕。

9 提供化合物表的详细设置，然后单击 [完成]。

屏幕中显示指定到此点的设置。如果有必要，输入或修改项目。



编号	描述
①	输入化合物名称。
②	输入类型。 当使用外标法定量时，指定所有内容为 [目标]。 当使用内标法定量时，仅指定内标物质为 [内标]。
③	输入每一级别标准物质的浓度。“浓度”后的数字表示浓度的级别，并用于在生成校准曲线时指定目标数据。 在 [浓度 1] 中，输入标准样品中包含的每一化合物的级别 1 浓度。与之类似，在 [浓度 2] 中输入级别 2 浓度，在 [浓度 3] 中输入级别 3 浓度，以此类推。
④	当使用内标方法时显示此字段。为组分输入与 [内标组] 值相同的值（通过使用内标组分和内标组分本身计算的值）。

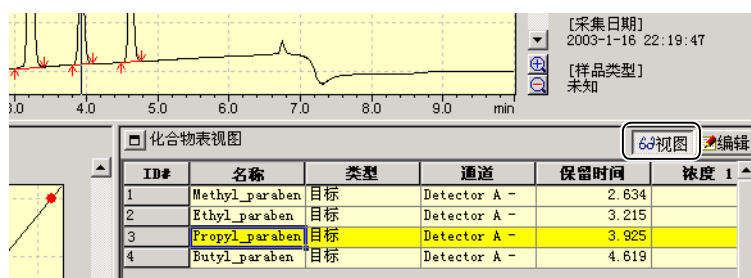
注意

当选择分组时，在化合物表字段中添加 [组 #]。必须为所有物质指定相同的 [组 #]，这些物质是在同一组中定量计算的。此外，完成化合物表向导设置后，在 [化合物表视图] 中 [组参数] 标签上提供每组的组设置。

完成 [化合物表向导]。

10 确认化合物表的更改。

一旦完成 [化合物表向导] 设置，单击化合物表右上角的 [视图] 按钮，确认所有的更改。




注意

如果要取消更改，在单击 [视图] 按钮之前选择 [编辑表] 菜单中的 [取消编辑]。

3.5.2 将数据分析参数应用到原始方法

将“LC 数据分析”中设置的分析参数另存为方法文件。

要在其他分析中使用这些设置，必须将数据中的方法另存为方法文件。

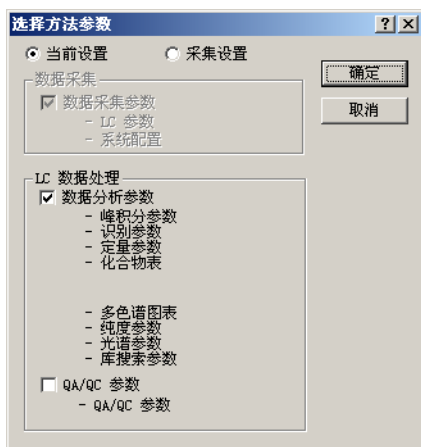
1 单击 [LC 数据] 助手栏中的 （应用到方法）图标。
出现屏幕，提示您指定方法文件名。

2 命名方法文件并单击 [保存]。

自动将原始方法文件名输入到 [文件名] 字段中。当应用“LC 数据分析”中设置的方法内容到原始方法文件时，单击 [保存] 而不进行任何更改，并覆盖方法文件。

出现 [选择方法参数] 屏幕。




3 单击 [确定] 而不进行任何更改。



覆盖已设置或更改的数据分析参数，并将这些参数保存到原始方法文件中。

3.5.3 执行批处理

创建批处理表并执行批处理。指定方法文件。

- 1 单击助手栏中的  (批处理) 图标。
出现 [批处理表] 窗口。
- 2 单击工具栏中的  (切换数据管理器) 按钮。
出现 [数据管理器]。
- 3 将包含测量数据的文件夹设置为项目文件夹。
单击 [数据管理器] 右上角的  (选择浏览文件夹) 按钮，然后选择包含测量数据的文件夹。
- 4 选择 [文件] 菜单中的 [新建批处理文件]。
- 5 将设置为校准级别的数据文件从 [数据管理器] 拖放到批处理表中。



将数据文件名添加到批处理表。

6 为批处理表的所有行指定 [方法文件] 字段中创建的方法文件。

可以在该屏幕中浏览并指定方法文件，该屏幕可以通过单击单元格右侧的箭头显示。



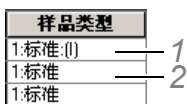
7 请确保在 [分析类型] 单元格中同时显示了 [IT] 和 [QT]。

如果它们没有显示在表中，则在 [分析类型] 屏幕中同时选中 [IT] 和 [QT]。



8 设置 [样品类型] 单元格。

将第一行设置为 [标准 - 初始化校准曲线]，然后将第二行和所有后续行设置为 [标准 - 添加校准级别]。



- 1 单击第一行以显示 [样品类型] 屏幕。选择 [标准] 和 [初始化校准曲线]，然后单击 [确定]。



- 2 单击第二行以显示 [样品类型] 屏幕。选择 [标准] 和 [添加校准级别]，然后单击 [确定]。



9 设置 [级别 #]。

输入并指定每行的化合物表级别。
当为多个数据设置同一级别时，数据的平均值用于校准级别。

级别#
1
2
3

10 使用新名称保存批处理表。

11 单击 [批处理] 助手栏中的 (批处理开始) 图标。 执行批处理，并生成校准曲线。

3.5.4 查看校准曲线

在“LC 数据分析”的 [校准曲线视图] 中查看生成的校准曲线。

1 在批处理表中打开最新处理的标准样品数据。

可以通过双击行号打开数据文件。

再解析	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别#
1	1:标准:()	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-001.lcd	1
2	1:标准	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-002.lcd	2
3	1:标准	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-003.lcd	3

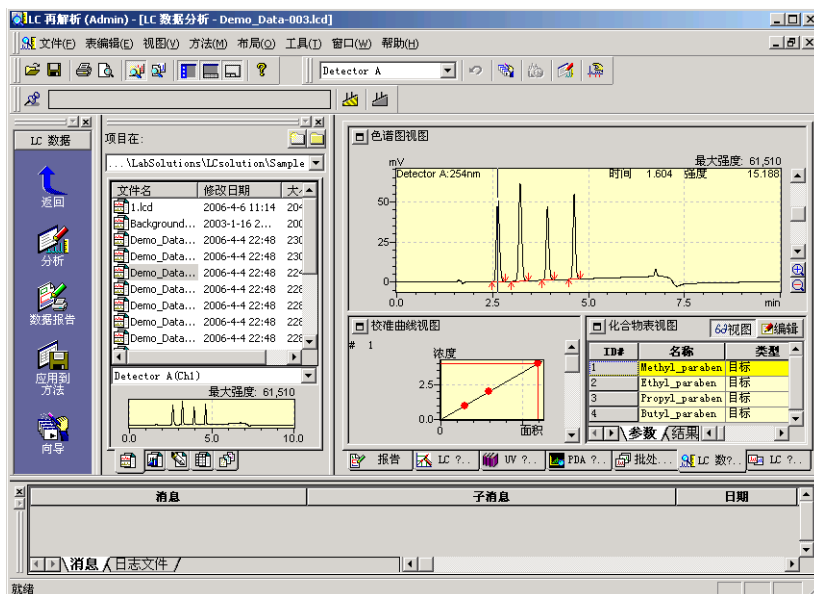
注意

当打开生成校准曲线过程中的标准样品数据时，显示不完整的曲线。

在“LC 数据分析”的 [校准曲线视图] 中显示校准曲线。


2 查看每一组分的校准曲线。

单击 [化合物表视图] 的 [ID#] 字段中的编号，以在 [校准曲线视图] 中显示每一组分的校准曲线。在 [化合物表视图] 中 [结果] 标签的 [浓度] 字段里显示浓度值，该值是使用保存在数据中的校准曲线上的峰面积 / 高度计算的。



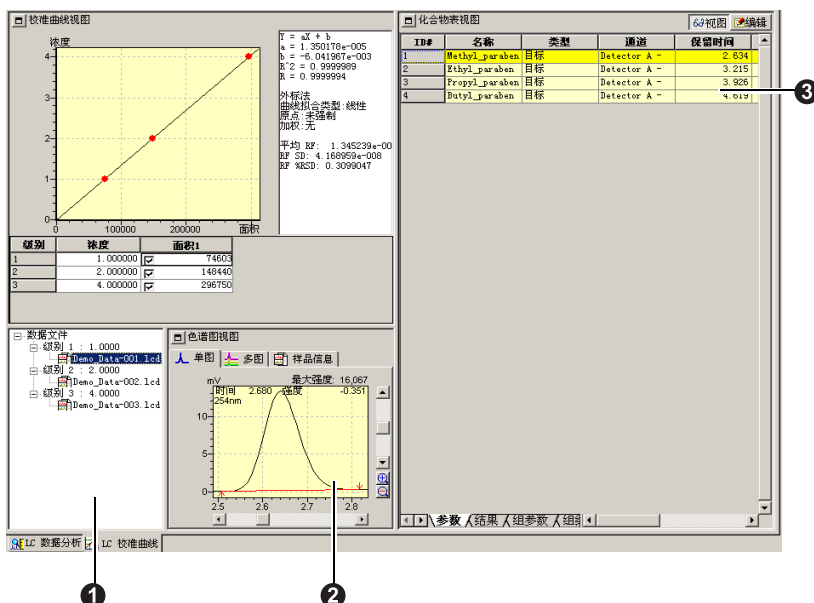
3

■ 详细的校准曲线视图

1 单击 [再解析] 助手栏中的  (校准) 图标。出现 [LC 校准曲线] 窗口。

2 打开用于生成校准曲线的方法文件。

要查看有关校准曲线的详细信息，选择 [文件] 菜单中的 [打开方法文件]，然后指定方法文件名。



可以在此屏幕中查看以下内容。

编号	描述
①	校准数据所有级别的数据文件名
②	色谱图
③	峰信息

可以从此屏幕添加或删除校准级别。

要添加校准级别数据，将数据文件从 [数据管理器] 拖放到显示文件名的区域。

要删除校准级别数据，用鼠标右键单击要删除的数据文件，然后从显示的菜单中选择 [删除]。

注意

如果没有在方法文件中设置的识别条件内识别峰，则不添加曲线的校准级别。这时，即可以从 [方法] 菜单中选择 [数据分析参数]，然后修改 [识别] 标签中的参数，也可以优化 [化合物表视图] 的 [参数] 标签中的 [保留时间] 设置。

3.5.5 使用校准曲线计算数据浓度

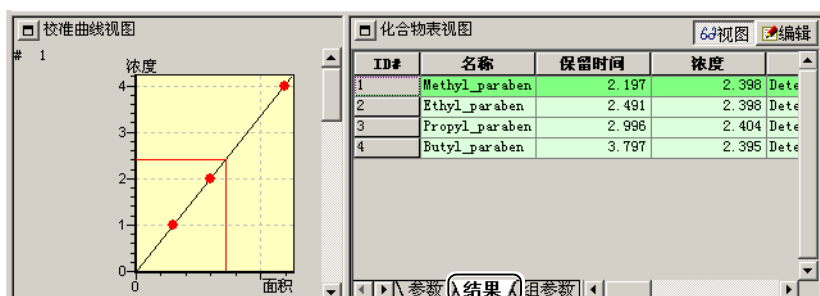
使用校准曲线可以计算未知样品的浓度。可以通过导入方法或执行批处理计算浓度。

■ 导入方法

1 使用“LC 数据分析”或“PDA 数据分析”，打开要计算的数据文件。
选择 [文件] 菜单中的 [打开数据文件]，然后指定数据文件名。

2 选择用于生成校准曲线的方法文件。
选择 [文件] 菜单中的 [加载方法参数]，然后指定方法文件名。
出现 [选择方法参数] 屏幕。

3 单击 [确定]。
使用方法文件中的校准曲线计算数据的浓度。可以在 [化合物表视图] 的 [结果] 标签中查看计算结果。



■ 执行批处理

1 创建批处理表。

通过指定用于生成校准曲线的方法文件，创建批处理表。每个字段必须进行如下设置：

		①	②	③	④	⑤
再解析	样品 ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别#
1	1001	0:未知	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-004.lcd	0
2	1002	0:未知	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-005.lcd	0
3	1003	0:未知	IT QT	Calib_Method.lcm	Demo_Data-006.lcd	0

编号	字段	设置
①	样品类型	所有 [未知]
②	分析类型	同时选中 [IT] 和 [QT]
③	方法文件	用于生成校准曲线的方法文件。
④	数据文件	要计算的未知样品数据。
⑤	级别 #	所有 [0]

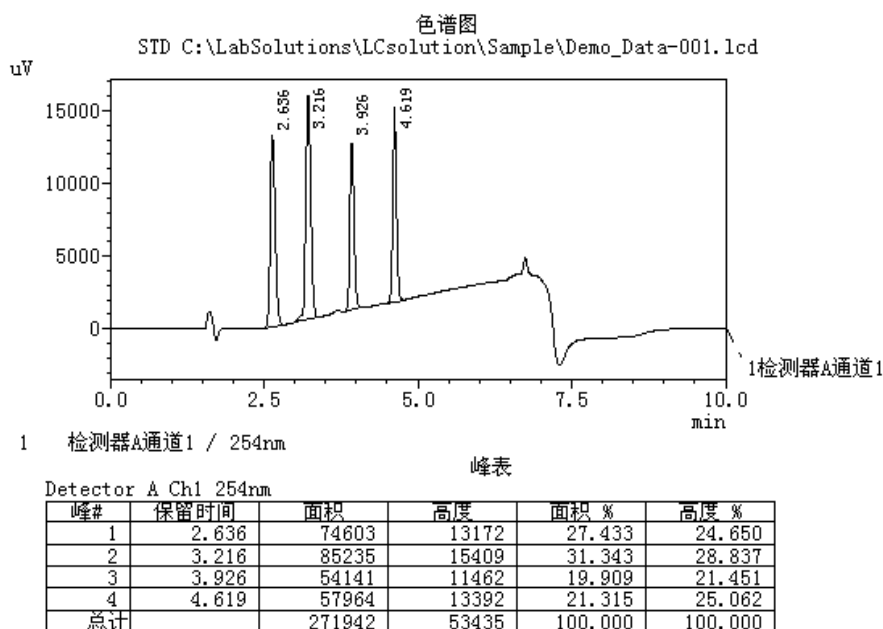
2 单击 [批处理] 助手栏中的 图标。



执行批处理，并且根据方法文件的校准曲线定量计算浓度。

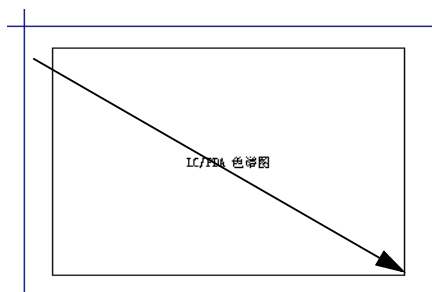
3

3.6 创建报告格式

本节描述创建数据文件报告的步骤。本节中以创建显示色谱图和峰表的报告为例。[☞ 第 135 页的“报告功能”](#)



- 1** 单击“LC 再解析”助手栏中的  (报告格式) 图标。出现 [报告] 窗口。
- 2** 单击工具栏中的  (LC/PDA 色谱图) 按钮。
- 3** 选择要粘贴色谱图的区域。



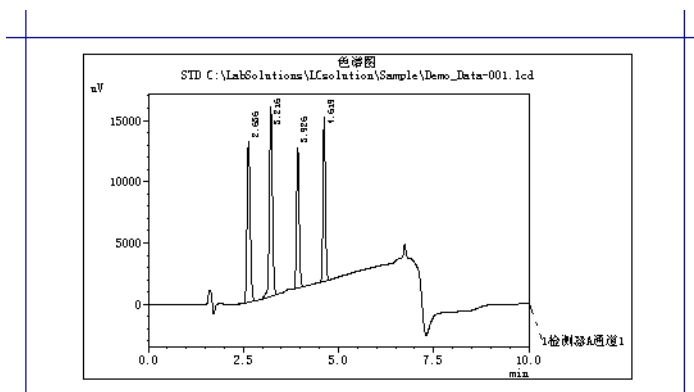
在工作区中，将光标从要粘贴项目的区域的起点拖放到终点。在区域的终点处松开鼠标按钮，出现 [LC/PDA 色谱图属性] 屏幕。

4 单击 [确定]。

在 [LC/PDA 色谱图属性] 屏幕中设置报告格式。在此示例中，使用缺省值输出报告，因此单击 [确定] 而不进行任何更改。
在工作区中显示如下色谱图。

5 将文件加载到报告。

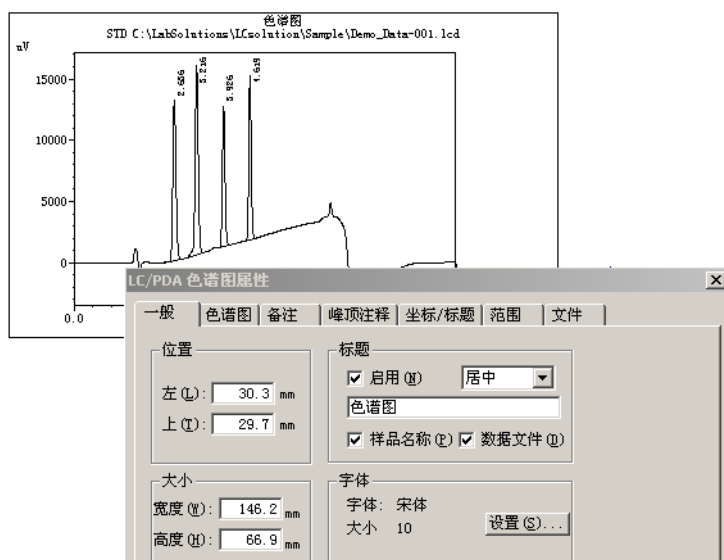
将  (数据文件) 图标从 [数据管理器] 拖放到工作区中。将选中的文件加载到报告中。



3

6 定制报告。

- 1 用鼠标右键单击工作区，然后从菜单中选择 [属性]，或双击粘贴色谱图的工作区的区域。出现 [LC/PDA 色谱图属性] 屏幕。



- 2 设置报告的显示格式，或启用 / 禁用标题的显示。


注意

可以在工作区中查看报告格式，通过使用 [预览] (第 40 页)，可以查看其详细信息。

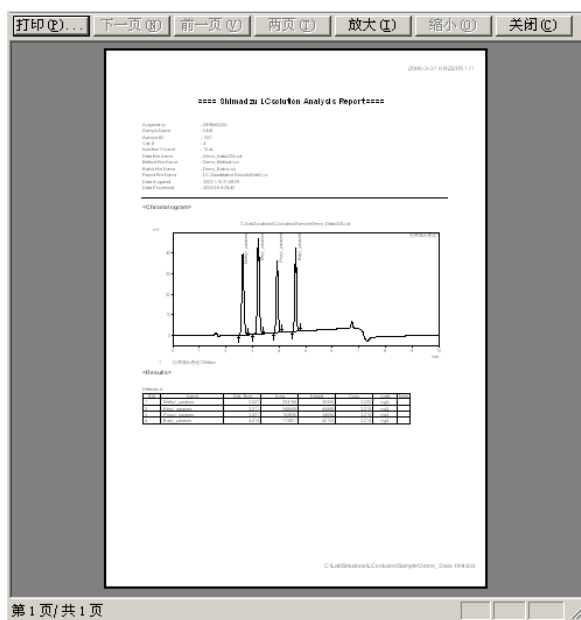
7 单击工具栏中的  (LC/PDA 峰表) 按钮。

8 选择要粘贴峰表的区域。


正如上述第 3 步中所述的粘贴色谱图，在工作区中拖动鼠标光标指定起点和终点。现即完成了报告布局。

9 单击 [报告] 助手栏中的  (预览) 图标。




检查在预览屏幕中显示的报告内容。有关详细信息，请参见第 148 页的“9.5.5 查看打印图像”。



10 要打印报告，单击工具栏中的 [打印]。
打印报告。

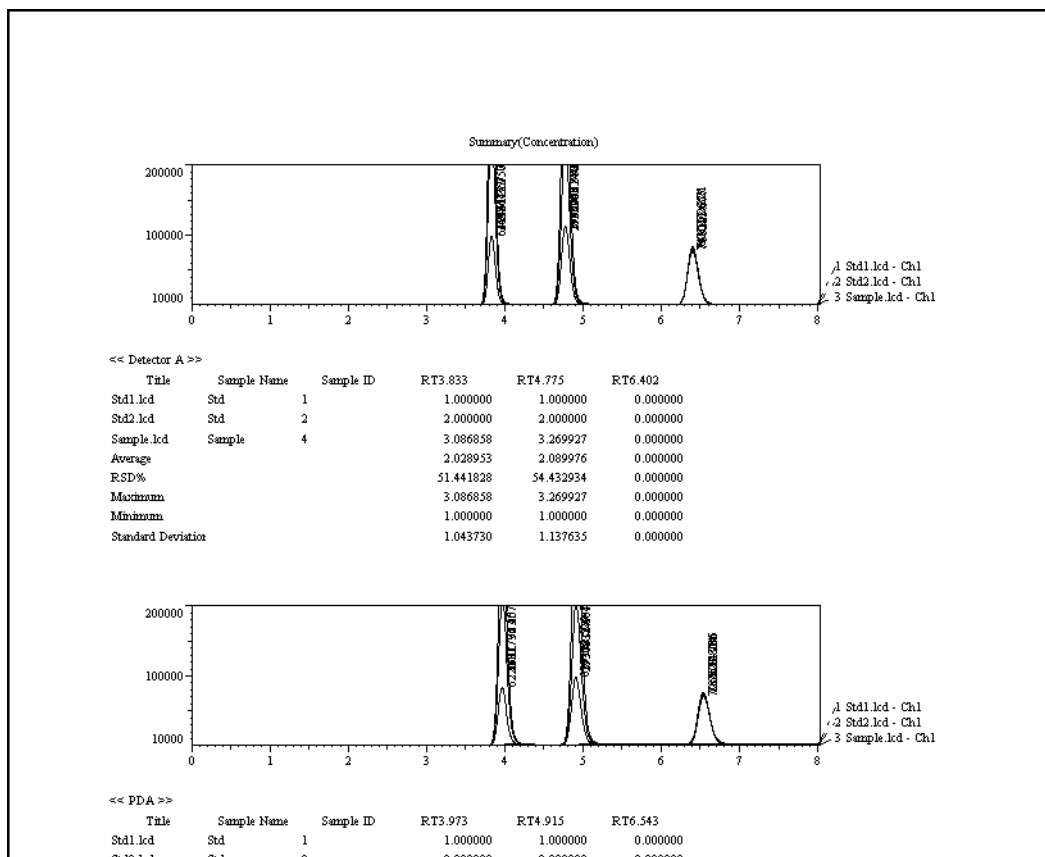
11 保存报告格式。
一旦保存了报告格式，就可以使用相同的格式创建其他数据的报告。
单击工具栏中的  (保存) 按钮，然后使用新名称保存报告格式。

注意

- 要打开保存的报告格式，单击工具栏中的  (打开) 按钮，然后在 [打开] 屏幕中指定文件名。
- 通过使用  (文本) 或  (图片) 以及第 3 步中描述的相同步骤，粘贴文本和图像并放置在报告中。

3.7 创建汇总报告

汇总报告的功能是创建简单的报告，该报告包括如下所示的两个或多个结果的色谱图和峰表。






汇总报告有两种类型。

- [浓度]: 浓度、面积和高度的结果一起显示。
- [化合物]: 显示每个化合物峰的峰信息，包括浓度和柱效。


本节描述使用再解析批处理分析创建“汇总报告”的步骤。

可以使用与创建报告格式相同的步骤创建汇总报告。有关未在此处描述的步骤的详细信息，请参见第 38 页的“3.6 创建报告格式”。

1 创建汇总报告格式。

- 1 单击“LC 再解析”助手栏中的 （报告格式）图标，以显示 [报告] 窗口。
- 2 单击工具栏中的 （汇总（化合物））或 （汇总（浓度））按钮。
- 3 在工作区中，将光标从要粘贴项目的区域的起点拖放到终点。
- 4 保存报告格式

2 选择用于分析的批处理文件。

单击“LC 再解析”助手栏中的 （批处理）图标，以打开 [批处理表] 窗口，并打开用于分析的批处理文件。

3 批处理表的设置。

再解析	分析类型	方法文件	数据文件	汇总类型	汇总报告格式文件
1	IT QT	Demo_QCTool_Method.lcm	Demo_Data-001.lcd	汇总开始	ummary\Summary Report(Conc_LC).lcr
2	IT QT	Demo_QCTool_Method.lcm	Demo_Data-002.lcd	汇总运行	
3	IT QT	Demo_QCTool_Method.lcm	Demo_Data-003.lcd	无	
4	IT QT	Demo_QCTool_Method.lcm	Demo_Data-004.lcd	汇总结束	

编号	描述
①	输入汇总报告格式文件的名称，该文件在第 1 步中，在 [汇总开始] 行的 [汇总报告格式文件] 字段里创建。

注意

除 [汇总开始] 行以外，无需为其他行指定汇总报告格式文件名。

在上述示例中，通过批处理汇编的数据文件 [01]、[02] 和 [04] 的汇总报告，以 “Summary.lcr” 格式打印。

注意

可以通过在一个批处理表中设置 [汇总开始] 和 [汇总结束] 的两个或多个设置，打印多个汇总报告。

4 单击助手栏或屏幕上方的 （批处理开始）图标。 执行批处理，并打印选定的汇总报告文件。

3.8 查看数据

本节描述如何在实时分析和再解析后查看结果。


3.8.1 查看和使用 [数据管理器]

当使用 LCSolution 时，管理文件的基本方法是将所有相关文件（如数据文件、方法文件和批处理文件）放入相同的“项目文件夹”中。使用 [数据管理器] 有效地管理 LCSolution 的项目。

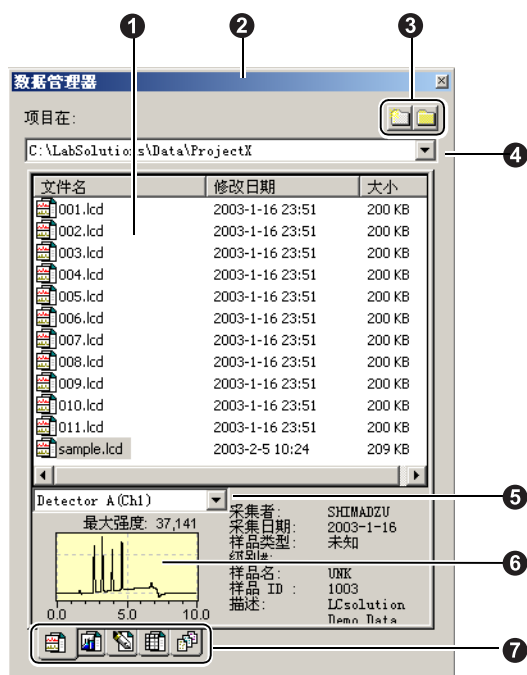
注意

使用 LCSolution 的 [数据管理器] 和 [Windows 管理器] 创建或复制项目文件夹而没有任何限制。

■ 显示 [数据管理器]

单击工具栏中的 （切换数据管理器）按钮，切换 [数据管理器] 窗口开和关。



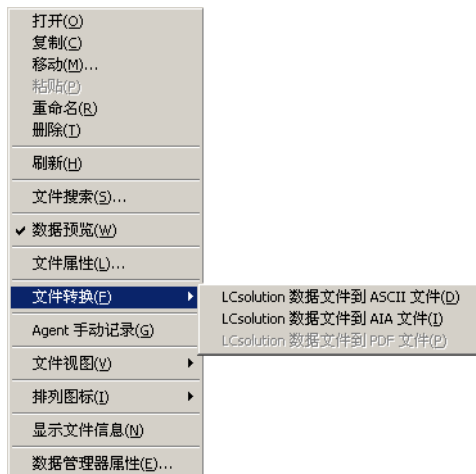


3

编号	描述
①	显示文件列表。可以通过双击文件或将其拖放到另一窗口中，加载这些文件。 <ul style="list-style-type: none"> 可以按文件名、分析日期和更新日期排列文件。用鼠标右键单击显示文件名的区域，然后从显示的菜单中选择 [排列图标]。在子菜单中，选择排列的标准。 要显示其他信息（如样品名），用鼠标右键单击文件名，然后从显示的菜单中单击 [显示文件信息]。
②	通过双击标题栏，可以切换浮动显示和对接显示（其中，[数据管理器] 包含在 LCsolution 窗口中）。
③	创建新的项目文件夹，复制和浏览现有的项目文件夹。
④	可以列出并选择以前使用的项目文件夹。
⑤	选择要显示色谱图的检测器。
⑥	可以预览选中的文件内容。也可以显示部分样品信息。用鼠标右键单击文件名，然后从显示的菜单中单击 [数据预览]，以切换预览开或关。
⑦	可以根据文件类型显示文件。要显示所有文件，选择 [所有文件]。

转换数据格式

可以将 LCsolution 数据文件转换为 ASCII 格式，将其他 LC 工作站（岛津制造）的数据文件转换为 LCsolution 格式。



用鼠标右键单击文件名，然后从显示的菜单中选择 [文件转换]，并从子菜单中选择要转换的文件类型。

注意

根据显示的标签，可以选择不同的文件类型。


3.8.2 查看数据

通过启动“LC 数据分析”查看数据。

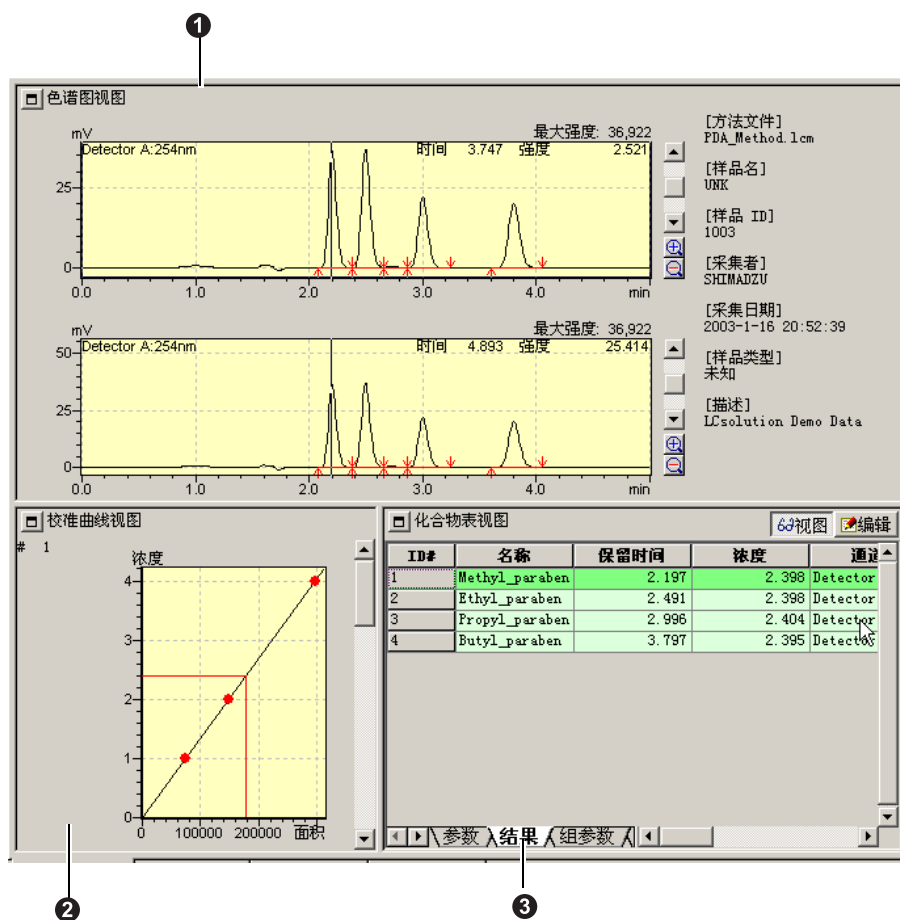
1 启动“LC 数据分析”，并打开批处理分析过程中采集的数据文件。

数据文件的名称是在批处理表中输入的名称。在批处理表中，通过从批处理表的鼠标右键单击菜单中选择 [浏览数据]，打开数据文件。

分析	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件
1	0:未知	IT QT	test.lcm	test.lcd
2	0:未知	IT QT		

此外，双击 [数据管理器] 的 [数据] 标签中的 （数据文件）图标，以导入数据文件并启动“LC 数据分析”。

在“LC 数据分析”中，可以查看校准曲线以及识别结果和定量计算结果。




编号	描述
①	可以在 [色谱图视图] 中查看采集的色谱图。
②	可以在 [校准曲线视图] 中查看用于定量计算的校准曲线信息。
③	可以在 [化合物表视图] 的 [结果] 标签中查看定量计算结果。

2 启动“LC 校准曲线”并加载用于分析的方法文件。

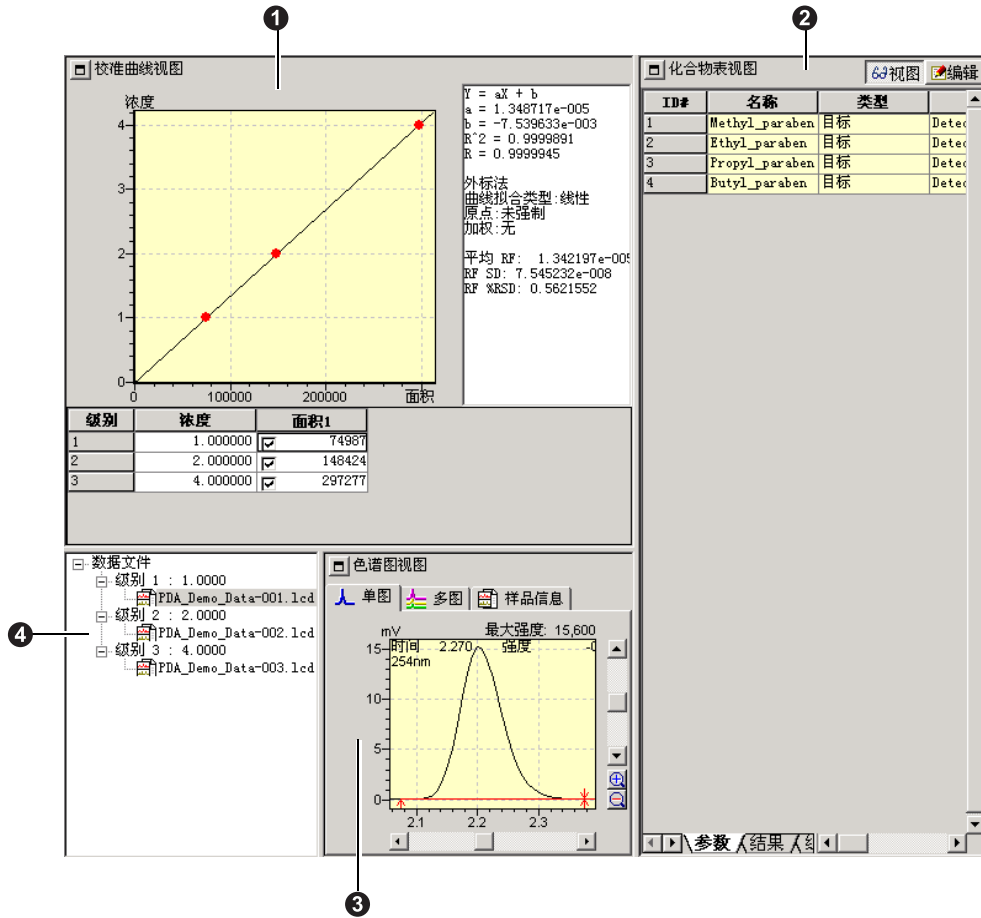
要查看校准曲线上每一校准级别的信息（如峰表、积分结果和峰面积），启动“LC 校准曲线”并加载用于分析的方法文件。

方法文件的名称是在批处理表中输入的名称。在批处理表中，通过从批处理表的鼠标右键单击菜单中选择 [编辑方法]，打开方法文件。

分析	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件
1	0:未知	IT QT	test.lcm	test.lcd
2	0:未知	IT QT		

此外，双击 [数据管理器] 的 [方法] 标签中的 （方法文件）图标，以加载方法文件并启动“LC 校准曲线”。

通过“LC 校准曲线”可以查看校准曲线以及峰信息的特定内容。



编号	描述
①	可以在 [校准曲线视图] 中查看校准曲线的详细信息。
②	可以在 [化合物表视图] 中查看每个峰的信息。
③	可以在 [色谱图视图] 中查看用于每个校准级别的峰的色谱图。
④	通过在数据树视图中选择其文件名, 查看用于生成校准曲线的数据内容。


3.8.3 使用 CLASS-Agent 查看数据

当在执行分析的计算机中设置了可选数据管理软件 CLASS-Agent 时, 可以将分析结果自动记录到 Agent 数据库中。

要手动记录数据, 请参见《管理说明书》的“6.3 使用 CLASS-Agent 的数据管理”。

注意

在 [工具] - [Agent 记录设置] 中选择 [指定每个仪器的数据库], 以指定记录 LCsolution 数据的数据库。如果没有设置 Agent 记录, 则不能记录数据。

1 在“LCsolution Launcher”中, 单击 [操作] 菜单中的  (数据库) 图标, 启动“CLASS-Agent 管理器”。

出现 [登录] 屏幕。

2 输入登录 ID 和密码。



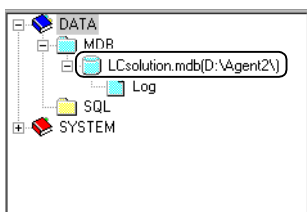
注意

[登录 ID] 的缺省值为 “Admin” 且没有密码。可以在 “CLASS-Agent 管理器” 中的 [工具] - [用户管理] 屏幕中记录或更改登录 ID 和密码。

3 单击 [确定]。

启动 “CLASS-Agent 管理器”。

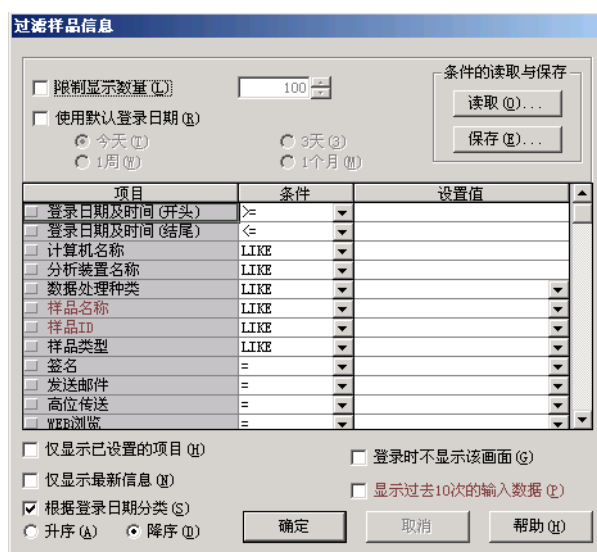
4 从数据库选择屏幕中单击要选择的数据库，在其中记录了 LCsolution 数据。



出现 [过滤样品信息]。

5 设置要显示数据的条件，然后单击 [确定]。

通过指定信息（如分析日期、记录日期和记录的数据的分析仪器）仅显示必要的数据库。



6 在数据列表中，单击需要的分析数据行。

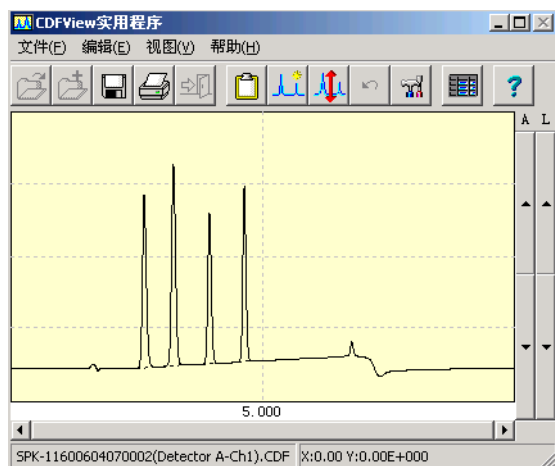
选定数据的分析结果显示在窗口底部。


	登录日期及时间	计算机名称	分析装置名称	数据处理种类	样品名称	
1	2006-04-07 10:34:41 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	3
2	2006-04-07 10:34:36 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	2
3	2006-04-07 10:34:32 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	1
4	2006-04-07 10:34:27 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	Blank	
5	2006-04-07 10:26:44 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	UNK	10
6	2006-04-07 10:26:39 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	3
7	2006-04-07 10:26:34 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	1
8	2006-04-07 10:26:30 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	UNK	10
9	2006-04-07 10:26:25 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	2
10	2006-04-07 10:17:04 (+0800)	SFK-116	System1	LCsol	STD	3

LCSOL	通道	峰位编号	ID号码	峰位开始高度	峰位终
1	DetA (Ch1) 254nm	1	0	-3	
2	DetA (Ch1) 254nm	2	0	-389	
3	DetA (Ch1) 254nm	3	0	-789	
4	DetA (Ch1) 254nm	4	0	-328	
5	DetA (Ch1) 254nm	5	0	25	
6	DetA (Ch1) 254nm	6	0	-180	
7	DetA (Ch1) 254nm	7	0	-481	
8	DetA (Ch1) 254nm	8	0	-647	

7 要查看分析数据的色谱图，单击工具栏中的 (色谱图预览) 按钮。

显示色谱图，并且可以查看选定分析数据的色谱图积分结果。



要关闭色谱图预览，再次单击工具栏中的  (色谱图预览) 按钮。

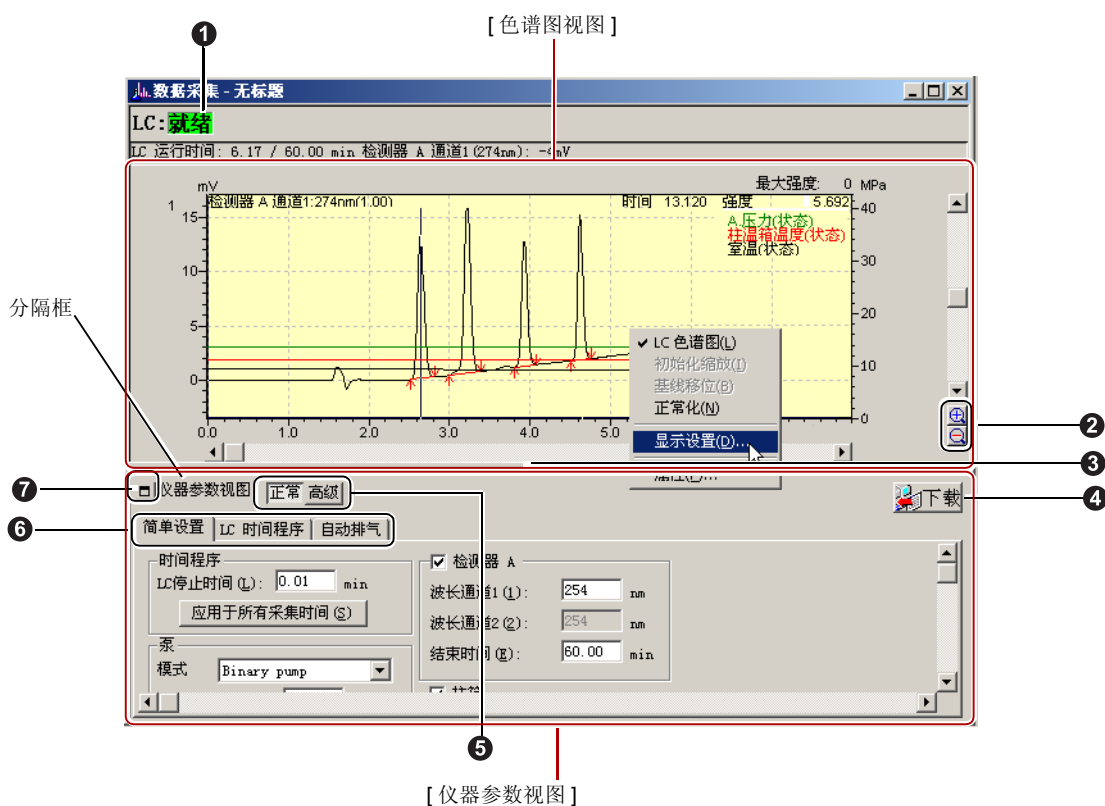
4

数据采集

本章介绍了 [数据采集] 窗口中的功能，以及与数据采集相关所有其他操作。

4.1 使用和查看 [数据采集] 窗口

[数据采集] 窗口有两个视图：[色谱图视图] 和 [仪器参数视图]。（由分隔框分隔的区域称为“视图”。可以通过拖动分隔框定制布局并调整显示区域。）在每个视图中，有下列功能和显示方式：



编号	描述
①	在本节中显示的内容是状态和在显示设置中指定的信息。
②	使用这些按钮增加或降低强度方向上的衰减。
③	使用滚动条查看以前绘图的一部分。
④	单击此按钮以将仪器参数设置发送到分析仪器。
⑤	可以在 [正常] / [高级] 模式之间切换。
⑥	在 [系统配置] 屏幕中记录的每个模块的参数设置显示在多个标签中。设置要用于数据采集时的仪器参数设置。
⑦	单击此按钮（更改大小按钮）在全屏幕和标准显示模式之间切换。

■ 通过鼠标右键单击显示的菜单

鼠标右键单击 [色谱图视图] 显示包括下列的菜单项目：


- [显示设置]
设置每个视图的显示设置。
- [属性]
可以修改包括图表颜色在内的设置。

■ [数据采集] 窗口中的工具栏

基线检查按钮（仪器控制栏）



[仪器控制栏] 中的按钮可以用于分析前和分析后，如开机和关机。

选中 （基线检查）按钮，以评估指定通道的基线的噪音和漂移。在开始数据采集过程之前，执行方法设置中指定的评估。


注意

- 不能执行色谱图类型设置为 [最大绘图] 的通道的基线检查。在 PDA 检测器的 [数据分析参数] - [多色谱图] 标签的 [波长设置] - [色谱图类型] 中完成此设置。
- 基线检查过程中，可以从 [LC 分析编辑器] 窗口记录分析数据。
- 通过将批处理的任意行中 [基线检查] 复选框标记选中，可以在开始分析前运行基线检查。

检测器 A 归零按钮（实时仪器控制栏）



[实时仪器控制栏] 有分别打开 / 关闭泵或柱温箱的按钮。


单击 （归零检测器 A）按钮以命令常规检测器执行信号基线的归零校正。

数据分析 / 快照图标（[采集] 助手栏）

数据采集过程中，该按钮成为 [快照] 按钮。通过读取 [LC 再解析] - [LC 数据分析] 中的数据，该功能显示从分析开始到单击该按钮时数据的色谱图，使您可以在分析过程中检查峰面积。

对于所有其他时间，该按钮成为 [数据分析] 按钮。该功能将数据文件中最近的数据采集读取到 [LC 再解析] - [LC 数据分析] 中，可以使您查看分析结果和方法。


注意

- 如果需要，可以使用新名称保存此过程中读取到的数据。
- 如果不显示助手栏，则单击工具栏中的 （切换助手栏）按钮。

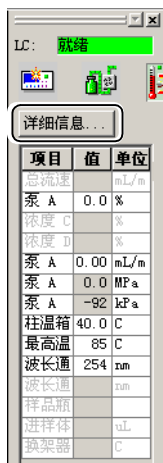
■ 仪器监视栏

在仪器监视栏中，可以查看仪器的运行状态，此外，还可以通过直接在监视值单元格中输入值，调整其参数值。

注意

如果不显示仪器监视栏，则单击工具栏中的 （切换仪器监视）按钮。

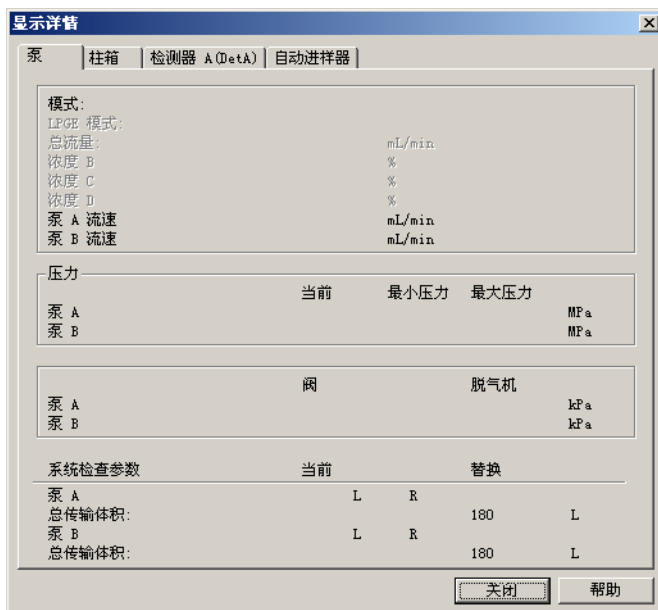
1 在仪器监视栏中单击 [详细信息]。



注意

- 在仪器监视栏的顶部，使用颜色和图标显示仪器的可行状态。
- 可以直接将仪器的参数设置到仪器。要设置参数，重新输入单元格的值，然后按 [Enter] 键以确认设置。

出现 [显示详情] 屏幕。



注意

- 在 [泵] 标签中，显示每个仪器模块的详细运行状态。

- 此处更改的参数不反映在方法中，因此这些更改不记录在参数的审查追踪日志中而是记录在操作日志中。

4.2 更改分析结束时间

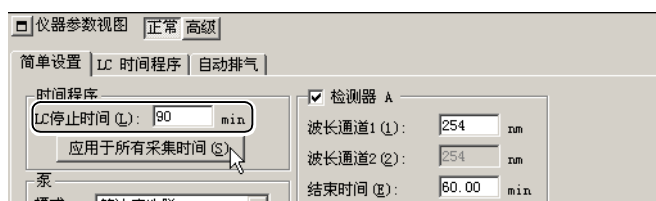
当达到 [仪器参数视图] 中指定的检测器的 [结束时间] 时，自动终止数据采集。

本节描述如何设置分析时间。

4.2.1 设置分析结束时间

可以根据 LC 时间（LC 时间程序的停止时间），分别设置分析结束时间（检测器停止数据采集的时间）。该功能可以使您控制色谱图中数据文件的大小，在这些色谱图中相对早的分离分析中目标元素的峰。

- 要设置 LC 停止时间作为所有检测器的分析结束时间，单击 [仪器参数视图] 中 [简单设置] 标签中的 [应用于所有采集时间]。




- 当设置每个检测器的不同分析结束时间时，输入 [LC 停止时间] 的值和每个检测器的 [结束时间]。

4.2.2 停止分析



执行以下操作以停止分析。

■ 对于单次分析

单击 [采集] 助手栏中的  (停止) 图标。立即停止色谱图的采集。在分析停止的点处创建数据。



■ 对于批处理分析

单击 [批处理] 助手栏中的  (停止) 图标, 或 [采集] 助手栏中的  (停止) 图标。显示屏幕, 提示您选择停止分析的时间。您可以选择在当前批处理行的中间立即停止分析, 或在处理当前批处理后停止分析。



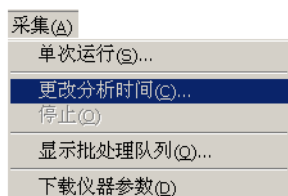
4.2.3 更改分析过程中的分析结束时间

在 [数据采集] 菜单的 [更改分析时间] 项目中, 可以在数据采集过程更改结束时间。

注意

一旦开始数据采集, [仪器参数视图] 设置变为只读, 并且不能在 [仪器参数视图] 中更改结束时间。

1 选择 [采集] 菜单中的 [更改分析时间]。



出现 [更改分析时间] 屏幕。

2 重新输入分析时间并单击 [确定]。



注意

- 有多个检测器时, 如果单击 [全部更改] 按钮, 则所有检测器的分析时间设置将与分析时间最长的检测器的分析时间相同 (当选 [更改为最小值] 时, 分析时间与分析时间最短的检测器的分析时间设置相同)。
- 如果指定的分析时间短于当前分析已用时间, 立即停止数据采集, 并创建数据文件。
- 虽然该设置不反映在方法中, 但是操作日志会记录在数据文件中以确保可追溯性。

- 当更改方法时，使用 [分析编辑器]。

4.3 更改数据采样间隔

需要根据采集的色谱图的峰形，在常规检测器中设置数据采样间隔。

注意

数据采样间隔越短，可以处理的色谱图的峰就越陡，但是设置采样率太低会增加数据文件的大小，并且会导致占用更多的空间。

本节描述与数据采样相关的参数，以及如何设置基本周期和检测器的采样间隔。

4.3.1 与数据采样相关的参数类型

与色谱图数据的采样间隔相关的参数包括：

■ [基本周期] ([系统配置] 中的检测器属性)

此处，可以设置色谱图采样间隔的基本单位。

一般地，应该使用初始值 100 msec。当需要高速采样时，可以将采样时间最多增加至 20 msec。

初始值	100 msec
可选值	20 / 40 / 60 / 80 / 100 / 200 / 500 / 1000 msec

注意

在下列情况下，不能将 [基本周期] 设置低于 100 msec。

- 当使用 SPD-10A (20A) 系列 (UV/UV-Vis 检测器)，且当 [系统配置] 的检测器属性中选中 [双波长模式开启] 时。
- 当使用 CDD-10Avp/sp (电导检测器)，并且连接且使用通道 2 选项。

■ [采样] [Hz] / [msec] ([仪器参数视图] - [数据采集] 标签)

根据色谱柱设置和分析条件适当地调整色谱图采样间隔。

初始值	[系统配置] 的 [检测器] 属性中设置的 [基本周期] 乘以 5 [msec]。
可选值	[基本周期] 的倍数。通常 1-10 倍 [msec]。

注意


- 当使用 [Hz] 单位进行设置时，上述初始值和可选值显示为时间 [sec] 的倒数。
- 采样间隔越短意味着数据文件越大。

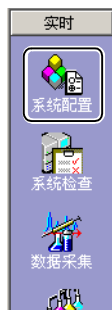
■ [半峰宽] ([数据分析参数] - [积分] 标签)

在此参数中，可以设置半峰宽 (半峰高处的宽度)，色谱图中的峰在达到此半峰宽时积分。

推荐的值	推荐的值是实际检测的半峰宽的 1/4 至 1/2 [sec]。
------	---------------------------------

4.3.2 设置检测器 [基本周期]

- 1 单击 [实时] 助手栏中的  (系统配置) 图标。



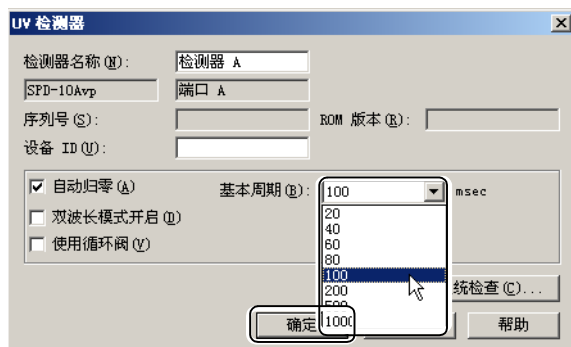
出现 [系统配置] 屏幕。

- 2 双击 [用于分析的模块] 列表中的检测器。




出现选定检测器的属性窗口。

- 3 选择基本间隔以获得必要的 [基本周期] 的采样间隔，然后单击 [确定]。



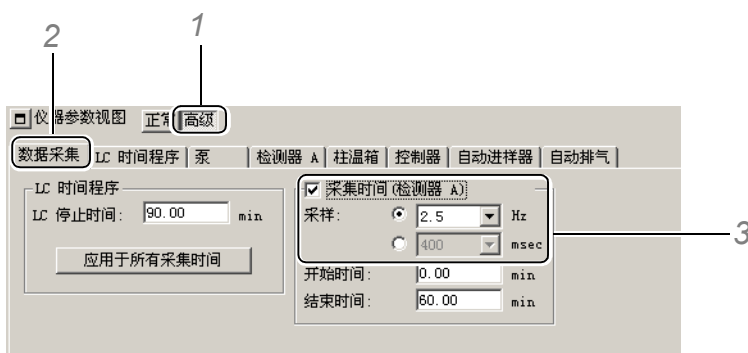
4.3.3 设置检测器的采样间隔

- 1** 单击 [实时] 助手栏中的  (数据采集) 图标。



出现 [数据采集] 窗口

- 2** 在 [仪器参数视图] 的 [数据采集] 标签中设置采样间隔。




- 1 单击 [高级] 以显示详细的设置。
- 2 单击 [数据采集] 标签。
- 3 以 [Hz] 或 [msec] 为单位设置采样间隔。

4

4.4 LC 系统的开机 / 关机设置

可以设置在指定时间启动 LC 系统和 / 或在分析完成后自动停止 LC 系统。

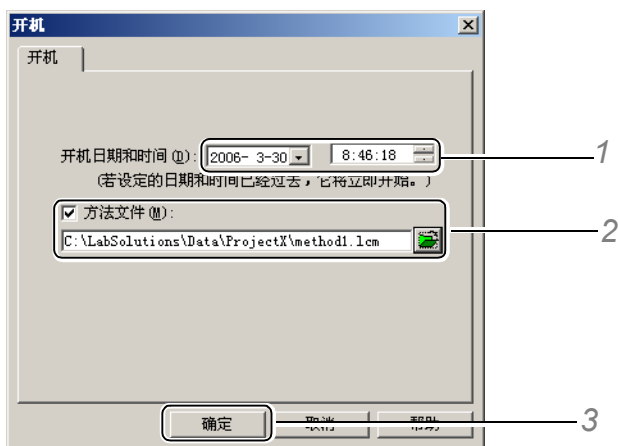
■ 在指定时间启动 LC 系统

1 单击 [仪器控制栏] 中的  (开机) 按钮。



出现 [开机] 屏幕。

2 指定要启动 LC 系统的日期和时间，然后单击 [确定]。




- 1 设置启动 LC 系统的日期和时间。
- 2 指定方法文件。使用指定方法文件中包含的仪器参数设置，可以执行预热操作。预热操作持续直到下一任务。
- 3 单击 [确定]。

注意

批处理表有相似设置，也可以在开始批处理之前设置 LC 系统开机日期和时间。

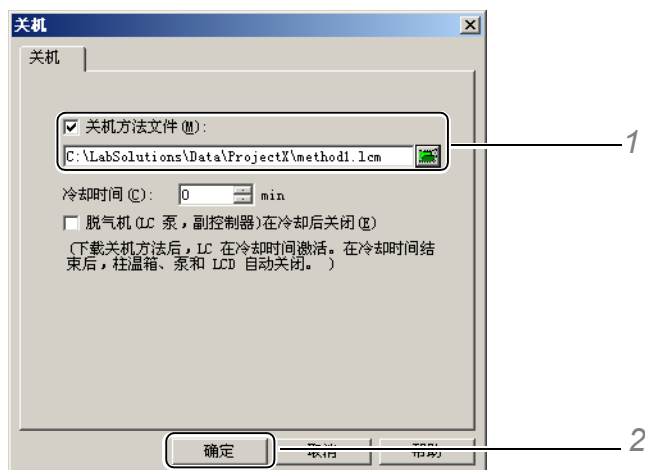
■ 分析后停止 LC 系统

- 1** 单击 [仪器控制栏] 中的  (关机) 按钮。



出现 [关机] 屏幕。

- 2** 指定关机方法文件并单击 [确定]。




- 1** 选择方法文件。
使用指定方法文件中包含的仪器参数设置，可以执行冷却操作。[冷却时间] 之后关闭仪器。
- 2** 单击 [确定]。

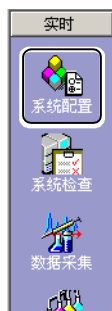
注意

按批处理队列中记录的顺序执行处理。请确保在批处理队列中间没有设置关机程序。如果在分析过程中或批处理队列执行过程中关机程序启动，则会在完成这些处理后，然后返回到“等待开机”状态。

4.5 记录色谱柱信息

当根据分析对象更改色谱柱时，首先将色谱图连接到 LC 系统，然后在 [系统配置] 中记录色谱柱信息。

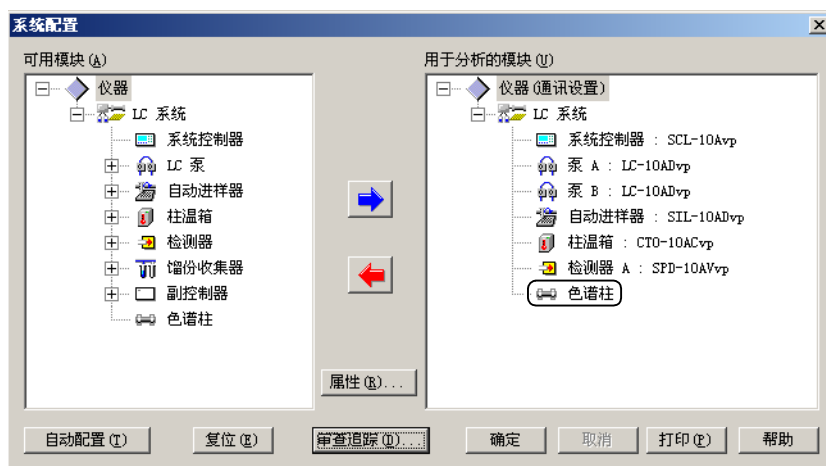
- 1 单击 [实时] 助手栏中的  (系统配置) 图标。



出现 [系统配置] 屏幕。

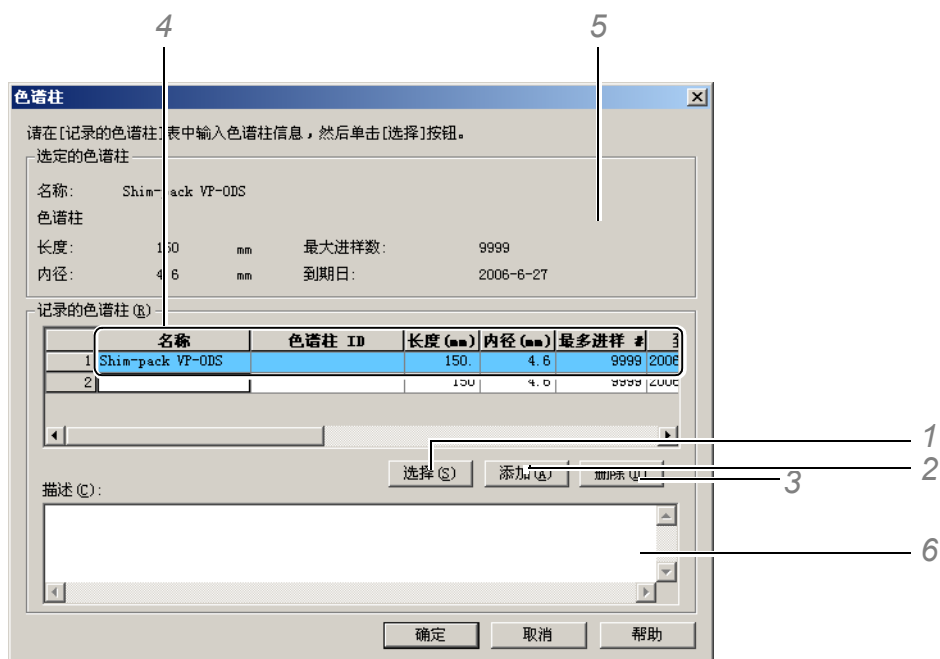
- 2 双击 [用于分析的模块] 列表中的 [色谱柱]。

当 [用于分析的模块] 中没有出现色谱柱时，双击 [可用模块] 中的 [色谱柱]，然后将其添加到 [用于分析的模块] 的列表中。



出现 [色谱柱] 屏幕。

3 设置每一项并单击 [确定]。



- 1 选定高亮显示的色谱柱。
- 2 在 [记录的色谱柱] 表的底部添加空白行。
- 3 删除当前光标所在行中的色谱柱信息。
- 4 当选定色谱柱（选定的色谱柱与背景颜色不同时），背景颜色发生变化。直接在 [记录的色谱柱] 表中输入色谱柱信息。
- 5 显示选定的色谱柱设置。
- 6 可以将描述添加到选定色谱柱。可以记录如色谱柱使用的历史信息并用于管理。

参考

有关如何将色谱柱安装到 LC 系统中的信息，请参见 LC 系统说明手册。

本页空白。

5

LC 数据分析

“再解析”由以下应用程序窗口组成：

- **[LC 数据分析]**
使用来自一般检测器的数据进行分析。
- **[PDA 数据分析]**
使用来自 PDA 检测器的数据进行分析。
- **[LC 校准曲线]**
- **[LC 数据比较]**

本章说明在 [LC 数据分析] 窗口、[LC 校准曲线] 窗口和 [LC 数据比较] 窗口中的操作。

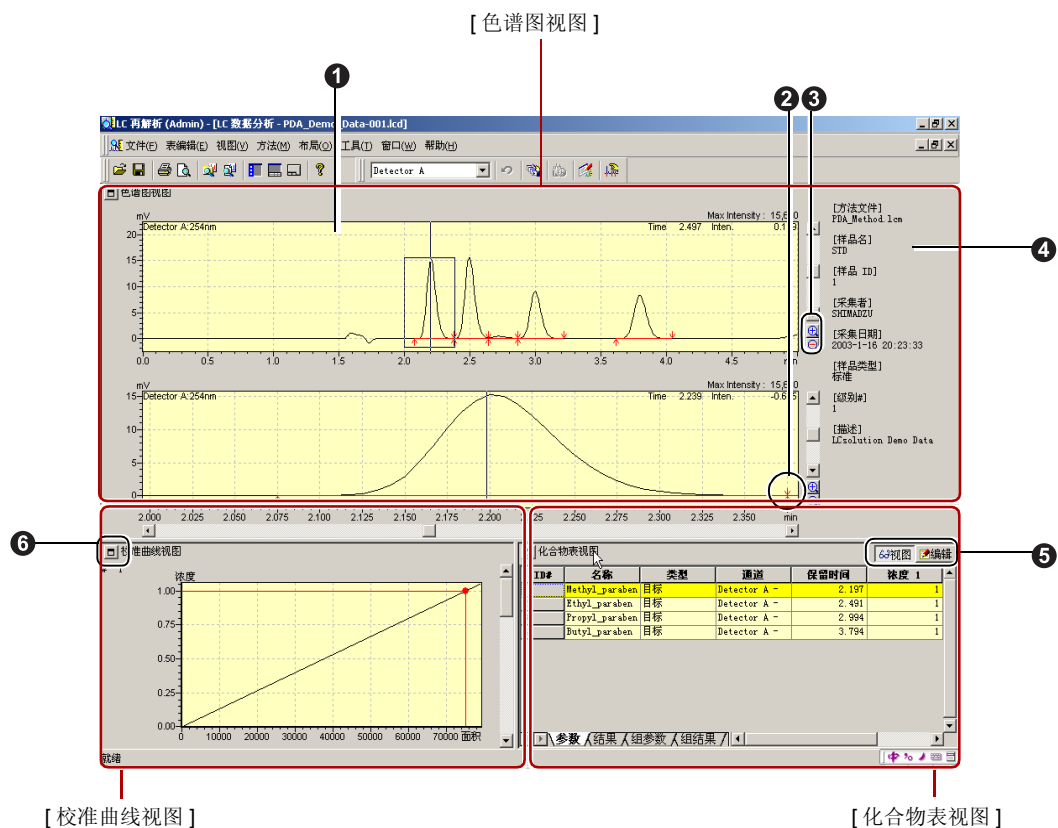
参考

有关在 [PDA 数据分析] 窗口中的操作，请参见第 87 页第 6 章的“PDA 数据分析”。

5

5.1 使用和查看 [LC 数据分析] 窗口的方式

[LC 数据分析] 窗口由三个视图组成：[色谱图视图]、[化合物表视图]和[校准曲线视图]。（由分隔框分隔的区域称为“视图”。可以通过拖动分隔框定制布局和调整显示区域。）在每个视图中，有以下功能和显示：



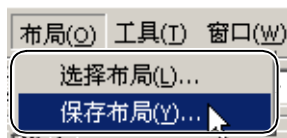
编号	描述
①	要指定放大显示的区域，在 [色谱图视图] 中拖动光标。
②	显示的、带有箭头的基线表明检测的峰的起点 (↑) 和终点 (↓)。
③	强度轴的范围可以伸缩。
④	显示样品信息。
⑤	在 [视图] / [编辑] 模式之间切换。 从 [编辑] 模式切换到 [视图] 模式时自动重新分析数据。
⑥	单击此按钮 (更改大小按钮) 在全屏幕和标准屏幕之间切换。

注意

在一个 [LC 再解析] - [数据分析] 窗口中，仅能打开一个数据文件。如果一次要处理多个数据文件的内容，必须分别启动多个 [LC 再解析] - [数据分析] 窗口，以打开每个不同的文件。

■ 保存定制的布局

要保存当前显示的布局，从 [布局] 菜单选择 [保存布局]。要使用已经保存的布局，选择 [选择布局]。



■ 单击鼠标右键显示的菜单

每个视图都有各自的鼠标右键菜单，与其功能相对应。这些鼠标右键单击菜单包括：

- [显示设置]
可以设置每个视图的显示状态。
- [属性]
可以修改包括图表颜色在内的设置。

注意

用鼠标右键在图表上单击时，菜单中某些选项 (例如复制到剪贴板、撤消缩放等) 变为可用。

5.2 使用数据文件操作

LCsolution [数据分析] 窗口使用的数据文件，包含关于方法、系统配置及其色谱图的信息。在此窗口中重新分析数据时，使用在数据文件中存储的数据处理方法。本节说明如何使用方法文件和报告格式文件。

参考

有关 LCsolution 文件结构的详细信息，请参见 《管理说明书》的“4.1 重要文件的概念”。

5.2.1 导出 / 导入数据分析参数

在配置数据处理条件时，编辑在采集的数据文件中已经记录的方法，并在 [数据分析] 窗口中重新分析。一旦设置了方法，即将数据文件中存储的仪器参数和数据处理方法应用* (导出) 到数据采集所用的方法文件。

* 在应用到现有的方法文件时，将所有导出的内容都导入到该文件中。但是，当应用到新方法文件时，除导出的参数以外，所有其他值都保留为缺省设置。

■ 导出数据分析参数

单击助手栏中的  (应用到方法) 图标。

■ 导入数据分析参数

从 [文件] 菜单选择 [加载方法参数]。




当使用过去创建的方法文件，或者使用 [LC 校准曲线]，重新单独分析其他数据文件时，将数据分析方法（不包括仪器参数）导入到数据文件的方法部分中。

■ 将参数保存到另一方法文件

导出方法时，覆盖用于分析的方法文件中的参数。要将参数保存到其他方法文件，选择 [文件] 菜单中的 [方法文件另存为]。

5.2.2 导入 / 导出报告格式

在导入 / 导出数据文件中存储的报告格式时，单击 [数据分析] 窗口的助手栏中的  (数据报告) 图标，启动 [数据报告]。打开 [数据报告]，加载了数据文件中存储的报告格式中数据。

5

■ 导入报告格式

从 [文件] 菜单选择 [打开报告格式文件]。

■ 导出报告格式

从 [文件] 菜单选择 [另存报告格式文件]。

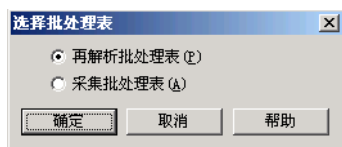


- 在编辑和保存报告格式时，仅更新数据文件的报告格式部分。
- 在保存更新的数据文件时，将其保存为数据文件的报告格式。

5.2.3 导出批处理表

按照下面的步骤，导出在数据文件中存储的批处理表，并执行批处理。

1 从 [数据分析] 窗口的 [工具] 菜单中选择 [另存数据文件中的批处理为]。



出现 [选择批处理表] 屏幕。

2 选择是从最新的再解析批处理中导出批处理表，还是从用于采集此数据文件的批处理表中导出。

出现 [另存批处理文件为] 屏幕。

3 输入批处理文件的名称并单击 [保存]。


5.3 设置积分参数

本节说明以下积分操作。

- 设置积分参数以检测峰
- 设置积分时间程序
- 设置手动积分（处理）

5.3.1 设置积分参数以检测峰

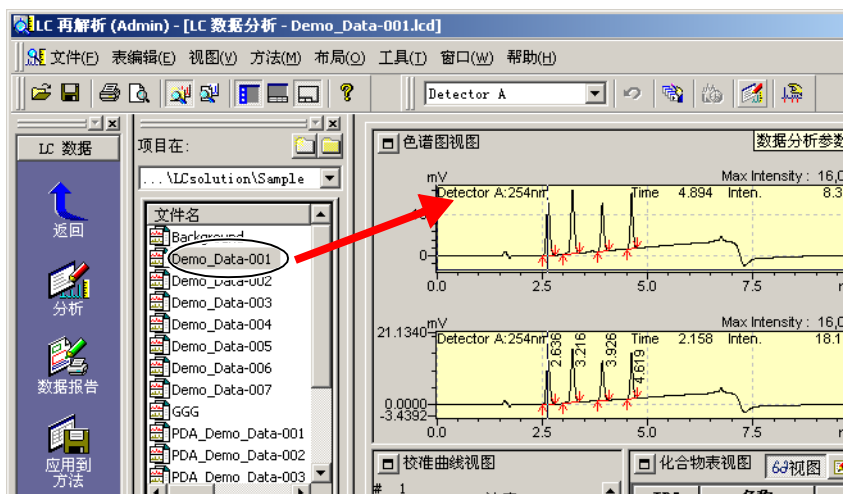
按照以下步骤设置积分参数以检测峰。

1 单击 [再解析] 助手栏中的  (LC 数据分析) 图标。



出现 [LC 数据分析] 窗口。

2 用鼠标将 [数据管理器] 中选定的数据文件拖放到 [色谱图视图]。

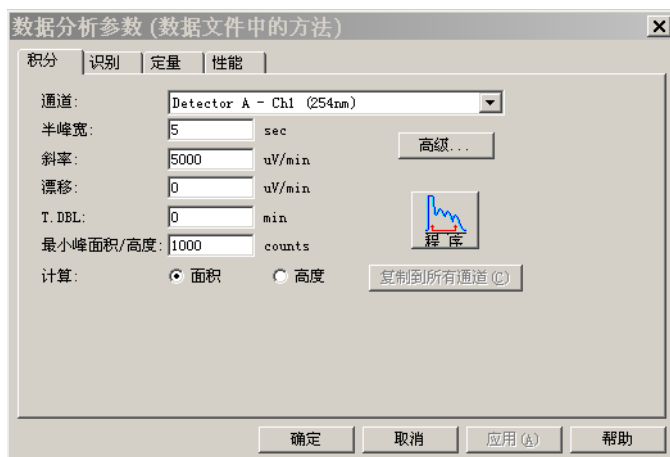


数据文件打开。


3 单击 [LC 数据] 助手栏中的 (分析) 图标。

出现 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 窗口。

4 单击 [积分] 标签并设置每个参数。



注意

要为下一个再解析编辑数据文件的方法中的时间程序，单击  (程序) 按钮。

参考

- 请参见第 68 页的“5.3.2 设置积分时间程序”。
- 有关每个参数的详细信息，请参见在线帮助。

5 单击 [应用] 或 [确定]。

根据指定的参数设置，重新分析在 [数据分析] 窗口中导入的数据。通过在 [色谱图视图] 中显示的峰检测点和基线，检查结果。





通过单击 [确定], 开始再解析并且关闭 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 窗口。

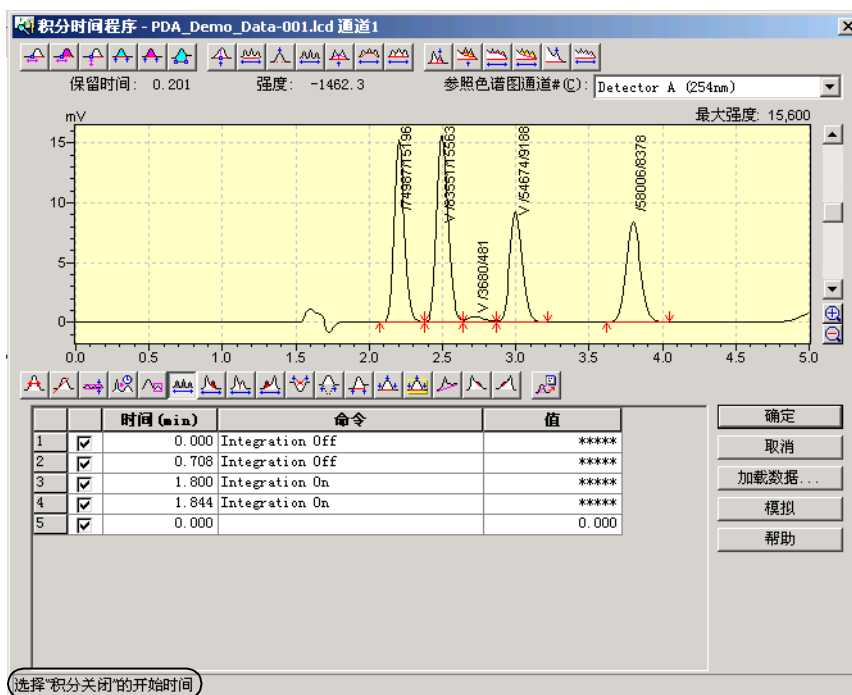
5.3.2 设置积分时间程序

通过设置积分时间程序, 可以改进那些仅使用积分参数无法处理的区域。

本节说明如何检查指定区域的分析结果, 在这些区域中, 通过设置峰的起点和终点未检测到峰。

1 单击 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 屏幕上的  (程序) 按钮。
出现 [积分时间程序] 屏幕。

2 单击  (积分关闭至开启) 按钮。

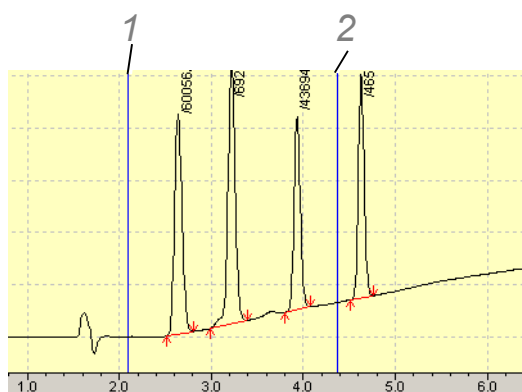


操作指导



将鼠标光标移至按钮上, 或单击按钮时, 在屏幕的左下角显示操作指导。

3 单击以指定区域的起点和终点。



- 1 单击起点。
- 2 单击终点。

出现一个屏幕，请用户确认这些点。

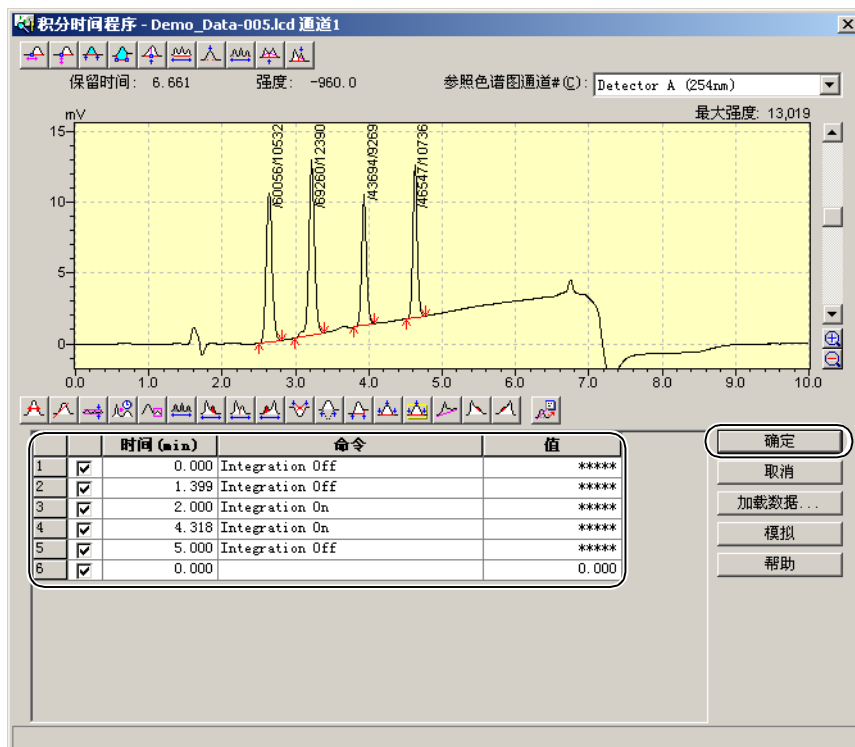
4 检查开始时间和结束时间，并单击 [模拟]。



使用已设置的积分程序执行分析，在色谱图上显示基线和面积值。

5

5 验证分析结果并单击 [确定]。



注意

可以编辑程序表。

5.3.3 设置手动积分（处理）

使用手动积分（处理）功能，移动特定峰的起点和终点，或者去除不需要的峰。

注意

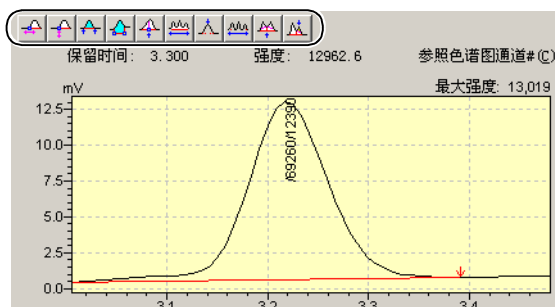
可以在 [数据分析] 窗口、[LC 校准曲线] 窗口或 [定量浏览器] 窗口中执行手动积分。


■ 执行手动积分

1 用鼠标右键单击 [数据分析] 窗口或 [LC 校准曲线] 窗口的 [色谱图视图]，并从显示的菜单中选择 [手动积分栏]。

显示 [手动积分] 栏。

2 根据您要执行的处理类型，在色谱图上单击命令按钮并设置处理命令。



- 某些处理命令需要您指定起点和终点。请按照屏幕左下角显示的操作指导操作。
- 单击  (查看表) 按钮以显示程序表中的设置。可以直接编辑程序表。

	时间 (min)	命令	值
1	<input checked="" type="checkbox"/> 3.700	Move BL	0.000
2	<input checked="" type="checkbox"/> 3.800	Reject Peak	*****
3	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000		0.000

注意

要更改按钮大小，用鼠标右键单击 [手动积分] 栏，从显示的菜单中选择 [大图标] 或 [小图标] (取决于您的偏好)。

在 [数据分析] 窗口中，基于导入的数据执行手动积分。

在 [LC 校准曲线] 窗口中，从校准曲线数据文件树中选择目标数据。手动积分的结果将立刻反映在校准曲线上。

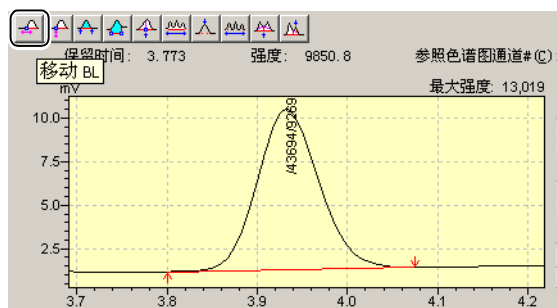
注意

- 在目标数据中保存手动积分的命令，但是不保存在方法文件中 (即使在 [数据分析] 窗口中应用 (导入) 了方法)。
- 即使在 [数据分析] 窗口或 [批处理表] 窗口中使用不同的方法文件执行再解析，也不会覆盖方法文件中的手动积分命令。

■ 设置手动积分

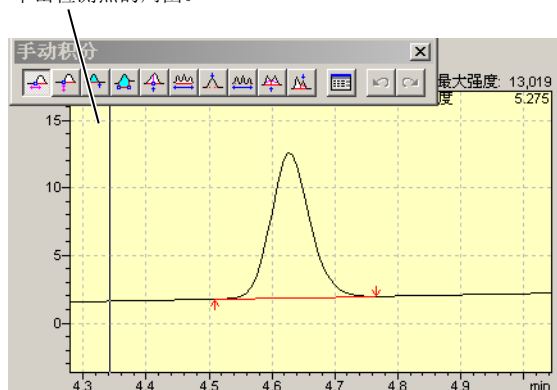
在本节中，使用示例说明手动移动峰检测点的方式。

1 单击 [手动积分] 栏中的 (移动 BL) 按钮。



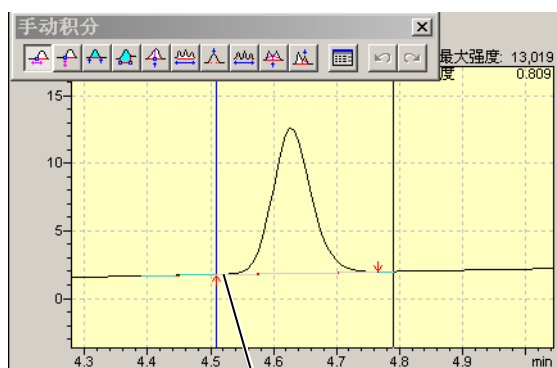
2 单击要移动的检测点的周围。

单击检测点的周围。



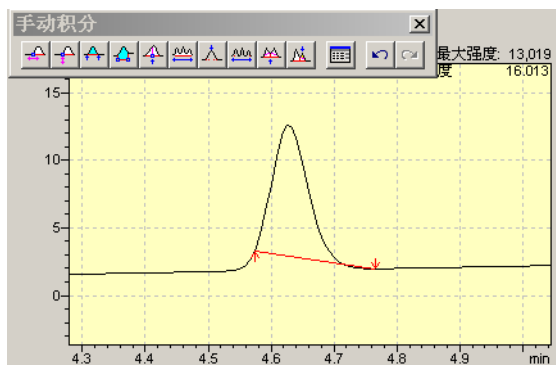
峰基线随着鼠标的移动而移动。

3 检查基线的外观并再次单击目标点。




单击目标点。

峰检测点移动，显示基线。



注意

如果目标点看上去不合适，单击  按钮取消它。

5.4 设置峰识别参数


5

峰识别是一个过程，用于确定检测到的峰属于样品中的哪一化合物，在积分过程中同步执行峰识别。要执行峰识别和定量分析，在化合物表中输入以下信息：组分类型、标准保留时间和浓度级别。在调整这些设置后，分析数据时，将采集的色谱图的峰值与化合物表中的值一一比较。如果峰保留时间在识别允许的范围以内，则将峰识别为目标化合物。

参考

有关定量分析的详细信息，请参见第 77 页的“5.5 设置定量参数”。

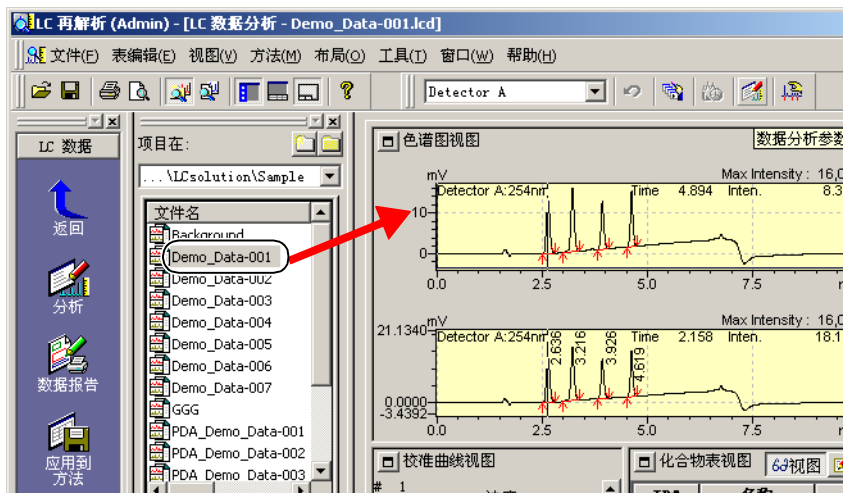
本节说明基于化合物表中的设置识别峰时，通过设置允许时间范围（在此范围中，认为峰保留时间在标准保留时间范围内）、设置识别方法（例如选择绝对保留时间法或相对保留时间法），识别峰的步骤。

1 单击 [再解析] 助手栏中的  (LC 数据分析) 图标。



出现 [LC 数据分析] 窗口。

2 用鼠标将 [数据管理器] 中选定的数据文件拖放到 [色谱图视图]。

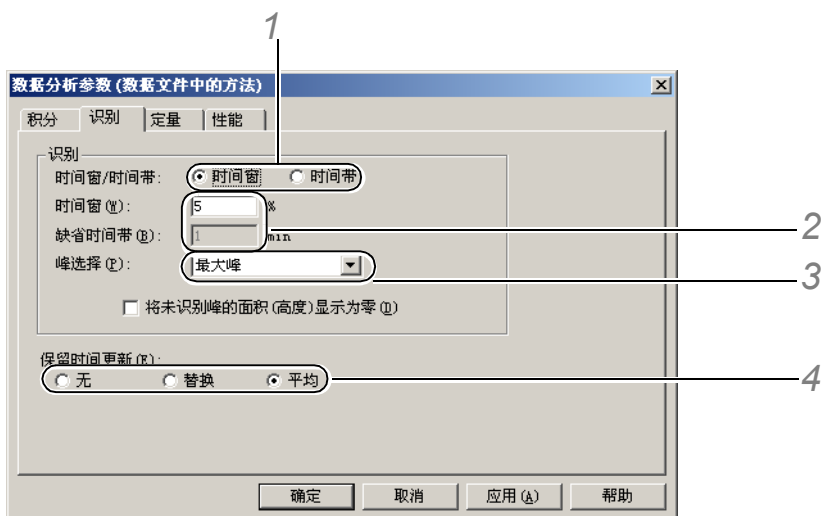


数据文件打开。

3 单击 [LC 数据] 助手栏中的 (分析) 图标。

出现 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 窗口。

4 单击 [识别] 标签并设置每个参数。



- 1 选择 [时间窗] 或 [时间带]。
- 2 如果选择 [时间窗]，则以 % 为单位设置 [时间窗]；如果选择 [时间带]，则以分钟为单位设置 [缺省时间带] 时间。
- 3 当多个峰在允许识别范围以内时，选择如何操作。
- 4 当给定峰的保留时间在数据采集过程中被识别时，选择如何将保留时间反馈回化合物表。

参考

有关每个参数的详细信息，请参见在线帮助。

 注意

在识别内标法的内标物质时，无论 [峰选择] 如何设置，都将面积最大的峰和高度最高的峰自动识别为内标物质。

5 单击 [应用] 或 [确定]。

根据指定的参数设置，重新分析在 [数据分析] 窗口中导入的数据。可以在 [化合物表视图] 的 [结果] 标签中查看分析结果。

 注意

通过单击 [确定]，开始再解析并且关闭 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 窗口。

■ 为每一化合物设置时间窗法或时间带法。

通常，在 [数据分析参数] 屏幕的 [识别] 标签中设置的识别方法适用于所有化合物；此外，也可以为每一化合物单独指定识别方法。

ID#	保留时间	时间窗/时间带	时间带
1	2.197	缺省	缺省
2	2.491	时间带	缺省
3	2.995	缺省	缺省
4	0.001	时间窗	缺省
5	0.001	时间带	缺省

在 [化合物表视图] 中，单击要设置的化合物的 [时间窗/时间带] 字段，并从显示的菜单中选择 [时间窗] 或 [时间带]。如果选择 [时间带]，则在 [时间带] 字段中输入带宽（以分钟为单位）。如果在每个字段中显示 [缺省]，则表明使用 [数据分析参数] 中的设置。

 注意

如果既未显示 [时间窗/时间带] 字段，也未显示 [时间带] 字段，则用鼠标右键在化合物表上单击，并选择 [表样式] 以显示这些字段。

■ 使用相对保留时间识别

在 [化合物表视图] 中，单击化合物（认为该化合物是保留时间的标准）的 [类型] 字段，然后从显示的菜单中选择 [参照]。

ID#	名称	类型	通道	保留时间	时间窗/时	时间
1	Methylparaben	参照	Detector A -	2.197	缺省	
2	Ethylparaben	目标	Detector A -	2.491	缺省	
3	Propylparaben	参照	Detector A -	2.995	缺省	
4		参照	Detector A -	0.001	缺省	

首先，运行参照化合物的识别处理，并基于该结果，校正每一目标的保留时间。然后执行每一化合物的识别处理。

如果使用内标法，则将内标物质指定为参照，以增强效果。单击内标物质的 [类型] 字段，并选择 [内标和参照]。

 注意

- 在 [编辑] 模式中编辑参数时，如果要在 [化合物表视图] 中切换为 [视图] 模式，则自动重新分析在 [数据分析] 窗口中导入的数据。
- 在调整那些将导致校准曲线变化的设置（例如化合物表中的 [类型]）时，需要特别小心，这将自动删除保存在数据文件中的校准曲线信息。

- 必须在 [LC 校准曲线] 中完成包括重新生成校准曲线在内的方法变更，将其另存为方法文件之后，通过从 [数据分析] 窗口的 [文件] 菜单中选择 [加载方法参数] 导入并使用这些数据。


5.5 设置定量参数

本节说明在 [LC 数据分析] 窗口中执行定量分析的方式。

- 设置定量参数
- 设置化合物表
- 保存（导出）到方法文件

5.5.1 设置定量参数

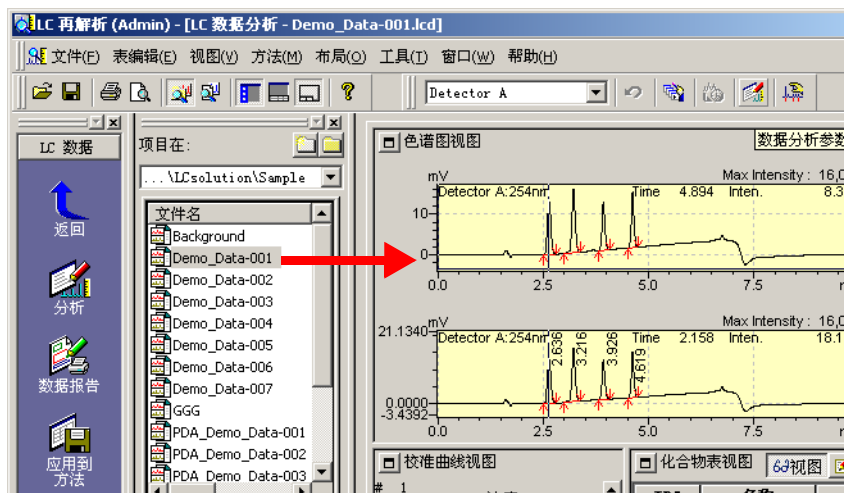
按照以下步骤设置定量参数。

- 1 单击 [再解析] 助手栏中的 （LC 数据分析）图标。




出现 [LC 数据分析] 窗口。

- 2 用鼠标将 [数据管理器] 中选定的数据文件拖放到 [色谱图视图]。

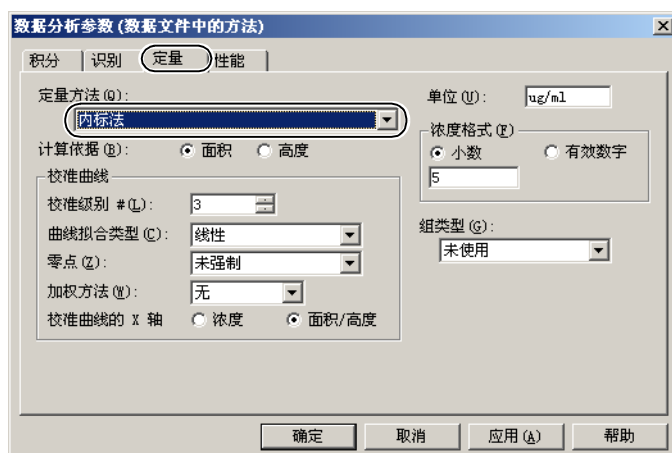


数据文件打开。

- 3 单击 [LC 数据] 助手栏中的 （分析）图标。
出现 [数据分析参数（数据文件中的方法）] 窗口。

4 单击 [定量] 标签并设置每个参数。

在 [定量方法] 中选择定量计算方法并设置所有必需的项目。



参考

有关每种定量方法的参数设置的详细信息，请参见在线帮助。

5 单击 [应用] 或 [确定]。

根据指定的参数设置，重新分析在 [数据分析] 窗口中导入的数据。可以在 [化合物表视图] 的 [结果] 标签中查看分析结果。

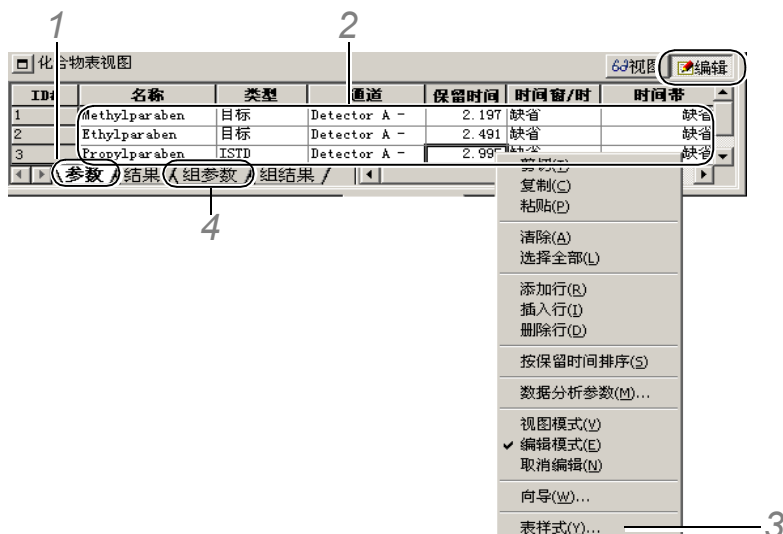
注意

通过单击 [确定]，开始再解析并且关闭 [数据分析参数 (数据文件中的方法)] 窗口。

5.5.2 设置化合物表

在 [化合物表视图] 中，为每一化合物设置用于生成校准曲线的标准值，包括化合物名称、类型和保留时间。

1 单击 [编辑] 并设置定量计算方法所对应的每个字段。



- 1 单击 [参数] 标签。
- 2 设置对应于定量方法的所需字段。始终为所有定量方法设置 [名称]、[类型] 和 [保留时间]。在生成校准曲线时，还要设置 [浓度]。
- 3 在编辑表时，用鼠标右键单击化合物表并使用显示的菜单。也可以使用购买的电子表格软件。
 - 要取消编辑，选择 [取消编辑]。如果在执行再解析之前取消，则可以恢复编辑之前的表的内容。
 - 要查看 / 隐藏表中的列，选择 [表样式]。

参考

有关表的基本操作的信息，请参见第 159 页第 11 章的“表的一般操作”。

- 4 在分组时，还要设置 [组参数] 标签。

2 单击 [视图] 切换为 [视图] 模式。

自动重新分析导入到 [数据分析] 窗口中的数据。


注意

- 创建新的化合物表时，首先在 [数据分析参数] 屏幕的 [识别] 标签和 [定量] 标签中设置参数。
- 如果在 [定量] 标签中或在化合物中，更改与生成校准曲线直接相关的参数，例如 [定量方法] 或 [类型]，将自动删除校准曲线。在这种情况下，使用新的参数重新生成校准曲线。
- 在 [LC 校准曲线] 窗口中生成校准曲线，并将在方法文件中生成的曲线导入 [数据分析] 窗口，并在该窗口中使用。要导入方法文件，从 [文件] 菜单选择 [加载方法参数]。

5

5.5.3 保存（导出）到方法文件

在设置定量参数和化合物表以后，将新设置保存（导出）到方法文件。

- 1 单击 [LC 数据分析] 窗口的助手栏中的 （应用到方法）图标。

- 2 覆盖方法文件，或创建（导出）编辑的方法作为新文件。

注意

可以使用此方法文件采集新数据，并对标准样品执行单次 / 批处理分析；或者，可以使用现有的标准样品数据在方法文件中创建校准曲线信息（在 [LC 再解析] - [LC 校准曲线] 或批处理再解析中使用该方法文件）。使用此校准曲线，采集或重新分析目标样品，获取定量计算结果。

5.6 在 [LC 校准曲线] 窗口中的操作

本节说明在“LC 再解析”的 [LC 校准曲线] 窗口中的操作，以及如何生成校准曲线。

参考

有关通过批处理生成校准曲线的步骤，请参见第 32 页的“3.5.3 执行批处理”。

5.6.1 显示 [LC 校准曲线] 窗口

单击 [LC 再解析] 窗口左侧助手栏中的 （校准）图标，显示 [LC 校准曲线] 窗口。



[LC 校准曲线] 窗口由 [校准曲线视图]、[化合物表视图] 和 [色谱图视图] 组成。（由分隔框分隔的区域称为“视图”。可以通过拖动分隔框定制布局和调整显示区域。）在每个视图中，有以下功能和显示：

The screenshot shows the 'LC 校准曲线 - Demo_Method.lcm' window. It is divided into several panes:

- [校准曲线视图] (Calibration Curve View):** Contains a graph of Concentration vs. Area with three data points and a linear fit line. A table below shows the calibration data:

级别	浓度	面积1
1	1.000000	74603
2	2.000000	148440
3	4.000000	296750
- [化合物表视图] (Compound Table View):** A table listing compounds:

ID#	名称	类型	通道	保留时
1	Methyl_paraben	目标	Detector A -	
2	Ethyl_paraben	目标	Detector A -	
3	Propyl_paraben	目标	Detector A -	
4	Butyl_paraben	目标	Detector A -	
- 数据树视图 (Data Tree View):** Shows a hierarchical tree of data files under 'Demo_Data-001', '002', and '003'.
- [色谱图视图] (Chromatogram View):** Shows a chromatogram with a peak at 2.75 minutes. A context menu is open over the peak with options: '添加(A)...' and '删除(D)'. The peak is labeled '大强度: 16,067'.

Numbered callouts in the image:

- 1: Button to toggle between full screen and standard display mode.
- 2: Button to toggle between [视图] and [编辑] modes.
- 3: Link in the compound table to the calibration curve view.
- 4: Labels for selecting calibration curves and display modes (by compound or by group).
- 5: Context menu for viewing chromatograms of selected files in the data tree.

5

编号	描述
①	单击此按钮（更改大小按钮）在全屏幕和标准显示模式之间切换。
②	在 [视图] / [编辑] 模式之间切换。当从 [编辑] 模式切换到 [视图] 模式时自动重新分析数据。
③	在化合物表中选定的数据行中，显示至 [校准曲线视图] 的链接。
④	在这些标签中，可以选择校准曲线，并选择是按化合物显示，还是按组显示。
⑤	允许您查看在数据树视图中选定的文件的色谱图。

注意

数据树视图显示了每个级别上，用于生成校准曲线的数据。在化合物表中列出了对应于浓度 (1-64) 的曲线级别编号，用化合物表设置标准样品的浓度。

■ 单击鼠标右键显示的菜单

每个视图都有各自的鼠标右键菜单，与其功能相对应。例如，数据树视图具有以下菜单：



- **[删除]**
可以从校准级别上删除文件。

注意

对于图表区域、信息区域和表区域，[校准曲线视图] 的鼠标右键单击菜单各不相同。

5.6.2 生成校准曲线

使用以下方式在 [校准曲线] 窗口中生成校准曲线。

- 用鼠标将  (方法文件) 拖放到 [校准曲线视图] 中并编辑文件。
- 用鼠标将  (数据文件) 拖放到数据树视图上, 并作为一个校准级别添加它。

注意

还可以使用批处理再解析, 使用“LC 再解析”生成校准曲线。

- 要重新生成校准曲线, 选择第一行上的 [标准] - [初始化校准曲线], 并清除校准曲线。
- 作为一组指定校准级别和数据文件。

再解析	样品名	样品 ID	样品类型	级别#	数据文件	方法文件
1	STD	1	1:标准:(1)	1	Demo_Data-001.lcd	Demo_Method.lcm
2	STD	2	1:标准	2	Demo_Data-002.lcd	Demo_Method.lcm
3	STD	3	1:标准	3	Demo_Data-003.lcd	Demo_Method.lcm

5.7 [LC 数据比较] 窗口中的操作

在 [LC 数据比较] 窗口中, 最多可以显示 16 个数据文件和色谱图进行比较。本节说明在“LC 再解析”的 [LC 数据比较] 窗口中的操作。

注意

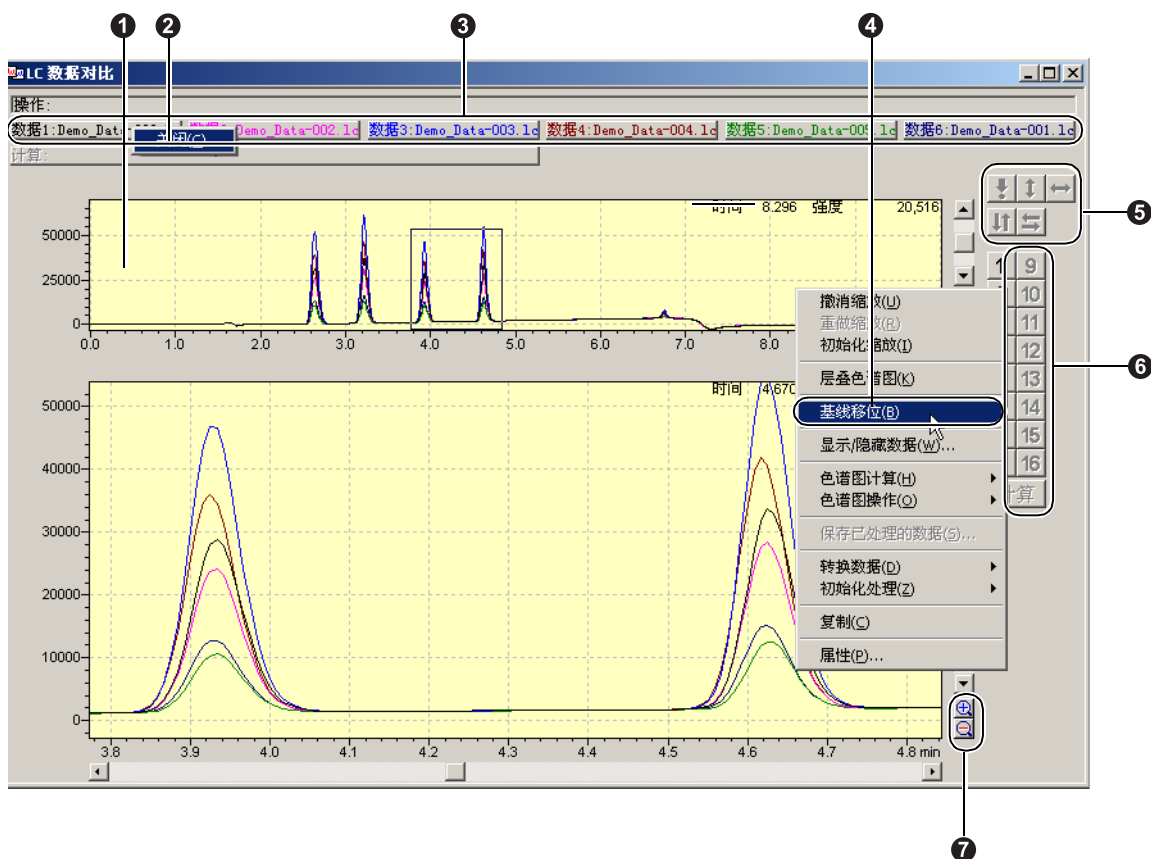
对于 PDA 数据, 通过选择 [PDA 数据分析] 的 [文件] 菜单中的 [导出数据] - [输出色谱图], 提取多色谱图并比较数据。


5.7.1 显示 [LC 数据比较] 窗口

单击 [LC 再解析] 窗口左侧助手栏中的  (数据比较) 图标, 显示 [LC 数据比较] 窗口。



在 [LC 数据比较] 窗口中，最多可以显示 16 个数据文件及其色谱图。[LC 数据比较] 窗口中有以下功能和显示。



编号	描述
①	用鼠标拖放  (数据文件) 图标，以打开数据文件并显示其相应的色谱图。最多可以打开 16 个数据文件。
②	要关闭数据文件，用鼠标右键单击数据文件名并从显示的菜单中选择 [关闭]。
③	在此处显示打开的数据文件的名称。单击数据文件名以在其色谱图上移动焦点。
④	用鼠标右键单击色谱图并从菜单中选择 [基线移位]，以相等的间距显示各个色谱图。
⑤	在四个方向上移动色谱图。有关详细信息，请参见第 84 页的“5.7.3 移动色谱图”。
⑥	单击要将焦点移至其上的色谱图的编号。
⑦	使用这些按钮在强度方向上增加或降低衰减。

■ 单击鼠标右键显示的菜单

每个区域都有其各自的鼠标右键菜单，与其功能相对应。例如，色谱图的菜单有：

- **【缩放】、【移动 / 展开和收缩】**
可以缩放、移动、展开 / 收缩或恢复显示。
- **【复制】**
将色谱图复制到剪贴板上，以便能够将其作为图像文件，复制到另一应用程序中。

■ 同时关闭所有数据

从 [文件] 菜单的 [关闭] 选择 [所有数据]。

5.7.2 在色谱图之间计算

从 [文件] 菜单选择 [显示/隐藏数据文件]，或者用鼠标右键在色谱图上单击并从菜单中选择 [显示/隐藏数据文件]，显示 [显示/隐藏数据文件] 屏幕。通过选中 [显示] 和 [操作] 字段指定目标数据。（最多可以为每个操作指定 2 个数据文件。）




5.7.3 移动色谱图

可以垂直或水平地移动、展开或收缩色谱图。

■ 垂直（水平）移动

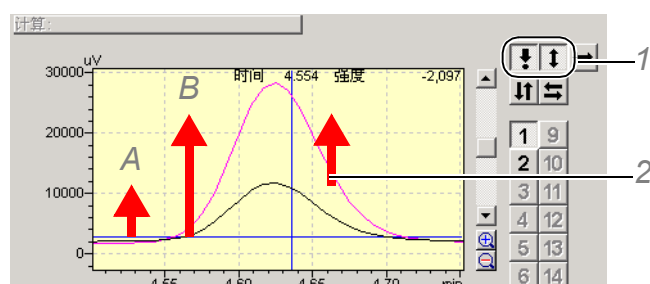
本节使用示例说明垂直移动色谱图的方式。（请使用相同的步骤水平移动色谱图。）





- 1 单击 （垂直移动）按钮。
- 2 将色谱图拖至您选择的位置。
色谱图移至该位置。

■ 垂直（水平）展开和收缩

本节使用示例说明垂直展开和收缩色谱图的方式。（请使用相同的步骤水平展开和收缩。）



- 1 单击 （基点）按钮确定基点，并单击 （垂直展开和收缩）按钮。
- 2 将色谱图拖至您选择的点。
拖动色谱图时（B/A 次），色谱图展开。

本页空白。

6

PDA 数据分析

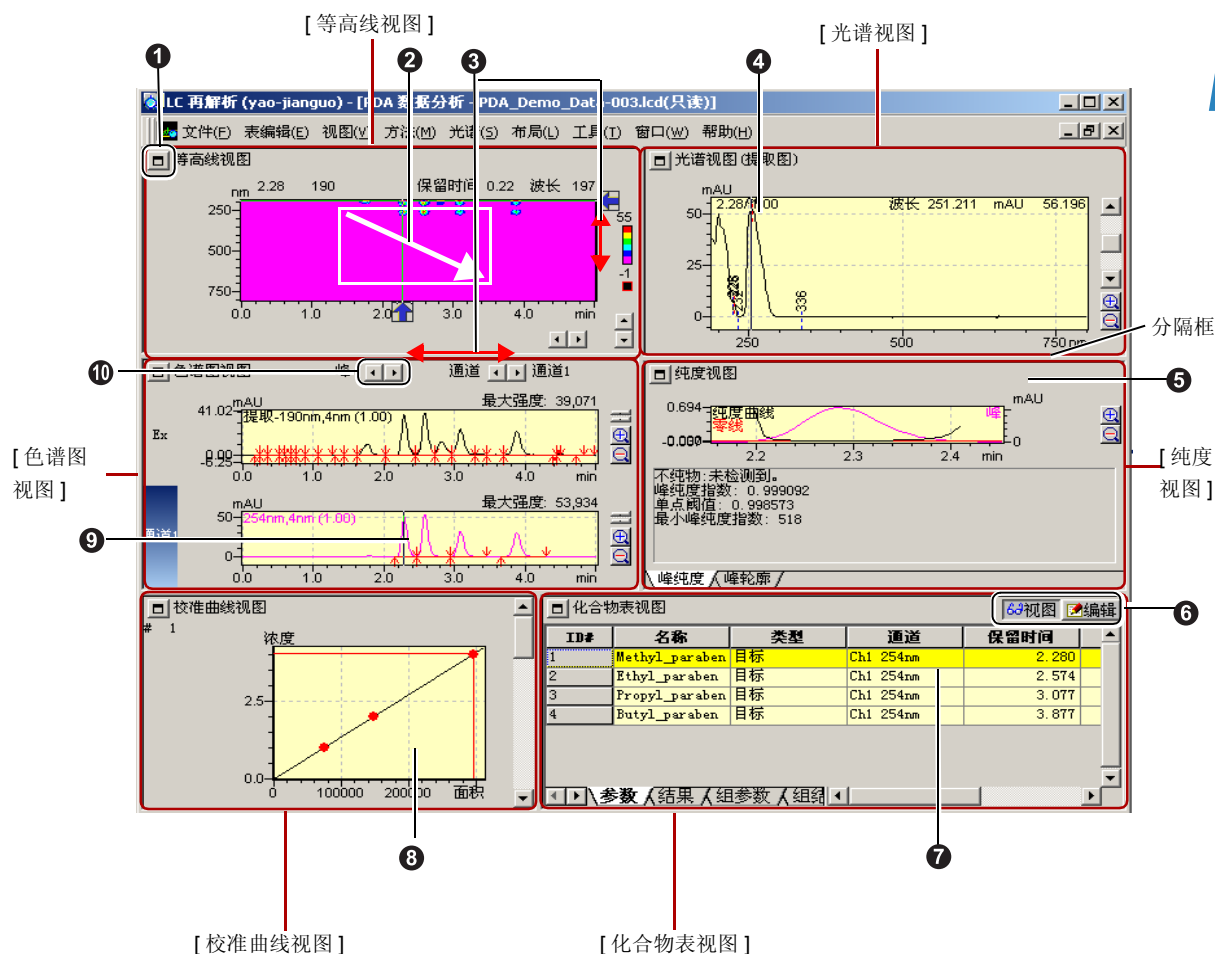
使用以下窗口分析通过 PDA 检测器采集的数据文件。

- **[PDA 数据分析]**
在此窗口中显示和分析数据。
- **[UV 库编辑器]**
在此窗口中，创建和维护用于库搜索的光谱库。

6.1 使用和查看 [PDA 数据分析] 窗口

[PDA 数据分析] 窗口由以下视图组成：[等高线图]、[色谱图视图]、[光谱视图]、[纯度视图]、[校准曲线视图]和[化合物表视图]。

(由分隔框分隔的区域称为“视图”。可以通过拖动分隔框定制布局和调整显示区域。) 在每个视图中，有以下功能和显示：



编号	描述
1	单击此按钮（更改大小按钮）在全屏幕和标准显示模式之间切换。

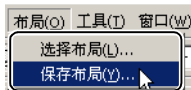
编号	描述
②	要放大一个区域以便更好地查看它，沿着它的轮廓拖动光标。在 [色谱图视图] 和 [光谱视图] 中，显示在 [等高线视图] 中由缩放功能定义的区域。
③	可以同时时间和波长两个方向上提取 [等高线视图] 的区域，并在 [色谱图视图] 和 [光谱视图] 中查看该区域的详细信息。
④	双击一点以将提取光标移至该位置。
⑤	显示光标所在位置的峰的纯度信息。
⑥	在 [视图] / [编辑] 模式之间切换。当从 [编辑] 模式切换到 [视图] 模式时自动重新分析数据。
⑦	在化合物表中选择一行，以激活该行的通道的色谱图，并将光标移至峰顶。这也与 [校准曲线视图] 显示协同操作。
⑧	与 [化合物表视图] 协同显示数据。
⑨	双击一点以将提取光标移至该位置。
⑩	将光标移至最近的峰顶。

注意

- 在一个 [LC 再解析] - [PDA 数据分析] 窗口中，仅能打开一个数据文件。如果一次要处理多个数据文件的内容，必须分别启动多个 [LC 再解析] - [PDA 数据分析] 窗口，以打开每个不同的文件。
- 如果一个数据文件中同时存在常规检测器和 PDA 检测器的信息，则还向 [LC 数据分析] 窗口中导入相同的数据。
- 在 [LC 再解析] - [LC 校准曲线] 或 [LC 实时分析] - [数据采集] 的 [数据分析参数] 屏幕中，可以直接编辑方法文件的内容。

■ 保存定制的布局

要保存当前显示的布局，从 [布局] 菜单选择 [保存布局]。要使用已经保存的布局，选择 [选择布局]。



■ 单击鼠标右键显示的菜单

每个视图都有各自的鼠标右键菜单，与其功能相对应。这些鼠标右键单击菜单包括：

- [显示设置]
可以设置每个视图的显示状态。
- [属性]
可以修改包括图表颜色在内的设置。

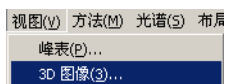
注意

用鼠标右键在图表上单击时，显示的菜单中的某些选项（例如复制到剪贴板、撤消缩放等）变为可用。

■ 完整地查看数据（3D 图像）

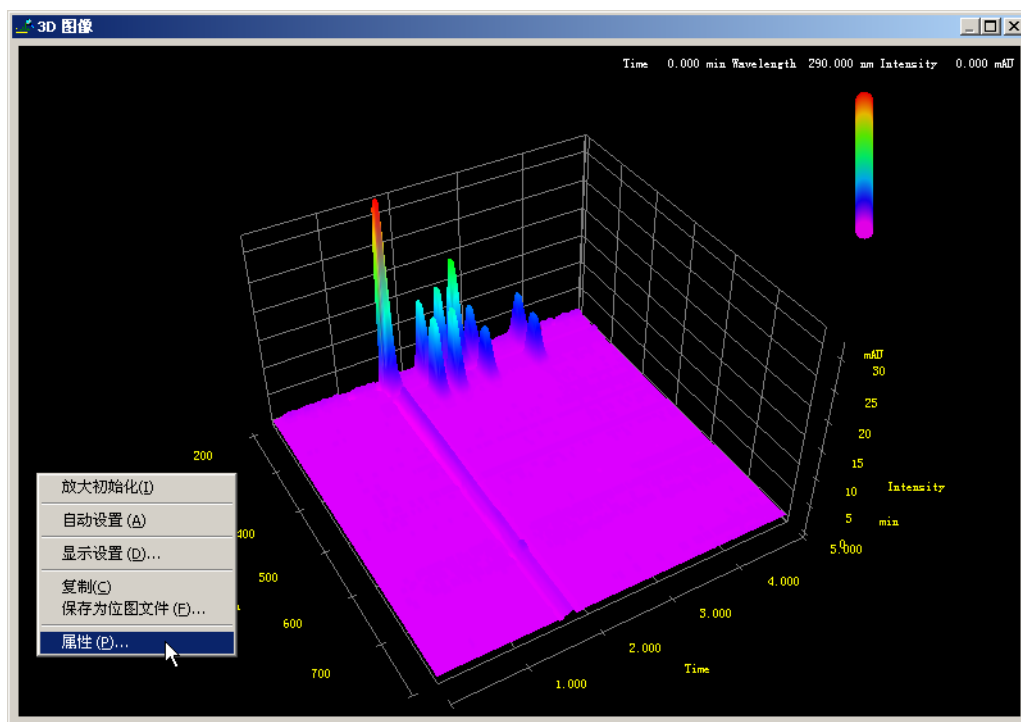
可以在 [等高线视图] 中查看整个 PDA 数据，但如果希望查看同一数据的详细信息，请使用 3D 图像功能。

1 从 [视图] 菜单选择 [3D 图像]。



出现 [3D 图像] 屏幕。

在 [3D 图像] 屏幕中，可以查看使用 PDA 检测器采集的完整数据。



注意


- 在 3D 图像上拖动光标，以更改放大百分比和显示角度。
- 用鼠标右键在 3D 图像上单击，显示更多的菜单项以进行高级设置。

2 要关闭，单击 [3D 图像] 屏幕右上角的 (关闭) 按钮。

注意

[3D 图像] 窗口不支持 Windows [256 色] 模式。请确保在 [高彩] 设置或更高设置的环境中使用它。在显示 [3D 图像] 屏幕时，请不要更改 Windows 显示属性的 [颜色] 设置。

注意

- 单击助手栏中的  (光谱索引) 图标生成色谱图，及其与每个识别的峰的保留时间的色谱相关联的报告图像。
- 如果使用单色打印机打印 3D 图像，将无法保证其清晰度；但是如果使用光谱索引，将会使图像更清晰。
- 在 [视图] 菜单中，除 [3D 图像] 功能外，还有其他菜单项。
 - [峰表]
 - 显示峰表，该表显示了为多色谱图中记录的每个通道检测的峰。
 - [数据采集日志]
 - 显示数据采集日志。
- [方法] 菜单中的功能用于显示关于校准曲线和分析所用的仪器参数的详细信息。

6.2 从不同的视图中提取

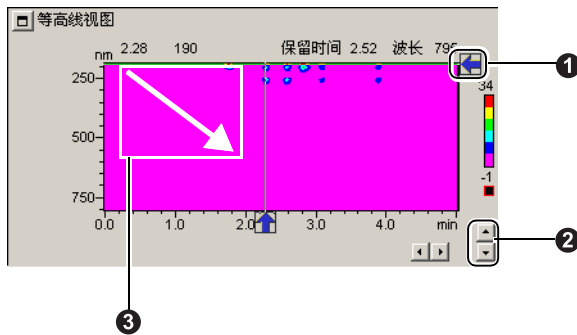
本节介绍 [等高线图]、[色谱图视图] 和 [光谱视图] 中的提取操作。

6.2.1 在 [等高线图] 中提取

在 [等高线图] 中，可以显示任意选择的时间和波长的吸光度的俯视图。这使查找样品的波长（使样品易于检测）变得容易。指定波长以获得提取的色谱图，并指定提取光谱的时间。

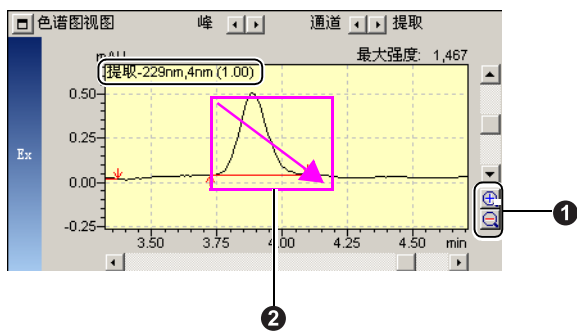
■ 从等高线显示色谱图

1 用鼠标拖动 [等高线图] 上的 ，将提取光标移至要提取的波长处。



编号	描述
①	拖动它以移动提取光标。
②	单击这些按钮以调整提取位置。
③	当拖动并放大 [等高线图] 时，同时放大 [色谱图视图]。

提取了提取光标波长处的色谱图。

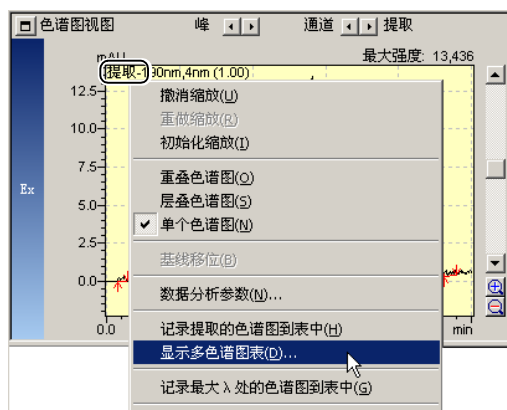


编号	描述
①	可以在强度方向上调整色谱图坐标。
②	可以在 [色谱图视图] 中放大色谱图的一个区域。

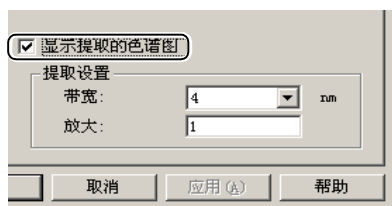
■ 如果未能显示提取的色谱图

执行以下操作显示提取的色谱图。

- 1 用鼠标右键单击色谱图，并从显示的菜单中选择 [显示多色谱图表]。

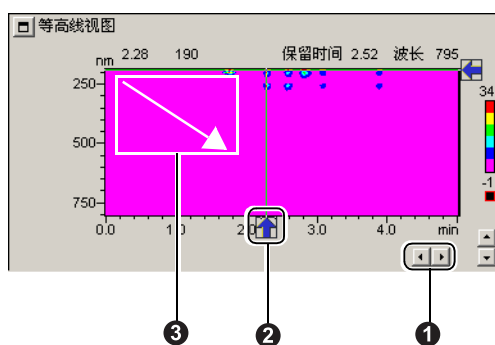


- 2 选中 [显示提取的色谱图] 并单击 [确定]。



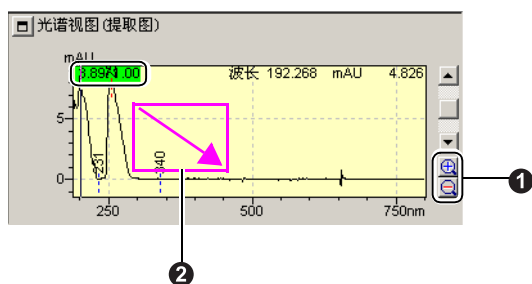
■ 从等高线显示光谱

- 1 用鼠标拖动 [等高线视图] 上的 ，将提取光标移至要提取的时间处。



编号	描述
①	单击这些按钮以微调提取位置。
②	拖动它以移动提取光标。
③	当拖动并放大 [等高线视图] 时，同时放大 [光谱视图]。

提取了提取光标位置处时间的光谱。

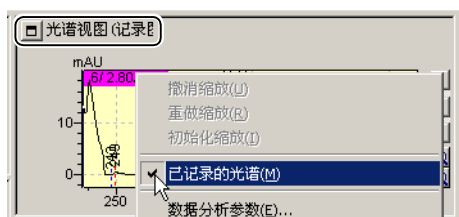


编号	描述
①	可以在强度方向上调整光谱坐标。
②	可以在 [光谱视图] 中放大光谱的一个区域。

■ 如果未能显示提取的光谱

执行以下操作显示提取的光谱。

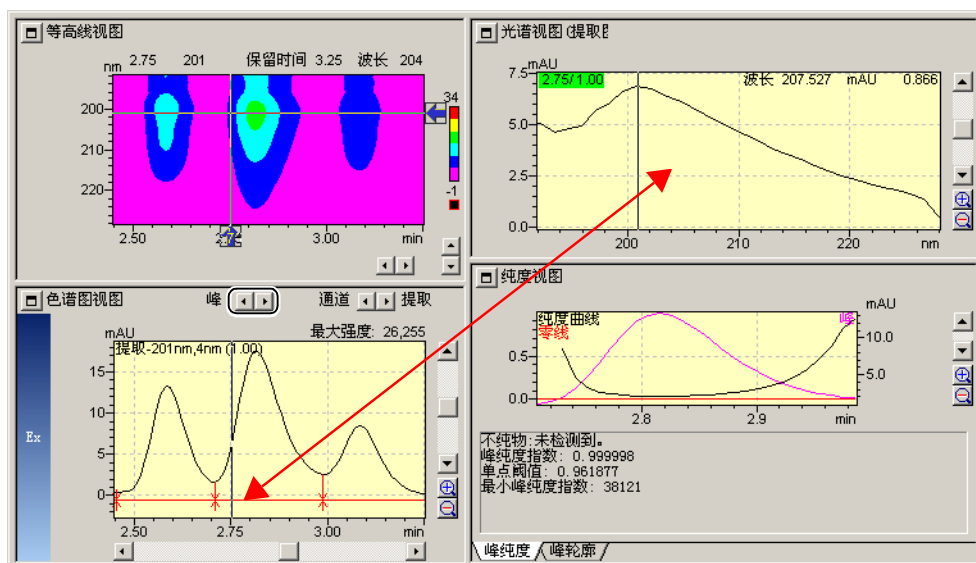
1 用鼠标右键单击光谱，并从显示的菜单中单击 [已记录的光谱] 以取消其选中标记。




6.2.2 在 [色谱图视图] / [光谱视图] 中提取

在双击 [色谱图视图] 中时间轴上的点时，[等高线视图] 中的时间轴提取光标相应地变化，并更新提取的光谱。

同样，双击 [光谱视图] 中波长轴上的点时，[等高线视图] 中的波长轴提取光标相应地变化，并更新提取的色谱图。



注意

- 单击 [色谱图视图] 上的 ，将光标移至选定的色谱图中每个峰的峰顶。
- 在多色谱图表中记录色谱图并使用化合物表设置进行识别时，其提取光标移至分析通道的峰处，与化合物表中选定的行相对应。

6.3 记录色谱图

使用 PDA 检测器采集的数据与使用紫外可见光检测器采集的色谱图类似。但是，PDA 检测器同时收集所有波长处的数据（多色谱图）；而使用紫外可见光检测器采集的色谱图是单个波长处的吸光度数据。本节说明如何在多色谱图表中记录提取的色谱图，以及如何在 [光谱表] 中记录提取的光谱。

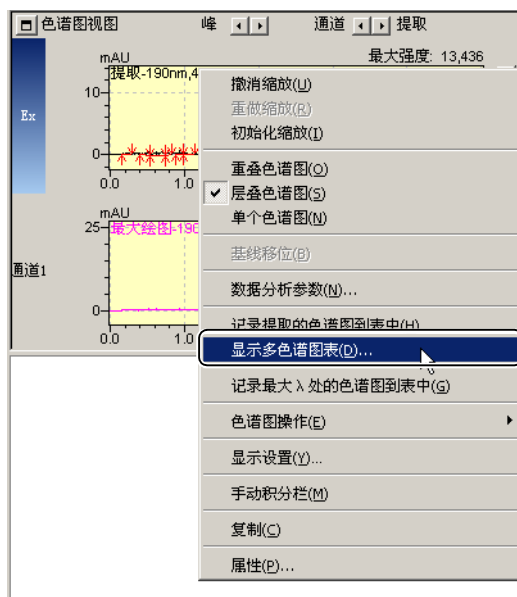
6.3.1 在多色谱图表中记录色谱图

在屏幕上检查提取的色谱图的形状后，使用以下任意一种方法在多色谱图表中记录它。

- 在数据分析参数的多色谱图表中直接记录
- 在多色谱图表中记录提取的色谱图
- 使用自动检测最大波长功能，在多色谱图表中直接记录

■ 在多色谱图中记录波长

1 用鼠标右键单击色谱图，并从显示的菜单中选择 [显示多色谱图表]。



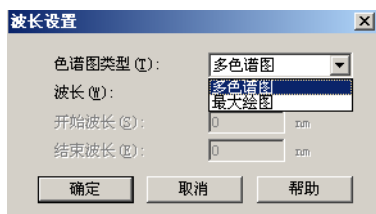
出现 [数据分析参数] 屏幕的 [多色谱图] 标签。

2 选中 [显示] 列并单击 [波长] 列。



出现 [波长设置] 屏幕。

3 选择波长并单击 [确定]。 选择 [最大绘图] 时指定波长范围。



注意

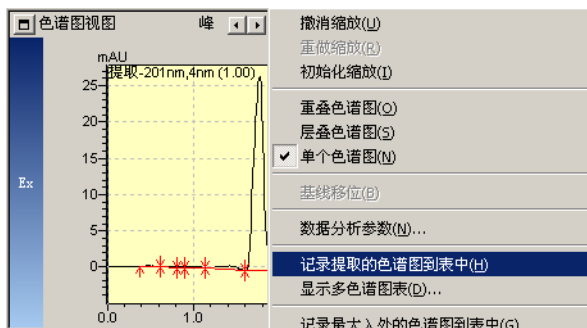
[最大绘图] 生成最大吸光度的波长位置处的色谱图。

返回 [多色谱图] 标签。

4 单击 [确定]。

在多色谱图表中记录提取的色谱图

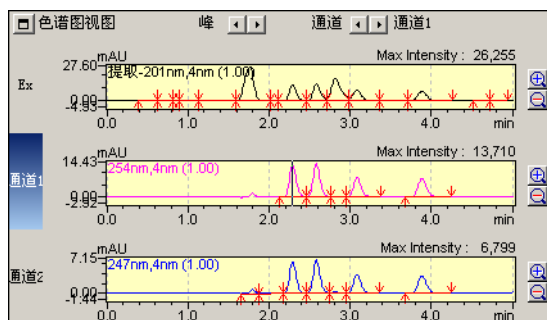
1 用鼠标右键在 [色谱图视图] 上单击，并从显示的菜单中选择 [记录提取的色谱图到表中]。



注意

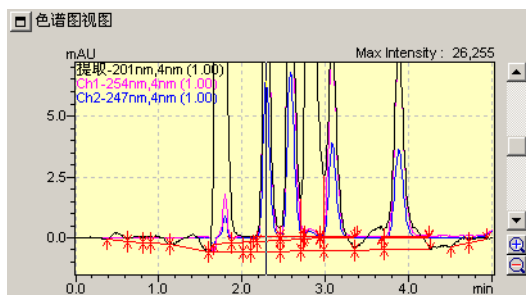
- 要取消色谱图记录，单击 [显示多色谱图表] 并清除选中标记。
- 如果在多色谱图中记录许多色谱图，则每个色谱图的显示高度会变得很小，这使确认色谱图变得很困难。这时，可以单击并选中上面菜单中的 [重叠色谱图]。

(示例) 常规视图 (层叠色谱图)



(示例) 重叠色谱图

色谱图被放大，可以很容易地查看峰的形状。



注意

在 [重叠色谱图] 模式中，由于很难确定当前选定的色谱图，所以无法使用某些功能，例如色谱图和纯度计算。

■ 使用自动检测最大波长功能，在多色谱图表中直接记录

1 用鼠标右键在 [色谱图视图] 上单击，并从显示的菜单中单击选中 [记录最大波长色谱图到表]。

2 双击色谱峰。
自动检测并记录该峰的最大波长。

注意

双击 [光谱视图] 可以更新提取的色谱图；但在按住 **Shift** 键的同时双击视图，则可以直接在多色谱图表中记录波长轴上单击点的色谱图。

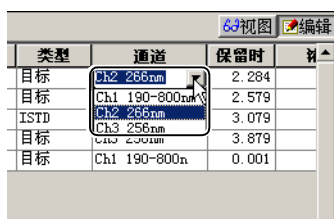
6.4 为数据分析调整多色谱图

本节说明如何为数据分析调整多色谱图。

6.4.1 从识别和定量处理中调整


通过记录波长通道（最适合于 [数据分析参数] 屏幕的 [多色谱图] 标签中的数据处理）中的色谱图，并通过为化合物表中的定量指定通道，可以在最佳灵敏度 / 分离度条件下，执行识别和定量处理。

1 在 [化合物表视图] 的 [参数] 标签中，从多色谱图表中记录的分析通道中，选择识别和定量要用的分析通道。



类型	通道	保留时	视
目标	Ch2 266nm	2.284	
目标	Ch1 190-800nm	2.579	
ISTD	Ch2 266nm	3.079	
目标	Ch2 266nm	3.879	
目标	Ch1 190-800n	0.001	

■ 设置每个分析通道的检测条件

单击工具栏中的 （数据分析参数）按钮。在 [数据分析参数] 屏幕的 [积分] 标签中，在 [通道] 字段中选择在多色谱图表中记录的分析通道，并设置每项。



编号	描述
①	在 [积分] 标签中设置检测条件。
②	选择波长通道以应用积分条件。
③	对于 PDA 检测器，增加了这些标签。
④	单击此按钮以对所有通道应用相同的分析条件。
⑤	如果选中，则自动在 [光谱表] 中记录检测的峰的光谱。

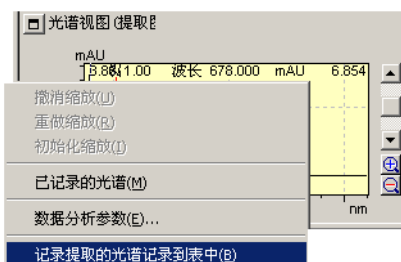
6

6.5 记录光谱


通过在 [光谱表] 中记录，可以在数据文件中保存提取的光谱。

6.5.1 在 [光谱表] 中记录光谱

- 用鼠标右键在 [光谱视图] 上单击，并从显示的菜单中选择 [记录提取的光谱记录到表中]。

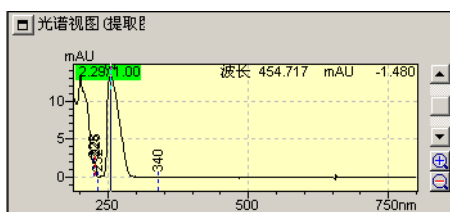


注意

- 要显示 [光谱表]，选择 [显示光谱表] 或者单击工具栏中的  (光谱表) 按钮。

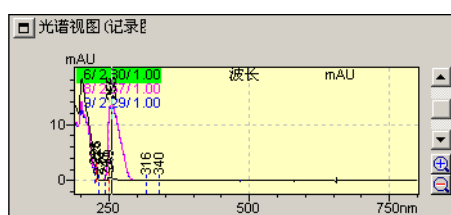
- 要查看记录的光谱的形状，选中 [光谱表] 的 [显示] 框，用鼠标右键单击 [光谱视图]，并从显示的菜单中选择 [记录的光谱] 以切换视图模式。
- 常规视图显示提取的光谱，记录的光谱视图显示由选择符选择的光谱。

(示例) 常规视图 (提取的光谱视图)



(示例) 记录的光谱视图

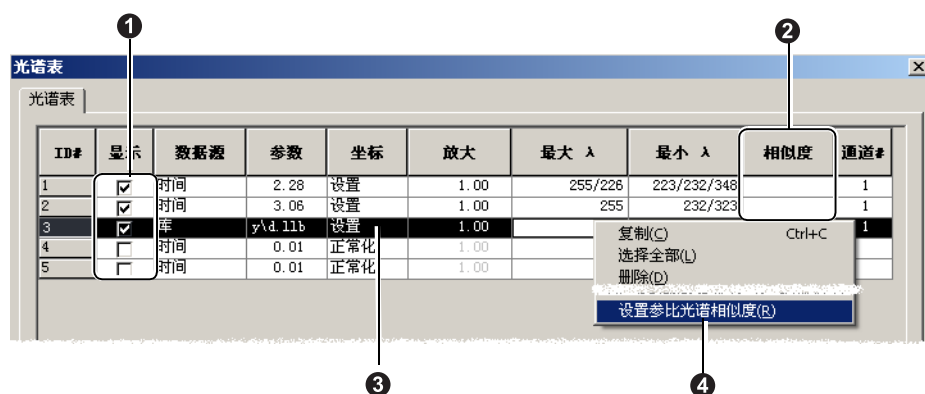
单击选择符以选择光谱。



- 在 [记录的光谱] 模式中，不显示提取的光谱。
- 在两种视图模式中，都可以进行库搜索、光谱导出、在库中记录数据等操作，以及包括推导计算在内的单个光谱操作。

■ 在 [光谱表] 中的操作

在 [光谱表] 中可以进行以下操作。



编号	描述
①	取消选中 [显示] 列，以临时隐藏光谱。
②	允许您使用相似度指数等搜索特定模式的光谱。
③	选择 [设置参照光谱相似度] (从用鼠标右键在选定的行上单击显示的菜单中)，计算此光谱与其他行的相似度指数，并使用结果进行比较。
④	可以记录同一数据文件中，特定时间区间范围内的光谱，也可以记录外部光谱 (UV 光谱 / UV 库文件)。对于外部光谱，指定文件的完整路径作为目标参数。

注意

- [光谱表] 是数据文件中的一节，用于记录光谱到库，或者将光谱记录为化合物表中的标准光谱。与多色谱图表不同，不在方法文件中记录 [光谱表]。

- 要删除记录的光谱，用鼠标右键单击 [光谱表] 并从显示的菜单中选择 [删除]。

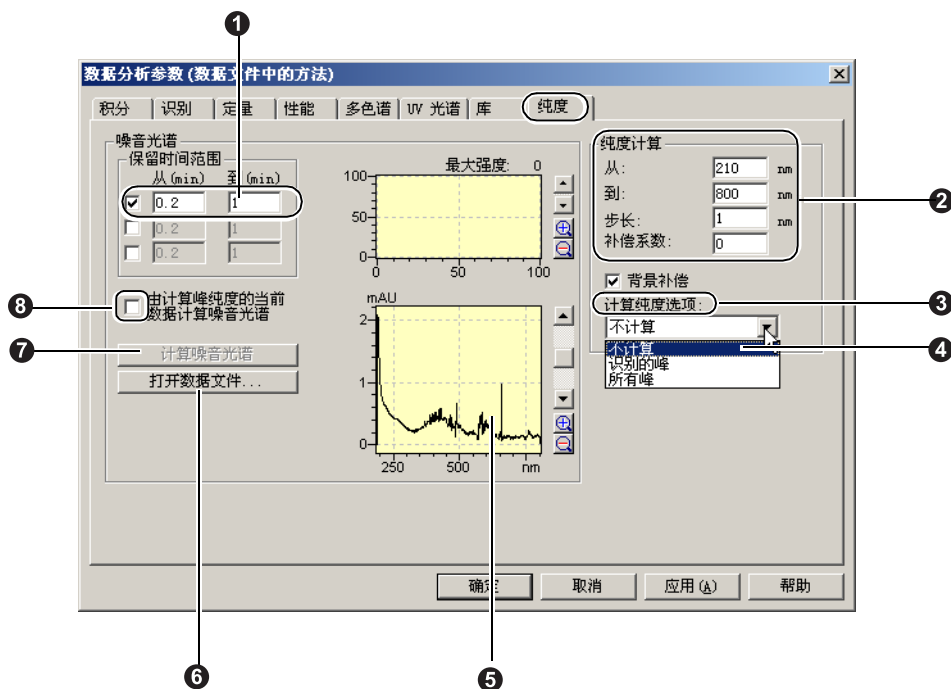
6.6 计算峰纯度

如果化合物表中的峰已经完全分离，对于化合物表来说，它们的光谱显示模式是唯一的，即在峰的任意时间点，光谱图均相似。但是，如果峰未被完全分离，由于各化合物保留时间不同，峰顶处的光谱与峰前部及峰后部的光谱不同。基于上述机制计算峰纯度，以表明峰是否由单一化合物组成。本节说明如何设置纯度参数和显示峰纯度计算结果。

6.6.1 设置纯度参数

- 单击工具栏中的  (数据分析参数) 按钮。
出现 [数据分析参数] 屏幕。

- 单击 [纯度] 标签设置每个字段并单击 [确定]。



编号	描述
①	选中复选框，指定保留时间范围计算噪音光谱。
②	设置包括范围和波长步长在内的各种参数，用于纯度计算。
③	选中此复选框，以便在计算纯度时执行背景补偿。如果数据很大，计算可能需要更多的时间。
④	选择纯度计算的目标峰类型。
⑤	显示当前的噪音光谱。
⑥	单击此按钮打开用于噪音光谱计算的数据文件。在按钮下面显示文件名，并可以在右上角的图表中查看色谱图的形状。
⑦	单击此按钮计算噪音光谱。
⑧	选中此框使用应用的方法文件（而非方法中设置的方法文件）中的数据计算噪音光谱。

注意

- 通常，导入与当前方法类似的条件下采集的 PDA 数据，并将反映背景噪音影响的适当范围（例如，检测到未分离的组分的附近范围）指定为保留时间。
- 要获取准确的峰纯度和光谱相似度，必须计算噪音光谱。如果没有噪音光谱，将使用根据检测器的规格预设的缺省光谱。

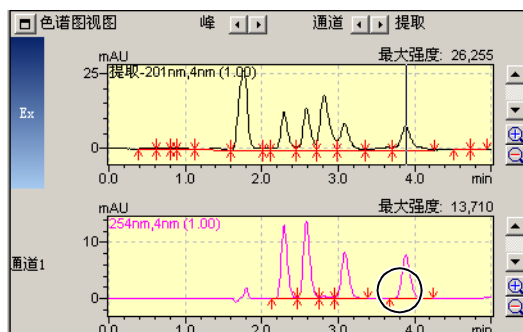
6.6.2 显示峰纯度计算结果

以图表格式和数字格式显示对积分的色谱图进行峰纯度计算的结果。

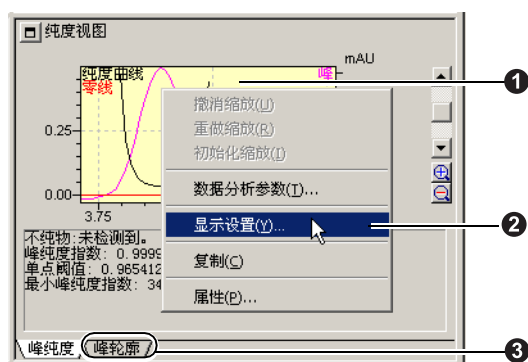
1 在 [色谱图视图] 上，在要计算其纯度的峰的检测起点和终点之间移动提取光标。

注意

在 [层叠色谱图] 模式中，不显示纯度计算。



在 [纯度视图] 的 [峰纯度] 标签中，以图表格式和数字格式显示计算结果。



编号	描述
①	纯度曲线降至零以下的区域表明有杂质。
②	用鼠标右键单击 [纯度视图] 并从显示的菜单中选择 [显示设置], 显示光谱相似度曲线。还有其他设置, 例如 3 点纯度法设置和 Y 轴 (强度轴) 设置等可用。
③	在 [峰轮廓] 标签中, 可以在一个图表中查看检测的峰的多光谱图, 用图表示了每一光谱图的不同波长。

参考

有关纯度计算的等式的详细信息, 请参见在线帮助。

注意

- 如果 [色谱图视图] 为 [重叠色谱图] 模式, 则不能在屏幕上指定用于计算纯度的峰。在计算纯度时, 必须关闭 [重叠色谱图] 模式。
- 用于计算纯度的峰必须是从积分中检测的峰。对于检测的峰, 在 [色谱图视图] 上显示其检测起点 (↑) 和终点 (↓)。
- 当光谱数据小于用于计算的噪音数据时, 将不显示纯度曲线。
- 在使用化合物表设置识别峰时, 其提取光标移至与化合物表的选定行相对应的分析通道的峰上。
- 当在 [显示设置] 的 [峰纯度] 标签中选择 [相似度] 视图模式时, 在光谱相似度低于噪音阈值的区域中包含杂质。
- 如果在 [显示设置] 的 [峰纯度] 标签中将纯度指数模式设置为 [3 点], 则分别显示前半峰和后半峰的保留时间的一点处的相似度及阈值。3 点峰纯度指数是这两个值的平均值。

6.7 从光谱指定化合物

根据化合物, 从使用 PDA 检测器采集的 3D 数据的特定时间提取的光谱, 显示唯一的模式。通过比较提取的光谱与已知化合物的光谱, 可以识别已由色谱图分离的组分。

LCsolution 使用以下功能从光谱指定化合物。

- UV 库编辑功能: 可以记录已知化合物光谱。
- 库搜索功能: 以 UV 库中搜索标准的顺序 (例如, 以指定光谱的相似度指数的降序) 列出和显示光谱。
- 相似度识别功能: 在化合物表中记录标准光谱和相似度阈值, 使用与超过阈值的指定光谱相类似的光谱识别峰。

本节说明设置库搜索标准和执行库搜索的步骤。

参考

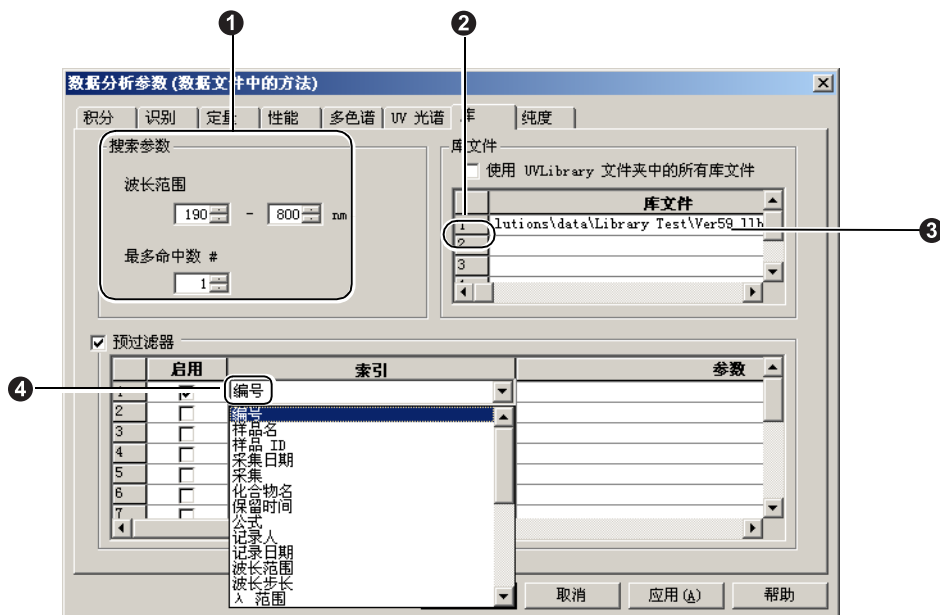
有关编辑库的信息, 请参见 第 105 页的 “6.8 编辑光谱库”。

6.7.1 设置库搜索标准

在 [数据分析参数] 屏幕的 [库] 标签中设置搜索标准。

- 1 单击工具栏中的  (数据分析参数) 按钮。
出现 [数据分析参数] 屏幕。

2 单击 [库] 标签设置搜索标准并单击 [确定]。



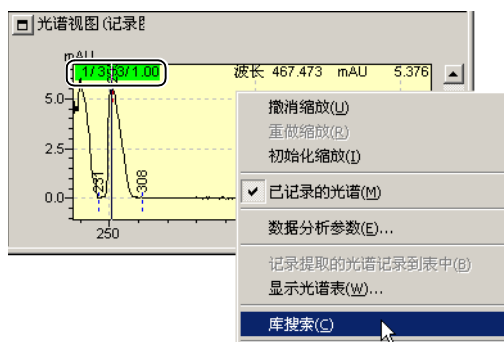
编号	描述
①	设置目标波长范围和库搜索的最大命中数。
②	如果显示区域过窄，无法正常显示信息，可以调整行的高度。
③	最多可以选择 5 个 UV 库进行搜索。
④	除相似度指数外，还可以指定其他搜索关键字（例如样品名称）。

6.7.2 执行库搜索

搜索库时，根据指定光谱的相似度指数创建一个命中列表，按照相似度指数的顺序，显示相匹配的光谱。当光谱图完全相同时，相似度指数为 1。如果相似度指数小于 1，则表明光谱中有差异。

1 用鼠标右键在 [光谱视图] 上单击，从显示的菜单中选择 [库搜索]。

单击 [光谱视图] 的左上角，选定您选择的特定记录的光谱。



如果未设置搜索标准，则显示 [数据分析参数] 中的 [库] 标签。

参考

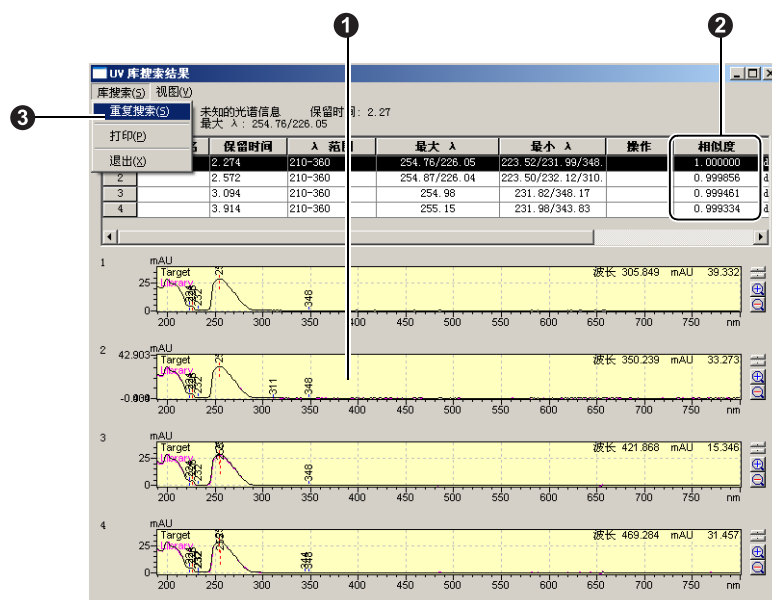
有关设置 [库] 标签的信息，请参见第 101 页的“6.7.1 设置库搜索标准”。



注意

在提取的光谱视图中，搜索的目标光谱是 [等高线图] 中波长光标所在处提取的光谱。

出现 [UV 库搜索结果] 屏幕，显示命中列表和光谱。



6


编号	描述
①	显示作为搜索结果的命中光谱。
②	按照相似度指数的降序顺序显示命中列表。
③	可以更改标准并重复搜索。

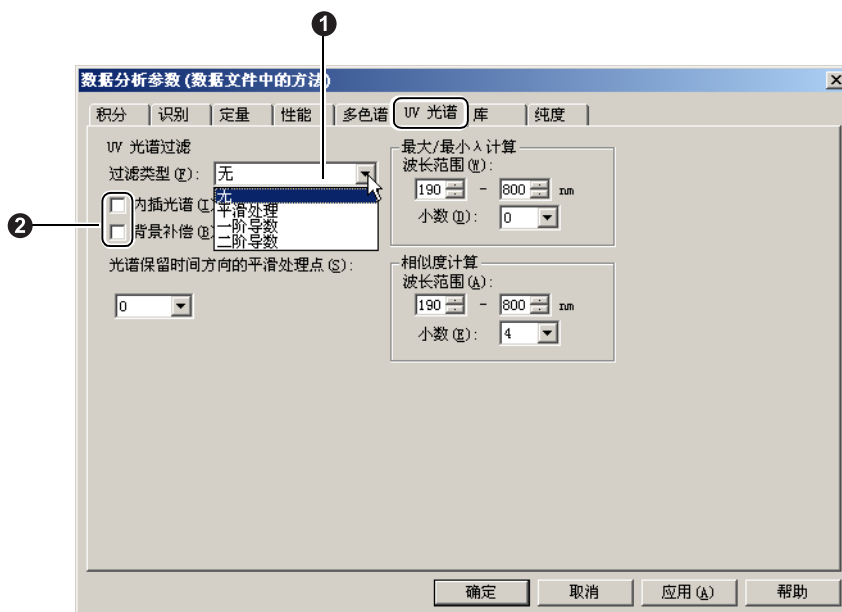


注意

通过配置 [表样式] 中的设置，可以更改 [UV 库搜索结果] 屏幕上显示的命中列表的显示项和顺序。

■ 在光谱上设置要搜索的条件

- 1 单击工具栏中的 （数据分析参数）按钮。
出现 [数据分析参数] 屏幕。
- 2 单击 [UV 光谱] 标签，设置要搜索的光谱的条件并单击 [确定]。



编号	描述
①	为采集的光谱选择要使用的过滤类型。
②	预设背景补偿和平滑处理。


注意


- 在特定波长范围内（特别是在短波处测量的色谱图），基线可能会向正向或负向偏移（例如，使用 THF 对流动相进行梯度分析时）。在这种情况下，需要背景补偿以获取适当的检测峰的光谱。
- 启用背景补偿后，为色谱图上出现的峰的光谱执行背景补偿（例如，在积分标记的检测起点和终点之间的区域）。所以，在为光谱运行背景补偿时，必须从检测的峰提取光谱。
- 选中 [插入光谱]，为 [光谱视图] 中显示的光谱插入 3D 样条线。
- 将插入的光谱另存为新文件（[另存为]）时，或在 [库] 中使用时，搜索可能需要更多的时间，因为要搜索更多的数据。

6.8 编辑光谱库

可以在 [UV 库编辑器] 屏幕上创建新的 UV 库文件。可以在 [PDA 数据分析] 窗口中记录 UV 光谱。


6.8.1 创建新 UV 库文件

1 单击 [再解析] 助手栏中的  (库编辑器) 图标。
出现 [UV 库编辑器] 窗口。

2 单击工具栏中的  (新建) 按钮。
在 [UV 库编辑器] 中打开一个“未命名”的 UV 库文件。

6.8.2 保存 UV 库文件

要将光谱从 [PDA 数据分析] 窗口记录到新的 UV 库文件，首先必须使用新名称保存 UV 库文件。

1 单击 [UV 库编辑器] 窗口工具栏中的  (保存) 按钮。



出现 [库文件信息] 屏幕。

2 保留 [库类型] 为空白并单击 [确定]。
此时不使用 [库类型]。保留为空白。
然后在显示的 [另存库文件为] 屏幕中输入 UV 库文件名。

注意

- 如果文件不是新创建的 UV 库文件，则不打开 [库文件信息] 屏幕。
- 缺省情况下，在安装 LabSolutions 路径中的“UVLibrary”文件夹中保存 UV 库文件。
- 要防止误删除 UV 库文件，不能覆盖现有的文件；因此，要使用不同的名称保存 UV 库文件。要删除现有文件，使用 [数据管理器] 或 Windows 资源管理器。

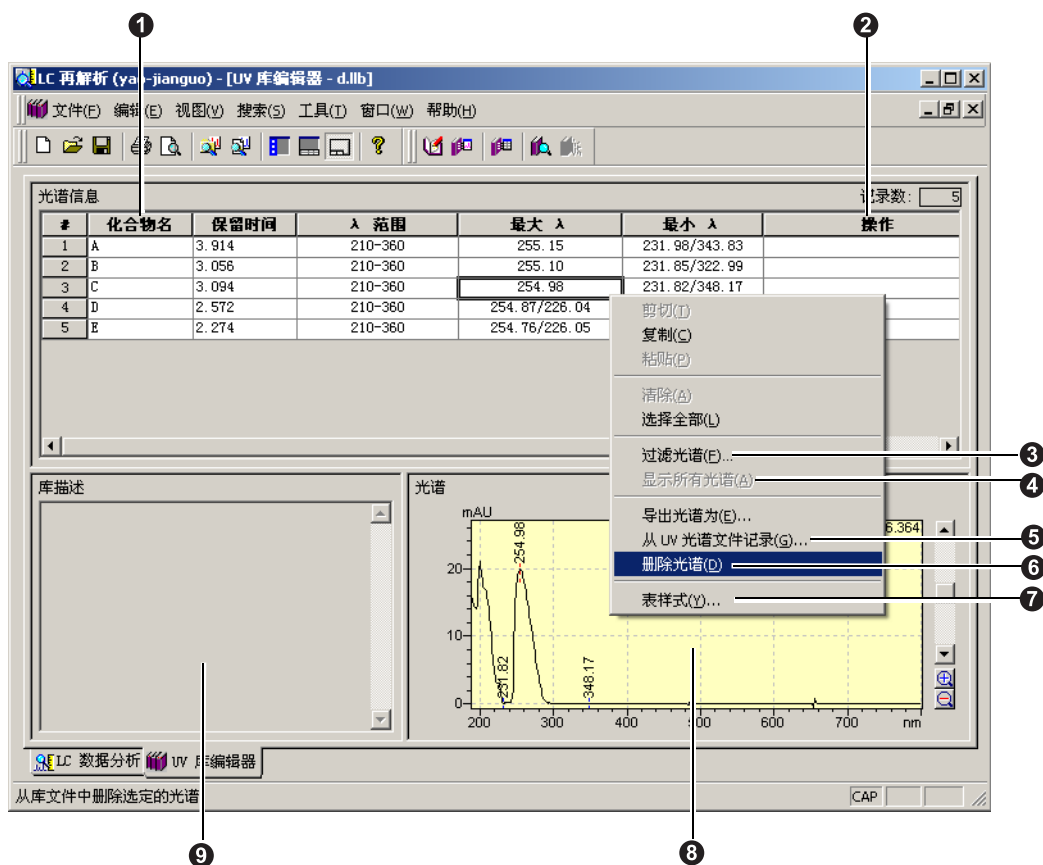
6.8.3 记录光谱到 UV 库文件

1 在 [PDA 数据分析] 窗口的 [光谱视图] 中显示要记录的光谱。

2 用鼠标右键在 [光谱视图] 上单击，从显示的菜单中选择 [记录光谱到库]。
出现 [打开库文件] 屏幕，选择要将光谱记录到其中的 UV 库文件。随即将光谱记录到 UV 库文件中。

6.8.4 编辑 UV 库文件

在 [UV 库编辑器] 屏幕上可以执行以下操作。



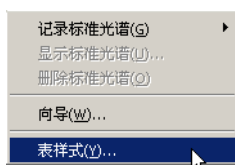
编号	描述
①	可以输入或编辑库搜索所用的索引搜索项（除相似度指数（预过滤器）之外）。
②	通过比较使用导数计算处理过的光谱，获取更佳搜索结果，可以使用处理过的光谱创建库。
③	使用索引搜索（预过滤）项过滤编辑目标。
④	取消对搜索进行的过滤，显示所有光谱。
⑤	导入已导出的光谱文件。
⑥	从库中删除不再需要的光谱。
⑦	在表样式中设置显示项 / 顺序。
⑧	可以查看当前在光谱信息表中选定的光谱的形状。
⑨	显示在 UV 库文件属性的 [描述] 标签中输入的描述。

6.9 使用光谱进行峰识别

本节说明如何在化合物表中设置相似度识别。

执行相似度识别时，首先在化合物表中设置“标准光谱”，然后为标准光谱设置用于识别的最小相似度指数和用于相似度计算的波长范围。

1 用鼠标右键单击 [化合物表视图]，从显示的菜单中选择 [表样式]。



出现 [表样式] 屏幕。

- 2** 在 [列顺序] 标签中, 从 [隐藏项目] 中选择 [标准光谱]、[最小相似度] 和 [波长], 并单击 [添加]。选定的项目被添加到 [显示项目] 列表中。



注意

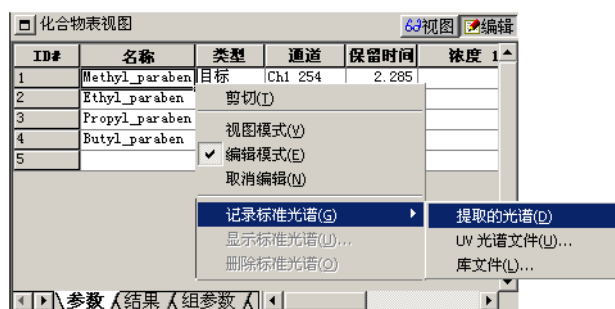
在化合物表的缺省设置下, 不显示这些项目; 必须手动进行设置才能在 [表样式] 中显示它们。

屏幕返回 [化合物表视图]。

- 3** 在 [化合物表视图] 的 [参数] 标签中, 用鼠标右键单击记录了标准光谱的行, 并从显示的菜单中选择 [记录标准光谱] - [提取的光谱]。

记录在 [光谱视图] 上选定的光谱。

使用子菜单, 可以从 UV 光谱文件和 UV 库文件记录标准光谱。



注意

选择 [显示标准光谱] 查看标准光谱的形状。

4 设置标准光谱的最小相似度以及用于相似度识别的波长范围。

ID#	标准光谱	最小相似度	波长
1	无	0.9000	420 - 700
2	无	0.9000	190 - 800


5 单击 [化合物表视图] 上的 [视图]。 使用设置光谱执行峰识别。

6.10 执行其他操作

本节说明以下操作。

- 保存（导出）到方法文件
- 导出色谱图 / 光谱
- 更新快照
- 执行色谱图 / 光谱计算

6.10.1 保存（导出）到方法文件

要在 [数据采集] 窗口的数据分析条件中反映出数据中方法的内容，单击助手栏中的 （应用到方法）图标，将数据中的方法应用于方法文件，或将其另存为新的方法文件（导出）。

注意

[PDA 数据分析] 窗口中数据分析参数设置的更改反映在数据中的方法上，而不是直接更新方法文件。

参考

有关详细信息，请参见《管理说明书》的“4.1 重要文件的概念”。

6.10.2 导出色谱图 / 光谱

■ 导出色谱图

选择 [文件] 菜单中的 [导出数据] - [导出色谱图到数据文件]，将指定波长的色谱图导出到常规检测器的数据文件（LCsolution 格式）中。

在为数据比较导入 PDA 色谱图时，此操作是必需的。

注意

可以以 ASCII 格式导出色谱图，并在其他应用程序中使用它。

■ 导出光谱


用鼠标右键单击 [光谱视图] 并从显示的菜单中选择 [导出光谱为]，将选定的光谱另存为 UV 光谱文件。

注意

- 从鼠标右键菜单中选择 [记录光谱到库]，在 UV 库文件中记录光谱。有关详细信息，请参见第 105 页的“6.8 编辑光谱库”。
- 与其他图表显示类似，通过从鼠标右键菜单中选择 [复制]，可以作为图像将色谱图 / 光谱图复制到剪贴板中。

6.10.3 更新快照

在作为快照从“数据采集”启动“PDA 数据分析”和“LC 数据分析”时，通过更新快照导入当前分析的最新状态信息。

要更新快照，单击工具栏中的 （更新快照）按钮，或选择 [视图] 菜单中的 [更新快照]。

6.10.4 执行色谱图 / 光谱计算

用鼠标右键在 [色谱图视图] 或 [光谱视图] 上单击，从显示的菜单中选择 [操作]，执行平滑处理、导数计算等操作。

■ [光谱视图] 的 [光谱计算] 菜单

在 [光谱视图] 的 [光谱计算] 菜单中必须选择两个光谱。

1 在 [光谱表] 中记录要计算的光谱。

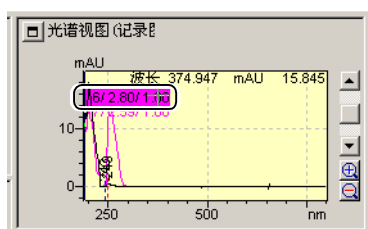


参考

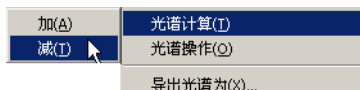
第 97 页的“6.5.1 在 [光谱表] 中记录光谱”

2 切换到 [记录的光谱] 模式。

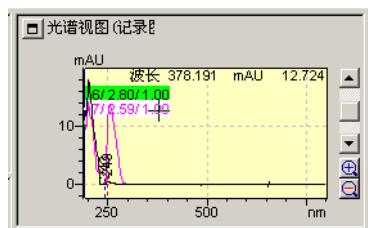
3 选中第一个光谱。



4 选择 [光谱计算] - [扣除]。



5 选中第二个光谱。



记录计算结果光谱。

 注意

在 [色谱图操作] 和 [光谱操作] 中，修改目标色谱图 / 光谱本身，但在 [光谱计算] 中，作为新光谱创建计算的光谱。

7

批处理

LCsolution 配有“批处理”功能，该功能实现连续数据采集和分析，以及可以执行其他分析的“批处理队列”功能。本章介绍了有关批处理功能的操作和参数。

7.1 执行连续数据采集

当使用“LC 实时分析”中的 [批处理表] 时，可以连续采集并处理多个样品数据。


■ 运行“LC 实时分析”时

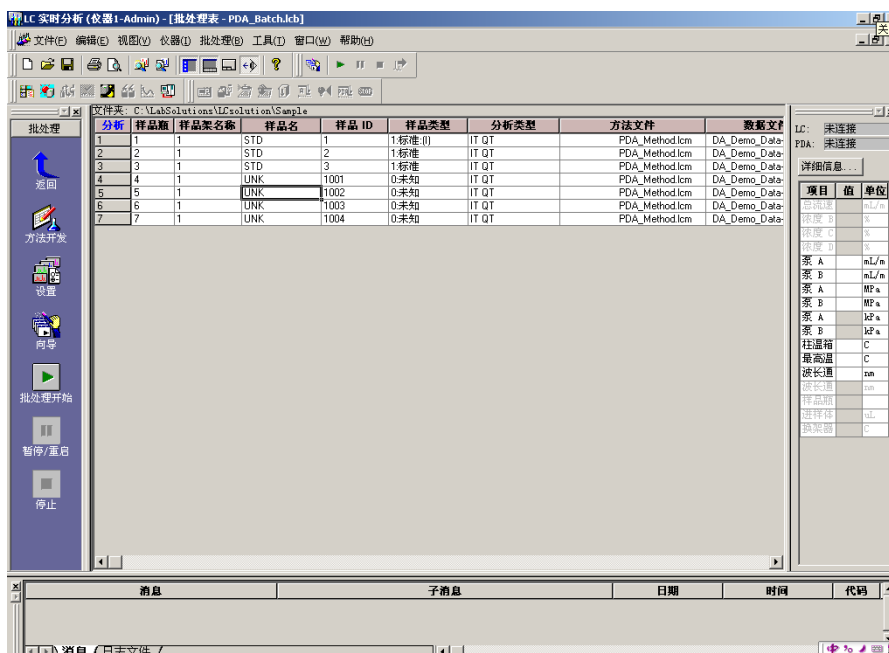
单击“LCsolution Launcher”中的 [分析] 按钮以启动“LC 实时分析”。



7.1.1 显示并编辑 [批处理表]

本节描述创建批处理表的基本步骤。

1 单击 [LC 实时分析] 窗口助手栏上的  (批处理) 图标。出现 [批处理表] 窗口。



2 在每个批处理列中输入必要项目，创建批处理表。

每一行（批处理行）对应一个数据采集（单次分析）。




编号	描述
①	输入必要的项目，如每个批处理列的方法文件名和数据文件名。当编辑最底行时，在其下面插入附加行。
②	必要时使用鼠标右键单击菜单，编辑批处理表。

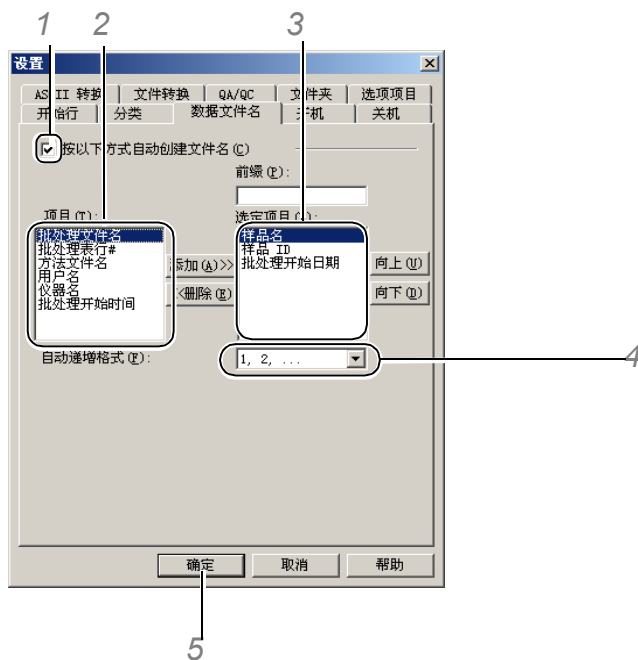
注意

有关编辑批处理表的详细信息，请参见第 159 页第 11 章的“表的一般操作”。

■ 数据文件名的自动生成

1 单击 [批处理表] 窗口助手栏中的  (设置) 图标。
出现 [设置] 屏幕。

2 单击 [数据文件名] 标签以设置每个项目，然后单击 [确定]。
在 [数据文件名] 标签中，可以配置设置以自动生成数据文件名。当配置了该设置时，每次执行批处理时自动生成数据文件名，这样就不需要键入文件名。




- 1 单击此框。
- 2 选择文件名中要包含的项目，然后单击 [添加]。
- 3 使用这些项目生成文件名。也可以更改项目的顺序。
- 4 选择位于每个文件名后自动递增数字的格式。
- 5 单击 [确定]。

注意

保存每个批处理文件的设置。

7.1.2 使用向导

当创建批处理表时，建议您首先使用向导创建批处理表，然后在必要时对其进行编辑。

1 单击助手栏中的  (向导) 图标。
出现 [批处理表向导] 窗口。

2 键入要使用的方法文件名，并配置必要的项目。单击 [下一步]。



按照屏幕上的指示完成批处理表设置。

3 单击 [完成]。

创建批处理表。

7.1.3 编辑批处理表

1 可以编辑批处理表。

分析	样品瓶#	样品名	样品 ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别#
1	1	标准样品	STD-0001	1:标准 (I)	default.lcm	(自动命名文件)	1
2	1	标准样品	STD-0002	1:标准	default.lcm	(自动命名文件)	1
3	2	未知样品	UNK-0001	0:未知	default.lcm	(自动命名文件)	1
4	2	未知样品	UNK-0002	0:未知	default.lcm	(自动命名文件)	1
5	2	未知样品	UNK-0003	0:未知	default.lcm	(自动命名文件)	1
6	2	未知样品	UNK-0004	0:未知	default.lcm	(自动命名文件)	1
7	2	未知样品	UNK-0005	0:未知	default.lcm	(自动命名文件)	1

(示例) 编辑 [样品瓶 #]、[样品名]、[样品 ID] 和 [数据文件]

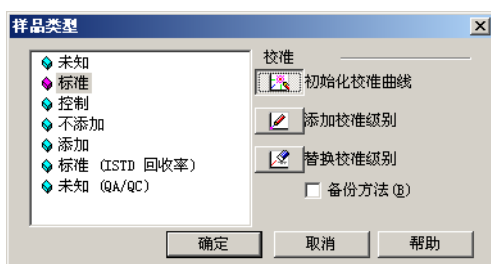
鼠标右键单击每个项目，并从显示的菜单中选择 [向下填充]，以显示可以立即输入列的多个单元格的屏幕。在此屏幕中编辑设置。


注意

- 当启用数据文件名自动生成时，不能编辑数据文件。
- 在本软件中，每个批处理行表示一个样品进样。当重复一个进样时，设置批处理行数等于进样数。当多次从样品瓶进样时，可以使用在 [向下填充] 菜单中的样品瓶数输入功能或使用批处理表（如复制 & 粘贴）中可用的编辑功能，可以很方便地输入设置。


(示例) 编辑 [样品类型]

当选择 [样品类型] 中的 [标准] 时，必须指定计算校准级别的方法。通常地，选择 [初始化校准曲线] 仅适用于第一个标准样品，选择 [添加校准级别] 则适用于所有后续校准样品。



- 2** 当完成编辑时，单击工具栏中的 （保存）按钮。
保存批处理文件。



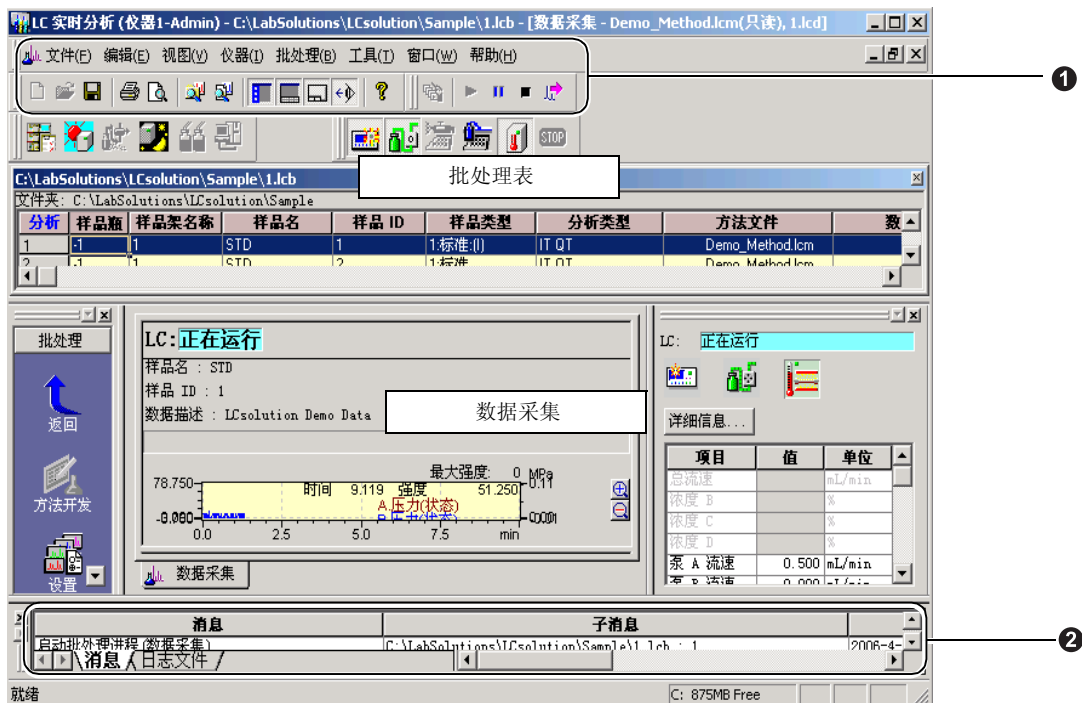
单击 （方法开发）图标以编辑光标所在行中的仪器参数。

7.1.4 执行批处理

设置批处理表后，可以立即执行批处理。



- 1** 单击助手栏中的 （批处理开始）图标。

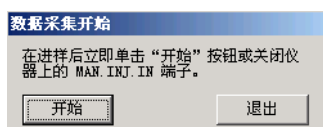
批处理开始，“批处理表”区域和“数据采集”区域显示如下。当连接自动进样器时，自动注入样品并开始分析。



编号	描述
①	当双击“批处理表”区域或“数据采集”区域时，菜单和工具栏根据激活的区域而发生变化。
②	当出现错误时，出现输出窗口。可以在批处理分析过程中显示窗口，以查看进度和出现的所有错误。

注意

- 当使用助手栏中的 （暂停 / 重新启动）图标暂停批处理时，可以添加、删除或编辑未执行的批处理行。完成编辑时，检查批处理表。如果没有任何问题，则再次单击 （暂停 / 重新启动）图标以重新启动批处理。
- 该批处理也指“分析批处理”以与仅涉及数据的批处理相区分。
- 当手动进样（无自动进样器）时，单击屏幕中的 [开始] 按钮以开始分析。



7.2 执行连续数据分析

在 [LC 再解析] 窗口中，可以指定多个已经采集的数据文件，并重新按顺序再次分析。


■ 当不运行“LC 再解析”时

单击“LCsolution Launcher”中的 [再解析] 图标以启动“LC 再解析”。



7.2.1 显示 [批处理表] 以打开批处理文件

显示在 [LC 实时分析]、[LC 分析编辑器] 和 [LC 再解析] 窗口中的批处理表有相同项目；因此，用于分析批处理的相同批处理设置可以用于再解析批处理。但是，当分析批处理文件作为再解析批处理文件导入时，不显示仅在运行分析时的必要设置。

- 1 单击助手栏中的 （批处理）图标。
出现 [批处理表] 窗口。

2 要打开用于分析批处理的文件，将文件图标拖放到批处理表中。



分析	样品瓶#	样品架名称	样品名	样品 ID	样品类型	分析类型	方法文件
1					0:未知	IT QT	


注意

对于启用 [按以下方式自动创建文件名] 设置的分析批处理文件，可以在相应的单元格中输入自动生成的用于每个批处理的数据文件名。当使用分析批处理文件执行再解析批处理时，批处理更改最近批处理分析中采集的数据。

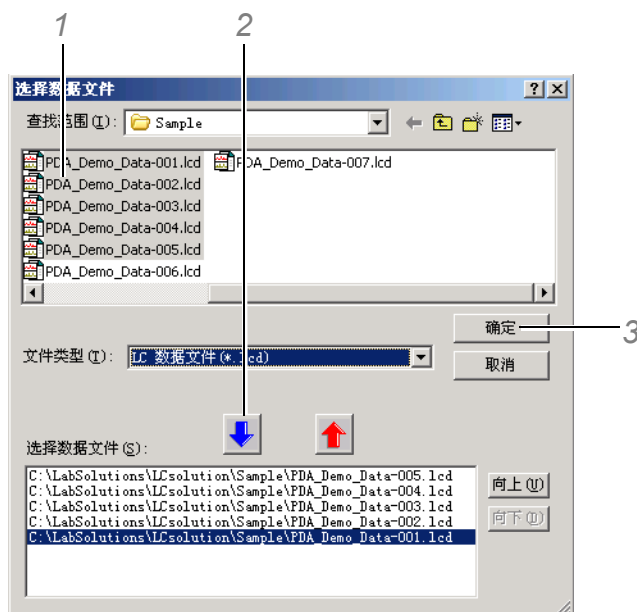
参考


有关编辑批处理文件的详细信息，请参见第 159 页第 11 章的“表的一般操作”。

7.2.2 使用选定的数据文件添加行

1 单击工具栏中的 （使用选定的数据文件添加行）按钮。出现 [选择数据文件] 屏幕。


2 选择数据文件然后单击 [确定]。



- 1 选择数据文件。
- 2 单击  按钮并将文件添加到 [选定数据文件] 列表中。批处理表中设置的文件与其在列表中出现的顺序相同。要更改顺序，选择数据文件，然后单击 [向上] 或 [向下] 按钮。
- 3 添加数据文件后单击 [确定]。

根据数据文件中的样品信息创建批处理表。

注意

- 可以通过将数据文件拖放到批处理表中执行相同操作。则在最后一行下面添加新的批处理行。
- 单击  (方法开发) 图标以编辑光标所在行中的仪器参数。
- 单次再解析 (LC / PDA 再解析) 使用数据文件中保存的方法；而再解析批处理分析则使用批处理表中指定的方法。
- 该批处理也指“再解析批处理”以和数据采集过程中的批处理相区分。

3 创建批处理表后，单击工具栏中的 (保存) 按钮。

保存批处理表。

注意

当使用创建为再解析批处理文件的批处理表用于分析批处理时，仅用于分析的项目是缺省值或保留不输入任何值。当创建分析批处理文件时，必须在 [LC 实时分析] 的 [批处理表] 或 [LC 分析编辑器] 窗口中编辑该分析批处理文件。

7.2.3 执行批处理

设置批处理表后，可以立即执行批处理。

1 单击助手栏中的 （批处理开始）图标。

执行批处理。


分析	样品名	样品 ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件
1	STD	1	1.标准 (1)	IT QT	Demo_Method.lcm	1.lcd
2	STD	2	1.标准	IT QT	Demo_Method.lcm	2.lcd
3	STD	3	1.标准	IT QT	Demo_Method.lcm	3.lcd
4	UNK	1001	0.未知	IT QT	Demo_Method.lcm	4.lcd



当再解析过程中更改样品类型时，使用批处理表的功能。

7.2.4 停止 / 暂停批处理

■ 停止批处理

单击 [LC 实时分析] - [批处理表] 窗口助手栏上的 （停止）图标。当完全停止批处理并从以下行中重新启动时，清除包含用于 QA/QC 功能的通过 / 失败校准的信息（这会导致与暂停批处理时测定的操作不同的操作）。

7.3 批处理参数

本节描述批处理的参数和批处理表的其他参数。

7

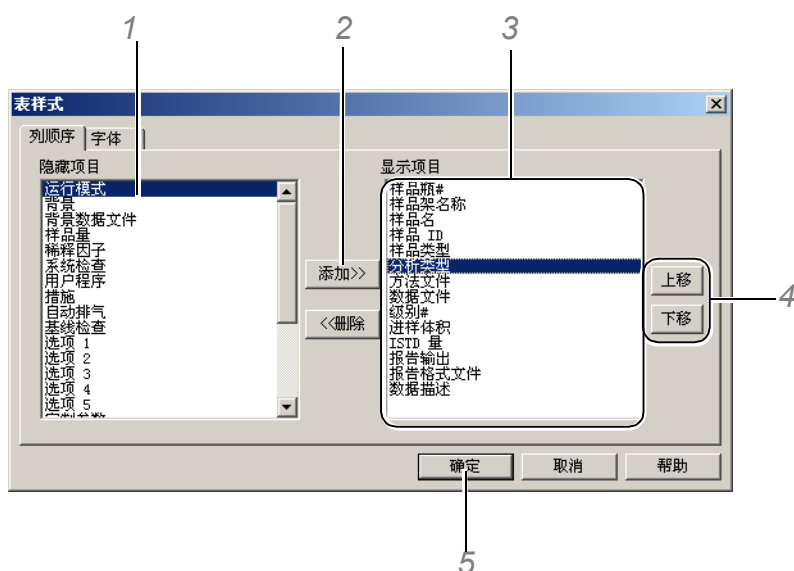
7.3.1 批处理的参数

在批处理表行，除单次分析外，还可以设置以下参数。

参数	内容
运行模式	该参数设置批处理表每行的详细执行方法，包括是否要执行数据采集或数据分析。
分析类型	该参数指定是否在数据处理过程中执行积分或定性 / 定量分析。
汇总报告 (类型 / 格式文件)	指定带有汇总报告项目的报告格式文件时，打印汇总报告。
自动清洗 基线检查	对于单次分析，这些设置在方法文件中可用，而对于批处理，则可以在批处理表中打开 / 关闭这些设置。
系统检查	可以运行每行的系统检查，并将结果用于控制批处理。（屏幕中不显示任何内容。）
用户程序	可以指定执行批处理行之前和之后外部程序的执行（对于再解析，只可以在执行一行后指定执行）。
操作	可以设置 QA / QC 设置（《管理说明书》的“5.1.2 计算 QA/QC”）并且可以使用系统检查的通过 / 失败结果设置批处理控制。
定制参数	使用数据分析结果（例如，面积、高度和浓度）执行计算，将结果保存为用于定量结果表的项目，并将项目作为报告输出。

■ 当不显示项目列时

- 1 用鼠标右键单击批处理表，并从显示的菜单中选择 [表样式]。
出现 [表样式] 屏幕。
- 2 设置要在批处理表中显示的字段，然后单击 [确定]。



- 1 从 [隐藏项目] 列表中选择字段。
- 2 单击 [添加] 以将选定字段添加到 [显示项目] 列表中。
- 3 设置希望在批处理表中显示字段的顺序。字段从左开始的顺序显示。
- 4 要更改顺序，在 [显示项目] 列表中选择字段，然后单击 [上移] 或 [下移]。
- 5 单击 [确定]。

注意

- 要隐藏显示的字段，在 [显示项目] 列表中选择该字段，然后单击 [删除]。
- 可以通过双击列表中的字段执行相同 [添加] / [删除] 操作。
- 在 [字体] 标签中，可以选择批处理表的字体。
- 将表样式设置保存到批处理文件中，这样可以保存任何工作流的正确布局。
- 当配置设置用于批处理表时，即使项目不在批处理表中显示（例如，这些项目已隐藏），也会基于这些设置执行批处理。例如，当设置了汇总报告输出的名称以及汇总报告格式文件规定但在批处理行中显示时，仍可以在批处理执行过程中生成汇总报告。

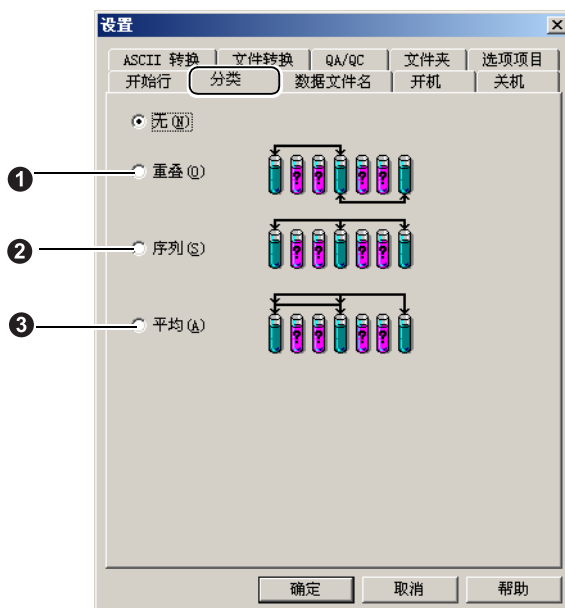
在设置时需牢记的要点

- 减少要显示的字段的数目（仅显示必要的字段）。
- 按降序排列经常使用的字段，以便无需滚动便可以查看这些字段。

7.3.2 设置分类校准

可以在 [设置] 屏幕的 [分类] 标签中配置分类校准设置。

- 1 用鼠标右键单击批处理表，并从显示的菜单中选择 [设置]。
出现 [设置] 屏幕。
- 2 单击 [分类] 标签以选择分类校准类型，然后单击 [确定]。



编号	描述
①	基于校准曲线执行未知样品的定量计算，该校准曲线是在未知样品系列的分析前和分析后根据立即执行的标准样品分析而确定的。 对于顺序末尾的未知样品，仅在未知样品分析前或分析后根据标准样品立即确定校准曲线。
②	无论未知样品的位置如何，都会基于校准曲线执行所有未知样品的定量计算，该校准曲线是根据所有标准样品的分析而确定的。
③	通过平均校准曲线执行每个未知样品的定量计算，该校准曲线是根据未知样品分析前的标准样品系列和分析后的校准曲线而确定的。 对于在顺序最靠前的未知样品，基于现有的校准曲线执行计算。

注意

- 在分类校准中，在未知样品的定量计算之前重新生成校准曲线。
- 也可以在 [批处理表向导] 的 [校准位置] 屏幕配置这些设置。
- 在每一批处理文件中保存在 [设置] 屏幕中指定的设置。

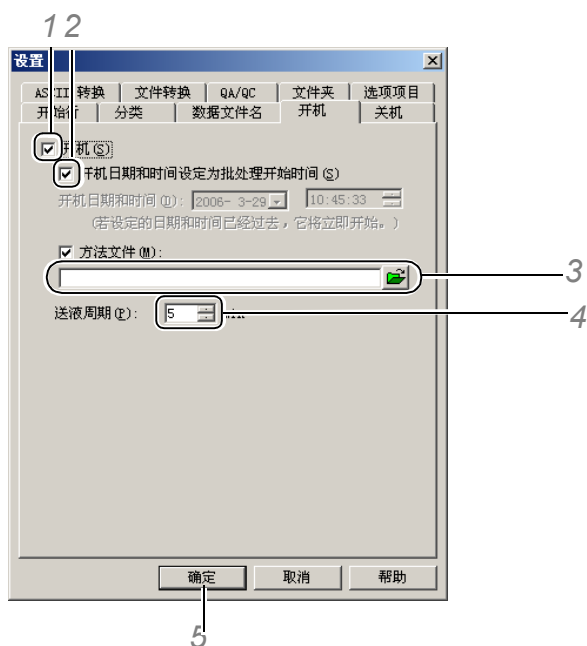
7.3.3 配置开机 / 关机条件

在 [设置] 屏幕的 [开机] / [关机] 标签中，可以设置批处理执行前后下载到分析仪器中的方法（仪器参数），以及该方法文件设置中的等待时间。

本节中以 [开机] 标签中描述的设置为例，该设置与 [关机] 标签中的设置十分相似。

1 用鼠标右键单击批处理表，并从显示的菜单中选择 [设置]。
出现 [设置] 屏幕。

2 单击 [开机] 或 [关机] 标签以设置每个项目，然后单击 [确定]。



- 1 单击此框。
- 2 选中此对话框以设置执行批处理时的启动时间。
- 3 当指定方法（包括用于冷却的仪器参数设置或等待分析仪器稳定的仪器参数设置）时，选中此对话框以指定方法文件。
- 4 设置等待时间（启动的送液期间和关机的冷却时间）用于指定的方法。
- 5 单击 [确定]。

注意

在每一批处理文件中保存在 [设置] 屏幕中指定的设置。

7.3.4 设置背景数据文件

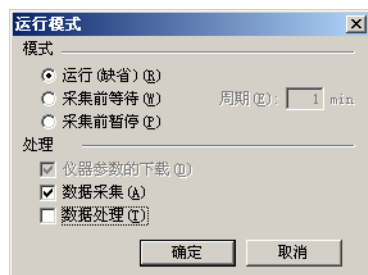
背景数据文件（也称为基线色谱图）是数据分析过程用于从目标色谱图中排除的色谱图。该色谱图用于消除空白峰和在恒定状态下改变的基线。也可以对每一行设置背景分析。

1 在批处理表中配置必要的项目。

样品瓶#	样品架	运行模式	方法文件	数据文件	背景	背景数据文件	报告输出
10	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Baseline.lcd	<input type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input type="checkbox"/>
1	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Demo001.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>
2	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Demo002.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>
3	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Demo003.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>
4	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Demo004.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>
5	1	DL AQ DP <input checked="" type="checkbox"/>	Batch1.lcm	Demo005.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>	Baseline.lcd	<input checked="" type="checkbox"/>

1 当在相同分析批处理中采集背景数据和执行背景分析时，应该在使用背景数据执行分析的行之上进行采集背景数据的分析设置。

单击 [运行模式] 字段并清除显示在 [运行模式] 中的 [数据处理] 复选框。



2 因为只需要色谱图用于背景数据，所以清除包括 [报告输出] 在内所有不必要的处理的复选框。

注意

其他运行模式的用法包括：

- 当再解析批处理行和分析批处理混合时（或要再次在分析批处理中采集特定数据时），仅选中 [数据处理] 复选框。
- 当不需要执行数据分析而要重新在批处理中打印报告时，清除 [数据采集] 和 [数据处理] 复选框*。

* [运行模式] 不在再解析批处理表中显示。如果不执行数据分析，清除 [分析类型] 中的 [定量积分] 和 [定量计算]。

7.4 执行其他分析（批处理队列功能）

在 [LC 分析编辑器] 窗口中，可以在执行分析时设置其他单次 / 批处理分析。

当在 [LC 分析编辑器] 窗口中启动单次分析时，在批处理队列中记录分析，作为使用方法的单行的批处理。

同样的，当开始批处理分析时，在批处理队列中记录批处理文件。

当在批处理队列中记录时，完成当前单次 / 批处理分析后，按记录的顺序继续分析。从列表的顶部开始执行分析，一旦开始一个项目的分析，就会从列表中删除该项目。



注意

通过 [批处理表] 窗口 [批处理] 菜单的 [显示批处理队列] 中打开 [批处理队列] 屏幕，可以在该屏幕显示的列表中查看批处理队列的内容。

在 [批处理队列] 屏幕中，除了更改批处理执行顺序外，还可以删除批处理文件。

即使关闭了“LC 实时分析”后也能够保留批处理队列设置，并在下次启动“LC 实时分析”时重新开始分析。

也可以通过在分析过程中选择 [批处理表] 窗口中 [批处理] - [记录到批处理队列]，在“LC 实时分析”的批处理队列中指定和记录批处理文件。（不能记录单次分析。）

对于已经处理的批处理表，批处理队列功能不可用。在此示例中，可以在 [LC 实时分析] - [批处理表] 窗口中暂停或停止批处理过程中的以下操作：查看执行状态、将行添加到批处理表中，取消批处理。

8

浏览器功能

“LC 浏览器”包括 [定量浏览器] 和 [数据浏览器]。

- [定量浏览器]

一起检查多个样品的定量计算结果时，该功能十分有用。

- [数据浏览器]

检查多个色谱图的数据和基于光谱数据搜索库时，该功能十分有用。


本章介绍了如何使用“LC 浏览器”的 [定量浏览器] 和 [数据浏览器]。

8.1 使用 [定量浏览器] 显示定量计算结果。

在 [定量浏览器] 中，可以同时检查多达 1024 个样品的定量计算结果。


8.1.1 显示 [定量浏览器]

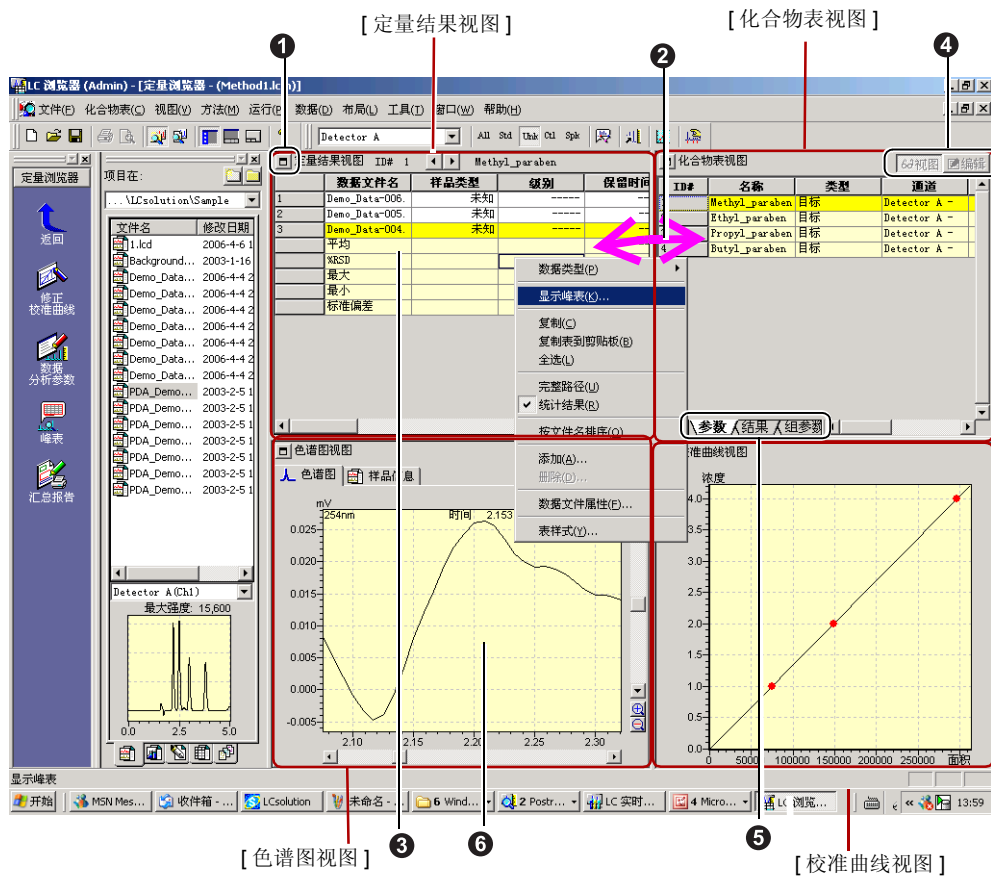
1

在“LCsolution Launcher”中，单击 [操作] 标签中的  (浏览器) 图标。



8

2 单击 [定量浏览器] 助手栏中的  (LC 定量浏览器) 图标。出现 [定量浏览器]。



编号	描述
①	单击此按钮 (更改大小按钮) 在全屏幕和标准显示模式之间切换。
②	在 [化合物表视图] 中选定化合物信息显示在 [定量结果视图] 中。
③	拖动数据文件图标, 将数据添加到表的最后一行中。
④	在 [视图] / [编辑] 模式之间切换。当从 [编辑] 模式切换到 [视图] 模式时自动将数据反映在方法中。
⑤	使用这些标签可以按化合物、按钮或通过选择校准曲线的方式, 切换定量结果的显示。
⑥	可以查看在 [定量结果视图] 中选定文件的色谱图。

注意

- [定量结果视图] 中的定量计算结果显示 [化合物表视图] 的 [参数] 标签中选定化合物的信息。
- 集中在 [定量结果视图] 中的文件的定量计算结果显示在 [化合物表视图] 的 [结果] 标签中。
- 通过从 [布局] 菜单中选择 [保存浏览文件], 可以将布局信息 (如导入的方法文件和数据文件、文件的顺序、有无统计计算的设置) 另存为 “浏览文件 (扩展名为 *.lcq)”。
- 通常, 其他应用程序中正在编辑的文件是 “只读” 的, 不能编辑。关闭其他的应用程序, 使用 “LC 浏览器” 编辑文件。

参考

有关在 [数据分析] 窗口中连续查看多个数据文件方法的详细信息, 请参见 《管理说明书》的 “6.1.4 按数据内容搜索文件”。

8.1.2 显示必要的信息

鼠标右键单击 [定量结果视图]，使用显示的菜单编辑表或更改显示状态。

主菜单项	描述
显示峰表	显示所有峰的信息，包括选定行中用于数据文件的未识别峰。
按文件名排序	将显示在表中的文件按文件名排序。
添加	可以指定文件名并在表的底部添加一行。
删除	从表中删除选定行的数据。
数据文件属性	显示所有未在 [色谱图视图] 中显示的其他信息。
表样式	可以显示 / 隐藏 [定量结果视图] 中的项目，并且可以更改其顺序、字体大小等。

参考

有关表样式设置的详细信息，请参见第 161 页的“更改表列的显示（表样式设置 1）”和第 163 页的“11.2.3 更改表中显示的行数（表样式设置 2）”。


8.2 执行多个数据的再解析

在 [定量浏览器] 中，不仅可以查看多个数据，而且可以对数据执行集中再解析或统计计算。

8.2.1 使用 [定量浏览器] 更改数据分析条件。

可以更改校准曲线信息、数据分析参数以及化合物表设置。


■ 更改校准曲线信息

- 1 单击 [定量浏览器] 助手栏中的 （修正校准曲线）图标。
出现 [LC 校准曲线] 窗口。可以从此屏幕向校准级别中添加标准样品数据，或从校准级别中删除标准样品数据。


注意


与“LC 再解析”的 [LC 校准曲线] 不同，在“LC 浏览器”的 [LC 校准曲线] 中编辑导入到 [定量浏览器] 中的方法文件。


■ 更改数据分析参数

- 1 单击 [定量浏览器] 助手栏中的 （数据分析参数）图标。
出现 [数据分析参数] 屏幕。可以在此屏幕中编辑参数。有关详细信息，请参见屏幕的帮助。

■ 更改化合物表的设置

- 1 单击 [化合物表视图] 中的 （编辑模式）按钮。
将模式切换到参数编辑模式。


- 2** 编辑参数，并单击 [化合物表视图] 中的  (视图模式) 按钮。
当切换到视图模式时，更改内容会反映到方法文件中。

 **参考**

使用“数据分析”以详细地分析每个数据文件。有关详细信息，请参见第 63 页的“5 LC 数据分析”和第 87 页的“6 PDA 数据分析”。

8.2.2 根据定量计算的值，执行统计计算

当在 [定量结果视图] 中导入数据文件的行中选中 [统计] 列时，将计算数据定量计算结果的平均值 / 最大值 / 最小值 / %RSD / 标准偏差值，并在表的底部显示这些值。

要打印出所有数据的定量结果，包括这些统计结果的报告，单击 [定量浏览器] 助手栏中的  (汇总报告) 图标。


 **注意**

通过从 [文件] 菜单中选择 [打印当前数据] - [打印]，可以分别打印表中选定数据文件的定量结果。


8.3 集中显示多个数据

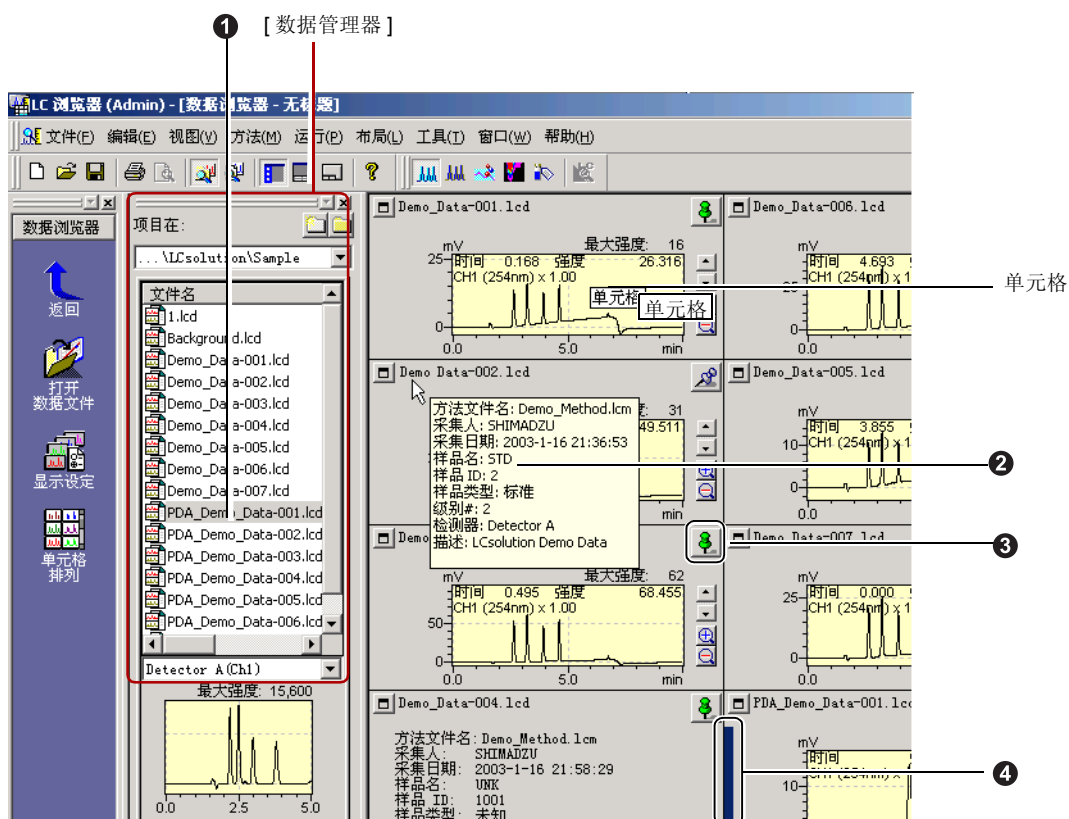
在 [数据浏览器] 中，可以同时查看最多 64 (8 x 8) 个色谱图的数据，并基于其光谱数据执行库搜索。

8.3.1 显示 [数据浏览器]

- 1** 在“LCsolution Launcher”中，单击 [操作] 标签中的  (浏览器) 图标。



- 2 单击 [浏览器] 助手栏中的  (数据浏览器) 图标。
出现 [数据浏览器]。



8

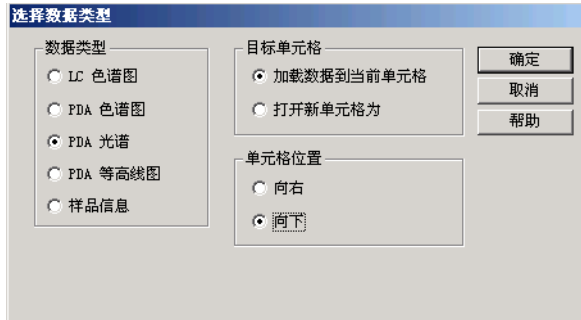
编号	描述
①	将数据文件从 [数据管理器] 拖放到单元格中，以显示其色谱图。可以拖放多个数据文件。
②	当在标题处按住鼠标指针（将鼠标指针放在标题处并保持几秒钟）时，出现样品信息。
③	当焦点指针按钮为绿色时，每个单元格与其他单元格可以一起使用。
④	当激活单元格时，显示焦点栏。

注意

通常，其他应用程序中正在编辑的文件是“只读”的，不能编辑。关闭其他的应用程序，使用“LC浏览器”编辑文件。

■ 显示色谱图

将数据文件图标从 [数据管理器] 拖放到单元格中时, 出现 [选择数据类型] 屏幕。选择输出数据类型, 将数据加载到当前单元格或打开新的单元格, 以及添加新的单元格的位置。然后单击 [确定] 以在单元格中显示色谱图。



👉 参考

也可以使用 [LC 数据比较] 显示 LC 色谱图。有关详细信息, 请参见第 82 页的“5.7 [LC 数据比较] 窗口中的操作”。

8.3.2 提取必要数据

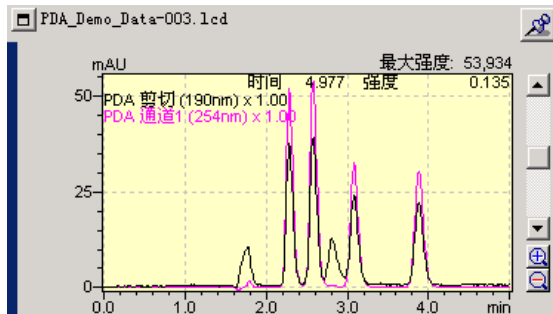
带有 📍 图标的单元格接收其他单元格的信息。例如, 当通过双击的操作, 在一个单元格中指定位置信息时, 便会将相同信息发送到所有其他带有 📍 图标的单元格。该功能称为“协同显示”, 并且可以在不同数据文件的单元格之间发送和接收信息。

📌 注意

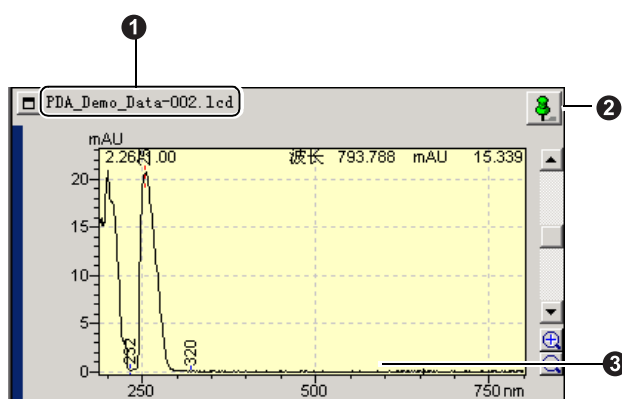
- 对于 [PDA 等高线] 单元格, 始终会显示保留时间和波长的位置信息光标, 并且当拖动光标时, 将位置信息发送到其他单元格。
- 此功能类似于“PDA 数据分析”中的 [等高线视图]、[色谱图视图] 和 [UV 光谱视图] 之间的协同显示; 但是, 也有可能 [数据浏览器] 中协同显示不同数据文件的单元格。

例如, 本节描述当 [PDA 光谱] 单元格接收从 [PDA 色谱图] 单元格发送的位置信息时的协同显示。

1 双击要从 [PDA 色谱图] 单元格提取的位置。





将位置信息发送到带有 📍 图标的单元格。
在 [PDA 光谱] 单元格中, 显示保留时间处的光谱。



编号	描述
①	即使不同文件中的数据也有可能协同显示。
②	带有  图标的单元格接收信息。 单击该图标以在  模式和  模式之间切换。
③	显示发送的保留时间的光谱。

注意

- 可以启用选中模式以用于多个单元格。通过双击一个单元格，可以将位置信息发送到此模式中的所有单元格。
- 缺省情况下， 模式中有指针；当没有必要显示协同信息时，移除指针 ()。
- [视图] 菜单中的高级设置可用于以下单元格类型。

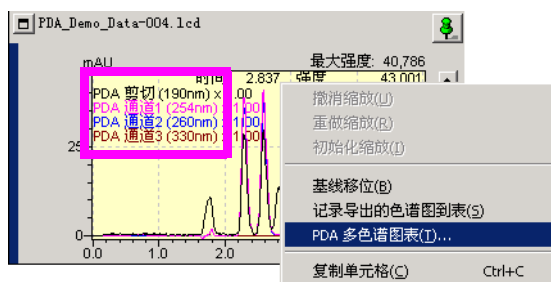
单元格类型	[视图] 菜单项	功能
PDA 色谱图	[PDA 多色谱图表]	单独显示放大率 / 带宽、最大绘图设置
UV 光谱	[UV 光谱表]	单独显示放大率、参照光谱设置
LC 色谱图	[显示设置]	当有多个检测器时，选择一个检测器

8.3.3 删除不需要的提取数据

当使用前一节中描述的“协同显示”功能时，如果要在屏幕中显示过多数据，请按下面的说明从显示中删除不需要的数据。

1 单击鼠标右键，然后从显示的菜单中选择 [PDA 多色谱图表]。

出现 [数据分析参数] 屏幕。



2 取消选中不需要数据的 [显示] 复选框，然后单击 [确定]。



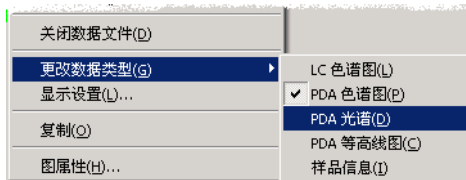
注意

- 当启用“协同显示”功能时，根据单元格的类型，可以切换显示或可以添加到当前显示。不需要删除任何用于切换显示的单元格中显示的数据。
- 对于 [UV 光谱] 单元格，可以在 [显示设置] 中选择切换或添加显示的数据（提取的 / 记录的）。仅当记录了显示设置时，显示 [UV 光谱表] 中设置的光谱。

8.3.4 更改显示的数据类型

如果文件包含可以显示为其他格式的数据，可以更改数据的显示格式。

1 按鼠标右键单击单元格，从显示的菜单中选择 [更改数据类型]，然后从子菜单中选择显示格式。



显示格式更改。

注意

- 当从鼠标右键单击菜单中选择 [显示设置] 时，可以在每个单元格的重叠 / 层叠之间切换，并确定是否在单元格的右边显示信息显示区域。
- 当使用鼠标右键单击菜单 [复制单元格] 和 [粘贴单元格] 复制单元格时，可以复制显示的数据和设置。通过将数据文件拖放到复制的单元格中，可以很方便地使多个数据的显示状态保持一致。

8.3.5 排列布局

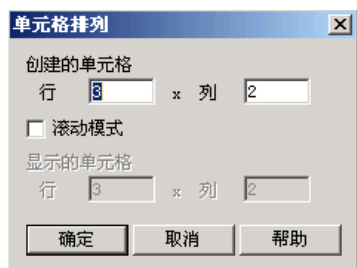
[数据浏览器] 中单元格的边界线不是“分隔框”，不能拖动单元格四周来更改其大小。在单元格之间等分窗口，自动确定单元格大小。

打开数据时，通过指定要添加单元格的方向以调整布局。如果已经添加了太多的单元格，请按照以下说明删除不必要的行或列。

- 1 鼠标右键单击要删除的单元格，然后从显示的菜单中选择 [调整布局] - [删除行 / 列]。删除单元格。

注意

- 要预先插入空白单元格，从鼠标右键单击菜单中选择 [插入行 / 列] 或 [添加行 / 列]。
- 从鼠标右键单击菜单中选择 [单元格排列] 时，指定行数和列数。因此，如果要显示水平 / 垂直滚动栏，则选中 [滚动模式] 复选框。



- 要交换两个单元格之间显示的数据，将一个单元格的标题拖放到另一个单元格中。

8.3.6 保存布局

当从 [布局] 菜单中选择 [保存布局文件] 时，可以将每个单元格的布局信息（包括数据）另存为“布局文件（扩展名为 *.lyt）”。

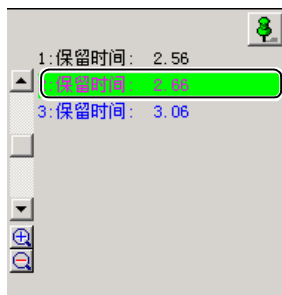
通过从 [布局] 菜单中选择 [打开布局文件] 打开布局文件时，可以重新生成保存的布局。

8

8.3.7 执行库搜索

在 [UV 光谱] 单元格中，可以执行已显示光谱的库搜索。

- 1 当显示多个光谱时，从 [UV 光谱] 单元格的右方信息显示区域中选择要搜索的光谱。



- 2** 鼠标右键单击 **[UV 光谱]** 单元格，然后从显示的菜单中选择 **[搜索库查找当前光谱]**。
根据数据文件的方法中记录的搜索标准执行库搜索。



注意

当 **[UV 光谱]** 右方不显示信息区域时，在 **[显示设置]** 中更改设置以显示信息区域。

9

报告功能

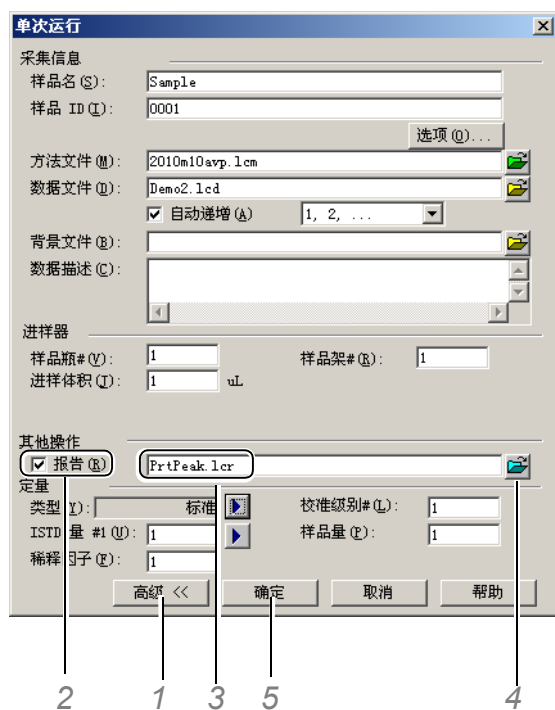
本章介绍了报告功能，可以按您喜好的格式打印分析报告。

9.1 打印分析结果

配置报告格式文件后打印分析报告。

9.1.1 数据采集中的报告输出

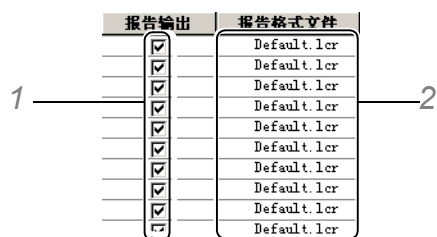
按如下所示设置 [单次运行] 屏幕，以在数据采集结束时进行报告输出。



- 1 如果不显示 [其他操作]，则单击 [高级] 按钮。
- 2 选中 [报告] 复选框。
- 3 输入报告格式文件的文件名。
- 4 单击此处从列表中选择文件。
- 5 完成设置后，单击 [确定]，开始单次分析。

9.1.2 批处理中的报告输出

按如下所示设置批处理表，以在执行批处理的每行后进行报告输出。

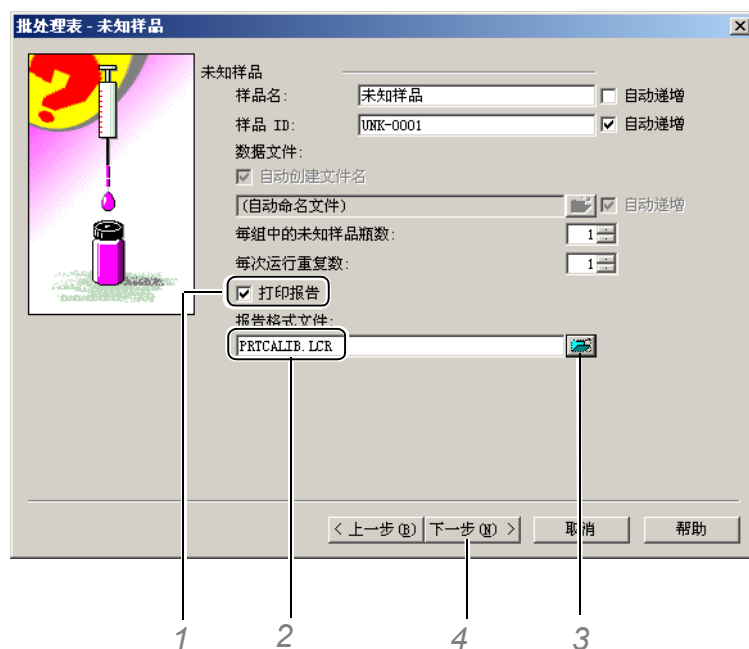


- 1 选中要生成报告的行的 [报告输出] 框。
- 2 输入报告格式文件的文件名。

完成设置后，执行批处理。

■ 设置用于报告输出的 [批处理表向导]。

按如下所示设置 [批处理表向导]。



- 1 选中 [打印报告] 复选框。
- 2 输入报告格式文件的文件名。
- 3 单击此处以从列表中选择文件。
- 4 完成设置后，使用 [批处理表向导] 单击 [下一步] 以继续设置。

注意

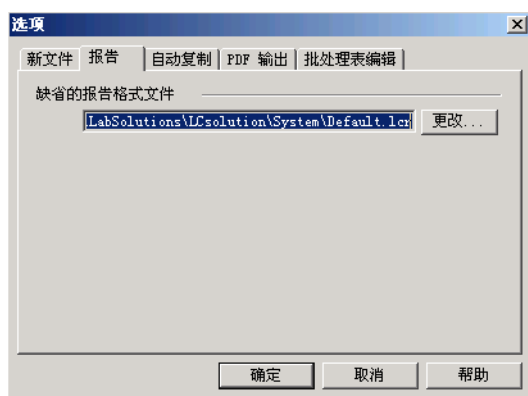
再解析批处理表中不能使用向导功能。

9.1.3 缺省报告格式文件

如果在打印单次分析或批处理结果时没有指定报告格式文件，则使用缺省报告格式设置打印报告。

■ 设置缺省格式文件

- 1 从 [LC 实时分析] 窗口的 [工具] 菜单中选择 [选项]。
出现 [选项] 屏幕。
- 2 在 [报告] 标签中，单击 [更改]，指定一个报告文件，然后单击 [确定]。






✎ 注意

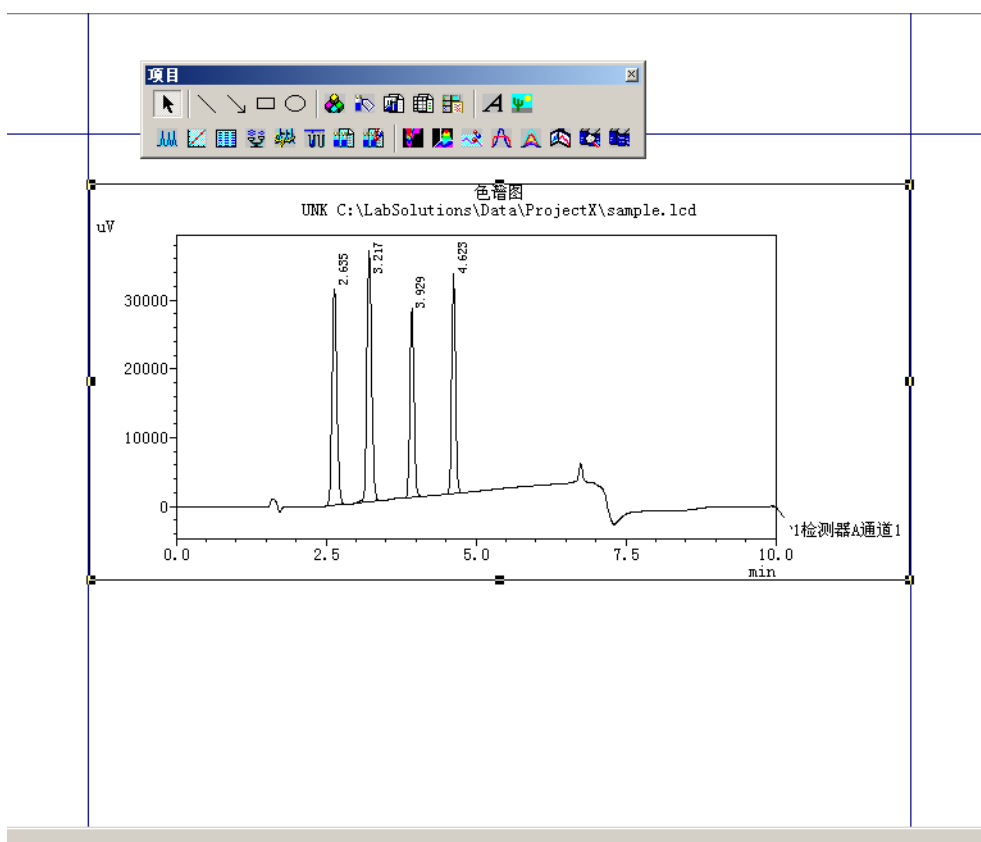
- 确保没有删除按缺省报告格式文件设置的文件或没有将其移到另一路径中。
- 如果选中 [报告输出] 并开始分析而将 [单次分析] 或“LC 实时分析”的批处理表设置中的 [报告格式文件] 留为空，则使用此处设置的报告格式打印报告。
- 当开始批处理再解析开始而将“LC 再解析”的批处理表设置中 [报告格式文件] 留为空时，将使用保存在每个数据文件中的报告格式打印报告。

9.2 重新打印数据处理结果

本节描述打印数据文件报告的步骤。


- 1 单击“LC 再解析”助手栏中的  (LC 数据分析) 图标。
- 2 打开数据文件。
从 [数据管理器] 中拖放  (数据文件) 图标或双击 [数据管理器] 中的  (数据文件) 图标。

3 单击 [LC 数据] 助手栏中的 (数据报告) 图标。 出现报告创建屏幕。



用于以前打印报告的数据或创建报告格式的数据与包含原始数据的项目一起显示。对于其他情况，必须将报告格式按缺省格式设置为空。


注意


从 [数据管理器] 中拖动  (报告格式文件) 图标，将报告格式导入到编辑区域。保留数据文件的内容，可以不编辑而打印数据分析结果。在此操作过程中，不要双击 [数据管理器] 中的报告格式文件。该操作会启动“报告”。


4 编辑报告的布局。

可以在屏幕中编辑报告的布局。有关详细信息，请参见第 145 页的“9.5 调整报告布局”。

注意

通过单击 [数据管理器] 助手栏中的  (预览) 图标，可以查看屏幕中的打印图像。

5 单击 [数据报告] 助手栏中的  (打印) 图标。
打印报告。


6 保存报告格式。
单击工具栏中的  (保存) 按钮。


7 保存数据文件。
保存 [LC 数据分析] 中的数据文件。
在数据文件中保存报告格式，下次可以使用相同格式打印数据。

 **注意**

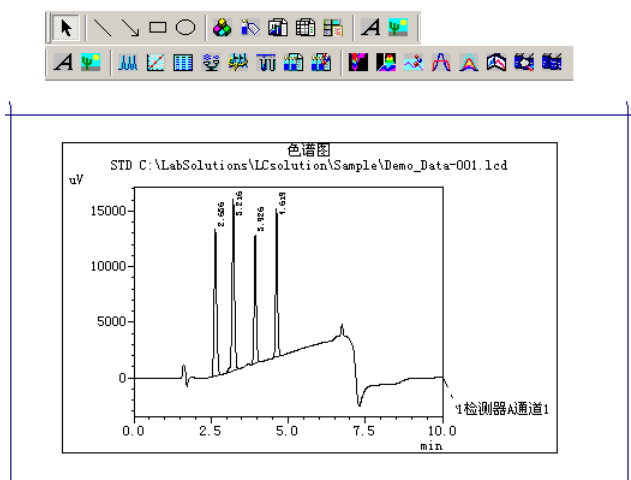
- 根据报告分别保存数据文件。
- 要将报告格式另存为标准格式以便可以在数据采集或批处理过程中使用该格式，从 [文件] 菜单中选择 [另存报告格式文件]，将报告另存为“报告格式文件 (*.lcr)”。


■ 使用报告格式文件

也可以使用报告格式文件打印数据文件的内容。这样操作时，无需更新数据就可以使用不同于数据报告格式的格式打印内容。也可以通过从 [数据管理器] 中拖放  (数据文件) 图标，逐个查看报告图像。

1 双击 [数据管理器] 中的  (报告格式文件) 图标。
导入报告格式文件，并显示报告创建屏幕。

2 导入一个数据文件。
将  (数据文件) 图标从 [数据管理器] 拖放到工作区中。




3 单击 [报告] 助手栏中的  (打印) 图标。
打印报告。

 **注意**

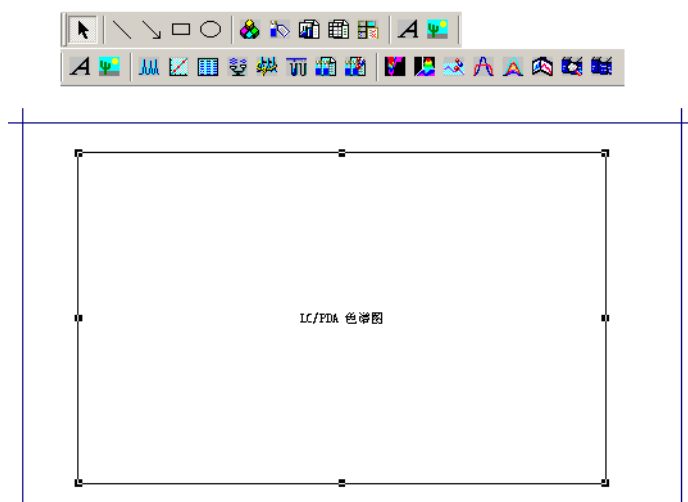
要同时重新打印多个数据的报告，使用再解析批处理功能。清除 [分析类型] 中的 [定量积分] 和 [定量计算] 复选框，然后在批处理表中选中 [报告输出] 复选框。进行这些设置后，在批处理运行过程中只打印报告而不进行任何处理。

9.3 创建报告格式文件



本节描述如何在“LC 再解析”、“LC 实时分析”以及“LC 分析编辑器”中创建报告格式文件。

1 单击助手栏中的  (报告格式) 图标。

2 在工具栏中单击  (新建报告格式文件) 按钮。
出现报告创建屏幕。





注意

通过从 [数据管理器] 中拖放  (报告格式文件) 图标或双击  (报告格式文件) 图标，可以在报告创建屏幕中导入和编辑现有报告格式文件。



3 编辑报告的布局。

可以在屏幕中编辑报告的布局。有关详细信息，请参见第 145 页的“9.5 调整报告布局”。

注意

通过单击 （打印）按钮或单击工具栏中的 （预览）按钮，可以打印报告格式或在屏幕中查看其图像。



4 保存报告格式。


单击工具栏中的 （保存）按钮，可以使用新的名称保存报告格式。单击 （打开）按钮并指定其名称，可以打开保存的报告格式文件。


注意

通过在 [单次分析] 或在批处理表中指定报告格式文件，可以自动将指定格式的分析结果报告记录到数据文件中或打印该报告。

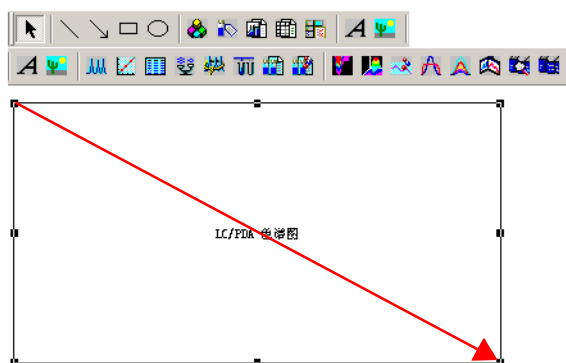
9.4 创建报告布局的示例

本节通过使用示例  (色谱图) 和  (峰表), 描述如何创建新报告格式文件和粘贴打印项目。

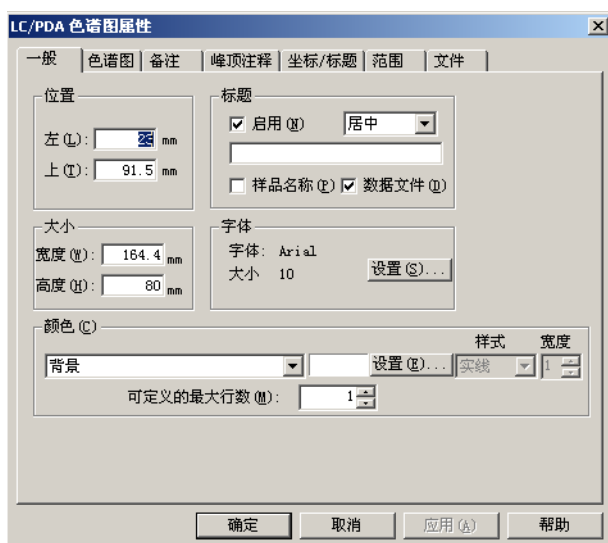
1 单击 [再解析] 助手栏中的  (报告格式) 图标。
出现报告创建屏幕。

2 单击要粘贴的打印项目。
在此示例中, 选择了  (色谱图) 图标。

3 选择要粘贴打印项的区域。
在报告创建屏幕中, 将光标从要粘贴打印项目 (色谱图) 区域的起点拖到终点。



当松开鼠标按钮时, 出现 [LC/PDA 色谱图属性] 屏幕。



4 配置打印项格式。



属性屏幕中显示的标签和设置因打印项目不同而异。

5 单击 [确定]。

6 单击要粘贴的下一个打印项目。

在此示例中，选择了 (峰表) 图标。

7 选择要粘贴打印项的区域。

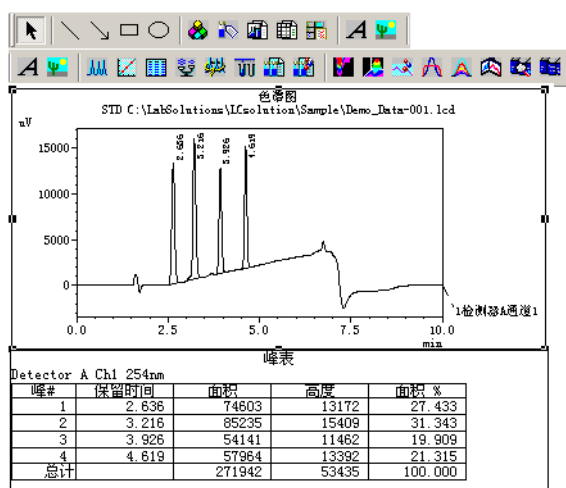
在报告创建屏幕中，将光标从要放置打印项目 (峰表) 区域的起点拖到终点。松开鼠标按钮，出现 [LC/PDA 峰表属性] 屏幕。

8 配置打印项格式。

9 单击 [确定]。



可以导入数据文件以检查格式。将 (数据文件) 图标从 [数据管理器] 拖放到报告创建屏幕中时，导入实际的数据并以报告格式显示该数据。

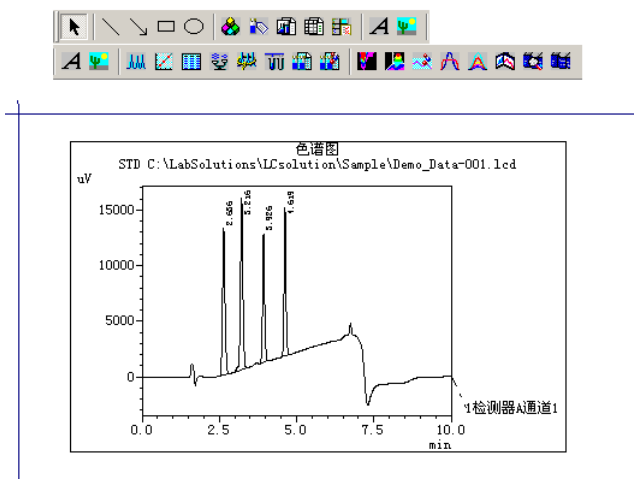


9.5 调整报告布局

使用以前创建的报告格式，本节描述修改布局的方法。

9.5.1 编辑打印项目

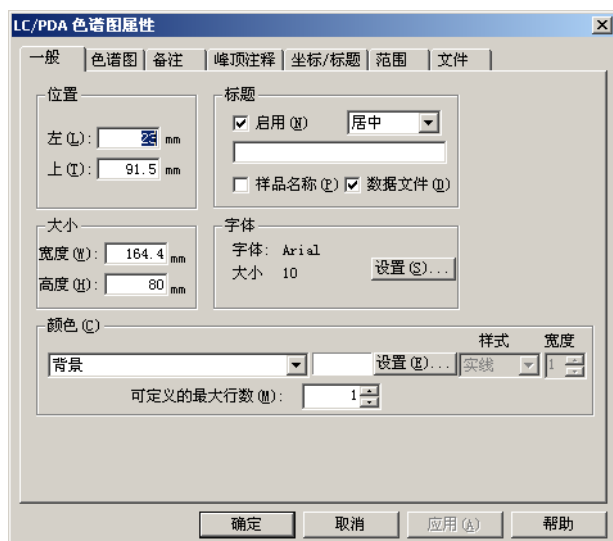
当单击粘贴在布局创建屏幕中的打印项目时，选择此打印项目，该项目由有八个 ■ 标记（每个角各一个标记，每边各一个标记）的固定框所围绕。



9

使用鼠标拖动其中一个 ■ 标记，可以更改打印项目的大小。

当双击打印项目时，显示属性屏幕，在此屏幕中可以编辑打印项目的精确格式设置（包括其大小和位置）。










■ 调整多个打印项目的大小和位置

当调整打印项目组的大小和位置时，可以使用该调整功能调整多个项目的大小和位置。

要选择多个打印项目，单击 [项目] 工具栏中的 （箭头）按钮，斜对角地拖动光标以便可以涵盖所有要选择的打印项目。

也可以按下 [Shift] 键的同时单击每个项目，选择这些项目。

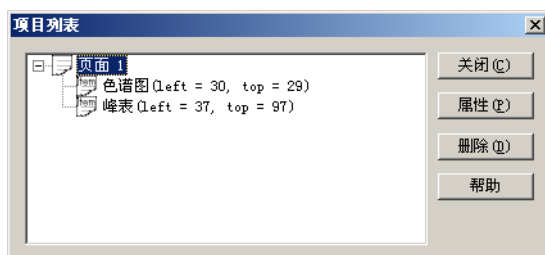
选择项目后，可以一起拖动和移动项目，并使用布局菜单功能调整报告的格式。因此，使用布局菜单，也可以更改打印项目的显示层（该项目显示在背景前或背景中）。

“布局” 菜单	功能
 对齐 / 左对齐	将选中打印项目左对齐。
 对齐 / 右对齐	将选中打印项目右对齐。
 对齐 / 向上对齐	将选中打印项目向上对齐。
 对齐 / 向下对齐	将选中打印项目向下对齐。
 调整为相同大小 / 宽度	调整选中打印项目为相同宽度。
 调整为相同大小 / 高度	调整选中打印项目为相同高度。
 调整为相同大小 / 宽度和高度	调整选中打印项目为相同宽度和高度。
顺序 / 前移	将选定打印项目移至前面。
顺序 / 后移	将选定打印项目移至后面。
顺序 / 上移一层	将选定打印项目一层移近前面。
顺序 / 下移一层	将选定打印项目一层移向后面。

9.5.2 将打印项目放置在多个页面上

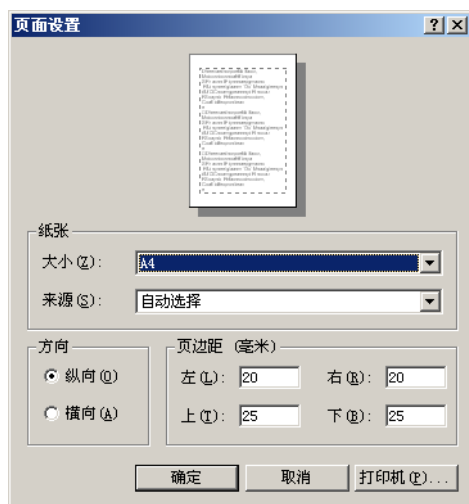
当选择 [报告] 中 [视图] - [项目列表] 时，出现 [项目列表] 屏幕。

在 [项目列表] 中，报告格式的打印项目在每个页面中以树状格式列出。在此屏幕中，可以检查每个项目的内容并可以编辑其属性。



9.5.3 设置页面大小和边距

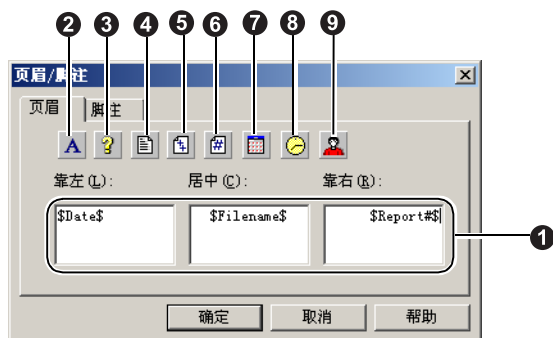
当选择 [创建报告] 中 [文件] - [页面设置] 时，出现 [页面设置] 屏幕。
在 [页面设置] 中，可以设置纸张大小、纸张来源、方向（横向或纵向）以及报告的页边距。



9.5.4 设置页眉 / 页脚

1 选择 [报告] 中的 [视图] - [页眉 / 页脚]。
出现 [页眉 / 页脚] 屏幕。


2 设置页眉和页脚。



编号	描述
①	在要显示页眉 / 页脚的 [左对齐]、[居中] 或 [右对齐] 框中单击。
②	单击此图标以更改字体或字体大小。
③	单击此图标以插入版本号。
④	单击此图标以插入数据文件名。
⑤	单击此图标以插入报告编号。
⑥	单击此图标以插入页码。
⑦	单击此图标以插入日期（天、月和年）。
⑧	单击此图标以插入时间。
⑨	单击此图标以插入用户名。

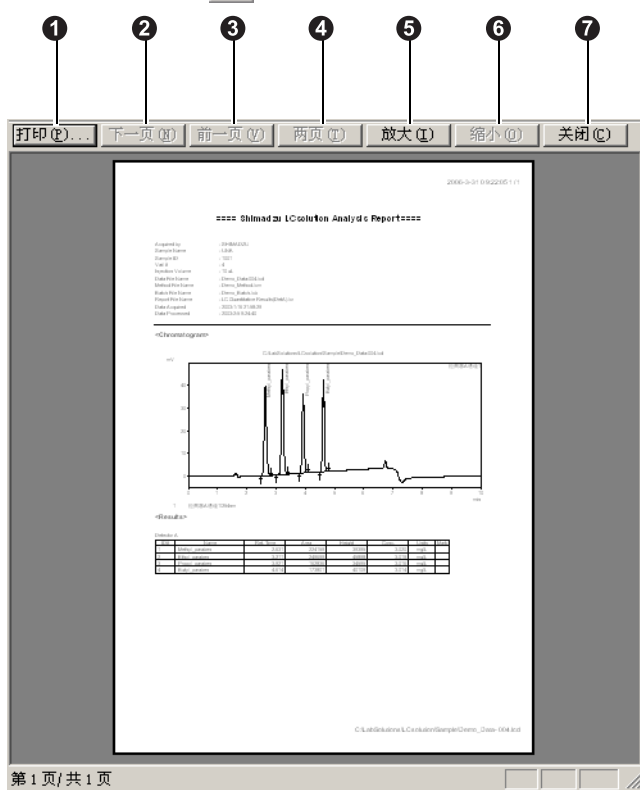
3 单击 [确定]。

9.5.5 查看打印图像

通过单击 [报告] 助手栏中的  (预览) 图标, 可以查看屏幕中的打印图像。

注意

工具栏中也有  (预览) 按钮。



编号	描述
①	打印报告。
②	显示下一页。
③	显示上一页。
④	在第一页预览和第二页预览之间切换。
⑤	放大视图。
⑥	缩小视图。
⑦	关闭预览屏幕。

9.5.6 打印的内容

可以打印 [报告] 屏幕中可用的文件中包含的下列项目。

打印项目	内容
 图形	直线 / 箭头 / 矩形 / 椭圆形 / 无边框 (仅菜单)
 系统配置	系统配置文件的内容
 样品信息	样品信息的设置
 方法	方法文件的内容
 批处理表	批处理文件的内容
 系统检查	系统检查的结果
 字符	输入的文本
 图	包含位图的图像文件
 色谱图	色谱图
 校准曲线	包含校准曲线图形的校准曲线信息 (适用于每个检测器)
 峰表	峰表的内容 (每个通道)
 定量计算结果	定量计算结果表 (每个检测器)
 分组结果	分组结果表的内容 (每个检测器)
 分离报告	馏份收集信息
 汇总 (浓度)	根据浓度 / 面积 / 高度, 汇总输出
 汇总 (化合物)	每个化合物的汇总输出
 等高线	PDA 3D 数据的等高线图
 3D 图表	PDA 3D 数据的 3D 图表
 UV 光谱	从 PDA 3D 数据采集的光谱图表
 峰纯度	PDA 再解析的峰纯度信息内容
 峰轮廓	PDA 再解析的峰轮廓信息内容
 光谱索引	色谱图的峰及其相对应的光谱
 UV 库搜索	使用光谱库, 根据相似度指数搜索结果
 UV 光谱库	光谱库文件的内容

■ 包含非数据文件内容信息的报告

通常，一个报告包含数据文件的内容，但是以下内容以特殊的报告格式打印：

打印项目	描述
LC / PDA 再解析 校准曲线 数据比较 库编辑器 定量浏览器 (打印图像)	可以将导入到应用程序窗口中的文件内容导入到特定报告格式并打印该内容。
系统配置设置 (系统配置：打印)	可以将系统配置信息导入到特定报告格式并打印该信息。
分析方法的内容 (打印方法)	可以使用报告功能打印当前在 [数据采集] 中使用的方法文件的内容。
批处理表的内容 (打印批处理表)	可以使用报告功能打印用于批处理表的批处理表设置。
光谱索引报告 (打印光谱索引)	可以将光谱索引报告导入到特定报告格式并打印该报告。
光谱搜索结果 (库搜索：打印)	可以根据光谱相似度指数搜索的结果导入到特定报告格式并打印该结果。
光谱记录表的内容	可以以固定格式打印 PDA 再解析中记录的光谱表的列表。
审查追踪日志	可以以固定格式从“审查追踪”屏幕中打印日志内容，包括系统配置 / 方法 / 数据 (数据中的方法) 的日志。
显示“日志浏览器”的内容	可以以固定格式打印显示在“日志浏览器”中的系统日志和过滤的搜索结果。
伪造检查结果 (程序 / 原始数据)	可以以固定格式打印有关程序和原始数据的伪造检查结果。
系统检查结果	可以从系统检查结果屏幕以固定格式打印系统检查结果。

10

窗口一般操作

本软件中安装的主应用程序包括“LC 实时分析”和“LC 再解析”，“LC 实时分析”用于设置数据采集的参数，“LC 再解析”用于分析采集的数据。每个程序窗口都有子窗口，这些子窗口具有各种功能和提供辅助功能的功能栏。

本章介绍了使用所有窗口的操作方法。

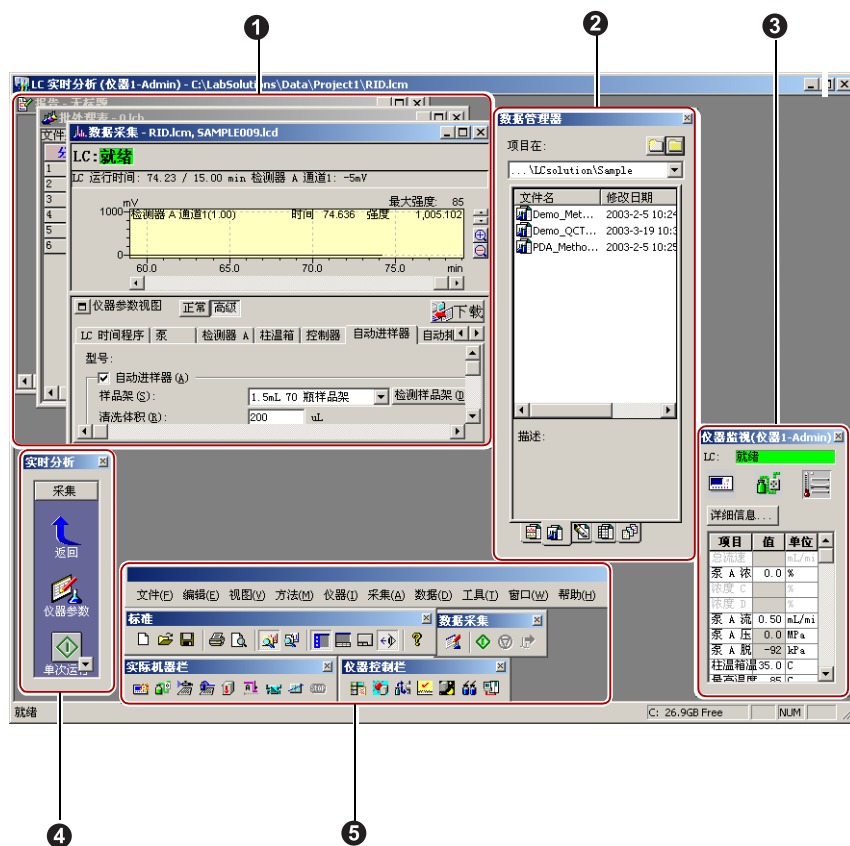
10.1 显示窗口和功能栏

每个程序都有具有各种功能的多个应用程序窗口、程序之间共享的窗口（称为“公共窗口”）、助手栏以及工具栏等。本节描述窗口的类型和程序窗口内合并的功能栏（工具按钮），以及显示特定应用程序窗口的方法。

10.1.1 程序窗口的窗口类型

一个程序窗口中有两种基本窗口类型；提供程序主要功能的“应用程序窗口”，以及提供辅助功能的“公共窗口”。

可以在窗口的框中合并公共窗口，并使用工具栏中的按钮显示或隐藏公共窗口。







编号	描述
①	应用程序窗口
②	公共窗口
③	公共窗口
④	单击助手栏中的图标以显示窗口、视图或与图标相对应的设置屏幕。
⑤	单击工具栏中的一个按钮以显示并运行与该按钮相对应的窗口。

注意

可以使用 [视图] 菜单显示或隐藏工具栏和助手栏。

■ 窗口类型和工具栏（按钮）

“LC 实时分析”和“LC 再解析”有以下窗口和功能栏。

	LC 实时分析	LC 再解析	LC 浏览器
应用程序窗口	[数据采集]	[数据分析] (LC/PDA) [LC 数据比较] [UV 库编辑器]	[定量浏览器] [数据浏览器]
		[校准曲线]	
	[批处理表]		
	[报告]		
公共窗口 / 栏	 [仪器控制栏] (通过菜单切换)		
	 (数据管理器)  (输出窗口)  (助手栏) [工具栏] / [项目栏] (通过菜单切换)		

注意

- 只有应用程序窗口有其工具栏和菜单。
- 显示的菜单根据激活的应用程序窗口不同而异。

10.1.2 显示应用程序窗口

可以使用以下方法显示应用程序窗口。

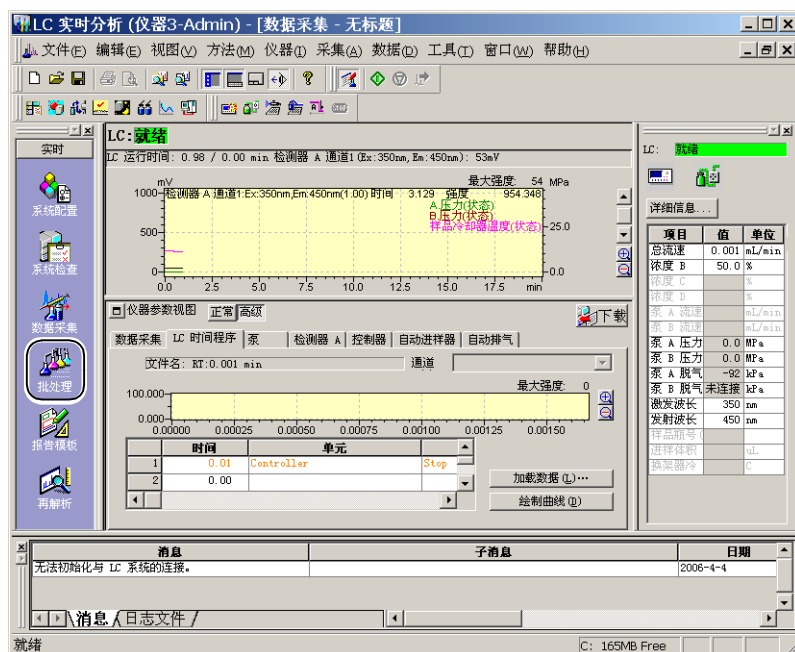
- 显示助手栏
- 从 [窗口] 菜单中的 [显示窗口] 启动
- 双击 [数据管理器] 中的文件

■ 使用助手栏

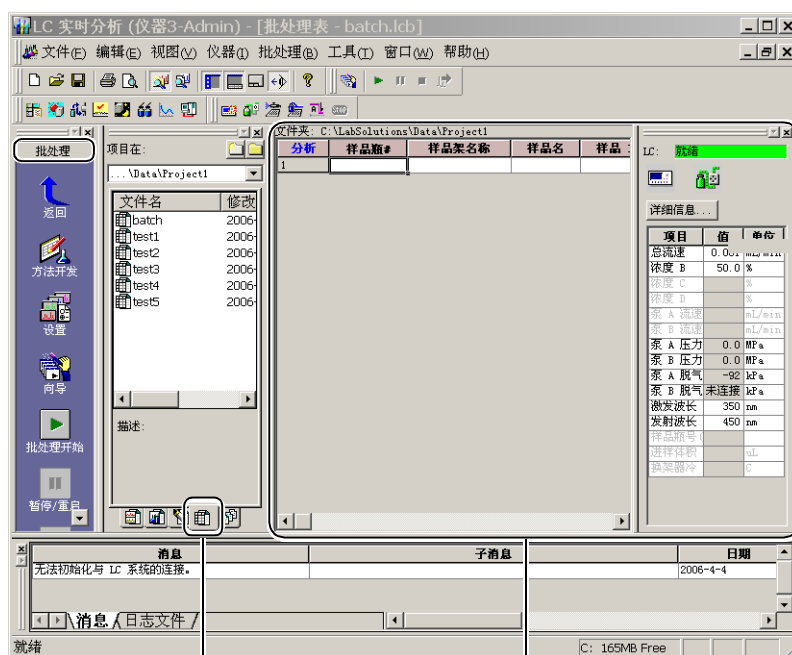
如果在助手栏中单击一个图标，则出现与其相对应的应用程序窗口，并自动切换 [数据管理器] 的文件标签。

(示例) 显示 [批处理表] 窗口。

单击“LC 实时分析”中 [实时] 助手栏的  (批处理) 图标。



出现 [批处理表] 窗口，并且 [数据管理器] 显示 [批处理] 标签。将助手栏切换至 [批处理]。

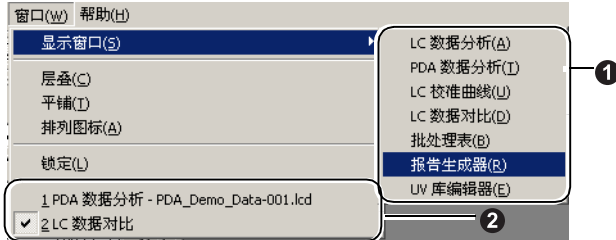


[批处理] 标签

批处理表

■ 从 [窗口] 菜单中的 [显示窗口] 启动

从 [窗口] 菜单中选择 [显示窗口]，然后选择要在子菜单中显示的应用程序窗口。出现选定的应用程序窗口。




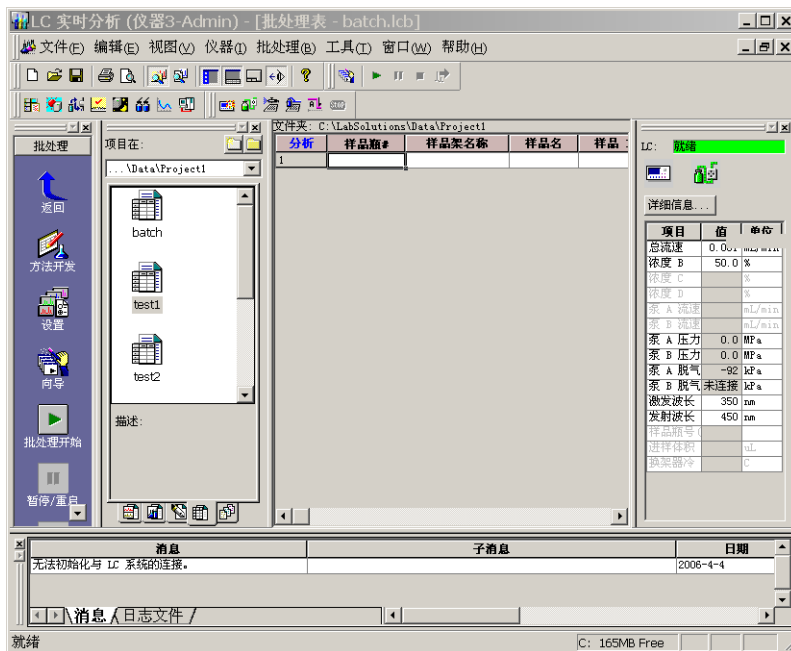
编号	名称	描述
①	[显示窗口] 的子菜单	显示要启动的应用程序窗口。如果应用程序窗口已经启动，并且要切换窗口，则从 [显示窗口] 子菜单中选择该窗口。
②	用于切换窗口的菜单	可以在已启动的应用程序窗口之间切换。

■ 双击 [数据管理器] 中的文件

双击 [数据管理器] 中的文件，然后打开已经加载文件的应用程序窗口。

(示例) 显示 [批处理表] 窗口。

如果在 [数据管理器] 中双击  (test.lcb) 图标，则出现已经加载 “test.lcb” 数据的 [批处理] 窗口。



10.2 定制窗口

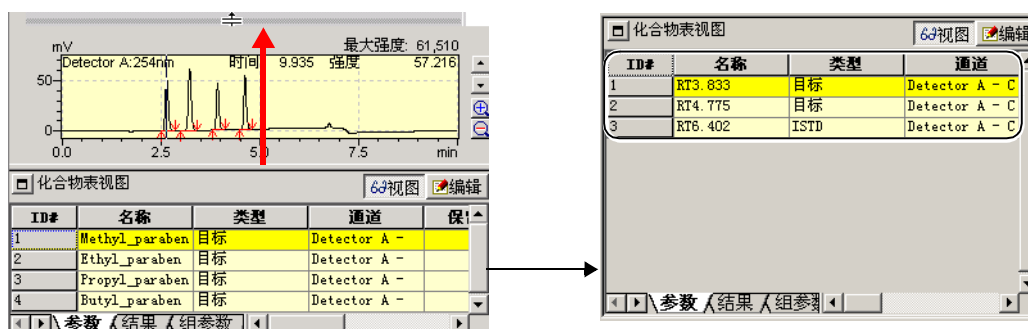
在应用程序窗口中，可以更改应用程序窗口和公共窗口的视图大小和显示格式。

10.2.1 更改视图大小

特定的应用程序窗口有几个使用分隔线（框）分隔的“视图”。可以更改视图大小。

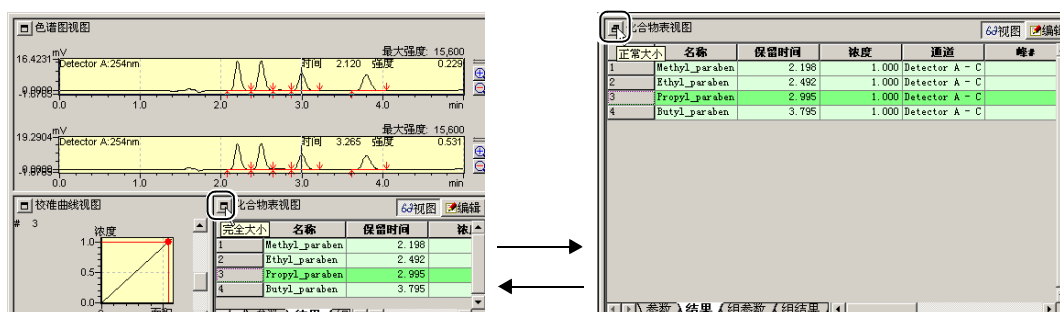
■ 拖动分隔框以更改大小

可以将分隔框拖至选择的位置以更改视图大小。



■ 单击视图中的 （最大化/还原）按钮

当单击每个视图左上方的 （最大化/还原）按钮时，就会放大视图。再次单击该按钮以还原其大小。



10

10.2.2 更改应用程序窗口的显示格式

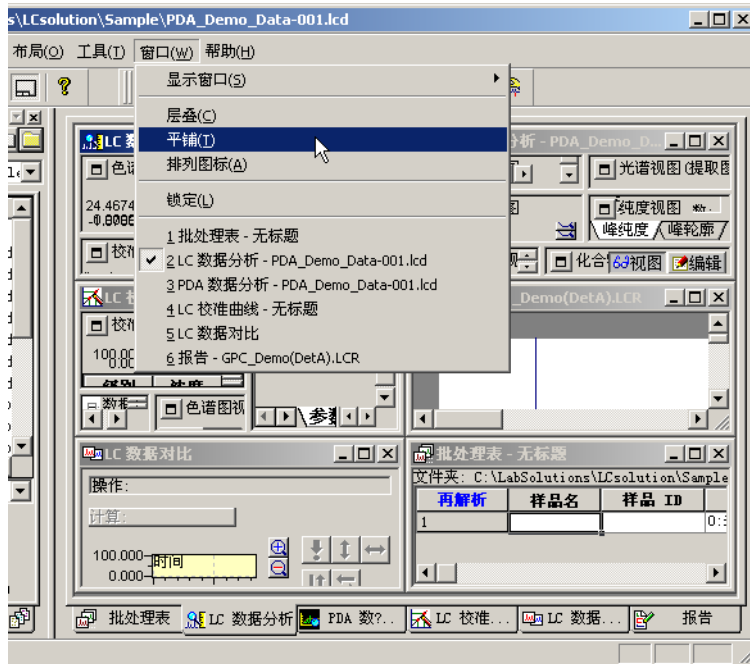
当打开多个应用程序窗口时，可以更改显示格式。

■ 显示多个窗口

可以在不同窗口中显示多个应用程序。

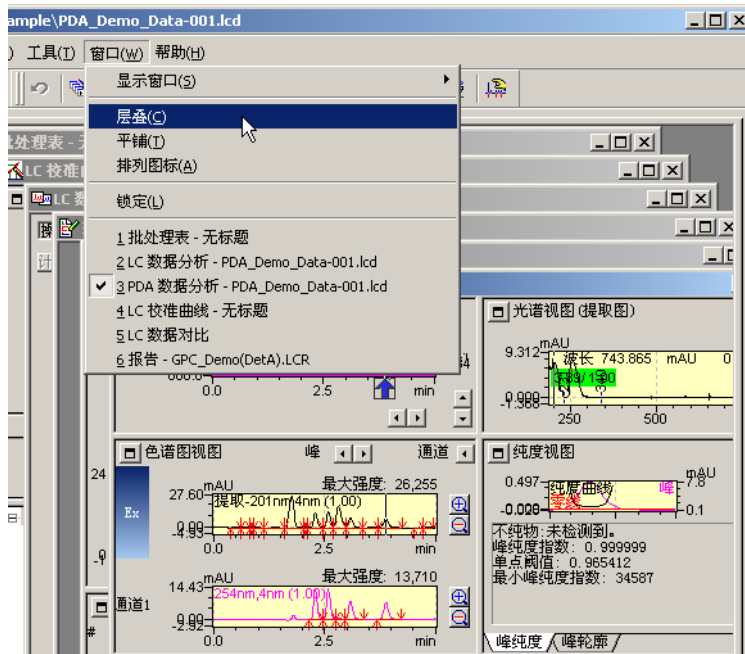
■ 平铺窗口

通过从 [窗口] 菜单中选择 [平铺], 平铺窗口。




■ 层叠窗口

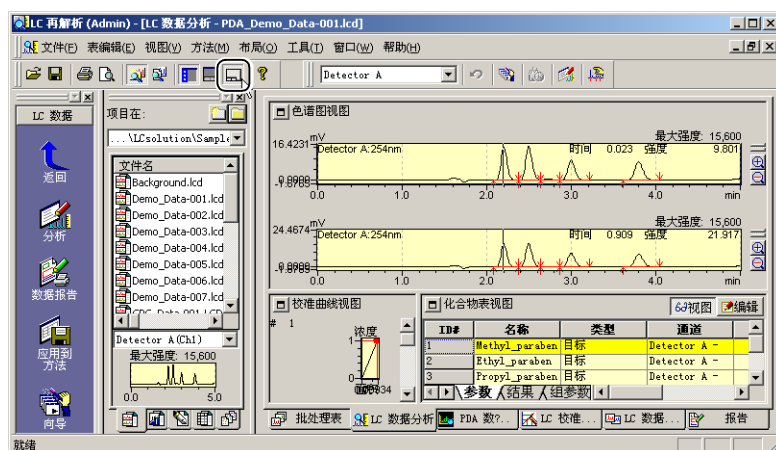
通过从 [窗口] 菜单中选择 [层叠], 层叠窗口。



■ 使用标签控制显示多个窗口

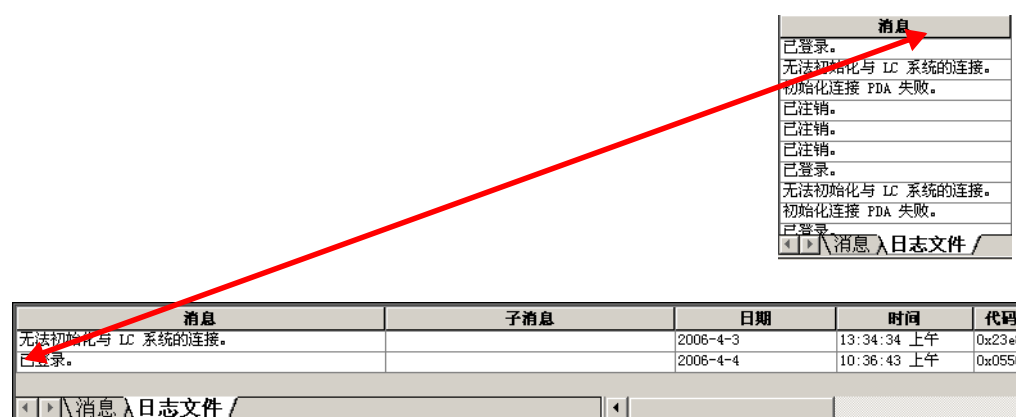
使用标签可以切换多个应用程序窗口。

通过单击工具栏中的  (切换标签控制) 按钮, 可以按标签控制格式显示窗口。



10.2.3 更改公共窗口的显示格式

有两个适用于公共窗口的显示格式选项; 常规的“窗口显示”格式和“对接显示”格式 (显示窗口的部分框)。通过在公共窗口中拖动标题栏或双击标题栏, 可以在对接显示和窗口显示之间切换。



注意

通过拖动或双击某一区域而不是拖动或双击工具栏的图标, 可以在对接显示和窗口显示之间切换工具栏。

本页空白。

11

表的一般操作

在 [化合物表] 和批处理表中，使用表处理数据。本章介绍了对所有表的共同操作。

注意

- 可以使用与商业电子表格相同的方式操作表格。
- 本章以我们的姐妹产品 GCsolution 为例，说明了如何操作化合物表，但是两个产品的基本操作相同。

11.1 选择表列

表列按以下方式配置。

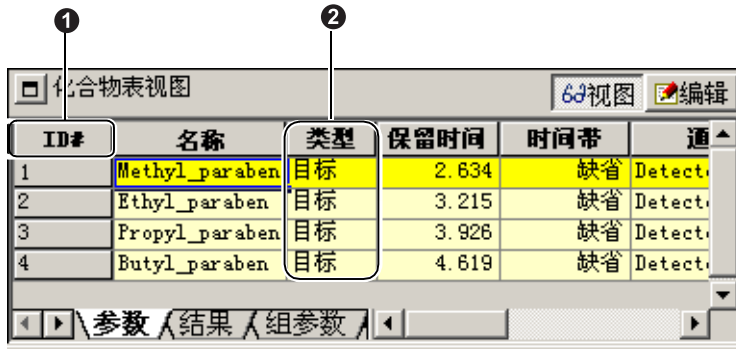
ID#	名称	类型	保留时间	时间带	通
1	Methyl_paraben	目标	2.634	缺省	Detect
2	Ethyl_paraben	目标	3.215	缺省	Detect
3	Propyl_paraben	目标	3.926	缺省	Detect
4	Butyl_paraben	目标	4.619	缺省	Detect

编号	描述
①	表中最左边的灰色列称为“行数列”。行数列既不能被删除也不能被移动。
②	垂直的单元格组称为“表列”。
③	显示项目标题的单元格称为“标题单元格”。
④	组成表的输入字段称为“单元格”。

下面开始介绍使用表列的操作。

11.1.1 选择表列

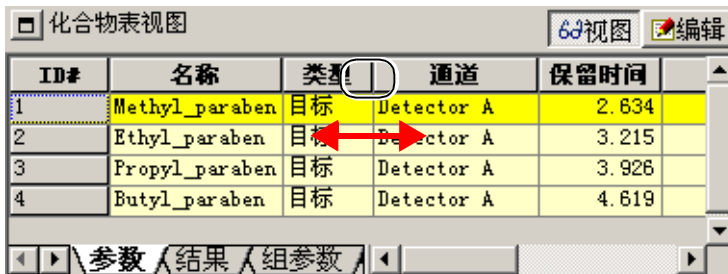
要选择表列，应遵循以下说明。



编号	描述
①	整个表可以通过单击行号列的标题单元格选取。
②	<p>要选择一个表列，单击该列的标题单元格。</p> <ul style="list-style-type: none"> 如果要选择相邻的多个列，拖动光标到您要选择的最后一个标题单元格，或在按住 [Shift] 键的同时单击标题单元格。 当选择多个不连续的列时，在按住 [Ctrl] 键的同时单击要选择的标题单元格。

11.1.2 更改表列宽度

当鼠标光标移动到两个标题之间的边界时，光标变为下图显示的形状。可以向左或向右拖动此光标改变列的宽度。



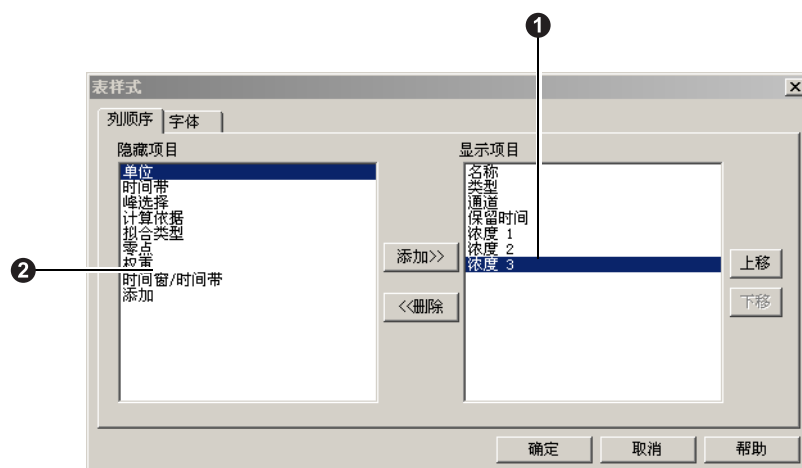
注意

在选择了多个列时拖动鼠标，可以同时调整列的宽度。行号列的宽度也可以更改。（但是不能删除或移动它。）

11.1.3 更改表列的显示（表样式设置 1）

可以设置列显示或隐藏，也可以对项目顺序进行排列。

用鼠标右键单击表，从显示的菜单选择 [表样式]，出现 [表样式] 屏幕。在 [表样式] 屏幕的 [列顺序] 标签中，可以显示或隐藏表列并设置列的显示顺序。



编号	描述
①	在每个表中，[显示项目]列表中的项目按列表中的相同顺序显示。 <ul style="list-style-type: none"> 要更改显示顺序，选择一个项目并单击 [向上] 或 [向下] 按钮。 要隐藏已在表中显示的项目，从列表选择该项目并单击 [删除]。
②	要显示已经隐藏的项目，从 [隐藏项目] 列表选择该项目并单击 [添加]。

注意

- 在 [表样式] 中某些表格式没有 [列顺序] 标签。
- 在设置 [表样式] 时要记住以下几点：
 - 仅显示必需的项目。
 - 把经常使用的字段放在左侧，这样无需滚动即可查看。
 - 尽可能使用小字体以使单元格的宽度最小。
- 如果要选择相邻的多个列，拖动光标到您要选择的最后一项，或在按住 [Shift] 键的同时单击该项。当选择多个不连续的项时，在按住 [Ctrl] 键的同时单击要选择的项。
- 如果在选择了多个项目的同时单击 [添加] 或 [删除]，这些项目将被一起添加或删除。
- 当双击 [隐藏项目] 列表中的项时，将把它移动到 [显示项目] 列表。当双击 [显示项目] 列表中的项时，将把它移动到 [隐藏项目] 列表。

11.2 操作表行

表行按以下方式配置。

ID#	名称	类型	保留时间	时间带	通道
1	Methyl_paraben	目标	2.634	缺省	Detecto
2	Ethyl_paraben	目标	3.215	缺省	Detecto
3	Propyl_paraben	目标	3.926	缺省	Detecto
4	Butyl_paraben	目标	4.619	缺省	Detecto

编号	描述
①	最上方的灰色行称为“标题”行。标题行不能删除。
②	水平的单元格组称为“表行”。
③	组成表的输入字段称为“单元格”。
④	显示行号的单元格称为“行号单元格”。

下面开始介绍使用表行的操作。

11.2.1 选择表行

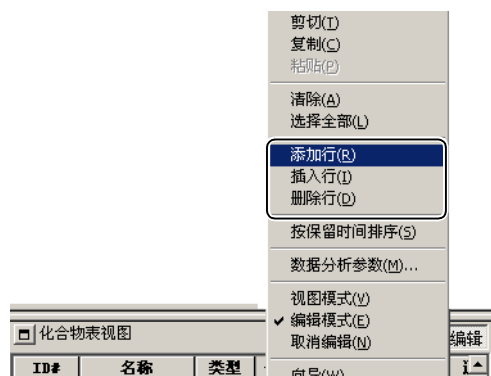
要选择表行，应遵循以下说明。

ID#	名称	类型	通道	保留时间	时间带
1	Methyl_paraben	目标	Detecto	2.636	缺省
2	Ethyl_paraben	目标	Detecto	3.217	缺省
3	Propyl_paraben	目标	Detecto	3.927	缺省
4	Butyl_paraben	目标	Detecto	4.620	缺省

编号	描述
①	整个表可以通过单击“行号列”的标题单元格选取。
②	要选择一个表行，单击该行的行号单元格。 <ul style="list-style-type: none"> 如果要选择相邻的多个行，拖动光标到您要选择的最后一个行号单元格，或在按住 [Shift] 键的同时单击行号单元格。 当选择多个不连续的行时，在按住 [Ctrl] 键的同时单击要选择的行号单元格。

11.2.2 添加或删除表行

在表上单击鼠标右键，出现弹出菜单。



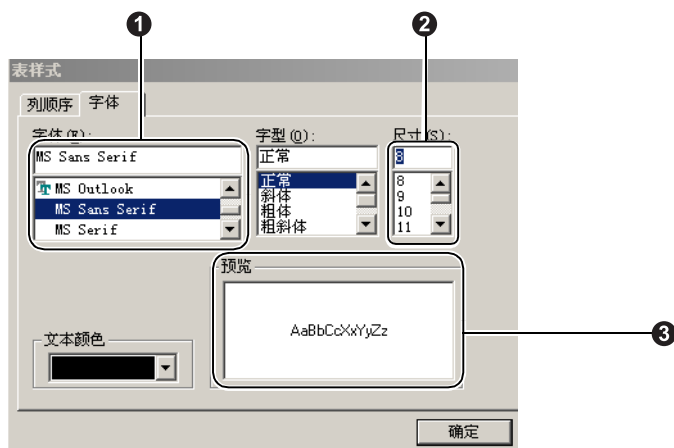
- [添加行]: 在表的底端添加新的一行。
- [插入行]: 在选定行的上面插入新的一行。
- [删除行]: 删除选定的行。

注意

如果不在编辑模式中，单击表右上角的 [编辑] 并切换到编辑模式。

11.2.3 更改表中显示的行数（表样式设置 2）

您可以通过更改表中文本的字体和字体大小，改变屏幕上可显示的信息量（行数）。用鼠标右键单击表，从显示的菜单选择 [表样式]，出现 [表样式] 屏幕。可以在 [表样式] 屏幕的 [字体] 标签中更改字体及字体大小的设置。



编号	描述
①	选择字体。
②	选择字体大小。
③	可以查看选定字体的式样。

在设置时需牢记的要点

- 尽可能选择较小的字体。
- 选择即使在小字号下也容易观看的字体。

注意

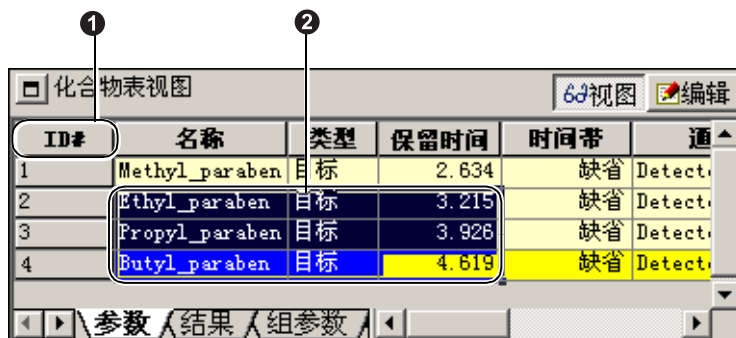
- 可以不指定行数。
- 单元格（行）的高度会自动调整以适应字体大小。当设置了较小的字体时，则增加了可显示的行数。
- 即使更改字体大小，单元格宽度也不会改变。有关更改单元格宽度的详细信息，请参见第 160 页的“11.1.2 更改表列宽度”。

11.3 编辑单元格

本节介绍了如何编辑单元格。

11.3.1 选择多个单元格

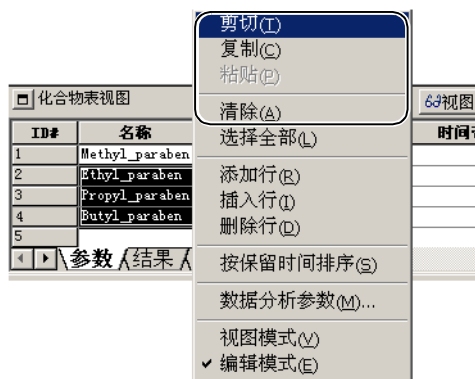
可使用下列一种方法选择多个单元格。



编号	描述
①	要选择整个表，单击行号列中的标题单元格。
②	要选择单元格，沿四边形对角线方向拖动光标，将要选择的单元格包括在内。或者在按住 [Shift] 键的同时，单击对角方向的两个单元格。

11.3.2 编辑单元格内容

可以复制、剪切、粘贴或清除单元格的内容。用鼠标右键单击单元格，并从显示的菜单中选择一项操作。



菜单项	描述
剪切	将选定范围复制到剪贴板，并删除原始数据。
复制	将选定范围复制到剪贴板，保留原始数据。
粘贴	粘贴剪贴板的内容到选定范围中。
将表复制到剪贴板	将整个表复制到剪贴板。
清除	清除选定的范围（不复制到剪贴板）。

注意



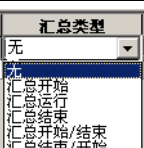



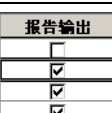

- 如果处于 [显示] 模式，单击表右上角的 [编辑] 切换到 [编辑] 模式。
- 在粘贴操作中，如果目标小于原内容，那么实际粘贴的范围由原内容确定。如果目标大于原内容，则重复粘贴原内容。
- 已经复制到剪贴板中的内容可以粘贴到 Microsoft Excel 等电子表格软件中。

11.4 设置单元格中的值

本节介绍了在使用 [批处理表] 窗口时如何设置单元格的值。

11.4.1 用特殊的输入格式设置单元格中的值

对于大多数单元格来说，您可以直接从键盘输入值，但是对于要求特殊输入格式的单元格，请使用以下方法。

类型	示例	操作步骤
弹出窗口类型 (对于复杂的设置)		在选择单元格后，单击右侧出现的  ，显示出该单元格相应的设置窗口。在显示的窗口中设置值。
下拉列表类型 (从选项中选择)		选择一个单元格并单击右侧出现的  ，显示出选项列表。单击列表中的选项继续设置。
旋转输入类型 (输入特定的数字值)		选择一个单元格并单击  ，按给定的“步长值”更改数字值。如果要更改的值增加 / 减小量较小，应直接在单元格中输入该数字值。
复选框类型 (设置打开 / 关闭)		单击复选框在框中放置选中标记（打开）。再次单击以移除选中标记（关闭）。
双击类型 (打开文件)		在 [批处理表] 窗口中双击单元格中的任意空白部分，可打开选定的数据文件或方法文件。

数据文件内容的简单查看

如果在“LC 再解析”中同时显示了 [批处理表] 窗口和 [数据分析] 窗口，那么可以简单地通过双击相邻 [数据文件] 列的空白部分查看每个批处理行设置的数据文件内容。

The screenshot shows the LabSolutions/LCsolution software interface. The main window is titled "LC 再解析 (yao-jianquo) - C:\LabSolutions\LCsolution\Sample\Demo_Data-004.lcd". It features a menu bar (文件(F), 表编辑(E), 视图(V), 方法(M), 布局(O), 工具(T), 窗口(W), 帮助(H)), a toolbar, and a sidebar with navigation icons. The central area displays a "批处理表 - Demo_Batch.lcd" table with the following data:

再解析	样品名	样品 ID	数据文件	方法文件	级别#
1	STD	1	Demo_Data-001.lcd	Demo_Method.lcd	1
2	STD	2	Demo_Data-002.lcd	Demo_Method.lcd	2
3	STD	3	Demo_Data-003.lcd	Demo_Method.lcd	3
4	UNK	1001	Demo_Data-004.lcd	Demo_Method.lcd	0

Below the table, the "LC 数据分析 - Demo_Data-004.lcd" window is open, showing two chromatograms. The top chromatogram is titled "Detector A: 254nm" and shows a peak at 8.884 minutes with a maximum intensity of 46,660. The bottom chromatogram is also titled "Detector A: 254nm" and shows a peak at 9.290 minutes with a maximum intensity of 15,541. Callout '1' points to the blank space between the '数据文件' and '方法文件' columns in the table. Callout '2' points to the chromatogram plot area.

编号	描述
①	双击连续单元格的空白部分。
②	显示数据文件的内容。

12


文件一般操作

本章介绍了如何在应用程序窗口和 [数据管理器] 中处理文件，以及进行有效文件管理的基本操作。

12.1 在应用程序窗口中的文件操作

在应用程序窗口中，使用工具栏中的按钮处理文件。





12.1.1 创建新文件

1 单击工具栏中的  (新建) 按钮。



为应用程序窗口创建新文件。


在应用程序窗口中，可以创建以下新文件。

-  (批处理表) 文件
-  (报告格式) 文件
-  (方法) 文件 (可以在 [数据采集] 窗口和 [LC 校准曲线] 窗口中作为新文件创建)
-  (数据) 文件 (仅在采集数据时创建)

注意

- 在“LC 再解析”的 [LC 数据分析] 窗口或 [LC 数据比较] 窗口中，不能创建新文件。
- 对于批处理表文件和方法文件，可以使用模板创建新文件。此外，还可以固定一个模板，以便在每次创建新文件时都使用同一个模板。有关使用模板的信息，请参见 LCsolution 管理说明书的第 31 页中的 3.3 使用模板。
- 在“LC 再解析”的 [UV 库编辑器] 窗口中创建新文件时，创建一个库文件 (扩展名为 *.lib)。

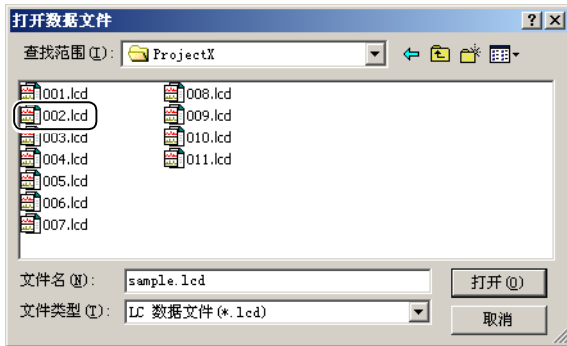
12.1.2 打开文件

- 1** 单击工具栏中的  (打开) 按钮。



出现 [打开文件] 屏幕。

- 2** 选择文件名并单击 [打开]。







注意

还支持我们现有产品的文件格式。在 [文件类型] 中选择文件格式。

打开选定的文件。


在应用程序窗口中可以打开以下文件。

-  (数据) 文件 (可以在 [数据分析] 窗口和 [LC 数据比较] 窗口中打开。)
-  (批处理表) 文件
-  (报告格式) 文件
-  (方法) 文件 (可以在 [数据采集] 窗口和 [LC 校准曲线] 窗口中打开)

注意

一般来说，在应用程序窗口中，可以打开的文件类型与可以新建的文件类型相同。因此，要将不同的文件导入到基本文件中（例如，要将数据文件导入到报告格式文件中），必须用鼠标拖放该文件。

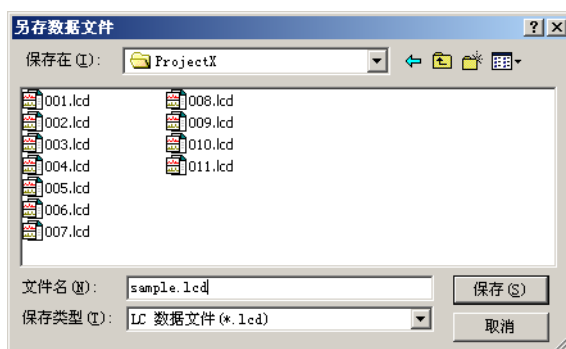
12.1.3 保存文件

- 1 单击工具栏中的 （保存）按钮。



如果已命名了文件（例如，一个现有文件），则使用应用程序窗口的更新信息覆盖它。如果文件是“未命名”（例如新文件），则出现 [文件另存为] 窗口。

- 2 在 [文件名] 字段中输入文件名并单击 [保存]。
要指定文件格式，在 [保存类型] 中选择文件格式。



保存文件。

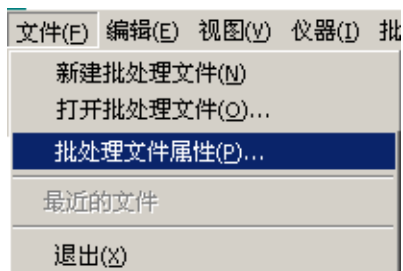
注意

- 在更改文件内容之后关闭文件或窗口时，或创建一个新文件后，都会出现一个屏幕，提示用户确定是否保存文件。
- 这时，通过选择 [文件] 菜单的 [文件另存为]，可以使用新名称保存文件。

12.1.4 查看文件历史记录

可以查看包括创建日期和修改日期在内的文件历史记录。

- 1 在打开文件时，从 [文件] 菜单选择 [批处理文件属性]。



出现 [属性] 屏幕。

根据文件类型不同，显示的项目也有所不同。


	批处理	报告	方法	数据	库	描述 / 附加信息
文件信息	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	文件类型、创建人、创建日期和修改日期等等。
描述	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	用作文件搜索关键字。
审查追踪			<input type="radio"/>			指定是否在方法文件和 / 或数据的方法中记录更新的日志。
样品信息				<input type="radio"/>		数据采集时的样品信息（样品名称、样品 ID 等等）。
原始文件				<input type="radio"/>		列出了用于分析的方法和批处理、最新使用的方法、批处理和报告格式等等。

12.2 有效的文件管理

在 [LC 实时分析] 窗口和 [LC 再解析] 窗口中，可以使用 [数据管理器] 管理文件。

12.2.1 使用 [数据管理器]

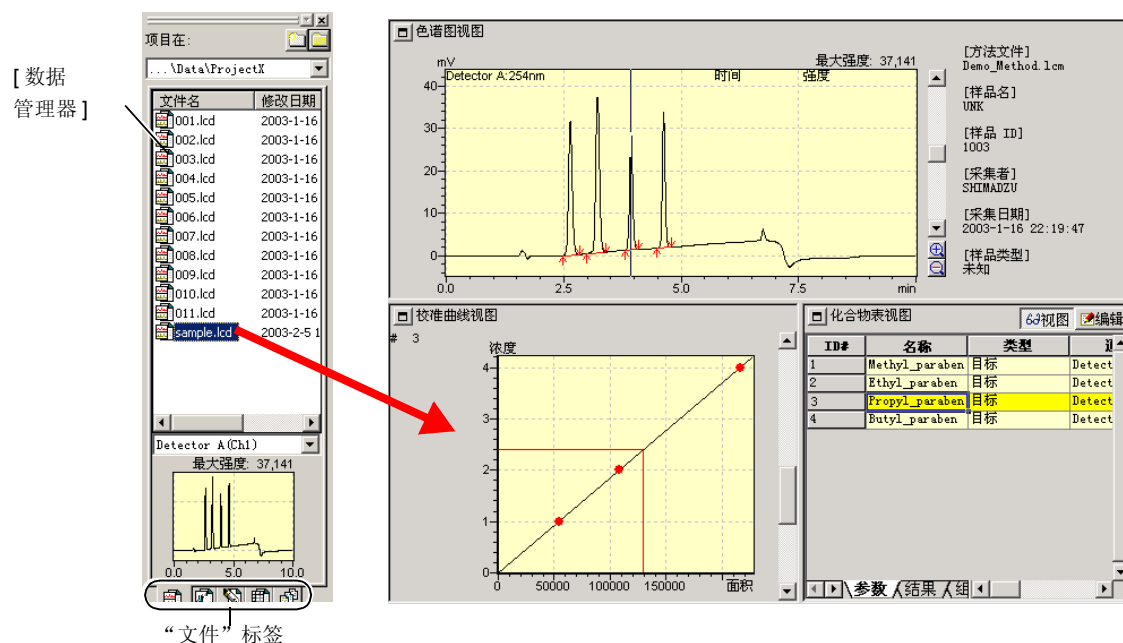
■ 显示 [数据管理器]

单击工具栏中的 （切换数据管理器）按钮。单击按钮以相应地显示和隐藏 [数据管理器]。



■ 显示 [数据管理器]

用鼠标将文件从 [数据管理器] 中拖放到应用程序窗口。



选择 [数据管理器] 底部的文件标签，按类型显示文件。

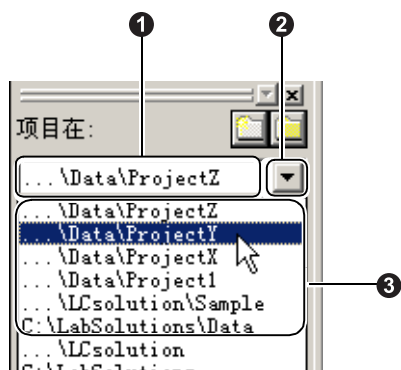
“文件” 标签	文件类型
(数据)	数据文件 (扩展名 .lcd)
(方法)	方法文件 (扩展名 .lcm)
(报告)	报告格式文件 (扩展名 .lcr)
(批处理)	批处理文件 (扩展名 .lcb)
(所有文件)	所有文件

12.2.2 项目

在 [数据管理器] 中，文件夹亦称为“项目”，按照项目管理文件。通常，在 LCsolution 中，各种类型的所有文件都放置在一个项目（文件夹）中，并使用 [数据管理器] 的文件文件标签按文件类型进行管理。当前正在使用的项目称为“参照项目”，其中包括：

- 包含当前打开的方法文件（在单次分析的情况下）的文件夹
- 包含当前打开的批处理文件（在批处理分析的情况下）的文件夹
- 在 [数据管理器] 的 [项目列表] 中显示的文件夹（除上述两种情况外）

可以使用 [项目 (文件夹) 选择] 图标或 [项目在] 列表切换参照项目。



编号	描述
①	显示参照项目的名称。
②	单击以切换参照项目。
③	最多显示十个当前使用的項目。

注意

安装本软件时，创建一个名为“项目 1”的空项目（文件夹）。

■ 参照项目的适用范围

参照项目适用于每个程序窗口中的所有范围。例如，在 [打开文件] 屏幕中，首先总是出现参照项目（文件夹）。此外，如果指定参照项目中的文件，则它被当作参照项目中的文件，而非特定文件夹中的文件。如果指定了非参照项目的文件夹中的文件，则文件名使用完整路径的文件名表示。


(示例) 对于批处理表



编号	描述
①	参照项目中的文件
②	参照项目以外文件

12.2.3 创建新项目（文件夹）

可以使用 [数据管理器] 创建新项目（文件夹）。

1 单击  (创建新项目 (文件夹)) 按钮。



出现 [创建新项目 (文件夹)] 屏幕。

2 设置每一项并单击 [确定]。



编号	描述
①	输入新项目的名称。
②	如果选中这些框中的任何框，则可以将参照项目中所用的文件复制到新项目中。
③	单击 [确定]。

创建新项目（文件夹）。

■ 使用项目管理文件的优点


- 当在批处理表中指定参照项目中的方法文件时，如果同时将批处理文件和方法文件一起复制到新的项目中，则仅能够通过新建项目来维护文件之间的参照关系。
- 如果要将一组文件（例如方法文件、批处理文件、报告格式等）复制到新项目中，则仅能够通过参照新项目来使用这些文件，即使由于硬盘空间不足删除了源项目。
- 在删除文件前按项目对文件进行备份，以便日后可以轻松地重新创建项目的环境。
- 对其他项目的分析条件进行更改不会影响参照项目中设置的分析条件。

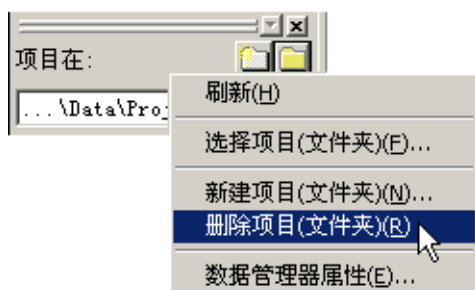
12.2.4 删除项目（文件夹）

可以使用 [数据管理器] 删除不再需要的项目（文件夹）。

注意

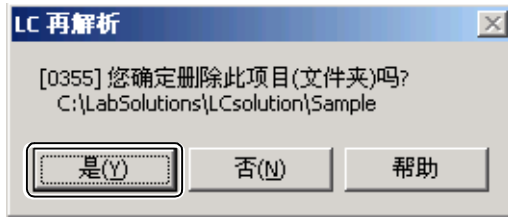
要删除文件夹，首先必须删除它里面的所有文件，以清空它。

- 1 用鼠标右键单击 （创建新项目（文件夹））按钮左侧的空白处，从显示的菜单中选择 [删除项目（文件夹）]。



出现确认消息。

2 单击 [是]。



删除项目。

12.3 [数据管理器] 中的文件操作

在 [数据管理器] 中，使用文件进行的操作与在应用程序窗口中使用的操作类似。

12.3.1 打开文件

使用以下方式从 [数据管理器] 打开现有的文件。

■ 通过双击打开文件

双击 [数据管理器] 中的文件。

激活打开文件的应用程序窗口，显示文件内容。根据文件类型的不同，出现以下窗口。

文件类型	窗口类型	程序
方法文件	[数据采集]	“LC 实时分析”
	[LC 校准曲线]	“LC 再解析”
数据文件	[LC 数据分析]	两者
库文件	[UV 库编辑器]	
批处理文件	[批处理表]	两者
报告格式文件	[报告]	

■ 通过用鼠标拖放打开文件

用鼠标将要打开的文件的图标从 [数据管理器] 中拖放到应用程序窗口中。

通过拖放打开文件的操作，与执行列出每一文件类型的操作效果类似。

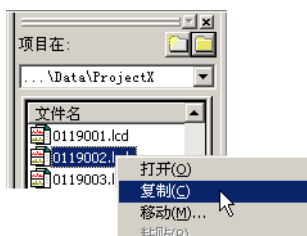
文件类型	放至	等于
方法文件	[数据采集]	[文件] - [打开方法文件]
	[LC 校准曲线]	[文件] - [打开方法文件]
	[LC 数据分析]	[文件] - [加载方法参数]
数据文件	[LC 数据分析]	[文件] - [打开数据文件]
	[LC 校准曲线]*	[数据] - [添加]
	[LC 数据比较]	[文件] - [打开] - [添加数据文件]
	[批处理表]	[编辑] - [按选定的数据文件添加行]
	[报告]	[文件] - [加载数据文件]
库文件	[UV 库编辑器]	[文件] - [打开库文件]
批处理文件	[批处理表]	[文件] - [打开批处理文件]
报告格式文件	[报告]	[文件] - [打开报告格式文件]

* 放到数据树视图中。

12.3.2 复制文件

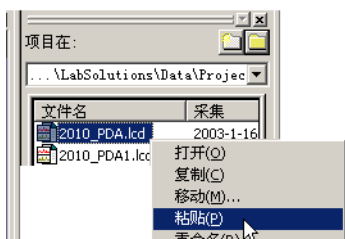
可以在 [数据管理器] 中复制文件。

- 1 用鼠标右键单击源项目中的文件，从显示的菜单中选择 [复制]。



- 2 将参照项目切换到目标项目。
单击项目名称右侧的箭头，从列表中选择目标项目。

- 3 用鼠标右键在文件列表上单击，从显示的菜单中选择 [粘贴]。



复制文件。



注意
在 [数据管理器] 与 “Windows 资源管理器” 之间，也可以使用拖放操作复制文件。如果源和目标在同一驱动器上，则在按住 [Ctrl] 键的同时拖放文件。

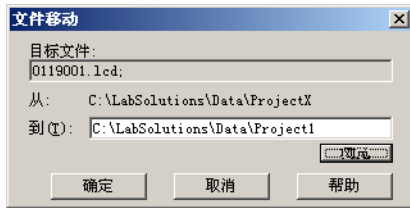
12.3.3 移动文件

可以在 [数据管理器] 中移动文件。

- 1 用鼠标右键单击源项目中的文件，从显示的菜单中选择 [移动]。



出现 [文件移动] 屏幕。



2 指定要将文件移至的目标并单击 [确定]。

移动文件。

也可以单击 [浏览] 从列表中选择目标。

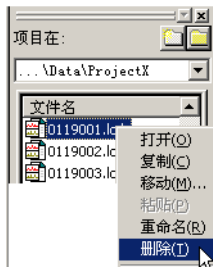
注意

在 [数据管理器] 与 “Windows 资源管理器” 之间，也可以使用拖放操作移动文件。如果源和目标在不同的驱动器上，则在按住 [Shift] 键的同时拖放文件。

12.3.4 删除文件

可以在 [数据管理器] 中删除文件。

1 用鼠标右键单击要删除的文件，从显示的菜单中选择 [删除]。



出现确认消息。



2 单击 [是]。

删除文件。

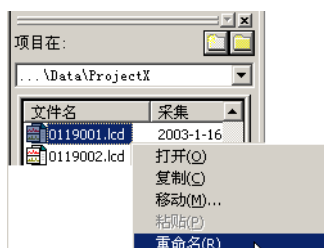
注意

- 如果误删除了文件，请双击桌面上的 [回收站]，选择删除的文件，然后从 [文件] 菜单中选择 [还原]，将文件移回最初的位置。
- 如果从 [回收站] 的 [文件] 菜单中选择 [清空回收站]，则从硬盘上删除 [回收站] 中的所有文件，无法再还原。

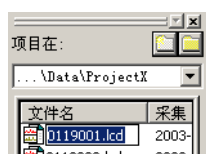
12.3.5 重命名文件

可以在 [数据管理器] 中重命名文件。

- 1 用鼠标右键单击要重命名的文件，从显示的菜单中选择 [重命名]。



- 2 输入新名称并按 [输入]。



重命名文件。

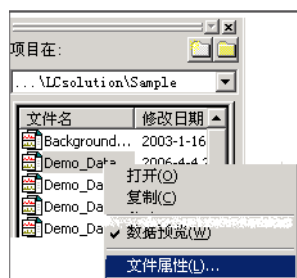


请不要更改文件扩展名（例如 .lcd）。

12.3.6 查看文件历史记录

可以在 [数据管理器] 中查看文件的历史记录，包括创建日期、修改日期等。

- 1 用鼠标右键单击要查看其历史记录的文件，从显示的菜单中选择 [文件属性]。



出现 [属性] 屏幕。



注意

与应用程序窗口的 [文件] 菜单中的 [文件属性] 不同，显示文件的一般属性。

12.3.7 转换文件格式

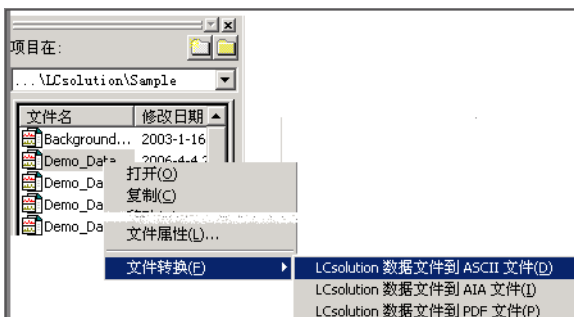
通过在 [数据管理器] 中转换文件格式，可以在其他应用程序或程序中使用本软件的数据。

1 在 [数据管理器] 中，用鼠标右键单击要转换的文件，从显示的菜单中选择 [文件转换]，并从子菜单中选择文件格式。

注意

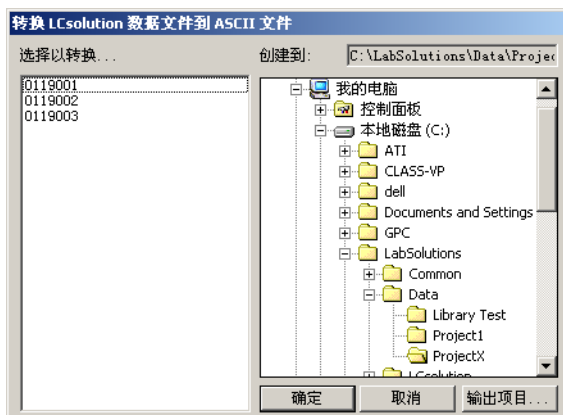
- 如果要选择连续的多个文件，将光标拖至要选择的最后一个文件，或者在按住 [Shift] 键的同时单击文件。
- 如果要逐个地选择多个文件，在按住 [Ctrl] 键的同时单击每个文件。

下面，以选择 [LCsolution 数据文件到 ASCII 文件] 作为示例。



出现 [转换 LCsolution 数据文件到 ASCII 文件] 屏幕。

2 在 [创建到] 中，选择要将转换的文件复制到其中的目标文件夹，并单击 [确定]。



在指定的文件夹中转换并保存文件。

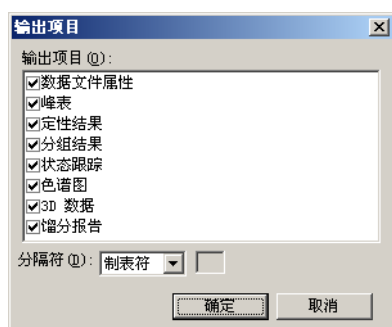
注意

根据目标文件格式，文件的扩展名自动更改。

- LCsolution 数据 / 方法: *.lcd / *.lcm
- AIA ANDI 文件: *.cdf
- ASCII 文件: *.txt
- Acrobat 文件: *.pdf

■ 转换为 ASCII 格式

在将文件转换为 ASCII 格式时，单击转换目标设置屏幕上的 [输出项目]。使用复选框指定是否输出数据文件的每一项。此外，还可以指定行中各个值之间的分隔符。



使用我们现有的产品（CLASS-LC10 或 CLASS-VP）创建的文件，在转换为 LCsolution 文件格式时，转换的目标中将反映以下内容。

源文件格式		转换的文件格式 (LCsolution)	描述
CLASS-LC10	数据文件	数据文件	CLASS-LC10 的数据文件和色谱图文件转换为 LCsolution 数据文件。
	色谱图文件	数据文件	CLASS-LC10 的色谱图文件转换为 LCsolution 数据文件。 ^{*1}
	方法文件	方法文件	CLASS-LC10 方法文件转换为 LCsolution 方法文件。
CLASS-VP	数据文件	数据文件	CLASS-VP 数据文件（包括色谱图文件）转换为 LCsolution 数据文件。
	方法文件	方法文件	CLASS-VP 方法文件转换为 LCsolution 方法文件。 ^{*2}

^{*1} 峰表保留为空白，方法为缺省值。

^{*2} 从 [LC 实时分析] 窗口的 [工具] 菜单中选择 [选项]，并选择与 [选项] 屏幕的 [CLASS-VP 文件转换] 标签中的方法文件相对应的 CLASS-VP 系统配置文件 (Instrument*.cfg)。

13

附录

本章提供了关于以下各项的信息。

- 当操作遇到问题时
- 如何使用 LC 维护实用程序
- 维护 PDA 检测器
- LCsolution 的规格
- LCsolution 的联系信息



13.1 当操作遇到问题时

本软件提供了帮助菜单和在线说明书。如果操作过程中有疑惑，请使用它们以及屏幕上的术语。

13.1.1 使用帮助

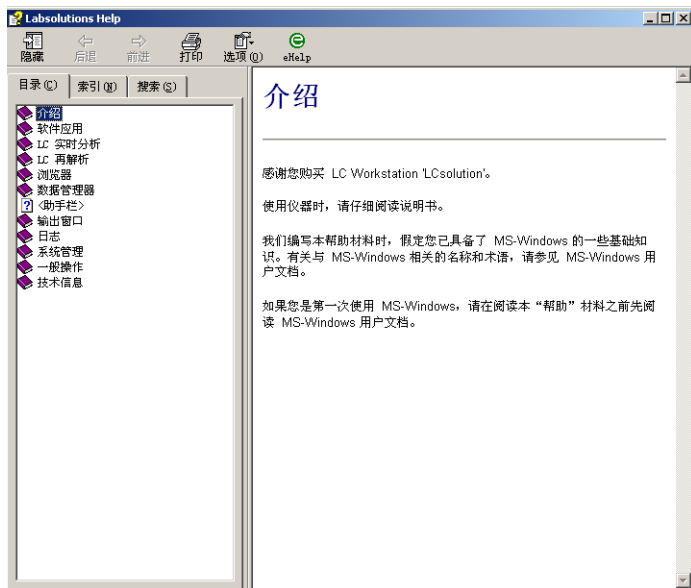
■ 当操作遇到问题时

1 使用以下任意一种方式显示帮助。

- 单击激活的窗口上的 。
- 单击激活的窗口上的 。
- 从 [帮助] 菜单选择 [内容]。
- 按键盘上的 [F1] 键。

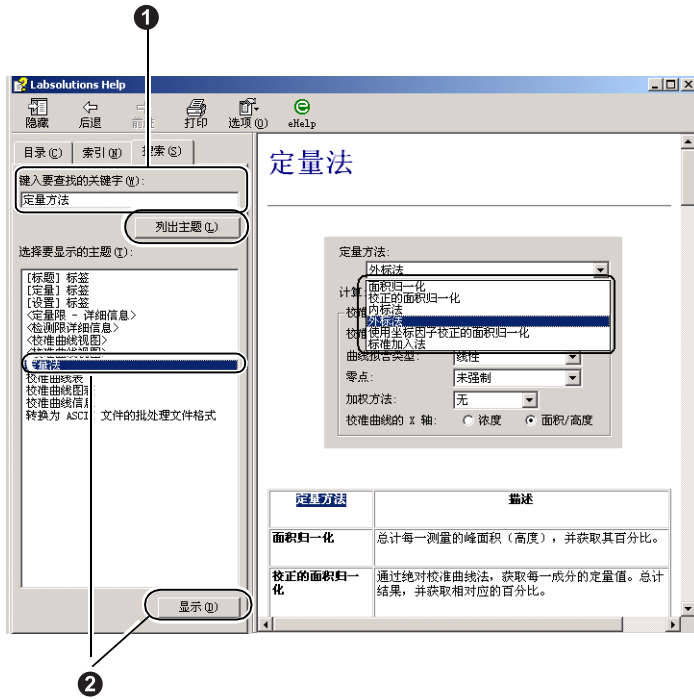
出现与激活的窗口相对应的帮助。

示例：[LabSolutions 帮助] 窗口



■ 对于不熟悉的术语和参数

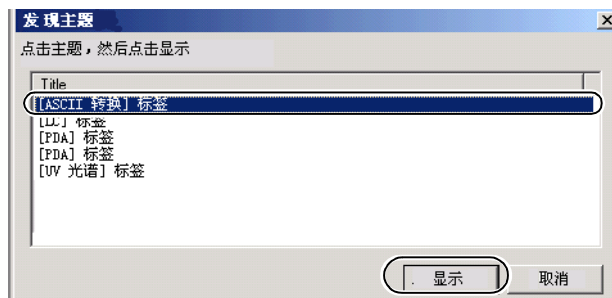
- 1 显示帮助并单击 [搜索] 标签。
- 2 输入要查找的术语，并选择要显示的主题。



编号	描述
1	输入要查找的术语并单击 [列出主题]。列出搜索到的主题。
2	双击要查看的主题或单击 [显示]。显示选定的主题。

注意

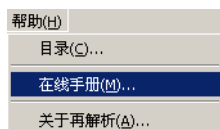
- 还可以使用类似步骤在 [索引] 标签中使用关键字搜索主题
- 对于一个特定关键字，存在多个主题时，显示以下屏幕。选择要查找的术语并单击 [显示]。



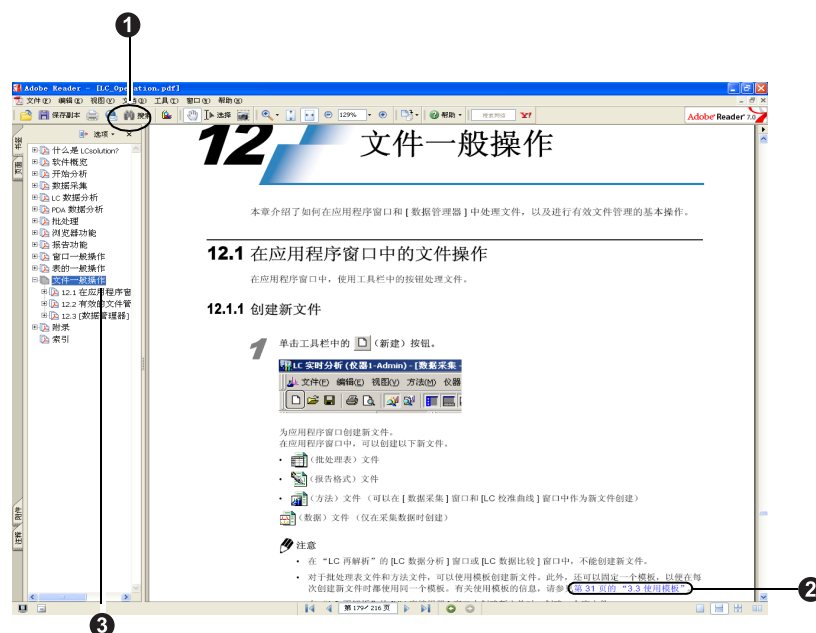
13.1.2 使用在线说明书

可以在屏幕上查看“操作说明书”和“管理说明书”的内容。

1 从 [帮助] 菜单选择 [在线手册]。



启动 Adobe Acrobat® 或 Adobe Acrobat® Reader®, 显示“操作说明书”或“管理说明书”。



编号	描述
①	可以搜索要查找的术语。
②	通过单击蓝色的交叉引用或术语，可以跳转到相关项的页面。
③	通过单击按层次结构排列的书签（目录），可以跳转到所需的页面。

注意

- 要查看在线说明书，需要 Adobe Acrobat® 或 Adobe Reader®（版本 4.0 或更高版本）。
- 在本产品的 CD 中，包含有 Adobe Reader®, 在需要时，请按照以下步骤安装：
 1. 请将提供的 CD 插入计算机。
 2. Lcsolution 安装开始时，单击 [退出] 结束程序。
 3. 双击桌面上 [我的电脑]。
 4. 用鼠标右键单击 CD-ROM 图标并从显示的菜单中选择 [打开]。
 5. 双击 CD 中 Chinese\Acrobat 文件夹下的 AdbeRdrxxx_zh_CN.exe（xxx 是数字，根据版本不同而不同）。
按照屏幕上出现的指导进行安装。
- 有关 Adobe Reader® 及其使用的详细信息，请参见 Adobe Reader® 的在线用户指南或访问 Adobe 的主页。

13.2 如何使用 LC Maintenance Tools

在更换 LC 模块的易损部件时，使用 LC 维护实用程序初始化易损部件的使用记录。在更换易损部件时，运行此程序以初始化记录。

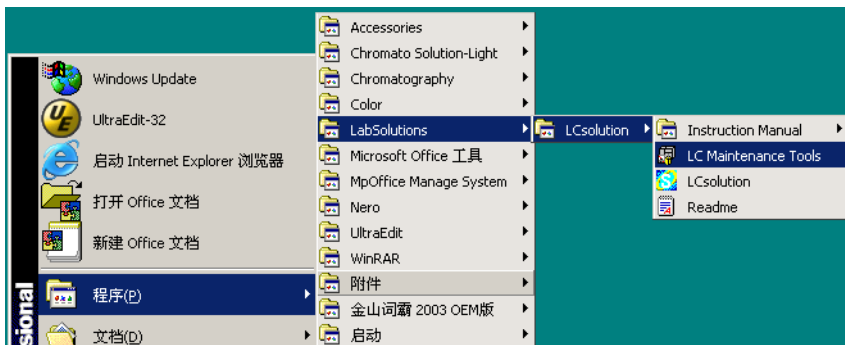
注意

- 此实用程序不能与 LC 实时分析同时使用。
- 对于 SCL-10Avp，ROM 版本应为 5.33 或更高版本。
- 对于 SIL-10ADvp 或 LC-10ADvp/10ATvp，如果使用 ROM 的旧版本，则会初始化主单元上的参数。
- 使用 PDA 实用程序重设 D2 灯和 W 灯的照明时间（小时数）。

1 如果正在为 LC 单元运行 LC 实时分析，但需要初始化该单元的记录，请结束 LC 实时分析程序。

2 使用更换的易损部件和系统控制器打开 LC 单元电源。

3 单击 [开始] 按钮并选择 [程序] - [LabSolutions] - [LCsolution] - [LC Maintenance Tools] (LC Tool Launcher)。

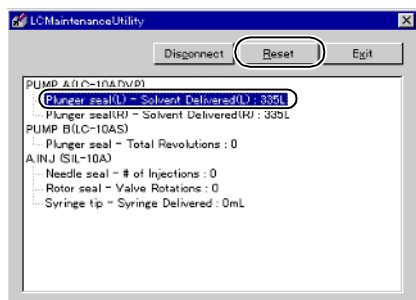


4 在 [应用程序] 中选择 [LC Maintenance Utility]，在 [仪器编号] 中，选择与仪器（有消耗品）连接的的分析仪器，并单击 [运行]。



出现“LC 维护实用程序”。

5 选择要初始化的项目（可更换的易损部件），并单击 [Reset] 按钮。



注意

在 [LC 维护实用程序] 屏幕中，列出了连接到系统控制器的单元的消耗参数及其当前值。

初始化选定的易损部件的使用记录。

6 单击 [Exit] 退出 LC 维护实用程序。

7 单击 [LC Tool Launcher] 屏幕上的 [取消] 退出 LC Tool Launcher。

■ 要初始化的参数列表

LC 单元	要初始化的项目
LC-10AD, LC-10AS, LC-10AT, LC-10Ai	泵总计转数（转数）
LC-10ADvp（ROM 版本 5.26 或更高版本）	溶液传输总体积 (L)
LC-10ATvp（ROM 版本 5.27 或更高版本）	溶液传输总体积 (L)
LC-20AD, LC-20AT, LC-20AB	溶液传输总体积 (L)
SPD-10A, SPD-10Ai, SPD-10Avp	D2 灯照明时间（小时数）
SPD-10AV, SPD-10AVi, SPD-10AVvp	D2 灯和 W 灯照明时间（小时数）
SPD-20A, SPD-20AV	D2 灯和 W 灯照明时间（小时数）
RF-10A, RF-10AXL	Xe 灯照明时间（小时数）
RID-10A	W 灯照明时间（小时数）
CDD-10Asp, CDD-10Avp	切换阀的次数
SIL-10A, SIL-10AF, SIL-10Ai, SIL-10AL, SIL-10AP, SIL-10AXL	注射器总吸入体积 (mL)，阀总转数（转数） 进样次数（次数）
SIL-10ADvp（ROM 版本 5.32 或更高版本）	阀总转数（转数），进样次数（次数）
SIL-20A, SIL-20AC	进样次数（次数），阀总转数（转数），清洗泵操作时间（秒）

注意

不支持 SIL-HT 和 LC-2010。

13.3 维护 PDA 检测器

当发生下列事件时，请检查并调整 PDA（光电二极管阵列）检测器。

安装检测器时	执行波长检查 (D2/Ho)。*
更换灯时	执行曝光时间的自动设置。重设灯总计照明时间。执行波长检查 (D2/Ho)。*
更换池时	执行曝光时间的自动设置。执行波长检查 (D2/Ho)。*
移动检测器时	执行波长检查 (D2/Ho)。*
当软件变更时（变为 CLASS-VP 或从 CLASS-VP 变更）	执行波长校准。（仅 SPD-M10AVP 需要）
进行认证时	执行波长检查 (D2/Ho)。* 检测漏液传感器以及吸光度线性和准确度。

* 如果波长检查的结果是不可接受，则执行波长校准。

使用 PDA 实用程序维护 PDA 检测器。

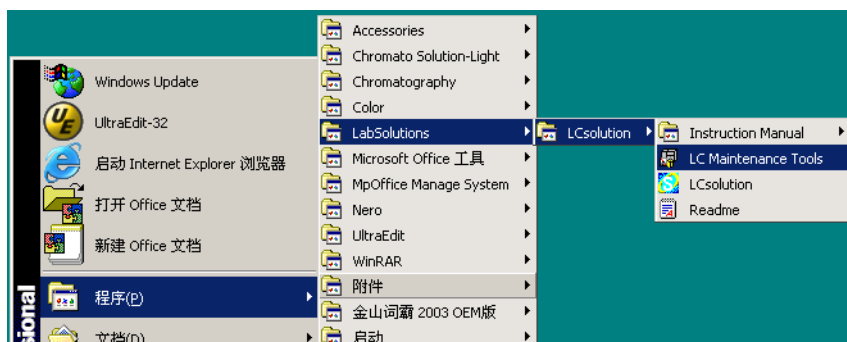
13.3.1 启动 PDA Utility

使用下面列出的步骤启动 PDA 实用程序。

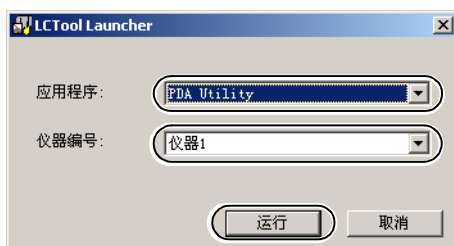


此实用程序不能与 LCsolution 同时使用。

- 1 如果 LCsolution 正在运行，请结束该程序。
- 2 单击 [开始] 按钮并选择 [程序] - [LabSolutions] - [LCsolution] - [LC Maintenance Tools] (LC Tool Launcher)。

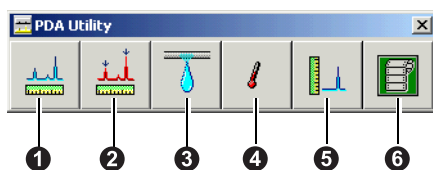


- 3 在 [应用程序] 中选择 [PDA Utility]，在 [仪器编号] 中，选择与要维护的仪器连接的分析仪器，并单击 [运行]。



PDA 实用程序启动。

单击下面的按钮以打开其对应的窗口。



编号	描述
①	波长检查
②	波长校准
③	漏液传感器检查 / 调整
④	池温度检查
⑤	吸光度准确度检查 / 校准
⑥	仪器信息

注意

- 不能同时使用这些功能。
- 使用检查和调整功能时，应使用水替代流通池中的液体。有关详细信息，请参见检测器的说明书。
- 漏液传感器检查 / 调整、池温度检查和吸光度准确度检查 / 校准仅适用于 SPD-M20A。如果使用 SPD-M10Avp，这些功能都不可用。

13.3.2 使用波长检查

波长检查包括以下两种类型：


- 使用氘灯 / 钨过滤器 (D2/Ho) 执行波长检查
- 使用低压水银蒸汽灯 (Hg) 执行波长检查

对于一般波长准确度检查，使用氘灯 / 钨过滤器 (D2/Ho)。

要执行波长准确度检查，要测量氘灯的两条发射线（486.0 nm 和 656.1 nm），以及内置钨过滤器的两个吸光度最大值（287.6 nm 和 360.8 nm）。

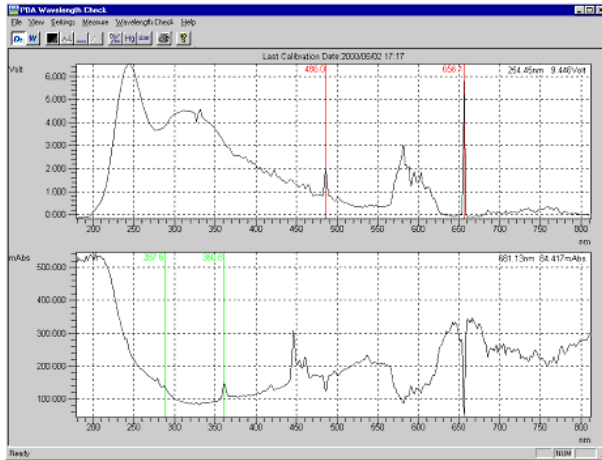
■ 执行波长检查 (D2/Ho)

1 用水替换流通池中的液体。

2 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (Wavelength Check) 按钮。



出现 [PDA Wavelength Check] 窗口。



3 从 [Wavelength Check] 菜单选择 [Wavelength Check] - [D2/Ho]。
检查波长并在窗口中显示结果。

4 确认显示的检查结果为 [PASS]。

D2/Ho Check Result				
FDA		SPD-M10Avp		Calibration Data 2000/06/02 17:17
D2 Lamp Intensity:				
4.68V at 230nm		6.52V at 244.34nm(Max. 200 - 260nm)		
W Lamp Intensity:				
4.08V at 600nm		4.59V at 704.55nm(Max. 400 - 800nm)		
D2/Ho Wave Check	Reference	Measured	Variance	Pass/Fail
D2 Lamp	496.00nm	495.76nm	-0.2nm	PASS
	656.10nm	656.23nm	+0.1nm	PASS
Ho Filter	287.60nm	287.28nm	-0.3nm	PASS
	360.80nm	360.87nm	+0.1nm	PASS
Operator Name: <input type="text"/> <input type="button" value="Print"/> <input type="button" value="Close"/>				

5 如果显示的结果为 [Fail]，则检查以下各项并执行波长校准。

- 在本次波长检查以及以前的波长校准过程中，是否使用水替换了流通池中的液体？
- 在本次波长检查或者以前的波长校准过程中，流通池中是否有气泡？
- 氙灯是否有效照明？（检查位于检测器前面的 LED。）

注意

- 再次执行波长校准后，如果检查结果依然是 [失败]，请就近与我们的办事处、销售部门或经销商联系。
- 除上述解释的“波长检查”功能以外，其他功能由我们的办事处人员操作以执行调整。

Reference

有关波长校准的详细信息，请参见第 189 页的“13.3.3 使用波长校准”。

13.3.3 使用波长校准

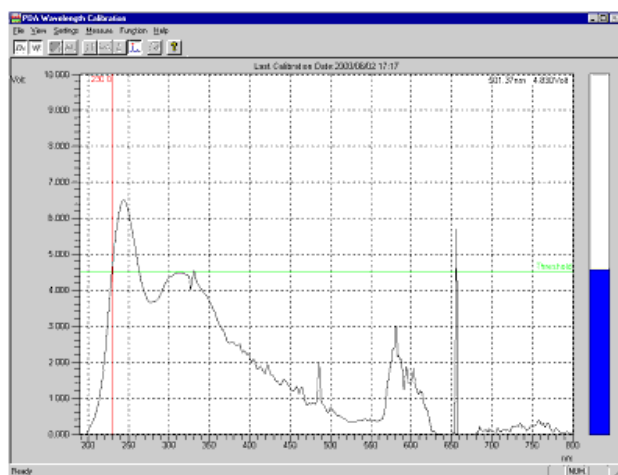
在 [PDA Wavelength Calibration] 窗口中，可以调整或检查波长校准、自动设置曝光时间、灯总计照明时间和光强度检查。

■ 显示 [PDA Wavelength Calibration] 窗口

- 1 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (WaveLength Calibration) 按钮。



出现 [PDA Wavelength Calibration] 屏幕。



■ 执行波长校准

波长校准功能还用于确定在光电二极管阵列的每一光敏元件中输入的波长。因为在检测器内部存储这些结果，所以大多数情况下不需要此功能。如果波长检查的结果不能满足要求，则执行波长校准。

- 1 用水替换流通池中的液体，并确保在流通池内的光学路径中没有气泡。
- 2 从 [PDA Wavelength Calibration] 菜单，选择 [Function] - [Calibrate Wavelength Table]。执行波长校准。



注意

波长校准完成后，执行波长检查检查波长。

■ 执行自动设置曝光时间

曝光时间是指光电二极管阵列元件对电荷进行加速的持续时间。为曝光时间设置适当的值非常重要，如果该值过长，则信号会饱和；如果值过短，则信 / 噪比不佳。请使用自动设置曝光时间功能设置适当的值。

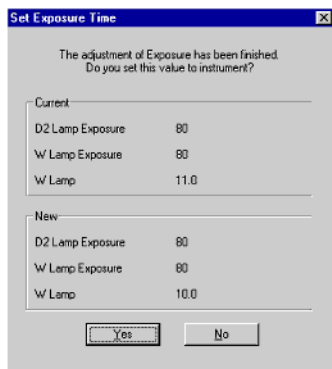
1 要使用流通池自动设置曝光时间，使用水替换池中的液体，并目测池中是否有气泡。



如果流通池的光学路径中有气泡，则可能无法设置适当的值。

2 从 **[PDA Wavelength Calibration]** 菜单，选择 **[Function] - [Set Exposure Time]**。
执行自动设置曝光时间，计算并显示最佳值。

3 确认值并单击 **[Yes]**。

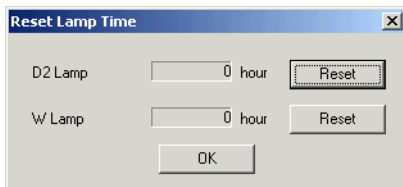


自动设置曝光时间和 W 灯的电压。

■ 检查灯总计照明时间

可以分别检查 D2 灯和 W 灯的总计照明时间。在更换灯时，请重设灯总计照明时间。

1 从 **[PDA Wavelength Calibration]** 菜单，选择 **[Function] - [Lamp Time]** 并单击 **[OK]**。
显示每个灯的总计照明时间。

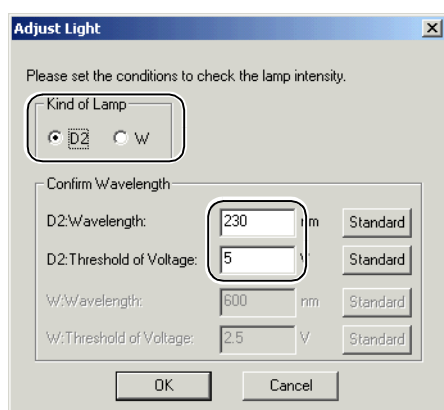


如果为每个灯单击 **[Reset]**，则重设总计照明时间。

■ 执行光强度检查

此功能持续进行扫描以检查每个灯的强度。大多数情况下，在波长检查过程中，自动使用执行光强度检查的结果。岛津办事处的工作人员将使用在这里描述的光强度检查，执行更详细的检查。

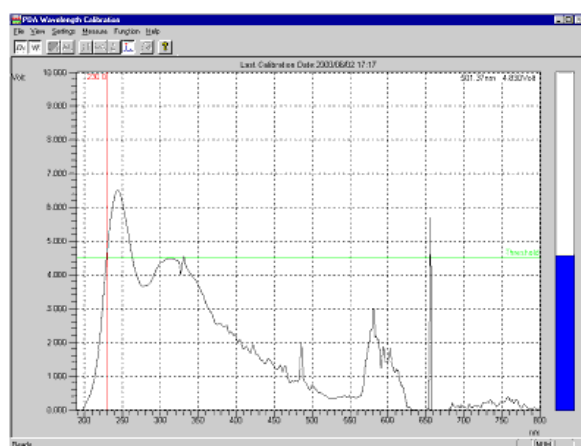
- 1 用水替换流通池中的液体，并确保在流通池内的光学路径中没有气泡。
- 2 从 [PDA Wavelength Calibration] 菜单，选择 [Function] - [Check Light]。出现 [Adjust Light] 屏幕。
- 3 选择要使用的灯，设置波长和电压阈值的值，并单击 [OK]。



注意

如果单击 [Standard]，则将值重设为其初始缺省值。

执行灯强度检查，且数据随着持续扫描的进行而不断更新。



注意

与指定波长处的电压相对应，右侧栏的颜色随之变化。

- 蓝色表明指定波长处的电压高于阈值电压。
- 红色表明指定波长处的电压低于阈值电压，意味着灯的光强度不足。显示为红色时，请根据需要更换灯。

- 4 要停止灯强度检查的持续扫描，从 [PDA Wavelength Calibration] 菜单中再次选择 [Function] - [Check Lamp]。


13.3.4 使用漏液传感器检查 / 调整

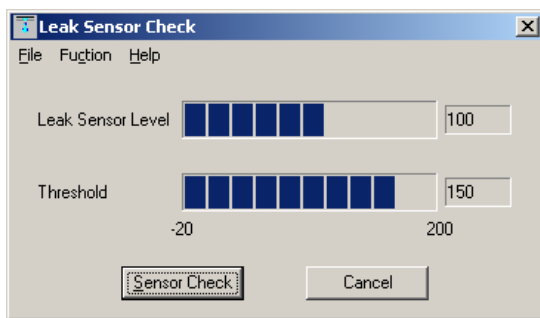
本功能用于检查漏液传感器操作和调整漏液检测灵敏度。

■ 执行漏液传感器检查

可以检查漏液传感器是否能够正确地检测到漏液。

1 在检测器中没有漏液的情况下，验证传感器输出的值为 100 左右。

2 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (Leak Sensor Check/Adjust) 按钮。
出现 [Leak Sensor Check] 屏幕。



3 单击 [Sensor Check]。

4 打开检测器的前面板，将水倒入漏液传感器托盘中。
如果传感器输出超出阈值，则传感器通过检查。

注意

- 但是，如果即使将水倒入漏液传感器托盘，传感器的输出也没有超过阈值，则必须调整检测灵敏度（阈值设置）。
- 要终止或停止传感器检查，单击 [Cancel]。

■ 执行阈值设置

但是，如果即使将水倒入漏液传感器托盘，传感器的输出也没有超过阈值，则必须调整检测灵敏度（阈值设置）。

1 从 [Leak Sensor Check] 菜单，选择 [Function] - [Threshold]。
出现 [阈值] 屏幕。



2 调整阈值的值。

在 100 与用水弄湿漏液传感器时，传感器输出的值之间设置值。

注意

阈值越低，传感器应该越灵敏。但是，如果设置的值过于接近 100，由于室温的变化等等，可能出现操作错误。

13.3.5 使用池温度检查

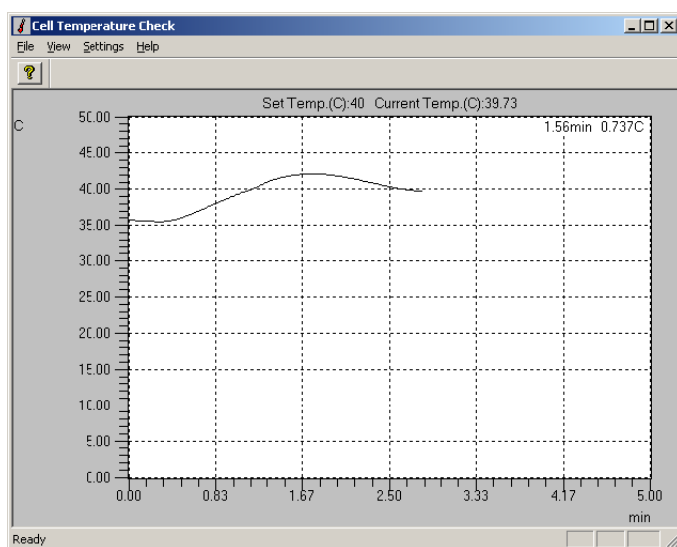
为流通池使用温度控制池时，可以显示与温度控制池的设置温度相关的实际温度的图表。

注意

仅在 SPD-M20A 上执行池温度检查。

■ 执行池温度检查

- 1 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (Cell Temperature Check) 按钮。
出现 [Cell Temperature Check] 窗口。




注意

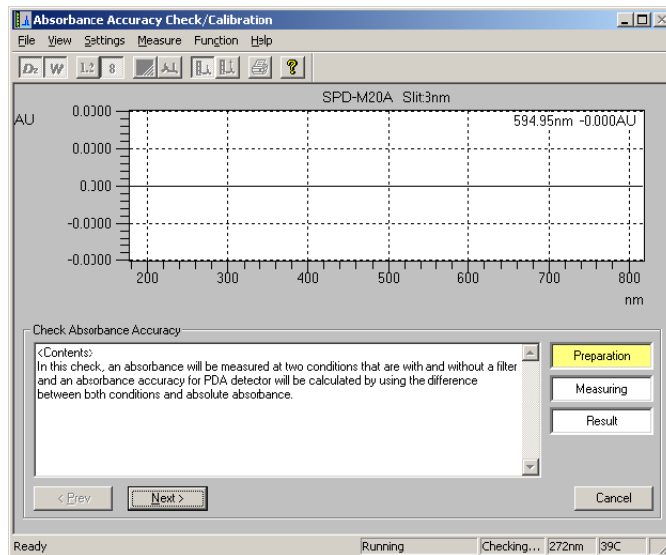
从 [Cell Temperature Check] 菜单，选择 [Setting] - [Temperature]，可以更改温度控制池的温度设置。

13.3.6 使用吸光度准确度检查 / 校准

可以使用标准吸光度池检查和校准检测器的吸光度准确度。

■ 执行吸光度准确度检查

- 1 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (Absorbance Accuracy Check/Calibration) 按钮。
出现 [Absorbance Accuracy/Calibration] 窗口。
- 2 单击 [Absorbance Accuracy Check/Calibration] 菜单中的 [Setting] - [Conditions]。
- 3 设置标准池的参数以用于吸光度准确度的测量、接受标准以及测量时的采样条件。
- 4 从 [Absorbance Accuracy Check/Calibration] 菜单，选择 [Function] - [Absorbance Accuracy Check]。
窗口切换为 [Absorbance Accuracy Check] 窗口。



- 5 使用测量吸光度准确度的池替换流通池。



注意

此时，不要为吸光度校准附加光学过滤器（外部标准过滤器）。

- 6 单击 [Next]，将没有附加过滤器时的吸光度（背景光谱）调整为 [0]。

- 7 为池附加光学过滤器（外部标准过滤器），以便为吸光度校准测量吸光度准确度，单击 [Next]。

测量附加了过滤器的池的吸光度，显示吸光度准确度检查的结果。



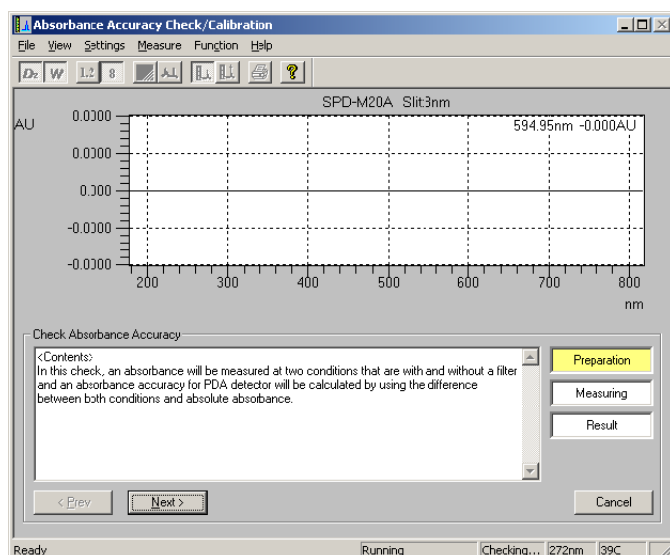
注意

如果检查结果不可接受，则执行吸光度准确度校准。

■ 执行吸光度准确度校准

如果吸光度准确度检查的结果不可接受，则执行吸光度准确度校准。

- 1 单击 **[Absorbance Accuracy Check/Calibration]** 菜单中的 **[Setting] - [Conditions]**。
- 2 设置标准池的参数以用于吸光度准确度的测量、接受标准以及测量时的采样条件。
- 3 从 **[Absorbance Accuracy Check/Calibration]** 菜单，选择 **[Function] - [Absorbance Accuracy Calibration]**。
窗口切换为 **[Absorbance Accuracy Check]** 屏幕。



- 4 使用测量吸光度准确度的池替换流通池，然后单击 **[Next]**。

注意

此时，不要为吸光度校准附加光学过滤器（外部标准过滤器）。

测量没有附加过滤器时的吸光度（背景光谱）。

- 5 为池附加光学过滤器（外部标准过滤器），以便为吸光度校准测量吸光度准确度，单击 **[Next]**。

测量附加了过滤器时的吸光度，显示基于测量结果的参数。

- 6 确认显示的参数并单击 **[Next]**。
根据显示的参数执行校准。

注意

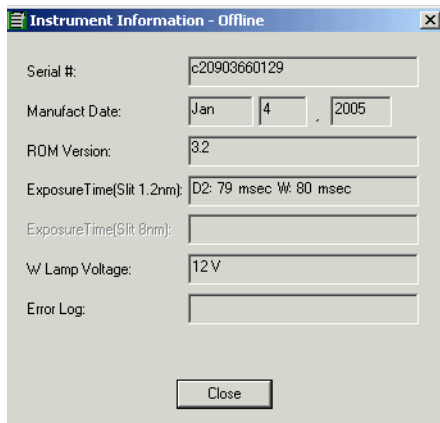
如果要取消测量结果并使用最初的参数，单击 **[Cancel]**。

13.3.7 使用仪器信息

可以查看检测器的仪器信息。可以使用此功能检查 ROM 版本等等。

■ 查看仪器信息

- 1** 单击 [PDA Utility] 屏幕上的  (Instrument Information) 按钮。
显示关于检测器的信息，包括序列号、ROM 版本等等。



13.4 LCsolution 的规格

■ 控制设备

一台计算机最多可以控制 4 个系统，最多可以将其中 2 个系统连接到 PDA 检测器。
下面列出了系统控制器可以控制的各种设备的组合。

系统控制器类型	LC10/LCvp 系列单元	LC-20A 系列单元
CBM-20A CBM-20Alite	适用	适用
SCL-10Avp SCL-10Asp (版本 6) SIL-HT	适用	在 VP 兼容模式中适用 (除 LC-20AB 和换架器外)
LC-2010 系列	不适用	不适用

注意

- CBM-20A 或 SCL-10Avp 最多可以处理 2 个检测器 (数字检测器, 除 LC-VP 和 10A 的 CLD-10A 外) 和 2 个模拟通道的数据。
- CBM-20Alite 最多可以处理 2 个数字检测器 (除 CLD-10A 外) 的数据。
- 如果常规检测器的基本速率达到 100 msec 或更高, 则可以连接 2 个或更多系统。
- CDD-10Avp/sp 可由 SCL-10Avp/sp 版本 6.1 或更高版本, 以及 CBM-20A/20Alite 版本 1.2 或更高版本进行控制。

■ 数据采集

- 最小采样时间
20 msec (最小积分灵敏度: 0.02 μ Vsec): 对于常规检测器
240 msec (最小积分灵敏度: 0.24 μ AUsec): 对于 PDA 检测器 (SPD-M10Avp)
25 msec (最小积分灵敏度: 0.025 μ Vsec): 对于 PDA 检测器 (SPD-M20A)
- 持续绘制 (常规检测器, 状态日志数据)
- 单次分析 / 批处理分析
- 附加分析 / 中断分析
- 延长分析时间
- 快照

■ 数据处理

- 识别方法 (时间窗 / 时间带、光谱识别、绝对 / 相对 / 多相对保留时间、分组)
-> 通过将保留时间反馈回化合物表中, 可以实现自动修改
- 六种不同的计算方法 (通过面积 / 高度的定量确定)
-> 面积百分比法、校正的面积百分比法、使用坐标因子的校正的面积百分比法、内标法、外标法和标准加入法
- 处理
-> 在时间程序中自动反映出结果
- 数据比较
- 纯度分析
- UV 光谱的库搜索
- 校准
- 七种类型的校准曲线 (可以选择其是否通过原点和进行权重 (1/C, 1/C², 1/A, 1/A²))
-> 线性、点到点、二次方程、三次方程、平均 RF、指数和手动 RF
- 校准点数 (64 个级别 x 10 个点)
-> 可以手动创建校准曲线。
- 可以选择浓度或面积 / 高度作为校准曲线的 X 轴。

■ 报告格式的创建

- 报告项: 23 种类型
-> 系统配置、样品信息、方法、批处理文件、系统检查、色谱图、峰表、定量结果、分组结果、校准曲线、馏份收集结果、光谱图、库搜索、光谱库、等高线图、3D 图、纯度图、峰轮廓图、汇总 (浓度)、汇总 (化合物)、数字、文本、绘制对象 (直线 / 箭头 / 矩形 / 椭圆形)
- 支持包含多页的布局
- 报告预览

■ 文件

- 方法文件、报告文件和批处理文件
-> 使用方法 / 批处理模板文件, 支持 SOP
- 数据文件 (使用复杂结构全面存储以下信息)
-> 原始数据 (色谱图或 PDA 3D 数据)、数据处理结果、方法、报告格式、批处理、系统配置和状态信息
- 光谱库文件
- 文件转换
-> AIA ANDI 格式 (输入和输出)、CLASS-LC10 格式 (输入)、CLASS-VP 格式 (输入)、ASCII 格式 (输入和输出)、PDF 格式 * (若要输出, 必须单独安装 Adobe Acrobat®。)

■ GLP/GMP 支持

- 密码安全性
- 通过用户管理和组设置（使用网络时）限制操作
- 锁定功能
- 系统检查
- 状态日志
- 软件伪造检查
- 原始数据伪造检查
- 审查追踪
- 数据恢复
- All-in-One 的数据文件结构
- 柱效计算（USP, JP, JP2, EP, BP, DAB, EMG, EMG50%, 面积 / 高度）
- QA/QC（统计计算）

■ 操作支持

- 助手栏
- 数据管理器
- 文件搜索
- 简单仪器参数设置屏幕
- 批处理表向导
- 化合物表向导
- 在线说明书和帮助

■ 自动支持

- OLE 自动
- 定制参数
- 开机 / 关机
- 基线检查
- 自动数据文件名创建
- 批处理中的操作功能
- 批处理队列功能
- 在指定的行，批处理执行的暂停 / 待机功能
- 根据通过 / 失败结果，在批处理行前或批处理后，启动用户程序

索引

数字

21 CFR Part 11 1, 2
[3D 图像] 88, 89

英文字母

Acrobat 链接功能 2
Acrobat 文件 179
[Admin] 7
Admin 14, 47
Adobe
 Acrobat 183, 197
 Acrobat Reader 183
AIA ANDI 格式 2, 197
AIA ANDI 文件 179
ASCII 格式 197
ASCII 文件 179
CLASS-Agent 1
 查看数据 46
“CLASS-Agent 管理器” 46
CLASS-LC10 180
CLASS-LC10 格式 2, 197
CLASS-VP 180
CLASS-VP 格式 2, 197
D2 / Ho 187
GLP/GMP
 规格 198
 支持功能 1
Hg 187
LC Tool Launcher 184, 186
[LC 定量浏览器] 图标 126
“LC 后处理分析” 6, 116
LC 色谱图 131
“LC 实时分析” 6, 111
 登录 13
 启动 7
 在编辑模式中 6
[LC 数据比较] 82
[LC 数据比较] 窗口 82
LC 数据分析 63
“LC 数据分析” 34
 [LC 数据比较] 82
 [LC 校准曲线] 80
 定量参数 77
 峰识别参数 73
 [化合物表视图] 63
 积分参数 66
 积分时间程序 68
 [色谱图视图] 63
 使用数据文件操作 64
 手动积分 (处理) 70
 [校准曲线视图] 63
[LC 数据分析] 窗口 63
[LC 数据分析] 图标 28, 66, 73, 77, 137
LC 维护工具 184, 186

LC 维护实用程序 184
LC 系统
 设置开始时间 58
 在分析后停止 59
“LC 校准曲线” 45, 46
 [化合物表视图] 46, 80
 [色谱图视图] 46, 80
 [数据树视图] 80
 数据树视图 46
 [校准曲线视图] 46, 80
[LC 校准曲线] 窗口 80
“LC 浏览器” 6
LCsolution
 操作流程 12
“LCsolution”
 密码 47
“LCsolution Launcher” 111, 116, 125, 128
 [操作] 5, 6, 13
 [LC 浏览器] 图标 128
 [分析] 图标 6
 [后处理] 图标 6, 28
 [数据库] 图标 46
 [脱机编辑器] 图标 6
 [浏览器] 图标 6, 125
 登录 ID 47
 [管理] 6, 7
 [日志浏览器] 图标 7
 [系统策略] 图标 7
 [用户管理] 图标 7
 密码 14
 启动 5, 13
 用户 ID 14
[PDA 多色谱图表] 131
PDA 检测器 186
[PDA 色谱图] 130, 131
PDA 实用程序 186
 波长检查 187
 波长校准 189
 池温度检查 193
 灯总计照明时间 190
 光强度检查 191
 漏液传感器检查 / 调整 192
 吸光度准确度检查 / 校准 193
 仪器信息 196
 自动设置曝光时间 190
PDA 数据分析 87
“PDA 数据分析” 36
 [纯度视图] 87
 [等高线视图] 87
 [光谱视图] 87
 [化合物表视图] 87
 [色谱图视图] 87
 [校准曲线视图] 87
[PDA 数据分析] 窗口 87
PDF 格式 197

[UV 光谱]	133
UV 光谱	131
UV 库文件	
保存	105
编辑	106
创建新文件	105
记录光谱	105

A

安全性	
支持	1

B

帮助	181
参数	182
术语	182
在线说明书	183
报告	12
边距	147
打印	40
定制	39
缺省格式	137
[页眉 / 页脚]	147
页面大小	147
报告布局	
创建	143
排列	145
报告格式	2
保存	40
创建	38
导出	65
导入	65
[报告格式] 图标	38, 143
报告格式文件	9, 174
创建	141
使用	139
报告功能	135
打印分析结果	135
报告输出	
在批处理中	136
在数据采集中	135
背景数据文件	123
边距	147
编辑	
单元格	164
标签控制	157
标题栏	8
表	159
表列	
操作	159
更改宽度	160
更改显示	161
选择	160

表行	
操作	162
更改显示的行数	163
删除	163
添加	163
选择	162
波长检查	187
波长校准	189
灯总计照明时间	190
光强度检查	191
自动设置曝光时间	190
布局	
保存	64
报告	143, 145
排列	133
正在保存	133

C

采集	
[等高线视图]	90
[光谱视图]	92
[色谱图视图]	92
采集的光谱	92
采集的色谱图	91
在多色谱图表中记录	
多色谱图表	95
[采集] 助手栏	50
[采样]	55
采样间隔	
设置	57
菜单栏	8
参照项目	172
[操作]	5, 6, 13
操作	
规格	198
程序窗口	151
池温度检查	193
窗口	151
层叠	156
定制	155
工具栏	152
类型	152
平铺	156
使用标签控制显示多个窗口	157
显示多个窗口	155
纯度参数	
设置	99
[纯度视图]	87

D

打印	
报告	40
分析结果	135
类型	149
数据处理结果	137
[打印] 图标	139, 140

打印图像	
查看	148
单次分析	12, 21
积分参数	22
停止	53
执行	21
柱效参数	25
[单次开始] 图标	21
单元格	164
[UV 光谱]	133
查看数据文件内容	166
弹出窗口类型	165
复选框类型	165
设置值	165
双击类型	165
下拉列表类型	165
旋转输入类型	165
选择	164
岛津用户认证工具	2
导出	
报告格式	65
光谱	108
批处理表	66
色谱图	108
数据分析参数	64
导入	
报告格式	65
数据分析参数	64
灯总计照明时间	190
[登录]	7
[登录 ID]	
Admin	47
[等高线视图]	87
采集	90
低压水银蒸汽灯	187
[定量]	78
定量	
查看计算结果	45
计算方法	29
计算结果	125
定量参数	77
方法文件	79
化合物表	78
定量计算	
统计计算	128
[定量结果视图]	126
[定量浏览器]	125
[定量结果视图]	126
更改数据分析条件	127
[化合物表视图]	126
[色谱图视图]	126
[校准曲线视图]	126
多色谱图	93
多色谱图表	93
记录	96
最大波长	96

F

方法	
导入	36

方法文件	9, 174, 180
保存 (导出)	79, 108
加载	45
批处理表	26
校准曲线	28
分隔线	155
分析	
停止	53
准备	13
分析结果	
打印	135
分析结束时间	
分析过程中更改	54
更改	53
设置	53
分析条件	11, 12
分析通道	96
[分析] 图标	67, 74, 77
分析仪器	11
监视	19
检查	16
启动	13
[色谱图视图]	19, 20
系统配置	14
仪器监视栏	20
准备	13
峰	
保留时间	29
检测	66
识别方法	30
峰表	40
峰纯度	99
显示计算结果	100
峰识别	73, 106
峰识别参数	73
峰信息	
查看	46
复合结构系统	2

G

工具栏	8
[数据分析 / 快照] 按钮	50
[LC/PDA 峰表] 按钮	40
[LC/PDA 色谱图] 按钮	38
[保存] 按钮	18, 105, 115, 118, 169
[打开] 按钮	168
[归零检测器 A] 按钮	50
[汇总 (化合物)] 按钮	41
[汇总 (浓度)] 按钮	41
[基线检查] 按钮	50
[色谱图预览] 按钮	48
[数据分析参数]	
按钮	96, 99, 101, 104
[锁定数据管理器] 按钮	32, 42, 170
[锁定仪器监视] 按钮	51
[新建] 按钮	105, 167
[新建报告格式文件] 按钮	141
[选择数据文件以创建表]	
按钮	117
关闭方法文件	59

[管理]	6, 7
光谱	
从等高线显示	91
导出	108
峰识别	106
计算	109
记录	97
指定化合物	101
[光谱表]	
操作	98
记录	97
光谱库	105
[光谱视图]	87, 102
采集	92
光强度检查	191
规格	196
GLP/GMP 支持	198
报告格式的创建	197
操作支持	198
控制设备	196
数据采集	197
数据处理	197
文件	197
自动支持	198

H

后处理	127
化合物表	30, 31, 78
[化合物表视图]	35, 46, 63, 87, 126
[化合物表向导]	28
化合物表向导	3
汇总报告	
创建	41
[汇总报告格式文件]	42
[基本周期]	55, 56
设置	56

J

积分参数	12, 22, 66
峰检测	66
设置	66
积分时间程序	68
计算	
光谱	109
色谱图	109
检测器	
采样间隔	57
[基本周期]	56

K

库	
设置搜索标准	101
搜索	102, 133
[库编辑器] 图标	105
库文件	174
快速仪器设置屏幕	3

快照	
更新	109
[宽度]	55

L

漏液传感器	
调整漏液检测灵敏度	192
检查	192
阈值设置	192
漏液传感器检查	192

M

[密码]	7
------	---

P

批处理	111
参数	119
关闭条件	122
其他分析	124
启动条件	122
执行	115, 119
[批处理] 图标	26, 32
[批处理表]	111, 116
批处理表	
编辑	114
创建	26
导出	66
[方法文件]	33
方法文件	26
[分析类型]	33
分析类型	26
[级别 #]	34
级别 #	26
进样体积	26
设置	42
数据文件	26
托盘名	26
向导	113
校准曲线	28
[样品类型]	33
样品类型	26
样品瓶 #	26
执行	32, 37
[批处理表向导]	136
批处理表向导	3
批处理队列功能	124
批处理分析	12, 26
积分结果	27
计划时间	26
进度检查	27
停止	54
执行	27
[批处理开始] 图标	27, 34
[批处理] 图标	111
批处理文件	9, 174

Q

全部合一的文件结构	2
缺省报告格式	137

R

认证	
支持	1

S

色谱图	130
从等高线显示	90
导出	108
积分结果	48
计算	109
记录	93
移动	84
在多色谱图表中记录	93
展开和收缩	84
[色谱图视图]	19, 20, 46, 49, 63, 87, 126
采集	92
纯度	100
色谱图文件	180
色谱柱	
记录信息	60
[设置] 图标	113
审查追踪	
支持	1
时间窗法	75
时间带法	75
[实时仪器控制栏]	50
[识别]	74
识别	
查看计算结果	45
峰	29, 30
识别和定量处理	96
识别与定量处理	2
视图	155
手动积分	
处理	70
输出窗口	8
数据	
查看	42, 44
文件	167
[数据报告] 图标	65, 138
[数据比较]	82
[数据采集]	
[色谱图视图]	49
[仪器参数视图]	49
数据采集	49, 111
检测器信号基线的归零校正	50
快照	50
数据分析	50
通道的基线检查	50
[数据采集] 窗口	49
[数据采集] 图标	57

数据采样	
[采样]	55
参数类型	55
更改间隔	55
[基本周期]	55
[宽度]	55
数据处理	
规格	197
数据处理结果	
重新打印	137
数据分析	116
数据分析参数	96
创建	28
导出	64
导入	64
更改	127
应用到原始方法	31
[数据分析参数] 图标	127
[数据分析] 图标	22
数据格式	
转换	44
[数据管理器]	8, 154, 170
查看历史记录	177
打开文件	174
复制文件	175
删除文件	176
视图	42
文件操作	174
显示	170, 171
移动文件	175
重命名文件	177
转换文件格式	178
数据管理器	3
文件标签	9
数据结构	11
数据树视图	46
数据文件	9, 174, 180
操作	64
批处理表	26
数据文件名	113
[数据浏览器]	
显示	128
[数据浏览器] 图标	129

T

[停止] 图标	27, 54
通用数据格式	
输出功能	2

W

维护	
PDA 检测器	186
PDA 实用程序	186
未保留峰时间	25

文件	
保存	169
报告格式	9, 139, 141, 167, 174
报告文件	168
操作	167
查看历史记录	169, 177
打开	168, 174
方法	9, 167, 168, 174
复制	175
管理	170
规格	197
库	174
批处理	174
批处理表	167, 168
批处理进程	9
删除	176
数据	9, 168, 174
新建	167
移动	175
重命名	177
文件格式	
转换	178
文件类型	9

X

吸光度准确度检查 / 校准	193
[系统检查] 图标	16
[系统配置] 图标	14, 56, 60
系统适用性测试	25
相对保留时间	75
项目	171
删除	173
新建	172
[向导] 图标	
[化合物表向导]	28
校准曲线	3, 12
查看	34, 45
更改信息	127
计算数据浓度	36
类型设置	29
生成	28, 82
数据分析参数	
创建	28
应用到原始方法	31
[校准曲线视图]	34, 46, 63, 87, 126
[校准] 图标	35, 80
斜率测试	24
[修改校准曲线] 图标	127

Y

要搜索的光谱	104
[页眉 / 页脚]	147
[页面大小]	147
仪器参数	
设置	17
[仪器参数视图]	18, 49
仪器监视栏	20, 51

[仪器控制栏]	50
[关闭] 按钮	59
[启动] 按钮	58
仪器信息	196
应用程序窗口	8, 152, 155
[应用方法] 图标	31, 79, 108
[用户 ID]	7
Admin	14
[预览] 图标	40, 148

Z

在色谱图之间计算	84
在线说明书	183
[暂停 / 重新开始] 图标	27
支架校准	121
柱效参数	25
未保留峰时间	25
助手栏	3, 8, 108, 153
[LC 实时分析]	
[批处理] 图标	111
[设置] 图标	113
[LC 数据]	
[数据报告] 图标	65, 138
[应用方法] 图标	31
[分析] 图标	67, 74, 77
[LC 浏览器]	
[LC 定量浏览器] 图标	126
[数据浏览器] 图标	129
[报告]	
[预览] 图标	40, 148
[打印] 图标	140
[采集]	
[数据分析] 图标	22
[停止] 图标	54
[定量浏览器]	
[数据分析参数] 图标	127
[修改校准曲线] 图标	127
[后处理]	
[批处理] 图标	41
[LC 数据分析] 图标	28, 66, 73, 77, 137
[报告格式] 图标	38, 41, 143
[库编辑器] 图标	105
[数据比较] 图标	82
[向导] 图标	28
[校准] 图标	35, 80
[批处理]	
[批处理开始] 图标	34
[暂停 / 重新开始] 图标	27
[批处理开始]	27
[停止] 图标	27, 54
[实时]	
[单次开始] 图标	21
[系统检查] 图标	16
[系统配置] 图标	14
[批处理]	32
[批处理] 图标	26
[数据采集] 图标	57
[系统配置] 图标	56, 60

[数据报告]	
[打印] 图标	139
[数据分析]	
[应用方法] 图标	79
自动	
规格	198
自动设置曝光时间	190
自动生成	
数据文件名	113
最大波长	96
[最大绘图]	50
阈值设置	192
浏览器功能	125
保存布局	133
[定量浏览器]	125
排列布局	133
色谱图	130
氘灯 / 钽过滤器	187

本页空白。