

前言

一、 如何快速入门

在您使用我们的 N2000 色谱工作站时，你想快速学会操作该系统时，并不需要每一个章节依次看下去，您可以直接进入第二章的 2.2 和 2.3 节，根据你采用的定量分析方法不同参照第九章、第十章及十一章进行操作。

二、 N2000 工作站的结构

我们根据生产实际需要将 N2000 色谱工作站分别设计开发了在线和离线色谱工作站两大块。前者特点：N2000 在线工作站根据进样采集到的实验信息，记录信号并对其进行处理，判别信号并计算和输出实验结果；后者的区别在于它无采样功能，其侧重点在于对数据进行后处理。

目录

第一章 简介	6
1.1 N2000 色谱工作站对计算机的要求.....	6
1.2 N2000 色谱工作站主要性能与技术指标.....	6
1.2.1 整机性能.....	6
1.2.2 峰处理能力.....	6
1.2.3 谱峰定性鉴别方法.....	6
1.2.4 积分参量.....	6
1.2.5 定量计算方法.....	6
第二章 安装与卸载 N2000 型色谱工作站	7
2.1 N2000 工作站的安装.....	7
2.1.1 硬件的安装.....	7
2.1.2 软件的安装.....	9
2.2 N2000 在线色谱工作站操作步骤.....	13
2.3 N2000 工作站标准操作步骤.....	14
第三章 N2000 型色谱工作站的有关概念	17
3.1 本工作站需用到的部分色谱专业术语.....	17
3.1.1 色谱图的有关概念.....	17
3.1.2 峰处理参数.....	17
3.2 色谱处理的相关概念.....	17
3.2.1 数据采集.....	17
3.2.2 积分.....	17
3.2.3 定量.....	18
3.2.4 校准.....	18
3.2.5 报告.....	18
3.3 本工作站的特有概念介绍.....	18
3.3.1 方法.....	18
3.3.2 组分表.....	18
3.3.3 谱图 DAT 文件.....	18
3.3.4 ORG 文件.....	19
3.3.5 MDY 文件.....	19
3.3.6 实验日志.....	19
3.3.7 手动积分事件表.....	19
3.4 本工作站通用的文件操作方式.....	19
3.4.1 方法的加载.....	19
3.4.2 方法的保存.....	19
3.4.3 方法的另存.....	19
3.4.4 方法的缺省.....	19
3.4.5 谱图的打开.....	19
3.4.6 谱图的保存.....	19
3.5 本工作站通用的谱图操作方式.....	19
3.5.1 谱图的放大.....	19

3.5.2 谱图的缩小.....	19
3.5.3 谱图的拖动.....	19
3.5.4 选择一个色谱峰.....	19
3.5.5 选择一个时间段.....	19
3.5.6 谱图的全量程显示.....	19
3.5.7 谱图的自动显示.....	19
3.5.8 范围不变.....	19
第四章 N2000 在线色谱工作站系统介绍.....	20
4.1 概述.....	20
4.2 主菜单.....	20
4.2.1 主菜单.....	20
4.2.1.1 方法菜单.....	20
4.2.1.2 报告菜单.....	23
4.2.1.3 系统设置菜单.....	24
4.2.1.4 窗口菜单.....	25
4.2.1.5 帮助菜单.....	25
4.3 工具栏.....	26
4.3.1 缺省工具栏.....	26
4.3.2 打开工具栏.....	26
4.3.3 保存工具栏.....	26
4.3.4 另存工具栏.....	26
4.3.5 编辑工具栏.....	26
4.3.6 1 通道工具栏.....	26
4.3.7 2 通道工具栏.....	26
4.3.8 窗口排列工具栏.....	26
4.3.9 日志工具栏.....	26
4.4 采样通道窗口.....	27
4.4.1 实验信息.....	27
4.4.2 方法.....	27
4.4.2.1 采样控制介绍.....	28
4.4.2.2 积分.....	28
4.4.2.2.1 积分参量的选择.....	28
4.4.2.2.2 积分方法的选择.....	29
4.4.2.2.3 积分参数的选择.....	29
4.4.3 组分表的编辑.....	29
4.4.4 谱图显示设置.....	33
4.4.5 报告编辑.....	33
4.4.6 仪器条件的输入.....	37
第五章 N2000 离线色谱工作站操作说明.....	38
5.1 定制报告.....	39
5.2 比较谱图.....	43
5.2.1 谱图的分开与合并.....	43
5.2.2 谱图的对齐.....	43

5.2.3 谱图的相加减.....	44
5.3 手动积分.....	44
5.3.1 手动画基线.....	45
5.3.2 强制改变峰.....	45
5.3.3 移动起/终点.....	45
5.3.4 增加/删除分割线.....	45
5.3.5 添加峰.....	45
5.3.6 前/后向水平基线.....	45
5.3.7 添加/删除负峰.....	45
5.4 手动积分事件表.....	45
5.5 模拟显示.....	46
第六章 第一次进样示例.....	47
6.1 进入工作站.....	47
6.2 串行口设置.....	47
6.3 通道的选择.....	48
6.4 采样控制设置.....	48
6.5 进标样.....	50
第七章 实验方法的编辑.....	51
7.1 实验信息的编辑.....	51
7.2 方法的选择.....	51
7.2.1 采样控制的设置.....	52
7.2.2 积分方法及参数的编辑.....	54
7.2.2.1 积分方法的选择.....	54
7.2.2.2 积分参数的选择.....	54
7.3 组分表的编辑.....	55
7.4 谱图显示的编辑.....	55
7.5 实验报告的编辑.....	55
7.6 仪器条件的设置.....	55
第八章 校正.....	56
8.1 校正原理.....	56
8.1.1 校正类型.....	56
8.1.2 介绍系统校正.....	56
8.1.3 建立一个校正方法.....	57
8.2 校正方法.....	59
8.2.1 采集标样校正.....	59
8.2.2 单运行校正.....	62
8.2.3 加入标样校正(多点).....	63
8.2.4 加入槽样校正(单点).....	63
8.4 观察峰校正曲线.....	63
8.5 积分参数项.....	64
第九章 用面积归一法做一个样品.....	66
第十章 在在线色谱工作站中用内标法测试样品.....	68
第十一章 用面积外标法做一个样品.....	75

第十二章	N2000 色谱工作站日常维护.....	83
第十三章	N2000 工作站服务指南.....	84

第一章 简介

感谢您购买我们的色谱数据工作站，为了保证您的正确操作，请仔细阅读这本说明书，其中介绍了工作站的主要性能与技术指标、安装、卸载、调试及操作示例等方面的情况。若有不明之处，请及时与我们联系，我们会给您最满意的解答。

任何产品都有他的不足之处，我们的产品也不例外，如果您对我们的色谱数据工作站有一些建议的话，也敬请及时与我们联系，以便我们根据您的要求对软件的进行更新完善。

1.1 N2000 色谱工作站对计算机的要求：

奔腾 CPU 166 MHz 以上，内存 32M 以上（推荐 64M），配备一个光驱，安装了中文 WINDOWS98 操作系统或中文 WINDOWS95 与 IE4.0（必配）。显示器最低要求为 256 色 800 × 600 的分辨率，并设置为小字体（内置式至少有一个空闲的 ISA 插槽，外置式至少有一个 COM 口）。

1.2 N2000 色谱工作站主要性能与技术指标：

1.2.1 整机性能：

输入通道数：2 个

输入电压范围：-5mV—1.7V

输入阻抗：>10M

积分灵敏度：1uV · 秒

最小分辨率：0.1 uV

动态范围：10⁷

线性度：±0.1%

1.2.2 峰处理能力

可处理的峰个数：大于 1000 个（与计算机资源有关）

可处理的最小峰宽：0.1 秒

具有自动时间程序

具有手动积分功能

可自动识别各种复杂峰形并准确分割

基线自动跟踪与校正

负峰影响自动消除

符合 ISO、GMP 规定

1.2.3 谱峰定性鉴别方法

保留时间法

组份表鉴别法

1.2.4 积分参量：峰面积或峰高

1.2.5 定量计算方法

归一法

校正归一法（带比例因子的校正归一法）

内标法

分组法

多内标法

外标法
指数法

第二章 安装与卸载 N2000 型色谱工作站

2.1 N2000 工作站的安装：

2.1.1 硬件的安装

1、设备清单检查

在安装系统以前，请先按照装箱单检查各个设备及附件是否齐全。

N2000 色谱工作站的标准配置包括下面几个部件：

- 1) 工作站数据采集卡（或器），一块（或只）；
- 2) 通讯线一根（连接串行口与采集卡间）；
- 3) 信号线（含启动开关）一根（连接工作站与色谱仪）；
- 4) 操作说明书一份；
- 5) 保修卡一份；
- 6) N2000 色谱工作站软件（光盘）一张；

注：如发现上述部件缺失，请及时与本公司联系。

2、安装工作站硬件(内置式)

在做完上述检查后，可按如下方法开始安装色谱工作站硬件系统。

第一步：关掉主机电源；

第二步：把显示器从主机上搬下；

第三步：取下计算机机箱背面的三颗（四颗）螺钉，如图 A、B 所示，并打开机箱盖；

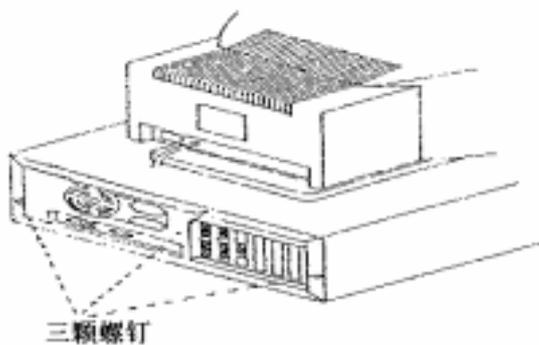


图 A

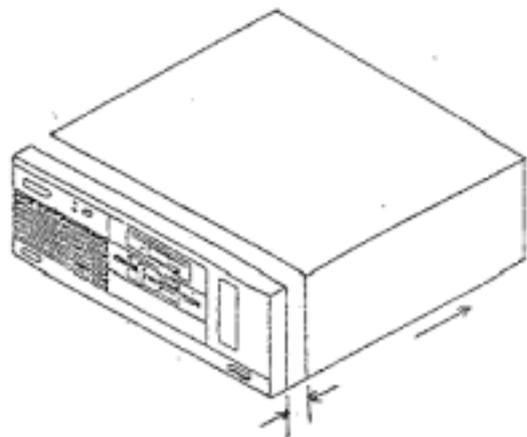


图 B

警告：硬件的安装切勿在带电的情况下拔插任何设备 !!!

第四步：选择一个空的 ISA 扩展槽并拧下该槽相应的档条螺钉，取下该档条，如图 C 所示；

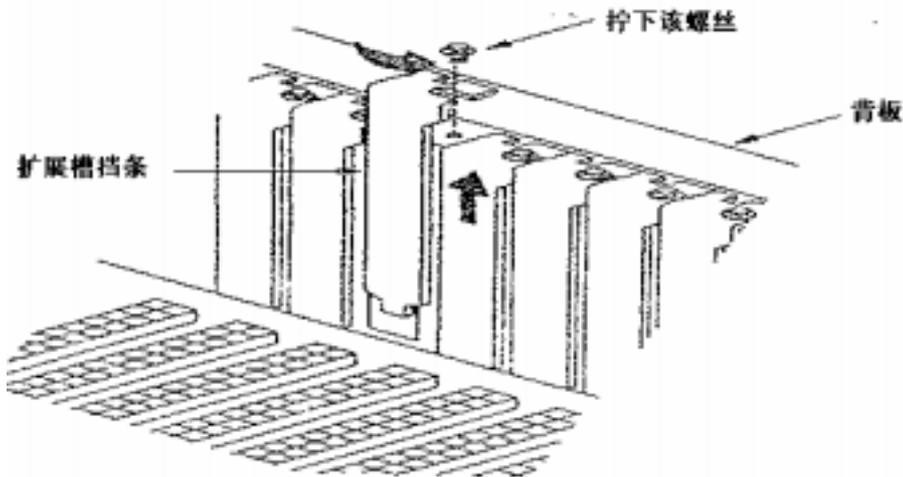


图 C

第五步：安装色谱工作站数据采集卡于扩展槽上，如图 D 所示，用螺钉扭紧数据采集卡于背板上；

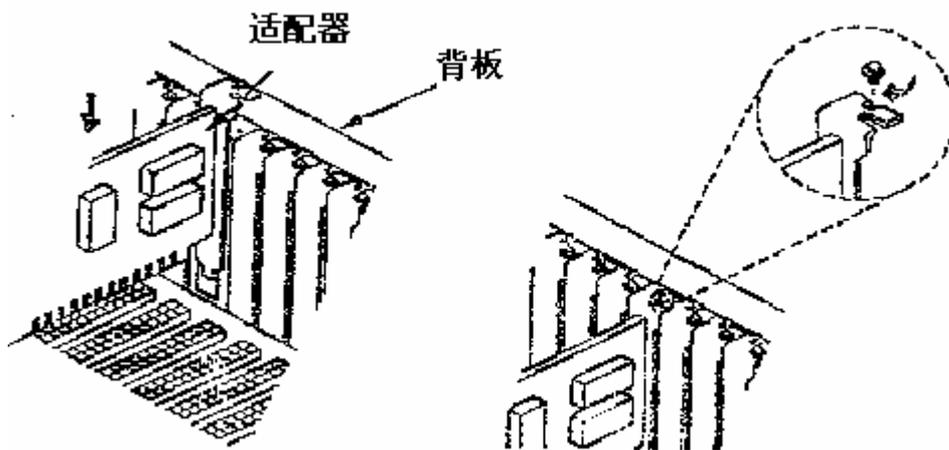


图 D

第六步：将主机箱盖滑回主机上，重新拧上机箱背面的螺钉，如图所示 A；

第七步：用信号线将色谱仪的信号输出源连接到数据采集卡；

第八步：用通讯线将计算机的串行口与数据采集卡连接起来，**注意：通讯线连接计算机串行口的接头有大小各一个，分别为 9 针和 25 针，您只要根据您**

计算机的串口类型选用其中一个,而将另外一个空闲。(因不同的计算机的串行口是不一样的。)

3. N2000 色谱工作站 (外置式) 的安装

2.1.2 N2000 色谱工作站软件的安装

1、)软盘安装方法：

将 N2000 色谱工作站的第一张安装盘插入软驱中,如图 1 所示,在桌面上双击图标“我的电脑”,弹出图 2 所示的对话框;接着双击图标 A,可运行并看到 A: 驱中的所有文件夹及文件,如图 3 所示,双击 SETUP.EXE 命令,依照安装程序的提示进行相应确认并换盘即可。其操作要领可参见图 5。



图 1



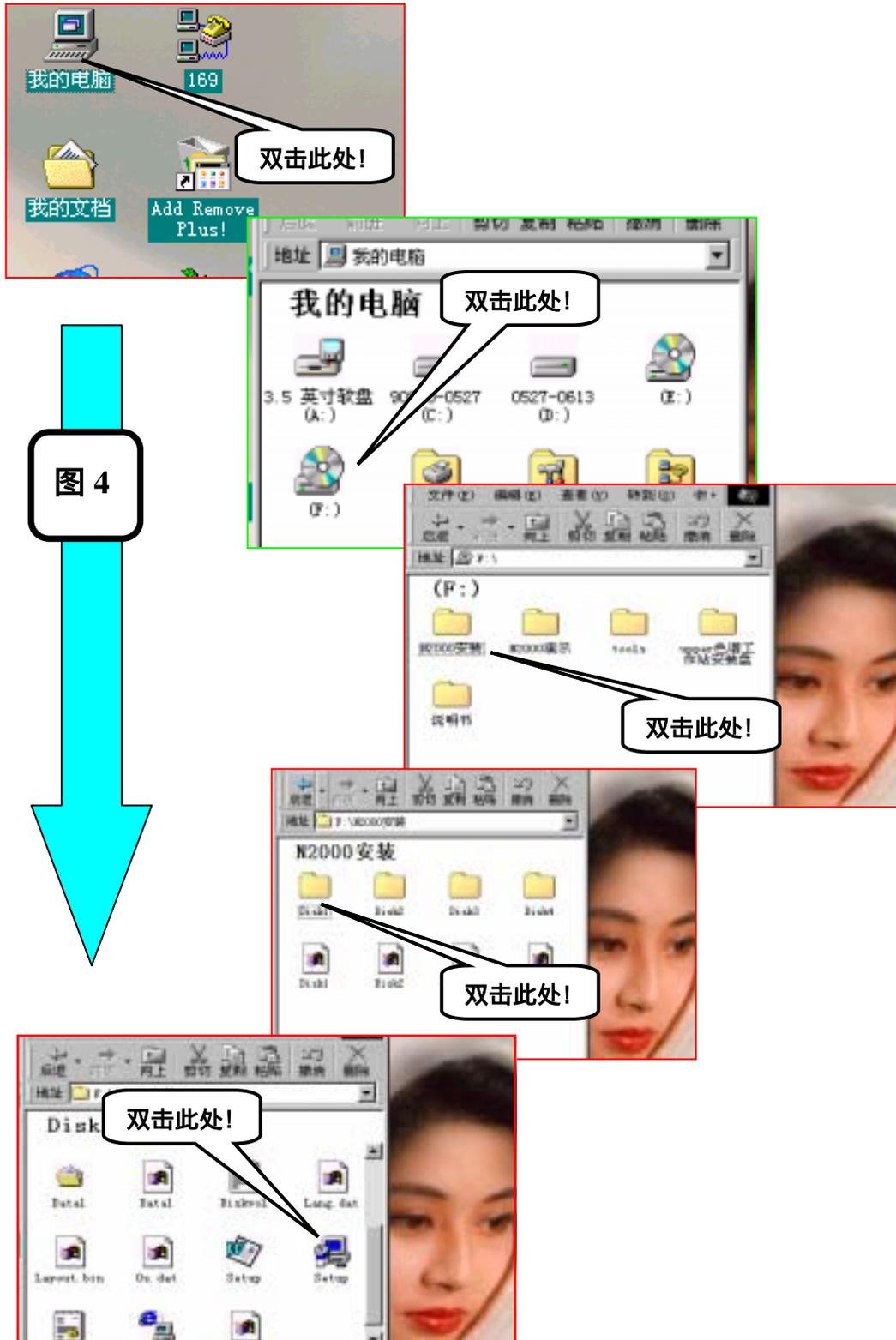
图 2



图 3

2.) 从光盘安装 N2000 型色谱工作站 :

将 N2000 色谱工作站光盘放入光驱,从双击桌面上图标“我的电脑”开始,依照光驱(F:)、N2000 安装目录、DISK1 目录、SETUP.EXE 安装顺序,执行光盘中\N2000 安装\DISK1 目录下的 SETUP.EXE 命令,如图 4 所示。依照安装程序的提示进行相应确认即可。(假设 F:为光驱,实际与用户计算机硬盘分区有关)



3) 执行安装程序，将 N2000 色谱工作站安装到硬盘中

您只要按照提示依次点击下一步并输入安装序列号，最后点击完成即可，如下图 5 所示：

注意：安装时的序列号在安装盘的标签上，请千万不能输错，否则工作站将无法进行正常工作。

图 5



4) 如果您在安装完毕 N2000 色谱工作站后, 运行在线色谱工作站如果没有色谱仪的信号输入, 若确认色谱仪采集和输出线正常时, 请重新选择 N2000 色谱工作站所用的串行口!!

注: 对于常规计算机而言, 只有两个串口, 您只须选择其中一个即可。

串口设置的两个方法如下: A、从开始菜单所提供串行口设置快速进入; B、从在线色谱工作站中的系统设置中进入设置 (要求在不采样情况下)。如下图 6

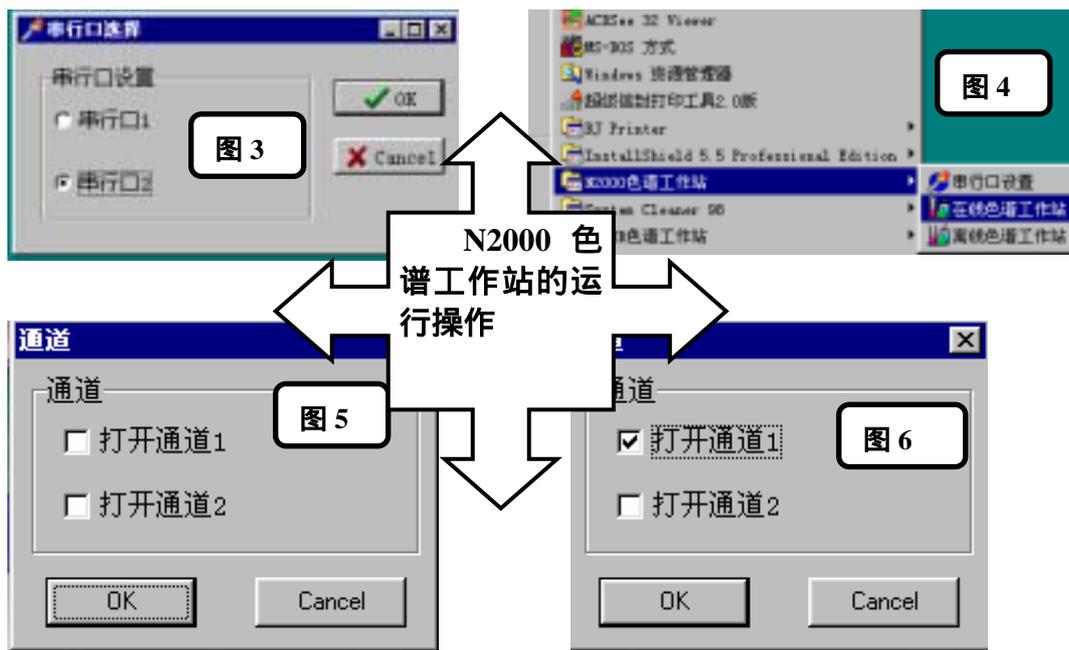
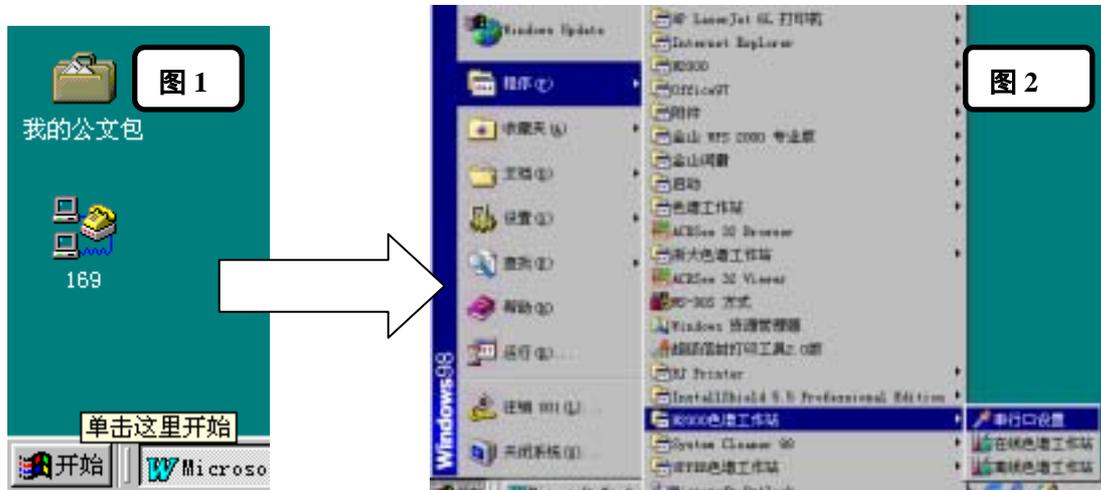
现在您就可以选择您所使用的串行口 1 或串行口 2, 然后单击确定 (OK)。

注意: 您更改了串行口以后必须关闭程序, 然后重新运行在线色谱工作站。



2.2 N2000 在线色谱工作站基本操作步骤

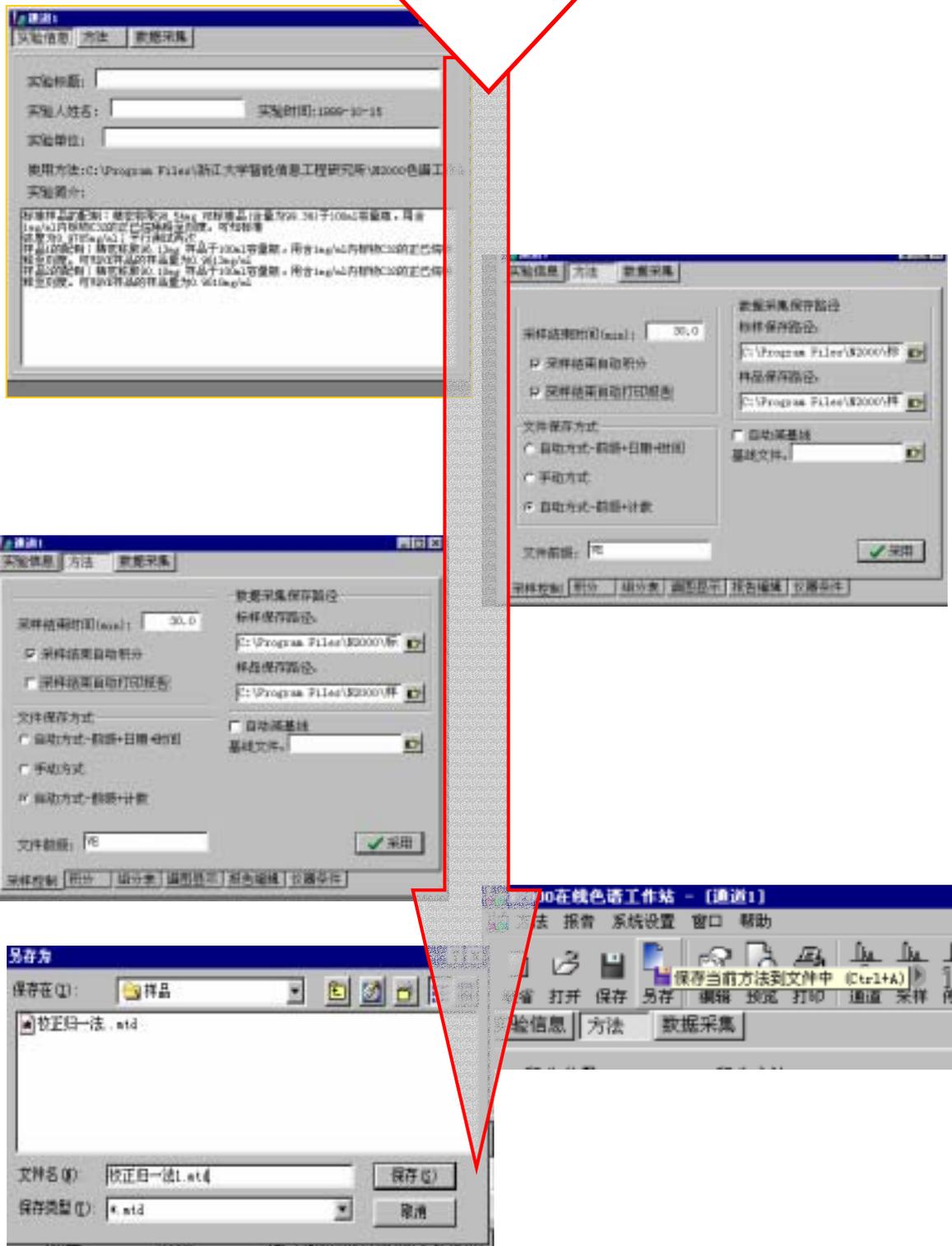
第一步：开机进入工作站：点击桌面开始菜单，拉出如下图所示程序菜单，点击 N2000 色谱工作站下的串口设置图标，设置串口。然后再点击在线色谱工作站即可进入工作站。



第二步：打开通道，编辑实验信息，根据您的需要，输入相应的**实验标题、实验者、实验单位、实验简介**，另外工作站还自动给出实验时间和实验方法。如下图 6 所示：

第三步：编辑实验方法：点击方法，依次设置**采样控制、积分、组分表、谱图显示**等。

如果您是第一次使用，您可以根据您的实际情况，结合工作站给出的缺省方法进行**修改**，然后另存为一个**方法文件（.mdy）**。下次只要重新打开这个方法（参见第四章相关章节）就可以了。具体操作按下图所示：

图 6


接下来您便可进行数据采集了。点击**采集数据**，如下图所示：

第四步：采集数据

1) 如果您只想采样，一共有四个方法供您选择：

最简单的方法是按下相应通道的**遥控开关**；

第二个方法应该是用鼠标单击右上角的相应通道的**采样按钮**。



第三个方法是：单击**数据采集**菜单，再单击谱图监视窗口右边的**采集数据**。

第四个方法是：按热键 **F5** 键（通道 1）、**F7** 键（通道 2）。

2) 当您设置的停止时间到了，或在您单击**停止采集**时，工作站就自动将谱图及实验信息保存在依照您设置的文件保存方式而生成的 ORG 文件和相应 DAT 数据文件里，并弹出一个对话框提示您。当您不需要保存谱图时，您只要单击**放弃采集**就可以了。

3) 如果您想先看看色谱仪输入的信号，您先单击**数据采集**按钮以后，再单击图 1-31 中**查看基线**按钮即可。

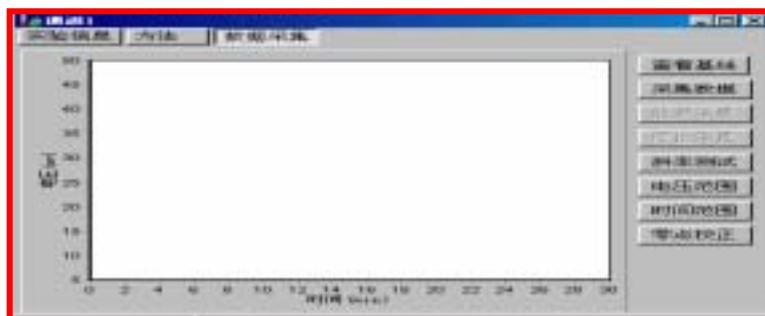


图 1-31

4) 如果您想测试一下色谱信号的斜率，您可以单击图 1-31 所示的**斜率测试**按钮，工作站即自动弹出一个窗口，告诉您斜率测得值结果，并提示是否需要采用。您只要用鼠标选择一下就可以了。

5) 您看到的谱图监视窗口右边还有**电压范围**、**时间范围**等按钮，如图 1-31 所示。这是为了方便您将谱图看得更清楚一些，您需要哪一个功能，只要单击相应按钮并输入相应数值即可。

2.3 标准操作步骤

2.3.1 简单的 N2000 色谱工作站应用分析操作步骤

当你进行色谱实验分析时，请按以下顺序操作：

1. 2.2) 节第一、二步操作进行 N2000 工作站。点击图 1-31 所示的**查看基线**，观察色谱仪基线，待基线走稳，调整色谱仪的零点，使数据采集监视窗中的输入电平值在 5000uv 或 0uv 附近。

2. 将试样注入色谱仪，同时按下**采集数据**按钮（或按下遥控开关），可看到谱图窗内画出色谱图。

3. 分析结束即峰出完后, 按下**停止采集按钮**。

2.3.2 面积归一法

1. 分析前的准备

1). 色谱主机调零, 使监视窗中的输入电平值在 5000uv 或 0uv。

2). 点击**采样控制**, 设置采样结束时间(自动采集停止时间)、文件前辍、数据采集保存路径、采样结束自动积分及自动打印报告。

注:一般情况下, 初次进样分析, 色谱分析报告可不打印出来, 则应在采样控制中取消采样结束自动打印报告一项。

2. 进样分析

1). 由通道窗口中选择**方法**, 选择积分中的**面积和归一法**选项, 在积分参数表中编辑适当的参数。

2). 设置采样结束自动打印报告一项及文件前辍方式。

3). 设置谱图显示。

4). 设置报告打印选项。

5). 色谱仪进样, 同时按下摇控开关。

注:可同时操作两个通道。

6). 峰出完后, 点击**停止采集按钮**, 即分析结束, 系统会自动打印出实验结果。

2.3.3 非面积归一法(已知校正因子)

1. 分析前的准备

1) - 6) 同面积归一法, 只是不要打印报告一项。

7). 点击**方法**, 选择**组分表**一项, 编辑已知校正因子的 ID(组分)表。

2. 进样分析

1). 由“方法”中选定适当的定量方法, 调出刚进样所采集的谱图文件。

2). 根据样品设定积分参数表。

重复 1. 分析前的准备 1) - 6) 步操作。

2.3.4 非面积归一法(未知校正因子)

1. 分析前的准备

1). 准备好有关的标准样品。若仅用单点校正, 则准备一个标样; 若使用多点校正, 则准备多个各组分浓度互不相同的标样 1#、2#、..... N#。

2) - 7) 同非面积归一法(已知校正因子)步骤 1) - 6)。

2. 校正分析

1). 由积分中选择**面积外标法**或其它适当的定量非归一方法。

2). 进 1 个(或 N 个)标样, 并按下摇控开关。

3). 点击**校正按钮**, 当系统跳出校正窗口时, 点击**组分含量**, 输入相应的各组分含量。

4). 点击**加入标样**, 选择刚采集的标样谱图文件, 并打开即可。

5). 要多点校正, 请重复 2) - 4) 步, 直到你点击**校正完毕**。

6). 查看校正曲线和校正因子。

7). 点击**另存按钮**, 将这一操作步骤保存为一方法文件(.MDY); 以便下次做同一样品分析时调用。

3. 分析未知样品

1) 设置合适的积分参数表。

将未知样品注入色谱仪, 待谱图走完后, 按下**停止采集**。

第三章 N2000 型色谱工作站的有关概念

3.1 本工作站需用到的部分色谱专业术语

3.1.1 色谱图的有关概念

色谱图：色谱柱流出物通过检测器系统时所产生的响应信号对时间或者说载气流出体积的曲线图

色谱峰：色谱柱流出组分通过检测器系统时所产生响应信号的微分曲线。

基线：峰的起点与终点之间所连接的直线

峰高：从峰的最大值到峰基线的距离

峰宽：在峰两侧拐点处所作切线与峰基线相交两点之间的距离

半峰宽：通过峰高的中点作平等于峰底的直线，此直线与峰两侧相交两点之间的距离

峰面积：峰与峰基线之间的面积

3.1.2 峰处理参数

色谱峰检测、基线漂移的修正、峰起落点的确定、分割分离不完全的峰、测定峰面积等谱峰处理，都是根据设定的峰处理参数（如峰宽、斜率、漂移量、最小峰面积、时间变参、时间程序表及积分事件表）等进行的，其有关概念见下表：

参数	单位及范围	功能与说明
峰宽	0~50 (5) 秒	删除峰宽比设置值小的峰，过程如同筛子以最小有效峰的半高处的宽度为依据来设置，最小半峰宽，可从谱图显示处估计该设置值。
斜率	0~99999.99 (70) (微伏/分)	峰检测灵敏度，用于确定峰的起点与终点
最小峰面积	0~99999.99 (100) (微伏·秒)	删除面积(峰高)比设定值小的峰,用于删除分析过程中面积相对较小的不相关峰(如仪器噪声)
漂移	0~99999.99 (0) (微伏·秒)	确定基线变化程度,实现峰面积的自动分割置“0”则进行自动修正
时间变参	0~2000 (0) (分)	依据色谱峰的峰形规律,在到达设定时间后,斜率减半,峰宽加倍,置“0”根据峰宽与实际峰形的关系,自动改变,如不想使用则设置一个比停止时间大的值
锁定时间	0~99999.99 (0) (分)	删除分析开始至锁定时间之间的峰,主要用于删除分析开始的一段时间内出现的空气峰,溶剂峰,负峰等不相关峰
样品量	0~999999.99(100)	分析样品的重量,不能置零,对非归一法有效

注：表中括号内数据为系统默认值。

3.2 色谱处理的相关概念

3.2.1 数据采集：在采集数据的过程中，分析仪器所输出的信号在采集器中由模拟信号转化为数字信号。数字信号传送到 N2000 色谱工作站并保存在信号数据文件中。

3.2.2 积分：积分是从信号曲线上确定峰并计算其大小。积分是定量计算必不可少的。N2000 色谱工作站积分时，先是辨别每一个峰的开始及结束时间，并用“|”符号标记这些点，同时寻找这些峰的顶点，确定保留时间，建立基线，计算峰面积、峰高及峰宽。这些过程由积分参数表、时间表、手动积分事件表控制。

在实际运行中，色谱工作站常常必须处理非常复杂的色谱问题。在一次运行中，峰的大小可能变化很大，而且峰经常是以很小的浓度出现。系统噪声，漂移等干扰会影响工作站用来计算峰面积和高度的基线，最终会导致色谱过程难以完全将峰分离。只要有可能，就优化色谱分析方法产生分离效果。当由于某些原因而难以做到时，色谱工作站必须处理复杂峰。

因此，我们知道峰的积分是一项复杂的工作，尽管我们浙江大学智能信息工程研究所的增强型智能算法尚不能对极差的色谱峰完全补偿，但我们的 N2000 型色谱工作站能够克服噪声、漂移和峰的不完全分离等问题，并从较差的色谱图中获得可重复的结果。

3.2.3 . 定量：使用峰面积或峰高来确定样品中化合物的浓度，包括以下过程：弄清并鉴别您所分析的化合物；建立分析含有这种化合物样品的方法；分析含有已知化合物浓度的一个或几个标准样品，以获得该浓度下的响应，并计算出响应因子；分析未知浓度的化合物样品，以得到未知浓度的响应；将未知浓度的样品与标准样品进行比较，并利用标准样品的校正因子来确定未知样品中化合物的浓度。

为了获得未知样品响应与标准样品的有效比较，必须在相同的条件下采集和处理数据。

3.2.4 . 校准：校准是通过进样分析指定的准备好的标准样品，来确定计算绝对组分浓度的响应因子的过程。

重复次数：同一浓度的标准样品平行进样的次数

校准点数：由一个校准不同样品浓度的校准点组成。

标准样品：也叫校准样品或标准混合物，是含有用于定量的已知数量的化合物样品。标准样品可从国家标准试剂供应商处买到。

标准曲线：是从一个或多个标准样品中获得的化合物的数量与响因数据的图形表示。

3.2.5 . 报告：报告包含所分析样品的质及量的信息。报告可以直接打印，或在屏幕上显示，报告可包括运行中所测峰の詳細信息及所得的信号图。

3.3 本工作站的特有概念介绍：积分方法、组分表、谱图、ORG 文件、MDY 文件、DAT 文件、手动积分事件表等。

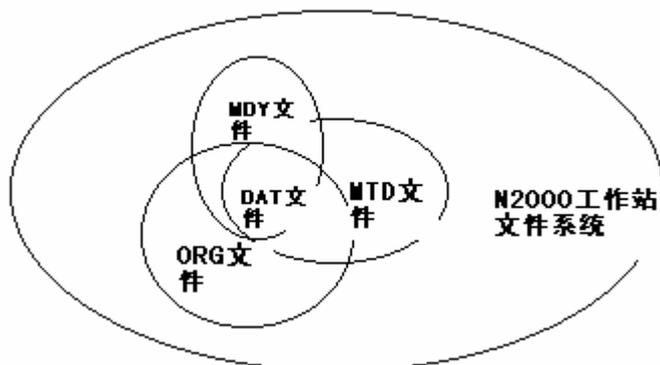
3.3.1 . 方法(.MTD 文件)

方法是指控制工作站对色谱仪的信号进行显示、采样保存、分析计算、打印、同时记录试验条件的一个程序，包括采样控制、积分参数、组分表、谱图显示控制、报告编辑格式、仪器条件等。

本工作站所用的方法有三类：贮存方法、缺省方法、现用方法，扩展名为.MTD

针对不同的样品设置相应的方法，可以使您更准确更快速更方便地进行样品测试，并真实地记录样品的实验条件。所以，在日常的操作中应养成良好习惯；即取一个简单直观的方法文件名并及时地保存修改过的方法。

N2000 工作站文件系统结构图



3.3.2 . 组分表(即 ID 表)

工作站组分表就是用来鉴别峰，判定组分名称，进行非归一法计算时的依据。

3.3.3 . 谱图 DAT 文件

即只包含色谱数据信息的文件，与原 N 型和 UPPER 色谱工作站兼容。

3.3.4 . ORG 文件

原始处理数据文件，除了谱图数据以外，还包括实验信息与样品分析方法、仪器条件、积分及定量计算结果、结果报告等信息。这是只可查看不可编辑的二进制文件，因而可确保结果的原始性，符合 ISO9000 系列及美国 GMP 认证规定。后处理时不许对其进行修改，修改后保存为 MDY 文件。

3.3.5 . MDY 文件

对原始处理数据（ORG 文件）进行修改后保存的文件。

3.3.6 . 实验日志

即您利用本工作站时对方法的操作、数据的采集等在线工作站的自动记录。

可记录整个系统的运行情况，包括方法的建立、保存、另存、加载、实验数据的采集及文件的保存。

3.3.7 . 手动积分事件表

即您对谱图手动画基线等手动积分事件的集合。

3.4 本工作站通用的文件操作方式

1. 方法的加载：从磁盘中调入一个已有方法到内存中，作为现用方法处理色谱数据。
2. 方法的保存：将内存中正在使用的方法以加载时的文件名保存到磁盘中，以免因调用其他方法或突然停电而将修改后的方法丢失。
3. 方法的另存：将内存中正在使用的方法作为另一个文件名保存到磁盘中。
4. 方法的缺省：将工作站内置的方法调出作为当前方法。
5. 谱图的打开：从磁盘中调入一个已有的谱图作为当前对象进行操作，打开之前可以在打开谱图的下方小窗口进行预览及放大。
6. 谱图的保存：将当前内存中的谱图以另一个文件名保存到磁盘中，需要选择或者输入一个文件名，保存的扩展名为 MDY。

3.5 本工作站通用的谱图操作方式

1. 谱图的放大：在谱图窗口内，按住鼠标左键，从左上到右下选一个区域，放开鼠标，所选区域即被放大至全窗口。
2. 谱图的缩小：与放大的操作步骤相反，即在谱图窗口内，按住鼠标左键，从右下到左上拉一个区域，放开鼠标，谱图即还原回被放大前的全窗口。
3. 谱图的拖动：即在谱图窗口内，按住鼠标右键，任意移动鼠标，即可将谱图的其他部分显示在窗口内。
4. 选择一个色谱峰：按住 shift 键，用鼠标在谱图上点击所需要的色谱峰，然后再点击插入，工作站自动给出相应的保留时间，以方便您进行组分表的编辑。
5. 选择一个时间段：按住 shift 键，用鼠标在谱图上拉出所需要的时间范围，在编辑时间程序表时用。
6. 谱图的全量程显示：以最大的峰高为纵坐标，将谱图的所有峰都显示在窗口内。工作站默认为本选择。
7. 谱图的自动显示：即工作站根据谱图的实际情况，自动选择一个最佳的电压作为纵坐标，以美观的格式显示谱图，方便您的操作。
8. 范围不变：即工作站强制以您设置的电压范围和时间范围显示谱图。

第四章 N2000 在线色谱工作站系统介绍

N2000 色谱工作站是在原 UPPER 色谱工作站基础上，由本研究所自行开发的基于 WINDOWS 操作平台、具有友好操作界面的色谱分析应用软件。本章节我们将对 N2000 在线工作站进行详细介绍。

4.1 概述

N2000 在线色谱工作站包括一个主菜单、一个工具栏及弹出对话框；本工作站是双通道的，因此你可以连接两台色谱仪同时打开两个通道。N2000 在线工作站系统界面如图 4-1 所示：

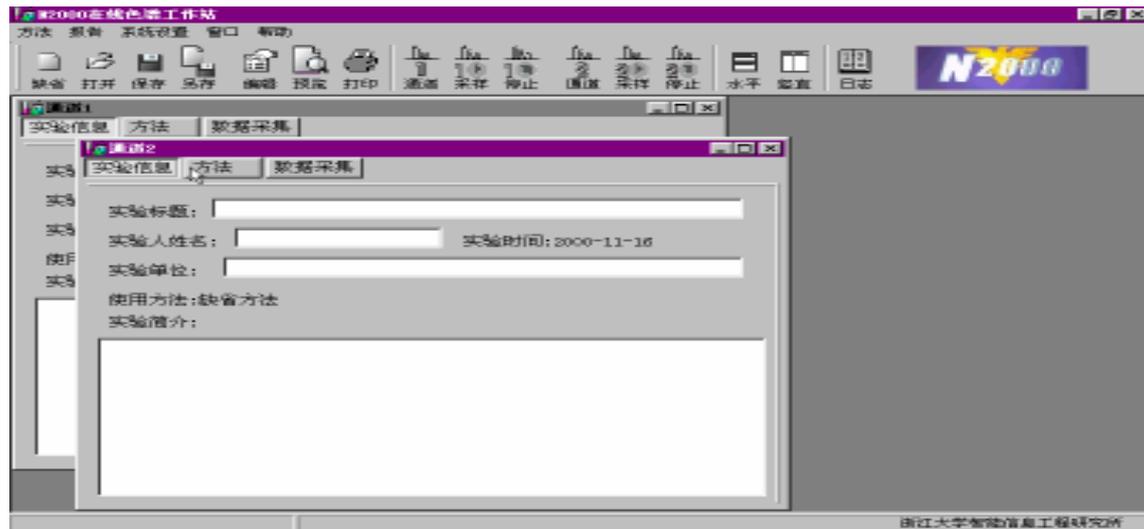


图 4 - 1

4.2 主菜单

4.2.1 主菜单：包括方法、报告、系统设置、窗口及帮助四个菜单项。如图 4 - 2 所示：

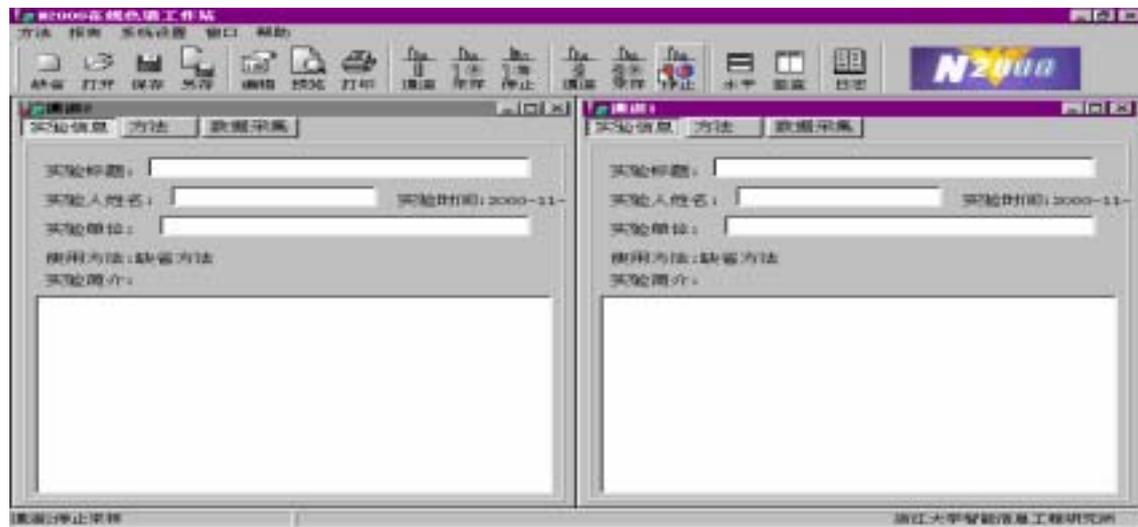
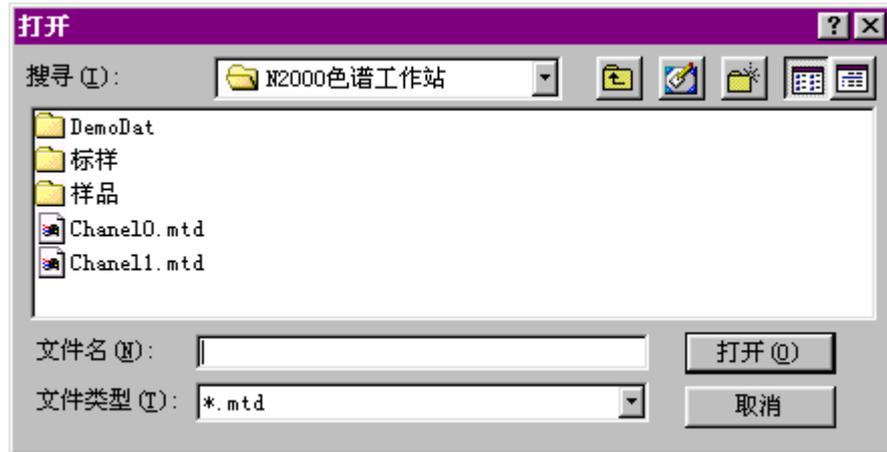


图 4 - 2

4.2.1.1 方法菜单：主要用于对进样操作方法（关于操作方法的定义请参见）进行选择。拉开方法菜单，你可以看到缺省、打开、保存、另存四个菜单项。如图 4 - 3 所示：


图 4 - 3

打开：用于打开已经存在的操作方法，其热键为 Ctrl+O。点此项你将看到如图 4 - 4 所示的对话框。


图 4 - 4

在此对话框中，你可以打开试验所需要的操作方法。从图中，我们可看到系统所默认的方法 Chanel0.mtd。你也可打开你所需要的操作方法，只要你找到所保存方法文件的正确路径即可。为让你便能熟悉地操作该对话框，有必要具体介绍一下。

窗口（对话框）的标题（打开）栏最右边设置了两个功能按钮：（帮助）和（关闭）。

：点击此按钮，你将获得系统提供的帮助。点击，系统将鼠标变成；鼠标后将带上一个问号标记，表示你要从系统获得帮助；剩下的你只须在有疑问的地方用鼠标点击即可，具体操作可参见如何获得系统帮助。

：点击此按钮，你将关闭打开对话框，回到 N2000 在线系统。



对话框的第二栏（搜寻栏）设置了六个工具按钮：下拉、上移、查看桌面、新建文件夹、列表、详细资料.

：通过此工具选项，你可以找到所需的保存实验方法的路径，如图 4 - 5 所示，其功能相当于一层或多层的下拉出菜单。

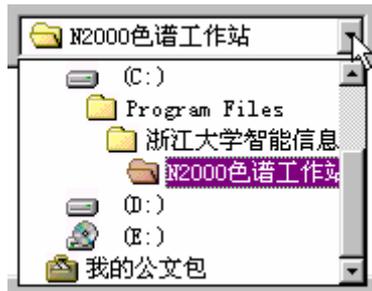


图 4 - 5

你可以通过拖动矩形条进行搜寻所需要的路径。



: 你也可以通过此工具按钮进行路径查找，其作用相当于一层层上移寻找路径。



: 点击此项，你可以查看整个电脑桌面，如图 4 - 6 所示。



图 4 - 6



: 这一工具按钮主要用于创建你所需要的新文件夹，新建文件夹的具体操作如图 4 - 7 :

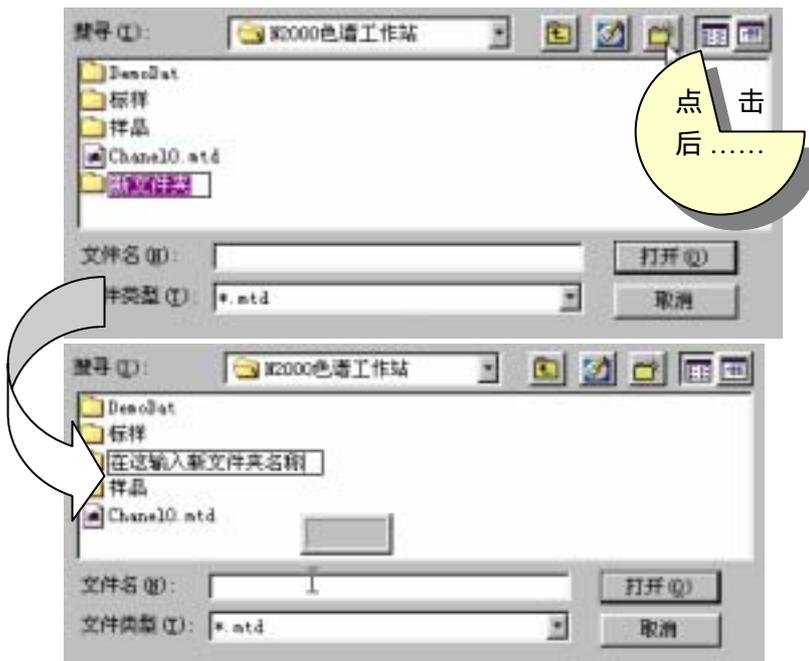
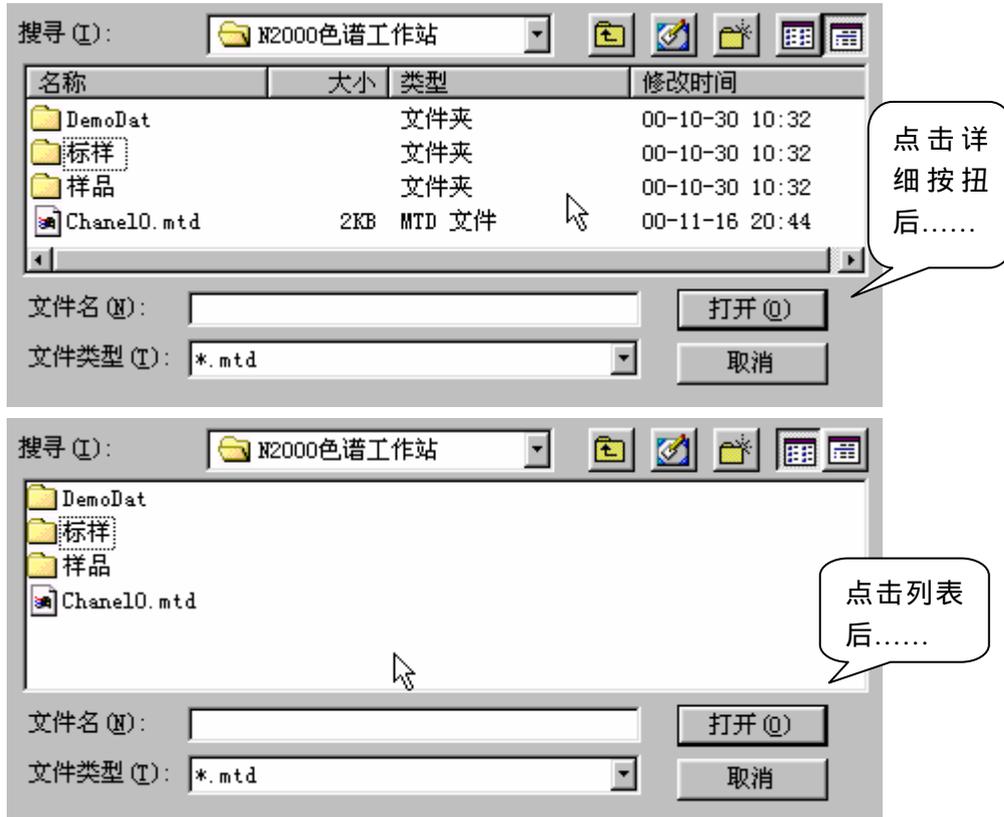


图 4 - 7

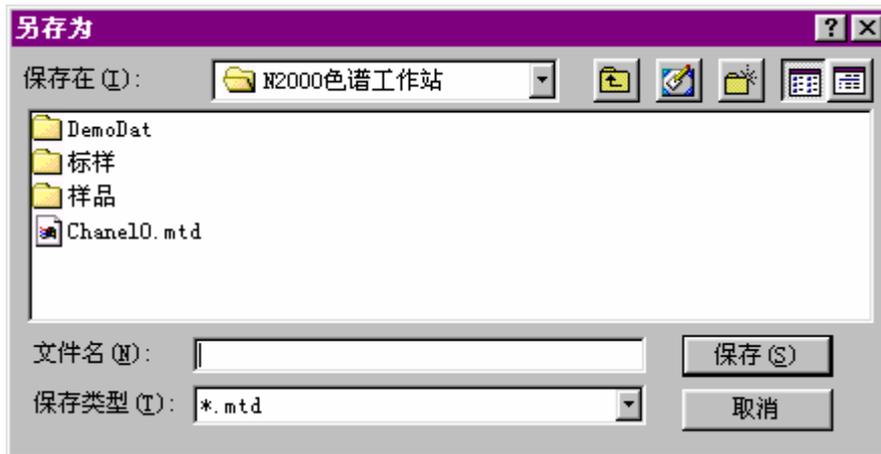
 和  : 这两个工具按钮用于对搜寻路径文件及文件夹进行列表、详细说明。



另外对话框中还设计了文件名和文件类型两项标题栏。

保存：用于保存已经修改好的操作方法 Ctrl+S。

另存：用于保存已经编制好的操作方法 Ctrl+A，点击此菜单项将跳出下述窗口。



另存菜单选项的具体操作用法与打开菜单一项相同，在此我们不再进一步介绍了。

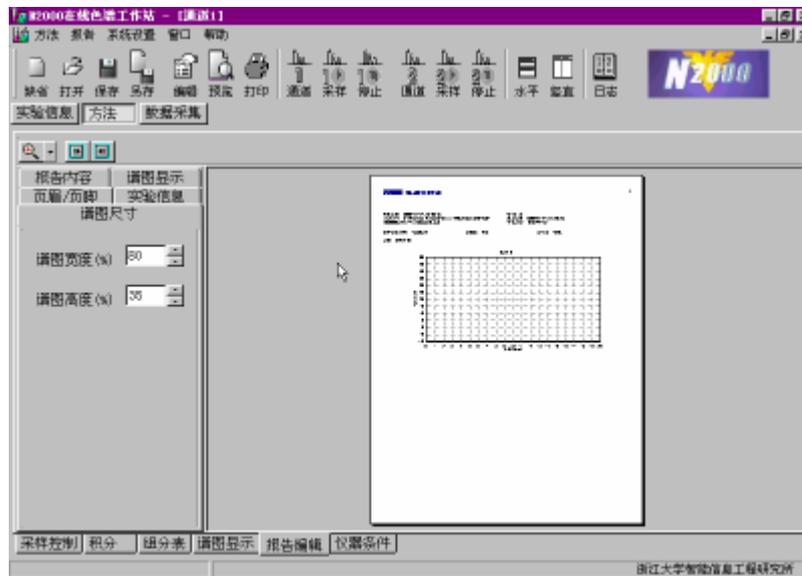
缺省：用于打开本软件系统所默认的操作方法 Ctrl+D，只需点击这一菜单项，系统会自动会将使用方法转为默认方法。

4.2.1.2 报告菜单：用于试验报告进行编辑和修改等操作。拉开此菜单项你可以看到编辑、预览、打印三个菜单项，如图 4-8 所示。



图 4-8

编辑：用于对试验报告进行编辑。



如何编辑实验报告详细情况参见 4.4.5 报告编辑窗口一节。

预览：主要用于对编辑或修改好的实验报告进行预浏览，其热键为 Ctrl+Alt+P。

打印：用于试验报告的打印输出，其热键为 Ctrl+P。

4.2.1.3 系统设置菜单：主要用于对工作站与计算机信号输入及输出之间的串行口位置的设置，同时你也可在此对数据采集频率进行设置。它包括两个菜单项：串行口和采集频率。如图 4-9 所示：

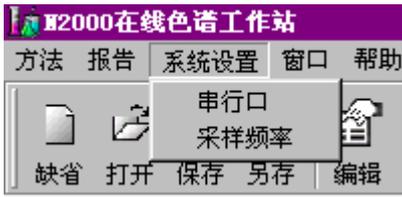


图 4-9



图 4-12

串行口：此菜单项可以对你所拥有的工作站与计算机所联接和串行口进行设置和更改。点击此项，系统将弹出一窗口，如图 4-10 所示：

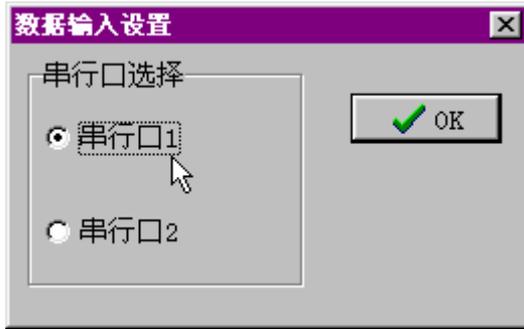


图 4-10

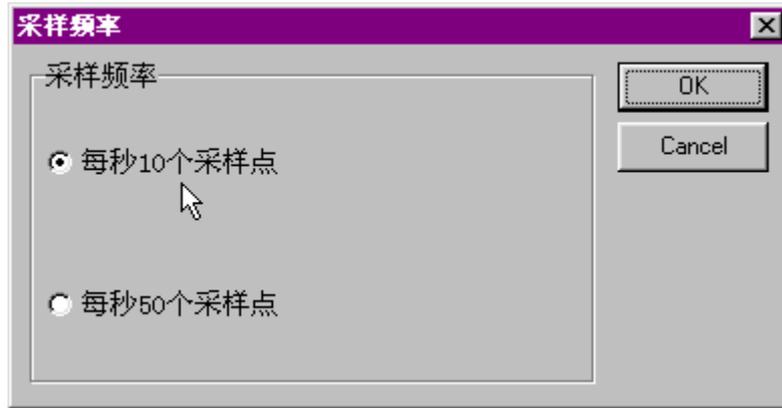


图 4-11

采样频率：你可以在此对采样频率进行调整设置。点击该菜单项，你可以看到如图 4-11 所示对话框，

4.2.1.4 窗口菜单：主要用于对采样通道进行打开、调整等操作。拉开此菜单你可以看到水平、竖直、通道 1、通道 2 四个菜单项。如图 4-12 所示。



图 4-12



图 4-13

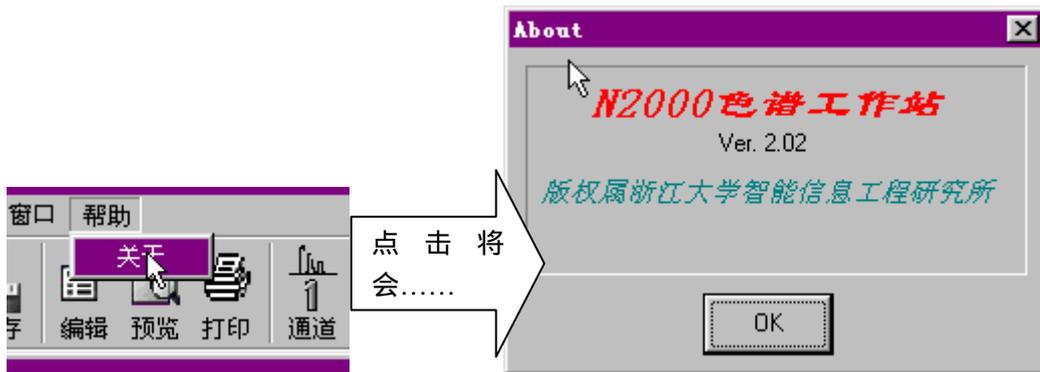
水平：点击此项，系统将已经打开的两个通道水平排列。如图 4-13 所示：
 竖直：点击此项，系统将已经打开的两个通道竖直排列。如图 4-14 所示。


图 4-14

通道 1：点击此项，你将打开采样通道 1，其热键为 F3。

通道 2：点击此项，你将打开采样通道 1，其热键为 F4。

4.2.1.5 帮助菜单：主要用于对软件所有权进行说明。点击此项菜单，你将看到一关于软件所有者进行说明的对话框，如图 4-15 所示。


图 4-15

4.3 工具栏


图 4-16

N2000 在线色谱工作站主菜单之下设计的是工具条一栏，如图 4-16 所示。包括十六项：

4.3.1 缺省工具条 ：作用与方法菜单中缺省项相同。

4.3.2 打开工具条 ：作用与方法菜单中打开项相同。

4.3.3 保存工具条 ：作用与方法菜单中保存项相同。

4.3.4 另存工具条  : 作用与方法菜单中另存在项相同。

4.3.5 编辑工具条 、预览  及打印  与菜单项报告中各项作用相同，在此不再一一介绍。

4.3.6    这三个工具条是对通道 1 采样控制进行操作的。

4.3.7    这三个工具条是对通道 2 采样控制进行操作的。

4.3.8   这两个工具条功能与窗口菜单中水平和竖直两项相同。

4.3.9  工具条 : 点击这一工具条 , 将弹出一个称为实验日志的窗口 , 如图 4-17 所示 :

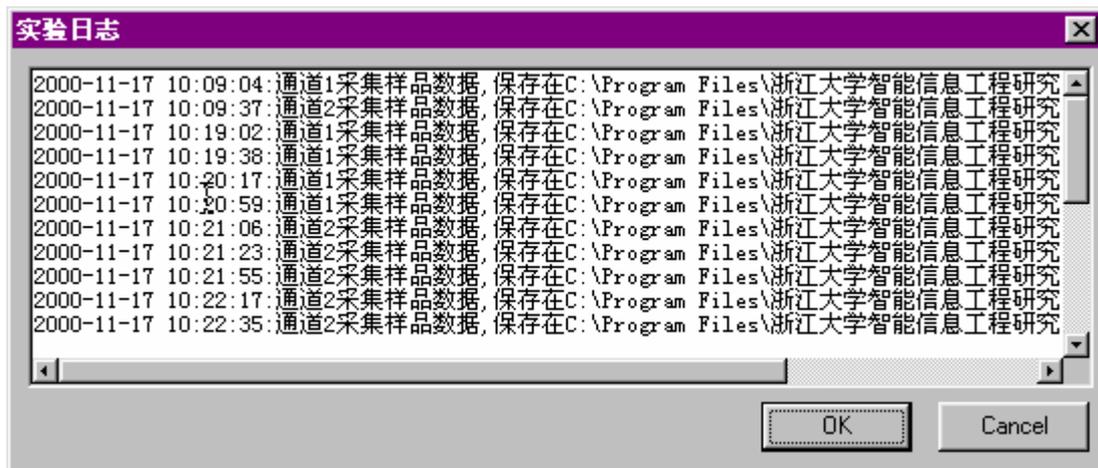


图 4-17

此窗口主要功能是：它将你每次实验所做的事件贮存起来，以便以后查看。

4.4 采样通道窗口

我们以通道 1 窗口为例进行介绍。

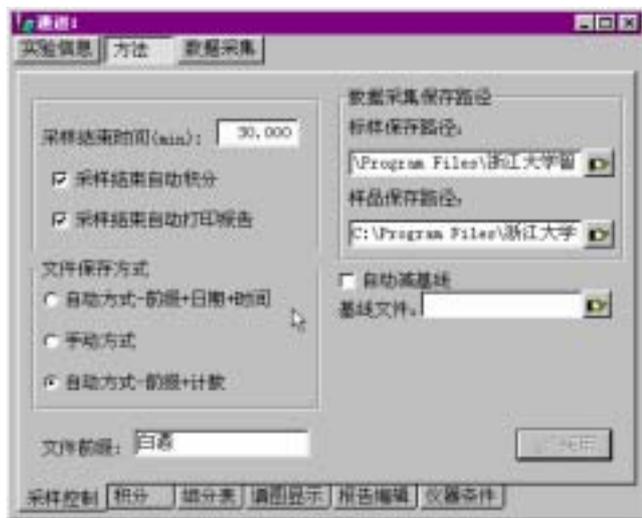


通道窗口包括实验信息、方法及数据采集三个功能栏。

实验信息包括实验标题、实验人姓名、实验单位、实验简介、实验时间、使用方法；其中前四项是根据实验需要进行填写的

4.4.1 实验信息：我们先对实验信息一栏进行介绍。如上图所示。

4.4.2 方法：在这我们将介绍方法一功能栏，如图 4-18 所示：

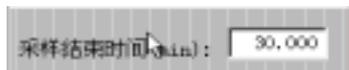


方法功能栏包括采样控制、积分、组分表、谱图显示、报告编辑及仪器条件。

而采样控制又包括对采样结束时间、文件保存方式、文件前辍、数据采集保存路径及基线的处理几项功能。在这你可以根据实验所需进行编辑。

图 4-18

4.4.2.1 先介绍一下采样控制：



：这一栏用来控制实验采样自动结束时间，可根据实验实际所需要的时间长短进行输入。

采样结束自动积分：这一栏用于控制实验积分的方式。划标记表示实验采样结束后系统积分自动完成，得出我们实验所需的结果。否则实验结束后将需要你进行手动积分计算出结果。这可以根据实验的需要进行积分方式的选择。

采样结束自动打印报告：划标记表示实验采样结束后系统自动打印实验报告，得出我们实验所需的报告结果。否则实验结束后将需要你进行离线数据后处理才能打印得出实验报告结果。这可以根据实验的需要进行报告打印方式的选择。

自动方式-前缀+日期+时间
 手动方式
 自动方式-前缀+计数

这三项是用于实验结束后文件的保存方式进行控制选择。第一项表示文件以你所输入的文件名为前缀名、以实验时的日期和时间做为后缀保存文件名，并且采用自动保存；手动方式是需要你在实验结束后输入文件保存名；第三种方式是以你输入的文件名为前缀，以 000n++ 计数为后缀的文件保存方式，每保存一个文件系统计数自动加一。

文件前缀:

: 为了便于区分各不同样品保存结果，我们设计了这一栏。

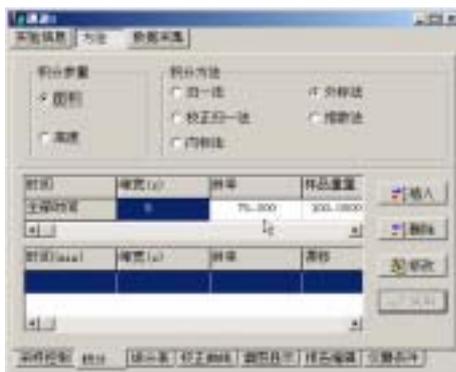
标准保存路径:

这二项用于设置标样及样品谱图文件的保存路径。你可以根据需要进行保存路径修改。其中标样是在校正采集标样时才保存在你所设置的标样保存路径下，其它一律当作样品谱图进行保存的。

自动减基线

这两项用于消除基线漂移影响时进行设置的。

4.4.2.2 积分：包括积分参数、积分变量及积分方法的设置。



4.4.2.2.1 积分参量的选择：系统提供了两种方法可选择，你必须根据实验所需将积分参量设置为面积或高度方式。

积分参量

 面积
 高度

积分方法

 归一法
 校正归一法
 内标法
 外标法
 指数法

4.4.2.2.2 积分方法的选择：在这我们将实验方法设置为归一法、内标法、外标法、校正归一法及指数法六种积分方法，以供你根据实验田所需进行选择。

4.4.2.2.3 积分参数的选择：在这你可以对峰宽(s)、斜率、样品重量、最小面积(uv*s)、时间变参(min)、锁定时间(min)及漂移量进行选择设置。



为了便于积分参数的介绍，有必要对本工作站所需用到的相关概念作一介绍。

A 处所指为积分参数表,其相关概念如下表所示:

参数	单位及范围	功能与说明
峰宽	0~50 (5) 秒	删除峰宽比设置值小的峰,过程如同筛子以最小有效峰的半高处的宽度为依据来设置,最小半峰宽,可从谱图显示处估计该设置值。
斜率	0~99999.99 (70) (微伏/分)	峰检测灵敏度,用于确定峰的起点与终点
最小峰面积	0~99999.99 (100) (微伏·秒)	删除面积(峰高)比设定值小的峰,用于删除分析过程中面积相对较小的不相关峰(如仪器噪声)
漂移	0~99999.99 (0) (微伏·秒)	确定基线变化程度,实现峰面积的自动分割置“0”则进行自动修正
时间变参	0~2000 (0) (分)	依据色谱峰的峰形规律,在到达设定时间后,斜率减半,峰宽加倍,置“0”根据峰宽与实际峰形的关系,自动改变,如不想使用则设置一个比停止时间大的值
锁定时间	0~99999.99 (0) (分)	删除分析开始至锁定时间之间的峰,主要用于删除分析开始的一段时间内出现的空气峰,溶剂峰,负峰等不相关峰
样品量	0~999999.99(100)	分析样品的重量,不能置零,对非归一法有效

注：表中括号内数据为系统默认值。

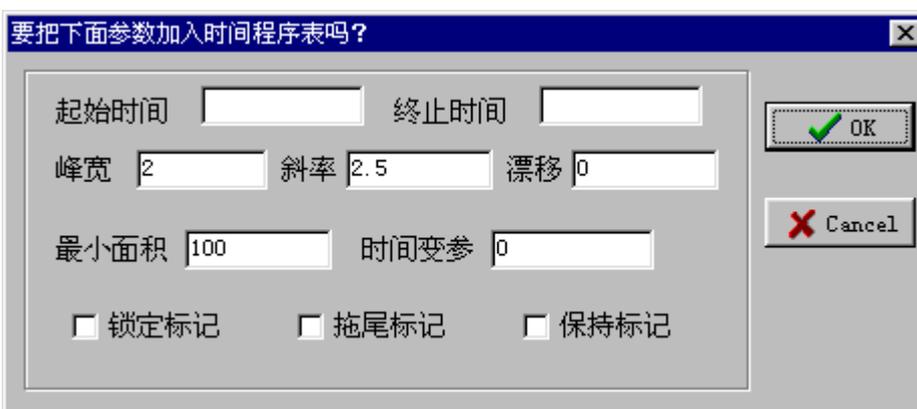
B 处所示为时间程序表,其具体操作如下:

插入 : 当需要在中间时间段进行锁定、拖尾标记等操作时,用此功能按钮。

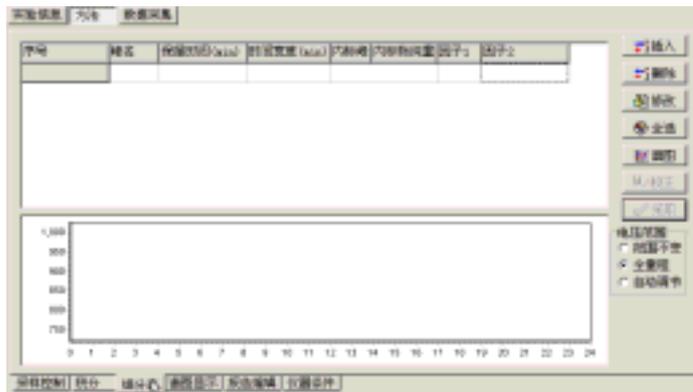
删除 : 当插入的时间程序不正确时,可用此功能按钮进行删除操作。

修改 : 当插入的时间程序表不正确时,你也可用此功能按钮进行修改操作。

点击以上三个选项当中的一项都会跳出如下图所示对话框:



4.4.3 组分表的编辑



组分表的编辑好坏对于除归一法之外的积分方法积分结果表是相当重要的，在此我们详细介绍如何编辑组分表。一般组分表包括三部分：组分名称列表、谱图及功能按钮。

在编辑组分表前你必须先调出一个已存在系统中的谱图数据文件，这需要你点击

谱图 按钮，系统自动弹出一个对话框，如图 4-19 所示：

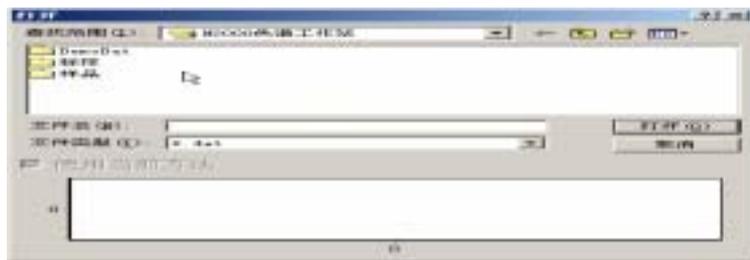


图 4-19

你只需按你刚开始在采样控制中所选择的谱图文件保存路径，找到你实验所需要的谱图数据即可并点击 OK。打开一个谱图后，系统便在谱图栏中显示。如图 4-20 所示：

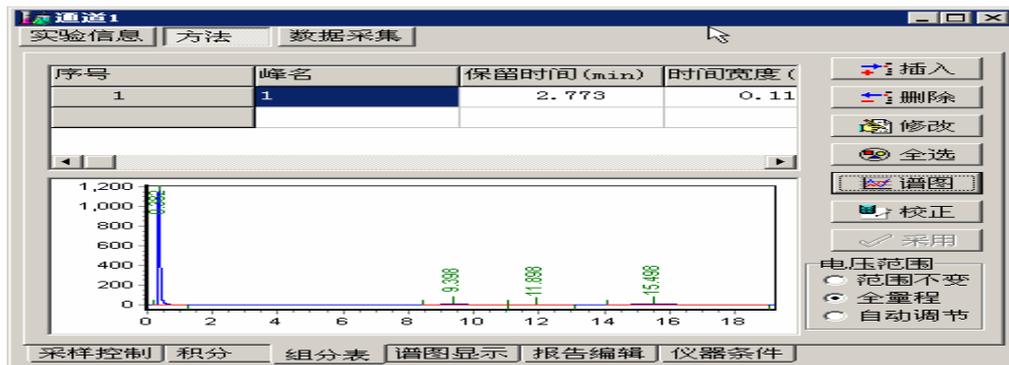


图 4-20

注:在这打开谱图并没有参与积分校正,在作校正时还得重新加入标样.

接下来便可以进行组分表的编辑了。为此我们介绍功能按钮：

插入：此功能按钮用于插入一个组分峰名操作。先按住 SHIFT 键，再用鼠标点击所需要的峰谱图，系统将用黄框框住你所选择的峰，以示标记。如图 4-21 所示：

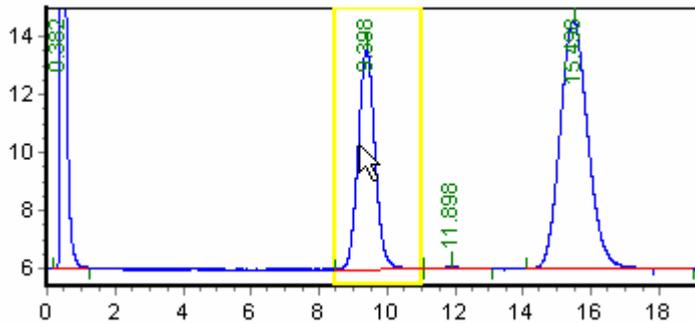


图 4-21

系统将跳出一对话框，如图 4-22 所示：



图 4-22

在此对话框中，输入组分名、峰保留时间（出峰时间）、时间宽度。对于时间宽度输入方式你可有两种选择：绝对和相对数值。如果你所选择的是内标法，还得做上标记，输入内标物量与含量，如果知道因子，你还可以先输入校正因子。做完后，你必须确定你的输入或选择。

删除：此项用于对已插入的峰组分进行删除操作。

修改：此项用于对已插入的峰组分进行修改操作。如图 4-23 所示，点击你要进行修改的组分峰，系统将跳出一对话框，如图 4-24 所示：

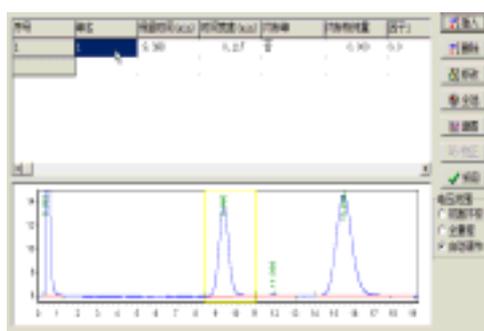


图 4-23



图 4-24

根据你的需要进行修改后，请确定你的输入系统才接受。

全选：对于已打开的谱图数据文件，通常我们全选其组分，然后根据实验的实际所需进行峰组分名的选择。点击这一项，系统将全部谱图峰选取，如图 4-25 所示：

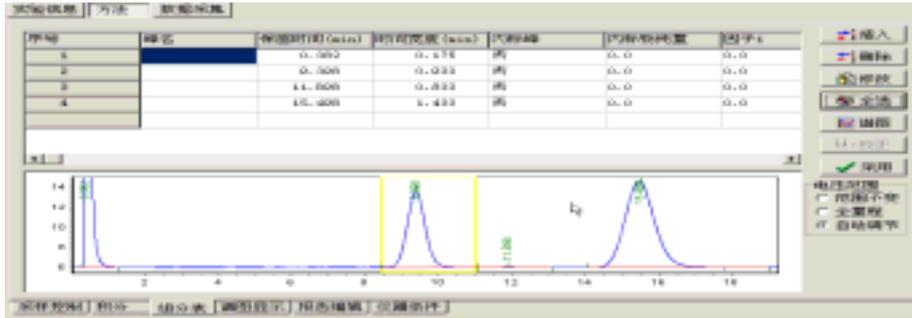


图 4-25

注:编辑组分表时,我们推荐使用 全选 这一项.

选择好所需要的峰后,点击采用 采用 按钮,系统将跳出提交成功窗口。如图 4-26 所示:



图 4-26

谱图 : 在在线工作站中,只能是在这调出谱图数据文件。

校正 : 一旦你编辑好了组分名,如果是非归一法,那么你要么输入已知的校正因子,要么点击这一按钮,进行因子校正操作。点击此项,系统将跳出如图 4-27 所示的对话框:

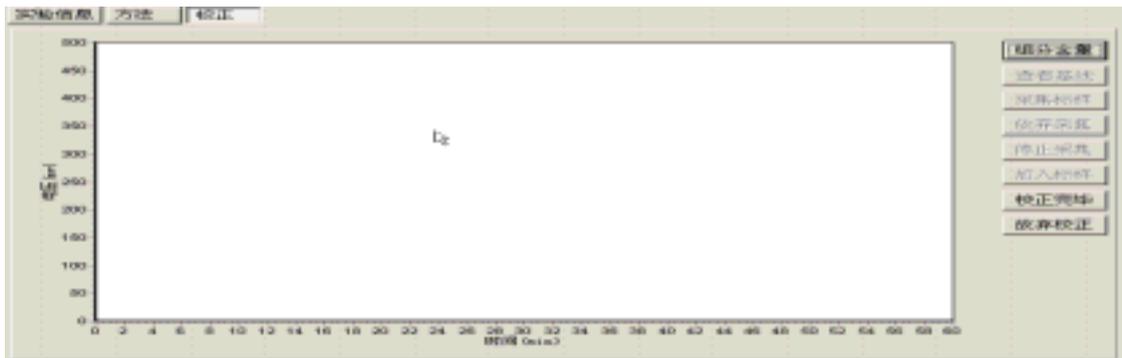
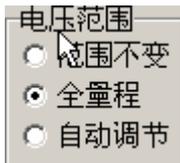


图 4-27

如何进行因子校正,请参见因子校正一节。

采用 :这一菜单按钮用于系统接受你的修改操作。无论你在何处见到这一标志,你都须点击它,否则系统将不理睬你的任何输入。



对于打开的谱图，你可能看得并不清晰，那你可能过这三个选取项进行调节。具体调节所得结果见图 4-28 所示：

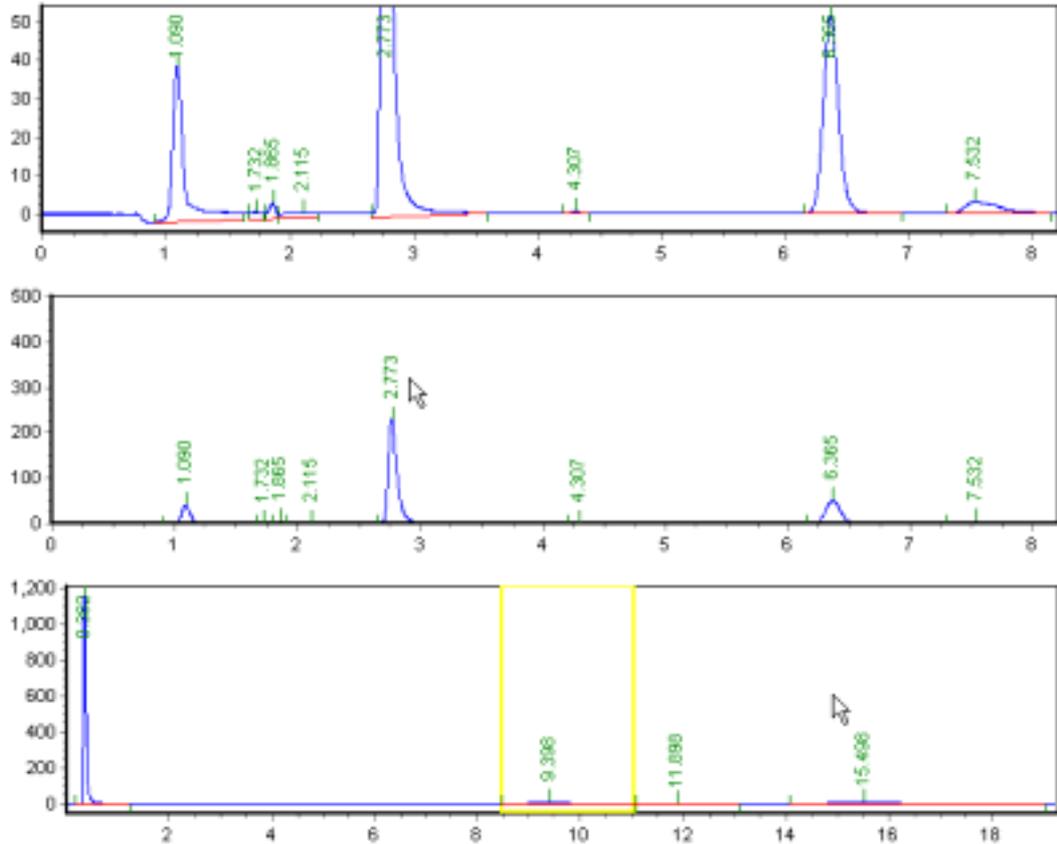


图 4-28

4.4.4 谱图显示设置：这一功能项主要用于对谱图，尤其是用在报告编辑中谱图输出的设置。

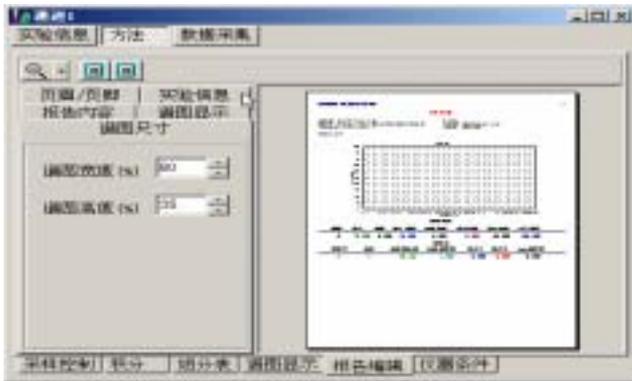


时间显示范围：时间显示的最大和最小值，你可随意设置；但系统数据采集最大时间不超过两小时，最小值不得为负。

电压显示范围：最大和最小值，你也可以随意设置；但系统检测最大范围为 -5~12mv。

显示颜色：你可在这对谱图所显示的颜色进行选择设置。

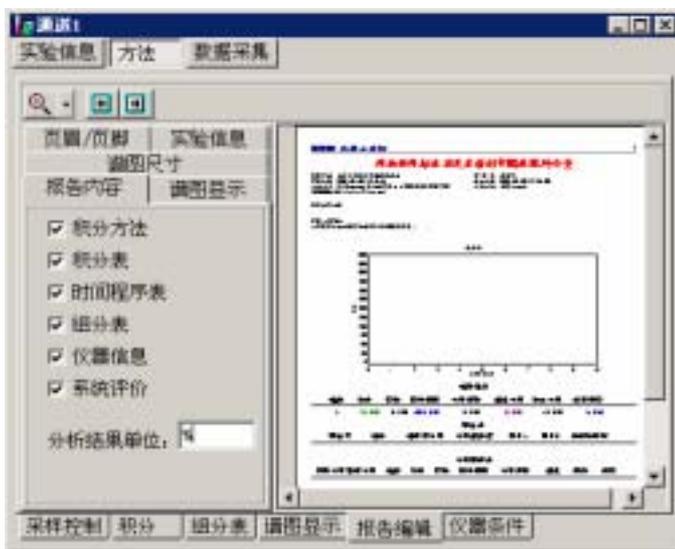
注释内容：你可在这对显示于谱图上的具体内容进行选择。

4.4.5 报告编辑：

图 4-29

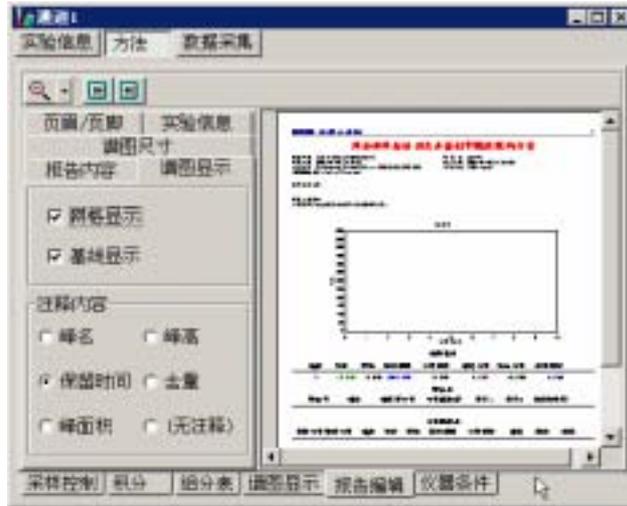
报告编辑包括谱图显示，谱图尺寸，实验信息，报告内容，页眉/页脚的设置。在这你可以定制报告所需的内容。

为了方便用户将分析结果按不同需要而打印出来，我们设计了编辑报告菜单。用户只须点击报告编辑按钮，如图 4-29 所示，可以看到窗口右侧是实际的报告预览情况，您可以根据需要选择左边的报告内容、谱图显示、实验信息、谱图尺寸、页眉页脚等，并可实时看到修改后的报告形状。

其中报告内容包含了实验报告上是否要显示积分方法、积分表、时间程序表、组分表、积分结果等，如图 4-30 所示；


图 4-30

谱图显示包含了网格显示、基线显示、注释内容选项（包括峰名、峰高、保留时间、含量、峰面积和无注释），如图 4-31 所示；


图 4-31

实验信息则是一个关于是否需要打印实验人姓名、实验单位、实验日期、实验简介等的选项，如图 4-32 所示；


图 4-32

谱图尺寸则是指您的色谱图占整个报告的比例，如图 4-33 所示；

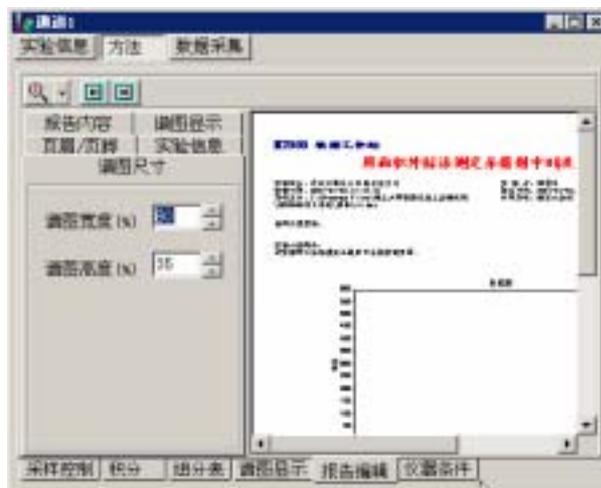


图 4-33

页眉页脚中则可以将您输入的信息在每一页报告上显示并打印出来，如图 4-34 所示。



图 4-34

另外，窗口左上角还有三个按钮让您快速选择预览页的大小，并可上下翻页，如图 4-35 所示。

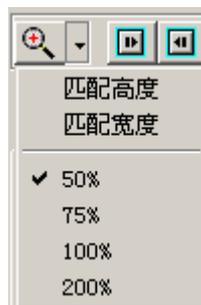


图 4-35

：此功能按钮作为放大预览实验报告的作用。

：本按钮用于查阅预览下一页实验报告。

：本按钮用于查阅预览上一页实验报告。

最后介绍如何输入您的仪器条件。

4.4.6 仪器条件的输入

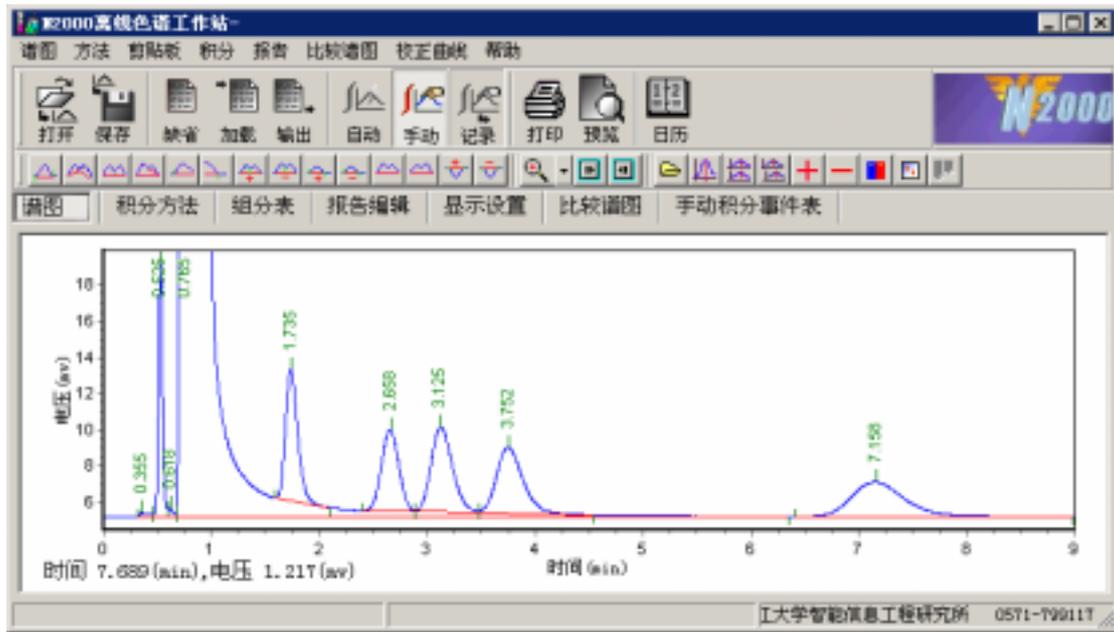
本工作站根据不同的色谱分析仪所需条件而设计了此菜单。您可以从气相色谱、液相色谱、离子色谱、毛细管电泳中选择一种仪器类型如图 4-36 所示：


图 4-36

然后您可以根据需要在相应的项目内输入您的实验信息。同理，在您选择了检测器、进样器和柱温以后，全中文的信息提示会使您输入测试样品时的实验信息时相当顺手。所有这些信息都将作为谱图结果的一部分保存在原始处理结果（即 ORG 文件）中。

到此为止，N2000 在线工作站基本功能已经介绍完毕了。

第五章 N2000 离线色谱工作站操作说明



本章节我们对 N2000 离线色谱工作站进行详细介绍。

在软件开发设计时，我们将 N2000 型色谱工作站分为两大部分：在线和离线工作站。对于离线色谱工作站，除了在线的数据实时采集功能之外，在线所拥有的各项功能，在离线中都能找到。因此在这不再进行介绍了。另外，离线工作站还多了手动积分和比较谱图两项功能，而且你还可以将谱图、积分参数表、时间程序表及组分表、系统评价等粘贴输出到其它软件进行报告编辑。我们在此将一一介绍。

5.1 定制报告

剪贴板的使用及文件的共享：单击剪贴板，选择结果表，可将您所做的分析结果通过 WINDOWS 的粘贴功能送往任意地方，有了这一功能，我们可以进行自己的实验报告的定制。



现在我们定制一个简单的实验报告单：

第一步：设计报告表头，包括实验标题、实验单位、实验人姓名、实验时间、实验方法等。如图 5-1 所示：

实验单位：北京天擎化工有限责任公司	实验者：胡国华
实验时间：2000-12-14, 9:05:14	报告时间：2001-01-03, 15:29:59
谱图文件：D:\色谱工作站\新建文件夹\杀菌剂-0011-027-0280000.org	计算方法：面积外标法

使用仪器类型：液相色谱	梯度方式：恒流	检测器：紫外
仪器型号：DLC-20		
柱温 (°C)：室温		
柱型号：C18		

实验内容简介：
方法简略

图 5-1

第二步：粘贴谱图，点击谱图按钮，拉出输出菜单，点击 WORD，将谱图输出到 WORD 文档中。如图 5-2 所示：

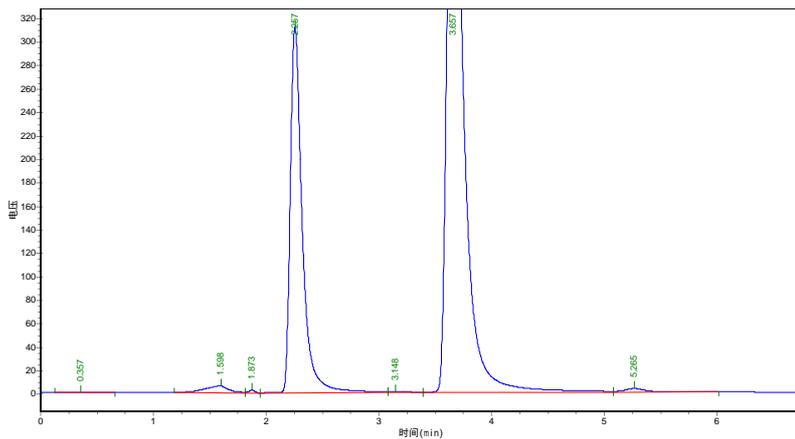


图 5-2

第三步：点击剪贴板，依次将分析结果表、积分表、组分表输出到我们所定制的 WORD 文档中。

第四步：输出校正曲线，点击校正曲线菜单，输出校正曲线到我们所定制的 WORD 文档中。
如图 5-3 所示：

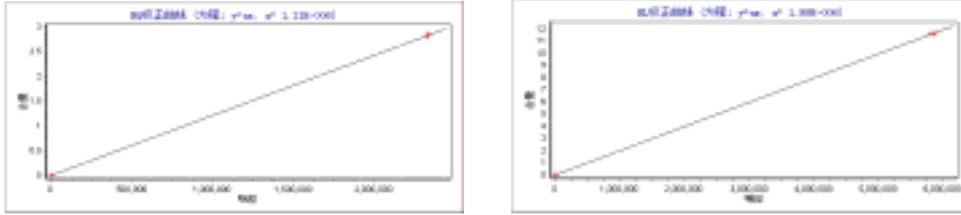


图 5-3

一个完整的实验报告如下页所示：

N2000 色谱工作站
液相色谱分析报告单

实验单位：北京天华化工有限责任公司
 实验时间：2000-12-14, 9:05:14
 谱图文件：D:\色谱工作站\新建文件夹\杀菌剂-0011-027-0280000.org

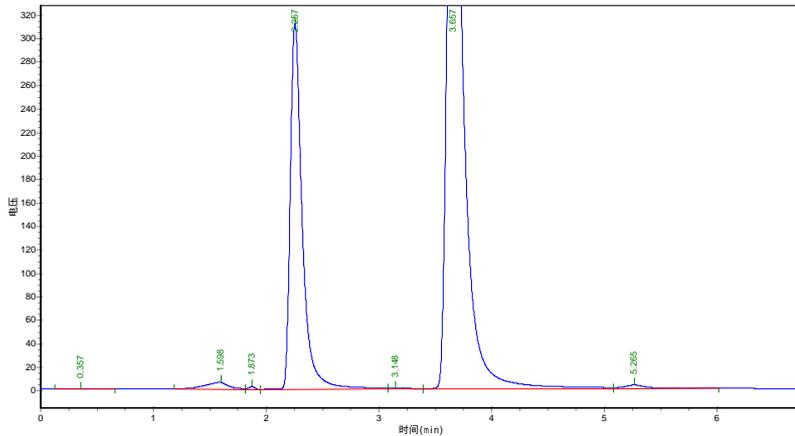
实验者：胡国华
 报告时间：2001-01-03, 15:29:59
 计算方法：面积外标法

使用仪器类型：液相色谱
 仪器型号：DLC-20
 柱温(℃)：室温
 柱型号：C18

梯度方式：恒流

检测器：紫外

实验内容简介：
 方法简略


积分结果表：

峰号	峰名	保留时间	峰高	峰面积	含量(%)
1		0.357	177.125	2803.2	0
2		1.598	6187.717	84666.48	0
3		1.873	2351.011	9657.121	0
4HQ		2.257	310900.8	2321078	2.795
5		3.148	881.967	13327.28	0
6HL		3.657	583684.1	5762326	11.384
7		5.265	3067.521	47368.2	0
总计			907250.2	8241226	14.1798

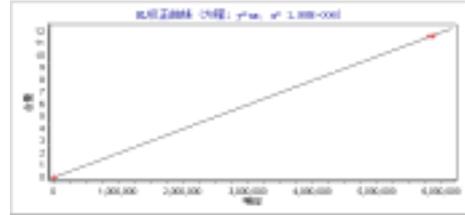
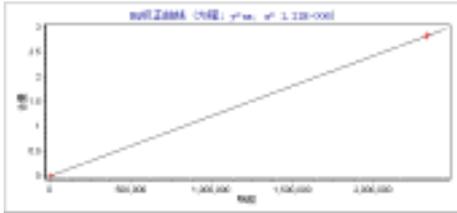
组分表：

组分号	峰名	保留时间	时间窗宽度	斜率	截距	内标物重量
1HQ		2.257	0.292	0	0	0
2HL		3.582	0.2	0	0	0

积分表：

峰宽	斜率	漂移	最小面积	时间参数	锁定时间	停止时间	样品重量
5	5.833	0	1000	0	0	6.763	100.6

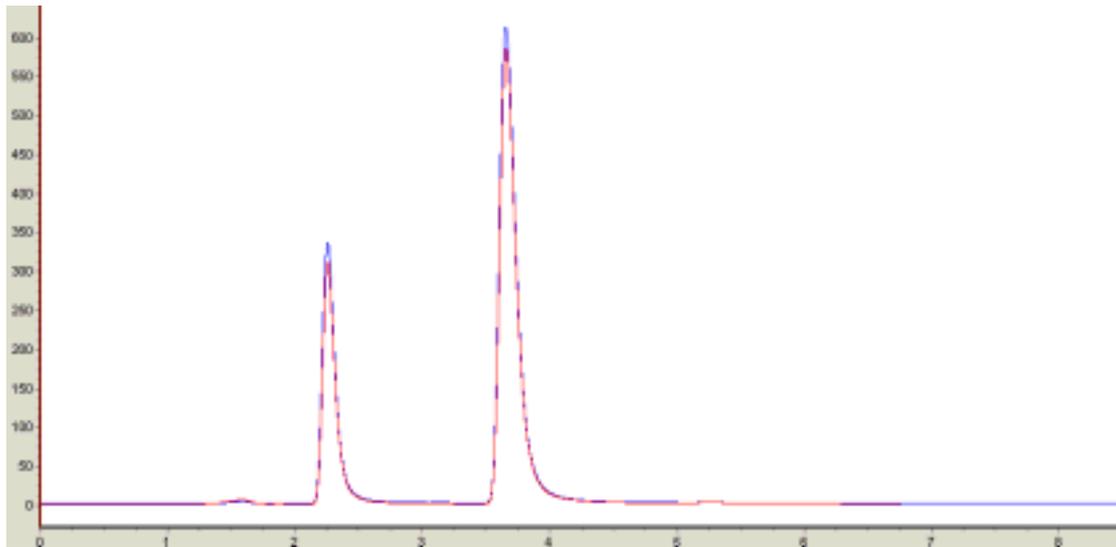
校正曲线：



系统评价：

峰号	峰名	保留时间	半峰宽	系统评价			
				理论塔板数	分离度	拖尾因子	不对称度
1		0.357	0.255	10.838	0.000	0.960	1.076
2		1.598	0.205	336.772	2.699	0.644	0.831
3		1.873	0.065	4601.632	1.019	0.986	0.889
4	HQ	2.257	0.107	2479.631	2.233	0.446	1.911
5		3.148	0.308	577.604	2.149	2.372	3.744
6	HL	3.657	0.140	3779.413	1.134	0.666	2.089
7		5.265	0.185	4487.071	4.949	2.165	2.486

比较谱图：(这一效果需要一定的抓图软件)



2001-01-03

浙江大学智能信息工程研究所承制

采样：北京天擎化工有限责任公司

5.2 比较谱图

离线色谱数据工作站的比较谱图功能

单击谱图比较菜单，就可以同时打开两个谱图并对之进行比较或加减。方法为用鼠标单击再打开按钮或选中菜单中的相应功能，上面的是用来比较的谱图，下面的是被比较的谱图。在谱图加减运算中，上面的谱图是用来加减的谱图，下面的是被加减的目标谱图。谱图比较有很多实用的功能，如图 5-4 所示，具体操作如下：

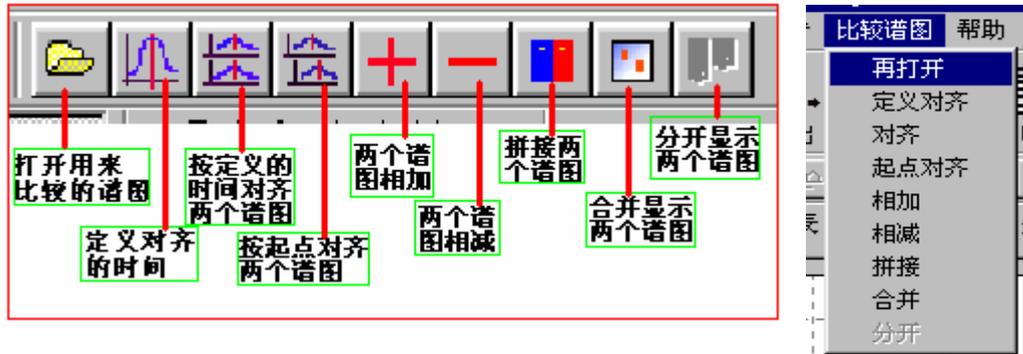


图 5-4

5.2.1 分开显示谱图与合并显示

再打开一个谱图后，您可以把两个谱图用合并显示与分开显示两种方式进行查看，默认为分开显示，如需必为合并显示，则用鼠标单击合并显示按钮或在菜单中选中该功能。工作站马上就可以将两个谱图合并在一起显示，如图 5-5 所示。反之亦然。

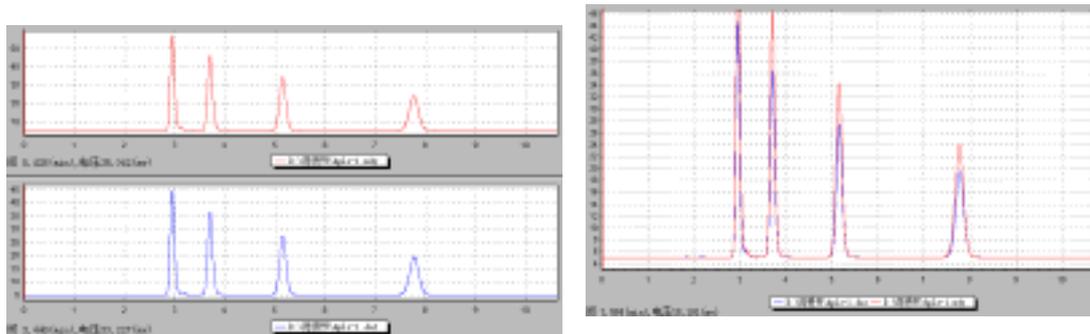
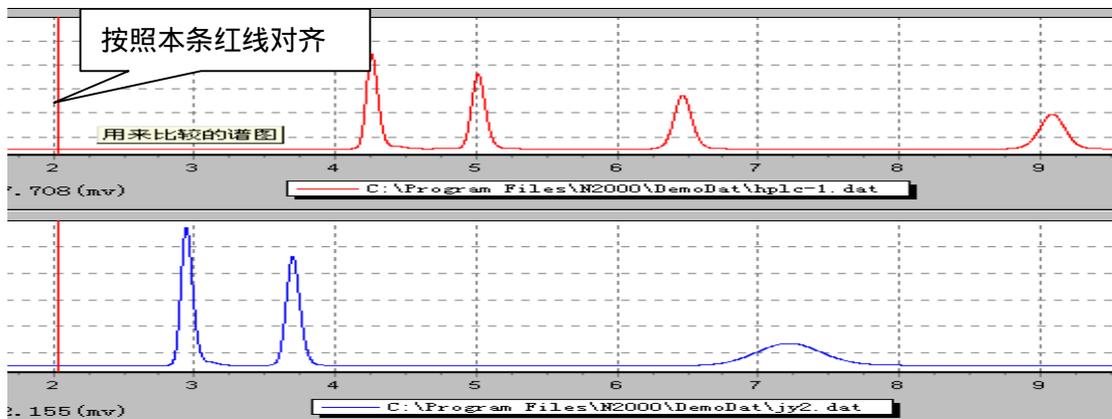


图 5-5

5.2.2 谱图的对齐

为了方便地进行比较，您可以根据需要对齐两个谱图，除了工作站默认的方式即起点对齐以外，工作站还



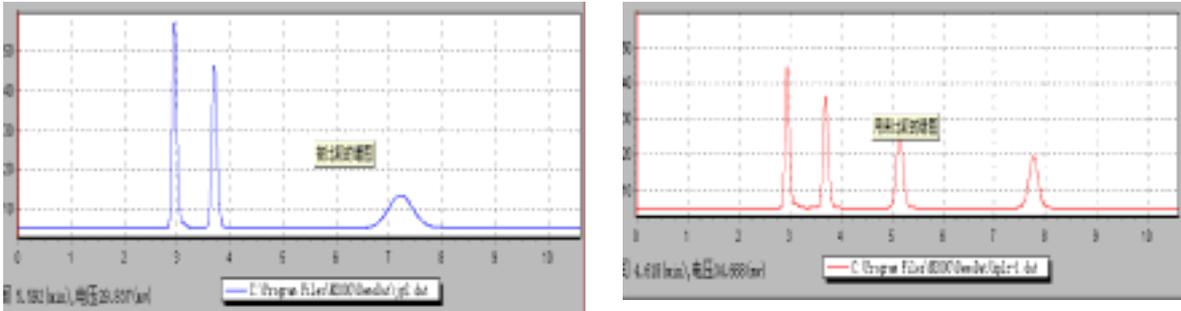
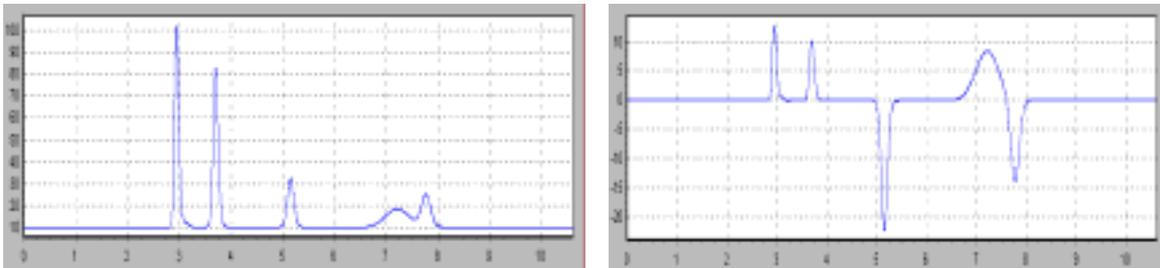
可

图 5-6

以先自定义好对齐的时间点，然后单击对齐，如图 5-6 所示。

5.2.3 谱图的相加减

N2000 型色谱工作站还提供了两个谱图相加减的功能，在打开了如图 5-7 所示两个谱图后，您只要用鼠标单击谱图相加按钮或在菜单中选中该功能，就可得到如图 5-8 所示相加的谱图结果，还可以根据需要对运算结果加以保存。谱图相减是操作和谱图相加一样，谱是上述两个谱图相减后的结果。


图 5-7

图 5-8

5.3 手动积分

实际分析中由于有时的样品十分复杂，实验室所用的色谱分离技术无法达到较理想的分离状况，虽然 N2000 色谱数据工作站采用了国际上最先进的算法对色谱信号进行智能鉴别，但作为一个软件产品，要百分之百准确地鉴别出峰的起点、终点与峰的类型，仍然具有一定的难度，于是我们工作站就提供了一个人工对色谱峰的识别进行补充处理的工具，这就是手动积分。手动积分是对工作站智能自动判别的一种合理补充。

手动积分有手动画基线，设置峰类型（单峰/重叠峰/拖尾峰），移动峰起点与结束点，增加分割线/删除分割线，添加峰，设置水平基线，添加负峰及删除负峰等几种。

手动积分的各个功能使用方法如下：您必须先用鼠标按下手动积分按钮，或者选中积分菜单中的手动积分功能，等到手动积分的各子功能按钮弹出（如图 5-9 所示），然后您可以按照**色谱工作站在谱图下方给出的提示**，用鼠标单击所需功能按钮，使该按钮按下，并在谱图上选择所需想改变的目标点以及改动以后的点即可。具体各功能的操作如下：

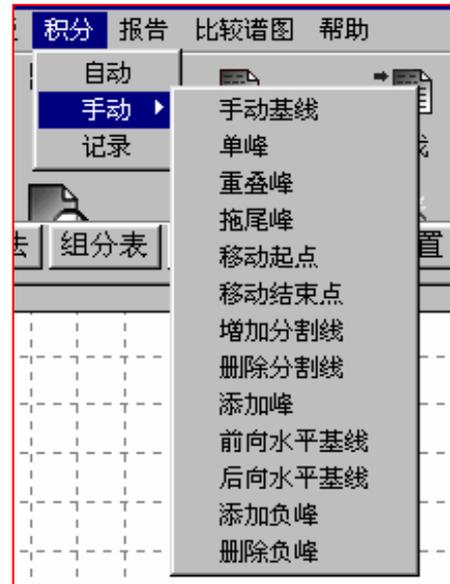



图 5-9

- 5.3.1 **手动画基线**：用鼠标按下手动画基线按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标分别在色谱图上单击选择所需改变色谱峰基线的起点及终点，工作站即自动在按您所给出的两个点之间画一条基线，并强制按这条线计算出该色谱峰的面积。
- 5.3.2 **强制改变峰类型(单峰 / 重叠峰 / 拖尾峰)**：用鼠标按下强制为单峰按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标分别在色谱图上单击选择所需改变色谱峰类型的起点及终点，工作站即按您的要求对所选时间段内的色谱峰强制以单峰重新进行积分。如图所示。强制为重叠峰与强制为拖尾峰的操作与强制为单峰一样。
- 5.3.3 **移动起点 / 移动结束点**：用鼠标按下移动起点（或结束点）按钮或在菜单上选中该功能，然后依下方的提示用鼠标在色谱图上单击在移动的目标峰，然后用鼠标单击选择新的起点（或结束点）
- 5.3.4 **增加分割线 / 删除分割线**：用鼠标按下增加分割线按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标在色谱图上单击选择所要添加分割线的位置，工作站即自动在您所选的位置强制添加一条分割线。如果您要想删除分割线，则在用鼠标按下删除分割线按钮或在菜单上选中该功能后，必须用鼠标在色谱图上单击选择所要删除分割线的起点与终点位置。
- 5.3.5 **添加峰**：用鼠标按下添加峰按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标分别在色谱图上单击选择所要添加色谱峰的起点与结束点。
- 5.3.6 **前向水平基线 / 后向水平基线**：用鼠标按下前向（或后向水平基线）按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标分别在色谱图上单击选择所需改变色谱峰水平基线的起点与结束点，工作站即自动在的选两点处连接成一条水平线。
- 5.3.7 **添加负峰 / 删除负峰**：用鼠标按下添加负峰（或删除负峰）按钮或在菜单上选中该功能，然后用鼠标分别在色谱图上单击选择所需添加负峰（或删除负峰）的起点及终点，工作站即自动在按您所给出的两个点之间添加负峰（或删除负峰），并强制按这条线计算出该色谱峰的面积。

5.4 手动积分事件表

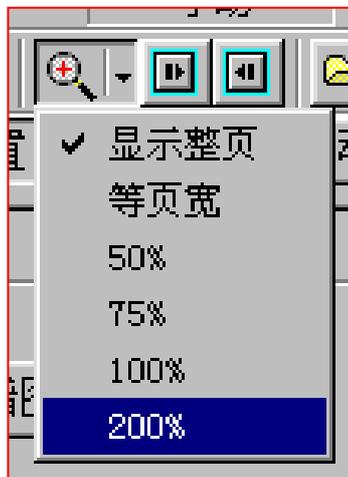
所谓手动积分事件表就是色谱工作站自动将您所做的每一步手动积分操作都记录在一个表格中，这就是手动积分事件表，如图 5-10 所示。通过手动积分事件表，您不仅可以清楚地看到每一次手动积分的积分内容，时间点 1 和时间 2，而且可以先选择其中一个手动积分事件并通过点击删除按钮将该事件删除，或者通过点击清除按钮将所有的手动积分事件全部清除。

事件号	描述	时间点1	时间点2
1	删除峰	3.81895	0.00000
2	强制重叠峰	0.31825	5.01556
3	强制拖尾峰	0.20368	5.32107

图 5-10

5.5 模拟显示

对于积分完成后的报告，我们还可以采用不同的比例显示，如图 5-11 所示，第一个按钮提供了显示整页，等页宽，50%，100%，200%等以满足您各种不同的需要。旁边的两个按钮分别为上一页和下一页。


图 5-11

第六章 第一次进样测试标样试验示例

进入 N2000 工作站并打开一个或两个通道后，用户首先关心的是如何进行第一次样品测试的操作。为此，我们先对怎样进行第一次进样测试做一介绍。

就如我们老版本 UPPER 进行第一次进样操作般，开机并进入 N2000 色谱工作站，打开一个或两个通道后，您可以不去考虑软件的众多功能，只须操作色谱仪器进样并按下色谱工作站摇控开关（或点击 N2000 工作站的通道数据采集按钮）；待第一次进样分析完毕后，我们即得到了以后所需要的谱图数据。具体操作步骤如下：

6.1 进入 N2000 色谱工作站

进入 N2000 色谱在线工作站：开机，等待计算机已运行完 WINDOWS 操作平台后，点击开始菜单  开始，从程序菜单中拉出在线工作站并点击即可进入本工作站，如下图 6-1 所示：



图 6 - 1

6.2 串行口设置

一般第一次进样前都检测工作站是与计算机哪一串行口相联，即设置串行口，具体操作如下：

6.2.1 按 6.1 步操作拉出 N2000 色谱工作站，点击图标  串行口设置，系统将跳出一个称为串行口选择的窗口，如图 6 - 2 所示：

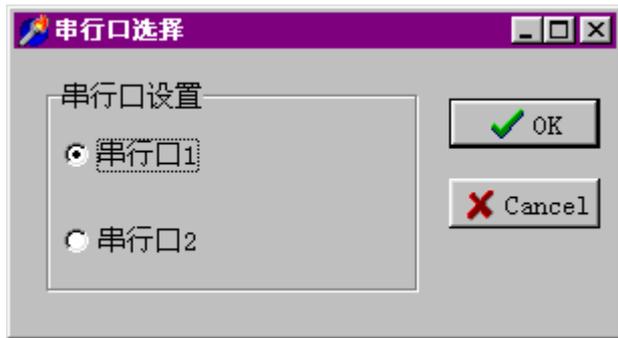


图 6 - 2

6.2.2 当串行口选择窗口跳出后,请根据你所用的工作站 ID 数据采集卡与计算机串行口联接情况,进行串行口的选择设置,选择完毕后点击  按钮。

串行口的设置选择好后,重复 6.1.1 步操作,等待系统运行完毕,进入 N2000 在线工作站,并跳出一个叫作通道的窗口,如图 6 - 3 所示:

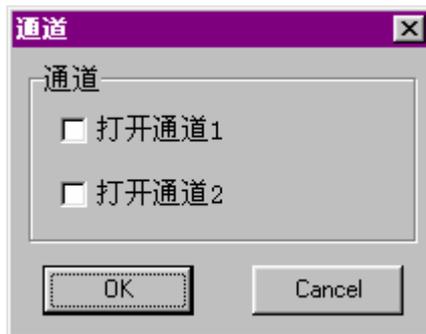


图 6 - 3

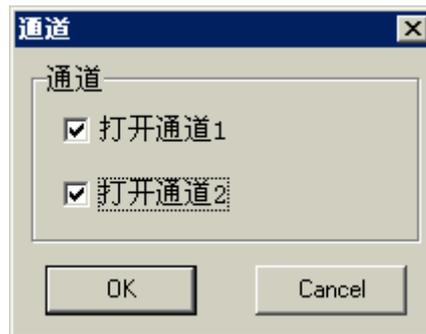


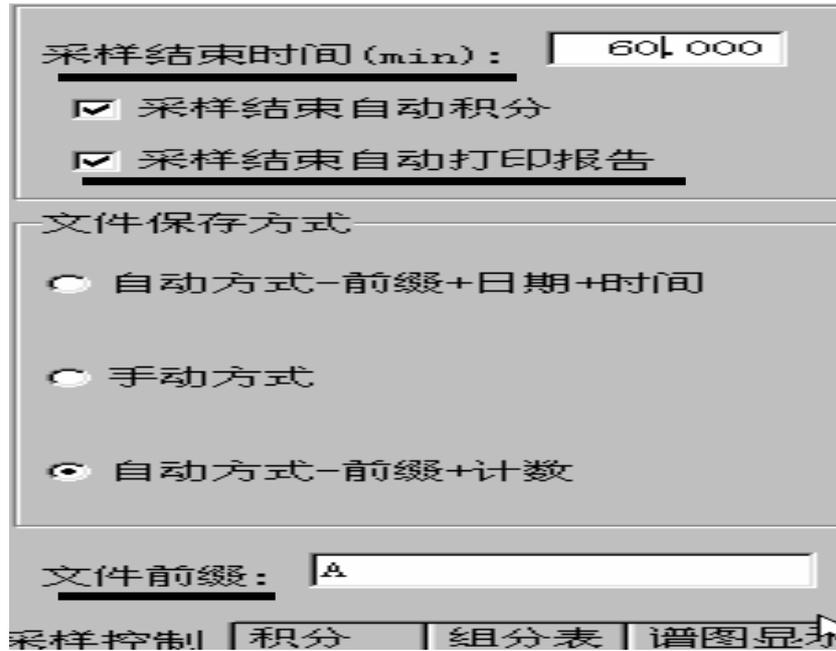
图 6 - 4

6.3 通道的选择

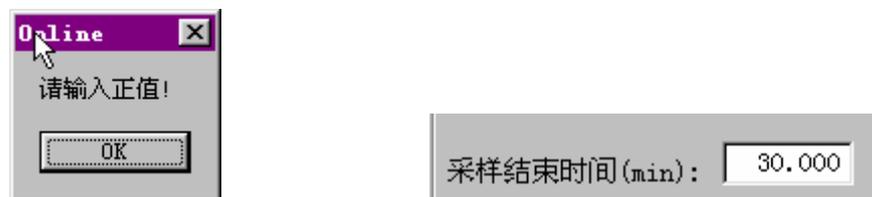
当系统跳出通道窗口时,你先得选择一个或两个通道(选择了的通道系统用  标记),如图 6 - 4 所示,选择 ,系统将进入在线工作站。

6.4 采样控制设置

对于第一次进样实验,我们一艘无须顾虑太多,只需对系统所默认的方法稍做修改即可进样采集谱图操作,所需修改的参数主要是积分对话框中采样控制中的几个设置(可修改也可不修改),如图 6 - 5 所示:


图 6 - 5 (加黑线处)

6.4.1 采样结束时间：一般分析实验不需一个小时的时间，我们可以根据所做实验时间进行修改，比如改为 30 分钟。修改时间是，一般系统会先跳出一提示窗口（图 6 - 6），提示你必须在此输入一正值，否则系统将不接受你的输入。


图 6 - 6

6.4.2 采样结束后自动打印报告：第一次进标样只是为采集一实验谱图数据，因此我们一般无需打印实验报告，在此我们可以取消此项选择（取消 标记），如图 6 - 7 所示：


图 6 - 7

6.4.3 文件前辍：这一选项你可以根据实验分析的样品名称输入，以便以后数据的查找和管理。比如，做白酒中组分分析时，我们可输入白酒作为文件前辍，系统将以白酒+000(n++)白酒0005:计数，即每进一次样，停止采集则自+1。如图 6

- 8 所示：

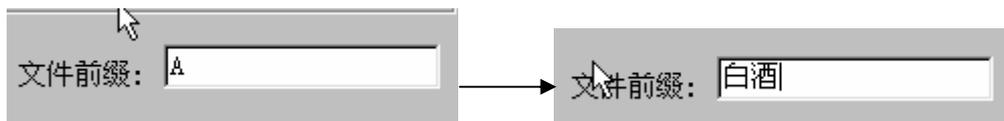


图 6 - 8

不管你对系统哪一参数进行了修改，你都必须点击采用按钮 ，你的输入才能被计算机所接受。

6.5 进标样

采集数据：至此你可以进标样采集谱图数据了。

等到采集数据完毕，点击停止采集按钮  即完成第一次采集谱图进样实验。

接下来你便可以利用此标样谱图进行实验方法的编辑并保存,最后便可利用所编辑的实验方法进行样品数据采集了。

下一章我们介绍实验方法的编辑。

第七章 实验方法的编辑

实验方法是指控制工作站对色谱仪的信号进行显示、采样保存、分析计算、打印、同时记录试验条件的一个程序,包括采样控制、积分参数、组分表、谱图显示控制、报告编辑格式、仪器条件等。它实际上是一个你分析进样前所编好的批处理程序。一旦编辑好了实验方法,计算机将一步一步按你所编好的方法进行作。

在采集数据进行色谱实验分析以前,针对不同的样品设置相应的方法,可以使您更准确更快速更方便地进行样品测试,并真实地记录样品的实验条件。所以,在日常的操作中应养成良好习惯;即取一个简单直观的方法文件名并及时地保存修改过的方法。以后做同一类物质色谱分析,你只需打开这一方法即可。

为此,我们在这一章详细介绍实验方法的编辑。

进入在线工作站打开一个或两个通道后,我们便可进行实验方法的编辑了。

7.1 实验信息的编辑

点击实验信息一栏,在实验信息一栏中填写实验标题、实验人姓名、实验单位、实验简介(根据你的需要进行填写),如图 7-1 所示:



图 7-1

7.2 方法的选择

对实验信息进行编辑之后,点击方法一栏,接下来进行实验积分方法和参数的编辑了。


图 7 - 2

7.2.1 采样控制的设置

1) 刚开始进第一针标样采集谱图时，取消了采样结束自动打印报告（图 7 - 2 所示），因此我们在这如需要必须选取（用 标记）此一项功能。如图 7 - 3 所示：

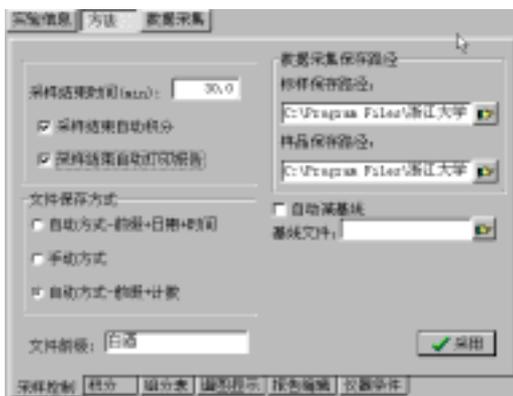
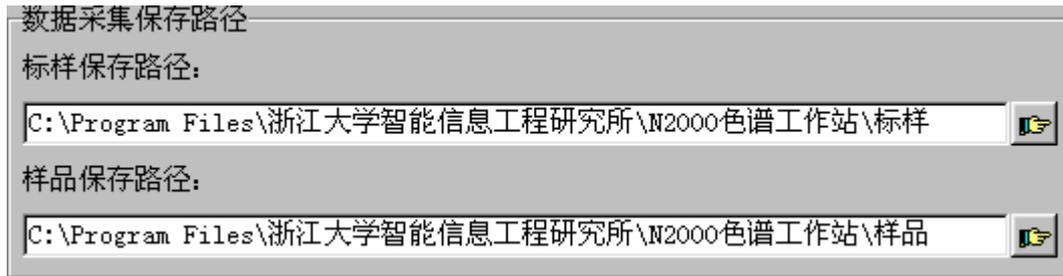

图 7 - 3

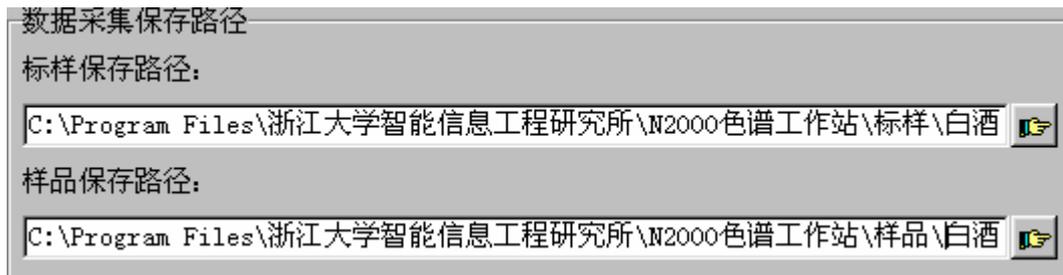
图 7 - 4

2) 你也可再次对文件保存方式进行修改选择，如果你觉得有必要的话。例如我们选择第一种文件保存方式即自动方式-前缀+日期+时间方式，如图 7 - 4 所示。在此我们采用第三种方式自动方式-前缀+计数方式，所以我们不再做修改了。

3) 数据采集保存路径的设置：如果觉得必要你也可对采集所得的文件保存路径进行更改，为了以后进行数据后处理的方便，我们将标样、样品谱图保存在白酒目录下；因此我们在路径 C : \.....\标样后输入白酒及 C : \.....\样品后输入白酒一路径，如图 7 - 5 所示：


图 7 - 5

输入后：


图 7 - 6

最后我们必须点击采用  按钮，以使系统接受我们的输入。点击后，我们将看到两次图 7 - 7 所示的窗口：


图 7 - 7

请点击  后，即出现图 7 - 8 所示结果：


图 7 - 8

到此为止你已经做完采样控制的编辑。接下来我们进行积分方法及参数的选

择。

7.2.2 积分方法及参数的编辑

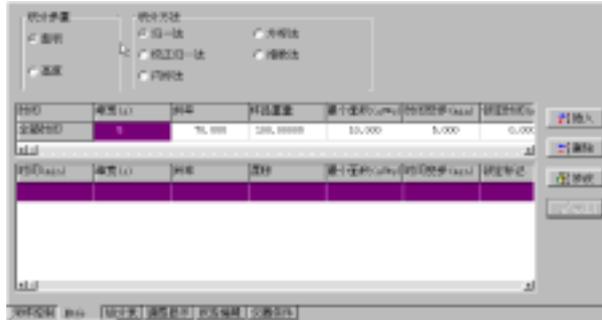


图 7 - 9

点击积分按钮，当跳出如图 7 - 9 所示的窗口时，我们就可以进行积分方法及参数的编辑了。

7.2.2.1 积分方法的选择：在进行色谱分析时，对运用工作站的分析人员，积分参数和方法的选择是必然的。在在线工作站中，你必须根据实验所需进行积分方法和参数的选择。我们在此用面积内标法对白酒组分进行测定，因此我们积分参

量选用面积（用 面积 表示）一项，积分方法则选用内标法（用 内标法 表示）一项。

7.2.2.2 积分参数的选择：同样，积分参数的选择对分析也是必要的。在这你必须根据实验所需对积分参数进行正确选择。



一般峰宽、斜率、时间变参，你可以不做修改，以系统默认值即可进行分析；最小面积一旦设置，系统会将那些峰面积低于这个值的峰过滤不积分处理；锁定时间设置后，系统将从采集数据开始到此一时间之间的所有谱峰锁定，不进行积分。

若实验需要锁定某一中间部分的谱峰，那你可点击插入按钮，系统将跳出如图 7 - 10 所示的

对话框：

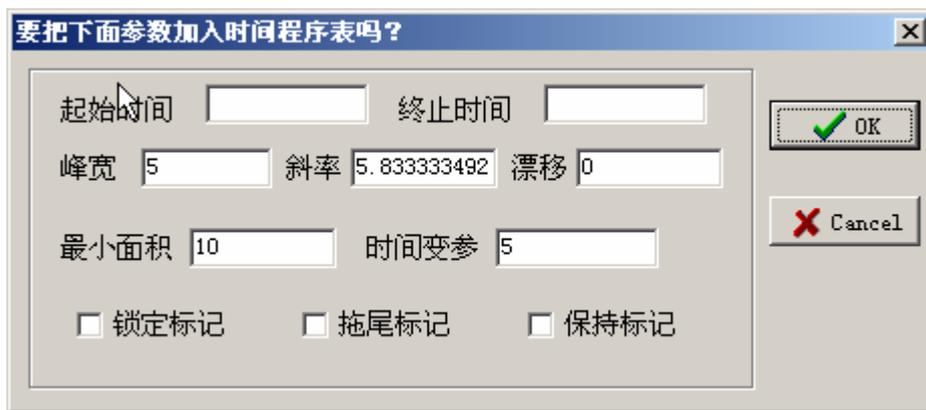


图 7 - 10

在图 7 - 10 所示的窗口中，你在输入起始和终止时间后，请标记 锁定标记 锁定标记，

然后点击 。

对于插入的参数，你可通过删除和修改操作。在此不再介绍。

7.3 组分表的编辑

积分方法和参数设置完后,接下来进行组分表的编辑,具体操作可参阅在线介绍一章节;若你所选择的积分方法为非归一法,那么在这你还需要进行因子校正或直接输入校正因子;关于曲线因子的校正,请参阅校正一章节。

7.4 谱图显示的编辑

组分表编辑好后,接下来你可以对报告中谱图的显示进行编辑了;具体操作可参阅在线介绍一章节。

7.5 实验报告的编辑

为了打印获得一份较好的实验报告,你必须进行实验报告的编辑。具体操作请参阅在线介绍一章节。

7.6 仪器条件的设置

实验所用的仪器条件、型号等,你都将其加入到实验报告中去。具体操作也请你参阅在线介绍一章节。

到此为止你已经将一个完整的实验方法设置好了,剩下的你只须保存这一方法,以便以后使用了。

下一章节我们将介绍如何进行因子的校正。

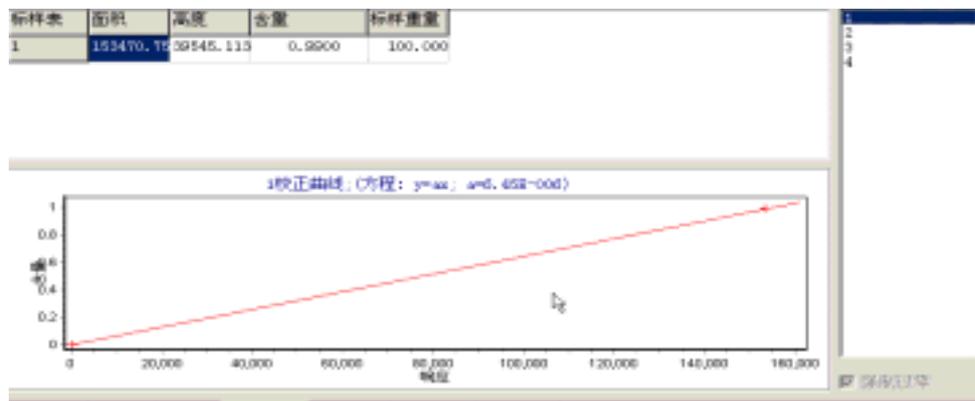
第八章 校正

8.1 校正原理

光谱仪的校正对结果的准确性通常是重要的。校正一台仪器的目的是核实某一给定的组份在检测器上的响应,因为等量的不同组份在同一检测器上在相同的色谱条件下往往产生不同的响应。校正的另一个原因是有关检测器的线性,许多组份的响应将随着组份的浓度的增大而增加,因此需要用同一组份的不同浓度对检测器进行校正(多点校正)。

校正包括如下步骤:

1. 制备一个含已知量主要组份的标准混合物(如果进行多点校正,则为多个混合物)。
2. 依次预运行选择分离最佳条件,确定主要组份的保留时间。
3. 建立一个校正方法,包括一个含有每个校正峰信息的校正组份表。在组份表中选择或输入组份名、期望保留时间和标样浓度。
4. 通过加入或采集标样(或几个标样)来进行校正。所得的峰面积用于建立校正曲线,通过校正曲线计算每个组份对应的响应系数。



当采集一个未知样品时,每个组份的峰面积与相应的响应系数比较,计算出每个组份的量并打印在样品的最终报告上。

8.1.1 校正类型

在色谱分析方法中,有两种校正样品的的方法——内标法和外标法——需要用到校正。

1. 在内标法中,每个样品(标样和未知样)与给定的已知组份的已知浓度的峰(内标峰)进行比较,当接着运行样品时,其峰面积即可由内标“校正”。该方法用于校正系统误差和进样技术造成的误差。
2. 外表法不需给定峰值的标准组份。所有未知样品与标样比较,因此进样量的精确度和重复性是很重要的。

在此我们有必要先对色谱分析中校正方法类型进行介绍。

8.1.2 色谱校正类型

色谱分析的每一步操作,从取样,样品制备到进样和峰面积(或峰高)测量都会引入误差,最后分析结果的误差是每一步操作所产生的误差的总合。校正包括单点和多点校正:

- 1、单点(单级)校正是一个标准样品,在浓度(含量)和响应值(峰面积或峰高)坐标中获得一个点,将此点与原点联成一直线,该直线即为单点(单级)校正曲线。对

于单点（单级）校正曲线，欲测样品组分浓度范围内的检测器响应值，假定是线性的，该组分的响应因子为通过该点及原点的校正曲线的斜率的倒数。

2、多点校正用多个浓度不同的标准样品，在浓度（含量）和响应值（峰面积或峰高）坐标中获得多个点，然后用一条直线将这些点与原点进行线性拟合。图是用三个不同浓度标准样品作的三点（三级）校正曲线，该组分的响应因子为该直线斜率的倒数。这种通过原点的线性拟合与单点（单级）校正方法相似，检测器响应值在校正的浓度范围内假定是线性的。两种校正方法的不同点在于线性拟合（多点校正）情况下，检测器响应斜率是由通过多点的最佳值拟合决定，因此多点校正结果的可靠性及准确性要高于单点校正。

8.1.3 建立一个校正方法

在设定方法校正部分之前，应保证选择好测定参数和色谱分离的最佳条件，还应保证积分参数的正确性，因为主要峰应被正确地分辨和积分。之后，就应该进行标准混合物的测定（或多点标准混合物的测定），并将它作为数据文件存盘。用这个保存文件作为校正时加入的标样。

(一) 建立组份表

一旦采集了标准样品并将其保存，就可以用保存的文件建立您校正组份表(组份表)。

组份表对组份的分辨很重要，组份表中列出了峰名和保留时间。可以为每个组份输入峰名，保留时间可以由键盘输入也可以以系统默认的形式定义。

在组份表中有一个保留时间范围区(时间宽度)，如果谱峰落在定义的时间范围中，尽管峰的保留时间与表中的保留时间不相符，也能被分辨并识别。该时间范围主要用于识别组份表中的保留时间。

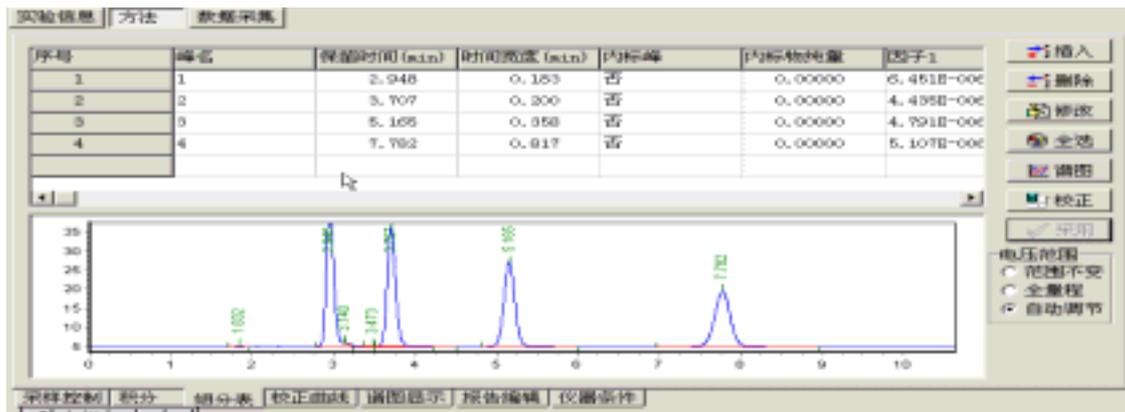
在报告编辑中单位的列中输入组份的浓度单位。

下面的步骤讲述如何建立一个组份表。

1. 如需要，选择方法。
2. 选组份表。将出现一个组份表屏幕，包括一个为当前方法定义的组份的目录。如果没定义组份，则屏幕中将没有组份列出。
3. 要手动定义组份，点击插入按钮，输入峰名、保留时间、保留时间范围、浓度单位和所使用的参考峰代号。

(二) 以系统默认的形式定义多个峰

要用所存的数据文件建立组份表，须将谱图数据文件打开。在工作站通道窗口上选择谱图按钮，系统将跳出一对话框，选择好谱图文件保存路径并打开你所要的谱图。然后点击全选按钮。在你所需要的峰组分处做好标记，如图8-1所示，点击采用按钮。


图8 - 1
内标量：

如果所做的是内标法校正，必须输入内标物浓度。一般由于所用标样和样品中的内标量相同，因而常输入“1”。

样品量：

如果样品量被设定一个非零值，所有浓度将除以这个数，此处一般输入“100”

(三). 输入组分含量

点击**校正按钮**，当系统跳出校正窗口时，点击**组分含量**，输入各组分的实际含量。到此为止，你已经做好了完整的校正方法。接下来只要进行加入标样或采集标样谱图校正了。

8.2 校正方法

有两种方法输入做校正曲线所需要的峰面积：运行校正标样(或多个标样)，工作站自动校正方法，我们称为采集标样；用盘中所存的数据文件手动校正方法，我们称为加入标样。在大多数情况下运行标样时是采用采集标样自动校正的。如果后来发现由于某种原因校正不正确，可以用加入标样手动方法进行更正或在不重运行标样的情况下重新标定方法。

8.2.1 采集标样校正

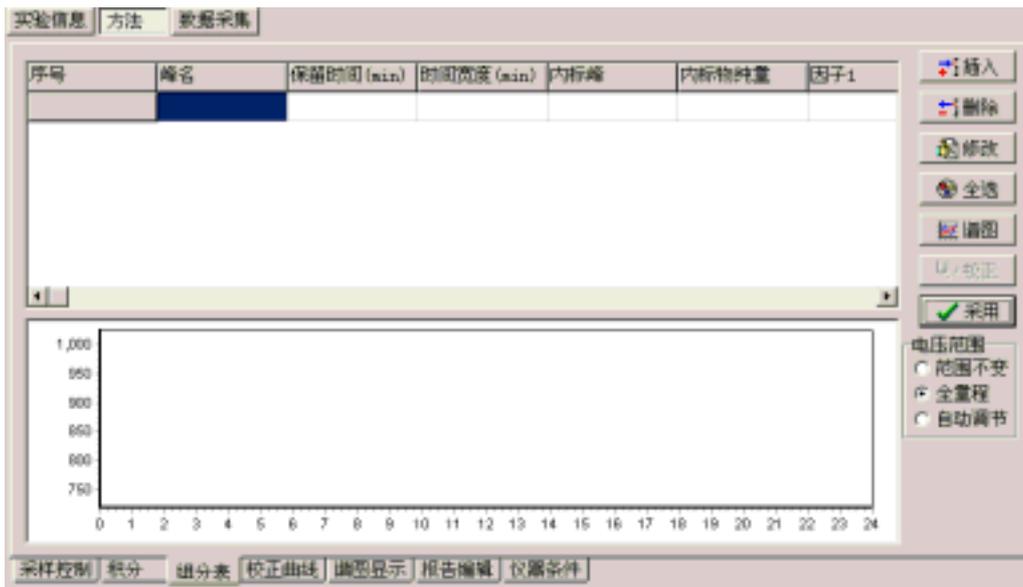
采集标样进行自动校正包括运行新的标样和让系统在运行完标样后校正方法。有两种方法进行自动校正：采集多个不同浓度的标样进行多点校正；采集一个或多个同浓度的标样做单点或平行多点校正。

(一) 采集多个不同浓度的标样进行多点校正：

要进行自动多点校正，必须采集多个标样。

这个程序是工作站通道窗口组分表的校正功能建立的。在组分表屏幕上，一个校正标样由在输入组分含量次数来决定校正点数的。

1. 从通道窗口中选组分表。

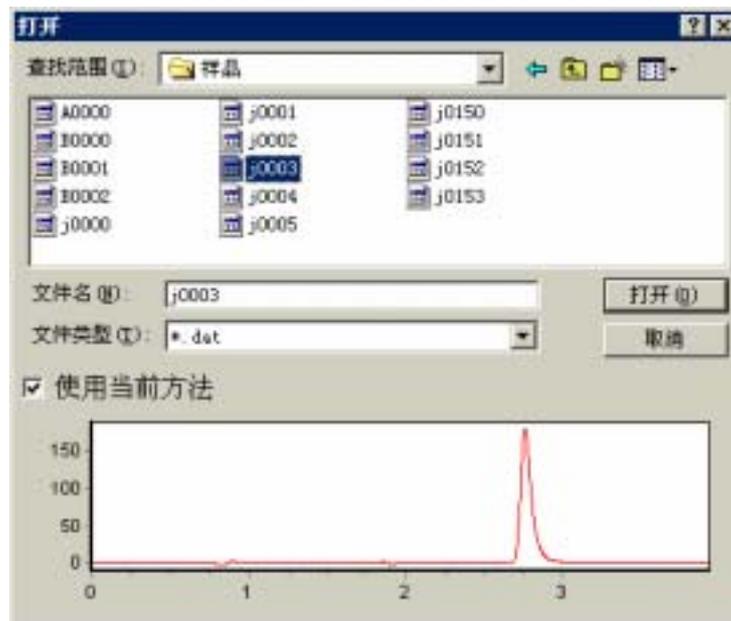


2. 选谱图来调出系统已采集的谱图数据文件。则显示图8 - 2所示的窗口：



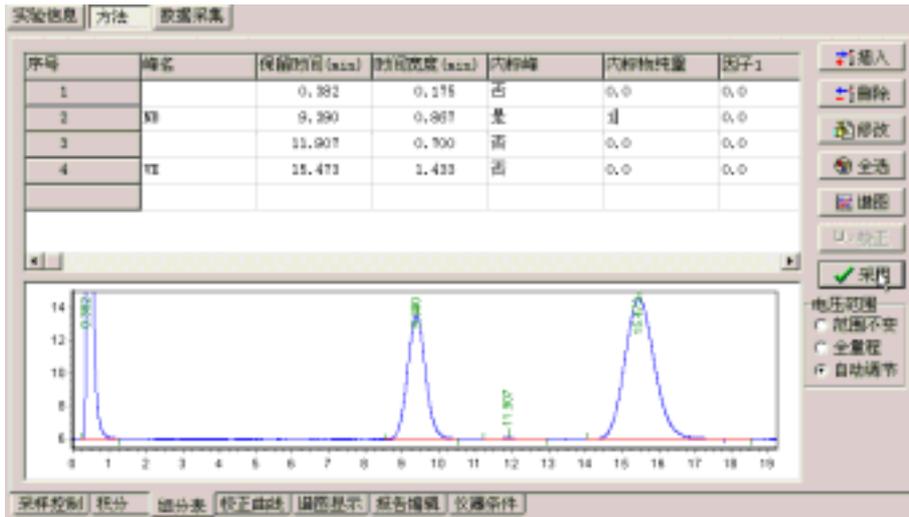
图8 - 2

3. 点击谱图数据所在的路径并找到相应的文件名，打开这个文件。



4. 从组分表上选**全选** 

工作站将从数据采集所得到的值中向该屏幕自动输入保留时间、时间宽度的值。如果想要更改它们就在那里编辑。在这你必须输入峰名，以便系统自动识别峰；是内标法你还得给内标峰作标记。若已知校正因子，你还可人工输入因子。如图8 - 3所示：


图8 - 3

点击采用按钮，系统将跳出提交成功窗口，如图8 - 4所示，单击OK。


图8 - 4

5. 点击**校正**，系统将跳出校正窗口，如图8 - 5所示：


图8 - 5

组分含量：

标准样品的含量。

点数 (Level)：

运行的校正点数。重复输入组分含量进行多次校正。

样品量 (Sample Amt.)：

如果样品量被设为一个非零值，则所有浓度要除以这个数。

内标量 (ISTD Amt.)：

主要是在样品中加入一个给定的已知组份的量，使运行结果被确认和/或更正。如果加入一个内标物，则要输入内标物的量，一般为“1”。

倍数因子 (Mult.):

6. 点击组分含量，输入标准组分含量。如图8 - 6所示：

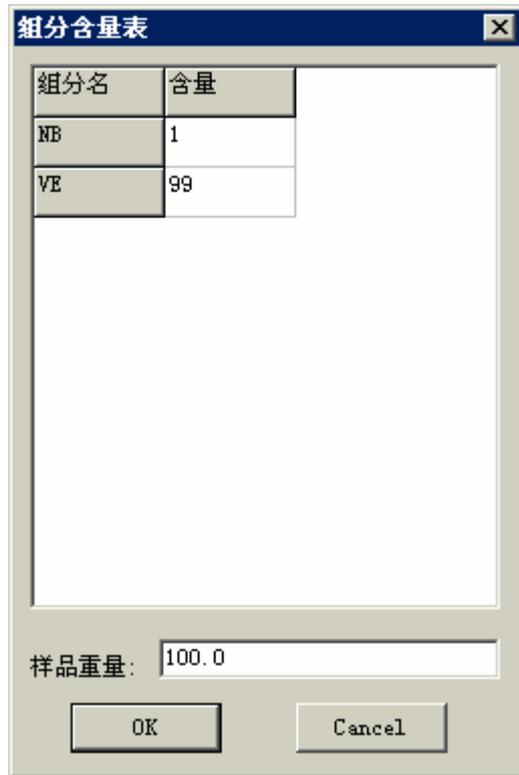


图8 - 6

点击OK按钮，当系统跳出如图8 - 7所示窗口时，单击**采集标样**，待到停止采集数据，系统将自动根据你所采集到的标样谱图进行因子校正。

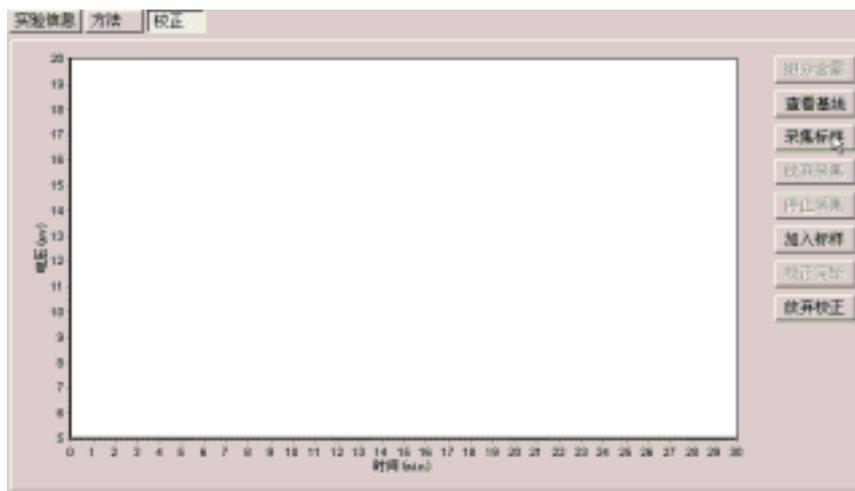


图8 - 7

注意： 当运行完所有校正标样时，方法校正就完成了，并且在未知样品报告中将包括从方法中的响应曲线计算出的浓度。

8.2.2 单运行校正:

运行一个校正标样可能不用程序。如果所做的是单点校正就可以用这种方法。并且一次运行一个样品而不是多个校正运行。(注意：这个方法还可以用于从多点校正中运行一个单点标定。)

要运行一个校正标样，则用所用通道窗口的功能按钮中的**校正**选项。将出现一个如图所示的对话框。单点校正步骤与多点校正相似，只是这只需输入一次组分含量采集一个标样即可。在这只对要用到的一些术语进行介绍。

数据文件名：

数据将被保存在该区中输入的文件名和路径下。键入数据路径和文件名来输入数据文件。

样品量：

如果样品量被设为一个非零值，则所有浓度要除以这个数，输入标准浓度，一般为“1”。

内标量：

内标物的浓度，一般输入值为“1”。

稀释系数：

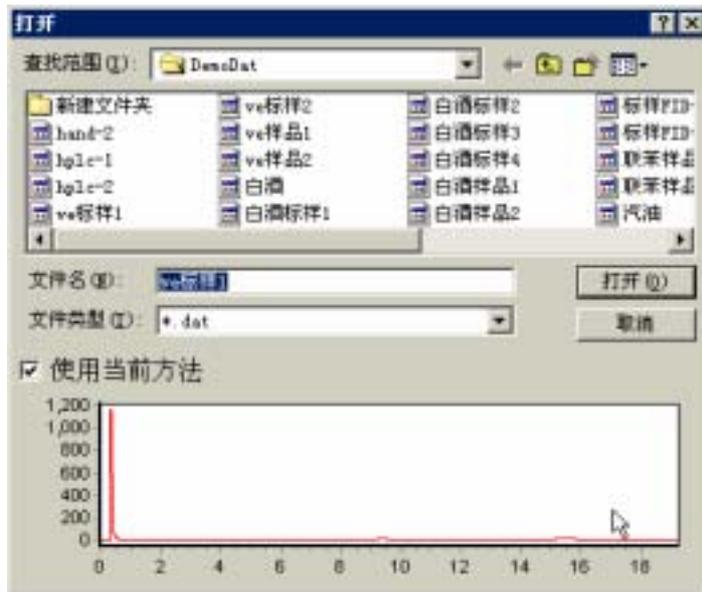
所有的浓度值都乘以输入的稀释系数。

8.2.3 加入标样校正(多点)：

如果想要用所存的数据进行多点校正则用这个校正方法。这个选项在将数据并入方法之前检查标样的数据和基线。

加入标样校正以工作站主菜单的批处理功能进行。如上所述，填一个包括所希望的校正方法和标准样品数据文件的表。当执行校正时，系统将用所存的数据文件中的数据对每个点进行校正。加入标样校正可用于改正错误，或在校正方法之前检查一下多点校正的色谱图。

具体操作参见自动校正步骤，只是在采集标样时，改为加入标样。系统将跳出如图所示窗口；此时只需打开相应谱图数据文件，系统将根据这个打开的谱图进行自动校正。



8.2.4 加入标样校正(单点)(参照自动单点校正)

8.4 观察峰校正曲线

组份校正曲线可以用**显示校正曲线**功能来观看。工作站软件可以在最多十六个浓度点

内控制校正,一个校正点对应校正曲线上一个点。一个特定通道的每个组份必须以同一种方式校正,这就意味着如果一个组份的曲线是一个点到点的校正,则其它所有组份都必须都是点到点的校正。每个组份的校正点数可以不同,在**显示校正曲线**屏幕上选择的校正拟合在对色谱的分析过程中不起作用。具体参考**校正设定**屏幕。

我们建议不要用**显示校正曲线**屏幕来输入数量,它应用于观察校正信息和决定所要用的曲线类型。点数可以在校正过程中用校正屏幕较容易输入,并且在校正过程中由工作站测定峰面积。

观看校正曲线:

1. 选方法。
2. 选**显示校正曲线**。
3. 选适合的通道。
4. 在**观察**菜单中击**已命名谱峰**来选一个组份。
5. 可以观察或更改表中的数量信息。
6. 面积信息是在校正方法时所保存的面积值。
7. 要观察数据的点到点、线性或二次拟合等曲线,需在**拟合**菜单下选择相应的选项。在**拟合**下选清除则将曲线清除掉。在**拟合**菜单下选择**强制过零**则强迫校正曲线通过零点。
8. 完成后,选窗口的左上角。然后从显示的菜单中选择**关闭**。

8.5 积分参数项

积分参数项可以作为方法加入到**积分参数表**中或以图表的形式加入到任何通道窗口中。开始一个新方法时,文件DEFAULT.MET中的缺省积分项(Threshold、Width、Shoulder Sensitivity)自动输入到新的方法中。这三个基本积分时间项是峰的测定和积分最基本要求。这些事件的值可能需要改变,并且有时可能需要更多的积分时间项来选择峰测定的最佳条件。

(一) 从方法中输入一个积分参数项

请按照下列步骤进行:

1. 选方法。
2. 选**积分参数表**。
3. 在“EVENT ID”列中的空行内双击鼠标,屏幕即显示积分参数项菜单。
4. 从菜单上选想要的积分参数项,关于积分参数项的完整说明参见屏幕/命令参考。
5. 输入起始、停止时间及该项的值,无起始、终止时间则按全程处理。
6. 编辑完任何其它积分参数项后,击积分参数表窗口的左上角从弹出的菜单中选择**关闭**。

峰阈值:

这一项事件将基线中的峰值降到最小。这可以用测定每一个数据点和它相邻的数据点的平均值之间的差值来实现。这个差值再与输入到积分参数表中的峰阈值比。如果这个差值比输入值大,则这个数据点被它相邻点的平均值所代替。对色谱图中的每一点都实行该操作。

零值积分:

该项将在一个特定的时间停止峰的测定和积分。

起始 积分的起始时间

终止 积分的终止时间

数值 无需输入数

肩峰灵敏度:

该项让使用者设定肩峰灵敏度，肩峰灵敏度被定义为单位时间的电压差，肩峰灵敏度用于测定峰的起始和终止。如果谱图中三个连续的值都超过这个值就被确认为峰。在遇到另一个肩峰灵敏度项或运行结束之前这个肩峰灵敏度都有效。

起始 这一项的起始时间

终止 无需输入数

数值 所用的边缘值

峰宽:

使用者可以改变峰宽项，这会影响数据的拥挤度。在色谱的起点(时间为 0)至少需要一个峰宽项。一般来说，每当峰的宽度加倍就要输入一个新的宽度项。

起始 这一项的起始时间

终止 无需输入数

数值 峰底部的宽度值

最小面积:

最小面积是一个时间项，用于设定基线上的信号变化能作为峰检测的最小面积。

起始 这一项的起始时间

终止 无需输入数

数值 所用的最小面积

谷到谷:

该项用于规定积分是以谷到谷的形势。

起始 这一项的起始时间

终止 这一项的终止时间

数值 无需输入数

水平基线:

这一项用于在正方向上规定一条水平基线。它一般从水平基线起始时间后的下一个峰的起点开始。

起始 这一项的起始时间

终止 这一项的终止时间

数值 无需输入数

切线方向:

这一项用于切掉峰。

起始 这一项的起始时间

终止 这一项的终止时间

数值 无需输入数

负峰处理:

该项用于将负峰倒转为正峰。

起始 这一项的起始时间

终止 这一项的终止时间

第九章 用面积归一法做一个样品

例：样品 1 的配制：精密称取 96.13mg 样品于 100ml 容量瓶，用蒸馏水稀释至刻度。可分析测定出样品中各组分的含量；

操作步骤如下：

第一步：打开在线色谱数据工作站，先选择需要打开的通道 2。如图 9-1 示



第二步：单击实验信息，根据需要如实填入实验标题、实验人姓名、实验方法及实验简介。另外工作站还自动给您填好实验时间和使用方法，如图 9-2 示。

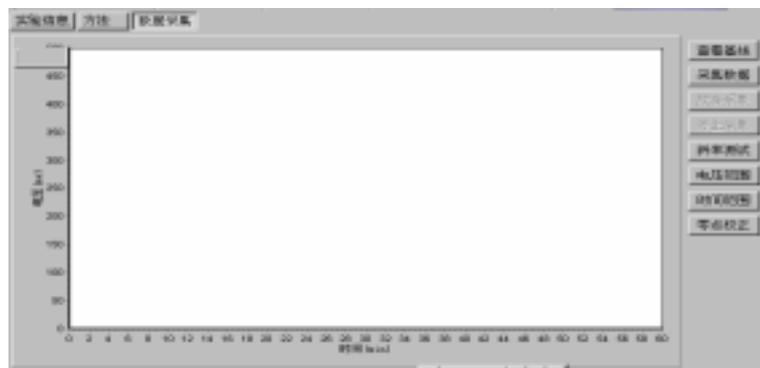
第三步：单击方法，单击采样控制，根据实验情况修改采样结束时间为 30 分钟，取消采样结束自动打印报告（用鼠标单击该功能前的小方框，消失为该功能取消）。选择文件保存方式为自动方式 - 前缀 + 计数，并输入文件前缀为 CXL。然后单击采用如图 9-3 示：



第四步：编辑积分参数，用鼠标单击积分菜单，选择面积归一法。并根据需要修改积分参数表。然后单击采用，如图 9-4 示：


图 9-4

第五步 采样：点击数据采集，查看基线，看看基线是否走平稳；若基线已平稳，那您便可点击采样数据按钮，您便可进行实验数据的采集。当采样完毕，系统自动打印输出报告。



注：面积归一法无须进行曲线谱图的校正！

附实验报告：

第十章 在在线色谱工作站中用内标法测试样品

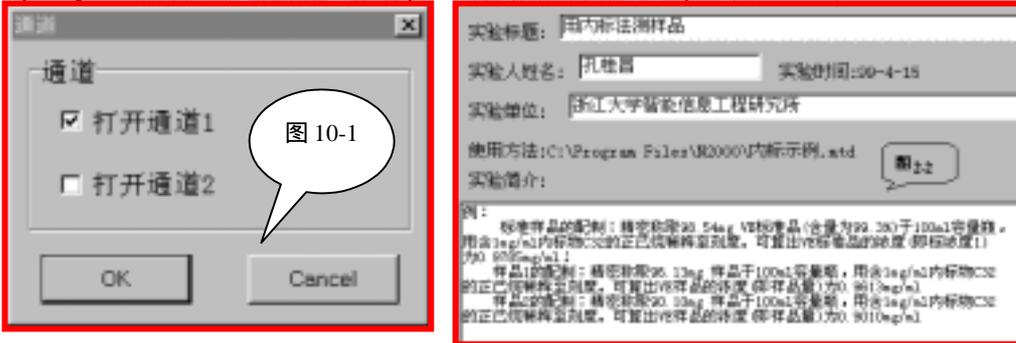
例：标准样品的配制：精密称取 98.54mg VE 标准品(含量为 99.3%)于 100ml 容量瓶，用含 1mg/ml 内标物 C32 的正己烷稀释至刻度。可算出 VE 标准品的浓度(即标浓度 1)为 0.9785mg/ml；

样品 1 的配制：精密称取 96.13mg 样品于 100ml 容量瓶，用含 1mg/ml 内标物 C32 的正己烷稀释至刻度。可算出 VE 样品的浓度(即样品量)为 0.9613mg/ml

样品 2 的配制：精密称取 90.10mg 样品于 100ml 容量瓶，用含 1mg/ml 内标物 C32 的正己烷稀释至刻度。可算出 VE 样品的浓度(即样品量)为 0.9010mg/ml

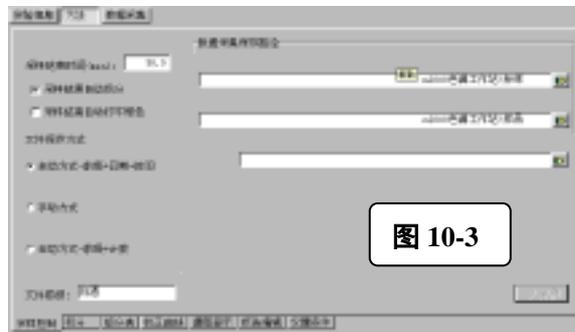
操作步骤如下：如果测定的 VE 样品是第一次，请先采集两到三针标样，以便获得谱图数据，详见第六章。

第一步：打开在线色谱数据工作站，先选择需要打开的通道 1。如图 10-1 示



第二步 接下来进行实验信息的编辑：单击实验信息，根据需要如实填入实验标题、实验人姓名、实验方法及实验简介。另外工作站还自动给您填好实验时间和使用方法。如图 10-2 示

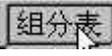
第三步：单击方法，单击采样控制，根据实验情况修改采样结束时间为 30 分钟，取消采样结束自动打印报告(用鼠标单击该功能前的小方框，消失为该功能取消)。选择文件保存方式为自动方式 - 前缀 + 计数，并输入文件前缀为 CXL。然后单击采用如图 10-3 示



第四步：编辑积分参数，用鼠标单击积分菜单，选择面积内标法。并需要根据需要修改积分参数表。然后单击采用，如图 10-4 示：



图 10-4

第五步：编辑组分表;单击组分表 ，先单击谱图 ，调入一个以前所做的谱图 VE 标样 1.DAT (如图 10-21 所示)，单击全选 ，找到内标物及 VE 相对应的保留时间，并分别输入所需要的组分名如 NB、VE，并选择是否内标物 ，是内标物还得输入内标物纯度即可 (如图 10-6 所示)，单击采用  后可将不需要的组分清除，当跳出图 10-22 所示对话框后单击 OK 。另外，您还可以按下 SHIFT 键用鼠标选中内标峰，单击插入，即弹出请输入组分的一个对话框，您只要输入组分名时间宽度、内标物重，然后选择是内标峰。注意：内标峰必须位于前它组分前，否则工作站将无法进行准确计算，如内标峰不在第一行，您应该用鼠标将这行拖到第一行位置。如图 10-5、图 10-6 示

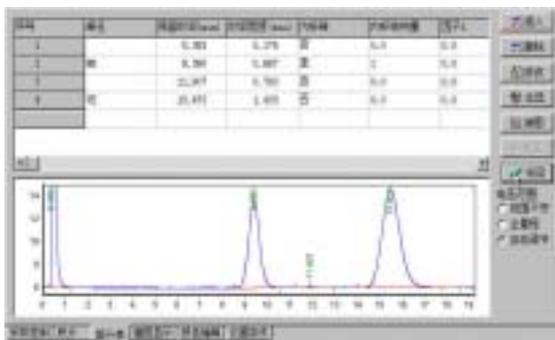


图 10-5

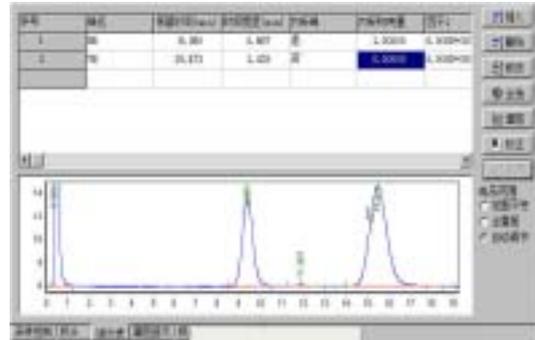


图 10-6

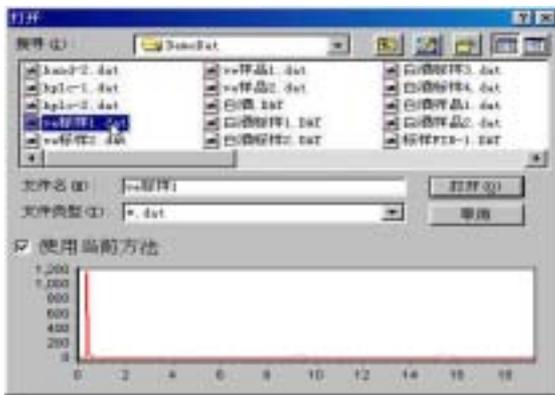


图 10-21



图 10-22

单击采用，工作站即自动弹出提交成功的对话框 (如图 10-22 所示)。然后单击校正。单击校正，工作站即弹出校正对话框，如图 10-8 所示：

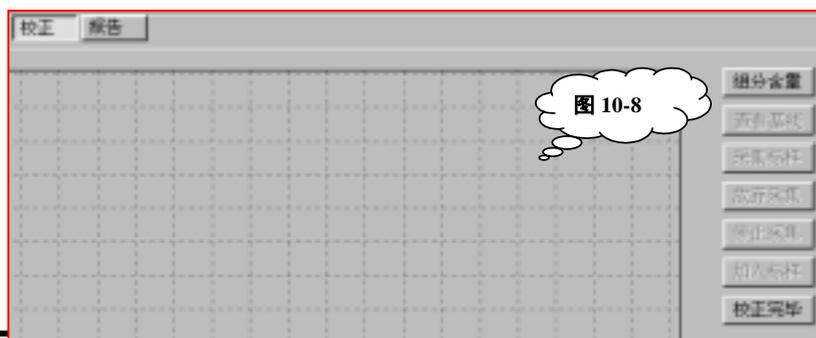
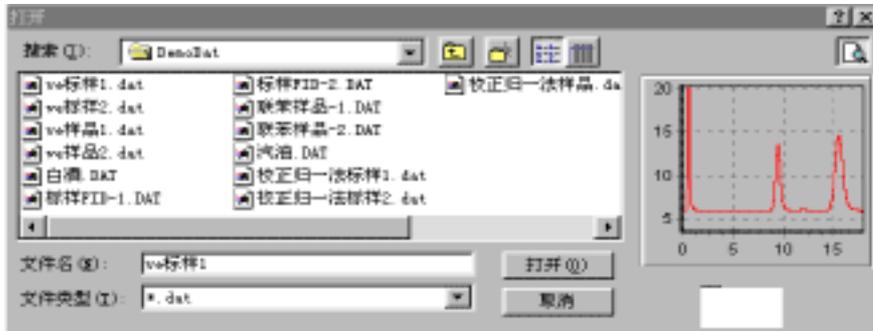


图 10-8

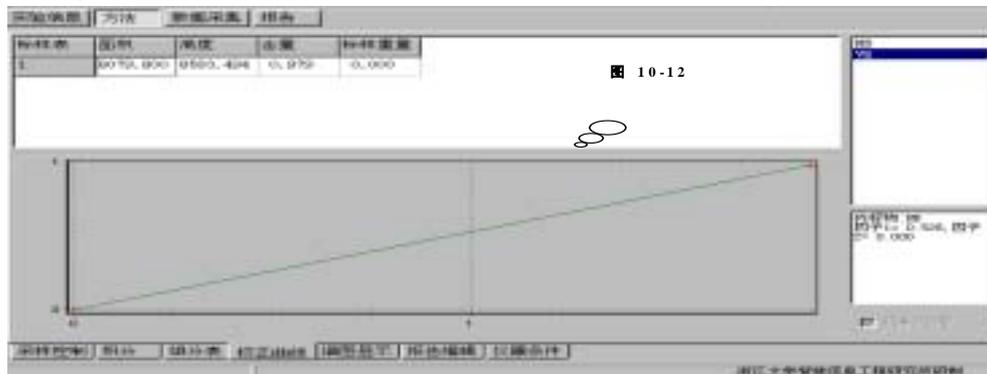
第六步：单击图 10 - 8 中右边的组分含量，输入工作站给出的组分含量表，单击 OK 确认，如图 10-9 示



第七步：单击采集标样数据，或者单击加入标样，根据工作站弹出的对话框中选择标准样品（VE 标样 1.DAT），如图 10-9,图 10-10 示，您可以根据需要输入组分含量并采集标样或重复读入标样，即重复第六步，进行多点校正，直至您点击校正完毕按钮（如图 10-11）来结束这个校正过程。



第八步：校正完成后，工作站将自动给您计算出校正因子，并绘出校正曲线，如图 10-12 示。



第九步：接下来，您就可以直接利用工作站计算出的校正因子进行样品分析了。在参数表中输入样品重量，在单击采用确认（如图 10-13 所示）后，再单击采集数据；一旦你停止采集，工作站就直接给您计算出结果，并打印出报告。



为了以后再分析同一种样品方便，我们可将这一整个过程保存下来，点击另存按钮



另存，系统将跳出如图 10-14 所示窗口：

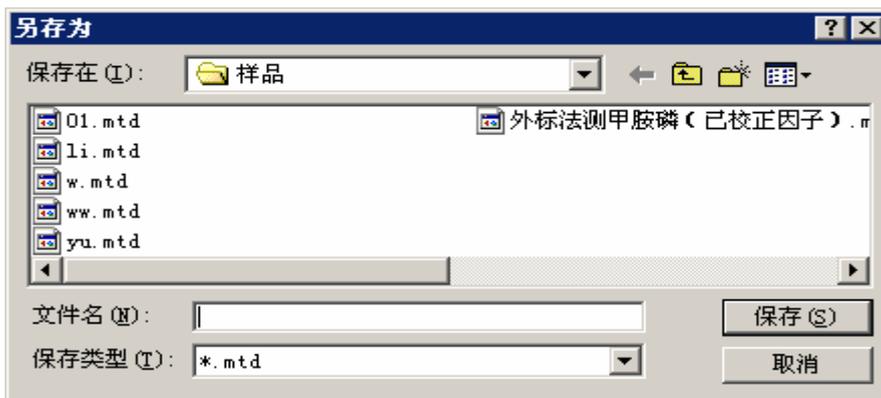


图 10 - 14

在文件名处输入用面积内标法测定 VE 组分（已计算校正因子），并点保存，如图 10 - 15 所示；下次做同一种样品时，你只需打开此方法即可进样采集数据。

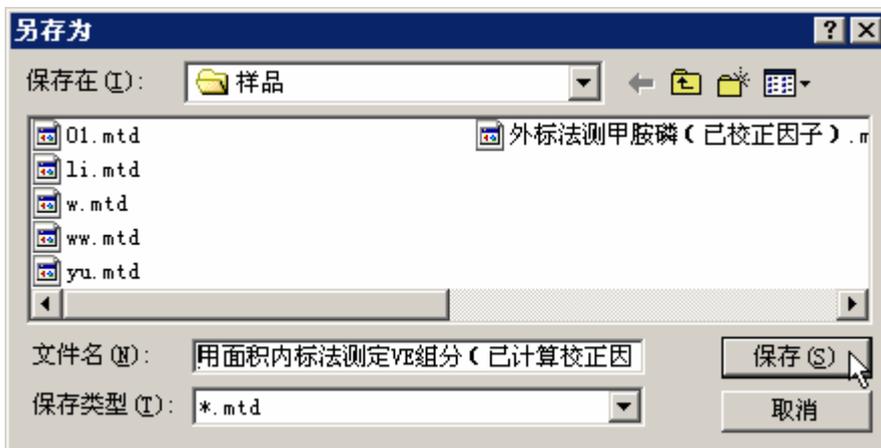
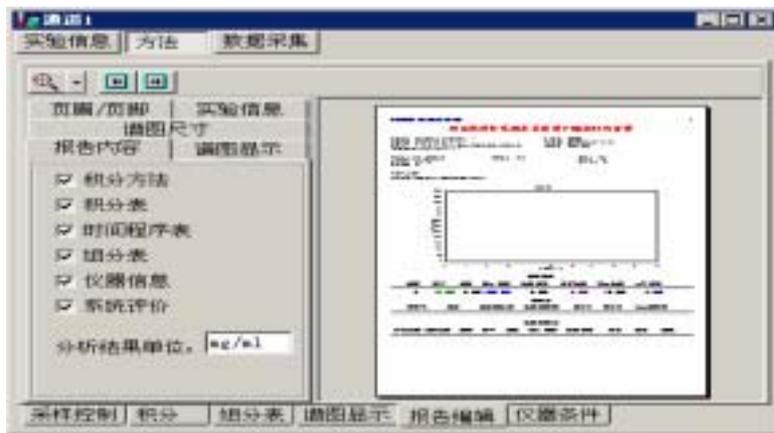


图 10 - 15

对于一个完整的实验报告，我们还必须进行报告编辑及仪器信息的输入操作。这两个过程必须在另存方法之前做好。

A . 报告编辑：点击通道窗口中的方法按钮，出现如图 10 - 16 所示窗口：

1). 点击报告编辑，选择报告内容一项，我们在这需要打印积分表、积分结果表、时间程序表、组分表、积分方法、仪器信息及系统评价，结果单位为 mg/ml，因此选择这些所要的项目。如图 10 - 16 所示：


图 10 - 16

2). 选择所需的实验信息：点击实验信息，我们希望打印实验单位、时间、日期、简介及实验人姓名，因此我们选择这些项目。如图 10 - 17 所示：

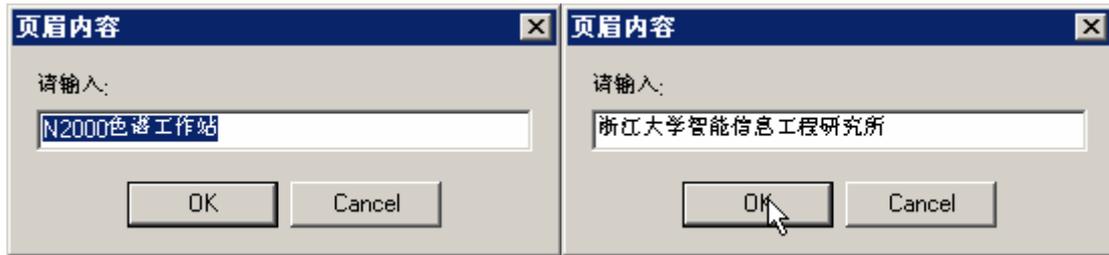

图 10 - 17

图 10 - 18

3). 谱图显示：点击谱图显示，我们希望打印时谱图显示保留时间、网格显示、基线显示、注释内容显示峰名，选择这三项。如图 10 - 18 所示：

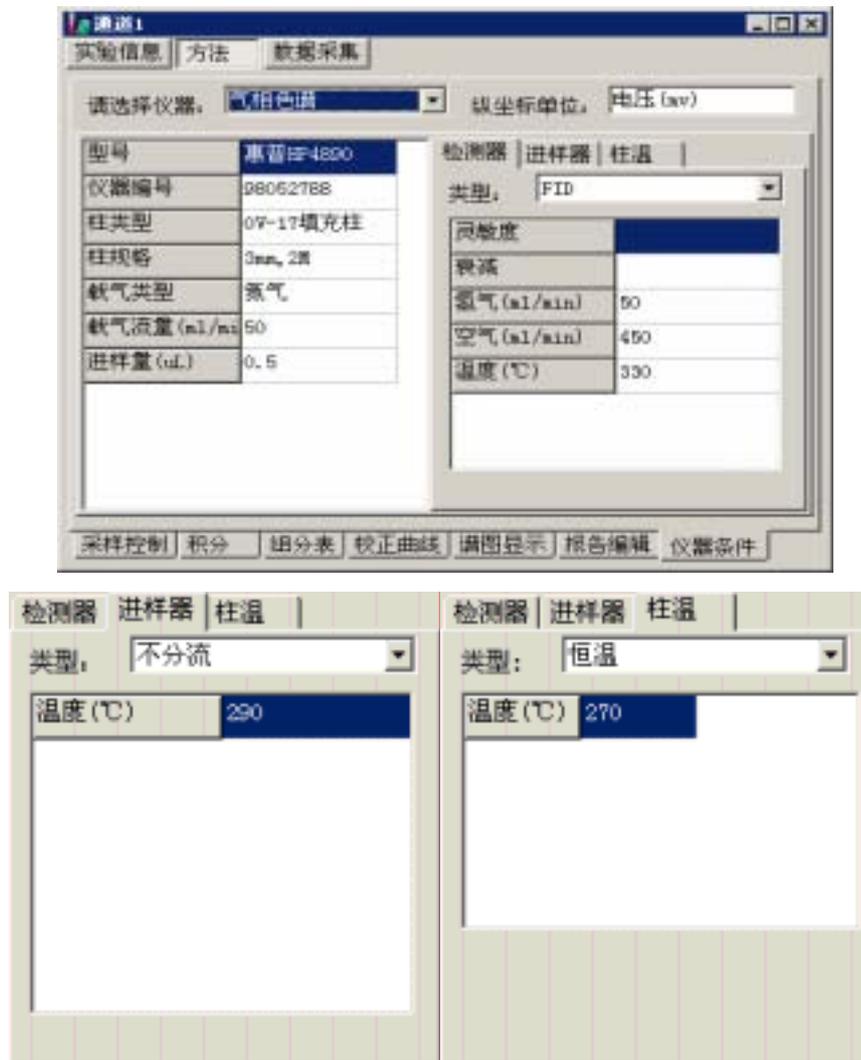
4). 对于谱图尺寸，我们以默认方式打印。对于页眉/页脚，我们希望页眉内容为本单位名称，选择需要页

眉标记，并点击页眉 ，当出现如图 10 - 19 所示窗口时，输入单位名称，并点击 ；


图 10 - 19

对于页脚内容的输入，方法与页眉方法相同，在此不再介绍。

B. 仪器信息：点击仪器信息，输入所操作仪器的相关信息。在这我们用惠普 HP4890 气相色谱分析样品，因此将其所配型号、编号、柱类型及规格等各项仪器信息一一输入，如图 10 - 20 所示：


图 10 - 20

附实验报告：

第十一章 用面积外标法做一个样品

例：杀菌剂标准样品的配制：精密称取 100.1mg 杀菌剂标准品（含量为 HQ:2.82mg/ml;HL:11.6mg/ml）于 100ml 容量瓶，用蒸馏水稀释至刻度。

杀菌剂样品 1 的配制：精密称取 100.6mg 样品于 100ml 容量瓶，用蒸馏水稀释至刻度。分析测试样品中 HQ 及 HL 的含量。

操作步骤如下：

第一步：打开在线色谱数据工作站，先选择需要打开的通道 1。如图 11 - 1 所示



图 11 - 1

第二步：进标样,点击数据采集按钮,采集标准样品谱图数据,以便作为优化数据用。

采集数据

点击这一按钮，你便可进行标样采集了。采集完毕请点击

停止采集

按钮。

第三步：待标样谱图数据采集完后,接下来进行实验方法的编辑。

1) 单击实验信息，根据需要如实填入实验标题、实验人姓名、实验方法及实验简介。另外工作站还自动给您填好实验时间和使用方法。如图 11 - 2 所示

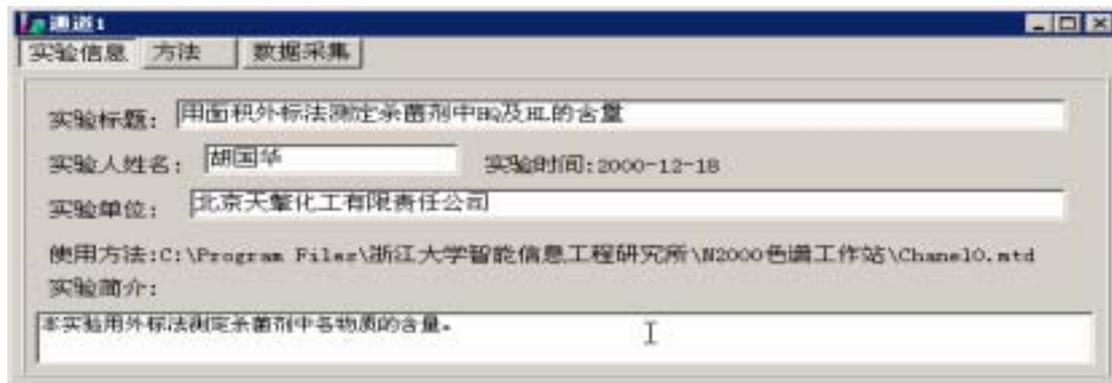
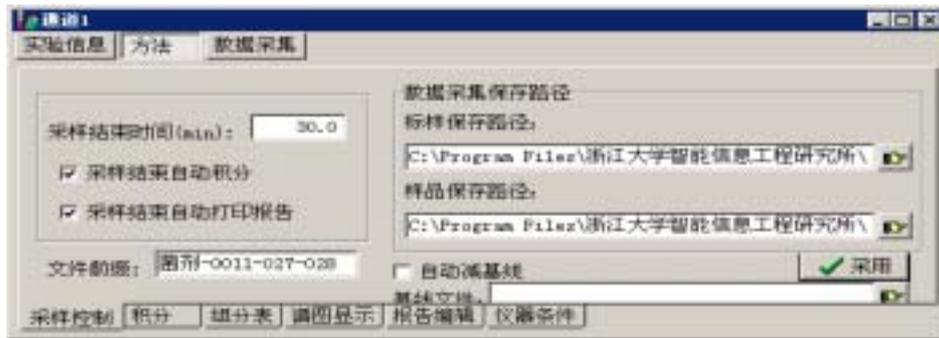
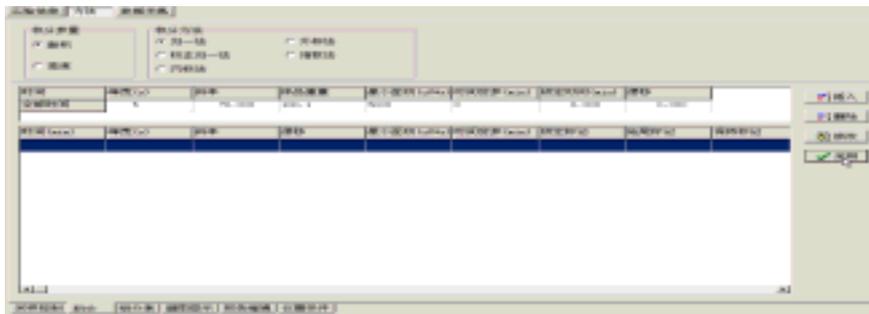


图 11 - 2

2) 单击方法，先点击采样控制，根据实验情况修改采样结束时间为 30 分钟，选择采样结束自动打印报告（用鼠标单击该功能前的小方框，为该功能被选用）。选择文件保存方式为自动方式 - 前缀 + 计数，并输入文件前缀为 CXL。然后单击采用如图 11 - 3 所示


图 11 - 3

3) 编辑积分参数,用鼠标单击积分菜单,选择外标法。并根据需要修改积分参数表如样品量输入为 100.1mg;最小面积为 5000。然后单击采用,如图 11 - 4 所示:


图 11 - 4

要编辑时间程序表,请参看 N2000 在线工作站介绍。

4) 编辑组分表:单击组分表,先单击谱图,调入刚采集的标样谱图。DAT,按下 SHIFT 键用鼠标选中外标峰,单击插入,即弹出请输入组分的一个对话框,您只要输入组分名时间宽度。单击确定。另外,您还可以单击全选,输入所需要的组分名即可,单击采用后可将空白的组分清除。单击采用,工作站即自动弹出提交成功的对话框。如图 11-5 所示。点击 OK 按钮。

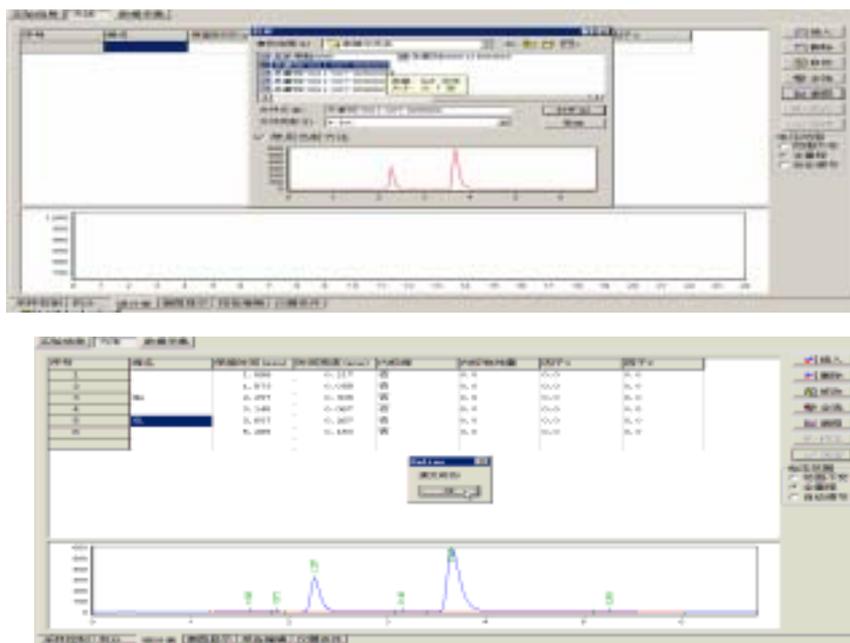
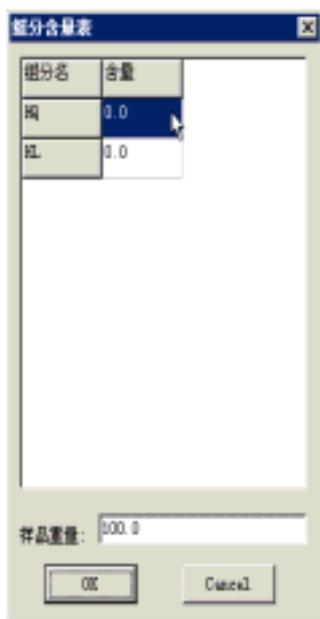
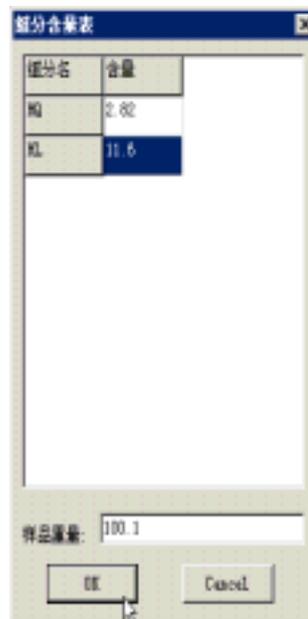
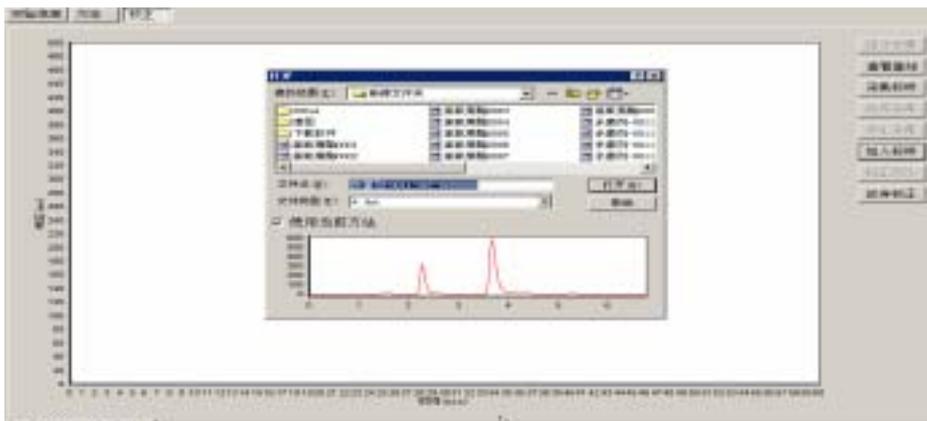


图 11 - 5

5) 接下来进行因子校正:点击校正按钮,系统将跳出如图 11 - 6 所示窗口;点击组分含量,当系统跳出如图所示对话框时,分别输入样品重量、HQ 及 HL 的标样中各自含量:100.1, 2.82,11.6。并点击 OK 按钮,如图 11 - 7 所示:


图 11 - 7

图 11 - 8

图 11 - 9

6) 单击采集标样数据,或者单击加入标样,根据工作站弹出的对话框中选择标准样品(VE 标样 1.DAT),如图 11-8,图 11-9 示,您可以根据需要输入组分含量并采集标样或重复读入标样,直至您点击校正完毕按钮(如图 11-10)来结束这个校正过程。



若此时进行采集标样，则系统将标样谱图保存在标样设置保存路径下。

第四步：校正完成后，工作站将自动给您计算出校正因子，并绘出校正曲线，如图 11-11 示。

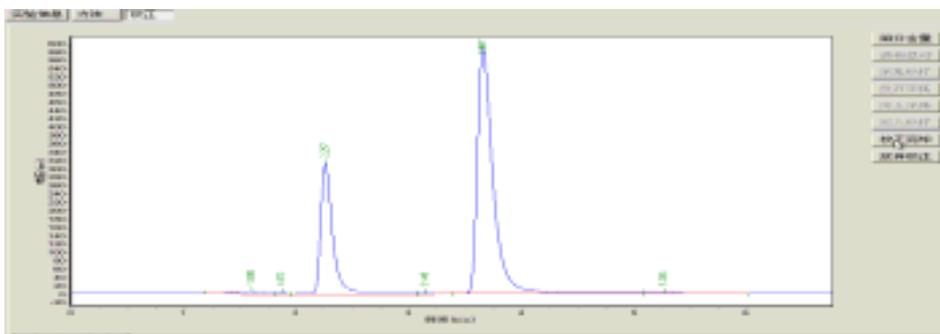


图 11 - 10

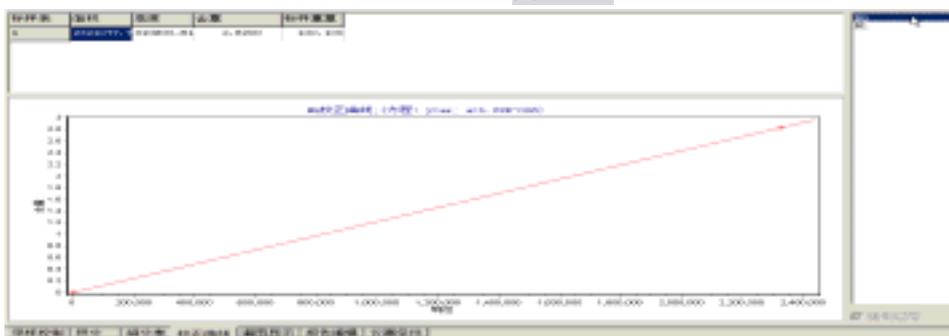


图 11 - 11

本工作站可进行多点校正，包括平行多点校正，具体如何进行校正，请参看校正章节。



到此为止，我们已经计算出校正因子，如无必要，你即可点击另存 **另存** 按钮，将此方法取名保存，以便以后之用。否则，你还需要进行以下的报告编辑及仪器条件的设置。

第五步 编辑实验报告：

1). 点击报告编辑，选择报告内容一项，我们在这需要打印积分表、积分结果表、组分表、积分方法、仪器信息及系统评价，结果单位为%，因此选择这些所要的项目。如图 11 - 12 所示：


图 11 - 12

2). 选择所需的实验信息：点击实验信息，我们希望打印实验单位、时间、日期、简介及实验人姓名，因此我们选择这些项目。如图 11 - 13 所示：

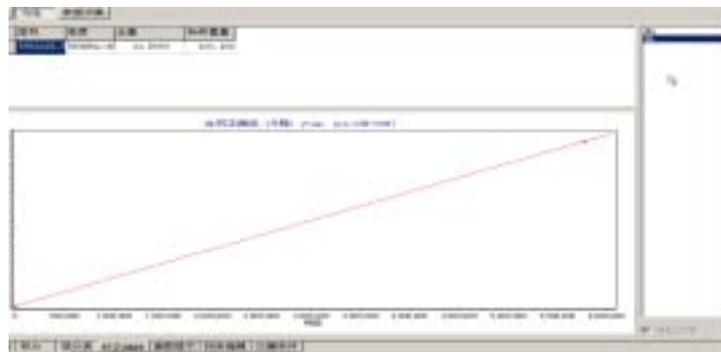
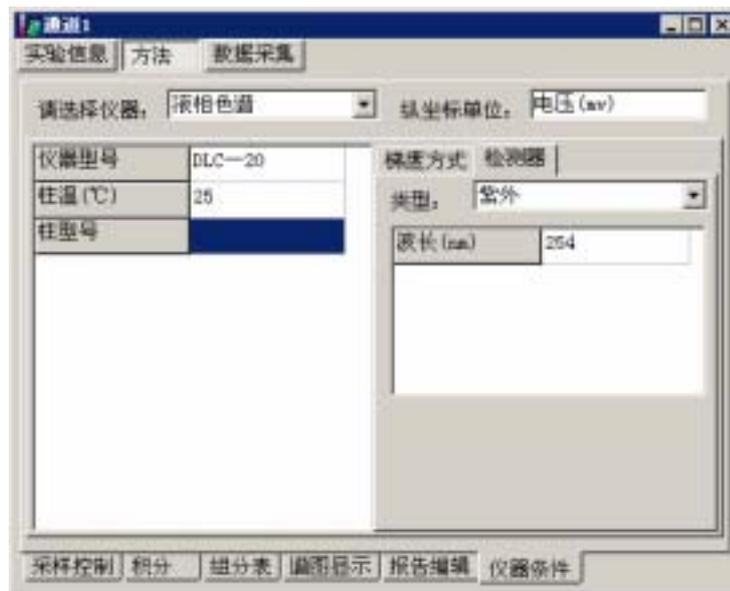

图 11 - 13

3). 谱图显示：点击谱图显示，我们希望打印时谱图显示保留时间、基线显示，选择这两项。如图 11 - 14 所示：


图 11 - 14

4). 对于页眉/页脚、谱图尺寸，我们以默认方式打印。

11. 仪器信息：点击仪器信息，输入所操作仪器的相关信息。如图 11 - 15 所示：


图 11 - 15

第六步：接下来，您就可以直接利用工作站给您做出的校正因子进行样品分析了。在参数表中输入样品重

量 (100.6), 在单击采用确认 (如图 11-16 所示) 后, 再单击数据采集, 工作站就直接给您计算出结果, 并打印出报告。

时间	峰宽 (s)	峰率	样品重量	总峰面积 (uV*s)	时间常数 (min)	稳定时间 (min)	漂移
全部时间	5	70.000	100.6	5000.000	0.000	0.000	0.000

图 11 - 16

为下次做同一种样品时操作方便, 我们将此操作过程另存为一个方法, 命名为用面积外标法测杀菌剂 (已计算校正因子). MTD; 点击另存按钮, 出现如图 11 - 17 所示窗口时, 输入面积外标法测杀菌剂 (已计算校正因子), 点击保存即可。

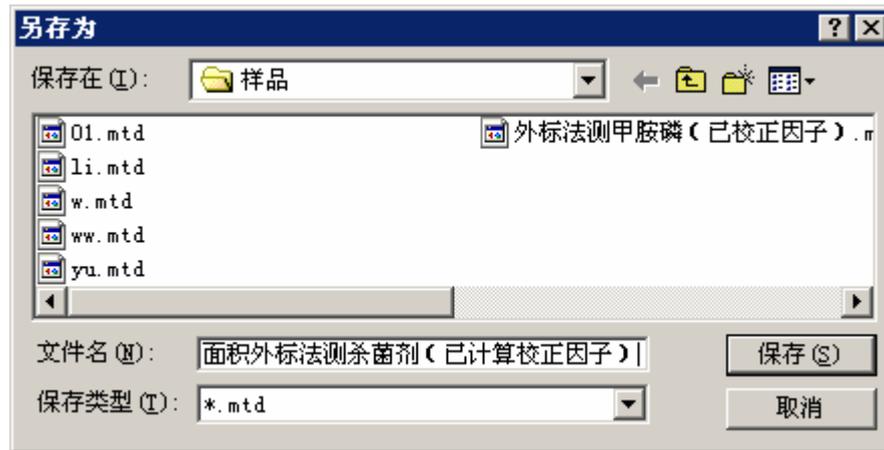


图 11 - 17

附实验报告：

用面积外表法测定杀菌剂中HQ及HL的含量

实验单位: 北京天华化工有限责任公司
 实验时间: 2000-12-14, 9:05:14
 谱图文件: A:\杀菌剂-0011-027-0280000.org

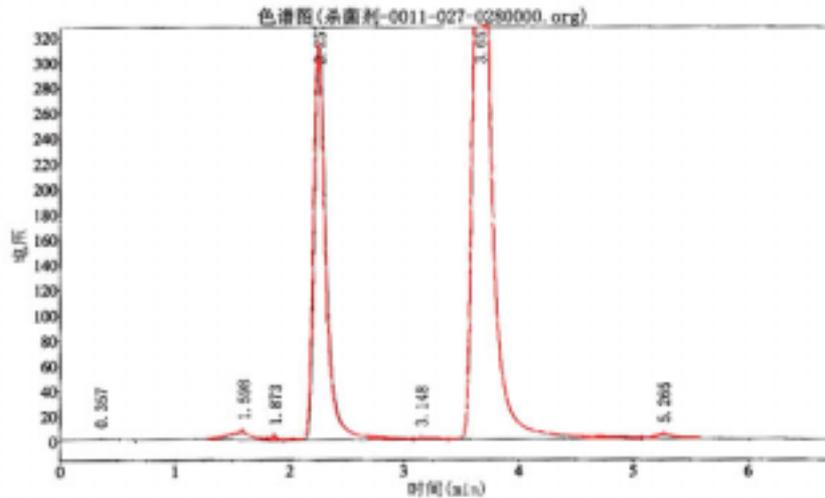
实验者: 胡国华
 报告时间: 2000-12-04, 22:20:43
 计算方法: 面积外标法

使用仪器类型: 液相色谱
 仪器型号: DLC-20
 柱温(°C): 室温
 柱型号: C18

梯度方式: 恒流

检测器: 紫外

实验内容简介:
 方法简略



分析结果表

峰号	峰名	保留时间	峰高	峰面积	含量
1		0.357	177.125	2803.200	0.0000
2		1.598	6187.717	84666.477	0.0000
3		1.873	2351.011	9657.121	0.0000
4	HQ	2.257	310900.813	2321077.750	2.7953
5		3.148	881.967	13327.279	0.0000
6	HL	3.657	583684.063	5762325.500	11.3844
7		5.265	3067.521	47368.195	0.0000
总计			907250.216	8241225.622	14.1798

峰参数表

峰宽	斜率	漂移	最小面积	时间变参	锁定时间	停止时间	样品重量
5	70.000	0.000	1000.000	0.000	0.000	6.763	100.600

第十二章 在线色谱工作站用内标法测样品—多点校正

例：标准样品 1 的配制：精密称取 98.54mg VE 标准品(含量为 99.3%)于 100ml 容量瓶，用含 1mg/mlC32 的正己烷稀释至刻度。可算出 VE 标准品的浓度(即标浓度 1)为 0.9785mg/ml；

标准样品 2 的配制：同理，精确配制 VE 样品的浓度(即样品量)为 1.0244mg/ml，用含 1mg/mlC32 的正己烷稀释至刻度。

标准样品 3 的配制：同理，精确配制 VE 样品的浓度(即样品量)为 1.1363mg/ml，用含 1mg/mlC32 的正己烷稀释至刻度。

样品为任一 VE 样品溶液，内标物同为 1mg/mlC32 的正己烷。

操作步骤：

第一步：首先对 VE 样品进行多次采集标样，以便获得谱图数据，详见第六章。

第二步：在实验信息里输入相应的信息(也可以省略)，如图：



第三步：单击方法，编辑积分参数，单击左下角 **积分**，进入如图所示：

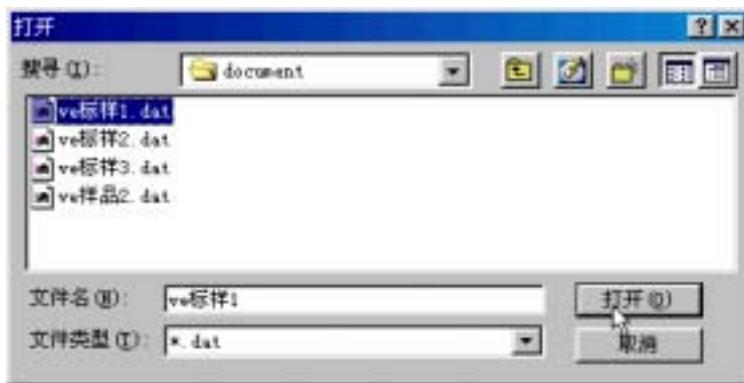


选择内标法之后，单击 **采用**。

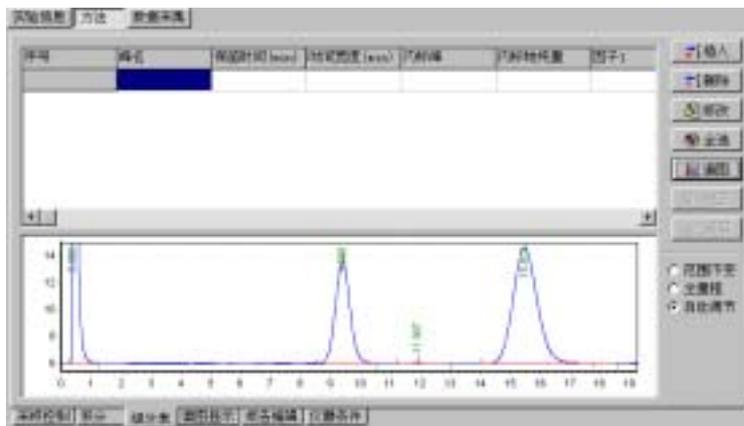
第五步：编辑组分表，单击左下角 **组分表**，进入如图所示：



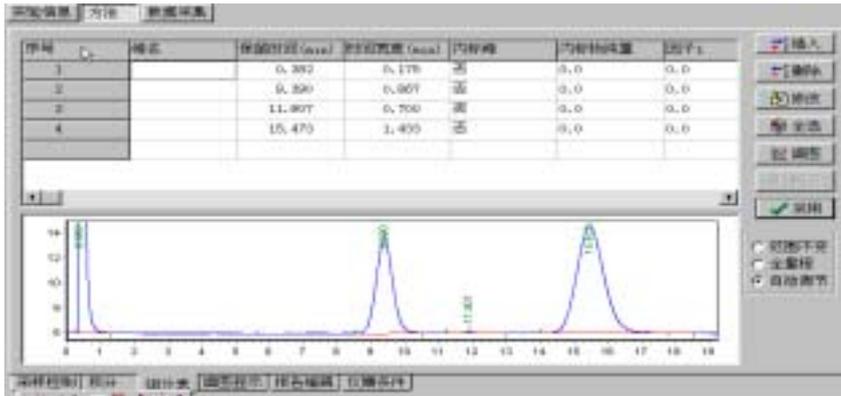
单击右边按钮 **调入谱图**；调入以前所做的 VE 标样谱图 'VE 标样 1.dat'，如图所示：



单击 **打开(O)** 之后，进入如图所示：



单击右边按钮 **全选**，如图所示：



注明内标峰、内标物量、样品名称，如图所示：

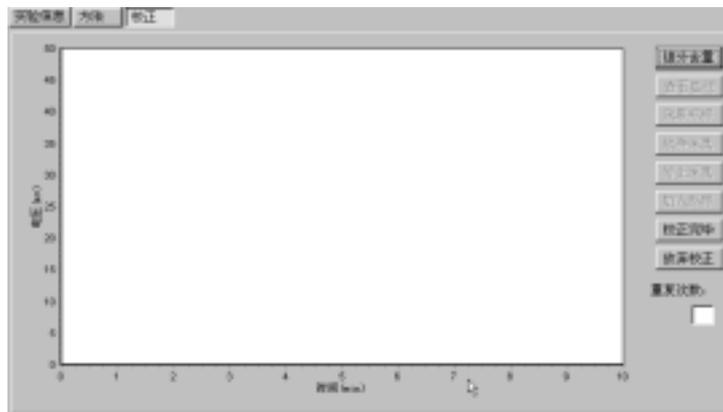
序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度(min)	内标峰	内标物纯度	因子1
1		0.382	0.175	否	0.0	0.0
2	内标物	9.390	0.867	是	1	0.0
3		11.907	0.700	否	0.0	0.0
4	VE样品	15.473	1.433	否	0.0	0.0

单击右边按钮 应用，出现如下提示：，单击 OK，设定成功，如图所示：

序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度(min)	内标峰	内标物纯度	因子1
1	内标物	9.390	0.867	是	1.00000	0.000E+000
2	VE样品	15.473	1.433	否	0.00000	0.000E+000

单击右边按钮 校正，进入下一步校正。

第六步：进行校正。在上一步单击校正之后，出现如图所示：

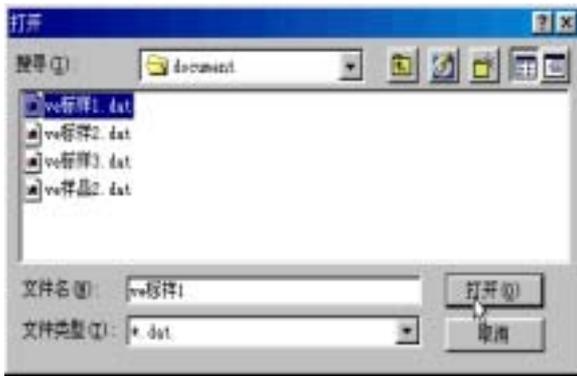


单击右上角 组分含量，在组分含量表里相应输入数据，如图所示：



单击左下角按钮 **OK** ， 单击上图的按钮

加入标样 ，调入 VE 标样谱图 ‘ VE 标样 1.dat ’ ，如图所示：



单击右下角按钮 **打开(O)** ，单点校正完

成。

第七步，第二点校正，单击右边按钮 **组分含量** ，如第六步所示在组分含量表里输入



，单击左下角 ‘ OK ’ ，单击按钮 **加入标样** ，调

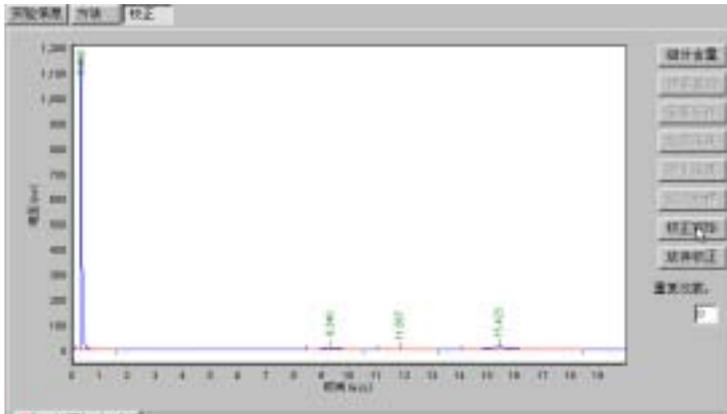
入 VE 标样谱图 ‘ VE 标样 2.dat ’，单击右下角按钮 **打开**，第二点校正完成。

第八步：第三点校正，如第七步所示，在组分含量表里输入数据，如图所示：



，如第七步所示完成上述步骤，调入 VE 标样谱图 ‘ VE 标样 2.dat ’，单击右下角按钮 **打开**，第三点校正完成。如三点校正还不够，步骤同上。

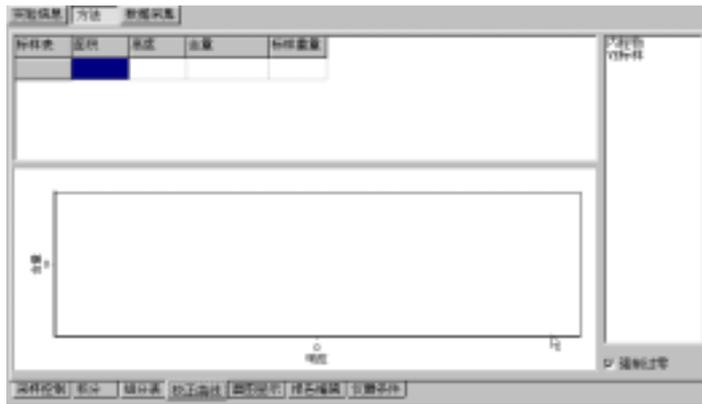
第九步：在完成上述校正步骤之后，出现如图所示：



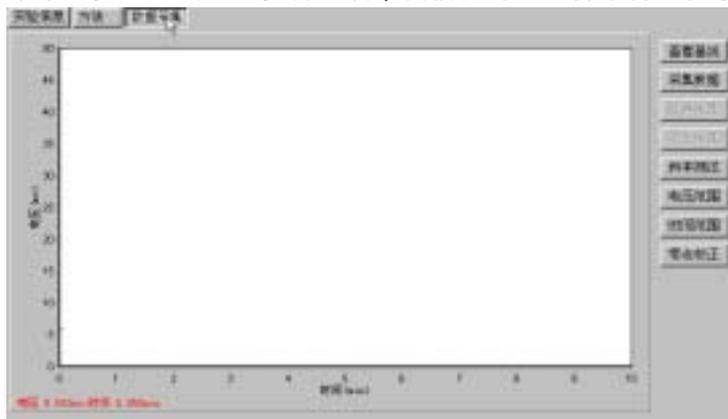
单击按钮 **校正完毕**，校正曲线完成。

第十步：完成上一步操作之后，进入如图所示对话框：

内标物无校正曲线；而点击右上角 ‘ VE 标样 ’ 就能看到校正曲线，根据需要在右下角图表 (**强制过零**) 进行选择强制过零或否。



第十一步：完成上述步骤之后，我们就可以进行采样分析了。如图所示：



单击右边按钮 **采集数据** 就可以采样了。

最后采样完毕，如果你需要对方法进行保存以便下一次调入方法直接进行采样，单击按钮



，对刚才所做方法进行保存，以后作同样的测样直接调出方法即可。

第十三章 在线色谱工作站用外标法测样品—多点校正

例：1、配制含甲醇 0.03mg/ml、异丁醇 0.03mg/ml 及异戊醇 0.03mg/ml 的白酒标液 1；
3、配制含甲醇 0.06mg/ml、异丁醇 0.06mg/ml 及异戊醇 0.06mg/ml 的白酒标液 1；
样品分析：任取一种白酒进行色谱分析。

操作步骤：

第一步：首先对白酒标样进行多次采集，以便获得谱图数据，详见第六章。

第二步：在实验信息里输入相应的信息（也可以省略），如图：



第三步：单击 ，单击采样控制，根据需要设定采样时间为 20 分钟（如果你不确定可以设置大一些），保存方式、保存路径自己设定。一切设置好之后单击 .

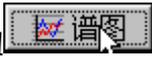
第四步：编辑积分参数，单击左下角 ，进入如下图所示：

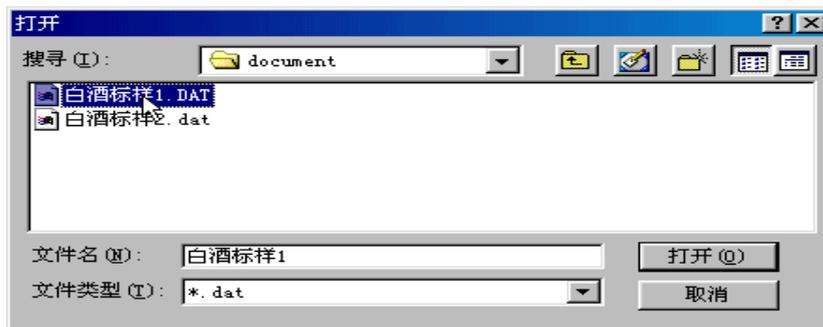
选择外标法之后，单击 .



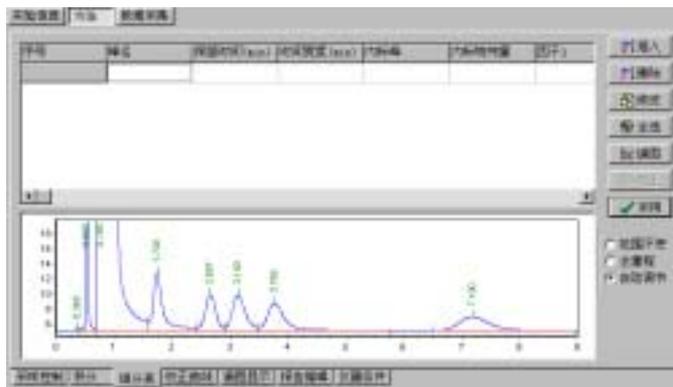
第五步：编辑组分表，单击左下角 ，进入如图所示：



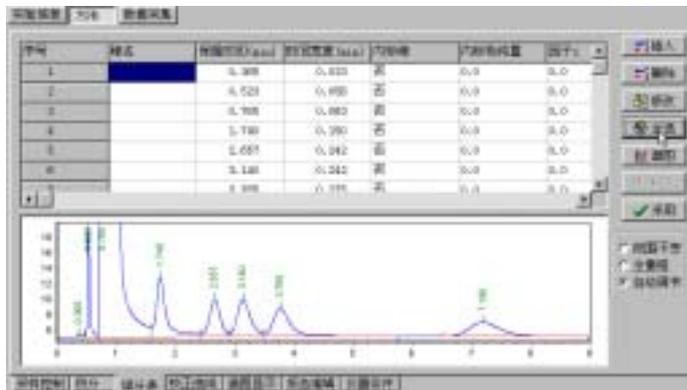
单击右边按钮  ; 调入以前所做的白酒标样谱图 ‘白酒标样 1.dat’, 如图所示：



单击  之后，进入如图所示：



单击右边按钮  , 如图所示：



在峰名一栏里输入相应的峰名，如图所示：

序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度 (min)	内标峰	内标物纯度	因子1
2	甲醇	0.523	0.058	否	0.0	0.0
3		0.765	0.083	否	0.0	0.0
4		1.740	0.150	否	0.0	0.0
5		2.657	0.242	否	0.0	0.0
6	异丁醇	3.140	0.242	否	0.0	0.0
7		3.765	0.275	否	0.0	0.0
8	异戊醇	7.190	0.700	否	0.0	0.0

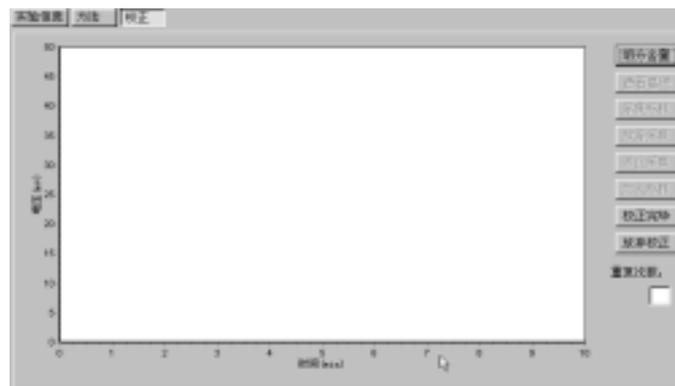


单击右边按钮  ，出现如下提示： ，单击  ，设定成功，如图所示：

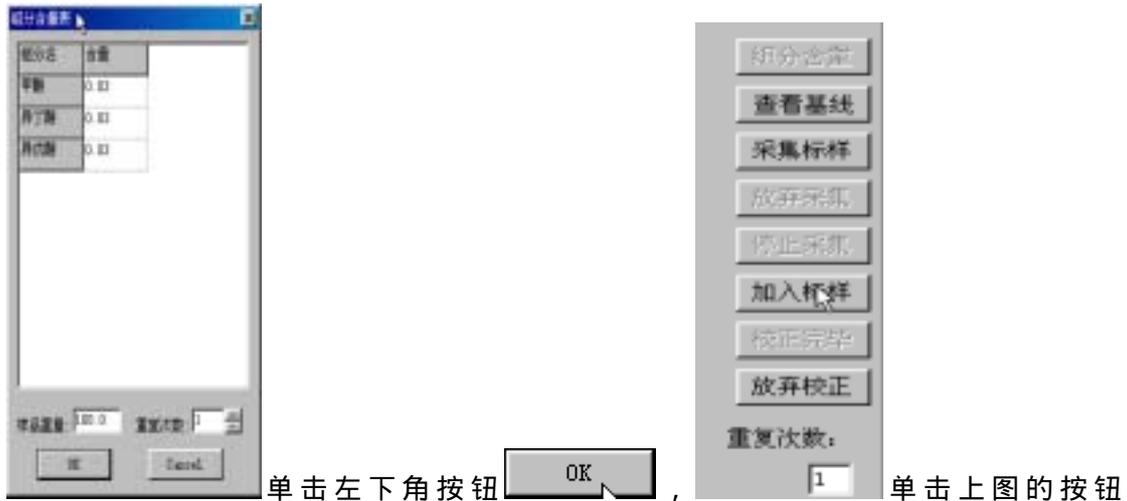
序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度 (min)	内标峰	内标物纯度	因子1
1	甲醇	0.523	0.058	否	0.00000	0.000E+000
2	异丁醇	3.140	0.242	否	0.00000	0.000E+000
3	异戊醇	7.190	0.700	否	0.00000	0.000E+000

单击右边按钮  ，进入下一步校正。

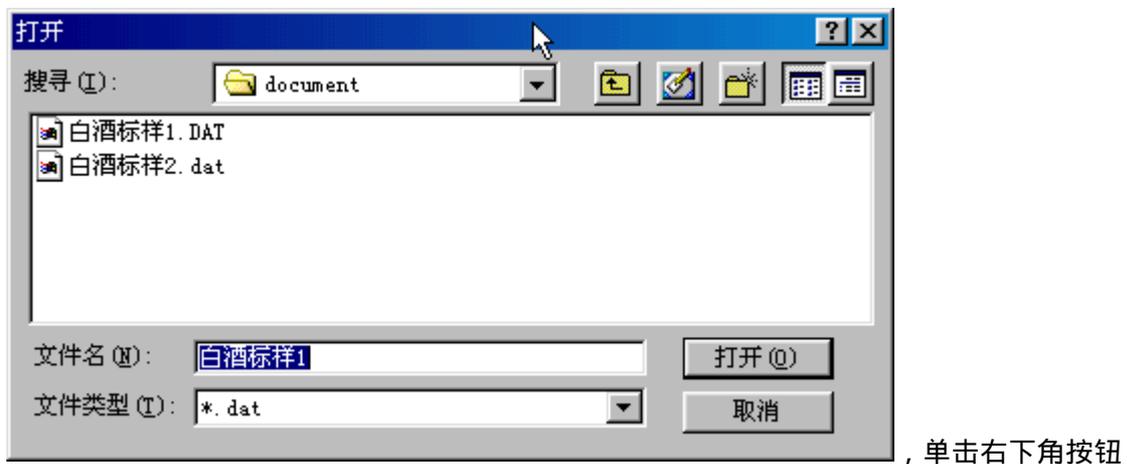
第六步：进行校正。在上一步单击校正之后，出现如图所示：



单击右上角  ，在组分含量表里相应输入数据，如图所示：



加入标样 ，调入白酒标样谱图‘白酒标样 1.dat’，如图所示：



打开(O) ，单点校正完成。

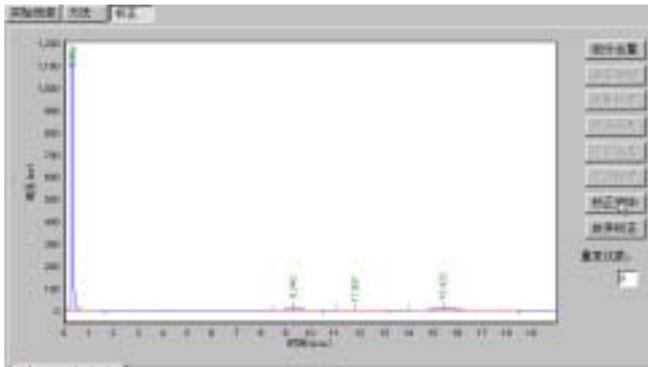
第七步，第二点校正，单击右边按钮 **组分含量** ，如第六步所示在组分含量表里输入数据，如图所示：



, 单击左下角 'OK', 单击按钮 **加入标样**, 调入白酒标样谱图 '白酒

标样 2.dat', 单击右下角按钮 **打开(O)**, 第二点校正完成。如两点校正还不够, 步骤同上。

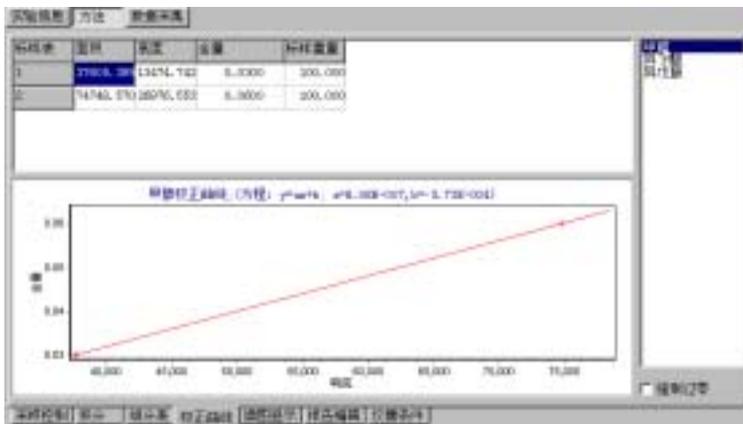
第八步: 在完成上述校正步骤之后, 出现如图所示:



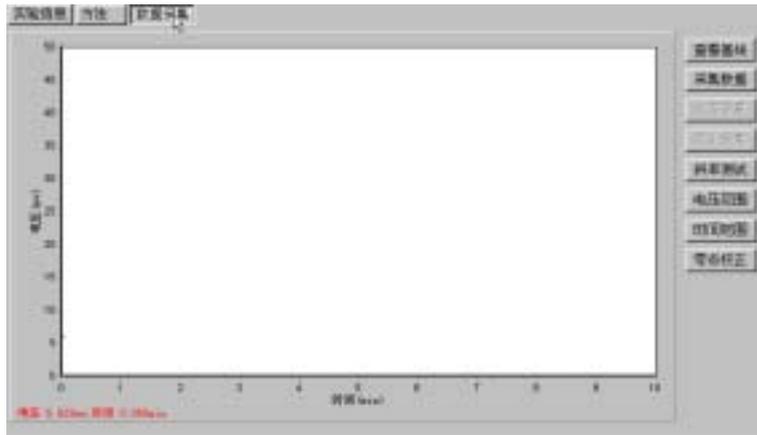
单击按钮 **校正完毕**, 校正曲线完成。

第九步: 完成上一步操作之后, 进入如图所示对话框:

分别为甲醇、异丁醇、异戊醇的校正曲线; 而点击右上角 '甲醇' 就能看到校正曲线, 根据我们需要可以在右下角图表 (**强制过零**) 进行选择强制过零与否。



第十步：完成上述步骤之后，我们就可以进行采样了。如图所示：



单击右边按钮 **采集数据** 就可以采样了。

最后采样完毕，如果你需要对方法进行保存以便下一次调入方法直接进行采样，单击按钮



，对刚才所做方法进行保存，以后作同样的测样直接调出方法即可。

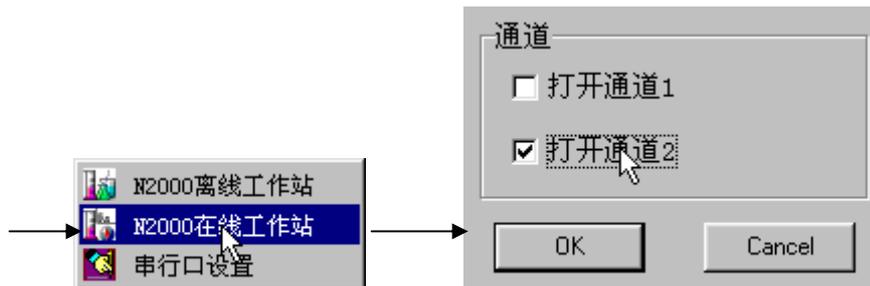
第十四章 在线工作站用校正归一法测样品浓度

例：甲醇 0.24%、乙醇 97.7%、异丁醇 0.35%、异戊醇 0.46%、杂质 a0.39%、杂质 b0.44%、
杂质 c0.42%

样品分析：任取一种白酒进行色谱分析。

操作步骤：首先对白酒标样进行多次采集，以便获得谱图数据，详见第六章。

第一步：打开在线色谱数据工作站，先选择需要打开的通道，如通道 2，如图：



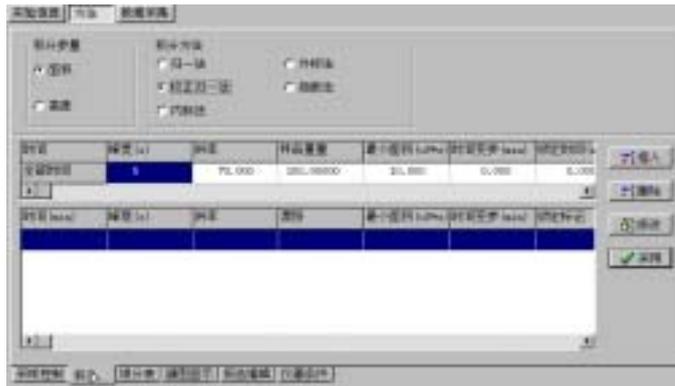
第二步：在实验信息里输入相应的信息（也可以省略），如图：



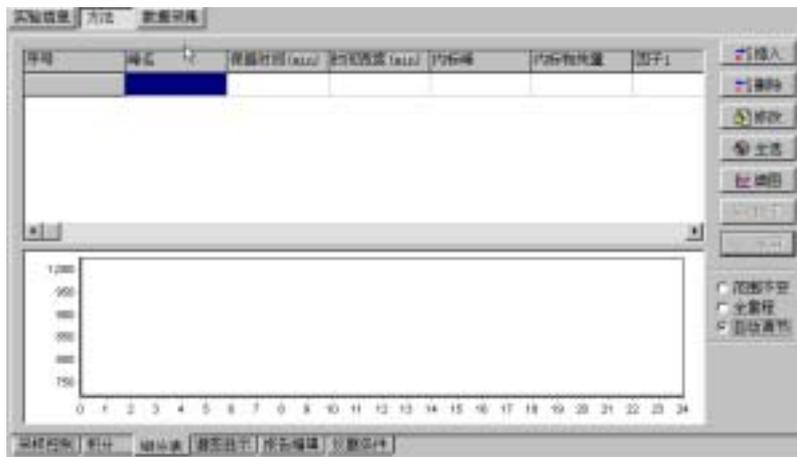
第三步：单击 ，单击采样控制，根据需要设定采样时间为 20 分钟（如果你不确定可以设置大一些），保存方式、保存路径自己设定。一切设置好之后单击 。

第四步：编辑积分参数，单击左下角 ，进入如下图所示：

选择校正归一法之后，单击 。



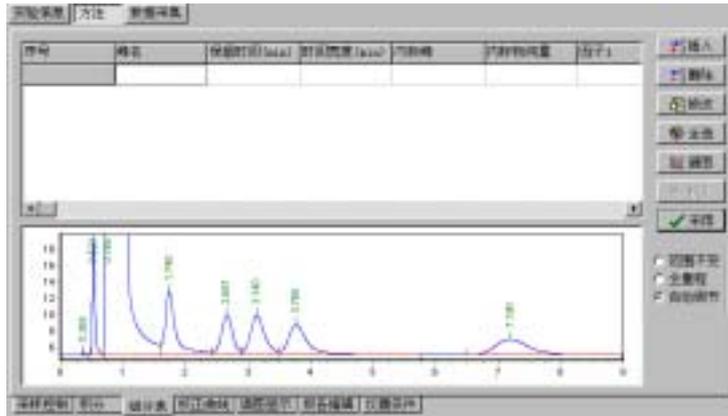
第五步：编辑组分表，单击左下角 **组分表**，进入如图所示：



单击右边按钮 **谱图**；调入以前所做的白酒标样谱图‘白酒标样.dat’，如图所示：



单击 **打开(O)** 之后，进入如图所示：



在峰名一栏里输入相应的峰名，如图所示：

序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度(min)	内标峰	内标物纯度	因子1
2	甲醇	0.525	0.060	否	0.0	0.0
3	乙醇	0.768	0.087	否	0.0	0.0
4	杂质a	1.735	0.147	否	0.0	0.0
5	异丁醇	2.698	0.240	否	0.0	0.0
6	杂质b	3.138	0.240	否	0.0	0.0
7	杂质c	3.765	0.275	否	0.0	0.0
8	异戊醇	7.185	0.700	否	0.0	0.0

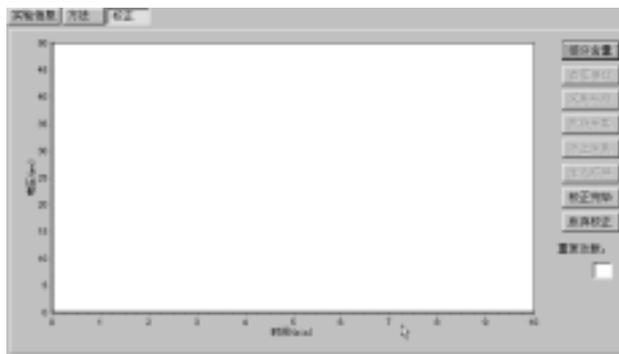


单击右边按钮 采用，出现如下提示：，单击 OK，设定成功，如图所示：

序号	峰名	保留时间(min)	时间宽度(min)	内标峰	内标物纯度	因子1
1	甲醇	0.523	0.058	否	0.00000	0.000E+
2	乙醇	0.765	0.083	否	0.00000	0.000E+
3	杂质a	1.740	0.150	否	0.00000	0.000E+
4	异丁醇	2.657	0.242	否	0.00000	0.000E+
5	杂质b	3.140	0.242	否	0.00000	0.000E+
6	杂质c	3.765	0.275	否	0.00000	0.000E+
7	异戊醇	7.190	0.700	否	0.00000	0.000E+

单击右边按钮 校正，进入下一步校正。

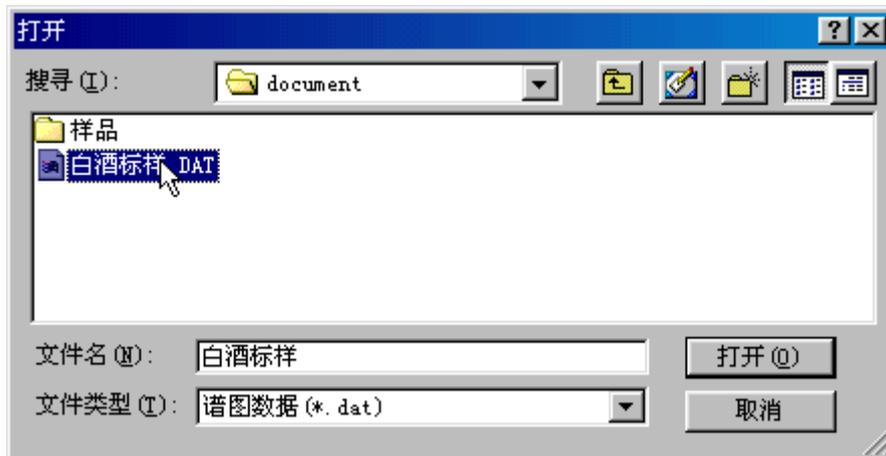
第六步：进行校正。在上一步单击校正之后，出现如图所示：



单击右上角 **组分含量** ，在组分含量表里相应输入数据，如图所示：

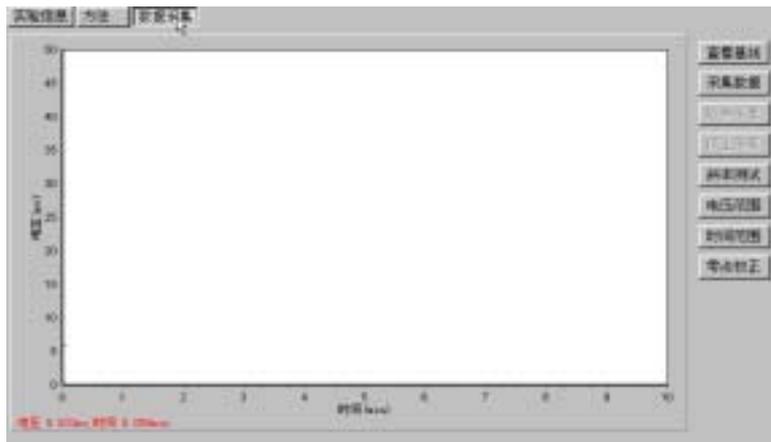


单击按钮 **加入标样** ，调入白酒标样谱图‘白酒标样.dat’，如图所示：



单击 **打开(O)** ，单点校正完成。即可得到校正曲线。如要进行多点校正，步骤同上，也可参考外标法或内标法多点校正。

第七步：察看校正曲线，即可开始采样，



单击右边按钮 **采集数据** 就可以采样了。

最后采样完毕，如果你需要对方法进行保存以便下一次调入方法直接进行采样，单击按钮



，对刚才所做方法进行保存，以后作同样的测样直接调出方法即可。

第十五章 N2000 色谱工作站日常维护

12.1 峰处理参数的设定

工作站出厂时给的峰处理参数处理大部分色谱峰。但是，如果色谱峰处理不好时，请参照下表设定峰处理参数。

项目	内容	处理方法
1	检测不出微小峰	减小斜率值，直至检出为止，如还不行，减小峰宽值。
2	将 1 个峰分成 2 个以上的峰	增大峰宽值，直至峰处理正常。
3	基线出现漂移，对后出的峰不进行检测时	将变参时间正确设定为峰宽变为 2 倍时间
4	检测不出后出的宽峰、或在出峰的途中积分结束	减小斜率值，直至检出为止；将变参时间正确设定为峰宽变为 2 倍的时间
5	想将基线画法变更时	将漂移设置为合适的值
6	想除去不需要的峰、除去独立的负峰时	除去分析开始时的不需要峰，设置合适的锁定时间；要除去分析途中的不需要峰时，可使用时间程序中的锁定功能

12.2 N2000 工作站日常故障排除

当色谱工作站出现异常现象时，请按下述方法处理。如还无法解决，请与代理商或与厂商联系。

项目	内容	处理方法
1	工作时，经常死机	<ol style="list-style-type: none"> 1. 电脑感染病毒，请用杀毒软件杀毒。确认计算机无病毒后，重新安装色谱工作站。 2. 内存不足，增加内存或删除部分其他软件。
2	工作时，发现色谱工作站无法采样（按下摇控制开关分析时无信号）	<ol style="list-style-type: none"> 1. 检查计算机后面的连线是否松开，请拧紧所有固定螺丝。 2. 检查串行口设置是否正确，更改串行口设置。 3. 数据采集线是否完好，更换数据采集线。
3	点击校正时不起作用	<ol style="list-style-type: none"> 1. 所选用积分方法是面积(高度)归一法;请选择您所要的积分方法; 2. 在查看基线的同时,进行校正;请先停止查看基线再进行校正; 3.

附：有关 N2000 色谱工作站样品重量的输入几点说明

一、校正面积归一法

对于总量不是 100%的分析，应用比例因子的校正面积归一法，将比例因子或总量百分数设置入“样品重量”参数。例如分析时有 12%的组分没有测到（没出峰），则出峰总量是 88%，这时可设置**样品重量 = 88**。

二、外标法

样品重量参数的设置，为了便于说明，以单点校正方法的计算式为例：

- 1) 如果分析未知样品时与校正时计算 F1 的样品重量值相同，则结果表中组分含量单位与计算校正因子时的组分单位相同，而与样品量的单位和数值无关。
- 2) 在校正分析时，若设置 SPL.WT=100，组分的 C1 项用绝对重量（或体积）表示，而在未知样品分析时将 SPL.WT 设置为样品的实际重量（或体积），则结果以百分含量表示。
- 3) 如果在校正分析时，也输入样品量，则 ID 表的浓度项必须是百分含量，不能是绝对含量。
- 4) 浓缩样品的分析：将浓缩因子乘以样品量后的值设置为样品重量，则可得到原始样品中的组分含量。

三、内标法

1) 内标量 IS.WT 的设置

用所加入的内标组分的绝对量来设置。不过在校正分析时，内标物浓度在 ID 表中的设置，只须使 IS.WT = 1。

例：10UL，2NG / UL 的内标 样品

则 IS.WT = 20NG

2) 样品量 SPL.WT 的设置

用加入内标组分之前的量作为样品量，原则上，应该用与内标量相同的单位；若不同，则结果以一个新的单位表示。

例：0.5G 内标 2ML 样品

IS.WT=0.5G SPL.WT=2ML

则结果以 G/ML 表示。

第十六章 N2000 色谱工作站服务指南

为了保护您的每一分投资,浙大智能工程研究所向您 提供一系列的服务与支持,我们十分欢迎您来我们公司交流学习。我们的交通方法如下:

从火车东站坐 2 8 路、K 2 8 路、K 5 9 9 路或者从其他地方坐 1 6 路、1 5 路、2 1 路到浙江大学玉泉学区,下车后沿玉古路往北走 100M 即到,只要您到浙江大学后,可以打电话给我们,经便我们到校门口接您。

附:

联系地址:浙江省杭州市玉古路 149 号国家大学科技园三楼 304 室

邮编:310012

传真:0571 - 87986339, 87983221

联系电话:0571-87970882, 87968803, 87986337, 87991175, 87983221

联系手机:013705712210

电子邮件:sales@54pc.com & service@54pc.com & support@54pc.com

网址:<http://www.54pc.com/>