

使用说明书

Primaide 系统管理 详细操作篇

本产品是研究用仪器。请不要以患者的治疗或诊断为目的而使用本仪器。

柱式会社 日立高新技术

日本东京都港区西新桥 1 丁目 24 番 14 号

在使用本说明书时, 请注意并理解以下事项。

1. 本说明书的内容会因改进有所变更, 恕不另行通知。
2. 本说明书的版权属日立高新技术所有。未经日立高新技术的书面允许, 不得以任何形式、通过任何手段擅自转载、复印或向第三方泄露本书的部分或全部内容。
3. 因本说明书未予记述的目的、方法使用而引起的损害, 本公司不对此承担任何责任。在使用本设备时, 请务必谨慎操作。
4. 本说明书不对工业产权以及其它权利的实施做任何保证, 也不对权利的实施做任何承诺。

前言

日立高新技术集团真诚地感谢您使用日立液相色谱仪用数据处理设备—Primaide 系统管理。

本设备应由具备化学分析基础知识的人员操作。如果分析仪器或药品·样品的操作或使用不当，不仅得不到正确的结果，还可能会导致安全上的问题。非上述人员请不要使用本设备。

在操作前，请您务必仔细阅读该说明书以便能正确有效地使用。

本使用说明书的阅读方法

本说明书由以下 4 部分构成：

- Primaide系统管理 安装篇
- Primaide系统管理 环境设定篇
- Primaide系统管理 详细操作篇
- Primaide系统管理 维护软件篇

※ 环境设定篇，详细操作篇及维护软件篇以 PDF 文件（Online Manual）的形式保存在 Instruction Manual CD 里。

上述说明书是对 Primaide 系统管理的操作方法以及特别注意事项的说明。

首先，请您仔细阅读卷首的“注意事项”（注意—1-3）与“安全使用注意事项”（安全—1-6）。

接下来，再请您阅读 Primaide 系统管理的各项说明书。

注意事项

产品质量保证

关于Primaid系统管理,本公司仅在依照使用说明书内容使用的情况下,按照说明书所述的规格范围内,保证制造上或材料上没有缺陷。

在此表述中明示了保证内容,不保证此内容之外的情况。

如未在此表述,制造商不以明确或默认的方式对下述情况做保证:

用于特殊目的或用途时的商品性·适销性;

因明示或暗示而引起的直接的·间接的损失做补偿。

销售店,雇工未经本公司认可,以口头或者书面方式提供与产品性能不相符信息的情况下,本公司不承担任何责任。

除此之外,不对因计算机病毒或设备故障而引起的数据与应用软件的损坏承担任何责任。

(1) 质量保证范围

无偿地维修因产品制造缺陷而引起的故障。维修时,可能会使用一部分替代品、也有可能以换代修而提供给同等的产品。在替换时,如个人计算机、打印机等在市场上频繁更新的产品,可能无法获得其原始版本。

(2) 质量保证区域

只限于中国。

(3) 质量保证期限

自初次安装日算起一年。

(4) 不予保证项目

在质量保证期内,不予保证的项目。

(a) 因安装于不符合制造商规定地点进行操作而引起的故障。

(b) 因使用不符合制造商规定电源(电压、频率)、或因电源异常而引起的故障。

(c) 因用户使用的样品、气体、压缩空气或冷却水中混入杂质物而引起的管路腐蚀、老化。

(d) 因空气中含有强腐蚀性气体而引起的电器腐蚀或光学元件劣化。

(e) 因使用非制造商提供的硬件、软件或零部件而引起的故障。

(f) 因用户误操作或保管不妥善而引起的故障。

(g) 因非制造商指定维修点维修而引起的故障。

(h) 初次安装后,因未在制造商指导下进行迁移或运输而引起的故障。

(i) 因用户擅自拆卸、改装或迁移而引起的故障。

(j) 因火灾、地震、风暴或水灾、落雷、骚乱、社会动乱、犯罪、恐怖活动、战争、放射能污染、有害物质的污染以及其它的不可抗力而引起的故障。

(k) 易耗品与超出使用寿命的部件故障。

(l) 因计算机感染病毒而引起的故障。

(m) 对用户废弃的设备,或未经制造商允许擅自转售的设备。

(n) 易耗品,以及任何超出使用寿命的部件引起的故障。

(o) 因设备故障而引起的数据损坏。

(5) 保证书

保证书不能再发行。请务必妥善保管。

安装·迁移与售后服务

请用户不要擅自进行交货时的安装或交货后的迁移。

交货时，必须由制造商安装服务部门或制造商认可的技术者，或在其指导下安装设备。

安装前，请用户依照本说明书的要求为安装做好妥善准备。

交货后发生迁移时，将另外收费。

迁移时，为避免发生故障，请务必与购买商或是最近的售后服务部门联系。

所有维修服务均在本公司业务时间内提供。

有关售后服务，维修合同和其他的咨询，请同制造商指定的维修服务点（参照本章末的售后服务网）*或销售店联系。

* 请联系安装报告书上的维修服务点。

用户培训

为了更安全准确地使用本仪器，本公司会在公司内或者在用户现场举行相关培训。有关具体的培训事项，请同销售部门协商。（该培训是有偿的）

其它注意事项

商标

Microsoft是美国Microsoft Corp. 在美国以及其它国家的登录注册商标。

Windows是美国Microsoft Corp. 在美国以及其它国家的登录注册商标。


Windows 7是美国Microsoft Corp. 的美国以及在其他国家的注册商标和商标。


Microsoft Internet Explorer 是美国Microsoft Corp. 的商品名称。

其他的产品名，公司名是各公司的商标或登录注册商标。


安全使用注意事项


在使用Primaide系统管理之前，请务必仔细阅读下述注意事项并充分理解该内容。

安全注意事项由“危险”，“警告”，“注意”的警告标题与之相对应的警告标识来表示。

：该警告符号位于所有警示词之前，用于说明记述的内容与安全相关，并引人注意。为了自己的人身安全，请严格遵守该警告符号后面的所有安全内容。

 危险：表示存在紧急危险。如不注意，将导致死亡或重伤。

 警告：表示存在潜在危险。如不注意，可能导致死亡或重伤。

 注意：表示存在危险。如不注意，可能导致中、轻度受伤。

注意：表示存在潜在危险。如不注意，可能导致财物损坏，数据损坏，环境污染。

另外，帮助用户正确使用本设备的注意事项用以下词条表示。

注释：该词条是用来说明正确使用设备，避免设备故障的发生以及进行正确的测定。

安全的共同注意事项

使用前的注意事项

- 使用本产品前，请仔细阅读使用说明书并理解该内容。
- 请将使用说明书妥善保管于便利之处以便随时参考。
- 设备的使用请遵守说明书所述的操作规程。
- 请务必理解并遵守本说明书里有关安全方面的指示内容。
- 请务必遵守设备以及使用说明书中提示的注意事项。如有违反，可能会导致人身伤害或设备的损害。
- 请务必遵守说明书上所记述的产品的使用方法。
- 请勿改装产品，交换部品，使用非指定零部件或是拆除安全装置，以免造成危险。
- 为避免发生故障，切勿采取说明书记述外的操作。如产品发生故障，请与销售店或售后服务部门联系。
- 为了不损害用户的健康，当使用药品的时候，请保持房间良好的通风。
- 由于无法预测操作中可能会发生的所有事故，所以请用户不仅要充分理解·遵守该说明书的注意事项与指示，还需要用户自身始终保持警惕并根据常识做出判断。

安全的共同注意事项（续）

使用前的注意事项

- 使用设备过程中，如果出现异常的声音，奇怪的味道，冒烟，漏气等异常情况的时候，请立即拔掉装置的电源。然后，针对不同的异常情况实施安全措施。同时，请联系制造商指定维修点。


安装·维修·迁移的注意事项

- 请用户不要擅自进行交货时的设备安装。
为了更安全准确地使用本仪器，安装只限于制造商指定维修点，或受过制造商训练，拥有制造商认可资格的人员来施行。
- 设备安装完后交付使用时，请检查标准附属品是否齐全。如在标准附属品不足的状态下启动装置，装置会出现故障，引起安全上的问题。万一发现数量不足，破损，或感觉装置有问题时，请咨询设备安装者，或销售店，或最近的制造商指定维修点。
- 用户可以维修的项目只限于本使用说明书里有的项目。所以，请仔细阅读并充分理解使用说明书里记述的内容后，再实施维修。使用说明书里没有的项目，请不要实施维修。否则，可能会导致人身伤害或设备的损害。
- 设备设置后，请不要再移动设备。因震动可能会影响已调整好的光学系统和降低设备灵敏度以及产生波长偏差等。


使用说明书中的警告表示

以下总结了本使用说明书里用到的警告以及被记载的地方。

危险标识

- 此设备中不存在被列为「 危险」的注意事项。

警告标识

- 此设备中不存在被列为「 警告」的注意事项。

注意标识

● 长时间操作引起的疲劳

- 边观看显示器边操作时，以同样姿势长时间注视显示器会使眼睛与身体感到疲劳。在长时间使用显示器时，为了您的健康，请每小时休息10至15分钟，使您的眼睛与身体都能得到休息。另外，看显示器的时间一天请不要超过6小时。

（使用说明书 第1章）

正确使用Primaide系统管理的 的注意事项

● 测定值的正确性・精密度

- 请进行定期检查，监测设备是否正常运行。另外，请进行必要的管理样品测定。

● 数据的备份

- 因设备发生故障或误操作等原因会使测定结果以及参数无法使用。为了在硬盘损坏时仍保持数据的完整性，请定期把硬盘中的文件保存到软盘或CD-R等抽取式磁盘上。

● 计算机病毒

- 如程序及数据突然受损或出现意外的运行或屏幕信息，计算机很可能被病毒感染。

计算机病毒指的是隐蔽性地侵入计算机，并任意操纵计算机而破坏数据的一种恶意程序。该病毒可以用防病毒程序来查杀。

可能引起病毒感染的原因有：

(a) 下载了含有病毒的程序；

(b) 使用了含有病毒的软盘等可换式存储媒体；

被病毒感染的计算机还会通过网络，存储媒体感染其它计算机。所以，请勿使用可能含有病毒的程序或存储媒体。

在使用软盘等存储媒体时，请使用杀毒软件来查杀。但请注意的是：杀毒软件并不能查杀所有类型的病毒。因此，请务必事前备份硬盘中的文件。同时，请用户自备杀毒软件并查杀。

正确使用Primaide系统管理的 的注意事项（续）

● 供电中断

- 供电中断或是因为雷击引起的电压瞬间跌落会导致计算机发生故障，或破坏基本软件，应用软件以及数据。

为防止上述情况的发生，建议采用交流不间断电源(根据社团法人日本电子工业发展协会关于个人计算机供电电压瞬间跌落的对策指南)。

● 个人计算机

- 关于个人计算机的操作，请参照计算机的使用说明书。在使用本设备时，请务必遵守计算机生产厂家指示的警告与注意事项。
- 如果在硬盘或软盘存取数据时断掉计算机电源，可能会导致个人计算机发生故障或破坏存储的数据与软件。在切断个人计算机电源时，请先退出该操作系统，然后关机。
- 请不要将该设备放置于倾斜，狭窄的地方以避免倒落，致人受伤。
- 请不要将溶剂撒到计算机上，以免导致计算机发生故障。万一撒到计算机上，请迅速擦干以免发生触电，冒烟，火灾。
- 请不要在计算机附近使用有机溶剂等挥发性较高的液体，以免进入计算机内引起火灾。

目 录

前言

本使用说明书的阅读方法

注意事项	注意-1
产品质量保证	注意-1
安装·迁移与售后服务	注意-2
用户培训	注意-2
其它注意事项	注意-3
 安全使用注意事项	安全-1
 安全的共同注意事项	安全-2
 使用说明书中的警告表示	安全-4
 危险标识	安全-4
 警告标识	安全-4
 注意标识	安全-4
注意：长时间操作引起的疲劳	安全-4
正确使用Primaide系统管理的注意事项	安全-5
第1章 概 要	1- 1
1.1 Primaide系统管理	1- 1
1.2 主要功能	1- 2
第2章 Primaide系统管理的启动·关闭	2- 1
2.1 开始	2- 1
2.2 启动·关闭Primaide系统管理	2- 1
第3章 主窗口的功能与操作	3- 1
3.1 主窗口菜单命令功能	3- 2
3.1.1 文件菜单	3- 2
3.1.2 帮助菜单	3- 3
3.2 工具栏图标	3- 4
3.2.1 选择应用程序	3- 5
3.2.2 设定方法文件	3- 5
3.2.3 设定样品表	3- 6
3.2.4 执行数据采集	3- 6
3.2.5 执行数据再处理	3- 6
3.2.6 模块状态显示	3- 7
3.2.7 报告预览	3- 9
3.2.8 打印窗口	3- 9

3.3	新建对话框	3-10
3.4	“打开文件”对话框	3-10
3.4.1	“打开文件”对话框的构成	3-10
3.4.2	使用“打开文件”对话框	3-12
3.5	保存对话框	3-17
3.6	另存为对话框	3-18
第4章	方法文件窗口的功能与操作	4- 1
4.1	方法文件设置窗口的构成	4- 1
4.1.1	文件菜单	4- 2
4.1.2	编辑菜单	4- 3
4.1.3	模块的条件	4- 4
4.1.4	数据处理设定菜单	4- 5
4.1.5	选项菜单	4- 6
4.2	生成与保存方法文件	4- 8
4.2.1	新建方法文件	4- 8
4.2.2	变更已存的方法文件	4- 9
4.2.3	设定方法文件	4-10
4.2.4	保存方法文件	4-10
4.3	设定方法文件	4-11
4.3.1	仪器条件设定窗口	4-11
4.3.2	数据处理条件设定窗口	4-26
第5章	样品表窗口的功能与操作	5- 1
5.1	样品表设定窗口的构成	5- 1
5.1.1	文件菜单	5- 2
5.1.2	编辑菜单	5- 3
5.1.3	样品表的设定菜单	5- 4
5.2	生成·保存样品表	5- 5
5.2.1	新建样品表	5- 5
5.2.2	变更已存样品表	5- 5
5.3	设定样品表	5- 7
5.3.1	设定单一方法样品表	5- 7
5.3.2	设定复数样品表	5- 9
5.3.3	变更数据采集中样品表	5-10
5.3.4	保存样品表	5-11
5.4	样品表窗口	5-12
5.4.1	样品表生成条件的设定窗口	5-12
5.4.2	样品表编辑窗口	5-16
第6章	数据采集窗口的功能与操作	6- 1
6.1	数据采集窗口的构成	6- 1
6.1.1	文件菜单	6- 2

6.1.2	数据采集菜单	6- 3
6.1.3	数据显示菜单	6- 6
6.2	采集数据	6- 7
6.2.1	打开数据采集窗口	6- 7
6.2.2	变更色谱显示比例	6- 8
6.3	数据采集窗口的操作	6- 9
6.3.1	单分析的开始	6- 9
6.3.2	连续分析的开始	6-10
6.3.3	噪音测试	6-13
6.3.4	更新数据采集中的样品表	6-14
6.3.5	样品表中指定行的数据采集	6-15
6.3.6	连续分析未完成的数据系列的数据再处理	6-16
6.4	在线数据处理	6-17
6.5	开始快速分析	6-19
6.5.1	设定参数	6-19
第7章	进样表窗口的功能与操作	7- 1
7.1	进样表窗口的构成	7- 1
7.1.1	文件菜单	7- 2
7.1.2	选项菜单	7- 3
7.1.3	窗口菜单	7- 3
7.2	进样表窗口的操作	7- 4
7.2.1	打开进样表窗口	7- 4
7.2.2	进样表的操作	7- 6
7.3	标准曲线窗口	7- 9
7.3.1	标准曲线窗口的构成	7- 9
7.3.2	生成与修改标准曲线	7-11
7.4	报告显示窗口	7-13
7.4.1	报告显示窗口的构成	7-13
7.5	再计算处理	7-15
7.5.1	再计算处理	7-15
7.5.2	执行再计算	7-16
第8章	数据再处理窗口—色谱图—	8- 1
8.1	数据再处理窗口的构成	8- 1
8.1.1	文件菜单	8- 2
8.1.2	编辑菜单	8- 3
8.1.3	数据处理菜单	8- 3
8.1.4	选项菜单	8- 7
8.1.5	显示菜单	8- 8
8.1.6	窗口菜单	8- 9
8.1.7	手动基线处理图标	8- 9
8.2	设定·修改数据处理参数	8-10
8.2.1	成分表/波形处理参数表	8-10
8.2.2	其它数据处理参数	8-11

8.2.3	峰处理的手动积分	8-11
8.3	色谱的多重显示	8-13
8.3.1	多重显示窗口的构成	8-13
8.3.2	文件菜单	8-14
8.3.3	编辑菜单	8-14
8.3.4	选项菜单	8-14
8.3.5	多重显示设定菜单	8-16
8.3.6	重叠显示	8-17
8.3.7	并排显示	8-19
8.3.8	多重色谱显示选项	8-20
8.3.9	保存窗口原文件	8-21
8.3.10	打印	8-21
8.4	色谱显示的变更方法	8-22
8.4.1	扩大·缩小色谱显示	8-22
8.4.2	移动色谱	8-23
8.4.3	变更Y轴标度	8-23
8.4.4	移动时间光标	8-23
第9章	报告预览窗口的功能与操作	9- 1
9.1	窗口的构成	9- 1
9.2	打开报告预览窗口	9- 2
9.3	控制按钮功能	9- 2
第10章	报告画面编辑器	10- 1
10.1	报告生成概要	10- 1
10.2	窗口的构成	10- 3
10.3	菜单命令	10- 6
10.3.1	文件菜单	10- 6
10.3.2	编辑菜单	10- 6
10.3.3	选项菜单	10- 7
10.4	区域选择按钮	10- 8
10.5	访问报告编辑画面	10-11
10.6	生成方法画面模板	10-12
10.6.1	生成与保存方法画面模板	10-12
10.6.2	载入主画面	10-12
10.6.3	编辑画面模板	10-13
10.7	报告项目的从属关系	10-34
10.7.1	从属关系的概要	10-34
10.7.2	更改从属关系	10-35
10.7.3	设定从属关系	10-36
10.8	生成主画面	10-37
10.8.1	根据已存主画面生成新画面	10-37
10.8.2	新建主画面文件	10-40
10.9	主画面文件内容	10-42
10.10	特殊处理结果的报告	10-42

10.10.1	多重进样图谱的叠加	10-42
10.10.2	分解物报告	10-43
第11章	模块详细信息窗口的功能与操作	11- 1
11.1	模块详细信息窗口的状态显示	11- 1
11.2	模块详细信息窗口的控制命令	11- 3
11.3	状态显示	11- 5
11.3.1	1110 泵状态显示	11- 5
11.3.2	1210 自动进样器状态显示	11-11
11.3.3	1310 柱温箱状态显示	11-15
11.3.4	1410 UV检测器状态显示	11-16
11.3.5	1430 DAD状态显示	11-19
11.3.6	USB-AID状态显示	11-22
第12章	数据再处理窗口—3D数据—	12- 1
12.1	数据再处理窗口的构成	12- 1
12.1.1	文件菜单	12- 2
12.1.2	编辑菜单	12- 3
12.1.3	数据处理菜单	12- 4
12.1.4	选项菜单	12- 5
12.1.5	数据库菜单	12- 6
12.1.6	显示菜单	12- 7
12.1.7	窗口菜单	12- 8
12.2	设定·修改色谱的提取参数	12- 9
12.2.1	显示任意波长色谱	12- 9
12.2.2	指定固定波长色谱	12-10
12.2.3	指定整合色谱	12-11
12.2.4	指定最佳色谱	12-11
12.2.5	其它数据处理参数	12-13
12.2.6	提取色谱图的数据再处理	12-13
12.3	设定·修改光谱的提取参数	12-14
12.3.1	显示任意时间的光谱	12-14
12.3.2	光谱的叠加显示	12-14
12.3.3	指定背景光谱	12-15
12.3.4	指定整合光谱	12-15
12.4	峰纯度检测	12-16
12.4.1	执行峰纯度检测	12-16
12.4.2	确认峰纯度检测用光谱	12-17
12.4.3	设定·修改峰纯度检测处理参数	12-18
12.5	其它显示窗口	12-19
12.5.1	色谱显示窗口	12-19
12.5.2	光谱显示窗口	12-20
12.5.3	3D立体图窗口	12-22

12.6	变更图显示的方法	12-23
12.6.1	扩大·缩小图显示	12-23
12.6.2	移动色谱	12-24
12.6.3	变更信号强度标度	12-24
12.6.4	移动波长光标与时间光标	12-24
第13章	光谱数据库窗口	13- 1
13.1	光谱数据库窗口的构成	13- 1
13.1.1	数据处理菜单	13- 2
13.1.2	选项菜单	13- 3
13.2	光谱数据库的管理	13- 4
13.2.1	修改数据库内光谱信息	13- 4
13.2.2	光谱列表的筛选处理	13- 5
13.2.3	删除数据库中的光谱	13- 5
13.3	使用光谱数据库	13- 6
13.3.1	数据库菜单	13- 8
13.3.2	检索·登记光谱数据库	13- 9
13.3.3	查询逆向数据库	13-11
13.3.4	数据采集中数据库的检索	13-13
第14章	解说	14- 1
14.1	序言	14- 1
14.2	梯度洗脱时溶剂时间表举例	14- 1
14.3	采样周期的确定	14- 2
14.3.1	自动数据采样周期模式	14- 2
14.3.2	手动数据采样周期模式	14- 2
14.4	波长参数表及最佳波长色谱	14- 3
14.5	定量法	14- 3
14.5.1	面积%(高度%)法	14- 3
14.5.2	标准曲线	14- 4
14.5.3	绝对标准曲线法	14- 4
14.5.4	修正百分比法	14- 7
14.5.5	内标法	14- 8
14.6	认定峰	14-10
14.6.1	%时间容许宽度的例	14-10
14.6.2	绝对时间容许宽度的例	14-10
14.6.3	认定峰的规则	14-11
14.7	空白校正	14-12
14.8	成分分组	14-14
14.9	修正保留时间	14-14
14.9.1	相对保留时间(相对RT)	14-14
14.9.2	校正保留时间(校正RT)	14-15

14.10	波形处理以及基线校正	14-17
14.10.1	噪音	14-17
14.10.2	聚束	14-17
14.10.3	平滑	14-17
14.10.4	峰的灵敏度	14-17
14.10.5	峰波检测	14-17
14.10.6	基线N法	14-18
14.10.7	积分禁止	14-18
14.10.8	拖尾处理	14-18
14.10.9	垂直分割	14-19
14.10.10	前方/后方水平线	14-19
14.10.11	负峰	14-19
14.10.12	峰组	14-19
14.10.13	基线处理命令的优先顺序	14-20
14.10.14	基线代码	14-20
14.11	根据光谱检测峰纯度	14-22
14.12	光谱峰ID、峰纯度、光谱库检索中的光谱相关	14-23
14.13	统计计算	14-24
14.13.1	平均值	14-24
14.13.2	离散	14-24
14.13.3	标准偏差	14-24
14.13.4	相对标准偏差	14-24
14.13.5	决定系数	14-24
14.14	系统适应性测试(SST)	14-25
14.14.1	容量系数(k')	14-26
14.14.2	选择系数(Alpha)	14-26
14.14.3	理论塔板数(N)	14-26
14.14.4	分离度(Res)	14-28
14.14.5	不对称系数(Asym)	14-29
14.14.6	S/N值	14-30
14.15	数据诊断	14-31
14.15.1	指定诊断峰	14-31
14.15.2	峰的期待浓度判定	14-32
14.16	分解物报告	14-33
14.16.1	成分峰的检索规则	14-33
14.16.2	分解物报告算法	14-33
14.17	故障诊断	14-34
14.17.1	峰检测故障	14-34
14.17.2	定性与定量计算的故障	14-35
14.17.3	解除故障的方法	14-36

附录1 在线DDE的功能与操作	附1-1
1. 附属的在线DDE用程序的执行环境	附1-1
2. 设定方法文件	附1-2
3. 关于附属的在线DDE程序	附1-2
4. 设定在线 DDE	附1-4
5. 在线DDE处理结果例	附1-5
附录2 Primaide系统管理的应用	附2-1
1. 在内标法中的应用	附2-1
2. 报告输出的应用	附2-3
附录3 生成AIA形式的数据	附3-1
1. 生成AIA形式数据	附3-1
附录4 关于采样周期的设定	附4-1
附录5 响应时间的设定	附5-1
附录6 错误信息	附6-1
术语表	术语-1
索 引	索引-1

第1章 概 要

⚠ 注 意

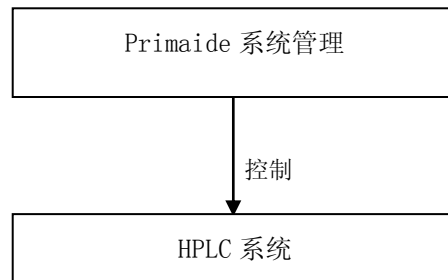
由于长时间使用而引起的疲劳

边观察显示屏边操作时,长时间保持相同姿势持续盯着显示屏,会使眼睛和身体很疲劳。长时间使用时,为了保障身体健康,请每隔1小时休息10至15分钟,放松眼睛和身体。

1.1 Primaide 系统管理

Primaide 系统管理实现了个人计算机(PC)对高速液相色谱仪(HPLC)系统的控制功能、数据采集·处理功能的操作。

该系统管理是使用 IFB 接口装置,通过 e-Line (elite Line) 通信方式对网络化的 Primaide 系列的泵、自动进样器、柱温箱与检测器来进行控制。并使个人计算机对二极管阵列检测器(DAD)的直接控制、对 3D 数据的采集以及 3D 数据的处理也成为了可能。



1.2 主要功能

- (1) 设定方法参数
 - 设定仪器控制参数
 - 设定数据处理参数
 - 编辑报告画面

- (2) 采集数据
 - 仪器运行状态下在线监测器
 - 2ch 色谱的在线监测器
 - 3D 等高线的在线监测器
 - 检索光谱数据库


- (3) 色谱数据处理
 - 定量计算
 - 系统适应性测试 (SST)
 - 通过保留时间与光谱认定成分

- (4) 3D 数据处理
 - 光谱数据处理
 - 显示等高线图与 3D 图
 - 生成/检索光谱数据库
 - 比较光谱
 - 空白校正
 - 检测峰纯度
 - 从 3D 数据 (DAD 数据) 提取色谱

- (5) 生成报告
 - 在线定量计算
 - 在线信赖性报告
 - 生成再计算 (离线) 报告
 - 在线 DAD 数据报告

(6) 文件管理

- 方法文件
- 样品表文件
- 数据系列文件
- 报告文件



读取、保存、复制、删除

(7) 模块操作

- 显示详细信息
- 单一模块控制
- 显示/重置维护信息

第 2 章 Primaide 系统管理的启动 · 关闭

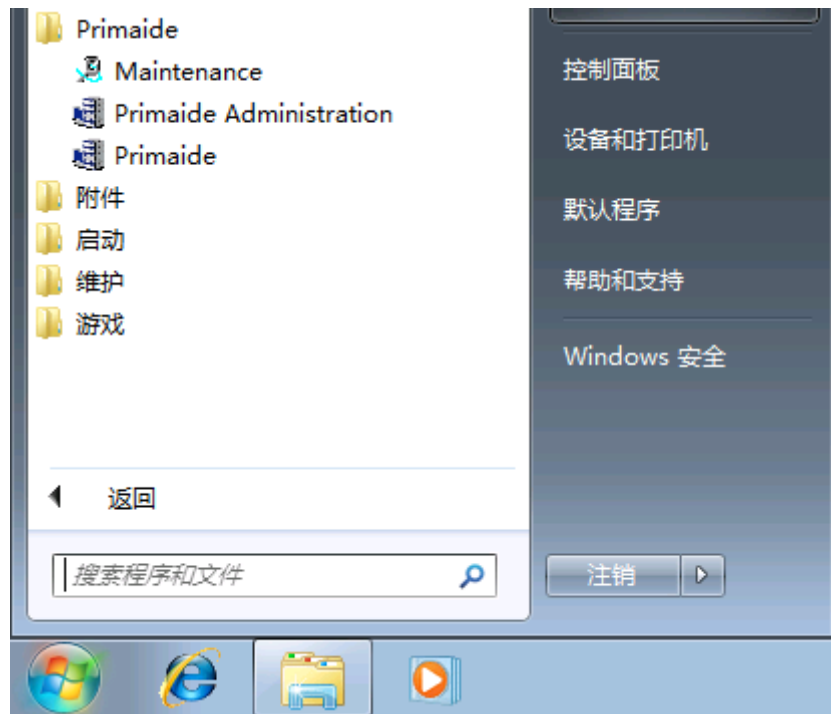
2.1 开始

Primaide 系统管理使用了 Windows®规定的屏幕、菜单、鼠标、键盘、帮助功能以及与此相关连的技术和用语。详细请参照“Windows®使用指南”。

注： 因为与仪器的通信连接等而花费处理时间时，Primaide 系统管理的窗口上可能会显示“无应答”的信息。但是，该信息并不表示运作上有问题。请等到完成处理为止。

2.2 启动 · 关闭 Primaide 系统管理


Primaide 系统管理主窗口，可以通过屏幕左下侧的开始菜单“所有程序 / Primaide / Primaide”、或单击桌面的“Primaide”图标来启动。



Windows ®7 开始菜单



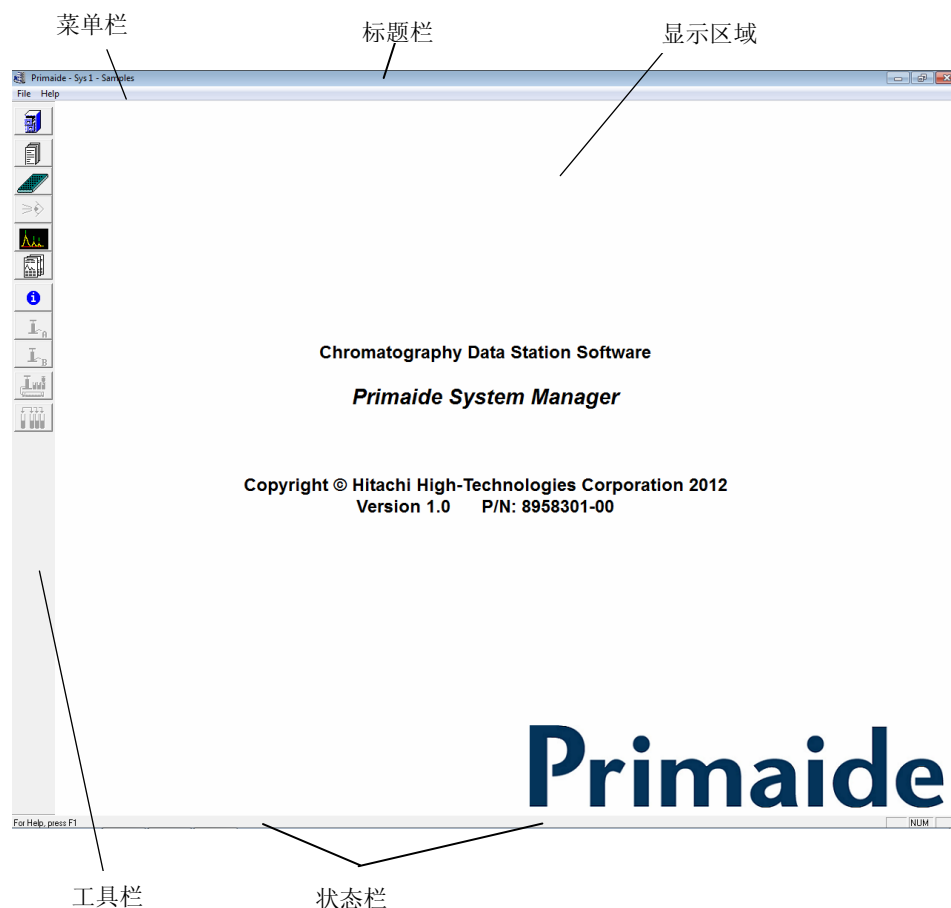
Primaide 图标

Primaide 系统管理主窗口可以通过文件菜单的“退出”或是单击窗口右上侧的  来关闭。



第3章 主窗口的功能与操作

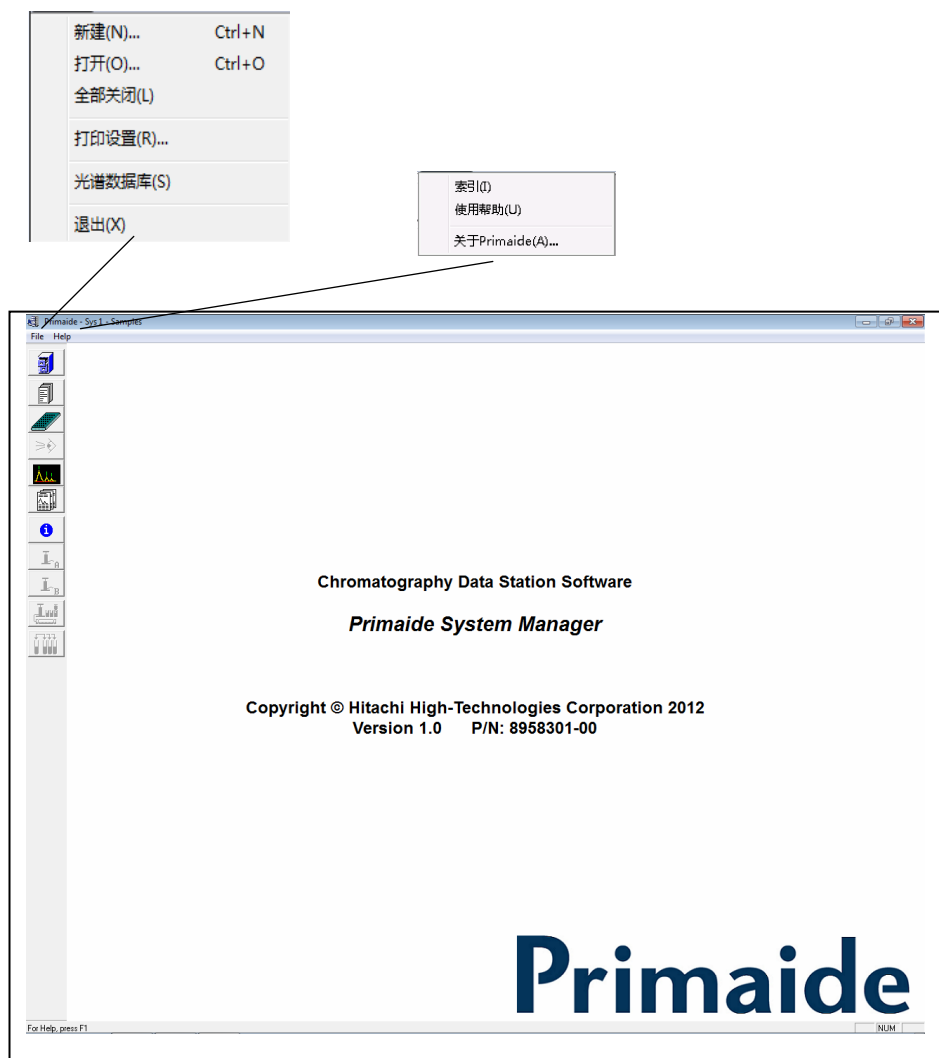
在该管理器中主要是通过主窗口来访问 Primaide 系统管理的各项功能。主窗口的构成如下所示。



- (1) 标题栏
主窗口标题栏中显示有程序标题（Primaide 系统管理）与选择的应用程序名（例如，上图的“Samples”）。
- (2) 菜单栏
显示功能菜单。可选菜单根据执行中的窗口而不同。打开菜单后将显示执行特定功能所需的命令。
- (3) 显示区域
显示参数、表格与图表。
- (4) 工具栏
单击工具栏图标可以访问 Primaide 系统管理的各项功能。
- (5) 状态栏
表示信息、输入方法、日期与时间等。

3.1 主窗口菜单命令功能

主窗口菜单如下所示。



3.1.1 文件菜单

文件菜单中有以下命令：

新建

打开“新建”对话框生成新的方法文件与样品表。

打开

打开“打开文件”对话框，使已保存的方法文件、样品表文件以及数据系列文件处于打开的状态。

全部关闭

无论窗口是否处于使用中，关闭所有打开的窗口。这样可以保存在任何一个窗口修改过的内容。

打印设置

设置打印机、纸张方向（纵向或横向）、纸张大小（信封、Legal、A4）以及纸张来源的选择。

光谱数据库

打开光谱数据库窗口。该命令可在主窗口与进样表窗口中使用（关于功能与操作，请参照“第13章：光谱数据库窗口”）。

退出

关闭 Primaide 系统管理程序。关闭指令在数据采集（关闭监测器画面）中不可以使用。请关闭数据采集监测器后再执行命令。

3.1.2 帮助菜单

帮助菜单中有以下命令：

索引

打开“帮助”窗口显示目录。

使用帮助

打开“帮助”窗口显示帮助使用方法。

关于 Primaide

显示“关于 Primaide 系统管理”对话框。在对话框中显示有程序名, Parts 编号, 版本信息, 修改编号, 版权通告等信息。

3.2 工具栏图标

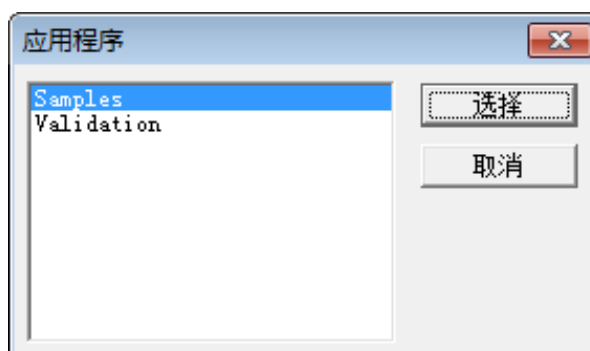
主窗口工具栏中有以下图标。

表 3-1 工具栏的图标

图标	图标的名称与功能
	<u>更改应用程序</u> 选择应用程序。单击图标打开应用程序更改对话框。
	<u>方法的设定</u> 选择方法文件，设定参数。
	<u>样品表设定</u> 选择样品表，设定参数。
	<u>数据采集</u> 移动到数据采集监测器屏幕，开始数据采集处理。
	<u>数据的再处理</u> 设定数据分析参数。
	<u>报告</u> 显示报告打印预览，指定打印页数。
	<u>HPLC 系统状态（确认模块状态）</u> 打开模块状态画面，显示 Primaide 系统管理状态以及当前连接的装置。
	<u>泵 A 与泵 B 的开/关</u> 单击图标，选择泵 A 与泵 B 为：开 - “开始送液” / 关 - “停止送液”。
	<u>模块的详细信息</u> 设定模块详细信息（状态）与控制。
	<u>快速分析的开始</u> 输入方法文件名与样品架名后，迅速的移动到数据采集监测器。

3.2.1 选择应用程序

单击“更改应用程序”图标打开“应用程序”对话框。



选择要使用的应用程序，单击选择按钮。按以下方法启动应用程序：

- 例1. 打开非数据采集中窗口
关闭所有窗口后，移到新的应用程序。
- 例2. 包括数据采集窗口，打开一个以上窗口
除使用中的数据采集用样品表窗口，关闭所有其它窗口（分析方法、数据再处理列表）后，移到新的应用程序。
- 例3. 没有窗口打开
移动到新的应用程序。

3.2.2 设定方法文件

单击方法的设定图标，启动方法参数设定功能（关于功能与操作，请参照“第4章方法文件窗口的功能与操作”）。

不能同时打开多个方法文件。请按以下方法启动方法文件设定功能。

- 例1. 没有打开方法文件（初次登录时）
显示“打开文件”对话框。
- 例2. 方法窗口已打开
显示“打开文件”对话框。使用中的应用程序呈反白显示。
- 例3. 打开的方法被图标化
相关的窗口图标化后，显示“打开文件”对话框。
- 例4. 方法窗口和进样表同时打开
显示“打开文件”对话框。
使用中的应用程序呈反白表示。

设定方法时，如果已有方法打开，将会显示“是否要关闭当前的方法？”对话框，单击取消按钮中止打开新方法，单击确定按钮保存设定完毕的分析参数后关闭方法窗口。然后，打开新方法窗口并使之显示在最前面。

3.2.3 设定样品表

单击样品表设定图标打开样品表设定窗口（关于功能与操作，请参照“第5章 样品表窗口的功能与操作”）。可同时打开多个样品表。

请按以下方法打开样品表设定窗口：

例1. 没有样品表打开

执行打开命令显示“打开文件”对话框，选择一个样品表文件后单击 **确定**按钮打开样品表并使之显示于最前面。

例2. 打开的样品表被图标化

所有的样品表复原到原来的尺寸，只有最后打开的窗口处于有效状态。其它的窗口都被图标化。

3.2.4 执行数据采集

单击数据采集图标，属使用中应用程序的样品表将显示在列表框中。在列表框中选择一个样品表。

打开样品表，启动数据采集功能。样品表中最初表示的方法参数，从PC经由IFB，转送到各个仪器中（关于功能与操作，请参照“第6章 数据采集窗口的功能与操作”）。

3.2.5 执行数据再处理

单击数据的再处理图标启动数据处理功能（关于功能与操作，请参照“第8章 进样表窗口-色谱-”）。

要进行数据再处理必须有一个与数据系列文件相对应的文件。处理步骤如下所示：

例1. 没有打开的方法文件与进样表

显示“文件打开”对话框。

从对话框中选择一个数据系列文件，单击 **确定**按钮自动打开数据采集用的方法文件。

例2. 方法文件与进样表已打开

在“打开文件”对话框中最后使用地数据系列文件呈反白表示。

选择数据系列文件，核对进样表与方法的仪器构成。核对结束后，进行以下的处理。

(1) 核对成功：打开方法（图标状态）与进样表

(2) 不存在与数据文件相对应的文件：表示错误信息为“无法打开“打开文件”对话框”

(3) 方法文件与测定用方法文件不一致：显示需要再计算的警告对话框。单击 **确定**按钮进行分析；单击 **取消**按钮中止分析。

3.2.6 模块状态显示

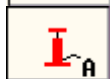
单击系统状态（确认模块状态）图标显示“模块的状态”对话框。单击初始化按钮开始与各个模块进行通信连接。



与各个模块的通信连接结束后，可以访问以下模块：



数据采集



泵 A 与泵 B 的开/关



模块的详细信息



快速分析的开始

要变更模块构成，需要在 Primaide 环境设定程序中设定。

注： HPLC 系统模块的构成，必须在 Primaide 环境设定程序中设置。在 Primaide 环境设定中没有注册的模块，将有警告信息显示，并不将之显示于“模块的状态”对话框中，同时也不被作为系统构成的模块。

以下是对模块的状态对话框各个项目的说明：

(1) 状态

显示系统状态。单击[初始化]按钮开始确认与各个模块的连接。确认结束后，连接模块的形式、程序编号、序列号与当前系统状态将显示在对话框中。该系统状态信息也可以在数据采集窗口获取。

(2) 键锁定

可以设定模块的键锁定与解除。单击[锁定]按钮设定键锁定；单击[解除]解除键锁定。

(3) 模块

● 接口

表示 Primaide 系统管理程序确认后的通信端口种类（IFB）、程序编号与序列号。

● 泵 A

显示泵 A 的类型、程序编号与序列号。

● 泵 B

显示泵 B 的类型、程序编号与序列号。

● 自动进样器

显示自动进样器类型、程序编号与序列号。

● 柱温箱

显示柱温箱类型、程序编号与序列号。

● 检测器

显示检测器类型、程序编号与序列号。

● 附属装置

显示连接的附属仪器名称、类型（比如，冷却装置）、程序编号与序列号。

(4) 确定

单击[确定]按钮关闭模块状态对话框。

(5) 初始化

单击[初始化]按钮开始与各个模块的通信连接。

(6) 解除连接：

解除 PC-模块之间的通信连接。

(7) 解除错误：

连接地模块中如果发生错误，将显示[解除错误]按钮。单击该按钮可以解除模块错误。

注：要在系统中追加新的仪器，请先在“Primaide 环境设定”中注册后，再进行连接。

3.2.7 报告预览

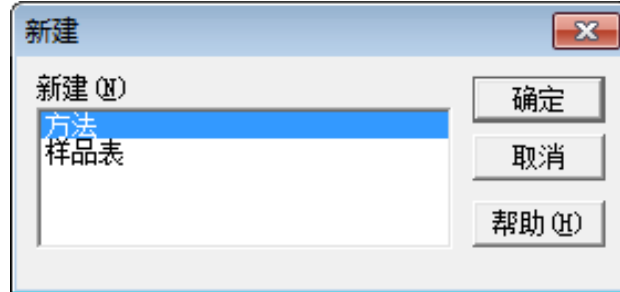
单击“报告预览”图标启动报告预览功能（关于功能与操作，请参照“第9章 报告预览窗口的功能与操作”），报告将以打印预览形式显示。在预览中可以确认计算结果等项目。单击打印按钮可以打印报告。

3.2.8 打印窗口

打印显示中的屏幕（有效的窗口）。

3.3 新建对话框

在“新建”对话框中指定要新建的方法文件或生成样品表文件的窗口。



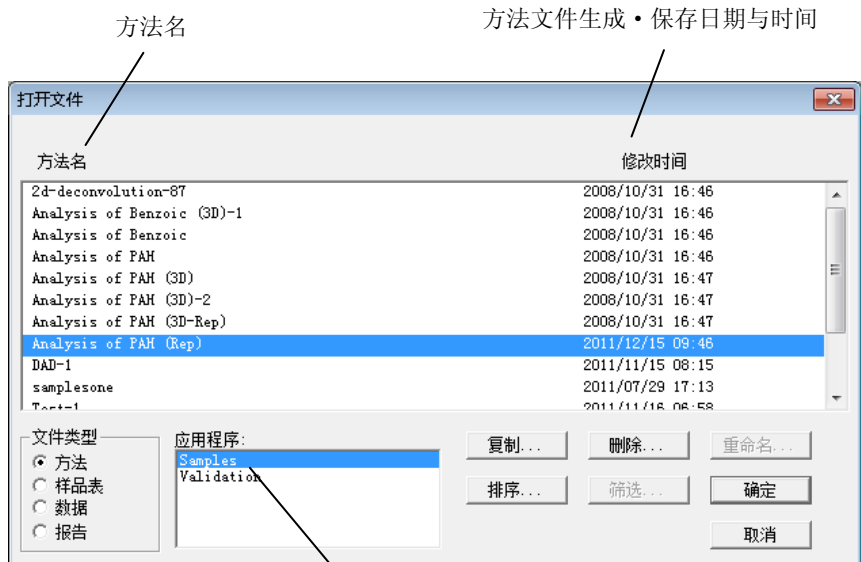
3.4 “打开文件”对话框

“打开文件”对话框是管理 Primaide 系统管理文件（方法文件、样品表文件、数据系列文件与报告文件）的对话框。

3.4.1 “打开文件”对话框的构成

单击文件菜单的“打开”或主对话框的工具图标打开与图标相对应的管理文件对话框。

(1) 方法文件用“打开文件”对话框



方法文件所属的应用程序

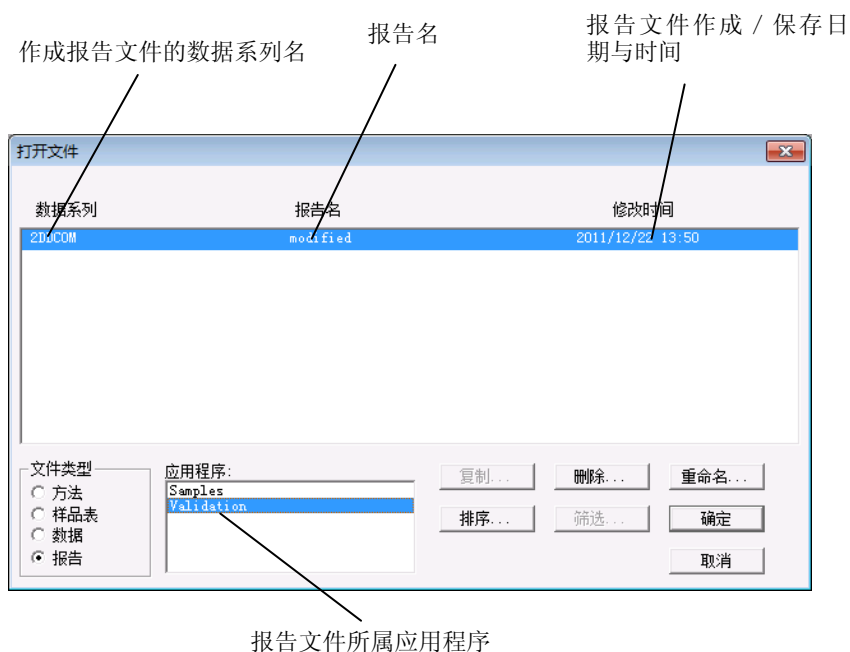
(2) 样品表用“打开文件”对话框



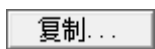
(3) 数据系列文件的“打开文件”对话框



(4) 报告文件的“打开文件”对话框



3.4.2 使用“打开文件”对话框 在“打开文件”对话框中，单击各个按钮访问与按钮相对应的各个功能。按钮功能如下所示：

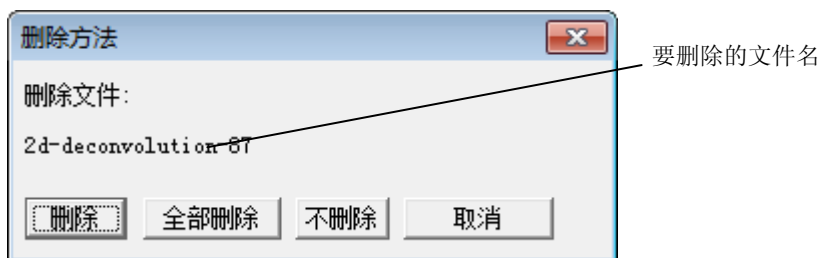


显示复制对话框。将指定的文件从执行中的应用程序复制到其它的应用程序中。



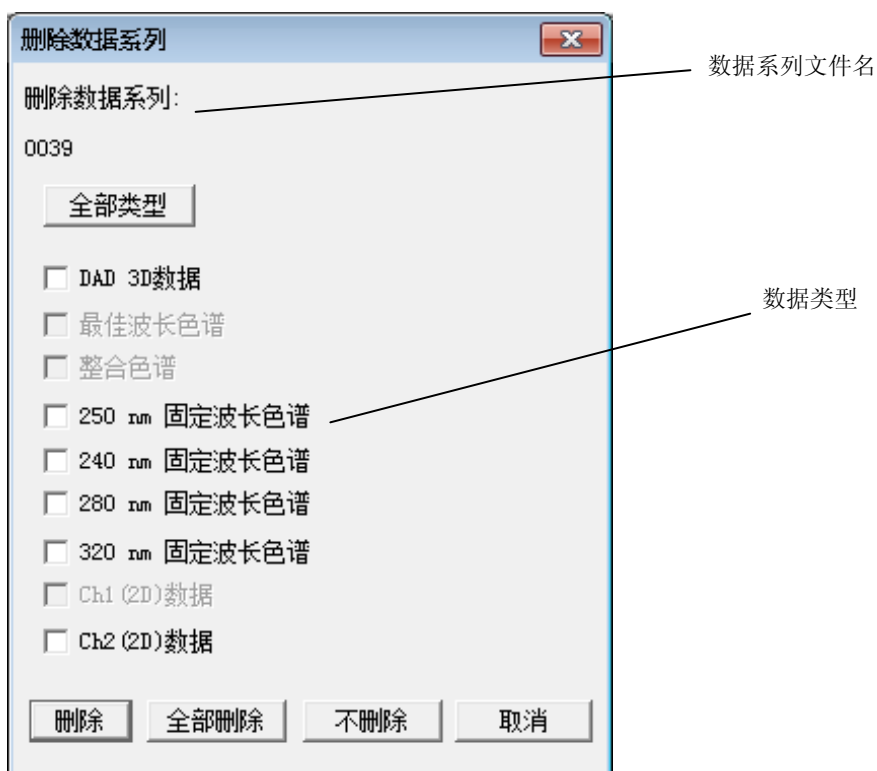
删除...

显示“删除方法”对话框。



- 删除
删除对话框中显示的文件。
- 全部删除
将指定的多个文件全部删除。
- 不删除
取消对对话框中显示文件的删除。

在删除对话框中显示了要删除的数据系列文件所属的文件类型。同时也可以个别指定要删除的数据类型。



- 全部类型
将表示的所有数据类型指定为删除文件。

注：删除功能，只有系统管理者在 Primaide 环境设定程序中给予删除权的用户可以使用。

排序...

打开“排列数据”对话框，指定“排列”与“排列方法”。



排序

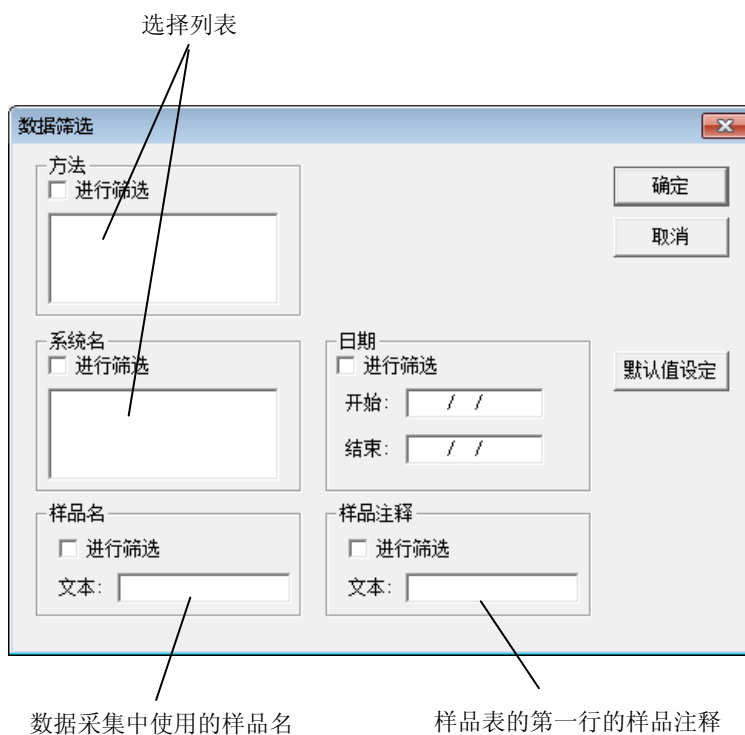
指定排列的项目。

排序方法

排序项目按从“A”到“Z”，或是从“a”到“z”排序，或是按修改时间的先后（新建顺序）顺序排序时，请选择“升序”；相反显示时请选择“降序”。

筛选

显示数据筛选对话框。要有选择性地显示数据系列文件，需要设定显示用筛选参数与执行过滤处理。选可筛选复选框为“ON”使筛选参数变为有效。在“打开文件”对话框中只显示与设定的筛选参数一致的数据系列文件。



- 初期设定

将数据筛选对话框的参数设为初期值。

3.4 “打开文件”对话框

重命名...

打开“重命名”对话框，在该框中可以变更数据系列文件名或是报告文件名。



重命名文件：文件名最多可以输入 20 个半角字符。

确定

变更名称。

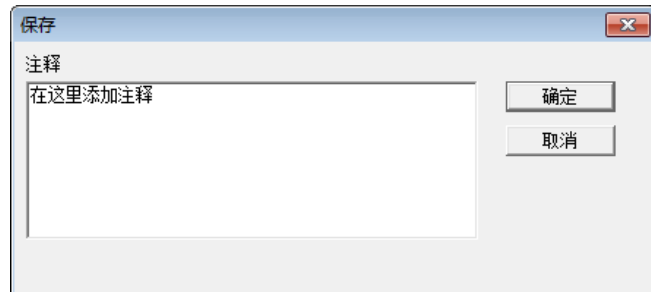
取消

取消名称变更。

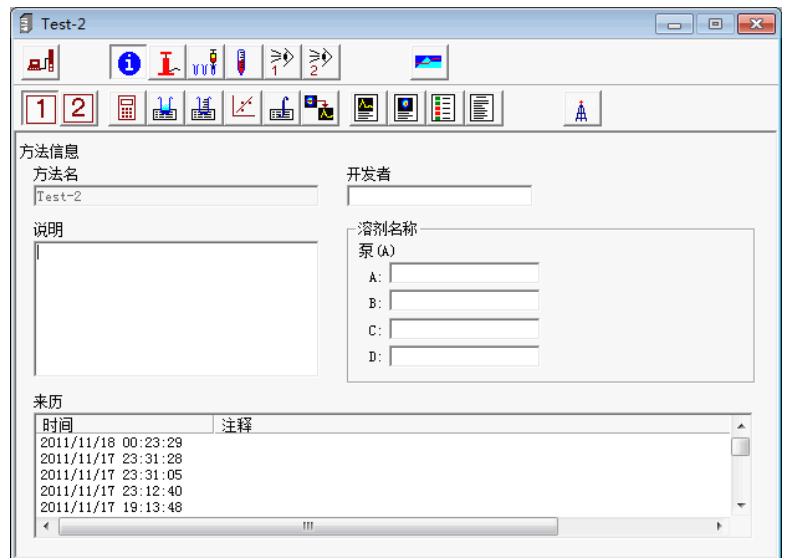
3.5 保存对话框

覆盖保存修改的文件。

可以在保存对话框中输入方法文件注释。



输入的注释将输出到方法文件来历栏中。



注: 只有在 Primaide 环境设定程序中选“GLP 选项/日志/方法日志”为“ON”时，才可以在文件保存时输入注释。

3.6 另存为对话框

用其它名称保存修改过的文件。保存时可以指定文件所属的应用程



- 名称
输入新的名称或是选择一个已存的名稱。
- 应用程序
在列表框中选择应用程序名，指定保存文件的应用程序。
- 注释
可以输入对方法文件的注释。输入的注释将输出到方法来历栏中。

注: 只有在 Primaide 环境设定程序里指定了“GLP 选项/日志/方法日志”为“ON”时才可以输入对另存方法名的注释。

第4章 方法文件窗口的功能与操作

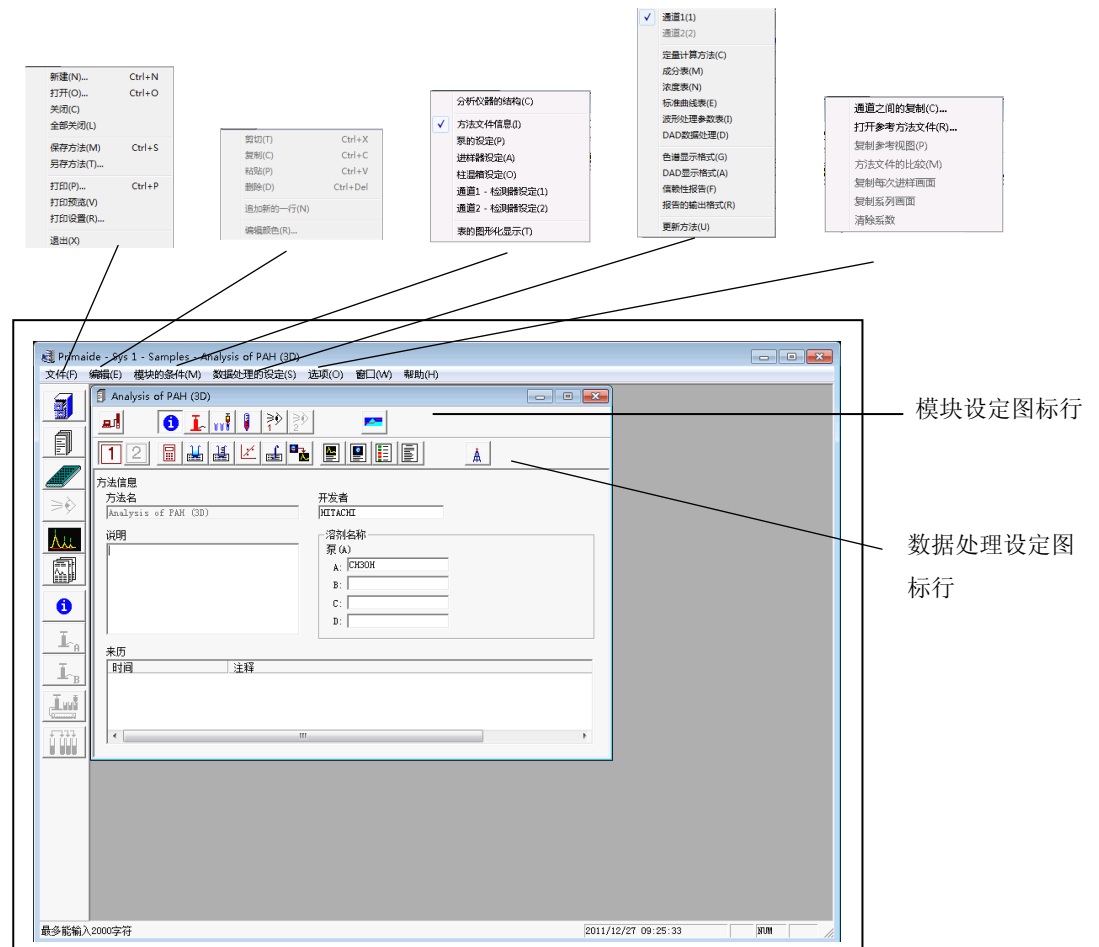
方法文件窗口是设定模块参数与数据处理参数的窗口。

在方法文件窗口不能同时打开多个方法文件，也不能同时对多个方法文件进行设置与编辑。但是可以作为参照方法文件（只限于读取）打开。

可将参照方法文件的全部或一部分的参数复制到打开的方法（可编辑的）中，同时还可以比较打开的方法文件与参照方法文件。

4.1 方法文件设置窗口的构成

方法文件窗口图标分2行显示于窗口上部。第一行显示的是模块参数设定用图标。第2行显示的是 Ch. 1 与 Ch. 2 的数据处理参数设定用图标。



4.1.1 文件菜单

菜单命令以及相关的图标功能如下所示：

新建

打开新建对话框，生成新的方法文件以及样品表。

打开

打开“打开文件”对话框，使已保存的方法文件，样品表文件，数据系列文件处于可以打开的状态。

关闭

关闭打开的窗口。

全部关闭

无论窗口是否处在使用中，关闭所有打开的窗口。这是为了在任意窗口进行修改时，可以保存修改的内容。

作为例外，如果数据采集窗口是“数据集中”时，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，关闭所有其它窗口。

保存方法

保存窗口内显示的有效方法文件。如有信息（合适的方法文件参数）显示，回答完毕所有信息后，对硬盘里前一次的文件内容进行覆盖。

另存方法

方法文件确认开始后，打开”另存为”对话框，使方法文件的标题和应用程序名处于可以指定的状态。

打印

将显示的方法文件以文本文件的形式打印出来。

打印预览

表示打印信息，指定打印页数。

打印设置

打印机，纸张方向（纵向或横向）、纸张大小（信封，legal，A4）以及纸张来源的选择。

退出

关闭 Primaide 系统管理程序。关闭命令在数据集中不可以使用。请先关闭数据采集监测器后，再进行操作。

4. 1. 2 编辑菜单

编辑菜单中有以下执行命令：

剪切

将剪切的项目(呈反白显示)移到剪贴板,在此同时剪贴板以前的内容会被清除。该命令仅限于编辑表格时可以使用。

复制

将选择的(呈反白显示)项目复制到剪贴板。复制源的项目照原样存在。如果要复制文件(方法,样品表,数据系列,报告),请使用“打开文件”对话框的复制功能。

粘贴

可以与剪切和复制的命令一起使用。可以将剪贴板的数据写入或粘贴到表中光标所在位置。

删除

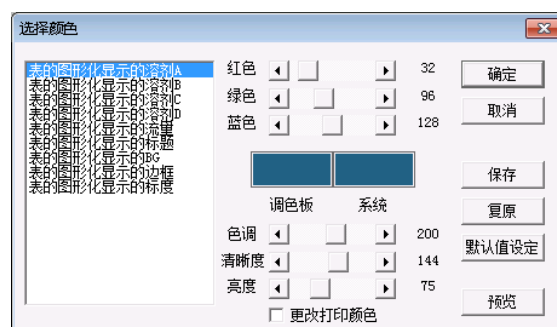
删除选择的(呈反白显示)的项目。与剪切指令不同的是,用删除指令消除的数据不可以使用撤销命令恢复。

追加新的一行

在时间表最后一行的后面追加新的一行。参数为初期值。

编辑颜色

打开“选择颜色”对话框,改变“时间表”的颜色调色板。与显示窗口相关的项目,将会列在列表框中。保存调色板后,改变的颜色将在调色板中反映出来。



4.1.3 模块的条件

在模块的条件中有以下命令及相对应图标：



分析仪器的结构：

显示仪器构成的设置窗口。关于仪器构成的组合请参照表 4-1。



方法信息：

在窗口显示方法文件名、溶剂、注释以及方法文件的来历。方法文件的来历栏只有选” Primaide 环境设定”的“GLP 选项/日志/方法日志”为“ON”时才显示。



泵的参数：

显示泵参数设定窗口。



自动进样器参数：

显示自动进样器参数设定窗口。



柱温箱参数：

显示柱温箱参数设定窗口。



Ch1/Ch2 检测器参数：

显示 Ch1/Ch2 检测器参数设定窗口。



表的图形化显示：

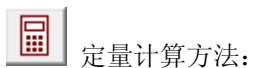
泵的时间表等以图形化形式表示。

4. 1. 4 数据处理 设定菜单

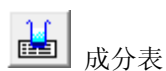
在数据处理菜单中有以下的命令以及相对应的图标：



用 Ch. 1 与 Ch. 2 数据处理参数分别处理从两通道检测器中采集的色谱数据。用 Ch. 1 与 Ch. 2 图标可以切换数据处理参数的设定窗口。如果在方法构成中只设置了一台检测器，那么只有与设置的检测器相对应的通道(Ch)有效。例如，只选择通道 1 时，通道 2 就是无效的，只有通道 1 显示数据处理参数。



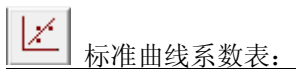
显示指定定量计算方法的窗口。



显示成分表生成/修改的窗口。



显示浓度表生成・修改窗口。



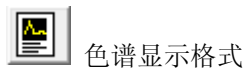
显示标准曲线系数表窗口。



显示波形处理参数表的生成・修改窗口。



显示 DAD 数据处理参数设定窗口。



显示色谱格式用参数设定窗口。



DAD 显示格式

显示 DAD 显示用参数设定窗口。



信赖性报告

显示信赖性报告用参数设定窗口。



报告的输出格式

显示报告输出用参数设定窗口。通过访问报告编辑窗口，可以编辑报告输出画面。



更新方法文件

单击参数更新图标后，变更的参数会反映到数据再处理中。用变更过的参数来显示数据处理窗口与进行定量计算。

用保存方法或另存方法命令，将变更的参数保存到方法文件中。

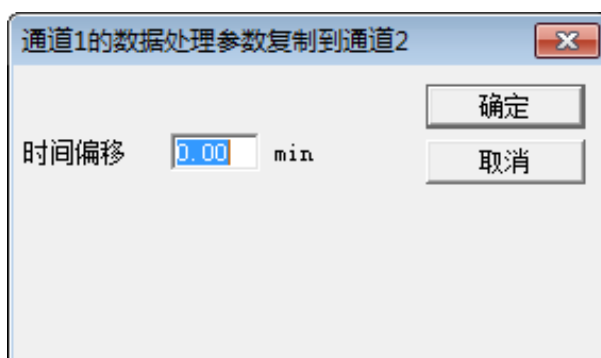
4.1.5 选项菜单

选项菜单中有以下命令：

通道之间的复制

将通道 1 的所有数据处理参数复制到通道 2 中。

在”通道 1 的数据处理参数复制到通道 2 中”对话框里通过设定时间偏移，可以将通道 1 成分表与通道 2 波形处理参数表的时间（设定的时间）全部进行变更。



打开参考方法文件

从参照方法文件可以打开其它的方法文件。但是参照方法文件只限于读取，不可以更改参数。

复制参考视图

可以将参照方法文件的参数复制到编辑中方法文件中。如果与参照方法文件和方法文件相对应的窗口不存在时，此命令则呈无效显示。

方法文件的比较

方法文件与参照方法文件之间的参数自动进行比较。比较结束后，有不同参数存在的窗口图标将会显示。设定内容完全一致的窗口图标及模块类型不同的图标，将以灰色来表示。

复制每次进样画面

将参照方法文件的每次进样报告画面复制到设定中方法文件中。

复制系列画面

将参照方法文件的系列报告画面复制到设定中方法文件中。

清除系数

删除标准曲线系数表的系数（A0-A3）。单位在”其它”中设定。

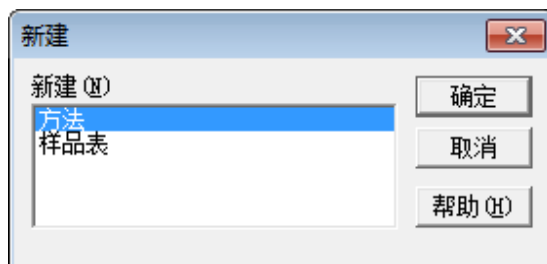
4.2 生成与保存方法文件

可以通过以下方法来设定方法文件：一是新建方法文件；二是通过变更已存的方法来生成新的方法文件。

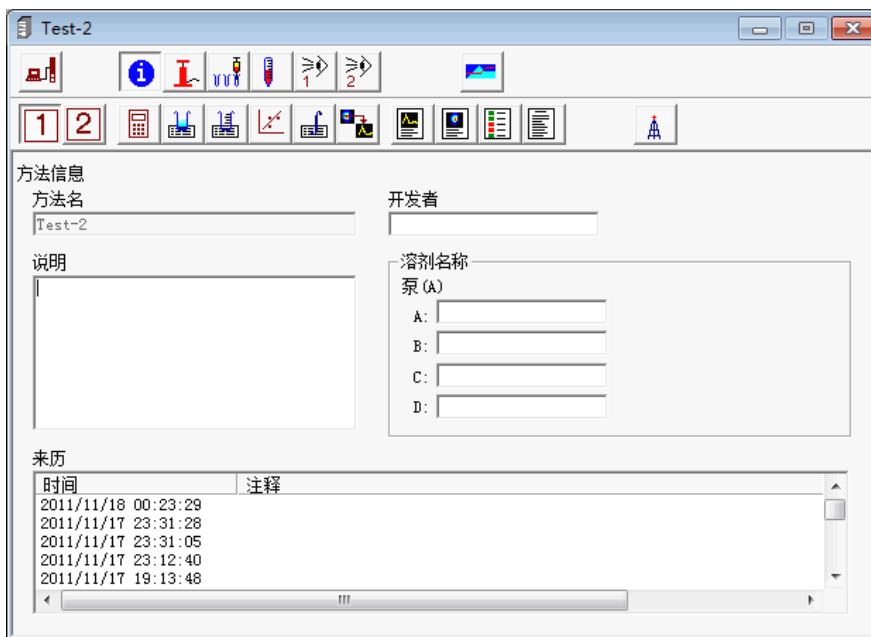
4.2.1 新建方法文件

按以下步骤生成新的方法文件：

- (1) 从文件菜单里选择“新建”，打开“新建”对话框。



- (2) 选择方法文件，单击“确定”按钮打开方法设定窗口。



4. 2. 2 变更已存的方法文件

按以下步骤来变更已存的方法文件：

- (1) 单击方法的设定图标显示“打开文件”窗口。
(关于打开文件窗口的功能与操作，请参照“3. 4 打开文件对话框”。)



- (2) 确认在文件类型框中是否选择了方法，并确认在应用程序列表框中是否指定了正确的应用程序。

注：应用程序的默认值有“Samples”和“Validation”。在该应用程序中不可以变更或删除方法，但是方法可以作为新建方法的复制源”与“参照方法文件”来使用。

- (3) 在方法名框中选择要变更的方法文件，单击**确定**按钮。

4.2.3 设定方法文件

使用参考方法来设定方法文件

使用编辑中方法文件的参考方法可以生成新的方法文件。

可以将参考方法中的参数复制到编辑中的方法文件中。

请按以下步骤操作：

- (1) 打开设定方法文件窗口。
- (2) 在选项菜单中选择“打开参考方法”命令打开参考方法窗口。
- (3) 编辑中的方法窗口与参考方法窗口同时打开。

图标显示区域位于两方法窗口之间。单击图标后，切换为与该图标相对应的方法窗口。

- (4) 在选项菜单中选择“复制参考视图”命令，只有显示窗口的参数被复制到编辑中的方法文件中。
- (5) 重复以上的步骤，复制必要的参数。
- (6) 单击[X]按钮，关闭参考方法窗口。
- (7) 保存编辑中的方法文件。

4.2.4 保存方法文件

请按以下步骤保存方法文件：

- (1) 新建或另存方法时，请在文件菜单中选择“另存为”命令（用同一名称保存时，请选择“保存方法”的命令），打开另存方法对话框。



- (2) 输入方法文件与注释。只限于“Primaide 环境设定”的“GLP/日志/方法日志”设为“ON”时可以输入注释。

- (3) 单击 **确定** 按钮保存方法。

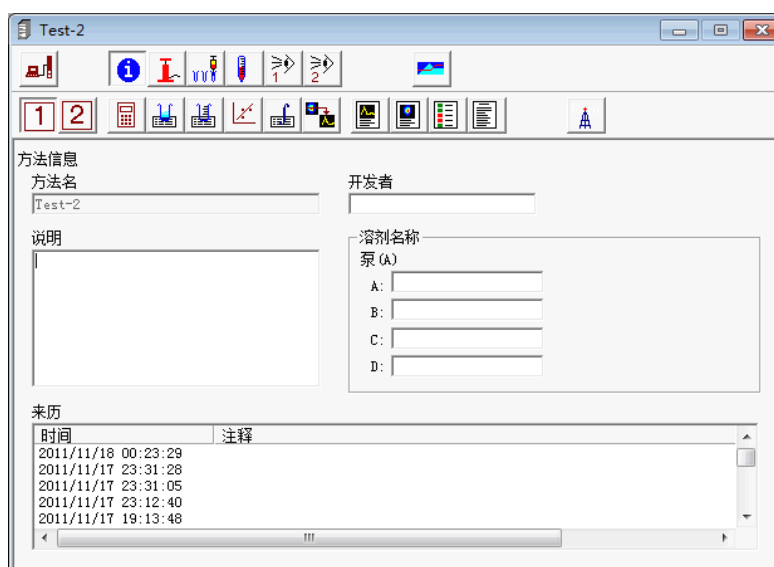
4.3 设定方法文件

4.3.1 仪器条件设定窗口

仪器条件的设定窗口如下所示：

(1) 方法文件信息

下面是方法文件功能设定窗口的初始状态。从此窗口可以获取方法文件的来历和名称。还可以输入或更改溶剂名称等一般方法文件信息。



方法文件信息窗口有以下参数：

- 方法名
在“另存方法”对话框中输入方法文件可以识别的名称。名称的长度为 30 个半角字符（全角字符为 15 个）
- 开发者
输入开发者的名称。文字长度为 30 个半角字符（全角字符为 15 个）。
- 说明
输入关于方法文件的注释。文字长度为 2000 个半角字符（全角字符为 1000 个）。
- 溶剂名称
在仪器构成窗口选择泵之后，溶剂名称将会显示（文字长度为 30 个半角字符（全角字符为 15 个））。在方法信息窗口或是泵的参数窗口均可输入溶剂名称。更改其中任何一个画面的名称之后，另外一个画面的名称将会自动更新。

● 来历

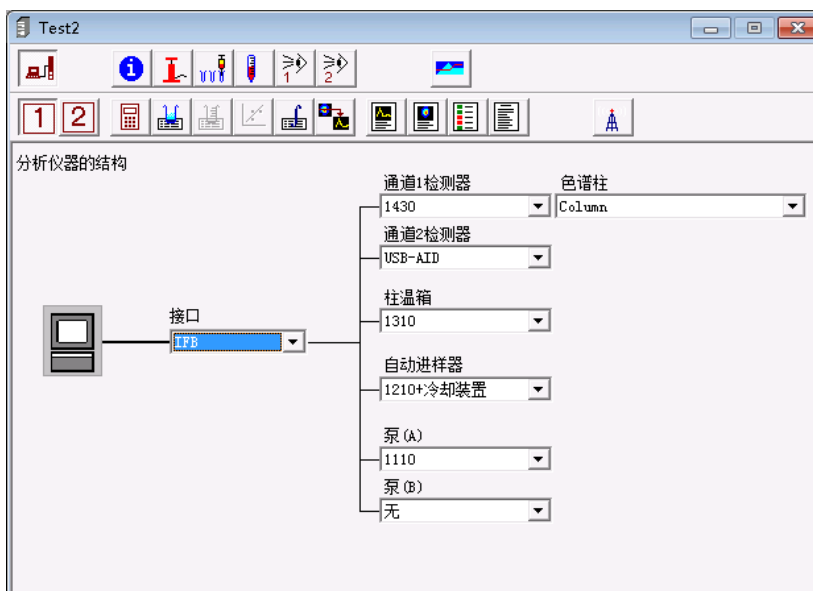
显示方法文件的编辑来历。来历栏中以下的项目将自动设定。

- 时间
- 注释

注：只限于在“Primaide 环境设定”程序的“GLP 选项”中指定了方法日志为“ON”时，来历栏才可使用。
（详情请参照 Primaide 系统管理使用说明书（环境设定篇）。）

(2) 分析仪器的结构

下面显示的是分析仪器的结构窗口。为与实际的 HPLC 系统构成一致，在此窗口设定分析仪器的结构。



从各个仪器的下拉菜单中选择机种。分析仪器的结构组合如下表所示。

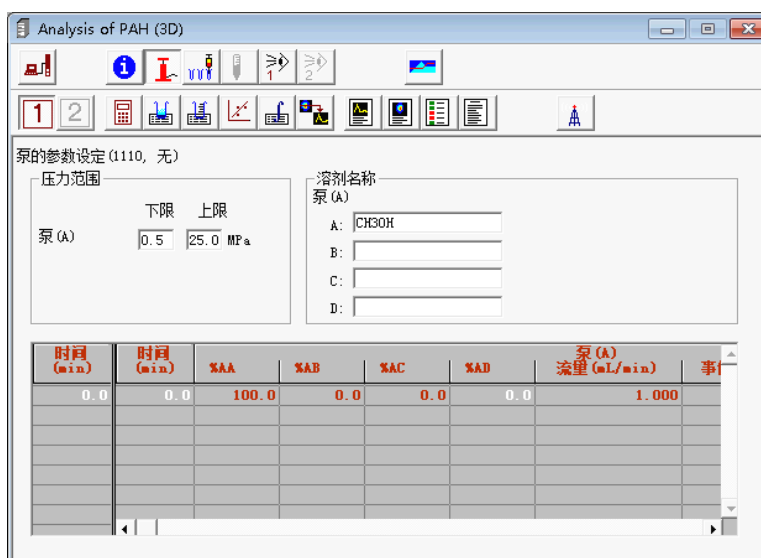
表 4-1 分析仪器的结构 (Primaide 1000 系列)

接口	泵 A	泵 B	柱温箱	自动进样器	检测器通道 1	检测器通道 2
IFB	无 1110	无 1110	无 1310	手动 1210 1210+冷却装置	无 1410 1430 USB-AID	无 1410 USB-AID

(3) 泵的参数设定

以下是泵送液条件与梯度洗脱时间表的设定窗口。

① 泵 (1110)



设定泵的相关项目：

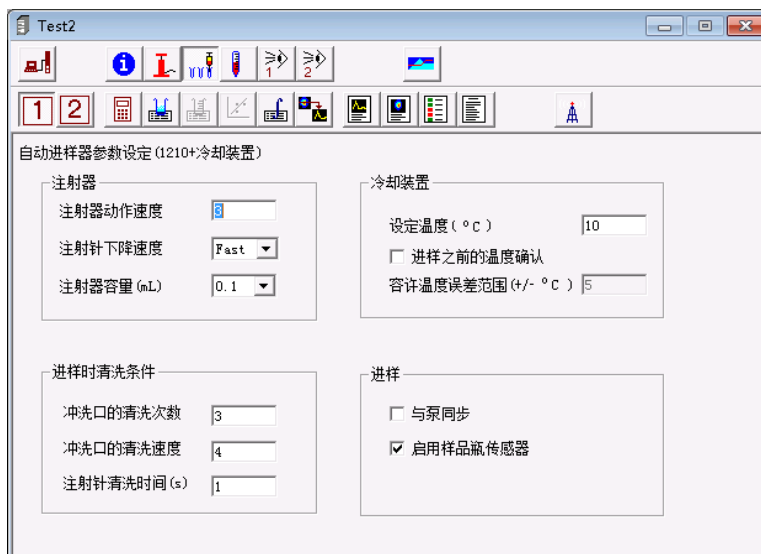
- 压力范围
指定泵 A 与泵 B 的压力范围的上限值与下限值。
- 溶剂名称
输入泵的各溶剂名称。在这里输入的溶剂名称将会在方法文件信息日志里自动反映出来。
- 梯度洗脱时间表
溶剂的组成随着时间而变化, 在变化的同时作成梯度洗脱送液程序。在表中输入以下项目：
 - 时间 (min)
请在时间栏中输入溶剂浓度变化的时间 (分) 或流量变化的时间 (分)。
 - %AA -%AD
请在各栏中输入各溶剂的浓度百分比。
 - 流量
请输入泵 A 的流量, 如果装置构成中有泵 B, 输入泵 B 的流量。
 - 事件
单击事件输出栏的任何一行显示列表框。请在列表框中选择接点的输出形式。

注：信赖性报告的“压力文件”只输出梯度洗脱程序执行范围内的报告。
请在梯度洗脱时间表里设定压力信息所需要的时间。

(4) 自动进样器参数设定:

自动进样器设定窗口只有在分析仪器的结构中设置了自动进样器时才可以使用的。

① 自动进样器 (1210)



请设定以下参数:

注射器

- 注射器动作速度
请选择速度编号。

注: 运行速度范围因注射器而不同, 详细请参照自动进样器配备的使用说明书。

- 注射针下降速度
请从“Fast”与“Slow”中选择注射器的下降速度。
- 注射器容量 (mL)
请从列表 0.1 (标准、默认值)、0.5、5.0 中选择注射器的容量值。

进样时清洗条件

- 冲洗口的清洗次数
请输入冲洗口的清洗次数。
- 冲洗口的清洗速度
请输入冲洗口的清洗速度。
- 注射针清洗时间 (s)
请输入注射针清洗时间 (s)。

进样

- 与泵同步

指定是否使用泵发出的进样同步信号。

通过与泵的同步信号连动，推算进样的开始时间，可以提高保留时间的再现性。

- 启用样品瓶传感器

指定是否启用样品瓶传感器。

冷却装置

只限于在分析仪器的结构窗口选择了 1210+冷却装置时，才会显示以下项目：

- 设定温度(°C)

请设定温度。

- 进样之前的温度确认

指定是否要确认进样前温度。

- 容许温度误差范围(±°C)

请设定容许温度误差范围。

冷却装置的温度上升到设定温度±容许温度误差范围时，开始进样。只限于选择了确认进样前温度时才可以设定。

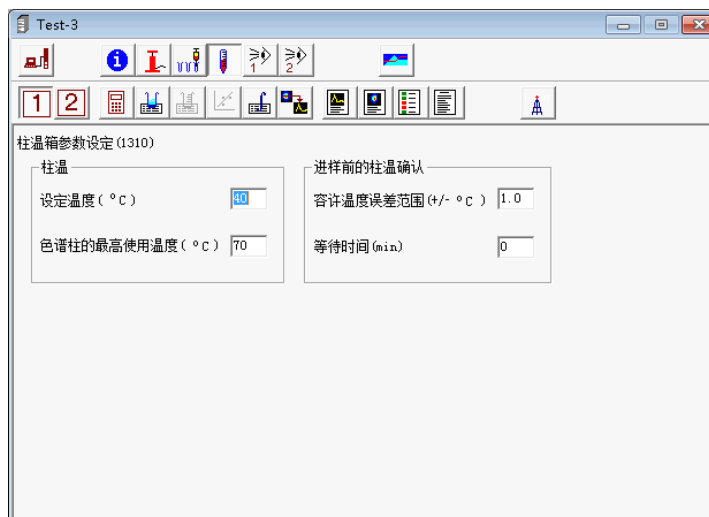
(5) 柱温箱的设定

只限于在分析仪器的结构窗口选择了柱温箱时,才可以使用柱温箱设定窗口。在此窗口可以设定柱温箱的参数。

请输入以下参数。

① 柱温箱(1310)

选择了柱温箱后,下面的条件设定窗口将显示。

**柱温**

- 设定温度 (°C)
请输入设定温度 (°C)。
- 色谱柱的最高使用温度(°C)
为了保护色谱柱,请输入色谱柱的常用最高使用温度。

进样前的柱温确认

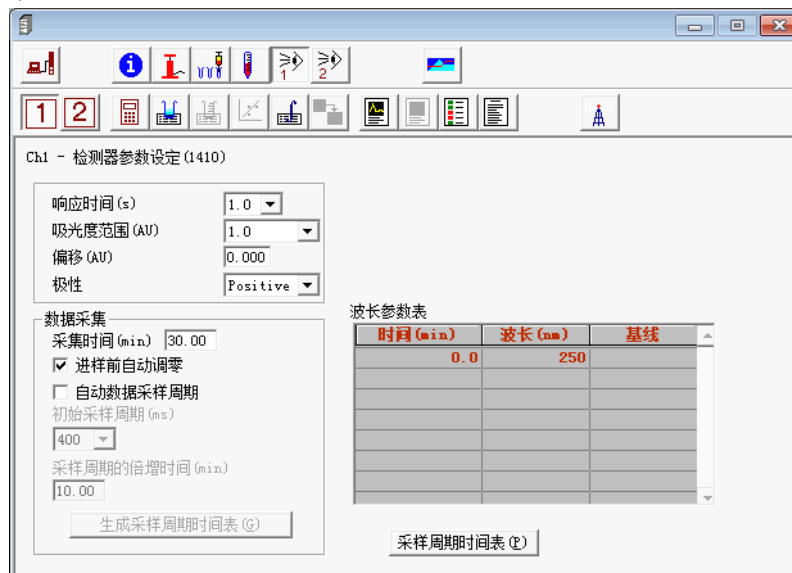
- 容许温度误差范围 (± °C)
请输入容许温度误差范围。柱温箱的温度升到设定温度±容许温度误差范围时,开始平衡化(等待时间)。平衡化结束后,开始进样。
- 等待时间 (min)
请输入升到了容许温度范围之后的平衡化时间。

(6) 通道 1 与通道 2 检测器参数设定

在窗口设定通道 1 或通道 2 检测器参数。根据在方法构成窗口中注册的检测器类型，通道 1 或是通道 2 检测器的设定窗口会有所不同。

① UV 检测器 (1410)

作为通道 1 或通道 2 的检测器，选择 UV 检测器后，下面的窗口将显示。



请在窗口中输入以下参数：

- 响应时间 (s)
指定对信号的响应速度。该值越大响应也就越迟，信号趋向平滑化。一般来说，响应时间越长，过滤噪音的功能就越强。
- 吸光度范围 (AU)
选择吸光度范围的全标度。
- 偏移 (AU)
为了扩大负吸光度标度，请指定 0 AU 位置的提高范围 (偏移)。
- 极性
请指定输出信号的极性是 Positive (正) 或是 Negative (负)。

数据采集

- 采集时间 (min)。
输入色谱数据采集时间。
数据采集时间受 SP 时间表中设定的最小 SP 值的限制。最小 SP 和最大数据采集时间的关系如下所示

数据采集周期 (SP) (ms)	数据采集的最大时间 (min)
50	36.25
100	72.50
200	145.00
400	290.00
800	580.00
1600	600.00
3200	600.00

- 进样前自动调零
选择该项为“ON”后，在进样前检测器将会自动调节为零。
- 自动数据采样周期
用启动时的 SP 和 SP 重叠时间自动设置 SP 时间表。选择该项后 SP 时间表只限于显示不可以手动设定。
- 初始采样周期(ms)
从列表框中选择 SP (进样间隔)。只限于自动数据采样周期模式下可以设定。
- 采样周期的倍增时间 (min)
是自动数据采样周期 SP 值 2 倍化后的最初时间。采集时间也随之变为 2 倍。只限于自动数据采样模式下可以设定。
- 生成采样周期时间表(G)
点击生成采样周期时间表按钮生成新的 SP 时间表
该指令只限于自动数据采样周期模式下有效。
- 波长参数表/采样周期时间表
切换显示时间表。

波长参数表

- 时 间 (min)
指定波长的切换, 自动调零等的操作时间。请将第一行的时间设定为 0.0 min。
- 波 长 (nm)
设定测定波长。
- 基 线
 - 自动调零
指定自动调零操作时间。
 - 保 持
指定保持操作时间。
保持功能可以使切换波长之前的数据位置与基线一致。

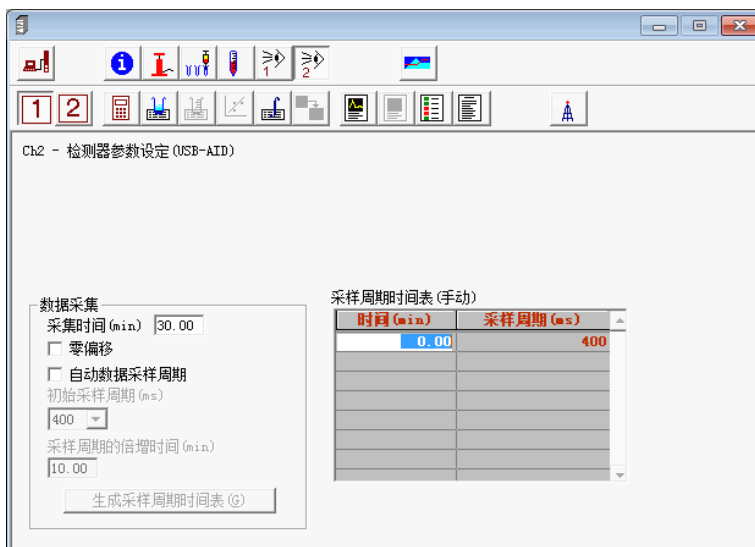
采样周期时间表

可以确认 SP 时间表。

没有选择自动数据采样周期模式时, 可以手动设定数据采样周期。

② USB-AID (AID: Analog Input Device)

作为通道 1 或是通道 2 检测器, 选择 USB-AID 后, 下面的窗口将显示。



请在窗口中输入以下参数。

数据采集

- 采集时间 (min)

输入色谱数据的采集时间。

数据采集时间受 SP 时间表里设定的最小 SP 值的限制。最小 SP 和最大 SP 数据采集时间的关系如下所示。

数据采集周期 (SP) (ms)	数据采集的最大时间 (min)
50	36.25
100	72.50
200	145.00
400	290.00
800	580.00
1600	600.00
3200	600.00

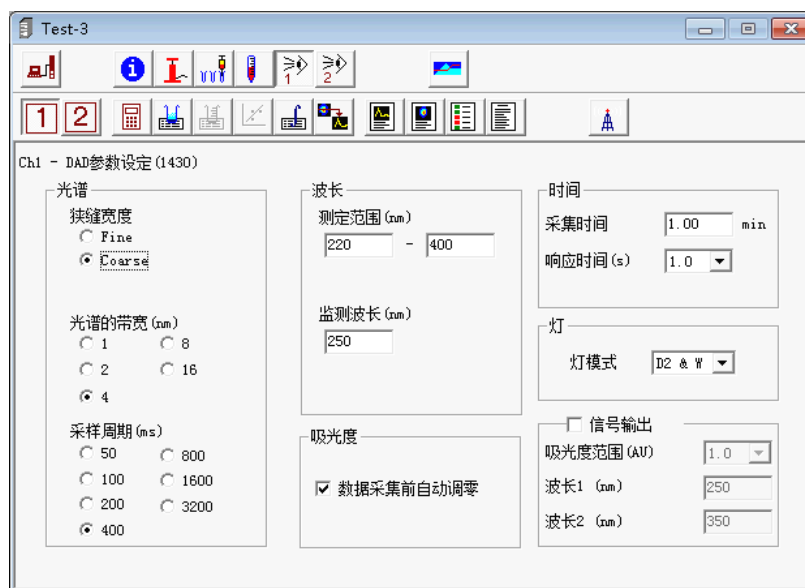
- 零偏移
选择数据采样前的自动调零后，色谱开始点的信号值设置为零。
- 自动数据采样周期
用开始时的 SP 和 SP 重叠时间自动设定 SP 时间表。选择此项后 SP 时间表只限于显示不可以手动设定。
- 初始采样周期 (ms)
从列表框中选择 SP (进样间隔)。只限于自动数据采样周期模式下可以设定。
- 采样周期的倍增时间 (min)
自动数据采样周期模式下的 SP 值的 2 倍化后的最初时间。时间会随之变为原来的 2 倍。该指令只限于自动数据采样周期模式下可以使用。

生成采样周期时间表

点击 生成采样周期时间表 按钮生成新的 SP 时间表。该命令只限于自动数据采样周期模式下可以使用。

③ DAD(1430) (DAD: Diode Array Detector)

作为通道 1 的检测器，选择 DAD 后，以下窗口将显示。



请在该窗口中输入以下参数：

光谱

- 狭缝宽度
从 Fine (1 nm) 和 Coarse (4 nm) 中选择数据采集时使用的狭缝宽。狭缝宽光谱的分辨率将会下降，但同时噪音会变小。
- 光谱的带宽 (nm)
指定数据采集时使用的光谱带宽。带宽越大二极管阵列间也越平均，同时噪音会减少，光谱对应的数据点也会减少。
- 采样周期 (ms)
指定光谱采样周期的时间。对于色谱图中最尖的峰的光谱采样时间一般设定为 10-20。

波长

- 测定范围 (nm)
指定波长测定范围。
- 监测波长 (nm)
指定在监测窗口中所用的采样色谱波长。

吸光度

- 数据采集前自动调零
在进样前, 指定是否要实行自动调零。初始值设置为有效。

时间

- 采集时间 (min)
指定色谱数据的采集时间。采集时间受采样周期和测定范围设定的限制。测定范围在 220-400 (nm) 时, 采样周期和最大采集时间的关系如下所示。

采样周期 (ms)	数据采集的最大时间 (min)
50	30.00
100	61.00
200	122.00
400	244.00
800	488.00
1600	600.00
3200	600.00

- 响应时间 (s)
指定对信号的响应速度。该数值越大响应也就越迟, 信号也就越趋向平滑化。

灯

- 灯模式
从 D2, W, D2 和 W 中选择测定时使用的灯模式。测定范围因灯模式的不同而不同。灯模式的测定范围如下所示。

D2 : 190-350 nm
W : 401-850 nm
D2&W : 190-850 nm

信号输出

使用输出信号选项时，请选择该项为“ON”。

- 吸光度范围 (AU)
从 0.25, 0.5, 1.0 或是 2.0 里选择信号输出的最大吸光度。值越大信号也越大。值越小灵敏度也越高。

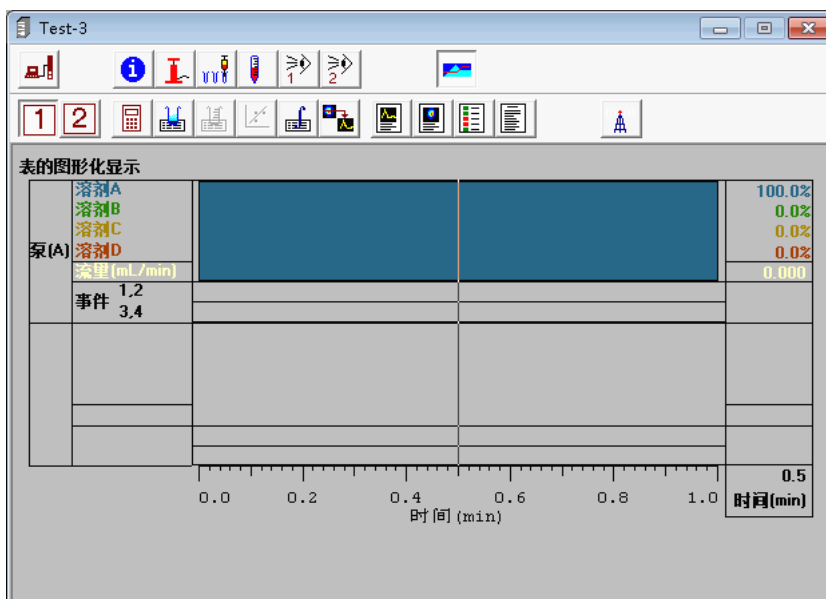
- 波长 1 (nm)
在信号输出选项中设定 CH1 输出信号的波长。设定值必须在测定范围之内。

- 波长 2 (nm)
在信号输出选项中设定 CH2 输出信号的波长。设定值必须在测定范围之内。

(7) 表的图形化显示

显示泵的梯度洗脱时间图表。

该窗口只有在分析仪器的构成窗口中设定了泵（1110）时才显示。



将垂直方向的光标移动到所需的时间位置上，即可显示图表上各个时间表中任意时间所对应的设定值。与垂直方向的光标相对应的数值显示于右侧文本框内。

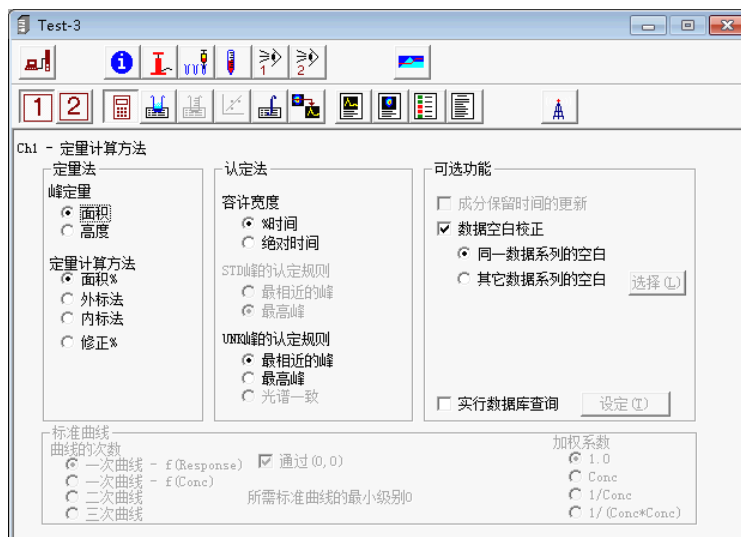
4.3 设定方法文件

4.3.2 数据处理条件的设定窗口

请在下面窗口中设定数据处理条件。数据处理参数设定窗口的通道，以通道 1 和通道 2 的图标来切换。

(1) 设定定量计算方法

设定定量计算方法和成分认定时所用的参数。



可使用以下选项：

定量法

① 峰定量

指定基线处理的峰的定量法。指定面积法或是高度法。

② 定量计算方法

选择以下 4 种方法中的一种。

- 面积%/高度%
- 外标法
- 内标法
- 修正%

(各选项的详细内容，请参照“14.5 定量法”)

认定法

① 容许宽度

用于指定目标峰的实际保留时间与该成分期待保留时间偏离的容许范围。

%时间：随保留时间的增加容许宽度也增加。

绝对时间：与保留时间没有关系，容许宽度是固定值。

② STD 峰的认定规则

指定 STD (标准样品) 峰的认定方法。选择最相近的峰或是最高峰。

- 最相近的峰
在容许宽度范围内与指定成分的保留时间值最相近的峰。
- 最高峰
容许宽度范围内的最高峰。

③ UNK 峰的认定规则

指定 UNK (未知试样) 峰的认定方法。选择最相近的峰或是最高峰。

- 最相近的峰
在最大宽度范围内与指定成分的保留时间值最相近的峰。
- 最高峰
容许宽度范围内的最高峰。
- 光谱一致
UNK 峰是通过指定窗口内各个峰光谱与 STD 成分光谱比较来认定的。
此参数只限于 DAD 在使用通道中注册过时可以使用。

可选功能

① 成分保留时间的更新

- ON:
为作标准曲线而计算成分表标准样品的平均值时, 已设定的保留时间的数值自动切换为该保留时间的平均值, 并进行校正。
对未知成分进行定性定量时, 使用经过自动校正的成分表。
- OFF:
未知成分的定性定量使用没有自动校正 (设定完毕的保留时间) 的成分表。

② 数据空白校正

指定是否要进行数据空白校正 (即状态为 ON 或 OFF), 并指定数据空白校正时的数据。

在样品表中设定 “同一数据系列的空白”。

“其它数据系列的空白” 使用同一应用程序内的其它的数据系列的数据。

要选择其它数据系列的空白, 先按 **选择** 按钮打开空白数据对话框, 从中选择数据。(关于数据空白校正, 请参照 “14.7 空白校正”。)

③ 实行数据库查询

在光谱查询库中可以自动检索已认定的峰。查询结果将以相关系数最高的光谱，或是以相关系数从高到低的顺序在报告书中输出 3 个光谱的名称。

单击 **设定** 按钮显示“数据库查询设定”对话框，在对话框中设定的参数可限定数据库自动查询范围。



- 应用程序；
检索应用程序名下的光谱库。
- 关键字；
检索含有关键字的光谱。输入多个关键字可以用（，）区分开。
允许输入的最长字符是半角 35 个。
- 容许宽度%；
选择此项后，使用峰 RT 容许宽度%来检索定量峰。
- 波长范围；
在输入的波长范围内检索光谱。
- 报告结果
选择输出报告检索结果类型。只输出相关系数最高光谱的检索结果时请选择“最佳 1”；以相关系数的高低顺序输出 3 个光谱的检索结果时请选择“最佳 3”。
只有在“报告画面编辑器”的“进样”区域内插入“数据库查询表”项目时，报告结果会被输出。如果报告中包括数据库查询表，将输出以下表格。

NO	色谱 RT	纯度	概算 浓度	相关 系数	光谱	光谱 RT	RIX
----	----------	----	----------	----------	----	----------	-----

在报告输出画面的“报告输出峰区域”中指定每个色谱所代表的峰。如果检索不出有峰则不输出色谱峰表。每个色谱图最多可以显示 100 个峰。

标准曲线

在此指定以下项目：

① 曲线的次数

指定与标准数据点对应的多项式次数。请从下面选择曲线次数。

- 一次曲线 - $f(\text{Response})$
- 一次曲线 - $f(\text{Conc})$
- 二次曲线
- 三次曲线

注：一次曲线 - $f(\text{Response})$ ：是响应值（面积或是高度）对浓度的回归线
 一次曲线 - $f(\text{Conc})$ ：是浓度对响应值（面积或是高度）的回归线

② 通过

指定是否强制标准曲线通过原点。

③ 所需标准曲线的最小级别

表示所需的最小 STD 样品（标准样品）数。请在样品表中设定该数值以上的 STD 样品数。

标准曲线的次数	所需的最小 STD 样品数
1 次	2
1 次+通过原点	1
2 次	3
2 次+通过原点	2
3 次	4
3 次+通过原点	3

④ 加权系数

请从下面选择生成标准曲线的加权系数。

- 1.0
生成一般标准曲线。
- Conc 、 $1/\text{Conc}$ 、 $1/(\text{Conc}*\text{Conc})$
生成加权系数标准曲线。将浓度表中每个标准样品指定的值（ Conc ）作为标准曲线的加权系数。
(关于加权系数请参照“14.5.2 标准曲线”。)

(2) 成分表

生成成分表。设置认定・定量峰(与每个成分相对应的峰)用参数(保留时间、容许宽度范围、成分名、因子等)。同时在每个成分中指定特殊计算用执行命令。

RT (min)	容许宽度 (%)	成分名	功能!
2.550	10.00	Naphthalene	
3.090	10.00	Anthracene	
3.840	10.00	Chrysene	

设定以下项目，并指定必要的功能：

- ① RT (min)
输入该成分的期待保留时间。
- ② 容许宽度 (%) /容许宽度 (min)
输入 RT(保留时间)的容许宽度。
显示在定量计算法窗口下，指定的容许宽度 (%时间或绝对时间)。
- ③ 成分名
输入成分名。输入的成分名将被自动复制到浓度表和标准曲线系数表中。
- ④ 功能： 1, 2, 3
在每个成分中指定一个特殊命令。点击输入栏显示下拉式菜单。菜单中有以下可使用执行命令：
 - (a) 内标准
指定内标物成分。只适用于内标法。
 - (b) 相对 RT (相对保留时间, RRT)
在相对 RT 标准峰中可以指定一个或多个成分。RT 以每个峰与 RT 标准峰保留时间的比值来显示。

(c) 校正 RT (校正保留时间, CRT)

作为校正 RT 基准峰可以指定一个或是多个成分。每个峰的 RT 将会以与校正系数 (校正 RT 的期待保留时间/校正 RT 峰的实际保留时间) 相乘的值表示出来。

(d) 期待浓度

期待浓度峰的成分可以指定为一个或多个。有必要输入成分期待浓度值和容许范围 (%) 值。

(e) SST (系统适应性测试)

为 SST 峰指定一个或是多个成分。使用这些峰来输出系统适应性测试的结果 (SST 的结果输出在信赖性报告中)。

(f) 贷标准曲线

将标准曲线借给没有标准曲线的峰时, 必须指定标准曲线 (贷标准曲线) 所用的成分, 且仅只能指定一个。

(g) 借标准曲线

使用“贷标准曲线”进行定量计算。可以指定多个。

注: 1. 通过使用贷标准曲线/借标准曲线的功能, 可以在成分表中列出标准样品中没有包含的未知成分, 并可以定量这些成分 (只限于绝对标准曲线法和内标法的定量计算方法)。

2. 因贷标准曲线/借标准曲线功能不能在 STD 样品中检测出借标准曲线成分峰, 所以也不能通过光谱认定 UNK 峰。要使用该功能, 请在定量计算方法 UNK 峰的认定规则中选择最相近的峰或是最高峰。

(h) 峰组 1-峰组 20

将成分“分组”时, 请指定组名。(关于详细信息, 请参照“14.8 分组”。)

(i) 主要、(j) 分解成分

上述两种成分是生成分解物报告的参数。输出分解成分对主要成分的相对面积%。

分解成分=分解成分面积/主要成分面积×100 (%)

只有主要成分峰与分解成分峰都被检测出时才能生成分解物报告。

(k) 光谱

使用画中画功能 (色谱图中包含光谱图) 时, 请指定叠加显示光谱的峰。

⑤ 分子量

指定成分固有的分子量。用浓度单位 (报告输出参数中选择的单位) 来换算定量计算结果 (浓度 1, 浓度 2) 时使用。

⑥ 成分系数

指定成分固有的系数。系数与“浓度 1”相乘的结果作为“浓度 2”输出。

⑦ 期待浓度

指定成分的期待浓度值。该项目只限于在同一行中指定“期待浓度”时有效。

⑧ 浓度容许宽度

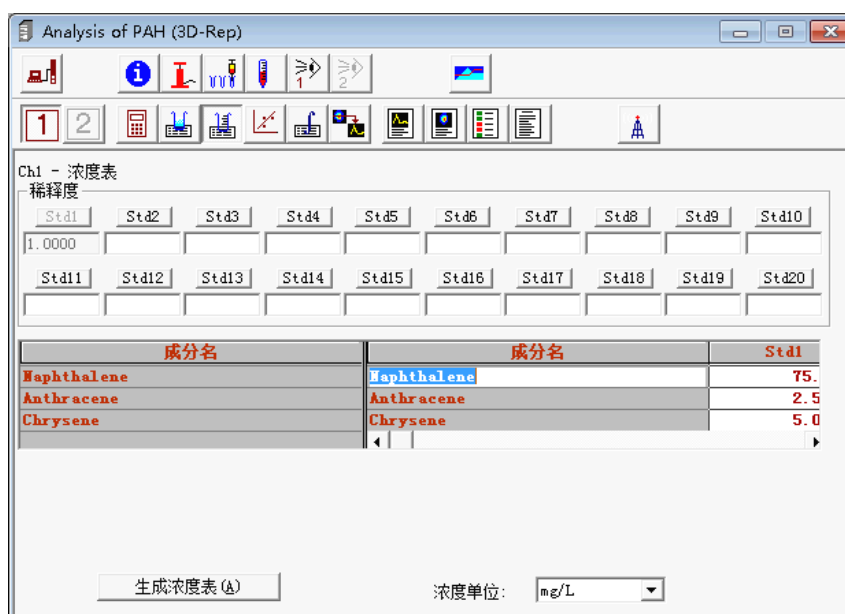
以%的表示形式输入期待浓度值的容许范围。该项目只限于在同一行中指定“期待浓度”时有效。

注：可以使用编辑菜单命令在成分表中进行追加或删除。成分表的编辑结果将自动反映(修改)到浓度表与标准曲线系数表中。

(3) 浓度表

生成在成分表中输入的各个成分标准曲线用浓度表。

浓度表主要用于每个标准样品的标准成分浓度值的输入。



Primaide 系统管理程序可以根据稀释度自动生成浓度表：

请按以下步骤来设定：

- ① 指定标准曲线级别数 (Std n、n=1-20)
单击 **Std n** 按钮，基准浓度的稀释度自动设定为 1.0（浓度表中的该栏会呈反白表示）。
- ② 在浓度单位栏中选择浓度值单位。
- ③ 输入其他的 Std n 的稀释度。
与浓度表内标准曲线级别数相对应的栏（呈反白显示）中输入基准浓度（稀释前的标准成分浓度）。
- ④ 单击 **生成浓度表** 自动生成浓度表。

生成浓度表按钮

- a. 单击此按钮可以自动生成浓度表。根据稀释度和基准浓度（稀释前的标准成分浓度）来计算。
- b. 成分名
显示在成分表中输入的成分名。
更改过的成分名，将会自动复制到成分表和标准曲线系数表中。
- c. Std1-20（浓度）的输入栏
请输入 STDn 样品中的成分浓度。
可以手动生成浓度表或更改自动计算值。
在加权标准曲线中，浓度表的浓度值是加权系数“Conc”值。

(4) 标准曲线系数表

显示在成分表中设定的标准曲线系数。

成分名	A0	A1
Benzoic Acid	0.000e+000	2.056e-005
Sorbic Acid	0.000e+000	2.913e-005

请在标准曲线系数表中输入以下项目：

① 成分名

显示成分表中设定的成分名。

更改过的成分名，将会自动复制到成分表和浓度表中。

② A0-A3

为最小 2 乘法拟合的标准曲线系数。显示的系数根据在定量计算方法窗口设定的曲线次数而变化。可以输入并修改数值。

标准曲线多项式：

$$f(x) = A_0 + A_1x + A_2x^2 + A_3x^3 \quad (x: \text{面积或高度})$$

STD 样品的数据处理结束后，生成标准曲线，处理结果自动写入标准曲线系数表中。UNK 样品使用这些系数来进行定量计算。

注：输出报告（参数）时，作为标准曲线系数，可以设定浓度计算用（A）和响应值计算用（K）。响应值计算用系数如下输出报告：

$$K_0 = -A_0 / A_1$$

$$K_1 = 1 / A_1$$

但是，不可将上述系数保存于原系数表。

③ 单位

显示标准曲线使用单位。

④ 决定系数

决定系数栏中显示的值表示的是标准曲线和实际的数据点（标准样品数据）的一致性。

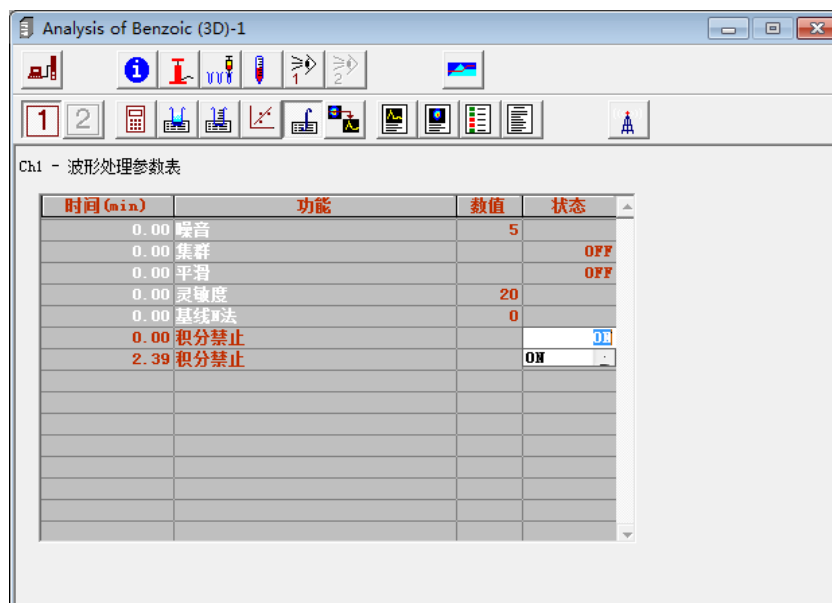
决定系数越接近“1”，标准曲线和实际数据点的一致性也就越高。

（决定系数的具体解释请参照 14.13 “统计计算”）

(5) 波形处理参数表

生成波形处理参数表。

在表的最初 4 行中设定基本的基线处理和波形处理计算用初始值。



请在表中输入以下项目：

① 时间 (min)

输入波形处理功能的启动时间。

② 功能

指定波形处理功能。

指定的波形处理功能，将决定色谱图基线如何确定。

〈功能一览表〉

项目	功能	设定值
灵敏度	峰的检出灵敏度	1~255
基线 N 法	指定画出基线的峰数 N	0~100
峰组	将异构体等作为 1 个峰来处理	ON / OFF
积分禁止	从计算结果中排除溶剂干扰、杂质等	ON / OFF
前方水平线	从前向后沿水平方向来画基线	ON / OFF
后方水平线	从后向前沿水平方向来画基线	ON / OFF
垂直分割	强制垂直分割处理	ON / OFF
拖尾处理	强制拖尾处理	ON / OFF
负峰	将负峰翻转	ON / OFF
噪音	基线的噪音值	1~8000
集群	将色谱变换为指定的采样周期	OFF、20-200ms
平滑	色谱的平滑	OFF、5-25 Pt

噪音

进行峰的检测与基线设定时使用。在线报告中是以连续分析前自动进行的噪音测试结果进行数据处理的。噪音测试结果作为“数据采集信息”自动记录到数据文件中。

离线（再计算处理）报告中使用的是波长处理参数表中的噪音值。使用 UV 检测器（1410）时，噪音值单位为 μV 。

注：要使离线（再计算处理）报告与在线报告取得相同的结果，必须将“数据采集信息”中的噪音值输入波长处理参数表中，再进行分析。

集群

执行色谱的波形处理之前，将取得的数据的数据采样周期 (SP) 变换为指定的周期。在波形处理参数表中选择预变换的采样周期。因为是再计算，对原来的数据没有影响。

注：集群处理会使色谱变形，因此请在探讨最适采样周期 (SP)，或在一般的波形处理下无法应对的紧急状况下才要使用集群。

平滑

在执行色谱波形处理前，可以首先使用在波形处理参数表中选择的平滑点进行 Savitzky-Golay 平滑处理。因为是再计算，对原来的数据没有影响。

注：在数据点比较少的峰中，如果选择了太大的平滑数据点会产生波形的起伏。请将平滑数据点选为峰的数据点数的 1/3-1/4 的值。

在初期设定的噪音、集群、平滑、峰的灵敏度以及基线 N 法中，只有数值和状态选项可以变更。（关于波形处理功能的具体信息，请参照“14.10 波形处理与基线校正”）

③ 数值

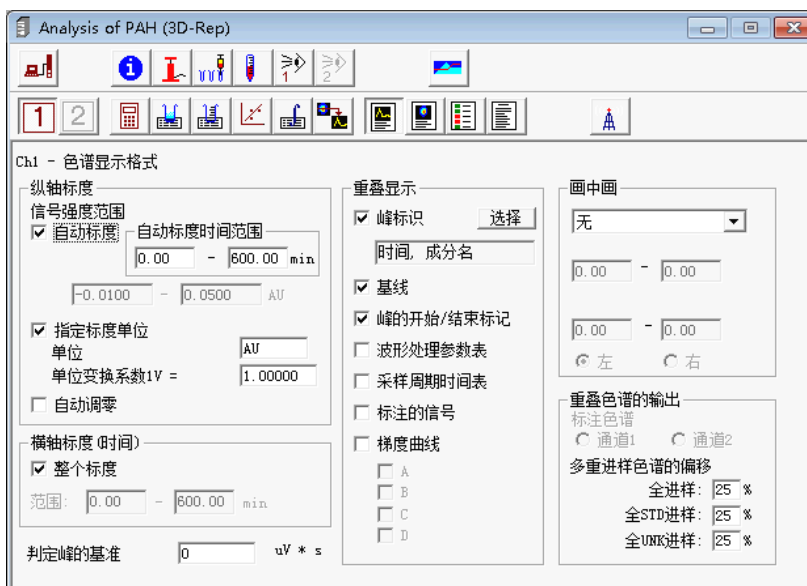
只限于指定功能是峰的灵敏度、噪音与基线 N 方法时，（指定功能）可以在栏中输入数值。

④ 状态

只限于指定功能是除峰的灵敏度、噪音、基线 N 方法以外的功能时，可以指定“On”或“Off”。

(6) 色谱显示格式

请在画面中设定以下的参数：数据采集中监测器的显示（参数）；数据再处理（输出报告）中显示的色谱输出（参数）。



请输入以下项目：

纵轴标度

- 信号强度范围

指定“自动标度”后，可以将自动标度时间范围内的色谱作为基准来表示整体的色谱。

未指定“自动标度”时，可以设定色谱显示的吸光度范围。

- 指定标度单位

指定与检测器相对应的单位。同时输入相应的变换系数。例如：使用UV检测器（1410），想将吸光度范围设为“1.0”，使单位显示为AU时，请设单位为“AU”，单位变换系数为1V=“1.00000”。

请参考以下换算表进行设定。

<单位换算表>

检测器	单位换算系数
UV 检测器 (1410)	1V = 0.25 / 0.5 / 1.0 / 2.0AU (根据吸光度范围的设定而变)
USB-AID	1V = 1V
DAD (1430)	1V = 2AU

- 自动调零

指定自动调零。

横轴标度

- 整个标度
选择“整个标度”时，将检测器参数设定窗口的数据采集时间作为横轴标度。
- 未选择“整个标度”时，可以任意指定色谱显示的时间范围。特别是只显示目标峰时请选择该项。

判定峰的基准

输出报告峰的判定基准。输入峰的判定基准(临界值)。计算方法为“面积”时，单位是 $\mu\text{V}\cdot\text{s}$ ；计算方法为“高度”时的单位是 μV 。

重叠显示

指定在色谱中重叠显示·打印时峰顶部的标识。

- 峰标识：可在色谱峰上部显示以下项目。
最多可以选择 2 个标识。
 - ① 保留时间(时间)
 - ② 认定成分名(成分名)
 - ③ 峰的编号(峰编号)
 - ④ 峰的面积(面积)
 - ⑤ 峰的高度值(高度)
 - ⑥ 无显示(无)
- 基线：在色谱中显示基线。
- 峰的开始/结束标记：显示基线的开始与结束标记。
- 波形处理参数表：显示波长参数处理表。
- 采样周期时间表：显示采样周期时间表。
- 标注的信号：显示从组分收集器里传出来的信号。每 5 个标注信号表示一个编号。
- 梯度曲线：可以从溶剂 A, B, C, D 中选择。

画中画

- 色谱图中包含色谱图
在色谱图中重叠显示所指定的色谱。叠放位置可以指定为主要色谱位置的左上方或是右上方。
输出在成分表功能栏中被指定为“光谱”的成分的光谱。

重叠色谱的输出

- 通道 1 &通道 2 的重叠

通道 1 的色谱和通道 2 的色谱重叠输出到报告时，将其中一个用实线来表示，另外一个则用虚线来表示。

通道 1：用实线来表示通道 1 的色谱。

通道 2：用实线来表示通道 2 的色谱。

- 多重进样色谱的偏移

在报告输出项目的“多重进样色谱的偏移”中设定重叠显示偏移值。

设定项目有全进样、全 STD 进样与全 UNK 进样。设定范围均是 0-50(%)。

(7) 信赖性报告

设定信赖性报告内容。

Ch2 - 信赖性报告

报告内容

系统适应性测试 模块的性能测试 数据诊断

系统适应性测试

计算方法 峰底宽 (USP) 半峰宽 (EP/JP15) 半峰宽 (JP)

非保留峰的时间 (min) 0.001

警告条件

不对称因子 (As) 0.80 - 1.20

色谱柱的理论塔板数 (N) 5000

分离度 (R) 0.80

S/N 3

模块的性能测试

打印压力/温度信息

警告条件

色谱柱进样次数 100000

进样时的柱压 39.2 MPa

灯能量 0

波长准确性 1 nm

数据诊断

诊断峰

保留时间 (min) 0.001 面积 0

容许宽度 (%) 10.00 容许宽度 (%) 10

峰的期待浓度判定

从下面项目中选择报告内容：

- 系统适应性测试 (SST)
- 模块的性能测试
- 数据诊断

请在每个项目中设定以下的参数：

系统适应性测试 (SST)

要进行系统适应性测试，必须在成分表中指定“SST”（成分）。

- 计算方法
指定计算方法。
请从“峰底宽 (USP)、半峰宽 (EP/JP15) 半峰宽 (JP)”中选择理论塔板数、分离度的计算方法。
- 非保留峰的时间 (min)
输入非保留峰的时间和计算用的保留时间。
- 警告条件
输入不对称因子 (Asym)、色谱柱理论塔板数 (N)、分离度 (R) 与 S/N 的容许范围的界限值。(关于 SST 参数的具体信息，请参照“14.14 系统适应性测试”)

模块的性能测试

模块的性能测试仅限于 Primaide 1000 系列仪器有效。

- 打印压力·温度信息
指定是否要输出泵压力信息与柱温箱温度信息报告。压力温度信息在泵时间表的最大时间范围内采集；温度信息则在数据采集时间范围内采集。
- 警告条件
请设定以下判定基准参数：
 - 色谱柱进样次数
 - 进样时的柱压
 - 灯能量
 - 波长准确性

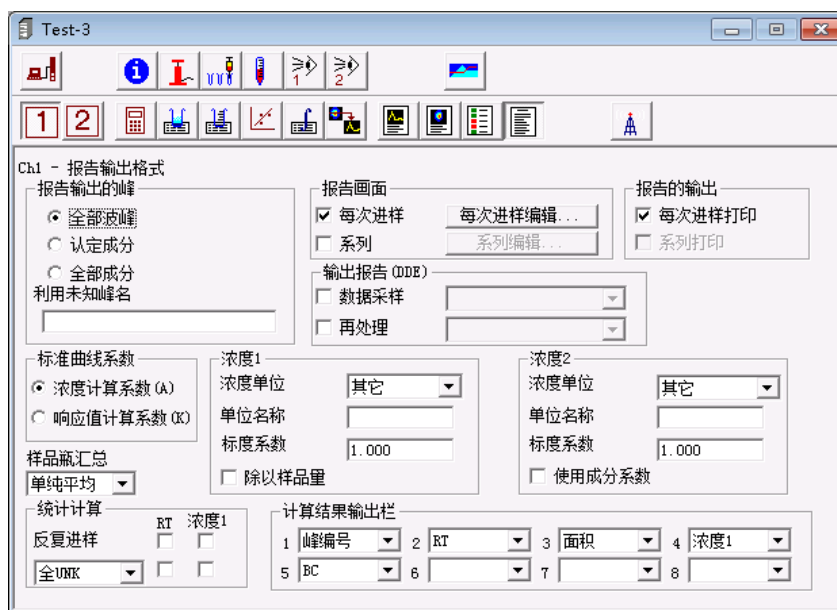
数据诊断

指定诊断项目并设定其参数。

- 诊断峰
输入诊断峰的保留时间及其容许宽度范围以及面积（高度）及其容许宽度。诊断的对象只限于 STD 样品。
- 峰的期待浓度判定
要进行判定时请选为 ON。
必须在成分表里指定“期待浓度”峰（成分）。（关于各数据的诊断参数，请参照“14.15 数据诊断”。）

(10) 报告输出格式

指定报告输出用参数。



请指定以下的参数：

报告输出的峰

指定输出到报告的峰。

- 全部波峰
可以在报告中将检测出的峰中大于“报告峰的判定基准”值的峰进行输出。这种情况下，可以为峰命名通用名。
- 认定成分
根据认定成分表，输出被认定成分的峰的报告。
- 全部成分
包括没有认定的成分，输出成分表中的所有成分的峰的报告。
- 利用未知峰名
选择“全部波峰”后将会显示通用名输入栏，可以在该栏中输入检测出的峰的通用名。对于成分表中没有指定的峰，如果使用在成分表中指定的成分的贷标准曲线来定量，作为成分名将给检测出的峰命名为通用名。

标准曲线系数

指定输出报告（一次曲线，指定 1 次-f (Response) 或 1 次-f (Conc)）标准曲线的系数。

- 浓度计算系数(A) : 输出浓度计算系数 (A0, A1)。
- 响应值计算系数(K) : 输出计算响应时间（面积或者是高度）用的系数 (K0, K1)。

样品瓶汇总

指定统计计算中平均值的计算方法。

- 单纯平均
- 加权平均

统计计算

可以生成关于“保留时间 (RT)”与“浓度 1”的统计计算报告。请选择该复选框为“ON”。

- 反复进样
各个样品瓶反复进样时的统计计算报告。
- 全 UNK
关于全 UNK 样品进样的统计计算报告。
- QC 样品
关于全 QC 样品的统计计算报告（关于统计计算请参照“14.13 统计计算”）。

浓度 1

请从以下单位中选择浓度 1 的单位：

- 浓度单位
g/L, g/mL, g/ μ L, mg/L, mg/mL, mg/ μ L, μ g/L, μ g/mL, μ g/ μ L
- 单位名称（质量分数或是体积分数）
%、ppm、ppb
- 标度系数(摩尔浓度单位)
M、mM、 μ M

如果定量方法是“修正%”，只能选择分率单位。在使用上述以外的单位时，请选择“其它”。

关于浓度 1 的计算内容，请参照“14.5 定量法”。

用样品量除算：指定是否使用“除以样品量”来进行除法处理。

浓度 2

请从以下单位中选择浓度 2 的单位：

- 浓度单位
g/L、g/mL、g/ μ L、mg/L、mg/mL、mg/ μ L、 μ g/L、 μ g/mL、 μ g/ μ L
- 单位名称（质量分数或是体积分数）
%、ppm、ppb
- 标度系数(摩尔浓度单位)
M、mM、 μ M

如果定量方法是“修正%”，只能选择分率单位。在使用上述以外的单位时，请选择“其它”。

关于浓度 2 的计算内容，请参照“14.5 定量法”。

成分系数：指定是否使用成分表中设定的乘数来进行乘法处理。

计算结果输出栏

生成报告时，如果选择了“每次进样”或“系列”，最多可以输出 8 种计算结果。计算结果将按设定的顺序输出。可输出的项目如下所示：

峰编号：	定量峰的顺序（整数）
RT：	峰的保留时间值（小数点以下 2 位固定）
相对 RT：	峰的相对保留时间值
校正 RT：	峰的校正保留时间值
面积：	峰的面积值（整数）
高度：	峰的高度值（整数）
成分名：	峰的认定成分名。未认定的峰为空栏显示。
浓度 1：	浓度（1）的计算结果
浓度 2：	浓度（2）的计算结果
BC：	基线编号（详细请参照“14.10.13 基线号码”。）
峰组：	在成分表中设定的组编号
标准曲线的斜率：	峰的标准曲线斜率（R-系数）
面积/高度%：	面积% = 面积/总面积值 × 100 高度% = 高度/总高度值 × 100
纯度：	峰的纯度
ID 系数：	光谱峰 ID 系数

报告画面

指定生成的报告。生成的报告将以报告文件形式保存。如果没有指定则不生成报告。

单击 **每次进样编辑** 或 **系列编辑** 访问“报告画面编辑”（关于“报告画面编辑”，请参照第 10 章。）

- 每次进样
每次进样均生成“每次进样报告”。
单击 **每次进样编辑** 按钮访问“每次进样报告”用“报告画面编辑”。
- 系列
每系列测定结束后均生成“系列进样报告”。
单击 **系列编辑** 按钮访问“系列进样报告”用“报告画面编辑”。

报告的输出

指定要输出的报告。可以在每次在线分析中及与再处理计算时生成的报告并自动打印。

如果没有任何指定，将只生成报告而不打印。因报告将以文件形式被保存下来，所以可以在数据收集后手动进行打印。

- 每次进样打印
每次进样时，打印“每次进样报告”。
- 系列打印
连续分析结束后，打印“系列进样报告”。

输出报告 (DDE)

指定使用 DDE (Dynamic Data Exchange) 功能输出报告的 DDE 程序。

- 数据采样
在连续分析中输出报告。输出报告时使用从列表框中选择的 DDE 程序。
- 再处理
对数据再处理后输出报告。输出报告时使用从列表框中选择的 DDE 程序。

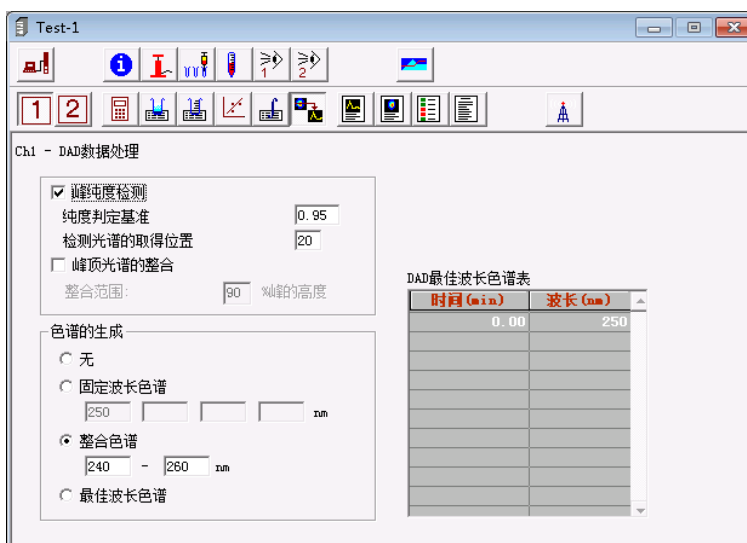
注：使用 Primaide 系统管理的 DDE 程序可以将 STANDARD 画面的报告输出到 MS-Excel。附带的 DDE 程序如下所示：

- 在线（数据采集）用：online.xls
输出每次进样生成的报告。
- 离线（再处理）用：reproc.xls
指定范围内的数据再处理结束后输出报告。

(11)DAD 数据处理

仅限于在分析仪器的结构中选择了 DAD（1430）时，才可以使用 DAD 数据处理窗口。

设定 DAD 数据处理参数。



请在 DAD 数据处理窗口输入以下内容：

峰纯度检测

选复选框为“ON”时进行峰的纯度检测。该功能的设定如下：

① 纯度判定基准

请输入 0.5-1.0 的数值，初始值设为 0.95。如果计算纯度值比纯度判定基准值大的时，判定为“纯”。

② 检测光谱的取得位置

指定取得纯度判定用光谱的位置（峰高度的百分比）。

峰顶光谱的整合

选复选框为“ON”后将对峰的光谱进行整合处理。

功能的设定如下：

- **整合范围**

指定整合用光谱的范围（峰高的百分比）。对范围内的光谱数据进行整合处理后，生成整合光谱。

色谱的生成

请指定从 DAD 数据中提取的色谱类型：

- **无**

不提取新色谱选择“无”。

- **固定波长色谱**

输入从 DAD 数据中提取色谱的波长。可以同时提取 4 个波长的色谱。

- **整合色谱**

输入整合区间的波长。

- **最佳波长色谱**

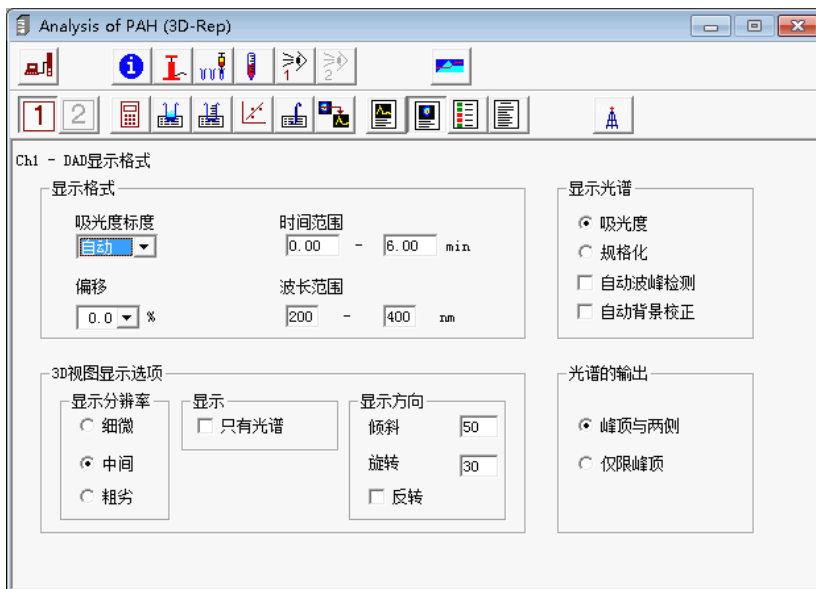
指定最佳波长色谱的提取。

指定最佳波长色谱后，可以编辑最佳波长色谱表。

(12) DAD 显示格式

仅限于在分析仪器的构成中选择了 DAD (1430) 时才可以使用 DAD 数据显
示窗口。

在窗口设定 DAD 显示格式的参数：

**显示格式**

请设定以下参数：数据采取中的监测器显示格式参数、数据再处理时（报告输出）的三维色谱显示参数（报告输出）/等高线显示参数（报告输出）

- 吸光度标度
设定数据集中的监测器显示以及数据采集后的三维色谱显示/等高线显示用的吸光度标度。为自动与三维色谱的最高值相对应，吸光度的默认值设为“自动”。
- 偏移
以整个标度的%值指定显示为零的位置。
- 时间范围
设定显示数据再处理结果与报告输出用时间范围。
- 波长范围
设定数据再处理窗口显示与报告输出用的波长范围。

3D 视图显示选项

请设定数据再处理结果显示与输出报告时的显示分辨率·显示与显示角度。

显示光谱

指定峰顶光谱显示（报告输出）用参数。

- 吸光度：用实际的吸光度来显示光谱时必须指定。
- 规格化：通过将最高吸光度换算为 1.0，将光谱以规格化后的标度来显示时指定此项。
- 自动波峰检测：输出检测出峰波长的光谱。
- 自动背景校正：输出经过光谱背景校正处理的光谱。光谱背景指地是峰主要基线上（不包括前伸、拖尾之类）的光谱（从起始点光谱到终点光谱进行了一级插值处理的光谱）。

光谱的输出

指定检测峰的报告输出用光谱。

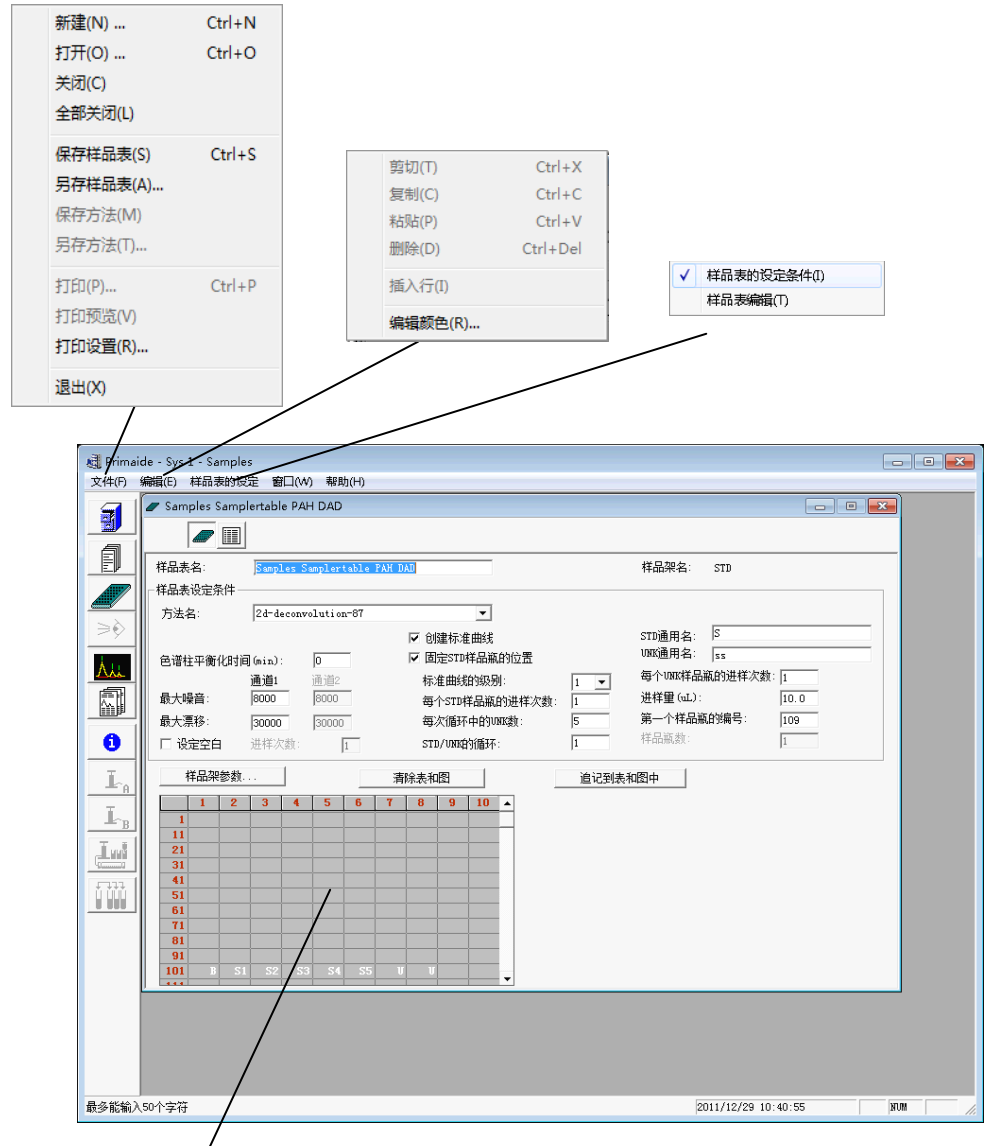
- 峰顶与两侧：输出峰顶光谱与两侧的光谱。
- 仅限峰顶：只输出峰顶的光谱。

第5章 样品表窗口的功能和操作

样品表窗口是设定采集样品时进样序列相关参数的窗口。

5.1 样品表设定窗口的构成

菜单命令以及相关的图标功能如下所示。



样品瓶配置图：显示样品架的样品瓶配置位置。

5.1.1 文件菜单

文件菜单中有以下执行命令：

新建

打开新建对话框，创建新的样品表。

打开

打开“打开文件”窗口，选择已存在的样品表文件。

全部关闭

无论窗口是否处于使用中，关闭所有打开的窗口。如果在任意窗口进行了修改，可以保存修改过的内容。

作为例外，如果数据采集窗口的状态为“数据采集中”，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，关闭所有其它窗口。

保存样品表

保存有效的样品表。如果有提示“输入适当的样品表参数的相关”信息显示时，回答所有信息后，对硬盘中已存的文件内容进行覆盖。

另存样品表

确认了样品表文件的参数后，打开“另存样品表”对话框，设定样品表文件名称和应用程序。

打印

将使用中的样品表文件内容以文本文件的形式打印出来。

打印预览

显示打印信息，指定打印页数。

打印设置

设置打印机，纸张方向（纵向或是横向），纸张大小（信封，Legal，A4）以及来源的选择。

退出

关闭 Primaide 系统管理。数据采集中不可以使用退出指令。请先关闭数据采集监测器后，再进行本操作。

5. 1. 2 编辑菜单

编辑菜单中有以下执行命令：

剪切

将选择的项目(呈反白显示)移到剪贴板，在此同时剪贴板以前的内容会被清除。该命令只限于编辑表格时可以使用。

复制

将选择的(呈反白显示)项目复制到剪贴板。复制源的项目仍照原样存在。如果要复制文件(方法, 样品表, 数据系列, 报告), 请使用打开文件对话框中的复制功能。

粘贴

可以与剪切和复制的命令一起来使用。可以将剪贴板的数据写入或粘贴到表中光标所在位置。

删除

删除选择的(呈反白显示)的项目。与剪切指令不同的是, 用删除指令消除的数据不可以使用撤销命令恢复。

插入行

在样品表里反白显示行的前面插入新的一行。

编辑颜色

打开选择颜色对话框, 改变“样品表”的颜色调色板。与显示窗口相关的项目将会列在对话框中。保存调色板后, 改变的颜色会在调色板中反映出来。



5.1.3 样品表的 设定菜单

样品表的设定菜单中的命令以及图标如下所示：



样品表的设定条件

显示样品表的设定条件窗口。设定自动生成样品进样序列用参数。



样品表编辑

显示样品表编辑窗口，在该窗口可以核对和设定样品进样序列。数据采集也可以对进样序列进行变更（追加或删除）。

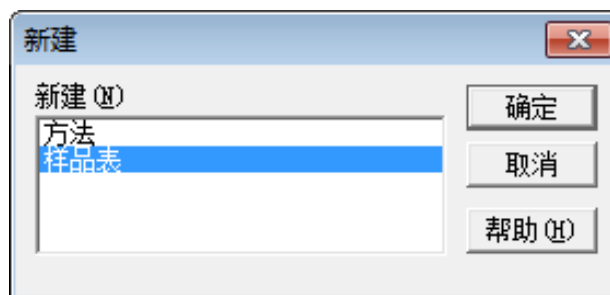
5.2 生成·保存 样品表

生成样品表有两种方法:一是新建样品表的方法;另外一个方法则是改变原有样品表生成新的样品表。

5.2.1 新建样品表

请按以下步骤生成样品表:

- (1) 从文件菜单中选择“新建”，打开新建对话框。

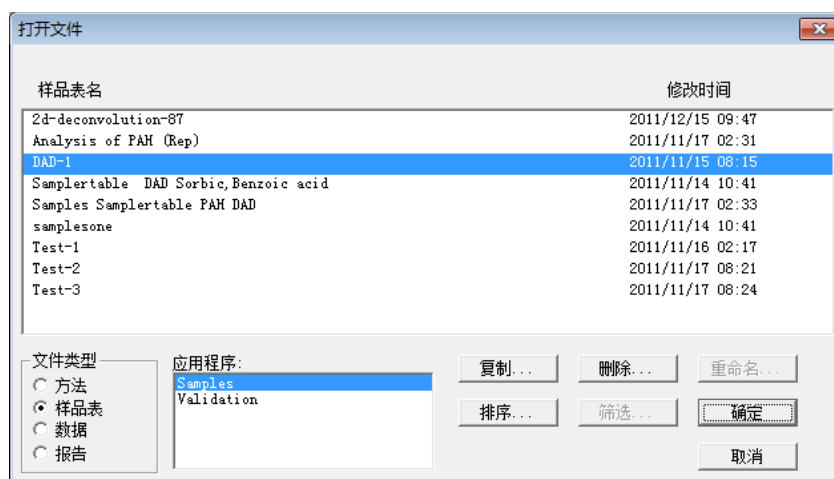


- (2) 选择样品表, 请单击 **确定** 按钮, 打开样品表设定窗口。

5.2.2 变更已存 样品表

按以下步骤变更已存样品表:

- (1) 单击样品表设定图标, 打开“打开文件”对话框。
(关于打开文件对话框的功能和操作, 请参照“3.4 打开文件对话框”)



- (2) 确认在文件类型框中是否选择了样品表，并确认在应用程序列表中是否指定了正确的应用程序。

在样品表文件框中选择要变更的样品表文件，请单击确定打开样品表设定窗口。

5.3 设定样品表

5.3.1 设定单一方法样品表

请按以下步骤设定单一方法样品表：

- (1) 打开样品表的设定条件窗口。
- (2) 选择方法文件，输入每个参数后，单击 **追记到表和图中** 按钮。



- (3) 在样品表编辑窗口，确认样品进样序列。

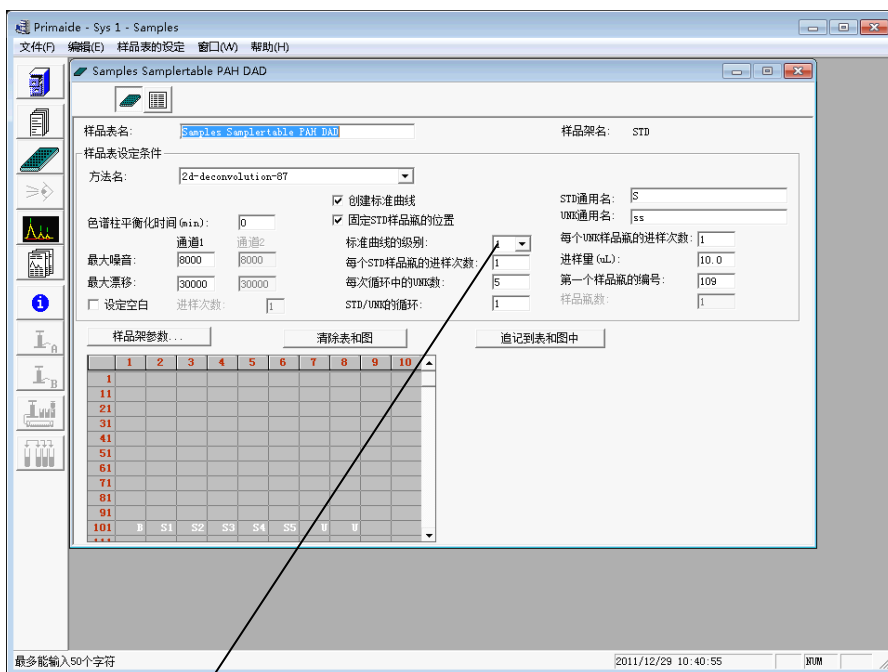
The screenshot shows the 'Samples Samplertable PAH DAD' window with a detailed table of sample injection sequences. The table has the following columns: 'Sample No.', 'Injection Volume (uL)', 'Injection Frequency', 'Type', 'Sample Name', 'Sample Volume', 'Internal Standard', and 'Method Name'.

样品编号	进样量 (uL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	方法名
101	10.0	1	空白	MeOH Blank	1	1	Analysis of PAH (3D)-2
102	10.0	1	STD1	PAH STD-1 DAD	1	1	
103	10.0	1	STD2	PAH STD-2 DAD	1	1	
104	10.0	1	STD3	PAH STD-3 DAD	1	1	
105	10.0	1	STD4	PAH STD-4 DAD	1	1	
106	10.0	1	STD5	PAH STD-5 DAD	1	1	
107	10.0	6	UNK	2	1	1	
108	10.0	6	UNK	40	1	1	

5.3 设定样品表

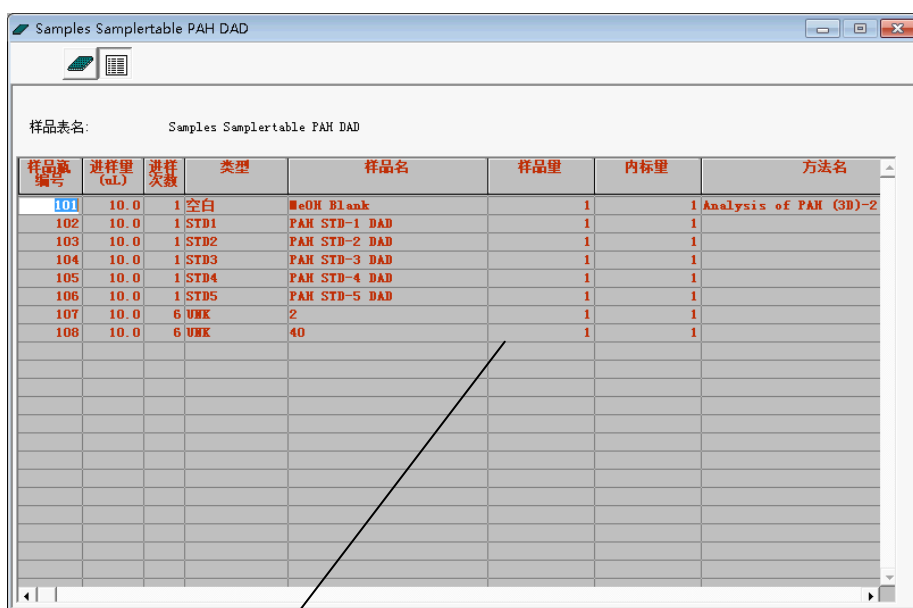
(4) 另外，还可以用同样的方法文件，不同的 STD 数和 UNK 数来设定 STD/UNK 序列、更改标准曲线的级别数和循环中的 UNK 数。

变更表格的设定条件后，单击追记到表和图中按钮，可以将更新过的样品进样序列追加到样品瓶图和样品表中。



变更标准曲线的级别 (3→1)

(5) 在样品表编辑窗口，确认样品进样序列。

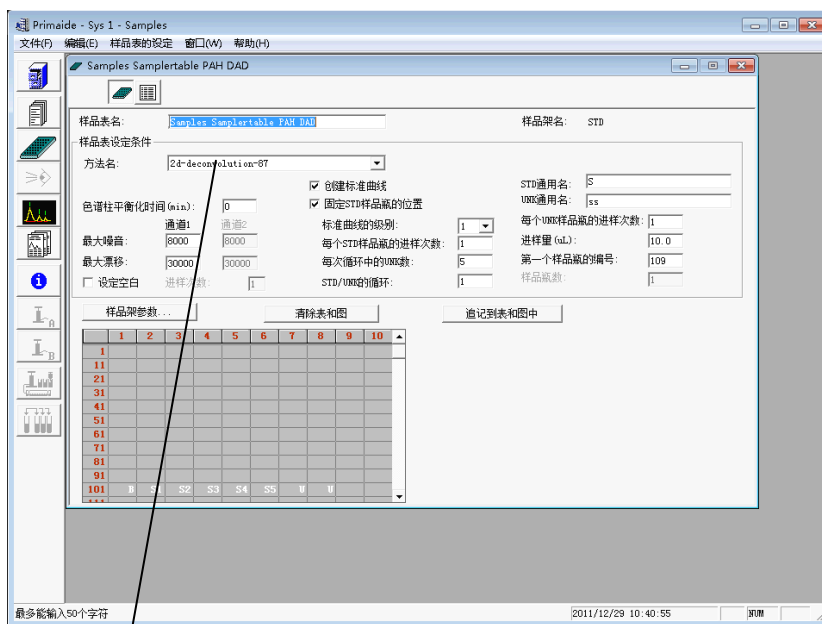


更新过的样品进样序列

5. 3. 2 设定复数样品表

可以生成能够在分析中自动进行多个方法切换的样品表（复数方法样品表）。请按以下步骤设定：

- (1) 打开样品表的设定条件窗口。
- (2) 选择首先使用的方法文件，输入各参数后，单击 **追记到表和图中** 按钮。
选择其次使用的方法文件名，输入各参数后，单击 **追记到表和图中**，追加到样品瓶图和样品表中。



选择方法文件

- (3) 在样品表编辑窗口，确认样品进样序列。

样品瓶编号	进样量 (μL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	方法名
1	10.0	1	STD1	标准样品001	1	1	2d-deconvolution-87
2	10.0	1	UNK	未知样品002	1	1	
3	10.0	1	STD1	标准样品003	1	1	2d-deconvolution-87
4	10.0	1	UNK	未知样品004	1	1	

第 1 序列方法文件

第 2 序列方法文件

(4) 重复步骤 (3)，可以作成复数方法（使用多个方法文件的）样品表。

样品编号	进样量 (μL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	方法名
1	10.0	1	STD1	标准样品001	1	1	1 2d-deconvolution-87
2	10.0	1	UNK	未知样品002	1	1	
3	10.0	1	STD1	标准样品003	1	1	1 2d-deconvolution-87
4	10.0	1	UNK	未知样品004	1	1	
5	10.0	1	STD1	标准样品005	1	1	1 Analysis of PAH (Rep)
6	10.0	1	UNK	未知样品006	1	1	

第 1 序列方法文件

第 2 序列方法文件

第 3 序列方法文件

5.3.3 变更数据采集中样品表

数据采集开始后，样品表条件设定窗口将变为无效。因此，不能使用此窗口在样品表中进行追加。但是在数据采集中没有使用的行，可以在样品表编辑窗口直接进行更新（追加或删除）。

数据采集开始后，样品表的最初行将会变为冻结状态（不可变更—呈灰色显示）。如果数据采集窗口是“连续分析”以外（比如是监测器，噪音测试，单分析）的情况时，只有样品表最初的列变为冻结状态。

连续分析开始后，随着进样，一行一行变为冻结状态（呈灰色显示）。没有被冻结的行可以更改。为使更新后的参数有效，必须从文件菜单里选择保存样品表（或是另存样品表），将更新后的结果保存起来。

属于以下的情况时，参数会恢复到更新前的值：

- (1) 更新结果没有保存
- (2) 更新结果保存前，该行已变为冻结状态。

为了防止对正在更改中的行进行数据采集，首先在数据采集窗口里选择“暂停”后，再对样品表进行更改。

5.3.4 保存样品表

请按以下步骤保存样品表文件：

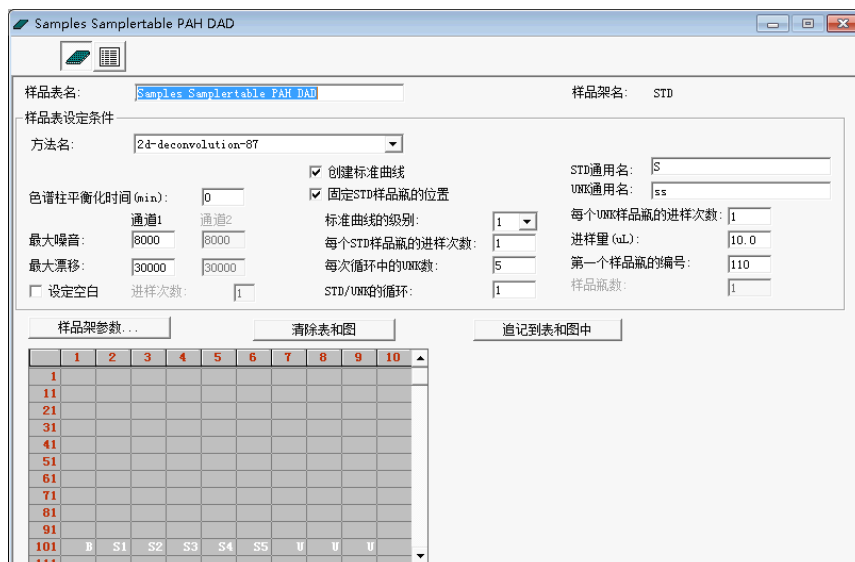
- (1) 在文件菜单中选择“另存样品表”命令（用同一名称保存时，请选择“保存样品表”命令），打开“另存为”对话框。



- (2) 输入样品表文件名。
- (3) 单击 **确定** 按钮。

5.4 样品表窗口

- 5.4.1 样品表生成条件的设定窗口 使用样品表的设定条件窗口能简单且迅速地生成样品表。手动设定样品表时，请使用样品表编辑窗口。



请在设定窗口设定以下项目：

设定名称

- 样品表名（样品表文件名）
输入名称（最多可输入 50 个半角字符）。输入的名称会在标题一栏内显示出来。
- 样品架名
显示当前选择的样品架名。
更改样品架名时，请单击**样品架参数**，打开样品架参数对话框。
从样品架名列表框中选择样品架，单击**确定**按钮。

注：如果设定的样品瓶数超出了样品架的界限值（ $N_x \times N_y$ 样品瓶数），会显示警告信息。

样品表设定条件

请设定以下的样品表条件参数。

- 方法名
从列表框中选择方法文件名。
初始名为正在打开的方法文件名。没有方法文件打开的情况下，则设刚更新（生成）过的方法文件名为初始文件名。
- 色谱柱的平衡化时间（min）
输入测定前（进样前）的色谱柱平衡化时间。
- 最大噪音
输入在色谱柱平衡化时间过后进行的基线稳定度检测时允许的最大噪音值。
- 最大漂移
输入在色谱柱平衡化时间过后进行的基线稳定度检测时允许的最大漂移值。
- 设定空白
在复选框里选择 ON 后，此系列用的空白样品瓶将会准备出来。空白样品瓶自动使用最初的样品瓶被指定的编号。
空白样品将以“空白”的名称登记到样品表最初的行中。
- 进样次数
设定空白样品瓶重复进样次数。
- 创建标准曲线
要生成标准曲线时，请选复选框为 ON。
- 固定 STD 样品瓶的位置
选择该功能为“ON”后，所有标准样品将以相同的标准样品瓶来进样。比如 2 次连续进样，2 次都用相同的标准样品和不同的未知样品来进样时，自动进样器会控制每次进样都从相同的标准样品瓶进行。
- 标准曲线的级别
请输入生成标准曲线时使用的标准样品瓶数。
- 每个 STD 样品瓶的进样次数
指定每个 STD 样品瓶的重复进样次数。
- 每次循环中的 UNK 数
指定在 STD/UNK 序列里分析用 UNK 样品瓶数（未知样品）。
- STD/UNK 的循环
输入在一个分析系列中，STD/UNK（标准样品/未知样品）序列的重复次数。
- STD 通用名
输入 STD 类型样品的通用名。初始名是“标准样品”。在生成样品表时，付给每个 STD 样品一个通用编号（001-999）。

- UNK 通用名
输入 UNK 类型样品的通用名。初始名是“未知样品”。在生成样品表时，付给每个 UNK 样品一个通用编号（001-999）。
- 每个 UNK 样品瓶的进样次数
指定每个 UNK 样品瓶重复进样次数。
- 第一个样品瓶的编号
输入表示最初样品瓶在样品架位置的编号。如果输入的编号已存在，这个样品瓶和之后的样品瓶编号会被覆盖。
样品瓶 No. 的初始值为“1”。单击 **追加到表和图中** 按钮自动更新样品瓶 No.。
单击 **清除表和图** 按钮后，样品瓶初始 No 设置为“1”。
- 样品瓶数
不生成标准曲线时，输入分析用 UNK 样品（未知样品）的样品瓶数。

工具按钮

设定样品架参数

单击此按钮显示样品架参数设定对话框。

从列表框中选择样品架名称后，与之相对应样品瓶配置图将自动显示。



注：请在 Primaide 环境设定程序中设置样品架信息（样品架名与参数的设定）。关于详细信息，请参照操作说明书“环境设定篇”。

清除表和图

单击此按钮显示确认对话框，单击**确定**按钮删除样品表和样品瓶图。删除样品表后，最初的样品瓶编号重设为“1”。

追记到表和图中

单击此按钮可以根据表的设定条件追加到样品表和样品瓶图中。在确认对话框中单击**确定**按钮执行追加命令。

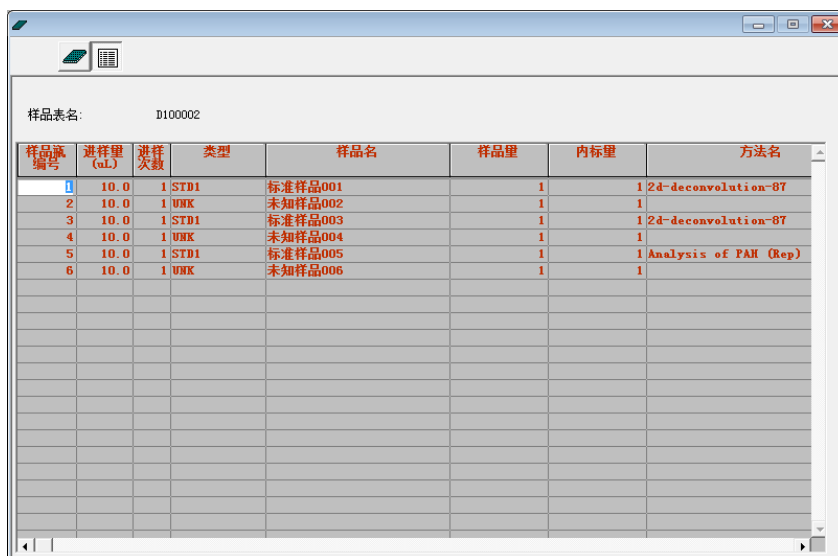
更新样品瓶图后，新设定的进样序列同时也被追加到样品表中。使用该功能可以在样品表中追加新进样，或是在样品瓶图中追加新的样品瓶，不可以生成新的样品表。图和样品表更新后，最初的样品瓶编号也会随之更新。通过变更使用的方法文件后再进行追加，可以作成复数方法的样品表。

空白样品表示为“B”；标准样品表示为“Sn (n=1-20)”；未知样品表示为“U”。

5.4 样品表窗口

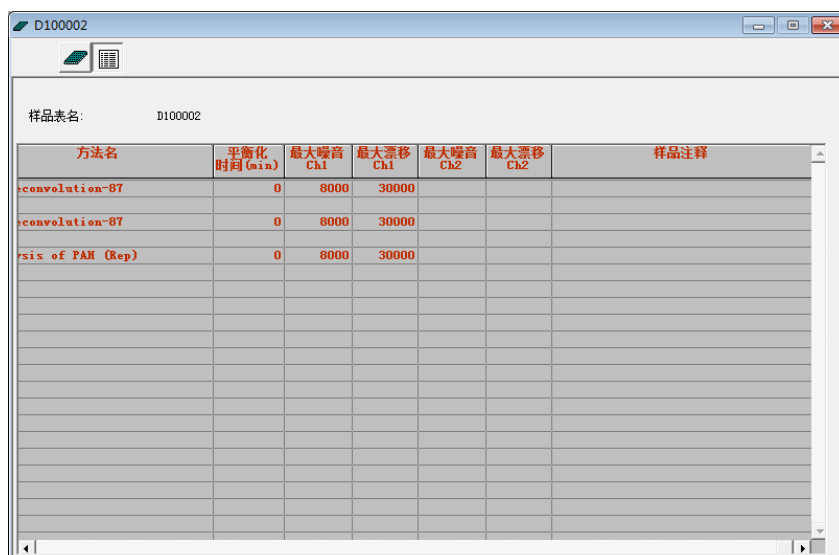
5.4.2 样品表编辑窗口

在该窗口可以对用表格设定条件参数自动生成的样品表内容进行确认、删除与追加。编辑时请使用编辑菜单命令。



样品表名: D100002

样品瓶编号	进样量 (μL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	方法名
1	10.0	1	STD1	标准样品001	1	1	1 2d-deconvolution-87
2	10.0	1	UNK	未知样品002	1	1	
3	10.0	1	STD1	标准样品003	1	1	1 2d-deconvolution-87
4	10.0	1	UNK	未知样品004	1	1	
5	10.0	1	STD1	标准样品005	1	1	1 Analysis of PAH (Rep)
6	10.0	1	UNK	未知样品006	1	1	



样品表名: D100002

方法名	平衡化时间 (min)	最大噪音 Ch1	最大漂移 Ch1	最大噪音 Ch2	最大漂移 Ch2	样品注释
2d-deconvolution-87	0	8000	30000			
2d-deconvolution-87	0	8000	30000			
Analysis of PAH (Rep)	0	8000	30000			

样品表中最多可以设定 400 行。

以下是对样品表项目的说明：

- 样品瓶编号
样品架上样品瓶的位置。
- 进样量 (μL)
指的是样品进样量。如果进样量=0.0 μL，将在不注入样品下进行分析。
- 进样次数
每个样品瓶的重复进样次数。

- 类型

从下面选择样品的类型。

- ◆ 空白：空白样品。
- ◆ STD n (n = 1 -20)：标准样品。根据标准样品的测定值来生成标准曲线。
- ◆ UNK：未知样品，定量计算的對象。
- ◆ EQU：进行监测分析（不注入样品的分析）。监测分析的数据，无法进行记录或保存。
- ◆ QC：未知样品中，用于控制测定精度的样品。可以使用附带的 Summary Macro 程序，在 MS-Excel 里对该样品进行处理，进行测定精度的统计处理。

- 样品名

每个样品瓶的样品名称。

- 样品量

样品量需要手动设置。初始值为“1”。

该参数作为换算系数（重量百分比的计算等）来使用。

- 内标量

该数值需要手动输入。初始值为“1”。内标量指的是加入样品的内部标准的量。使用内标法作为定量法时设定内标量。

- 方法名

只在该系列的最初行显示方法名。

- 平衡化时间

只在该系列的最初行显示色谱柱的平衡化时间。

- 最大噪音 Ch1 (Ch2)

Ch1 (Ch2) 噪音测试时允许的最大值。

- 最大漂移 Ch1 (Ch2)

Ch1 (Ch2) 漂移测试时允许的最大值。

- 样品注释



输入对样品的注释。

注： 将各通道的最大噪音值与最大漂移值设为最大值（噪音值：8,000，漂移值：30,000）时，连续分析中的自动噪音测试会被跳过。

注： 在“样品表编辑”窗口编辑的内容会自动反映到样品瓶图中（样品表的设定信息窗口）。

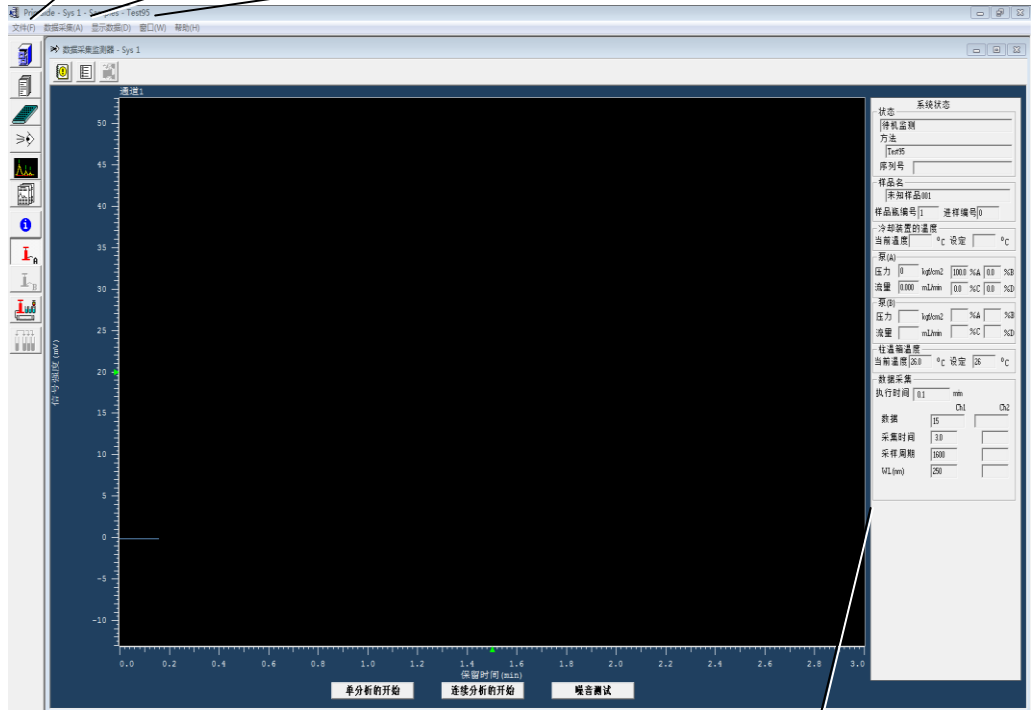
第6章 数据采集窗口的功能与操作

数据采集窗口是检测仪器状态与采集数据的窗口。

可以通过单击数据采集图标  或快速分析的开始图标  来显示该窗口。

6.1 数据采集窗口的构成

菜单命令以及相关的图标功能如下所示：



显示状态

6.1 数据采集窗口的构成

6.1.1 文件菜单

文件菜单中有以下命令：

新建

打开新建对话框。

打开

打开文件打开窗口。

全部关闭

无论窗口是否处于使用中，关闭所有打开的窗口。但是，如果数据采集窗口处于“数据采集中”状态时，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，关闭其它所有窗口。

打印设置

设置打印机，纸张方向（纵向或横向），纸张大小（信封，Legal，A4）以及来源的选择。

退出

关闭 Primaide 系统管理。数据采集中不可以使用退出指令。请先关闭数据采集监测器后，再进行操作。

6. 1. 2 数据采集菜单

数据采集菜单中有以下命令。

显示状态

显示系统状态以及测定运行状况的监测区域。

系统状态

状态
待机监测

方法
Test95

序列号

样品名
未知样品001

样品瓶编号 1 进样编号 0

冷却装置的温度
当前温度 °C 设定 °C

泵(A)
压力 0 kgf/cm² 100.0 %A 0.0 %B
流量 0.000 mL/min 0.0 %C 0.0 %D

泵(B)
压力 kgf/cm² %A %B
流量 mL/min %C %D

柱温箱温度
当前温度 26.0 °C 设定 26 °C

数据采集
执行时间 0.1 min

	Ch1	Ch2
数据	15	
采集时间	3.0	
采样周期	1600	
WL (nm)	250	

- 显示 Primaide 系统管理程序系统的处理状态
- 执行中的方法文
- 采集中数据保存的系列文件编号
- 数据采集中的样品信息
- 冷却装置的温度信息
- 泵(A) 泵(B) 泵的当前信息
- 柱温箱的温度信息
- 开始监测的经过时间或从分析开始的经过时间，每次进样结束的同时，都会被重新设置，重新计时。
- Ch1/Ch2 里设定的数据采集时间
- Ch1/Ch2 里设定的数据采集周期
- 监测波长

自动调零

检测器可以自动调零。只有系统状态处于[监测器]或 [平衡化]时有效。

采集时间

在“采集时间的设定”对话框中可以更改数据采集时间。设定的采集时间时,不能设定得比开始时间或是比已经开始了的分析时间短。

采集时间的变更,只限于在执行单分析或连续分析时有效。执行连续分析时,通过采集时间指令重置的采集时间,将会反映在之后的测定中,但却不反映到方法文件的参数中。



波长

波长命令主要用于更新监测中的色谱波长。在“波长的设定”对话框中可以更改波长。该命令只限于使用 DAD 时有效。



静置/激发:

该功能只限于连续分析执行开始后可以使用。在“静置/激发”对话框中设定静置/激发为“ON”后,图标将显示为红色。



样品表中指定的测定结束后，连接仪器将由静止功能关闭。静止中的仪器也可使用激发功能在指定时间打开电源，用样品表最初的方法开始分析。

要使用激发功能，需要设定激发日期（yyyy/mm/dd）和时间（hh:mm），并设置复选框为“ON”。

注： 设定了激发功能时，使用静止功能没能关闭的仪器，到了设定激发时间后，样品表中最初的方法也会被转送到检测器开始测定。如果在数据采集结束前，到了激发时间，静止参数将变为无效，采集结束后，激发功能（使用样品表中最初方法进行的监测）立刻执行。



显示错误日志：

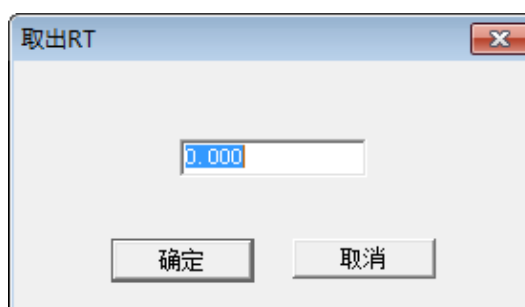
在错误日志表中记录了连续分析执行中发生的错误。连续分析报告打印结束后，错误日志的内容也会随后自动打印出来。

错误日志的内容，在下次连续分析开始时会被删除。



查询数据库

3D数据的单分析或连续分析执行中，在光谱数据库里对指定保留时间(RT)的光谱进行光谱数据库检索。



关于数据库检索的使用，请参照“13.3.4 数据采集中数据库的检索”。

6.1.3 数据显示菜单 数据显示菜单中的命令与图标如下所示：

**显示选项：**

显示“数据采集中的色谱显示选项”对话框。

在显示选项窗口可以更新色谱的显示标度（信号强度，时间范围）以及等高线图的显示标度（信号强度，时间范围，波长范围）。还可以切换显示数据（Ch1 色谱，Ch2 色谱，Ch1/Ch2 重叠显示，等高线）。

单击[复原]按钮可以将参数恢复为方法文件的设定值。

数据采集中的色谱显示选项

显示器上显示的谱图

- 等高线图与Ch1色谱
- 等高线图与Ch2色谱
- Ch1与Ch2色谱显示
- Ch1色谱显示
- Ch2色谱显示

色谱选项

- 梯度曲线
 - A B C D
- 标注的信号

显示格式

- 重叠显示 并排显示

Ch1色谱的标度

信号强度范围: [-0.026] - [0.106] AU

时间范围: [0.00] - [30.00] min

Ch2色谱的标度

信号强度范围: [-13] - [53] mV

时间范围: [0.00] - [30.00] min

等高线图的标度

吸光度标度: [0.0005]

零偏移%: [0.0]

波长范围: [220] - [400] nm

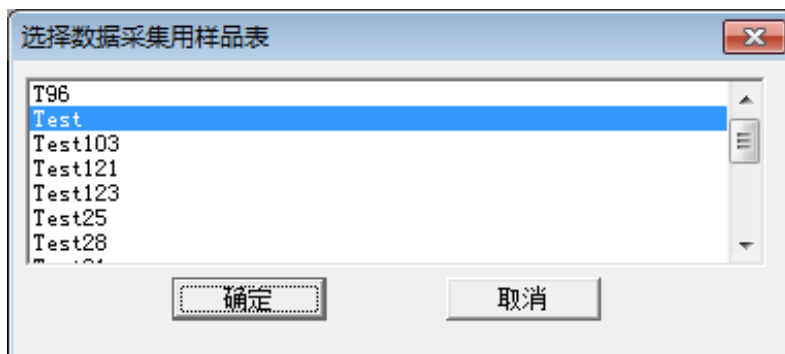
时间范围: [0.00] - [30.00] min

[复原] [确定] [取消]

6.2 采集数据

6.2.1 打开数据采集窗口

- (1) 在主工具栏中单击数据采集图标打开“选择数据采集用样品表”对话框。

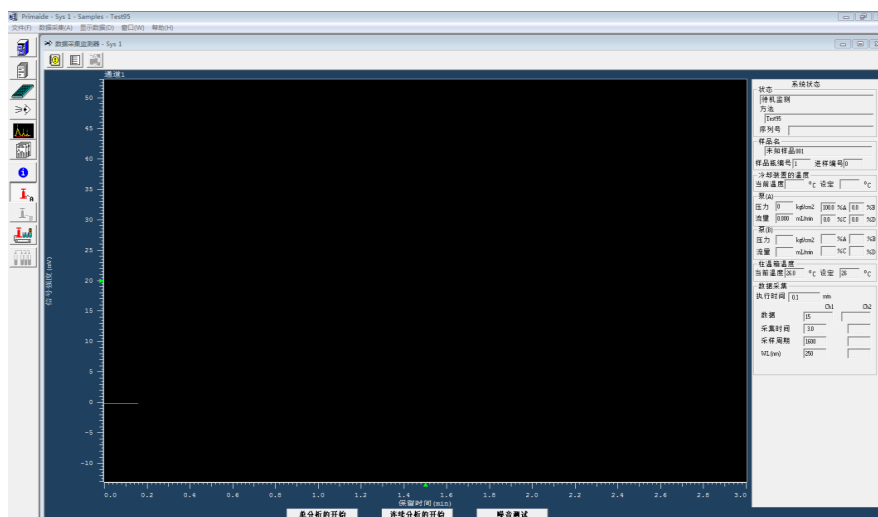


- (2) 选择要使用的样品表文件，单击 **确定** 按钮。
- (3) 检查样品表第一行的参数。

确认指定的方法文件的仪器结构参数和数据采集参数等。

如果出现错误，显示错误信息后，数据采集将中止。出现多个错误时，按照发生的顺序显示错误信息。

- (4) 打开数据采集窗口，确认连接的泵与检测器是否处于准备状态。如果不处于准备状态，就不能执行监测。出现上述情况时，将有状态信息显示，例如“正在等待泵的准备状态”。
- (5) 数据采集监测器开始运行。



6.2.2 变更色谱 显示比例

有以下方法可以更改色谱的显示比例：

- (1) 通过输入数值来扩大或缩小色谱显示
在显示选项对话框中输入 X 轴与 Y 轴的数值。
- (2) 使用鼠标来扩大色谱的显示
请按照以下步骤扩大色谱的显示：
 - ① 将鼠标指示符放在要扩大的范围的左上侧。
 - ② 单击拖动鼠标键的同时，将鼠标指示符放到要扩大的范围的右下侧。
 - ③ 放开鼠标键后，指定部分的色谱会被扩大。
- (3) 用鼠标来扩大轴标度的显示
请按照以下步骤来扩大 X 轴和 Y 轴的显示：
 - ① 将鼠标指示符放在要扩大的 X 轴或 Y 轴标度起始点的左上侧。
 - ② 在单击拖动鼠标键的同时，将鼠标指示符放到要扩大的范围的终点。
 - ③ 放开鼠标键后，指定范围的轴会扩大显示出来。
- (4) 用键盘来扩大或缩小轴比例的显示。
按 PageUp 或 PageDown 键后，Y 轴的上限值会有 10% 的增加或减少。

注：在等高线图显示中，按 PageUp 或 PageDown 键可以变更等高线吸光度标度值。

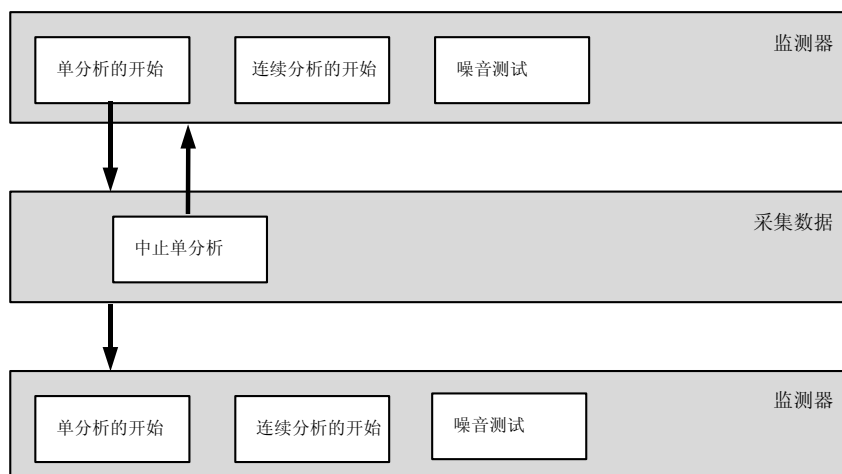
- (5) 时间轴 (X 轴) 和强度轴 (Y 轴) 的同时自动标度
将鼠标指示符放在色谱显示范围内，单击鼠标右键。
- (6) 移动色谱
请按照以下的步骤来移动色谱：
 - ① 鼠标指示符放在 X 轴或 Y 轴显示的绿色三角形上。鼠标指示符由箭头变为“手”的形状。
 - ② 单击拖动鼠标键的同时，将鼠标指示符放到要移动的位置。
 - ③ 放开鼠标键后，色谱会移动到指定位置。

6.3 数据采集窗口的操作

数据采集主要通过点击“按钮”来执行。“按钮”的层次和系统处理状态的变化如下图所示：

6.3.1 单分析的开始

“单分析的开始”仅执行样品表中第一行的进样。



单分析的开始

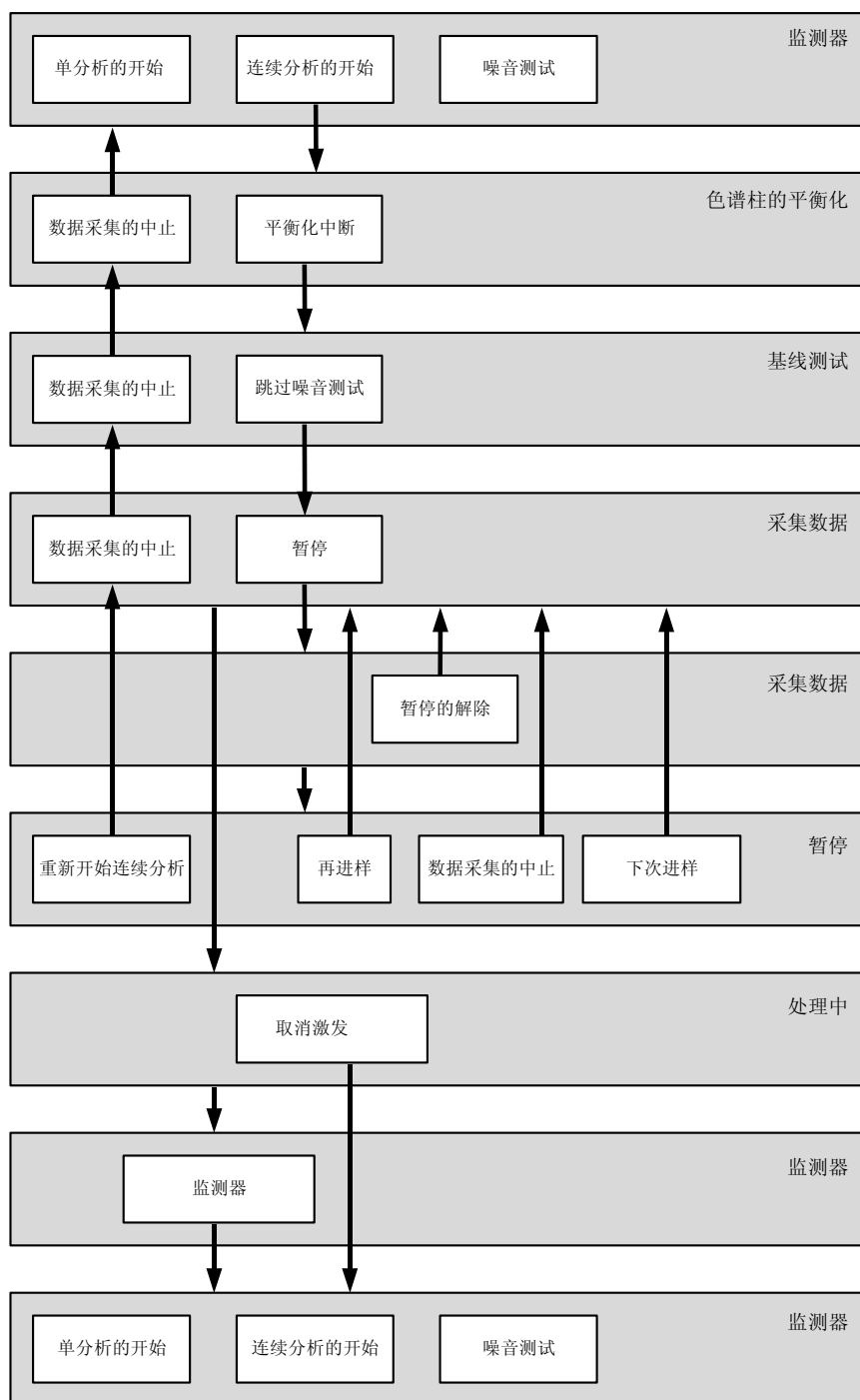
用样品表第一行的设定条件来采集数据。

开始测定前，确认连接的自动进样器、泵、检测器、柱温箱是否处于准备状态。测定结束后返回到监测器，采集的数据将保存到数据系列文件中。

中止单分析

中止数据采集，保存到截止中止时的数据后，恢复到监测器状态。

6.3.2 连续分析的开始 “连续分析的开始” 执行样品表中所有进样。



连续分析的开始

用样品表第一行的设定条件来采集数据。

如果执行中样品表中存在多个方法时，一个系列的测定结束后，下一个系列的测定将会自动开始。

确认以下项目后，开始采集连续分析用数据。

- (1) 确认连接中的自动进样器、柱温箱、泵是否处于“准备”状态。如不处于“准备”状态，将显示“正在等待泵的准备状态”信息，不会执行连续分析。只有柱温箱，即使在“忙”状态下也可以开始运行。但是，样品的进样却要等到变为“准备”状态之后才可以执行。
- (2) 确认样品表中所有行的参数（装置构成，样品架参数等）是否正确。如有错误存于某行时将有错误信息显示。如在显示的所有错误信息框中选择 **取消**，则不会执行连续分析，恢复到监测器状态；如果选择 **确定**，连续分析将会开始，但只执行参数设置正确的行。
- (3) 色谱柱平衡化结束后，开始执行连续分析。如果样品表中的平衡化时间为零，将不执行平衡化，而是自动开始测定噪音和漂移。
- (4) 如果噪音和漂移值大于样品表中设定值时，会重复执行噪音测试，直至达到最大值以下。样品表的噪音和漂移值设为最大时，自动噪音测试将自动被取消。进样前的噪音测试中取得的噪音和漂移值将和测定中的数据一起被保存。
- (5) 噪音测试结束或是指定了“跳过”后开始进样。

数据采集的中止

立即中止数据的采集。连续分析结束后，用样品表第一行的方法重新开始监测。如样品表中存在多个方法时，用下一个方法来监测。

平衡化中断

停止系统的平衡化，自动开始噪音测试。

跳过噪音测试

取消自动噪音测试，开始进样。

暂停

指定暂停前的进样（已进样的样品）数据采集结束后，暂停数据采集。

暂停的解除

样品(完成进样)测定结束前, 点击此键可以取消暂时停止。

重新开始连续分析

从执行中连续系列(方法)的最初样品瓶开始重新进样, 采集的结果将覆盖已存系列的数据。

再进样

从暂停的样品瓶重新开始继续连续测定。包括暂停(采集中止)的数据, 对所有的数据都进行计算处理。如果要排除该暂停数据的处理, 请从进样表中删除。

下次进样

从暂停进样的下一个进样开始重新进行连续测定。

取消激发

结束激发处理。用样品表中的最终行的方法开始监测。

监测器

从以样品表最终行的方法进行监测的状态切换为以第一行的方法监测的状态。监测器返回到初始状态(显示为以目前样品表中最初行的方法进行监测的模式)。

如在执行单分析或连续分析时出现错误, 单击此按钮可以解除模块错误。

<p>注: 数据采集监测器画面没有打开时, 如果模块发生错误, 通过点击模块的详细信息图标打开 HPLC 模块, 单击错误解除按钮可以解除错误。</p>
--

6. 3. 3 噪音测试

“噪音测试”是用样品表中第一行的方法，通过手动来进行的噪音测试。噪音测试包括测定噪音值和漂移值。



噪音测试

噪音测试前，需要确认连接的泵、检测器与柱温箱是否处于“准备”状态。噪音测试大约需要 1 分钟的时间。测试结束后，测试结果将显示于对话框中。

注：使用 UV 检出器（1410）时，噪音值单位是 μV ；漂移值单位是 $\mu\text{V}/\text{min}$ 。如果噪音测试在 1 min 以内中止的话，1 min 以内的测定结果将显示出来。

噪音测试的中止

中止噪音测试，回到初始状态。

6.3.4 更新数据采集中的样品表

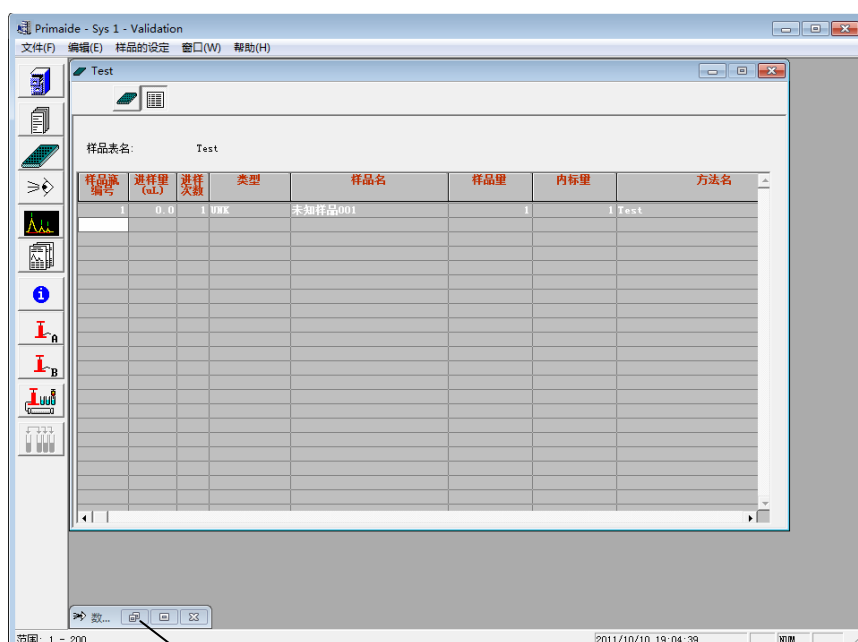
要在数据采集中更改样品的进样序列，需要在“样品表编辑”窗口追加或更新样品进样。

数据采集开始后，样品表的最初行变为冻结状态(不可更改-文字呈白色显示)。数据采集是“连续分析”以外的状态(比如监测、噪音测试、单分析)时，只有样品表的最初行变为冻结状态。

未使用的行，可以在样品表窗口直接进行编辑。

要编辑数据采集中的样品表窗口：

- ① 单击数据采集窗口的“样品表编辑”图标。
- ② 数据采集窗口将最小化，执行中的样品表将会显示。



最小化数据采集窗口

- ③ 更新样品表(更新方法请参照“5.4.2 样品表编辑窗口”)。

要使更新的参数有效，必须在文件菜单中选择保存样品命令保存更新结果。

如果属于以下情况，参数将恢复为更新前的：

- 未保存更新结果。
- 保存更新结果之前，此行变为冻结状态。

为防止对正在更新的行进行数据采集，请在数据采集窗口选择暂停之后，再对样品表进行更新。

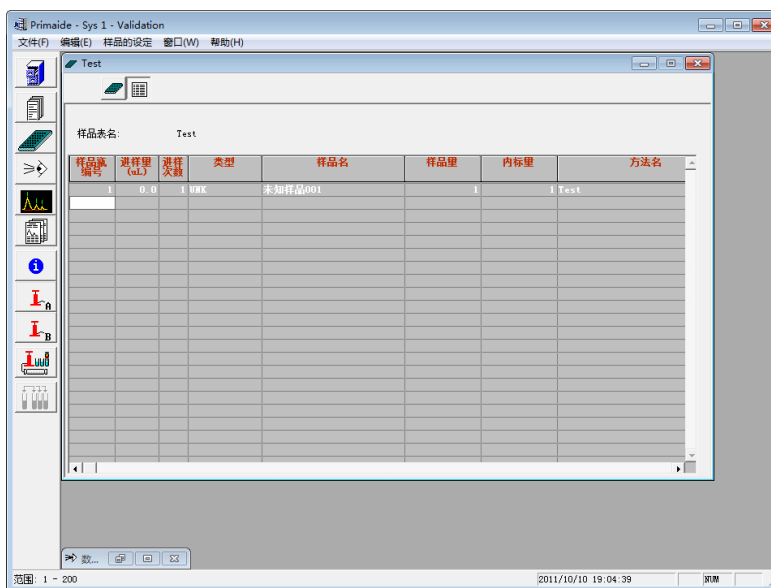
- ④ 双击“数据采集”图标(最小化后的数据采集窗口)使之恢复到原来的大小。

6. 3. 5 样品表中指定行的数据采集

要从样品表的任意行开始采集数据（连续分析，单分析），需要在“样品表编辑”窗口指定开始行。

要指定开始行：

- ① 选择样品表，开始监测。
- ② 要指定数据采集的开始行，先要在数据采集窗口单击样品表设定图标。
- ③ 数据采集窗口变为最小，执行中的样品表将显示。在“样品表编辑表”窗口指定（呈反白显示）“开始行”。



注： 如果指定的行中不存在方法时，数据采集将以指定行的前一个方法开始进行。如果方法名存在的行中设定了色谱柱的平衡化时间与噪音测试，数据采集将会自动执行。

- ④ 返回到数据采集窗口，单击“连续分析的**开始**”（或是“单分析的**开始**”）按钮显示“从被选行开始测定”对话框。



- ⑤ 单击“从被选行开始测定”按钮开始测定。要从第一行开始采集数据，请单击“从第一行开始测定”按钮。

6.3.6 连续分析未完成的数据系列的数据再处理

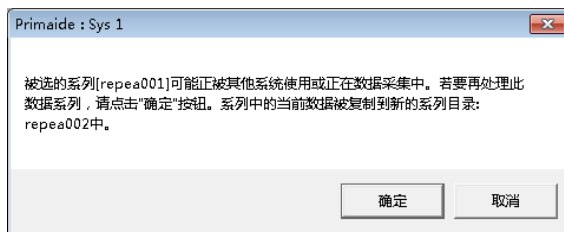
连续序列中未完成的数据系列进行再处理时：将采集的所有数据复制到新建数据系列中，然后以新建的数据系列来进行处理。

要对连续分析中未完成的数据系列进行再处理：

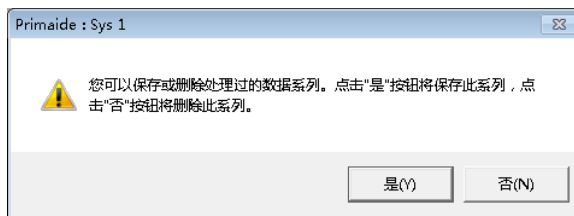
- ① 在数据采集窗口单击“数据的再处理”图标打开“打开文件”对话框，点击连续分析中的任意的数据系列。要确认连续测定中的数据系列名称，请在数据采集窗口中的“系统状态”中确认。



- ② 单击 **确定** 按钮将所有采集的数据复制到新的建数据系列中，同时打开进样表。关于进样表，请参照“第7章 进样表窗口的功能与操作”。



- ③ 关闭进样表时，可以对新建数据系列进行保存或删除。删除处理将删除连续分析未完成的数据系列相关的所有文件。



6.4 在线数据处理

数据测定开始后，根据方法文件的报告项目生成·输出报告。

每次测定结束后，数据处理都会立刻自动执行。根据方法文件的设定，数据处理包括以下内容：

- ① 作成报告
- ② 统计计算
- ③ 生成标准曲线
- ④ 空白校正
- ⑤ DAD 数据处理
- ⑥ 2 个通道的数据处理

下面是对各个功能的说明。

(1) 报告的生成与输出

“每次进样打印”指的是每次进样测定结束后作成·输出报告。“系列打印”指的是连续分析结束后作成·输出报告。

(2) 统计计算

特定样品瓶的反复进样结束后，立刻对反复进样进行统计计算；而未知样品样品瓶的统计计算则是在连续分析结束后进行。

(3) 生成标准曲线

STD 样品（标准样品）测定结束后，如果下一次的进样样品是 UNK（未知样品）时，将生成标准曲线（只限于指定了方法的情况下）。标准曲线系数则会自动写入执行中的方法系数表中以便于定量未知样品时使用。

Primaide 系统管理除了生成标准曲线之外，还自动对每个成分的平均保留时间进行计算，然后将计算结果与成分表的保留时间自动替换。其次，这个功能还可以对应连续分析中保留时间的变化。在新的 STD / UNK 循环中，用循环的 STD 样品测定结果来生成标准曲线。新标准曲线的结果被写入（与旧结果替换）执行中方法系数表以便于定量计算时使用。

(4) 空白校正

在系列第一行有空白样品进样时，对每个数据都要进行空白校正(具体信息请参照“14.7 空白校正”)。

如果开始的样品不是空白类型时，对同一系列中的空白不进行空白校正。

(5) DAD 数据处理

测定中的 DAD 数据处理指的是根据 DAD 数据处理参数来提取色谱。

从 DAD 数据中不提取色谱时则只生成简单的报告(无定量)。

空白校正与提取色谱同时进行，首先用 DAD 数据进行空白校正后，再从校正的数据中提取色谱。

要提取多个固定波长色谱时，用最初提取的色谱来进行定量计算。在测定中，如果在方法中设定了“输出报告后删除 DAD 数据”，提取色谱后，DAD 数据会被删除。


如果设定了“检索数据库”，在成分表中指定了功能的成分将自动进行数据库检索并输出报告。

(6) 2 通道 (1ch&2ch) 的数据处理

在 1ch&2ch 中采集数据时，需要在两个通道的数据处理都结束后才可以打印报告。一个数据系列只生成一个进样表。

即使在测定中打印失败(比如，打印机的纸张不足)，数据采集和数据处理也将继续进行，原始数据和报告将会保存下来。

6. 5 开始快速分析

单击主工具栏的快速分析的开始图标  显示快速分析开始的对话框。

6. 5. 1 设定参数

选择使用分析文件名及样品架名，设定测定样品表参数后，与方法文件相同的样品表将自动生成，并使用该样品表进行数据采集。



- 分析文件名 : 选择要使用的分析方法文件。
- 样品架名 : 选择要使用的样品架参数。
- 创建标准曲线 : 复选框选为“ON”时，用标准样品数据生成标准曲线。如选为“OFF”时，用方法文件的标准曲线来计算浓度。
- 标准曲线的级别数 : 请输入生成标准曲线时使用的标准样品瓶数。
- UNK 总数 : 请输入未知样品的样品瓶数。
- 进样量 : 请输入进样量 (μL)。

以上的参数设置完毕后，单击 **确定** 按钮将自动生成样品表并显示数据采集窗口。

样品表的其它参数为：

- 平衡化时间 : 0 min
- 进样次数 : 一次
- 空白数据测定 : 无
- 容许噪音 : 8000
- 容许漂移 : 30000

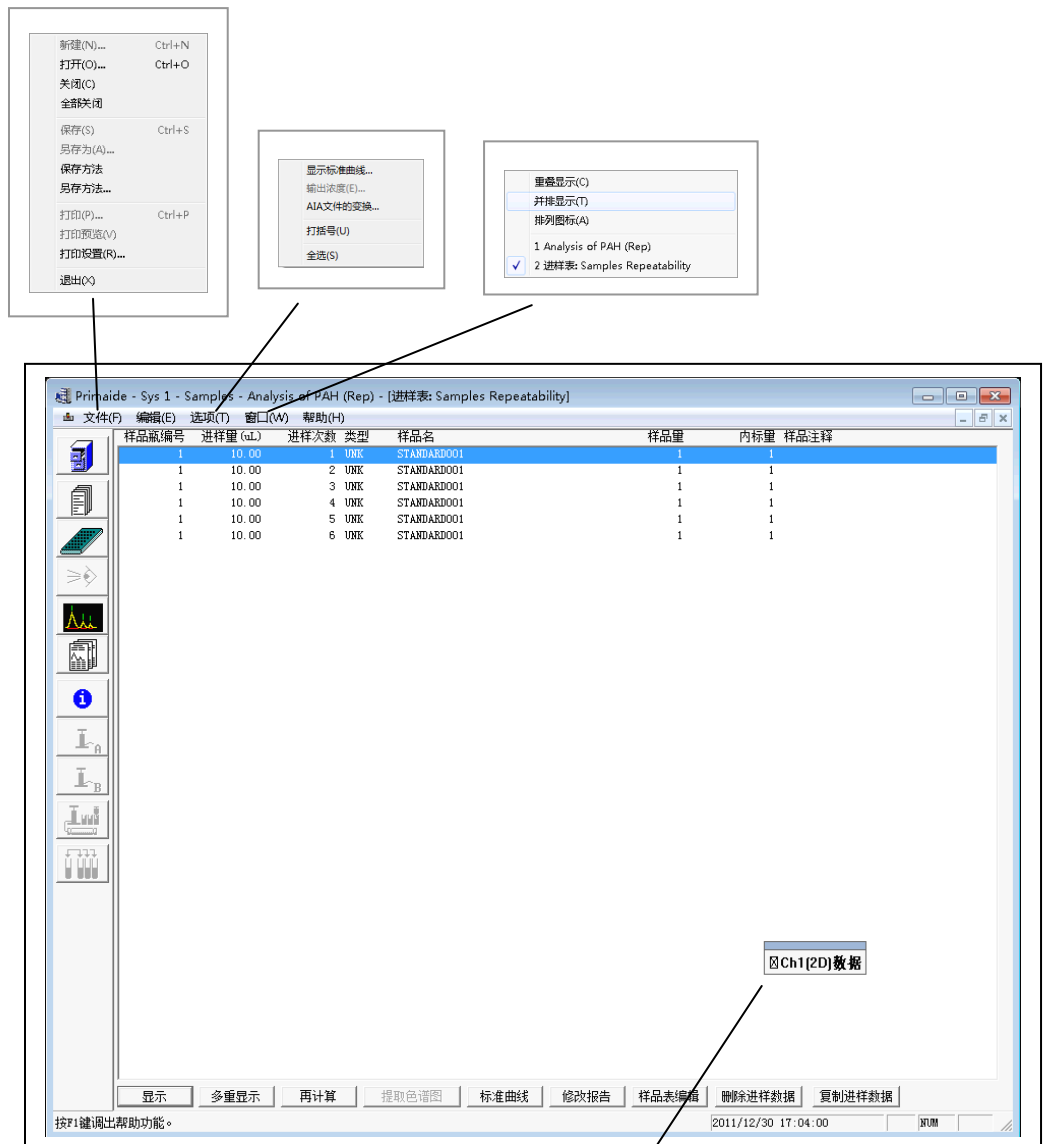
注：快速分析开始后，与分析文件同名的样品表将会生成。如果同一名称的样品表已存在时，将会被覆盖。
因此，如果要用相同名称来保存样品表时，请使用“打开文件”对话框的复制功能，用其它名称来保存。

第7章 进样表窗口的功能与操作

进样表窗口是选择再处理数据与指定再处理内容的窗口。进样表中显示的数据是连续分析中采集的数据（数据系列）。

7.1 进样表窗口的构成

进样表窗口的构成如下所示：



指定数据类型的漂浮框

菜单命令以及相关的图标功能如下所示。

7.1.1 文件菜单

文件菜单中有以下命令。

打开

打开[打开文件]对话框，使已保存的方法文件、样品表文件与数据系列处于可打开的状态。

全部关闭

无论窗口是否处在使用中，关闭所有打开的窗口。这是为了在任意窗口进行修改时，可以保存修改的内容。

作为例外，数据采集窗口是“数据采集中”时，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，关闭所有其它窗口。

保存方法

保存有效的方法文件。如果有“输入适当的方法文件参数”信息显示时，回答所有信息后，对硬盘中前一次的文件内容进行覆盖。

另存方法

打开“另存为”对话框，设定分析文件名与应用程序名。

打印

将显示的方法文件以文本文件的形式打印出来。

打印预览

显示打印信息，指定打印页数。

打印设置

设置打印机、纸张方向（纵向或横向）、纸张大小（信封，Legal，A4）以及纸张来源的选择。

退出

关闭 Primaide 系统管理。数据采集中不可以使用退出指令。请先关闭数据采集监测器后，再进行本操作。

7.1.2 选项菜单

选项菜单中有以下命令：

显示标准曲线

打开标准曲线窗口，并根据方法文件的标准曲线表显示标准曲线。生成标准曲线的数据不存在时，屏幕显示为空白。

AIA 文件的变换

AIA 是美国分析仪器工业协会提倡的色谱数据通用格式。Primaide 系统管理可以将原始的数据变换为 AIA 格式。关于具体的信息，请参照“附录 5 AIA 格式数据的生成”。

打括号

用括号方式进行再计算。括号方式指的是在进行系列分析时，比如“STD1, UNK, UNK, UNK, STD1...”，用最初的 STD1 和第二次的 STD1 的平均值来作成标准曲线，并定量 UNK 样品。这个方式只限于数据再处理模式下可以使用。

全选

选择数据进样表中的所有数据。

7.1.3 窗口菜单

窗口菜单中显示的是当前打开的窗口名。指定的窗口显示在最前面。

7.2 进样表窗口的操作

- 7.2.1 打开进样表窗口 (1) 单击“数据的再处理”图标打开“打开文件”窗口（关于打开文件窗口的功能与操作，请参照“3.4 打开文件对话框”）。

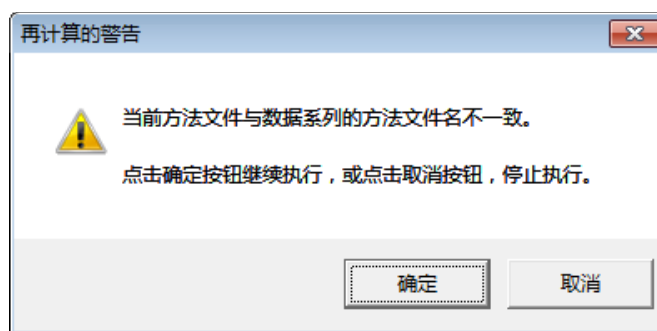


- (2) 确认在文件类型框中选择了数据，并在应用程序列表框中选择了正确的应用程序。
- (3) 请在“数据名”框中选择数据系列文件，单击确定按钮。
- (4) 方法文件的检测器构成与数据系列文件的检测器构成进行比较。

用下面的方法来决定进行比较的方法文件：

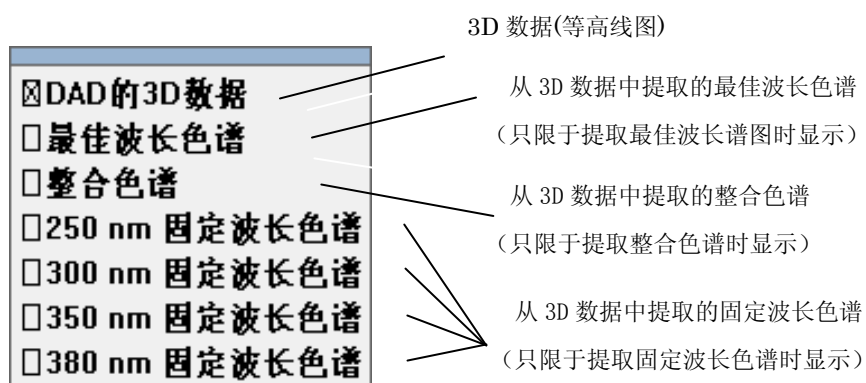
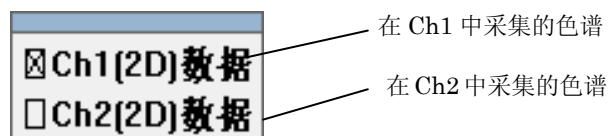
- 方法文件已打开时：与打开的方法文件进行比较。
- 方法文件未打开时：在数据系列文件中注册（数据采集时使用过的）的方法文件将自动打开并与之进行比较。

上述以外的情况时，单击再计算按钮显示以下的“再计算警告”对话框。



单击确定按钮后，用打开的方法文件进行再计算。单击取消按钮取消再计算。

- (5) 在进样表窗口显示数据指定用浮漂工具框。
在浮漂工具框中显示有数据系列的所有数据类型。数据类型随着数据再处理将自动更新。请在该框中指定再处理用数据类型。



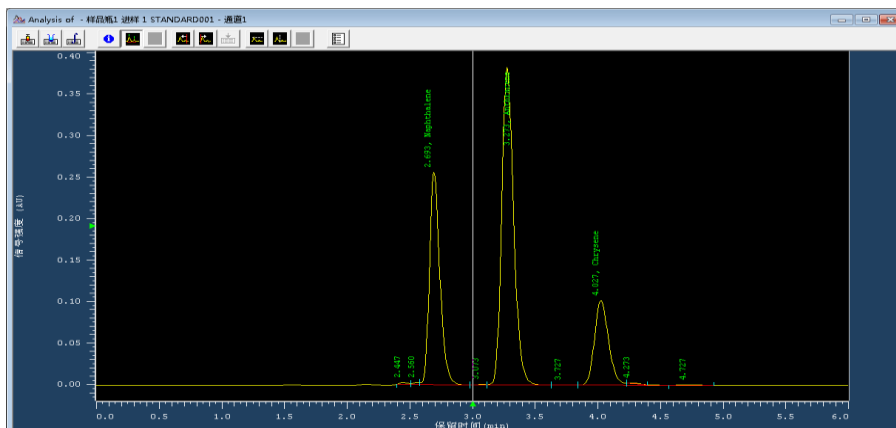
7.2.2 进样表的操作

单击进样表中的“按钮”可以访问数据处理功能与数据处理相关的窗口。数据处理功能与数据处理相关的窗口如下所示：

显示

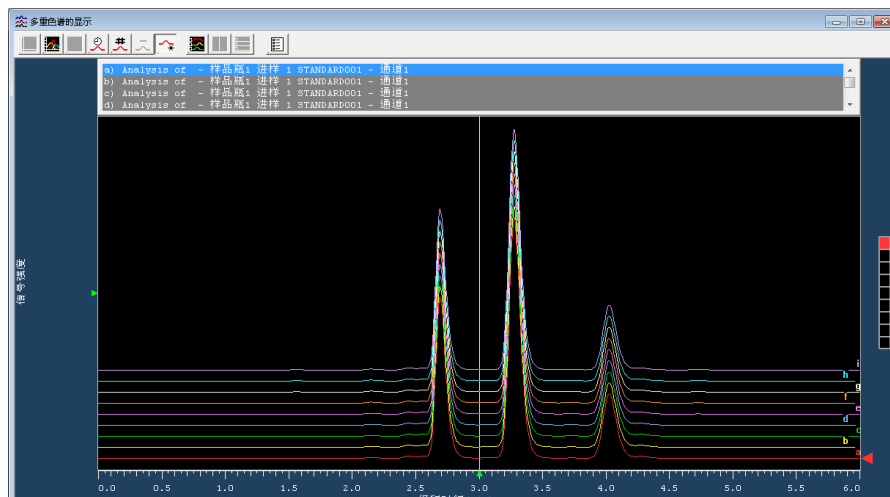
打开进样表窗口显示在进样表中指定的色谱。色谱的类型则要在漂浮工具框中指定。

(请参照“第8章进样表窗口色谱”。)



多重显示

同时显示多个色谱（最多可以显示 20 条）。(请参照“第8章进样表窗口-色谱-”。)



再计算

对在表中选择的数据进行再计算。但是，如果在漂浮工具框中指定的是以下几种情况时，再计算按钮呈无效显示（灰色显示）。

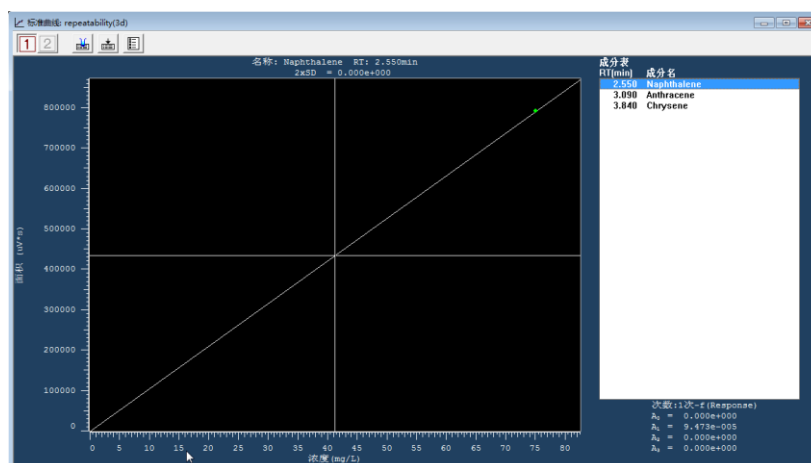
- 只指定 DAD 数据
- 指定 DAD 数据与提取色谱
- 指定多个要提取色谱的数据
- 没有指定

提取色谱图

从 DAD 数据提取色谱(在方法文件中指定的色谱类型(固定波长、最佳波长、整合化))。进样表窗口处于打开时呈无效显示(灰色显示)。

标准曲线

显示成分表中各个成分的标准曲线。(请参照“7.3 标准曲线窗口”。)



显示报告

显示以再计算生成的报告。没有报告时按钮呈无效显示。(请参照“7.4 报告显示窗口”。)

样品表编辑

在表中可以修正样品类型、样品名、样品量、内标量与样品注释。单击保存按钮，将修改的内容保存到进样表中。

The screenshot shows a window titled '进样表: Validation 0006'. It contains a table with the following data:

样品编号	进样量 (uL)	样品量的进样次数	类型	样品名	样品量
1	0.00	1	XXX	未知样品001	1
2	0.00	1	XXX	未知样品001	1

At the bottom, there are buttons for '保存' (Save) and '取消' (Cancel).

注: 进样表的编辑, 只限于 Primaide 环境设定程序的 GLP 选项“进样表的订正/更新”设为“ON”时有效。

删除进样数据

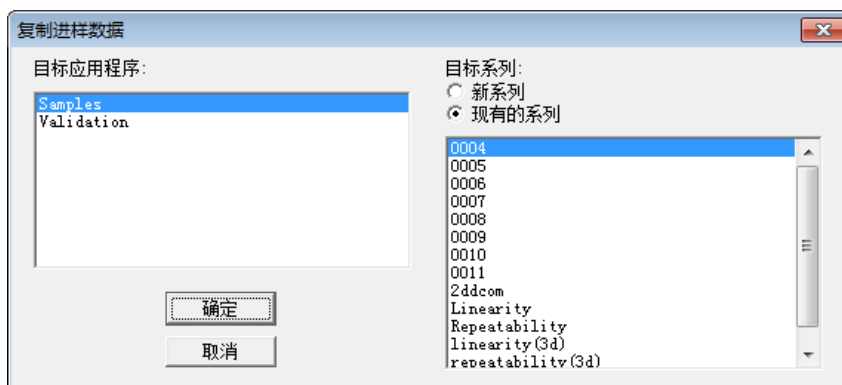
删除指定的数据与数据所属的所有数据类型。

**复制进样数据**

将指定的进样数据以及数据所属的所有数据类型复制到其它数据系列中。

要将数据复制到已存在的数据系列中，必须满足以下限制事项：

- (1) 数据的系统名一致。
- (2) 检测器的类型与控制参数一致。
- (3) 数据采集参数一致。
 - Ch1 数据/ Ch2 数据：“采集时间”之外的所有数据采集参数必须一致。
 - DAD 数据：“采集时间”与“监测波长”之外的所有数据参数必须一致。
 - 不能复制提取的色谱。请复制 DAD 数据后，再进行提取。



7.3 标准曲线窗口

在标准曲线窗口根据打开的方法文件的标准曲线系数表显示标准曲线。

7.3.1 标准曲线窗口的构成

菜单命令以及相关的图表的功能如下所示：

显示选项(O)...

- 显示Ch1标准曲线(1)
- 显示Ch2标准曲线(2)
- 1次-f(Response)(L)
- 1次-f(Conc)(I)
- 2次(Q)
- 3次(C)
- 通过(0,0)(F)
- 1.0
- Conc
- 1/Conc
- 1/(Conc**2)
- 更新标准曲线(U)

显示成分表(O)

相关系数的平方值

校准线(成分)选择列表

校准线系数

样品编号	进样量 (μL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	样品名称
1	10.00	2	STD	STANDARD001	1	1	
1	10.00	3	STD	STANDARD001	1	1	
1	10.00	4	STD	STANDARD001	1	1	
1	10.00	5	STD	STANDARD001	1	1	
1	10.00	6	STD	STANDARD001	1	1	

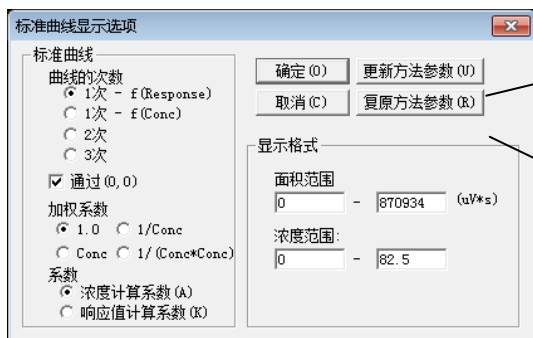
成分名	RT(min)	成分名
2.530	Naphthalene	
3.050	Anthracene	
3.840	Chrysene	

次数: 1次-f(Response)
 $A_0 = 0.000e+000$
 $A_1 = 9.473e-005$
 $A_2 = 0.000e+000$
 $A_3 = 0.000e+000$

(1) 选项菜单

显示选项：

显示标准曲线选项框。在显示选项中可以变更标准曲线的显示范围与标准曲线参数。



将变更值保存到方法文件中

以方法文件的设定值来显示

显示 Ch1 标准曲线/ Ch2 标准曲线：

切换要显示的标准曲线。

1 次-f (Response) / 1 次-f (Conc) / 2 次/3 次
显示更新过次数后的标准曲线。

通过

显示被强制性通过原点的标准曲线。

1/Conc / (/Conc) / (1/ (Conc*Conc))

显示变更过加权系数的标准曲线。

浓度计算系数 A/响应值计算系数 K

指定 1 次-标准曲线系数。

更新标准曲线：

变更任意成分的标准曲线参数（标准曲线的次数，是否通过原点）与浓度表值后进行再计算的结果（系数）可以转送到方法文件标准曲线系数表内。

(2) 显示菜单

成分表：

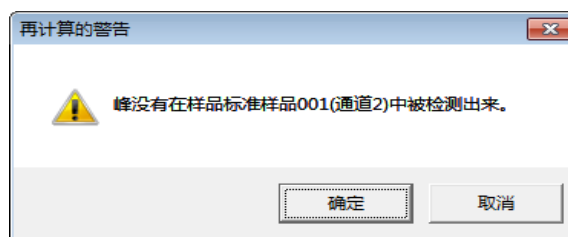
将从打开的方法文件中复制的成分表显示在表格区域内。

7.3.2 生成与修改标准曲线

(1) 生成标准曲线

在进样表中指定 STD 进样数据，单击**再计算**按钮生成标准曲线，同时将计算结果保存到使用中方法的系数表中。每次单击**再计算**按钮都会生成新的标准曲线。标准曲线的标准数据点数由数据进样表中指定的 STD 型样品数来决定。

如有检测不出的成分时，会显示以下信息，单击**确定**按钮只用定量峰生成标准曲线。



(2) 用特定数据生成标准曲线

只用特定数据生成标准曲线时，请指定使用的 STD 进样数据，再单击**再计算**按钮，只生成用特定 STD 数据生成的标准曲线。标准曲线系数被保存到方法文件系数表中。

同时计算 Ch1 与 Ch2 的色谱（也可以是提取色谱）时，在漂浮工具框中指定色谱后，再单击**再计算**按钮。

(3) 显示标准曲线

请在进样表中单击**标准曲线**按钮，显示根据数据系列进行计算后生成的最新的标准曲线。

在成分表中列有 RT（保留时间）与各成分的名称，单击成分名可以显示与该成分相对应的标准曲线。

(4) 通过编辑成分表更新标准曲线

因成分表中设定的 RT 与容许宽度不当，检测不出峰，也不能生成标准曲线时，请先更新参数后，再计算标准曲线。

请按以下步骤进行再计算：

- ① 请单击成分表的图标，编辑用成分表将显示在窗口下方。
- ② 编辑结束后，单击更新方法图标，回到标准曲线窗口。使用变更后的成分表进行再计算后，显示新的标准曲线。

(5) 通过变更浓度值的设定来变更标准曲线

计算标准曲线使用当前方法的成分表中的浓度值。当前方法文件设定值不当时，需要变更浓度值。

请按以下步骤更新浓度表，计算标准曲线。

- ① 打开使用中的浓度表。
- ② 变更浓度值后，单击更新方法图标。
- ③ 指定显示标准曲线后，计算出新的标准曲线。

(6) 变更标准曲线参数

标准曲线是根据当前方法的标准曲线参数（标准曲线的次数，是否通过原点）来计算的。当前方法参数不正确时，请按照以下步骤进行再计算：

- ① 打开使用中方法文件的定量计算方法窗口。
- ② 更新标准曲线参数后，单击更新方法图标。
- ③ 指定显示标准曲线后，计算并显示新的标准曲线。

(7) 保存任意成分系数

因任意成分的标准曲线参数（标准曲线的次数，是否通过原点）的变更与浓度表值的变更而得到的再计算结果（系数）可以转送到方法文件标准曲线系数表中。请按以下步骤操作：

- ① 指定并显示要变更的标准曲线。

标准曲线浓度表值（或者是标准曲线参数）更新后，单击更新方法图标。

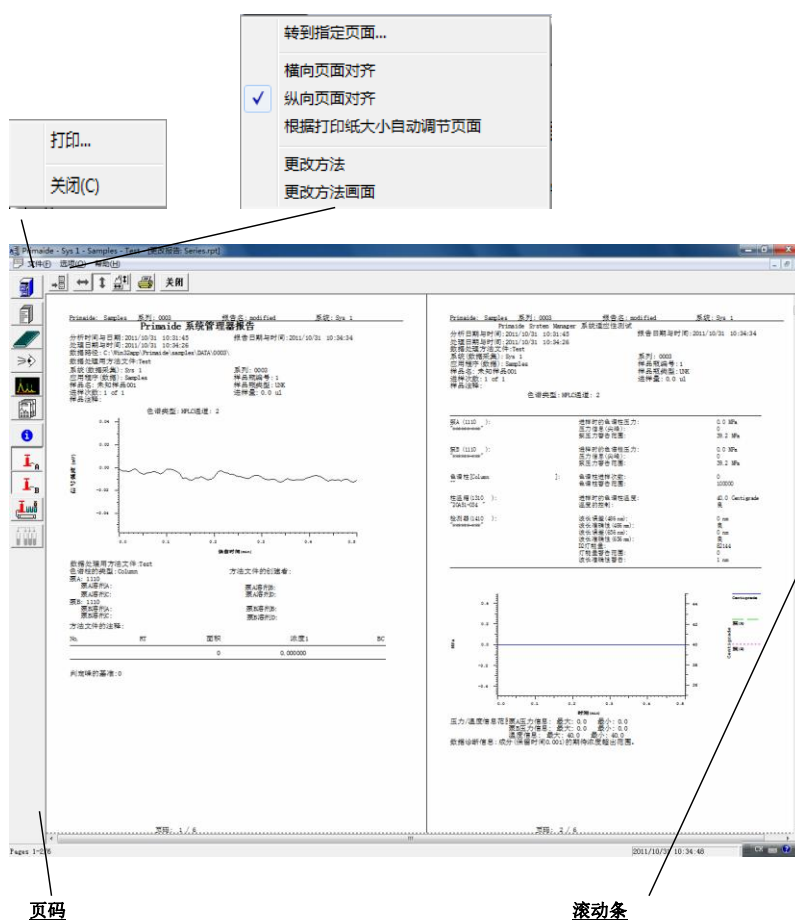
- ② 进行再计算后显示标准曲线，请点击标准曲线更新图标更新标准曲线。只有指定的成分系数被转送到使用中方法的标准曲线系数表中，并对以前的数据进行覆盖。

7.4 报告显示窗口

报告显示窗口是为了确认再计算处理结果而显示的报告窗口。
关于在测定中生成的报告结果，可以在“报告预览窗口”中确认。

7.4.1 报告显示窗口的构成

报告显示窗口的构成如下所示。

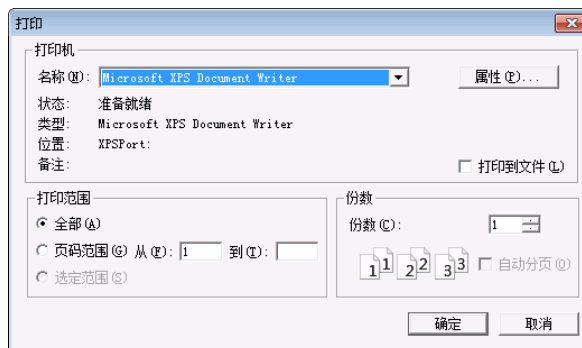


菜单命令与相关图标功能如下所示：

(1) 文件菜单



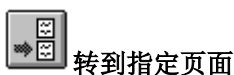
打印显示的报告。可以指定打印页数。



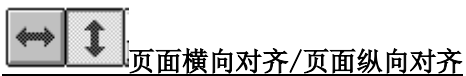
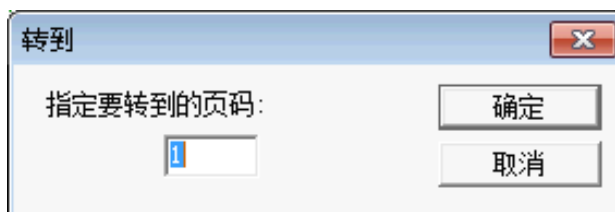
关闭

关闭报告显示窗口

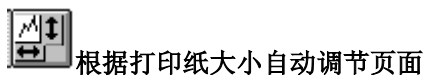
(2) 选项菜单



输入页码后，可以显示报告的任意页面。



与水平方向页面对齐：与屏面的水平方向页面对齐显示报告。显示为 1 页。
与垂直方向页面对齐：与屏面的垂直方向页面对齐显示报告。显示为 2 页。



根据 Windows 打印管理者设定的打印尺寸来显示报告。

更改方法(文件)

打开方法文件设定窗口。

更改方法画面

打开方法文件设定窗口与报告输出编辑画面。

7.5 再计算处理

7.5.1 再计算处理

数据再计算处理，是通过单击再计算按钮，根据指定方法文件的参数来执行。处理内容如下所示：

1. 用波形处理参数表检测出峰，确定基线。
2. 根据方法文件的设定，计算峰高或面积。
3. 认定成分表中列出的成分。
4. 执行每个成分的功能（相对 RT (RRT)、校正 RT (CRT)、系统适应性测试 (SST)）。
5. 执行数据诊断，生成信赖性报告。
6. 根据使用中的方法定量计算法，生成标准曲线。
7. 计算未知样品的成分浓度。
8. 统计计算
9. 根据方法报告输出项目与报告画面模版生成报告。

同时选择 Ch1 与 Ch2 时，在每个通道里都进行上述处理，并生成报告。

只有在方法文件中指定了内标法、外标法与修正百分比法，并在进样表中指定了 STD 类型样品时，生成标准曲线的同时还可以对 UNK 样品进行定量计算。指定内标法时，必须在成分表里指定内部标准成分。

再计算处理的报告文件名是以进样表的“数据系列名”为“报告名”生成。用不同的定量计算参数对同一数据进行再处理时，必须在“打开文件”对话框中变更报告文件的“报告名”。如果“报告名”文件已存在时，再计算结果将覆盖原文件。

报告中输出的标准曲线图包括成分表中所有成分的标准曲线。没有被认定的成分，将没有标准曲线输出。

指定统计计算功能时，每种样品都会有统计计算结果生成。所有 UNK 样品的统计计算结果将在报告的最后生成。

7.5.2 执行再计算

按以下步骤进行再计算：

- ① 在进样表中，用鼠标指示符点击需要再计算的数据。
要指定多数个数据时，请边按 Ctrl 键，按顺序点击数据。指定连续范围时，请边按 Shift 键，点击最上面数据与最下面的数据。



数据系列进行再计算时，首先生成标准曲线，再进行定量计算。只有再计算 UNK 数据时，才可以使用方法文件已生成的标准曲线来进行定量计算。

- ② 显示再计算处理的进行状况。单击 **取消** 按钮中止再计算处理，同时清除处理内容。



- ③ 再计算处理结束后，数据系列以“报告名”输出。
- ④ 要保存用不同的定量计算参数对同一数据进行再处理的结果，必须在“打开文件”对话框中变更“报告名”为“Modified”以外的名称。变更结束后，再进行再计算。

第8章 数据再处理窗口-色谱图-

数据再处理窗口是对色谱图（2D 数据）进行再处理的窗口。为了定量计算可以对色谱图进行数据的再处理。3D 数据不可以进行定量计算处理。从 3D 数据中提取的色谱图可以进行定量计算。

关于 3 维数据处理，请参照“第 12 章 数据再处理窗口-3D 数据-”。

8.1 数据再处理窗口的构成

菜单命令以及相关图标功能如下所示。

新建(N)... Ctrl+N
打开(O)... Ctrl+O
关闭(C)
全部关闭
保存(S) Ctrl+S
另存为(A)...
保存方法
另存方法...
打印(P)... Ctrl+P
打印预览(V)
打印设置(R)...
退出(X)

撤销(U) Ctrl+Z
剪切(T) Ctrl+X
复制(C) Ctrl+C
粘贴(P) Ctrl+V
编辑颜色(R)...

再处理(R)
添加峰(A)...
删除峰(M)...
保存手动积分(S)
删除手动积分(D)
输出保留时间
以ASCII码形式输出(X)...

自动标度(A)
下一个(N) Ctrl+右箭头
前一个(P) Ctrl+左箭头
峰的信息(I)
峰宽度量(W)
显示逻辑(O)...

光谱数据库
查询数据库...
添加到数据库...
清除数据库中光谱
查询逆向数据库...

重叠显示(C)
并排显示(T)
排列图标(A)
1 000
2 进样表: Validation 0026
3 000 - 样品瓶1 进样 1 标准样品001 - 通道2

表的显示领域
时间光标

样品名称	进样量 (μL)	进样温度 (°C)	样品名	进样量	进样温度	进样次数
1	10.00	2	STANDARD01	1	1	1
1	10.00	3	STANDARD01	1	1	1
1	10.00	4	STANDARD01	1	1	1
1	10.00	5	STANDARD01	1	1	1
1	10.00	6	STANDARD01	1	1	1

8.1.1 文件菜单 文件菜单中有以下执行命令：

打开

打开打开文件窗口，使已保存的方法文件、样品表文件和数据系列文件处于可打开的状态。

全部关闭

无论窗口是否处在使用中，关闭所有打开的窗口。这是为了在任意窗口进行修改时，可以保存修改的内容。

作为例外，数据采集窗口是“数据采集中”时，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，所有的窗口全部关闭。

保存方法

保存有效的样品表。如果有“输入适当的样品表参数”信息显示时，回答所有信息后，对硬盘中已存的文件内容进行覆盖。

另存方法

确认了样品表文件参数后，打开“另存为”对话框，可以指定方法文件名与应用程序。

打印

将使用中的方法文件以文本文件的形式打印出来。

打印预览

显示打印信息，指定打印页数。

打印设置

设置打印机，纸张方向（纵向或横向），纸张大小（信封，legal，A4）以及纸张来源的选择。

退出

关闭 Primaide 系统管理。数据采集中不可以使用退出指令。请先关闭数据采集监测器后，再进行本操作。

8. 1. 2 编辑菜单

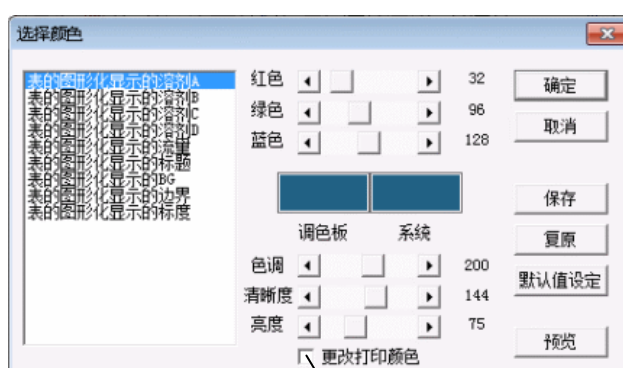
编辑菜单中有以下执行命令：

编辑颜色

打开“选择颜色”对话框，改变显示中的颜色调色板。与表示的窗口相关的项目将会列在对话框中。

选择“更改打印颜色”为有效，可以编辑印刷用的调色板。

保存调色板后，改变的颜色会在显示栏里反映出来。



显示为打印时的颜色

8. 1. 3 数据处理 菜单

检测纯度

对从 3D 数据中提取的色谱进行峰纯度检测。

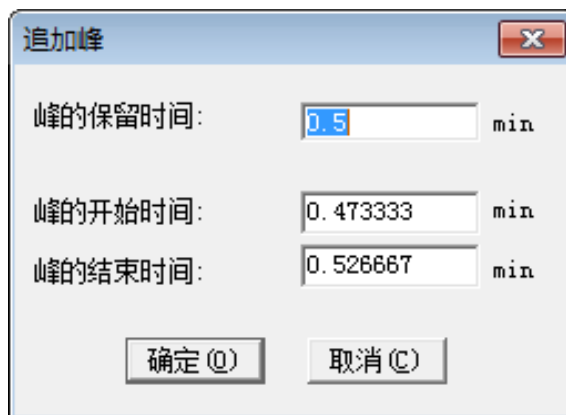
再处理

以正在使用中的方法文件来进行数据处理时，使用该指令。结果会反映到屏幕上。再处理包括以下内容。

- 峰的检测
- 基线的确定

追加峰

对于没有自动检测出来的峰，可以通过手动指定。峰追加在时间光标位置。通过手动积分基线，可以计算追加峰的高度与面积。



请按以下规则来追加峰的起点/峰的终点：

- ① 追加峰的起点/终点时间为追加峰保留时间的 $\pm 5\%$ （开始： -5% ，结束： $+5\%$ ）。
- ② 附近有自动检出峰时，将自动检出峰的起点（终点）作为追加峰的起点（结束点）。
- ③ 在自动检出峰的起点—终点间指定追加峰时，新的起点追加在自动检出峰的起点—终点间，这个点作为自动检出峰和追加峰的起点（终点）。

删除峰

删除在时间光标上指定的峰，同时删除峰的起点与终点。

保存手动积分

该命令主要用于保存手动校正基线与重叠结果。保存的重叠结果与基线将在色谱再计算时使用。

此命令不可用于从 DAD 数据里提取的临时色谱。

删除手动积分

删除手动校正基线，复原自动检测出的基线。该命令只适用于保存手动校正基线。



输出保留时间(到 RT 表)

该命令是将鼠标所在位置的保留时间转送到波形处理参数表以及成分表时使用。

该命令只能在波形处理时间表以及成分表显示于表格区域内时使用。

以 ASCII 码形式输出

将在进样表窗口显示的时间范围内的色谱数据，以 ASCII 码形式的文件输出。通过扩大或缩小时间轴来变更显示时间范围时，与色谱显示相同时间范围的色谱数据将以 ASCII 码形式文件输出。



输出文件的扩展名是“ctx”。ASCII 码形式文件的色谱数据（保留时间与信号值）以“分号”来区分。

8.1.4 选项菜单

在选项菜单中有以下可以使用的命令：

自动标度

调整吸光度标度以显示最高峰。零偏移变更与负的数据点无法定标。

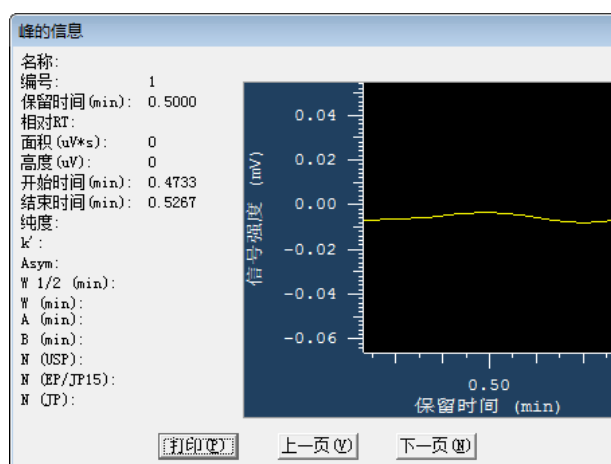


前一个峰/下一个峰

光标移动到前一个峰/下一个峰。

峰的信息

在色谱显示窗口显示有峰信息漂浮框，框内显示的是时间光标位置的峰信息，再次选择该名令可以关闭峰信息浮动框。



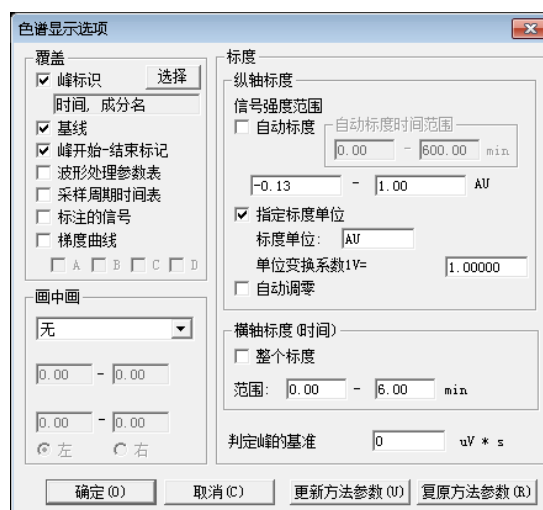
容许宽度

表示的是在色谱显示屏幕上认定峰时的保留时间的容许宽度范围（在成分表中设定的容许宽度范围）。



显示选项

显示数据采集窗口的“色谱显示选项”对话框。在对话框中，可以变更色谱显示标度（信号强度与时间范围）。

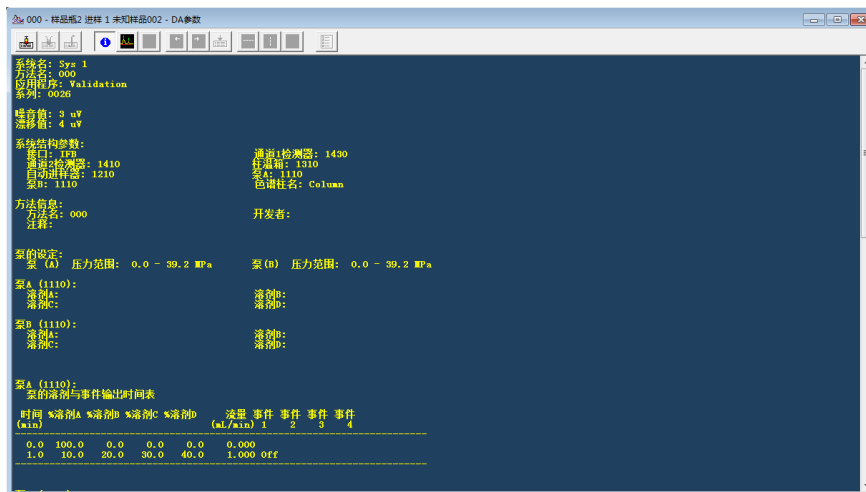


8.1.5 显示菜单



数据采集信息

表示与显示中的色谱相关的数据采集信息窗口。数据采集信息包括：色谱数据采集时的设备参数、样品进样参数、连续分析的自动噪音测试结果以及测定中的错误信息。



处理过的色谱

显示处理过的色谱窗口。



进样表

在表显示区域内显示进样表。



成分表

在表显示区域内显示从打开的方法文件中复制的成分表。



波形处理参数表

在表显示区域内显示从打开的方法中复制的波形处理参数表。

8.1.6 窗口菜单

显示当前打开的窗口名。指定多个进样时，对应每个进样数据的色谱窗口会重叠显示出来。可以指定显示在最前面的色谱窗口。

8.1.7 手动基线 处理图标



删除基线:

删除指定的基线。



新的基线:

插入新的基线。在已经有基线存在的位置不可以插入新的基线。



新的垂直线:

插入新的分割线。在没有基线的位置不可以插入新的分割线。

8.2 设定·修改数据处理参数

在数据处理窗口，可以确认色谱基线，并可以对基线进行图形编辑。还可以确认峰信息（峰高，面积，保留时间）以及峰的纯度（只限于 DAD 数据）。在确认色谱数据处理结果的同时，可以设定·修改数据参数并使之处于最适状态。使用文件菜单的“保存方法”或是“另存方法”命令将设定值与修改值保存到方法中。

8.2.1 成分表/波形处理参数表

可以在数据处理窗口指定的峰 RT（保留时间）转送到数据处理窗口的“成分表”以及“波形处理参数表”中。

按以下步骤来转送指定峰的保留时间：

- (1) 单击“成分表”图标或“波形处理参数表”图标，显示从使用中方法文件中复制得到的表。

RT (min)	最大数值 (%)	成分名	功能1	功能2	功能3	分子量	成分系数	保持温度 (K)	液相范围 (K)
10.00	10.00					0.000	1.000		

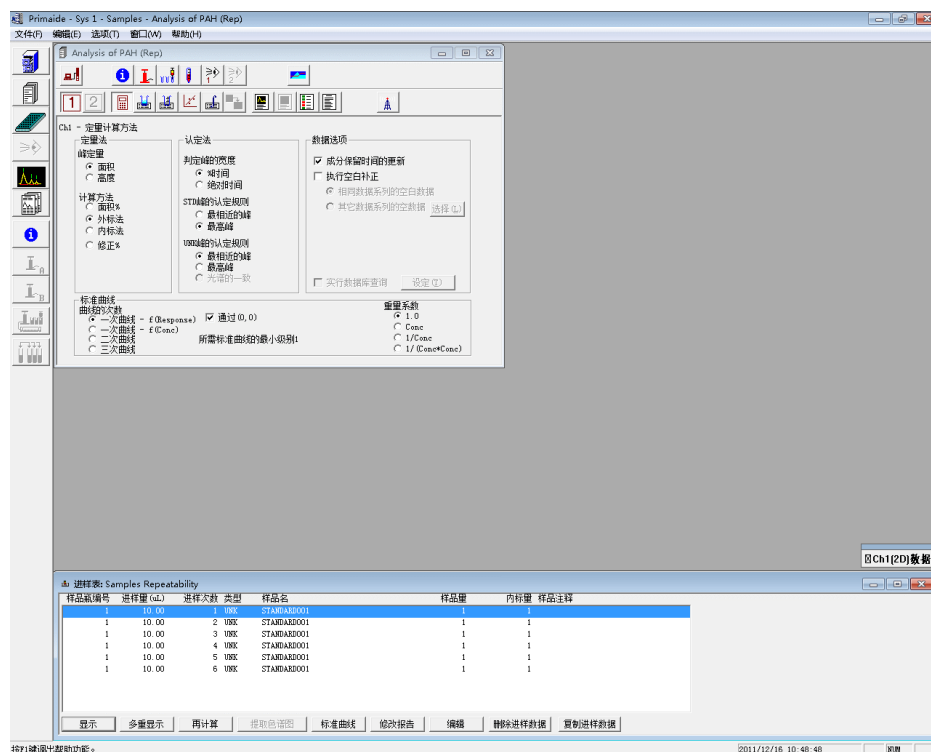
保留 (min)	功能	数值	状态
0.00	扫描	5	OFF
0.00	平滑	10	OFF
0.00	基线校正	0	

- (2) 返回到色谱窗口，将时间光标线对准要转送的峰的保留时间。使用“下一个峰”与“前一个峰”命令可以对峰进行扫描。
- (3) 指定了要转送 RT（保留时间）的峰之后，再在成分表中指定转送的目的行。
- (4) 执行“转送 RT 到表”命令，指定峰的保留时间会被复制到成分表中。
- (5) 设定并修改其它的表的参数。
- (6) 单击更新方法图标。变更内容被复制到进样表窗口后，色谱将进行再处理·再显示。

8. 2. 2 其它数据处理参数

对成分表，波形处理时间表以外的数据处理参数在方法文件窗口进行设定、修改。

(1) 在窗口菜单指定方法文件，并将方法文件显示在窗口的最前面。



(2) 在方法文件窗口设定、修改数据处理参数。

(3) 单击“更新方法文件”图标将变更内容复制到进样表窗口，对色谱进行再处理后再显示。

8. 2. 3 峰处理的手动积分

对于根据当前方法的波形处理参数表自动生成的“基线”与“峰的开始/结束标记”可以进行手动校正处理。

经过手动校正的峰，峰标识的颜色将会发生变化，可以与自动处理的峰区别开来。

请按以下步骤来进行手动处理：

(1) 指定基线

- ① 用鼠标单击要处理的基线。
- ② 单击指定的基线后，基线变为绿色。
- ③ 要想解除基线的指定，请再一次点击基线（绿色）。

(2) 变更已存在的基线

- ① 指定基线。
- ② 拖动基线的峰开始（或者结束标记），移动到任意位置。

(3) 删除基线

- ① 选择基线。
- ② 单击基线删除图标或者选择编辑菜单的“剪切”命令，或按键盘上 **Delete** 键。

注释：如果误删了基线，只要立刻（在进行其它操作前）从编辑菜单中选择“撤销”命令，就可以恢复到原来的状态。

(4) 插入新建基线

- ① 单击新基线插入图标，确认鼠标指示符形状的变化。
- ② 将鼠标指示符放到任意峰的开始位置。
- ③ 单击拖动鼠标指示符到任意一个峰的结束点。放开鼠标后，会插入新的基线。

注释：在没有峰被识别的区域无法插入基线。如果峰已存在基线或是与相邻的基线重叠时，也无法插入新的基线。但是，如果已存在的基线只是进行脱尾处理来分割辅助峰的，就可以插入新的基线。

(5) 分离重叠峰

- ① 单击新的分割线插入图标。确认鼠标指示符的形状发生变化。
- ② 将鼠标指示符移到任意位置，然后点击，设定分割标记的峰会强制性地分割开。

注释：分割标记，只有在有共同基线的重叠峰之间设定时有效。（请参照“14.10 波形处理以及基线校正”。）

(6) 以手动校正基线进行的定量计算

- ① 保存插入的基线。请从数据处理菜单中选择“保存手动积分”命令。
- ② 单击 **再计算** 按钮

(7) 自动处理基线的复元

要删除所有的手动校正基线，恢复原来的基线，请从数据处理菜单中选择“删除手动积分”命令。

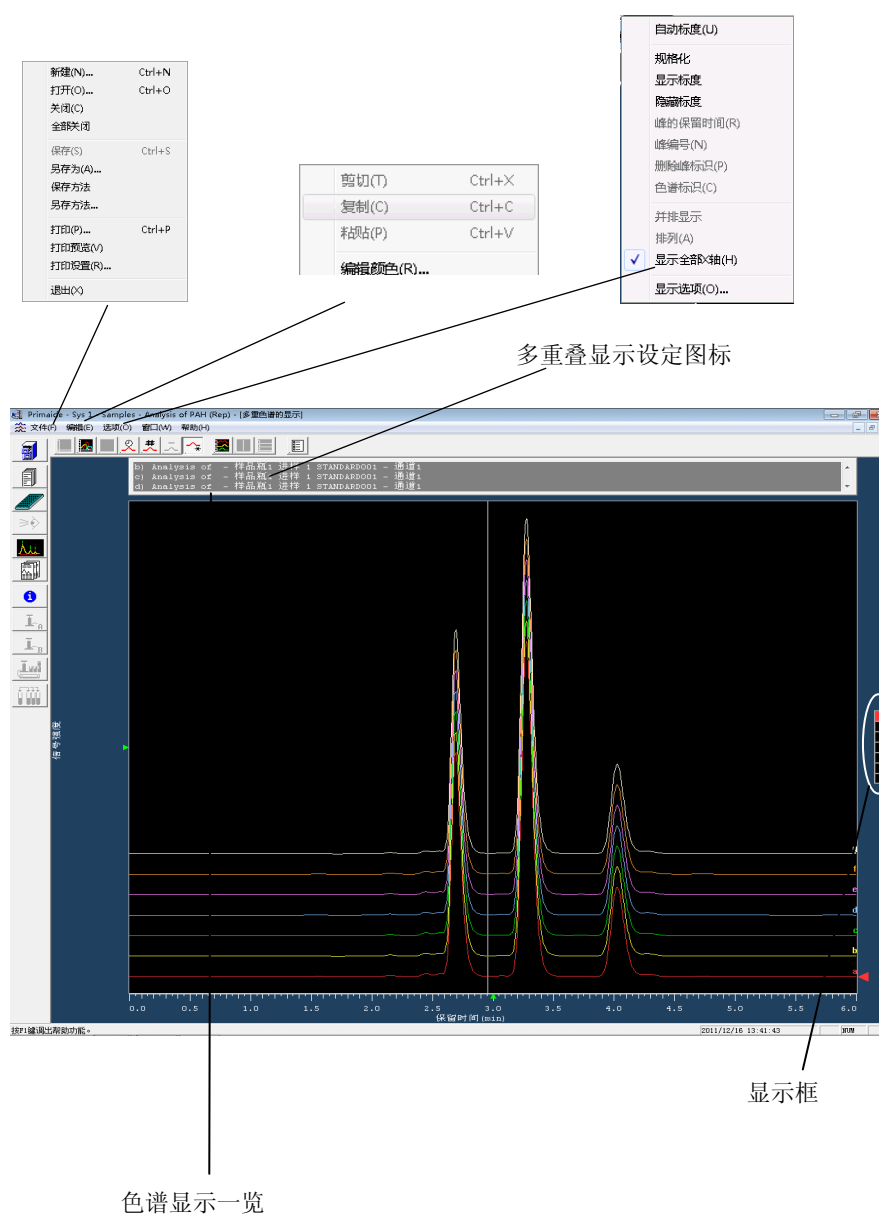
8.3 色谱的多重显示

单击**多重显示**按钮最多可以同时重叠显示 20 条色谱。显示形式有：多重显示有“规格化”，和“显示标度”和“隐藏标度”；并排显示有“排列”与“显示全部 X 轴”，一次最多可以显示 4 条色谱。在多重显示窗口有以下的功能：各个色谱间的偏移显示，打印功能以及以 WMF 格式保存的功能。

注：进行多于 20 条色谱的重叠显示时，只重叠显示前 20 条色谱，第 21 条色谱开始即无法显示出来。

8.3.1 多重显示窗口的构成

菜单命令以及相关图标功能如下所示：



以下是对多重显示相关菜单的说明：

8.3.2 文件菜单

另存为

重叠显示的相关画面，可以以 Windows Metafile 的格式 (*.wmf) 保存。通过指定文件夹名以及文件名，以 Windows Metafile 的格式保存。

打印

只打印与重叠显示相关的画面的显示内容。使所有的内容都打印在 1 张 A4 纸上。

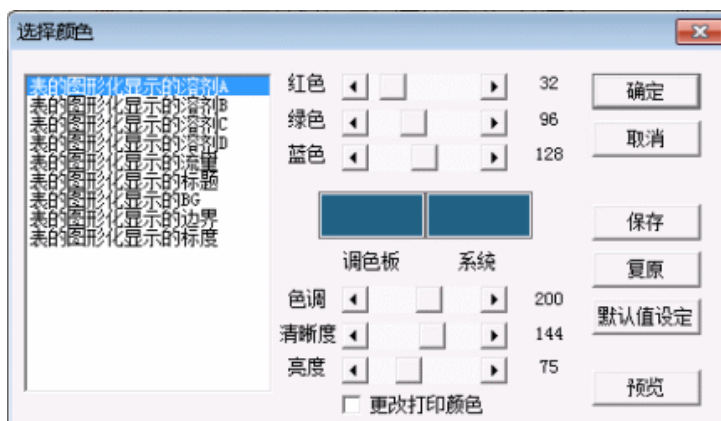
打印预览

可显示打印内容的预览画面。也可从此画面打印。

8.3.3 编辑菜单

编辑颜色

打开选择颜色对话框，改变“色谱多重显示画面”的颜色调色板。与窗口显示相关的项目，将会在对话框中列出来。保存后，改变的颜色将会在显示中反映出来。



8.3.4 选项菜单

选项菜单的内容如下所示(选项菜单的图标化：“8.3.5 多重显示设定菜单”)。

自动标度

并排显示色谱时，为使所有的色谱都能显示在纵轴标度范围内进行自动标度调整。

规格化

将各色谱图的纵轴规格化后显示。因每个色谱的信号强度都被规格化过，所以在这里不显示纵轴标度；用于不同浓度的标准样品叠加时十分方便。并可以在显示选项中对设定每个色谱图间的偏移值进行设置 (0-50 (%))。

显示标度

根据各色谱图的纵轴标度来重叠显示。纵轴标度作为绝对强度，显示与实际色谱图标度一致的色谱图。可以在显示选项中对每个色谱图间的偏移值进行设置（0-50（%））。

隐藏标度

排列显示后，根据指定的纵轴与横轴的标度显示色谱，但不显示纵轴标度。

峰的保留时间

作为被选择的色谱图的峰标识，显示峰的保留时间。

峰编号

作为被选择的色谱图的峰标识，显示峰编号。

删除峰标识

删除色谱峰标识（峰的保留时间或峰编号）。

色谱标识

在各色谱图的右端，显示与列表相同的标识（英文字（a-t））。再次点击后，将删除显示。

并排显示

最多可以排列显示 4 个色谱。指定多于 4 个色谱进行多重显示时，使用 **第一步** **步**，**前一步**，**下一步**与**最后一步**按钮来切换。“前一步”或是“下一步”每次只能切换显示一个色谱。

排列

强制性地移动每个色谱的横轴，使每个色谱中的纵轴光标显示于窗口中央。

显示全部 X 轴

显示每个色谱的横轴。再一次点击按钮，可以解除显示。

显示选项

指定显示模式以及设定色谱的偏移值等（重叠显示）。也可以在此处删除多重显示中的色谱。

8.3.5 多重显示 设定菜单

在多重显示设定菜单中有以下命令。在菜单栏“选项”中有同样的设定。



规格化的重叠显示:

将各色谱图的纵轴规格化后显示。因每个色谱的信号强度都被规格化过，所以在不显示纵轴标度；用于不同浓度的标准样品叠加时十分方便。并可以在显示选项中对每个色谱图间的偏移值进行设置（0-50（%））。




有标度的重叠显示:

根据色谱图的纵轴标度来重叠显示。纵轴标度作为绝对强度，显示与实际色谱图标度一致的色谱图。可以在显示选项中对每个色谱图间的偏移值进行设置（0-50（%））。



隐藏标度的重叠显示:

根据点击[并排显示色谱]按钮之后在多重色谱显示窗口中指定的纵轴与横轴标度重叠显示色谱(将排列显示的色谱重叠显示)。不显示纵轴标度。



峰保留时间标识:

作为被选择的色谱图的峰标识，显示峰的保留时间。



峰编号标识:

作为被选择的色谱图的峰标识，显示峰编号。



删除峰标识:

删除色谱峰标识（峰的保留时间或峰编号）。



色谱标识:

在各个色谱图的右端，显示与列表相同的标识（英文字母（a-t））。再次点击后，将删除显示。



并排显示:

最多可以排列显示 4 个色谱。指定多于 4 个色谱进行多重显示时，使用 **第一步**，**前一步**，**下一步** 与 **最后一步** 按钮来切换。“前一步”或是“下一步”每次只能切换显示一个色谱。



排列:

强制性地移动每个色谱的横轴，使每个色谱中的纵轴光标显示于窗口中央。



显示全部 X 轴:

显示每个色谱的横轴。再一次点击按钮，可以解除显示。



显示选项:

指定显示模式以及设定色谱的偏移值等（重叠显示）。也可以在此删除多重显示中的色谱。

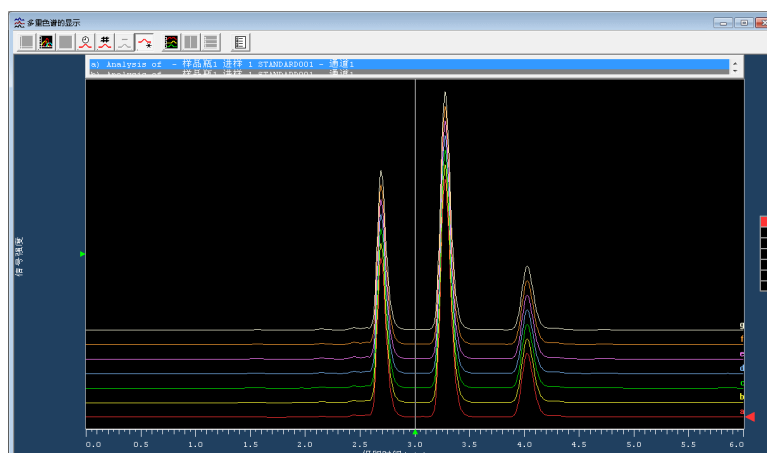
8.3.6 重叠显示

重叠显示方式有：“规格化”、“显示标度”、“隐藏标度”。选择“规格化”与“显示标度”时，偏移值为（0-50（%））。

- (1) 选择进样表中的数据系列。
- (2) 在漂浮框中选择要显示的色谱（Ch1, Ch2）。
- (3) 在进样表中点击指定进样数据。指定多个进样数据时，请边按 Ctrl 键，边点击要显示的色谱。
- (4) 单击 **多重显示** 按钮。

- 规格化

规格化是使每个色谱的最大信号强度值为 1 后显示色谱的功能。用于不同浓度标准样品的重叠显示时非常方便。



- 显示方法

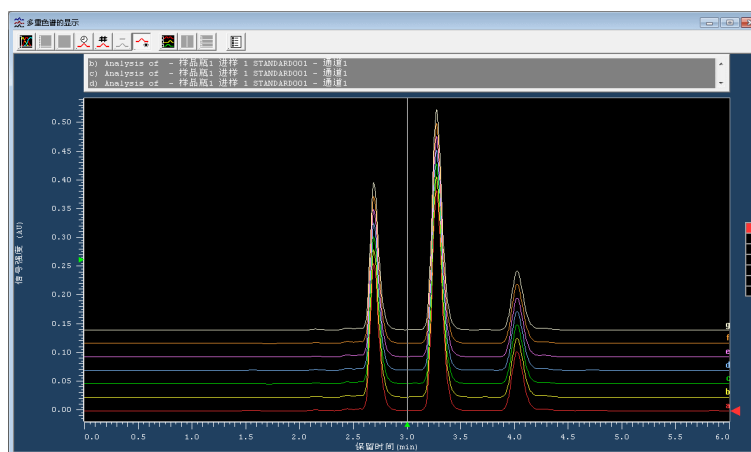
单击规格化图标或是点击选项图标来设定规格化显示。也可以通过单击菜单栏的“选项”-“规格化”显示。

- 设定偏移

单击显示选项按钮，通过设定规格化显示和偏移显示(0-50(%))来更改偏移值。

- 显示标度

以每个色谱的信号强度为基准显示。常用的重叠显示。



- 显示方法

单击显示标度图标，或者单击显示选项图标，然后设定显示标度，即可显示。也可以单击菜单栏的“选项”-“显示标度”。

- 偏移设定

单击显示选项图标，通过设定显示标度和表示偏移值(0-50(%))来更改偏移值。

- 隐藏标度

排列显示后,以设定的纵轴与横轴的标度显示色谱,但不显示纵轴标度。

- 手动偏移显示

使在色谱列表中选择色谱的基线位置处显示△标识,通过拖动标识可以将选择的色谱移动到任意位置。

可通过在色谱显示列表中点击要变更的色谱或是点击显示框来变更色谱的选择。

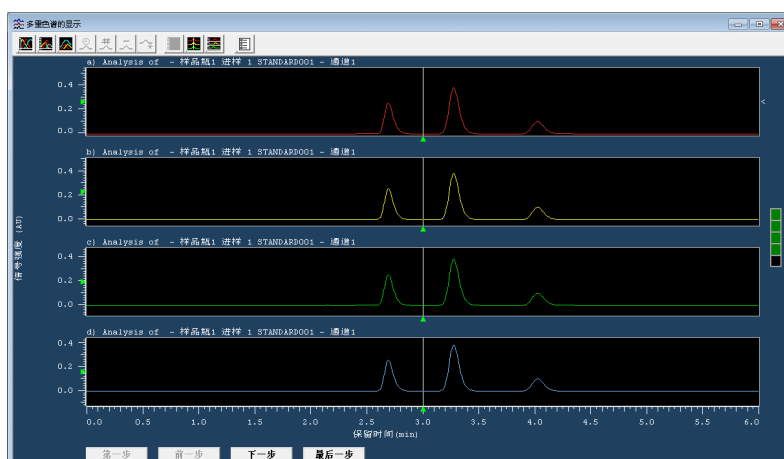
8.3.7 并排显示

并排显示的方式有“排列”与“显示全部 X 轴”。最多可以排列显示 4 个色谱。指定多于 4 个色谱进行多重显示时,使用使用第一步,前一步,下一步,最后一步按钮来切换。也可点击显示框来进行切换。

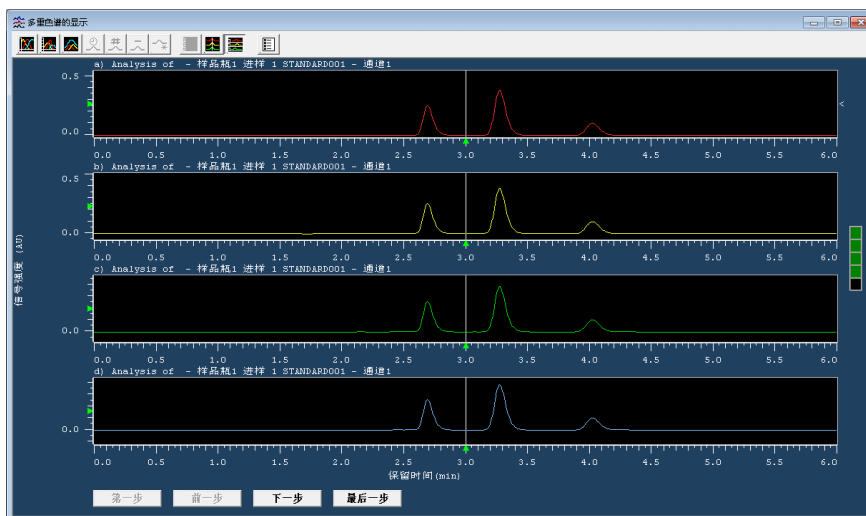
- (1) 选择进样表中的数据系列。
- (2) 在漂浮框中选择要显示的色谱 (从 Ch1, Ch2, 从 3D 数据中提取的色谱)。
- (3) 在进样表中指定进样数据。指定多个进样数据时,请边按 Ctrl 键,边点击要显示的色谱。
- (4) 单击多重显示按钮。
- (5) 单击并排显示按钮。

- 排列

移动“纵光标”到任意位置,通过点击排列按钮可使纵轴光标显示于窗口中央。以某一个峰为基准来确认其他峰的位置时非常有效。

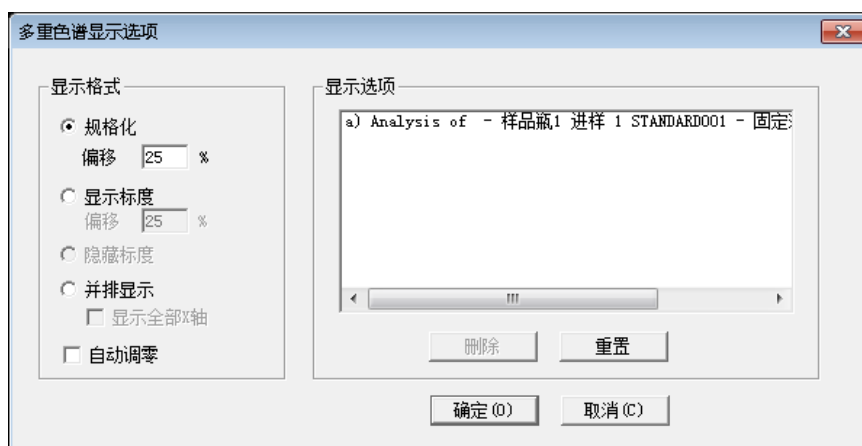


- 显示全部 X 轴
显示所有色谱的 X 轴（保留时间）。



8.3.8 多重色谱显示选项

请在“多重色谱显示选项”对话框中变更显示格式（重叠显示，并排显示）或删除显示中的色谱。



- 显示方法
通过单击菜单栏—“选项”—“显示选项”或者单击“显示选项”图标来显示。

删除

单击显示选项列表框列出的色谱后，再单击删除按钮可以删除色谱显示。要删除多个色谱时，在按 Ctrl 键的同时，点击要删除的色谱。

重置

取消删除显示色谱的操作。

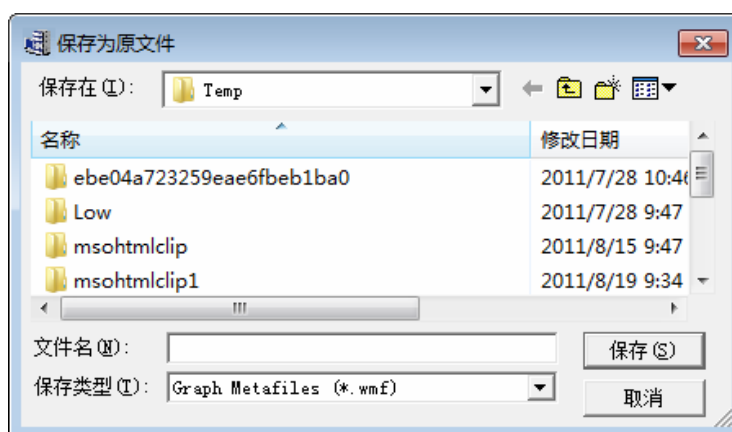
确定

应用 in 多重色谱显示选项框中指定的内容。

取消

取消 in 多重色谱显示选项框中指定的内容。

8.3.9 保存窗口原文件 重叠显示画面里显示的内容可以以 Windows Metafile (*.wmf) 的格式保存。



- 保存方法

(1) 单击菜单栏的“文件”-“另存为”。

(2) 指定文件夹与文件名后，可以以 Windows Metafile 的格式保存。

8.3.10 打印

重叠显示画面可以以报告文件的形式打印出来。无论重叠的色谱有多少，都能调节色谱与文字大小使之打印在 1 张 A4 纸上。在打印前，可以使用打印预览功能，确认打印内容。

- 打印

通过单击菜单栏“文件”-“打印”可以打印显示内容。经过调整将，将内容打印在 1 张 A4 纸上。

- 打印预览

单击菜单栏“文件”-“打印预览”可以显示预览画面。也可以从该画面进行打印。

8.4 色谱显示的变更方法

8.4.1 扩大·缩小 色谱显示

(1) 通过输入数值来扩大色谱的显示

请按以下步骤，通过输入数值来扩大(缩小)色谱。

① 可以通过以下的任何一种操作打开显示选项对话框。

- 在选项菜单里选择要显示选项。
- 将鼠标指示符放到色谱上，双击鼠标左键。
- 在工具栏里单击显示选项图标。

② 在数据处理窗口的显示选项对话框中，输入各轴的数值范围(标度范围)，单击[确定]按钮。

(2) 使用鼠标来扩大色谱显示

请按以下步骤，使用鼠标扩大(缩小)色谱。

- ① 将鼠标指示符放在要扩大区域的左上方。
- ② 边点击边拖动鼠标，将鼠标指示符拖动到要扩大区域的右下方。
- ③ 放开鼠标按键，将显示指定的色谱扩大部分。

(3) 使用鼠标来扩大轴的标度

请按以下步骤，使用鼠标来扩大(缩小)X轴或Y轴。

- ① 将鼠标指示符放在要扩大的X轴或Y轴标度的起始点
- ② 在点击拖动鼠标键的同时，将鼠标指示符放到要扩大的标度终点。
- ③ 放开鼠标按键，将显示指定的轴标度的扩大部分。

(4) 色谱显示的自动标度

用以下方法进行色谱显示的自动标度。

- ① 时间轴(X轴)和强度轴(Y轴)的同时自动标度
将鼠标指示符放在色谱显示范围内，单击鼠标右键。
- ② 强度轴(Y轴)的自动标度(只限于再处理时有效)
将鼠标指示符放在强度值附近，单击鼠标右键。
- ③ 时间轴(X轴)的自动标度(只限于再处理时有效)
将鼠标指示符放在时间值附近，单击鼠标右键。

8.4.2 移动色谱

请按照以下步骤，来移动色谱的显示。

- (1) 将鼠标指示符放在 X 轴或 Y 轴显示的绿色三角形上。
- (2) 在点击拖动鼠标指示符的同时，将鼠标指示符放到要移动的位置。
- (3) 放开鼠标按键后，色谱会移动到指定位置。

注：将光标放在三角形上后，鼠标指示符由箭头变为“手”的形状。

8.4.3 变更Y轴标度

通过以下任何一种操作来变更 Y 轴标度

- 按 PageUp 或 PageDown 键后，Y 轴的上限值会有约 10% 的增加或减少。
- 在选项菜单里选择要显示选项，显示选项对话框会弹出来。在 Y 轴的数值范围内（标度范围）输入新的值后，单击 **确定**。

8.4.4 移动时间光标

在色谱与多重色谱里有时间光标存在。时间光标可以用鼠标或者键盘的箭头键来移动。

请按以下步骤，使用鼠标来移动时间光标。

- (1) 鼠标指示符接近时间光标后，指示符的形状改变。
- (2) 在单击拖动鼠标指示符的同时，将鼠标指示符拖到要移动的位置。
- (3) 放开鼠标后，时间光标会移动到指定位置。继续按住 Shift 键，不点击鼠标，仅移动指示符时，鼠标指示符位置值会显示在状态栏里，但时间光标不会移动。

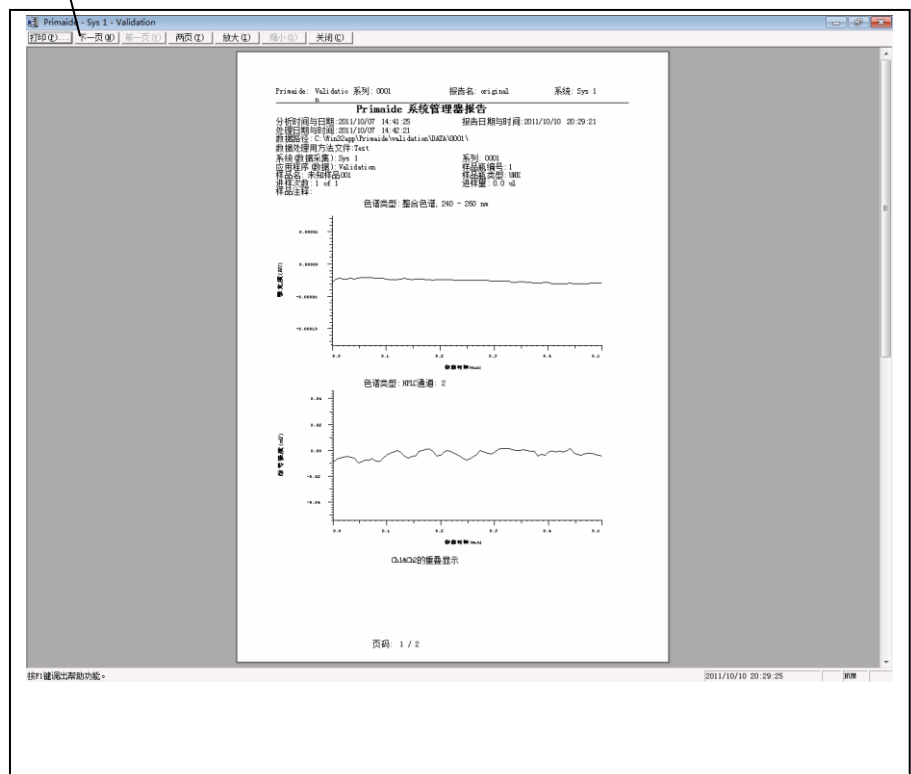
第9章 报告预览窗口的功能与操作

报告预览窗口是对 Primaide 系统管理报告内容进行以及设置打印的窗口。

9.1 窗口的构成

报告窗口的构成如下所示。请使用控制按钮来操作报告预览窗口。

控制按钮



页码(打印指定页面)

9.2 打开报告预览窗口

要打开报告预览窗口

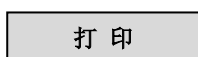
- ① 单击报告图标，打开打开文件对话框（关于打开文件对话框的功能与操作，请参照“3.4” 打开文件对话框）。



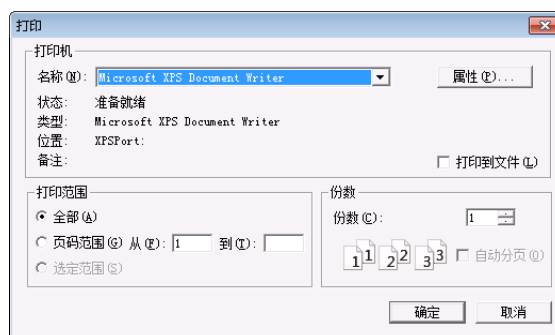
- ② 确认在文件类型框中是否选择了报告，在应用程序列表框中是否指定了正确的应用程序。
- ③ 在数据系列名/报告名框中选择报告文件，单击**确定**按钮。

9.3 控制按钮功能

使用控制按钮来操作报告预览窗口。控制按钮功能如下所示。



在打印对话框中指定打印的页面。单击确定将打印页面转送给 Windows 打印管理器。



下一页

显示下一页。

上一页

显示上一页。

1 页

/

2 页

窗口预览形式切换为[一页预览] 或 [两页预览]。

放大

扩大预览显示。点击一次扩大为 150%，点击两次扩大为 200%。

缩小

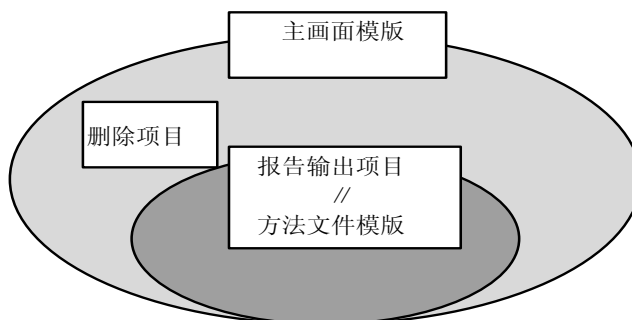
将扩大后的预览复原。

关闭

关闭报告预览窗口。

为防止在方法文件中设定的项目在“方法文件模板”中被遗漏，请设定主画面模板包含方法项目。

主画面模板不需要的项目(也就是在方法文件输出项目里不存在的项目)自动被删除之后，生成方法文件模板。



生成方法文件模板后，如果要追加方法文件输出项目，需要再次使用主画面模板生成包括追加项目的方法文件模板。

10.2 窗口的构成

画面编辑窗口的构成如下所示：

(1) 画面编辑窗口的构成

方法文件画面编辑模式

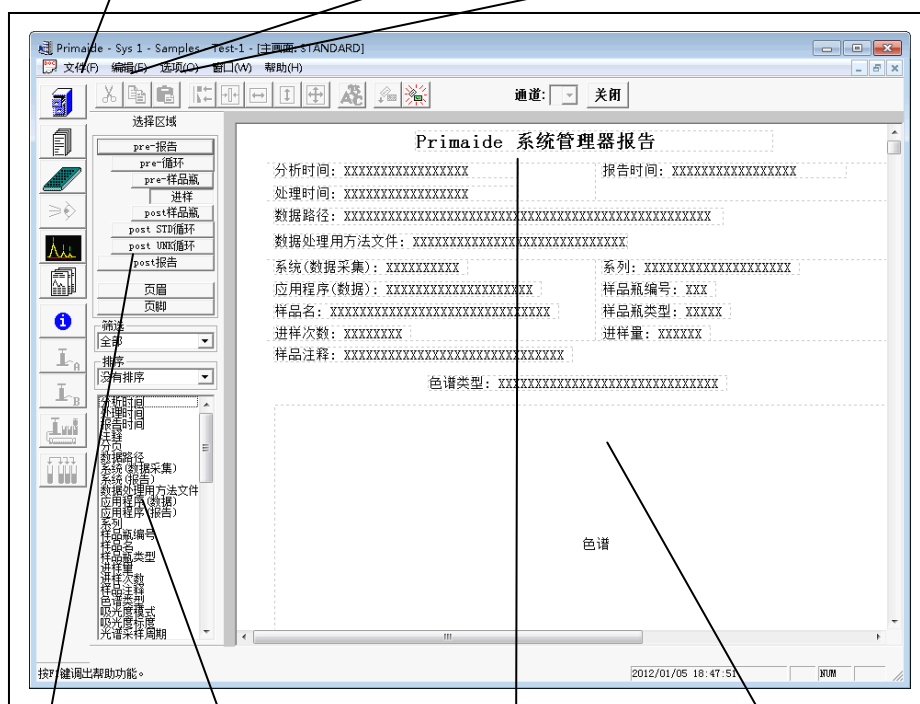
载入主画面(L)...
更改主画面(M)...
页面设定(U)...
关闭(C)
退出(X)

主画面编辑模式

更改主画面(M)...
保存(S)
另存为(A)...
页面设定(U)...
关闭(C)
退出(X)

撤销(U)	Ctrl+Z
剪切(T)	Ctrl+X
复制(C)	Ctrl+C
粘贴(P)	Ctrl+V
删除(D)	Del
全选(A)	
左对齐(L)	
居中(C)	
两端对齐(W)	
上下对齐(H)	
相等大小(S)	

更改从属关系(M)...
显示从属关系(S)
字体(F)...



- 报告区域选择按钮
- 报告项目的选择列表框
- 通道显示框：
指定并显示与项目相对应的通道（通用项目为空白）
- 画面编辑区域

(2) 模板显示区域的构成

框架：显示项目区域

Primaide 系统管理器报告

分析时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 报告时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

处理时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

数据路径: XX

数据处理用方法文件: XX

系统(数据采集): XXXXXXXXXXXX 系列: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

应用程序(数据): XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 样品瓶编号: XXX

样品名: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 样品瓶类型: XXXXX

进样次数: XXXXXXXX 进样量: XXXXXX

样品注释: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

区间分隔：显示报告项目之间的“区间”范围。

(3) 区间分隔的构成

区间分隔显示的是报告项目的“区间”范围。按水平方向并排排列时，项目被平均分割，自动生成区间分隔。

Primaide 系统管理器报告

分析时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 报告时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

处理时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX



将“处理时间”项目沿横向移动

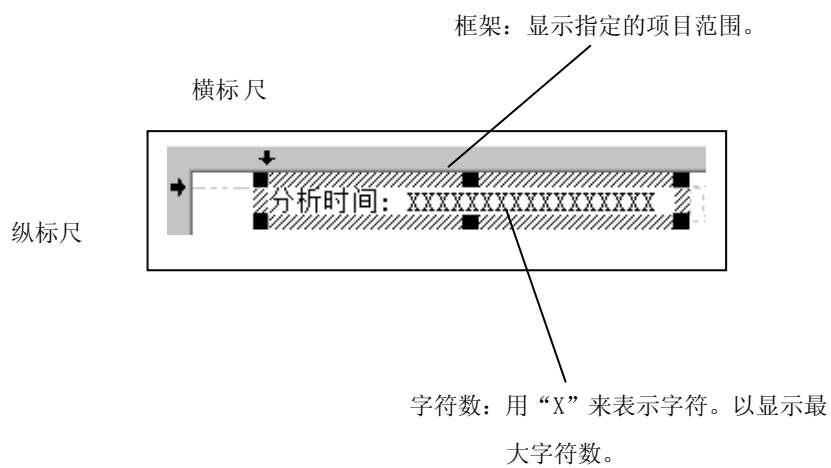
Primaide 系统管理器报告

报告时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 分析时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX 处理时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX

要选择区间分隔内的项目时，按住 Shift 键的同时单击最左上方与最右下方项目，即可选择区间分隔内的所有项目。要选择连续区间分隔内的项目时，按住 Shift 键的同时单击最上部区间分隔的项目与最下部区间分隔的项目，可以选择区间分隔内的所有项目。

(4) 框架的构成:

指定了模板显示区域报告项目后，显示下面的框架。



10.3 菜单命令

菜单命令的功能与相关图标如下所示：

10.3.1 文件菜单

载入主画面

读取并显示方法文件中使用的主画面文件。

更改主画面

读取要编辑的主画面文件，以编辑模式打开。

页面设定

在模板编辑区域内指定页面范围。在这里设定的页面布局值将成为模板内所有 [分页] 的设定值，可以统一模板内页面布局。

实际打印报告的页面布局，需要在 Windows 打印管理器进行设置。

关闭

关闭报告画面编辑器。

10.3.2 编辑菜单

剪切:

将选择的项目移动到剪贴板。剪切的项目将从报告中删除。在剪贴板中只存在最新的“剪切项目”和“复制项目”。

复制:

复制选择的项目到剪贴板上。复制的项目照原样保留在报告中。在剪贴板中只存在最新的“剪切项目”和“复制项目”。

粘贴:

将剪贴板中的项目复制到选择的位置上。

删除: **[键盘: Delete]**

删除选择的项目。删除的项目不会存留于报告以及剪贴板中。

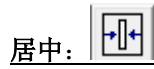
全选

选择报告中显示的所有项目。



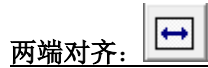
左对齐:

选择的项目与“横标尺”对齐配置。



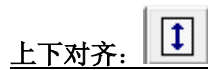
居中:

选择的项目位于页面的中央。



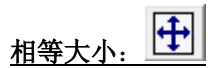
两端对齐:

对齐边框的两边。首先选择作为基准边框的项目，再选择要对齐边框的项目（可多个），单击图标。



上下对齐:

对齐边框的高度。首先选择作为基准边框的项目，再选择要对齐边框的项目（可多个），单击图标。

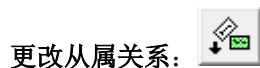


相等大小:

使边框大小一致。首先选择作为基准边框的项目，再选择要对齐边框的项目（可多个），单击图标。

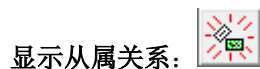
提示: 要选择多个项目，请边按 Shift 键，边用鼠标点击项目，这样点击的项目边框就会显示出来。

10.3.3 选项菜单



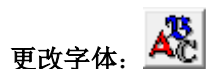
更改从属关系:

更改从属关系。打开从属关系更改的对话框，更改从属关系。



显示从属关系:

显示从属关系的项目。从属关系指的是报告项目的[主]与[从]的关系。在计算结果中，如果不存在[主]项目，[从]项目的报告也会自动被取消。



更改字体:

更改字体。更改字体后，确认报告预览窗口的报告项目是否存在重叠，或是超出打印范围。如有以上情况，需要在报告编辑器中修改后再打印。

10.4 区域选择按钮

选择报告画面的编辑区域。编辑范围根据进样序列按以下方式分类。

pre-报告

测定开始时输出的报告。

pre-循环

每次 STD/UNK 循环开始时输出的报告。

pre-样品瓶

每次进样样品瓶改变时输出的报告。

进样

根据每次进样分析的结果输出的报告。

post 样品瓶

样品瓶的连续进样结束时输出的报告。

post STD 循环

STD 样品分析循环结束时输出的报告。

post UNK 循环

UNK 样品分析循环结束时输出的报告。

post 报告

连续分析结束时输出的报告。

页眉

在报告输出用纸的上方设置打印的项目。在页眉中设定的内容将打印在报告所有页面中。

页脚

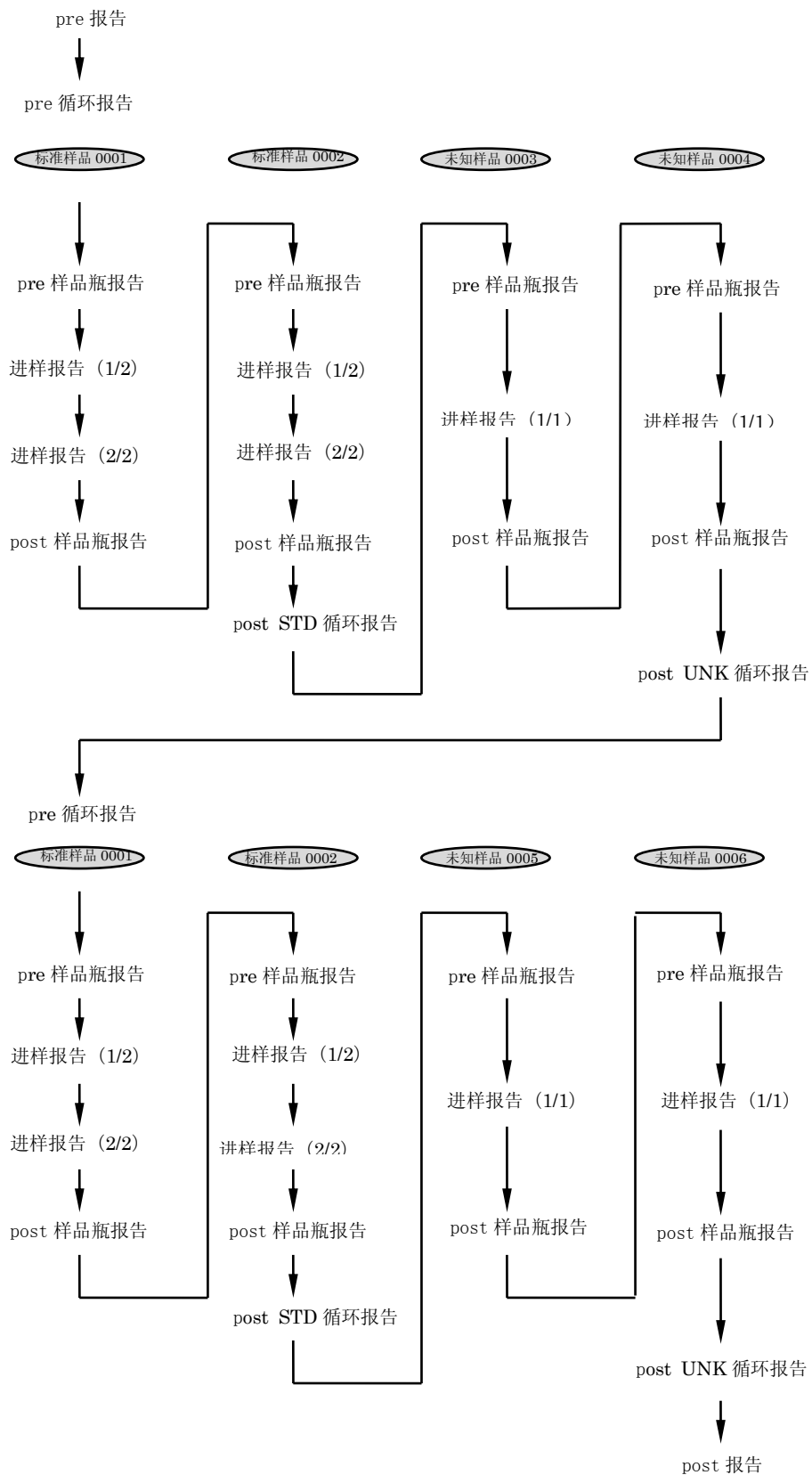
在报告输出用纸的下方设置打印的项目。在页眉里设定的内容将打印在报告所有页面中。

例如，样品表的设定是以下情况时，

样品瓶 编号	进样量 (μ L)	进样 次数	类型	样品名
111	20.0	1	空白	H2O Blank
112	20.0	1	STD1	STD-1 DAD
113	20.0	1	STD2	STD-2 DAD
114	20.0	1	STD3	STD-3 DAD
115	20.0	1	STD4	STD-4 DAD
116	20.0	1	STD5	STD-5 DAD
117	20.0	6	UNK	Sample-1 Wine x10
118	20.0	6	UNK	Sample-2 Hext x10
114	20.0	6	UNK	STD-3 DAD Rep.

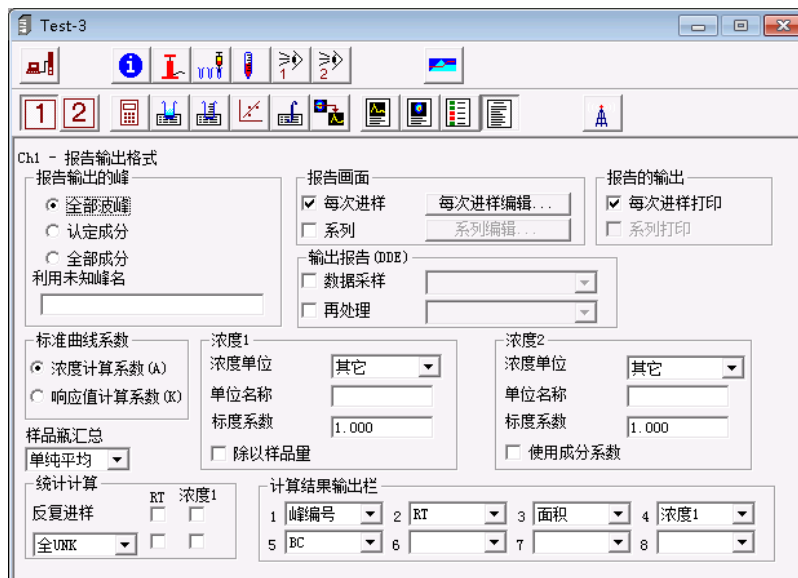
与区域选择按钮相对应的各个报告将如下输出。

10.4 区域选择按钮



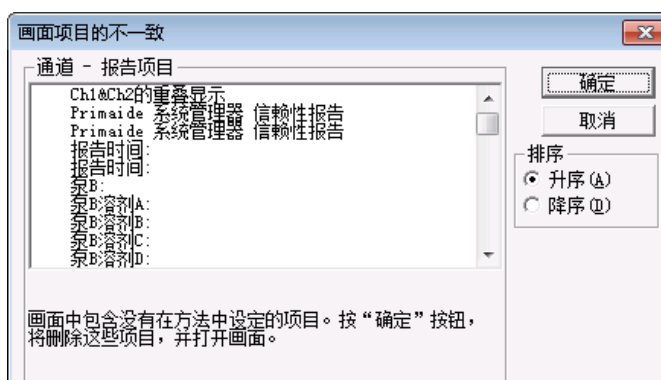
10.5 访问报告编辑画面

要访问报告编辑画面，需要单击方法文件窗口/报告输出的 **每次进样编辑** 或 **系列编辑** 按钮。



单击 **每次进样编辑** 按钮可以访问“每次进样报告”的模板编辑画面。“每次进样报告”指的是每次样品进样时输出的报告。

单击 **系列编辑** 按钮可以访问“系列报告”的模板编辑画面。“系列报告”指的是一个系列分析结束后输出的报告。



访问报告编辑画面时，方法输出项目和已存的方法画面模板的项目（新建的方法时，请选择 STANDARD 主画面模板）如有不一致时，不一致的项目会显示在“画面项目的不一致”对话框中。

单击 **确定** 按钮将自动生成把不一致的项目删除掉的方法模板。

10.6 生成方法画面模板

报告编辑画面主要用于编辑方法画面模板并生成报告输出用模板。

10.6.1 生成与保存方法画面模板

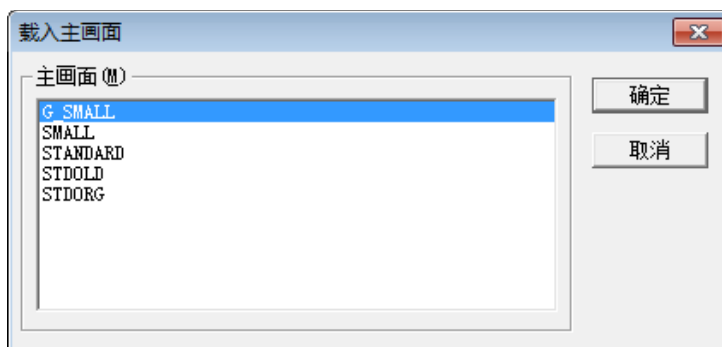
方法画面模板作为方法参数，一般被保存在方法文件中。请按以下步骤生成并保存模板：

- ① 访问方法窗口，设定方法参数。
- ② 从方法文件窗口/报告输出画面访问报告编辑画面。
- ③ 载入作为基准的“主画面”模板(不更改模板时不进行此操作)。
- ④ 在报告画面编辑器里编辑模板。
- ⑤ 单击[关闭]按钮返回到方法文件窗口。
- ⑥ 设定方法文件参数后，用保存方法文件(或是另存为)的命令将方法作为文件保存起来。

10.6.2 载入主画面

请按以下步骤载入主画面：

- ① 在文件菜单里选择“载入主画面”的命令。



- ② 指定主画面文件，单击[确定]按钮。
- ③ 显示方法中没有设置，属于主画面项目的一览。
根据方法生成报告时，单击[确定]按钮访问编辑画面。根据画面模板生成报告时，单击[取消]按钮重新设置方法。
- ④ 在主画面模板里，打开画面编辑窗口。

10.6.3 编辑画面模板

在编辑画面中，请用以下的命令来编辑画面：

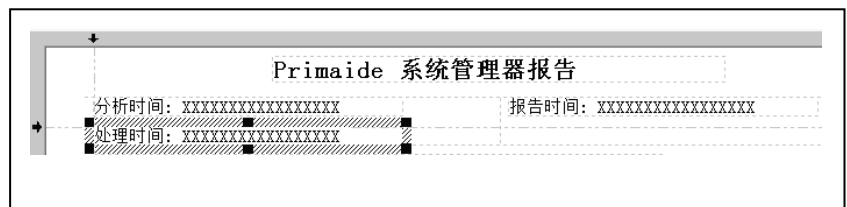
- (1) 移动画面项目
- (2) 删除画面项目
- (3) 复制画面项目
- (4) 剪切-粘贴画面项目
- (5) 追加画面项目
- (6) 更改报告项目名
- (7) 变更字体
- (8) 调整报告项目位置
- (9) 调整区间分隔
- (10) 标准曲线图与光谱图的排列方法
- (11) 设定报告项目换行
- (12) 插入注释
- (13) 调整边框的大小（扩大，缩小，统一）
- (14) 设定分页
- (15) 设定页面布局


命令的操作如下所示。

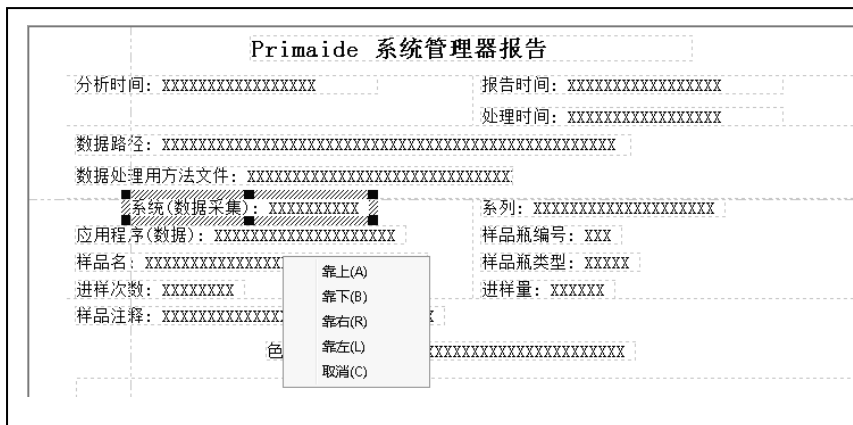
(1) 移动画面项目

要移动报告画面项目的输出位置：

- ① 单击要变更位置的项目后，该指定项目会有“边框”显示出来。

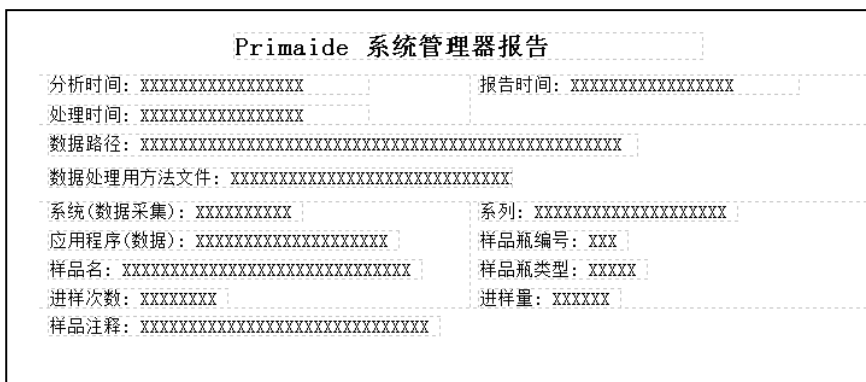


- ② 拖动指定的项目(鼠标指示符变为)。
- ③ 拖动到目的位置后, 即显示编辑命令。



拖动项目的边框与已存项目的边框重叠时, 将显示以已存项目为基准(拖动点(靠上/靠下/靠左/靠右))的命令。拖动到不重叠的位置时, 会显示“移动”命令。

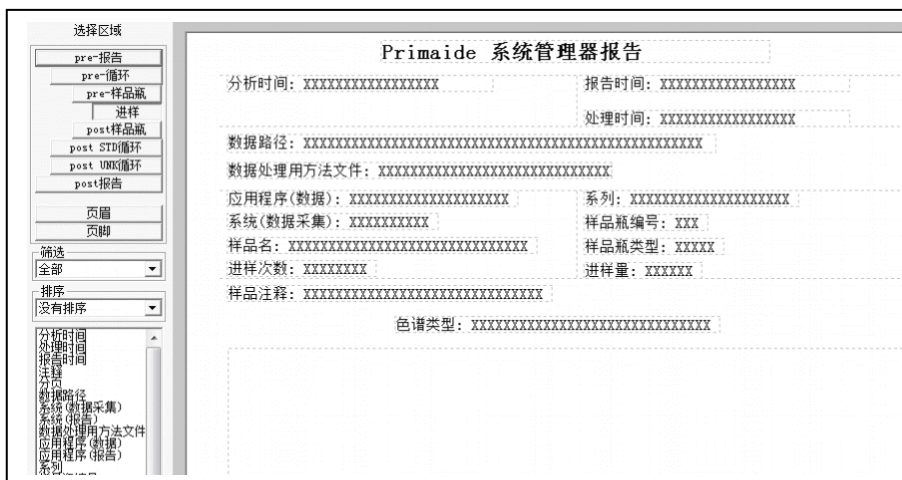
- ④ 移动指定项目到选择区域中。



(5) 追加画面项目

要在报告画面模板内追加新的项目：

- ① 在报告项目框中，单击要追加到报告模板内的项目。



- ② 将要追加的项目拖动到模板内的任意位置。

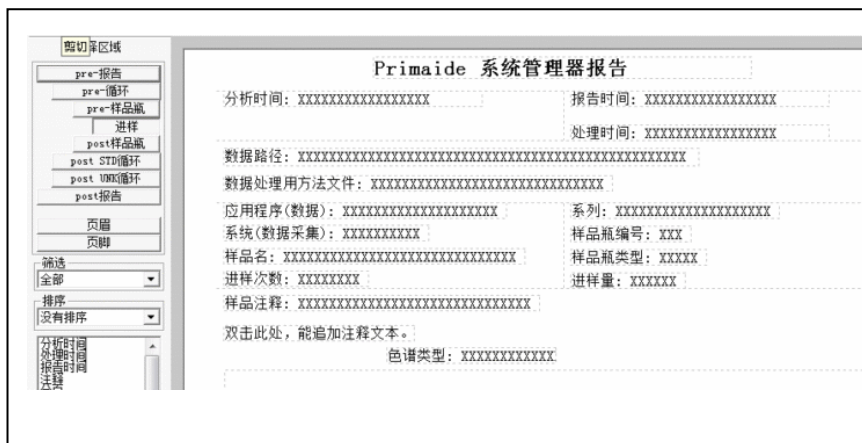
(指示符的形状变为  。)

- ③ 显示编辑命令。



追加项目的边框与已存项目的边框重叠的情况下，将显示以已存项目为基准(拖动点(靠上/靠下/靠左/靠右))的命令。当指定的位置无边框重叠时，显示“移动”命令。

- ④ 在选择的区域内插入要追加的项目。

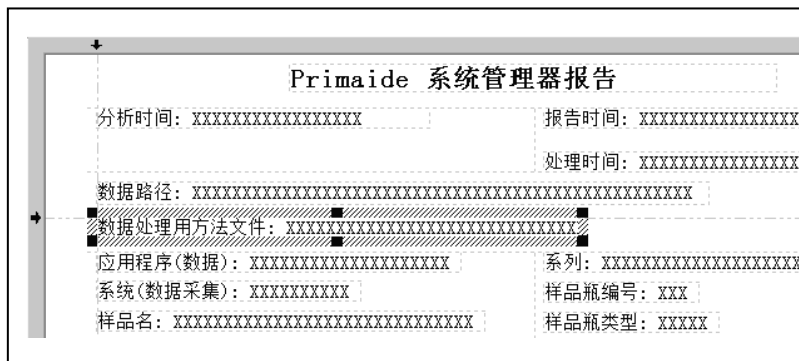


- ⑤ 要追加存在于两个通道(Ch1, Ch2)的项目时, 在通道框内指定与项目对应的通道编号。

(6) 更改报告项目名

在生成·打印报告时，可以在模板里对输出的“项目名”进行更改。更改步骤如下：

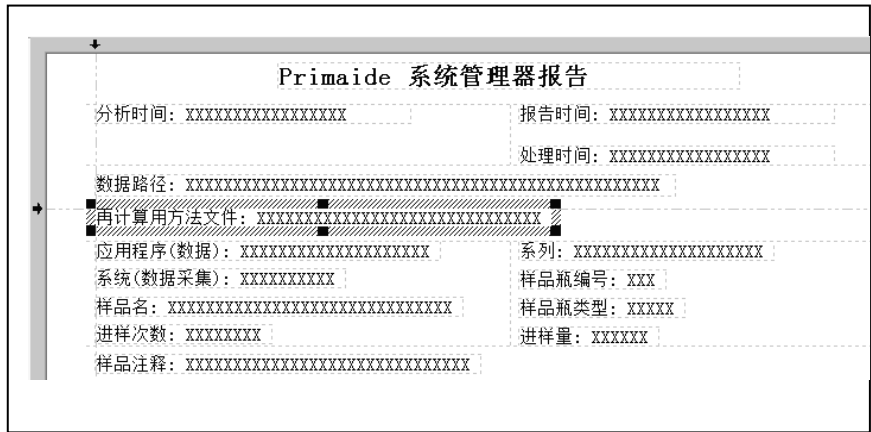
- ① 单击要更改的项目，指定的项目“边框”显示后，项目名称更改框将显示。



- ② 在项目名称更改框中输入任意名称，单击**确定**按钮。



③ 显示更改过的项目名称。

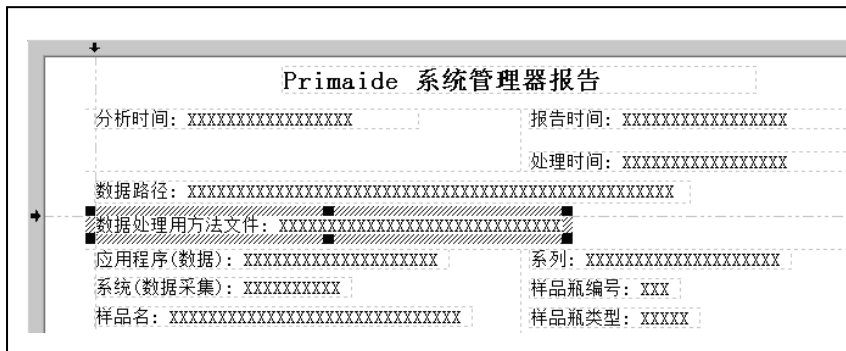


要复原更改后的名称时，在“项目名称更改”框中，再一次输入框架的名称(原来的项目名)。

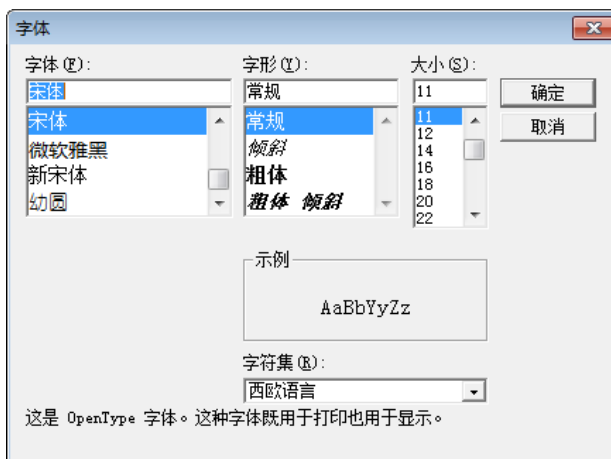
(7) 变更字体

在生成・打印报告时，可以在模板中更改字体。更改的顺序如下：

- ① 单击要更改的项目后，显示指定项目的“边框”。



- ② 单击更改字体图标，在“字体”对话框中选择任意的文字字体，单击确定按钮。



参考： Primaide 系统管理报告项目文字字体的默认值为：
宋体・常规・11。
 报告项目标题字体的默认值为：
宋体・粗体・小二。

③ 模板将以更改后的字体显示。

Primaide 系统管理器报告	
分析时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	报告时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
	处理时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
数据路径: XX	
■ 数据处理用方法文件: XX	
应用程序(数据): XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	系列: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
系统(数据采集): XXXXXXXXXXXX	样品瓶编号: XXX
样品名: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	样品瓶类型: XXXXX
进样次数: XXXXXXXX	进样量: XXXXXX
样品注释: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	

(8) 调整报告项目位置

在生成·打印报告时，可以对报告项目的位置进行调整。

要调整位置有以下几种：

- 调整指定项目到任意位置
- 调整同一组内多个项目对齐[横标尺↓]
- 调整指定项目到区间的中央

调整指定项目到任意位置：

- ① 点击要调整的项目。指定项目的“边框”、表示边框位置的“横标尺”与“纵标尺”将显示。

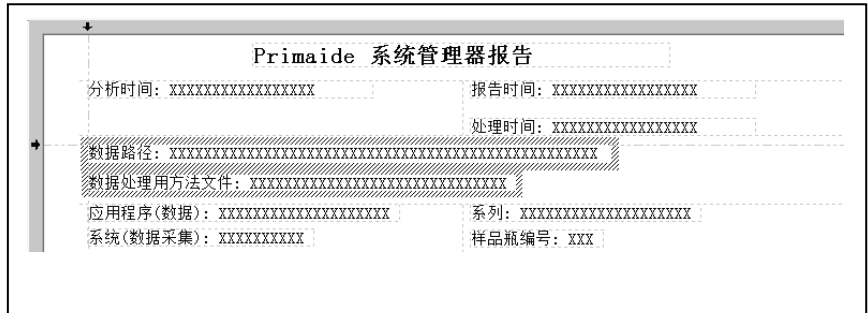
Primaide 系统管理器报告	
分析时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	报告时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
	处理时间: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
数据路径: XX	
■ 数据处理用方法文件: XX	
应用程序(数据): XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	系列: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
系统(数据采集): XXXXXXXXXXXX	样品瓶编号: XXX
样品名: XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX	样品瓶类型: XXXXX

横标尺

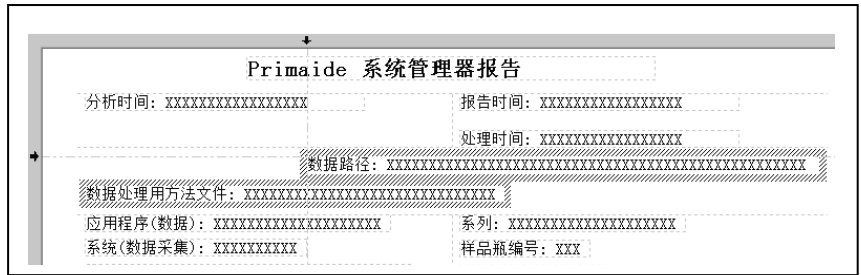
纵标尺

● 调整多个指定项目对齐“横标尺↓”：

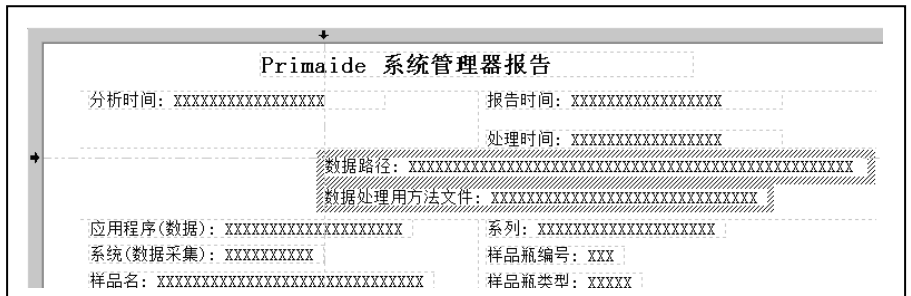
- ① 在同一组内指定进行位置调整的多个项目。单击用横标尺移动的项目(最前列的项目)。按住 Shift 键，单击其它项目。



- ② 移动“横标尺↓”到目的位置。



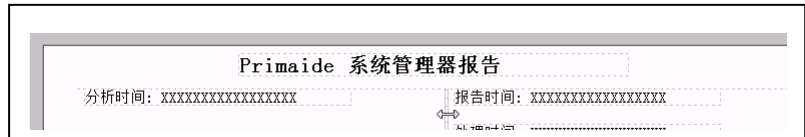
- ③ 单击“左对齐”图标。指定项目将会被调整为对齐“横标尺↓”。



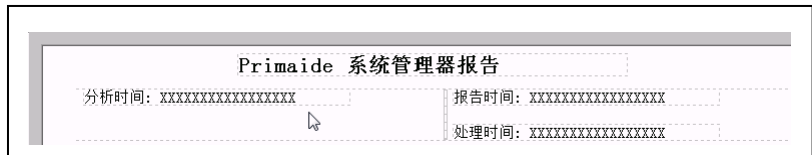
(9) 调整区间分隔

区间分隔显示报告项目的“区间”范围。通过移动横向排列的项目间的区间分隔，调整位置，可以简单地调整对齐区间内的项目：

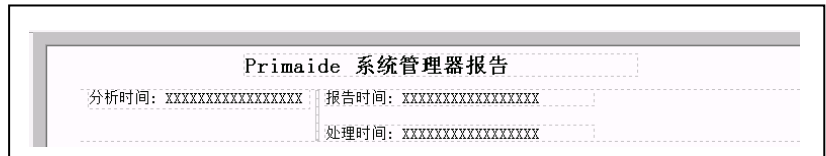
- ① 单击要调整的区间分隔。光标的形状将发生改变，单击的区间分隔将明确显示出来。



- ② 拖动区间分隔到目的位置。



- ③ 区间分隔范围内的项目也同时被移动。

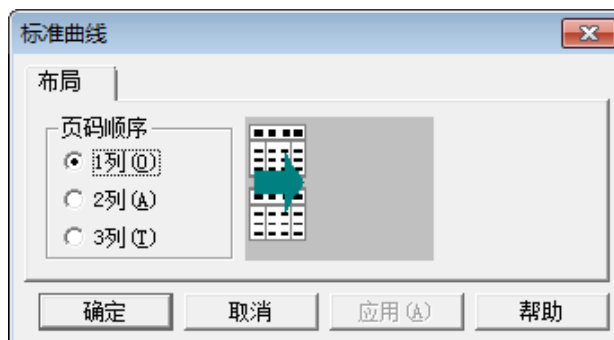


(10) 标准曲线图与光谱图的排列方法

设定多个标准曲线以及光谱图的配置。

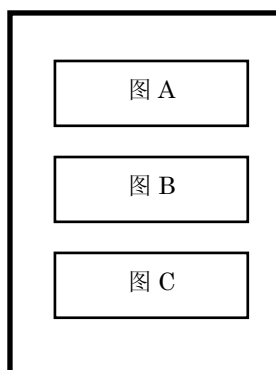
生成标准曲线以及光谱图横向布局画面模板：

- ① 双击画面显示区域内的“标准曲线”项目。
- ② 在设定对话框中指定页码顺序，单击确定按钮。

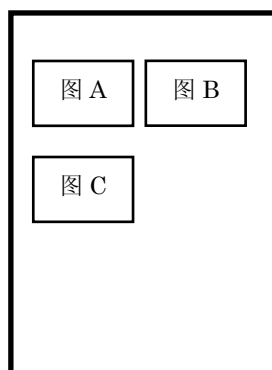


如下图配置：

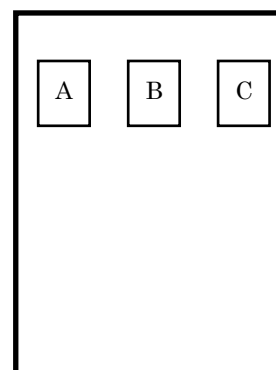
1 列：



2 列：



3 列：

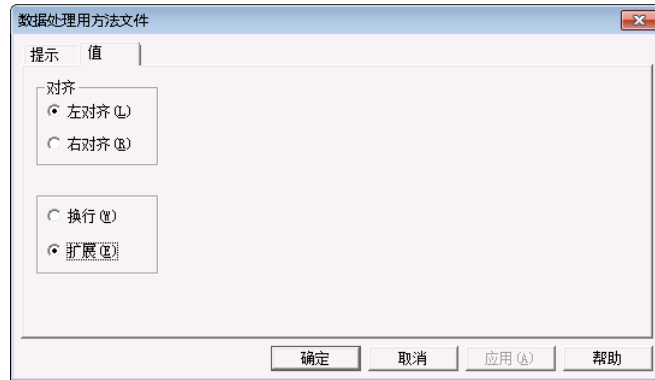


(11) 设定报告项目换行

设定内容包括：边框中报告项目内容的配置；报告项目内容比边框长的情况下字符列的处理。

项目内容的配置以及文字列处理的设定：

- ① 双击画面显示区域的“对象”项目。
- ② 单击设定对话框的“值”标签。
- ③ 指定“对齐”，单击**确定**按钮。



在画面编辑器中设定的项目，按以下方式配置/处理。

例如

数据路径名：XXXXXXXXXX 项目、

在报告中如下输出：

- 左对齐·换行

数据路径名：XXX

与

数据路径名：XXXXXXXXXX

XXXXXX

- 左对齐·扩展：

数据路径名：XXX

与

数据路径名：XXXXXXXXXXXXXXXXXX

边框不可扩大至页面外。对于溢出的字符列将不会生成报告，即无法被打印。

- 右对齐：

数据路径名：

XXX

与

数据路径名：XXXXXXXXXX

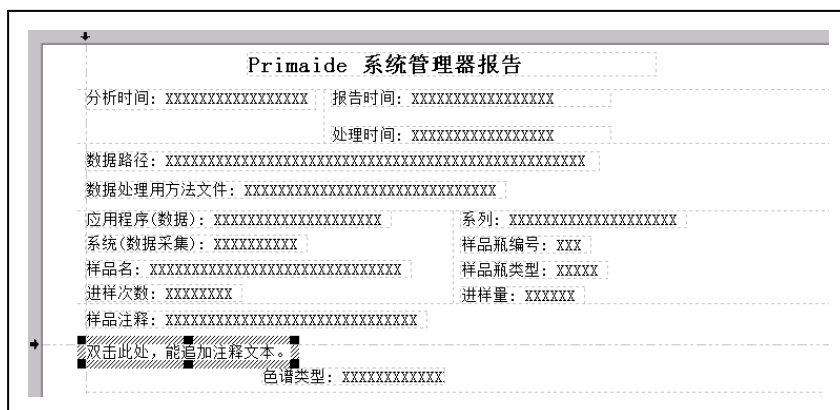
右对齐时，不可以进行换行与扩展操作。对于溢出的字符列将不会生成报告，即无法被打印。

(12) 插入注释

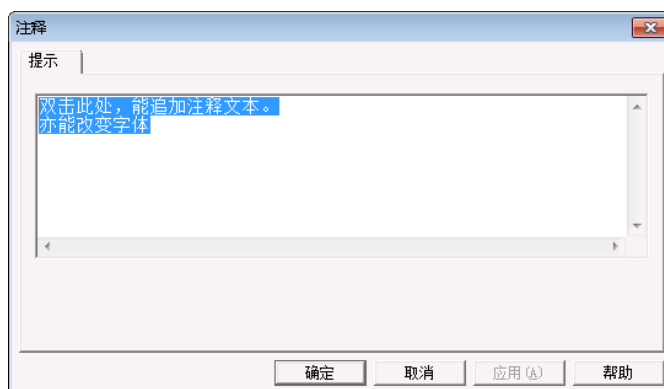
与在方法文件里设定的输出项目无关，可以在报告模板里追加任意的“注释”。与其它的项目同样，注释的字体也可以变更。

在报告模板里追加“注释”：

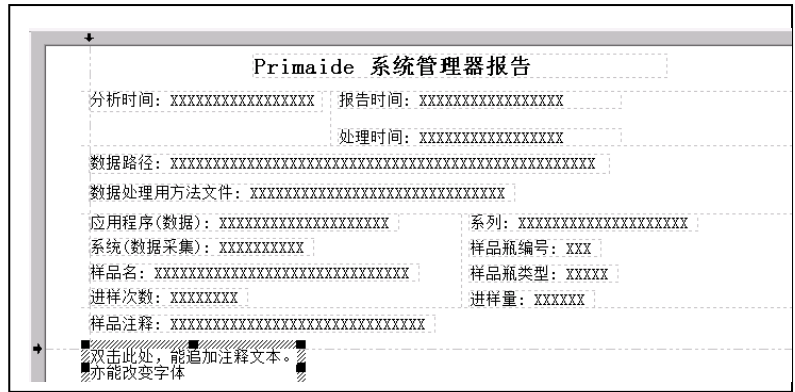
- ① 单击报告项目框里的“注释”后，将其拖动到模板的任意位置。
- ② 在拖动点位置插入“注释”的输入区域。



- ③ 双击注释输入区域后，显示注释对话框。输入注释，单击**确定**按钮。



- ④ 在注释对话框中输入的注释将显示。边框的大小将根据字符长短来调整。

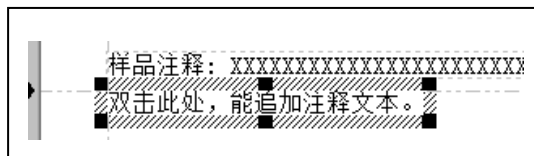


(13) 调整边框的大小（扩大，缩小，统一）

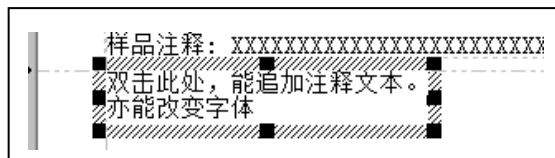
边框显示的是报告项目的范围。有时可以对图（色谱，标准曲线）进行扩大、缩小与输出。因字符数的多少与字体的大小不一，导致对应于实际的报告项目，边框有过大或过小的情况。在这种情况下，需要调整边框的大小。

调整边框的大小：

- ① 单击要调整的报告项目。调整边框到需要的大小。



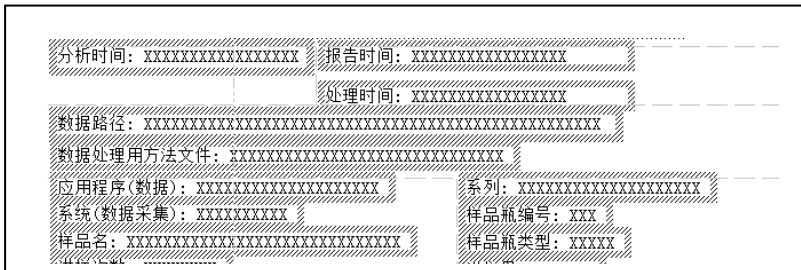
- ② 将以调整大小后的边框显示报告项目。



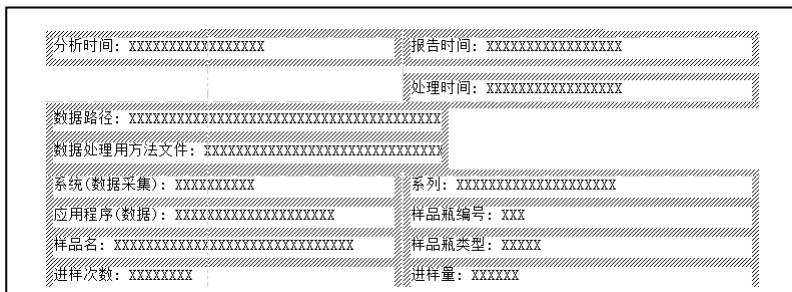
根据作为基准的报告项目来配置其它报告项目时可以统一边框的大小。

要统一基准项目边框的大小：

- ① 单击最初作为基准边框的项目。按住 Shift 键点击要对齐的项目（可以是多个）。



- ② 单击相应的图标（上下对齐/两端对齐/相等大小）。点击相等大小图标时，边框的大小与基准边框变为同等大小。



(14) 设定分页

通过追加报告列表框的“分页”项目到模板显示区域，可以设定分页位置。

分页有“手动分页”和“自动分页”两种方法。

- “手动分页”是在“分页”的位置自动进行分页。
- “自动分页”指的是不能在同一页内插入区间内所有的项目时，在“分页”的位置自动分页。可以设定“分页”后的页面布局。

在报告模板画面里追加“分页”：

- ① 单击报告项目列表框中的“分页”项目后，将其拖动到模板的目的位置。
- ② 在拖动点位置插入“分页”区域。

- ③ 双击“分页”项目。显示编辑框。设定参数后单击**确定**按钮。
按下面公式来设定空白值。
上空白+下空白 \leq 7.62cm
右空白+左空白 \leq 10.16cm



(15) 设定页面布局

设定模板编辑区域内的页面布局。将自动修正设定了“分页”的页面布局，统一报告内的所有页面布局。

要统一所有页的模板编辑区域内的页面布局：

- ① 选择文件菜单的“页面设定”命令。
- ② 在编辑对话框里设定页面布局。

按下面公式来设定空白值。

上空白+下空白 \leq 7.62cm

右空白+左空白 \leq 10.16cm



- ③ 设定参数，单击**确定**按钮后所有报告页面的布局将会被统一。

注释：实际打印报告时的页面布局必须在 Windows 打印管理器中设定。

10.7 报告项目的从属关系

10.7.1 从属关系的概要 从属关系指的是实际输出报告时，模板项目相互之间的关系。

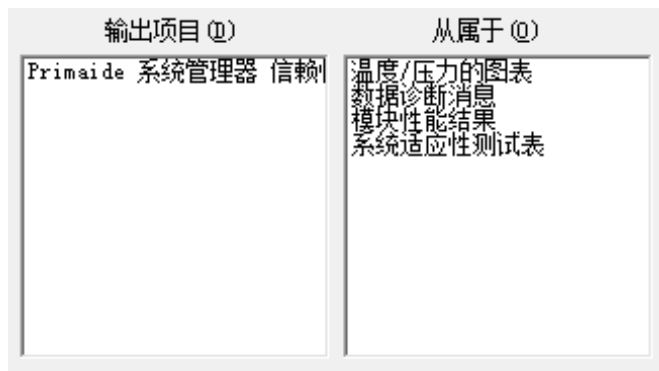
在实际的计算结果中如果不存在主（被从属的）项目时，Primaide 系统管理程序会自动取消与主（被从属的）项目结为从属关系的报告模板项目的输出。

如果设定了适当的从属关系，可以省去因报告输出项目变更而重新设定方法画面模板的工作。

例如，在主画面模板里，“光谱带宽”为“DAD 等高线图”的从属项目。在实际的计算结果中，如果不存在“DAD 等高线图”，“光谱带宽”的报告输出会自动被取消。



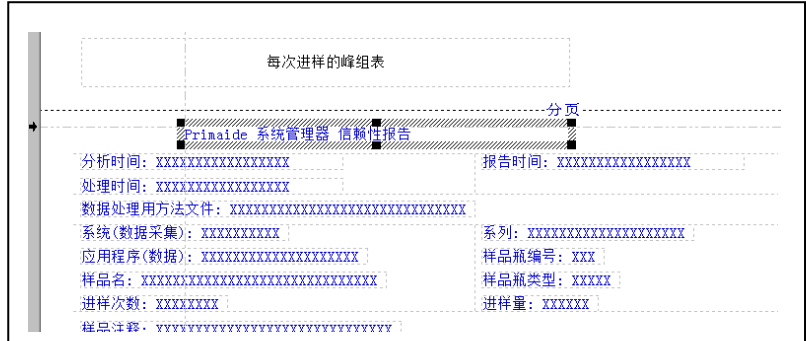
“温度/压力的图表”、“数据诊断消息”、“模块性能结果”与“系统适应性测试表”作为主（被从属的）项目与从属项目“Primaide 系统管理器信赖性报告”互相关联。在实际的计算结果中，如果上述“温度/压力的图表”、“数据诊断消息”、“模块性能结果”与“系统适应性测试表”都不存在的情况下，“Primaide 系统管理器信赖性报告”的报告输出将会被取消。如果存在其中任何一个，则可以输出“Primaide 系统管理器信赖性报告”。



10.7.2 更改从属关系

在报告模板显示区域内，变更报告画面模板项目的从属关系。要改变从属关系：

- ① 单击从属关系图标，显示具有从属关系的项目。指定（点击）要变更的从属关系项目。



- ② 单击从属关系变更图标。

要删除主（被从属）的项目时：

- ① a) 在从属于列表框中指定要删除的项目。
- b) 单击 **删除** 按钮。

要追加主（被从属）的项目时：

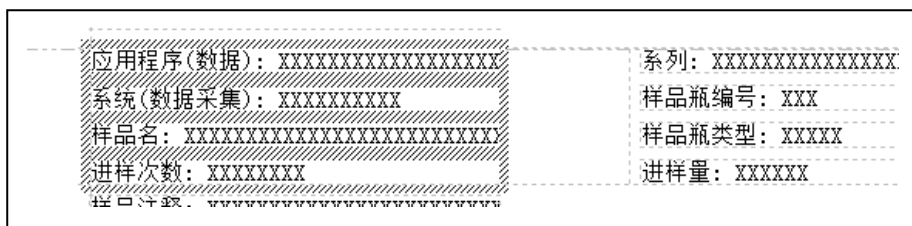
- ① a) 在从属元的选择列表框中指定要追加的项目。
- b) 单击 **追加** 按钮。



10.7.3 设定从属关系

在报告模板显示区域内，按以下顺序设定新的项目从属关系：

- ① 指定要设为从属关系的项目(可选多个)。



- ② 单击从属关系变更图标。

要追加主（被从属）项目时：

- a) : 在从属元的选择列表框中指定要追加的项目。
- b) : 单击追加按钮。



10.8 生成主画面

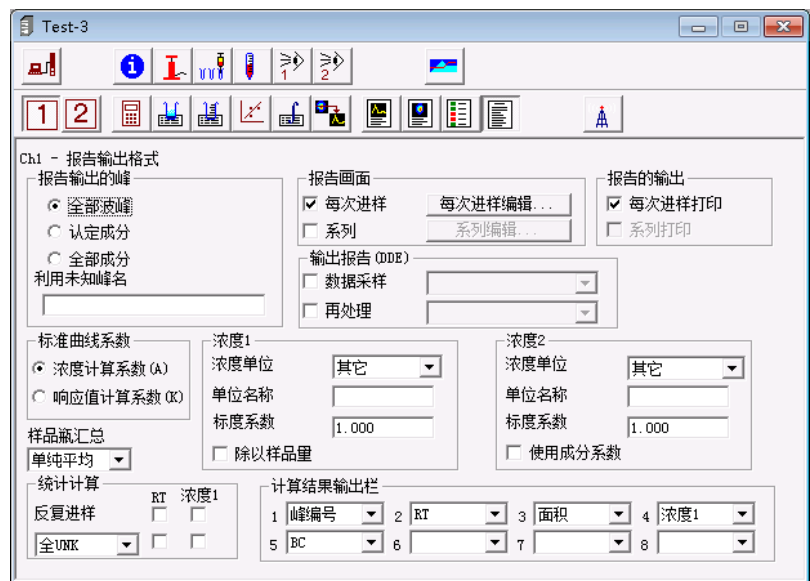
主画面是报告画面模板的基准模板。它可以作为文件来保存。

有两种方法可以生成主画面。一是将已存在的主画面编辑为新的主画面。二是新建主画面。关于主画面模板项目的编辑，请参照“10.6.3 编辑画面模板”与“10.7 报告项目的从属关系”。

10.8.1 根据已存主画面生成新画面

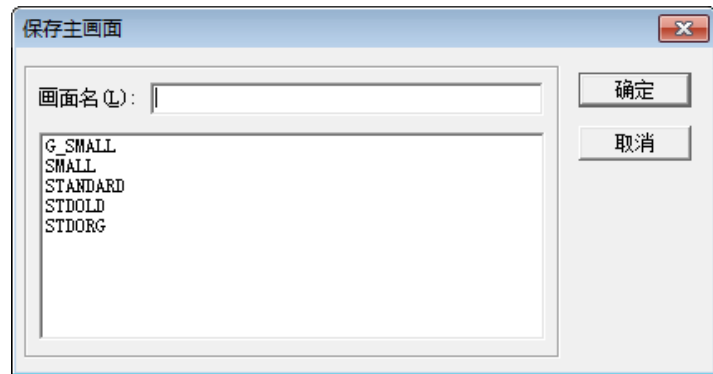
要生成主画面文件，编辑已存的主画面模板的方法比较简单。方法是：

- ① 单击方法窗口/报告输出的**每次进样编辑**按钮或**系列编辑**按钮均可访问报告画面编辑器。



单击**每次进样编辑**按钮或**系列编辑**按钮都可以生成主画面，没有区别。

- ⑤ 编辑结束后，保存主画面。在文件菜单中选择“另存为”命令，输入画面名，单击**确定**按钮。



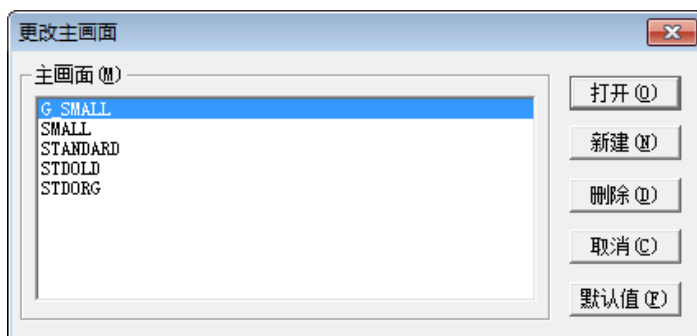
保存已打开的主画面文件的变更内容时，请在文件菜单里选择“保存”命令。

注：Primaide 系统管理初始设定的画面文件保存在“Primaide 系统管理安装盘”里。要复原初始设定的画面文件，请用 Windows 管理器将文件复制到“\Win32APP\Primaide\LAYOUTS”目录下。

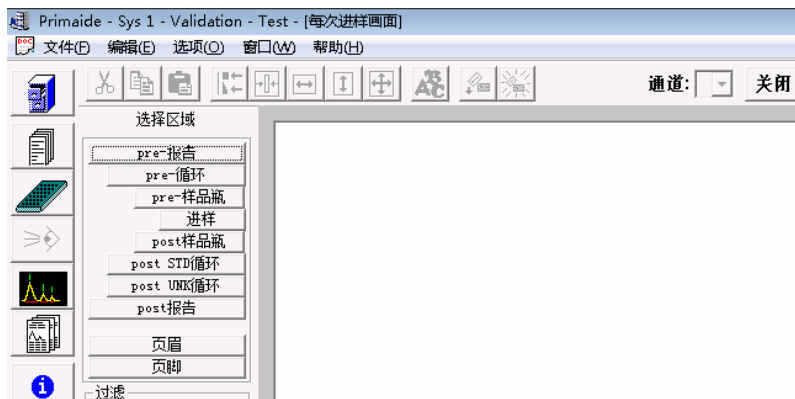
10.8.2 新建主画面文件

新建主画面文件：

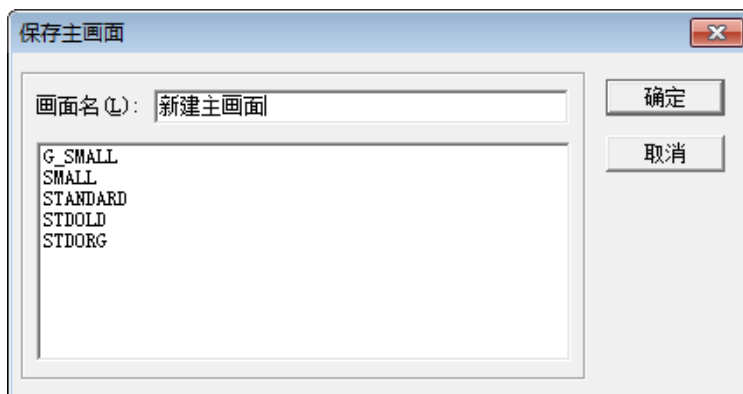
- ① 单击方法窗口/报告输出的“每次进样编辑”按钮，或者是单击“系列编辑”按钮均可以访问报告画面编辑器。
(单击“每次进样编辑”或“系列编辑”按钮均可生成主画面，没有区别。)
- ② 选择文件菜单的“更改主画面”命令。在更改主画面对话框中指定要编辑的主画面文件，然后单击“新建”按钮。



- ③ 报告画面编辑器切换为“主画面编辑模式”后，显示指定的主画面模板。在主画面编辑模式下，标题栏显示为“主画面：没有标题”。



- ④ 编辑主画面。模板的编辑方法请参照“10.6.3 编辑画面模板”与“10.7 报告项目的从属关系”。
- ⑤ 编辑结束后，保存主画面。在文件菜单里选择“另存为”命令，输入画面名，单击确定按钮。



10.9 主画面文件内容

在 Primaide 系统管理程序中，含有以下初始设定的主画面文件。

- (1) STANDARD 画面文件：
是包含方法文件中所有项目的模板文件，主要用于生成新的方法文件。最适合做为自定义主画面文件的基础模板来使用。
- (2) G_SMALL 画面文件：
是将 STANDARD 画面文件的分析信息最少化的画面文件。
- (3) SMALL 画面文件：
是将 STANDARD 画面文件的分析信息最少化，并删除所有图像的画面文件。

10.10 特殊处理结果的报告

在 STANDARD 画面中不包括经过特殊处理生成的报告项目。所以请手动在报告画面模板中追加以下特殊的报告项目。

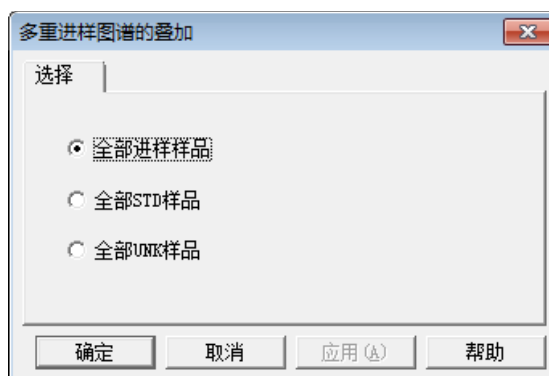
- 多重进样图谱的叠加
- 分解物报告

10.10.1 多重进样图谱的叠加

多重进样图谱的叠加功能指的是将不同样品的色谱图进行重叠的功能。可以从 post 样品瓶、post STD 循环、post UNK 循环与 post 报告中选择叠加内容。

选择要重叠的色谱：

- ① 在画面显示区域内追加“多重进样图谱的叠加”项目。
- ② 单击画面显示区域内的“多重进样图谱的叠加”项目。



- ③ 可能的进样范围根据追加了“多重进样图谱的叠加”项目的区域自动判断。选择进样范围后单击 **确定** 按钮。

注：多重进样图谱叠加的偏移值，可以用方法文件“色谱显示”中的多重进样偏移来设定。关于详细，请参照“4.3 方法文件的设定”。

10.10.2 分解物报告

在分解物报告功能中可以输出分解物成分相对主成分的相对面积比。要输出报告：

- ① 指定定量计算方法为除去面积（峰高）%法以外。
- ② 在成分表里指定主成分与分解物成分。
- ③ 在报告画面模板里追加“分解物表”项目。

第 11 章 模块详细信息窗口的功能与操作

模块详细信息窗口是确认模块详细信息/控制模块的窗口。

11.1 模块详细信息窗口的状态显示

在模块信息窗口可以显示已连接的各模块的状态。每个模块的显示状态如下所示。

但是在执行噪音测试、单分析与连续分析时，模块状态显示的是系统状态。上述(噪音测试、单分析与连续分析)以外的情况则显示以下固有状态。

共通 (系统状态)

处理中	处于条件送信中、处理中或计算中时显示。
正在等待 ****的 准备状态	在等待各模块的准备状态 (****) 时显示。例如，等待泵的梯度结束后的准备状态时。
正在等待进样	处于自动进样器的等待样品进样状态时显示。
基线测试	执行基线测试时显示。
数据采集中	数据采集中显示。
监测器	连续分析结束时显示。

1110 泵

正在停止送液	泵送液停止时显示。
正在净化中	泵在执行清洗时显示。
键盘输入中	以 UI 键盘的按键进行输入时，显示键盘输入状态。
错误	1110 泵发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时，一般是在泵送液开始时显示。
忙	上述以外忙的状态时显示。

1210 自动进样器

等待返回到初始位置	等待返回到初始位置时显示。 单击 <u>返回到初始位置</u> 按钮。
键盘输入中	以 UI 键盘的按键进行输入时，显示键盘输入状态。
错误	1210 自动进样器发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时显示。
忙	洗净进样器等上述以外忙的状态时显示。

1310 柱温箱

停止温度控制	温度控制停止时显示。
开门	柱温箱的门打开时显示。
等待准备	柱温箱还没有达到准备状态时显示。(包含等待时间。)
键盘输入中	以 UI 键盘的按键进行输入时，显示键盘输入状态。
错误	1310 柱温箱发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时显示。
忙	上述以外忙的状态时显示。

1410 UV 检测器

波长移动中	采集光谱等移动波长时显示。
自动调零	自动调零执行中显示。
键盘输入中	以 UI 键盘的按键进行输入时，显示键盘输入状态。
错误	1410 UV 检测器发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时显示。
忙	上述以外忙状态时显示。

1430 DAD

错误	1430DAD 发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时显示。
忙	上述以外忙的状态时显示。

USB-AID

错误	USB-AID 发生错误时显示。
准备	在测定准备结束时显示。
忙	上述以外忙的状态时显示。

11.2 模块详细信息窗口的控制命令

下面显示的是模块详细信息窗口的控制功能以及装置状态动作一览表。表 11-1 是对各模块的按钮功能的说明。表 11-2 表示了各个功能可否操作。

表 11-1 模块详细信息控制功能一览表

模块名	按钮名/功能	说明
1110 泵	净化	指定泵净化的流量后，进行净化。
	手动设定	手动设定泵（压力限度, 溶剂的组成以及流量）。
	泵 A/B 压力零点校正	进行泵的压力零点校正。
	泵 A/B 的维护	日志的确认以及重置。
1210 自动进样器	冲洗口	清洗冲洗口。
	柱塞的清洗	进行泵柱塞的清洗。
	净化位置	移动到净化位置。
	返回到初始位置	将阀与注射针等移动到初始位置。
	显示维护信息	日志的确认以及重置。
1310 柱温箱	设定	设定柱温箱的温度。
1410UV 检测器	设定	设定测定的波长。
	点灯	点亮 D ₂ 灯。
	关灯	关闭 D ₂ 灯。关灯时，显示确认信息。
	自动调零	执行自动调零。
	灯能量	显示 250 nm 下灯的能量值。结果会自动注册到环境设定的 HPLC 模块的详细信息中。
	显示维护信息	日志的确认，以及重置。
1430 DAD	打开 D ₂ 灯	点亮 D ₂ 灯。
	关闭 D ₂ 灯	关闭 D ₂ 灯。关灯时，显示确认信息。
	打开 W 灯	点亮 W 灯。
	关闭 W 灯	关闭 W 灯。关灯时，显示确认信息。
	设定（狭缝）	设定狭缝宽度（Fine（1 nm），Coarse（4 nm））。
	设定（灯模式）	设定灯的模式（D2&W 模式（打开 D ₂ 以及 W 灯），D2 模式（打开 D ₂ 灯），W 模式（打开 W 灯））。
	自动调零	执行自动调零。
	灯能量	显示 250nm 以及 600nm 下灯的能量值。结果会自动注册到环境设定的 HPLC 模块的详细信息里。
	显示维护信息	日志的确认以及重置。

表 11-2 控制命令动作可否一览表

模块名称	控制命令	打开监测器画面之前 (※1)	待机监测中 (※2)	单分析或连续分析中 (※3)
1110 泵	净化	○	×	×
	手动设定	○	○	×
	泵 A/B 压力零点校正	×	×	×
	泵 A/B 的维护	○	×	×
1210 自动进样器	冲洗口	○	○	×
	柱塞的清洗	○	○	×
	净化位置	○	×	×
	返回到初始位置	○	○	×
	显示维护信息	○	×	×
1310 柱温箱	设定	○	×	×
1410 UV 检测器	设定	○	○	×
	点灯	○	○	×
	关灯	○	○	×
	自动调零	○	○	×
	灯能量	○	×	×
	显示维护信息	○	×	×
1430 DAD	打开 D2 灯	○	×	×
	关闭 D2 灯	○	×	×
	打开 W 灯	○	×	×
	关闭 W 灯	○	×	×
	设定 (狭缝)	○	×	×
	设定 (灯模式)	○	×	×
	自动调零	○	○	×
	灯能量	○	×	×
	显示维护信息	○	×	×

○：可操作

×：不可操作

(※1)：指的是初始化处理结束后，数据采集监测画面打开之前的状态。

(※2)：指的是初始化处理结束后，打开数据采集监测画面，执行监测中的状态。

(※3)：指的是初始化处理结束后，打开数据采集监测画面，开始执行单分析或连续分析后的状态。

11.3 状态显示

11.3.1 1110 泵状态显示

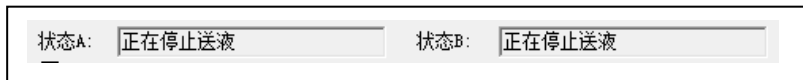
1110 泵连接时，在模块的详细信息窗口显示有泵标签。



状态A/B

显示当前状态。

低压梯度中指定了泵 A 与泵 B 时，状态 B 显示在状态 A 的右侧。



低压梯度中指定了泵 A 与泵 B 时，泵 B 的项目显示在泵 A 的下方。



压力

显示当前泵的压力。单位使用的是在环境设定中设定的单位。

最大

显示压力上限设定值。

最小

显示压力下限设定值。

流量

当前泵的流量以 mL / min 的单位显示。

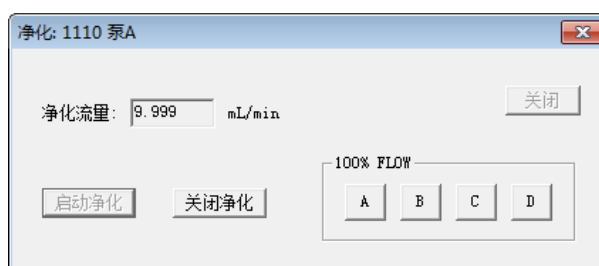
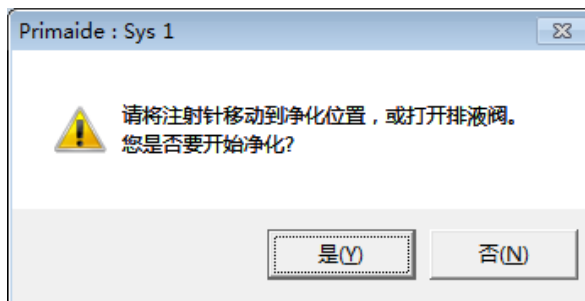
溶剂 %A-%D

显示各种溶剂的比例。

控制

净化

单击[净化]按钮，显示净化设定界面。单击[启动净化]按钮显示是否要净化的确认对话框。



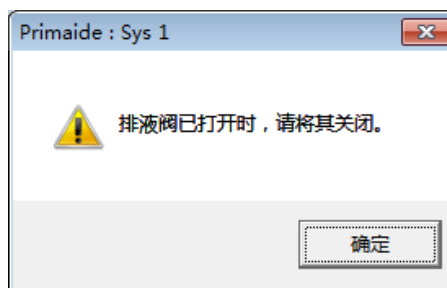
单击[是]按钮以当前混合比例开始净化。压力的上下限值：最小：0，最大：30 (kgf/cm²)。显示的净化流量为当前设定值。要变更净化流量，请在模块参数设定窗口进行。

100% FLOW A-D

通过单击按钮（**A**、**B**、**C**、**D**）可以切换净化中流路。

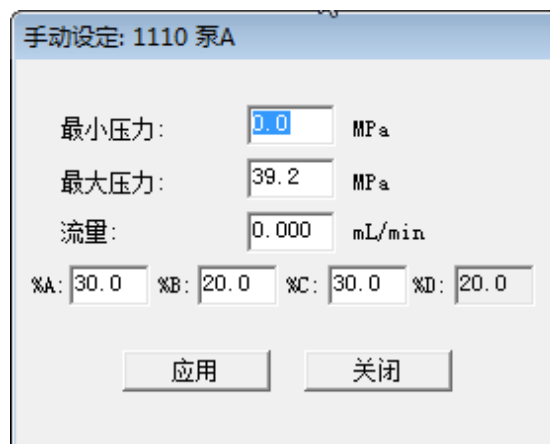
单击[关闭净化]按钮可以中止净化。

单击[关闭]按钮后显示以下对话框。



手动设定

可以手动设定任意的送液条件。
单击该按钮，显示手动设定画面。



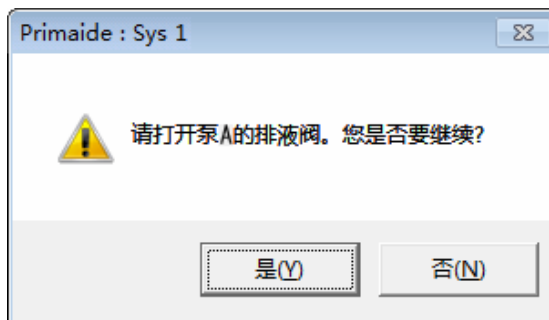
The image shows a software dialog box titled "手动设定: 1110 泵A". It contains several input fields for setting pump parameters. The "最小压力" (Minimum Pressure) field is set to 0.0 MPa. The "最大压力" (Maximum Pressure) field is set to 39.2 MPa. The "流量" (Flow Rate) field is set to 0.000 mL/min. Below these are four percentage fields: %A: 30.0, %B: 20.0, %C: 30.0, and %D: 20.0. At the bottom, there are two buttons: "应用" (Apply) and "关闭" (Close).

最小压力:	0.0	MPa					
最大压力:	39.2	MPa					
流量:	0.000	mL/min					
%A:	30.0	%B:	20.0	%C:	30.0	%D:	20.0

输入条件后，单击应用按钮将输液条件应用于泵。输入%A-%C后，%D会自动计算出来。

泵 A 压力零点校正：

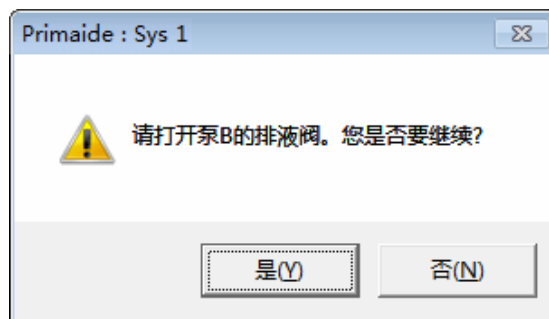
单击该按钮显示下面的信息。



单击 按钮关闭消息框，开始泵 A 的压力零点校正。

泵 B 压力零点校正：

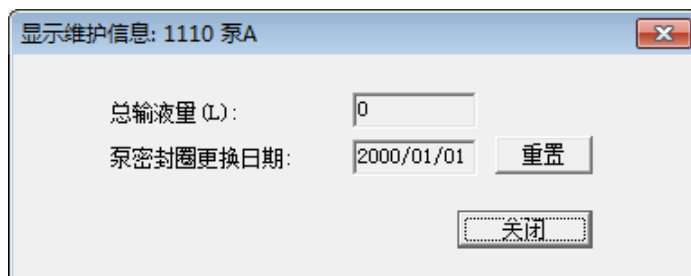
泵 B 压力零点校正：单击该按钮显示下面的消息框。



单击 按钮关闭消息框，开始泵 B 的压力零点校正。

显示维护信息

单击该按钮显示维护信息。在该消息框中可以确认泵密封圈的使用开始日期以及使用开始后的总输液量。并且，在更换泵密封圈后还可以重置这些信息。

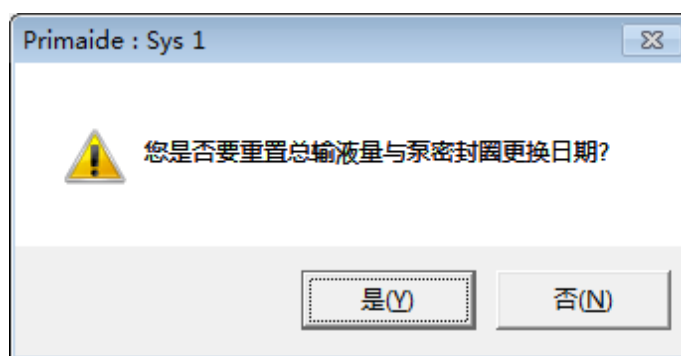


关闭

单击 **关闭** 按钮关闭显示维护信息消息框。

重置

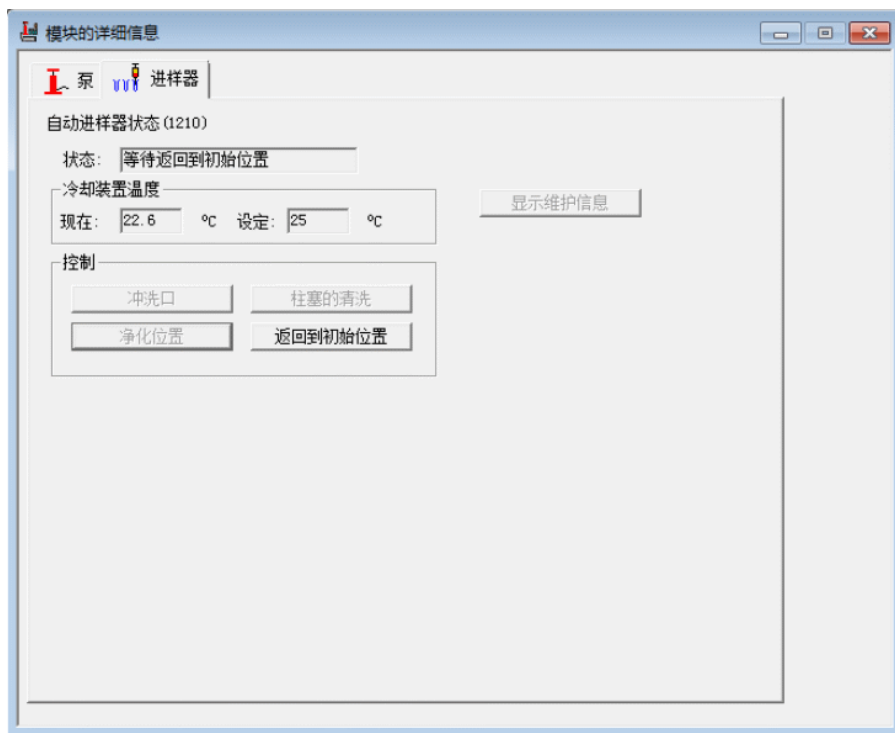
单击 **重置** 按钮显示下面的信息。



单击 **是** 按钮更新装置本体的日志（变更日期自动设置为 PC 日期）。重置内容与重置前总输液量都被记录（与环境设定中“GLP 选项”的设定无关）到环境设定日志中。

11.3.2 1210 自动进样器状态显示

1210 自动进样器连接时，进样器标签显示在模块的详细信息窗口中。



状态

显示当前状态。

冷却装置温度

现在

显示冷却装置当前的温度。

不使用冷却装置时则不显示温度。

设定

显示冷却装置的设定温度 (°C)。

不使用冷却装置时则不显示设定温度。

显示维护信息

单击该按钮显示维护信息。在该消息框中可以确认进样阀垫圈等的使用开始日期以及使用次数。另外，更换进样阀垫圈等后还可以重置这些信息。

	使用次数	更换日期	
进样口垫圈:	22	2011/08/19	重置
进样阀垫圈:	28	2011/08/19	重置
注射器:	18	2011/08/19	重置
注射器阀垫圈:	43	2011/08/19	重置

关闭

关闭

单击**关闭**按钮关闭显示维护信息消息框。

重置

单击**重置**显示下面的信息。

(进样口垫圈的例子)

Primaide : Sys 1

重置进样口垫圈的使用次数与更换日期。可以吗?

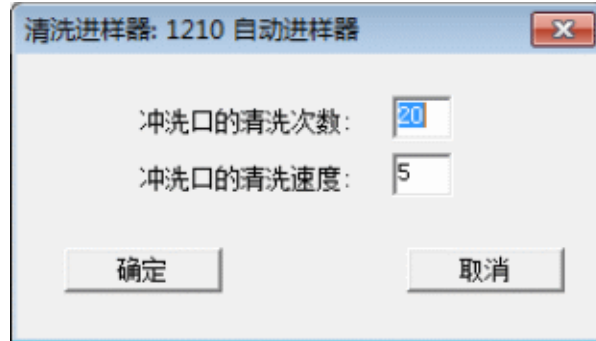
是(Y) 否(N)

单击**是**按钮更新装置本体的日志（变更日期自动设置为 PC 日期）。重置内容与重置前垫圈的使用次数等都被记录（与环境设定“GLP 选项”的设定无关）到环境设定日志中。

控制

清洗进样器

单击此按钮后开始清洗冲洗口。



冲洗口的清洗次数

在 0-20 之间指定注射针的清洗次数。初始值显示为 1210 自动进样器本体的设定值。

冲洗口的清洗速度

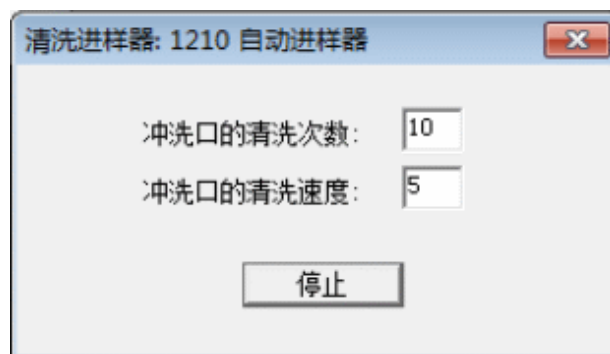
在 1 (Slow) -5 (Fast) 之间设定注射针的清洗速度。(5.0 mL 注射器的设定范围为 1 (Slow) -3 (Fast))。初始值显示为 1210 自动进样器本体的设定值。

注： 因注射器容量的不同，清洗速度的输入范围也会不同。

注射器容量 (mL)	清洗速度 (设定范围)
0.1, 0.5	1 - 5
5.0	1 - 3

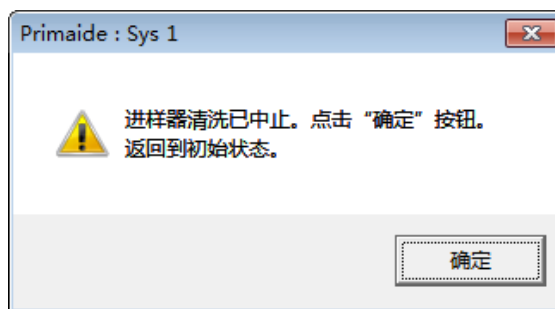
确定

单击 **确定** 按钮切换为以下画面。中途要停止清洗时，请点击 **停止** 按钮。



停止

单击 **停止** 按钮中止清洗。停止后显示以下对话框。

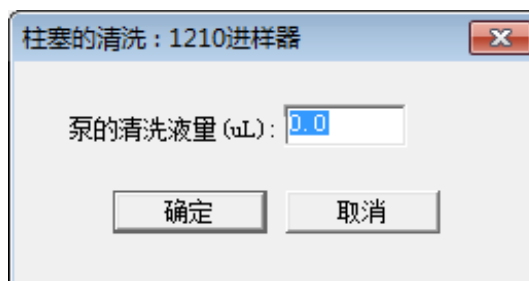


确定

单击 **确定** 按钮返回到清洗进样器画面。

柱塞的清洗

泵柱塞清洗装置（选配）与清洗阀口连接后，1110 泵的柱塞垫圈可以用自动进样器清洗液来清洗。

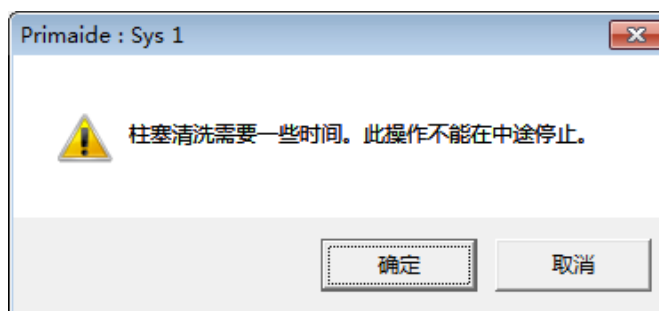


泵的清洗液量(uL)

在 0.0 - 5000.0 范围内设定泵清洗液量。

确定

显示下面的信息后，单击 **确定** 按钮后开始清洗泵柱塞。



单击 **取消** 按钮后中止泵柱塞的清洗。

净化位置

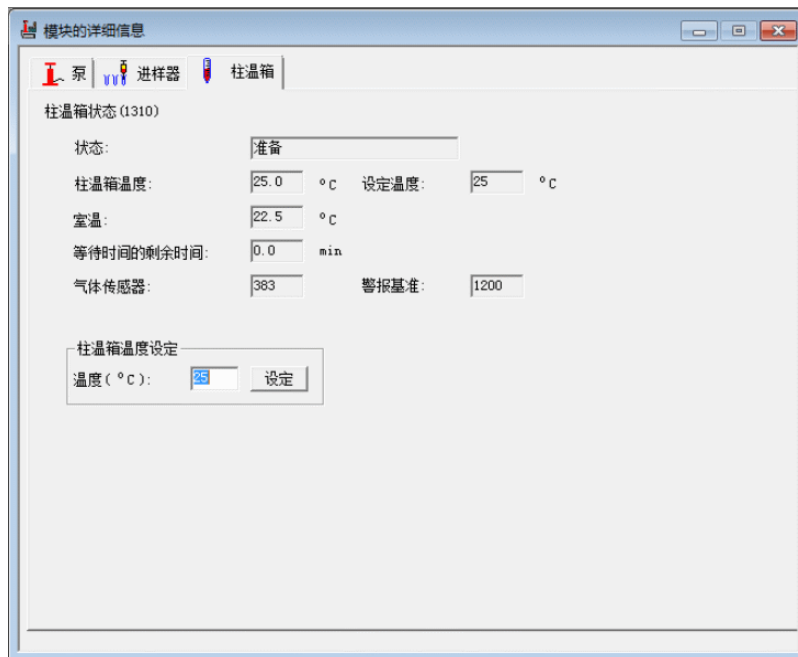
单击此按钮后，自动进样器移动到净化位置。此功能与 1110 泵净化功能组合后，即使不打开排液阀，也可以将到进样器进样阀为止的流路清洗干净。

返回到初始位置

单击该按钮后进样器返回到初始位置。

11.3.3 1310 柱温箱 状态显示

1310 柱温箱连接时，柱温箱标签显示在模块的详细信息窗口。



状态

显示当前柱温箱状态。

柱温箱温度

显示当前柱温箱温度。

设定温度

显示柱温箱的设定温度。

室温

显示当前室温。

等待时间的剩余时间

到达柱温箱准备状态（温度稳定）的剩余时间。

气体传感器

显示柱温箱内的气体传感器的值。

警报基准

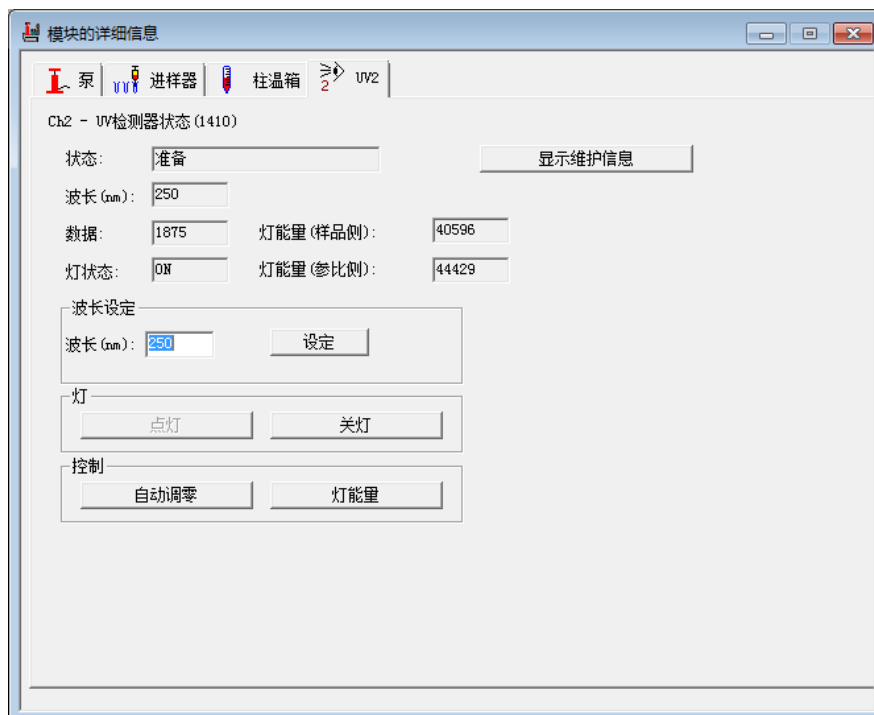
显示柱温箱内的警报基准值。

柱温箱温度设定

输入温度（℃）后，单击 **设定** 按钮设定 1310 柱温箱的温度。

11.3.4 1410 UV 检测器状态显示

1410 UV 检测器连接时，在模块的详细信息窗口显示有 UV 1 或 UV 2 的标签。UV 1 在设定为通道 1 时，UV 2 在设定为通道 2 时显示。



状态

显示当前检测器状态。

波长 (nm)

显示设定波长。

数据

将测定数据值以计数值显示。

灯状态

显示当前灯状态。

灯能量 (样品侧)

显示当前的灯能量 (样品侧)。

灯能量 (参比例)

显示当前的灯能量 (参比例)。

波长设定

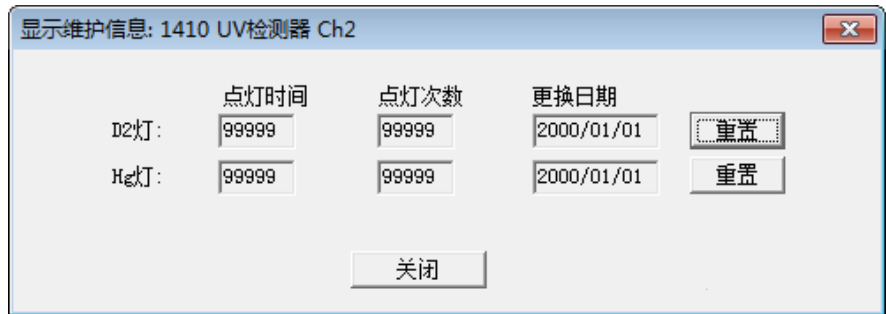
在 190-600 nm 的范围内输入波长 (nm) 后，单击 **设定** 按钮。

设定

单击该按钮后，设定指定波长。

显示维护信息

单击该按钮后显示维护信息。在该消息框中可以确认 D2 与 Hg 灯的累积点灯时间，点灯次数以及使用开始日期(更换日期)。并且，更换灯后还可以重置这些信息。



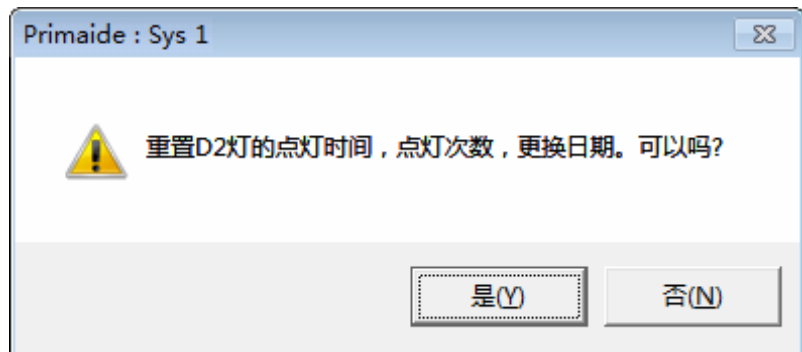
关闭

单击该按钮关闭显示维护信息消息框。

重置

单击[重置]后显示下面的信息。

(D2 灯的例子)



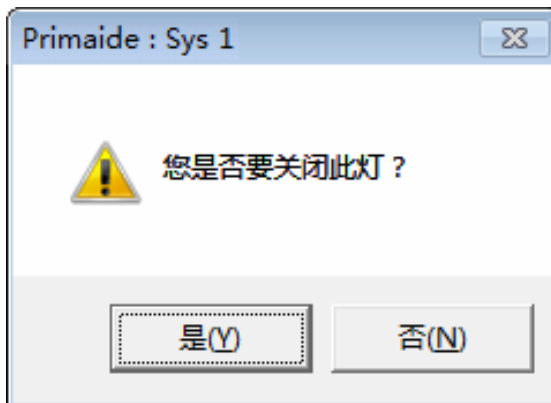
单击[是]按钮更新装置本体的日志(变更日期自动设置为PC日期)。重置内容与重置前的维护信息都被记录(与环境设定中“GLP选项”的设定无关)到环境设定日志中。

点灯

点击该按钮打开检测器的灯。

关灯

单击该按钮显示是否要关灯的确认信息对话框。



单击是按钮后关灯。单击否按钮后取消关灯操作。

自动调零

检测器执行自动调零。自动调零后，信号设为 0 AU。自动调零按钮在执行单分析、连续分析以及噪音测试过程中呈不可用状态。

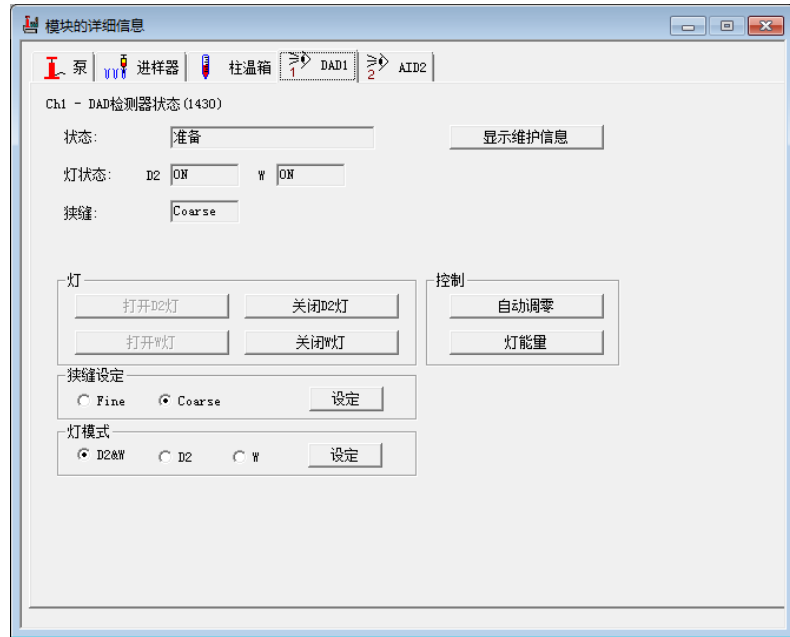
灯能量

单击灯能量按钮打开灯能量确认结果对话框，并显示当前灯能量（参比侧）的信息。确认结果将自动注册到环境设定日志中（与环境设定中“GLP 选项”的设定无关）。



11.3.5 1430 DAD 状态显示

1430 DAD 连接时，在模块的详细信息窗口显示有 DAD 1 的标签。DAD 固定设置在通道 1。



状态

显示当前检测器的状态。

灯状态

显示当前 D2 以及 W 灯状态。

狭缝

显示设定的狭缝。



显示维护信息

单击此按钮显示“显示维护信息”对话框。在该框中可以确认 D2, W 与 Hg 灯的累积点灯时间, 点灯次数以及使用开始日期 (更换日期)。并且, 在更换灯后还可以重置这些信息。

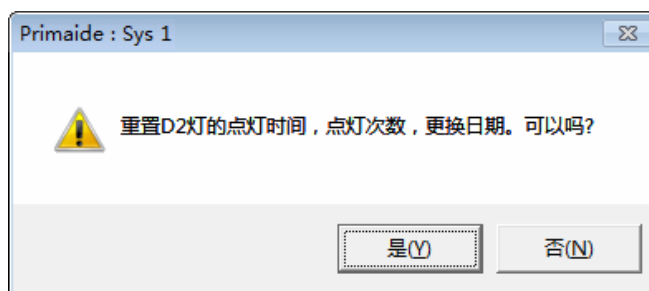
关闭

单击此按钮关闭显示维护信息消息框。

重置

单击**重置**按钮显示下面的信息。

(D2 灯的例子)



单击**是**按钮更新装置本体的日志（变更日期自动设置为 PC 日期）。重置内容与重置前的维护信息都被记录（与环境设定中“GLP 选项”的设定无关）到环境设定日志中。

狭缝设定

选择狭缝（Fine（1 nm）或 Coarse（4 nm））后，单击**设定**按钮。

设定

单击该按钮设定指定狭缝。

灯模式

选择灯的模式（D2&W，D2，W）后，单击**设定**按钮。

设定

单击该按钮设定指定灯模式。

打开 D2 灯

单击该按钮后点亮检测器 D2 灯。

关闭 D2 灯

单击该按钮后关闭检测器 D2 灯。

打开 W 灯

单击该按钮后点亮检测器 W 灯。

关闭 W 灯

单击该按钮后关闭检测器 W 灯。

自动调零

检测器执行自动调零。自动调零后，信号设置为 0 AU。**自动调零**按钮在执行单分析、连续分析以及噪音测试中呈不可用状态。

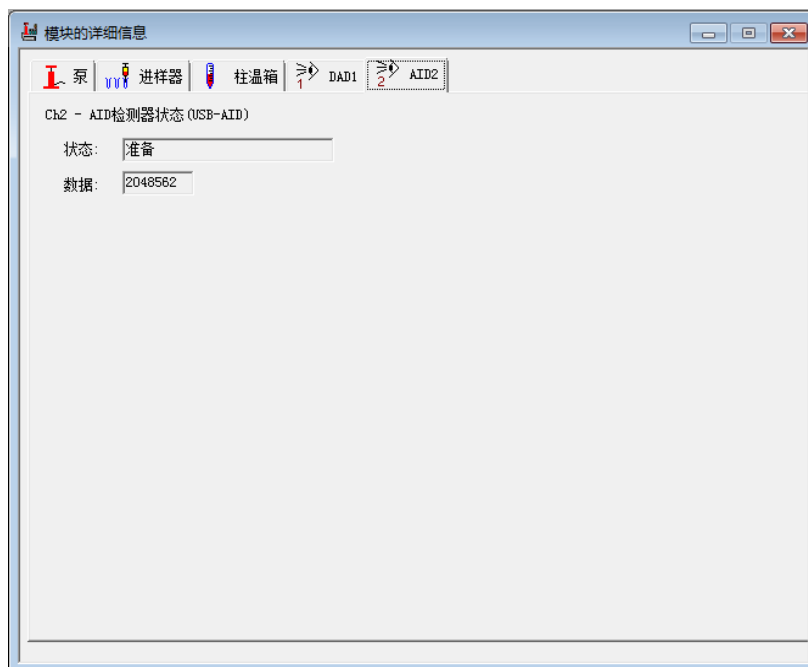
灯能量

单击灯能量按钮打开“灯能量确认结果”对话框，显示当前灯能量信息。确认结果将自动注册到环境设定日志中(与环境设定中“GLP 选项”的设定无关)。



11.3.6 USB-AID 状态显示

USB-AID 检测器连接时，在模块的详细信息窗口显示有 AID1 与 AID2 的标签。AID1 在设定为通道 1，AID2 在设定为通道 2 时显示。



状态

显示当前 USB-AID 的状态。

数据

将测定数据值以计数值显示。

第12章 数据再处理窗口—3D数据—

3D数据不可以直接进行色谱处理（峰的判定，面积、高度的计算）。数据再处理窗口（3D数据）是从3D数据中提取色谱与光谱的窗口。另外，还可将提取的光谱追加到光谱数据库。同时还可以通过数据库菜单对光谱数据库进行访问。关于提取色谱的处理，请参照“第8章数据再处理窗口—色谱—”。

12.1 数据再处理窗口的构成

菜单命令与相关图标的功能如下所示：

The screenshot shows the software interface with several callout boxes and labels:

- Top Left Callout:**
 - 新建(N)... Ctrl+N
 - 打开(O)... Ctrl+O
 - 关闭(C)
 - 全部关闭
 - 保存(S) Ctrl+S
 - 另存为(A)...
 - 保存方法
 - 另存方法...
 - 打印(P)... Ctrl+P
 - 打印预览(V)
 - 打印设置(R)...
 - 退出(X)
- Top Middle Callout:**
 - 撤销(U) Ctrl+Z
 - 剪切(T) Ctrl+X
 - 复制(C) Ctrl+C
 - 粘贴(P) Ctrl+V
 - 编辑颜色(R)...
- Top Right Callout:**
 - 光谱数据库
 - 查询数据库...
 - 追加到数据库...
 - 清除数据库中光谱
 - 查询逆向数据库...
- Right Side Callout:**
 - 数据采集信息
 - 等高线图
 - 光谱
 - 未被处理的色谱
 - 3D图
 - 处理过的色谱
 - 纯度检测光谱
 - 显示进样表
 - 显示最佳波长色谱表
 - 显示成分表
 - 显示波形处理参数表
- Left Side Callouts:**
 - 纯度检测(P):**
 - 更新最佳色谱
 - 复原最佳色谱
 - 替换独立数据文件中的光谱...
 - 自动标度(A):**
 - 吸光光谱(S)
 - 规格化光谱(N)
 - 添加光谱
 - 解除冻结光谱
 - 指定固定波长色谱
 - 清除固定波长色谱
 - 显示选项(O)...
- Labels on the main window:**
 - 光谱显示区域 (Spectral display area)
 - 表显示区域 (Table display area)
 - 时间光标 (Time cursor)
 - 波长光标 (Wavelength cursor)
 - 等高线图显示区域 (Contour plot display area)
- Bottom Callout:**
 - 重叠显示(C)
 - 并排显示(T)
 - 排列图标(A)
 - 1 Analysis of PAH (3D-Rep)
 - 2 进样表: Samples repeatability(3d)
 - 3 Analysis of - 样品瓶1 进样 1 STANDARD001 - DAD等高线图

12.1.1 文件菜单

文件菜单中有以下命令：

打开

打开打开文件窗口，使已存方法文件，样品表文件，数据系列文件处于可以打开的状态。

全部关闭

无论窗口是否正在使用，关闭所有打开的窗口。这是为了在任意窗口进行了修改时，可以保存修改的内容。

作为例外，数据采集窗口处于“数据采集中”时，除数据采集窗口和执行中的样品表之外，所有的窗口全部关闭。

保存方法

保存有效的方法文件。如果有“输入适当的方法参数”信息显示时，回答所有信息后，对硬盘中已存的文件内容进行覆盖。

另存方法

确认了方法文件后，打开“另存方法”对话框，使样品方法文件名和应用程序处于可指定的状态。

打印

将显示的方法文件以文本文件的形式打印出来。

打印预览

显示打印信息，指定打印页数。

打印设置

打印机，纸张方向（纵向或横向），纸张大小（Letter, legal, A4）以及纸张来源的选择。

退出

关闭Primaide 系统管理。数据采集中不可以使用退出命令。请先关闭数据采集监测器后，再进行本操作。

12.1.3 数据处理菜单

在数据处理菜单中有以下命令。但是这些命令能否使用取决于当前打开的窗口，呈灰色显示的图标与命令不可用。

纯度检测

对在等高线图上用波长光标指定了的色谱图进行峰的纯度检测。

纯度计算对象包括所有高于峰纯度判定基准（在当前使用的方法文件中有所规定）的峰。纯度检测结果以图形显示在图上，纯度值则显示在峰的附近。

更新最佳色谱

此命令是将提取色谱用参数（生成当前显示中的最佳波长色谱图时使用的参数）转送到使用中的最佳波长色谱表时使用。

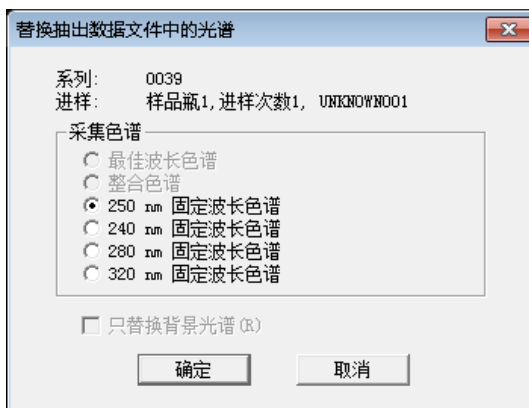
选择该命令后，最佳波长色谱表中的旧参数将被替换为新的参数（生成当前显示中的最佳波长色谱图时使用的参数）。

复原最佳色谱

此命令是在根据使用中方法文件的最佳波长色谱表的规定，复原原始的最佳波长色谱图时使用的。选择该命令后，显示的最佳波长色谱以使用中方法文件的最佳波长色谱表的参数重新生成色谱。

替换抽出数据文件中的光谱

将提取色谱的峰光谱自动替换为以等高线图上的时间光标指定的光谱。另外，提取色谱的峰光谱用背景光谱也自动替换为指定的背景光谱。背景光谱的“差光谱的校正系数”主要是在替换提取色谱的光谱时使用。



替换用光谱只限于峰光谱两侧之间的光谱。整合时间范围只适用于两侧光谱间的整合光谱作为替换用光谱时使用。

12.1.4 选项菜单

选项菜单中有以下执行命令：

自动标度

调整吸光度标度以显示最高峰。

对零偏移变更与负数据点不进行定标。

吸光度光谱

用吸光度来显示光谱。

光谱通过使用中方法的轴标度来显示。

规格化光谱

用规格化的标度来显示光谱。

将光谱的最大强度设为1.0，规一化光谱数据。



冻结光谱模式、连接图标：



冻结光谱

设为光谱冻结模式。



冻结光谱：

单击此图标后，时间光标上的光谱被冻结。最多可以冻结4条光谱。



解除冻结光谱：

解除所有冻结的光谱。



固定波长光谱模式、连接图标：



指定固定波长光谱

设为固定波长光谱模式。



指定固定波长光谱：

单击此图标后波长光标处的光谱被冻结。最多可以冻结6条光谱。



清除固定波长光谱：

清除所有显示的固定波长光谱。



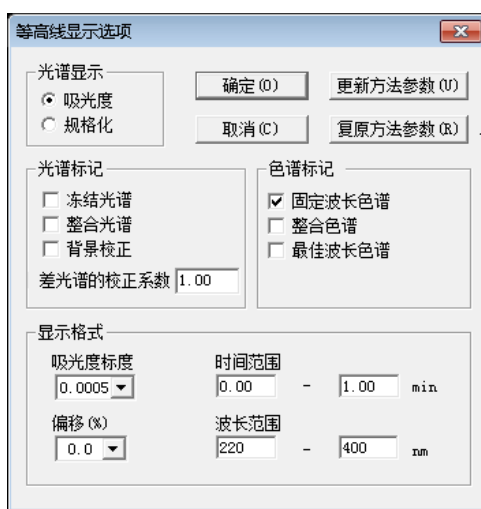
背景校正

指定背景校正用光谱。



显示选项:

显示3D数据处理窗口的色谱显示选项框。在显示选项中可以更改等高线图的显示标度（信号强度，时间范围），还可以指定窗口显示的光谱类型与色谱类型。



用方法文件的设定值表示

将更新值保存到方法文件中

12.1.5 数据库菜单

在数据库菜单中有以下可使用命令：（详细请参照“13.3 使用光谱数据库”）

光谱数据库

打开光谱数据库窗口。

查询数据库

对等高线图中时间光标位置的光谱或者纯度检测光谱窗口中指定的峰的光谱进行光谱数据库的检索。

追加到数据库

将等高线图中时间光标位置的光谱或者纯度检测光谱窗口中指定的峰的光谱追加到光谱数据库中。

清除数据库中光谱

删除光谱显示范围内所有检索光谱。

12. 1. 6 显示菜单



数据采集信息:

显示与显示中的色谱相关的数据采集信息的窗口。数据采集信息包括采集数据时的“装置参数”、“样品进样参数”、“连续分析中自动噪音测试的结果”和“测试中发生的错误信息”等。



等高线图

等高线图指的是数据再处理窗口中最初显示的图。

在等高线图中可以进行以下的处理。

- 光谱的叠加显示
- 色谱的叠加显示
- 生成/修改最佳波长色谱图
- 生成/修改最佳波长色谱表
- 生成/修改整合色谱
- 修改整合波长范围
- 生成/修改整合光谱
- 修改整合时间范围
- 指定固定波长色谱
- 背景光谱的指定/背景校正光谱的显示
- 指定固定时间光谱（冻结光谱）
- 执行/显示峰纯度检测
- 使用光谱数据库



光谱:

扩大显示等高线图显示画面左部的光谱图。



未被处理的色谱:

扩大显示等高线图显示画面上部的色谱图。



3D图:

显示DAD数据的3D立体图。



处理过的色谱, 连接图标:



纯度检测光谱

显示数据再处理窗口（详细请参照“第8章数据再处理窗口-色谱图-”）。



纯度检测光谱:

显示纯度检测光谱窗口。在窗口列表框中显示有检测出的所有峰与峰的信息（RT-保留时间，纯度）。在列表框中指定（单击）峰后，对应每个指定峰会取3个光谱（左边界，峰顶，右边界）会显示出来。



进样表:

在表显示区域内显示进样表（详细请参照“第7章 进样表窗口的功能与操作”）。



最佳波长色谱表:

设为最佳波长色谱模式。在表显示区域内显示方法文件的最佳波长色谱表。同时显示最佳波长色谱与波长线。


12.1.7 窗口菜单

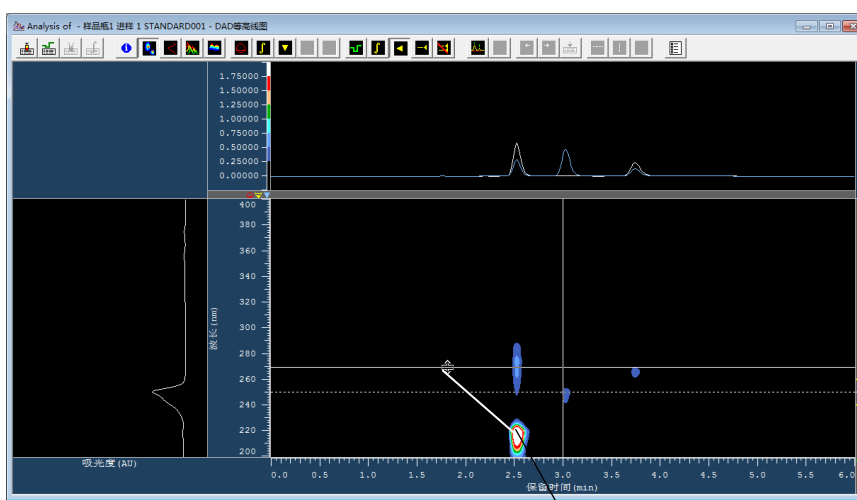
显示当前打开的窗口名称。在指定了多个进样数据时，对应各数据的窗口会重叠显示出来。可以指定显示在最前面的窗口。

12. 2 设定・修改色谱的提取参数

在3D数据处理窗口，可以通过图形化处理显示或提取任意波长的色谱图。边确认色谱区域内显示的色谱图，边对提取参数进行设定、修改与最优化。还可以对提取出的色谱图进行纯度检测。要将提取参数转送到方法中，请在“等高线显示选项”对话框中选择更新方法参数按钮。如要将设定值与修改值保存到方法中，请使用文件菜单的“保存方法”或是“另存方法”命令。

12. 2. 1 显示任意波长色谱

将鼠标指示符放到等高线图上的波长光标上之后，指示符的形状变为。沿波长方向拖动，在色谱显示区域内会显示相应的色谱。



波长光标的鼠标指示符

12.2.2 指定固定波长色谱


指定要提取的色谱的波长。任何波长的色谱图都可以进行叠加（最多6个）显示。

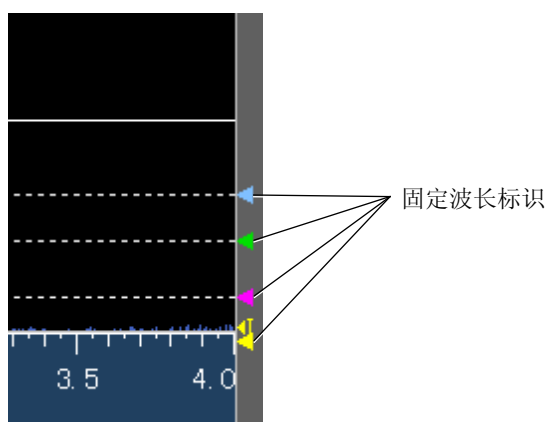
请按以下步骤操作：

(1) 图标操作

- ① 单击固定波长色谱图标，设为固定波长色谱处理模式。
- ② 与等高线图上要显示的波长光标对齐，单击指定固定波长色谱图标。
- ③ 重复步骤①，②。
- ④ 单击清除固定波长色谱图标，所有的固定波长色谱将被删除。

(2) 鼠标操作

- ① 将鼠标指示符放到等高线图时间轴右侧的固定波长色谱标识（▼）处，指示符变为形状。



- ② 将其拖动到任意波长，在色谱显示区域内将显示相应的固定波长色谱。固定波长色谱与固定波长色谱标识（▼）以同一种颜色显示。
- ③ 移动其它的标识（▼），显示新的固定波长色谱。
- ④ 如果将叠加显示的色谱的标识移动到栏外后，叠加显示将被解除。

12. 2. 3 指定整合 色谱

在等高线显示窗口显示有与等高线图相对应的波长范围（呈反色显示）。可以通过以下操作来指定整合色谱的整合范围。

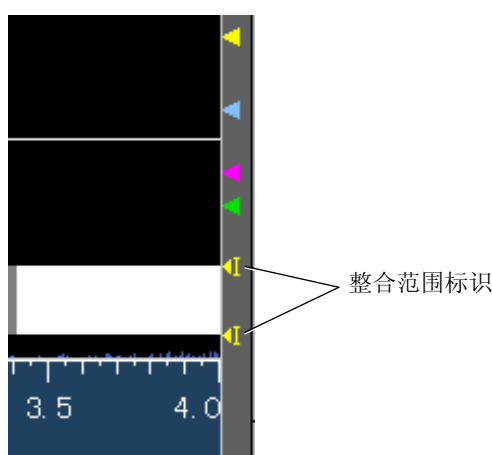
请按以下步骤操作：

(1) 图标操作

- ① 单击“整合色谱”图标设为整合色谱处理模式。
- ② 在“显示选项”中设置要修改的整合范围。

(2) 鼠标操作

- ① 将鼠标放置于等高线图右侧栏的波长范围标识处，开始拖动。整合范围为波长范围的两端。
- ② 整合范围将呈反色显示。



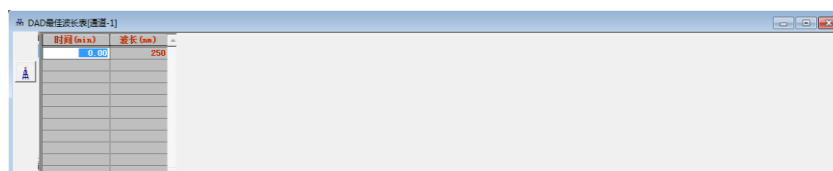
12. 2. 4 指定最佳 色谱

设置生成最佳色谱的最佳波长表，并将等高线图上指定的坐标（时间，波长）转送到最佳波长表中。

请按以下步骤操作：

(1) 设定最佳波长表

- ① 单击“最佳波长表”图标，显示从方法中复制的波长表。

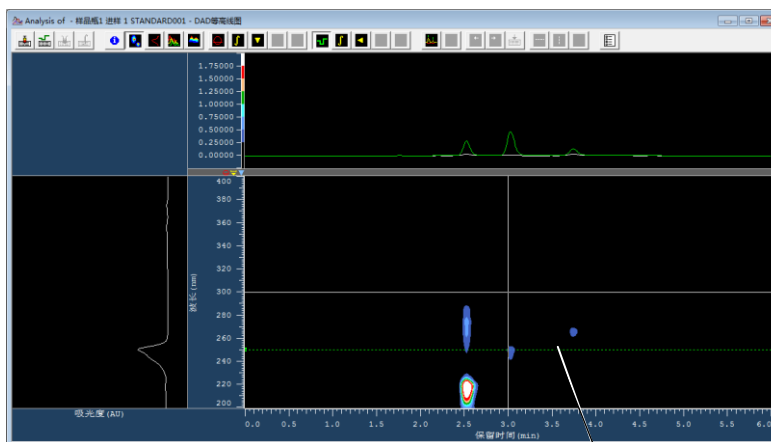


- ② 边确认等高线图，边将分离度最高的坐标（时间，波长）输入最佳波长表。
- ③ 单击“更新方法”图标重新显示最佳色谱图。


(2) 在等高线图中设定最佳波长表

在等高线图上指定的坐标（时间，波长）可以转送到最佳波长色谱表中。

- ① 单击“最佳波长色谱表”图标，显示从打开的方法中复制的最佳波长色谱表。
- ② 在色谱区域内追加显示最佳色谱图。在等高线图区域内显示根据最佳波长色谱表生成的波长指定线（虚线）。



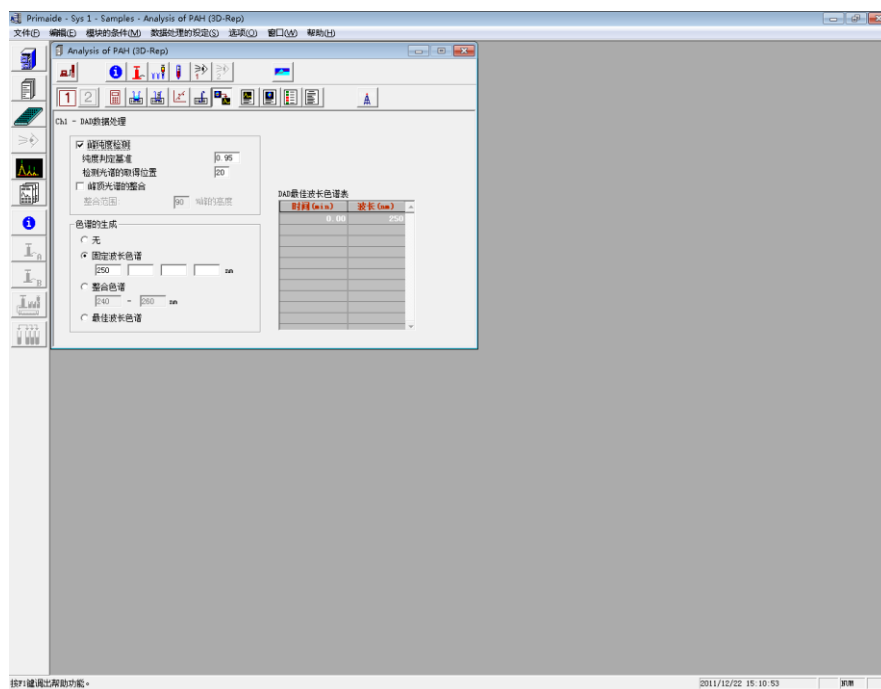
波长指定线

- ③ 将光标移动到纵或横波长光标（虚线）处，指示符变为  形状，按时间方向或波长方向拖动。
- ④ 追加新建坐标（时间，波长）时，按住 **Ctrl** 键的同时点击拖动。
- ⑤ 在等高线图区域内生成最佳波长色谱图后，选择“数据处理菜单/更新最佳色谱”命令，将等高线图上的最佳色谱图的坐标（时间值，波长值）转送到最佳波长色谱表中。
- ⑥ 单击最佳波长色谱表的“更新方法”图标更新最佳波长色谱表。

12. 2. 5 其它数据处理参数

关于其它数据处理参数的设定与修改，都在方法文件窗口进行。

(1) 在窗口菜单中指定方法并将方法文件窗口显示于最前面。



(2) 在方法文件窗口设定、修改数据处理参数。

(3) 单击“更新方法”图标将变更内容转送到数据处理窗口，将3D数据再处理后显示。

12. 2. 6 提取色谱图的数据再处理

提取色谱图的计算处理在数据再处理窗口进行。请单击“处理过的色谱”图标打开数据再处理窗口，在等高线图上任意指定的（波长光标线的位置的）色谱的峰处理结果将显示。如果指定了色谱类型为“固定波长色谱”、“整合色谱”或“最佳波长色谱”时，被指定的色谱峰处理结果将显示。等高线图有多个固定波长色谱被冻结时，只显示对应最初波长的色谱。


在从DAD数据中提取出的色谱的数据处理窗口可以指定是否使用光谱纯度检测功能。

关于数据再处理，请参照“第8章 数据再处理窗口-色谱图-”。

12.3 设定·修改光谱的提取参数

在3D数据处理窗口，可以通过图形化处理来显示或提取任意时间的光谱。可以边确认色谱区域内显示的色谱图，边对提取光谱用的参数进行设定、修改与优化。要将提取光谱用参数转送到方法中，请在“等高线显示选项”对话框中选择更新方法参数按钮。如要将设定值与修改值保存到方法中，请使用文件菜单的“保存方法”或是“另存方法”命令。

12.3.1 显示任意时间的光谱

将鼠标指示符放到等高线图上的时间光标处，指示符变为形状。沿时间方向拖动，在光谱区域内将会显示相应的光谱。


12.3.2 光谱的叠加显示

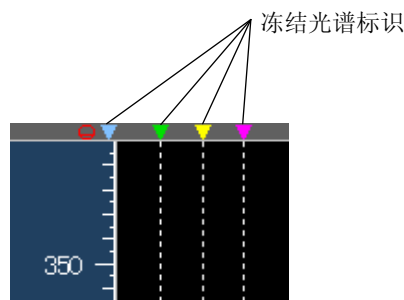
固定（冻结）任意时间的光谱，最多可以叠加显示4条光谱。
按以下步骤操作：

(1) 图标操作

- ① 单击“冻结光谱”图标，设为光谱冻结处理模式。
- ② 将等高线图上的时间光标与要叠加显示的光谱时间对齐，单击“冻结光谱”图标。
- ③ 重复操作步骤①，②。
- ④ 单击“解除冻结光谱”图标清除所有冻结的光谱。

(2) 鼠标操作

- ① 将鼠标指示符放于等高线图波长轴上端显示的冻结光谱标识（▼）处，鼠标指示符形状变为形状。



- ② 拖动至任意时间点后，冻结光谱将显示在光谱显示区域内。冻结光谱与冻结光谱标识（▼）以同一种颜色显示。
- ③ 移动其它的标识（▼），显示新的冻结光谱。
- ④ 如果将叠加显示的冻结光谱标识拖动到栏外，叠加显示将被解除。

12.3.3 指定背景光谱

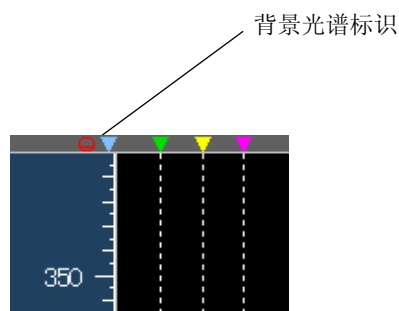
可以将任意时间的光谱指定为背景光谱。冻结光谱进行过背景校正（减去背景光谱）后显示。

请按以下步骤操作：

- (1) 单击“背景校正”图标设为背景校正模式。

无论校正模式是“ON”还是“OFF”，背景标识 \ominus 的位置不变。

- (2) 将鼠标指示符放到等高线图左上侧栏外的背景标识上处，指示符变为 \ominus 形状。将指示符拖动到要测定的峰的附近（没有峰的区域），将显示减去背景光谱后的光谱。拖动鼠标，色谱将发生变化。



- (3) 将重叠显示的色谱图的标识移动到栏外后，重叠显示会被解除。

12.3.4 指定整合光谱

在等高线显示窗口将显示与等高线图上相对应的时间范围（呈反色显示）。可以通过以下操作来指定整合光谱的整合时间范围。

请按以下步骤操作：

(1) 图标操作

- ① 单击“整合光谱”图标设为整合光谱处理模式。
- ② 在“显示选项”中设置要修改的整合范围。

(2) 鼠标操作

- ① 将鼠标指示符放于等高线上侧栏外的整合时间范围标识处，开始拖动（标识在时间范围的两端）。
- ② 整合区域将呈反色显示。

12.4 峰纯度检测

可以对由3D数据生成的色谱图中检测出的峰进行光学纯度评价。

12.4.1 执行峰纯度检测

用方法中指定的峰纯度检测参数来判定峰的纯度。检测结果用以下的颜色显示在色谱显示区域内。

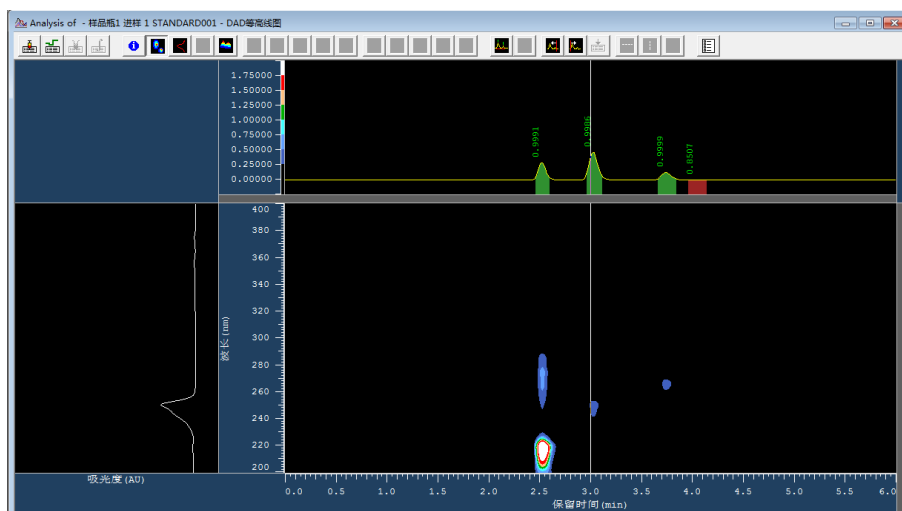
- 纯度判定基准值以上的峰：绿色
- 纯度判定基准值以下的峰：橙色

请按以下步骤检测峰的纯度：

- (1) 移动波长光标线到任意波长。
- (2) 从数据处理菜单中选择“纯度检测”命令。

Primaide 系统管理用方法中的“波形处理参数表”来检测峰，并对峰进行纯度检测。

- (3) 峰纯度检测结果显示在色谱区域内。

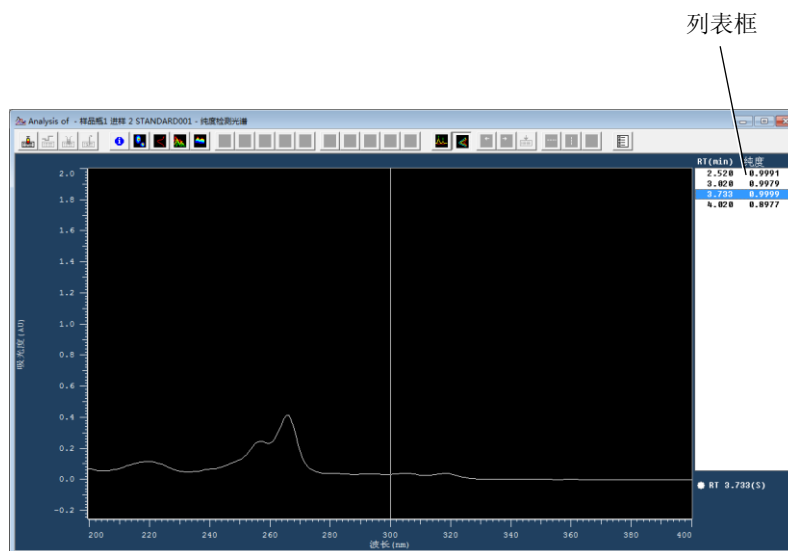


12. 4. 2 确认峰纯度检测用光谱

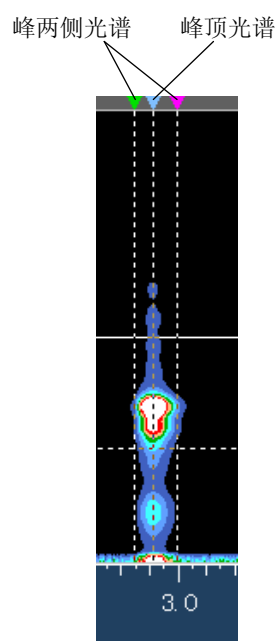
在纯度检测光谱窗口可以确认用于峰纯度检测的“峰两侧的光谱”与“峰顶光谱”。另外，还可以使用数据处理菜单的“以ASCII码形式输出”命令（详细请参照“12. 5. 2 光谱显示窗口”）。

请按以下步骤操作：

- (1) 单击“处理过的色谱”图标。
- (2) 单击“纯度检测光谱”图标。
- (3) 打开纯度检测光谱窗口。在右侧列表框中显示有峰的保留时间（RT）与纯度。



- (4) 用鼠标指示符指定要确认的光谱的峰的RT并双击。
峰两端与峰顶光谱作为冻结光谱显示。在等高线图窗口可以通过与光谱有相同颜色的冻结光谱标识来确认冻结位置。



等高线图的部分扩大图

12. 5 其它显示窗口

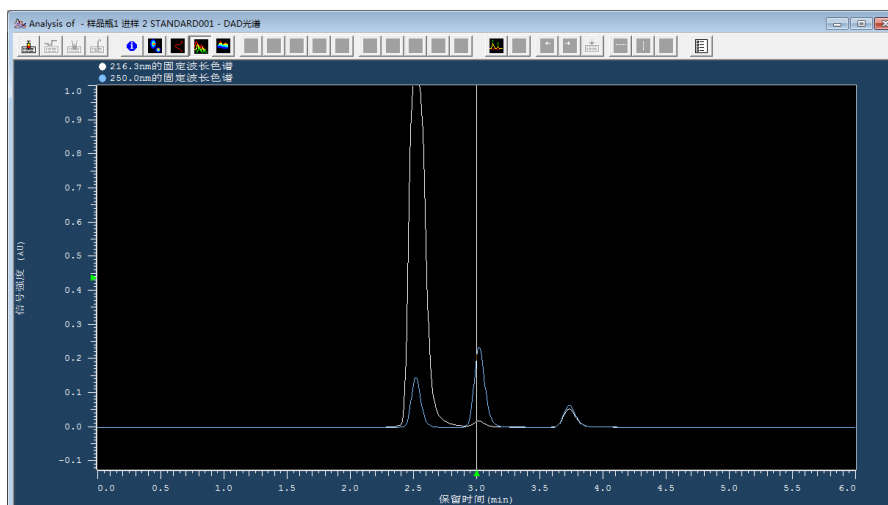
12. 5. 1 色谱显示窗口

“色谱显示窗口”显示的是等高线图上部区域色谱。在该窗口亦可以对色谱进行扩大显示。

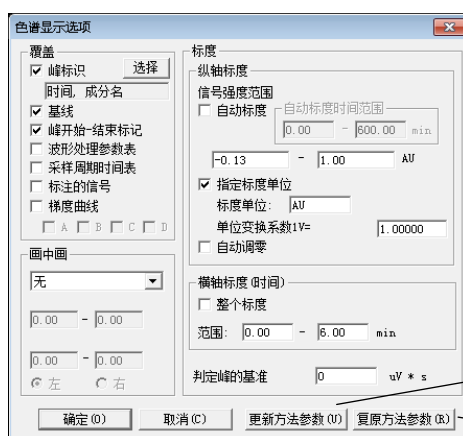
下述色谱之一可以与波长光标位置波长处的色谱同时显示出来。

- 最佳波长色谱
- 整合色谱
- 固定波长色谱（最多6条）

单击“色谱”图标显示色谱显示窗口。如果要对在等高线图中选择的色谱图进一步处理（例如波形处理、鉴别参数的设定与修改等）的话，必须在数据再处理窗口进行。



在“色谱显示选项”中变更显示标度。

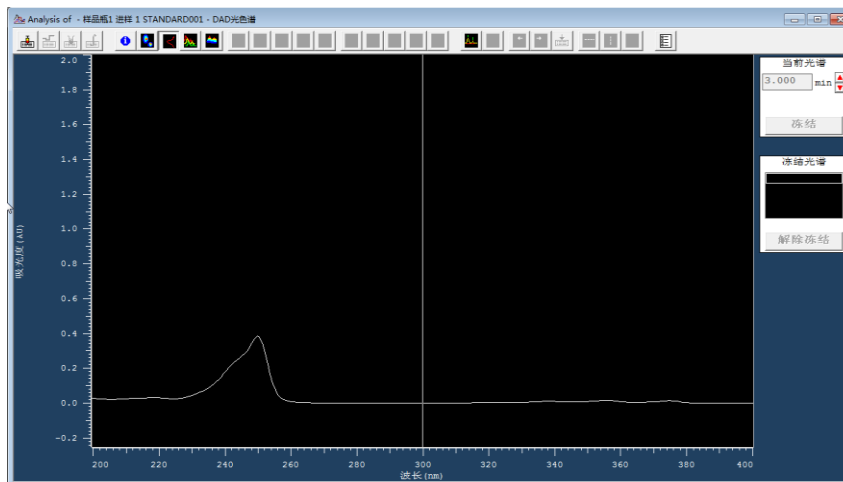


在方法文件中保存变更值

方法文件的设定值表示

12.5.2 光谱显示窗口

单击“光光谱”图标后，将显示等高线图窗口左下侧的光谱（冻结光谱、背景校正光谱或是与时间光标线对应的光谱）。在该窗口还可以使用数据处理菜单的“以ASCII码形式输出”命令。



在光谱窗口可以进行以下的操作：

(1) 冻结光谱

- ① 在等高线图窗口设定光谱冻结模式。
- ② 单击控制框的▲ / ▼。随着时间（RT）的增减，时间光标位置的光谱也随之变化。但是，冻结光谱不发生变化。
- ③ 选择任意的保留时间，单击冻结按钮。冻结时间光标位置的光谱。在光谱窗口变更的内容将在等高线图窗口反映出来。任意时间（RT）光谱的冻结最多可以是4个。

(2) 解除冻结光谱的冻结

选择要解除的冻结光谱的时间（RT），单击解除冻结按钮。

(3) 在光谱显示选项中选择自动波峰检测。

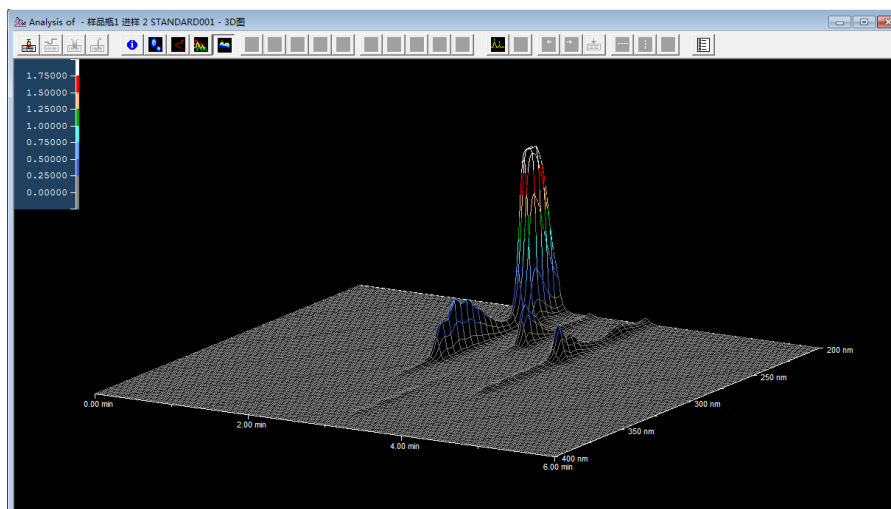
(4) 以ASCII码形式输出

选择“以ASCII码形式输出”命令后可以将光谱显示窗口显示的波长范围的“当前光谱”以ASCII码形式的文件输出。通过扩大、缩小光谱的波长轴变更了显示的波长范围时，将以ASCII码形式的文件输出与光谱显示相同波长范围的“当前光谱”的数据。



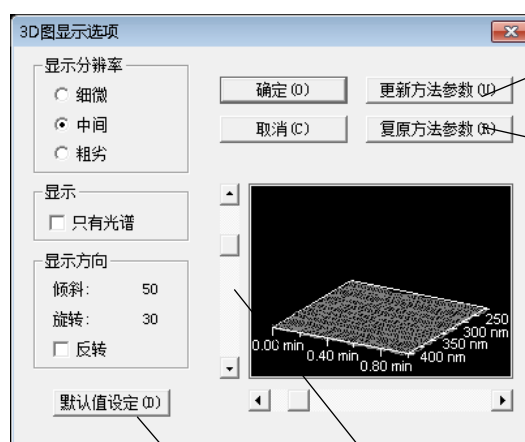
输出文件的扩展名为“stx”。ASCII形式文件中的光谱数据（波长与信号值）以“分号”来分隔。

12.5.3 3D立体图窗口



请单击“3D图”图标显示3D立体图。图的X，Y与Z轴的标度与等高线图显示的标度相同。显示的波长范围（X与Y）不可以变更。要变更Z轴标度，需要在选项菜单中选择自动标度命令。

在3D图显示选项中变更显示格式。



在方法文件中保存变更值

方法文件的设定值表示

改变显示角度。

设为Primaide 系统管理程序初始值

12. 6 变更图显示的方法

12. 6. 1 扩大·缩小图显示 通过以下方法来扩大/缩小图的（等高线图，色谱图，光谱图）显示标度：

（1）输入数值来扩大或缩小图的显示

- ① 通过下面的任何一种操作打开显示选项对话框。
 - 在选项菜单中选择“显示选项”。
 - 将光标放到色谱显示区域，双击鼠标左键。
 - 单击工具栏中的“显示选项”图标。
- ② 在“显示选项”对话框中输入各个轴的数值范围（标度范围）后，单击确定按钮。

（2）用鼠标来扩大图的显示

将光标放到要扩大的区域的左上角。

- ① 按住并拖动鼠标，将光标移动到要扩大的区域的右下角。
- ② 放开鼠标后，将显示指定色谱的扩大部分。

（3）用鼠标来扩大轴的标度

- ① 将光标放到X轴或Y轴要扩大的区域的起点。
- ② 按住并拖动鼠标，将光标移动到要扩大的区域的终点。
- ③ 放开鼠标后，将显示指定范围的轴的扩大部分。

（4）图的自动标度

- ① X轴（时间轴或是波长轴）与Y轴（信号强度或是波长轴）的同时自动标度
将光标放在图显示范围内，单击鼠标右键。
- ② Y轴的自动标度（只限于数据再处理窗口有效）
将光标放在强度轴（Y轴）的标度值附近，单击右键。
- ③ X轴的自动标度（只限于数据再处理窗口有效）
将光标放在时间轴（X轴）的标度值附近，单击右键。

12.6.2 移动色谱

请按照以下步骤移动色谱：

- (1) 将光标放到X轴或Y轴上显示的绿色三角形上。
- (2) 边拖动鼠标指示符，边移动到目的位置。
- (3) 放开鼠标指示符，色谱将移动到指定的位置。

12.6.3 变更信号强度标度

用以下任何一种操作来变更色谱，光谱，等高线图显示中的信号强度标度。

- 按PageUp或PageDown键，信号强度的上限值可发生约10%的增减。
- 在选项菜单中选择“显示选项”显示“显示选项”对话框。在信号强度数值范围（标度范围）里输入一个值后，单击确定按钮。
在显示的等高线图中，通过PageUp或PageDown键可以变更等高线的吸光度标度值。

12.6.4 移动波长光标与时间光标

除了3D图，其它的色谱图、多重色谱、光谱、等高线图显示时，都有时间光标存在。在等高线图中即存在时间光标也存在波长光标。这些光标可以通过鼠标或是键盘的箭头方向移动。

请按以下步骤，用鼠标来移动波长与时间光标。

- (1) 将鼠标指示符靠近波长或时间光标，光标的形状将发生变化。
- (2) 边拖动鼠标指示符，边移动到目的位置。
- (3) 放开鼠标指示符，波长与时间光标将移动到指定的位置。

不点击鼠标而通过按住shift键来移动时，光标位置的值将显示在画面下方的状态栏。

第13章 光谱数据库窗口

光谱数据库窗口是管理光谱数据库(保存从3D数据中提取出的光谱数据)的窗口。

可以通过主窗口的“文件”菜单或数据再处理窗口(3D数据)的“数据库”菜单打开光谱数据库窗口。

13.1 光谱数据库窗口的构成

菜单命令以及相关图标功能如下所示:

光谱一览表

样品编号	进样量 (μL)	进样次数	类型	样品名	样品量	内标量	样品注释
1	10.00	1	STB1	STAR040001	1	1	
1	10.00	2	STB1	STAR040001	1	1	
1	10.00	3	STB1	STAR040001	1	1	
1	10.00	4	STB1	STAR040001	1	1	
1	10.00	5	STB1	STAR040001	1	1	
1	10.00	6	STB1	STAR040001	1	1	

13.1.1 数据处理菜单

在数据处理菜单中有以下命令：



限定列表

打开限制列表参数的对话框。因可以指定限制参数，所以可以对限定的项目进行检索。



复原列表

复原数据库内没有删除的所有光谱的完整列表（未经筛选的）。

删除光谱

从列表中删除显示的光谱。在选择了“复原光谱”命令之前，删除的光谱将存在于删除列表中。



显示光谱信息

打开数据库的信息框。可以通过信息框确认并修改当前显示的光谱的信息。

删除列表

显示删除的光谱列表。

复原光谱

将删除的光谱复原到数据库中。

压缩数据库

将删除列表内的所有光谱删除。

13.1.2 选项菜单

选项菜单中有以下可执行命令：

自动标度

显示光谱的整个标度。

吸光度光谱

用吸光度来显示光谱。不调整当前的轴比例来显示。

规格化光谱

用规格化标度来显示光谱时，请选择该命令。选择此命令后，Primaide系统管理程序通过设定每个光谱的最大吸光度的标度为1.0，对光谱数据进行规一化。



按RT大小排序

按RT（保留时间）来排列光谱。



按名称排序

按字母顺序排列光谱。



逆向排序

将按名称顺序与RT顺序排列的光谱逆向排列。



自动检测峰

指定自动检测峰后，显示的光谱峰上的波长将标记。



标注波长

在光谱上对光标位置的波长做标记。



删除标记

将指定光谱上的波长标记删除。



清除所有标记波长

删除所有的光谱上的波长标记。

13.2 光谱数据库的管理

13.2.1 修改数据库内 在“光谱数据库信息”中保存有光谱采集时的测定条件。 光谱信息

光谱数据库信息

名称: asdasd

关键字:

注释:

系统: Sys 1

应用程序: Samples

DAD/SCN文件名: C:\Win32app\Primade\samples\DATA\0043\00000001.

方法: Analysis of PAH (3D-Rep)

3D空白样品: 无

分析时间: 2006/07/21 19:54:26

RT: 3 min RIX: 0.000

WL范围: 200 - 400 nm 吸光度: 0.0013 : 299.4 nm

带宽: 4 nm 估算浓度: 0 单位

Abs模式: 2.0 AU 光谱的整合: No 峰的高度

BG校正: No

进样量: 10.00 uL

打印 关闭 保存

作为光谱信息，下面的3D数据(光谱提取源文件)采集条件的参数不可以更改。

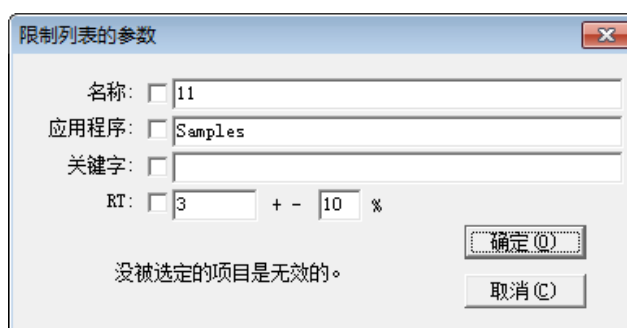
- 系统
- 方法
- RT (保留时间)
- WL (波长) 范围
- 分析时间
- 带宽
- Abs模式
- BG校正 (Yes: 有校正, No: 无校正)

除以上参数外，可以在数据库信息框里修正参数。关键字之间用逗号分开。关键字（最长为35个半角字符）可以是多个。比如，输入”A, B, C”后，可以对含有“A”、“B”与”C”的光谱进行检索。

单击保存按钮将修正内容保存到光谱数据库中。

13. 2. 2 光谱列表的筛选处理

可以对列表框中的光谱进行筛选与限制。



只有符合指定筛选参数的光谱才显示在光谱数据库窗口的列表框中。

13. 2. 3 删除数据库中的光谱

按以下步骤删除数据库中的光谱：

- (1) 在列表框中单击要删除的光谱。
- (2) 在数据处理菜单中选择“删除光谱”命令。将光谱移动到删除列表中。
- (3) 要从删除列表中删去光谱，在数据处理菜单中选择“压缩数据库”命令，清空删除列表内所有光谱。

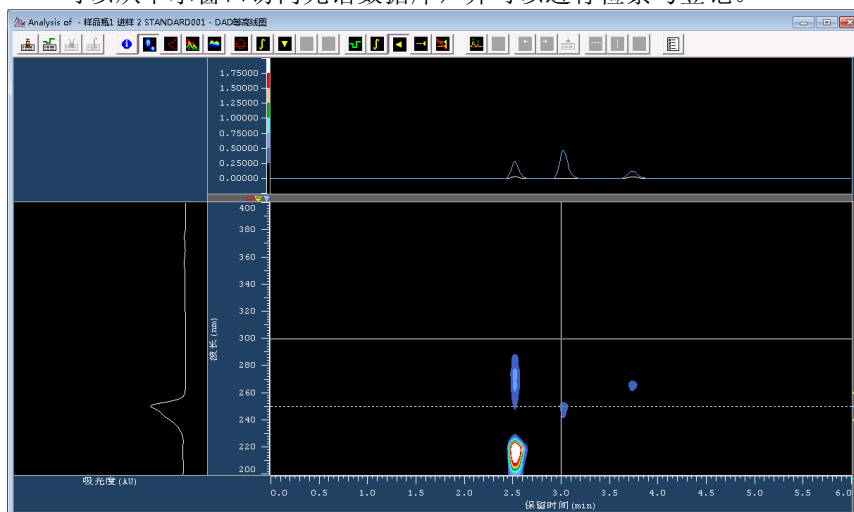
要将删除列表中的光谱复原到光谱数据库，在数据处理菜单中选择“复原光谱”命令（执行“压缩数据库”命令后，“复原光谱”命令变为无效）。

13.3 使用光谱数据库

通过以下窗口可以访问光谱数据库，进行光谱的检索与登记。

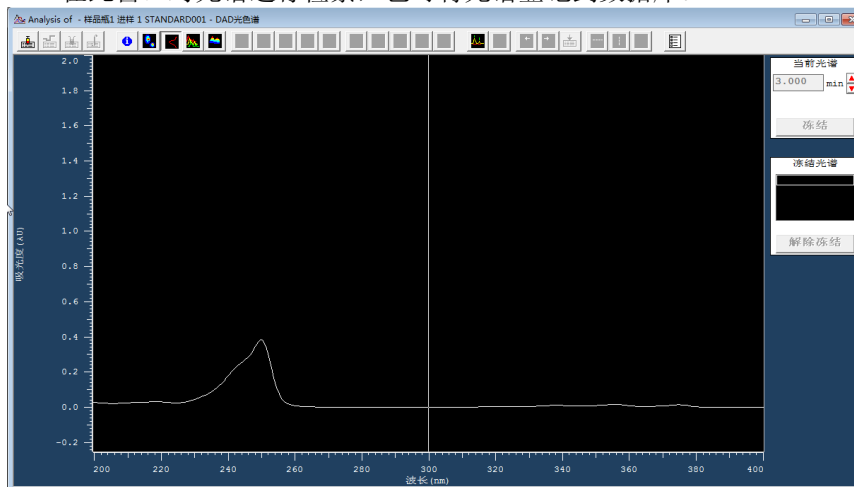
(1) 等高线图窗口

可以从下示窗口访问光谱数据库，并可以进行检索与登记。



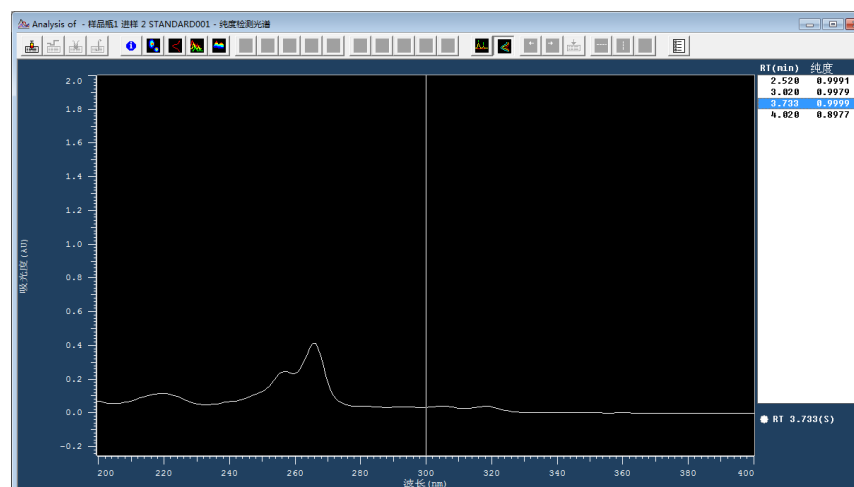
(2) 光谱显示窗口

在此窗口对光谱进行检索，也可将光谱登记到数据库。



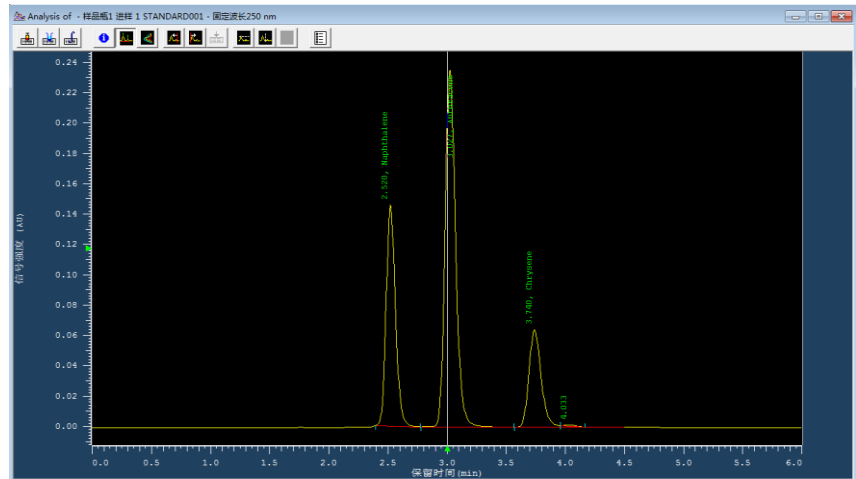
(3) 纯度检测光谱窗口

在此窗口对光谱进行检索，也可将光谱登记到数据库。



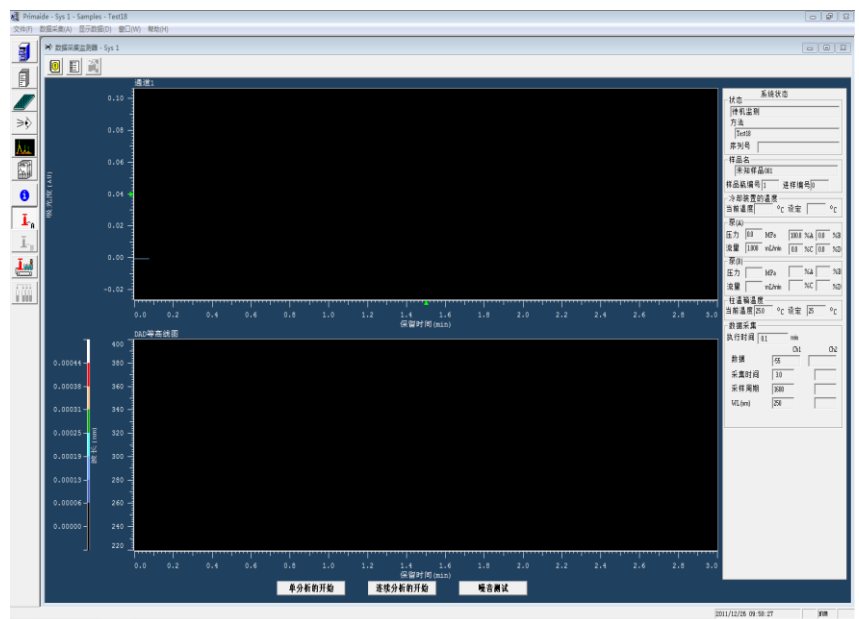
(4) 色谱数据处理窗口

可以逆向查询数据库。



(5) 数据采集窗口

可以检索数据库。



13.3.1 数据库菜单

数据库菜单中有以下执行命令：

光谱数据库

可以打开光谱数据库窗口。

查询数据库

可以在等高线图的时间光标位置的光谱或是纯度检测光谱窗口，对选择的峰的光谱进行数据库检索。

追加到数据库

可以在等高线图的时间光标位置的光谱或是纯度检测光谱窗口，将选择的峰的光谱登记到数据库中。

清除数据库中光谱

删除光谱显示区域内的检索光谱。

查询逆向数据库

在色谱数据处理窗口，可以用光谱数据库中指定的光谱进行色谱峰的光谱检索。

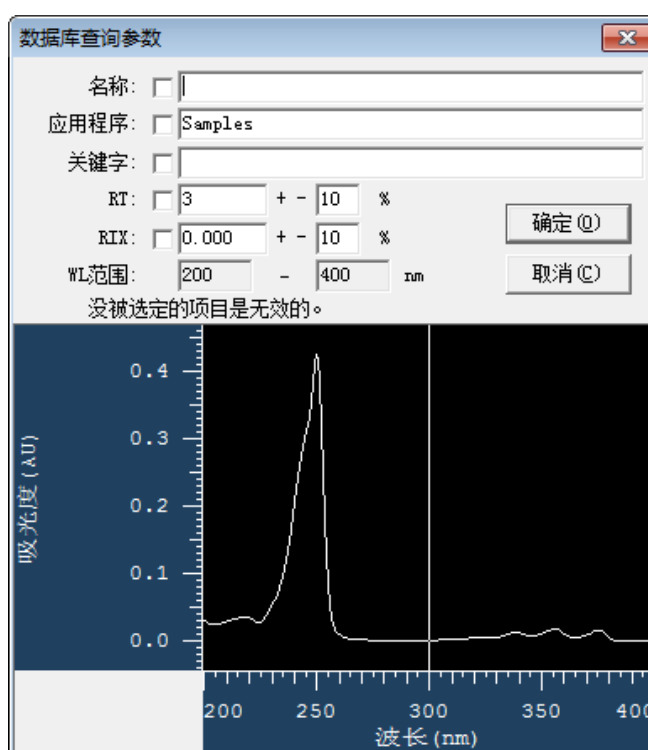
13. 3. 2 检索·登记 光谱数据库

在光谱数据库中作为检索、登记对象的光谱有：

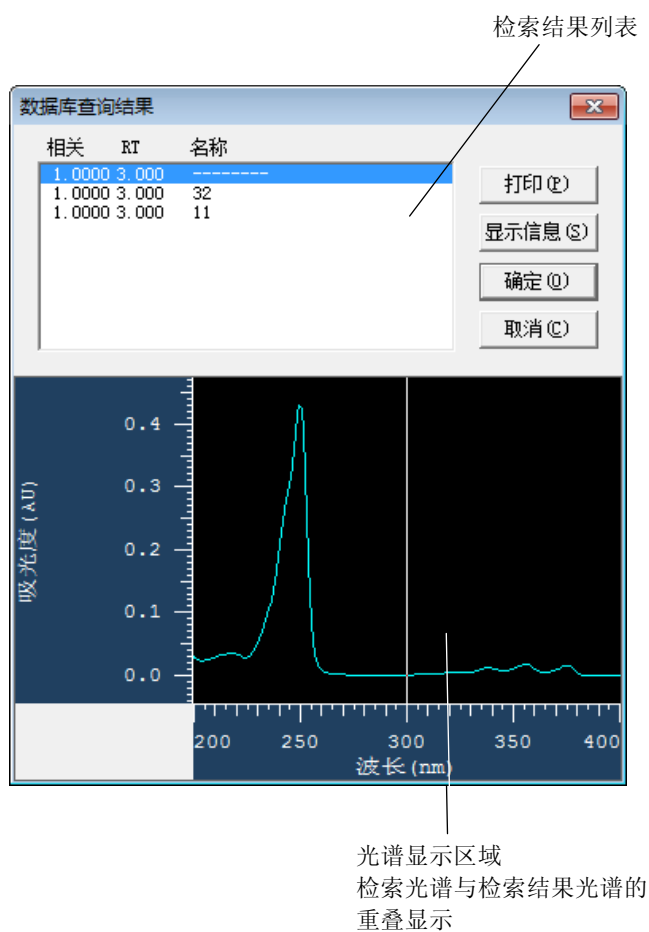
- 等高线图窗口：时间光标位置的光谱
- 光谱显示窗口：显示中的光谱
- 纯度检测光谱窗口：指定峰的峰顶光谱

(1) 请按以下步骤操作：

- ① 指定要检索的光谱。
- ② 在数据库菜单中指定“查询数据库”命令。
- ③ 在数据库检索框里以复选框指定检索条件，并输入检索参数。检索光谱的波长范围，可以用鼠标指示符在光谱显示区域指定。单击**确定**按钮。



- ④ 检索结果如下所示。在检索结果中以相关性的高低顺序列出光谱。单击检索结果列表框中的光谱名后，相应的光谱将显示。

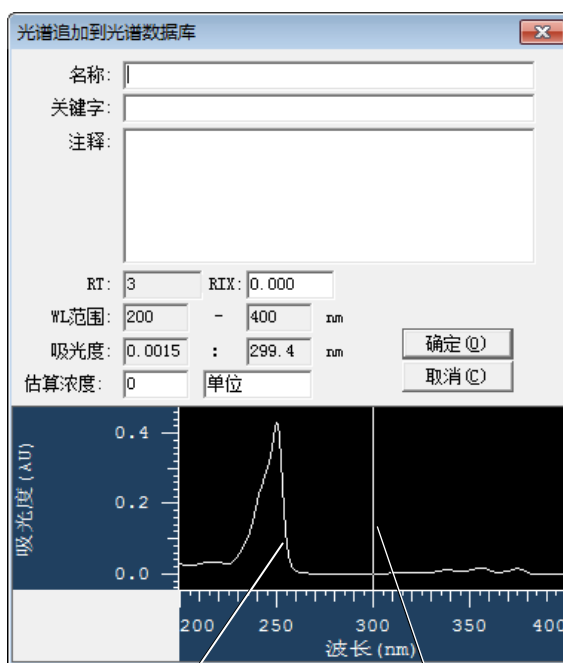


- ⑤ 在原窗口重叠显示检索出的光谱。即使更改时间光标与指定峰，检索结果光谱也不发生任何改变。要删除检索结果光谱，请选择数据库菜单中的“清除数据库中光谱”。



(2) 登记到光谱数据库

- ① 指定要登记的光谱。
- ② 在数据库菜单中指定“追加到数据库”命令。
- ③ 在数据库登记框中输入检索参数（不可以输入RT）。
登记光谱的波长范围，可以用鼠标指示符在光谱显示区域指定。
- ④ 单击确定按钮。



光谱显示区域
显示登记光谱

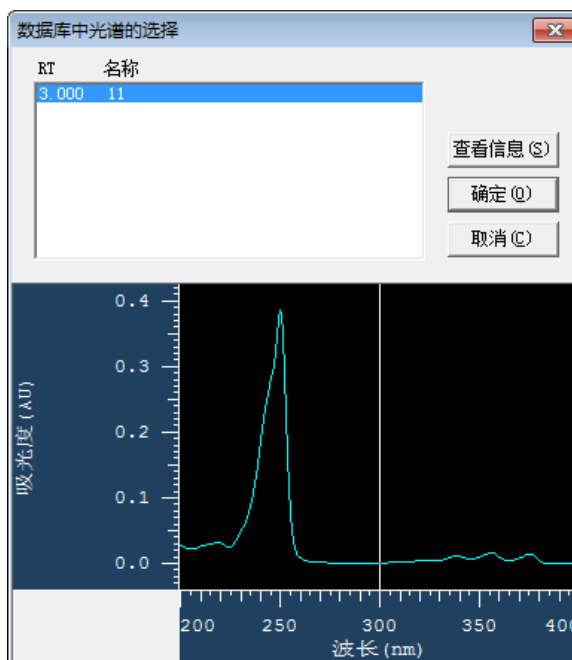
波长光标

13.3.3 查询逆向数据库

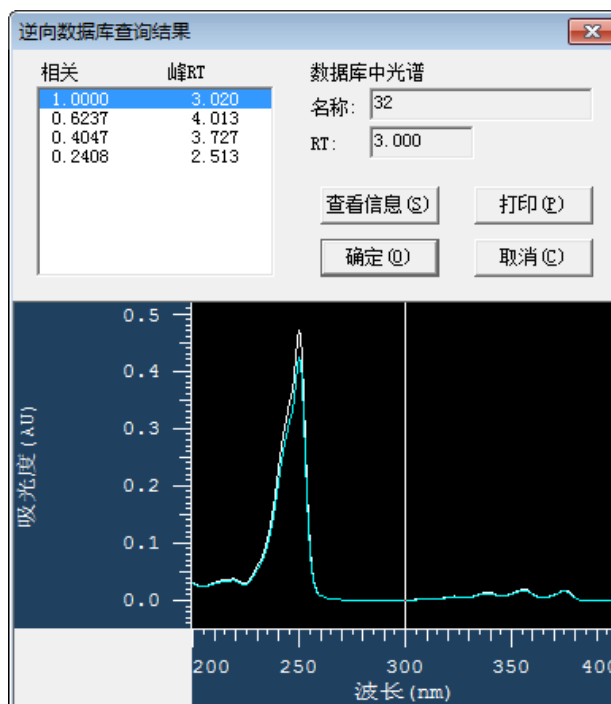
查询逆向数据库指的是：对在光谱数据库中指定的光谱，按与成分相关性高低的顺序进行色谱图中峰的光谱检索。

请按以下步骤操作：

- ① 在光谱数据库中指定要检索的光谱。
- ② 在数据库菜单中指定“查询逆向数据库”命令。
- ③ 在列表中指定要检索的光谱，单击确定按钮。



- ④ 检索结果如下所示。在检索结果中，按与光谱相关性高低顺序列出峰RT(保留时间)。用鼠标单击检索结果列表框中的峰RT后，将显示相应的的光谱。



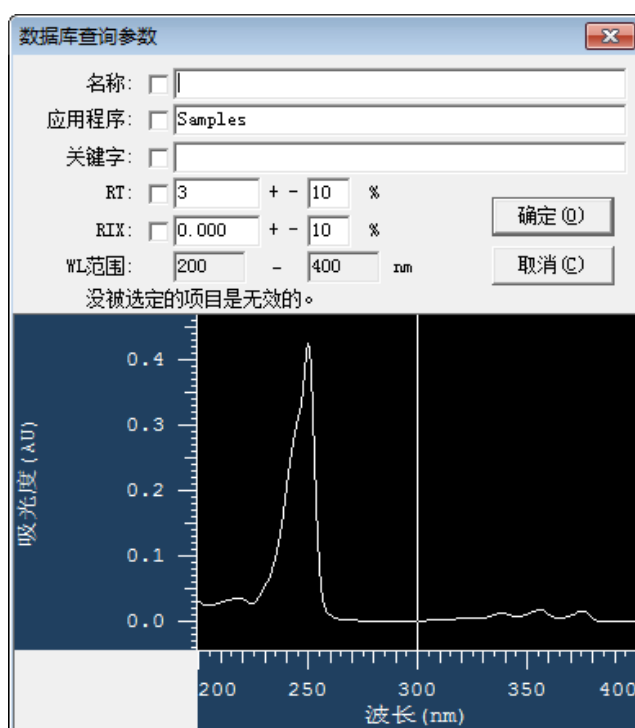
13.3.4 数据采集中数据库的检索

对在3D数据采集窗口指定的RT（保留时间）位置的光谱进行光谱数据库检索。请按以下步骤操作：

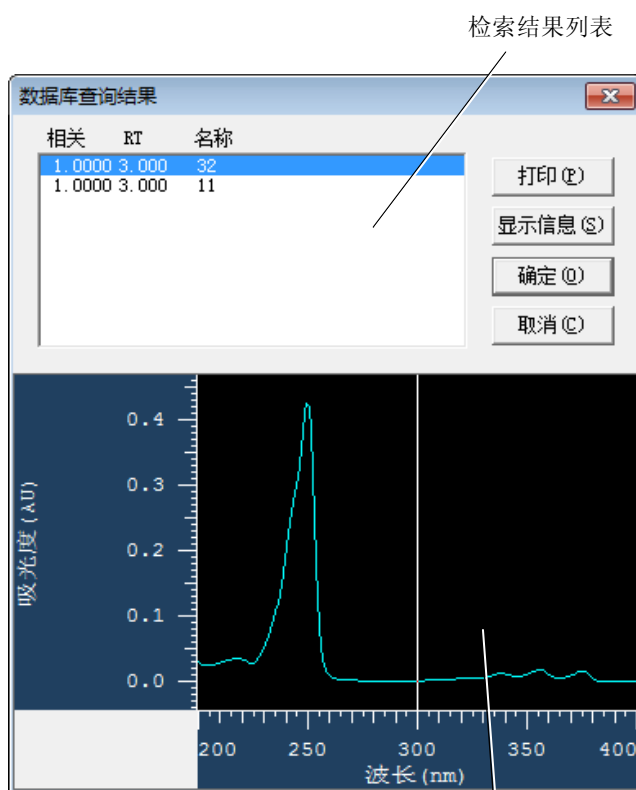
- ① 输入RT，指定要检索的光谱。



- ② 指定数据采集菜单中的“查询数据库”命令。
- ③ 在数据库检索框里以复选框指定检索条件，并输入检索参数。单击 **确定** 按钮。



- ④ 检索结果如下所示。检索结果按相关性高低顺序列出光谱。用鼠标单击检索结果列表框中的光谱名后，将显示相应的光谱。



光谱显示区域: 检索光谱与检索结果光谱的重叠显示

第 14 章 解说

14.1 序言

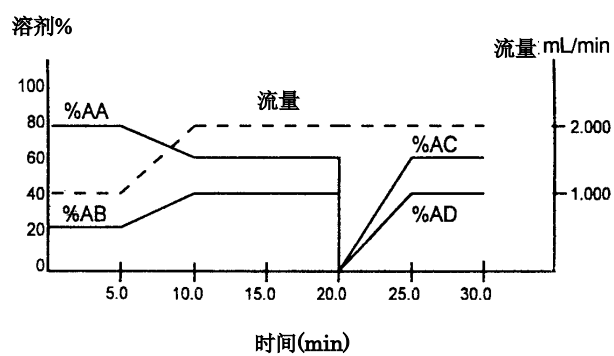
在本章中将对 Primaide 系统管理程序如何进行数据处理做详细的说明。

14.2 梯度洗脱时溶剂时间表举例

在低压梯度模式下，4 种溶剂(A、B、C、D)的溶剂时间表与图如下所示。

表 14-1 低压梯度溶剂时间表

时间 (min)	%AA	%AB	%AC	%AC	主泵流量
0.0	80	20	0	0	1.000
5.0	80	20	0	0	1.000
10.0	60	40	0	0	2.000
20.0	60	40	0	0	2.000
20.1	0	0	60	40	2.000
25.0	0	0	60	40	2.000
30.0	80	20	0	0	2.000



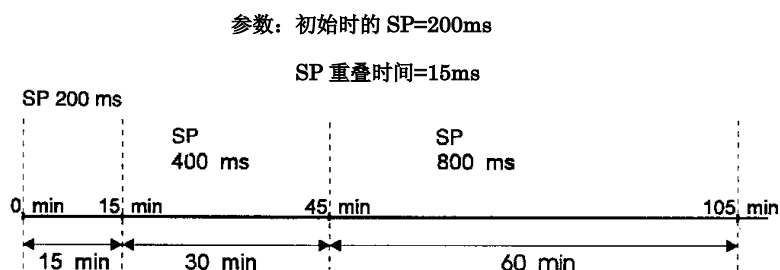
14.3 采样周期的确定

SP (SamplingPeriod) 指的是读取一个数据所需要的时间。当峰越窄时就将 SP 设定得越短些，当峰越宽时就将 SP 设定得越长些。为取得正确的波形处理结果（积分），一个峰必须有 10 个以上的数据点。因此，如果峰宽是 1s 时，请将 SP 设定在 100 ms 以下。SP 可以设定以下两种模式：

- 自动数据采样周期模式
适用于等度洗脱时。
- 手动数据采样周期模式
一般适用于梯度洗脱时。SP 根据采样周期时间表中设定的参数而变化。

14.3.1 自动数据采样周期模式

当初始时的 SP 为 200ms，SP 的倍增时间为 15ms 时，SP 将如何自动变化如下图所示。如果 SP 变为 2 倍，SP 的持续时间也随之变为 2 倍。

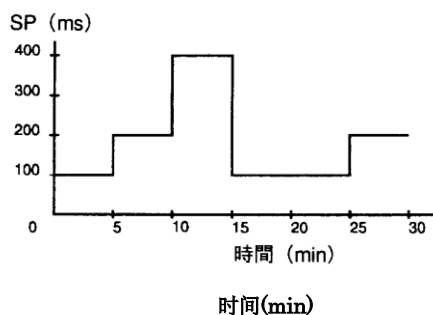


14.3.2 手动数据采样周期模式

采样周期时间表中最多可以输入 20 行数据。请参照下面的 SP 时间表与对应的图来以 SP 时间表控制 SP。

SP 时间表

时间	SP
0.00	100
5.00	200
10.00	400
15.00	100
25.00	200
30.00	200



14.4 波长参数表及最佳波长色谱

请在波长参数表中设置 UV 检测器指定时间下的检测波长。根据检测成分的光谱特征设定波长参数表可以取得最佳波长色谱。采集数据时，如果对各成分选择了的最佳吸收波长，可以得到最佳检测灵敏度。要合理地设定波长参数表，必须掌握各个成分的光谱以及正确的保留时间。

另外，利用 DAD 进行数据采集时，通过选择性地使用每个成分的波长数据可以提取最佳波长色谱。

14.5 定量法

14.5.1 面积%(高度%) 法

在 Primaide 系统管理中使用了以下定量方法。

定量法的默认值为面积%(高度%)法，也就是利用峰的面积或高度来进行计算。成分峰 i 的溶度可以按照下面的公式，通过峰面积或高度直接计算。

$$\text{conc}_i = \frac{x_i}{\sum_{j=i}^n x_j} \times 100\%$$

在此，

x_i : 第 i 项成分的峰面积或高度

总和项表示的是色谱图中所有成分的面积或高度的和。

14.5.2 标准曲线

在 Primaide 系统管理中标准曲线是通过成分表、进样表以及浓度表的内容来进行校正的。标准曲线中有 1 次、2 次以及 3 次曲线/多点标准曲线(最大 20 个点)。例如, 如果指定了 3 次曲线/多点标准曲线, 标准曲线将通过最小二乘法来进行拟合分析。通过拟合确定 a_0 、 a_1 、 a_2 及 a_3 以使得下述方程与数据点最接近。

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$$

在此,

x: 面积或峰高

如果选择了“通过原点(0, 0)”选项, a_0 的值始终为“0”。但是, 如果选择了“1 次-f(Conc)”时, x 则表示浓度。

利用最小二乘法创建标准曲线时, 对于浓度低的点, 得到的结果的误差相对较大, 可能与实际的分析不相符。为了改善这种情况, 需要对浓度进行“加权”。

通式为:

$$x^2 = \sum_{i=1}^n w_i [y(a, x_i) - y_i]^2$$

W(加权系数)可以选择如下:

$$W = \text{Conc}$$

$$W = 1/\text{Conc}$$

Conc: 成分表中设定的浓度值

$$W = 1/(\text{Conc} * \text{Conc})$$

W=1.0 时表示该标准曲线无加权系数。加权系数可以在“定量计算方法”窗口中指定。指定 1 次-f(Conc)时, 各个系数如下。

$$K_0 = -a_0 / a_1$$

$$K_1 = 1 / a_1$$

14.5.3 绝对标准曲线法

绝对标准曲线法指的是利用标准样品成分的峰面积或峰高取得的标准曲线来计算未知样品的色谱各成分浓度的计算方法。各成分都需要标准曲线。成分 i 的浓度通过下式来计算:

浓度 1:

- 不用样品量进行除算:

$$\text{cond}[i] = f_i(x) \text{ConvFl}[i]$$

- 以样品量进行除算(仅限于浓度单位=“其它”时可以选择):

$$\text{concl}[i] = f_i(x) \frac{\text{ScalingFactor1}}{\text{SampleAmt}}$$

i: 第 i 个成分

x: 第 i 个成分的峰面积或峰高

$f_i(x)$: 通过绝对标准曲线法定量得到的第 i 个成分的浓度值。

ConvFl[i]: 单位变换系数(输出报告时, 根据选择的浓度单位自动进行计算。)

Factor1: 系数。适用于所有未知样品的乘数。

SampleAmt: 样品量。只适用于未知样品，是计算重量%时通用的除数。

使用方法中的“浓度表”值时，样品量指的是样品表或进样表中的“样品量”。

使用在样品设定窗口生成的浓度数据时，样品量指的是未知样品的初始量(固体样品的浓度单位为· · · g；液体样品的浓度单位为· · · L)。

与系数不同的是，SampleAmt 可以针对每个未知样品进行定义。

SampleAmt 与 Factor 的初始值均为 1.0(对于标准样品输入的 SampleAmt 不被计算)。

(例 1) 根据 SampleAmt 计算重量%

例如，要定量 1.0g 片剂中所含有的化合物 A 时，请按以下步骤来准备样品液：

- (1) 把片剂溶于溶剂中作成待测溶液。
- (2) 配制不同浓度 (mg) 的化合物 A 作成外标溶液。
- (3) 用等量的溶剂制备全标准溶液与待测溶液。

化合物 A 的标准曲线的浓度单位为 mg。如果全标准样品与待测样品的进样量相等，只要在 SampleAmt 中输入 1000mg 后就可以直接得到片剂中化合物 A 的重量%。

$$A\% = \frac{f_A(x) \times Factor}{Sample_amt} = \frac{f_A(x)mg \times 1.0}{1000mg}$$

在此，

A%: 化合物 A 的重量%

SampleAmt: 作成样品使用的片剂的重量。

必须确保单位一致。如果 $f_A(x)$ 单位指定为 mg/ml，那么

SampleAmt 也必须指定同样的单位。在上例中，1000mg 必须变换为 1000mg/V(mg) (V 指的是制备待测样品时使用的溶剂量)。也就是说，如果制备标准样品与未知样品的溶剂量不等时，单位必须指定为 mg/ml。

(例 2) 作为通用除数的 Sample_Amt(样品量)

使用绝对标准曲线的定量例:

- (1) 全标准溶液的进样量为 10L, 待测溶液的进样量为 5L 时, 生成待测溶液中含有的化合物 A 的标准曲线。
- (2) 如果 $f_A(x)$ 的浓度单位恰当 (例如是 ppm), 在样品表的 SampleAmt 值 (样品量) 中输入 0.5 后, 即可计算出待测溶液中 A 的浓度。

$$\text{conc}_A = \frac{f_A(x) \times \text{Factor}}{\text{Sample_amt}} = \frac{f_A(x) \text{ ppm} \times 1.0}{0.5}$$

在此,

SampleAmt: 进样量的校正系数

Factor: 适用于所有待测样品的乘数。

浓度 2

- 使用成分系数时:

$$\text{Conc2}[i] = f_i(x) \times \text{Multiplier}[i] \times \text{ConvF2}[i]$$

$$\text{Conc2}[i] = \text{Conc1}[i] \times \text{Multiplier}[i] \times \text{Factor2}$$

- 不使用成分系数时:

$$\text{Conc2}[i] = f_i(x) \times \text{ConvF2}[i]$$

$$\text{Conc2}[i] = \text{Conc1}[i] \times \text{Factor2}$$

i: 第 i 个成分

x: 第 i 个成分的峰面积与峰高

$f_i(x)$: 根据绝对标准曲线法定量的第 i 个成分的浓度值

ConvF2[i]: 单位变换系数 (根据输出报告时选择的浓度单位自动进行计算。)

Multiplier[i]: 第 i 个成分的成分系数。适用于各成分的乘数。

Conc1[i]: 第 i 个成分的浓度 1 的值。

Factor2: 系数。适用于所有待测样品的乘数。

14. 5. 4 修正百分比法

首先，利用绝对标准曲线法计算未知样品中各成分的浓度；接下来，可以根据全部成分浓度的和对其进行归一化。峰 i 的浓度计算公式如下：

浓度 1

$$conc1[i] = \frac{f_i(x)}{\sum_{j=1}^n f_j(x)} ConvF1[i]$$

i: 第 i 个成分

x: 第 i 个成分的峰面积或峰高

fi(x): 利用绝对标准曲线法定量的第 i 个成分的浓度值。生成标准曲线时使用“方法”窗口的“浓度表”中的数据或在“样品表设定”窗口生成的数据。

ConvF1[i]: 单位变换系数(根据输出报告时选择的浓度单位自动进行计算。)

如果变换系数选为“其它”，则 ConvF1[i]=系数。

总和项: 色谱图中所有成分的浓度之和

浓度 2

- 使用成分系数时

$$conc2[i] = \frac{f_i(x) * Multiplier[i]}{\sum_{j=1}^n f_j(x)} ConvF2[i]$$

- 不使用成分系数时

$$conc2[i] = \frac{f_i(x)}{\sum_{j=1}^n f_j(x)} ConvF2[i]$$

i: 第 i 个成分

x: 第 i 个成分的峰面积或峰高

fi(x): 利用绝对标准曲线法定量的第 i 个成分的浓度值。生成标准曲线时使用方法设定窗口的“浓度表”数据或在“样品表设定”窗口作成的数据。

ConvF1[i]: 单位变换系数(根据输出报告时选择的浓度单位自动进行计算。)

如果变换系数选为“其它”，则 ConvF2[i] =系数。

总和项: 色谱图中所有成分的浓度之和。

Multiplier[i]: 第 i 个成分的成分系数。适用于各成分的乘数。可以在成分表中输入。

14.5.5 内标法

内标法指的是将一定量的内标成分加入标准样品或未知样品中，排除因进样量变动或前处理过程中的变化而引起的误差。峰 i 的浓度计算公式如下：

浓度 1

- 不用样品量来除算：

$$Conc1[i] = f_i \left(\frac{X}{X_{istd}} \right) * Istd_Amt * ConvF1[i]$$

- 用样品量来除算（只限于浓度单位=“其它”时可选择）

$$Conc[i] = f_i \left(\frac{X}{X_{istd}} \right) * \frac{Istd_AMt}{SampleAmt} * ScalingFactor1$$

- I: 第 i 个成分
- X: 第 i 个成分的峰面积或峰高
- X/Xistd: 内标峰的面积 / 第 i 个成分的峰面积(或峰高)
- f_i(X/Xistd): 根据相应的标准曲线计算出的第 i 个成分(根据内标物单位)的浓度值。
- Istd_Amt: 内标物浓度。一般指的是样品表或进样表中的内标物值。
- ConvF1[i]: 单位变换系数
根据报告输出时选择的浓度单位自动计算。如果选择“其它”时，则 ConvF1[i]=系数。
- SampleAmt: 样品量
只适用于待测样品，是计算重量%时的通用除数。
使用方法设定窗口的浓度表中的值作为浓度数据时，使用样品表或进样表中的“样品量”。

浓度 2

- 使用成分系数:

$$Conc2[i] = f_i \left(\frac{x}{x_{istd}} \right) * Istd_Amt * ConvF2[i] * Multiplier[i]$$

$$Conc2[i] = Conc1[i] * ScalingFactor2 * Multiplier[i]$$

- 不使用成分系数:

$$Conc2[i] = f_i \left(\frac{x}{x_{istd}} \right) * Istd_Amt * ConvF2[i] \quad (\text{浓度单位} \neq \text{“其它”})$$

$$Conc2[i] = Conc1[i] * ScalingFactor2 \quad (\text{浓度单位} = \text{“其它”})$$

i:	第 i 个成分
x:	第 i 个成分的峰面积或峰高
X/Xistd:	内标峰的面积(或峰高)/第 i 个成分的峰面积(或峰高)
fi (X/Xistd):	根据相应的标准曲线计算出的第 i 个成分(根据内标物单位)的浓度值。
Istd_Amt:	内标物浓度。一般指的是样品表或进样表中的内标物值。
ConvF2[i]:	单位变换系数 根据报告输出时选择的浓度单位自动计算。如果选择“其它”时, 则 ConvF1[i]=系数。
SampleAmt:	样品量 只适用于待测样品, 是计算重量%时的通用除数。 使用方法设定窗口的浓度表中的值作为浓度数据时, 使用样品表或进样表中的“样品量”。
Multiplier[i]:	第 i 个成分的成分系数。适用于各成分的乘数。可以在成分表中输入。
Conc1[i]:	第 i 个成分的浓度 1 值。
Factor2:	系数。适用于所有待测样品的乘数。

14.6 认定峰

在 HPLC 系统中，通常是通过保留时间来认定峰的。而保留时间会因装置的使用条件而稍有变化，所以要认定峰必须使用容许宽度(时间窗，即预计将出峰的时间间隔)。

- %时间容许宽度
以成分表中输入的保留时间的百分比表示的成分峰的保留时间范围。
- 绝对时间容许宽度(min)
以分表示的成分峰的保留时间范围。

要认定峰，除容许宽度以外还有其它的规则。详细请参照“15.6.3 项”。

14.6.1 %时间容许宽度的例

成分表的内容如下所示：

RT(min)	成分名	容许宽度 (%)
14.30	Diphenyl	10

Diphenyl 的容许宽度按下式计算。

- 下限
 $14.30 - (14.30 \times 10/100) = 12.87 \text{ min}$
- 上限
 $14.30 + (14.30 \times 10/100) = 15.73 \text{ min}$

因此，Diphenyl 的容许保留时间的范围为 12.87~15.73 min。

14.6.2 绝对时间容许宽度的例

成分表内容如下所示：

RT(min)	成分名	容许宽度 (min)
14.30	Diphenyl	0.10

Diphenyl 的最大容许宽度按下式计算。

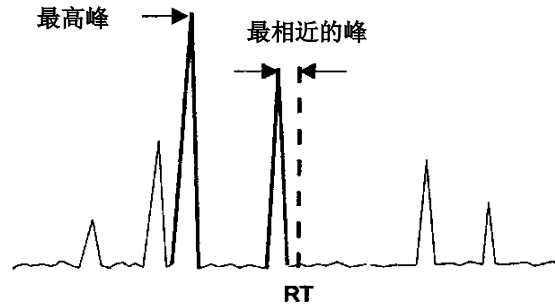
- 下限
 $14.30 - 0.10 = 14.20 \text{ min}$
- 上限
 $14.30 + 0.10 = 14.40 \text{ min}$

因此，Diphenyl 的容许保留时间的范围为 14.20~14.40 min。

14.6.3 认定峰 的规则

为未知样品与标准样品选择最近的峰与最高的峰。

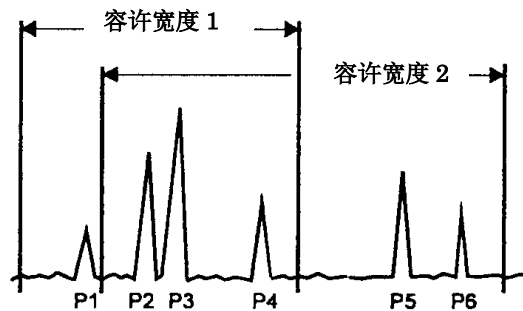
- 最高的峰
在容许宽度范围内的最高峰
- 最相近的峰
与成分表中指定成分 RT 最相近的峰



如是 DAD 数据，还可以对未知样品的光谱进行核对。

在容许范围内出现多个峰或是容许范围重叠的情况下，适用下述认定峰的辅助规则：2 个容许范围重叠时，首先从最初的容许范围内认定第一个峰，第二个峰的认定范围仅限于第一个峰后，第 2 容许范围内的峰。

下例中是标准样品中的峰。首先，P3 作为 P1、P2、P3、P4 中的最高峰，在第 1 容许范围内被认定。其次，P5 作为 P4、P5、P6 中的最高峰在第 2 容许范围内被认定。因 P2 是第 1 容许范围内出现在 P3 之前的峰，所以不作为认定对象。



特殊峰的规则

特殊峰 (RRT 标准峰、内标峰、诊断峰等) 指的是在所有样品中，在选择的容许宽度范围内最高的峰。

14.7 空白校正

如果存在空白数据，就可以进行空白校正处理。根据数据的种类与设定条件可以对 2D 数据与 3D 数据进行校正处理。只要在方法文件设定窗口中选择“同一数据系列的空白”后，即可以适用下列规则：

- (1) 对空白数据不进行任何计算(基线、峰的定量等)。根据报告输出参数的设定，可以在报告中输出色谱图。空白数据只适用于空白校正以及 SST 的 S/N 计算。
- (2) 在线数据处理中：仅限于连续分析数据系列的最初行是空白数据时，才可以进行数据空白校正以及 S/N 的计算。如最初行不是空白数据，对整个数据系列都不进行空白校正。
- (3) 如果存在多个空白进样数据(数据之间不存在其它类型的数据)时，通常是用最新的空白数据进行空白校正与 S/N 计算。如果在标准—未知样品循环进样中，重复存在多个空白数据，用在待校正或 S/N 计算的标准—未知样品之前采集的空白数据进行校正处理。下面是进样序列的例子：

B(样品瓶 1), S1(样品瓶 2), S2(样品瓶 3), U1(样品瓶 4), U2(样品瓶 5)
B(样品瓶 1), S1(样品瓶 2), S2(样品瓶 3), U3(样品瓶 6), U4(样品瓶 7)

处理时，最初的 S1、S2、U1、U2 的空白校正以及 S/N 计算是用第 1 次进样的 B 空白数据来进行处理。第 2 行的 S1、S2、U3、U4 的空白校正以及 S/N 计算则是用第 2 次进样的 B 的空白数据来进行处理。就这样，空白数据与标准样品和与其相对应的标准曲线同时被更新。

- (4) 数据再处理时：从最初选择的进样数据(呈反白显示)中逆向检索空白数据，以最初被检索到的空白数据进行空白校正处理。如果逆向检索没有结果时，则从被选择的进样开始正向检索，以最初被检索到的空白数据进行空白校正处理。逆向与正向检索均没有结果时，则不进行空白校正处理。
- (5) 计算 S/N 时，为测定噪音在同一进样表中检索空白数据时，按照规则 2、3、4(测定中以及再处理规则)来进行。如果在同一进样表中不存在空白数据时，在信赖性报告的 SST 表的 S/N 一览中将以“— — —”被打印。

如果在方法窗口选择了“其它数据系列的空白”，则按照下述规则进行空白处理。

- (1) 色谱数据：如果空白数据与处理数据的 SP 一致，则以在线处理与再处理中同时指定的空白数据进行空白校正处理。
- (2) DAD 数据：如果空白数据与待处理 DAD 数据的光谱范围及带宽相同，则以在线处理与再处理中同时指定的空白数据进行 3D 数据的空白校正；如范围及带宽不同，则不进行数据的空白校正。
- (3) 无论何种情况，空白数据的时间范围（如为 DAD 还要加上波长范围）必须与待处理数据相同或比其大。非上述情况时则不进行空白校正处理。

如果选择的空白中存在 2 种以上的进样数据时，则按下列规则来检索相应的空白数据。

- (1) 通道 1(或者 2)的色谱图必须使用通道 1(或者 2)的数据。如果不存在数据时则不进行空白校正。
- (2) DAD 数据只限使用 DAD 类型的空白数据。如果不存在空白数据时则不进行空白校正。
- (3) 处理提取色谱图时，必须检索与其相对应的提取空白数据。提取的空白数据与待处理的数据种类必须一致。例如，第 3 个固定波长空白数据只限于第 3 个固定波长色谱可以使用。如第 3 个固定波长空白数据不存在，即使第 2 个固定波长空白数据存在也不进行空白校正处理。另外，如果是从已进行了校正的 3DDAD 数据中提取的色谱，则可以不进行空白校正设定。

对所有类型的提取色谱图，2D 空白校正仅限于对色谱图进行，对提取峰的光谱图不进行空白校正处理。如果在提取色谱之前对 3D 数据进行空白校正，那么可以同时得到校正的色谱图与光谱图。

14.8 成分分组

对成分分组时，请在成分表中的“功能 1”或“功能 2”中指定组的编号，最多可以指定 20 个组。指定组后，在“各样品报告”或“每次进样报告”中将新生成一个表示各个组的浓度和的表。在下例中，峰 1 与 6 属于组 1，峰 2 与 7 属于组 2。峰 1 与 6 的浓度和作为组 1 的浓度、峰 2 与 7 的浓度和则作为组 2 的浓度输出到报告中。



14.9 修正保留时间

为校正因 HPLC 条件的变化而引起的保留时间的变动，在成分表中设有“相对保留时间(相对 RT)”与“校正保留时间(校正 RT)”项目。成分表的“功能 1~3”设置为“相对 RT”或“校正 RT”后，就可以用校正的保留时间来认定峰了。

14.9.1 相对保留时间(相对 RT)

在计算相对 RT (RRT) 时，只要在成分表的功能栏中选择了“相对 RT”就可以指定基准峰。如要把相对 RT 输出到报告中，必须在报告输出项目中设置“相对 RT”。

上述情况下，第 i 个成分峰的保留时间相对于相对 RT 基准峰的保留时间的比率可按下式来计算：

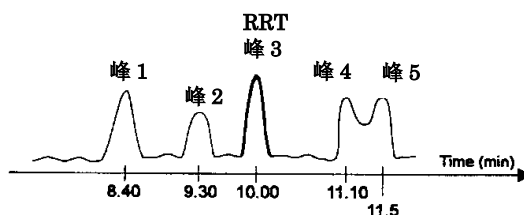
$$RRT_i = \frac{TR_i}{TRRf}$$

在此，

TR: 测定的保留时间

TRRf: 基准峰测定的保留时间

下例中，峰 3 是 RRT 基准峰，其期待保留时间为 9.5min。



则按下列公式来计算峰 1~5 的相对 RT:

$$RRT_1 = \frac{8.40}{10.0} = 0.84$$

$$RRT_2 = \frac{9.30}{10.0} = 0.93$$

$$RRT_3 = \frac{10.0}{10.0} = 1.0$$

$$RRT_4 = \frac{11.1}{10.0} = 1.11$$

$$RRT_5 = \frac{11.5}{10.0} = 1.15$$

如果分析所需时间较长, 温度以及梯度模式等 HPLC 条件将会发生很大的变化。在这种情况下, 可以指定多个相对 RT 峰以校正因条件变化而引起的变动。指定多个相对 RT 峰后, 各个基准峰的有效范围也将自动被设定如下。

- 首个相对 RT 峰的有效范围: 从色谱图起点开始至第 2 个基准峰的 1/3 处。
- 第 2 个相对 RT 峰的有效范围: 从第 1 个基准峰的有效范围的终点至第 3 个基准峰的 1/3 处(不存在第 3 个峰时, 有效范围至色谱图的终点)。
-

其它 RRT 基准峰的有效范围也用同样的方法来确定。如果不存在基准峰时(由于容许范围内未出现), 与未指定时同样, 前后基准峰的有效范围将扩大。

14.9.2 校正保留时间 (校正 RT)

在计算校正 RT(CRT)时, 如果在成分表的功能栏中指定了“校正 RT”就可以确定参照峰。如要把“校正 RT”输出到报告中, 必须在报告输出项目中设置“校正 RT”。

上述情况下, 用成分表中指定的参照峰的期待保留时间(成分表中设定的保留时间)与测定保留时间的比来校正其它成分峰的测定保留时间。第 i 个成分峰的校正保留时间(补正 RT、CRT)以下式来计算:

$$CRT_i = \frac{TR_f}{TRR_f} \times TR_i$$

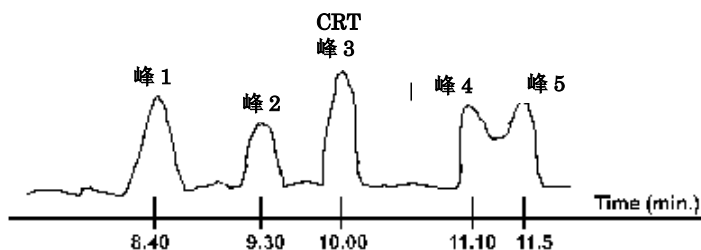
在此,

TR_f: 参照峰的期待保留时间

TRR_f: 参照峰的测定保留时间

TR_i: 第 i 个成分峰的测定保留时间

下例中, 峰 3 是 CRT 参照峰, 其期待保留时间为 9.5min。



按下面公式来计算峰 1~5 的相对 CRT:

$$CRT1 = 8.40 \times \frac{9.50}{10.00} = 7.98 \text{ min}$$

$$CRT2 = 9.30 \times \frac{9.50}{10.00} = 8.84 \text{ min}$$

$$CRT3 = 10.00 \times \frac{9.50}{10.00} = 9.50 \text{ min}$$

$$CRT4 = 11.10 \times \frac{9.50}{10.00} = 10.54 \text{ min}$$

$$CRT5 = 11.50 \times \frac{9.50}{10.00} = 10.93 \text{ min}$$

如果分析所需时间较长, 温度以及梯度模式等 HPLC 的条件将会发生很大的变化。在这种情况下, 可以指定多个参照峰(最多 20 个)以校正因条件变化而引起的变动。设定多个参照峰后, 各参照峰的有效范围也将自动被决定如下。

- 首个参照峰的有效范围: 从色谱图起点开始至第 2 个参照峰的 1/3 处。
- 第 2 个参照峰的有效范围: 从第 1 个参照峰的有效范围的终点至第 3 个参照峰的 1/3 处(不存在第 3 个峰时, 有效范围至色谱图的终点)。

其它参照峰的有效范围也用同样的方法来确定。如果不存在参照峰时(由于容许范围内未存在), 与未指定参照峰时同样, 前后参照峰的有效范围将扩大。

14.10 波形处理以及基线校正

14.10.1 噪音

在检索峰与确定基线时需要使用波形处理参数表中的噪音值，该值的设定范围为：1~8000 μ V。

数据的噪音值是在监测中(或是平衡化后)通过手动或自动噪音测试来测定的，并保存于原始数据中。噪音值可以在数据显示窗口的数据采集信息界面得以确认。如要在波形处理时使用，还可以将之复制到波形处理参数表中。

只有在波形处理参数表的第1行0.00(min)的时间可以输入噪音值。如要在有色谱图存在的区域内更改峰检出的阈值，需要在波形处理参数表中变更的时间追加新的峰灵敏度。

14.10.2 聚束

进行色谱图的波形处理前，将已经采集的数据变换为指定的数据采样周期(SP)。在波形处理参数表中选择预变换的采样周期(20~200ms)。并且以下条件下，不可进行集群处理。

- (1) 在波形处理参数表中选择的采样周期(SP)比取得集群处理的色谱图时的采样周期(SP)小时。
- (2) 进行集群处理的色谱，利用SP时间表取得了多个采样周期(SP)时。
- (3) 对于采样周期(SP)为20ms的色谱，选择了50ms的集群处理时。

注： 集群处理会使色谱图本身发生变形，因此请在探讨最佳采样周期(SP)，或一般的波形处理无法应对的紧急状况下使用集群。

14.10.3 平滑

以软件将采集的数据进行平滑处理。在进行色谱图的波形处理前，可以先进行Savitzky-Golay类型的平滑处理。

在波形处理参数表中选择5~25个平滑数据点。如果对于数据少的峰选择了多的平滑数据点，将会使波形失真，所以请选择峰的数据数的1/3~1/4作为峰的数据点数。

注： 平滑处理会使色谱图本身发生变形，因此在一般的波形处理无法应对的紧急状况下使用。

14.10.4 峰的灵敏度

峰的灵敏度是在波形处理参数表中指定的可变参数。峰检出阈值 α 以下式计算：

$$\alpha = \text{噪音} \times \text{峰灵敏度}$$

在此，噪音指的是波形处理参数表中指定的噪音值。最大峰灵敏度为1；最小峰灵敏度为225。

14.10.5 峰波检测

波峰检测根据波形处理参数表中的噪音值来设定。首先，比较以连续SP取得的信号，检测出最大信号值，并找出峰顶点。接下来，依次检查自峰顶开始的数据点。如果连续5次样品数据的变化量小于 α 值就意味着有峰检出。

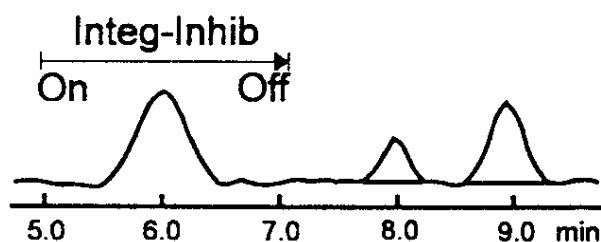
14.10.6 基线 N 法

可以通过该功能指定画基线的峰数 N(范围是 0~100)。基线从最初峰的起点至第 N 个峰的终点,对每组 N 个峰重复描画。画的基线不得横穿波谷,如果横穿波谷时,N 值就暂时成为组内峰数。如果初始值 N=0 时就意味着该功能无效。下例中的 N=3,即最初的 3 个峰须画一条基线,接下来的 3 个峰再画一条基线。如果 N=0,对重叠的峰组,根据自动积分功能,基线将从最初峰的起点画至结束峰的终点。

14.10.7 积分禁止

积分禁止指的是对于在色谱指定区域内出现的峰不进行波形处理。该功能主要用于排除不需要进行峰定量的色谱区域。排除范围通过 On/Off 来指定。

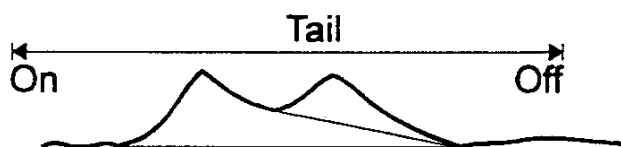
下例中,因在 5.0~7.0min 之间指定了积分禁止功能,所以最初的峰将不被积分。



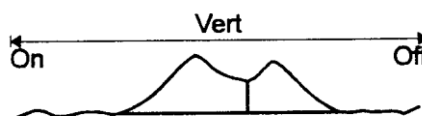
经积分处理过的峰将呈强调显示并画有基线(上例中的 8.0 分与 9.0 分的峰)。

14.10.8 拖尾处理

拖尾处理指的是对相邻的不分离的峰画基线后,通过画连接线强制性地使峰分割的功能。该功能通过 On/Off 来指定。

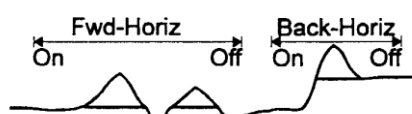


- 14.10.9 垂直分割** 垂直分割指的是对相邻的不分离的峰画主基线后，从谷底至主基线方向，通过画垂直线强制性地把峰分割的功能。通过 On/Off 来指定功能是否有效或无效。



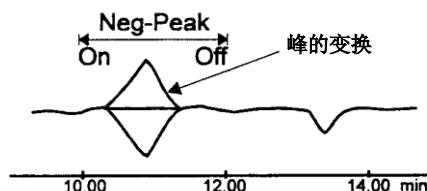
**14.10.10 前方 / 后方
水平线**

该功能指的是把基线沿前方/后方水平方向固定的功能。如果在指定区间内存在多个峰，所有的峰都将通过画水平线被强制性地分割。下例中，经积分处理过的峰呈强调显示并画有基线。



14.10.11 负峰

该功能指的是把负峰转换为正峰后计算峰面积与高度的功能。通过 On/Off 来指定功能是否有效或无效。下例中，因负峰功能在 12.00 处设为 Off，因此第 2 个负峰不能被转换为正峰。



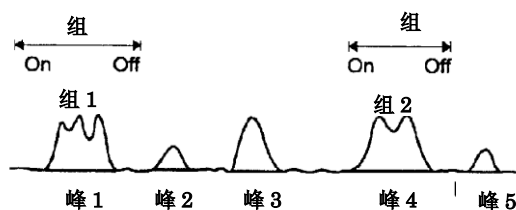
14.10.12 峰组

峰组指的是把相同物理化学性质的成分(峰)，在计算或输出报告时作为一个组来处理。在 Primaide 系统管理中有两种方法可以分组。

- 按时间范围分组
利用波形处理参数表中“峰组”功能来分组。
- 按成分分组

按成分表中功能(1-3)的设置来分组。

如果在波形处理参数表中指定了“峰组”功能，在指定的时间范围内 (On/Off)出现的峰将作为一个峰被处理。该峰的面积按下面方法来计算。

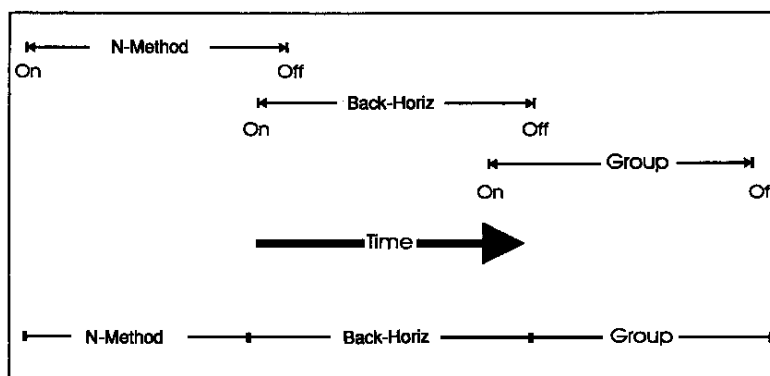


14.10.13 基线处理命令的优先顺序

基线功能的优先顺序如下所示：

积分禁止>后方水平线>前方水平线>峰组>基线 N 法

根据波形处理参数表，指定时间上有重复的一系列基线功能的例子如下所示：

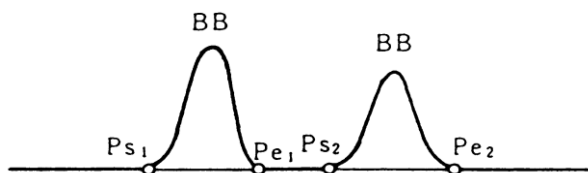


14.10.14 基线代码

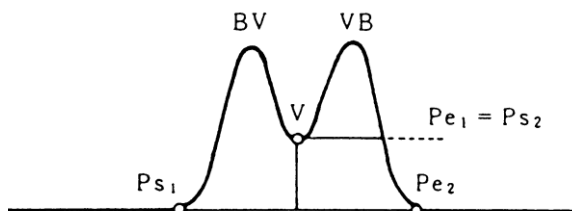
峰的分割结果将打印在计算结果 BC(基线代码)项目内。

- B 基线
- L 前沿
- V 波谷
- Ps 峰的起点
- T 拖尾
- Pe 峰的终点

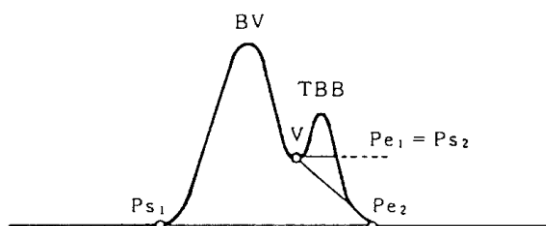
因 Ps₁、Pe₁ 都与基线相邻，为从基线到基线，因此命名为 BB。



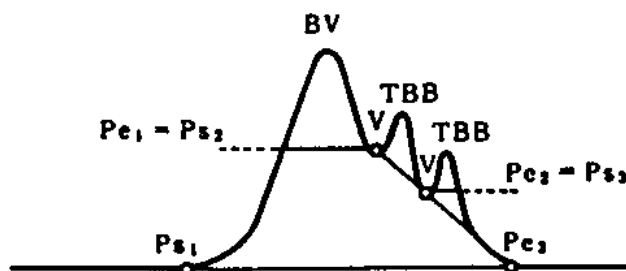
第 1 个峰的终点 Pe₁ 与第 2 个峰的起点 Ps₂ 为相同级别位于基线上方(谷底 V)。



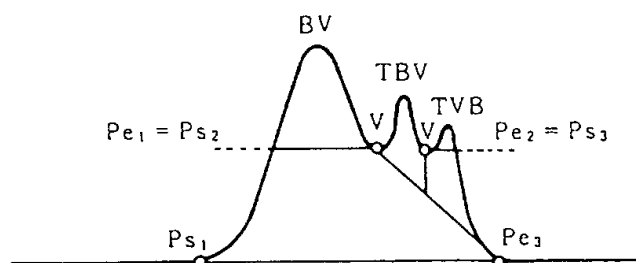
在拖尾峰中的子峰与主峰各有自己的基线。因此，在下图中，V 为子峰的基线的起点。



拖尾峰中的子峰在 V 点处与基线相接。因此，下图拖尾峰中的 2 个子峰均表示为 TBB。



第 1 个子峰的终点与第 2 个子峰的起点位于基线上方 V 点处。第 1 个子峰表示为 TBV；第 2 个子峰表示为 TVB。



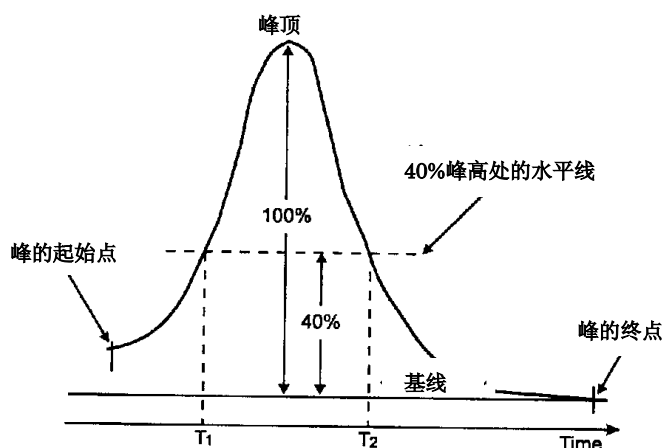
注：手动绘制的基线代码表示为“MC”；经过峰重叠处理的峰基线代码表示为“Mcd”。

14.11 根据光谱检测峰纯度

如是 DAD 数据及提取色谱图的数据，可以用峰两侧的光谱来计算出峰的纯度。峰纯度计算方法如下：

- (1) 首先，根据波形处理参数表确定所有波峰的起点、顶点与终点。接下来，以报告峰的判定基准(在“色谱显示画面”中指定的峰基准)作为阈值把微小峰从峰纯度检测范围内排除。
- (2) 检索出所有重叠的峰。如果 2 个峰中前一个峰的终点与后一个峰的起点重叠时，这两个峰就被认为是 2 峰重叠。如果 3 个峰中前 2 个峰重叠，而且第 2 个峰与第 3 个峰也重叠的情况下，这 3 个峰就被认为是 3 峰重叠。与峰的个数无关，该规则适用于所有的峰。
- (3) 对于不重叠峰的基线，是从起点或终点沿由低到高的方向划水平线来确定的。
对于重叠的峰组，首先在组内确定第一个峰的起点与最后一个峰的终点，然后在两点之间沿由低到高的方向来划基线。该基线为组内所有峰的共同基线。
- (4) 对每个峰都要进行以下处理：
 - 测量从峰顶点到基线间的垂直距离，确定峰高。
 - 在峰高的 X%处划水平线。X 为在 DAD 数据处理窗口中设定的检测光谱位置 (%)。
 - 求出该峰上与所划水平线的两个交点。以 T1 与 T2 表示这两个交点相应的保留时间($T1 < T2$)。如果水平线与该峰在其顶点右侧不相交时，该峰的终点的保留时间则为 T2。
 - 提取 T1 与 T2 的光谱。
 - 计算出两个光谱的相关系数作为峰的纯度。
 - 根据 DAD 数据处理窗口中指定的峰纯度判定基准判定峰的纯度。

下例中，不重叠峰的终点比起点要低。在 DAD 数据处理窗口中，把检测光谱的位置 X(%) 设为 40%峰高处。



14.12 光谱峰 ID、峰纯度、光谱库检索中的光谱相关

2 个光谱的相关系数的计算式如下。

以 $A = (a_1, a_2 \dots a_n)$ 、 $B = (b_1, b_2 \dots b_n)$ 表示 2 个光谱。

a_i 与 b_i 表示的是光谱 A、B 在波长 i 下的吸光度值。两个光谱 A、B 之间的相关系数按照下式来计算：

$$\text{Corr. Coeff.} = \frac{\sum_i^n a_i b_i}{\sqrt{\sum_i^n a_i^2 \sum_i^n b_i^2}}$$

如果两个光谱之间的共同波长范围不够宽则无法计算相关系数。共同波长范围必须在 50nm 以上或是光谱带宽的 5 倍以上。光谱带宽不同时，请从中选择大的光谱带。

为使波长数据点等间隔配置，在计算前所有光谱都应被线性化。

14.13 统计计算

14.13.1 平均值

如果指定了统计计算功能，在 Primaide 系统管理中则可以使用下列公式。

$$x_{\text{avg}} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + \dots + x_n}{n}$$

$$x_{\text{w-avg}} = \frac{x_1 + x_2 + 2x_3 + 4x_4 + 8x_5 + \dots + 2^{n-2}x_n}{1 + 1 + 2 + 4 + 8 + \dots + 2^{n-2}} \quad (n \geq 2)$$

在此，

x_{avg} : 标准平均

$x_{\text{w-avg}}$: 对新数据进行加权的加权平均

加权平均在新数据比旧数据更可信时有用。

14.13.2 离散

离散的计算公式：

$$D_x = \frac{\sum_i^n (x_i - x_{\text{avg}})^2}{n-1} = \frac{n \sum_i^n x_i^2 - \left(\sum_i^n x_i \right)^2}{n(n-1)}$$

此处， $n > 1$ 。

14.13.3 标准偏差

标准偏差的计算公式：

$$SD_x = \sqrt{D_x}$$

14.13.4 相对标准偏差

相对标准偏差的计算公式：

$$RSD = \frac{SD_x}{x_{\text{avg}}} \times 100\%$$

14.13.5 决定系数

决定系数的计算公式：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i^n (y_1 - fx_i)^2}{\sum_i^n (y_1 - y_{\text{avg}})^2}$$

多点标准曲线的决定系数值以 R^2 表示，1 点标准曲线时以 $2D_x$ 表示。

14.14 系统适应性测试(SST)

在信赖性报告窗口选“系统适应性试验”为“ON”，然后在报告输出窗口(参数)指定信赖性报告后就可以输出系统适应性试验(SST)报告。

根据地区的不同 SST 计算方法也不同。SST 参数的计算方法为：美国 USP—使用峰底宽；欧洲为 EP—使用半峰宽；日本为：JP15(第 15 版)与 JP(第 13 版)—使用半峰宽。

下面为 SST 报告格式：

非保留峰的时间：2.00 min

RT (min)	成分名	k'	Asym	N (USP)	N (JP)	Res (USP)	Res (JP)	Alpha	S/N	噪音 (uV)
4.36	Diphenyl	1.1	1.05	3377	3377	---	---	---	59.5	2.50
5.05	Phenanth	8	1.34*	3834*	3834*	2.13	2.13	1.05	70.5	5.25
5.74	Flourant	1.5	---	---	---	1.98	1.98	1.05	89.1	6.75
7.10	Chrysene	3	—	4532	4532	2.09	2.09	1.2	77.1	9.75
8.81	Benz(b)	1.8	1.25	4191	4191	3.14	3.14	1.5	55.1	3.50
		7	1.25							
		2.5								
		5								
		3.4								
		1								

警告：理论塔板数小于界限值。

警告：不对称因子超出容许范围。

不对称因子容许范围：0.800-1.200

小于色谱柱的理论塔板数警告值：5000

小于分离度(R)的警告值：0.800

小于 S/N 的警告值：3

警告信息将输出到报告中。导致错误发生的数值附有*号。例如上表中的 1.34*与 3834*。带有下划线的分离度值表示的是重叠峰的推测分离度。“---”则表示没有相应值。

下述的是警告信息例：

- 峰对称度超出范围
峰对称度的计算值在容许范围之外。
- 理论塔板数低于界限值
理论塔板数的计算值小于界限值。
- 分离度值小于界限值
分离度的计算值小于界限值
- * * * * * (连续*号)
计算值过大无法显示。

用于 SST 参数计算的公式如下所示：

14.14.1 容量系数(k')

按照下式来计算容量系数:

$$k' = \frac{t_R}{t_0} - 1$$

在此,

t_R : SST 峰的实际保留时间

t_0 : 非保留峰的 RT

14.14.2 选择系数
(Alpha)

按照下式计算选择系数:

$$\alpha = \frac{k'_2}{k'_1}$$

在此,

k'_1 : 当前的 SST 峰的 k' , RT

k'_2 : SST 峰的 k' , RT

利用 RT 值更小的最接近 SST 的峰可以计算 SST 峰的分选选择系数(α)。

因此 RT 值最小的 SST 峰的分选选择系数将无法计算。这种情况下,在 SST 表中将以“——”输出。

14.14.3 理论塔板
数(N)

(1) USP

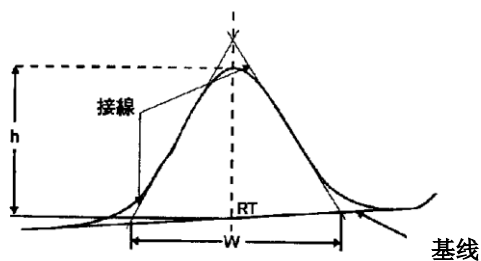
根据 USP 基准来计算理论塔板数时使用下示公式:

$$N = 16 \times \left(\frac{RT}{W} \right)^2$$

在此,

RT : SST 峰的实际保留时间

W : 在峰的两侧画切线,通过计算切线与基线相交的 2 点间的距离而求得峰宽。



(2) EP 与 JP

根据 EP、JP15 以及 JP 基准，利用下式来计算理论塔板数：

- JP:

$$N = 5.55 \times \left(\frac{RT}{W_{1/2}} \right)^2$$

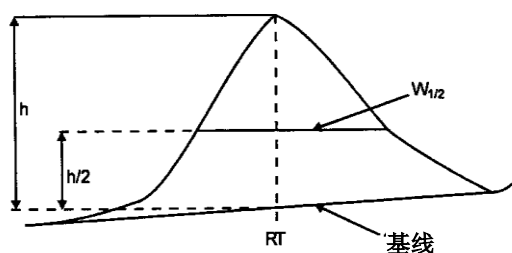
- EP 及 JP15:

$$N = 5.54 \times \left(\frac{RT}{W_{1/2}} \right)^2$$

在此，

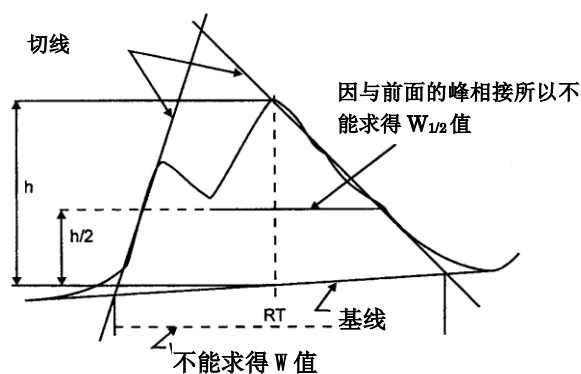
RT : SST 峰的实际保留时间

$W_{1/2}$: 在 1/2 峰高处画一条与时间轴相平行的线，该线与峰相交的 2 点之间的距离为 $W_{1/2}$ 。



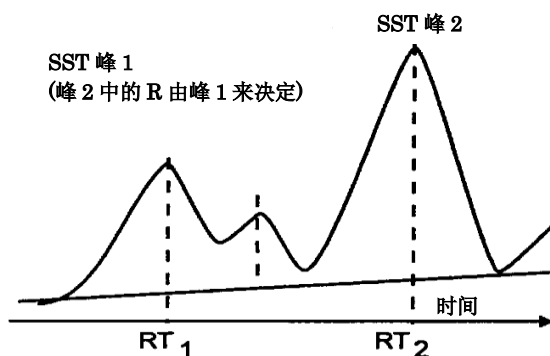
如果在半峰高处不存在数据点时，利用最接近的数据点来画平行线。

如下图，在 $W_{1/2}$ 不能正确求得时（即半峰宽值与前/后的峰相连接时），N 将不被计算，在 SST 报告的理论塔板数一栏中将以 “——” 打印。



14.14.4 分离度(Res)

R 表示的是某个 SST 峰与其左侧相邻的 SST 峰之间的分离度。最左侧 SST 峰的 R 将无法计算，因为在其左侧没有 SST 峰存在。这种情况下，SST 表的分离度栏中将以“——”显示。



(1) USP

按下式计算。

$$R = \frac{2(t_2 - t_1)}{W_2 + W_1}$$

在此，

W_1, W_2 ：在峰的两侧各画一条切线，根据切线与基线相交的两点间的距离求峰宽 W_1, W_2 。详细请参照“14.14.3”。

(2) EP 以及 JP

请按照下式来计算分离度：

$$R = \frac{1.18(t_2 - t_1)}{W_{1(1/2)} + W_{2(1/2)}}$$

在此，

$W_{1(1/2)}, W_{2(1/2)}$ ：在 1/2 峰高处画一条与时间轴相平行的线，根据该线与峰相交的 2 点之间的距离求得半峰宽。

$W_{1(1/2)}, W_{2(1/2)}$ 与 $W_{2(1/2)}$ 不能正确求得时（即半峰宽与前/后的峰相连接时），请按下式来计算 R：

$$R = \frac{\sqrt{N}}{4} \times \frac{\alpha - 1}{\alpha} \times \frac{k'_2}{k'_2 + 1}$$

在此，

k：容量系数

α ：选择度

N：以下述规则，根据相邻 SST 峰求得的理论塔板数。

求理论塔板数的规则：

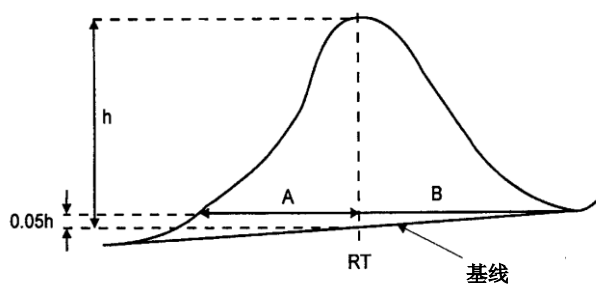
- 如无法求得 SST 峰的 N 值时，使用 RT 更大的最接近的 SST 峰的 N 值。如上述 N 值也不存在时，检索 RT 更大的 SST 峰。
- 如果检索不到合适的 RT 更大的 SST 峰，则使用 RT 更小的最接近的 SST 峰的 N 值。如上述 N 值也不存在时，检索 RT 更小的 SST 峰。
- 如在所有 SST 峰中都不存在有效的 N 值时，则该 SST 峰的分离度将无法计算，在 SST 表中将以“——”显示。

14.14.5 不对称系数 (Asym)

请用下式来计算不对称因子(峰的对称度)。

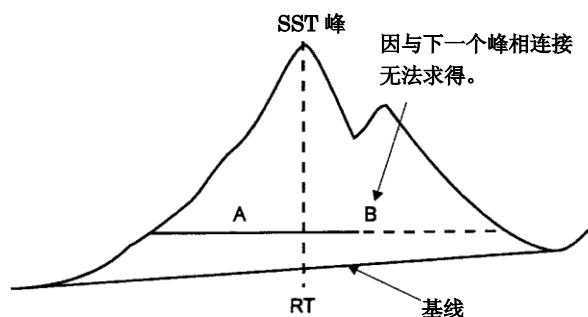
$$\text{Asym} = \frac{1}{2} \times \left(1 + \frac{B}{A} \right)$$

A 与 B 值以 SST 峰的 5%峰高来计算。



如在 5%峰高处不存在数据点时，利用最接近的数据点来计算 A 与 B。

如果 A 与前面的峰相连接或 B 与后面的峰相连接时，A 与 B 都无法取得正确的结果。如下图所示：



这种情况下，无法计算 Asym 值，Asym 将以“——”显示。

14.14.6 S/N 值

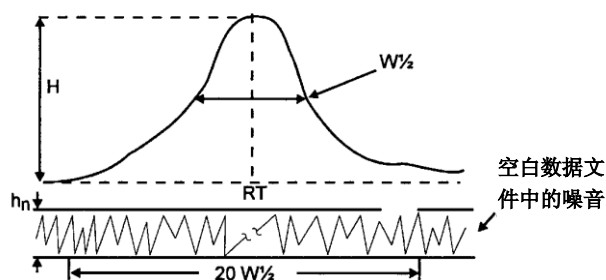
请按下式计算 S/N 值：

$$\frac{S}{N} = \frac{2H}{h_n}$$

在此，

H : 峰的高度

h_n : 待测峰的 RT 前后的、20 倍半峰宽 ($20W_{1/2}$) 范围内的最大噪音测定值。



对于距色谱两端最近的 SST 峰(例如, 最初与最后的 SST 峰), 其噪音测试范围可以比较短(例如, 从峰 RT 至 10 倍半峰宽的时间超出色谱数据范围的情况)。 h_n 是由相对应的空白数据而求得值。空白数据必须属于同一个数据系列。如果同一个数据系列中不存在空白数据时, S/N 将不被计算, 在报告的 S/N 栏中将以“——”显示。

在线处理时, 当数据系列中存在多个空白数据时, 用最新的空白数据(待处理数据)来计算 S/N 值。例如, 以下数据系列中, 用 Blank2 来计算 Standard3~5 与 Unknown6 的 S/N 值; 用 Blank7 来计算 Standard8~10 与 Unknown11 的 S/N 值。

行	样品
1	Blank1
2	Blank2
3	Standard3
4	Standard4
5	Standard5
6	Unknown6
7	Blank7
8	Standard8
9	Standard9
10	Standard10
11	Unknown11

数据再处理时也用同样方法来计算 S/N 值, 同一系列内的空白数据将自动被检索。详细请参照“14.7 空白校正”。

14.15 数据诊断

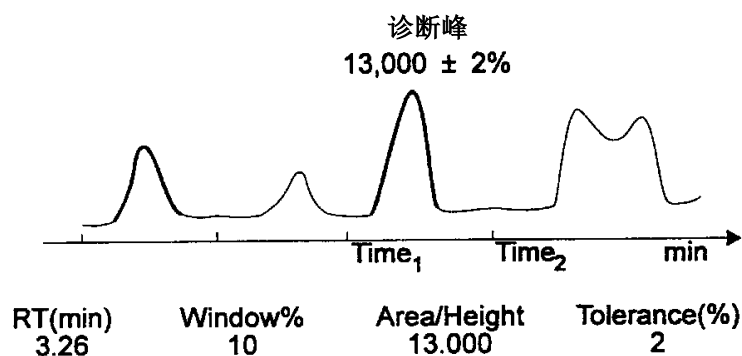
在信赖性报告窗口选择数据诊断功能，执行数据诊断。

14.15.1 指定诊断峰

要对某个峰执行数据诊断，必须在信赖性报告中指定以下项目。

- 峰的期待保留时间(RT)(分)
- 保留时间的容许宽度(min)或容许宽度(%)
- 峰的期待面积、高度与浓度
- 面积与高度的容许宽度(%)

利用 RT、RT 容许宽度(%)与 RT 容许宽度(min)可以计算出待诊断峰的期待时间范围(请参照 14.6.1 与 14.6.2)。



如果在 Time1-Time2 之间存在多个峰，最高峰将被选为诊断峰。将该诊断峰的实测峰面积与峰高与期待值进行比较。

- 下限
期待面积(或高度) × (1.00 - 容许宽度% / 100)
- 上限
期待面积(或高度) × (1.00 + 容许宽度% / 100)

如果下限比实际面积(或高度)小，而上限比实际的大，这就说明色谱数据正常。如非上述情况时，色谱数据被诊断为异常并在信赖性报告中有警告信息显示(例：STD 样品的数据诊断用峰值超出容许范围)。

诊断峰功能只限于判定 STD 色谱数据。如果 STD 进样数据被诊断为异常，将自动从校准范围内被排除。

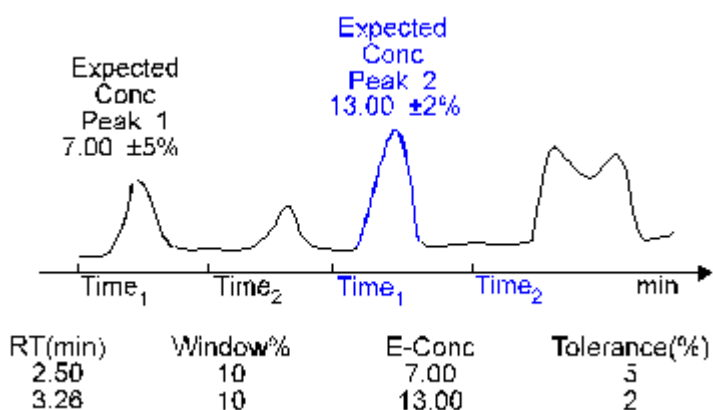
14.15.2 峰的期待浓度判定

在成分表的功能 1 与功能 2 栏中选择“期待浓度”后，可以把需要的成分指定为浓度判定峰。请在成分表中对每个成分指定以下附加参数：

- 期待浓度值
- 浓度范围(%)

但是，如果在“定量计算方法”窗口中指定了计算方法为“面积%高度%法”时，在成分表中只限于期待浓度与 SST 值可以选择。浓度判定峰只适用于判定 UNK 色谱数据成分。

浓度判定峰的预测时间范围由 RT、RT 容许宽度(%)或 RT 容许宽度(min)来计算。(关于详情请参照 14.6.1 与 14.6.2 项。)



RT 容许宽度内存在多个峰时，距容许宽度中心最近的峰作为浓度判定峰。上例中，峰 1 的期待浓度为 7 mg \pm 5%，容许范围为 6.65~7.35 mg；峰 2 的期待浓度为 13 mg \pm 2%，容许范围为 12.74~13.26 mg。如果根据色谱图求得的峰 1 与峰 2 的实测值在各自的容许范围内，就说明值正常。

如果峰被判定超出期待浓度的容许范围后，该结果将被输出到信赖性报告中。上述情况只限于在“报告输出格式”窗口选择了“每次进样”时有效。

14.16 分解物报告

分解物报告指的是分解成分(主成分分解的成分)对主成分的相对量。在报告编辑器中的“方法画面”中追加“分解物报告表”后可以输出该报告。

14.16.1 成分峰的检索规则

在成分表的功能栏中指定了主成分或分解成分，并检测出主成分峰与分解成分峰时将有分解物报告输出。报告输出峰为“认定成分”时，对于未检测出的分解成分将不被输出到报告中。

首先检索出主成分。如果存在多个主成分时，把最先检测出的峰作为主成分峰。找到主成分后开始检索分解成分。如果检测出的成分已被指定为主成分后，就不可以再把其指定为分解成分。例如，下例的“aaaa”是最初被检测出的成分所以被认定为主成分，“cccc”与“ dddd”则被作为分解成分输出到报告。

RT(min)	容许宽度(%)	成分名	功能指定 1	功能指定 2
1.0	10	aaaa	主要成分	分解成分
1.5	10	bbbb	主要成分	
1.8	10	cccc	主要成分	分解成分
2.0	10	dddd	分解成分	

14.16.2 分解物报告计算法

用相对面积%法来计算主成分分解物量：

Degrade[i] : 第 i 个分解成分量

Area[i] : 第 i 个分解成分的峰面积

Area_Main : 主成分的峰面积

(如果检测不出主成分峰，Degrade[i]将不被计算。)

计算结果将如下示的“分解成分表”的形式被输出。主成分标有(m)符号，分解成分标有(d)符号。

成分名	RT(min)	面积	相对面积%
dddd (m)	3.0	10000	100.00
aaaa (d)	2.3	325	3.25
bbbb (d)	3.8	215	2.15
分解物的合计			5.40

14.17 故障诊断

在本节中，将对峰检测以及定性·定量的一些典型的故障诊断例做说明。

- 峰检测时的故障
- 定性与定量计算的故障

14.17.1 峰检测故障

峰检测中所发生的故障，多半是与 SP 时间表中的数据采集间隔(SP)、波形处理参数表中的噪音值与峰检测灵敏度的设定相关。

下述的是较典型的故障例以及排除法：

- (1) 检测不出微小峰
- (2) 在峰的中途画有基线
- (3) 检测不出宽的峰
- (4) 一个峰被分割成 2 个以上
- (5) 不能检测出宽峰后的尖峰
- (6) 不需要的峰也进行了基线处理

(1) 故障：检测不出微小峰

原因与对策：

- 噪音与峰检测灵敏度：
峰检测界限值(α)由噪音值与峰灵敏度的乘积来决定。请将波形处理参数表中的噪音值与峰的灵敏度值设小一些。
- 报告峰的判定级别：
请将“色谱显示格式”窗口中的该设定值设小一些。
- 数据采集周期(SP)：
请将“检测器参数”窗口中的该设定值设小一些后再进行数据采集。
- 噪音测试：
数据采集前取得的噪音值被保存到使用中文件中。如果噪音值过于大，请等到安定后再开始采集数据。

(2) 故障：在峰的中间画有基线

原因与对策：

原因：数据采集周期可能过于小。请在尖峰中将大约 20 个数据点作为目标来设定 SP 值后，再进行数据采集。

(3) 故障：检测不出宽的峰

原因与对策：

峰的检测灵敏度可能过于大。请将值设小之后再进行再计算。

(4) 原因：一个峰被分割成 2 个以上的峰

原因与对策：

- ① 首先变大峰的检测灵敏度值后再实行再计算。
- ② 变大数据采样周期(SP)后再开始数据采集。

(5) 故障：不能检测出宽峰后的尖峰

原因与对策：

因数据采样周期仍为宽峰的采样周期值。

(6) 故障：不需要的峰也进行了基线处理

原因与对策：

通过在数据开始采集后的溶剂峰与负峰中设定“积分禁止”可以排除该故障。

14.17.2 定性与定量计算的故障

定性与定量计算中的故障，多半是与成分表的设定内容、连续测定中保留时间的变化相关。下述的是比较典型的故障例以及排除法。

- (1) 峰没有被认定
- (2) 峰没有被正确的认定
- (3) 内标峰没有被认定
- (4) 无法检测出相对 RT

(1) 故障：峰没有被认定

原因与对策：

成分表中保留时间与容许范围设定值不正确而引起。请使成分表中的保留时间与峰的保留时间一致，或者将容许范围变宽或变窄(如果存在多个峰时)。

(2) 故障：峰没有被正确的认定

原因与对策：

连续测定中，因色谱峰的保留时间整体向前方或后方漂移而引起。连续测定中，相隔一段时间后，请对标准样品(STD)也进行分析以便更新成分表中的保留时间。

(3) 故障：内标峰没有被认定

原因与对策：

成分表中的内标峰的保留时间与同定时间范围设定值不正确而引起。请使成分表中的保留时间与峰的保留时间一致，或者将同定时间范围变宽或变窄(如果存在多个峰时)。

(4) 故障：无法检测出相对 RT

原因与对策：

成分表中的相对峰的保留时间与同定时间范围设定值不正确而引起。请使成分表中的保留时间与峰的保留时间一致，或者将同定时间范围变宽或变窄(如果存在多个峰时)。

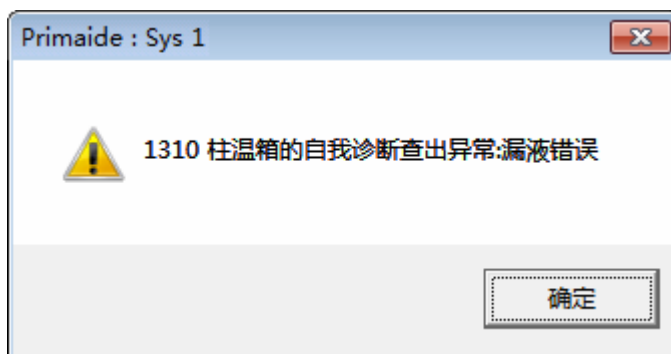
14.17.3 解除故障的方法

下面是对在模块中发生错误时解除方法的说明。错误的解除方法因数据采集窗口打开与未打开时而不同。请按以下步骤来解除错误：

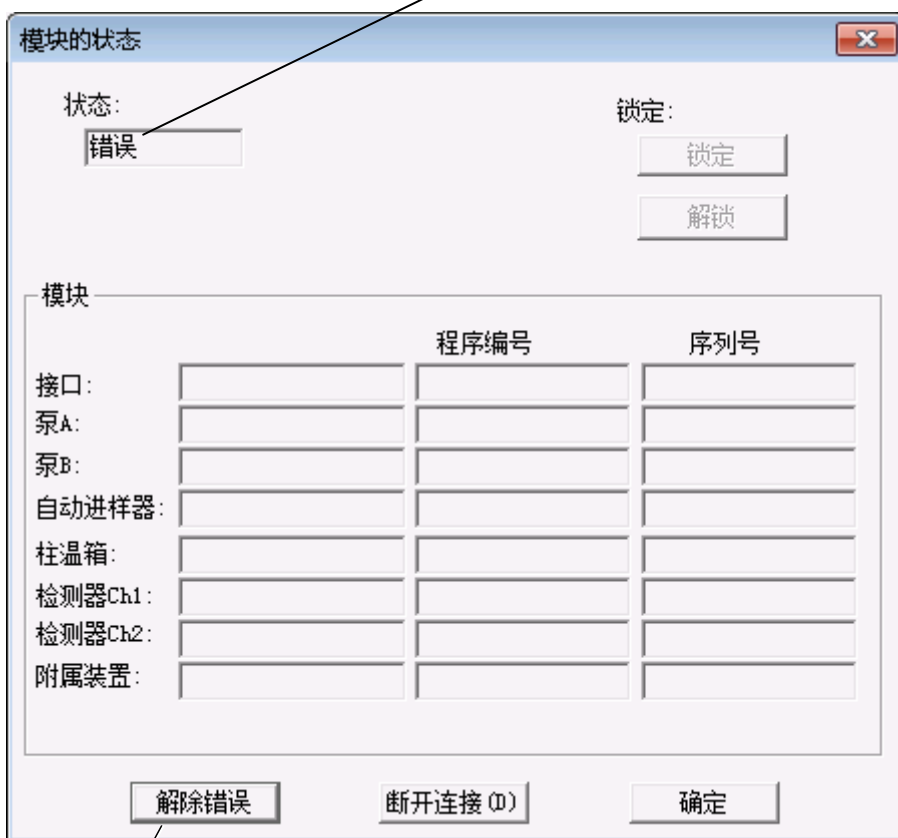
(1) 数据采集窗口未打开

(a) 如有错误信息发生，首先确认错误信息并在模块中解除错误，然后单击**确定**按钮关闭对话框。

(1310 柱温箱：错误信息)



(b) 单击 Primaide 系统状态图标。状态显示为“错误”时，请点击**解除错误**按钮解除错误。

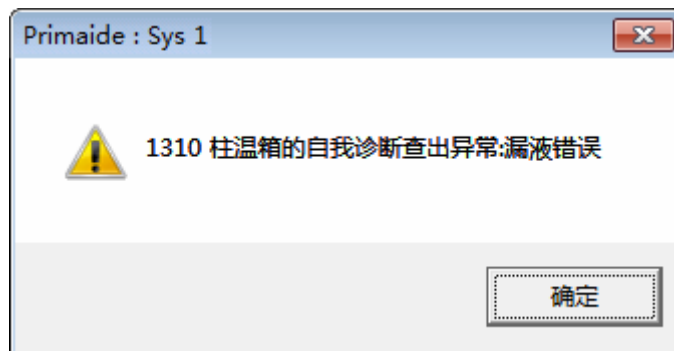


解除错误按钮

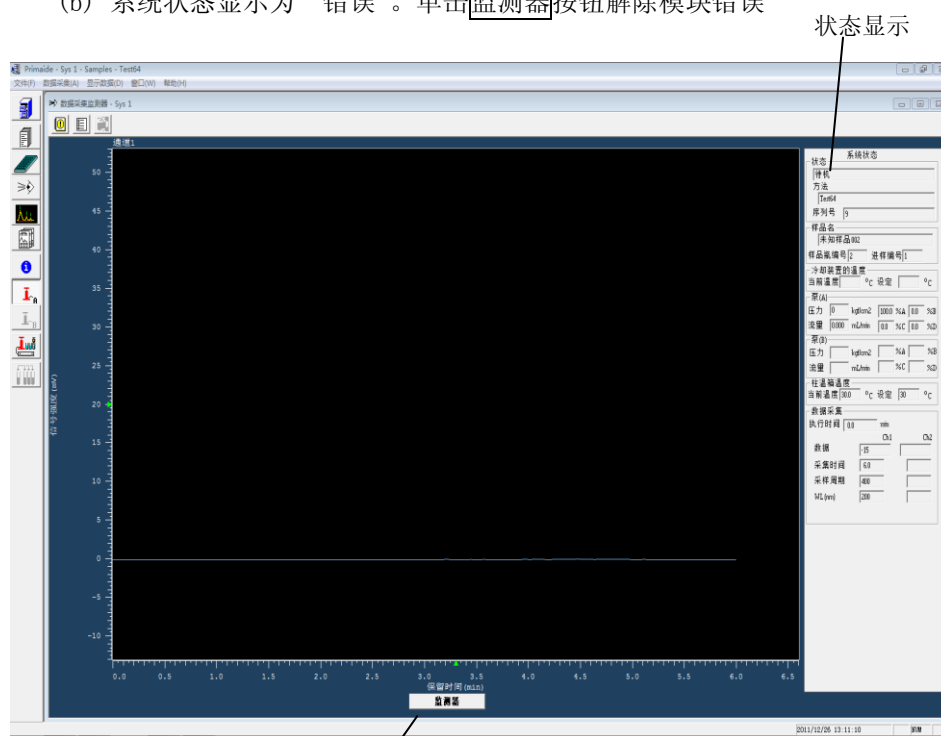
(1) 数据采集窗口打开时

(a) 如有错误信息发生，首先确认错误信息并在模块中解除错误，然后单击**确定**按钮关闭对话框。

(1310 柱温箱：错误信息)



(b) 系统状态显示为“错误”。单击**监测器**按钮解除模块错误



监测器按钮

附录 1 在线 DDE 的功能与操作

在线 DDE (Dynamic Data Exchange) 指的是数据采集中或是数据再处理中把数据处理结果输出到其它软件里的功能。

Primaide 系统管理中有向 Microsoft® Excel (以下简称 Excel) 输出数据处理结果 (用 STANDARD 画面生成的报告的一部分) 的在线 DDE 程序。

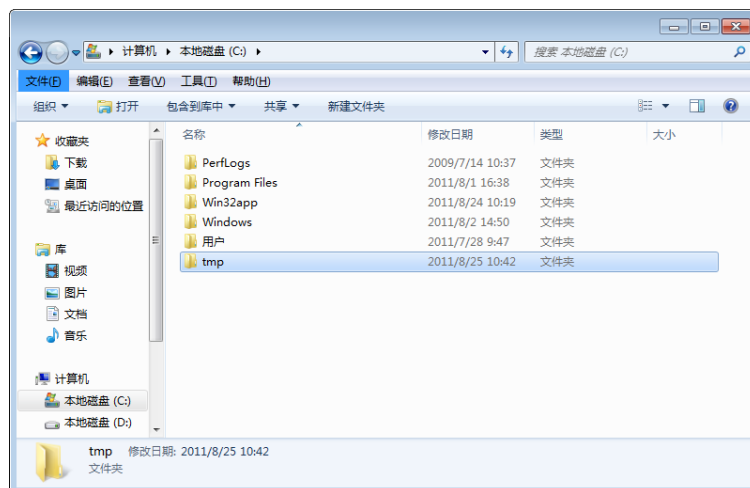
注: 请确认在 Excel 中是否注册了 Windows 图元文件 (扩展名 wmf) 用图形文件。如没有注册, 在读取 Windows 图元文件 (扩展名 wmf) 时将会发生错误。

1. 附属的在线 DDE 程序的执行环境

要启动在线 DDE 用程序, 必须先在 “C: 盘” 中先生成在线 DDE 用程序的工作目录 (文件夹) “TMP”。工作目录 (文件夹) “C: TMP” 通常通过资源管理器来生成。请设置 TMP 为半角大写。

注: 在下图中, 用半角大写输入的字符虽显示为半角小写, 但在输入时请一定输入大写 “TMP”。

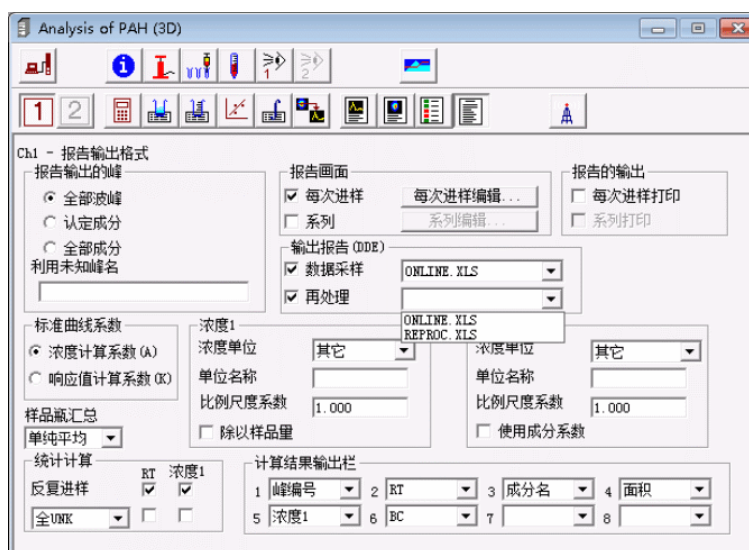
半角小写设定的工作目录将无法运行, 请注意。



Excel 目录的 “Excel” 必须与 Primaide 系统管理程序目录 “Primaide” 在同一个驱动器中。

2. 设定方法文件

在方法文件设定窗口的“报告输出格式”中进行在线 DDE 的设定。



请设定在线 DDE 功能用 DDE 参数：

- 数据采集
指定连续分析中数据处理结果输出用程序文件。如果设置在线 DDE 为“Online.xls”，数据处理结果将被输出到 Excel。
- 再处理
指定数据再处理结束后输出数据再处理结果的程序文件。如果设置在线 DDE 为“reproc.xls”，数据处理结果将被输出到 Excel。

3. 关于附属的在线 DDE 程序

在线 DDE (Online.xls 与 Reproc.xls)，根据以初始设置的标准画面生成的报告(数据处理结果)的内容，把以下的项目粘贴到 Excel 表中。

Manager Report 项目

测定时间、报告时间、系统名、数据处理用方法文件、应用程序、系列、样品瓶、样品名、样品瓶类型、进样量、进样次数、样品注释：

通道 1：色谱类型、色谱图、等高线图

通道 2：色谱类型、色谱图

Tables 项目

通道 1：色谱类型、峰定量、定量计算方法、样品量、比例系数 1、数据处理结果表

通道 2：色谱类型、峰定量、定量计算方法、样品量、比例系数 1、数据处理结果表

Confidence Report 项目

测定时间、报告时间、系统名、数据处理用方法文件、应用程序、系列、样品瓶、样品名、样品瓶类型、进样量、进样次数、样品注释；

通道 1: 色谱类型、系统适应性报告、非保留峰的时间、系统适应性报告结果

通道 2: 色谱类型、系统适应性报告、非保留峰的时间、系统适应性报告结果

注: Primaide 系统管理的在线 DDE 程序, 只支持用“标准画面模板”生成的报告项目, 用其它画面模版生成的报告项目不能输出到 Excel 中。

向 Excel 中输出的结果, 在每次进样后作为文件被保存。文件名如下所示:

- 数据采集 (利用 Online.xls 程序) 中输出的文件;

进样数据的输出顺序为:

Inj0001.xls, Inj0002.xls, Inj0003.xls Injn.xls

如果在工作目录 TMP 中 Injn.xls 已存在时, 文件命名为 Injn.xls 以外的名称。例如, Inj0002.xls, Inj0003.xls 已经存在时, 文件名按进样数据的输出顺序命名为 Inj0001.xls, Inj0004.xls, Inj0005.xls Injn.xls

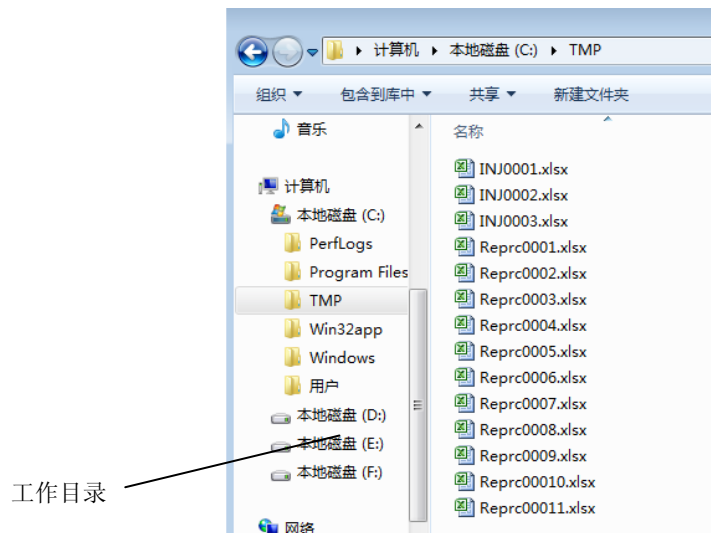
- 再处理 (利用 Repoc.xls 程序) 中输出的文件;

进样数据的再处理顺序为: Reprc0001.xls, Reprc0002.xls,

Reprc0003.xls Reprcn.xls

如果在工作目录 TMP 中 Reprcn.xls 已存在时, 文件命名为 Reprcn.xls 以外的名称。例如, Reprc0002.xls, Reprc0003.xls 已经存在时, 文件名按进样数据的输出顺序命名为 Reprc0001.xls, Reprc0004.xls, Reprc0005.xls Reprcn.xls

为便于区别文件名, 输出操作结束后, 请把从 TMP 中输出的文件 (Injn.xls 和 Reprcn.xls) 移动到其它的工作目录下。如果想更容易地来管理文件, 请使用移动目的目录名。文件的操作通过资源管理器来进行。



4. 设定在线 DDE

在线 DDE 包括“数据采集”与“再处理”。
设定如下所示：

(1) 数据采集在线 DDE 的设定

- ① 请按下图所示来设定方法文件报告输出窗口的 DDE 参数。



- ② 保存方法文件。
- ③ 单击数据采集图标，开始采集数据。每次进样后，数据处理结果将自动输出到 Excel。

(2) 再处理在线 DDE 设定

- ① 单击数据再处理图标打开进样表。
- ② 在窗口菜单选择方法文件，把方法文件设定窗口移动到最前面。
- ③ 报告输出窗口的 DDE 参数设置如下。



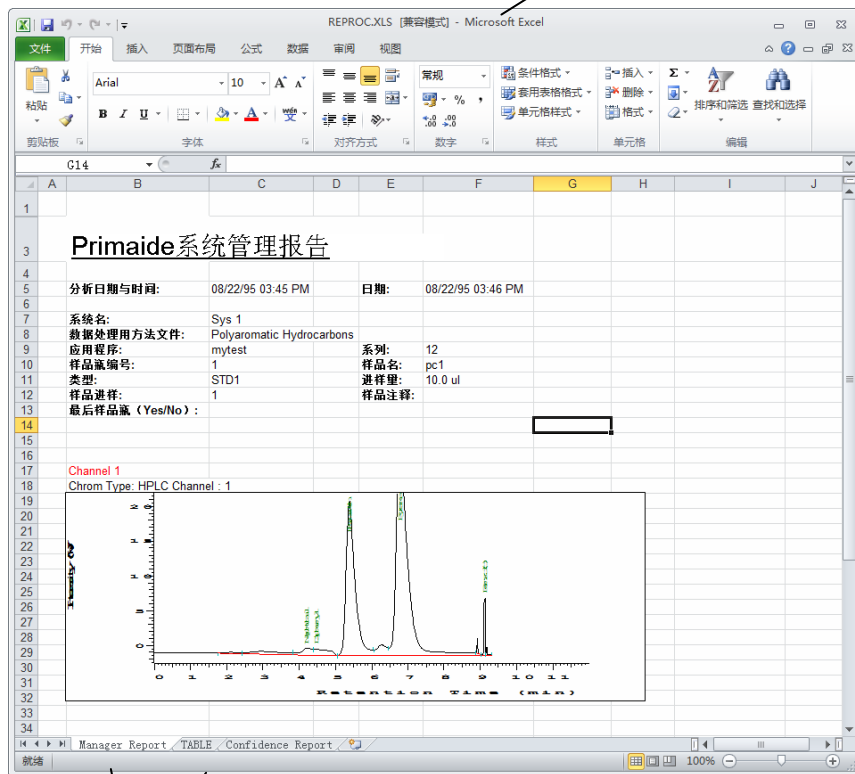
- ④ 单击更新参数图标。

- ⑤ 在进样表中指定数据再处理范围，然后单击“再计算”按钮。指定范围内数据再处理结束后，结果将自动输出到 Excel。

5. 在线 DDE 处理结果例

在线 DDE 处理结果文件 (Injn.xls 与 Reprcn.xls) 内容如下图所示:

输出文件名



表格标签

附录 2 Primaide 系统管理的应用

1. 在内标法中的应用

内标法指的是在标准样品与未知样品中加入相同溶度的内标成分，以内标成分峰为基准来进行定量的计算方法。内标定量包括：（1）定量成分浓度（与外标法相同）；（2）定量内标物/成分的面积（峰高）的比。

请按以下方法来操作方法文件设定窗口：

（1）定量成分浓度方法

- ① 在定量计算方法窗口选择“定量计算方法：内标法”
- ② 在成分表窗口指定“内标准”成分。

RT (min)	最大宽度 (%)	成分名	功能1
2.69	10.00	Naphthalene	内标准
3.27	10.00	Anthracene	
4.03	10.00	Chrysene	

- ③ 在浓度表中输入各个成分的浓度。

成分名	Std1
Naphthalene	7.5
Anthracene	0.25
Chrysene	0.50

- ④ 在样品表窗口输入内标物的浓度。

样品表名: test

内标量	方法名
1	Analysis of PAH

- ⑤ 根据 STD 样品瓶绘制标准曲线，定量未知样品。

NO	保留时间	面积	浓度 1 ppm	成分名	
1	2.34	710914	N/A	Naphthalene	I
2	2.64	1079429	20.079	Anthracene	
3	3.10	291567	30.703	Chrysene	
		2081910	51.782		

(2) 定量面积（峰高度）方法

- ① 在定量计算方法窗口选择“定量计算方法：内标法”。
- ② 在成分表窗口指定“内标法”成分。

RT (min)	最大宽度 (%)	成分名	功能1
2.69	10.00	Naphthalene	内标准
3.27	10.00	Anthracene	
4.03	10.00	Chrysene	

- ③ 在系数表窗口，为使“浓度值=面积（峰高）值”，在各个成分标准曲线系数的“A1”列中全部输入“1”。

成分名	A0	A1
Naphthalene	0.000e+000	5.033e-005
Anthracene	0.000e+000	9.983e-007
Chrysene	0.000e+000	6.157e-006

- ④ 不计算 STD 样品瓶（标准曲线已在③中绘制完成）来定量未知样品。

NO.	保留时间	面积	浓度 1 比	成分名	
1	2.34	710914	N/A	Naphthalene	I
2	2.64	1079429	1.518	Anthracene	
3	3.10	291567	0.410	Chrysene	
		2081910	2.928		

2. 报告输出的应用

数据处理结果报告包括“每次进样报告”与“系列报告”。“每次进样报告”，指的是对每次进样进行数据处理后输出的报告。“系列报告”则指的是系列分析结束后输出的报告。指定两个报告的输出后，一次连续分析可以输出 2 种报告。

例如，可以输出报告项目分类的报告。如下所示：

- 每次进样报告： Standard 画面报告

(输出项目：样品信息、数据处理信息、光谱、标准曲线信息与计算结果表等)

- 系列报告：计算结果一览报告

(输出项目：样品名、进样次数与计算结果表)

为便于管理数据，连续分析结束后输出计算结果一览。


附录3 生成 AIA 形式的数据

AIA 形式数据是美国分析仪器工业协会提倡的色谱数据的通用版本。Primaide 系统管理可以把测定中数据转换为 AIA 形式或是读取 AIA 形式的原始数据。

1. 生成 AIA 形式数据

- (1) 单击“数据再处理”图标打开“打开文件”对话框。
- (2) 选择要变为 AIA 形式的数据系列，单击**确定**按钮打开进样表。
- (3) 选择“选项”菜单的“AIA 文件的变换”打开“AIA 数据变换”对话框。



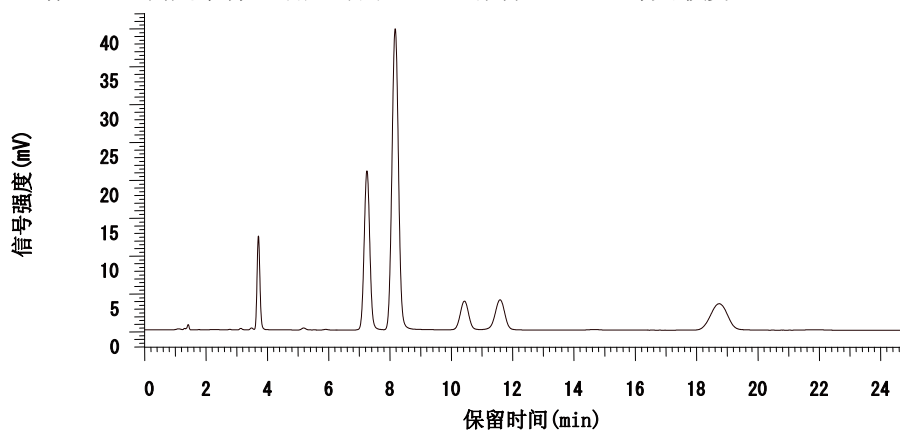
- (4) 在“收藏处”输入 AIA 数据储存目录。单击  按钮显示“收藏处目录的设定”对话框。从目录树中选择收藏处。
- (5) 要变更显示的文件名，单击“文件名”，打开“AIA 文件名”对话框，输入名称与序列编号，单击**确定**按钮。
- (6) 单击“变换”，开始变换处理。变换结束后，关闭对话框。

注：指定的文件名已存在的情况下将会有提示信息显示。

附录 4 关于采样周期的设定

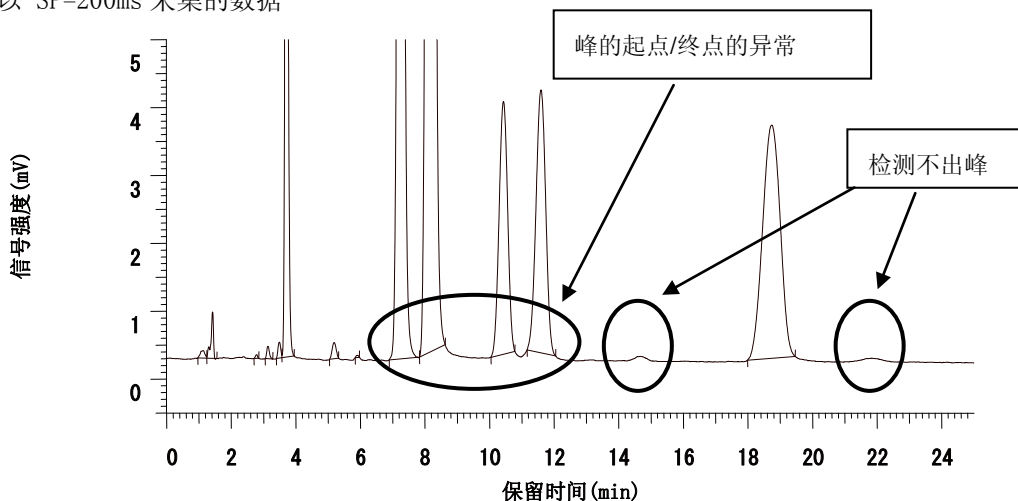
数据采集开始后, Primaide 系统管理按一定间隔从检测器中读取信号, 这个间隔就叫做采样周期 (SP)。要取得正确的峰面积, 根据要测定的峰宽设置适当的 SP 值是非常重要的。下面介绍的是不同采样周期取得的色谱。

<色谱> (测定条件: 响应时间 0.5s 噪音 $10\mu\text{V}$ 峰灵敏度)



扩大基线附近

以 SP=200ms 采集的数据



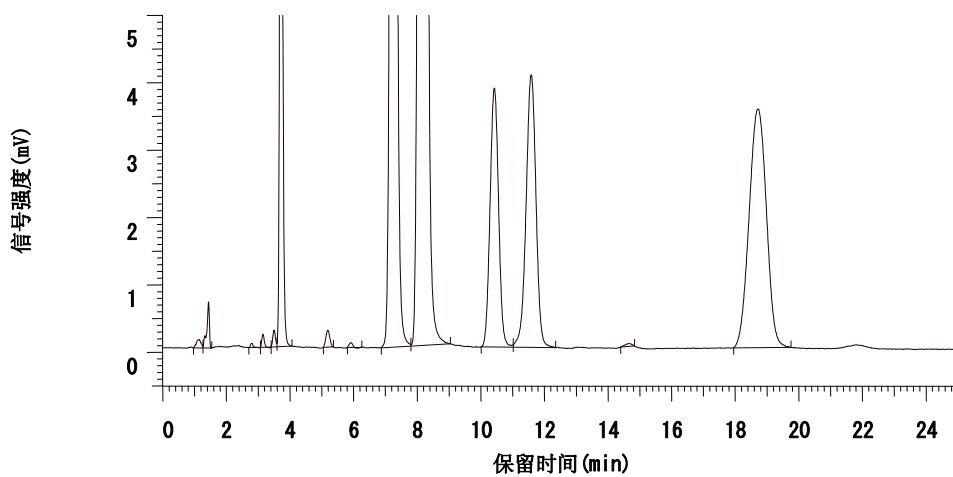
SP=200ms 时, 在峰检测中可能会出现的问题。诸如, 不能正确判别峰的起点与终点, 也不能检测出宽峰与小峰等。如果把 SP 值扩大后, 这些问题都会解决。所以请一定要设定适当的值。因 SP 是数据采集用参数, 所以请注意, 无法在变更后再进行再计算。

<参考> 设定值的标准

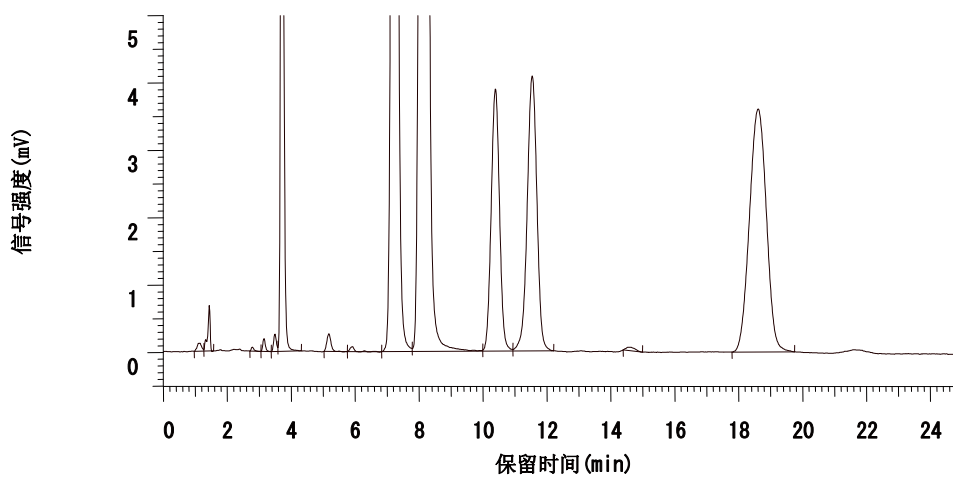
峰的宽度 0.2 分以下	: 200ms	1.0 分以上:	1600ms
0.2-0.5 分	: 400ms	1.0 分以上, 峰的高度为 1mV 以下:	3200ms
0.5-1.0 分	: 800ms		

变更 SP 值后采集的色谱例。

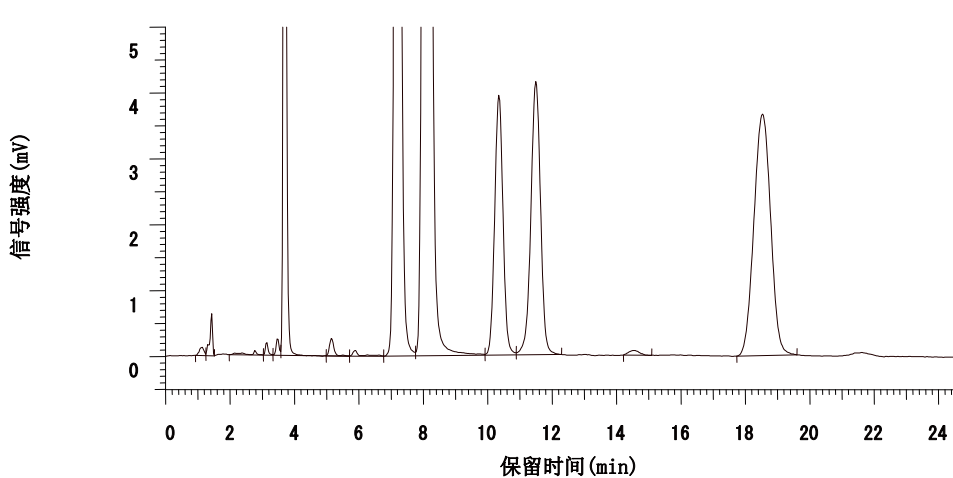
以 SP=400ms 采集的色谱



以 SP=800ms 采集的色谱



以 SP=1600ms 采集的色谱



附录 5 响应时间的设定

响应时间是检测器的应答速度。响应时间值越大，应答就越慢，也因此跟不上尖峰的检测速度，导致峰高过低或是峰过宽，出现峰分离度下降等情况，影响色谱。5 分钟以内溶出的峰尤其容易受到影响。另一方面，响应时间的值如果过小，噪音值会增大，有可能导致再现性变差。

在这里推荐：通过改变设定值进行实际测定，对色谱图的不同、噪音值的大小与基线处理等进行比较。

下面介绍的是设定不同响应时间得到的色谱图。

<参考>响应时间设定值的标准

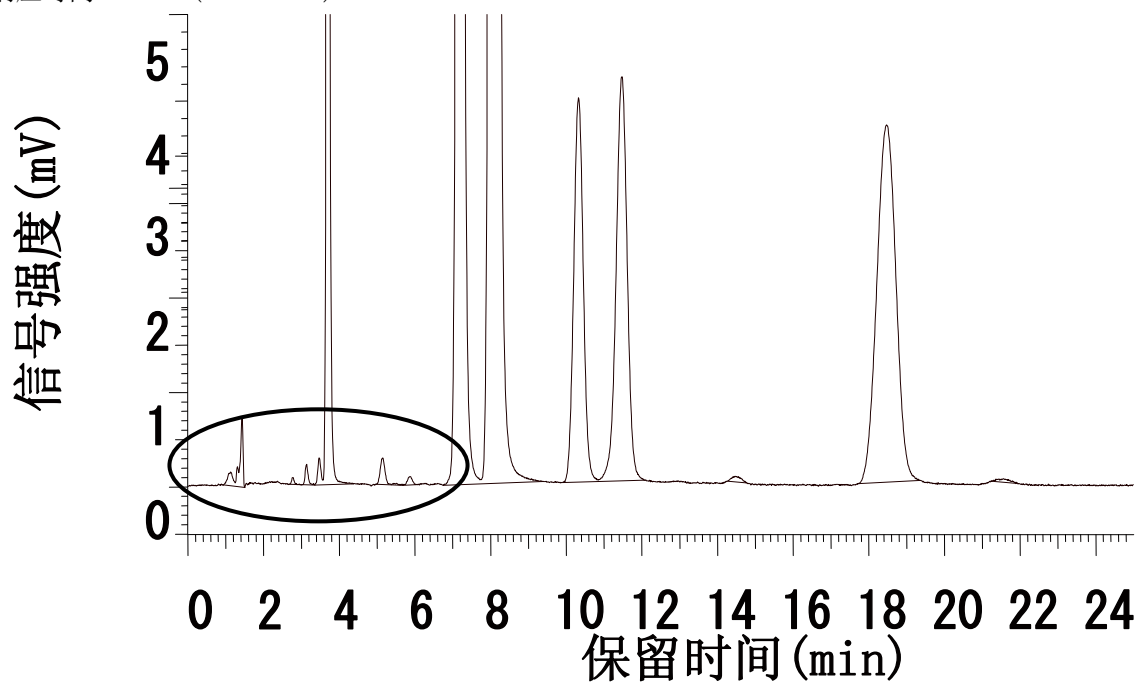
以短色谱柱进行短时间测定 : 0.05-0.1 s (2-3 分测定结束的情况)

通常测定 : 0.5-1.0 s

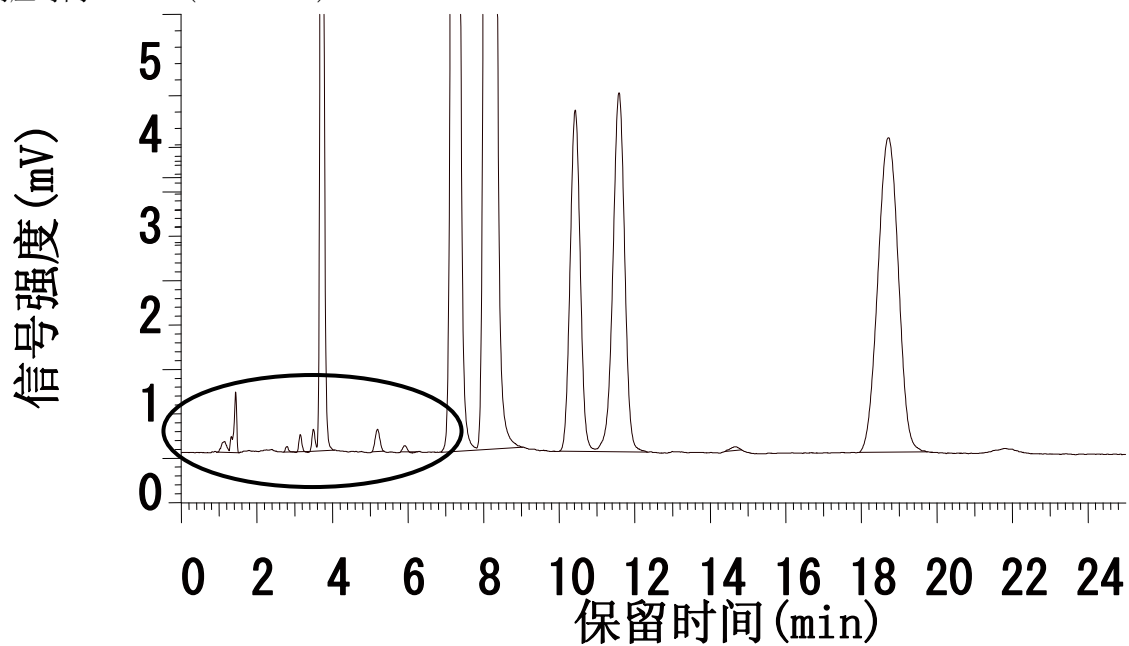
使用噪音大的检测器进行的测定 : 2.0 s

固定采样周期 (SP) 为 400ms，只改变响应时间来显示采集的色谱。根据响应时间的不同，请注意 4 分钟以内的峰的形状，越小的峰，受到的影响就越大。

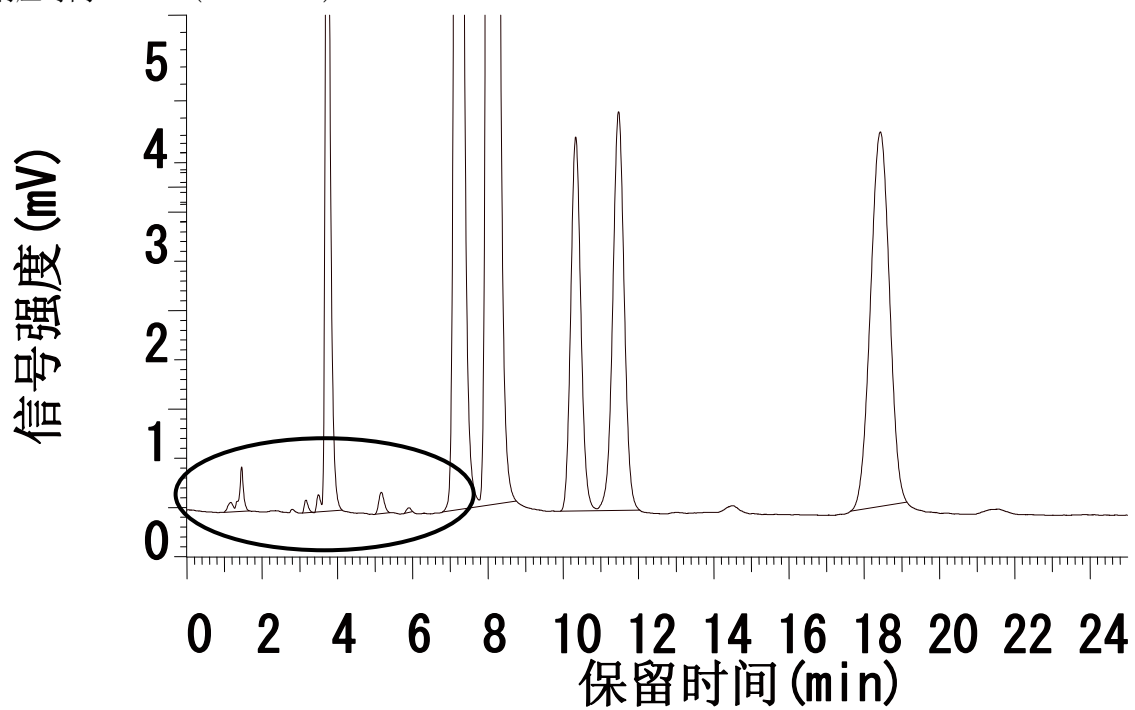
响应时间=0.1s (SP=400ms)



响应时间=0.5s (SP=400ms)



响应时间=2.0s (SP=400ms)



附录 6 错误信息

以下是对每个模块里发生的错误信息的说明。关于每个模块的错误信息解除方法，请参照附带的操作说明书。Primaide 1000 系列错误信息请参照“14.17.3 解除故障的方法一项”。

(1) 1110 泵 A/B

显示错误信息	模块显示的 错误信息	原因
1110 泵 A/B 自我诊断查出错误： ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时，程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1110 泵 A/B 自我诊断查出错误： RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时，对 RAM 进行检测，有异常时(RAM 不良)显示。
1110 泵 A/B 自我诊断中查出异常： 参数错误。 1110 泵 A/B 参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
在 1110 泵 A/B 自我诊断中查出异常： 日志信息错误。 1110 泵 A/B 的维护日志已被初始化。	LOG INFORMATION ERROR	保存的 LOG 信息存储空间不良(损坏)时显示。
在 1110 泵 A/B 自我诊断中查出异常： EEPROM 错误。 1110 泵 A/B 的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的仪器参数存储空间不良(损坏)时显示。
1110 泵 A/B 的自我诊断查出异常： 漏液错误	PUMP OFF BY LEAKAGE	溶剂托盘中发现漏液。漏液传感器检测出泄漏现象时显示。
1110 泵 A/B 的自我诊断查出异常： 压力信息数据缓冲溢出	DATA BUFFER OVERFLOW	压力信息里有泵单独的存储缓冲区。因通信错误等原因，PC 不对泵输出压力值时显示。
1110 泵 A/B 的自我诊断查出异常： 压力上限错误	PRESSURE MAX LIMIT ERROR	泵送液中的压力超出设定压力上限值时显示。
1110 泵 A/B 的自我诊断查出异常： 压力下限错误	PRESSURE MIN LIMIT ERROR	泵送液中的压力低于设定压力下限值时显示。
1110 泵 A/B 的自我诊断查出异常： 电机初始位置错误	MOTOR INITIALIZE ERROR	泵在送液中回复不到凸轮位置，也就是说发动机不工作时显示。
从模块接到错误接点信号(注)。	PUMP OFF BY EXTERNAL ERROR	从外部接点模块里接受到错误信号，泵的送液被强制性停止时显示。
1110 泵 A/B 发生了通信错误。请退出 Primaide，并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

(2) 1210 自动进样器

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置连接错误	THERMO UNIT IS NOT CONNECTED	虽然已指定自动进样器连接了冷却装置, 但是硬件呈未连接状态时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置连接时的通信错误	THERMO UNIT TIME OUT ERROR	虽然已指定自动进样器连接了冷却装置, 但初始化时发生了通信错误时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出错误: ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出错误: RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 对 RAM 进行检测, 如有异常时(RAM 不良)显示。
在 1210 自动进样器的自我诊断中查出异常: 参数错误 1210 自动进样器的参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断中查出异常: 日志信息错误。 1210 自动进样器的维护日志已被初始化。	LOG INFORMATION ERROR	保存的 LOG 信息存储空间不良(损坏)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断中查出异常: EEPROM 错误。 1210 自动进样器的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的仪器参数存储空间不良(损坏)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 漏液错误	STOPPED BY LEAKAGE	溶剂托盘里发现漏液。漏液传感器检测出泄漏现象时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 样品架操作错误	ERROR-X	机械错误。初始化时, 或操作时样品架位置动作确认发生异常时显示。其次, 由于执行返回初始位置功能命令时, 进行同样的操作, 也有可能发生错误。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 臂操作失败	ERROR-Y	机械错误。初始化时, 或操作时样品架位置动作确认发生异常时显示。其次, 由于执行返回初始位置功能命令时, 进行同样的操作, 也有可能发生错误。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 注射针操作错误	ERROR-Z	机械错误。初始化时, 或操作时样品架位置动作确认发生异常时显示。其次, 由于执行返回初始位置功能命令时, 进行同样的操作, 也有可能发生错误。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 注射器错误。	ERROR-SYRINGE	机械错误。初始化时, 或操作时注射器位置动作确认发生异常时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 注射器阀错误	ERROR-SVALVE	机械错误。初始化时, 或操作时注射器阀位置动作确认发生异常时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 进样阀错误	ERROR-IVALVE	机械错误。初始化时, 或操作时进样阀位置动作确认发生异常时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 进样同步信号检测错误	INJ TIMING ERROR	在方法文件中设定了[与泵同步], 进样时等待由泵发出的进样开始信号超过一定时间(65s)仍不传出时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 样品瓶检测错误	NO TUBE	发生进样动作, 但是检测不出指定的样品瓶时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 样品瓶编号错误	CHECK VIAL NO.	测定开始后, 设置的样品瓶 No. 超出指定的样品架参数的最大样品瓶数时显示。

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 注射器总容量错误	CHECK TOTAL VOL	进样量超出注射器总容量时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 注射器速度错误	CHECK SYRINGE SPEED	注射器发生动作时, 设定的速度超过装置的注射器上限值时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 清洗速度错误	CHECK WASH SPEED	注射器发生动作时, 设定的速度超过装置的注射器上限值时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 外部连接模块的 BUSY 错误	SYSTEM_BUSY:CHECK OTHER MODULE STATUS	测定开始时, 连接的其它模块处于 BUSY 时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置控制错误	START KEY IS NOT ACCEPTABLE THERMO UNIT IS NOT CONTROLLED	冷却装置温度异常错误, 冷却装置电源错误, 冷却装置回答错误, 冷却装置确认连接错误后, 已回复到 Idle 状态, 而又发送了 START 命令时显示。不重新开启电源无法执行开始命令。
从模块接收到错误接点信号(注)。	STOPPED BY EXTERNAL ERROR	从外部的连接模块里接收到错误信号, 强制性停止动作时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出错误: 冷却装置 ROM 错误	THERMO UNIT ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 冷却装置的程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出错误: 冷却装置 RAM 错误	THERMO UNIT RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 对冷却装置的 RAM 进行检测, 如有异常时(RAM 不良)显示。
在 1210 自动进样器的自我诊断中查出异常: 冷却装置参数错误。冷却装置的参数与仪器信息已被初始化。	THERMO UNIT PARAMETER ERROR	保存的冷却装置的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置连接时, 电源没被接通	THERMO UNIT POWER ON ERROR	初始化时冷却装置设为[使用], 但是冷却装置的电源却处于关闭状态时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置通信错误	THERMO UNIT POWER ON ERROR	测定中因某种原因导致冷却装置的电源不供电时显示。
1210 自动进样器检的自我诊断查出异常: 冷却装置通信错误	THERMO UNIT TIME OUT ERROR	与冷却装置间的通信, 3s 内没有回应时显示。
1210 自动进样器的自我诊断查出异常: 冷却装置温度的异常: %.1f 摄氏度。	ABNORMAL TEMPERATURE (THERMO UNIT):** °C	超过了冷却装置的温度上限(55°C)或下限(-10°C)时, 与测定时的实际温度同时显示。**: 温度发生错误。
1210 自动进样器发生了通信错误。请退出 Primaide, 并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

(3) 1310 柱温箱

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
1310 柱温箱的自我诊断查出错误: ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1310 柱温箱的自我诊断查出错误: RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 对 RAM 进行检测, 有异常(RAM 不良)时显示。
在 1310 柱温箱的自我诊断中查出异常: 参数错误。1310 柱温箱的参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
在 1310 柱温箱的自我诊断中查出异常: 日志信息错误。1310 柱温箱的维护日志已被初始化。	LOG INFORMATION ERROR	保存的 LOG 信息存储空间不良(损坏)时显示。
在 1310 柱温箱的自我诊断中查出异常: EEPROM 错误。1310 柱温箱的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 漏液错误(GAS)	TEMP CONTROL OFF BY LEAKAGE (GAS)	柱温箱内挥发性有机溶剂的浓度超过了一定的浓度(气体传感器值)的情况下显示。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 漏液错误(LIQUID)	TEMP CONTROL OFF BY LEAKAGE (LIQUID)	柱温箱里发生漏液。漏液传感器检测出泄漏现象时显示。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 温度信息数据缓冲溢出	DATA BUFFER OVERFLOW	柱温箱有单独保存温度信息的存储缓冲区。因通信错误, PC 不对柱温箱输出温度值时显示。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 温度上限范围错误: %.1f 摄氏度	OVER MAX TEMPERATURE LIMIT:** °C	温度超过了在温度上限范围内设定的温度上限值时显示。温度调节呈关闭状态。**: 发生错误时的温度。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 温度下限异常(OVEN): %.1f 摄氏度	ABNORMAL TEMPERATURE (OVEN) : ** °C	温度低于柱温箱温度的下限值-10°C时显示。温度调节呈关闭状态。**: 发生错误时的温度。
1310 柱温箱的自我诊断查出异常: 温度上限错误(OVEN): %.1f 摄氏度	ABNORMAL TEMPERATURE (OVEN) : ** °C	温度高于柱温箱温度的上限值 90°C时显示。温度调节呈关闭状态。**: 发生错误时的温度。
1310 柱温箱检查出异常: 温度下限异常(PELTIER): %.1f 摄氏度	ABNORMAL TEMPERATURE (PELTIER) : ** °C	温度低于帕尔帖温度的下限值-10°C时显示。温度调节呈关闭状态。**: 发生错误时的温度。
1310 柱温箱检查出异常: 温度上限错误(PELTIER): %.1f 摄氏度	ABNORMAL TEMPERATURE (PELTIER) : ** °C	超过了帕尔帖温度的上限值 90°C时显示。温度调节呈关闭状态。**: 发生错误时的温度。
从模块接到错误接点信号(注)。	TEMP CONTROL OFF BY EXTERNAL ERROR	从外部连接模块里接到错误信号, 温度控制被强制性停止时显示。
1310 柱温箱发生了通信错误。请退出 Primaide, 并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

(4) 1410 UV 检测器

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：波长原点错误	WL DRIVE MECHANISM ERROR	初始化(自我诊断)时,没有成功检测出波长原点时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：ADC 初始化错误	ADC INITIALIZE ERROR	初始化(自我诊断)时,ADC 没有正常初始化时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：ADC 错误	ADC ERROR	连接 CDS 时,ADC 数据转送停止时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：DAC 错误	DAC ERROR	DAC(信号输出选项)数据转送停止时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出错误：ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时,程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出错误：RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时,对 RAM 进行检测,如有异常时(RAM 不良)显示。
在 1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断中查出异常：参数错误。1410 UV 检测器 Ch1/2 的参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
在 1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断中查出异常：日志信息错误。1410 UV 检测器 Ch1/2 的维护日志已被初始化。	LOG INFORMATION ERROR	保存的 LOG 信息存储空间不良(损坏)时显示。
在 1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断中查出异常：EEPROM 错误。1410 UV 检测器 Ch1/2 的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的仪器参数存储空间不良(损坏)时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：漏液错误	LAMP OFF BY LEAKAGE	溶剂托盘里发生漏液。漏液传感器检测出泄漏现象时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：数据缓冲溢出	DATA BUFFER OVERFLOW	在数据采集中无法数据向 IFB 转送,数据缓冲溢出时显示此信息。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：自动调零超出范围	A/Z OVER RANGE	虽实行了自动调零,但是超出调零范围时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：波长校准错误	WL CALIBRATION ERROR	在初始化(自我诊断)的波长校正时,不能检测出 656nm 辉线时显示此信息。
1410 UV 检测器 Ch1/2 的自我诊断查出异常：D2 灯错误	D2 LAMP ERROR	启动时或熄灯后,要点亮 D ₂ 灯却不能点亮。要熄灯时却不能熄灭时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 检测出异常：Hg 灯错误	Hg LAMP ERROR	启动时或熄灯后,要点亮 Hg 灯却不能点亮。要熄灯时却不能熄灭时显示。
以关灯接点输入的方式关闭此灯。	LAMP OFF BY EXTERNAL INPUT	在 LAMP OFF IN 端子,输入熄灯信号时显示(故意熄灯)。
从模块接收到错误接点信号。(注)	LAMP OFF BY EXTERNAL ERROR	从外部连接的模块接收到错误信号,强制性熄灯时显示。
1410 UV 检测器 Ch1/2 发生了通信错误。请退出 Primaide,并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

(5) USB-AID

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
USB-AID Ch1/2 中查出异常: ADC 错误	ADC ERROR	连接 CDS 时,从 ADC 转送来的数据中断时显示。
USB-AID Ch1/2 的自我诊断中查出异常: ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时,程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
USB-AID Ch1/2 的自我诊断中查出异常: RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时,对 RAM 进行检测,有异常时(RAM 不良)显示。
USB-AID Ch1/2 的自我诊断中查出异常: 参数错误。USB-AID Ch1/2 的参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
USB-AID Ch1/2 的自我诊断中查出异常: EEPROM 错误。USB-AID Ch1/2 的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的仪器参数存储空间不良(损坏)时显示。
USB-AID Ch1/2 中查出异常: 数据缓冲溢出	DATA BUFFER OVERFLOW	在数据采集中无法将数据向 IFB 转送,数据缓冲溢出时显示此信息。
USB-AID Ch1/2 中查出异常: ADC 校准错误	ADC CALIBRATION ERROR	执行自动校正时,没有成功对 ADC 进行校正时显示。
USB-AID Ch1/2 发生了通信错误。请退出 Primaide, 并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

(6) 1430 DAD

显示错误信息	模块显示的错误信息	原因
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出错误: ROM 错误	ROM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 程序的 SUM 值不正确(ROM 异常)时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出错误: RAM 错误	RAM ERROR	仪器启动(自我诊断)时, 对 RAM 进行检测, 有异常时(RAM 不良)显示。
在 1430 DAD Ch1 的自我诊断中查出异常: 参数错误: 参数错误。1430 DAD Ch1 的参数已被初始化。	PARAMETER ERROR	保存的方法参数存储空间不良(损坏)时显示。
在 1430 DAD Ch1 的自我诊断中查出异常: 日志信息错误。1430 DAD Ch1 的维护信息日志已被初始化。	LOG INFORMATION ERROR	保存的 LOG 信息存储空间不良(损坏)时显示。
在 1430 DAD Ch1 的自我诊断中查出异常: EEPROM 错误。1430 DAD Ch1 的仪器信息已被初始化。	EEPROM ERROR	保存的仪器参数存储空间不良(损坏)时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: 漏液错误	LAMP OFF BY LEAKAGE	溶剂托盘里发现漏液。漏液传感器检测出泄漏现象时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: D2 灯错误	D2 LAMP ERROR	启动时或熄灯后, 要点亮 D ₂ 灯却不能点亮。要熄灯时却不能熄灭时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: Hg 灯错误	Hg LAMP ERROR	启动时或熄灯后, 要点亮 Hg 灯却不能点亮。要熄灯时却不能熄灭时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: W 灯错误	W LAMP ERROR	启动时或熄灯后, 要点亮 W 灯却不能点亮。要熄灯时却不能熄灭时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: 风扇错误引起的关灯	LAMP OFF BY FAN ERROR	冷却风扇停止后, 为防止灯过热将灯熄灭时显示此信息。
从模块接到错误接点信号。	LAMP OFF BY EXTERNAL ERROR	在 LAMP OFF IN 里输入熄灯信号时显示(故意熄灯)。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: DSP 错误	DSP ERROR	DSP 运作不良时显示。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: 狭缝错误。1430 DAD 的灯能量异常地低。请确认流动池的光路。	SLIT ERROR	切换狭缝时, 而灯能量过于低的情况下显示。可能是由于流动池被污染、含有气泡, 或是狭缝运作不良造成的。
1430 DAD Ch1 的自我诊断查出异常: 挡板错误。1430 DAD 的灯能量异常地低。请确认流动池的光路。	SHUTTER ERROR	自动调零时灯能量过于低的情况下显示。可能是由于流动池被污染、含有气泡, 或是挡板运作不良造成的。
1430 DAD Ch1 发生了通信错误。请退出 Primaide, 并确认仪器的电源和电缆连接。	Communication Error	不能和仪器通信时显示。

术 语 表

	3D 数据:	是由信号值、保留时间、波长值构成的数据。采集数据时使用 DAD (Diode Array Detector) 检测器。通过数据处理, 可以提取任意波长与任意保留时间的色谱。
	3D 显示:	是 3D 数据显示方法的一种。信号值、保留时间、波长值呈立体显示。
A	AIA:	AIA 是美国分析仪器工业协会提倡的色谱数据通用格式。 在 Primaide 系统管理中作为标准功能使用。
	AID:	Analog Input Device 的略称, 是模拟信号采集专用的 PC 内置基板。
C	采集光谱:	利用检测器的光谱采集功能, 采集流通池内吸光度光谱与 D ₂ /W/Hg 的能量光谱。
	重叠显示:	将采集的色谱重叠的功能, 最多可以同时重叠显示 20 条色谱。
	初始化按钮:	是 Primaide 1000 系列与 Primaide 系统管理通信操作按钮, 设置于 HPLC “系统状态” 内。
	错误解除按钮:	Primaide 1000 系列与 Primaide 系统管理通信中或是发生错误时, 为解除错误而设置的按钮, 设置于 HPLC “系统状态” 内。
D	DDE:	DDE (Dynamic Data Exchange) 是两个软件之间连续地相互交换主要信息与数据的功能。
	等高线显示:	是 3D 数据显示方法的一种。用横轴表示保留时间; 纵轴表示波长; 信号强度则用颜色显示。
	冻结光谱:	从 3D 数据中以任意保留时间提取出的光谱。
E	e-Line 电缆:	Elite Line 的略称。是连接 Primaide 1000 系列用分析专用数字网络电缆。
F	方法画面模版:	指的是在主画面模版提取方法中设定的报告输出项目的画面模板。即在生成实际报告时使用的画面模版。方法画面模版作为文件保存在方法文件中。
	方法文件:	指的是包括仪器条件、数据处理参数等测定条件的文件。
	峰纯度:	指的是从 3D 数据中提取的色谱与“两侧光谱”(峰顶作为中心时)的相关值。从光学角度来看一个峰只代表一个成分是最理想的。值越大峰的纯度也就越高(最高值: 1.000)。
G	光谱冻结:	指的是从 3D 数据中提取指定保留时间的光谱。
	固定波长色谱:	是从 3D 数据中以任意波长提取出的色谱的一种。
I	IFB:	IFB 是与 Primaide 1000 系列通信用通信接口。
J	键锁定:	指的是模块的 UI 面板的键盘处于不可输入状态。该功能可以在 Primaide 系统管理的环境设定程序或 HPLC 模块状态窗口中设定。
	静止 / 激发:	静止功能指的是 Primaide 系统管理所控制的仪器(泵、检测器、柱温箱), 在连续分析结束后自动停止运行的功能。激发功能则指的是在指定时间(激发时间)自动开始进行测定准备(送液、点灯、加热)的功能。
K	快速分析的开始:	指的是在 Primaide 系统管理中只要输入方法文件、样品架名、标准曲线级别数与总 UNK 数后, 就可以立即开始分析。

L	离线:	Primaide 系统管理虽已启动, 但处于不可运行的状态。
M	忙状态:	指的是泵、检测器等仪器不能从 Primaide 系统管理接受到命令、或是处于不能运行的状态。
	模块详细信息窗口:	是设置 Primaide 1000 系列各个模块的详细状态以及控制功能的窗口。
	模块原参数设定窗口:	是设置 Primaide 1000 系列各个模块详细参数的窗口。
P	Primaide 1000 系列:	是 Primaide 1000 系列高速液相色谱仪的总称。
S	色谱提取:	从 3D 数据中提取指定波长的色谱。
	数据系列:	指的是测定数据(色谱数据)按测定(进样)顺序存储的目录。
W	维护日志(显示信息)按钮	通过点击该按钮可以确认或重置各个模块日志(部件的使用次数、更换日期等)内容。
X	信赖性报告:	是包括系统适应性测试结果、数据采集运行状态的确认(柱温箱温度变化、泵压力变化)以及数据诊断的报告。
Y	样品表:	是设定标准样品与未知样品进样序列的文件。设定内容包括样品瓶编号、进样量与样品表名等。
	应用程序	指的是储存方法文件、样品表文件、数据文件与报告文件的目录。
Z	在线:	表示 Primaide 系统管理处于运行状态。
	整合色谱:	指的是从 3D 数据中提取出的色谱的一种, 也就是把任意波长范围内的 3D 数据整合后提取的色谱。该色谱是减少噪音值后的色谱。
	主画面模版:	指的是生成方法画面模版的基础模板。主画面模版可以作为模版文件保存到报告画面编辑器中。
	准备状态:	指的是泵、检测器等仪器可以从 Primaide 系统管理接受到命令并处于可运行的状态。
	自动调零:	将检测器的吸光度调为零, 取消数据变动的功能。该功能在 Primaide 系统管理的模块详细信息中设定。
	最佳波长色谱:	指的是从 3D 数据中提取出的色谱的一种, 也就是将保留时间分段, 并改变波长后提取出的色谱。

索引

1

1110 泵状态显示	11-5
1210 自动进样器状态显示	11-11
1310 柱温箱状态显示	11-15
1410 UV 检测器状态显示	11-16
1430 DAD 状态显示	11-19

3

3D 立体图窗口	12-22
----------------	-------

B

帮助菜单	3-3
保存窗口原文件	8-21
保存对话框	3-17
保存方法文件	4-10
保存样品表	5-11
报告画面编辑器	10-1
报告生成概要	10-1
报告输出的应用	附2-3
报告项目的从属关系	10-34
报告显示窗口	7-13
报告显示窗口的构成	7-13
报告预览	3-9
报告预览窗口的功能与操作	9-1
变更色谱显示比例	6-8
变更数据采集样品表	5-10
变更图显示的方法	12-23
变更信号强度标度	12-24
变更已存的方法文件	4-9
变更已存样品表	5-5
变更 Y 轴标度	8-23
编辑菜单	4-3、5-3、8-3、8-14 10-6、12-3
编辑画面模板	10-13
标准曲线窗口	7-9
标准曲线窗口的构成	7-9
并排显示	8-19

C

菜单命令	10-6
采集数据	6-7
成分表/波形处理参数表	8-10
重叠显示	8-17
窗口菜单	7-3、12-8
窗口的构成	9-1、10-3
从属关系的概要	10-34

错误信息..... 附 6-1

D

打开报告预览窗口..... 9- 2
打开进样表窗口..... 7- 4
打开数据采集窗口..... 6- 7
“打开文件”对话框..... 3-10
“打开文件”对话框的构成..... 3-10
打印..... 8-21
打印窗口..... 3- 9
单分析的开始..... 6- 9
DDE 程序..... 附 1- 2
多重进样图谱的叠加..... 10-42
多重色谱显示选项..... 8-20
多重显示窗口的构成..... 8-13
多重显示设定菜单..... 8-16

F

方法文件窗口的功能与操作..... 4- 1
方法文件设置窗口的构成..... 4- 1
访问报告编辑画面..... 10-11
峰处理的手动积分..... 8-11
分解物报告..... 10-43
附属的在线 DDE 用程序的执行环境..... 附 1- 1

G

更改从属关系..... 10-35
更新数据采集中样品表..... 6-14
根据已存主画面生成..... 10-37
工具栏图标..... 3- 4
光谱的叠加显示..... 12-14
光谱列表的筛选处理..... 13- 5
光谱数据库窗口..... 13- 1
光谱数据库窗口的构成..... 13- 1
光谱数据库的管理..... 13- 4
光谱显示窗口..... 12-20

J

检索·登记光谱数据库..... 13- 9
进样表窗口的操作..... 7- 4
进样表窗口的功能与操作..... 7- 1
进样表窗口的构成..... 7- 1
进样表窗口—色谱图—..... 8- 1
进样表的操作..... 7- 6
聚束..... 14-17

K

开始.....	2- 1
开始快速分析.....	6-19
控制按钮功能.....	9- 2
扩大·缩小色谱显示.....	8-22
扩大·缩小图显示.....	12-23

L

连续分析的开始.....	6-10
连续分析未完成的数据系列的数据再处理.....	6-16
另存为对话框.....	3-18

M

模块的条件.....	4- 4
模块详细信息窗口的功能与操作.....	11- 1
模块详细信息窗口的控制命令.....	11- 3
模块详细信息窗口的状态显示.....	11- 1
模块状态显示.....	3- 7

N

逆向数据库检索.....	13-11
--------------	-------

P

Primaide 系统管理.....	1- 1
Primaide 系统管理的启动·关闭.....	2- 1
Primaide 系统管理的应用.....	附 2- 1

Q

其它数据处理参数.....	8-11、12-13
其它显示窗口.....	12-19
启动·关闭 Primaide 系统管理.....	2- 1
区域选择按钮.....	10- 8
确认峰纯度检测用光谱.....	12-17

S

S/N 值.....	14-30
色谱的多重显示.....	8-13
色谱显示窗口.....	12-19
色谱显示的变更方法.....	8-22
删除数据库中的光谱.....	13- 5
设定·修改峰纯度检测处理参数.....	12-18
设定·修改光谱的提取参数.....	12-14
设定·修改色谱的提取参数.....	12- 9
设定·修改数据处理参数.....	8-10
设定采样周期.....	附 4- 1

设定参数	6-19
设定从属关系	10-36
设定单一方法样品表	5-7
设定方法文件	3-5、4-10、4-11、附1-2
设定复数方法样品表	5-9
设定响应时间	附5-1
设定样品表	3-6、5-7
设定在线 DDE	附1-4
生成·保存样品表	5-5
生成方法画面模板	10-12
生成与保存方法画面模板	10-12
生成与保存方法文件	4-8
生成与修改标准曲线	7-11
生成主画面	10-37
使用“打开文件”对话框	3-12
使用光谱数据库	13-6
手动基线处理图标	8-9
数据采集菜单	6-3
数据采集窗口的操作	6-9
数据采集窗口的功能与操作	6-1
数据采集窗口的构成	6-1
数据采集中数据库的检索	13-13
数据处理菜单	8-3、12-4、13-2
数据处理设定菜单	4-5
数据库菜单	12-6、13-8
数据显示菜单	6-6
数据再处理窗口—3D 数据—	12-1
数据再处理窗口的构成	8-1、12-1

T

特殊处理结果的报告	10-42
提取色谱图的数据再处理	12-13

U

USB-AID 状态显示	11-22
--------------	-------

W

文件菜单	3-2、4-2、5-2、6-2、7-2 8-2、10-6、12-2
------	--------------------------------------

X

显示菜单	12-7
显示任意波长色谱	12-9
显示任意时间的光谱	12-14
新建对话框	3-10
新建方法文件	4-8
新建样品表	5-5
新建主画面文件	10-40
修改光谱数据库内光谱信息	13-4
选项菜单	4-6、7-3、8-7、8-14

	10- 7、13- 3
选择应用程序.....	3- 5

Y

样品表编辑窗口.....	5-16
样品表窗口.....	5-12
样品表窗口的功能与操作.....	5- 1
样品表的设定菜单.....	5- 4
样品表设定窗口的构成.....	5- 1
样品表生成条件的设定窗口.....	5-12
样品表中指定行的数据采集.....	6-15
移动波长光标与时间光标.....	12-24
移动色谱.....	8-23、12-24
移动时间光标.....	8-23
仪器条件设定窗口.....	4-11

Z

再计算处理.....	7-15
在内标法中的应用.....	附 2- 1
载入主画面.....	10-12
在线 DDE 处理结果例.....	附 1- 5
在线 DDE 的功能与操作.....	附 1- 1
在线数据处理.....	6-17
噪音测试.....	6-13
指定背景光谱.....	12-15
指定固定波长色谱.....	12-10
指定整合色谱.....	12-11
指定最佳色谱.....	12-11
执行峰纯度检测.....	12-16
执行数据采集.....	3- 6
执行数据再处理.....	3- 6
执行再计算.....	7-16
状态显示.....	11- 5
主窗口的功能与操作.....	3- 1
主画面文件内容.....	10-42
主要功能.....	1- 2