



Agilent MicroLab 软件

操作手册

# 声明

## 手册部件号

0020-410

第 11 版，2024 年 10 月

## 版权

© Agilent Technologies, Inc. 2024

根据美国和国际版权法，未经 Agilent Technologies, Inc. 事先许可和书面同意，不得以任何形式或通过任何方法（包括电子存储和检索以及翻译成其他语言）复制本手册的任何部分。

Agilent Technologies Australia [M] Pty Ltd

679 Springvale Road

Mulgrave, Victoria 3170, Australia

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

## 软件版本

本指南适用于 Agilent MicroLab 5.7 或更高版本，直至被取代。

## 担保说明

本文档所含资料“按原样”提供，在以后的版本中若有更改，恕不另行通知。此外，在适用的法律所允许的最大范围内，Agilent 对与此手册相关的内容及其中所含的信息不作任何明示或默示的保证，包括但不限于为特定目的适用性和适用性所作的默示保证。Agilent 对提供、使用或应用本文档及其包含的任何信息所引起的错误或偶发或必然损坏概不负责。如果 Agilent 与用户之间单独签定的书面协议中所含的保证条款与本文档中的条款冲突，则应以单独协议中的保证条款为准。

## 技术许可

本文档中所述的硬件和/或软件是依据许可提供的，且只能根据此类许可的条款进行使用或复制。

## 权力限制说明

如果软件在美国政府的项目主合同和转包合同中使用，则所交付并许可使用的软件是 DFAR 252.227-7014（1995 年 6 月）中定义的“商用计算机软件”，或 FAR 2.101(a) 中定义的“商用品”，或 FAR 52.227-19（1987 年 6 月）或任何同等机构法规或合同条款中定义的“限制性计算机软件”。本软件的使用、复制或公布受 Agilent Technologies 标准商用许可条款的限制，非国防部 (DOD) 机构和美国政府机构所受限制以 FAR 52.227-19(c)(1-2)（1987 年 6 月）中定义的“限制性权利”为准。美国政府用户所受限制以 FAR 52.227-14（1987 年 6 月）或 DFAR 252.227-7015 (b)(2)（1995 年 11 月）中定义的“限制性权利”为准，该条款适用于任何技术数据。

## 安全声明

### 小心

小心声明表示存在危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。除非已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视小心声明而继续进行操作。

# 目录

1	简介	9
	支持的仪器	10
2	MicroLab Mobile	11
	将 PDA 连接到仪器以进行蓝牙通信	11
	首次登录	12
	4300 手持式 FTIR 的软件 IQ	13
	管理用户	14
	添加	15
	角色定义	15
	常用图标	16
	主页面屏幕	16
	状态	16
	开始	17
	方法	17
	参考方法	17
	注销	17
	锁定	17
	菜单	17
	方法屏幕	18
	方法列表	19

## 简介

激活	19
编辑	19
3 MicroLab PC	21
主页面屏幕	21
状态	21
开始	22
方法	22
参考方法	22
注销和退出	22
锁定	22
前一结果	22
高级功能	22
方法	23
主页	23
新建方法/编辑现有方法	23
高级功能	33
系统检查	33
诊断	33
MAC 地址	33
库管理	33
用户管理	35
多元方法从 GRAMS PLS/IQ 传输到 MicroLab PC	36
将 PLS/IQ *.cal 文件导出到 ASCII	36
生成方法文件	36
MicroLab 定量模型从 MicroLab Expert 转移到 MicroLab PC	38

## 简介

使用样品扫描前准直检查	39
将已编辑的方法传输到 MicroLab Mobile	40
使用 MicroLab Lite 同步	40
通过“我的电脑”复制	41
在启用了 21 CFR Part 11 的环境中移动文件	41
系统检查	42
<b>4 MicroLab Quant</b>	<b>43</b>
主页面屏幕	43
注销	44
锁定	44
启动新模型	44
导入模型	48
21 CFR Part 11 功能	49
21 CFR Part 11	49
电子签名	49
<b>5 MicroLab OQ</b>	<b>51</b>
操作认证 (OQ)	51
操作系统的诊断验证	51
性能验证	52
执行 OQ	52
OQ 报告	53

## 简介

<b>6</b>	<b>符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab</b>	<b>55</b>
	SCM	55
	SDA	56
	MicroLab 中的 21 CFR Part 11 软件组件	56
	锁定	56
	电子签名	57
	更改原因	58
	21 CFR Part 11	58
<b>7</b>	<b>测量样品</b>	<b>61</b>
	清洁样品接口	61
	采集背景光谱	61
	采集样品光谱	62
<b>8</b>	<b>检查结果</b>	<b>65</b>
	MicroLab Mobile	65
	结果屏幕	65
	处理数据	65
	前一结果	67
	MicroLab PC/MicroLab Lite	67
	结果屏幕	68
	将光谱导入 GRAMS	74
	MicroLab 报告创建	75
	将报告模板分配到方法	75
	创建新的报告模板	75

简介	
9 更新和故障排除	79
固件更新	79
故障排除	79
初始化失败	79
报告模板创建失败	79
增益值更改未保存	80
数据库访问问题	80
Appendix A: MicroLab 文件类型	81

## 简介

本页空白。

# 1

## 简介

支持的仪器

10

Agilent MicroLab 软件套件是为运行 Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan、4300 手持式 FTIR、4500 系列、5500 系列和 Cary 630 FTIR 光谱仪专门设计的。此软件可通过两种不同的软件包提供：

MicroLab FTIR 软件和 MicroLab Mobile 软件。

MicroLab FTIR 软件包中包含以下四个模块：

- MicroLab PC – 连接并控制仪器
- MicroLab Quant – 适用于定量方法开发
- MicroLab OQ – 适用于操作认证
- MicroLab Lite – 数据查看和方法开发

MicroLab Mobile 软件包中包含以下内容：

- MicroLab Mobile
- MicroLab FTIR 软件包

### 注意

MicroLab Mobile 软件包仅适用于 4300 手持式 FTIR 以及之前随附有手持式 PC (PDA) 的仪器：Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan 和 4500 系列。

安捷伦将不再为这些仪器附带 PDA。

可选的 MicroLab Pharma 软件包（部件号：G4984-64000）和 MicroLab Pharma 升级软件包（部件号：G4985-64000）拥有内置技术控制功能，可确保数据安全并控制访问权限，帮助您遵循 US FDA 21 CFR Part 11、欧盟附录 11 及类似的国家电子记录法规的要求。

本档中，凡提及 21 CFR Part 11 软件、环境、功能等，是指使用 MicroLab Pharma 软件的任何数据可靠性环境/组件。

这些 MicroLab 软件包提供相同的功能和结构，但也有如下差别：

- 不能在 MicroLab Mobile 软件上编辑方法
- 不能在 MicroLab Lite 软件上采集数据
- 必须连接仪器才能在 PC 上运行 MicroLab PC 和 MicroLab Mobile 软件

软件设计为既适合高级用户使用，又适合新手用户使用，其菜单提示的界面和说明可帮助用户完成分析。

软件包含用户登录名；每个用户都有管理员分配的已定义“角色”。管理员可以使用这些角色来限定较低级别用户可使用的方法和操作。

## 简介

## 支持的仪器

该软件版本适用于 Agilent Cary 630、4100 ExoScan、4200 FlexScan、4300 手持式、4500 便携式和 5500 紧凑型 FTIR 仪器。

## 2 MicroLab Mobile

将 PDA 连接到仪器以进行蓝牙通信	11
首次登录	12
4300 手持式 FTIR 的软件 IQ	13
管理用户	14
常用图标	16
主页面屏幕	16
方法屏幕	18

如要安装或升级软件，请参阅软件随附的 MicroLab 软件安装说明。

### 注意

MicroLab Mobile 软件包仅适用于 4300 手持式 FTIR 以及之前随附有 PDA 的仪器：  
Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan 和 4500 系列。

## 将 PDA 连接到仪器以进行蓝牙通信

### 注意

本节仅适用于 Agilent 4100 ExoScan、4200 FlexScan 和 4500 FTIR 系列仪器。

- 1 要配置仪器和 PDA 之间的蓝牙连接，单击主页中的“Bluetooth”（蓝牙）图标。如果启用了“flight mode”（飞行模式），则禁用它。单击“Bluetooth”（蓝牙）栏以打开蓝牙通信（如果它未处于“ON”（打开）模式）。
- 2 从“Menu”（菜单）上，选择 **Bluetooth Settings**（蓝牙设置）。
- 3 在“Devices”（设备）选项卡上删除所有设备。用手写笔选择设备，按住，直到菜单出现。然后单击 **Delete**（删除）。
- 4 清除设备后，单击 **Add a New Device**（添加新设备）。等待启用了蓝牙的设备列表出现，并选择相应的设备。单击屏幕底部的 **Next**（下一步）。
- 5 与手持式设备的连接需要一个通用密码。所需的密码是 **7890**。输入此值，并选择 **Next**（下一步）。系统随后会测试与便携 FTIR 设备的连接，并添加该设备。

## MicroLab Mobile

- 6 添加该设备后，选择 **Advanced**（高级）并确保选中了“Serial Port configuration”（串行端口配置）框。该框默认为未选中，必须启用它，设备才能正常工作。单击 **Save**（保存）。
  - “Advanced”（高级）选项仅在连接之后出现。如果它消失并返回到“Device”（设备）选项卡，请通过手写笔单击设备，选中刚连接的设备。这会转至上面的“Advanced”（高级）部分，以便进行串行端口通信设置。
- 7 设置串行端口后，选择“Bluetooth settings”（蓝牙设置）屏幕底部的 **COM Ports**（COM 端口）选项卡。
- 8 选择 **New Outgoing Port**（新建传出端口）。选择刚添加到“Bluetooth”（蓝牙）通信配置的设备，并单击“Next”（下一步）。
- 9 适用于 MicroLab Mobile 版本 4.0 及更高版本的默认 COM 端口是 COM 1。将“COM Port”（COM 端口）设置为 COM 1，并取消选中 **Secure Connection**（安全连接）框。执行该操作后，选择屏幕底部的“Finish”（完成）。
  - 如果选定的 COM 端口有通信问题，PDA 将通过错误消息进行提醒。通过便携/手持式设备的通信文件，可以更改通信的 COM 端口默认值。如果更改 COM 端口设置需要其他安装说明，请与 Agilent 支持人员联系。
- 10 这会转回至初始“Bluetooth setting”（蓝牙设置）的配置屏幕。单击右上角的 **OK**（确定），并关闭任何打开的程序，直到返回到主页面屏幕。
- 11 选择“开始”菜单，MicroLab Mobile 应该显示为所选内容。

## 首次登录

### 首次登录到 MicroLab Mobile：

- 1 Agilent 4100 ExoScan FTIR 和 Agilent 4500 系列 FTIR 系统随附的手持式和嵌入式 PC 的“开始”菜单中有指向已安装的 MicroLab Mobile 软件的快捷方式。要启动该软件，请单击**开始**，然后单击 **MicroLab Mobile** 图标。通过浏览到 My Device\Program Files\MicroLab Mobile 并单击 **MicroLabMobileEX.exe** 图标，或者从“开始”菜单选择“程序”并选择相应的图标，也可以启动该软件。

Agilent 4300 手持式 FTIR 附带了嵌入式计算机中预装的 MicroLab Mobile。如果启用了 4300 手持式 FTIR，则 MicroLab Mobile 会自动启动。
- 2 该软件会启动，并显示一条消息，指出需要初始同步。这种同步会将在 SCM（适用于启用了 21 CFR Part 11 的软件）中创建的配置文件以及 Public Mobile Methods 文件夹中的所有方法上传到 PDA 或嵌入式计算机。有关在 21 CFR Part 11 环境中移动文件的信息，请参阅第 41 页。
- 3 在 PC 上打开 MicroLab Lite 并登录。

## MicroLab Mobile

- 要连接 PDA，请确保 PC 已安装 Windows Mobile Device Center。从 MicroLab 软件安装光盘安装应用程序。
- 4 将通信电缆从 PDA 或嵌入式计算机连接到 PC。
  - 5 如果没有自动触发同步，则单击 **Advanced Features**（高级功能），然后单击 **Synchronize**（同步）。
  - 6 单击 **New**（新建）。
  - 7 单击 **Get Connected Device Name**（获取连接设备的名称）。该设备名称将出现在字段中。
  - 8 单击 **Browse**（浏览），然后导航到 Public Mobile Results 文件夹。采集的所有数据将保存到该文件夹。
  - 9 单击 **OK**（确定）。
  - 10 单击 **Sync**（同步），然后在所显示消息中单击 **Yes**（是）以开始同步。
  - 11 同步完成后，单击 **OK**（确定）。
  - 12 在 PDA 或嵌入式计算机上，重新启动 MicroLab Mobile，然后在显示“Security”（安全）屏幕时登录。要使用的登录凭据就是使用 MicroLab Lite 或 MicroLab PC 创建的登录凭据。然后，系统应显示“Home”（主页面）屏幕。

**对于 21 CFR Part 11 环境：**使用具有 MicroLab Mobile 权限的配置文件登录。为在 SCM 中创建的配置文件输入相应的用户名。“Groups”（组）和“Projects”（项目）字段将自动填充。输入密码，然后单击 **Login**（登录）。

### 注意

用户名和密码区分大小写。

如果使用 MicroLab Mobile 21 CFR Part 11，密码只能是字母数字。请勿使用诸如 \$、@ 等特殊字符。

建议登录到 MicroLab Mobile 或 MicroLab Lite，但是当手持式设备连接到 PC 时不要使用同一个配置文件同时登录这两个软件。

## 4300 手持式 FTIR 的软件 IQ

### 注意

本节仅适用于 Agilent 4300 手持式 FTIR。

MicroLab Mobile 在仪器机载计算机中内置有 IQ/OQ 功能。执行软件安装认证 (IQ) 测试，以确保所有相关文件都已安装。

## MicroLab Mobile

### 运行 IQOQ:

- 1 在“Login”（登录）屏幕上，单击 **Exit**（退出）以关闭 MicroLab Mobile。
- 2 出现“Exit Confirmation”（退出确认）对话框时，单击 **OK**（确定）。
- 3 屏幕将进入“中间”模式，显示两个图标。顶部图标是 MicroLab Mobile，底部图标代表软件 IQ/OQ。
- 4 选择底部图标以运行 IQ/OQ。
- 5 出现“Login”（登录）屏幕。输入用户名和密码进行登录。
- 6 单击右下角的 **Next**（下一步）箭头按钮，以执行 IQ – 软件测试。
- 7 出现结果页面。确保安装认证“PASS”（通过）。
- 8 单击 **Next**（下一步）箭头按钮，生成 IQ 报告。
- 9 单击 **Exit**（退出），返回“中间”模式。

## 管理用户

管理员可以使用“Advanced Features”（高级功能）选项管理授权用户，并更改 MicroLab 系统功能。系统安装有多个用户级别：管理员、开发人员、技术人员、电子签名者和服务人员。可以随时添加其他用户。如果多个操作员将使用系统，建议在初次启动时使用所需的用户和密码设置系统。

### 注意

只有具有管理员权限的用户才能访问“User Management”（用户管理）。

启用 21 CFR Part 11 环境后，此功能不可用。所有用户管理功能都在 Spectroscopy Configuration Manager (SCM) 软件中执行。有关详细信息，请参阅随该软件提供的《SCM 用户指南》。

## MicroLab Mobile

添加

向系统添加用户：

- 1 在 MicroLab Mobile“Home”（主页面）屏幕上点击“Advanced Features”（高级功能）按钮。
- 2 单击 **User Management**（用户管理）。
- 3 单击 **Add New User**（添加新用户）。
- 4 在文本框中输入个性化的用户 ID。
- 5 输入用户的完整名称。
- 6 输入新密码。
- 7 标识新用户的角色（Admin（管理员）、Service（服务）、Developer（开发人员）和 Technician（技术人员））。
- 8 单击 **Apply Changes**（应用更改）。
- 9 将显示一个窗口，通知您将从系统注销。在应用了所做的更改后，系统将强制您再次登录。

注意

系统将会自动注销用户。新的用户 ID 将显示在登录屏幕的“User Name”（用户名）下拉菜单中。

---

角色定义

**服务：**Service（服务）角色提供对方法中所有仪器参数的访问权限，包括适用于该方法的采样技术。

**管理员：**Admin（管理员）角色是为负责对 MicroLab 软件进行持续维护和更改的人员而保留的，其权限包括编辑方法、创建新方法、定义公共方法、进行仪器验证以及控制用户访问权限。

**开发人员：**Developer（开发人员）角色不但可以编辑和运行方法，而且允许访问系统性能验证。然而，此角色没有访问“用户管理”功能或系统诊断的权限。

**技术人员：**Technician（技术人员）角色适用于系统的标准用户。技术人员只有运行由管理员定义为公共方法的方法的权限。此外，技术人员不能检查数据、进行系统验证或修改方法。

**电子签名：**指定用于允许用户在数据采集和数据审查的各个级别对方法和结果进行电子签名。此级别通常仅在 MicroLab 软件的 21 CFR Part 11 版本中使用。

注意

只有 Admin（管理员）和 Developer（开发人员）角色有权访问高级功能。

---

## MicroLab Mobile

### 用户管理屏幕

**添加新用户：**向系统添加用户。必须指定用户名、密码和访问权限级别。还需要输入全名。

**删除用户：**从 MicroLab Mobile 系统永久删除用户的配置文件。

**重置密码：**允许管理员更改当前选定用户的密码。

**重置安全：**删除所有自定义的用户，并重置三个预定义的用户（Service（服务）、Admin（管理员）和 User（用户））。如果使用“Disable Security”（禁用安全）选项禁用了安全，该选项还将重置安全。

**禁用安全：**移除所有安全功能。禁用安全后，不需要任何密码，所有用户都具有管理员权限。通过点击“Reset Security”（重置安全）按钮并输入初始 Admin（管理员）账户信息，可以恢复安全。

## 常用图标

软件中将会显示下列图标：

**主页面：**将软件返回到初始的“Home”（主页面）屏幕。

**菜单：**显示菜单选项。

**下一步：**让软件进入数据采集过程中的下一步。

## 主页面屏幕

“Home”（主页面）屏幕是登录后在 MicroLab 中显示的第一个屏幕。在“Home”（主页面）屏幕中，可以启动方法、测量参考样品、打开“Method Selection”（方法选择）对话框、打开“Previous Results”（前一结果）对话框或打开“Advanced Features”（高级功能）对话框。应在“Home”（主页面）屏幕上更改采样模块或接口。所有操作过程都在“Home”（主页面）屏幕上开始和结束。

### 状态

在屏幕的右上角显示一个小圆圈。该圆圈会显示不同颜色，指示连接到 MicroLab 软件的仪器的状态。如果系统在出厂时定义的范围参数内工作，则圆圈为绿色。红色或黄色灯表示参数超出规格。如果无法解除红色或黄色灯状况，请联系 Agilent

## MicroLab Mobile

以获得帮助。用于确定系统就绪状态的所有参数列在“Advanced Features”（高级功能）>“Diagnostics”（诊断）下。超出限值范围的参数将在“Diagnostics”（诊断）屏幕上以红色列出。

就绪灯上方是电池指示器。电池指示器显示仪器电池剩余的电量。运行手持式 PC 的电池的电量不在 MicroLab 软件中显示。

### 开始

“Start”（开始）按钮将使用当前选定的方法开始样品测量。当前选定的方法显示在“Home”（主页面）屏幕的左上角。

### 方法

“Method”（方法）按钮可打开“Method Selection”（方法选择）对话框。没有管理员权限的用户只能选择由管理员指定为“公共”的方法。请参见下面的方法选择说明。

### 参考方法

使用“Reference Method”（参考方法）按钮可采集成份方法的参考样品。某些成份方法将浓度显示为百分比增大或减小。对于这些计算，需要使用规格样品中的参考来计算这些起始值。此外，参考方法还会保存规格（新）材料的光谱以便在将来进行可视性比较。

### 注销

“Log Off”（注销）按钮可使当前用户退出，使 MicroLab Mobile 软件返回到“Login”（登录）屏幕。在此屏幕上，点击“Exit”（退出）按钮可关闭软件。

### 锁定

此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。用于锁定软件，以便在无人看管时控制访问。有关详细信息，请参阅第 55 页的“MicroLab 21 CFR Part 11”部分。

### 菜单

菜单包含：

- 前一结果
- 高级功能

## MicroLab Mobile

### 前一结果

查看以前采集的数据。只有 Service（服务）、Admin（管理员）和 Developer（开发人员）角色才有权限查看前一结果。

### 21 CFR Part 11

在打开结果文件的情况下，单击“21 CFR Part 11”按钮将显示审计跟踪以及创建或编辑模型时所执行操作的列表。

有关此功能的详细信息，请参阅第 55 页的“MicroLab 21 CFR Part 11”部分。

### 高级功能

对于 Admin（管理员）、Service（服务）和 Developer（开发人员）角色，使用“Advanced Features”（高级功能）屏幕可访问“Diagnostics”（诊断）、“System Check”（系统检查）、“User Management”（用户管理）和“Library Management”（库管理）。

系统检查包括以下仪器测试：性能（信噪比）、稳定性测试、激光频率校准检查和光谱分辨率检查。有关诊断和系统检查的更多信息，请参见相应的仪器操作手册。

### 采样接口

利用“Advanced Features”（高级功能）屏幕，用户可以访问用于 4100 ExoScan FTIR 系统的“Sampling Interface”（采样接口）选择。这对于直接绑定到采样接口的方法以及将性能指标链接到采样设备的方法很重要。必须选择合适的采样接口，以使这两种方法中的任一种方法都能正常工作。

## 方法屏幕

方法可定义 MicroLab 软件中的仪器采集参数和数据分析。可将方法定义为仅采集数据，采集数据并将已采集的数据和预定义的库进行比较，或采集数据并对这些数据进行定量分析或峰分析。对于 Agilent 4500t/5500t 和 Cary 630 FTIR 光谱仪，三个预定义的方法类型包括：(1) 数据采集；(2) 定性（谱库）搜索；(3) 成份（定量或峰分析）方法。有关预定义方法规格的问题和其他信息，请联系 Agilent。

MicroLab Mobile 仅允许选择预定义的方法。必须在运行 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 软件的单独计算机上对这些方法进行编辑。为了能够在“Method”（方法）对话框中查看方法，应该将使用 PC 和 Lite 版本的软件开发的方法传输到手持式或嵌入式控制器的以下目录中：@\\Program Files\\MicroLab Mobile\\Methods。

在 21 CFR Part 11 环境中，将在同步期间进行方法传输。

## MicroLab Mobile

### 方法列表

显示为 MicroLab PC 应用程序软件创建的方法的列表。要上下移动方法列表，只需用手写笔点击列表并在屏幕上拖动列表。

#### 注意

系统管理员可限制方法的可访问性。系统管理员必须选中屏幕左边缘的复选框；这样使所有技术人员级别用户能够对方法进行操作。对于具有 Technician（技术人员）角色的用户，此屏幕仅显示以前由系统管理员启用的方法。

---

### 激活

“Activate”（激活）按钮可选择突出显示的方法并关闭屏幕。软件将返回到“Home”（主页面）屏幕。检查以确保激活了正确的方法。如果显示不正确的方法，可返回到“Methods”（方法）屏幕并选择另一方法。为此，可点击“Select Methods”（选择方法）按钮，突出显示所需的方法并点击“Activate”（激活）。

### 编辑

MicroLab Mobile 软件不提供方法编辑功能。要编辑方法，必须使用在另一台计算机上安装的 MicroLab Lite 软件。确定方法后，可将其传输到手持式或嵌入式 PC，以与 MicroLab Mobile 结合使用。

#### 注意

对于带有 PDA 的仪器，应将 MicroLab Lite 软件安装在包含 Windows Mobile Device Center 的计算机上，以便轻松地转移方法和数据。可以通过 MicroLab 软件安装光盘安装 Windows Mobile Device Center。

---

本页空白。

## 3 MicroLab PC

主页面屏幕	21
方法	23
MicroLab 定量模型从 MicroLab Expert 转移到 MicroLab PC	38
使用样品扫描前准直检查	39
将已编辑的方法传输到 MicroLab Mobile	40
系统检查	42

### 主页面屏幕

“Home”（主页面）屏幕是登录后在 MicroLab PC 中显示的第一个屏幕。所有操作过程都在“Home”（主页面）屏幕上开始和结束。

可以在“Home”（主页面）屏幕上选择以下选项：

- Start（开始）
- Methods（方法）
- Reference Templates（参考模板）
- Logoff（注销）
- Previous Results（前一结果）
- Advanced Features（高级功能）

#### 状态

在屏幕的左上方，“Status”（状态）按钮应为绿色并显示 READY（就绪）。如果该字段是黄色或红色，可单击“Advanced Features”（高级功能）选项下方的“Diagnostics”（诊断）按钮来确定出现的问题。如果无法解除红色或黄色灯状况，请联系 Agilent 以获得帮助。

#### 注意

对于某些接口/仪器组合，数据采集过程中，状态预计显示为黄色（尤其是对于外反射接口）。

## MicroLab PC

### 开始

“Start”（开始）按钮将使用激活的方法开始样品测量。激活的方法显示在“Home”（主页面）屏幕的右上角。

### 方法

“Methods”（方法）按钮可打开“Method Selection”（方法选择）对话框。没有管理员权限的用户只能激活由管理员指定为“公共”的方法。

有关“方法”的更多信息，请参阅方法第23页。

### 参考方法

可以使用 Reference Templates（参考模板）按钮创建新的参考方法模板、编辑现有参考方法模板以及激活所选的参考方法模板。

### 注销和退出

“Logoff”（注销）屏幕允许其他用户登录系统以及从系统注销。“Exit”（退出）按钮可关闭 MicroLab PC 软件。

### 锁定

此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。用于锁定软件，以便在无人看管时控制访问。有关详细信息，请参阅第 55 页的“MicroLab 21 CFR Part 11”部分。

### 前一结果

执行分析后，可通过“Home”（主页面）屏幕访问前一结果。单击“Previous Results”（前一结果）后，将显示一个屏幕，其中列出已运行的样品。将根据所选命名惯例对这些样品进行命名。

### 高级功能

在“Advanced Features”（高级功能）屏幕中，可以选择以下选项：

- System Check（系统检查）
- Diagnostics（诊断）
- MAC Addresses（MAC 地址）
- Library Management（库管理）
- User Management（用户管理）

## MicroLab PC

- Change Password (更改密码)

有关高级功能的更多信息，请参阅第 33 页。

## 方法

### 主页

**方法列表：**显示为 MicroLab PC 应用程序软件创建的方法的列表。此处显示的所有方法也会出现在 MicroLab Lite 中。

**删除：**删除当前选定的方法；只能由具有管理员权限的用户访问。此功能在 21 CFR Part 11 环境中不可用。

**导入：**此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。导入 CFR 和非 CFR 方法。尽管所有签名都将被移除，但 CFR 方法将保留旧的审计跟踪。导入后，这些方法可用于 CFR 环境。导入的非 CFR 方法是只读的。

**新建：**创建新方法；只能由具有管理员权限的用户访问。

**打印：**此系统功能允许用户打印所选方法的仪器和方法详细信息的副本。

**编辑：**打开当前选定的方法进行编辑；只能由具有管理员权限的用户访问。

**激活：**选择当前突出显示的方法作为要使用的方法。要使用某个特定方法采集数据，必须首先激活它。

### 注意

非管理员级别的用户只能查看或激活“公共”复选框列中选定的方法。

## 新建方法/编辑现有方法

### 信息页

Info (信息) 页用于设置所选方法相关的基本信息。该页默认设置为空方法。

**方法名称：**该字段指定方法名称；方法名称将显示在方法列表中。无法在 Info (信息) 页编辑方法名称。在对新方法首次 **Save** (保存) 时可以定义方法名称，或在现有方法进行编辑后，通过选中 **Save As..** (另存为..) 定义方法名称。

**开发人员：**该字段指定开发此方法的用户。

**评注：**该字段可供用户输入有关方法的任何特殊信息。

### 注意

MicroLab 软件附带的默认方法仅用作占位符。安捷伦不建议使用此默认方法。

---

### 类型页

Type（类型）页对于所有类型的方法均通用，用于指定数据采集前的检查参数。

**方法类型：** MicroLab PC 软件提供三种类型的方法：

- **成份定量：** 定量预测方法或光谱分析。将采集红外光谱，然后根据这些数据或峰高/面积类型分析进行预定义的定量预测。可以定义多个成份，每个成份在单一方法中都有其自己的定量校准。还具有测量峰高/面积/重心/噪音的功能。
- **仅采集数据：** 仅采集和显示红外光谱。不对采集的数据进行任何其他分析。
- **定性检索：** 采集红外光谱，并在预定义的光谱库或多个库中检索它。根据所选检索算法，此方法的结果将是与光谱库匹配率最高的项目。

**在采集背景之前检查晶体洁净度：** 该选项可在采集背景之前启用或禁用系统对 ATR 晶体或样品池进行洁净度检查。该选项仅推荐用于 ATR 接口。

- **洁净度扫描：** 设置进行洁净度扫描的次数。
- **阈值：** 设置洁净度扫描的吸光度阈值上限。

### 注意

根据实验要求，洁净度扫描阈值可能需要随时间进行调整。

---

**背景：** 可使用两个选项采集背景：

- **对每份样品采集新背景：** 该选项需要采集每个样品的背景光谱。这是为实现高数据质量建议的选项，因为它为水蒸汽、二氧化碳以及其他大气成份变化提供理想校正。
- **背景有效时间：** 如果选择了此选项，则按一定的时间间隔采集背景，并且可以按顺序采集样品，而不会测量样品之间的背景光谱。可以以分钟、小时和天为单位设置期限。

### 注意

可以基于应用要求以及实验条件的预期变化设置有效期限。频繁并及时地采集背景光谱对于数据质量至关重要。

---

**Y 轴单位：** 此可选功能可指定 Y 轴比例：吸光度、透射率或反射率。

**固定最大 Y 值：** 此选项将指定值上的吸光度值显示为固定最大 Y 值。当没有用于分析的波段可能超出比例时，该选项会很有用；如果选择此功能，超出比例的波段将显示为“平顶”，这不会对显示的比例产生负面影响。仅当选择了“吸光度”作为 Y 轴单位时，此选项才可用。

**最小 Y 阈值：**设置 Y 轴上的最小阈值。仅当选择了“吸光度”作为 Y 轴单位时，此选项才可用，用于告知信号不佳。启用后，如果在数据采集开始时，检测到的信号低于指定值，将会发出警告，建议在继续扫描前重新放置样品。此功能仅在初次光谱扫描时使用。

### 注意

Y 轴固定通常用于透射接口，以此限制记录的最高吸光度，从而更好地对比例峰进行建模。通常使用的值为 2。默认最大值为 5 Abs，相当于 0.00001 T (0.001% T)。

**显示样品扫描前准直检查：**此选项可以启用并启动样品扫描前准直检查。有关样品扫描前准直检查的更多信息，请参见第 39 页。

**显示采样连续性检查：**此选项可以启用或禁用样品连续性检查。手持设备通常会启用此检查，以确保样品在测量过程中始终处于采样技术的焦点位置上。

### 注意

**Show Pre-Sample Alignment Check**（显示样品扫描前准直检查）和 **Show Sampling Continuity Check**（显示采样连续性检查）仅用于外反射接口/模块。这些检查不适用于 ATR 接口。

**启用经典视图：**此选项用于启用或禁用图形窗口的经典视图。仅当方法设置为“Data Collect Only”（仅数据采集）时，才可以使用此选项。

有关“仅数据采集”图形窗口选项的更多信息，请参阅第 70 页。

## 仪器页

Instrument（仪器）页对于所有类型的方法均通用，用于指定处理采集数据的仪器设置。

**光谱范围 (cm<sup>-1</sup>):**以波数指定光谱范围的上限和下限。选择 **Full**（全扫）可启用默认检测器范围用于数据采集。范围可能因仪器系列不同而有差异，可能会有所增减。

**背景光谱扫描次数：**这可指定要在背景测量中采集的扫描次数。扫描次数越多，信噪比就越高；然而，测量时间会随着扫描次数的增加而成比例延长。

**样品扫描次数：**这可指定要在样品测量中采集的扫描次数。与背景测量相同，扫描次数越多，信噪比就越高，但同时也会使时间变长。样品扫描次数应等于或小于背景扫描次数。通常，采集背景和样品时的扫描次数都是相同的。

**分辨率 (cm<sup>-1</sup>):**这可指定光谱分辨率。对于凝聚态样品，分辨率为 4 cm<sup>-1</sup> 时可进行大多数测量。

## 注意

应基于应用要求选择合适的分辨率。更高的分辨率（较低的波数值，即  $2\text{ cm}^{-1}$ ）会导致扫描速率更低，数据密度和点数会增加。在没有零填充的情况下，在  $4\text{ cm}^{-1}$  处采集的典型光谱会生成大小约为 32 Kb 的文件。

**补零因子：**这指定了用于将干涉图傅里叶变换为能量谱图的补零因子。

**切趾函数：**这指定了用于将干涉图傅里叶变换为能量谱图的切趾函数：无 (Boxcar)、三角或 Happ-Genzel。

**相位校正：**应用标准 Mertz 方法，以校正相位差异。

**采样技术：**选择采样技术：透射池、反射、ATR、气体池或其他。这是一个可选字段。如果方法选择的采样技术与实际接口不匹配，该方法可能无法激活。

**设置方法增益：**此选项用于在方法中保存用于常规分析的增益值。该选项通常适用于与特定接口相结合的具体仪器设置，以及采用合适背景间隙的情况。

**将定量结果标准化为光程长 ( $\mu\text{m}$ ):** 此选项仅适用于透射池和气体池采样技术。

**样品采集子类型：**根据所选的采样技术选择样品采集子类型。

- **透射池：** Tumbler、DialPath 或 630 透射模块。
- **反射：** 漫反射、镜面反射或掠角反射。
- **ATR：** 1-Bounce、3-Bounce、5-Bounce、9-Bounce、ZnSe 5-Bounce、Ge 1-Bounce、Diamond 1-Bounce 或 ZnSe 1-Bounce。

**检测器类型：**选择仪器检测器类型。

**储存 GPS 数据：**此功能仅适用于 Agilent 4300 手持式 FTIR。使用此选项可以在采集光谱时存储 GPS 数据（全球定位系统）。GPS 数据会显示记录谱图时该地点的经度和纬度。

**要求 GPS 数据：**此功能仅适用于 Agilent 4300 手持式 FTIR。此选项可在采集光谱时将启用或禁用 GPS 数据作为必选信息。如果仪器不支持提供 GPS 数据，则应禁用此选项。否则，仪器将拒绝采集数据。请勿在卫星未覆盖的室内或区域使用此选项。

### 谱库页

仅在选择 Qualitative Search（定性检索）方法类型的情况下，才能使用 Libraries（谱库）页。显示列表的第一列描述谱库名称，第二列指示谱库是否包含 ATR 光谱。可以在此页面添加或移除谱库。

有关谱库的更多信息，请参阅第 33 页的 Library Management（库管理）部分。

### 检索页

仅在选择 Qualitative Search（定性检索）方法类型的情况下，才能使用 Search（检索）页。该页面用于配置所选方法在所选库中的检索方式。

**检索算法：**检索算法下拉菜单提供了以下操作检索功能的选项：

- Euclidean（欧氏距离）
- Absolute Value（绝对值）
- Derivative Absolute Value（导数绝对值）
- Least Squares（最小二乘）
- Derivative Least Squares（导数最小二乘）
- Correlation（相关性）
- Derivative Correlation（导数相关性）
- Similarity（相似度）
- Derivative Similarity（导数相似性）
- Extended Correlation（扩展相关性）

**导数算法间隙：**仅当选择了导数类型检索算法时，此字段才可用。该字段用于选择所应用导数的间隙大小（用于计算的点之间的间隙）。值“1”相当于应用标准 Norris Gap 导数。该值可以大于 1，取决于接口和光谱特征，以获得理想效果。

**最小 Hit Quality：**此字段用于指定最小阈值，该值范围为 0–100 (%)，用于所显示库的匹配结果质量。检索结果中不会显示任何低于指定值的质量值结果（指数 × 100）。

**显示最大 Hits 值：**此字段用于将高质量下限库匹配结果列表的大小限制为指定数量。例如，选择 12 将显示排名前 12 的指数结果，这些结果超过了匹配结果最低质量。

**质量临界阈值：**此字段用于设置质量检索结果中颜色标记功能的阈值上限。如果未选择 **Quality Marginal Threshold**（质量边际阈值）选项，任何低于质量临界阈值的检索结果将会显示为红色（该值必须介于 0 和 1 之间，接受十进制值）。此参数与指数值相关。如果未设置质量临界阈值，将不会应用彩色标记。

**质量边际阈值：**此可选字段用于设置边际检索结果的阈值下限。任何介于质量边际阈值和质量临界阈值之间的结果都将以黄色显示（该值必须介于 0 和 1 之间，接受十进制值）。

#### 注意

阈值质量方向和颜色分级将自动调整，从而匹配所选算法。

**显示元数据：**选中此复选框，显示与所选样品对应的元数据。这些数据包括样品等级、说明和危险状态等信息。此功能在 21 CFR Part 11 环境中不可用。

**自动残余检索：** 启用此复选框将自动对采集的光谱应用残余检索功能。

- 当选择“Top Hit”（最匹配的结果）时，自动残余功能将从光谱中扣除初始最匹配的库结果，重新检索所选库，并显示最匹配的残余结果。

### 注意

当选择“Top Hit”（最匹配的结果）时，只会显示最终的最匹配残余结果（不会显示实际的最匹配结果）。

- 当选择“Defined Spectrum”（定义光谱）时，自动残余功能将从采集的光谱中扣除用户定义的光谱，然后检索所选库并显示最匹配的定义残余结果。

### 注意

“Defined Spectrum”（定义光谱）文件必须是 Agilent 结果文件，采用 \*.a2r 格式，并从结果文件夹中选择。

**排除搜索区域 (cm<sup>-1</sup>):** 此可选字段用于向光谱添加检索排除区域。该功能将从光谱中去除不需要的波数区域（例如晶体固有吸收区域），从而获得更清晰的结果。还可以用该功能进行集中检索，例如只检索指纹区域。

成份定量页（成份定量方法）

“Components”（成份定量）页列出为该方法定义的成份。成份是样品成份的定量校准。可以为每个方法定义多个成份。

**添加：** 使用此按钮可将新用户成份添加到方法。此按钮将显示“Add Component”（添加成份）对话框（请参见下文）。

**移除：** 使用此按钮可从方法中移除选定的成份。

**编辑：** 使用此按钮可以编辑用于所选成份校准的参数。此按钮将显示“Edit Component”（编辑成份）对话框（请参见下文）。

**添加成份对话框：** “Add Component”（添加成份）对话框可用于添加或编辑成份。该对话框提供成份校准设置、显示设置以及该成份的限值。成份限值可对成份结果启用颜色编码的显示。

**成份名称：** 这可指定将显示在成份列表和结果二者中的成份的名称。为了清楚起见，名称应包括结果单位。

**计算类型：** 该字段指定要使用的计算的类型。计算类型包括一元（峰高度、单基线峰高度、双基线峰高度、峰面积、单基线峰面积、双基线峰面积）、噪声计算（RMS 噪声）、峰位置（峰位置（重心））和多元（定量模型）。“Quant Model”（定量模型）计算类型还用于 MicroLab Quant 一元或多元校准。

### 注意

使用峰高度、峰面积或峰比率的一元校准的线性拟合必须在第三方软件（如 Microsoft Excel）上进行。MicroLab Quant 软件可用于创建完整的一元校准，而不必使用第三方软件。

---

### 注意

多元校准可在 Thermo Galactic PLS/IQ Plus 软件中进行，并导出为 MicroLab PC 软件可读的文本格式，或导出为 Eigenvector Solo Plus Model Exporter 可读的 XML 格式，或导出到 MicroLab Expert（定量模块）中。有关导出校准的详细信息，请参见下面的说明。

---

#### 峰开始，峰停止：

- 对于一元和峰位置计算，该选项可定义要使用的峰。
- 对于峰高度计算，将选择此区域之间的最大值。
- 对于峰面积，这是面积计算的限值。
- 对于重心，这是将计算重心的区域之间的限值。
- 对于多元（定量），这是显示范围的限值。

**基线 1 开始，基线 1 停止：**这些点可定义要在其中计算基线的第一个点的区域。对于单点基线，只能使用基线 1。此基线将被视为此范围内的最小值。

**基线 2 开始，基线 2 停止：**这些点可定义要在其中计算基线的第二个点的区域。此基线将被视为此范围内的最小值。

**成份：**仅当将“定量模型”选定为计算类型时，此功能才适用，并且仅适用于 Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q)。多元模型中使用的成份会显示在下拉菜单中。

### 注意

使用 Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q) 文件需要在同一设备上安装具备定量功能的 MicroLab Expert。

---

**缩放比例：**此部分定义要应用于数据的线性校准。可以将其与任何峰定义（峰高度、峰面积等）结合使用，或用于修改由多元（定量）方法生成的值。通常，它用于将值更改为适当的比例。

- **比例 (x 值)：**“Scale”（比例）是线性校正方程的斜率。在线性拟合方程  $y=mx+b$  中，比例是“m”。
- **偏移：**“Offset”（偏移）是线性校准的 Y 轴偏移。在线性拟合方程  $y=mx+b$  中，偏移是“b”。
- **报告的小数位数：**这可定义将在答案中报告的小数位数。

**阈值：**此部分定义 MicroLab PC 软件用于对显示的结果和报告进行颜色编码的限值。在边缘高和临界高或边缘低和临界低阈值之间的值将显示为黄色。高于边缘高或低于边缘低阈值的值将显示为红色。所有其他值将显示为绿色。

**计算值为：**可以根据以下选项计算值：

- Actual Value (实际值)
- Percent Low (低百分比)
- Percent High (高百分比)

### 注意

高百分比和低百分比选项需要临界高参考值。参考值实际上是 100% 的参考值。计算值将以参考值的百分比进行报告。

## 成份报告页

方法开发人员可使用成份报告确定成份何时显示在“Results”（结果）屏幕和报告中。只有在“Display”（显示）列中选定的成份才会同时显示在屏幕和报告中。

### 编辑成份报告条件对话框

此外，方法开发人员还可以选择仅在某些条件下报告成份。例如，开发人员可以指定只有在成份的值在其校准范围内时才报告该成份。这样，方法中将存在多个范围（高、中和低）内的校准。如果指定，软件将只报告范围内的校准中的浓度。对于多元方法，可以使用任何方法统计测量（马氏距离、F 测试等）确定是否应报告某个值。

**报告为：**此部分允许开发人员选择是将成份报告为计算得到的值，还是基于该值的文本字符串。如果与条件设置中的布尔逻辑结合使用，则允许显示基于文本的结果而不是数值结果，如“超出规格”或“良好”。

**成份/诊断：**此下拉列表显示可用于选择显示逻辑的所有诊断信息。

**测试状态：**启用诊断状态的规格。它与下面的“值”结合使用。

**值：**与测试状态结合使用的诊断的值，以确定是否显示成份。

**示例 1：**对于简单的一元方法，可以为单个待测元素指定两种成份；一种成份有低范围的有效校准，另一种成份有高范围的有效校准。开发人员可能更愿意仅报告适当的范围。在此示例中，成份将称为“面积”，有效的高范围是从 1000 到 5000 ppm。对于此示例，将为成份/诊断选择“面积”。首先，将选择测试状态“>=”以及值 1000。添加此项之后，将选择“And”限定符。然后，将选择测试状态“<”以及值 5000。在此示例中，如果值介于 1000 和 5000 之间，现在将仅报告面积成份。

**示例 2：**对于多元 (PLS) 方法，一个分析物可以指定多个成份。每个成份都有不同的多元校准。您可能只需要其校准设置与未知样品相关程度最密切的成份。在这种情况下，开发人员会将成份/诊断选择为 MDistance（马氏距离），

## MicroLab PC

将测试状态选择为  $\leq$ ，将值选择为 3。这将仅报告马氏距离小于 3 的值，这表明样品在统计上属于校正集的组。

### 自定义字段页

自定义字段是管理员定义的字段，在所选方法的开头位置显示。随后由该方法的用户完成该字段。字段可以是日期、文本或数字，只能由管理员添加或删除。可在“Results”（结果）屏幕和报告中查看这些字段。根据具体的用户需求，可以将许多可选字段附加至方法中。

### 推荐页

建议将显示在样品分析之后出现的“Results”（结果）屏幕中。消息是一种独特的功能；它们使用户能够按照其特定需求和参数对结果进行自定义。

### 报告页

报告页面对于所有类型的方法均通用，用于将 Available Report Template（可用报告模板）分配至当前方法，或从当前方法中删除 Selected Report Template（选定报告模板）。如果可用，可以同时添加或删除多个报告模板。

**可用报告模板：**报告模板用于特定类型的方法。

- “Data Collect Only”（仅数据采集）方法可以使用光谱报告模板。
- 成份方法可以使用光谱或者成份报告模板。
- 定性检索方法可以使用油品报告模板、光谱模板、光谱重叠模板、光谱分列模板、缩放光谱重叠模板和缩放光谱分列模板。

也可以创建您自己的定制报告模板。有关报告模板的更多信息，请参阅第 75 页章节 8。

- **结果文件夹：**这可指定以下文件夹之一中用于保存结果的位置。
- 对于所有系统，从版本 5.3 开始，所有用户可定义的交互式调用文件保存在 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab 或 C:\Users\Public\Public Documents\Agilent\MicroLab 中。

如果该字段空白，文件将直接保存到结果文件夹中：

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results。

对于 21 CFR Part 11，当该字段空白时，默认结果文件夹是 VAIMDB\_Public(000)|Public Results。

可以输入其他文件夹，以保存结果目录中的文件。如果将方法传输到运行 MicroLab Mobile 的系统，该文件夹将自动更新到移动设备上相应的文件夹。还有一个自动报告功能的选项。如果选中此框，当使用相关方法采集样品时，将自动生成与该方法相关的所有报告。

## MicroLab PC

向/从当前方法中添加/移除报告模板

“Available Report Templates”（可用报告模板）列中所列的报告只有在添加到方法中才会激活。向当前方法添加报告：

- 1 突出显示“Available Report Templates”（可用报告模板）列中所需的报告。
- 2 单击 **Add ->**（添加 ->）。

完成该方法后，用户可以选择添加到“Available Report Templates”（可用报告模板）列中的任何报告。如果选择了 **Auto-Report All Selected Reports**（自动报告所有选定报告）选项，则“Available Report Templates”（可用报告模板）列中所列的所有报告都将自动打印。

从当前方法中移除报告：

- 1 突出显示“Selected Report Templates”（选定报告模板）列中所需的报告。
- 2 单击 **<- Remove**（<- 移除）。

移除的报告将在“Available Report Templates”（可用报告模板）列中再次出现。

**结果文件夹：**指定保存选定报告的文件路径。

**结果命名：**MicroLab 具有自动保存功能，可创建每个分析独有的唯一识别号。所有文件对所有授权用户可用，并可通过“Previous Results”（前一结果）按钮进行查看。管理员可以选择最适合其需要的格式。

- **样品 ID + 增量（需要的样品 ID）：**结果名称将与样品 ID 和四位数增量相对应，如：样品\_0000。
- **日期时间：**结果名称将与分析的日期和时间戳相对应。
- **样品 ID + 日期时间：**结果名称将包含分析的样品 ID、日期和时间。

**自动导出：**利用 MicroLab 的自动导出功能，用户在数据采集时可自动导出结果文件。MicroLab 可以生成 \*.csv、\*.spc 和 \*.asp 文件类型，用于导入各种第三方软件程序。\*.spc 是通用的光谱数据文件，用于在 GRAMS 或 Eigenvector 中使用的数据。\*.asp 文件格式只是 Y 数据的 ASCII 输出，带有定义为 X 的标题。

### 注意

样品 ID 由用户在分析过程中输入。如果用户未输入样品 ID，系统将自动创建日期和时间戳。在运行多个样品时，用户必须始终更新样品 ID。MicroLab PC 将存储以前输入样品 ID。

# 高级功能

## 系统检查

系统检查包括以下仪器测试：

- 性能（信噪比）
- 稳定性测试
- 激光频率校准检查
- 光谱分辨率检查

有关系统检查的更多信息，请参见相应的仪器操作手册。

## 诊断

诊断页面显示有关仪器的重要诊断和基本信息，包括：

- 仪器状态
  - 能量（计数）
  - 电池（AC 电源或电池百分比）
  - 光源（电流/电压）
  - 激光（计数）
- 组件温度 (°C)
- 版本信息

该页面还支持：

- 重置洁净度和背景有效性
- 配置日期时间格式

## MAC 地址

MAC Addresses（MAC 地址）页显示系统的当前 MAC 地址，支持将地址复制至剪贴板进行导出。

## 库管理

Library Management（库管理）页显示库信息，如存储库名称和内容。也可通过此页面新建谱库、删除现有谱库以及编辑现有谱库条目。

### 注意

无法从许可谱库中编辑或删除谱库条目。

---

#### 新建谱库

1 选择谱库列表窗口右侧的 **New Library**（新建库）按钮。

将显示“Create Library”（创建库）窗口。

2 输入 **Library Name**（库名称）。

3 如果需要，输入附于谱库的可选 **Comment**（评注）。

4 选择 **Library Spectra**（谱库谱图）类型：

- 基线校正
- ATR 光谱

5 选择 **Y Type**（Y 类型）：

- 吸光度
- 反射率
- 透射率

6 选择 **Lib Bytes**（谱库字节）。指定用于保存各个光谱的字节数。对于用户创建的谱库，该字节数通常为 2。

7 选择是否 **Auto detect from first library entry**（从第一个谱库条目自动检测）。启用该功能时，会使用谱库中的第一个光谱来确定第一个 X (cm<sup>-1</sup>)、最后一个 X (cm<sup>-1</sup>) 和点数。禁用此功能后，用户可以手动选择谱库匹配的范围和点数。

8 单击 **Create**（创建）。

### 注意

安捷伦不建议对镜面反射数据、掠角反射数据或漫反射数据应用 ATR 校正。

---

#### 编辑当前谱库

##### 向现有谱库中添加条目：

1 从高级功能和库管理中选择现有谱库文件 (.lib)。

## MicroLab PC

- 2 单击“Add to Library”（添加到库）。
- 3 选择相应的 \*.a2r 谱库条目文件。
- 4 单击“Open”（打开）。

会显示“Importing Results Entry”（导入结果条目）对话框。该对话框支持将名称和可选 CAS 号应用于条目。

- 5 单击 OK（确定）。

### 注意

对单个谱库中样品的定制信息进行编辑，将自动编辑同个谱库和所有其他谱库中具有该 CAS 号的所有条目的信息。

### 从现有谱库中移除条目：

- 1 从列表中选择现有谱库文件 (.lib)。
- 2 单击 **Delete From Lib**（从库中删除）。
- 3 单击 OK（确定）。

### 注意

删除的谱库条目将从谱库中彻底移除。谱库索引号将变得不可用。

### 注意

安捷伦建议只在一个谱库中添加相同样品类型（如 ATR）的光谱。

### 定制信息

“Custom Information”（定制信息）窗口显示与所选谱库条目相关的识别和数据信息（如果可用）。该页面还允许用户添加与该谱库条目相关的类别、注释和处理信息。

### 用户管理

“User Management”（用户管理）页可用于编辑用户名、角色以及修改用户安全性。

有关用户管理的更多信息，请参阅[第 14 页](#)。

# 多元方法从 GRAMS PLS/IQ 传输到 MicroLab PC

将 PLS/IQ \*.cal 文件导出到 ASCII

将 PLS/IQ \*.cal 文件导出到 ASCII:

- 1 使用 PLS/IQ 模块生成 PLS/IQ \*.cal 文件。要将校准保存到 PLS/IQ 中，可使用 GRAMS 帮助文件中的步骤“Galactic GRAMS: 保存来自实验的校准”。有关 GRAMS 帮助文件的问题和其他信息，请联系 Agilent。
- 2 在 GRAMS 主屏幕中，单击 **Add-ons** (加载项) > **PLS/IQ** > **Export Calibration** (导出校准)。将显示“Open” (打开) 对话框。
- 3 选择适当的 \*.cal 文件并单击 **Open** (打开)。将显示“Export” (导出) 对话框。
- 4 第一个部分列出选定的校准文件。第二个部分列出导出的文件类型；输出文件类型应为 **ASCII Text (\*.txt)** (ASCII 文本) (\*.txt)。
- 5 单击 **Next** (下一步)。将显示“Save As” (另存为) 对话框。
- 6 在保存文件之前浏览到  
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\models。
- 7 输入适当的名称并单击 **Open** (打开)。校准文件即被导出。软件将返回到“Export” (导出) 对话框。
- 8 单击 **Cancel** (取消) 以返回 GRAMS。

生成方法文件

在 MicroLab PC 中生成方法文件:

- 1 从 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 中单击 **Method** (方法) 按钮。
- 2 在“Method” (方法) 对话框中单击 **New** (新建) 按钮。
- 3 在方法 **Type** (类型) 页面上，从“Method Type” (方法类型) 下拉列表中选择 **Components** (成份)。
- 4 单击 **Components** (成份定量) 页面。
- 5 在“Components” (成份定量) 页面上单击 **Add** (添加) 按钮。
- 6 在“Add Component” (添加成份) 对话框中，为成份指定名称。  
成份名称是一些文本，当最终用户运行方法时，这些文本将显示在值旁边。该名称必须是要预测的属性的描述性名称。

## MicroLab PC

- 7 对于多元 (PLS) 方法，选择 **Quant Model**（定量模型）作为计算类型。出现“Open File”（打开文件）对话框。
- 8 选择相应的校准文本文件（该文本文件是在“将 PLS/IQ \*.cal 文件导出到 ASCII”的步骤 7 中从 Galactic GRAMS 导出的）并单击 **Open**（打开）。
- 9 “Add Component”（添加成份）对话框中的其他可用选项如下所列：

“Add/Edit Component”（添加/编辑成份）对话框中的可用选项如下所列：

- a **定量开始和定量停止：**使用这些峰可设置当从“Results”（结果）屏幕选择成份时要显示的频率范围。如果将此保留为空，则显示整个光谱。
  - b **缩放比例：**“Scaling”（缩放比例）部分将线性缩放比例应用于定量模型生成的结果。
  - c **阈值：**这些值可设置成份结果的显示颜色。如果成份值大于或低于临界值，结果将显示为红色。如果成份值在临界值和边缘值之间，结果将显示为黄色。否则，结果将显示为绿色。
  - d **计算值为：**在实际成份值、临界高值的百分比或临界低值的百分比之间更改显示。
- 10 相应地设置了所有值后，单击 **OK**（确定）。
  - 11 单击 **Save As**（另存为）。输入方法名称并保存到适当位置。默认文件路径位于：

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods。

### 注意

在 21 CFR Part 11 环境中，系统会提示您将方法保存在数据库中。

- 12 该方法现在可在 MicroLab PC 中使用。要使用该方法，请确保其已激活。

# MicroLab 定量模型从 MicroLab Expert 转移到 MicroLab PC

在 MicroLab PC 中使用来自 MicroLab Expert 的模型文件：

### 注意

对于 21 CFR Part 11 环境，在加入方法之前需要使用 MicroLab Quant 将模型导入数据库。有关详细信息，请参见第 48 页上的导入模型。

- 1 从 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 中单击 **Method**（方法）按钮。
- 2 在“Method”（方法）对话框中单击 **New**（新建）按钮。
- 3 在方法 **Type**（类型）页面上，从“Method Type”（方法类型）下拉列表中选择 **Components**（成份）。
- 4 单击 **Components**（成份）页面。
- 5 在“Component”（成份）页面上单击 **Add**（添加）按钮。
- 6 在“Add Component”（添加成份）对话框中，为成份指定名称。
- 7 选择 **Quant Model**（定量模型）作为计算类型。出现“Open File”（打开文件）对话框。
- 8 导航至模型文件所在的位置。更改文件类型字段以筛选文件类型。可接受以下文件类型：
  - Agilent 模型 (\*.mqm)
  - Thermo 模型 (\*.txt)
  - Eigen 向量模型 (\*.xml)
  - Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q)

### 注意

使用 Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q) 文件需要单独的注册码，可在工作流程产品套装（例如“测量套装”(G8188AA)）中找到。如果没有，将出现错误对话框。

- 9 选择模型文件并单击 **Open**（打开）。该模型现已包含在方法中。
- 10 在“Add Component”（添加成份）对话框的其他可用选项中输入相应的值。单击 **OK**（确定）。
- 11 单击 **Save As**（另存为）。输入合适的方法名称并保存至  
C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods。

- 在 21 CFR Part 11 环境中，系统会提示您将方法保存在数据库中。

12 该方法现在可在 MicroLab PC 中使用。要使用该方法，请确保其已激活。

## 使用样品扫描前准直检查

样品扫描前准直检查可根据预览屏幕中测量的样品生成信号强度的可见性指示。这样便于确定样品是否在 FTIR 仪器的界面焦点中并与样品平齐，或仪器是否与样品匹配以获得最大信号。此步骤详细说明创建使用样品扫描前准直检查的方法的过程。在该方法中，将指定要从样品进行的测量。通常，这是与目标样品对应的峰高度或峰面积。

### 检查样品校准：

- 1 从 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 中单击 **Methods**（方法）按钮。
- 2 在“Method”（方法）对话框中单击 **New**（新建）按钮。
- 3 在方法 **Type**（类型）页面上，从“Method Type”（方法类型）下拉列表中选择 **Components**（成份）。
- 4 单击 **Components**（成份）页面。
- 5 在“Component”（成份）页面上单击 **Add**（添加）按钮。
- 6 在“Add Component”（添加成份）对话框中，为成份指定名称。
- 7 选择成份的“Calculation Type”（计算类型）。通常，“Peak Area With Dual Baseline”（双基线峰面积）或“Peak Height With Dual Baseline”（双基线峰高度）将给出样品校准的最佳指示。
- 8 定义要测量的峰（面积）。
  - 对于峰面积，“Peak Start”（峰开始）和“Peak Stop”（峰停止）将定义峰的边沿。
  - 对于“Baseline 1”（基线 1）和“Baseline 2”（基线 2），基线设置为开始点和停止点之间最低的点。
- 9 设置“Scale Factor”（比例因子），使得测量点大于 1。对于峰高度，比例因子为 1000 可确保大多数测量值都是成比例的。
- 10 单击 **OK**（确定）。
- 11 在方法 **Type**（类型）页中，选择 **Show Pre-Sample Alignment Check**（显示样品扫描前准直检查）。从下拉列表中选择在步骤 6 中定义的成份。
- 12 还要注意的，可以使用**样品连续性检查**以确保在整个测量过程中，系统与样品是匹配的。

## MicroLab PC

- 13 单击 **Save As**（另存为）并保存该方法。
- 14 要在手持式 PC 上使用，应将方法传输到移动设备的 MicroLab Mobile/Methods 文件夹中。
- 15 在 MicroLab Mobile 中，样品扫描前准直检查将在“Sample Alignment”（样品校准）页中显示为红色/黄色/绿色条形图。应旋转或校准样品，使其达到条形图上的最大值。

## 将已编辑的方法传输到 MicroLab Mobile

在 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 中完成方法修改后，应将文件传输到嵌入式或手持式 PC 以便使用。有两种方法可以复制文件：使用“我的电脑”，或通过 MicroLab Lite 自动传输文件。

使用 MicroLab Lite 同步

**使用 MicroLab Lite 同步将方法传输到 MicroLab Mobile：**

- 1 将手持式或嵌入式 PC 连接到包含 MicroLab Lite 的计算机。
  - 对于 4300 手持式 FTIR，请退出设备上的 MicroLab Mobile 软件以进入“中间”模式，然后使用 USB 连接到计算机。要退出 MicroLab Mobile，请选择“Home”（主页面）屏幕上的 **Logoff**（注销），单击 **Exit**（退出），出现“Exit Confirmation”（确认退出）对话框时，单击 **OK**（确定）。
- 2 打开计算机上的 MicroLab Lite。
- 3 单击 **Advanced Features**（高级功能）。
- 4 单击 **Synchronize**（同步）。
- 5 如果未列出连接，请单击 **New**（新建）。
- 6 在该对话框中，选择 **Get Connected Device Name**（获取连接设备的名称）；所连接 PDA 或 4300 手持式 FTIR 仪器的序列号将在该对话框中自动输入。
- 7 对于标准配置，选择要同步哪些选项。可以同步报告、结果和方法。此外，可通过指定所需的打印机来自动打印报告。
  - 对于启用了 21 CFR Part 11 的系统，单击 **Browse**（浏览），然后导航到 Public Mobile Methods 或 Results 文件夹。
  - 要将方法文件上传到启用了 21 CFR Part 11 的 MicroLab Mobile，这些文件必须位于 Public Mobile Methods 文件夹。该文件夹中的所有方法文件都将上传。
- 8 选择了要同步的设备后，单击 **OK**（确定）。

## MicroLab PC

- 9 要传输文件，请在列表中突出显示所需的手持式 PC，然后单击 **Synchronize**（同步）或 **Sync**（同步），然后单击 **Yes**（是）。

通过“我的电脑”复制

### 注意

对于 21 CFR Part 11 环境，当通过“我的电脑”进行复制时，非 CFR 方法在移动环境中可见，但无法激活。

### 使用“我的电脑”将方法传输到 MicroLab Mobile:

- 1 将手持式或嵌入式 PC 连接到包含 MicroLab PC 的计算机。

### 注意

此操作过程不适用于 4300 手持式 FTIR。请使用第 40 页上说明的 **Synchronize**（同步）功能。

- 2 在计算机中，打开**我的电脑**，然后浏览到 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Methods。
- 3 选择所需的方法，然后选择 **Edit**（编辑）> **Copy**（复制）。
- 4 从“我的电脑”标题中选择 **Mobile Device**（移动设备）驱动器。
- 5 浏览到 Program Files\MicroLab Mobile\Methods\ 文件夹。
- 6 单击 **Edit**（编辑）> **Paste**（粘贴）。
- 7 返回到计算机上的 C:\ 驱动器，并浏览到 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Models。
- 8 复制 Models 文件夹的全部内容。
- 9 从“我的电脑”标题中，选择 **Mobile Device**（移动设备）驱动器。
- 10 浏览到文件夹 Program Files\MicroLab Mobile\Models，并单击 **Edit**（编辑）> **Paste**（粘贴）。
- 11 如果显示覆盖警告，则单击 **Yes to All**（全是）。

在启用了 21 CFR Part 11 的环境中移动文件

此过程可用于方法或结果文件。

### 将一个文件夹中的文件移至另一个文件夹:

- 1 登录用户必须具有“剪切/粘贴方法/结果”权限。
- 2 在 MicroLab Lite 或 MicroLab PC 中，选择所需文件，右键单击并选择“剪切”。
- 3 导航到相应的文件夹，然后“粘贴”这些文件。

注意

这些文件不能复制到不同的文件夹。

---

## 系统检查

### 执行系统检查：

- 1 单击“Home”（主页面）屏幕上的 **Advanced Features**（高级功能）。
- 2 选择 **System Check**（系统检查）。可以执行四种测试。有关每种测试的更多信息，请参见仪器操作手册。
- 3 选择要执行的测试。
  - 如有需要，可调整“测试次数”、“用户数量”或“运行次数”参数。
  - 可以选择同时运行多个测试。
- 4 单击 **Next**（下一步）开始测试。
- 5 按照屏幕上的说明进行操作。完成该步骤后单击 **Next**（下一步）。
- 6 重复以上步骤，直到完成测试。

## 4 MicroLab Quant

主页面屏幕	43
注销	44
锁定	44
启动新模型	44
导入模型	48
21 CFR Part 11 功能	49

### 主页面屏幕

安装 MicroLab PC 5.1 及更高版本时，MicroLab Quant 模块也将安装。该模块旨在允许用户创建要在 MicroLab PC 的 MicroLab Component 方法模块中使用的方法和模型。

MicroLab Quant 会使用在 MicroLab PC 中应用的相同安全设置和用户管理工具。要登录，用户输入其用户名和密码，就像他们进入 MicroLab PC 一样。对于 21 CFR Part 11 环境，还必须输入组和项目。

以下选项可供使用：

- 启动新模型
- 以前的项目/模型
- 评估模型
- 导入模型（仅适用于 21 CFR Part 11）

在使用 MicroLab Quant 之前，应先采集新项目/模型的数据。这需要在 MicroLab PC 中完成。所有数据都应该使用相同的参数采集。

### 注销

“Logoff”（注销）屏幕允许其他用户登录系统以及从系统注销。“Exit”（退出）按钮可关闭 MicroLab PC 软件。

### 锁定

此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。用于锁定软件，以便在无人看管时控制访问。有关详细信息，请参阅第 55 页的“MicroLab 21 CFR Part 11”部分。

### 启动新模型

#### 生成新模型

- 1 选择 **Start New Model**（启动新模型）。软件会自动生成新项目的名称，但是，用户也有机会创建和输入名称。
- 2 数据选择菜单将出现，并允许用户选择当前存储数据的文件夹。然后，还将按照采集数据的方法对数据进行分组。
  - a 选择模型生成所需使用的数据。这可以通过单击数据来完成。用户可以使用 **CTRL** 和 **Shift** 键突出显示多个文件，类似于在 Windows 环境中选择文件。
  - b 选择文件后，单击屏幕底部的 **[Next>>]**（[下一步>>]）按钮继续。
- 3 对于每个标准，在浓度列中输入浓度。

- 4 从 [Quant Algorithm] ([定量算法]) 下拉菜单中选择应用至数据的算法类型，然后单击 [Next>>] ([下一步>>])。算法选择包括以下选项：
  - a **简单的比尔定律：**典型地描绘为单一成份的线性方程。成份由一系列已知浓度以及特定光谱特性的变化（使用吸光度单位显示）来定义。这些变化可以是峰高度、峰面积或峰比率。然后，根据  $A=ebc$  的比尔定律构造，以  $[y = mx+b]$  形式确定线性方程。这就是相对于已知校正方程确定未知浓度的方法。
  - b **经典最小二乘法：** 当一个混合物中存在多个成份时使用。这种分析类型也基于比尔定律，其中，选择多个频率来捕获所有成份发生的所有变化。其中每个组合使用，相对于校准模型的实际浓度来确定预测值的最佳相关性。
    - 1 将定义多个频率并且无限制。应该定义各个成份的已知浓度。
    - 2 CLS 不适用于对相互作用的成份有基体效应的混合物。它也可能容易受到基线效应的影响。
    - 3 识别混合物中的一个成份时，CLS 最有效。
  - c **逆最小二乘法（又称逆比尔定律，或多元线性回归）：** 用于其中存在基体效应的多成份混合物。这种分析类型基于比尔定律。使用多个频率定义逆比尔定律  $C= P*A+e_c$  的校准。
    - 1 最好用作多元模型，其中只需识别相关成份。适用于复杂类型的分析。
    - 2 在校准中使用的频率的数量不能超过在校准中使用的已知标准的数量。这些频率应该对应于相关成份的变化。
    - 3 如果有足够数量的校准光谱可用，ILS 通常产生最精确的校准。
- 5 选择定量算法后，峰定义是必需的。该软件允许选择峰高度、峰面积和峰比率。
  - a **峰高定义：** 在数据窗口中显示的光谱上拖放“Peak Height”（峰高）图标 。通过“Spectral Display”（光谱显示）上的箭头，用户能够交互式更改基线和峰位置。
    - 1 **红色箭头：** 指向向上方向，定义基线位置 - 起点和终点。
    - 2 **蓝色箭头：** 指向向下方向，指示峰位置。

- b 峰面积定义：**在数据窗口中显示的光谱上拖放“Peak Area”（峰面积）图标 。通过“Spectral Display”（光谱显示）上的箭头，用户能够交互式更改基线和峰位置。
  - 1 红色箭头：**指向向上方向，定义基线位置 – 起点和终点。
  - 2 蓝色箭头：**指向向下方向，指示峰位置 – 起点和终点。
- c 峰比率定义：**软件允许将峰比率或面积比率用于校准目的。它至少需要定义两个峰（通过峰面积或峰高度）。定义相关峰后，单击数据窗口下方的“Peak ratio”（峰比率）图标 。该对话框随后提示用户定义比率方程的分子和分母。
- d 缩放比例：**允许用户交互式单击和缩放所显示的光谱数据。要“取消缩放”，在光谱显示窗口中右键单击并单击 [Full Scale]（全缩放比例）。
- e 数据表：**该表中显示的数据代表了用户通过交互式光谱显示窗口添加的峰定义。如果特定的值是必要的，用户可以选择直接在该表中更改这些值。
  - 1 Include in Model**（包括在模型中）选项：允许用户决定在其开发的模型中包括哪些操作。它基于完整的数据集。
  - 2 删除：**允许用户从模型中永久删除峰定义。
- f 标准表：**允许用户交互式选择在校准算法中使用哪些特定标准。通过取消选中相应的复选框，可以从图或模型中移除各个光谱数据。同时，通过在标准窗口中突出显示单个光谱，可以在显示窗口中突出显示它。
- g 模型图窗口：**模型图窗口的默认设置是显示预测图与实际图。用户可以通过以下两种方法之一切换至“Defined Peak vs Concentration Plots”（定义的峰与浓度图）：
  - 1** 在模型图窗口中右键单击，并选择所需的图。
  - 2** 单击分析屏幕底部的 **Select Model Plot**（选择模型图）按钮。
- h Model Evaluation**（模型评估）：通过单击“Model Evaluation”（模型评估）按钮，软件会为用户提供两个功能。这些功能通常用于确定校正集的离群值和耐用性。
  - 1 交叉验证：**软件通过运行校准，来消除每个标准，然后确定当将该标准作为未知项运行时会返回哪些值。

- 2 **独立集**: 允许用户 **[Add Files...]** ([添加文件...]) 以检查独立于校准运行的标准, 并预测这些样品的值。将每个样品的浓度输入表中, 然后单击 **[Predict]** ([预测]) 按钮。
  - a 在屏幕底部会显示“Total Standard Error” (标准错误总数)、 “R-Squared for Actual V Predicted” (实际 V 预测值的 R 平方值)。在屏幕上还会显示“Actual V Predicted” (实际 V 预测值) 图。
  - b 用户可以在所选位置将这些值 **Export** (导出) 为 CSV 文件格式。
  - c 现在, 用户可以选择使用 **[Save]** ([保存]) 来保存模型, 或使用 **[Back]** ([返回]) 来返回到上一个数据分析屏幕。
- i **Finalize Model** (最终确定模型): 如果用户对校准模型感到满意, 则选择 **[Finalize Model]** ([最终确定模型]) 按钮。然后, 它允许用户保存项目 (\*.mpq), 其中包括标准和模型。用户也可以选择在此时将数据保存到 MicroLab 方法。这将包括用户刚刚在相关模型中定义的成份以及所有校准参数。
  - 1 **模型文件**: 如果需要定义多个成份, 则此操作将在各个模型/项目中进行。每个成份将在单独的模型或 \*.mqm 文件中定义, 同时项目文件会被保存。
  - 2 **保存方法**: 使用 \*.a2m 文件扩展名, 将这些文件与相关成份一起保存。该方法中包含的数据采集参数与用于创建模型的校准文件的数据采集参数相同。如果方法文件中需要多个成份, 则必须通过 MicroLab Lite 或 PC 手动将这些成份添加到该方法。请参阅“MicroLab PC”下的“多元方法传输”部分。这些模型的添加方式与 GRAMS 模型的添加方式相同, 但是, 如上所述, 它们定义为 \*.mqm 文件。
  - 3 **打印**: 选择以创建一个 PDF, 其中包括标准和模型信息。该文件将保存在 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results 文件夹中。
- 6 **以前的项目/模型**: 允许用户选择以前启动的项目并编辑参数。这样做类似于上面的“启动新模型”部分。但是, 已经完成一定量的工作。通常, 标准可能已经添加, 一些峰定义可能已经添加。

## MicroLab Quant

现在，用户可以执行相同的步骤，来定义、评估并最终确定其方法。

- 7 **Evaluate Model**（评估模型）允许用户选择要评估的方法。**Independent Set Evaluation**（独立集评估）屏幕将显示，允许用户加载已知标准并预测浓度，与之前在新模型设置的模型评估部分中执行的操作一样。

## 导入模型

### 使用 MicroLab Quant 导入模型文件：

#### 注意

此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。

MicroLab Quant 是唯一能够将模型导入数据库，以在使用 MicroLab PC 的方法中使用模型的应用程序。

有关在非 21 CFR Part 11 环境中进行模型转移的信息，请参见第 38 页。

---

- 1 登录到 MicroLab Quant。
- 2 选择 **Import models**（导入模型）。
- 3 导航至模型的保存位置，然后选择目标模型。根据要求筛选模型类型。可接受以下文件类型：
  - Agilent 模型 (\*.mqm)
  - Thermo 模型 (\*.txt)
  - Eigen 向量模型 (\*.xml)
  - Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q)

#### 注意

使用 Agilent MicroLab Expert 定量模型 (\*.a2q) 文件需要单独的注册码，可在工作流程产品套装（例如“测量套装”(G8188AA)）中找到。如果没有，将出现错误对话框。

---

- 4 单击 **Open**（打开）。将出现“Select database/folder”（选择数据库/文件夹）窗口。
- 5 选择一个数据库/文件夹以导入模型文件，然后单击 **OK**（确定）。

## MicroLab Quant

- 6 模型文件成功导入数据库后，单击 **OK**（确定）。
- 7 按照第 38 页上描述的步骤，将模型添加到使用 MicroLab PC 的方法中。

## 21 CFR Part 11 功能

有关这些功能的详细信息，请参阅第 55 页的“MicroLab 21 CFR Part 11”部分。

### 21 CFR Part 11

显示当创建或编辑模型时所执行操作的列表。

### 电子签名

单击“E-sign”（电子签名）以应用电子签名，并将评注添加到模型。

本页空白。

## 5 MicroLab OQ

操作认证 (OQ)	51
执行 OQ	52
OQ 报告	53

MicroLab OQ 软件提供诊断值和性能验证测试，以确保系统性能符合预期要求。有关每种仪器的诊断值和性能验证测试的更多信息，请参见相应的仪器操作手册。

### 操作认证 (OQ)

#### 操作系统的诊断验证

“Diagnostic”（诊断）屏幕显示有关仪器的以下信息：

- 仪器状态：能量、电池、光源、激光和电流增益。
- 相关温度：检测器、CPU、IR 板、电源和模块。
- 版本信息。

#### 注意

也可以通过 **Advanced Features**（高级功能）屏幕在 MicroLab PC 和 MicroLab Mobile 上查看诊断情况。

结果以不同的颜色表示。

- 绿色：结果在最佳值范围内。仪器性能正常。
- 黄色：结果在边缘值范围内。仪器运行正常，但性能水平较低。
- 红色：结果在临界值范围内。仪器无法正常工作。

## MicroLab OQ

### 性能验证

可进行以下测试：

- 信噪比（性能）测试
- 稳定性测试
- 激光频率校准检查（频率准确度和重现性）
- 光谱分辨率检查

#### 注意

这些测试与通过 **Advanced Features**（高级功能）屏幕在 MicroLab PC 和 MicroLab Mobile 中进行**系统检查**的测试相同。

---

## 执行 OQ

### 开始操作认证：

- 1 单击 **Next**（下一步）启动测试。
- 2 确保选择了正确的仪器。
- 3 选择一个附件用于 OQ 测试。该模块将设置在主要附件上。  
下面的列表显示了选择模块的推荐顺序。执行测试需要其中一个模块。
  - 透射模块
  - DialPath 模块
  - Tumbler 模块
  - 1-Bounce Diamond ATR 模块
  - 1-Bounce Germanium ATR 模块
  - 1-Bounce Zinc Selenide ATR 模块
- 4 单击“设为主要”以将附件定义为主要附件。这将允许仪器使用所选附件执行测试。  
主要附件必须可以运行所有性能验证测试。这是为了确保仪器正常运行。
- 5 单击 **OK**（确定）开始此流程。

## MicroLab OQ

- 6 显示“Diagnostic”（诊断）页面。如有任何诊断结果不合格，则无法继续进行性能测试。
  - 如果“Instrument Status”（仪器状态）下的“Energy”（能量）字段显示为“FAIL”（失败），请单击 **Gain Adjust**（增益调整）按钮并调整增益值，使信号处于最佳值（绿色）范围内。信号在最佳值范围内时，状态指示灯也会显示为绿色。
  - 单击 **Set Instrument Default Gain**（设置仪器默认增益），将该增益值保存为仪器默认值。
  - 单击 **Back**（返回）回到“Diagnostic”（诊断）页面。
- 7 单击 **Next**（下一步）。
- 8 选择要运行的性能测试。单击 **Next**（下一步）。
- 9 按照屏幕上的说明进行操作。准备就绪后，单击 **Next**（下一步）。
- 10 如果需要，请使用附加附件重复上述步骤，直到 OQ 完成。

## OQ 报告

### 结果汇总

操作确认完成后，将显示“Results Summary”（结果汇总）屏幕，其中显示了每项测试的结果。

同时，会生成 PDF 格式的 OQ 报告，显示以下信息：

**系统信息**，如工作站 ID 和软件版本。

**报告信息**，如用户信息和报告文件名。

**附件信息**，如与仪器连接的任何附件。

MicroLab OQ 生成的结果位于以下文件路径：

C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\IQOQ。

本页空白。

## 6 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab

SCM	55
SDA	56
MicroLab 中的 21CFR Part 11 软件组件	56

MicroLab Pharma 软件中的 21 CFR Part 11 组件由两个程序组成：

- Spectroscopy Configuration Manager (SCM)
- Spectroscopy Database Administration (SDA)

一旦进行了测量，就无法删除结果。

安装 CFR 后，无法关闭 CFR 功能。卸载 MicroLab 软件和 SCM 后仅重新安装 MicroLab 软件会保留 CFR 规则。这将保留 CFR 环境的完整性。

有关安装说明，请参阅随软件一起提供的“适用于 21 CFR Part 11 环境的 MicroLab 软件安装说明”。

### 注意

可选 MicroLab Expert 软件不能在 21 CFR Part 11 环境中使用。有关更多信息，请参见 MicroLab Expert 软件安装说明、MicroLab Pharma 安装说明以及 Agilent MicroLab Expert 1.1.0.1 软件发布说明。

## SCM

Spectroscopy Configuration Manager (SCM) 是系统管理人员与 Agilent 光谱软件应用程序的服务器和采集服务器部分之间的软件接口。SCM 提供了创建、配置和维护有关系统安全、用户管理和数据路径的数据的手段。

为了提供符合 21 CFR Part 11 规则所需的安全性，Agilent 使用 SCM 来获得安全性和权限。这些安全功能可提供：

- 通过使用用户识别码和密码实现的访问控制和授权检查。
- 通过使用数据库实现的电子记录安全。
- 时间和日期的审计跟踪。

## 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab

通过使用用户识别码和密码，可控制哪些用户能够登录系统，以及哪些用户能够在 Agilent 应用程序软件中执行特定功能。它还提供了允许对电子记录进行电子签名的机制。将数据库与 SCM 结合使用，可防止所有未授权用户更改或删除文件。SCM 事件日志扩充了驻留在应用程序软件中的审计跟踪。SCM 管理员必须设置所需的用户。重要的是，执行此操作时要遵循简单要求数量，以确保符合 21 CFR Part 11 规则。

有关配置 SCM 的其他信息，请参阅 SCM 帮助。要访问 SCM 帮助，在打开 SCM 应用程序的情况下，按键盘上的 F1 键或导航到 C: > Program Files (x86) > Varian > 21 CFR 11 > Configuration manager > Server > Configuration Manager Database Help。

## SDA

Spectroscopy Database Administrator (SDA) 设计为供系统管理员设置和维护数据库，以便 Agilent 应用程序软件使用该数据库存储数据。

可以将 SDA 与 Agilent Spectroscopy Configuration Manager (SCM)、应用程序软件和您自己的标准操作实践 (SOP) 一起使用，形成支持 21 CFR Part 11 的环境，来控制 Agilent 仪器。

SDA 允许将由 Agilent 仪器采集的数据进行本地存储（在 Agilent 应用程序软件所在的同一台 PC 上），或按照客户端/服务器排列方式进行远程存储。

必须由系统管理员或者拥有 SDA 运行管理权限的人员来执行配置。

有关配置 SDA 的其他信息，请参阅 SDA 帮助。要访问 SDA 帮助，在 SDA 应用程序打开的情况下，按键盘上的 F1 键或单击“开始”>“所有程序”>“Agilent”>“Database Utilities”（数据库实用程序）>“SDA Help”（SDA 帮助）。

## MicroLab 中的 21 CFR Part 11 软件组件

安装 21 CFR Part 11 软件后，额外的按钮将可用。

### 锁定

此对话框允许用户在使用 21 CFR Part 11 软件包时锁定 MicroLab 软件。可从“Home”（主页面）屏幕访问它。

## 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab

锁定后，将显示“Unlock MicroLab PC”（取消锁定 MicroLab PC）对话框，此时不能执行任何操作，直到经验证的用户登录并取消锁定该软件。并非最初“锁定”MicroLab PC/Lite/定量/OQ 的用户只能在主页上解锁软件。只有最初登录软件的用户可以在所有页面解锁软件。这可以确保权限使用正确，MicroLab 和配置管理器中的审核追踪信息正确，以及结果文件正确保存。

**User Identification**（用户标识）－ 输入您的用户标识号。

**Group**（组）－ 从下拉列表中选择组。

**Project**（项目）－ 从下拉列表中选择项目。

**Password**（密码）－ 输入您的密码。

### 注意

如果使用 MicroLab Mobile 21 CFR Part 11，密码只能是字母数字。请勿使用诸如 \$、@ 等特殊字符。

**OK**（确定）－ 单击“OK”（确定）登录并退出该对话框。该软件现在将取消锁定。

**Cancel**（取消）－ 单击“Cancel”（取消）退出该对话框而不登录。该软件将保持锁定状态。

### 电子签名

单击“E-sign”（电子签名）以应用电子签名。任何用户都可以对方法或结果进行“签名”。要执行“Approval - 1”（批准 - 1）和“Approval - 2”（批准 - 2），必须在 Spectroscopy Configuration Manager 中赋予用户适当的权限。无需登录 MicroLab 软件即可批准，但是，当出现“Signature”（签名）对话框时，用户将需要输入其凭据才能执行“Approval - 1”（批准 - 1）或“Approval - 2”（批准 - 2）。在执行“Approval”（批准）之前登录的原始用户将保持登录状态。如果登录 MicroLab 软件的用户账户被禁用或锁定，则在取消电子签名对话框时会显示“锁定”对话框。配置管理器管理员必须首先将初始用户账户解锁，然后才能解锁 MicroLab 软件。

**User Identification**（用户标识）－ 此字段显示当前用户的名称。操作者/审批者必须在此字段中输入其用户标识，再应用电子签名。

**Group**（组）－ 输入用户标识字段后，会自动填充组。如果用户链接到多个组，则选择相应的组。

**Project**（项目）－ 输入用户标识字段后，会自动填充项目。如果用户链接到多个项目，则选择相应的项目。

**Password**（密码）－ 如果操作者/审批者要应用电子签名，他们必须在此字段中输入其密码。

## 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab

**Comment** (评注) – 在此字段中，输入有关所签核操作的信息或签名的含义。必须输入评注 – 如果保留为空，当单击“Sign” (签名)、“Approval-1” (批准-1) 或“Approval-2” (批准-2) 按钮时，将显示一条消息，指示这是必填字段。

**Approval-1** (批准-1) – 单击以在“Approval-1” (批准-1) 级别应用电子签名。运行该方法的用户也不能批准数据，会显示说明这一点的消息。

**Approval-2** (批准-2) – 单击以在“Approval-2” (批准-2) 级别应用电子签名。运行该应用程序并创建数据的用户也不能批准数据，会显示说明这一点的消息。

执行“Approval – 2” (批准 – 2) 后，方法或结果将变为锁定状态。此方法或结果可以打开和查看，但不能执行进一步的修改。可以从这一锁定的方法创建一个新方法。

除非执行了批准-2，否则无法锁定 MicroLab 方法和结果文件。操作员和审批人-1 对文档进行签名后，公司 SOP 可能需要确保没有对文件进行进一步修改。审核追踪中详细记录了执行电子签名操作中进行的修改，包括电子签名活动。

### 更改原因

只要对方法进行了更改，此对话框就会打开。填写“Reason for change” (更改原因) 对话框后，该方法会立即保存。

通过此对话框，用户可以输入对该方法进行的任何更改的原因。

在此处输入的信息将显示在 MicroLab 报告以及 SCM 中的数据日志和审核日志中。

此对话框底部会显示该方法的日志，其中包括进行的任何更改。

### 21 CFR Part 11

单击以访问“Audit Trails” (审计跟踪)、“Collect Parameters” (采集参数) 和“Analysis Parameters” (分析参数) 选项卡。

### 审计跟踪

将显示方法和结果的审计跟踪，其中显示了所有记录的操作，包括：

- 方法和结果保存位置
- 用于重新分析的方法
- 方法参数更改
- 更改原因
- 开始运行的方法
- 停止运行的方法
- 意外的仪器故障，停止运行的方法

## 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab

- 授权的方法或结果
- 应用的残余

对于上述每一项，还会记录以下信息的组合：

- SAdministrator 服务器/数据库/文件名称
- 本地日期和时间
- GMT 日期和时间
- 工作站名称
- 用户：组/项目/用户 ID
- 用户名
- 用户说明
- 仪器序列号
- 经验证的评注
- 软件版本号
- 固件版本号

本页空白。

# 7

## 测量样品

清洁样品接口	61
采集背景光谱	61
采集样品光谱	62

MicroLab PC 和 MicroLab Mobile 软件是为帮助用户完成样品测量过程而设计的。此软件可显示用户进行样品测量所需的操作的图像和说明。认真按照屏幕上的说明操作可确保获得一致的测量结果。对于任何样品测量，将执行下列步骤：

- 清洁样品接口。
- 采集背景光谱。
- 放置要测量的样品。
- 采集样品光谱。

### 清洁样品接口

进行样品测量的第一步是确保样品放置接口是干净的，没有上一样品或平常使用和存放留下的任何残留物。有关具体的清洁说明，请参考系统附带的相应的仪器操作手册。

小心

请勿拆开光谱仪密封圈并试图清洁内表面。拆开密封圈将使保修权利失效。

### 采集背景光谱

安捷伦建议将系统设置为在每个样品之前采集背景。

## 测量样品

在开始分析之前，如果将方法按建议进行设置，软件将自动采集背景光谱。背景测量（不存在样品）可提供当前系统条件的基本状况，使用户能够在背景和样品光谱中分析出任何异常情况。

### 注意

在采集背景之前，应确保样品接口是干净的。要清洁样品接口，应使用合适的溶剂，如甲醇、丙酮或异丙醇。有关详细信息，请参见仪器操作手册。

### 采集背景光谱：

- 1 在“Home”（主页面）屏幕上，确保激活了适当的方法，然后单击 **START**（开始）以初始化背景样品分析。
- 2 单击 **Next**（下一步）。将快速检查样品接口（晶体）。测试成功后，系统将采集“背景”。背景采集进度用状态条指示。

### 注意

只有在要重新开始分析时才能单击“Home”（主页面）屏幕以返回到主屏幕。

## 采集样品光谱

### 测量样品：

- 1 要开始样品测量，请单击“Home”（主页面）屏幕上的 **Start**（开始）按钮。
- 2 按照软件指示，清洁样品接口以进行 ATR 或透射测量。
  - 要在 Agilent 4100 ExoScan FTIR 上进行反射率测量，应将反射标样放在样品接口上。

### 注意

应使用软布和合适的溶剂（如甲醇、乙醇或丙酮）清洁样品表面。

- 3 单击 **Next**（下一步）按钮。单击“Home”（主页面）按钮将会停止测量并返回到“Home”（主页面）屏幕。

如果在方法中选择了“Clean Crystal Check”（晶体洁净度检查），则进行该检查。这将检查存储的背景的吸光度。如果发现吸光，软件将指示用户清洁样品接口并再次开始。

### 注意

如果晶体洁净度检查持续失败，则存储的背景扫描可能已损坏。如果发生此情况，则可单击“Advanced Features”（高级功能）>“Diagnostics”（诊断），然后单击“Diagnostics”（诊断）对话框中的“Reset Clean Check”（重置洁净度检查）来重置洁净背景。这将清除存储的背景。

---

- 4 晶体检查（如果指定）完成后，软件将采集背景光谱。背景样品将在每次扫描时或在指定时间间隔（如方法中所指定）后进行采集。  
该软件会指示您将样品应用于样品接口。所示的图将与系统配置一致。放置好样品后，单击 **Next**（下一步）。
- 5 软件将显示一个图形，其中显示样品测量的强度（吸光度）。可使用此屏幕确保已将样品正确放置在采样接口上。
  - 对于使用 Agilent 4500t FTIR 进行的油品应用，应最大化该值。
  - 对于使用反射率的 Agilent 4100 ExoScan FTIR 应用，该值应在 0.1 和 2 AU 之间；ATR 测量应在 0.05 和 1 AU 之间。
- 6 在“Sample ID”（样品 ID）字段中输入文件名；这将是用于保存样品数据的文件名。在“Comment”（评注）字段中输入有关样品的其他信息。
- 7 单击 **Next**（下一步）按钮开始样品测量。软件将按照方法中指定的方式一起添加样品扫描。
- 8 在样品测量期间，样品需要保持在采样技术的焦点位置上。
  - 对于 Agilent 4500t FTIR，不能在测量期间调整样品池。
  - 对于 Agilent 4100 ExoScan FTIR，不能在测量期间将仪器从样品表面移开。

软件将在测量期间监控样品信号。如果信号低于预设的阈值，采集将会停止。重新获得样品焦点后，软件将立即开始采集数据。

### 注意

进度条显示数据采集的进展情况。进度条完成后，提示将更改为“Transferring Data”（正在传输数据）。此过程完成后，测量将完成，可将样品从仪器移开。

---

## 测量样品

- 9 样品测量完成后，软件将在“Results”（结果）屏幕中显示方法结果。样品光谱和计算得到的方法结果将会自动保存。随时可从“Previous Results”（前一结果）屏幕返回到这些数据。

## 8

# 检查结果

MicroLab Mobile	65
MicroLab PC/MicroLab Lite	67
MicroLab 报告创建	75

## MicroLab Mobile

### 结果屏幕

对于成份方法，“Results”（结果）屏幕显示计算得到的成份值。成份值将按照相对于其临界限值的情况来排列；将首先列出超出临界范围的值，然后是超出边缘范围的值。在可接受范围内的成份以绿色显示在最后。

- 绿色结果表明样品在可调整的限值范围内。
- 黄色结果表明样品在边缘和临界限值之间的范围内。
- 红色结果表明样品超出或低于临界限值。

**主页面：**此按钮可将软件返回到“Home”（主页面）屏幕。

**下一步：**此按钮可将软件返回到“Sample Collection”（样品采集）页面，以测量其他样品。

### 处理数据

使用“Menu”（菜单）按钮可选择“Data Handling”（数据处理）。用户可使用此按钮输入样品 ID 和评注（如果以前未输入的话）。系统的自动保存功能将保存“Comment”（评注）字段，并基于样品 ID（如果输入的话）生成新文件。

#### 注意

自动保存功能在保存当前文件时始终带有样品 ID 和时间日期戳。这可以防止用户将文件保存到以前的样品结果上。

**主页面：**将软件返回“Home”（主页面）屏幕。

**下一步：**使软件返回到开始采样屏幕，以测量下一个样品。

**重新分析：**允许对当前查看的数据执行其他方法计算。当无法重新采集样品数据时，此选项将很有用。每次重新分析都会生成新的数据文件。

### 注意

重新分析功能只能用于以与所选方法的光谱分辨率相同的分辨率采集的数据。光谱分辨率的差异会影响定量结果。

**导出：**允许将采集的数据导出到其他分析软件包。导出的文件将以与样品相同的文件名保存，只是扩展名不同，其扩展名为 \*.csv、\*.asp 或 \*.spc。它将保存到 Results 目录中。

**峰选取：**允许用户定义要在所检查的光谱上标记的峰。为此，可右键单击光谱并从菜单中选择“Peak Pick”（峰选取）。要在光谱上标记峰，可通过单击、拖动、再次单击来绘制阈值线。此操作可重复多次，以在光谱上定义多个峰。这些峰将打印在任何生成的报告中，并与数据文件一起保存。完成后，再次右键单击，从菜单中取消选择“Peak Pick”（峰选取）。

报告模板包含一个峰选取表。对于选定的峰，峰值将按其选中的顺序在表中列出。

将光谱导入 GRAMS

#### 将数据导入 SPC 格式：

- 1 在计算机上打开 GRAMS/AI，单击 **File**（文件）> **Import/Export**（导入/导出）。选择 ASCII 文件转换程序。然后，单击 **Import**（导入）按钮。
- 2 浏览驱动器和目录，找到要导入的文件。导入时，请记住，大多数文件转换程序都需要一个特定的输入文件扩展名。例如，ASCII 转换程序将查找具有 \*.ASP 文件扩展名的文件。（如果需要，可将文件类型更改为“所有文件 (\*.\*)”。）

按下 Ctrl 键的同时单击每个文件名，可选择多个文件。

单击 **Open**（打开）。“File Import”（文件导入）对话框显示要导入的文件的名称。（如果要导入多个文件，则将显示第一个文件的名称。）

- 3 如果需要，可对文件进行重命名。要将新创建的文件写入不同的目录，可在文件名前面加上完整的目录路径。否则，它将保存到与 ASP 文件相同的文件夹中。（您对输出目录必须具有读/写权限。）
- 4 从“Output File Type”（输出文件类型）列表中选择实验键扩展名。将其设置为默认扩展名 **Spectra (\*.spc)**。
- 5 选择“Output Rename”（输出重命名）选项。将其保留为 **Manual**（手动）。
- 6 单击 **Auto-open**（自动打开），以在 GRAMS/AI 中自动打开转换的文件。（自动打开功能不能打开多个文件。自动打开将应用于最后转换的文件。）
- 7 在“File Import”（文件导入）对话框中，单击 **OK**（确定）。

转换文件时，GRAMS 转换应用程序将读取要导入的文件，并将新文件写入磁盘。转换过程完成后，可使用“File”（文件）>“Open Trace”（打开谱图）命令将文件加载到 GRAMS/AI 中。

## 检查结果

转换进行时，将会显示一些消息或错误。如果转换许多文件，则可能会切换回 GRAMS/AI 或任何其他 Windows 程序，转换过程将继续。请注意，转换程序是名为 GRAMSC32.EXE 的另一个应用程序，可从 GRAMS/AI 单独从 Windows 启动。“File”（文件）>“Import/Export”（导入/导出）命令将使用一个特殊的命令行开关启动此应用程序，这会使它在转换之后自动退出。

**报告：**单击“Data Handling”（数据处理）按钮可保存报告。报告是 \*.PDF 文件，它详细说明了成份方法的成份结果，或定性检索方法的库检索结果。这些报告保存在 Results 目录中，可使用 MicroLab Lite 进行同步。

## 前一结果

MicroLab Mobile 的“Previous Results”（前一结果）允许在采集之后检查数据。“Previous results”（前一结果）位于“Home”（主页面）屏幕中的“Menu”（菜单）图标下方。在“Previous Results”（前一结果）屏幕上显示以前采集的样品的列表。要在列表中移动，请单击列表并拖动可在其中进行滚动。

**主页面：**将软件返回“Home”（主页面）屏幕。

**查看：**打开数据文件以进行查看。数据的显示方式与第 65 页的“检查结果”部分中所显示的“Results”（结果）屏幕相同。

**报告：**从“Menu”（菜单）按钮中，“Report”（报告）按钮将生成一个 PDF 报告，如第 31 页的“Report”（报告）页部分中指定的那样。

## MicroLab PC/MicroLab Lite

MicroLab PC/MicroLab Lite 提供的数据分析比 MicroLab Mobile 提供的更多。由于屏幕大小限制，光谱当前未显示在 MicroLab Mobile 软件中。MicroLab PC/MicroLab Lite 允许查看光谱，并检查用于成份计算的光谱区域。将数据传输到计算机（请参见第 40 页的“将已编辑的方法传输到 MicroLab Mobile”，传输结果与传输方法类似）后，可使用 MicroLab PC 或 MicroLab Lite 的“前一结果”功能检查这些数据。在 MicroLab PC“Home”（主页面）屏幕中，单击 **Previous Results**（前一结果）按钮将显示一个屏幕，其中列出所有样品文件名。

**主页面：**将软件返回“Home”（主页面）屏幕。

**导入：**允许对“Results”（结果）屏幕添加内容。

**报告：**如果在方法的“Reports”（报告）页面中分配了报告模板，则生成样品报告。请参见第 75 页以将报告模板分配给方法。

## 检查结果

**查看：**将软件返回“Sample Results”（样品结果）屏幕。总是可以使用 MicroLab 软件检查样品结果。

**重叠：**选择了多个光谱文件时，将显示“Overlay”（重叠）按钮。为了进行比较，它允许用户以重叠或分列格式查看最多 5 个样品光谱。文件必须具有相同的横坐标类型才能一起查看。

**导出：**允许将采集的数据导出到其他分析软件包。导出的文件将以与样品相同的文件名保存，只是扩展名不同，其扩展名为 \*.asp 或 \*.spc。它将保存到 Results 目录中。

**诊断信息：**显示连接到 MicroLab 软件的光谱仪的诊断信息。

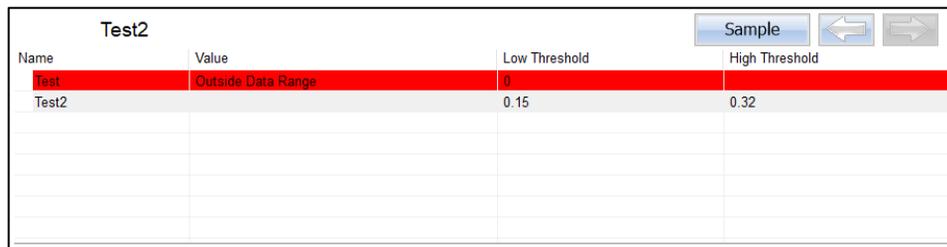
### 注意

上一结果部分所使用的软件将按照结果部分的操作方式进行操作。屏幕是相同的。操作员可使用这些功能检查数据。

## 结果屏幕

运行完成后，显示的结果屏幕将根据所选的方法类型而有所不同。

### 成份方法类型



Name	Value	Low Threshold	High Threshold
Test	Outside Data Range	0	
Test2		0.15	0.32

图 1. 成份方法结果屏幕。

为清晰起见，成份方法检索结果采用了颜色标记。指定范围之外的结果以红色突出显示，并移至列表顶部。

- 绿色结果表明样品在可调整的限值范围内。
- 黄色结果表明样品接近可接受的限值范围。
- 红色结果表明样品超出了可接受的限值范围。

结果表显示了样品名称、值以及高低阈值。

仅数据采集方法类型

## 检查结果

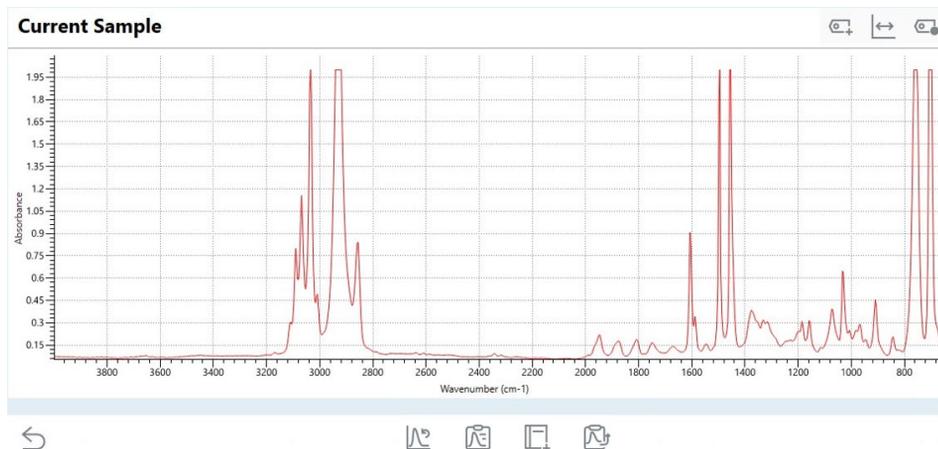


图 2. 仅数据采集方法类型结果屏幕。

默认的仅数据采集方法类型窗口显示了 MicroLab 结果界面（图 2）。结果窗口上方的工具栏包含可用于操作数据显示的各种图标。

- 选择  图标返回主页面屏幕。
- 选择  图标以从结果光谱中添加和删除数据标签。

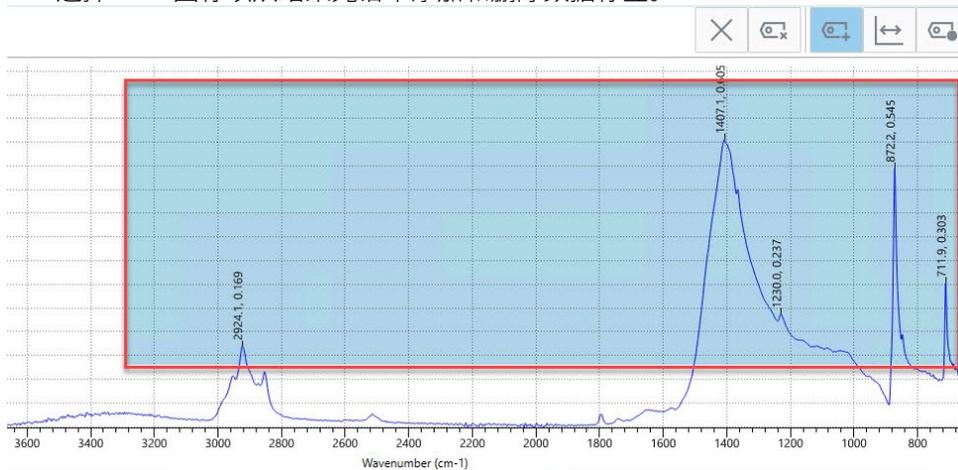


图 3. 峰选取数据标签功能。

- **标峰：**为方便起见，可通过选择 **Data Labels** （数据标签）图标并拖动选择以纳入任何相关峰，将数据标签同时添加到光谱的多个峰。这也可以通过键盘快捷键 **Ctrl+F** 启用。
- 选择  图标将光谱显示从默认视图更改为精简视图。当显示光谱的特定区域需要更高清晰度时，此功能可能有用。

## 检查结果

在精简视图中时：

- **Position**（位置）值定义了精简波数和正常波数（x 轴）之间的边界位置。
- **Factor**（因子）值定义了应用于选定波数（x 轴）位置左侧区域的精简系数。
- 选择  图标编辑应用的数据标签的可见性和格式。

数据显示下方的工具栏包含各种图标，可用于处理数据和浏览软件。

- 选择  图标重新分析数据（仅适用于以前的结果）。
- 选择  图标生成报告。
- 选择  图标将当前结果添加到谱库中。
- 选择  图标对当前报告应用电子签名。（仅限 21 CFR Part 11 模式）。
- 选择  图标导出结果文件。
- 选择  图标开启下一个样品的工作流程（仅作为测量 workflow 的一部分可用）。
- 选择  图标显示样品 ID 以及采集前附加的任何评注。

“经典视图”仅数据采集图形窗口

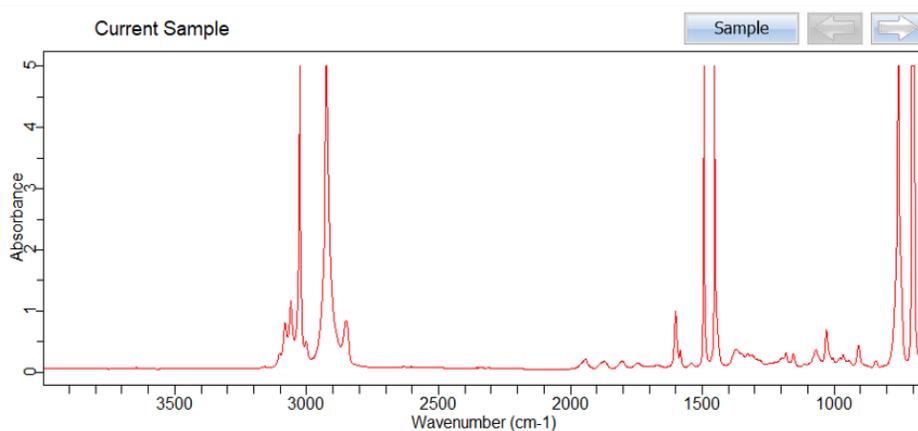


图 4. 仅数据采集经典视图方法类型结果屏幕。

当选择“Data Collect Only”（仅数据采集）方法类型时，数据采集图形窗口的“Classic View”（经典视图）提供了查看结果的替代方法。要启用/禁用此功能，请在方法编辑窗口中选中“Enable Classic View”（启用经典视图）复选框。

## 检查结果

### 定性检索方法类型

Results:					
Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
	1	0.18933	TIC TAC (523)		Table Salt
	2	0.26196	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (280)		Natural-Rubber - Blair Run#5
	3	0.30146	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (139)		Gasket-SBR 10053333 Run#4 edge
	4	0.36079	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (278)		Natural-Rubber - Blair Run#3
	5	0.38287	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (279)		Natural-Rubber - Blair Run#4
	6	0.38513	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (138)		Gasket-SBR 10053333 Run#3 edge
	7	0.42246	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (258)		Natural-PureGum-Rubber - US Flex Run#2
	8	0.44293	Agilent Elastomer Oring and Seal Handheld ATR Library (347)		Neoprene U S Flexible Run#3

**Rank 10**

图 5. 定性检索方法结果屏幕。

为了清晰起见，定性检索结果采用颜色标记。

- 绿色结果表示谱库匹配低于质量边际阈值。
- 橙色结果表示谱库匹配介于质量边际阈值和质量临界阈值之间。
- 红色结果表示谱库匹配低于质量临界阈值。

关于设置颜色编码阈值的更多信息，请参见第 23 页的方法部分。

### 查看光谱区域

MicroLab 软件的一个独特功能是，允许用户比较特定区域中的样品。只需双击各个参数。参考光谱将与样品光谱一起显示。使用右上角的向左和向右箭头可在不同类别中移动。可以确定在“Overlay”（重叠）或“Stacked”（分列）视图中比较样品和参考光谱。

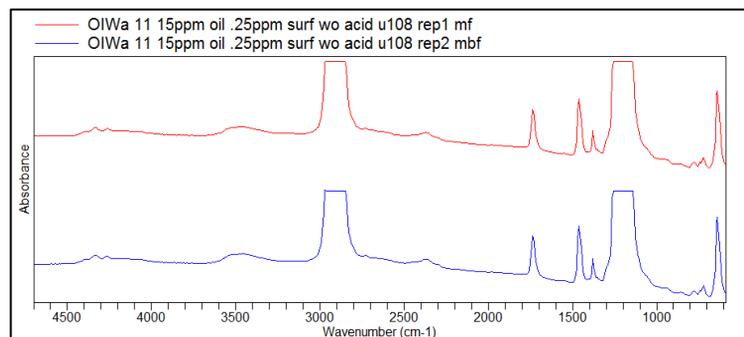


图 6. “Stacked”（分列）选项示例

## 检查结果

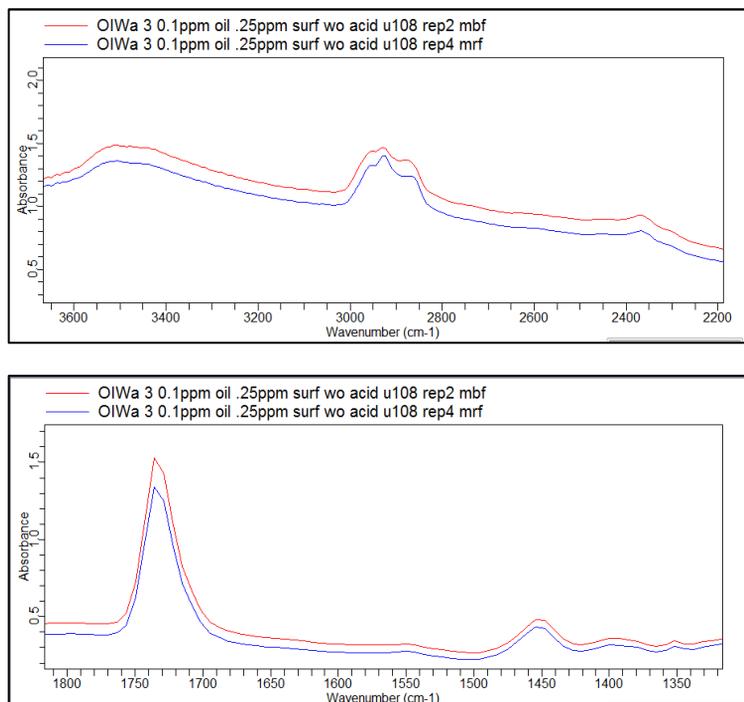


图 7. “Overlay”（重叠）选项示例

### 注意

要在类别之间切换，可右键单击并向下滚动到任一选项。屏幕将反应您指定的视图。

### 详细信息

单击 **Details**（详细信息）可查看样品光谱。MicroLab 软件将显示样品光谱和参考光谱。

当选择定性检索时，光谱下方的表格列出了按质量排序的谱库匹配结果。

此外，还会显示以下选项卡：

- **文本查找**：允许通过名称或 CAS 号搜索特定的谱库条目。选择后，所选谱库条目光谱将与“Details”（详细信息）选项卡中的样品光谱进行对比。此条目也将出现在谱库质量匹配列表的顶部。
- **残余**：将当前分析的样品显示为选定谱库匹配结果的残余。

## 检查结果

### 注意

可以放大光谱的任何部分。使用鼠标或触摸板，在图形上单击并突出显示所需的部分。屏幕将自动变为显示放大的部分。

要返回完整的光谱，请右键单击一个图形并选择“Undo Zoom”（撤消缩放）。

---

### 参数

单击 **Params**（参数）查看以下选项卡：

- **采集参数**：显示方法参数的汇总。
- **分析参数**：显示所采集数据的分析的汇总。

### 数据处理

单击 **Data Handling**（数据处理）可访问以下功能。

**报告**：如果在方法的“Reports”（报告）页面中分配了报告模板，则生成样品报告。该报告总结了预设参数，并以相关单位显示与参考油品或 ASTM（美国材料与试验协会）方法（如适用）进行比较的结果。请参见第 75 页，了解为方法分配报告模板的相关信息。

**添加到库**：允许将样品光谱添加到适当的库。单击“Browse”（浏览）以访问库。将显示一个列表，其中显示可用的库。

“Add To Library”（添加到库）将完成此过程。添加到用户的库，可使软件确定后续样品是否类似。

**导出**：允许将采集的数据导出到其他分析软件包。

**重新分析**：允许对当前查看的数据执行其他方法计算。当无法重新采集样品数据时，此选项将很有用。

### 注意

重新分析功能只能用于以与所选方法的光谱分辨率相同的分辨率采集的数据。光谱分辨率的差异会影响定量结果。

---

### 电子签名

此功能仅在 21 CFR Part 11 环境中可用。单击“E-sign”（电子签名）以应用电子签名。有关详细信息，请参阅第 57 页。

### 21 CFR Part 11

显示当运行或编辑方法或结果时所执行操作的列表。有关详细信息，请参阅第 58 页。

## 检查结果

### 将光谱导入 GRAMS

#### 将数据导入 SPC 格式：

- 1 在计算机上打开 GRAMS/AI，单击 **File**（文件）> **Import/Export**（导入/导出）。选择 ASCII 文件转换程序。然后，单击 **Import**（导入）按钮。
- 2 浏览驱动器和目录，找到要导入的文件。导入时，请记住，大多数文件转换程序都需要一个特定的输入文件扩展名。例如，ASCII 转换程序将查找具有 \*.ASP 扩展名的文件。（如果需要，可将文件类型更改为“所有文件 (\*.\*)”。）

按下 Ctrl 键的同时单击每个文件名，可选择多个文件。

单击 **Open**（打开）。“File Import”（文件导入）对话框显示要导入的文件的名称。（如果要导入多个文件，则将显示第一个文件的名称。）

- 3 如果需要，可对文件进行重命名。要将新创建的文件写入不同的目录，可在文件名前面加上完整的目录路径。否则，它将保存到与 ASP 文件相同的文件夹中。（您对输出目录必须具有读/写权限。）
- 4 从“Output File Type”（输出文件类型）列表中选择实验键扩展名。将其设置为默认扩展名 **Spectra (\*.spc)**。
- 5 选择“Output Rename”（输出重命名）选项。将其保留为 **Manual**（手动）。
- 6 单击 **Auto-open**（自动打开），以在 GRAMS/AI 中自动打开转换的文件。（自动打开功能不能打开多个文件。自动打开将应用于最后转换的文件。）
- 7 在“File Import”（文件导入）对话框中，单击 **OK**（确定）。

转换文件时，GRAMS 转换应用程序将读取要导入的文件，并将新文件写入磁盘。转换过程完成后，可使用“File”（文件）>“Open Trace”（打开谱图）命令将文件加载到 GRAMS/AI 中。

转换进行时，将会显示一些消息或错误。如果转换许多文件，则可能会切换回 GRAMS/AI 或任何其他 Windows 程序，转换过程将继续。请注意，转换程序实际上是名为 GRAMSC32.EXE 的另一个应用程序，可从 GRAMS/AI 单独从 Windows 启动。“File”（文件）>“Import/Export”（导入/导出）命令将使用一个特殊的命令行开关启动此应用程序，这会使它在转换之后自动退出。

**完成：**返回到提示您清洁采样区域和采样设备的屏幕。这将使光谱仪准备好进行下一次采样。“Done”（完成）使您可以运行多个样品而无需返回到“Home”（主页面）屏幕。

#### 注意

该选项不允许更改单位信息。如果您要从其他机器运行样品，则必须返回到“Home”（主页面）屏幕。

#### 注意

如果您要停止分析，可单击“Home”（主页面）按钮。

## MicroLab 报告创建

### 将报告模板分配到方法

通过 MicroLab 用户可从报告模板列表中进行选择，并将其与特定方法相关联。当根据软件中的方法类型或特定功能创建报告时，将指定每个报告模板。

#### 将报告模板分配到方法：

- 1 从 **Home** (主页面) 屏幕中选择 **Methods** (方法)，然后选择需要报告模板的方法。选择 **Edit** (编辑)。
- 2 从“Method” (方法) 选项卡中，选择 **Reports** (报告)。
- 3 从 **Available Report Templates** (可用报告模板) 列表中，选择要与方法关联的一个或多个模板。然后，单击 **Add** (添加) 按钮。
- 4 如果需要自动报告生成，则选中标有 **Auto-Report All Selected Reports** (自动生成所有选择的报告) 复选框。这会在数据分析结束时自动生成所有相关报告。
- 5 要移除不需要的报告，只需选择不需要的报告并单击 **Remove** (移除) 按钮。
- 6 进行所有更改后，单击 **Save** (保存) 按钮以保存方法，或单击 **Save As** (另存为) 将方法另存为其他方法名称。

### 创建新的报告模板

安装 MicroLab PC 后，还将向 Microsoft Office 的 Word 平台安装一个加载项。该加载项允许用户自定义或创建报告模板，以便在 MicroLab 软件平台中使用。

#### 注意

仅 Microsoft Word 2010 或更高版本的 32 位安装包支持此功能。

使用此功能需要本手册中可能并不包含的 Microsoft Word 知识。

#### 创建新的报告模板：

- 1 打开 Microsoft Word 并创建一个新文档。
- 2 创建此文档后，导航到“View” (视图) 菜单/选项卡。
- 3 一个新功能已添加到“View” (视图) 菜单 – MicroLab 报告。它包括两个按钮：“Report Designer” (报告设计器) 和“Perform Merge” (执行合并)。
- 4 开始创建文档：选择“Report Designer” (报告设计器) 功能。与 MicroLab 关联的架构将作为菜单出现在屏幕右侧。

## 检查结果

- 5 确定需要的报告类型，并在“Report Type”（报告类型）下选择它。报告类型包括：
  - a 成份报告：仅当方法编辑器中“Method”（方法）指定为成份方法时才会仅显示此报告模板。
  - b 定性检索：仅当方法编辑器中“Method”（方法）指定为定性检索方法时才会仅显示此报告模板。
  - c 仅数据采集：仅当方法编辑器中“Method”（方法）指定为数据采集方法时才会仅显示此报告模板。
  - d 方法报告：用于打印方法参数的系统级报告。
  - e 日志报告：用于打印系统日志文件的系统级报告。
- 6 在 MicroLab 报告参数块中指定报告模板名称。
- 7 “Report”（报告）字段包含与 MicroLab 软件关联的参数字段。这些字段可以针对用户位于不同的类别下，从结果到方法参数不等。用户应该花时间熟悉这些不同的类别。请务必注意，每种类型的方法具有其自己的方法类别和结果类别。例如，定性检索方法具有两个与之相关的类别 –“Hit List”（结果清单）和“Method Library”（方法库）。特定于这种类型方法的信息及其结果文件将位于此处。而更普遍的信息只会位于结果或方法类别中。
- 8 要将字段添加到报告中，只需单击所需字段并将其拖至报告模板页面。
  - a 添加的字段将只显示所请求的信息。由于这是在 Word 中，因此用户可以随时添加文本来标识字段或标签材料。
  - b 不建议使用预定义表以外的表，因为这会导致报告中出错。
- 9 “Component Reports”（成份报告）和“Search Hit Lists”（检索结果清单）的预定义表已进行配置，用户只需单击并拖至报告模板即可。
- 10 任何时候，要预览报告的显示效果，请选择位于“MicroLab Reporting”（MicroLab 报告）菜单底部的“Preview Rep”（预览报告）按钮。
  - a 这也可以通过“Perform Merge”（执行合并）功能来实现。
  - b 最好是保存报告并对分配了报告的方法运行真实数据，来确定报告是否显示所有必需的值。

## 检查结果

- 11 报告经过适当编辑后，应将文件保存到 MicroLab 对应的报告模板文件夹中。此文件夹通常位于 C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\rptTemplates 中。
  - a 以 docx 文件格式保存该文件。
- 12 安装软件时提供了多个报告模板。这些报告模板可以编辑。但是，强烈建议用户使用 Word 的“Save As”（另存为）功能将编辑过的报告模板另存为不同的文件名，这样原始模板保持不变。

## 检查结果

本页空白。

## 9

# 更新和故障排除

固件更新	79
故障排除	79

## 固件更新

Agilent 会不时地发布固件（包含在 FTIR 光谱仪中的软件）更新，以修复问题或扩展系统提供的功能。固件更新作为 Microsoft Windows 可执行文件的形式提供。这些文件可以直接提供给客户，也可以作为 Agilent MicroLab PC 应用程序更新的一部分一起提供。

对于 Agilent 4300 手持式 FTIR 固件，在 MicroLab Mobile 软件中，更新是以单独的可执行文件形式提供和安装。请参见系统随附的相应仪器操作手册，或与安捷伦联系以获取更多信息。

## 故障排除

### 初始化失败

如果看到此错误消息：

#### **Instrument failed to initialize**

Instrument returned error code: -2. (仪器初始化失败。仪器返回错误代码：-2。)

应用程序将退出；然后关闭再打开设备电源并重新启动应用程序。

打开软件后，检查光谱仪是否已通电，并通过 USB 电缆或蓝牙（如果适用）连接到控制 PC。检查仪器是否已通电（显示绿色 LED）。如果通过 MicroLab PC 控制 4300 FTIR，请确保仪器处于“Pass-Through”（中间）模式。如果同步 4300 FTIR，请确保仪器通过 USB 连接到 PC，处于“Pass-Through”（中间）模式，并且 MicroLab Lite 软件正在使用。

### 报告模板创建失败

有关创建或自定义报告模板的要求和步骤的更多信息，请参见第 75 页。

## 更新和故障排除

### 增益值更改未保存

如果未保存更新后的增益值，且仪器状态指示灯在激活方法或启动数据采集时从绿色变为黄色，请检查以下各项：

- 在 MicroLab PC/MicroLab Mobile 软件中，在 **Methods**（方法）下 > 选择方法 > 单击 **Edit**（编辑）> 导航至 **Instrument**（仪器）页面，确保“Set Method Gain”（设置方法增益）复选框没有选中。
- 在 **Diagnostics**（诊断）页面上（在 MicroLab OQ 中，或者通过 MicroLab PC/MicroLab Mobile 中的 **Advanced Features**（高级功能））> 单击 **Gain Adjust**（增益调整）> 调整增益值 > 单击 **Set Instrument Default Gain**（设置仪器默认增益值），将该增益值保存为仪器默认值。  
选择“Set Method Gain”（设置方法增益值）则仅会将增益值保存到所使用的方法中。

### 数据库访问问题

如果（在 21 CFR Part 11 环境中）安装 SDA 之后，尝试连接到服务器时看到此错误消息：

#### **错误：服务器连接错误**

对于安装方案 1，请重新启动 PC 并再次打开 SDA 以成功连接服务器。

对于安装方案 2 和 3，请确保可在网络上看见 PC，禁用所有防火墙并重新启动 PC。尝试再次连接到 SDA 服务器。

有关更多信息，请参见 21 CFR Part 11 安装说明。

如果在 MicroLab PC 或 MicroLab OQ 中运行系统检查测试，请确保用户已分配到具有系统检查数据库和公共数据库访问权限的组和项目中。有关更多信息，请参见 SCM 用户指南。

## Appendix A: MicroLab 文件类型

下表说明了 MicroLab 使用和接受的各种文件类型。

表 1 MicroLab 文件类型

文件类型	文件扩展名	备注
Agilent 谱库文件	*.a2l *.a2x *.lib	在 MicroLab PC/Lite 中创建谱库时，将生成这三种文件并存储在一起。导出谱库时，这三种文件必须一起导出。 <ul style="list-style-type: none"><li>• *.a2l 文件包含实际的谱库内容；</li><li>• *.a2x 文件包含关联的空白结果；</li><li>• *.lib 文件包含用于识别的谱库标题。</li></ul>
Agilent 方法文件	*.a2m	方法文件用于存储以下其中一种方法类型： <ul style="list-style-type: none"><li>• 仅数据采集</li><li>• 定性（谱库）搜索</li><li>• 成份类型方法</li></ul>
Agilent 结果文件	*.a2r	这是一种光谱文件格式，根据所选的方法类型，生成三种可能的结果文件子类型中的一种： <ul style="list-style-type: none"><li>• 光谱结果</li><li>• 具有归一化光谱的谱库结果</li><li>• 成份结果和光谱</li></ul>
Agilent 安全设置文件	*.a2s	此文件存储用户登录设置和密码。此为内部文件，不得移动或删除。
MicroLab 兼容文件类型		
光谱文件	*.asp	MicroLab PC/Lite 可以查看和导入此光谱文件类型和/或自动导出此文件类型。
Thermo Galactic / GRAMS	*.spc	MicroLab PC/Lite 可以查看和导入此光谱文件类型和/或自动导出此文件类型。
GRAMS PLS1 文本模型	*.txt	GRAMS 模型说明的文本格式已应用到成份方法中。在建立适当的模型后，此文件由 GRAMS IQ 软件生成。
Eigen 向量模型	*.xml	MicroLab PC/Lite 以 XML 文件格式在成份方法中生成定量结果。仅适用于 PLS1 多元模型类型。
Agilent MicroLab 定量模型	*.mqm	由 MicroLab Quant 生成，并且可供 MicroLab Quant/PC/Lite 在成份方法中使用，以生成数值结果。
MicroLab Quant 项目	*.mqp	用于保存 MicroLab Quant 工作流程，仅适用于 MicroLab Quant。
Agilent MicroLab Expert 定量模型文件	*.a2q	此文件用于 MicroLab PC，仅可由 MicroLab Expert 软件包 v1.1 及更高版本生成。

## 附录

本页空白。



# 在本书中

本手册介绍以下内容：

- 简介
- MicroLab Mobile
- MicroLab PC
- MicroLab Quant
- MicroLab OQ
- 符合 21 CFR Part 11 的 MicroLab
- 测量样品
- 检查结果
- 更新和故障排除

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

© Agilent Technologies, Inc. 2024

第 11 版，2024 年 10 月



0020-410

