



OpenLab ChemStation

概念和工作流程

声明

文档信息

文档编号: D0013748zh Rev. B
版本: 04/2025

版权所有

© Agilent Technologies, Inc.
2010-2025

根据美国和国际版权法, 未经 Agilent Technologies, Inc. 事先同意和书面许可, 不得以任何形式、任何方式 (包括存储为电子版、修改或翻译成外文) 复制本手册的任何部分。

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germany

软件版本

本指南适用于 Agilent OpenLab
ChemStation LTS 01.11 Update 07 或
更高版本

担保说明

本文档内容按“原样”提供, 在将来的版本中如有更改, 恕不另行通知。此外, 在适用法律允许的最大范围内, Agilent 对本手册以及此处包含的任何信息不作任何明示或暗示担保, 包括但不限于适销性和针对某一特殊用途的适用性的暗示担保。对于因提供、使用或执行本手册或此处包含的任何信息而产生的错误, 或造成的偶然或必然的损失, Agilent 不承担任何责任。如果 Agilent 与用户签订了单独的书面协议, 其中涉及本文档内容的担保条款与这些条款冲突, 则以协议中的担保条款为准。

技术许可

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

权力限制说明

美国政府受限权利。授予联邦政府的软件和技术数据权利仅包括通常提供给最终用户的那些权利。Agilent 根据 FAR12.211 (技术数据) 和 12.212 (计算机软件) 和 (对于国防部) DFARS252.227-7015 (技术数据一商品) 以及 DFARS 227.7202-3 (商业计算机软件或计算机软件文档中的权利) 来提供软件和技术数据方面的此常规商业许可。

安全声明

小心

小心提示表示危险。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。不要忽视小心提示, 直到完全理解和符合所指出的条件。

警告

“警告”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, 可能会导致人身伤害或死亡。除非已完全理解并符合所指出的条件, 否则请不要忽视**“警告”**声明而继续进行操作。

内容提要...

Agilent OpenLab ChemStation 通过附加软件和高级方法开发为 Agilent GC、LC 和 CE 仪器的高级功能和工作流程提供支持，从而为研究和方法开发实验室提供极大的灵活性。本指南详细介绍了 OpenLab ChemStation 的所有概念。

本手册还会说明如何高效地使用 ChemStation 中的数据收集、分析和报告功能来提高实验室的生产率。

表 1 本文中使用的术语和缩写

术语	描述
AIC	Agilent 的分析仪器控制器
ChemStation	OpenLab ChemStation
控制面板	OpenLab 控制面板
Microsoft 控制面板	Microsoft Windows 操作系统的组成部分
LTS	长期支持
单个运行	通过运行方法或排队方法触发的单个样品的单独分析。单个运行也可以作为序列表中定义的一系列方法运行提交。

1 ChemStation 的基本概念

本章介绍 ChemStation 的操作原理，包括远程控制、图形界面和 ChemStation 视图。

2 使用方法

方法是 OpenLab ChemStation 工作方式的重要组成部分。OpenLab ChemStation 是一个色谱数据系统，具有很大的方法开发灵活性。本章将详细介绍方法的概念。

3 数据采集

OpenLab ChemStation 对 Agilent LC、GC、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统提供无缝仪器控制。其通过附加软件为 Agilent GC 和 LC 仪器的高级功能和 workflows 提供支持，并为研究和方法开发实验室提供灵活性。本章介绍了分析数据采集过程。

4 自动分析/序列

本章介绍了自动分析的概念。它阐述了在 ChemStation 中如何使用序列，运行序列时会发生什么以及如何自定义序列。

5 运行控制

本章节会解释“运行队列和队列计划”的概念。解释“运行队列”中如何添加单个样品、序列、暂停或命令。还会描述命令日程表，您可从中安排事件来确保实验室日常工作更加简单。

6 数据分析和查看概念

您可以使用 ChemStation 分析和查看数据。本章概述了 ChemStation 数据分析和数据检查选项。

7 校正

本章介绍校正的概念。

8 报告

本章介绍了智能报告和经典报告的概念。

9 CE 特有的概念和功能

本章只与使用 ChemStation 控制 CE 仪器有关。

目录

1	ChemStation 的基本概念	8
	简介	9
	关于 ChemStation 软件	10
	ChemStation 数据结构	35
	远程仪器控制	38
2	使用方法	41
	方法是什么?	42
	方法组件	44
	创建方法	46
	编辑方法	47
	管理方法	51
	运行方法时将发生什么?	58
3	数据采集	65
	什么是数据采集?	66
	在线监视器	68
	工作日志	68
	状态信息	69
	规则和警报	71
4	自动分析/序列	72
	什么是自动分析?	74
	什么是序列和序列模板?	74
	序列参数	75
	图示样品录入	77
	序列表	80
	简易序列	84
	使用序列 (序列和序列模板)	88
	序列日志文件	98

序列运行时会发生什么?	98
序列数据文件结构	100
后序列操作	110
自动重新校正	111
指定重新校正	112
序列类型	114
5 运行控制	128
关于运行队列	129
使用运行队列	130
使用队列计划	133
安排命令	134
6 数据分析和查看概念	136
数据分析	137
查看	152
7 校正	155
术语定义	156
校正类型	157
校正表	163
峰加和	164
化合物组	164
未知样品	165
重新校正	166
8 报告	169
报告是什么?	170
经典和智能报告	174

智能报告	175
经典报告	182
9 CE 特有的概念和功能	188
方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能	189
峰顶类型	191
校正类型	192
CE-MS	194
不同 CE 模式方法子目录	195

1 ChemStation 的基本概念

简介	9
关于 ChemStation 软件	10
数据完整性	10
中央数据存储	10
方法和序列	11
系统配置	11
采集方法查看器	11
方法下载选项	12
数据模型	12
文件命名规则	13
数据文件	16
软件的用户界面	17
数据采集	19
保留时间锁定	19
数据分析	20
报告	23
数据导出和导入	23
自定义	24
自动分析	26
运行队列和队列计划	27
样品位置	28
良好的实验室规范	29
制备型液相色谱	32
ChemStation 数据结构	35
远程仪器控制	38

本章介绍 ChemStation 的操作原理，包括远程控制、图形界面和 ChemStation 视图。

简介

ChemStation 对 Agilent 的 LC、GC、CE、CE-MS 和 LC-MS 仪器提供全面的仪器控制。它提供了一系列工具，允许用户使用多技术、多供应商仪器控制系统执行数据采集、分析和解释。该色谱软件从 OpenLab 控制面板启动；在此控制面板中可访问 OpenLab Shared Services 提供的所有功能。

关于 ChemStation 软件

数据完整性

ChemStation 文件（例如数据、方法或序列）存储于多个本地文件夹中。为确保数据完整性，ChemStation 提供“安全文件 I/O”功能。如果您启用该功能，将无法从 ChemStation 之外对所有文件夹进行修改，也无法在**打开**或**另存为**对话框中进行更改。

更多详细信息，请参见《OpenLab ChemStation 配置指南》(CDS_CS_configure.pdf) 中的“使用安全文件 I/O 保护文件夹”一章。

中央数据存储

中央数据存储系统可保存所有种类的电子数据，而与其专用数据格式无关。ChemStation 原始数据（以及其他人工可读文档，例如工作簿）与**元数据**存储在一起；这样就能非常轻松地检索数据。ChemStation 方法、序列模板、报告模板和数据文件（序列和单个运行）可以上传到中央数据存储，并可以在需要时下载到 ChemStation。

Agilent 为中央数据存储提供两套系统：

- **OpenLab Server** 作为单服务器解决方案，可为不超过 30 台仪器的中小型实验室提供中央数据管理。它提供了支持监管合规所必需的安全性。有关详细信息请参见 OpenLab 服务器文档。
- **OpenLab ECM** 作为单服务器解决方案或多服务器分布式解决方案，用于为拥有不超过 100 台仪器的实验室提供所需的全面数据管理。它还提供了支持监管合规所必需的安全性。有关详细信息请参见 OpenLab ECM 文档。

有关结合使用 ChemStation 与中央数据存储的概念的详细信息，请参见《使用 Content Management 系统的 OpenLab ChemStation - 管理员指南》。

方法和序列

分析方法详细介绍了如何进行某个特定的分离，包括用于仪器控制、数据采集及评估（包括积分、定量和报告）的所有参数。可以将系统设置为使用不同的方法来采集多个样品的数据。此类操作的控制文件称为序列。其中包含各个样品的信息、对相应方法的引用、自动重新校正说明，以及序列中所有运行总结报告的报告说明。有关方法和序列的详细信息，请参见第 72 页的 [自动分析/序列](#)及在线帮助系统。

系统配置

仪器系统的配置可以通过 OpenLab 控制面板启动配置编辑器程序来完成。该程序允许您为 ChemStation 软件定义仪器、仪器的 LAN 地址、数据目录、序列和方法以及初始屏幕大小。此外，您还可以激活或禁用智能报告和 3D 光谱评估，也可以定义方法下载选项。

采集方法查看器

使用采集方法查看器，除了当前仪器的配置，您可检查方法中存储的采集参数。您既可以选择将该方法的初始版本应用到仪器，也可以根据当前仪器配置解决该方法的问题。

方法下载选项

如果从上一个仪器会话中最后选择的方法与当前仪器设置不同，可通过方法下载选项定义 ChemStation 的行为。您可以选择以下选项：

- **下载方法到仪器**

将最后一次选择的方法下载到仪器。仪器设置将被覆盖。此行为对应于 ChemStation C.01.03 版或更低版本。

- **从仪器上传**

仪器设置上传到最后一次选择的方法中。该方法将被标记为已修改。

- **从仪器新建方法**

仪器设置上传到新创建的 ChemStation 方法中。

- **总是要求用户选择一个选项**

在 ChemStation 启动时会显示一个对话框，您可以从中选择上述选项。在此对话框中，您还可以比较每个模块的设置与最后一次选择的方法中的设置。

比较它们的差异时，您可以显示完整的设置列表，也可以仅显示差异。

数据模型

ChemStation 软件是围绕基于内存结构（称为寄存器）的数据模型而设计的。寄存器为多功能结构，可以保存二维（如时间/强度）和三维（如时间/强度/波长）信息的分析数据和信息。

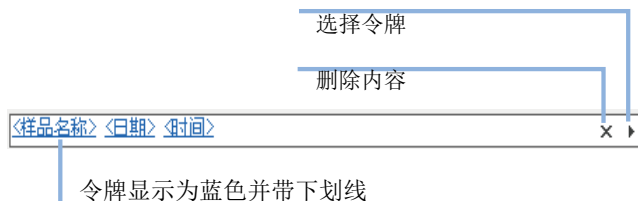
ChemStation 提供了一系列命令和功能，用于构建、扩展、提取和编辑（不会更改原始数据）寄存器。有关详细信息，请参见 ChemStation **帮助 > 命令**下的在线参考资料。

文件命名规则

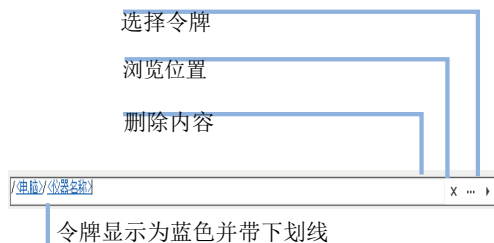
文件名和令牌

在大部分输入路径名或文件名的 ChemStation 对话框中，可以使用令牌动态地生成合适的名称。根据在指定的对话框中设置的文件名或路径名，会有不同的令牌可用。在下列屏幕中，使用多个令牌作为示例。

文件名控件的外观如下：



路径名控件的外观如下：



在每个相应的对话框中，还将另外显示所得的文件名或路径名。

对于这类字段，您可以选择下列选项：

- 添加静态文本。
- 单击箭头按钮 (▶) 以从列表中选择令牌。
按下箭头键以从列表中选择令牌。
- 右键单击其中一个已经使用的令牌，以将其替换为从列表选择的令牌。
- 单击 X 按钮以删除字段中当前的内容。
- 单击带三个点的按钮 (...) 以浏览所需的路径。

命名规则

确保您只将以下字符用于文件名或目录名、序列模板名称或 ChemStation 方法名称等 ChemStation 项目：

A-Z、a-z、0-9、_（下划线）、-（连字符）

检查名称的前面或后面是否有空格。这些位置不允许有空格，但很容易被忽略。

注意

如果您使用令牌，则会根据仪器名称、操作员姓名或样品名称等信息自动创建文件名或目录名。确保这些名称遵循相同的命名规则。

注意

自动创建的文件名可能包含特殊字符，例如前后进样器位置。这些字符可能会被本地化。即使这些字符不属于上述字符，它们也是有效的。

不能将以下保留的设备名用作文件名。也不能在这些名称后附加扩展名（例如 Nul.txt）：

- CON、PRN、AUX、NUL
- COMx（其中 x 是一个从 1 到 9 的数字）
- LPT1x（其中 x 是一个从 1 到 9 的数字）

注意

使用英文、日文和中文版操作系统来检验命名规则。Agilent 无法对其他非英文版操作系统提供支持声明。

ChemStation 文件名和子目录的最大长度

下表列出了 Agilent ChemStation 对文件名和子目录的说明：

表 2 ChemStation 文件名和子目录的最大长度

数据文件/子目录/路径	最大输入长度	自动添加	示例
单个样品的数据文件名称	60	.D	Demodad.d
序列中带有前缀/计数器的数据文件名称	60	.D	longname000001.d
序列中使用命名模式的数据文件名称	60	.D	05-1-sampleA.d
方法	60	.M	def_lc.m
序列		.S	def_lc.s
谱库		.UVL	demodad.uvl
自定义报告模板		.FRP	areapct.frp
数据文件子目录	40		demo (在样品信息中)
数据序列子目录	40		demo (在序列参数中)
数据路径	149		C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\data
方法路径			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\data
序列路径			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\data
谱库路径			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\methods
自定义报告模板路径			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\sequence
			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\speclib
			C:\Users\Public\Documents\ChemStation\repstyle

所有 ChemStation 工作日志都以扩展格式报告系统信息，并将信息字符串打印到多行。某些报告（例如序列报告）可能会将文件名截断以将所有信息放入报告模板。

Windows 操作系统规定所有路径的字符限制为 260。操作系统使用的某些字符不可见。因此您需要使用较短的名称（前提是符合上述所有规格）。

数据文件

数据文件包含一组文件，默认情况下，这组文件带有数据文件名和 .D 扩展名，并作为子目录存储在 DATA 目录下或此文件夹的子目录下。可以使用最多 42 个字符（包括扩展名）手动定义数据文件名。此目录中的每个文件均遵守命名规则（请参见第 13 页的 [文件命名规则](#)）。可以使用**首选项**设置添加其他数据目录。

表 3 数据文件

名称	说明
*.CH	色谱/电泳谱的信号数据文件。该文件名由模块或检测器类型、模块号及信号或通道标识所构成。例如 ADC1A.CH，其中 ADC 为模块类型，1 为模块号，A 为信号标识符，CH 为色谱扩展名。
*.UV	紫外光谱数据文件。该文件名由检测器类型及设备号构成（仅用于二极管阵列检测器及荧光检测器）。
*.ms	LCMS 质谱数据文件
REPORT.TXT, REPORT.PDF	相同信号数据文件的报告数据文件。 注意：如果您使用专有 PDF 文件名，PDF 文件名可能会有所不同。
Acq.MACAML	该文件包含有关数据采集时使用的方法的信息。该信息以 ACAML 格式保存。ACAML 文件供智能报告使用。
Sequence.ACAM_	该文件包含单一进样结果。该信息以 ACAML 格式保存。ACAML 文件供智能报告使用。
SAMPLE.MAC 或 SAMPLE.XML	该文件用于存储样品值
SAMPLE.MAC.BAK 或 SAMPLE.XML.BAK	备份原始 sample.mac 文件。在重新处理过程中，首次更新样品参数（如乘积因子）时会创建 .bac 文件。该文件存储在采集过程中使用的原始样品值。
RUN.LOG	运行过程中已生成的工作日志条目。该工作日志保存了分析记录。所有错误消息及 ChemStation 的重要状态变化均显示在工作日志中。
LCDIAG.REG	仅用于 LC。包含仪器曲线（梯度、温度和压力等）、进样量及溶剂的说明。

表 3 数据文件

名称	说明
ACQRES.REG	包含色谱柱的信息。对于 GC，还包括进样量。
GLPSAVE.REG	在指定了“保存 GLP 数据”时为数据文件的一部分。
M_INTEV.REG	包含手动积分事件。

软件的用户界面

ChemStation 的用户界面被设计成多个视图，这些视图根据分析任务的不同将软件功能分组。所有软件配置中均包含以下标准视图：

- 用于控制和采集仪器数据的“方法和运行控制”视图，
- 用于重新处理已采集的数据的“数据分析”视图，
- 用于通过特定的报告模板对数据进行查看的“查看”视图，
- 设计特定报告格式的“报告版面”视图，

如果订购了其他数据处理模块或者用于仪器诊断和认证过程的软件功能，也会显示其他视图。

导航窗格中包含导航按钮，使用此按钮可以在 ChemStation 视图和基于树状的 ChemStation 资源管理器之间快速切换。ChemStation 资源管理器的目录取决于视图，从中可以访问不同的 ChemStation 元素。

每个视图由一组标准用户要素（包括菜单和工具栏）组成。通过标准工具栏可以很快地获得某些常用的系统说明信息，例如方法和序列。另外，**方法和运行控制**视图还包含一个系统状态条、一个样品信息区域（可配置用于单个运行或自动运行）和一个适用于 GC、CE 和 LC 配置的图解式仪器界面图。图解式仪器界面视图使用热点来快速获得每个分析过程的仪器参数和动画显示分析过程中的运行状态。不需要图解式仪器视图时可以将其关闭，以节省内存和其他 Windows 资源。此视图中集成的**运行队列**显示为仪器安排的所有序列、样品和命令，并可用于组织和处理此工作量（请参见第 130 页的 [使用运行队列](#)）。

如果安装了相应模块，**数据分析**视图可以将标准工具栏扩展为特定的数据分析模式，包括重新计算、数据再处理、积分、校正、报告、批注、信号比较及其他专用模式。每种单独的数据分析模式均有相应的模式专用工具组来支持。

若可为仪器选择“智能报告”，则**查看**视图可用。该视图可以灵活的方式对数据进行查看。针对查看操作可以选择任意的数据文件组合，并针对所选的数据应用任何的现有报告模板。所选择的报告模板可定义数据显示的方式，以及生成报告所包含的信息类型。工具栏提供用于打印和导出生成报告的相关功能。

报告版面设计视图用于定义特定的报告模板的布局或报告格式。该任务同样需用一组专用工具栏来实现。视图中显示的“报告模板”编辑器的类型取决于为仪器配置的报告类型。您可以使用标准报告或智能报告（请参见第 169 页的**报告**）。

导航窗格

所有 ChemStation 视图的左侧都有一个导航窗格，其作用是加快多个重要 ChemStation 元素的访问速度，以及在视图之间实现快速切换。导航窗格包含基于树状的 ChemStation 资源管理器和可配置按钮区域。导航窗格还包含自动隐藏功能（该功能可保证 ChemStation 工作区不受到破）和调整导航按钮区域的大小及重新排列等标准功能。

导航按钮

“导航按钮”允许通过单击特定的导航按钮来切换 ChemStation 视图。可以最小化、展开和重新排列导航按钮区域。

ChemStation 资源管理器

导航窗格的内容取决于视图。对于“方法和运行控制”、“数据分析”、“评估”和“报告布局”，ChemStation 资源管理器可有于浏览不同的 ChemStation 元素。默认情况下，这些数据、方法和序列的元素由配置编辑器的设置决定。有关方法、序列和数据位置的新节点可以使用“视图”菜单的“首选项”来指定。

表 4 导航窗格项目

导航按钮	ChemStation 资源管理器元素
方法和运行控制	序列模板/主方法，结果集方法
数据分析	数据/主方法，结果集方法
查看	数据/报告模板
报告版面	经典报告：主方法 智能报告：报告模板
认证 (LC 和 LC/MS)	验证视图特定的快捷方式
诊断 (LC/MS)	诊断视图特定的快捷方式
调谐 (LC/MS)	调谐视图特定的快捷方式

数据采集

如果软件为可见视窗式和图标式，随着运行时间的进行，可以在监视器上持续监视仪器的状态并且状态会持续更新。分析过程中发生的各种事务，包括所有错误以及分析开始和结束时仪器的条件等，均记录在系统的工作日志中，从中提取的内容将随每个数据文件一起保存。

液相色谱的流量、温度、压力和溶剂成分等仪器条件可能会记录并保存在每个数据文件中。可以显示并打印这些仪器参数，以检测各项分析的质量。所记录的参数的准确性取决于技术以及所配置的仪器的功能。

所有常规数据采集 - 单个样品以及序列运行 - 首先添加到运行队列，然后再从此处启动。有更多关详细信息，请见第 129 页的 [关于运行队列](#)。

实际上，可能需要一个或多个显示窗口来监视仪器实时采集的数据。数据将以实际检测单位（例如：毫吸光度单位 [mAU]、伏特 [V]、温度或巴 [bar]）进行显示。每个窗口均可显示多个叠加的色谱/电泳图谱信号或仪器参数（例如压力）。系统可能会调整并记住默认显示设置，这样，用户就可以将他们自己的首选设置设定为仪器的默认设置。您可以缩放窗口，并且可以使用光标来随时显示任一点的特定信号响应值。

在分析过程中，可以通过离线副本使用 ChemStation 的全部功能。运行采集时，将无法访问仪器在线会话的数据分析部分，必须在离线副本中进行数据检查。

如果用户希望在完成分析之前就开始处理数据，可以使用快照功能。快照必须在仪器会话的离线副本中使用，这样就可以立即用于数据检查。

信号及状态信息窗口（包括图解式仪器界面视图的组件）的设置将会自动保存。

有关数据采集的详细信息，请参见第 65 页的 [数据采集及在线帮助系统](#)。

保留时间锁定

保留时间是色谱的基本定性指标。大多数峰识别是通过对比未知峰和标准峰的保留时间来实现的。如果每个分析物的保留时间没有变化，则识别峰和验证方法会容易得多。但是，保留时间经常发生变化。日常维护过程，如色谱柱修整，会改变保留时间。如果在多仪器实验室运行重复方法，每个仪器的保留时间会互不相同，即使是在常规识别条件下运行。要消除保留时间的差异，至少需要随保留时间更新重新校正，这意味着每个仪器例程都必须进行单独校正并具有积分事件表，将方法从一个系统传输到另一个系统，这一过程会浪费时间。久而久之，在对比仪器数据时，保留时间的差异还可能需要额外的工作。

保留时间多锁定 (RTL) 能实现 GC 系统和另一个具有相同常规色谱柱类型（相同的固定相、色谱柱内径、长度和相比（膜厚））的系统间的紧密匹配。在初始保

留时间锁定设置中使用保留时间/压力校正，当分析物峰变化时，RTL 可确定所需的新进样口压力，以更新（重新锁定）GC 方法进样口压力。现在此“锁定”方法可在另一个 GC 上调用，以更新进样口压力来匹配保留时间。

数据分析

数据分析 — 选项

“经典”数据分析是 ChemStation 中的功能。下一页提供了概述。更多详细信息，请见第 137 页的 [数据分析](#)。

数据分析—显示

ChemStation “数据分析”视图通过以下数据分析功能的任务分组对标准工具栏进行了扩展：重新计算、重新处理、积分、校正、报告、标注和信号比较工具组。可以进行下列主要的图形化操作：

- 当调用色谱图/电泳图谱时，可以选择显示单信号还是多信号，
- 不同样品的色谱图/电泳图谱的叠加，
- 从一个色谱图/电泳图谱中减去另一个色谱图/电泳图谱，
- 以图形方式垂直及水平排列信号，以便进行直观比较，
- 倒置或镜像处理信号，以便进行直观比较，
- 显示特定积分峰的扩展峰性能特征，
- 图形缩放和滚动功能，
- 调整显示属性，包括对峰起止符、基线、轴线、保留/迁移时间及化合物名称的选择（用户也可选择保留时间 (RT) 和化合物标签的字体、调整显示的大小和方向、选择叠加显示还是单独显示以及选择缩放因子），
- 根据已配置仪器的功能，色谱图/电泳图谱显示可以包含仪器参数的图形叠加，
- 通过选择字体、大小、文本旋转及颜色，可以将用户定义的标注以交互方式添加到显示中（定义标注后，可以通过图形方式来移动、编辑或删除这些标注），
- 以图元文件和位图格式将显示复制到 Windows 剪贴板上，
- 使用**挑选模式**功能以检测器单位来显示各数据点的值，
- 将时间/强度数字化点导出到 Microsoft Windows 剪贴板上。

数据分析 — 积分

ChemStation 积分器算法为新生成的第二版，其目的在于改善耐用性、可靠性和易用性。

数据分析 — 定量

ChemStation 的数据分析视图的校正模式可以同时显示：

- 信号或通过当前化合物的保留/迁移时间窗口的指示正被校正的信号，
- 内含各种校正参数的校正表，以及
- 被校正的化合物的校正曲线。

所有校正模式窗口均相互链接，这样，一个窗口中的变化将自动反映到其他所有窗口中。这种模式允许以图形方式选择和修改校正数据。

定量计算用峰面积或峰高进行，计算方法包括百分比法、归一化百分比法、外标法、外标百分比法、内标法及内标百分比法。校正可以是多级的，并且包括多个内标定义。校正历史记录会自动保存，并可用于确定重新校正计算的权重。

有关校正及定量的信息，请参见第 155 页的 [校正](#)。

数据分析 — 批处理浏览

可使用“批处理浏览”报告检查各样品中每个化合物的结果。它提供了几项主要的图形操作：

- 定义（校正的）数据文件的自动或手动检查和重新处理
- 校正表的重新校正
- 检查已校正方法的化合物表
- 创建特定的批处理报告

导航表提供了几项主要的图形操作：

- 标准表配置功能（例如排序、拖放选项、列选择、项目分组）以指定首选的导航表配置
- 鼠标右键单击功能，以调用信号、重叠信号、导出数据、打印报告
- 通过展开导航表中的行来检查信号的详细信息
- 检查信号并使用特定的方法创建 ChemStation 报告

“批处理浏览”可以保存每次运行的手动积分事件。可以使用“批处理浏览”外的数据文件保存手动事件。为避免两组手动积分发生冲突，“批处理浏览”中将不再应用使用数据文件保存的手动事件。

以下几点需要注意：

- “批处理浏览”中的重新校正方法与初始序列中的重新校正并不相同。按“批处理浏览”工具栏中的“更新校正”按钮会重新校正批处理中的所有校正运行，从而创建重新校正的校正表。按“批处理浏览”工具栏中的“开始”按钮将重新计算每个已校正化合物的含量。所有样品的含量将根据重新校正的校正表计算。
- 单击批处理浏览样品表格上的一行会调用相关数据文件。部分较大数据文件可能需要很长时间才能完成调用。这与使用调用信号调用相同的数据文件没有什么不同。
- “批处理浏览”报告提供了每个样品中每个化合物的结果。因为部分校正表格中有大量的化合物，所以会导致批处理浏览报告非常大。
- “批处理浏览”可以保存每次运行的手动积分事件。还可以使用“批处理浏览”外的数据文件保存手动事件。为避免两组手动积分发生冲突，“批处理浏览”中将不再应用使用数据文件保存的手动事件。

如果使用的是带中央数据存储的 ChemStation，那么批处理浏览是默认禁用的。可以使用 ChemStation.ini 文件中 [PCS] 部分的一个条目启用：[PCS]_BatchReview=1。ChemStation.ini 文档位于 C:\ProgramData\Agilent Technologies\ChemStation 目录。

数据分析 — 重新计算

重新计算模式包含的功能可用于快速生成“导航表”中任意数据子集的结果或报告。可以为任意选择的数据子集组合轻松生成结果，而无论最初采集样品时使用的序列如何。用户可以使用任意方法完成重新计算。使用的方法将复制到单个数据文件 (DA.M) 中。重新计算期间不会完成任何校正操作。

数据分析 — 重新处理

重新处理数据模式包含的功能可用于重新处理一个完整的序列，通过序列中定义的方法和根据校正样品的结果来计算样品结果。

数据分析 — 上次结果

在此模式下，将会针对每次运行调用数据文件方法 (DA.M)。DA.M 是曾用于执行上次的数据分析（在采集、重新处理或重新计算期间）的方法。“上次结果”模式可让您重新重新生成上次数据分析的结果，其间序列方法发生更改时也可重新生成。

报告

使用 ChemStation，可以为每个仪器选择要使用的报告类型：

- **经典 ChemStation 报告**与 ChemStation B 报告相比没有变化。有关详细信息，请参见第 182 页的 [经典报告](#)。
- **智能报告**：有了智能报告以后，您可以...
 - 使用拖放功能创建报告模板（“所见即所得”模型）
 - 只需选择数据和报告模板即可在新的**检查**视图中生成报告
 - 使用交互式报告进行数据检查：定义搜索条件来选择与您相关的信息
 - 生成交叉序列报告

更多详细信息，请见第 175 页的 [智能报告](#)。

数据导出和导入

ANDI

ChemStation 可以采用分析仪器协会 (AIA) 的 1.0 版（1992 版权所有）andi（分析数据交换）色谱格式来导入和导出数据文件。遵循级别一（样品信息和信号数据）时支持数据导入，遵循级别二（样品信息、信号数据及积分结果）时支持数据导出。

DDE

ChemStation 包括的一些命令和功能既支持 Microsoft Windows 平台在用作 DDE 客户端时的动态数据交换 (DDE) 标准，也支持该平台在用作 DDE 服务器时的动态数据交换标准。这些命令包括建立及终止连接的命令、双向传输信息的命令和执行远程功能的命令。

ADF

ADFExport for OpenLab 工具可将 ChemStation 数据导出为 Allotrope Data Format (ADF)。此工具仅在安装了相应附加软件时可用。

ADFExport for OpenLab 工具的详细说明请参见“ChemStation ADF 导出”在线帮助。

自定义

ChemStation 可通过强大的命令集合加以自定义。可以将这些命令分组以自动执行特定的功能，这些组被称为宏。

编写宏的用户可以定义他们自己的变量，将宏构建为条件结构或循环结构，执行物理 I/O 操作（包括文件处理及用户交互），嵌套宏和日程表并且与 Microsoft Windows 其他应用程序进行数据交换。

在 ChemStation 中使用自定义命令或宏

在 ChemStation 中，可在以下位置使用自定义命令：

- 运行队列
请参见第 130 页的 [使用运行队列](#)
- 队列计划
请参见第 133 页的 [使用队列计划](#)
- 运行时选项表
请参见第 45 页的 [运行时选项表](#)
- 序列参数
请参见第 75 页的 [序列参数](#)
- 命令日程表
请参见第 134 页的 [安排命令](#)

您还可以从每个位置访问对话框来创建或更改命令和宏。

创建自定义命令

ChemStation 提供了多个可供所有用户使用的内置命令。如果有所需的权限，可创建自己的自定义命令和宏。

先决条件

您需要 **ChemStation：安全 > 命令行** 权限。权限在控制面板中配置。

1 从任何可以使用命令的位置，选择**设置自定义命令模板...**。

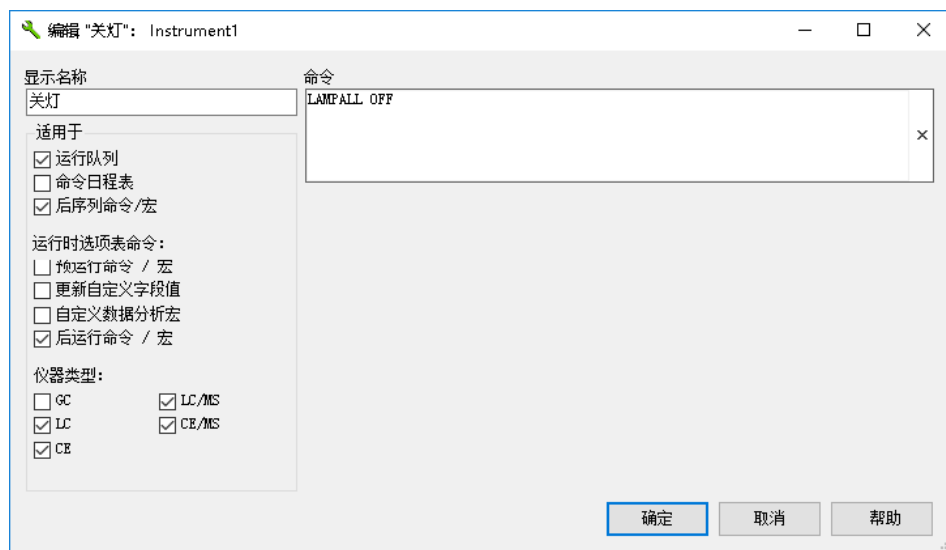
自定义命令模板对话框列出了适用于当前仪器类型的所有内置命令和自定义命令。



2 选择所需的命令，然后单击**编辑...**。

您可以在打开的对话框中设置命令属性。

- 所有用户在 ChemStation 中看到的显示名称
- 可以使用命令的位置（方法的**运行队列**、**命令日程表**、**后序列命令/宏**、**运行时选项表**）。
- 命令适用的**仪器类型**。



3 确认更改。

注意

命令定义是使用方法的运行时选项表、序列模板或队列计划独立保存的。这意味着，如果您更改或删除定义，这只会将在您调用**自定义命令模板**对话框的位置范围内生效。如要将更改应用于其他范围内的对话框，则必须明确更新相关方法选项表、序列模板或队列计划。

有关自定义的详细信息，请参见“命令”或“宏”的 ChemStation 在线帮助。

自动分析

ChemStation 可计划并执行单个样品和多方法序列。

可以将序列参数集定义为使用自动生成的文件或按顺序编号的文件（带有用户定义的最多十五个字符的前缀）。用户可选择运行完整分析序列或仅进行数据重新处理的序列，也可选择分析出现错误或完毕时运行的特定关闭的系列命令之一（有关内置命令的示例，请参见第 110 页的**后序列操作**）或用户定义的关闭命令。

在类似电子表格的用户界面中建立序列表或要运行的分析列表，用户可以在其中指定瓶号和样品名称、样品类型、分析方法、样品定量参数（包括样品量、乘积因子和稀释因子、校正设定、数据交换参数 LIMSID 和重复进样的次数）。根据配置的仪器和模块，用户还可以访问更多字段，例如，如果 Agilent 1100/1200 LC 系统包含馏分收集器，则序列表中将会显示**馏分开始**列。序列表

外观可以由用户配置。用户可以在表中的各个单元格之间移动，并且可以复制、剪切或粘贴单个单元格、整个行或一系列行以快速高效地建立序列。

在序列表中样品可能会被识别为未知、校正、空白或对照样品类型。样品类型确定了样品的所有特定的样品数据评估方式：

- 根据方法说明评估和报告未知样品。
- 使用校正样品按下述方法重新校正方法的定量组分。
- 空白样品用于评估《欧洲药典》定义的特定峰的参比信号。您可以在自定义报告中打印信噪比。请参阅《参考指南》以了解关于计算和必填数据字段的详细信息。
- 按照方法中定义的每种组分的限制评估对照样品。如果结果超出任何指定的参数范围，序列执行将中断。

可以将校正样品定义为简单、循环或区间循环校正。简单重新校正意味着每次在序列中定义了一个校正样品时就进行一次重新校正。循环重新校正意味着在分析一系列未知样品期间，将按定义的间隔进行循环重新校正。在插入一系列未知样品时，将分析两次校正设置。未知样品的定量报告将使用两次校正集的平均校正表值来计算。

“序列预览”功能允许用户查看序列的执行顺序。序列加入队列后，序列表也会按照运行逐个显示所有样品。用户可选择个别样品条目进行重新运行或重新评估。重新评估已采集的数据时，用户可指定是使用原有样品定量计算数据，还是序列样品表中输入的最新数据来进行数据重新处理。

可以暂停序列以使用其他方法运行单个进样优先样品，然后重新开始，而不会影响自动分析。可以在序列执行期间将样品添加到序列表中。

序列表和部分序列表都可以打印。

有关序列的详细信息，请参见第 72 页的 [自动分析/序列](#)和在线帮助系统。

运行队列和队列计划

通过运行队列，可依次自动运行多个单样品或序列。添加到队列中的第一项在数据系统准备就绪时即可开始，除非从队列中暂停。您可以根据简易序列模板或经典 ChemStation 序列添加单个样品或序列，也可以暂停队列。另外，每个**运行方法**或**运行序列**命令也会自动向运行队列添加一项，并在队列中自动启动该项。

使用队列计划，您可以准备一系列单个样品或序列，并将计划保存到文件系统。要启动这些计划的样品和序列，只需打开计划并将其添加到序列队列即可。通过此功能，可以启动时间很长的任务，例如通宵作业或周末作业。

有更多关详细信息，请见第 129 页的 [关于运行队列](#)。

样品位置

图形控制能让您为进样和馏分收集选取样品瓶位置。

手动输入样品位置需要充分了解正确的位置格式，您可以不必这样做，只需单击鼠标便可简单地选择抽屉位置、样品盘类型和样品瓶位置。

下面的对话框和工具栏中集成了用于选择样品位置的图形控件：

- 样品信息
- 序列表
- 向下填充选项：
- 馏分收集器（开始位置）
- Data Analysis 视图中的纯化任务栏

控制包括以下元素：

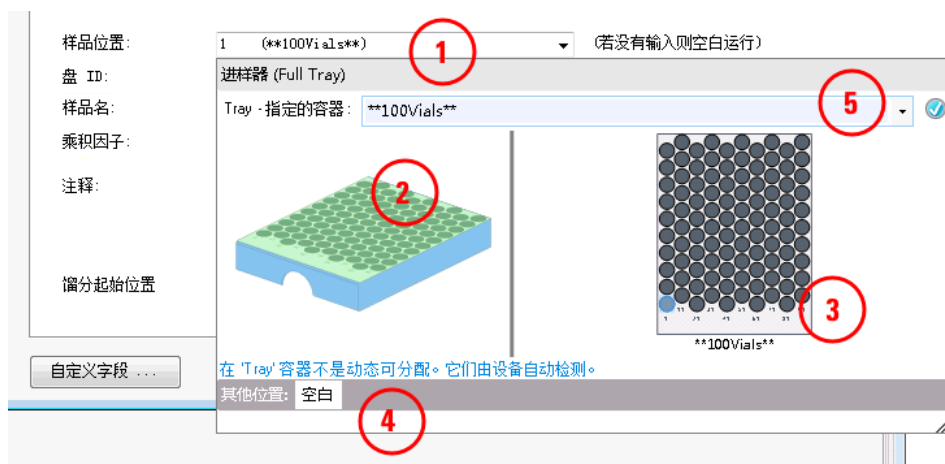


图 1 样品位置对话框中的样品位置选择器

- 1 样品位置的初始输入字段。单击箭头或按 F4 打开图形控制，或手动输入位置字符串。
- 2 用图表直观表示样品容器设备（进样器或馏分收集器）布局。如果有几个可用的容器，单击选择一个。
- 3 所选样品容器的直观显示。单击样品位置选择并关闭图形控制。

-
- 4 额外位置，如驱动程序所定义。例如，进样器的**空白**，或者馏分收集器的**下一个位置、下一个样品盘、汇集**。单击选择位置并关闭图形控制。

 - 5 与所选设备位置相配套的容器列表。
使用当前配置进样时选择由设备/驱动程序配置确定的容器。
使用 **<空>**（例如用于馏分收集器布局）以确保执行期间收集顺序中未考虑容器。
-

主要有下述工作流程：

- 使用当前配置
这是默认方法。执行样品或序列时，系统会自动检测设备。
- 指定用于采集的容器
此工作流程用于不能被系统检测到的可定义容器，如板。您可指定执行序列和样品时必须使用哪个容器。
- 指定待验证的容器
此工作流程用于能被设备自动检测到的不可定义容器，如样品盘。执行序列或样品时，系统会验证指定容器。如果实际容器与指定的不匹配，运行将终止。这能确保使用正确的容器类型。
- 准备未分配的容器
此工作流程适用于事先已经填充但尚未插入进样器的容器。稍后会为这些容器分配抽屉和位置。

Agilent LC RC.Net 驱动程序等支持图形化样品位置控制。

良好的实验室规范

ChemStation 是根据国际公认的设计和开发标准而开发的，具有许多专为辅助用户在规管环境下操作而设计的功能。这些功能涉及整个方法说明及验证各方法是否符合其预期的用途，检测系统的操作，并确保数据的可跟踪性、原始性和真实性。

开发过程

各软件包文档中包括的认证书记录了软件开发以及作为开发周期的一部分的测试步骤。开发过程已注册 ISO 9001 质量标准。

方法说明及使用

- 综合方法 — 将完整的仪器和数据分析说明存储在一起。方法中包含对各化合物范围的说明，在检测时，超出校正范围的定量计算结果将不被采用。
- 方法变更历史记录使验证方法的用户可以自动记录方法是如何改变及何时改变的。用户可以选择在变更历史记录中添加原因注释。变更历史记录将作为方法的一部分以二进制格式自动被保存。为避免对记录的未授权访问，可通过用户访问模式对其进行保护，如下所述。可以查看和打印变更历史记录。
- 如“数据分析定量”部分所述，可以根据每个方法中的各个化合物指定许多色谱/电泳谱和系统性能参数的限制。超出这些参数范围的结果将用于控制自动序列的执行，如“自动分析”部分所述。在相应的分析报告中对其进行了说明。
- 系统性能或适用性报告（请参阅上述“报告”部分）提供了详细的分离质量分析。

在 OpenLab Shared Services 中可以设置各种角色和权限。**ChemStation 管理员**、**ChemStation 实验室经理**、**ChemStation 分析员**和 **ChemStation 操作员**预配置角色是运行环境的角色基础。

方法耐用性

序列总结报告（请参阅第 174 页的 [经典和智能报告](#)）提供了耐用性测试方法的途径。对于经典报告，用户选定标准的扩展格式报告是一种趋势图报告，可用于确定实际的操作限制。对于智能报告，可以创建自己的序列摘要报告模板，其中包括带极限的趋势图。然后，可以将这些限制与方法结合，以确保在对照样品的分析过程中按说明执行方法。

系统操作

ChemStation 验证工具包（标准软件的一部分）可自动检查软件安装的正确性及数据评估部分的运行是否正确，方法是：将执行测试时生成的结果与预先记录的已知值进行比较。认证工具包允许用户定义自己的数据文件和方法作为测试的基础。

数据的可追踪性、原始性及质量

运行时日志可提供整个系统的运行情况日志。还可以记录任何不正常的事件（例如运行中的错误或参数变更），以及每次分析前和分析后的仪器条件。相关日志副本将随各个数据文件一起保存。

每次分析过程中的实际仪器条件（例如压力、流量和温度）也将被记录（如果所配置的仪器支持该功能）。随后，这些数据可以与色谱图/电泳图谱一起以图形方式显示，由此显示该特定分析过程中的实际仪器条件，并包含在报告中。

随数据文件一起保存的方法将记录分析时所用的实际方法，并且允许将来完全重建所报告的全部数据。所有分析步骤完成时将保存方法。

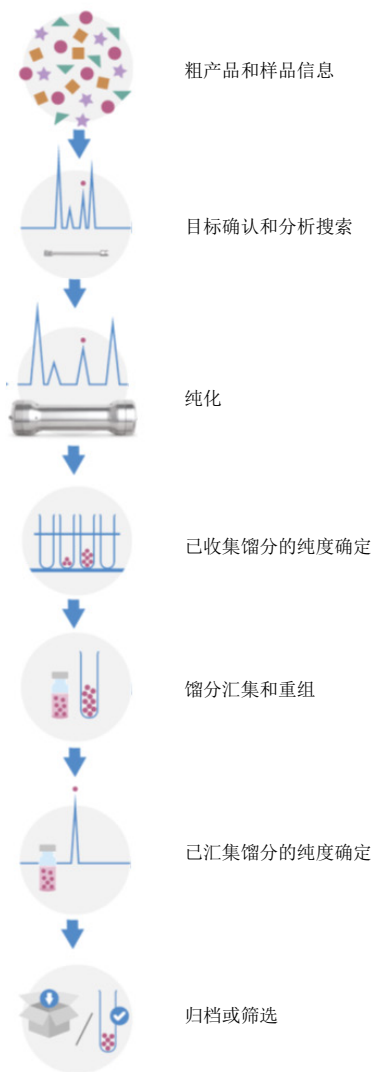
所有报告均包含时间戳记和可跟踪页码（采用**第 x 页，共 y 页**分页格式）。用户可以选择每个报告的详细级别，包括从简单的总结报告到完整的系统细节。

GLP 保存寄存器文件（指定为方法配置的一部分）将所有的原始数据（包括样品信息、数据分析方法、色谱/电泳图谱信号、仪器条件、积分和定量结果、报告数据和运行日志）保存为受校验和保护的二进制文件。该文件是不可编辑的二进制格式文件，可确保结果的原始性。该文件包括修订模式，用来指示数据是否已重新处理过。

可以在序列表中定义对照样品类型，当仪器在无人看管的情况下运行时，可以使用这些类型针对质量对照样品结果来自动检测仪器的性能。如果出现超出用户指定的可接受范围的结果，将停止仪器的自动执行。

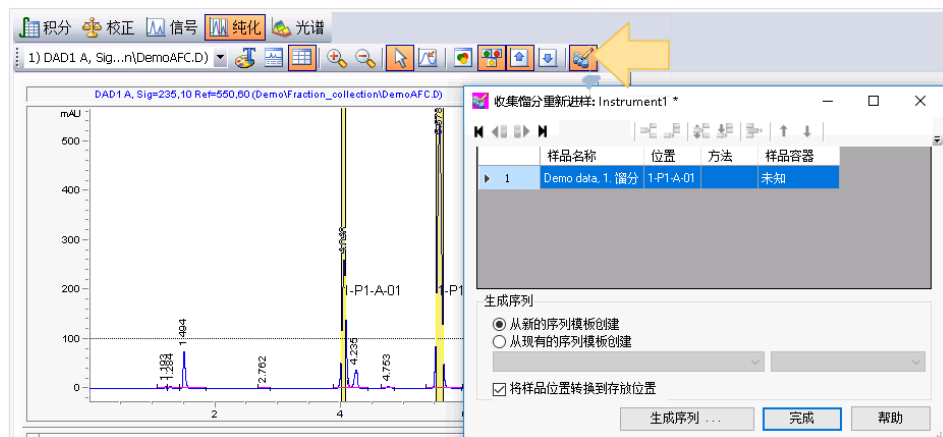
制备型液相色谱

ChemStation 支持自动提纯和制备工作流程。一般的工作流程包括使用带馏分汇集的馏分收集器。



已收集馏分的纯度确定

要检查已收集馏分的纯度，您可以将它们转化成样品，然后将其添加到序列进行重新进样。再分析馏分的列表是在**收集馏分重新进样**对话框中创建的，可通过**数据分析**中的**纯化工具栏**访问。



在对话框表格中，设置用于生成序列的馏分列表，然后执行方法和样品位置。

馏分列表	可以通过从色谱图、馏分表或样品容器图形中选择馏分来进行添加。
方法	下拉列表中显示了计算机上存储的所有方法。如果方法在您用于重新进样的另一台仪器上，在字段中输入方法名称，或将其留空以备稍后输入。
序列	您可以使用 从新的序列模板创建 选项来创建新序列。您可以使用 从现有的序列模板创建 选项来为现有序列追加馏分。
位置	如果您打算将样品容器转移到其他仪器进行馏分的重新进样，请选择 将样品位置转换为存放位置 复选框。这会将表格中的位置转换为可在其他进样器上使用的中性存放位置。

根据设置，可以立即执行序列，或再次在**样品录入**选项卡的**样品列表**中进行编辑。有更多关详细信息，请见第 77 页的**图示样品录入**。

馏分汇集

汇集是将多个馏分收集到相同的收集容器。ChemStation 支持不同的汇集选项：

- 从相同的进样位置数次进样，并收集到相同的容器中
在**样品信息**对话框中，选择单个样品所需的运行次数，并为首次运行选择固定的馏分起始位置。
- 从不同的样品位置进样，但收集到相同的容器中

若要配置汇集，设置首次运行的馏分收集器起始位置，如果需要，也可为以后的运行设置。

馏分收集器延迟校正

化合物需要在检测器检测点和馏分收集器收集点之间移动的时间被称为延迟时间。可以通过执行延迟时间校正来确定该时间。

延迟校正向导可指导您完成执行和评估馏分收集器延迟校正的流程。可通过**方法和运行控制**视图的**仪器**菜单访问该向导。

首先，使用**执行延迟校正运行**设置和运行延迟校正。之后使用**评估延迟校正数据**来评估延迟校正的结果。在**延迟校正总结**报告中对延迟校正进行总结。

数据评估能帮助您计算出峰检测器与馏分收集器模块之间的延迟。延迟时间取决于校正运行数据文件的检测器信号和馏分收集器的延迟传感器信号。延迟体积是根据流量信息得出的。

有关详细信息，请参见 ChemStation 在线帮助。

ChemStation 数据结构

为了加强数据文件与方法之间的关联，ChemStation B.02.01 版引入了结果集（当时又称为序列容器）：

- 结果集将与数据分析所需的所有必需的信息保存在一起：所有方法的序列文件的副本；如果是智能报告，则还有序列使用的报告模板。这些方法可通过序列特定的输入更改，而不影响原始主方法。因此，结果集概念加强了序列的意义，即作为结果生成的数据文件和方法的集合。
- 序列数据不会被覆盖。每次序列采集都会将结果数据文件以唯一名称保存在自己的结果集中。
- 通过导航表，可在**数据分析**视图中实现数据重新计算和数据再处理。
- 如果使用中央数据存储系统（**OpenLab ECM 3.x**、**OpenLab ECM XT** 或 **OpenLab Server**），将会把整个结果集（序列/方法/数据文件/报告模板）作为一个实体传输到中央存储库。

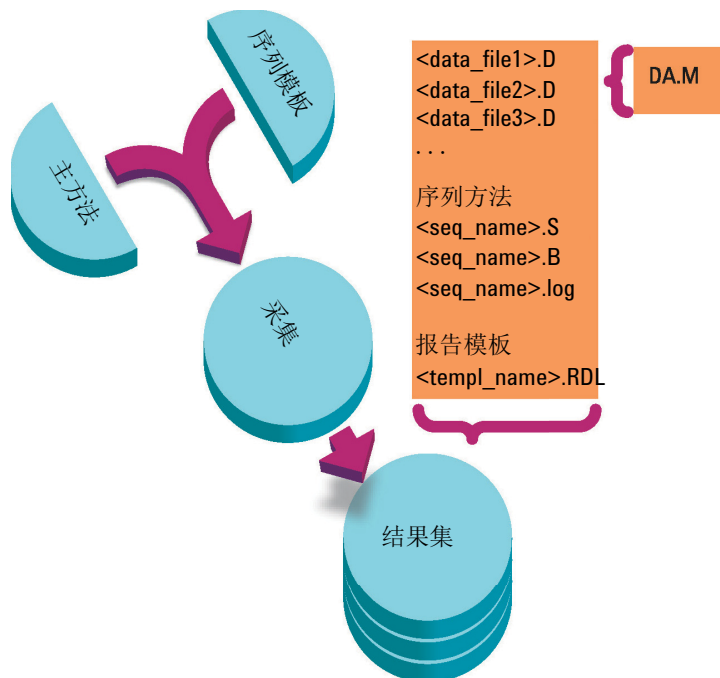


图 2 序列采集

方法在ChemStation\x\methods¹为位于公共文件中。这些方法在采集和数据分析期间保持不变。

类似地，公共文件夹 ChemStation\1\sequence 中的序列用作序列模板，可用于多次重新运行序列（但不进行数据重新处理）。

公共文件夹 ChemStation\REPSTYLE 中的报告模板作为开发自己使用的报告模板的基础。

¹ 文件夹中，x 是仪器编号。安装过程中文件夹作为主方法默认配置

数据的存储模式取决于采集的是单个运行数据还是序列数据：

1 执行序列时，在指定的子目录自动创建名称唯一的新文件夹（**结果集**）。运行单个样品时，数据文件 (*.d) 将写入指定子目录。

2 对于序列数据，执行的序列模板 (*.s) 和所有涉及的方法 (*.m) 都会复制到结果集中。方法的副本叫做**序列方法**，以区别于原始主方法。若使用“智能报告”，则将所有涉及的报告模板 (*.rdl) 也复制到结果集中。

所有和序列相关的任务（例如：采集和数据分析）都在序列和方法的副本上执行。因此，序列模板和主方法会保持不变，以便将来进行其他序列操作。

序列采集过程中对序列所作的任何更改（例如：向序列列表添加行）都将在结果集的序列文件副本上执行。序列模板将保留不变。

类似地，方法中的任何更改（例如：运行校正时校正表的更新）都会反映在序列方法中，而不是主方法中。

执行序列时，生成的所有数据文件 (*.d) 和对应的批处理文件 (*.b) 及序列日志文件 (*.log) 都会存储到序列数据文件夹中。

3 每个数据文件都包含用于创建运行的方法副本。其中会存储以下方法信息：

- 如要查看每个特定数据文件的原始方法参数，请在导航表中右键单击相关行，然后选择**查看采集方法**。
- 完成每次运行后，ChemStation 将保持整个方法 (RUN.M) 的副本（请参见第 64 页的 **将方法的副本与数据一起保存**）。
- 总是会保存数据分析参数 (DA.M) 的副本（请参见第 64 页的 **将方法副本作为 DA.M 与数据一起保存（ChemStation 缺省设置）**）。

远程仪器控制

在分布式系统配置下，可从连接到 OpenLab Shared Services 服务器的任何 OpenLab 控制面板中配置和启动 ChemStation 仪器。

启动仪器

若要配置或启动仪器，可使用 OpenLab 控制面板中的**配置仪器**、**在线启动**和**离线启动**按钮。与在独立工作站或网络化工作站配置中一样，“仪器配置”对话框在本地 PC 上运行。但在分布式系统配置下，ChemStation 应用程序本身在分析仪器控制器 (AIC) 机器上运行，您可以通过到 AIC 机器的远程桌面连接访问该应用程序。

远程 ChemStation 窗口与 OpenLab 控制面板均独立显示；启动仪器后，可关闭控制面板并继续使用该仪器。此外，还可以使用不同的登录凭证在同一个客户端上运行 OpenLab 控制面板的多个实例。每个凭证将被传送给从相应 OpenLab 控制面板启动的仪器。

通过包含仪器名称和 AIC 名称的窗口标题，可识别在远程 AIC 机器上运行的仪器。

断开会话连接

在 AIC 上运行的仪器独立于用来打开远程桌面连接的客户端。即使客户端断开连接（例如因网络故障而断开），仪器上运行的序列可继续运行而不受影响。若要在网络恢复后重新控制该仪器会话，只需再次单击**在线启动**或**离线启动**按钮即可。

若要特意断开连接，请单击**关闭**或选择**文件 > 退出**。**关闭**对话框额外提供了**断开连接**按钮。通过断开连接，可断开远程桌面连接，同时让仪器继续处于运行状态。

注意

您可以断开远程桌面连接而让序列保持运行。

若要重新连接到该仪器会话，只需在 OpenLab 控制面板中再次单击**在线启动**或**离线启动**按钮即可。您可以从连接到 OpenLab Shared Services 服务器的任意 OpenLab 控制面板中重新建立连接。

无论是单击**离线启动**重新连接到在线仪器，还是单击“启动”重新连接到离线仪器，都将显示两个仪器窗口，一个用于在线仪器，另一个用于离线仪器。

接管会话

通过在另一台 PC 上的 **OpenLab 控制面板** 中单击**在线启动**或**离线启动**按钮，可接管现有会话：

- 如果您从 PC 1 上的 OpenLab 控制面板启动了某台仪器，随后使用相同的用户证书登录 PC 2 上的 OpenLab 控制面板并从中启动同一台仪器，则会直接接管现有会话，您在 PC 1 上启动的所有项目都将继续在 PC 2 上运行。

注意

如果新用户和之前的用户使用相同的凭证，则不会显示任何警告。

- 如果其他用户通过另一台 PC 上的 OpenLab 控制面板启动了该仪器，而您拥有所需权限，您也可以接管该会话。您必须拥有**接管 ChemStation 远程会话**权限，如果 ChemStation 已被其他用户私有锁定，您必须同时拥有**解除会话锁定**权限。关于用户管理、权限或会话锁定配置的更多信息，请参见《OpenLab ChemStation 配置指南》(CDS_CS_configure.pdf)。

仪器/会话的当前锁定状态通过**仪器面板使用者**字段中用户名左侧的图标和**仪器表**中的**使用者**列显示：



另一个用户正在使用仪器/会话；请勿接管。



仪器/会话处于私有锁定状态；请勿接管。



仪器/会话处于非私有锁定或断开状态；另一个用户可以接管。

如果您接管会话，其他用户将收到一条信息，指出您将要接管该会话。

报告显示作为当前用户登录的**采集操作者**和提交单个样品或序列到“运行队列”的**样品操作者**。

在线仪器和离线仪器包括在同一会话中，因此始终会一同转移。如果某在线仪器和离线仪器已在一个会话中启动，则接管操作会转移对两台仪器的控制权，而不论单击的是**在线启动**还是**离线启动**按钮。无论是单击**离线启动**且会话只包含在线仪器，还是单击“启动”且会话中只包含离线仪器，都将显示两个仪器窗口，一个用于在线仪器，另一个用于离线仪器。

强制关闭系统

要关闭无法再使用的无响应的仪器，您可以右键单击 OpenLab 控制面板上的仪器，并在 ChemStation 客户端的控制面板上选择**强制关闭**。

您必须拥有**仪器管理**权限以使用该功能。

强行关闭系统不会立即更新仪器的状态，从而导致状态显示暂时不一致直到将状态自动重置为“未启动”。建议您在启动新的 ChemStation 会话前至少等待两分钟。

2

使用方法

方法是什么?	42
主方法	42
序列方法	42
数据文件方法	43
方法组件	44
创建方法	46
编辑方法	47
编辑方法组件	48
方法目录结构	49
在线模式下编辑方法	50
离线模式下编辑方法	50
管理方法	51
ChemStation 资源管理器的方法树状图	51
查看采集方法	52
更新主方法中的 DA 参数	54
更新方法	55
将方法另存为新的主方法	56
运行方法时将发生什么?	58
方法运行总结	59
预运行命令或宏 (运行时选项表)	60
数据采集 (运行时选项表)	61
数据分析 (运行时选项表)	61
更新自定义字段值	62
自定义数据分析	63
保存 GLP 数据	63
后运行命令或宏	63
将方法的副本与数据一起保存	64
将方法副本作为 DA.M 与数据一起保存 (ChemStation 缺省设置)	64

方法是 OpenLab ChemStation 工作方式的重要组成部分。OpenLab ChemStation 是一个色谱数据系统，具有很大的方法开发灵活性。本章将详细介绍方法的概念。

方法是什么？

方法由所有采集和数据分析的参数、及给定样品的运行前和后运行任务（如需要）组成。

ChemStation 资源管理器中可以看到可用方法 (*.m) 文件。要快速、轻松地浏览，可以使用**首选项**对话框的**路径**选项卡将其他方法位置添加到 ChemStation 资源管理器选择树状图中。

存在多种不同的方法类型。根据存储位置不同，可以将方法作为主方法使用，作为序列结果集中的引用，或者在数据采集期间作为使用设置的实际记录。

主方法

这些方法保存在计算机磁盘上。存储方法的名称最多包含四十个字母数字字符，后跟扩展名 *.M。主方法目录可在“首选项”中配置（参见第 66 页的 [路径选择](#)）。

主方法存储在方法子目录中，可以在 ChemStation 资源管理器的某个“方法”节点中找到，并且不与任何结果集直接关联。

序列方法

运行序列时，用于序列的所有主方法的副本均与序列数据文件一起存储在结果集中。这些方法直接链接到序列，并还会在对序列进行数据再处理时使用。默认情况下，对这些方法所做的更改不会自动传播给主方法。只要启动序列运行或暂停后继续序列运行，所做的更改即会生效。在重新处理序列以及生成任何报告时，这些更改还会传送到数据文件方法 (DA.M)。

数据文件方法

数据分析参数的副本将作为数据文件方法 DA.M 与数据文件一起保存。数据文件方法 DA.M 在每次生成结果（数据采集、重新计算或报告生成）后自动更新。当您在最终结果模式下重新计算结果时，ChemStation 也会调用此方法（请参见第 141 页的 [最终结果模式](#)）。

如果您使用了运行时选项表中的 **将方法与数据一起保存** 选项，那么在数据文件中还将把方法保存为 run.m。

在 ChemStation 资源管理器中，可以通过双击方法项实现轻松地调用主方法或序列方法。

方法组件

方法通过包含最多四十个字母数字字符的名称来识别。文件名始终带有 .M 扩展名以将其识别为方法。方法以目录的形式进行存储，这些目录包含与方法的组件相关的单独文件。

每个方法由四部分构成：

- 方法信息，
- 仪器控制，
- 数据分析，
- 运行时选项表。

方法信息

本节用于定义关于方法的说明信息。

仪器控制

定义控制仪器或其组件的参数。对于 LC 仪器，参数（例如流动相组成、流速、进样量、检测器波长等）用于控制泵、进样器和检测器。对于 GC 仪器，参数（例如进样口温度、进样口压力、填充柱流量设置等）用于控制仪器。

数据分析

定义控制数据处理的参数。

- **信号细节**

定义信号及其用于数据评估的特性。

- **积分事件**

定义色谱图/电泳图谱在指定的保留/迁移时间发生的定时事件。这些定时事件可用于更改信号的积分方式。

- **峰识别**

定义色谱图/电泳图谱中与峰识别相关联的数据处理参数。

- **峰定量**

定义影响定量计算的数据处理参数，这些参数决定对应于每个峰的样品组分的含量和浓度。

- **校正及重新校正**

定义影响校正及校正频率的数据处理参数。

- **自定义字段**

定义可用于方法的样品或化合物相关自定义字段的属性。自定义字段可用于向样品或样品化合物添加自定义信息。

- **报告**

使用经典报告：定义运行之后所打印报告的格式。

使用智能报告：指定运行之后用于生成报告的报告模板。

运行时选项表

定义方法运行时应该执行方法中的哪些部分。

运行时选项表可用于：

- 采集、保存和处理数据以生成报告，
- 仅执行方法的一部分，
- 采集并保存数据，但不对数据进行分析，
- 重新分析现有的数据文件，
- 使用自己的命令进行数据分析、运行前后的数据处理，
- 将分析结果保存在寄存器中以用于 GLP，以及
- 将方法和数据保存在一起。

有关自定义命令及其设置方法的详细信息，请参见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。

创建方法

创建新方法即意味着修改主方法或序列方法，并保存修改。用户可以覆盖现有的方法，或者将方法另存为新的主方法。请注意：更改方法时，只有保存所做的更改后，磁盘版本才会更改。

您可以选择如何创建方法。您可以创建一个方法来执行一部分或所有分析。例如，您可以创建一个仅执行数据采集的方法。当准备分析数据并生成报告时，可以修改该方法来执行相关数据处理任务。

注意

不可删除默认方法（DEF_LC.M、DEF_CE.M 或 DEF_GC.M）。这些方法文件用作创建新方法的模板。

编辑方法

您可选择“方法”菜单中的“编辑完整方法”。您会了解所有方法对话框，并可在结束时保存方法。该过程如下所示：

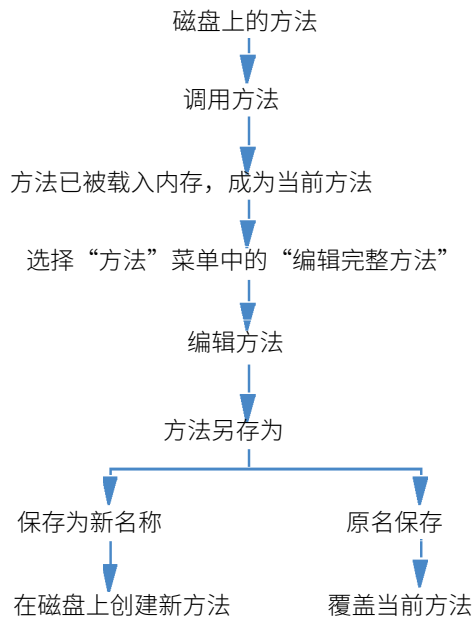


图 3 编辑方法

编辑方法组件

每个方法由四部分构成，每部分均可单独进行编辑。

以下详细介绍部分有些涉及特定的对话框，有些只作概括说明。

- **方法信息**包含：
 - 关于方法的文字性说明。
- **仪器控制**取决于配置。例如，可能包含：
 - 柱温箱参数，
 - 进样器参数，以及
 - 检测器参数。
- **数据分析**包含：
 - 信号细节，
 - 积分参数，
 - 定量参数，
 - 校正参数，
 - 自定义字段设置参数，以及
 - 报告参数。
- **运行时选项表**包含：
 - 要执行的方法部分。

方法目录结构

文件夹

方法由保存在方法目录 (*.M) 中的一组文件构成。默认情况下，主方法存储在仪器方法目录下。例如，该文件夹位于公共文档文件夹 C:\Users\Public\Documents\ChemStation\x\METHODS，其中 x 是仪器编号。

仪器路径可在安装期间定义。通过首选项设置可为主方法添加其他路径。

使用 ChemStation 菜单 **文件 > 打开 Windows 资源管理器...** 来打开仪器的数据目录（例如 C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1）。此外，也可使用开始菜单的**仪器数据**快捷方式。

序列方法存储在结果集中，数据文件方法作为 DA.M 存储在数据文件子目录中。

文件

带有 .MTH 扩展名的方法文件包含参数集，并以 UNICODE 格式存在。INFO.MTH 文件由方法控制参数构成。

包含仪器参数的方法文件具有相关分析模块的名称。例如：

表 5 方法文件示例

HPCE1.MTH	包含用于毛细管电泳的采集方法。
ADC1.MTH	包含 Agilent 35900 采集方法。如果配置了两台相同的仪器，则方法文件被分别称作 ADC1.MTH 和 ADC2.MTH。
DAMETHOD.REG	用于数据评估。
LALS1.REG	如果配置了典型的模块 LC 系统，则包含 Agilent 1100/1200 系列自动进样器的参数。用于其他 Agilent 1100/1200 系列模块的方法文件遵循相同的命名规则 Lxxx1.reg，其中 xxx 为模块的缩写。
AgilentSamplerDriver1.RapidControl.xxx.xml	如果配置了模块 LC 系统，则包含 Agilent 1100/1200 系列自动进样器的参数。参数的各个部分显示多个 .xml 文件（用文件名的 xxx 部分表示）。其他模块也可以使用类似的 .xml 文件。

在线模式下编辑方法

当在线 ChemStation 处于空闲状态时，可以编辑序列方法的所有部分。当序列正在运行时，可以编辑所有采集参数以及部分数据分析参数（如“设定报告”下的设置）。

所做的更改将被保存，且对于当前的运行和所有包含相同方法的后续序列行立即生效。这意味着还可以在序列暂停或部分序列期间更改方法。

离线模式下编辑方法

用户可以在离线 ChemStation 中编辑序列方法，而该方法可用于在线 ChemStation 的运行中。在此情况下，可在离线会话中编辑数据分析部分。一旦在离线会话中保存更改，则更改的 DA 设置将用于在线会话中当前序列运行的下一次“数据分析”。

有关校正的方法更新将忽略。此外，历史记录不会合并；这意味着，当方法在离线会话中运行时，可以从在线会话和离线会话中更改它，但方法的审计跟踪仅包含在离线 ChemStation 中所做的更改。

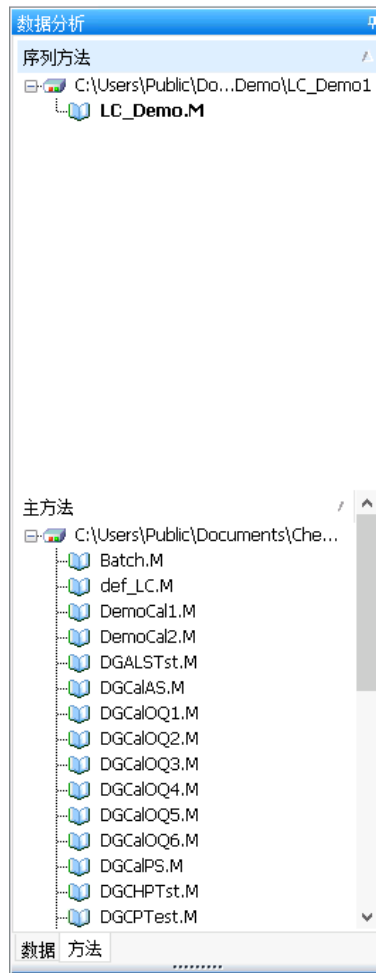
注意

如果相同仪器的在线和离线 ChemStation 调用了同一主方法，则只能编辑离线 ChemStation 中的方法。

管理方法

ChemStation 资源管理器的方法树状图

ChemStation 资源管理器的方法树状图由两部分构成。上半部分显示当前调用的结果集中包含的方法。下半部分显示主方法目录中的方法，可以使用**首选项**对话框进行配置。



当前调用的方法始终以粗体显示。

通过拖放操作可以轻松地将主方法复制到序列方法。整个方法（数据分析参数和采集参数）将会复制到结果集中。

查看采集方法

您可通过**方法和运行控制**视图中的**仪器 > 采集方法查看器...**访问采集方法查看器。联机 and 脱机 ChemStation 会话均可使用采集方法查看器。

使用采集方法查看器，除了当前仪器的配置，您可检查方法中存储的采集参数。对话框显示的是方法被保存到 ChemStation 中时的仪器配置。该查看器中不显示数据分析参数。采集方法查看器不允许用户对已调用的 ChemStation 方法进行更改。

采集方法查看器以只读模式显示方法设置。并不提供编辑和保存方法的功能。

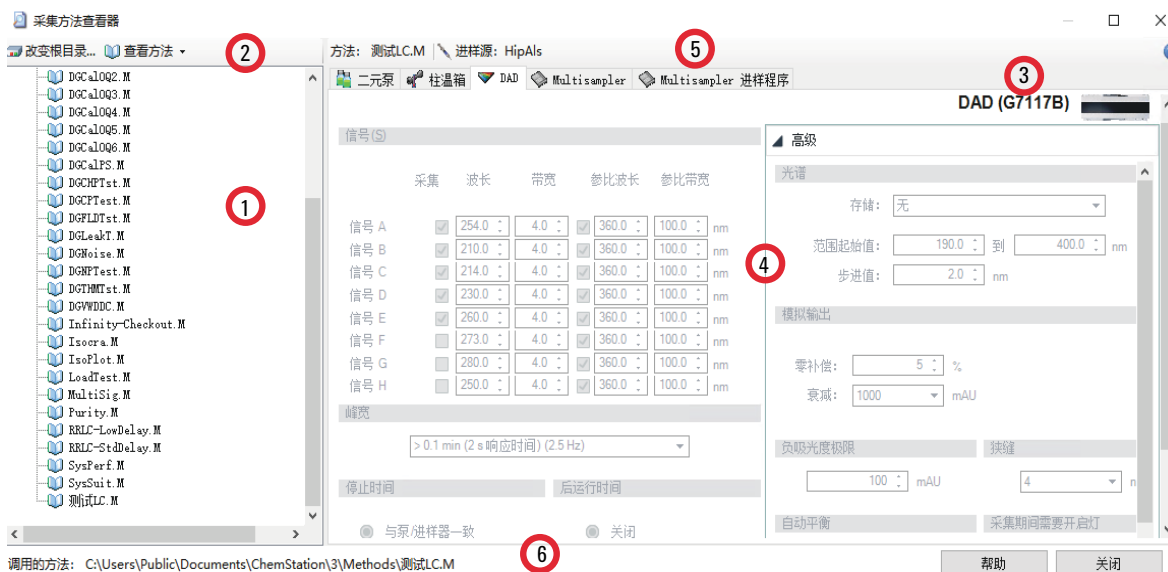


图 4 采集方法查看器对话框

1	方法浏览器
2	工具栏
3	模块选项卡（以选项卡控件的方式，显示所用仪器配置中所有已知设备的方法设置、预处理设置）
4	方法查看器区域
5	方法名称、进样源信息
6	状态栏

在方法浏览器 (1) 中，默认显示首选方法路径。单击工具栏中的**更改根目录...**可选择不同的目录。

工具栏 (2) 提供下列**查看方法**选项：

- **使用原始配置查看...**：将设置以方法中储存时的样式调用至仪器。
- **使用仪器配置查看...**：将存储的方法应用到当前仪器配置。只有联机仪器可以使用本选项。存储的方法可能与当前仪器设置不一致；如果可能，设置会自动适用；如未自动适用，可检查**方法解析信息**对话框中的详细信息。该对话框会显示未解决方法和已解决方法间的不一致和差异的列表。

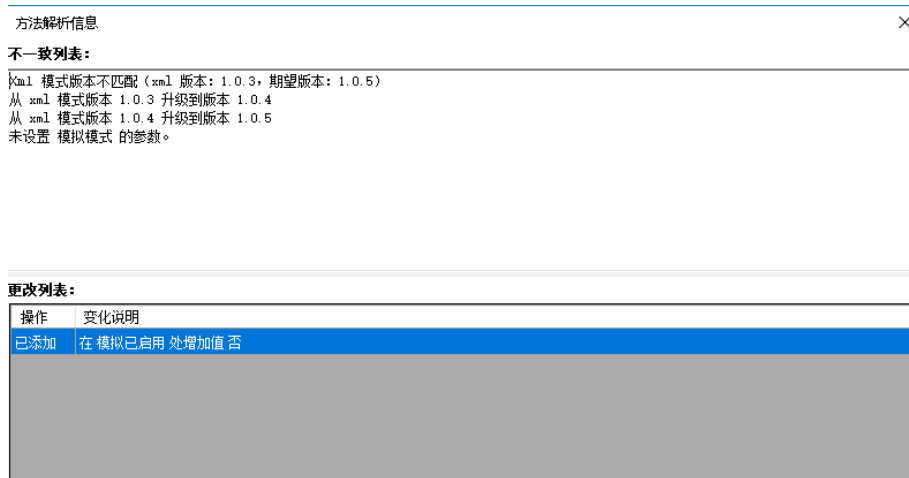


图 5 方法解析信息对话框

更新主方法中的 DA 参数

更新主方法选项通过 ChemStation 资源管理器的**方法**菜单和序列方法的上下文菜单提供。本功能的可用性和具体行为取决于当前的模式。在任何情况下，本功能都会更新目标方法的数据分析参数。

注意

值得注意的是：该功能**只更新目标方法的数据分析参数，覆盖所有的**数据分析参数。

在重新处理或重新计算模式下更新主方法

在该模式下，**更新主方法**命令仅适用于结果集的序列方法。您可以更新创建序列时引用的主方法。前提条件是该主方法仍存在于主方法目录中（主方法必须与序列方法的名称相同）。

还可以对序列参数进行配置，以在每次序列采集或数据重新处理期间自动执行该功能。有关更多信息，请参阅第 51 页的**管理方法**。

在“上次结果”模式下更新主方法

在该模式下，序列和单个样品均适用**更新主方法**命令。您可将当前数据分析参数传输至数据分析上次使用的主方法。该方法显示于导航表的**分析方法**栏中。

在以下条件下可以使用命令：

- 方法文件位于指定位置（也就是说，名称和整个路径必须一致）。
- 对于序列：已使用主方法（非序列方法）对序列运行进行了手动分析。

在“上次结果”模式下更新任意主方法

在“上次结果”模式中，除了关联到当前序列或单个运行的主方法，您还可以将数据分析参数传输至任意主方法。如要更新主方法，选择**菜单 > 更新任意主方法...**，然后从**选择要更新的主方法**对话框中选择一个方法。数据分析参数将会复制到所选的主方法。

更新方法

使用**更新方法**对话框（参见下图），可以将方法从主方法目录复制到结果集中，反之亦然。在这两种情况下会复制整个方法（数据分析参数和采集参数）。

通过 ChemStation 资源管理器的**方法 > 更新方法...**菜单或序列方法的上下文菜单打开该对话框。本功能适用于数据重新处理模式或重新计算模式下的结果集。

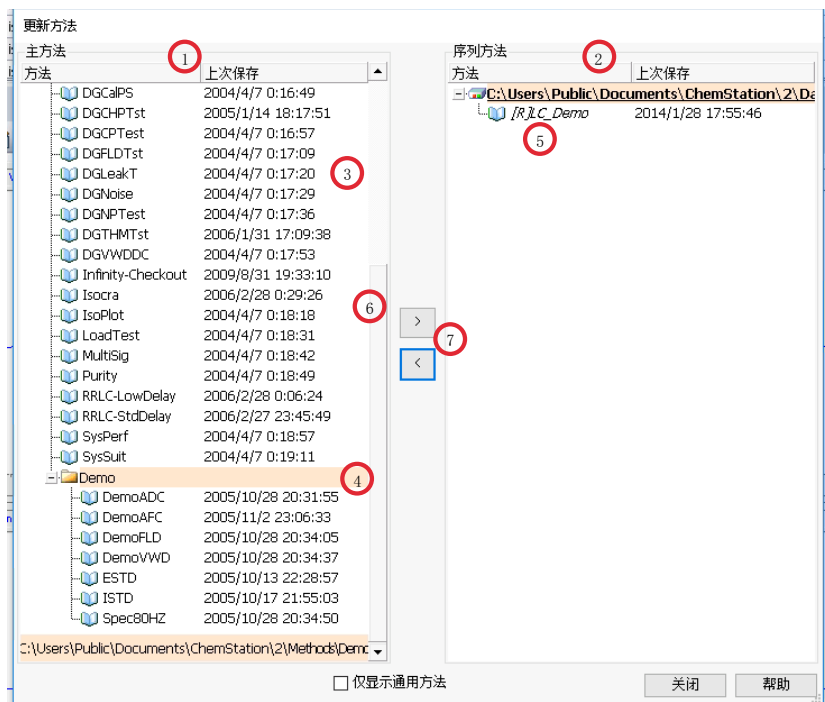


图 6 更新方法对话框

- 1 在左侧，您会看到所有主方法目录中的方法（如“首选项”中所配置）。
- 2 在右侧，您会看到当前调用的结果集中的方法。
- 3 对于每个方法，您会看到上次保存该方法的日期。日期的工具提示显示方法的上一历史记录条目。
- 4 方法也可以存储在主方法目录的子文件夹中。
- 5 只读方法具有 [R] 前缀。当前调用的序列方法以斜体显示。
- 6 通用于序列结果集和主方法池的方法以粗体显示。方法仅按名称匹配；如果方法名称存在于多个池中，则会将每个实例视为通用。
- 7 您可以通过使用拖放操作或通过使用 < 和 > 按钮，在主方法池和序列结果集之间复制方法。您无法覆盖标记为只读的方法。

将方法另存为新的主方法

您可将源自 DA.M 的数据分析参数另存为新的主方法。然而，DA.M 中不包含采集参数。为了给新的主方法提供一个有效的采集参数集，您必须将其他方法选为采集参数模板（参见下图）。新的主方法将会包含 DA.M 中的当前数据分析参数及选定的模板方法中的采集参数。将会在采集模板方法所在的文件夹创建新方法。

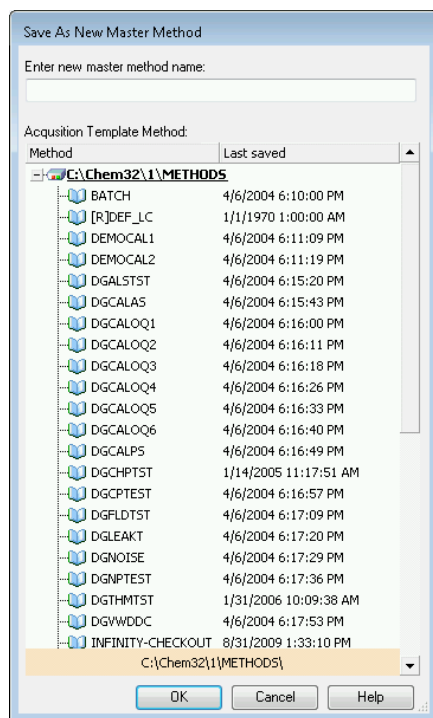


图 7 另存为新的主方法对话框

运行方法时将发生什么？

当运行开始时，**运行时选项表**对话框将指定方法中要执行的部分。

运行时选项表分为以下部分：

- 预运行命令或宏，
- 数据采集，
- 标准数据分析，
- 第二个信号的分析方法（仅限于 GC），
- 更新自定义字段值，
- 自定义数据分析，
- 保存 GLP 数据，
- 后运行命令或宏，以及
- 将方法副本与数据一起保存 (RUN.M)。

运行某方法时，将执行“运行时选项表”对话框中定义的方法的指定部分。使用菜单**方法 > 运行时选项表...**来显示或编辑运行时选项表的指定部分。

有关命令及其设置方法的详细信息，请参见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。

方法运行总结

以下列表显示了当“运行时选项表”中的所有部分都被选定时方法运行的流程：

1 预运行命令宏

分析开始前执行某一任务。

2 数据采集

执行进样器程序。

进样。

采集原始数据。

保存数据。

将采集参数保存到 ACQ.TXT 文件中。

3 此外，按照运行时选项表的要求操作：将方法的副本与数据一起保存为 RUN.M。

4 数据分析（处理数据）

调用数据文件。

积分数据文件。

识别及定量峰。

检索光谱库（如果可用）。

检查峰纯度（如果可用）。

保存方法 (DA.M) 的副本。

打印报告（更新自定义字段值后，如果已选）。

5 更新自定义字段值

执行宏，以在打印报告前更新自定义字段值。

6 自定义数据分析

打印报告后执行宏。

7 保存 GLP 数据

保存二进制记录于 GLPSave.Reg 中

8 后运行命令宏

分析完成后执行某项任务，例如，生成一个自定义报告。

使用方法

运行方法时将发生什么？

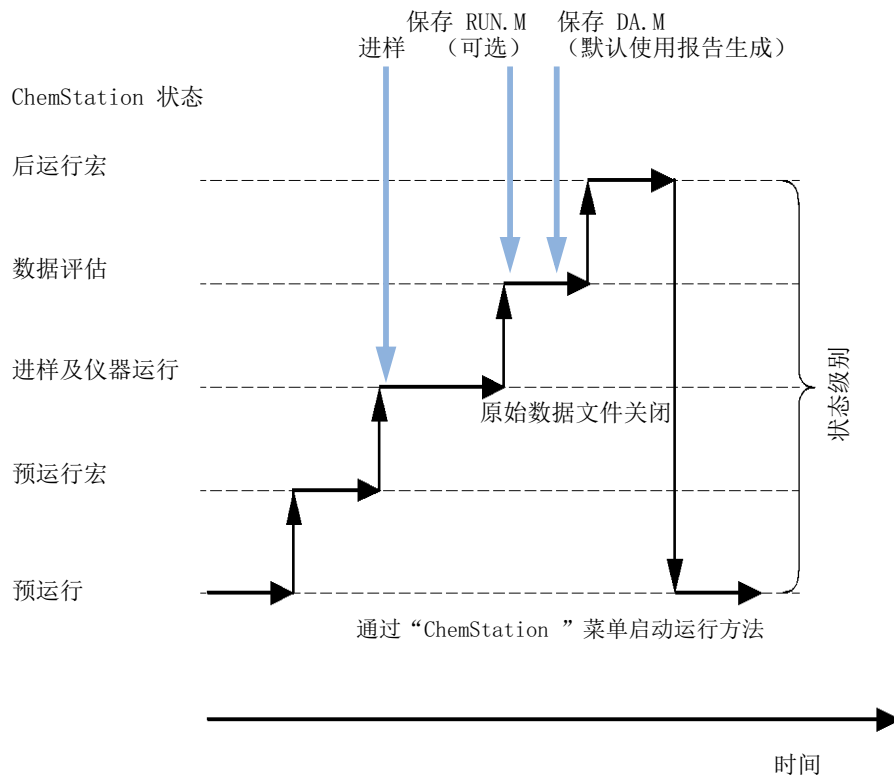


图 8 方法运行

下图显示 ChemStation 在方法运行期间的状态概览，其中“运行时选项表”的所有部分均已选定。

预运行命令或宏（运行时选项表）

如果指定了预运行命令或宏，则将在分析开始前执行。该部分通常用于使用其他软件包时的系统自定义。

数据采集（运行时选项表）

- 将所有参数设置为在当前方法中指定的初始条件。
- 如果指定了进样程序，则将从当前定义的瓶进样。
- 监视器窗口将显示分析的进度，包括色谱/电泳图谱信息和光谱数据（如果可用）。
- 采集数据并将其保存在数据文件中。
- 数据采集完成时，当前执行方法的采集参数缺省将保存为数据文件的 ACQ.txt。

数据分析（运行时选项表）

停止时间一到，即结束分析，所有原始数据都储存在计算机硬盘中。保存所有原始数据后，将开始软件的数据分析部分。

积分

- 信号中的色谱图/电泳图谱对象将按照“积分事件”对话框中指定的设置积分。
- 确定峰的起点、峰顶、保留/迁移时间及峰的终点。
- 在每个峰下定义基线以确定最终峰高及峰面积。
- 积分结果被创建为“积分结果”列表。

峰的识别及定量计算

- 利用保留/迁移时间，软件对照校正表中的已知组份来识别峰。
- 软件利用峰高或峰面积，通过在“校正表”中指定的校正参数来计算每个被检测的组分的含量。

光谱库检索（仅适用于 LC 3D、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统，可通过经典报告获得）。

对于具有紫外可见光谱的所有峰，可以进行预定义的光谱库的自动检索，并根据紫外可见光谱识别样品中的组分。有关详细信息，请参见[了解您的光谱软件](#)。

使用方法

运行方法时将发生什么？

峰纯度检测（仅适用于 LC 3D、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统）

对于具有紫外可见光谱的峰，您可以计算该峰的纯度因子并将其保存在记录中。如果在指定自动谱库检索时选取了“检查纯度”框，或选择了适当的报告类型，则峰纯度将在每次分析结束时作为方法的一部分自动被确定。有关详细信息，请参见[了解您的光谱软件](#)。

打印报告

运行中对组分进行了定性及定量分析，生成报告。

注意

如果您运行了一个更新自定义字段宏，报告将会在此宏执行后生成。

更新自定义字段值

ChemStation 允许为样品和特定化合物定义自定义字段。这些自定义字段值可被包含在报告中。默认情况下，值为静态。**更新自定义字段值**能让您在报告生成前修改自定义字段值。更新字段在经典和智能报告中均可用。

Disk2 > UCL 文件夹中有一个示例宏。

按以下方法执行更新自定义字段宏：

- 1 临近创建报告时，作为标准数据分析的一部分
- 2 每次在**数据分析**视图中创建报告/报告预览时（即使运行时选项表中未选择标准数据分析）

注意

重新处理期间，自定义字段值总是被序列/样品中定义的静态值覆盖。自定义字段将仅在临近报告生成前修改。因此，如果您使用了一个不包含更新自定义字段宏的方法来重新处理序列，则值将被重新设置为定义的静态值。

自定义数据分析

使您可以运行自定义的宏来评价分析数据。

标准数据分析已启用时，这些宏在报告生成后运行。此时结果不可用于报告（经典报告和智能报告都不可）。标准数据分析已禁用时，这些宏在数据采集后运行。

保存 GLP 数据

将二进制记录 GLPSave.Reg 随数据分析方法一起保存在默认的数据目录中。这一功能是为帮助验证数据的原始性和各个分析的质量而设计的。

GLPSave.Reg 二进制文件包含不可编辑的、受校验和保护的记录文件中的以下信息：

- 主要仪器设置点（可以通过图形方式检查）
- 色谱或电泳谱信号
- 积分结果
- 定量结果
- 数据分析方法
- 工作日志

仅当在运行时选项表中通过选取复选框激活“保存 GLP 数据”功能时，这些数据才会被保存。在 ChemStation 的“数据分析”菜单中只能查看 GLP 数据，但不能对它们进行编辑。

后运行命令或宏

如果指定了后运行命令或宏，则将在数据处理完成后执行该命令或宏，例如，将数据复制到磁盘以进行数据备份。

将方法的副本与数据一起保存

仅当在“运行时选项表”中激活了**将方法与数据一起保存**时，才会在数据采集完成后执行该操作。它会将用于采集的方法复制到数据目录中，名称为RUN.M。RUN.M 包含 DA 和 ACQ 参数。它是只读的，因此为您提供了一种可以在以后重构分析的方法（即使在这期间该方法已更改）。您可以看到方法中或选定参数中的更改对分析产生的影响，有助于对方法进行优化。

将方法副本作为 DA.M 与数据一起保存 (ChemStation 缺省设置)

无论在运行时选项表中标记了哪些项目，都会将已执行方法数据分析参数的副本作为 DA.M 与数据文件中的报告一起保存。当**标准数据分析**部分完成或在“数据分析”视图中创建报告时，就会执行上述操作。

3

数据采集

什么是数据采集?	66
在线监视器	68
在线信号监视器	68
在线光谱监视器	68
工作日志	68
状态信息	69
ChemStation 状态	69
状态栏	69
系统视图	69
规则和警报	71

OpenLab ChemStation 对 Agilent LC、GC、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统提供无缝仪器控制。其通过附加软件为 Agilent GC 和 LC 仪器的高级功能和 workflows 提供支持，并为研究和方法开发实验室提供灵活性。本章介绍了分析数据采集过程。

什么是数据采集？

在数据采集过程中，分析仪器所采集的所有信号在检测器中都将由模拟信号转换为数字信号。数字信号会以电子方式传输到 ChemStation，并存储在信号数据文件中。

路径选择

您可以利用单个运行和序列的灵活数据存储来指定不同的保存位置，而无需重新配置。使用**视图**菜单的**首选项**对话框中的**路径**选项卡，可以添加除缺省路径¹C:\Users\Public\Documents\ChemStation\x\DATA（其中 x 是仪器编号）。用**添加**和**删除**按钮可以方便地删除现有路径，也可以浏览到选定位置，将路径添加到**首选项**中。

不能从列表中删除默认路径，但可以在控制面板的**配置仪器**对话框中更改它。有关更改默认路径的更多信息，请参阅《OpenLab ChemStation 管理员指南》。

通过 ChemStation 菜单**文件 > 打开 Windows 资源管理器...**可以轻松访问实际仪器的数据目录（例如 C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1）。此外，也可使用开始菜单的**仪器数据**快捷方式。

¹ 路径可在安装过程中定义。

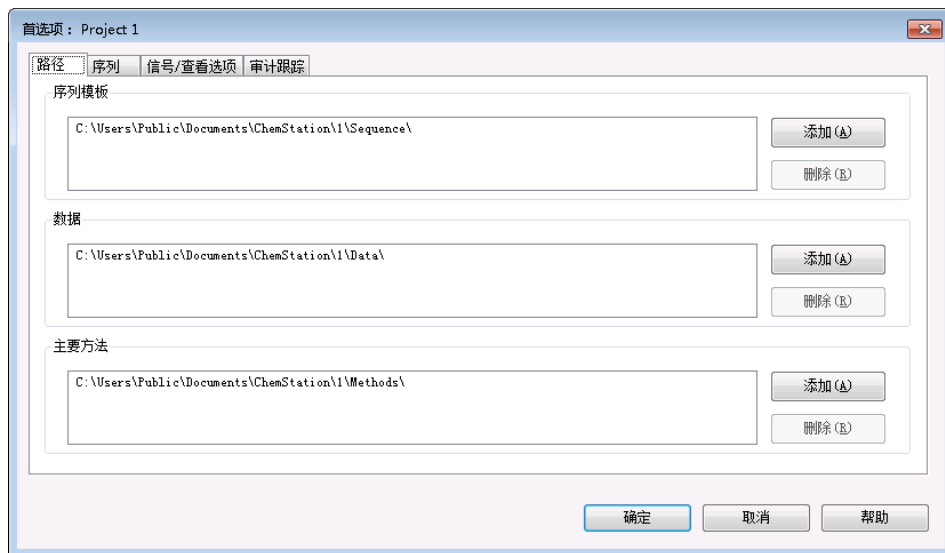


图 9 首选项对话框中的路径选项卡

所有新指定的数据路径在随后执行运行时都可在**样品信息**和**序列参数**对话框中选择。

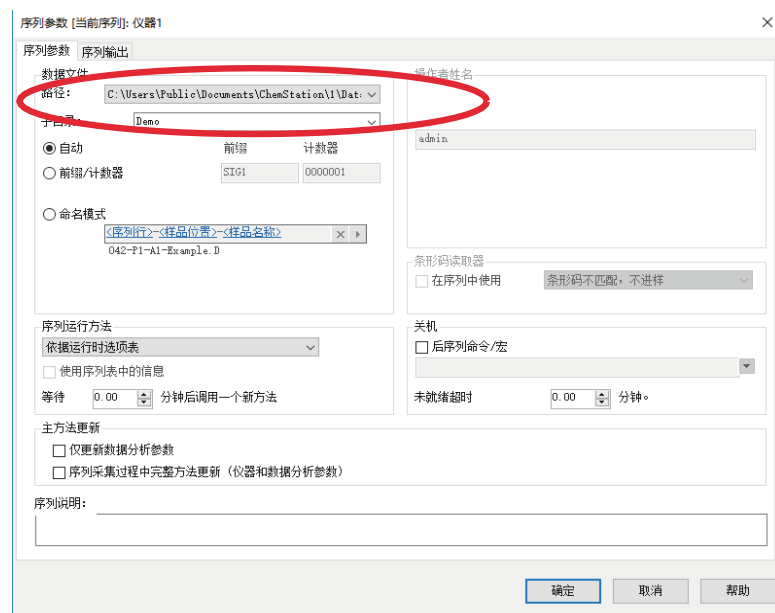


图 10 序列参数对话框中的数据路径选择

在线监视器

在线信号监视器

在线信号监视器可让您监控多个信号，如果相关仪器支持，还能在同一窗口中绘制仪器性能图。您可方便地选择要查看的信号，以及调整时间和响应轴。支持此功能的检测器会有一个平衡按钮。

您可通过在屏幕上移动十字线光标在消息行上显示绝对信号响应。

在线光谱监视器

在线光谱监视器可显示作为波长的函数的吸收值，或质谱的 m/z 值。您可以调整所显示的波长范围和吸收值刻度。

工作日志

工作日志显示的是分析系统生成的消息。这些消息可以是模块的错误消息、系统消息或事件消息。工作日志会记录这些事件，不会考虑是否显示这些事件。

状态信息

ChemStation 状态

ChemStation 状态窗口显示了 ChemStation 软件的总体状态。

单个分析运行时：

- ChemStation 状态窗口的第一行显示的是正在运行，
- 状态窗口的第二行显示的是当前方法状态，此外，
- 原始数据文件名称与实际运行时间（单位为分钟）一同显示在第三行中（如果是 GC 仪器，还会显示前后进样器文件）。

仪器状态窗口提供的是仪器模块和检测器的状态信息。其会显示单个组件的状态和适用的当前条件，例如压力、梯度和流量数据。

状态栏

ChemStation 系统的图形用户界面由“方法和运行控制”视图中的工具栏和状态栏组成。状态栏由系统状态字段和有关当前调用的方法和序列的信息构成。如果调用方法和序列后对其进行了修改，则将用黄色星号或齿轮进行标记，具体取决于仪器。黄色 EMF 符号表明使用限制超出了 LC 消耗品（例如灯）的设定值。状态栏还显示“运行队列”的状态，可以是**恢复**、**暂停**或**阻止**。

系统视图

如果配置的分析仪器（例如，Agilent 1200 Infinity LC 系列模块或 Intuvo 9000 GC 系统）支持，您可以显示 ChemStation 系统的图形系统视图。这使您可以快速检查系统状态。从**方法和运行控制**视图的**视图**菜单中选择**系统视图**项目可以激活系统视图。它是 ChemStation 系统的图形化表示。并用下面所述颜色编码显示当前状态。



图 11 系统视图 (以 GC 为例)

表 6 用于指示模块或仪器状态的颜色

颜色	状态
灰色	脱机
绿色	空闲
橙色	未就绪
红色	错误
青色	待机 (例如, 灯关闭)
紫色	预运行, 后运行
品红色	正在进样
蓝色	正在运行或后运行

另外, 您还可以显示实际参数设置的列表。除了浏览状态外, 系统视图还允许快速访问每个系统组件的设置参数的对话框。

有关系统视图的详细信息, 请参见在线帮助系统的仪器部分。

规则和警报

对于支持此功能的仪器驱动程序（例如，8890 GC），可选择**仪器 > 管理规则和警报...**来配置 ChemStation 针对采集期间特定事件的反应方式。

例如，缺少样品瓶或容器是色谱中的常见错误。例如，ChemStation 可能会继续、暂停、停止或中止某个序列。

注意

涉及的事件与可能的行为取决于仪器驱动程序。

4

自动分析/序列

什么是自动分析?	74
什么是序列和序列模板?	74
序列参数	75
图示样品录入	77
序列表	80
创建序列 (序列和序列模板)	80
简易序列	84
概述	84
使用 简易序列 选项卡 (序列)	85
使用 简易序列设置 选项卡 (模板)	86
使用序列 (序列和序列模板)	88
单个运行的数据采集	88
序列中的数据采集	88
主方法的自动更新	89
优先样品	90
含对照样品的序列分析	91
含空白参考样品的序列分析	91
运行序列	92
使用高通量选项	93
序列暂停	93
停止序列	94
序列中断	94
部分序列运行	94
创建自我组装的结果集	97
序列日志文件	98
序列运行时会发生什么?	98
序列数据文件结构	100
数据文件结构	100
“首选项” - “序列” 选项卡	101
数据文件命名	105
结果集迁移	108
后序列操作	110
未就绪超时 (仅限于 LC 和 CE)	110
等待时间 (仅限于 LC 和 CE)	110
自动重新校正	111

指定重新校正 112

序列表和样品信息对话框中的重新校正参数 112

序列类型 114

简明校正序列 114

循环单级校正序列 114

循环多级校正序列 115

合并使用简明和循环校正 119

带区间循环的循环校正序列 121

带多个包含相同标样稀释因子的样品瓶的循环重新校正序列 124

本章介绍了自动分析的概念。它阐述了在 ChemStation 中如何使用序列，运行序列时会发生什么以及如何自定义序列。

什么是自动分析？

自动分析是对多次进样进行自动分析。

ChemStation 软件的序列部分允许用户进行自动采样、数据评估和生成报告。

什么是序列和序列模板？

序列是自动进行样品分析的一系列指令。使用序列可对每个样品自动进样，并根据为该样品指定的方法采集和分析数据。序列中的每个样品瓶都可以使用不同的分析方法来进行分析，由此，可使用色谱/电泳图谱条件和评价参数的不同设置。

序列文件 (*.s) 是可用于多次运行采集的“序列模板”；但是这些模板不用于在**数据分析**中进行重新处理。运行序列模板时，将创建包含所有相关文件的一个结果集。如果重新使用序列模板，ChemStation 会为每次重新使用创建新的结果集。出于向后兼容性的原因，也可以将序列作为一系列单个运行来运行。有关详细信息，请参见第 103 页的 [序列执行模式](#)。

在 ChemStation 资源管理器中可以看见可用的序列模板。要快速、轻松地浏览，可以使用**首选项**对话框的**路径**选项卡将其他序列模板位置添加到 ChemStation 资源管理器选择树状图中。

可以为仪器设置多个序列，并为它们安排合适的顺序。**运行队列**选项卡显示仪器的总工作量（序列以及单样品、暂停等）。您可以直接在“运行队列”选项卡中定义要处理的项目的顺序。有关“运行队列”的更多信息，请参见第 129 页的 [关于运行队列](#)。

序列参数

序列参数对话框包含序列中所有样品瓶通用的信息。如要将其打开，请选择方法和运行控制视图中的序列菜单。

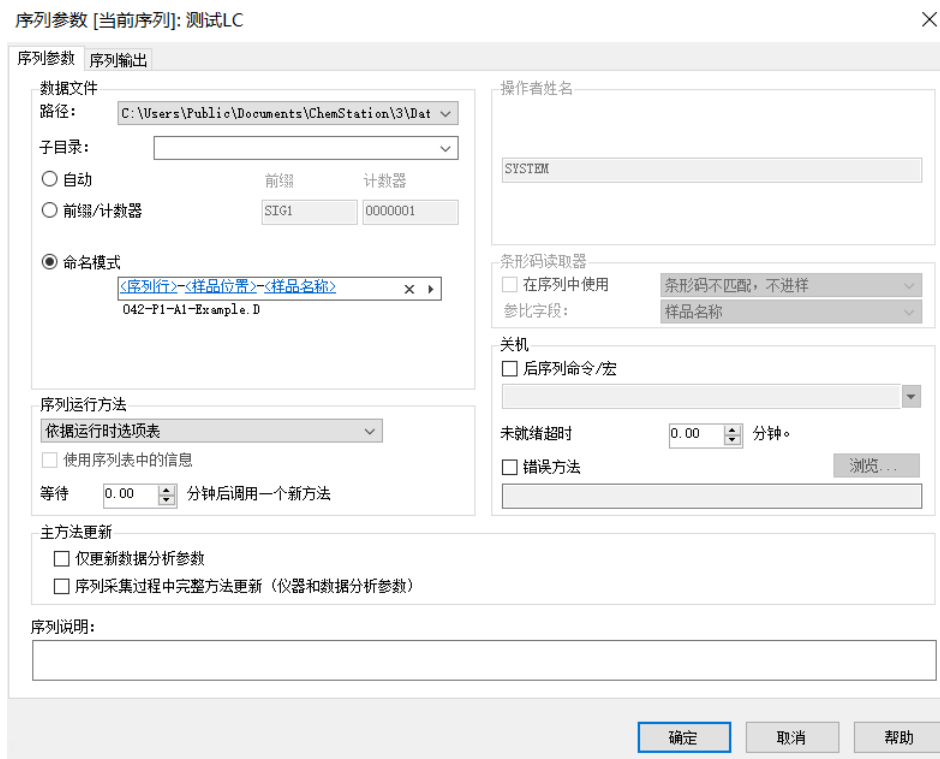


图 12 序列参数对话框

使用该对话框可以：

- 使用**路径**组合框选择数据目录，
- 选择特定的“方法和运行”参数部分确定序列如何进行，并
- 指定序列完成后发生的情况，例如，通过使用**关闭**命令宏。有关自定义命令及其设置方法的详细信息，请参见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。

例如，您可以选择下列任何一项：

- 执行运行时选项表；
- 只做采集，或
- 仅进行重新处理 - 针对使用 ChemStation B.01.03 版之前的版本采集的数据 - 针对采用旧有选项**专有文件夹创建关闭**采集的数据。

注意

使用 ChemStation B.01.03 版及以前的版本采集，或者使用旧有选项**专有文件夹创建关闭**采集的序列数据，需要使用**方法和运行控制**视图中的**重新处理**选项进行重新处理。

使用 ChemStation B.02.01 版和更高版本采集的序列数据，需要使用**数据分析浏览表**中的**重新处理**选项进行重新处理。

如果选择了**重新处理**选项，用户可以选择使用样品开始分析时设定的样品数据，或通过激活**使用序列表信息**复选框，在序列表中输入新的数据来使用更新后的样品数据：

- 设定序列中是否使用条形码，以假定系统已装有条形码读取器时，如何处理条形码不匹配的情况。

图示样品录入

图形样品录入提供了样品容器和调用样品的直观视觉显示。如果要指定方法和容器位置等不存在的参数（例如，用于从收集的馏分生成重新进样序列），可手动创建新模板，或调用现有序列。

“样品容器”指的是盛放样品/样品瓶的仪器托盘或样品盘。根据仪器种类，样品容器有多种尺寸和样品瓶容量。样品容器类型以 XML 格式说明特定托盘或样品盘的物理性质。通过导入包含样品容器类型定义的 XML 文件，可将自定义样品容器类型集中存储于实验室，以供日后使用。OpenLab 控制面板中的**导入样品容器类型**按钮用于导入自定义样品容器类型。

您可以在**样品录入**选项卡中选择一个样品容器。您可以使用图形化用户界面轻松创建新的样品条目，只需单击容器显示即可。会使用与样品类型对应的颜色代码来表示样品位置。

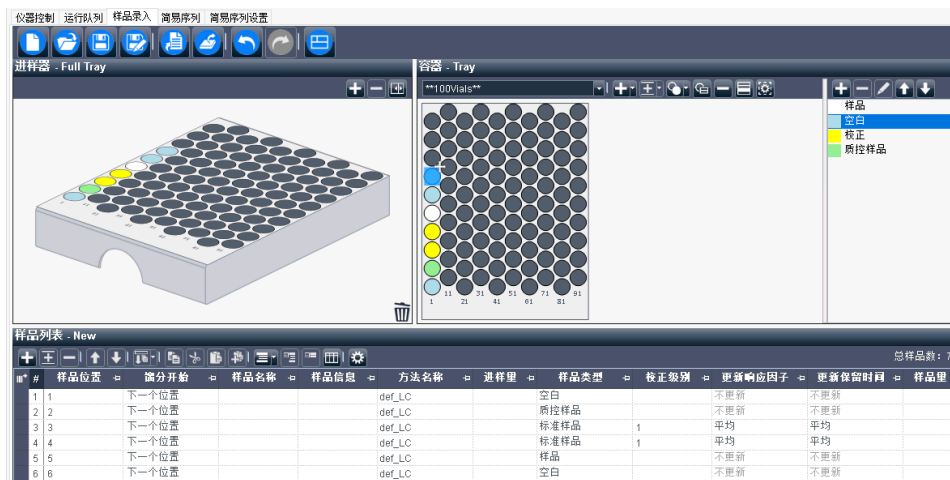


图 13 样品录入选项卡

属性选项 (⚙️) 能让您为多个样品定义模式。您可使用这些选项显示排序箭头。只需用鼠标拖动多个位置。

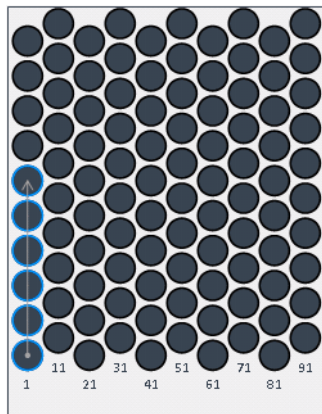


图 14 排序箭头

对于所有允许重新排列样品盘的自动进样器，您甚至可以把整个样品盘拖动到其他位置或抽屉。样品瓶位置会在样品列表中自动调整。可以使用序列模板保存容器配置，也可导出为 PDF 格式。

您也可准备与具体位置或抽屉不相关的样品板。这些“存放位置”与您在工作台上准备的样品板相对应。它们将与序列模板中的其他设置保存在一起。您可稍后为相关仪器调用该序列模板，然后将准备的样品板分配到正确的位置和抽屉。

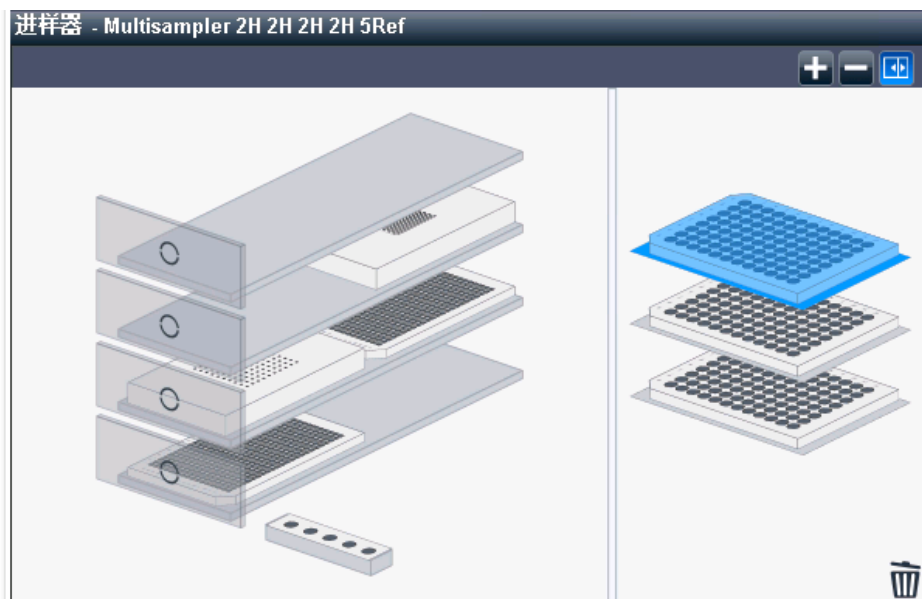


图 15 样品录入选项卡中的多功能进样器

样品列表表格提供了许多功能，可以帮助您对表格进行编辑，例如：

- 复制单元格范围
- 追加复制的单元格或行
- 根据特定信息对样品进行分组
- 使用智能自动增量进行批量输入
- 对单个或多个已选行进行重新排序
- 将各单元格内容或表格所选区域复制到剪贴板

在样品列表中准备的信息与序列列表相同（请参阅第 80 页的序列列表）。完成后，请将样品列表以序列的方式提交到运行队列。

注意

序列运行时，将无法再编辑样品列表。在线编辑只能在序列列表中进行。

注意

如要继续在 ChemStation 中编辑该序列模板，请使用样品录入选项卡中的保存按钮来保存。之后使用文件或序列菜单再次调用序列模板。

注意

容器配置未在仪器面板的图形库显示中更新。

序列表

序列表决定使用何种方法处理样品瓶，并将要采集和分析的样品瓶的数据进行排序。该表格还包含每个样品的信息，包括样品盘¹上的样品位置、样品名称、定量参数和重新校正参数。

对于支持双采样的仪器 (GC), 表中会另行显示进样器位置栏（值可能是前或后），同时双进样复选框显示于底部。

- 如果您选择了**同时双进样**复选框，则系统会合并运行，并在每次运行时同时处理两个样品。行编号会进行相应调整。在该模式下，您可通过**前**或**后**进样器位置对序列表进行排序。
- 如果不选择该复选框，则每次运行处理一个样品。运行的顺序正如表中所显示。您可交替使用前后进样器。

关于本表中各项的详细说明及保存在方法中的信息是如何相互影响的，请参阅帮助部分。


创建序列（序列和序列模板）

使用序列表指明要在序列中运行的样品、方法和样品瓶。序列表以序列运行的顺序列出了序列中的每个样品，还包含每个样品所必需的样品瓶编号或样品位置、方法、校正信息、样品含量、ISTD 乘积因子和其他数据。

选择显示的列

序列表显示的信息是可以配置的：

- 左移或右移该列，获取与工作最为相关的列。
- 将工作时不需要的列从视图中排除出去。

如要更改序列表的视图和内容，请单击序列表工具栏中的 （**列选择器**）。选择希望在序列表中显示的列。根据所安装的软件包，还会有其他列可用。例如，如果安装了 LC/MS 或 CE/MS，**目标质量**列将可用。

¹ 可在仪器配置中定义或在控制面板中导入的新样本容器类型

选择模式

与 Microsoft Excel 等应用程序类似，您可以选择多个单元格或单元格范围：

- Ctrl + 单击可选择多个单元格
- Shift + 单击可选择单元格范围

复制、剪切、粘贴

- **复制**：您可以复制所选单元格，并将其粘贴到其他应用程序（例如 Microsoft Excel）。复制的信息中包含列标题标识。例如，您可以通过将信息粘贴到 Microsoft Excel 来查看这些标识。即使列的顺序不同，也可借助这些列标题标识将值重新复制回 ChemStation 序列表。
- **剪切**：如果需要剪切整行，则会删除该行，并将该行置于剪贴板中。如果只剪切某列或单元格，该行仍将保留，只会清除单元格的值。
- **粘贴**：如果选择了整行，粘贴操作会在新行中插入剪贴板中的值。如果复制的内容中包含列标题，则会使用这些列标题将值映射到对应的列。如果只选择了一行，会自第一行向下（逐行）粘贴剪贴板中的值，并使用剪贴板缓存中的内容在右侧填充尽可能多的列。如果只选了一个单元格，将用剪贴板中的值填充所选单元格下方和右侧的单元格。

撤销、恢复

序列表允许撤销或恢复上一个操作。

插入、添加或删除行

若要插入或添加新的空行或删除现有行，请使用工具栏中的对应按钮：



(插入行)




(添加行)




(删除行)

使用批量输入功能

如果您有多个样品使用统一方法，可使用**批量输入**图标  快速将这些样品输入到序列表中。该功能会将某个单元格中的信息复制到之前选择的单元格或列中。对于样品位置、样品名和数据文件名称增量规则，将使用**批量输入选项**对话框中的定义。对于其他列，该功能只会复制字段（例如，方法名称、每个样品瓶的进样次数。如果进行了指定，还会复制样品含量、ISTD 含量、乘积因子和稀释因子）。


排除重复只适用于使用唯一值的列，例如 LIMS ID。此外，不会将校正设置复制到不是校正标样的样品。

您可使用**批量输入选项**  对话框为批量输入功能指定不同的行为。您可通过该对话框为样品位置和样品命名设定规则。在多孔板上可以选择增量模式的方向，还可选择这是否是多孔板上唯一的子集矩形。

数据文件批量输入很特殊；它会获取数据文件的全名并追加一个格式为 "--001" 的计数器。对于 GC，还会追加“F”或“B”，这具体取决于批量输入完成时所选的运行进样器。

新建行向导


您可使用该向导高效地创建大型序列表。您可通过不同方式执行该操作：

- **简单模式**：使用所有需要复制的值填充一行。选中该行并使用**插入/批量输入向导**  重复该行 n 次。此外，您还能定义完成一定数量样品后插入校正或空白运行的规则。
- **高级模式**：填充多个示例行来创建模式。然后全选这些行并调用**插入/批量输入向导**。可以切换校正、质控样品、空白运行和样品运行次数、校正级别和重新校正设置。

例如，您还可以选择让所有校正从同一样品瓶开始运行，并且仅使用样品瓶增量。样品位置会使用起始位置的智能增量（每个已复制部分的偏移量）进行重复，用以保持所有样品位置距离。如果不在该对话框中设定规则，那么只会向下复制该值

排除重复只适用于使用唯一值的列，例如 LIMS ID。

筛选序列表


您可使用**筛选选项**  应用一组条件，来显示序列表行的子集。

通过筛选来查看压缩的序列表。例如，您可以选择只显示特定样品类型、方法、校正级别、样品位置或样品名称。


这能够快速检查一致性，或通过将向下填充功能应用于筛选的列表，以便只编辑某一组序列行。例如：

- 更新特定样品位置的所有样品的样品含量。
- 更改特定校正级别的样品瓶或样品位置。


读取条形码

如果您的仪器支持读取条形码，请单击**读取条形码**  来获取样品名称。选择希望读取条形码的序列表行或样品位置单元格。可以选择一行或多行。条形码位于每个指定样品位置的样品名称单元格中。

使用“自定义字段”按钮

如果已在序列表所使用的方法中设置自定义字段，请选择**自定义字段**按钮 ，以便编辑各样品（样品相关自定义字段）或样品方法中各化合物（化合物相关自定义字段）的自定义字段值。

预览序列

有了**序列预览**  后，会打开一个对话框来准确显示序列执行时的样子，包括以正确顺序显示包括的所有重复校正、QC 样品和空白。

简易序列

概述

简易序列是一个用于快捷地从模板中设置序列的用户界面。模板指定用户应当查看或编辑的参数。校正设置显示序列概览，它具有易于使用的拖放界面，用于指定校正类型和样品位置。通过**简易序列**，用户可通过样品数不同、但十分类似的特定模式快速创建序列。

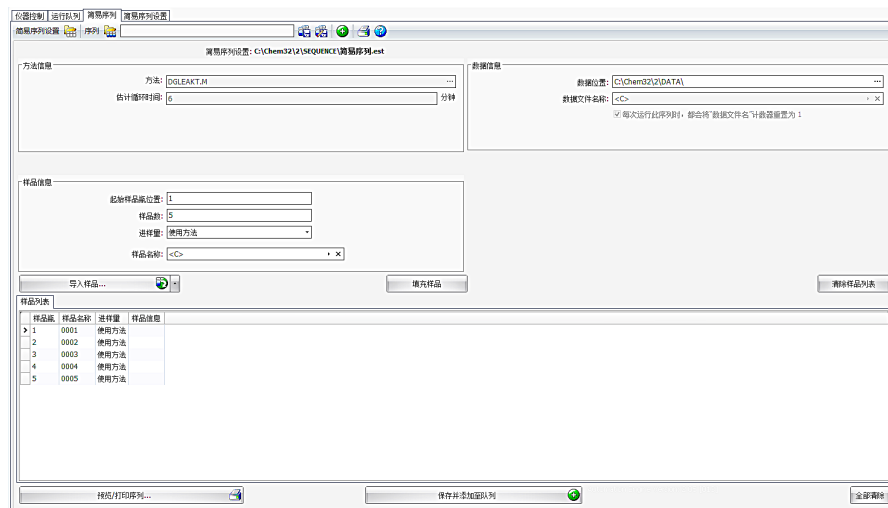


图 16 简易序列选项卡

使用简易序列选项卡（序列）

简易序列选项卡用于在简易序列设置选项卡创建的模板中创建序列。另存为 CSV 格式的样品也可导入。

定义序列

- 1 从简易序列选项卡中，通过单击**打开简易序列设置**图标打开模板。
- 2 如果需要，请进行更新。可以包括样品瓶位置、调谐液瓶位置、数据或序列位置。可供编辑的参数取决于模板配置。
- 3 如果预填的样品与新样品位置不匹配，请单击**填写样品**重新填写表格。
- 4 单击**预览/打印序列...**来预览序列
- 5 保存序列。

注意

只要序列状态为**待运行**，就可以在队列中编辑该序列。

- 6 单击**保存并添加至队列**来将序列提交至序列队列。

导入样品数据

样品数据集可导入到简易序列中。导入样品前必须正确设置和设定 CSV 文件的格式。有关如何创建 CSV 样品数据文件，详细信息请参见在线帮助。

- 1 从简易序列选项卡中，通过单击**调用简易序列设置**图标打开模板。
- 2 单击**导入样品...**
- 3 选择您希望导入的 CSV 文件。
将会导入所有有效字段。

注意

如要导入**后样品列表**的样品数据，请先确保选择并显示了**后样品列表**，然后再按下**导入样品**按钮。

- 4 通过检查样品列表来确认字段。

使用简易序列设置选项卡（模板）

简易序列设置用于创建模板，该模板为创建序列的起点。有两个面板：“样品”和“校正”。**样品**面板指定的是方法、样品、数据和序列信息。该模板还用于指明哪些参数的状态为隐藏或只读。**校正**面板所提供的是用来配置和查看校正运行的图形界面。该拖放界面简单易用，可用来指定校正类型（循环和区间循环）和样品位置。

创建简易序列模板：

- 1 从**简易序列设置**选项卡中选择**样品**面板。打开现有模板或创建新建模板。
- 2 选择**方法**。如果进样源为“双”，将会显示双进样选项。可为后信号指定后分析方法。方法是模板所需的唯一参数。
- 3 根据需要输入样品运行的估计持续时间（分钟）。此时间等于从一个样品开始运行到下一个样品开始运行的时间。此参数用于估计序列的总预期持续时间。如果您不想使用“估计循环时间”功能，请将此字段留空。
- 4 指定**起始瓶位置**、**样品数**和**样品名称**。
- 5 选择**数据位置**。
- 6 选择**序列位置**并指定**序列名称**。
- 7 为模板输入注释。
- 8 指明哪些参数的状态为隐藏或只读。输入**进样/样品瓶**、**样品含量**、**ISTD 含量**、**进样量**等的默认值。这样可以在**简易序列**选项卡中创建序列时降低错误几率。
- 9 保存模板。

定义校正：**先决条件**

模板中使用的方法应已校正为必需的水平。

- 1 从**简易序列设置**选项卡中选择**校正**面板
- 2 从**校正模式**下拉列表中选择**循环**、**区间循环**或**简单校正**。
- 3 **序列视图**包含以下几部分：
 - **序列开始**
 - **区间循环/循环**
 - **样品/进样**
 - **序列结束**
- 4 在序列的**样品**区域，根据样品数或进样次数设置**校正间隔**。
- 5 通过将图标从**样品类型**区域拖动至**序列视图**区域来设置 **样品类型**、**空白**、**调谐液**或 **QC 样品**。
- 6 为每个样品类型设置参数，设置为**隐藏**或**只读**。
- 7 在**简易序列**概览中验证校正模式。
- 8 保存模板。

使用序列（序列和序列模板）

可通过“序列”菜单访问和创建序列（序列和序列模板）。序列的创建和保存方式与方法基本相同。保存序列时，会创建一个扩展名为.S的文件。例如，想要再次编辑或使用序列时，请使用“序列”菜单中的“调用序列”项。

单个运行的数据采集

对于单个运行，数据文件直接保存到各自的子目录中。因为一个单个运行只使用一个方法，该方法无需复制到子目录中；所有操作都将直接用主方法来执行。完成方法的采集部分之后，采集参数的副本将保存到文件 ACQ.txt 中。执行主方法的数据分析部分之后，数据分析参数的副本保存到数据文件目录 (DA.M) 中。

序列中的数据采集

为了运行序列，必须有适当的预定义方法。这些方法就是以上所述的主方法。主方法和序列模板通常在 ChemStation 的**方法和运行控制**视图使用。因此，在**方法和运行控制**视图中，可通过 ChemStation 资源管理器访问主方法和序列模板。

序列模板会在序列列表中引用这些方法。

当您在默认执行模式下使用序列模板 <sequence_name>.S 运行序列，并使用主方法 <method_name>.M 时，将创建一个新文件夹（“结果集”），其中包含序列运行所生成的所有文件。该结果集文件夹的位置是由**序列参数**对话框中的设置决定的（请参见第 75 页的图 12）。结果集文件夹的名称和执行模式是由**首选项**中的设置决定的（请参见第 101 页的“首选项” - “序列”选项卡）。

采集序列开始时，将从主方法文件夹把序列列表中指定的方法复制到结果集中。此外将创建该序列的一个副本，和序列日志、批处理 (*.b) 文件一起放在结果集中。所有方法更新（例如，校正表的更新）都将写入结果集中的该序列方法。如果使用智能报告，您在“序列参数”或“方法属性”中选择的报告模板也会复制到结果集中。此时，所有必需文件都可用于将来数据查看和数据重新处理，而不受其他序列运行时对主方法或序列模板所作更改的影响。

采集期间，数据文件将存储到结果集中。在每个数据文件 (*.D) 内，会为这次特定运行保存序列方法的副本。文件 ACQ.txt 包含序列方法的采集参数，保存了采集特定数据文件时方法的状态。文件夹 DA.M 包含序列方法中使用的数据分析参数的副本。

如果序列文件夹中保存了这些文件，则可以在不改变主方法或序列模板的情况下执行数据查看和数据重新处理操作。如果需要，也可以将方法更改再次保存到主方法中。

注意

结果集必须总是包含所有数据文件的完整集合(*.D)。如果删除了部分数据文件，将结果集上传到中央数据存储将会导致问题。如果需要缩短序列，从缩减的序列行集创建自我组装的结果集（请参阅第 97 页的 [创建自我组装的结果集](#)）。

主方法的自动更新

这些功能用于选择是否以及如何更新序列中使用的主方法。例如，这样可以确保校正表随时更新。

可以在**序列参数**对话框（参加下图）中激活这些功能：

- **仅更新数据分析参数：**

如果要在序列结束时更新主方法中结果集中的所有方法的数据分析参数，请选择该复选框。

- **序列采集过程中完整方法更新 (仪器和数据分析参数)：**

如果要在每次运行结束时使用对仪器参数的更改来更新主方法，请选择中该复选框。与此同时，也会更新数据分析参数。如果仪器参数未发生改变，则会在序列结束时更新数据分析参数。

更新主方法的前提条件是同一主方法目录中仍有相应的主方法（与序列方法同名的方法）仍存在于当初复制到结果集时的同一主方法目录。

要更改复选框设置和更新主方法，您需要**保存方法更改**和**编辑序列总结**的权限。关于用户管理和权限的更多信息，请参见《OpenLab ChemStation 配置指南：用户管理和仪器配置》(CDS_CS_configure.pdf)。

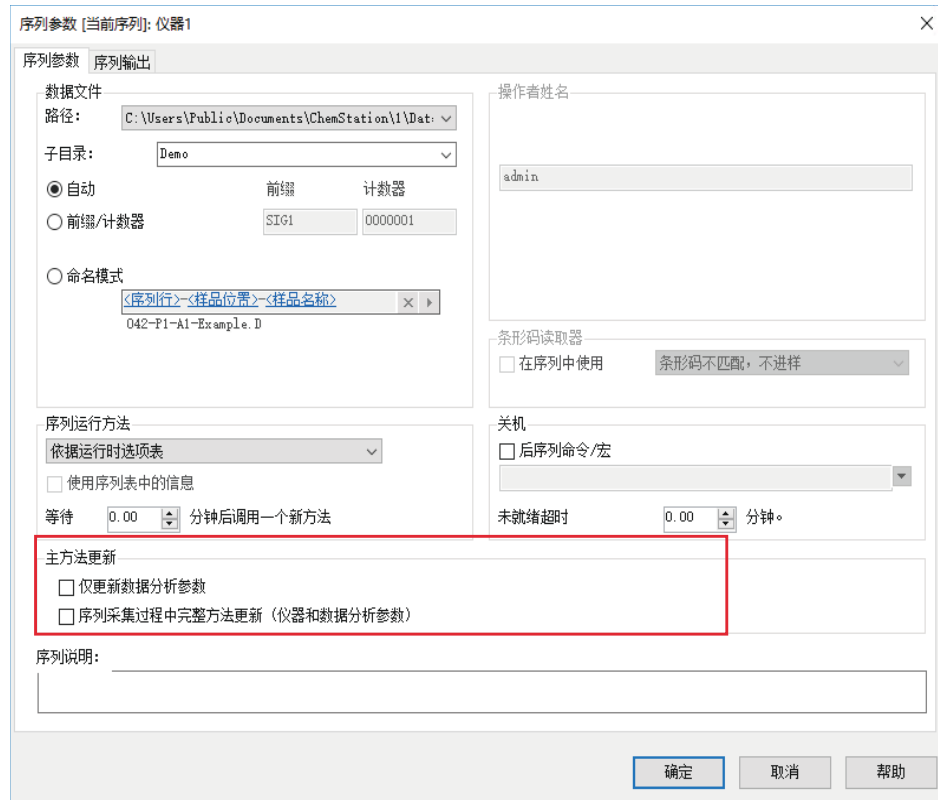


图 17 序列参数对话框中的更新主方法选项

注意

由于此功能会降低性能，因此如果您的序列包含成百上千个方法，则不建议使用此功能。

优先样品

完成当前方法后，可暂停目前运行的序列。可暂停序列，以便使用相同的或其他的方法分析优先样品。之后可恢复序列，而序列将会继续使用序列暂停时使用的样品。

含对照样品的序列分析

可以在序列表的“样品类型”字段中指定对照样品。用于分析对照样品的方法必须包含校正表，该表说明了化合物中某一对照样品的范围。如果超出了您指定的对照样品限值，序列将停止并在工作日志中写入一条消息。如果您使用的是 ChemStation 报告格式之一，则对照样品限值还将打印在为这些分析生成的报告上。有关如何确定包含对照样品的序列的详细信息，请参见在线帮助的“方法”部分。

含空白参考样品的序列分析

《欧洲药典》规定必须使用参比信号来评估信噪比。您可以为相应的样品选择空白样品类型，以在序列表中指定参考数据文件。

如果使用多个参考文件，这些文件的顺序极为重要。ChemStation 使用一个参考文件进行所有的连续运行，直到在序列表中指定了新参考文件。空白样品的参考文件充当其自身的参考。下面的概述显示包含两个空白样品的序列示例：

表 7 包含空白样品的序列示例

	样品	数据文件	参考文件
1	Sample1	DF01.D	
2	Blank1	DF02.D	DF02.D
3	Sample2	DF03.D	DF02.D
4	Sample3	DF04.D	DF02.D
5	Blank2	DF05.D	DF05.D
6	Sample4	DF06.D	DF05.D
7	Sample5	DF07.D	DF05.D

请参阅《参考指南》以了解关于信噪比计算的详细信息。

运行序列

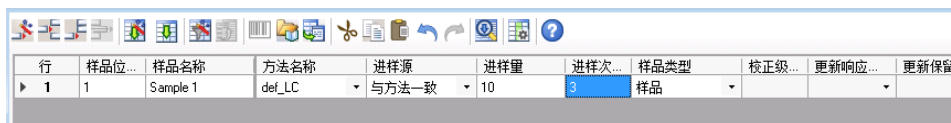
将序列提交至队列后，序列列表将会变为逐个运行的列表。它会准确显示序列执行时的样子，包括修正序列中包括的所有重复校正、QC 样品和空白。生成的序列文件将会保存到结果集中。

锁定已采集的或目前正在采集的序列行。它们不再能编辑。此外，对于特殊的工作流程，例如您使用顶空仪器或配置了重叠进样，会锁定数个暂停运行。

注意

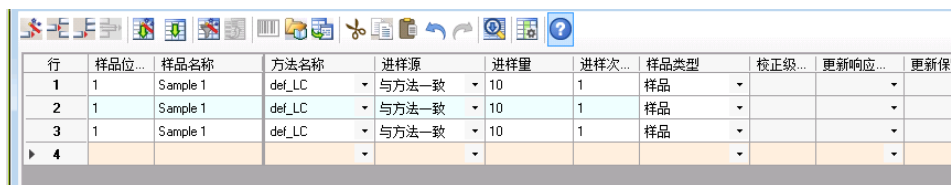
如果您要在一个序列处于采集过程中时添加序列行，相应的数据文件名称取决于您在序列参数中选择的命名方案。使用**命名模式**命名架构，使用已知的令牌即可以在运行开始时确定数据文件名称。

示例：拥有多个进样的序列



行	样品位...	样品名称	方法名称	进样源	进样量	进样次...	样品类型	校正级...	更新响应...	更新保留
1	1	Sample 1	def_LC	与方法一致	10	3	样品			

图 18 提交至队列前的序列模板，有 3 个进样的样品



行	样品位...	样品名称	方法名称	进样源	进样量	进样次...	样品类型	校正级...	更新响应...	更新保留
1	1	Sample 1	def_LC	与方法一致	10	1	样品			
2	1	Sample 1	def_LC	与方法一致	10	1	样品			
3	1	Sample 1	def_LC	与方法一致	10	1	样品			

图 19 提交至队列后的序列文件，3 个单独的行

示例：带循环校正的序列



行	样品位...	样品名称	方法名称	进样源	进样次...	样品类型	校正级...	更新响应...	更新保留...	校正间...	样品量	ISTD1
1	1	Calibration 1	BRACK	与方法一致	2	标准样品	1	区间循...	替换	3		
2	2	Calibration 2	BRACK	与方法一致	2	标准样品	2	区间循...	替换	3		
3	11	Sample A	BRACK	与方法一致	1	样品						
4	12	Sample B	BRACK	与方法一致	1	样品						
5	13	Sample C	BRACK	与方法一致	1	样品						
6												

图 20 提交至队列前的序列模板，带区间循环的循环校正



行	样品位...	样品名称	方法名称	进样源	进样次...	样品类型	校正级...	更新响应...	更新保留...	校正间...	样品量	ISTD1
1	1	Calibration 1	BRACK	与方法一致	1	标准样品	1	区间循...	替换			
2	1	Calibration 1	BRACK	与方法一致	1	标准样品	1	区间循...	替换			
3	2	Calibration 2	BRACK	与方法一致	1	标准样品	2	区间循...	替换			
4	2	Calibration 2	BRACK	与方法一致	1	标准样品	2	区间循...	替换			
5	11	Sample A	BRACK	与方法一致	1	样品						
6	12	Sample B	BRACK	与方法一致	1	样品						
7	13	Sample C	BRACK	与方法一致	1	样品						
8	1	Calibration 1	BRACK	与方法一致	1	标准样品	1	区间循...	替换			
9	1	Calibration 1	BRACK	与方法一致	1	标准样品	1	区间循...	替换			
10	2	Calibration 2	BRACK	与方法一致	1	标准样品	2	区间循...	替换			
11	2	Calibration 2	BRACK	与方法一致	1	标准样品	2	区间循...	替换			
12												

图 21 提交至队列后的序列文件，带区间循环的循环校正

使用高通量选项

有几种 LC 和 GC 自动进样器提供“高通量”选项以优化运行时间。使用此选项，序列重叠进样；当前采集仍在运行时，进样器会预取后续样品瓶并进行放置。这可为运行节省大量时间。

序列暂停

在序列暂停前将完成当前活动的运行，

序列分析暂停时，不可更改序列表文件名及数据文件名。在序列表中，您只能更改未执行的序列行，或当前序列行中的瓶号，您可以添加、删除和更改用于今后分析的序列行。

例如，为了增加一批新的样品，可能需要对运行中的序列进行编辑。您可以将此样品编入序列中，当 ChemStation 处理完当前运行的序列行中的样品后，即会对此样品进行处理。

停止序列

当前活动的运行将立即终止。但是，仍将为此次运行执行数据分析。序列停止后不能恢复。

如果要在停止序列之前完成当前运行，请暂停序列，等待运行完成，然后停止序列。

序列中断

中断功能可立即停止当前活动的序列。不执行数据分析。终止功能可作为紧急停止，需要重新启动当前会话。

部分序列运行

部分采集的结果集选择

您可以从下列选项中选择部分序列采集：

- 将部分序列采集到新的结果集中

或者

- 将部分序列采集到已有结果集中。

从部分序列执行将数据采集到已有结果集中，在以下场合可能有用：

- 必须覆盖一个数据文件（或若干数据文件），例如因为第一个位置使用了错误的样品瓶。
- 第一个位置只执行了序列的第一部分，必须通过执行部分序列来添加缺少的样品。序列采集期间发生仪器故障时，可能会出现这种情况。
- 采集已有行后，向序列模板追加了其他的行。其他的运行将添加到已有数据中。

注意

删除序列模板已采集部分中的行或为其添加新行将会导致数据文件命名出现严重的**不一致**。

因此，当您从**序列**菜单中选择**部分序列**时，将出现一个对话框，其中提供了从列表选择现有结果集还是创建新结果集的选项。

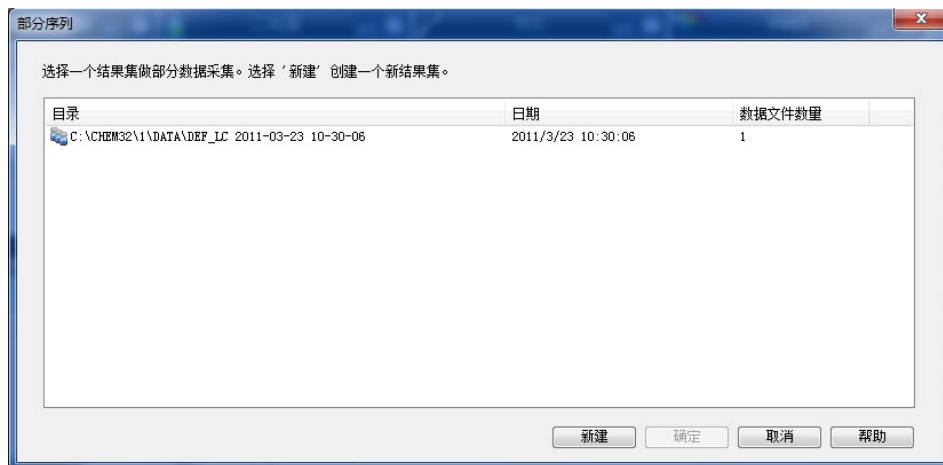


图 22 部分序列对话框

但是，为了保持结果集的一致性（这样就可以在 **数据分析** 中对其进行完全的数据重新处理），只提供了那些满足某些条件的结果集，以供部分采集之用：

- 序列模板（源序列）的名称和结果集（目标序列）中序列 *.S 文件的名称相同。
- 对序列文件而言，数据路径和子目录都必须相同。
- 源序列中的序列行数必须等于或多于目标序列中的序列行数。
- 对目标序列中的每一行，样品类型和进样次数必须等于源序列的对应行中的值。
- 对两个序列文件，数据文件命名方案必须相同。

单击**确定**（用于选择一个现有结果集）或**新建**（用于创建一个新的结果集）退出该对话框后，您可选择要在部分序列过程中执行的序列行。

部分序列采集的序列行选择

系统将显示**部分序列**对话框，用户可从表中选择所需样品进行分析。

部分序列对话框的一行代表一次运行。每次运行中，需给出瓶号、方法、数据文件及样品名等。另外，有关序列表的编码信息及所有校正样品均显示在 Seq Tbl 及 Calib:RF:RT 列中。有关这些代码的说明，请参见在线帮助。

注意

部分序列会在序列开始时填充数据文件名称。这就会导致文件名标记 DATE 和 TIME 将不会产生精确的进样日期和时间。

自动分析/序列

使用序列（序列和序列模板）

选择**打印**按钮可打印部分序列。

通过**手动更新 ...** 可打开**更新方法**对话框，您可以在该对话框中手动同步主方法以及序列模板中使用的方法。通过**为选择的运行进行自动更新**选项，可以用对应的主方法来更新选定运行中使用的所有序列方法。

注意

采集和数据分析参数均已更新。

例如，**部分序列**对话框可能类似如下所示。您可以标记特定样品以进行处理。

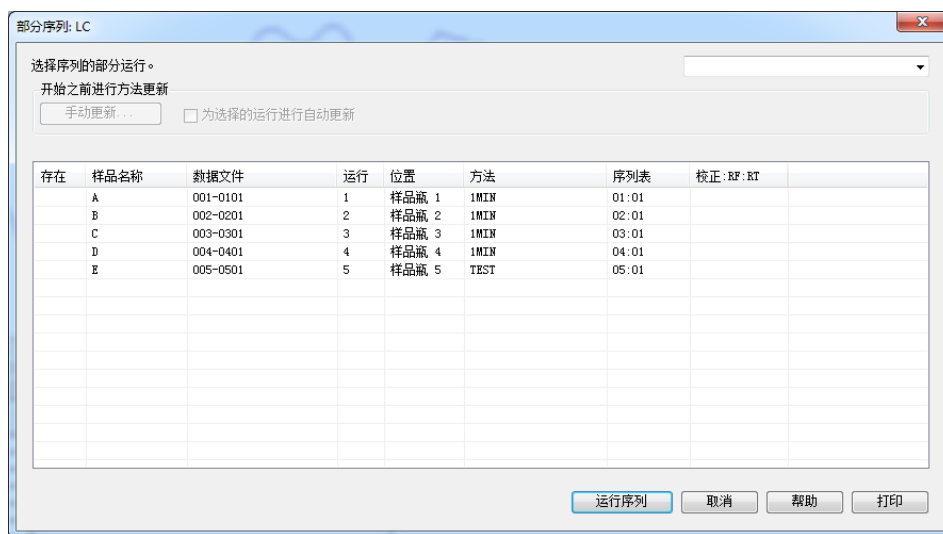


图 23 部分序列对话框

不能编辑正在运行的部分序列。

部分序列对话框不支持重叠进样（请参阅第 93 页的 **使用高通量选项**）。


创建自我组装的结果集

使用**数据分析**视图中的**序列 > 创建新结果集**命令，您可以从导航表中目前显示的数据创建新的自我组装的结果集。自我组装的结果集在下面列举的情形中很有用：

- 您要组合单个样品、序列或两者的组合，以使用指定的方法重新处理它们。
- 您要缩短序列。

组装新结果集

- 1 将所需的数据文件添加到导航表中。
- 2 在导航表中，选择要在新结果集中包含的所有数据文件。
- 3 选择**序列 > 创建新结果集**以打开**创建新结果集**对话框。
- 4 选择要与新结果集关联的方法。
- 5 为新结果集指定文件夹。
- 6 对样品进行排序。

输出数据文件的名称自动更新。如果需要，可以使用 （**恢复初始顺序**）按钮恢复样品的初始顺序。

请注意，空白文件的位置与《欧洲药典》中定义的信噪比的评估相关。另请参见第 91 页的 [含空白参考样品的序列分析](#)。

- 7 确认设置以将数据文件列表组装到指定文件夹的结果集中。

序列日志文件

生成的序列日志文件指明了序列运行期间发生的事件。如果序列是在无人值守的情况下运行或通宵运行，可用它在出现错误时识别错误。日志文件名的扩展名一直是 .log。日志文件位于保存序列数据的目录中。

序列运行时会发生什么？

开始运行一个序列

在默认序列执行模式下操作时，系统将根据序列参数中的路径定义和序列首选项设置来创建一个结果集。序列模板 *.s、属于该特定序列的序列表中定义的所有方法都将复制到结果集。如果使用智能报告，方法或序列模板中定义的所有报告模板 *.rdl 也会复制到结果集中。采集期间系统将继续使用这些文件。启动序列时，相应序列行的方法将从此结果集调用到 ChemStation 中。

有关执行模式的详细信息，请参见第 103 页的 [序列执行模式](#)。

执行序列期间接下来执行的步骤：

对执行的每个序列行都将重复以下步骤：

- 如果装有自动进样器，ChemStation 软件首先根据瓶列中输入的编号将样品装入自动进样器中。
- 将使用方法参数调用仪器。
- 执行预运行宏。
- 进样（自动或手动）。
- 此数据是必需的。
- 运行方法数据评估，积分、定量及报告结果，以及所有用户指定的宏。系统会在运行期间存储其他方法 DA.M。
- 执行后运行宏。
- 在整个过程中，ChemStation 会实时跟踪序列的进度，并生成一个序列日志文件。

自动分析/序列

序列运行时会发生什么？

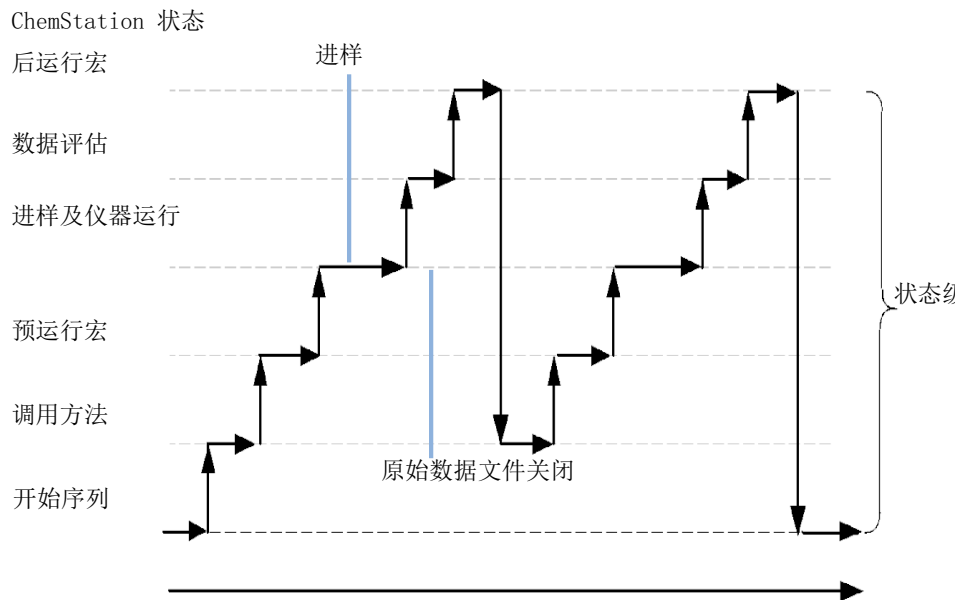


图 24 序列状态

序列数据文件结构

数据文件结构

在原始数据、方法与结果集之间有一个强大的链接。结果集文件夹包含序列中采集的所有数据文件 (*.D)。

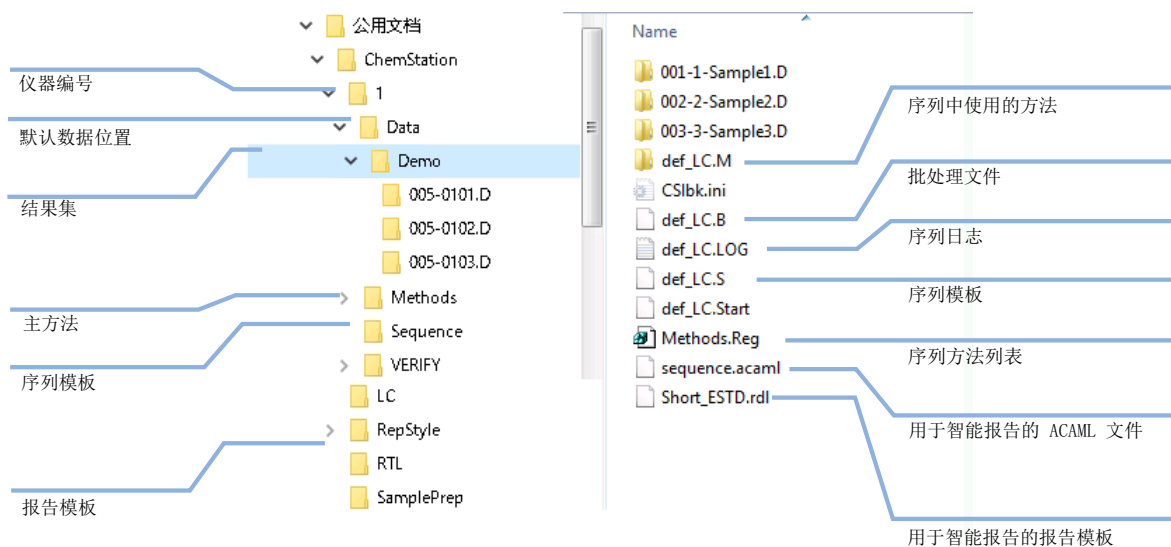


图 25 序列数据文件结构

注意

结果集必须总是包含所有数据文件的完整集合 (*.D)。如果删除了部分数据文件，将结果集上传到中央数据存储将会导致问题。如果需要缩短序列，从缩减的序列行集创建自我组装的结果集（请参阅第 97 页的 [创建自我组装的结果集](#)）。

每个数据文件（无论是在序列中采集的，还是作为单个运行采集）均具有一个指向用于数据分析的方法的链接。

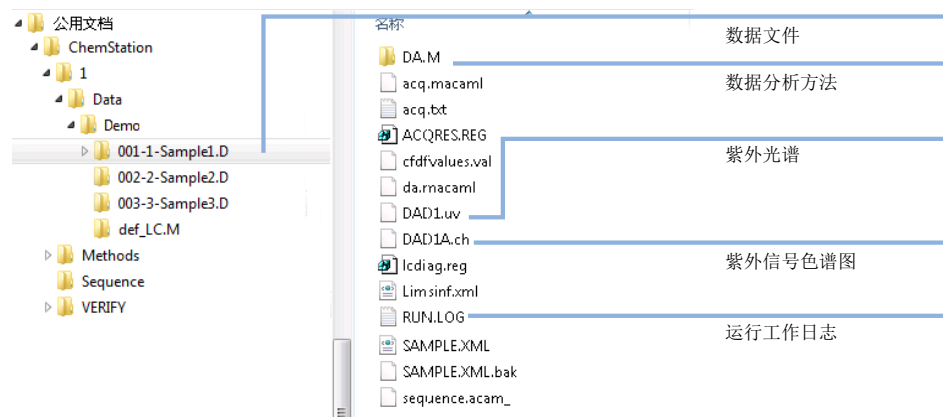


图 26 数据文件内容

“首选项” - “序列” 选项卡

在**首选项**对话框/**序列**选项卡中，可以定义在序列运行期间应该创建的文件夹和文件。

序列数据存储在与具有唯一结果集名称的结果集中。您可以在**首选项**对话框的**序列**选项卡中指定这些结果集的命名规则（名称模式）。如果不指定名称模式，则使用默认的序列名称模式。**序列**选项卡只能用于数据采集，因此仅用于在线系统。

序列名称模式可以包含不同的部分。系统为结果集创建名称，该名称根据您选择的序列名称模式部分而定。所有属于这个特定序列的数据文件、方法、序列工作日志、<sequence_name>.s 文件以及 <sequence_name>.b 文件均存储在该结果集中。该结果集将在启动该序列时创建。

序列 (*.s) 文件可以用作序列模板，此概念允许您多次运行任意序列文件，而无需覆盖现有数据或更改序列参数。如果序列名称模式中既没有使用计数器，也没有使用时间，则系统将自动引入一个计数器，以避免覆盖数据。对于第二个、第三个及以后所有使用同一序列模板的序列，将在结果集名称中添加计数器。

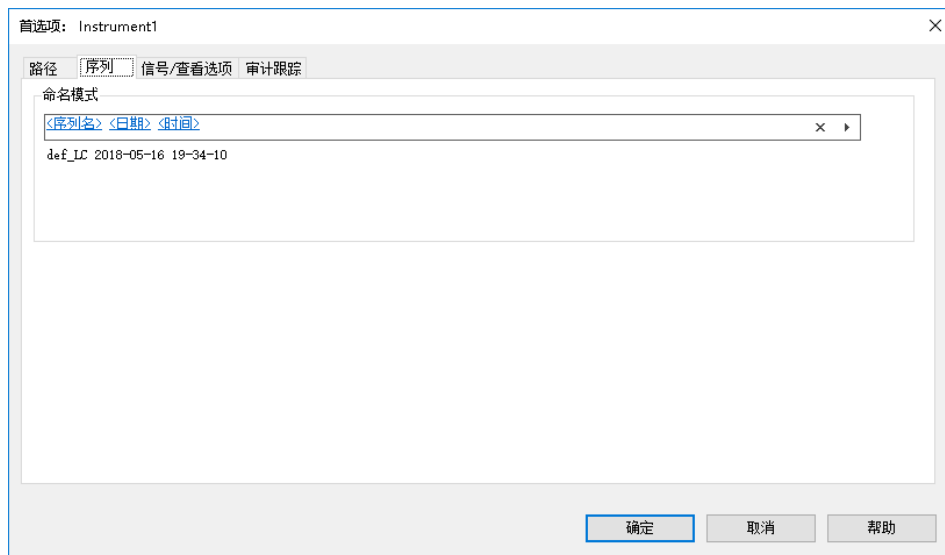


图 27 首选项对话框/序列选项卡

结果集命名

您可以在**结果集**字段中定义结果集文件夹的命名模式（请参见第 102 页的图 27）。默认情况下，名称为 <SeqName> <Date> <Time>，但是可以使用令牌配置，也可以手动输入任何名称。有关使用令牌的详细信息，请参见第 13 页的**文件名和令牌**。对于结果集文件夹，您可以选择以下令牌：

- 当前日期
- 当前时间
- 用户名
- 仪器名称
- 序列名称
- 计数器
- 计算机名称

如果命名模式没有为结果集生成具有唯一性的名称，ChemStation 将附加上一个计数，以确保其唯一性。

结果集文件夹的位置是由**序列参数**对话框中的设置决定的（请参见第 75 页的**序列参数**）。

默认数据文件命名模式

在**首选项**对话框中，可以为序列执行期间创建的数据文件定义默认命名模式。该设置将作为**序列参数**对话框的默认值（请参见第 75 页的 **序列参数**）。在**序列参数**对话框中，可以定义创建数据文件名的实际方式。

序列执行模式

如果运行序列，则所有数据和相关文件均在单个文件夹中。在整个序列的上下文中评估数据。例如，运行区间循环校正或创建序列总结报告时需要这样做。

然而，单个运行在编辑运行队列方面提供了更大的灵活性。

ChemStation 允许您以**一系列单个运行的方式**运行序列。如果使用此功能，则将展开序列的每一行作为单个样品添加到运行队列中。在文件系统中，将没有结果集文件夹；仅生成单个运行的数据文件 (.D)。数据文件名称将遵循您在**默认数据文件命名模式**字段中提供的定义。

在序列执行模式下，选择以下选项之一：

- **始终作为序列运行**（默认）：运行序列将始终生成结果集文件夹。

- **始终作为一系列方法运行：**序列将始终以一系列单个运行的方式运行。设置了该首选项后，将无法创建任何结果集。
- **操作者选择执行模式：**每次运行序列时，可选择以序列方式或以一系列运行方式运行。ChemStation 中的所有“运行”或“添加到队列”命令都通过相应的选项进行扩展。请参见以下示例：

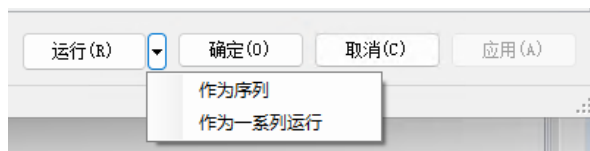


图 28 序列表中的运行选项

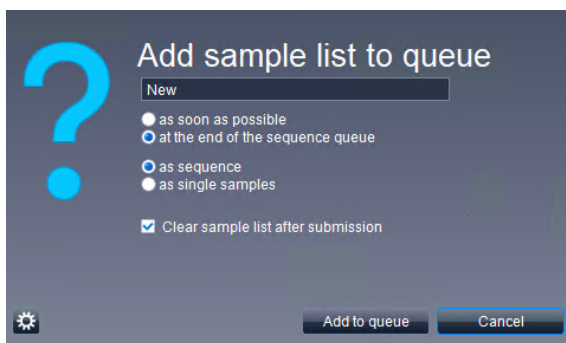


图 29 样品录入选项卡中的队列选项



图 30 单个样品显示中的序列按钮，以一系列单个运行的方式运行序列

数据文件命名

序列中数据文件的命名

如要定义序列中数据文件的名称，请配置序列参数（请参见第 75 页的 [序列参数](#)）。

在以下选项中进行选择：

- 自动，
- 手动，
- 使用前缀/计数器，或
- 使用命名模式。

序列中的自动数据文件命名

样品盘中的样品瓶

例如 017-0103.D

其中：

- 前三位是样品瓶编号，例如 017。
- 色谱和毛细管电泳中的第四位是分隔符 (-)；在气相色谱仪中可以是“前” (F) 或“后” (B)。
- 第五和第六位是定义所用方法的序列行，例如，01 代表首个序列行。
- 第七和第八位是方法针对该样品瓶的进样次数，例如，03 代表第三次进样。

多重进样器中的样品

例如 D1F-A3-0201.D

其中：

- D1F：样品容器在抽屉（此处为 D1）中的位置（此处为前）
- A3：样品容器中的样品位置
- 0201：序列行 2，第一个进样

空白运行

例如 NV--0499.D

其中：

- NV 代表没有样品瓶。
- - 是分隔符。
- 0499 是序列行 4 的第 99 个空白运行。

手动输入数据文件名称

序列表中有一列名为**数据文件**。当不包含条目时，使用序列参数中指定的数据文件命名方案（自动、前缀-计数器或命名模式）来创建数据文件名称。如果在**数据文件**列中输入了任何文本，ChemStation 就会将此文本作为运行的数据文件名称。

如果在具有手动数据文件名称的行中为每个样品瓶指定了多次进样，ChemStation 将自动截断用户输入的文件名后面的字符，然后附加进样次数。这样可防止多个进样器重复使用同一个数据文件名称。

使用前缀/计数器命名数据文件

如果使用前缀/计数器来命名数据文件，ChemStation 将为每次分析生成一个名称。对于支持双信号分析的仪器（例如 GC），ChemStation 将为每个信号生成一个名称。

序列设置程序允许对前缀/计数器使用长文件名。由前缀/计数器定义的数据文件名称最多可以包含十五个字符，加上 .d 扩展名，总共可以包含十七个字符。

以下规则适用于前缀/计数器字段：

- 计数器本身最多可包含 6 个字符
- 如果前缀提供的字符少于九个，计数器将自动扩展到 6 位数
- 计数器中给定的数值是要进行增量的初始数

表 8 文件名

前缀	计数器	文件名中的结果
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

使用“命名模式”命名数据文件

您可以使用以下令牌为每个序列行创建数据文件名：

样品名称 已附条形码的或输入至**样品名称**字段中的信息。

注意

条形码在数据文件名中不可见。在解析数据文件路径和名称的时间点评估条形码。

样品类型 样品类型：QC 样品、校正、样品。

样品位置 样品的样品瓶或多孔板的位置。

方法 序列行所用方法的名称。

序列行 平铺序列的当前行编号。

重复编号 该样品瓶完成的进样次数。

日期 开始采集样品时的日期戳。

时间 开始采集样品时的时间戳。

如果您的仪器支持不同的进样位置（例如，带前后进样器的 GC），您可以为每个位置提供不同的模式。例如，对表示进样位置的名称使用前缀：

- 对于前进样，使用 **F-`<序号行>`-`<样品位置>`-`<样品名称>`**且
- 对于后进样，使用 **B-`<序号行>`-`<样品位置>`- `<样品名称>`**。

注意

由于运行开始前未解析数据文件名；因此序列表不包含任何数据文件名。

解析的数据文件名限制到 40 个字符；过长的文件名会被截断。如果解析的文件名不唯一，则添加计数器。

结果集迁移

ChemStation 提供了将非结果集数据迁移为结果集格式的工具。要成功执行这一任务，需要原始序列文件仍处于可用状态。其必须包含所有必需的序列行，并遵循原始数据文件命名方案，才能对序列的所有数据文件进行数据重新处理。此外，序列表“方法”列中的所有方法都必须可用。

如要进行迁移，请从**数据分析**视图的**序列**菜单中启动**结果集迁移**。

对于已作为一系列单个方法运行的序列中的数据，不支持结果集迁移（请参见第 103 页的**序列执行模式**）。



图 31 结果集迁移

填写以下必填字段：

选择序列模板：选择包含与要迁移的数据集匹配的序列表的序列文件 (*.S)。

选择方法路径：选择序列表要引用的方法所在的目录。

选择数据源：选择包含要迁移的数据文件的目录。

选择目标目录：指定要创建的结果集的路径和名称。可以选择现有文件夹，也可以创建新文件夹。

填写了所有字段后，就可以启动迁移了。

将执行以下步骤：

- 创建结果集目录。
- 序列模板将会复制到结果集。该序列模板还将转换为能在**数据分析**视图中对数据文件进行数据重新处理的状态。

自动分析/序列

序列数据文件结构

- 序列表所引用的方法会从指定的方法路径复制到结果集文件夹中。
- 数据文件、序列日志和批处理文件会从数据源目录复制到目标目录中。
- 根据序列表中的信息，对应方法的副本作为 DA.M 复制到每个数据文件中。

结果集迁移完成后，会在**信息和警告**字段中显示成功消息。否则，警告消息会显示迁移期间的所有问题。您可以通过双击警告消息来获得警告的详细信息。

后序列操作

您可以指定，如果序列完成正常执行过程或 ChemStation 在序列运行期间遇到错误，将执行何种操作。该操作可通过激活序列参数**关闭**部分的**后序列命令/宏**对话框来完成。您可以选择为特定仪器类型配置的内置命令，例如：

- 将系统设置为在灯、泵、恒温器和样品冷却装置关闭时进入 STANDBY 状态。
- 将系统设置为在所有灯都关闭时进入 LAMPOFF 状态，
- 将系统设置为在所有灯都关闭时进入 PUMPOFF 状态，或
- 使用缺省的 SHUTDOWN 宏或修改 SHUTDOWN.MAC 以确定具体操作。

例如，您可能需要在序列完成后关闭系统。使用其他关闭宏，可将流量设置为零或者慢慢减少流量。未修改的 SHUTDOWN 宏将执行 STANDBY 命令。

有关可用内置命令的详细信息，请参阅 ChemStation 在线帮助中的“命令”。

在**关闭**序列参数部分中，可以指定自定义命令或宏。有关自定义命令及其设置方法的详细信息，请参见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。

未就绪超时（仅限于 LC 和 CE）

“序列参数”中的“未就绪超时”是系统等待仪器就绪的时长 — 超出该时长后系统将会关闭。

等待时间（仅限于 LC 和 CE）

序列参数允许您为调用方法后和使用该方法进样前指定一个等待时间。使用新的分析条件时，这对色谱柱/毛细管重新平衡很有用。

自动重新校正

当运行条件发生变化时，通常需要进行校正，例如，在更改色谱柱或毛细管后。自动重新校正通常在一系列分析工作开始时进行，或者在序列分析过程中的某一时刻进行，以补偿影响分析性能的因素。

执行重新校正时，所用方法的校正表将根据定义的方法设置更新。重新校正的方法可在结果集中看到。序列方法的校正表将在这一过程中更新。此外，单个数据文件的 DA.M 方法包含用于创建结果的已更新校正。

有两种自动序列重新校正：

- 简明校正序列，或
- 循环校正序列。

当运行单个样品或一系列单个样品时，也可以更新主方法的校正表。

指定重新校正

序列的重新校正参数是直接输入序列表中的。这些参数定义了序列运行过程中如何重新校正方法。

序列表和样品信息对话框中的重新校正参数

可通过多种方式更新响应因子 (RF) 和保留/迁移时间 (RT)。重新校正校正表时，校正级别、更新响应因子和更新保留/迁移时间是数据分析中要用到的指令。

当在样品表的“样品类型”列中输入“校正”后，会激活以下列，并且可以编辑：

- 校正级别
- 更新保留时间
- 更新响应因子
- 间隔

可将值输入表格中所示的每一列中。

表 9 序列表中的重新校正参数

校正级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
校正表级别 # (1-999)	不更新	不更新	循环重新校正间隔 # (1-999)
	平均值	平均值	空白
	替换	替换	
		区间循环校正	
		偏差%	

表格显示，序列表中的列包含可以输入的重新校正参数和值。提交单个方法运行或修改运行队列中暂挂的单个方法运行时，可以在“样品信息”对话框中输入相同的参数。

自动分析/序列

指定重新校正

不更新

不要更改响应因子或保留/迁移时间。

替换

仅将先前的保留/迁移时间和响应值（面积或高度）替换为当前运行中的对应项。对于任何未在该重新校正运行中发现的峰，其响应值不会改变。

平均值

对每个峰保留/迁移时间（面积或高度）的平均取决于原始校正运行和所有自此之后的平均重新校正。即使其中一个重新校正中缺少峰，也不会影响峰的平均响应值。

区间循环校正

样品通过“样品前”和“样品后”校正的方式进行区间循环校正。区间循环校正中的最后一个校正样品运行完毕后，即会完成评估。将会使用开区间循环校正运行的结果数据替换现有校正数据。闭区间循环校正会对该校正表进行平均。

间隔

间隔决定序列执行过程中进行校正的频率。校正频率与进行下一组校正进样前完成的样品进样次数相对应。分析开始时完成校正，并将结果（响应因子）输入校正表。然后，后续的定量计算中将会用到这些结果。完成指定次数的进样后，将再运行一次校正，并且结果将被输入到校正表中，覆盖上一次校正运行的结果。

偏差 %

偏差% 计算能让您比较分析中的响应因子和手动输入至校正表的响应因子。之后，会将偏差% 应用到表中所有已校正的峰。您可确定多个内标，而其测得的响应因子也将用于计算其他峰的新响应因子。您可确定在校正表中计算每个峰的偏差% 时使用的内标。

序列类型

准备序列时可使用下列序列类型：

- 简明校正序列，
- 简名单级校正序列，
- 循环多级校正序列，
- 同一序列中同时存在的简明和循环校正，以及
- 使用区间循环校正的循环校正序列。

注意

将序列提交至“运行队列”后，所有序列（包括使用区间循环校正的序列）将被转换为简明校正序列。请见第 92 页的 [运行序列](#)。

运行期间，序列表将只显示进样、逐次运行，这是因为仪器已对其进行了处理。如果您在运行期间添加样品，所有后续样品（包括校正样品）将在序列表中向下移动。

简明校正序列

这种类型的序列会使用您在序列表中指定的定义间隔进行重新校正。

对于简明校正序列，向序列表中没有间隔条目的序列输入校正样品。针对序列表中的每个校正样品条目完成一次重新校正。

循环单级校正序列

这种类型的序列使用相同的样品瓶，即序列中的校正样品使用固定间隔。

序列表中的间隔条目决定了重新校正的完成方式。例如，如果间隔值为 2，则会在序列中每隔两个样品瓶进行一次重新校正。

循环多级校正序列

这种序列使用不同标准样品来对多级校正方法进行重新校正。

下面这个例子介绍了使用由方法 A 和方法 B 构成的双方法序列来分析两组样品。两种方法均为多级校正方法，它们将根据规定的间隔自动进行重新校正。

针对每种方法，序列表均包含三个条目：

- 两个校正级别：
 - 序列行 1 和序列行 2 使用方法 A。
 - 序列行 8 和序列行 9 使用方法 B。
- 样品的五个条目：
 - 序列行 3 至序列行 7 使用方法 A。
 - 序列行 10 至序列行 14 使用方法 B。

校正由序列重新校正表中的重新校正间隔条目以固定间隔指定。

- 每隔两个样品后以方法 A 做一次重新校正。
- 每隔三个样品后以方法 B 做一次重新校正。

下面是一个删减过的序列表，简单作一说明。

表 10 方法 A 和方法 B 的序列表

行	样品位置	方法名称	进样/位置	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	校正间隔
1	1	方法 A	1	校正	1	平均值	不更新	2
2	2	方法 A	1	校正	2	平均值	不更新	2
3	10	方法 A	1					
4	11	方法 A	1					
5	12	方法 A	1					
6	13	方法 A	1					
7	14	方法 A	1					
8	3	方法 B	1	校正	1	平均值	不更新	3
9	5	方法 B	2	校正	2	平均值	不更新	3
10	20	方法 B	1					
11	21	方法 B	1					
12	22	方法 B	1					
13	23	方法 B	1					
14	24	方法 B	1					

方法 A 的分析次序

方法 A 是双方法序列的第一部分。

表 11 方法 A 的分析次序

进样号	方法	样品瓶	运算
1	方法 A	1	校正级别 1 和报告
2	方法 A	2	校正级别 2 和报告
3	方法 A	10	样品分析和报告
4	方法 A	11	样品分析和报告
5	方法 A	1	校正级别 1 和报告
6	方法 A	2	校正级别 2 和报告
7	方法 A	12	样品分析和报告
8	方法 A	13	样品分析和报告
9	方法 A	1	校正级别 1 和报告
10	方法 A	2	校正级别 2 和报告
11	方法 A	14	样品分析和报告

方法 B 的分析次序

方法 B 是双方法序列的第二部分。方法 B 与方法 A 的不同之处在于，校正级别为 2 时，每个样品瓶将进样两次。间隔条目设置为 3。

表 12 方法 B 的分析次序

进样号	方法	样品瓶	运算
12	方法 B	3	校正级别 1 和报告
13	方法 B	5	校正级别 2 和报告
14	方法 B	5	校正级别 2 和报告
15	方法 B	20	样品分析和报告
16	方法 B	21	样品分析和报告
17	方法 B	22	样品分析和报告
18	方法 B	3	校正级别 1 和报告
19	方法 B	5	校正级别 2 和报告
20	方法 B	5	校正级别 2 和报告
21	方法 B	23	样品分析和报告
22	方法 B	24	样品分析和报告

请注意，第 117 页的表 11 和第 118 页的表 12 中显示的结果可使用序列中的“预览”按钮获取。

合并使用简明和循环校正

这种类型的序列包含相同序列中的简明和循环校正。

在序列运行期间，该功能能让您在序列（**简明重新校正**）开始时重新校正整个方法，然后更新校正（**循环重新校正**）。

- **必须指定序列表中每个校正级别的两个校正行。**一个校正行用于简明重新校正条目，而另一行用于循环重新校正条目。
- 序列表的每个校正行**必须**包含条目，而且所有重新校正样品瓶**必须**显示于简明重新校正和样品条目之前。

示例

下面的序列表阐明了名为 SimpReg 的单级校正方法。为简便起见，已作删减。

表 13 用于 SIMPREG 的序列表

行	样品位置	方法名称	进样/位置	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	校正间隔
1	1	SimpReg	1	校正	1	平均值	平均值	3
2	1	SimpReg	1	校正	1	替换	替换	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

单级校正有两个条目：

- 第一个校正行用于同一级，但对校正参数求平均值。间隔条目指定每隔三个样品执行一次重新校正。
- 第二个条目取代所有的重新校正参数，即执行一次全面重新校正，它**没有**重新校正间隔值。

序列表 序列表由七行组成。第一行指定循环重新校正样品。第二行指定显式重新校正，该校正仅在序列开始时运行一次。第三至第七行是要分析的样品。

条目输入序列表的次序很重要。所有指定循环校正的循环重新校正瓶条目**必须**出现在样品条目或方法的任何显式重新校正条目**之前**。

SimpReg 分析次序

下表描述 SimpReg 方法的分析次序。

表 14 SimpReg 分析次序

序列行	进样号	方法	样品瓶	运算
2	1	SimpReg	1	简单校正
1	2	SimpReg	1	常规校正
3	3	SimpReg	2	样品分析
3	4	SimpReg	3	样品分析
4	5	SimpReg	4	样品分析
5	6	SimpReg	1	常规校正
6	7	SimpReg	5	样品分析
7	8	SimpReg	6	样品分析

带区间循环的循环校正序列

在带区间循环的循环校正序列中，校正表用于计算未知定量结果，该结果是通过将先前校正结果与当前校正结果进行平均后生成的。这个新的校正表更准确地呈现了分析样品时的仪器响应值。

示例

请考虑下列情况：

- 仪器响应值正在漂移。
- 指定了三个具有相同双组分混合物的进样。
- 将两个进样指定为校正样品，另一个指定为样品。
- 第一个和第三个是校正样品。
- 第二个进样是样品。

为了获得准确的进样 2（样品）定量结果，必须在两个校正样品之间进行内插；请见图 32。该过程被称之为区间循环校正。

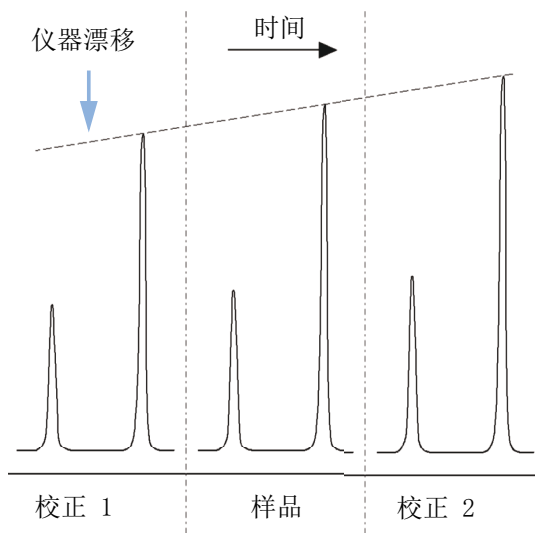


图 32 区间循环校正

区间循环校正序列操作

- 分析了第一批校正样品瓶。
- 分析了样品瓶。
- 分析了下一批校正样品瓶。
- 通过使用新的响应因子替换现有响应因子生成校正表，并将下面的校正运行平均至新的校正表。
- 已经评估了样品瓶数据文件并生成了报告。
- 如果有更多样品瓶需要分析，序列将返回至步骤 2。

示例

本部分介绍了一个区间循环校正序列示例，它由一种名为 Brack.M 的方法构成。Brack.M 方法是一种使用循环校正的两级内标方法。

序列表 为了简化说明，Brack.M 序列表（下页）已作删减。该表共有七行。前两行说明每级的重新校正条件，其余几行说明要分析的样品。

Brack.M 方法序列表的详细说明如下：

- “更新响应因子”列中的“区间循环校正”条目，指定用校正样品对样品进行区间循环校正。
- “更新保留/迁移时间”列中的替换条目，指定保留/迁移时间的替换项。
- “重新校正间隔”列中的条目 3，指定每三个样品进行一次重新校正。

表 15 BRACK-M 序列表

行	样品位置	方法名称	进样/位置	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	校正间隔
1	1	BRACK-M	2	校正	1	区间循环校正	替换	3
2	2	BRACK-M	2	校正	2	区间循环校正	替换	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

Run No.	Method Name	Vial No.	Inj No.	DataFile Name	Lvl No.	Upd RF	Upd Ret	Operation
1	Brack.M	1	1	c1-03001.d	1	R	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack.M	1	2	c1-03002.d	1	A	R	Report for Calibration Run No.2
3	Brack.M	2	1	c2-03001.d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack.M	2	2	c2-03002.d	2	A	R	Report for Calibration Run No.4 Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17

Where A = average

R = replace

图 33 区间循环校正序列分析次序

带多个包含相同标样稀释因子的样品瓶的循环重新校正序列

使用“循环”校正样品瓶的循环重新校正序列

运行执行循环重新校正的大型序列时，也就是，在固定数量的样品进样之后执行自动重新校正时，在序列期间会有清空校正样品瓶的潜在风险。ChemStation 序列列表提供了一种使用样品瓶序列的方法，该样品瓶序列的稀释因子与**循环**重新校正中标样所使用的稀释因子相同。

使用此功能，便可通过使用多个校正样品瓶，以固定间隔的自动重新校正来定义大型序列，并且每个级别和校正样品瓶所使用的内容相同。

通过定义合适数量的校正样品瓶，甚至还有可能保证每个校正样品瓶只使用一次。在每次重新校正均需要全新样品瓶（例如，与钢针接触后一旦隔垫被刺穿或是强度降低，被分析物就会挥发）的情况下，这一需求至关重要。以下章节说明的，是需要怎样设置 ChemStation 序列列表才能满足这些需求。

根据所预估的序列期间校正物的使用情况，确定各级别校正样品瓶的总数。

单独为每个校正样品瓶设置一个循环重新校正行。为同一校正级别定义的行，其序列行必须相邻，定义的样品瓶位置必须也要相邻。为所有校正行选择统一的重新校正间隔。例如，如果您的序列要在每 6 次样品进样后进行重新校正，请将重新校正间隔设置为 6。

表 16 循环重新校正序列为每个级别定义了 3 个样品瓶

样品瓶编号	样品名称	样品类型	方法名称	进样编号	级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
1	Cal1a	校正	方法A	1	1	平均值	平均值	6
2	Cal1b	校正	方法A	1	1	平均值	平均值	6
3	Cal1c	校正	方法A	1	1	平均值	平均值	6
5	Cal2a	校正	方法A	1	2	平均值	平均值	6
6	Cal2b	校正	方法A	1	2	平均值	平均值	6
7	Cal2c	校正	方法A	1	2	平均值	平均值	6
10	样品 10	样品	方法A	6				
11	样品 11	样品	方法A	6				
12	样品 12	样品	方法A	6				
13	样品 13	样品	方法A	6				
14	样品 14	样品	方法A	6				

执行顺序为：

- 样品瓶 1 (Cal1a)
- 样品瓶 5 (Cal2a)
- 样品瓶 10 中的 6 次进样 (样品 10)
- 样品瓶 2 (Cal1b)
- 样品瓶 6 (Cal2b)
- 样品瓶 11 中的 6 次进样 (样品 11)
- 样品瓶 3 (Cal1c)
- 样品瓶 7 (Cal2c)
- 样品瓶 12 中的 6 次进样 (样品 12)
- 样品瓶 1 (Cal1a)
- 样品瓶 5 (Cal2a)
- 样品瓶 13 中的 6 次进样 (样品 13)
- 样品瓶 2 (Cal1b)
- 样品瓶 6 (Cal2b)
- 等

每次校正均使用不同样品瓶的循环重新校正

为了确保每个校正样品瓶只进样一次，序列必须定义足够多的不同的校正样品瓶编号，这样就不会使用之前示例中描述的**循环**顺序。例如，如果要求序列每隔 10 个样品使用重新校正来处理 80 个样品瓶，则序列表中的每个级别必须包含 $80/10 + 1 = 9$ 个校正行。

同之前的示例一样，校正行必须是参考相邻样品瓶位置的相邻序列行。

关闭区间使用不同样品瓶的区间循环校正序列

区间循环校正序列的功能相同。可通过定义校正样品瓶的相应样品瓶范围来定义区间循环校正序列，以便让开闭区间使用不同的校正样品瓶。同样，在本例中，序列中的校正行必须邻近校正样品瓶的样品瓶位置。

是否在循环模式或单个进样中使用区间循环校正样品瓶仅取决于每个级别的校正样品瓶总数和序列所需的重新校正次数。

下列示例定义了 3 个由校正划定区间的样品进样。开区间与闭区间使用的校正样品瓶不同。需要在每次样品进样后进行重新校正，所以校正间隔必须为 1。每个级别的校正行行数为样品数加 1。

表 17 开区间和闭区间使用不同的样品瓶

样品瓶编号	样品名称	样品类型	方法名称	进样编号	级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
1	Cal1a	校正	方法A	1	1	Brkt	Brkt	1
2	Cal1b	校正	方法A	1	1	Brkt	Brkt	1
3	Cal1c	校正	方法A	1	1	Brkt	Brkt	1
4	Cal1d	校正	方法A	1	1	Brkt	Brkt	1
10	样品 10	样品	方法A	1				
11	样品 11	样品	方法A	1				
12	样品 12	样品	方法A	1				

该序列的执行顺序为：

- 样品瓶 1 (Cal1a)，开区间 1
- 样品瓶 10 (样品 10)
- 样品瓶 2 (Cal1b)，闭区间 1 和开区间 2
- 样品瓶 11 (Sample11)
- 样品瓶 3 (Cal1c)，闭区间 2 和开区间 3
- 样品瓶 12 (样品 12)
- 样品瓶 4 (Cal1d)，闭区间 3

5

运行控制

关于运行队列	129
使用运行队列	130
运行队列中的单个样品和序列	131
运行队列中的暂停	132
运行队列中的命令	132
使用队列计划	133
安排命令	134
安排事件	134
日程表操作模式	135

本章节会解释“运行队列和队列计划”的概念。解释“运行队列”中如何添加单个样品、序列、暂停或命令。还会描述命令日程表，您可从中安排事件来确保实验室日常工作更加简单。

关于运行队列

如果要在短时间内在一个仪器上运行很多样品（单个样品或序列），“运行序列”会非常有用。为仪器创建的所有单个样品或序列都显示在“运行序列”选项卡上。您可为序列添加暂停或自定义仪器命令（例如关于内置仪器控制命令请参见第 110 页的 [后序列操作](#)）。这样，您可以自动进行长时间的任务，例如通宵作业或周末作业。

仪器处理**运行序列**选项卡上显示的工作量时，您仍可对工作量进行修改，例如：

- 更改队列项目的位置，或添加一个暂停（请参见第 132 页的 [运行队列中的暂停](#)）。
- 为队列添加一系列单个样品和序列（请参见第 131 页的 [运行队列中的单个样品和序列](#)）。
- 编辑运行队列中现有的项目（请参见第 132 页的 [编辑运行队列中的现有条目](#)）。
- 立即运行一个单个样品或序列（请参见第 132 页的 [运行单个样品或序列](#)）。
- 例如，添加内置或自定义命令，以在运行后关闭系统（请参见第 132 页的 [运行队列中的命令](#)）。
- 添加使用**队列计划**创建的有预定义序列集的“队列计划”（请参见第 133 页的 [添加具有预定义序列组的队列计划](#)）。

ChemStation 状态栏显示“运行队列”的状态，可以是**恢复**、**暂停**或**阻止**（如果方法或序列有开始运行后会覆盖的未保存更改）。

“运行队列”选项卡的**历史队列**显示当前仪器上已执行的运行。

运行队列和队列计划仅可用于**方法和运行控制**视图中的在线 ChemStation 会话。

由于“运行队列”允许长时间作业，因此处理“运行队列”时很可能会由同一台仪器上的其他用户接管会话。接管会话的用户会记录在报告中。报告显示作为当前用户登录的**采集操作者**和提交单个样品或序列到“运行队列”的**样品操作者**。

使用运行队列

“运行队列”位于**仪器控制**选项卡或**运行队列**选项卡中。在“仪器控制”选项卡中，您可以使用**视图 > 运行队列**命令显示或隐藏“运行队列”。

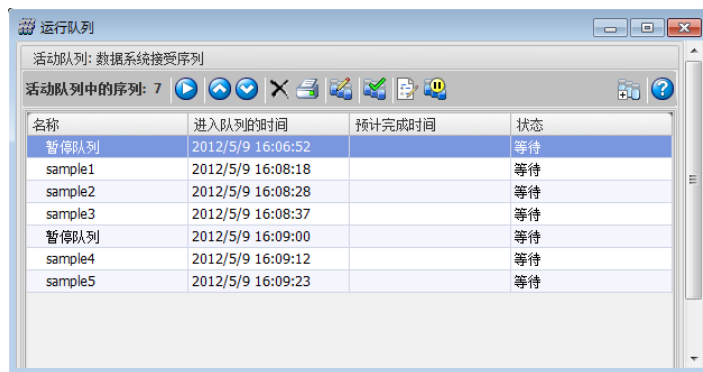



图 34 运行队列对话框

您可以将项目添加到队列的前部或后部。只要队列中的项目的状态为等待，就可以更改该项目的执行顺序和属性。根据**激活队列选项** ，队列中的第一项在数据系统就绪时启动或在重新开始队列后启动。

运行队列支持单个样品、简易序列模板和经典 ChemStation 序列。只有属于直接从仪器启动的部分排序、优先样品和运行的项目才无法添加到运行队列。

有关简易序列的详细信息，请参阅在线帮助系统。在线帮助中提供了**简易序列设置教程**。

运行队列中的单个样品和序列

将单个样品加入队列

- 1 选择 **运行控制 > 队列方法...**。
- 2 在**队列方法**对话框中，编辑样品参数。
- 3 将样品添加到队列。

添加到队列中的第一项在数据系统准备就绪时即可开始，除非从队列中暂停。

将序列或一系列单个样品列队

- 1 选择 **运行控制 > 队列序列...**。
- 2 选择经典 ChemStation 序列模板或简易序列模板。
- 3 编辑或查看序列表和序列参数。您可以修改序列表和序列参数，而不更改当前加载的序列。
- 4 保存设置。在**完成队列序列**对话框中，您可选择是否将序列添加到队列或另存为新序列模板。根据首选项设置（请参见第 103 页的 **序列执行模式**），您还可以将序列作为一系列单个方法运行来提交。


结束队列序列对话框还包含复选框**完成后删除临时序列模板**。ChemStation 总是在临时文件夹中保留一份队列序列模板的副本。此临时序列模板将用于从队列运行序列。由于相同的序列可使用不同的参数排列多次，因此 ChemStation 需要为每个队列项保留一份独立的副本。根据复选框的状态，队列继续下一项时将保留或删除此临时序列模板。

完成后删除临时序列模板复选框在缺省情况下为选中。重新处理数据需要的所有信息可从结果集中获得，因此不需要复制临时序列模板。但是，如果选中此复选框，将默认在 **C:\Users\Public\Documents\ChemStation\<instrument>\TEMP\AESEQ** 中保留一份副本。

编辑运行队列中的现有条目

您可以在“运行队列”中编辑现有项目，例如，可以为单个样品或序列中的样品指定不同的样品瓶位置，或者分配修改过参数的不同方法。

1 在“运行队列”中，选择要编辑的单个样品或序列。

2 在“运行队列”的工具栏中，选择  **编辑选项...**

根据编辑的是单个样品还是序列，会打开**队列方法**对话框或**序列列表**。

3 编辑参数并确认输入。

您的设置将应用到“运行队列”中的项目上。

运行单个样品或序列

要立即运行单个样品或序列，请选择**运行控制 > 运行方法**或 **运行控制 > 运行序列**命令。

单个样品或序列会先添加到运行队列，然后立即开始。

如果运行队列当前是暂停的，则会自动启用，以便项目立即运行。仪器在运行完成后将恢复暂停状态。

运行队列中的暂停

要向队列中添加暂停，在运行队列工具栏中单击**向队列添加暂停**。在这些暂停中，ChemStation 显示自定义的消息，并等待用户确认。

运行队列中的命令

如要向运行队列添加内置或自定义命令，请使用**运行控制 > 队列命令...**菜单。或者，在**活动队列选项**中配置一个自定义命令，该命令将在仪器空闲时执行。

下拉列表中将显示分配给该仪器的所有命令。从列表中选择命令，或设置自己的命令。如要设置自定义命令，则需要**命令行**权限。

有关在何处可以使用命令的详细信息，请参见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。

使用队列计划

通过队列计划程序，您可以准备排好顺序的序列集（ChemStation 序列模板 *.s 或简易序列模板 *.es）、暂停或命令。整个队列计划都可以添加到运行队列的后部或前部。

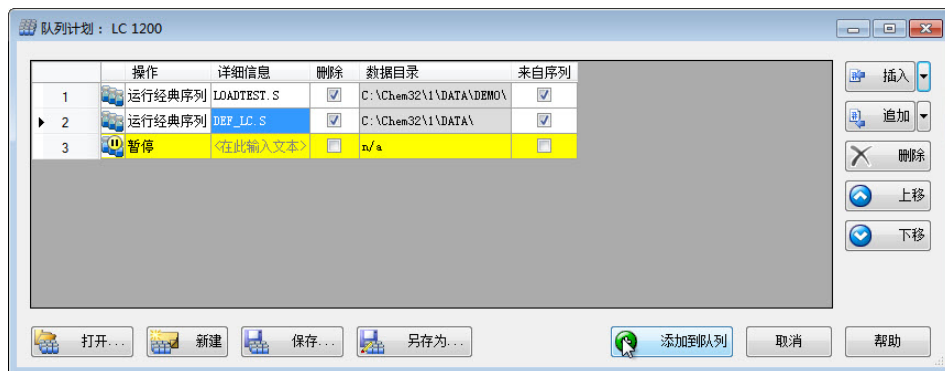


图 35 队列计划

添加具有预定义序列组的队列计划

通过队列计划，为要运行的序列创建队列计划，并在两者之间内置暂停和命令。
准备队列计划：

- 1 选择 **运行控制 > 队列计划...** 命令。
- 2 准备队列计划并插入序列。
- 3 在运行队列中，添加暂停时，您可以在**详细信息**列中提供自己的消息。当队列到达暂停时，ChemStation 停下，并显示指定的消息。用户必须先确认此消息，队列才能重新开始。
- 4 保存队列计划。队列计划另存为 *.qpl 文件。
- 5 要运行队列计划时，打开队列计划，载入队列计划，然后将其添加到“运行队列”。

有关用户界面的详细信息，请参阅在线帮助系统。

安排命令

利用命令日程表将 ChemStation 设置为在指定时间自动执行事件的命令，例如：

- 启动系统
- 恢复暂停的序列以准备当天的仪器
- 运行 MS 自动调谐
- 调整检测器补偿值
- 调用方法或序列
- 启动序列或运行队列

通过命令日程表可以将这些事件安排在特定日期和时间，并设置重复间隔。支持以下间隔：

- 仅此一次
- 每日进行
- 工作日进行
- 每周进行（同一天）
- 每月进行（同一天）

安排事件

事件是在命令日程表中安排的。在该表中，必须制定命令及对应的日期、时间和重复模式。



命令字段在下拉列表中为您提供内置命令。用户定义的命令可以扩大命令列表。如要设置自定义命令模板，则需要**命令行**权限。有更多关详细信息，请见第 24 页的 [在 ChemStation 中使用自定义命令或宏](#)。没有权限的用户只能从下拉列表中选择命令。

有关内置命令和宏的详细信息，请参阅 ChemStation 在线帮助中的“命令”和“宏”。

日程表操作模式

日程表会每分钟扫描一次现有命令。执行的宏将显示在仪器日志和 OpenLab 活动日志中。执行日期为超过两周之前并且配置为**仅此一次**的任务将自动删除。

如果 ChemStation 在安排的时间忙碌，则任务执行可能会延迟。ChemStation 就绪后，将会执行。重复任务执行的前提条件是仪器必须正在运行。

注意

任务是仪器专用的，与仪器名称相关。如果仪器重命名，针对该仪器安排的所有任务将被删除。

6

数据分析和查看概念

数据分析	137
导航表配置	138
数据分析模式	139
重新计算模式	139
最终结果模式	141
重新处理模式	142
更新方法	145
用于数据分析的报告查看器	146
批处理浏览	149
查看	152
智能报告的要求	152
数据文件选择	152
报告模板选择	153
报告预览	154
可能的查看工作流程	154

您可以使用 ChemStation 分析和查看数据。本章概述了 ChemStation 数据分析和数据检查选项。

数据分析

一旦采集了数据，则可以在**ChemStation 数据分析**视图对数据进行分析。选择 ChemStation 资源管理器的**数据**选项卡时，可通过双击相应的符号来调用某序列的所有运行或特定文件夹中的所有单个运行。相应的数据集随即会出现在导航表中。



图 36 从 ChemStation 资源管理器将序列调入导航表

导航表的主要部分由数据集的所有运行的列表组成。通过双击导航表中的相关行，可将运行调入 ChemStation 内存中。此外，右键单击某次运行也会出现几个选项，例如，从文件调用或重叠特定信号、导出数据或者查看采集方法参数。

对于（重新处理模式下的）**序列运行**，请使用在采集或重新处理期间使用的序列方法调用。方法名称显示在工具栏中，导航表中的**序列方法**栏中也会有显示。**采集方法**栏中显示的是采集方法的名称。

单次运行与相关分析方法一起调用。该方法的名称显示在导航表和运行详细信息中的**分析方法**中。如果原始路径中没有该方法，则会显示错误。

采集方法栏中显示的是采集方法的名称。

使用 ChemStation，您可以指定从导航表调用数据文件时自动执行的默认操作。这包括数据分析任务，如在调用、查看每个单次进样报告后直接对色谱图进行积分，或在一个步骤中进行积分和打印（参见下图）。



图 37 首选项对话框的信号/浏览选项选项卡

导航表配置

导航表中包括标准表配置功能，如排序和用于将列移至不同位置的拖放选项。也可以选择导航表中显示的列。

此外，还可以进行指定列分组，例如，通过按**操作者**列对已调用文件进行分组，可显示特定操作者的单个运行。

导航表提供了鼠标右键单击功能，该功能可用于调用信号、重叠信号、导出数据、打印报告、查看数据采集方法参数等。每个导航表行均可展开，方法为单击相应行左侧的+（加）号，以配置指定信号的选项：

- **信号**：列出获得的信号，并允许您指定要调用的信号。信号显示选项分别适用于每个运行。
- **基本信息**：列出有关运行的表头详细信息。
- **仪器曲线**：允许您选择要随屏幕上和打印输出中的色谱图/电泳图谱一起显示的仪器数据曲线。

数据分析模式

您可以在以下数据分析模式之间选择：

- 重新计算模式
- 最终结果模式
- 重新处理模式

这些模式可通过**视图**菜单或工具集访问（参见下图）。



图 38 模式选择

对于每种模式，该工具组包含一些特定功能。以下各部分介绍了这几种模式及其各自的功能。在**首选项**对话框的**信号/查看选项**选项卡中，可以选择调用结果集时应默认激活哪种模式（参见第 138 页的图 37，标记 1）。

重新计算模式

调用运行后，即可查看它，即调整数据分析参数、对信号进行积分并最终打印报告。在这种情况下，将运行作为单个运行分析，而不要考虑序列上下文，也不必使用序列表功能。此数据分析类型的导航表提供下图中显示的工具组。



图 39 导航表的重新计算工具组

使用这套工具组，您可以跳到导航表的开头或末尾、步进到下次或上次运行、在运行之间自动步进、停止自动步进、使用特定方法重新计算运行，或清除导航表。

重新计算就是对每次运行都执行一次分析。只分析导航表中显示的运行。如果将过滤器应用到导航表，则只会重新计算实际显示在该表中的那些运行。此外，还会考虑导航表的排序。

您可以在诸如下面的工作流程中使用重新计算：

- 您想要使用结果集中当前没有的不同方法（例如，未用于采集的主要方法）查看结果集的数据文件，原因是，您的工作流程使用单独的采集和数据分析方法。

- 您已经编辑了一种序列方法并且仅想使用此方法查看特定的运行，以便检查这些参数应用到不同运行的效果。
- 您想使用特定分析方法查看单次运行。在重新计算模式下，单个数据文件不会调用任何分析方法。

单个运行的数据分析方法

之前版本中，重新计算模式下不会自动调用方法和任何数据文件。自 C.01.05 版开始，您可选择该复选框来自动调用上次数据分析时使用的主方法（参见第 138 页的图 37，标记 1）。选中该复选框后，如果该方法仍位于给定位置，则会使用相应的主方法调用单个运行。

使用特定方法重新计算

使用此功能，可以通过特定的主要方法重新计算导航表中显示的运行。在**使用方法重新计算**对话框中指定所需的主要方法（见下图）。如果所选择的主要方法使用智能报告（见第 169 页的**报告**），则还可以指定将用于单个进样报告的报告模板。



图 40 使用方法重新计算对话框

浏览主路径中的方法对话框和**浏览主路径中的模板**对话框提供了您在“首选项”中指定的所有文件位置。

注意

在早期版本的 ChemStation 中，您能够通过选择工具栏中的**使用当前方法**、**使用来自数据文件中的方法**或**使用序列方法**，使用特定方法来重新计算。

如果选中**使用参比**复选框，则可以选择包含参比信号的数据文件。ChemStation 使用此信号来计算《欧洲药典》定义的信噪比。下拉列表提供您在当前会话中可以使用的数据文件。通过**浏览**按钮，可以选择还出现在导航表中的任何数据文件。如果要使用不同的参比文件，必须首先将其添加到导航表中。

新参比将覆盖原有的参比，并且从现在开始将用于每个报告中的信噪比计算。如果选中**使用参比**复选框，但是不选择任何文件，将对所有重新计算的数据文件清除参考，从现在开始不再计算信噪比的值。

每次重新计算样品或生成报告时，会自动用所用方法的数据分析参数更新数据文件方法 (DA.M)。特定方法的路径会作为参考保存到数据文件中。

最终结果模式



图 41 导航表最终结果模式工具集

在此模式下，将会针对每次运行调用数据文件方法 (DA.M)。DA.M 是曾用于执行上次的数据分析（在采集、重新处理或重新计算期间）的方法。因此，即使序列方法与此同时也发生改变，您也可以使用最初使用的方法重新生成上次结果。这样，您就可跟踪结果集连续重新校正步骤中对方法所进行的更改。

工具栏中的方法名称显示 DA.M，这表示已调用该数据文件方法。此外，将鼠标指针移到该字段上时，会有一条工具提示显示该方法的完整路径和名称。此外，上次用于数据分析的方法（已复制到 DA.M）的名称会显示在导航表的**分析方法**栏中。该栏的工具提示会显示该方法的完整路径。

注意

DA.M 通常是只读的。此方法不能手动调用，而只能由 ChemStation 在“最终结果”模式下进行重新计算时调用。您可以编辑它，但不能进行手动保存。

如果您更改了方法，并且还要打印报告，会显示一个消息框来提示您进行确认，因为该操作会生成新结果。如果确认，更改将被保存到上次使用的数据分析方法。随后会在方法审计跟踪中添加对应条目。

在最终结果模式中，您可使用 DA.M 中当前的数据分析参数更新已调用的主方法或任意主方法，或将更改过的 DA.M 方法另存为全新的主方法。例如，您调用了数周或数月前分析的数据集，您将发现 DA.M 中存储的数据分析参数对目前的工作很有帮助。然后，您可将设置传输到所选的主方法。有关更多信息，请参阅第 51 页的 [管理方法](#)。

重新处理模式

序列的重新处理模式

分析数据的另一种方式是对整个序列进行数据**重新处理**。与重新计算不同，数据重新处理将在序列上下文重新分析所有运行，即，运行校正时将更新序列方法的校正表，并且乘积因子、数量等可在序列表中改变。

结果集包含进行重新处理所需的全部文件：数据文件、序列文件的副本、所有序列方法以及原来随采集一起使用的所有报告模板。因此，为了对序列进行数据重新处理，只需将它调入导航表并选择重新处理工具组。

如果需要将序列方法的更改传播到相应的主方法以作为所有未来采集运行的输入，则可以使用**更新主方法**功能方便地实现这一点（请参见第 54 页的 **更新主方法**中的 DA 参数）。

每当您重新处理数据文件时，DA.M 都会自动更新。

为了重新处理序列，导航表提供了以下工具组：



图 42 导航表的序列重新处理工具组

通过此工具组，您可以编辑序列列表、编辑序列参数、保存当前序列、打印当前序列、显示或隐藏序列工作日志、查看保存的序列总结报告文件、开始序列重新处理、或停止序列。

请注意，导航表中的重新处理图标仅对 ChemStation B.02.01 和更高版本生成的结果集可用。在 B.02.01 之前生成的数据以及在旧的非唯一文件夹模式下采集的数据无法访问**数据分析**中的重新处理。这类序列需要在**方法和运行控制**中进行重新处理，将序列参数**序列运行方法**定义为**仅重新处理**。对于使用 ChemStation B.02.01 和更高版本生成的序列，**方法和运行控制**中的重新处理选项已删除，导航表将重新处理作为**数据分析任务**来提供。

另一种替代方法是将这种样品或序列添加到新的自我装配的结果集中。在这里，您还要分配序列方法，并且可以在之后重新处理整个序列（请参见第 145 页的**自我组装的结果集**）。

关于重新处理，请注意以下规则：

- 将结果集调入导航表中时，ChemStation 还会自动调用位于该结果集中的序列文件 (*.S)。该序列文件包含与属于该结果集的任何数据文件相关的所有序列行。
- 所有操作都针对序列方法执行。如果要应用更改过的分析参数，必须更改序列方法。
- 在重新处理期间，批处理文件 (*.b)、序列/单次运行日志 (*.log) 和导航表都会更新。每个已处理数据文件的单个数据分析方法 (DA.M) 都将由序列方法所覆盖。
- 如要将任一主方法目录中的新方法添加到序列列表，请使用 ChemStation 资源管理器将主方法复制到结果集，或单击**方法 > 更新方法...**。然后，您可以在序列列表中选择新的序列方法。在序列列表中不能添加或删除行。
- 在“序列参数”对话框中，只能更改序列注释和序列列表使用信息。其他所有字段都必须在数据采集期间设置，否则不会应用于重新处理。

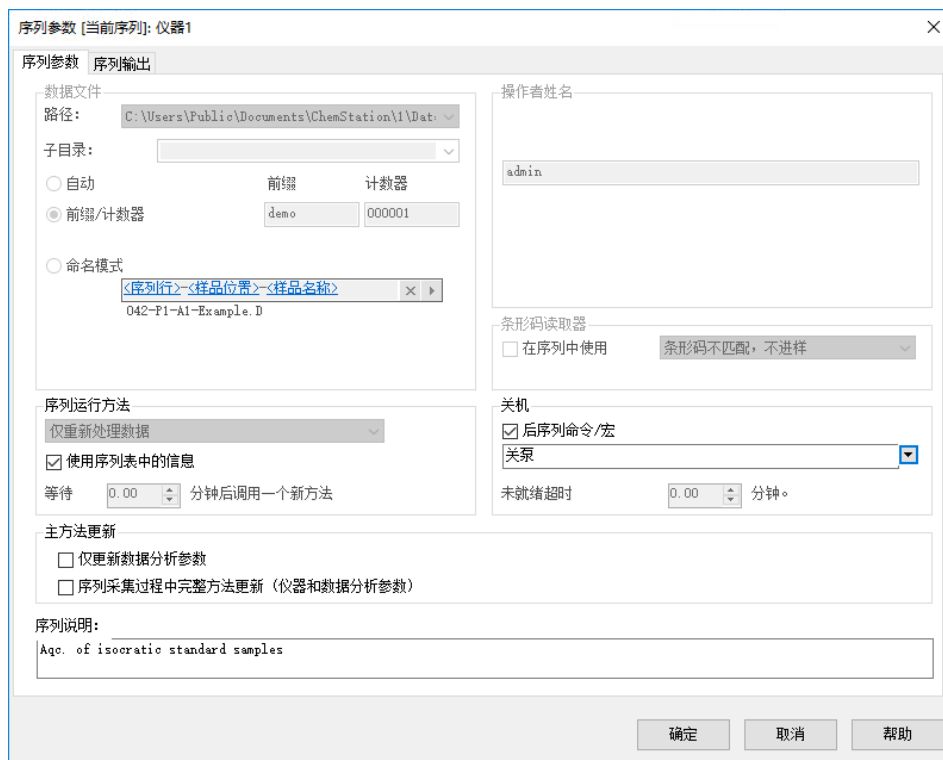


图 43 数据分析中的序列参数

单次运行的重新处理模式

将单次运行数据调用到导航表时，ChemStation 会调用相关的分析方法。该方法的名称将显示在**分析方法**列中。完整路径可通过上下文菜单（**查看运行详细信息**）显示。

如果分析方法在其原始路径下不可用，则会显示错误。在未使用分析方法的仅采集运行中，将会调用采集方法并用作分析方法。

为了重新处理单次运行，导航表提供了以下工具组：



图 44 导航表的单次运行重新处理工具组

使用该工具组后，您可以逐步查看运行情况，并使用相关分析方法对其进行重新处理。结合**调用后查看报告文件**选项（见第 138 页的图 37），该模式可在不修改任何数据的情况下轻松查看多个单次运行结果。

注意

即使单次运行是校正样品，方法中存储的校正数据也不会重新处理时更新。若要重新校正，请参阅第 166 页的**重新校正**。

手动积分事件的处理

手动积分事件（例如，手动绘制的基线）比定时积分事件更针对数据文件。如果色谱图很复杂，最好能用这些事件进行重新处理。

因此，在 ChemStation B.04.01 及更高版本中，可将手动积分事件直接存储在数据文件中，而不是方法中。每次查看或重新处理数据文件，都会自动应用数据文件中的这些手动积分事件。将会在浏览表的相应列中标记包含手动积分事件的运行。

除了用于绘制基线和手动删除峰的工具外，用户界面上还有其他工具可供用于：

- 将当前显示的色谱图的手动积分事件保存到数据文件中；
- 删除当前显示的色谱图中的所有事件；
- 撤消上一个手动积分事件（在该事件未保存的情况下，此功能不可用）。

如果用户在导航表中浏览数据期间继续查看下一个数据文件，则 ChemStation 会检查所有未保存的手动积分事件并询问用户是否希望保存这些事件。

在导航表中查看数据期间，存储在数据文件中的手动积分事件不会影响以**批处理**模式进行查看期间存储的手动积分事件。对于数据文件中的手动积分事件，上述两种查看方法完全不同。

在低于 B.04.01 的 ChemStation 版本中，手动积分事件只能存储在方法中。在 ChemStation B.04.01 版中，此工作流程仍可使用。 **数据分析**视图中的**积分**菜单提供了以下项，以便处理存储在方法中的手动积分事件：

更新方法中的手动积分事件： 将新抽取的手动积分事件保存到方法中。

应用方法中的手动积分事件： 将当前保存在方法中的手动积分事件应用到当前调用的数据文件。

删除方法中的手动积分事件： 从方法中删除手动积分事件。

要将保存在方法中的手动积分事件存储到数据文件中，需应用方法中的相应事件，然后将结果存储到数据文件中。根据需要，可以删除方法中的事件。

如果选中了方法的**积分事件表**的**手动积分事件**复选框，则调用使用了此方法的数据文件时将始终应用这一方法的手动积分事件。如果数据文件包含其他手动积分事件，那么会使用该数据文件中的这些事件。选中**手动积分事件**复选框时，永远不会要求用户将事件保存到数据文件中。

自我组装的结果集

在**数据分析**视图中，导航表显示所调用的单次运行或序列的内容。您可以调用、卸载数据文件或将其添加到导航表中。使用**序列 > 创建新结果集**命令，可以根据当前显示在导航表中的数据创建新的自我组装的结果集（请参见第 97 页的**组装新结果集**）。然后，可以以处理自动创建的结果集的方式重新处理自我组装的结果集。

卸载当前数据集

使用导航表的上下文菜单中的**卸载当前数据集**命令，可以将导航表恢复为最初的空白状态，就像刚启动 ChemStation 后导航表所处的状态。如果存在未保存的数据，则系统会提示您保存它。

删除选定的数据文件

使用导航表的上下文菜单中的**删除所选数据文件**命令，可以删除导航表中的选定行。这会删除导航表中的引用，而不会将实际数据文件从文件系统中已调用的结果集或单次运行中删除。只能删除已添加/重叠的文件的引用。

更新方法

在**数据分析**视图中，提供了多个选项来在主要方法目录和结果集之间复制方法。有关更多信息，请参阅第 51 页的**管理方法**。

用于数据分析的报告查看器

根据配置，ChemStation 在特定时间点自动将单个进样报告和序列总结报告保存到文件系统。通过报告查看器，可以方便地查看保存的报告文件，以检查来自数据采集、重新处理或重新计算的结果。

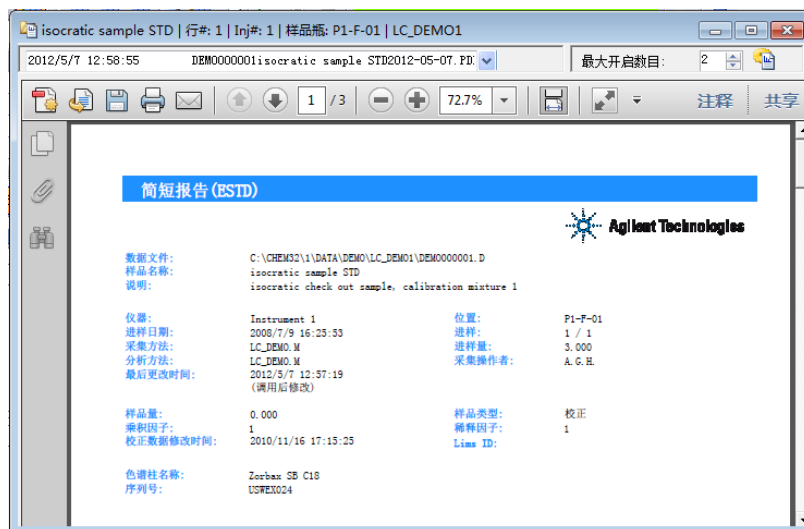


图 45 报告查看器

使用报告查看器具有以下优点：

- 您可以从 ChemStation 直接打开报告文件，而不需要在文件系统中搜索文件。
- 每个报告都将在单独的浮动窗口中打开。因此，您可以并排显示窗口以方便地比较不同的报告。
- 您可以使用全屏模式查看报告文件。
- 您可以使用 Adobe Reader 的功能查看 .pdf 报告。
- 您可以在 .txt 报告以及 .pdf 报告中搜索具体的文本。
- 在重新处理序列时，您不需要等到整个序列的重新处理过程结束。您可以打开已经完成的序列样品的已保存报告文件。

启动报告查看器

您可以通过菜单、通过工具栏图标或通过导航表的上下文菜单打开报告查看器。提供不同的项目，用于序列总结报告和单个进样报告。

查看单个进样报告：

- 选择菜单**报告 > 查看报告文件**以查看报告文件或加载的信号文件。
- 从导航表的指定样品的上下文菜单选择**查看保存的报告文件**命令。通过此命令，您可以加载报告文件或任何信号的文件，即使该文件当前未加载。
- 从工作区工具栏中单击**查看保存的报告文件**图标以查看报告文件或加载的信号文件。



查看序列总结报告：

- 选择**序列 > 查看总结报告文件**菜单。
- 从导航工具栏（重新处理模式下）单击**查看保存的序列总结报告文件**图标。



配置报告查看器窗口

您可以对报告查看器多个方面的行为进行配置。所有这些设置都可以通过报告查看器窗口中的**选项**按钮访问。

您可以定义同时打开的报告查看器窗口的最大数量。这些窗口将循环重复使用。如果查看的报告文件数量超过报告查看器窗口的最大数量，第一个打开的窗口将最先更改显示内容。

注意

如果不需要比较多个报告，建议将报告查看器窗口的数量限制为 1。

在比较多个报告时，调整报告查看器窗口的标题栏也很有用。显示序列总结报告、序列样品的单个进样报告或单个运行的单个进样报告的报告查看器窗口可使用多种标记。这些标记可帮助您区分每个报告查看器窗口。

报告查看器窗口总是显示在 ChemStation 应用程序顶部。为了同时使用 ChemStation 和报告查看器，您可以调整两个窗口的大小并重新定位，以便于同时查看两个窗口。关闭 ChemStation 时，将保存窗口的大小和位置。下次启动 ChemStation 时，再次使用同样的设置。

重排报告查看器窗口

报告查看器窗口总是显示在 ChemStation 应用程序顶部。为了同时使用 ChemStation 和报告查看器，您可以调整两个窗口的大小并重新定位，以便于同时查看两个窗口并方便地工作。

关闭 ChemStation 时，将保存窗口的大小和位置。下次启动 ChemStation 时，再次使用同样的设置。

使用报告查看器

您可以在下面列举的工作流程中使用报告查看器：

- 您设置方法和序列以将 PDF 报告保存到文件系统。完成序列运行后，您在报告查看器中直接从 ChemStation 打开报告文件（序列总结报告或单个进样报告）。使用 Adobe Reader 功能（例如，缩放或搜索）详细检查报告。
- 您从中央数据存储下载已经包含报告文件的序列。
 - 为查看最终果，您在导航表中选择相关的样品并在报告查看器中直接从 ChemStation 打开报告。
 - 如有必要，您可以更改方法并重新处理序列。在重新处理过程中，您开始查看已经完成的样品的报告。

在报告查看器中，您可以从左上角的列表中同时选择旧报告和新报告。您可以通过列表条目中显示的创建日期区分报告。根据传输设置，数据（包括新报告文件）在重新处理完成后可自动上传到中央数据存储。

- 您运行仅保存了 TXT 报告文件的序列。您也可以在报告查看器中检查这些报告文件。
- 您可以按照不同的报告格式或模板审核同一序列样品的不同报告。

首先，您使用扩展性能报告创建序列。您可以运行或重新处理此序列以获得报告文件。如果您对此报告中显示的结果感到满意，则可以更改序列方法以创建更短的报告（例如，选择不同的报告模板或经典报告格式**简短**）。然后，您可以重新处理此序列以获得更短的报告。使用报告查看器查看报告时，您可以从左上角的列表中选择不同的报告以进行切换。每个文件的创建日期都显示为列表条目的一部分。

批处理浏览

什么是批处理浏览？

批处理浏览是数据分析中的一种功能，用来帮助分析人员快速方便地对序列运行结果或选定的运行结果进行“第一遍”浏览。特别在再处理大量样品时可以节省时间。无论何时，只要运行序列，批处理文件（使用 .b 作为扩展名）就会自动产生，并连同数据文件一起放在数据目录中。该批处理文件包含指向该批处理浏览自身的数据文件的指针。调用一批处理时，分析人员只需选择批处理要使用的方法，然后分别选择想在批处理中分析的数据文件即可。认可结果前可以检查校正精度、仪器性能和各个积分。那些改变了积分参数的色谱图可与数据文件一起保存。这个环境也提供了所有其他数据分析的功能，如峰速度，谱库搜索等。

批处理浏览使用与标准数据分析相同的数据分析寄存器（ChromReg 和 ChromRes），因而不应在正在进行分析的在线会话中使用。

批处理配置

批处理是用户选择的使用用户定义的方法处理的一系列数据文件。批处理中的所有数据文件均使用同一方法处理。每次调用新样品进行查看时，均可以选择执行的处理步骤（积分、识别/定量、报告）。

批处理中的所有校正运行用于生成一个校正表，该表使用平均响应因子，然后用于定量。

批处理表

所有运行显示于一个用户配置的批处理表：

- 表中列数及其内容可设；
- 可以按以下方式对运行排序
 - 运行索引（采集运行的顺序）与其他任何标准无关，
 - 样品类型（先对照样品，然后校正样品，然后是标准样品）每一样品类型中再依据运行方法(如运行中使用各种方法)，每种方法中再用运行索引，
 - 方法（如果为获得运行使用了多种方法），然后按每种方法中的运行索引，
- 可以在表中显示或隐藏样品、校正样品和对照样品。

每个选定的运行占据批处理表中的一行。您可以将运行的样品类型更改为“已删除”从批处理表（如校正）中排除运行。

化合物表

化合物结果显示在一个用户可配置的化合物表中，但化合物表的内容取决于批处理表中的样品类型：

- 化合物列表包括在已调用进行批处理浏览的方法中找到的所有化合物。
- 如果在批处理表中仅显示校正样品（样品和对照样品隐藏），则化合物表将显示针对与校正相关的信息（预期含量、相对误差和绝对误差）的其他列。
- 如果在批处理表中仅显示控制运行（样品和校正样品隐藏），则化合物表将显示针对任何定义的控制限制的其他列。

对于包含化合物特定信息的列，可以通过向色谱柱说明添加 %s，以在表标题中包括化合物的名称。

批处理报告

批处理报告包括两个表，一般是批处理表和化合物表，也由用户自设定。

对于包含化合物特定信息的列，可以通过向色谱柱说明添加 %s 以在表标题中包括化合物的名称。允许多行表头，在要分割行处插入字符 “|” 即可。

用户界面

批处理提供两个用户界面的选择：

- 包括一个按钮栏的标准界面，与批处理和化合物表一起出现的按钮，与大多数的批处理菜单选项相应。
- 一个简化界面提供一个类似标准界面的按钮栏，但没有批处理表和化合物表，而是一个综合栏，只含有批处理的相关信息，简化界面按钮栏不包含批处理表连接或化合物表连接按钮。

查看功能

数据文件可按以下两种方式之一显示：

- 手动，通过选择运行以从表中显示。
- 自动，使用预定义的数据文件间间隔。自动显示期间，只会显示表中所显示的样品类型；运行会按在表中出现的顺序显示。自动查看可以暂停，之后可以继续或停止。

ChemStation 提供了批处理浏览的标准功能。其中包括校正、色谱图手动操作，例如平滑或手动积分。数据文件的任何更改可通过批处理文件标记和保存。已查看过的色谱图在批处理表中用星号进行了标记。您可仅针对当前色谱图取消所做更改，也可针对批处理中所有色谱图的所有更改执行该操作。

注意

“批处理浏览”可用于保存各运行的手动积分事件。还可以使用“批处理浏览”外的数据文件保存手动事件。为避免两组手动积分发生冲突，“批处理浏览”中将不再应用使用数据文件保存的手动事件。

调用运行后，系统会执行所选的处理选项；如果运行已经处理并且已保存更改，那么将会调用处理过的运行。与调用未经处理的运行相比，这种方法处理速度更快，因为无需完成任何处理。

批处理浏览中的校正

批处理浏览中的校正与序列中的重新校正设置无关。批处理校正的第一步通常是替换校正表中的响应和保留时间条目。对于下列校正标准，响应和保留时间均使用平均值。

单击批处理浏览工具栏会使系统重新校正批处理中的所有校正运行，创建重新校正后的校正表。单击批处理浏览工具栏将重新计算各校正化合物的含量。系统会使用重新校正的校正表计算所有样品的含量。

批处理报告

可以直接在打印机上打印用户可配置的第 149 页的 **批处理表**，可以将其显示在屏幕上或使用以下格式之一打印到带有用户指定前缀的文件中：

- UNICODE 文本文件，使用 .TXT 扩展名
- 数据交换格式，使用 .DIF 扩展名
- 逗号分隔值格式，使用 .CSV 扩展名
- Microsoft Excel 格式，使用 .XLS 扩展名。

也通过报告选项达到独立进行样品分类的目的（如按运行索引、样品类型或方法），而与批处理表中的方法分类无关，排序优先级与第 149 页的 **批处理表** 的一致。

批处理历史

批处理会形成一个与当前批处理相关的所有举动的记录，所有改变批处理的举动（如改变显示色谱图，改变样品类型，调用和存贮批处理）都会在批处理记录中加出一行，并同时存上日期和时间标记，当前操作员姓名和一个注项事件的说明。

您也可以在批处理历史中加入自己的注释。您无法编辑已存在的批处理历史，并且只能通过“批处理历史”菜单项访问批处理历史。

查看

在 ChemStation 中，提供了一个视图，该视图涵盖数据分析的纯数据查看工作流程。在此**查看**视图中，您可以为整个序列、某个序列的一部分，或者不同序列或单个样品中选定的任何数据文件生成报告。

在**查看**视图中，请勿调用任何方法，也勿在重新计算或重新处理期间创建任何新结果。在**查看**视图中生成的报告仅会显示已经计算的结果。

您可以选择一个报告模板并将其应用到所选择的特定数据文件。所选择的模板和数据文件组合决定所生成的报告的输出。

由于**查看**视图仅提供现有结果的视图，因此它可在适当的工作流程中使用以显示现有的结果，而不会生成新的结果版本。

注意

仅当在 OpenLab 控制面板的“仪器配置”中激活了智能报告时，**查看**视图才可用。

智能报告的要求

ChemStation 以智能报告使用的特定格式 (*.ACAML) 生成结果数据。如果您要针对使用 ChemStation 版本 A 或 B 采集的数据创建报告，必须先使用 OpenLab ChemStation LTS 01.11 版本生成结果（例如，在“数据分析”视图中重新计算数据或生成单个进样报告）。如果结果未采用所需的格式提供，则查看视图中的已生成报告不会包含任何数据。

数据文件选择

您可以通过从 ChemStation 资源管理器的导航树中调用序列或单个运行来选择所需的数据文件。之后，所有可用数据文件均会显示在导航表中。在导航表中，选择要在报告中查看其结果的特定数据文件。

调用数据文件

您可以从整个序列或“单个运行”文件夹调用所有数据文件。在 ChemStation 资源管理器的**数据**选项卡上，您可以双击序列或使用上下文菜单中的**调用**命令来调用所包括的全部数据文件。

调用数据文件时，会在显示新数据文件之前自动清除导航表。因此，您可以为**单个样品报告**或**序列总结报告**准备数据。

添加数据文件

如果您要比较不同序列中的结果，可以先调用一个序列，然后添加来自另一序列的所需数据文件。在 ChemStation 资源管理器的**数据**选项卡中，使用上下文菜单中的**添加数据文件...**命令，只将特定的数据文件添加到已调用的选项中。将会打开一个对话框，您可以在该对话框中选择所需的数据文件。

添加数据文件时，导航表会将数据文件追加到已经调用的数据文件的列表中。因此，您可以准备数据，例如，为**跨序列报告**准备。

选择用于报告的数据文件

导航表显示来自您在 ChemStation 资源管理器中双击的序列或单个样品集合的所有数据文件。在导航表中，您可以选择要为其创建报告的那些数据文件。生成报告时，仅包括所选定。

报告模板选择

您可以从 ChemStation 资源管理器的**报告模板**选项卡中选择所需的报告模板。导航树将在 REPSTYLE 目录中显示所有报告模板。

默认情况下，REPSTYLE 目录在 C:\Users\Public\Documents\ChemStation 下。该路径是在安装期间定义的。

使用 ChemStation 菜单**文件 > 打开 Windows 资源管理器...**来打开当前仪器的路径（例如 C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1）。此外，也可使用开始菜单的**仪器数据**快捷方式。

报告预览

生成的报告始终由数据选择和报告模板决定。因此，一旦您选择了一个或多个数据文件并调用了报告模板，则ChemStation会生成相应的报告并显示报告预览。

您可以将报告发送到打印机或将其另存为文件（.PDF、.XLSX、.DOCX、.TXT 或 .CSV）。如果使用中央数据存储系统，还可以直接将报告上传到中央存储库。

可能的查看工作流程

您可以在诸如下面的工作流程中使用**查看**视图：

- 调用一个序列并选择该序列的所有数据文件。调用报告模板并生成**序列总结报告**。
- 生成序列总结报告之后，请调用其他报告模板。使用**不同的报告布局**查看相同的数据。
- 调用一个序列，并且仅选择一部分数据文件。调用一个报告模板并且**仅为该序列的一部分**生成序列总结报告。
- 调用一部分数据文件之后，添加其他数据文件（来自序列或来自单个样品的集合）。调用一个报告模板并生成**跨样品或跨序列报告**。

7

校正

术语定义	156
校正类型	157
单级校正	157
多级校正	158
校正范围	160
校正曲线拟合	160
原点处理	160
校正表	163
峰加和	164
化合物组	164
未知样品	165
重新校正	166
什么是重新校正?	166
为何要进行重新校正?	166
手动重新校正	166
包含峰加和的重新校正	167
重新校正的方式	167
缺失峰情况下的重新校正	167
批处理浏览中的重新校正	168

本章介绍校正的概念。

术语定义

- 校正** 校正通过进样准备好的指定校正样品来确定用于计算绝对组分浓度的响应因子的过程。校正表也用于识别峰。
- 化合物** 在多信号校正中，一个化合物可以由几个峰构成，通常每个信号一个峰。在单信号校正中，一个化合物对应一个峰。
- 校正级别** 校正级别由一个校正样品浓度的校正点构成。在多信号校正中，可使用不同信号来校正不同的化合物。
- 校正点** 校正点是指校正曲线上峰的含量/响应值比率。
- 校正样品** 校正样品（也称为校正标准或标准混合物）是指含有要定量的已知含量的化合物的样品。在软件中，校正样品指来自校正样品瓶的进样。
- 校正样品可从化学供应商处购买，也可以通过精确检测的纯化合物的含量来制备。校正样品中化合物的含量通常用浓度表示，通常以 ng/ μ l 为单位。

校正类型

ChemStation 提供了两种校正类型，即单级校正和多级校正。

单级校正

第 157 页的图 46 中显示的校正曲线含有一个点，即为一个级别。对于单级校正曲线，假定目标样品的工作浓度范围内的检测器响应值为线性值。给定组分峰的响应因子为通过该点及原点的校正曲线斜率的倒数。单级校正的一个缺点是，对样品浓度的检测器响应值被假定为线性值，并且通过浓度与响应值对照图的原点。这种校正并不总是正确的，而且可能导致不精确的结果。

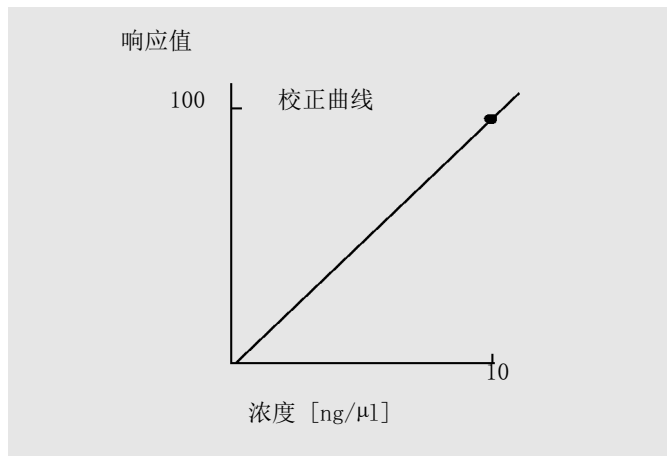


图 46 单级校正曲线

为了获得准确的定量结果，校正曲线应至少具有两种级别。这些级别应涵盖期望在未知样品中找到的含量。

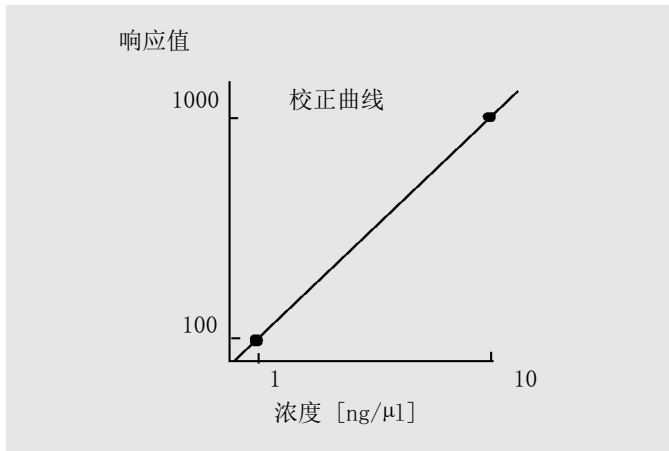


图 47 双级校正曲线

例如，如果要对某一化合物进行定量，并且未知样品的期望含量在 1 – 10 ng/μl 之间，则校正曲线至少应具有第 158 页的图 47 中所示的两个级别。

含量极限值

ChemStation 允许您根据各组分的绝对含量来定义有效定量范围。

多级校正

如果无法充分地假定某个组分显示线性响应或确认校正范围线性时，可使用多级校正。每个校正级别对应一个拥有特定组分浓度的校正样品。应准备校正样品，以便每个组分的浓度在未知样品预期的浓度范围内变化。通过这种方法，可使用浓度更改检测器响应值，并相应地计算响应因子。

该多级校正曲线有三个级别，还会显示通过原点的线性拟合。这种通过远点的线性拟合方法与单点方法校正相似。检测器的浓度响应值假定为线性。这两种校正类型的区别在于，使用线性拟合时，通过点数的最佳拟合可确定检测器响应值的斜率，每个级别一个。

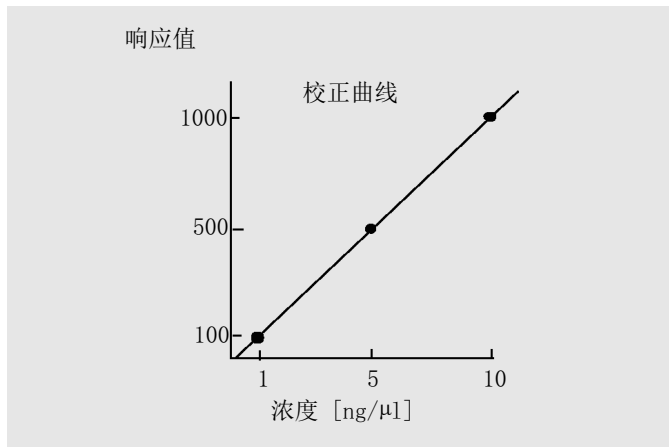


图 48 拥有三个级别的多级校正曲线

对应的校正表是用于生成该曲线的信息表，它的样子与第 159 页的表 18 中的其中一个类似。

表 18 校正表

级别	含量 (ng/μl)	响应值 (面积计数)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

在本例中，用于生成三个级别的校正样品已被识别为 1、2 和 3。

校正范围

每个多级校正在校正样品中所使用的浓度范围内都是有效的。尤其是当校正曲线为非线性值时，校正曲线的外插法最多只是一种近似。可以在**化合物细节表**对话框中定义每个化合物的有效校正范围。化合物的每个条目可用下限和上限来表示。如果超出这些限制，将在报告中进行标注。

校正曲线拟合

有多种可与多级校正一起使用的曲线拟合计算。

- 分段线性
- 线性
- 对数
- 幂
- 指数
- 平方
- 立方
- 平均（响应值/含量）

非线性拟合

在某些情况下，样品浓度中的检测器响应值更改是非线性的。对于这些分析类型，不适合使用线性回归校正方法，应使用多级校正计算。

原点处理

绘制响应值时有四种处理原点的方式：

- 忽略原点，
- 包含原点，
- 强制原点，或
- 连接原点。

如要在校正曲线中强制包括原点，请将第一象限内的校正点对照原点在第三象限内进行点对称操作。使用回归计算的所有点，以确保生成的校正曲线通过原点。在第 161 页的图 49 中也有说明。

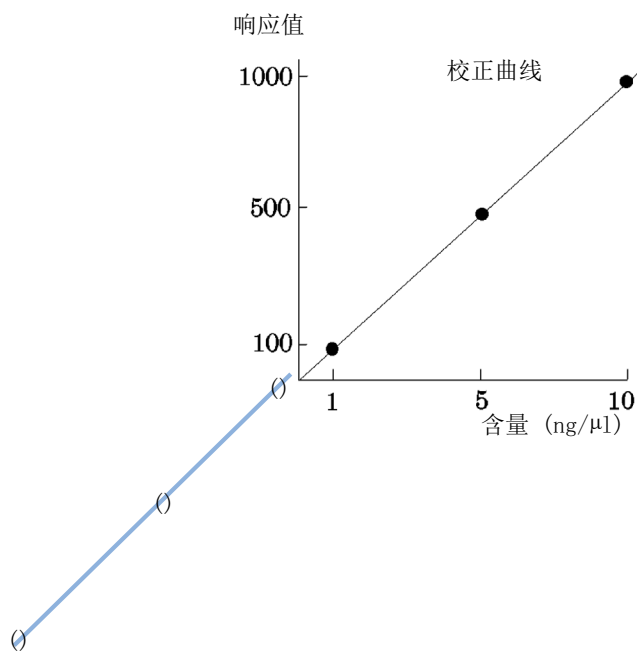


图 49 强制包含原点

有关校正曲线拟合和原点处理的详细信息，请参见[在线帮助文件](#)。

校正点加权

设置默认校正曲线时，您可为用于生成曲线的各个校正点指定一个相对加权（或重要性）。

可选择下列加权：

加权	说明
相等	曲线中的所有校正点使用相等加权值。
线性（含量）	含量为 x 的校正点的权重为 $1/x$ ，归一化到最小含量以使最大加权因子为 1。通过使用权重乘以最小含量来实现归一化。例如，含量为 x 的校正点的权重为 $(1/x) \times a$ （校正标样中准备的已校正化合物的最小含量）。 如果将原点包含在内，则将会指定其他校正点的加权平均数。
线性 (Resp)	响应值为 y 的校正点的权重为 $1/y$ ，归一化到最小响应值以使最大加权因子为 1。通过使用权重乘以最小响应值来实现归一化。例如，含量为 y 的校正点的权重为 $(1/y) \times b$ ，其中 b 是与校正标样中准备的已校正化合物的最小含量对应的响应值。 如果将原点包含在内，则将会指定其他校正点的加权平均数。
平方（含量）	含量为 x 的校正点的权重为 $1/x^2$ ，归一化到最小含量以使最大加权因子为 1。通过使用权重乘以最小含量来实现归一化。例如，含量为 x 的校正点的权重为 $(1/x^2) \times a^2$ （校正标样中准备的已校正化合物的最小含量）。
平方 (Resp)	响应值为 y 的校正点的权重为 $1/y^2$ ，归一化到最小响应值以使最大加权因子为 1。通过使用权重乘以最小响应值来实现归一化。例如，响应值为 y 的校正点的权重为 $(1/y^2) \times b^2$ ，其中 b 是与校正标样中准备的已校正化合物的最小含量对应的响应值。
# 校正	根据点的重新校正次数对校正点进行加权。未完成归一化。

例如，平方校正点加权可用于适应校正点的散布。它可保证靠近原点（这样点的测量结果通常会更准确）的校正点会有比远离原点的分散校正点有更高的加权。

您应当作出决定，根据您的方法要求，要使用哪一种校正点加权。

校正表

依据您所选择的计算过程，校正表指定将峰面积或峰高转换为您所选择的单位。校正表中列出从校正运行中得到的保留/迁移时间。这些保留/迁移时间与样品运行中峰的保留/迁移时间作比较。若匹配，则认为样品峰与校正表中的峰代表相同组份。在分析或产生报告的过程中，用输入的第一个峰含量来计算为报告选用的计算过程的含量。创建一个校正表所需信息的类型和多少随所需计算过程的不同而不同。

创建一个校正表需要以下信息：

- 每个校正混合物组份峰的保留/迁移时间，
- 用于制作校正混合物的各组分的含量，用同一单位表示。

峰加和

峰加和表专为石化和制药行业的某些特定应用而设计。典型的应用是总杂质或分解产物的报告，或对特定范围内的未校正峰区域进行加和。

峰加和表与标准校正表类似，但是有所不同。峰加和表与当前方法相关联，这一点与校正表一样。峰加和不用于多信号数据文件。

特定时间范围内的加和区域可通过使用校正表中化合物的校正曲线得出的量来表示。也可使用固定的响应因子。

注意

您必须先为分析创建校正表，然后才能创建峰加和表。

化合物组

化合物组允许校正表中的单个化合物成组，以便进行报告。一个化合物仅是单个组的一部分。您可在校正表中创建组。校正表中仅包含各组的编号；您可在单独的复选框内为编号指定组名称并添加一个或多个化合物。可以执行组样品量校正，为组指定总量。组中化合物的量根据总响应的响应值来计算。一个常见的例子：异构体混合物只知道总量，但是异构体的检测器响应值是相同的。

未知样品

未知样品是包含需要定量的未知量化合物的样品。

如要了解未知样品中化合物的含量，必须：

- 为化合物创建校正曲线，
- 进一针未知样品，然后使用与校正标样相同的方式运行分析，
- 确定信号中的响应值（其为由于化合物含量未知而产生的面积或高度），以及
- 使用校正曲线计算未知样品中的化合物含量。

例如，如果未知样品中的峰面积为 500，通过第 165 页的图 50 中显示的校正曲线，可确定未知样品的含量为 5 ng/μl。

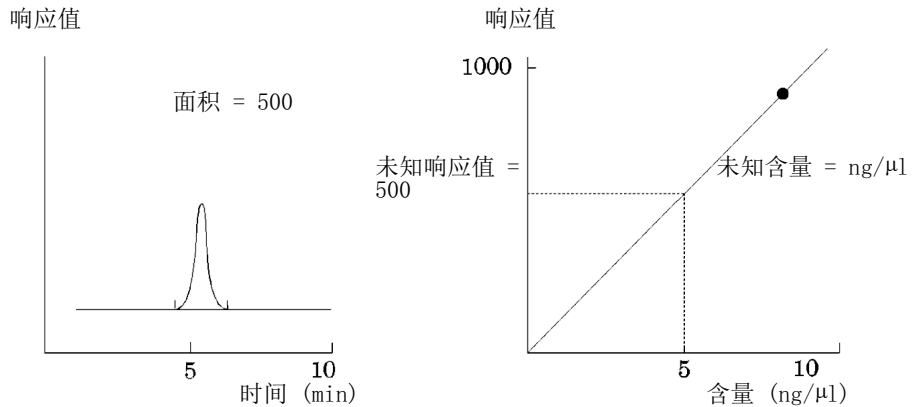


图 50 未知样品和校正曲线中的信号

重新校正

什么是重新校正？

重新校正是要更新校正曲线上的某个级别时所使用的过程。重新校正时，您要照旧运行另一个包含相同校正化合物的样品。最重要的是，这些化合物的含量也要相同。运行校正样品时，您将获得更新的响应因子和保留/迁移时间。您也可选择对一定数量校正运行的响应因子进行平均，以便对响应因子进行等量加权。

为何要进行重新校正？

因色谱的变化，大部分校正都有有限的时间周期。为保持分析的准确性，有必要重新校正。例如，假设每当您需要为含有咖啡因的化合物定量时，都要为咖啡因化合物创建校正表。有时您需要替换色谱柱/毛细管。尽管替换的色谱柱/毛细管的类型完全相同，但是其行为与之前您首次为咖啡因创建校正表时的色谱柱/毛细管行为不完全相同。因此，在使用新的色谱柱/毛细管分析含有未知量咖啡因的样品前，请重新校正校正表中的级别，以保证一致性。通过以上操作可在相同系统条件下对已分析的样品进行定量。

手动重新校正

您可以在“新校正表”对话框中使用“手动设定”选项按钮来手动输入峰校正信息并且归一化校正表。通常，通过运行一个校正标准混合物，创建一个校正表并输入所有被校正峰的含量以获得响应因子来产生一个新的校正方法。此方法对某些应用来说是有用的，在石化行业中的应用就是一个例子，在这些应用中，同样的化合物已被分析了许多年并且各种化合物和检测器的响应因子都是现成的。

您可以通过在校正表中输入峰和它们的响应因子，使用含有至少一个响应参考峰的标准对方法进行重新校正，并选择偏差百分比更新来手动创建校正表。

要参考特定峰来计算保留时间比，可以将此峰设置为保留时间比参比峰。然后，所有 RT 比参考号相同的峰都将参考此峰。

包含峰加和的重新校正

执行重新校正时，在完成实际重新校正前，会更新方法的峰加和表中的保留/迁移时间范围。以这种方式执行峰加和重新校正可确保将偏差包含到时间计算中。

重新校正的方式

使用 ChemStation 软件时，可通过两种方式完成重新校正。您可在自动分析序列期间交互或自动重新校正。单个或多个校正样品进样后使用 ChemStation 软件直接检查重新校正的过程时，请使用交互重新校正。在指定重新校正的时间时，请使用序列进行重新校正，自动化软件会完成重新校正。有关更多信息，请参阅第 111 页的 [自动重新校正](#)。

有关如何使用软件执行重新校正的信息，请参见帮助系统的“方法”部分。

缺失峰情况下的重新校正

可以通过三种方式对未识别峰进行重新校正。

无重新校正

如果校正表中有一个化合物在积分结果中不能被识别，校正将被中断。如果这种情况发生在序列中，则序列也同样被中断。

部分重新校正

此方式仅适用于已识别峰的重新校正。如果缺失峰，校正不会中断，但报告和运行日志中会标注缺失峰。

所有保留/迁移时间的重新校正

该方法通过使用已知峰的保留/迁移时间，使用已知化合物的保留时间/迁移时间完成操作。对于未识别出的峰，没有更新的响应因子。

批处理浏览中的重新校正

“批处理浏览”中的重新校正方法与初始序列中的重新校正并不相同。

单击“批处理浏览”工具栏中的**更新校正**按钮会重新校正批处理中的所有校正运行，从而创建重新校正的校正表。单击“批处理浏览”工具栏中的**开始**按钮将重新计算每个已校正化合物的含量。所有样品的含量将根据重新校正的校正表计算。

8

报告

报告是什么?	170
报告结果	172
定量结果	173
经典和智能报告	174
激活智能报告的结果	174
智能报告	175
智能报告的优点	175
智能报告的限制	175
用于智能报告的报告模板编辑器 (RTE)	176
报告模板的存储	179
已生成报告的存储	181
中央数据存储中的报告模板	181
经典报告	182
报告自定义字段值	182
报告类型	182
其他报告样式参数	184
序列总结报告	184
报告文件格式	187

本章介绍了智能报告和经典报告的概念。

报告是什么？

报告包括所分析样品的定量和定性的信息。报告可以直接打印、在屏幕上显示，或作为电子文件保存起来。报告可包括运行中所测峰的信息及所采集的信号图。

用途各异的报告

您可以在数据采集期间和数据查看期间指定具有不同用途的报告：

- **序列总结报告** 是在**序列参数**对话框的**序列输出**选项卡中定义的。此报告由 ChemStation 在完成序列采集或序列重新处理操作之后自动创建。
- **单个进样报告** 是在**指定报告**对话框中定义的。此报告是在序列采集或序列重新处理期间为单个样品创建的。

利用智能报告，您可以为不同的报告类型创建模板，具体取决于报告的用途。有关详细信息，请参见第 176 页的 [报告类型](#)。

报告目标

可将报告发送至下列目标：

- **屏幕**
报告（包括文本和图形）显示在报告预览窗口中的屏幕上，并且可以从该屏幕进行打印。
- **打印机**
将含有文本及图形的报告在当前所选的打印机上打印出来。
- **文件**
报告将保存到文件中，例如 Adobe PDF 文件。

时区注意事项

采集数据时，您可以在 ChemStation 和结果中的不同位置看到进样日期。根据您的本地时区和 Windows 中的区域设置，显示的进样日期可能适合本地时区或日期/时间格式：

- 在日志中：
该日期始终显示为数据采集地的本地时间。在不同的时区查看时，或打印在报告上时，它都不适用。
- 在数据文件的**文件信息**窗口中：
该日期始终显示为数据采集地的本地时间。在不同的时区查看时，或打印在报告上时，它都不适用。
- 在报告中：
该字段适用于生成报告的世界区域的本地时区和时间格式。

如果数据采集和报告生成发生在同一时区，则所有日期（日志、数据文件、报告）将显示相同的时间，仅以不同的打印格式显示。

如果您在与数据采集所在时区不同的时区生成报告：报告将显示转换为该区域本地时间的采集时间。

以下示例演示了采集日期如何在 ChemStation 的不同位置显示，具体取决于本地时区和 Windows 区域设置。

表 19 示例：在协调世界时 (UTC) 2021 年 7 月 30 日 15:00:00 所采集数据的时间表示法

事件	转换为本地格式的采集日期/时间	本地 Windows 设置中的时间格式	显示的采集日期
在纽约采集数据和生成报告 时区 UTC-05:00	2021/7/30 10:00:00	MM/dd/yyyy HH:mm:ss tt	工作日志：2021/7/30 10:00:00 AM 数据文件：2021/7/30 10:00:00 AM 经典报告：2021/7/30 10:00:00 AM 智能报告：2021/7/30 10:00:00+05:00

表 19 示例：在协调世界时 (UTC) 2021 年 7 月 30 日 15:00:00 所采集数据的时间表示法

事件	转换为本地格式的采集日期/时间	本地 Windows 设置中的时间格式	显示的采集日期
在苏黎世 (UTC+01:00) 重新生成报告。	2021/7/30 16:00:00	dd.MM.yyyy HH:mm:ss	工作日志：2021/7/30 10:00:00 AM 数据文件：2021/7/30 10:00:00 AM 经典报告：2021/7/30 16:00:00 智能报告：2021/7/30 16:00:00+01:00
在纽约 (UTC-05:00) 第二次生成报告	2021/7/30 10:00:00	yyyy-MM-dd HH:mm:ss	工作日志：2021/7/30 10:00:00 AM 数据文件：2021/7/30 10:00:00 AM 经典报告：2021/7/30 10:00:00 智能报告：2021/7/30 10:00:00+05:00

报告结果

有两种报告：

- 不修正检测器响应值的未校正报告和
- 显示样品中各组分的检测器响应值差异修正结果的校正报告。

未校正的报告

未校正报告包括**面积%**和**高度%**报告。这些报告主要用于准备校正报告。如果需要使用化合物含量来生成相似的目标化合物单位面积或高度响应值，它们可能会成为最终报告中的值。

校正报告

校正的报告修正了报告化合物的检测器响应值差异。一个或多个包含已知量报告化合物的校正样品，其运行条件必须与未知样品所用的条件相同。这些校正样品中的积分数据用于准备校正表。这是一个保留/迁移时间、含量和响应值列表，可用于生成报告。校正的报告基于两个校正流程 - 外标和内标。

外标报告

ESTD 报告列出的结果使用的是您选择的单位，或每种化合物占有所有存在化合物的比例。校正表中的所有化合物以及样品量使用同一个量。外标过程要求必须准

确了解校正和未知样品的相对进样量。外标报告的可靠性要受到进样的可重复性和样品之间其他变量的影响。

内标报告

可通过使用内标方法来克服外标过程所带来的限制。已知量（含量不一定要相同）的内标将被添加至校正样品和未知样品。使用每个目标化合物的响应值来除以内标响应值，以得出响应比率。校正曲线是该响应比率相对于含量比率的图，该信息用于计算报告结果。通过这种方式可抵消进样量的偶然错误，以及色谱/电泳系统中会影响所有化合物的些许变化。ISTD 报告列出的结果使用的是您选择的单位。

控制图表报告

控制图表报告对已校正的特定化合物多次运行后的单一结果进行跟踪。控制图表功能在 ChemStation 运行后安装。使用该功能的方法在每次运行后将跟踪的结果传递到 Microsoft Excel 工作表中。随后，此功能将使用 Excel 打印报告。

定量结果

通过准备时使用的计算方法的名称来确认报告类型，例如，ISTD 报告。会在下文简要介绍每种类型。

峰面积百分比是最简单的报告类型，它无需校正数据，因为它不对样品组分的检测器响应值差异进行修正。对于开发配合其他报告选项使用的校正表来说，面积 % 报告非常有用。该报告适合分析不太显著的组分检测器响应值差异。

峰高百分比报告类似于面积百分比报告，只不过它计算的是峰高而不是峰面积。

归一化法报告中，以各组分占呈现的所有组分的量的百分比来报告组分。

ESTD 生成每种物质的实际含量的报告。含量是使用之前确定的校正表计算的。使用外标需要知道校正混合物的进样量。

ESTD% 生成的报告反映每种物质的相对含量占进样样品质量的百分比。含量是使用之前确定的校正表计算的。使用外标需要知道校正混合物的进样量。

ISTD 生成每种物质的实际含量的报告。含量是使用之前确定的校正曲线计算的。在样品和校正混合物中使用内标消除了对知道和控制样品进样量的需要。也会修正运行期间的任何仪器性能变化。

ISTD% 生成的报告反映每种物质的相对含量占进样样品质量的百分比。在样品和校正混合物中使用内标消除了对知道和控制样品进样量的需要。也会修正运行期间的任何仪器性能变化。

经典和智能报告

使用 ChemStation，可以选择要使用的报告类型：**经典 ChemStation 报告**（与 ChemStation B 报告相比保持不变）或**智能报告**（与 OpenLab CDS 共享）。

以下各节介绍了两种类型的报告。

激活智能报告的结果

如果您要使用智能报告，则需要在 OpenLab 控制面板的“仪器配置”中启用智能报告。

激活智能报告会对 ChemStation 产生下列影响：

- **报告布局**视图显示用于智能报告的报告模板编辑器。您现在可以在该视图中编辑智能报告的报告模板，而非经典报告模板。
- **检查**视图将可见。
- 在**报告参数**和**指定报告**对话框中，您可以在经典报告和智能报告之间进行选择。您仍可使用经典报告设置，并针对仪器使用现有的“经典”报告模板。

智能报告

智能报告的优点

智能报告具有如下优点：

- 可以使用**查看视图**。
- 经典报告中的一些设置和一些对话框中可用的多数功能现已成为报告模板的一部分。您可以使用**报告版面设计视图**（它包含适用于智能报告的新“报告模板编辑器”）创建或编辑报告模板。报告模板编辑器具有多种强大功能：
 - 通过选择对应的数据字段，访问 ChemStation 生成的所有结果数据。
 - 为了能够使用数据字段进行计算，您可以创建自己的表达式。可以使用所有有效的 Microsoft Visual Basic 表达式。
 - 在使用 ChemStation 自定义字段进行计算的地方创建表达式。
 - 结果标记：您可以为高亮显示的特定结果根据其值来创建表达式。
 - 页面摘要：报告模板编辑器提供预配置的报告项目，即所谓的“页面摘要”，您可以通过拖放操作将其插入到报告模板中。
- 您可以使用报告模板文档工具来创建报告模板说明。
- 您可以报告《欧洲药典》定义的以下值（峰谷比也可用于经典报告；如需必填字段的详细信息，请参阅《参考指南》）：
 - 信噪比
 - 相对保留值
 - 相对保留时间

智能报告的限制

使用智能报告生成的报告始终基于原始信号。进行了空白扣除、平滑、信号对齐或背景扣除的已修改信号无法报告。

用于智能报告的报告模板编辑器 (RTE)

报告类型

您可以创建不同类型的报告。根据报告类型，报告模板中提供不同的数据字段，并且将以不同的方式为报告条目分组。

可用的报告类型包括

- **单个进样**

生成的报告针对当前数据范围的每次进样单独显示模板中的报告条目。您可以按进样显示数据，但无法将一个表或矩阵中不同进样的结果进行比较。

- **单个序列总结**

生成的报告针对当前数据范围中的每个序列单独显示模板中的报告条目。您可以将一个表或矩阵中不同进样的结果进行比较，但不能比较不同序列的结果。

- **交叉序列总结**

使用此报告类型，**不会**自动对数据进行分组。因此，您必须更加关注报告条目的分组，但却会因此而能够创建报告条目来对不同序列中的数据进行比较。

模板格式

所有报告模板均基于报告定义语言 (RDL)，该语言是 Microsoft 提供的标准化 XML 格式。

RTE 提供了易于使用的界面来帮助您通过几个步骤创建报告模板。该界面支持所有类型的报告项目和大多数各自的配置选项。

数据字段

您可以访问 ChemStation 在采集期间生成的所有结果数据。对于每个值，您可以选择用于存储该值的相应数据字段。您可以根据自己的要求排列报告模板中的数据字段。可用的数据字段分为以下类别：

- 序列
- 样品
- 进样
- 信号
- 化合物
- 峰
- 校正曲线
- 仪器
- 文件
- 项目

报告项目

您可以向报告模板中添加各种报告条目，具体取决于您的要求。对于每个报告条目，您可以配置多项属性，如字体格式、背景颜色、表达式，等等。可用的报告条目包括：

- 文本字段
- 数据字段
- 表格
- 矩阵
- 合成组
- 图像
- 色谱图
- 校正曲线
- 光谱
- 图表
- 方法信息

页面摘要

报告模板编辑器提供页面摘要、多个预先配置的报告条目或报告条目组，您可以通过拖放操作将其插入到报告模板中。

这些页面摘要可以是诸如以下项；用于确保化合物结果或系统适用性的预配置表、用于单信号图或多信号图的色谱图，或者用于确保校正准确性或保留时间稳定性的控制图表。您可以使用页面摘要作为起始点并根据您的要求调整它们。

自定义计算

在报告模板编辑器中，您可以显示由 ChemStation 生成的数据字段值，也可以针对不同的用途计算新值。您可以使用现有的数据字段创建表达式，也可以使用自定义字段创建。

您可以将值存储为变量并从模板中的后续报告条目访问这些变量。

报告模板编辑器提供了表达式编辑器来帮助您创建有效的表达式。所有表达式都基于 Microsoft Visual Basic。

条件格式

您可以为字段或单元配置某些特定属性，具体取决于表达式的值。例如，如果显示化合物含量，则您可以在该含量超过某个特定值时创建红色背景条件。

演示数据

在“报告布局”视图中开发新的报告模板时，ChemStation 会提供当您编辑或预览模板时显示在报告模板编辑器中的演示数据。演示数据与当前在**数据分析**视图的导航表中选择的数据集（序列或单个运行）相对应。如果您为序列总结报告开发模板，则需要在“数据分析”视图中调用一个序列并选择一部分样品。如果您为单个进样报告开发模板，则当您在数据分析视图中仅选择一个样品时，就够该模板使用了。

报告模板的存储

ChemStation 提供了多个预定义的报告模板。这些默认模板位于公共文档文件夹下的 ChemStation\REPSTYLE 目录中。

默认情况下，REPSTYLE 目录在 C:\Users\Public\Documents\ChemStation 下。该路径是在安装期间定义的。使用 ChemStation 菜单 **文件 > 打开 Windows 资源管理器...** 来打开系统中的路径（例如 C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1）。此外，也可使用开始菜单的 **仪器数据** 快捷方式。

对于序列，用于序列总结报告和单个进样报告的报告模板在结果集中与序列方法位于同一级别上。序列的数据文件级别未存储任何报告模板。

浏览模板对话框

如果您在 **序列参数** 对话框或 **设定报告** 对话框中浏览报告模板，则可以将默认模板目录中的模板与结果集中的模板同步。

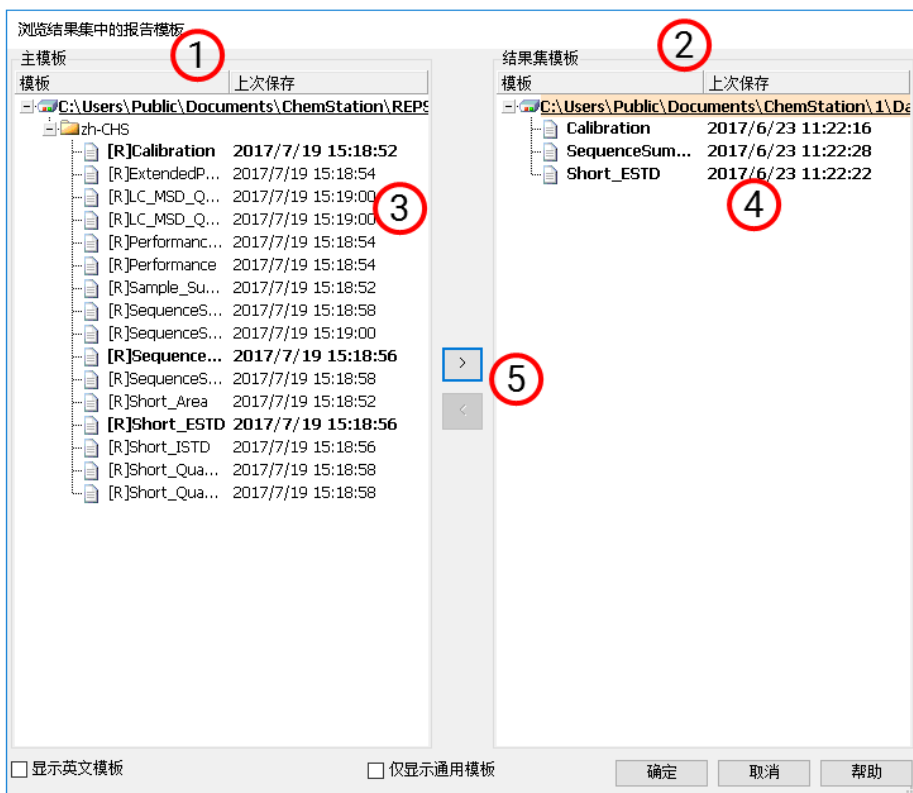


图 51 浏览结果集中的报告模板对话框

- 1 在左侧，您会看到默认模板目录（安装期间定义）中的模板。
- 2 在右侧，您会看到当前调用的结果集中的模板。
- 3 对于每个模板，您会看到上次保存该模板的日期。日期的工具提示显示模板的上一历史记录条目。
- 4 结果集和默认方法目录的共有模板以粗体显示。模板仅按名称匹配。
- 5 您可以通过使用拖放操作或通过使用 > 按钮，将模板从默认模板目录复制到结果集。

已生成报告的存储

单个进样报告的文件命名

在**设定报告**对话框中为单个进样报告提供文件名时，可以使用下列字段：

- <Date> 当前日期
- <Time> 当前时间
- <SeqName> 序列文件名（对于单个样品，将为“_”）
- <ResultSet> 结果集的名称（对于单个样品，将为“_”）
- <SampleName> 样品名称
- <LimsID> LimsID
- <InjDateTime> 进样日期和时间
- <DataFile> 数据文件名
- <SampleLoc> 样品位置

序列总结报告的文件命名

当您在**序列参数**对话框的**序列输出**选项卡中为序列总结报告提供文件名时，可以使用下列字段：

- <Date> 当前日期
- <Time> 当前时间
- <SeqName> 序列文件名
- <ResultSet> 结果集的名称
- <LimsID> LimsID

中央数据存储中的报告模板

如果您使用中央数据存储系统，则会将报告模板视为独立的文档类型。您可以将模板上传到中央数据存储、从中央数据存储下载模板，或使用中央数据存储中的最新版本更新所有本地报告模板。

经典报告

报告自定义字段值

根据可添加至报告的采集方法将自定义字段值附加至特定样品。样品自定义字段位于报告标题的结尾，其中包含样品的一般信息。化合物自定义字段位于报告结尾。

报告类型

通过选中“设定报告”对话框中适当的框，可以向任何经典报告类型添加信号。

可用的报告类型包括：

- **无** - 无文本报告。只有选择了“添加色谱图输出”选项，才会报告色谱图。
- **简短** - 包括定量文本结果。
- **详细** - 包括表头、定量结果和校正曲线。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- **表头 + 简短** - 包括文件表头及定量文本结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- **GLP + 简短** - 包括表头、样品信息、仪器条件、日志、信号及定量结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- **GLP + 详细** - 包括表头、样品信息、仪器条件、日志、信号、定量结果及校正曲线。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- **全部** - 包括表头、样品信息、仪器条件、日志、信号及定量结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。对于包含光谱的数据文件，也会报告各峰的顶点光谱。

- 性能** - 根据“系统适用性”菜单的“编辑性能限值”对话框所指定的限值生成报告。

对于未校正的方法，报告参数包括峰编号、保留/迁移时间、峰面积、峰高、信号描述、半值幅（请参见参考指南中的“实际峰宽 W_x [min]”）、对称因子、 k' 、柱效（塔板数）和分离度。

对于校正的方法，报告参数包括峰编号、保留/迁移时间、化合物名称、含量、信号描述、半值幅、对称因子、 k' 、柱效（塔板数）和分离度。

半峰高计算与积分仪使用的较复杂的峰宽公式不同。柱效和分离度值以此处计算出来的峰宽为基础。报告标题包含所有的方法相关信息，包括仪器、柱/毛细管柱、样品及采集参数。信号图也包含在内。
- 性能 + 噪音** - 将“性能”报告样式与“系统适用性”菜单中的“编辑噪音范围”对话框所定义的噪音范围的噪音计算结合起来。此外，噪声以六倍于标准偏差、峰-峰以及 ASTM 噪声等形式给出。漂移和波动同样已确定。
- 性能 + 扩展** - 生成扩展报告，包括峰性能计算的所有参数以及每个峰的各个图。图包括基线、切线和指定峰高处的峰宽。这种报告类型仅包含校正峰。

除打印“性能”报告类型的各种参数之外，为校正峰确定了更多峰性能参数：峰开始和结束时间、斜峰、剩余峰、峰宽、USP 拖尾因子、数据点间的时间间隔、数据点数、统计时刻、理论塔板数、每米塔板数、每个峰的选择性及分离度。峰宽、塔板数、每米塔板数、选择性及分离度均可通过实际半峰高、 5σ 、切线和拖尾方法来计算（有关详细信息，请参见参考指南中的“性能测试定义”）。

报告标题包含所有与方法相关信息，如仪器、柱/毛细管柱、样品、采集参数及信号图。有关峰性能参数算法的完整列表，请参见参考指南中的“性能测试定义”以获取详细信息。

了解您的光谱模块中介绍了光谱报告样式（简短 + 光谱、详细 + 光谱、性能 + 谱库检索）。

在报告格式中添加自定义的报告

您可以将在 ChemStation 的“报告版面”视图中创建的自定义报告模板添加到可用报告格式列表中。

注意

除了性能报告以外，所有报告都列出了积分器使用较复杂的公式计算出来的峰宽（有关峰宽计算的详细信息，请参见参考指南中的“峰宽”）。

其他报告样式参数

峰加和表

生成报告时，ChemStation 将使用峰加和表生成峰加和报告，此报告在标准报告计算后打印。

未校正峰的报告版面

若要更改未校正峰的报告版面，请在下面的“指定报告”对话框中选择其中一项：

- “分别”可将在一个单独的表中报告未校正峰（如果选择按保留/迁移时间排序），或者在多个单独的表中报告未校正峰（如果选择按信号排序）。
- “与校正峰一起报告”可将未校正峰与校正峰一起报告。
- “不报告”将禁止报告未校正峰。

序列总结报告

概述

ChemStation 可以打印多种标准报告，以用于各种样品分析。序列总结报告是报告的另外一种方式，可以计算并报告许多不同分析的参数。这一方法很有用，例如，可用于检测仪器的稳定性及新方法的适用性。

序列总结报告可以包括：

- 标题页；
- 仪器配置，包括仪器版本号及所用分析柱/毛细管的详细情况；
- 序列表，说明进行哪些序列自动分析；
- 工作日志，说明序列实际运行情况以及序列中发生的意外事件；
- 方法列表；
- 每个样品的独立报告；
- 基于选定标准对分析进行统计，**仅对校正化合物进行统计计算**；
- 目录表，包含指向报告详细介绍部分的页码参考。

设置序列总结报告

设置序列总结报告时，您可以选择以下九种类别的任意组合，方法是：激活相应的复选框，再从模板选项中选择报告类型（如果适用）。每个模板均指定了该特定部分在整个序列总结报告中的内容和布局。

您可以选择下列序列总结报告类型之一：

页眉

GLP 模板用大号字母打印 GLP 作为报告的标题页。它还包括日期及签名位置。

配置

如果要在报告中包括仪器配置及分析柱/毛细管说明，请选择**配置**。

序列表

如果要在报告中包括样品、样品定量参数及方法名称的列表，请选择**序列表**。该列表显示系统应该运行的内容。

工作日志

如果需要系统运行的各种分析的列表，包括仪器的运行状况及样品分析过程中发生的各种意外情况，请选择**工作日志**。

方法

如果要列出自动分析系列所使用的所有分析方法，请选择**方法**。

分析报告

若要根据为方法设置的报告格式生成各个分析报告，请选择**分析报告**。

完成每次分析后，可根据为相关方法指定的报告格式打印各个分析报告，以及在**序列总结报告**中指定的报告部分。请参见下面的“序列输出”。

校正运行和样品运行的统计

选择“统计校正运行”将为校正样品生成统计趋势分析。选择**统计**样品运行将生成样品（未知）分析的统计趋势分析。这两个选项均包含“标准统计”和“扩展统计”两种模板格式。**扩展统计**会以图表形式打印分析的统计趋势，而**标准统计**选项只打印文本。只有在**序列总结参数**对话框中选择**扩展统计**选项时，才会使用您在**扩展统计**中的**项目和限量**对话框中所选的选项。

如果在**序列总结参数**对话框中选择**标准统计**选项，则报告的统计项目包括：

- 保留/迁移时间；
- 峰面积；
- 峰高；
- 含量；
- 峰宽（取决于报告格式，请参见第 182 页的**报告类型**）
- 对称因子。

当使用多级校正方法时，统计计算不区分序列中的不同校正级别。这意味着，与浓度有关的各项，如面积、峰高、含量（请参见“扩展统计中的项目和限量”对话框）等，都发挥同样的作用，而不考虑校正级别。因此，对于序列中的多级校正方法，**校正运行统计值**是没有用的。

摘要

选择**摘要**将打印所分析样品系列及所用方法的概述。如果同时选择“摘要”选项和其他序列总结选项，则还将包括指向序列总结报告的其他部分的页码。有两种总结格式：

样品摘要以表格方式列出序列中运行的样品分析的详细内容，以及样品名称、数据文件名、方法及样品瓶号等样品信息。

化合物摘要以表格形式列出含有各校正化合物或各峰（取决于在方法中指定的报告类型）的基本定量结果的样品分析情况。

序列输出(O)

在**序列输出**对话框中，您可以定义应将序列总结报告打印至何处。

选择**输出到文件**并输入文件名可以将报告打印到指定文件。缺省设置下，数据被保存到 GLPrprt.txt 文件。在双进样的 GC 系统中，数据保存在 GLPrptF.txt 和 GLPrptB.txt 中，以分别用于前进样器和后进样器。

选择以 **PDF 格式输出**可将报告另存为 PDF 文档。报告将命名为 GLPrprt.PDF，并保存在序列文件夹中

选择以 **HTM 格式输出**将以 HTML 格式打印报告。报告将保存在数据子目录或序列容器目录中的 HTM 目录下。HTML 报告包括一个索引文件 (index.htm) 和至少两个其他文件，即内容文件 (contents.htm) 和每页报告上的 GIF（图形交换格式）文件（例如 page1.gif）。要查看 html 报告，请使用浏览器打开索引文件。

选择**输出到打印机**将在系统的打印机上打印报告。打印每次运行的各个报告时，还将激活在每次分析后打印样品报告的功能。在整个序列结束时，除了打印为序列总结报告指定的报告外，还将打印这些样品报告。您可以在**序列输出**对话框中为这些报告指定新的输出方式，也可以使用在各个方法中指定的输出方式。

报告文件格式

报告可保存为多种格式。每种格式都有特定的扩展名。可为报告选择一种或多种格式。

- .TXT** 以 UNICODE 文本文件形式打印报告文本。
- .EMF** 每个报告图形（信号或校正曲线）被保存为 Microsoft Windows 图元文件 (WMF) 格式。可为一个报告选择多个 .WMF 文件。生成文件的格式符合 Windows 软件开发文档中定义的 Microsoft 标准图元文件格式。这些文件与大量专用软件程序包使用的 Aldus 可放置图元文件 (APM) 格式兼容。
- .DIF** 表格式报告数据保存为数据交换格式 (DIF)。该格式适用于诸如 Microsoft Windows EXCEL 等电子表格程序。无论选择了何种报告格式，只有“简短”报告格式中包含的信息会被保存。

注意

不会针对性能报告生成 DIF 文件。

- .CSV** 报告为逗号分隔值 (CSV) 格式。这是一种很简单的表格式数据格式，适用于多种电子表格程序和数据库。无论选择了何种报告格式，只有“简短”报告格式中包含的信息会被保存。

一个报告可拥有多个 .DIF 和 .CSV 文件。对于每个报告组来说，第一个文件（如 REPORT00.CSV）包含的是报告表头信息。后续文件中包含的是表格式结果。

如果结果是以保留时间/迁移时间进行分类的，则整个表格只需要一个文件（如 REPORT01.CSV）。

如果结果是按信号进行分类的，则每个信号需要一个单独的表格。这种情况下，文件将被命名为 Report01.CSV 至 ReportNN.CSV，其中 NN 为信号的编号。

注意

不会针对性能报告生成 CSV 文件。

- .XLS** 报告被导出为 Microsoft Excel 电子表格 (.XLSX) 格式。数据通常需要进行其他处理。
- .PDF** 以 .pdf 文件形式打印报告。ChemStation 会话运行时，ChemStation PDF 打印机将列在**开始菜单/设备和打印机**中。使用**专有 PDF 文件名**选项可保存与报告无关的 .pdf 报告，文件名为
<sequence_container_name>_<data_file_name>.pdf

9

CE 特有的概念和功能

方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能 189

瓶表 189

方法冲突表 190

序列冲突表 190

峰顶类型 191

校正类型 192

基于迁移时间的校正 192

使用迁移率修正进行校正 193

CE-MS 194

背景扣除 194

不同 CE 模式方法子目录 195

本章只与使用 ChemStation 控制 CE 仪器有关。

方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能

瓶表

注意

瓶表功能仅在 ChemStation 联机会话中才可用。

瓶表是一个表格，它将瓶盘中的瓶与样品关联起来，更重要的是与任务专用瓶（例如缓冲瓶、冲洗瓶、试管清洁瓶和废液瓶）关联起来。**瓶表**已链接至序列表。调用序列时，序列表中的信息将被复制到瓶表中。但是，瓶表条目不会传回序列表中。在**瓶表**中选择**高级**按钮后将显示**瓶表高级设置**对话框。通过该对话框，可以启用**瓶表**和方法或序列之间的冲突警告，以及使用符号名称。您必须选择**启用瓶表检查和警告**以检查**瓶表**与方法和序列之间有无冲突。

调用方法或序列时，将会检查**瓶表**中的瓶分配与方法或序列中的瓶分配是否一致。如果存在任何瓶冲突，您可以使用**冲突表**将其轻松解决。

注意

瓶盘中的位置 49 用于针清洗瓶，位置 50 保留为空以允许返回瓶提升。这些位置在**瓶表**中不可用。

可以使用瓶表的**使用位置**列来支持使用要指定的瓶。**使用位置**字段有五个有效条目：

- | | |
|-----------|----------|
| 忽略 | 未进行一致性检查 |
| 方法 | 方法中引用该瓶 |
| 序列 | 序列表中引用该瓶 |

系统 这是属于系统配置的一个特殊瓶。名称必须是以下符号名称之一：

- @INLET 进样口瓶
- @OUTLET 出口瓶
- @FLUSH 冲洗瓶
- @WASTE 废液瓶
- @clean tubes 试管清洁瓶
- @USER X (其中 X 可以从 1 到 10) 序列占位符

使用该选项可以为方法中使用的符号名称指定各自的瓶编号。这使用户可以为序列中每一行的“进样口复位”、“出口复位”、“辅助功能”、“预处理”、“后处理”等指定不同的瓶。

未使用 在该位置没有瓶

方法冲突表

调用定义的瓶与样品瓶表中定义的瓶冲突的方法时，将显示**方法冲突表**。**方法冲突表**分为两部分；左半部分包含一幅**样品瓶表**的图像；右半部分显示的是有冲突的样品瓶。

如要解决冲突，可选择替换（单箭头），或将瓶从方法移动到**样品瓶表**的下一个可用位置（双箭头）。可针对表中的每个有冲突的样品瓶完成该操作。

使用用户定义的样品瓶（使用符号化名称 @User1、@User2 等）时，无法对这些样品瓶执行冲突测试，这是因为在没有序列信息的情况下无法确定是否有冲突。

序列冲突表

设置或调用定义的瓶与样品瓶表中定义的瓶冲突的序列时，将显示**序列冲突表**。**序列冲突表**分为两部分；左半部分包含一幅**样品瓶表**的图像；右半部分显示的是有冲突的样品瓶。

如要解决冲突，可选择用**序列表**中的信息覆盖**样品瓶表**信息；如果冲突是由系统条目引起的，则无法覆盖。您可选择关闭**序列冲突表**，这样不会解决冲突。

使用用户定义的样品瓶（在 User1、User2 等列中）时，无法对这些样品瓶执行冲突测试，这是因为在没有方法信息的情况下无法确定是否有冲突。

峰顶类型

与 LC、GC 或 MS 峰不同，CE 峰通常是不对称的。因此，具备选择积分参数的能力非常重要，这些积分参数将在定量结果中产生最高级别的准确性和重现性。

选择积分下拉菜单中的**峰顶类型**时，以下峰顶类型可用：

最高点

- 当峰为三角形时选择此项，以及
- 使用不同浓度时选择此项

线性内插

- 当峰为拖尾峰、未分离峰时使用

重心

- 为三角形的峰提供更精确的计算
- 具有相似浓度的样品

高斯拟和

- 当峰为对称峰时使用

校正类型

标准校正以峰面积或峰高为基础。选择**标准校正**时，可以选择**分别计算信号**或**使用修正面积计算**。

如果要确保在“归一化法”报告的计算中，单独报告的每个信号的含量百分比合计达 100%，请选择“分别计算信号”。取消选择**分别计算信号**时，所有信号的百分比总量为 100%。选择**分别计算信号**是在校正表中按信号排序的先决条件。

选择**使用修正面积计算**将根据迁移时间对峰面积作出校正。在此模式下，峰面积将除以迁移时间，这样就可以在迁移时间不稳定时提高定量分析中的重现性。

除了标准校正以外，还有 3 种基于迁移时间的单信号毛细管电泳特定校正。

校正表的下拉列表中包含以下校正类型：

- 标准校正
- 蛋白质分子量校正
- DNA 碱基对校正
- 毛细管等电聚焦校正

有关毛细管电泳特定校正的详细信息，请参见《OpenLab ChemStation 数据分析参考》(CDS_CS_Reference.pdf)。

基于迁移时间的校正

在序列中使用基于迁移时间的校正

可将基于迁移时间的校正和重新校正包含在一个序列中，但是仅支持简明校正和循环重新校正；不支持区间重新校正。基于迁移时间的校正没有序列总结报告。

基于迁移时间的校正的报告格式

可用于基于迁移时间的校正的报告格式仅限于**简短**（定量文本结果）和**全部**（表头、样品信息、仪器条件、工作日志、定量结果及峰纯度图）。

使用迁移率修正进行校正

缓冲液组成、运行温度或粘度以及毛细管壁吸附的轻微变化将影响电渗流 (EOF) 并使其不稳定。由此而导致的 EOF 变化可能会使迁移时间的标准偏差变得相当高。通过监测迁移率参考峰的迁移时间并依次显著增加迁移时间的重现性，迁移率校正可以显著降低因运行之间的迁移时间发生改变而产生的影响。

应按以下优先级选择迁移率参考峰：

- 选择具有最大信号的峰
- 选择最孤立的峰
- EOF 标记或内标也可以用作迁移率参考峰
- 放大检索窗口，以便随时查找迁移率参考峰
- 如果有多个峰落在检索窗口中，则自动选择具有最大信号的峰作为迁移率参考峰。

有两种迁移率修正类型：

有效迁移率修正

有效迁移率修正使用所有峰的有效迁移率，并要求电压阶升数据和电泳图谱均可使用。此外，使用有效迁移率修正还可以确定所有样品组分的实际有效迁移率。

相对迁移率修正

相对迁移率修正可以在缺少电压数据时为所有检测假定一个恒定电压。

CE-MS

背景扣除

当您选择**背景扣除** (BSB) 菜单项时，会从当前电泳图谱中的每个点扣除最近选择的质谱。生成的结果将保存至相同目录，名称也与原始数据文件相同；但文件扩展名将变为 .BSB。

新的数据文件将成为当前数据文件，还会显示扣除了背景的电泳图谱。已执行的背景扣除次数的记录将保存在数据文件表头的“运算符”项中。

如果您正在查看 BSB 数据列表，可能会发现数据显示精度所带来的差异。

注意

LC/MS 中的“帮助”文本文件仅针对 LC 参数，而非 CE。LC/MS 软件中的某些可用功能不存在于或不适用于 CE/MS 应用程序，但会在 LC 中使用。**峰匹配**功能不适用于 CE-MS，因此并未激活。在 CE-MS 中，如果分离毛细管的有效长度不同，则会进行 UV 和 MS 检测。由于不同有效长度的分离度不同，所以无法进行峰匹配。

不同 CE 模式方法子目录

CE 中的方法取决于所选 CE 模式。因此，它们也存储在“方法”子目录中的不同子目录中：

- CE** 存储 CE 模式的方法
- CEC** 存储 CEC 模式的方法
- CEp** 存储 CEp 压力模式的方法
- CEMS** 存储 CE MS 模式的方法。
- CEMSp** 存储 CE MSp 压力模式的方法

内容提要

本指南介绍 Agilent OpenLab ChemStation 的各种概念。其目标是帮助用户更好地了解 ChemStation 的工作原理。它包含关于下列主题的信息：

- 基本概念
- 数据采集
- 自动分析/序列
- 运行控制
- 数据分析和查看概念
- 校正
- 报告
- CE 特有的概念和功能

www.agilent.com

© Agilent Technologies Inc. 2010-2025

版本 : 04/2025

文档编号: D0013748zh Rev. B

