

Agilent G1701DA
GC/MSD ChemStation

Начальные сведения



Agilent Technologies

Предупреждения

© Agilent Technologies, Inc., 2006 г..

В соответствии с действующим в США и международным законодательством по охране авторских прав никакая часть этого документа не может быть воспроизведена в любой форме и любыми средствами (в том числе электрон–ными средствами накопления и обработки информации), а также переведена на другой язык без предварительного письменного разрешения Agilent Technologies, Inc.

Обозначение документа

G1701-91061

Издание

Июнь 2006 г.

Отпечатано в США.
Agilent Technologies, Inc.

5301 Stevens Creek Boulevard

Santa Clara, CA 95052

Гарантия

Информация в этом документе предоставляется на условии «как есть» и может быть изменена без уведомления в следующих изданиях. В наибольшей степени, допускаемой применимым законодательством, компания Agilent отказывается от всех гарантий, явных или подразумеваемых, относительно данного документа и приведенной в нем информации, включая, но не ограничи–ваясь, подразумеваемую гарантию высоких коммерческих качеств и пригодности конкретным целям. Agilent не несет ответственности за ошибки в этом документе, а также за случайный или преднамеренный ущерб, получен–ный в связи с предоставлением, исполнением или использованием данного документа или любых приведен–ных в нем сведений. Если между компанией Agilent и пользователем заключено отдельное письменное соглашение, содержащее условия гарантии, которые связаны с приведен–ными в этом документе условиями и противоречат им, приоритетными будут условия гарантии, приведенные в отдельном соглашении.

Предупреждения о безопасности

ВНИМАНИЕ

Знак **ВНИМАНИЕ** предупреждает об опасности. Он обращает внимание на рабочий процесс, метод или процедуру, неправильное выполнение которых или несоблюдение указанных для них требований может вызвать повреждение прибора или утерю важных данных. Не выполняйте действий, описанных после знака **ВНИМАНИЕ**, до тех пор, пока указанные условия не будут полностью осознаны и соблюдены.

ОСТОРОЖНО

Знак ОСТОРОЖНО предупреждает об опасности. Он обращает внимание на рабочий процесс, метод или процедуру, неправильное выполнение которых или несоблю–дение указанных для них требований может привести к травме или смерти. Не выполняйте действий, описанных после знака ОСТОРОЖНО, до тех пор, пока все указанные условия не будут полностью осознаны и соблюдены.

Содержание

1 Краткое справочное руководство по GC/MSD ChemStation

Содержимое данного руководства 6

Источники информации 7

Новые функции этой версии 14

Оборудование 15

Режимы просмотра в программном обеспечении ChemStation 18

Основные задачи ChemStation 27

Сообщения об ошибках и устранение неполадок 50

2 Выполнение количественного анализа

Количественный анализ 58

База данных количественного анализа 61

Учебник по использованию AutoQuant Setup 69

3 Использование программы Custom Reports

Custom Reports 84

Создание шаблона отчета 86

Настройка отчетов 90

Выбор ячеек, строк и столбцов 95

Печать отчетов 97

Создание базы данных настраиваемых отчетов 100

Выбор нескольких файлов данных 103

Просмотр и печать графиков 105

Кнопки на панели инструментов программы Custom Reports 106

1 Краткое справочное руководство по GC/MSD ChemStation

Содержимое данного руководства 6
Источники информации 7
Новые функции этой версии 14
Оборудование 15
Режимы просмотра в программном обеспечении ChemStation 18
Основные задачи ChemStation 27
Сообщения об ошибках и устранение неполадок 50

Содержимое данного руководства

Данный документ содержит обзор компонентов, прилагаемых к системе. Он поможет начать работу с системой ГХ/МСД.

Этот документ содержит следующую информацию:

- Сведения об источниках дополнительной информации.
- Фотографии оборудования и описание основных компонентов.
- Информацию обо всех панелях инструментов программного обеспечения GC/MSD ChemStation.
- Инструкции по выполнению основных действий в ПО ChemStation.
- Общее описание графика обслуживания.
- Советы по работе, сообщения об ошибках и информацию об устранении неполадок.
- Обзор выполнения количественного анализа с использованием GC/MSD ChemStation, а также инструкции по использованию функции AutoQuant, обеспечивающей экономию времени.
- Краткие инструкции по использованию программы Custom Reports.

Для получения подробных сведений см. интерактивную справочную систему, а также электронные руководства и видеоматериалы, которые содержатся на прилагаемом компакт–диске или диске DVD–ROM.

Источники информации





К системе прилагается обширный набор справочных материалов, включающий в себя печатные руководства, интерактивную справочную систему и электронные руководства на компакт–диске или диске DVD–ROM.

С каждым компонентом поставляется компакт–диск или диск DVD–ROM, который содержит сотни страниц подробных спра–вочных материалов и видеоклипы, демонстрирующие работу, обслуживание и устранение неполадок с оборудованием.

Эти справочные материалы для оборудования содержат подробную информацию по следующим темам:

- Работа с оборудованием.
- Обслуживание оборудования.
- Устранение неполадок с оборудованием.



Интерактивная справочная система содержит исчерпывающие инструкции по работе с программным обеспечением, а также учебники по использованию программного обеспечения GC/MSD ChemStation (расширенные функции, определение ароматических углеводородов в бензине, анализ лекарственных средств, анализ окружающей среды). В ней приведены инструкции по выпол–нению процедур и справочная информация по следующим темам:

Анализ данных

- Выполнение анализа данных
- Команды и функции
- Использование и написание макросов
- Глоссарий

Настройка МСД

- Настройка приборов
- Настройка платы GPIB
- Устранение неполадок с сетью
- Типичная информация PCS в файле MSDCHEM.INI

Управление прибором

- Использование функций управления прибором
- Использование методов
- Использование последовательностей
- Анализ данных
- Использование пакетного режима
- Настройка (калибровка) МСД
- Устранение неполадок с МСД
- Безопасное управление
- Диспетчер отчетов
- Команды и функции
- Использование и написание макросов
- Глоссарий



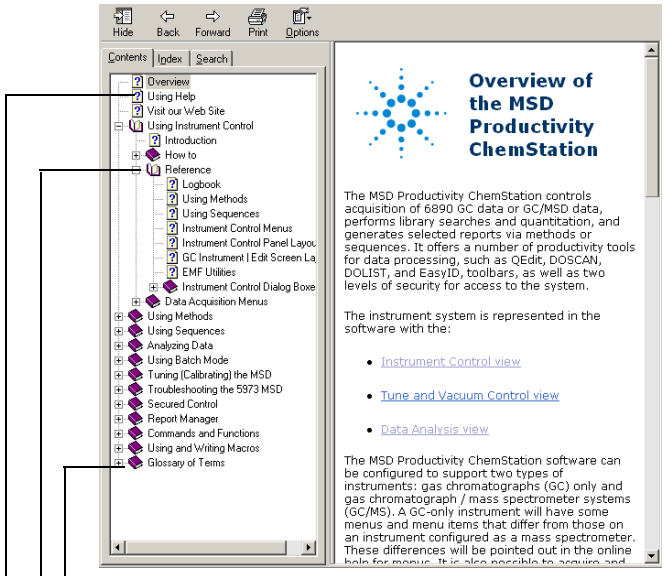
Печатные документы помогут быстро начать работу. Они включают в себя:

- Начальные сведения о программном обеспечении GC/MSD ChemStation (этот документ).
- Перечень требований к рабочему месту.
- Перечень действий при установке оборудования.
- Руководство по эксплуатации.
- Начальные сведения об анализе лекарственных средств.

Использование интерактивной справочной системы

Интерактивная справочная система содержит исчерпывающую информацию и учебники по управлению прибором, получению данных, анализу данных, методах, последовательностях, наст–ройке, устранении неполадок и использовании системных команд и переменных.

Для доступа к интерактивной справочной системе выберите **Help** (справка) в меню Help (справка) любого окна либо нажмите кнопку справки в любом диалоговом окне.



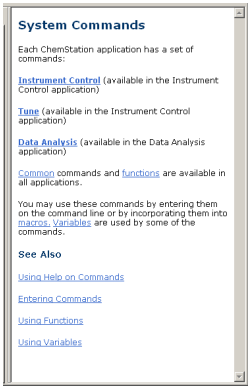
Элемент	Описание
Скрыть/показать	Включение и выключение показа списка разделов справочной системы.
Назад	Возврат к предыдущему разделу справочной системы.
Печать	Печать текущей книги или раздела справочной системы.
Содержание	Показ списка разделов справочной системы (см. выше).
Указатель	Позволяет выполнять поиск раздела справочной системы по ключевым словам в указателе.
Поиск	Позволяет ввести слово или фразу, а затем просмотреть список всех разделов справочной системы, содержащих эти слова.
Параметры	Изменение различных параметров справочной системы, например, отображения вкладок.

Значки справочной системы

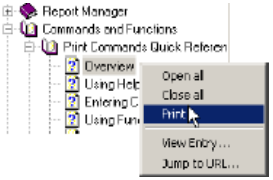
Обозначает книгу, содержащую несколько разделов. Чтобы открыть книгу, выберите ее и щелкните по ней два раза.

Обозначает открытую книгу разделов справки. Чтобы закрыть открытую книгу, выберите ее и щелкните по ней два раза.

Обозначает раздел справочной системы. Чтобы перейти к разделу справочной системы, выберите раздел и щелкните по нему два раза.



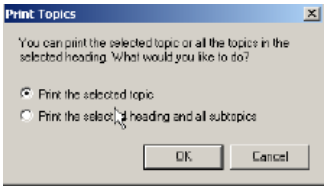
Печать одного раздела справочной системы



1 Выделите раздел, который требуется напечатать (например, **Overview**).

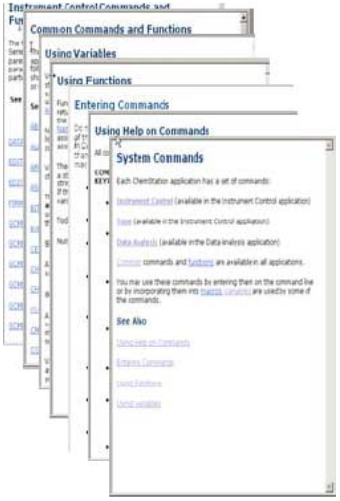
2 Нажмите правую кнопку мыши и выберите **Печать**.

3 Выберите **Напечатать текущий раздел** и нажмите **OK**.

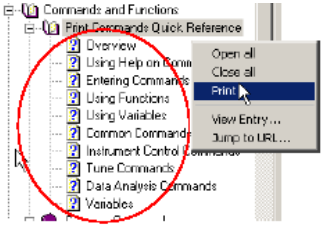


4 Проверьте выбранный принтер и нажмите **Печать**.

5 Будет напечатан один раздел. Другие разделы, связанные с этим разделом, не будут напечатаны.



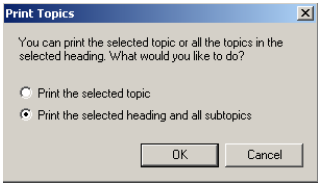
Печать всех разделов заголовка



1 Выделите раздел, который требуется напечатать (например, **Print Commands Quick Reference**).

2 Нажмите правую кнопку мыши и выберите **Печать...**

3 Выберите **Напечатать все содержимое текущего заголовка** и нажмите **OK**.



4 Проверьте выбранный принтер и нажмите **Печать**...

5 Будут напечатаны все разделы, содержащиеся в заголовке выбранного раздела. В данном примере будут напечатаны все подразделы в разделе **Print Commands Quick Reference** (приблизительно 26 страниц).

ПРИМЕЧАНИЕ Даже если выбран один из разделов в этом заголовке (например, **Tune Commands**), при выборе команды **Напечатать все содержимое текущего заголовка** будут напечатаны все разделы, содержащиеся в заголовке, а не только разделы, содержащиеся ниже выбранного.

Руководства для оборудования на компакт–диске или диске DVD–ROM

С каждым компонентом поставляется компакт–диск или диск DVD–ROM, который содержит сотни страниц справочных материалов и видеоклипы, демонстрирующие работу, обслуживание и устранение неполадок с оборудованием.

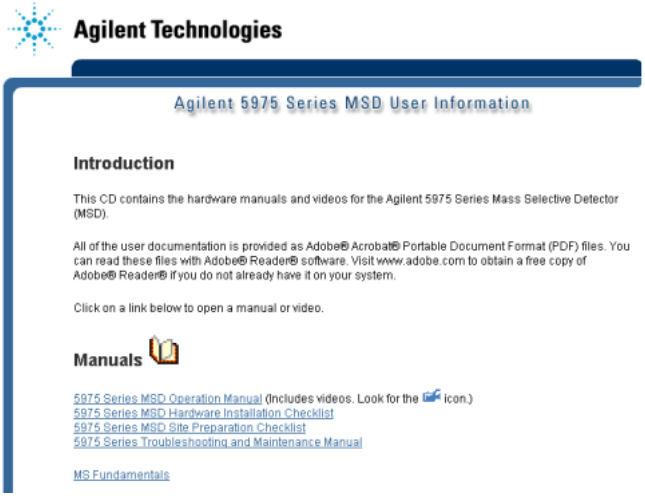
Использование руководств на компакт–диске или диске DVD–ROM

1 Руководства на компакт–диске или диске DVD–ROM имеют формат Adobe Acrobat PDF. Видеоклипы встроены в руководства (для их воспроизведения может потребоваться программа QuickTime), а также доступны для просмотра с компакт–диска или диска DVD с помощью программы Microsoft Media Player.

   – При необходимости посетите веб–сайт Adobe.com и загрузите бесплатную версию программы Adobe Acrobat Reader.

   – Посетите веб–сайт Apple.com/quicktime, чтобы загрузить бесплатную версию программы QuickTime.

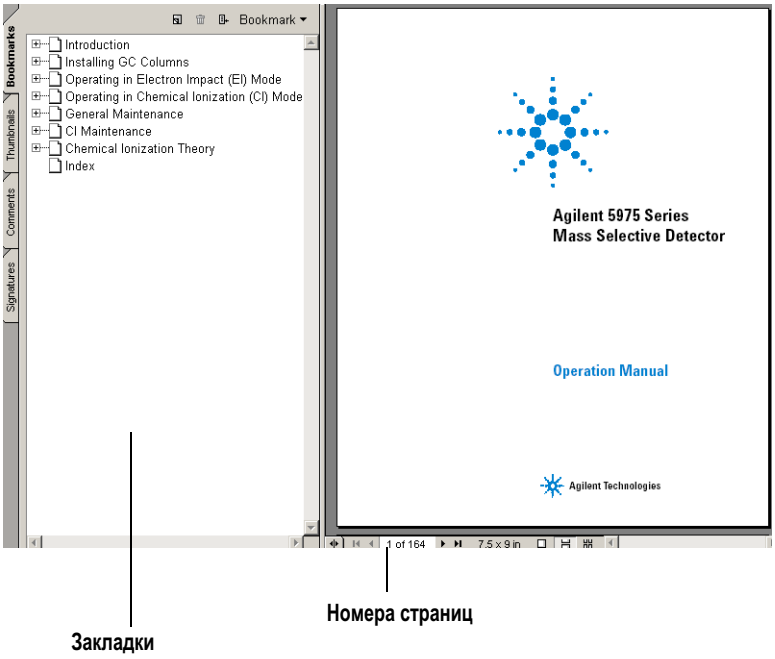
2 Вставьте компакт–диск или диск DVD–ROM в привод компакт–дисков. После этого на экране автоматически откроется главное меню, содержащее ссылки на все руководства, доступные на компакт–диске или диске DVD–ROM, которое выглядит аналогично изображенному ниже.



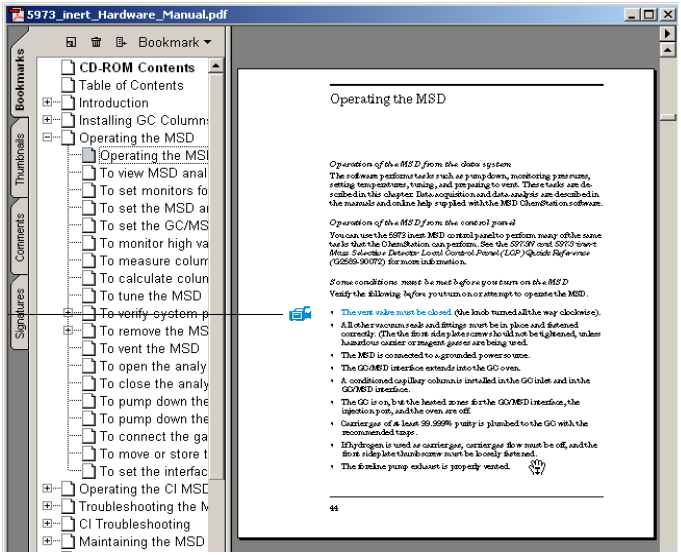
Пример главного меню компакт–диска или диска DVD–ROM с информацией для пользователя



3 Наведите указатель мыши на какое–либо из руководств. Когда указатель примет вид **руки**, нажмите левую кнопку мыши, чтобы выбрать руководство. Будет показана первая страница руководства и закладки.



4 Нажмите любую **закладку** в левом столбце (например, **Operating the MSD**), будет показана соответствующая страница.



Значок видео



5 Значок **видео** обозначает разделы, содержащие видеоклипы. Щелкните по этому значку, чтобы просмотреть, как выполнять процедуру обслуживания. Нажмите левую кнопку мыши, чтобы начать воспроизведение видеоклипа. Воспроизведение остановится после того, как видеоклип будет показан полностью. Кроме того, воспроизведение можно остановить в любой момент с помощью клавиши [Escape].

1 **Vent the MSD. See page 64.**

6 При наведении указателя мыши на перекрестную ссылку он будет иметь вид руки. Это означает, что текст связан с указанной страницей. Щелкните по ссылке, чтобы перейти на указанную страницу. Нажмите правую кнопку мыши, чтобы *вернуться* на предыдущую страницу.



7 Можно напечатать одну или несколько страниц. Выберите **Print** (печать), введите номера страниц, которые требуется напечатать, указанные в нижней части экрана.

Новые функции этой версии

Существует два способа просмотреть описание всех изменений в данной версии программного обеспечения:

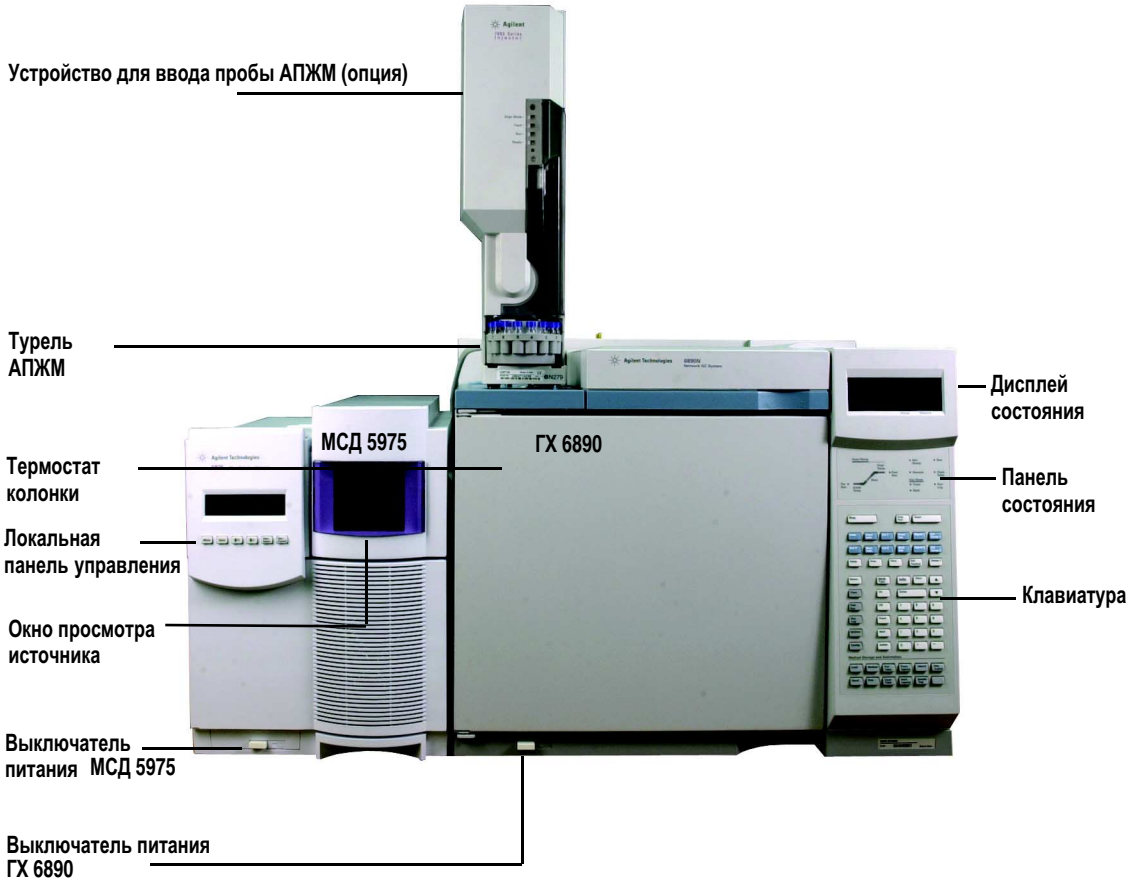
- После первоначальной установки программного обеспечения выберите «Yes» (да) при появлении запроса «Do you want to view the Readme file now» (хотите просмотреть файл Readme?).
- В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) или Instrument Control (управление прибором) выберите **Help/View Revisions Readme File** (справка/просмотр файла Readme с информацией об изменениях).

Появится всплывающее окно, содержащее текстовый файл. Текст можно прокрутить и прочитать на экране либо скопировать в другой документ.

Выберите **File/Exit** (файл/выход) для возврата в окно приложения.

Оборудование

МСД серии 5975 с ГХ 6890

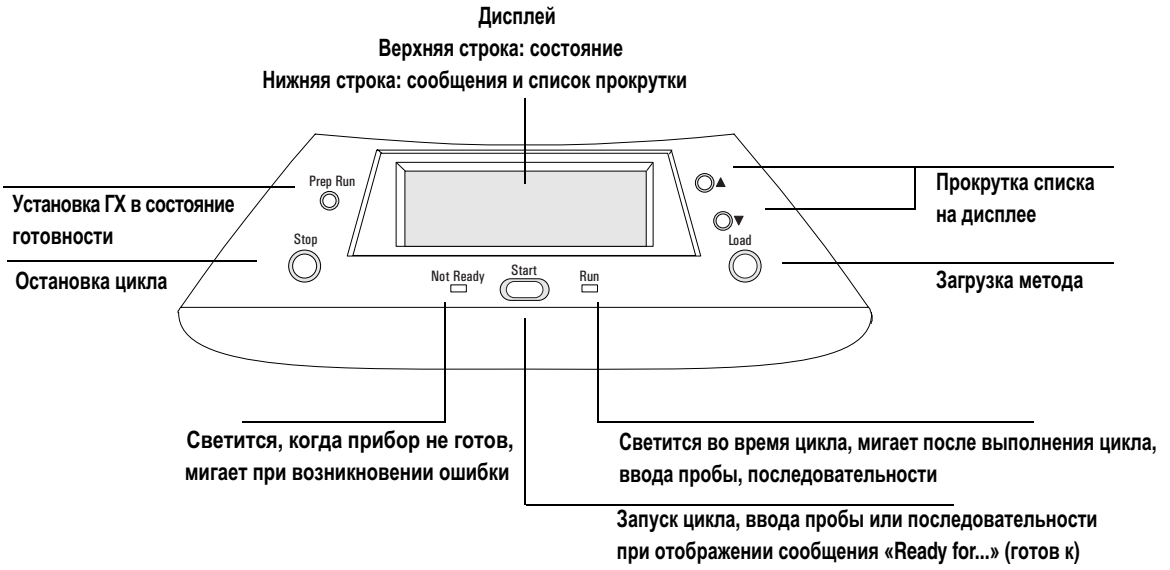


Клавиатура и дисплей ГХ 6850

С помощью программного обеспечения GC/MSD ChemStation можно управлять ГХ 6850. Это позволяет программировать прибор с помощью программного обеспечения, а не клавиатуры ГХ. Однако иногда может потребоваться использовать клавиатуру для быстрого выполнения одной из следующих задач.

В зависимости от конфигурации, настроенной модулем управления или ПО GC/MSD ChemStation, при работе прибора на дисплее может отображаться следующая информация:

- Температура термостата
- Давление во впускном канале
- Скорость потока в колонке
- Исходный сигнал детектора
- Сообщения
- Информация о последовательности
- Время цикла



Клавиатура ГХ 6890

С помощью программного обеспечения GC/MSD ChemStation можно управлять ГХ 6890. Это позволяет программировать прибор с помощью программного обеспечения, а не клавиатуры ГХ. Однако иногда может потребоваться использовать клавиатуру для быстрого выполнения одной из следующих задач.

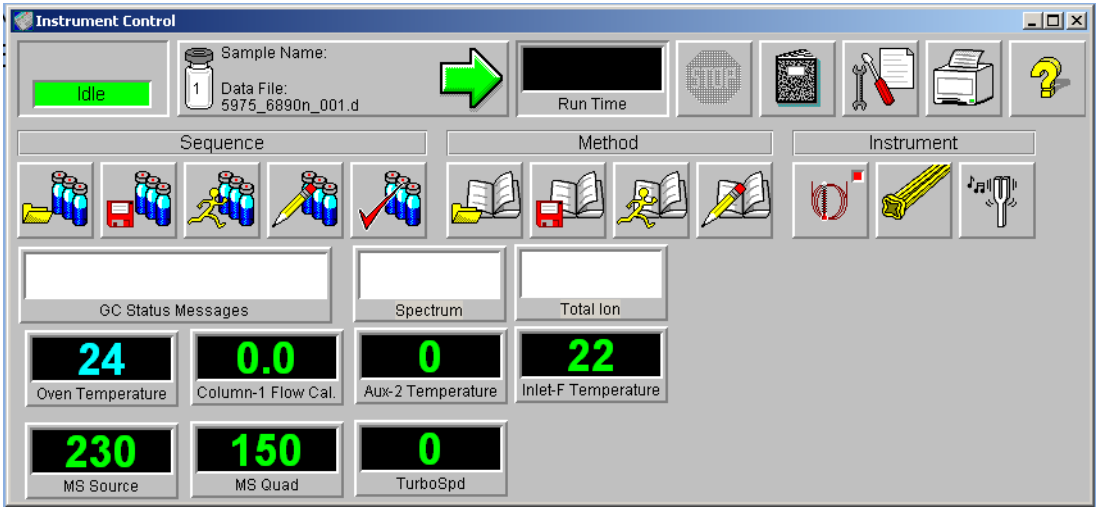


Режимы просмотра в программном обеспечении ChemStation

Режим просмотра Instrument Control

Режим просмотра Instrument Control (управление прибором) включен при запуске программного обеспечения GC/MSD ChemStation. Этот режим позволяет просматривать и настраивать параметры прибора. Если включен другой режим, выберите **View/Instrument Control** (вид/управление прибором), чтобы настроить систему для получения данных.

ПРИМЕЧАНИЕ Дополнительную информацию о меню, кнопках и окнах программного обеспечения см. в справочной системе.

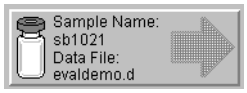




Индикатор состояния получения
Показывает состояние текущего цикла.



Время цикла
Показывает оставшееся время цикла.



Начать цикл
Показывает название пробы и файла данных, для которых прибор готов выполнить цикл.



Стоп
Значок остановки имеет красный цвет при выполнении цикла и серый цвет, когда цикл не выполняется. Используйте эту кнопку для остановки системы перед, во время или после выполнения цикла. При остановке системы во время выполнения цикла она перейдет в состояние, соответствующее завершению выполнения цикла. Если система завершила цикл, она перейдет в состояние бездействия.



Журнал
Отображает раскрывающееся меню журнала.



Выполненное обслуживание
Открывает диалоговое окно с информацией об обслуживании.



Печать
Открывает диалоговое окно, позволяющее напечатать журнал последовательности, текущую последовательность, параметры прибора, параметры анализа данных и подробные сведения о параметрах анализа данных.



Справка
Отображает справку для режима просмотра Instrument Control и обеспечивает доступ ко всей справочной системе программного обеспечения.



Загрузить последовательность
Открывает диалоговое окно Load Sequence (загрузка последовательности).



Сохранить последовательность
Открывает диалоговое окно Save Sequence (сохранение последовательности).



Запустить последовательность
Открывает диалоговое окно Start Sequence (запуск последовательности).



Изменить последовательность
Открывает диалоговое окно Sample Log Table (таблица журнала проб).



Имитировать последовательность
Тестирование последовательности.



Загрузить метод
Открывает диалоговое окно Load Method (загрузка метода).



Сохранить метод
Сохраняет текущий метод.



Запустить метод
Открывает диалоговое окно Start Run (запуск цикла).



Изменить метод
Позволяет изменить текущий метод.



Параметры ГХ
Позволяет изменить параметры ГХ и мониторы ГХ.



Параметры МС
Позволяет изменить параметры МС и мониторы МС.



Настроить параметры
Позволяет настроить МСД.

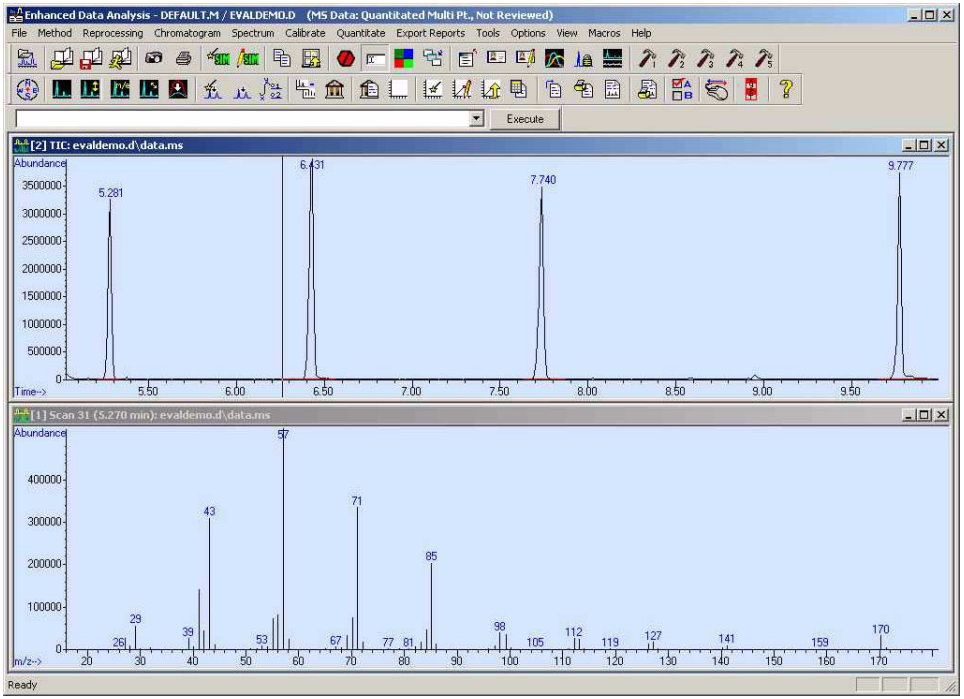
Режим просмотра Data Analysis

Режим просмотра Data Analysis (анализ данных) включается при запуске сеанса анализа данных на приборе и при выборе **View/Data Analysis (offline)** (вид/анализ данных (автономный)) в режиме просмотра Instrument Control (управление прибором). Используйте режим просмотра Data Analysis для выполнения таких задач, как:

- Настройка параметров интеграции
- Калибровка метода
- Количественный анализ данных
- Настройка и печать отчетов

В режиме Data Analysis (анализ данных) также доступны различные инструменты, такие как QEdit, DOSCAN, DOLIST, EasyID и панели инструментов. Кроме того, программное обеспечение содержит учебник по выполнению количественного анализа.

ПРИМЕЧАНИЕ Дополнительную информацию о меню, кнопках и окнах программного обеспечения см. в справочной системе.



Кнопки панели инструментов в режиме просмотра Data Analysis



Загрузить файл данных
Загружает выбранный файл данных (.D) и показывает общую ионную хроматограмму для этого файла.



Загрузить метод
Позволяет выбрать файл метода (*.M) для загрузки в дереве каталогов.



Сохранить метод
Сохраняет изменения, внесенные в текущий метод.



Запустить метод
Выполняет только анализ данных текущего метода. Необходимо выбрать имя файла с выходными данными для печати. Этот файл определит имя файла, в котором будет храниться документ. Документ хранится в таком формате, который может прочитать принтер, но не программа, используемая для печати.



Снимок
Показывает данные, полученные до того момента, когда был активирован снимок. Эта функция недоступна для данных, относящихся только к ГХ.



Печать
Позволяет напечатать выбранное окно, общую ионную хроматограмму и спектр или текущий метод.



Сгенерировать метод AutoSIM
Открывает диалоговое окно AutoSIM Setup (настройка AutoSIM).



Изменить параметры SIM
Позволяет изменить параметры SIM в таблице группы SIM.



Копировать
Позволяет скопировать выбранное окно в буфер обмена.



Сбросить окно
Восстанавливает выбранное по умолчанию положение графических окон.



Прервать
Останавливает выполнение команды или макроса.



Командная строка
Включает и выключает показа командной строки.



Изменить цвета
Позволяет настроить цвета различных элементов в режиме Data Analysis.



Свернуть/развернуть графику
Позволяет сворачивать и разворачивать отображаемые графические окна.



Закрыть экранные отчеты
Закрывает открытые экранные отчеты.



EasyID
Позволяет обновлять ожидаемые времена удерживания и соотношения ионов для данных MC в существующей базе данных количественного анализа на основе вещества.



QEdit
Позволяет просматривать и изменять результаты количественного анализа после анализа файла данных.



Чистота пика
Помогает обнаруживать перекрывающиеся (многокомпонентные) пики в хроматограмме (только ГХ/МС).



Фиксация времени удерживания
Обеспечивает доступ к режиму просмотра RTLock Setup (настройка RTLock), используемому для выполнения задач по фиксации времени удерживания.



Отношение сигнал/шум
Позволяет выполнять проверку отношения сигнал/шум, а затем просматривать или печатать отчет.



НАСТРАИВАЕМЫЙ ИНСТРУМЕНТ 1
Позволяет выполнить созданный пользователем макрос. Сначала макрос необходимо создать и присвоить ему имя CUSTOMTOOL1. См. разделы интерактивной справочной системы, посвященные использованию и созданию макросов, а также командам анализа данных.



НАСТРАИВАЕМЫЙ ИНСТРУМЕНТ 2
Позволяет выполнить созданный пользователем макрос. Сначала макрос необходимо создать и присвоить ему имя CUSTOMTOOL2. См. разделы интерактивной справочной системы, посвященные использованию и созданию макросов, а также командам анализа данных.



НАСТРАИВАЕМЫЙ ИНСТРУМЕНТ 3
Позволяет выполнить созданный пользователем макрос. Сначала макрос необходимо создать и присвоить ему имя CUSTOMTOOL3. См. разделы интерактивной справочной системы, посвященные использованию и созданию макросов, а также командам анализа данных.



НАСТРАИВАЕМЫЙ ИНСТРУМЕНТ 4
Позволяет выполнить созданный пользователем макрос. Сначала макрос необходимо создать и присвоить ему имя CUSTOMTOOL4. См. разделы интерактивной справочной системы, посвященные использованию и созданию макросов, а также командам анализа данных.



НАСТРАИВАЕМЫЙ ИНСТРУМЕНТ 5
Позволяет выполнить созданный пользователем макрос. Сначала макрос необходимо создать и присвоить ему имя CUSTOMTOOL5. См. разделы интерактивной справочной системы, посвященные использованию и созданию макросов, а также командам анализа данных.



Показать/скрыть навигацию
Позволяет включать и отключать отображение панели Проводника.



Построить хроматограмму
Выполняет повторное построение исходной хроматограммы текущего файла данных без ярлыков и значков интеграции.



Масштабировать хроматограмму
Масштабирует выбранную хроматограмму в соответствии с указанным коэффициентом.



Ионные хроматограммы
Извлекает и отображает извлеченные ионные хроматограммы из общей ионной хроматограммы текущего файла данных (только ГХ/МС).



Объединенный формат
Отображает извлеченные ионные хроматограммы, наложенные друг на друга (только ГХ/МС).



Наложить хроматограммы
Позволяет выбрать несколько хроматограмм и наложить их друг на друга.



Автоматически интегрировать
Пытается определить наилучшие параметры интеграции для текущей хроматограммы, а затем интегрирует хроматограмму. Это действие не разрешено, если в методе установлен интегратор RTE.



Интегрировать
Интегрирует текущую хроматограмму с использованием параметров, настроенных для текущего интегратора.



Параметры интеграции
Открывает диалоговое окно для редактирования параметров или событий текущего интегратора.



Вычесть
Вычитает один спектр из другого и показывает различие.



Выбрать библиотеку
Открывает диалоговое окно Library Search Parameters (параметры поиска библиотеки), в котором можно выбрать библиотеки, используемые для поисков PBM выбранного спектра.



Отчет поиска в библиотеке
Интегрирует текущую общую ионную хроматограмму, выполняет поиск соответствий для каждого пика в текущей библиотеке и генерирует отчет.



Настройка количественного анализа
Позволяет настроить базу данных количественного анализа путем ввода глобальных параметров и веществ в базу данных.



AutoQuant
Обеспечивает полуавтоматическое создание базы данных количественного анализа.



Изменить вещества
Позволяет просматривать и изменять информацию в базе данных количественного анализа на основе вещества.



Обновить калибровку
Позволяет добавить, удалить или обновить уровень калибровки в текущей базе данных количественного анализа.



Рассчитать отчет о количественном анализе
Выполняет количественный анализ текущего файла и создает отчет о количественном анализе.



Сгенерировать количественный отчет
Генерирует отчет о количественном анализе для файла, который уже использовался для выполнения количественного анализа.



Напечатать отчет о количественном анализе
Печатает отчет о количественном анализе.



Custom Reports
Запускает программу Custom Reports. Если для метода отсутствует база данных количественного анализа или не загружен файл данных, можно использовать значения, установленные по умолчанию.



Напечатать настраиваемый отчет
Печатает шаблон настраиваемого отчета, указанного методом, с использованием текущего файла данных.



Параметры анализа данных
Открывает диалоговое окно Select DA Options (выбора параметров анализа данных).



Переключает функции мыши в режиме анализа данных
Переключает команды, доступные при нажатии правой кнопкой мыши, с традиционных на новые.



Показать/скрыть набор (просмотр переменных)
Позволяет включить или выключить отображение окна набора (просмотр переменных).



Интерактивная справка
Отображает интерактивную справочную систему GC/MSD ChemStation.

Основные задачи ChemStation

Откачка (запуск) МСД

1 Перед выполнением откачки убедитесь, что система соответствует всем следующим требованиям:

- ❒ Вентиляционный клапан закрыт (ручка повернута до упора по часовой стрелке).
- ❒ Все другие вакуумные уплотнители и фитинги правильно установлены и закреплены. (Передний винт боковой панели *не должен быть затянут*).
- ❒ МСД подключен к заземленному источнику питания.
- ❒ Устройство сопряжения ГХ/МСД входит в термостат газового хроматографа.
- ❒ Капиллярная колонка вставлена во впускной канал ГХ и устройство сопряжения ГХ/МСД.
- ❒ ГХ включен, но нагреваемые зоны устройства сопряжения ГХ/МСД, порта ввода и термостата выключены.
- ❒ Газ–носитель чистотой не менее 99,999 % подается в ГХ через рекомендуемые ловушки.
- ❒ Если в качестве газа–носителя используется водород, поток газа–носителя должен быть перекрыт и передний винт боковой пластины должен быть слегка затянут.
- ❒ Вытяжка форвакуумного насоса хорошо вентилируется.

ОСТОРОЖНО **Убедитесь, что МСД соответствует ВСЕМ указанным выше условиям. В противном случае существует риск получения травмы.**

2 Выберите **View/Tune and Vacuum Control** (вид/управление настройкой и вакуумом).

3 Выберите **Vacuum/Pump Down** (вакуум/откачка).

4 Включите питание МСД при появлении соответствующего приглашения.

5 Подсоедините боковую пластину к коллектору рукой.

6 Включите режим Instrument Control (управление прибором).

7 Слегка нажмите на боковую панель, чтобы обеспечить герметизацию.

Форвакуумный насос начнет издавать булькающий звук. Этот звук должен прекратиться через минуту. Если звук не прекращается, значит, в системе имеется *большая* протечка воздуха, возможно, через уплотнитель боковой панели, гайки колонки устройства сопряжения или клапан вентиляции.

8 Когда будет установлена связь с ПК, нажмите **OK**. В пределах между 10 и 15 минутами диффузионный насос должен быть горячим или обороты турбонасоса должны составить порядка 80 %. Скорость насоса должна достигнуть 95 %.

ВНИМАНИЕ Если эти условия не выполнены, форвакуумный насос выключится. В этом случае необходимо выключить и снова включить МСД. Если откачка МСД выполняется неправильно, см. справочную систему и руководство пользователя для получения информации об устранении протечек воздуха и других неполадок вакуумной системы.

9 При появлении соответствующего приглашения включите нагреватель устройства сопряжения ГХ/МСД и термостат ГХ Затем щелкните **OK**. ПО включит нагреватели источника ионов и фильтра масс. Установки температур хранятся в текущем файле автонастроек (*.u).

ВНИМАНИЕ Не включайте нагреваемые зоны ГХ, пока не будет открыт поток газа–носителя. Нагревание колонки без газа–носителя приведет к повреждению колонки.

10 После появления сообщения **Ok to run** (запуск возможен), подождите 2 часа, пока МСД придет в состояние теплового равновесия.

ВНИМАНИЕ Данные, полученные до приведения МСД в тепловое равновесие, могут оказаться невоспроизводимыми.

ВНИМАНИЕ При использовании токсичного газа, например, аммиака, закрутите винты боковой пластины МСД. Если закрутить эти винты до того, как будет создан вакуум, уплотнитель может быть поврежден, что вызовет протечку.

Вентилирование (отключение) МСД

1. Если МСД серии 5975 имеет вакуумметр–контроллер, в режиме просмотра Tune and Vacuum Control (управление настройкой и вакуумом) выберите **Vacuum/Turn Vacuum Gauge on/off** (вакуум/включение и выключение вакуумметра). При использовании МСД серии 5973 убедитесь, что внешний вакуумметр–контроллер выключен.
2. Выключите вакуумметр.
3. Перед вентилированием МСД ХИ серии 5973 нажмите [Gas Off] (выкл. газ). При этом отключится подача газа–реагента и закроется стопорный клапан.

ОСТОРОЖНО **На МСД ХИ 5973 при вентиляции МСД должен светиться индикатор Gas Off (газ выкл.).**

4. В режиме просмотра Tune and Vacuum Control (управление настройкой и вакуумом) выберите **Vacuum Menu/Vent** (меню вакуум/вентиляция). Следуйте инструкциям на экране.

ОСТОРОЖНО **При использовании водорода в качестве газа–носителя поток газа–носителя должен быть полностью перекрыт перед отключением питания МСД. Если форвакуумный насос выключен, может произойти накопление водорода в МСД и возникнуть угроза взрыва. Перед работой с МСД с использованием водорода в качестве газа–носителя прочтите руководство Меры предосторожности при обращении с водородом (G3170–90010).**

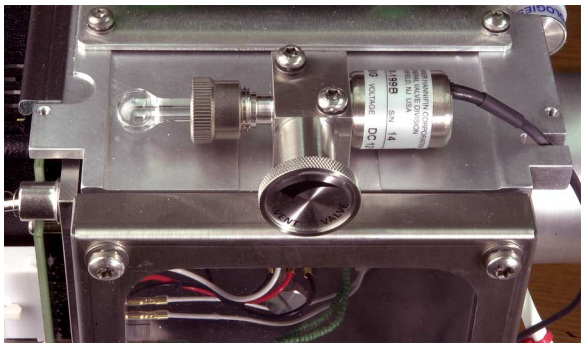
ВНИМАНИЕ Прежде чем перекрыть поток газа–носителя, убедитесь, что термостат ГХ и устройство сопряжения ГХ/МСД холодные.

5 Выключите питание МСД, когда появится соответствующее приглашение системы.

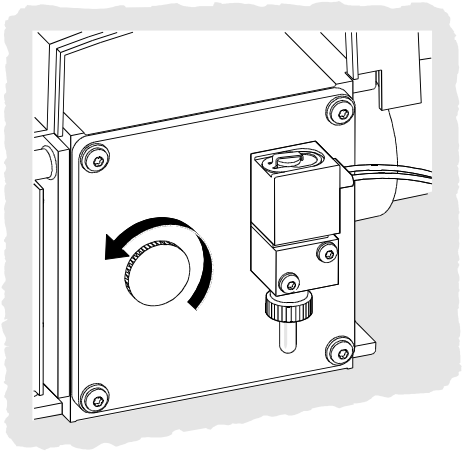
6 Отсоедините кабель питания МСД.

7 Снимите крышку анализатора (серия 5973) или крышку окна просмотра источника (серия 5975).

8 Поверните ручку клапана вентиляции против часовой стрелки только на 3/4 оборота или пока не услышите шипящий звук воздуха, поступающего в камеру анализатора.



Клапан вентиляции 5975



Клапан вентиляции 5973

ВНИМАНИЕ Не поворачивайте ручку слишком сильно, это может привести к выпадению кольцевого уплотнителя. Перед откачкой убедитесь, что ручка затянута.

ОСТОРОЖНО **Подождите, пока анализатор остынет примерно до комнатной температуры, прежде чем прикасаться к нему.**

ВНИМАНИЕ Работая с любыми частями, которые будут находиться внутри камеры анализатора, пользуйтесь чистыми перчатками.

Настройка МСД

Для обеспечения оптимальной производительности МСД его необходимо периодически настраивать. При настройке параметры МСД настраиваются определенным образом, чтобы прибор соответствовал определенным критериям. Частота настройки зависит от количества и типов проб, а также от общего состояния системы.

ПРИМЕЧАНИЕ При настройке МСД всегда устанавливайте такую температуру термостата ГХ, скорость потока в колонке и температуру анализатора, которые будут использоваться для получения данных.

Записывайте информацию отчетов настройки в блокнот, чтобы успешные отчеты можно было легко сравнивать.

Настройка МСД

В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором):

1 Выберите значок **Tune Parameters** (параметры настройки) (будут показаны только два первых меню, указанные в п. 2) или **View/Tune and Vacuum Control** (вид/управление настройкой и вакуумом).



2 В меню Tune (настройка) выберите один из следующих параметров в зависимости от необходимых характеристик работы прибора.

- **Tune MSD**
  Обеспечивает максимальную чувствительность во всем диапазоне сканирования.

- **QuickTune**
  Настраивает ширину пика, назначение массы и насыщение без изменения соотношения ионов.
- **Autotune (Atune.U)**
  Выполняет настройку для обеспечения максимальной реакции во всем диапазоне сканирования.
- **Low Mass Autotune (Lomass.U)**
  Выполняет настройку для диапазона малой массы.
- **Standard Spectra Tune (Stune.U)**
  Обеспечивает стандартную реакцию во всем диапазоне сканирования. При выборе этого варианта может снизиться чувствительность.
- **DFTPP Tune (DFTPP.U)**
  Выполняет настройку специально для метода EPA 625.
- **BFB Tune (BFB.U)**
  Выполняет настройку специально для метода EPA 624.
- **Tune Wizard. . .**
  Отображает несколько диалоговых окон, позволяющих установить норму содержания и параметры настройки. Этот вариант используется для целевой настройки.
- **Air and Water Check**
  Выполняет стандартизованное измерение и генерирует отчет об уровнях содержащегося в системе воздуха (азот *m/z* 28) и воды (*m/z* 18) в отношении массы ПФТБА 69. Используйте этот вариант для проверки отсутствия утечек. Содержание в *m/z* 28 должно быть менее, чем в *m/z* 18, и каждое из этих значений должно быть меньше 5 % от *m/z* 69.
- **Tune Evaluation**
  Оценивает текущий файл настройки.

3 Просмотрите отчет о настройке.

4 Чтобы просмотреть предыдущие результаты настройки, выберите **File/View Tunes** (файл/просмотреть настройки).

Использование функции настройки вручную

Функция настройки вручную позволяет устанавливать для параметров МСД, таких как напряжения линзы и массы настройки, значения, которые требуются для анализа. При настройке вручную можно добиться лучшей чувствительности, чем при автоматической настройке.

Настройка вручную позволяет настраивать перепады определенных параметров и указывать диапазон и размер шага перепада. Результаты перепада будут показаны — оптимальное значение параметра будет обозначено на графике.

При ручной настройке можно получать данные двух типов: изображения профиля (графики содержания и форма пика масс настройки) и изображения спектра (график реакции во всем диапазоне массы).

Дополнительную информацию о ручной настройке см. в интерактивной справочной системе.

Получение данных

Настройка ГХ для использования с МСД

В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором):

1. В меню Instrument (прибор) выберите **Inlet/Injection Types** (впускной канал/типы ввода). Выберите необходимый источник пробы и пометьте опцию **Use MS** (использовать МС). Щелкните **OK**.
2. В меню Instrument (прибор) выберите **Edit GC Parameters** (изменить параметры ГХ).
3. Щелкните **Aux** (дополнительно). Убедитесь, что используется дополнительный канал 2, нагреватель включен и на нем установлена необходимая температура, а также, что в качестве типа выбрано *MSD* (МСД).
4. Щелкните **Columns** (колонки). Убедитесь, что в качестве детектора выбрано *MSD* и для параметра Outlet psi (выходное давление) установлено значение *Vacuum* (вакуум). Щелкните **OK**.

Ввод пробы с помощью автоматического пробоотборника

В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором):

1 Поместите пробирку автоматического пробоотборника, содержащую пробу, в лоток пробоотборника.

2 Щелкните по значку **Run Method** (запустить метод) или выберите **Method/Run Method** (метод/запустить метод).

3 При появлении окна Start Run (запуск цикла) укажите информацию о пробе:

- ❒ Введите уникальный путь к данным для пробы.
- ❒ Введите уникальное имя файла данных для пробы.
- ❒ Введите номер позиции пробирки с пробой в поле **Vial** (пробирка).
- ❒ (Дополнительно) Введите информацию в полях **Operator Name** (имя оператора), **Sample Name** (название пробы) и **Misc Info** (дополнительная информация), чтобы зарегистрировать ввод пробы.
- ❒ Убедитесь, что выбрана опция *Data Acquisition* (получение данных). Пометьте опцию **Data Analysis** (анализ данных), если требуется сгенерировать какие–либо отчеты, указанные в методе.

4 Щелкните **Run Method** (запустить метод) для запуска.

ВНИМАНИЕ

Не нажимайте кнопку **Start** (запуск) на ГХ для запуска цикла при использовании автоматического пробоотборника.

Ввод пробы вручную

В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором):

1 В меню Instrument (прибор) выберите **Inlet/Injector Types** (впускной канал/типы устройств ввода).

2 В диалоговом окне Inlet and Injection Parameters (параметры впуска и ввода) выберите значение **Manual** (вручную) для источника ввода пробы.

3 На клавиатуре ГХ нажмите [Prep Run] (подготовка цикла). При этом будет отключен минимальный поток газа, скорость потока во впускном канале достигнет установленного значения и закроется клапан промывки (только для ввода без разделения).

4 Выберите **Method/Run Method** (метод/запустить метод).

5 При появлении окна Start Run (запуск цикла) укажите информацию о пробе, как описано ниже.

- ❒ Введите уникальный путь к данным для пробы.
- ❒ Введите уникальное имя файла данных для пробы.
- ❒ (Дополнительно) Введите информацию в полях **Operator Name** (имя оператора), **Sample Name** (название пробы) и **Misc Info** (дополнительная информация), чтобы зарегистрировать ввод пробы.
- ❒ Убедитесь, что выбрана опция *Data Acquisition* (получение данных).
- ❒ (Дополнительно) Пометьте опцию **Data Analysis** (анализ данных), если требуется сгенерировать какие–либо отчеты анализа данных, указанные в методе.

6 Щелкните **Run Method** (запустить метод) для запуска. Если температуры стабильны, появится окно Prepare To Inject (подготовка к вводу). В противном случае будет показано сообщение **Waiting for GC ready** (ожидание готовности ГХ).

7 Когда температуры ГХ стабилизируются (ГХ 6890 — будет светиться индикатор Pre Run на ГХ, ГХ 6850 — не будет светиться индикатор Not Ready), введите пробу и нажмите клавишу [Start] (запуск) на ГХ.

ВНИМАНИЕ Не вводите пробу до того, как ГХ будет готов. Это приведет к тому, что результаты будут сильно отличаться.

Изменение метода

В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором) выберите **Method/Edit Entire Method** (метод/изменить метод). Диалоговое окно Edit Method (изменение метода) позволяет выбрать компоненты метода, которые требуется изменить:

- Method Information (информация о методе).
- Instrument/Acquisition (прибор/получение) — будут доступны все диалоговые окна ГХ и МС для ввода информации.
- Data Analysis (анализ данных).

При нажатии **OK** будут последовательно открываться диалоговые окна выбранных компонентов, и в них можно будет вводить данные.

При появлении приглашения на сохранение метода можно ввести новое имя для метода. Если в качестве отчета указан настраиваемый отчет, потребуется указать, следует ли сохранять копию сгенерированного отчета с файлом данных.

Настройка последовательности

Таблица журнала проб используется для настройки последова–тельности. Каждая строка таблицы журнала проб содержит информацию для анализа одной пробы (одной пробирки при использовании АПЖМ).

1. Если таблица журнала проб не открыта, выберите **Sequence/Edit Sequence** (последовательность/изменить последовательность) или нажмите кнопку **Edit Sequence** (изменить последовательность) в режиме просмотра Instrument Control (управление прибором).
2. Щелкните по пустой строке в таблице. Затем нажмите стрелку в поле **Type** (тип) и выберите тип пробы, который планируется использовать.
3. С помощью клавиши Tab или мыши перейдите к полю **Vial** (пробирка) и введите номер пробирки.
4. Перейдите в поле **Method** (метод) и введите имя метода, который будет использоваться для текущей пробы. (Для просмотра списка методов нажмите кнопку **?** в этом поле).

5 Укажите имя файла данных в поле **Data File** (файл данных), имя пробы в поле **Sample** (проба), введите комментарий в поле **Comment** (комментарий) и укажите ожидаемый линейчатый код в поле **Expected Barcode** (ожидаемый линейчатый код).

6 Введите данные в других полях, относящихся к пробе.

ПРИМЕЧАНИЕ Отображаемые в таблице поля зависят от типа пробы, выбранного в поле **Type**.

7 После этого щелкните **OK**.

Чтобы добавить содержимое другой последовательности к текущей последовательности, выберите **Sequence/Additional Sequence Options...** (последовательность/дополнительные параметры последовательности...) и нажмите **Append Sequence** (добавить последовательность).

Анализ данных МС

Можно загрузить файл данных с **панели навигации** или выбрать команду **Load Data File** (загрузить файл данных) в режиме просмотра Data Analysis (анализ данных).

Загрузка файла данных

Чтобы загрузить файл данных в режиме Data Analysis (анализ данных), выполните следующее.

1 Щелкните по значку **Load Data File** (загрузить файл данных) или выберите **Load Data File** (загрузить файл данных) в меню File (файл).



2 Выберите файл данных (дважды щелкните по имени файла или введите имя и щелкните **OK**). Хроматограмма файла данных будет загружена и показана в окне [2].

ВНИМАНИЕ Для выполнения любых действий, описанных в этом разделе, необходимо загрузить файл данных.

Интеграция хроматограммы

1. Если необходимый интегратор не выбран, откройте меню Chromatogram (хроматограмма) и щелкните **Select Integrator** (выбрать интегратор). Выберите интегратор и нажмите **OK**.
2. Выберите **Chromatogram/Integrate** (хроматограмма/интегрировать).
3. (Дополнительно) Выберите **Chromatogram/Integration Results** (хроматограмма/результаты интеграции). На экране будет показан отчет о группированных результатах. После завершения просмотра результатов щелкните **Close** (закрыть).

Выбор спектра

ПРИМЕЧАНИЕ Если при щелчке правой кнопкой мыши в окне [1] или [2] открывается меню, используйте кнопку **Switch Data Analysis Mouse Actions** (переключить действия мыши для анализа данных) для переключения между режимами работы правой кнопки мыши.

Дважды щелкните *правой* кнопкой мыши по необходимой точке времени хроматограммы. Спектр будет показан в окне [1].

Увеличение

1. Наведите указатель на один из углов области хроматограммы или спектра, которую необходимо увеличить.
2. Нажмите и удерживайте *левую* кнопку мыши, а затем переместите указатель, чтобы выделить область, которую требуется увеличить.
3. Отпустите кнопку мыши. Выбранная область увеличится и заполнит текущее окно.

Уменьшение

1. Расположите указатель мыши в любом месте окна, содержащего увеличенное изображение.
2. Дважды нажмите *левую* кнопку мыши.

Усреднение спектра

1. Расположите указатель на хроматограмме в том месте, начиная с которого требуется усреднить спектр.
2. Нажмите и удерживайте *правую* кнопку мыши, а затем пере–местите указатель к концу области, которую следует усреднить.
3. Отпустите кнопку мыши. Спектр в выбранном диапазоне будет усреднен и результат отобразится в окне [1].

Добавление двух спектров

1. Выберите спектр (дважды щелкните *правой* кнопкой мыши по хроматограмме).
2. Выберите второй спектр (дважды щелкните *правой* кнопкой мыши по хроматограмме).
3. Выберите **Spectrum/Add** (спектр/добавить). Будут объединены два спектра и результат отобразится в окне [1].

Вычитание двух спектров

1. Выберите спектр (дважды щелкните *правой* кнопкой мыши по хроматограмме).
2. Выберите спектр, который следует вычесть (дважды щелкните *правой* кнопкой мыши по хроматограмме).
3. Выберите **Spectrum/Subtract** (спектр/вычесть).

   Спектр, выбранный в п. 2, будет вычтен из спектра, выбранного в п. 1, и результат отобразится в окне [1].

Вычитание фонового спектра

1 Выберите спектр или усредните участок спектра для вычитания из файла данных.

2 Выберите **Spectrum/ Subtract Background (BSB)** (спектр/вычесть фоновый). Система выполнит следующие действия:

- Выбранный спектр вычитается из каждого графика сканирования в текущем файле данных.
- Результат вычитания сохраняется в папке BSB в каталоге, в котором хранится файл данных.
- Файл данных с результатами вычитания становится текущим и данные отображаются в окне [2].

Включение/выключение расширенных меню

В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **Options/Show Extended Menus** (параметры/показывать расширенные меню). В раскрывающиеся списки будут добавлены дополнительные элементы.

Показ меню макросов

В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **Options/Show Macro Menus** (параметры/показывать меню макросов). Выбранное меню макроса будет показано на панели выбора меню.

Включение режима просмотра Multiple Data Files

В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **View/Analyze Multiple Data Files...** (вид/анализировать несколько файлов данных...). Это позволит просматривать одновременно до 9 хроматограмм. Чтобы вернуться к стандартному режиму просмотра Data Analysis, выберите **View/ Return to Data Analysis** (вид/вернуться к режиму анализа данных).

Включение режима просмотра Multiple Spectra

В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **View/Analyze Multiple Spectra...** (вид/анализировать несколько спектров...). Это позволит одновременно просматривать несколько спектров. Чтобы вернуться к стандартному режиму просмотра, выберите **View/Return to Data Analysis** (вид/вернуться к режиму анализа данных).

Использование библиотек спектров

Выбор библиотеки

1. В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **Spectrum/Select Library** (спектр/выбрать библиотеку).
2. В диалоговом окне **Library Search Parameters** (параметры поиска в библиотеке) введите имя библиотеки в первой строке.

   Можно ввести до двух дополнительных библиотек для поиска. Поиск в этих дополнительных библиотеках зависит от того, насколько результаты поиска удовлетворяют критериям.

Интеграция и поиск пиков

Используйте следующую процедуру, чтобы интегрировать общую ионную хроматограмму и автоматически создать отчет о поиске в библиотеке для каждого обнаруженного пика.

1. В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) загрузите файл данных. Будет показана общая ионная хроматограмма.
2. Выберите **Spectrum/Library Search Report** (спектр/отчет о поиске в библиотеке).
3. Когда появится диалоговое окно **Library Search Report Options** (параметры отчета о поиске в библиотеке), выберите необходимые параметры для отчета.
   - Выберите **Summary** (общий) или **Detailed** (подробный), чтобы определить формат отчета.
   - Выберите одно или несколько мест назначения (**Screen** (экран), **Printer** (принтер) и/или **File** (файл)).

– Выберите **Integration Parameter File** (файл параметров интеграции). Либо оставьте поле пустым, чтобы выполнить интеграцию с использованием интегратора GC/MSD ChemStation).

– Выберите используемый спектр каждого пика (**Apex, Apex – Start of Peak, Apex – Background at time или Peak Average** (вершина, вершина — начало пика, вершина — во времени, среднее значение)).

4 Нажмите **OK**, чтобы начать поиск.

Хроматограмма будет интегрирована, и система выполнит поиск спектра каждого пика. Результаты интеграции будут показаны на экране. Отчет о поиске в библиотеке будет отправлен в место назначения, выбранное в п. 3.

5 Выберите **Chromatogram/Integration Results** (хроматограмма/результаты интегрирования), чтобы просмотреть результаты интегрирования.

Поиск одного спектра

1 В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) загрузите файл данных.

2 Выберите **spectrum** (спектр).

3 Дважды щелкните правой кнопкой мыши в окне, содержащем спектр.

ПРИМЕЧАНИЕ Если при щелчке правой кнопкой мыши в окне [1] или [2] открывается меню, используйте кнопку **Switch Data Analysis Mouse Actions** (переключить действия мыши для анализа данных) для переключения между режимами работы правой кнопки мыши.

После завершения поиска результаты будут показаны на экране. Отобразятся спектр для неизвестного вещества, эталонный спектр, выбранный в списке, а также (если имеется) структурная формула эталонного вещества.

4 Чтобы просмотреть другие данные о спектре, выполните следующее:
   - Щелкните по другому веществу в списке, чтобы просмотреть другой эталонный спектр.
   - Пометьте опцию **Difference** (различие), чтобы просмотреть различие между неизвестным и эталонным спектрами.

5 Чтобы просмотреть другую информацию, выполните следующие действия:
   - Щелкните **Statistics** (статистика), чтобы просмотреть сведения о качестве каждого элемента в списке.
   - Щелкните **Text** (текст), чтобы просмотреть информацию заголовка, сохраненную в библиотеке для текущего эталонного спектра.
6 Щелкните **Print** (печать), чтобы напечатать копию показанного спектра.
7 Щелкните **Done** (готово), чтобы удалить результаты поиска в библиотеке.

Использование фиксации времени удерживания

Фиксация времени удерживания (Retention time locking — RTL) представляет собой процедуру, которая оценивает характеристики определенного метода (колонку, установки потока, параметры термостата) таким образом, что любые изменения в колонке, обычно влияющие на время удерживания, устраняются. Процедура включает в себя сбор данных о веществе (для которого известно необходимое время удерживания) при различных входных давлениях рядом с текущими установками метода (–20 %, –10 %, номинал, +10 %, +2 0%). По этим пяти точкам строится кривая давления/удерживания, характеризующая конкретный прибор. Эта кривая позволяет рассчитать давление, которое вызывает элюирование выбранного вещества в желаемое время. Параметры сохраняются, чтобы метод работал при этом давлении.

Фиксирование метода МС

1. В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором) загрузите метод, который требуется зафиксировать. При необходимости измените параметры метода.
2. При использовании АПЖМ установите пробирку в позицию 1.
3. Выберите **Method/Acquire RTLock Calibration Data** (метод/получить данные калибровки RTLock). Начнется сбор калибровочных файлов RTL.
4. Номинальное давление будет оценено в диапазоне калибровки –20 %, –10 %, +10 % и +20 %, будут автоматически выполнены пять циклов. Появится соответствующий запрос, а также сообщение, если имеются данные предыдущих калибровок. Пять файлов данных будут сохранены в каталоге метода, в папке RTLOCK в файлах с именами RTLOCK1–RTLOCK5.
5. После сбора данных будет запущен новый сеанс анализа данных и загрузится файл номинального цикла (RTLOCK3.D). Выберите пик (удерживая правую кнопку мыши), который требуется использовать для вычислений калибровки RTL.
6. Будет показан спектр выбранного пика. Нажмите **Yes** (да), чтобы ПО автоматически находило пик фиксируемого вещества в оставшихся четырех циклах. Программное обеспе–чение сравнит спектры и построит кривые для подходящих результатов. После этого будут показаны пять выбранных пиков.
7. Отображается уравнение кривой (основанное на соотношении времени удерживания и значений давления) и появляется запрос на продолжение работы. Нажмите **Yes** (да).
8. Затем введите необходимое фиксированное время удерживания и нажмите **OK**.
9. Нажмите **Yes**, чтобы сохранить в методе сведения о фиксиру–емом давлении. Введите название фиксируемого вещества и нажмите **OK**.
10. После этого будет предложено удалить калибровочные файлы данных (RTLOCK1.D–RTLOCK5.D). Выберите **Yes** (да) или **No** (нет). Метод будет зафиксирован.

При загрузке фиксированного метода в режиме просмотра Instrument Control (управление прибором) появится заголовок, уведомляющий о фиксировании метода и веществе, используемом для фиксации. Для давления (только на приборах в сети) будет установлено фиксированное значение.

ПРИМЕЧАНИЕ При работе фиксированного метода давление восстанавливается до фиксированного значения ДАЖЕ в том случае, если пользователь внес изменения с помощью клавиатуры ГХ или режима просмотра Instrument Control.

График обслуживания

Подробное описание процедур обслуживания приведено в документации, прилагаемой к оборудованию. Частота обслуживания может отличаться для разных систем. Ведите учет обслуживания.

Ежедневно

- ❒ Проверяйте и при необходимости заменяйте септу.
- ❒ Проверяйте затяжку лайнеров порта ввода.
- ❒ Проверяйте затяжку гаек колонки.

Еженедельно

- ❒ Проверяйте уровень жидкости в форвакуумном насосе.
- ❒ Заменяйте лайнеры и кольцевые уплотнители порта ввода.

Ежемесячно

- ❒ Очищайте ловушку впускной вентиляционной линии с разделением/без разделения.
- ❒ Проверяйте отсутствие утечек (впускной канал, соединения колонки).

Каждые 3 месяца

- ❒ Заменяйте газовые цилиндры (если давление ниже 500 psig).

Каждые 6 месяцев

- ❒ Заменяйте жидкость в форвакуумном насосе.
- ❒ Проверяйте и при необходимости заменяйте калибровочную пробирку.

Каждый год

- ❒ Проверяйте и при необходимости заменяйте жидкость в диффузионном насосе.
- ❒ Выполняйте кондиционирование или заменяйте внутренние и внешние ловушки и химические фильтры ГХ.

По мере необходимости

- ❒ Выполняйте настройку МСД.
- ❒ Очищайте источник ионов.
- ❒ Заменяйте ловушку газа–носителя.
- ❒ Заменяйте изношенные детали (катоды, ВЭУ и т.д.).
- ❒ Заменяйте колонку.
- ❒ Смазывайте уплотнители.

Предупреждения о безопасности

ОСТОРОЖНО

Не выполняйте обслуживание включенного или подключенного в источни-ку питания МСД, если этого не указано в документации, поставляемой с МСД.

Устройство сопряжения ГХ/МСД может оказаться включенным и нагретым до опасной температуры, даже если МСД выключен. После выключения устройство сопряжения ГХ/МСД остывает очень медленно. Убедитесь, что все детали остыли, прежде чем работать с ними.

Будьте осторожны при работе сзади прибора. При охлаждении ГХ выпускает горячий воздух, который может вызвать ожоги.

Если используются ядовитые растворители или ядовитые химические вещества, установите рукав, отводящий газы за пределы лаборатории. Обратите внимание, что ловушка стандартного форвакуумного насоса задерживает только масло форвакуумного насоса, но не задерживает и не фильтрует ядовитые химикаты.

При замене насосной жидкости используйте соответствующие химически стойкие перчатки и защитные очки. Избегайте любых контактов с жидкостью.

Изоляция впускных каналов, детекторов, клапанной коробки и изоляцион-ных цилиндров изготовлена из огнеупорного керамического волокна. Избегайте вдыхания частиц керамики. Организуйте вентиляцию рабочего пространства, надевайте одежду с длинными рукавами, перчатки, защитные очки и респиратор. Выбрасывайте изоляцию в закрытом пластиковом пакете. После работы с керамической изоляцией помойте руки с мылом в холодной воде.

Советы по работе

- ❒ *Регулярно* выполняйте резервное копирование данных и методов.
- ❒ Убедитесь, что используемый файл настройки подходит для анализируемых веществ.
- ❒ Сохраняйте отчеты о настройке для использования в будущем.
- ❒ Выполняйте обслуживание системы, как описано в документации ГХ и МСД. Ведите учет выполненного обслуживания.
- ❒ При вентиляции МСД ГХ не нагревается, поэтому выполняйте обслуживание, например, замену входных лайнеров, септы и т.д., в этот момент.
- ❒ После откачки подождите *не менее 2 часов*, чтобы МСД достиг теплового равновесия, прежде чем выполнять настройку или сбор данных.
- ❒ Оптимальная чувствительность обычно достигается при скорости потока в колонке 1,2 мл/мин и ниже.
- ❒ Когда объемы ввода превышают один микролитр, используйте импульсный режим без разделения и увеличьте первоначальную температуру термостата на 10–20 °C.
- ❒ При вводе без разделения импульсный режим обеспечивает лучшую подачу пробы в колонку. Импульсное давление может вдвое превышать начальное давление на впуске.
- ❒ Выбор режима **Constant Flow (постоянный поток)** в большинстве случаев обеспечит наиболее эффективное разделение.
- ❒ При использовании новой колонки повторно проверьте затяжку гаек после нескольких температурных циклов термостата.
- ❒ С помощью клавиш [Config Status] на клавиатуре ГХ 6890 выберите три наиболее важных объекта на дисплее (**оставшееся время**, **температура термостата** и т.д.). После этого они всегда будут видны независимо от того, какое из окон GC/MSD ChemStation открыто.

- Промывайте и пополняйте промывочные пробирки пробоотборника. Не доливайте растворитель в неполные пробирки.
- Используйте следующую таблицу в качестве руководства по использованию режимов получения SIM и/или сканирования.

Задача	Режим
Анализ смеси неизвестного состава.	Сканирование или Сканирование и SIM
Анализ смеси известных веществ в неизвестном соотношении (количественный анализ).	Сканирование или SIM или Сканирование и SIM
Определение наличия в смеси нескольких известных веществ в малой концентрации.	SIM

- При выборе масс SIM используйте точные массы, напечатанные в отчете табуляции, а не номинальные массы, показанные в спектре. Данные отчета являются более точными.
- При выполнении анализа SIM используйте режим низкого разрешения, если не требуется определять соотношение масс, различающихся на одну а.е.м. Низкое разрешение обеспечит наибольшую чувствительность и воспроизводимость.
- Выберите самый узкий диапазон сканирования, который обеспечивает хорошие результаты поиска в библиотеке. Это обеспечит лучшие спектры пика и лучший количественный анализ.

Сообщения об ошибках и устранение неполадок

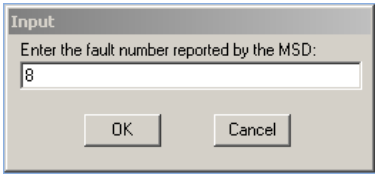
Сообщения об ошибках

Иногда при возникновении неполадок в МСД появляется сообщение об ошибке в ПО GC/MSD ChemStation. Некоторые сообщения об ошибках появляются только в процессе настройки. Другие сообщения появляются во время настройки или управления прибором.

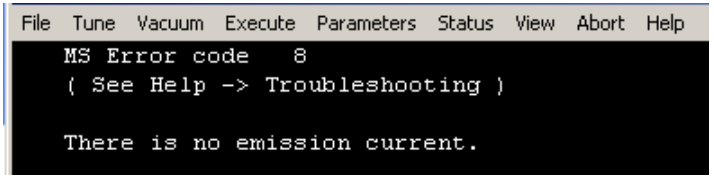
Иногда вместо сообщения показан только номер. Этот номер может обозначать одно или несколько сообщений об ошибках.

Чтобы преобразовать номер в сообщение об ошибке, выполните следующее.

1. Запишите номер.
2. В режиме просмотра Instrument Control (управление прибором) выберите **View/Tune and Vacuum Control** (вид/управление настройкой и вакуумом).
3. Выберите **Status/MS Error Codes** (состояние/коды ошибок МС).
4. Введите код ошибки и нажмите **OK**.



Будут показаны соответствующие сообщения об ошибках.



Советы по устранению неполадок

Ошибка ЛВС МСД

МСД включен, но мигает сообщение "Server not found! Check LAN connection"

Это нормальное явление при первом включении МСД. Сообщение означает, что связь МСД с ПО GC/MSD ChemStation еще не установлена. Если сообщение по–прежнему отображается после начала откачки:

- Соединение было разорвано в результате временного отключения электричества.
- Неустойчивое соединение между МСД и GC/MSD ChemStation и/или службой Agilent Bootp и/или коммутатором/концентратором.
- Адреса MAC и IP для МСД не настроены должным образом в службе Agilent Bootp для ЛВС.

Подъем базовой линии

- Унос неподвижной фазы из колонки.
- Посторонние примеси.

Слишком высокое форвакуумное давление или давление в вакуумном коллекторе

- Избыточный поток в колонке.
- Воздушная протечка.
- Низкий уровень жидкости диффузионного насоса.
- Посторонние примеси в жидкости диффузионного насоса.
- Низкий уровень жидкости форвакуумного насоса.
- Посторонние примеси в масле форвакуумного насоса.
- Перетянут форвакуумный рукав (в результате давление в вакуумном коллекторе будет слишком высоким, а форвакуумное давление будет слишком низким).

Сильный фон в масс—спектрометре

- Воздушная протечка.
- Слишком высокое форвакуумное давление или давление в вакуумном коллекторе.
- Посторонние примеси.

Ионы в *m/z* 18, 28, 32 и 44

- Недавно выполнялось вентилирование детектора (остаточный воздух и вода).
- Воздушная протечка.

Отсутствуют изотопы или их отношения являются неправильными

- Неправильная настройка.
- Загрязнен источник ионов.
- Сильный фон.
- Слишком высокое напряжение электронного умножителя.
- Слишком высокое напряжение отражателя.
- Высокая скорость сканирования (режим сканирования).
- Низкое время расширения (режим SIM).
- Пики слишком широкие или слишком узкие.
- Контакты отражателя и линзы ионного фокуса подключены наоборот.

Нет пиков

- Неправильная концентрация пробы.
- Нет аналита.
- Шприц не найден или установлен неправильно (только для АПЖМ).
- Пустая пробирка для проб.
- Ввод в режиме с разделением вместо режима без разделения.

Размытие границ пиков

- Активные точки в пути пробы.
- Избыточный ввод.
- Порт ввода слишком холодный.
- Слишком слабый поток в колонке.
- Интерфейс ГХ/МСД или источник ионов слишком холодный.

Пики с плоскими вершинами

- Слишком малое время задержки растворителя.
- Неправильная шкала.
- Избыточный ввод.
- Слишком высокое напряжение электронного умножителя.

Пики с расщепленными вершинами

- Неправильный метод ввода.
- Избыточный ввод.

Непостоянная ширина пиков

- Неправильная настройка.
- Нет ПФТБА в калибровочной пробирки.
- Сбой калибровочного клапана.
- Загрязнен источник ионов.
- Изношен электронный умножитель.
- МСД не достиг теплового равновесия.
- Большие перепады температуры в лаборатории.

Низкая воспроизводимость

- Загрязнена игла шприца.
- Протечка в порте ввода.
- Несоответствие размеров лайнера порта и ввода.
- Ослаблены соединения колонки.
- Перепады давления, потока в колонке и температуры.
- Загрязнен источник ионов.
- Ослаблены соединения анализатора.
- Замыкание на землю.

Низкая чувствительность

- Неправильная настройка.
- Файл настройки не соответствует выполняемому анализу.
- Неправильные температуры.
- Неправильная концентрация пробы.
- Протечка в порте ввода.
- Неправильное отношение разделения.
- Слишком малое время промывки в режиме без разделения.
- Избыточное давление в МСД.
- Загрязнен источник ионов.
- Воздушная протечка.
- Детектор работает неправильно.
- Плохо работает нить накала.
- Неправильная полярность фильтра масс.

Отклонение времени удерживания

- Колонка была укорочена (уменьшено время удерживания).
- Старая колонка (уменьшено время удерживания).
- Активные точки в пути пробы (увеличено время удерживания).

- Уменьшен поток в колонке (увеличено время удерживания).
- Протечка в порте ввода (увеличено время удерживания).
- Изменилась начальная температура термостата (если повысилась — уменьшено время удерживания, если понизилась — увеличено время удерживания).

Более подробную информацию см. в разделе справочной системы, посвященном устранению неполадок с МСД.

2
Выполнение количественного анализа

Количественный анализ 58
Содержание главы 58
Введение 58
Выполнение количественного анализа с помощью программного обеспечения GC/MSD ChemStation 58
База данных количественного анализа 61
Введение 61
Создание базы данных количественного анализа вручную 63
Принцип работы функции AutoQuant Setup 68
Учебник по использованию AutoQuant Setup 69
Процедура создания базы данных количественного анализа с использованием AutoQuant Setup 70

Количественный анализ

Содержание главы

В данной главе описываются основные шаги по формированию базы данных количественного анализа. Описанные ниже шаги помогут ознакомиться с программным обеспечением.

Перед началом работы прочитайте вводное руководство в конце данной главы, а затем попробуйте создать базу данных количественного анализа на основе собственных файлов данных. Чтобы получить более подробную информацию о различных функциях, воспользуйтесь интерактивной справочной системой.

Введение

Функция количественного анализа

Количественный анализ определяет количество вещества, находящегося в пробе.

Этап проведения количественного анализа

Количественный анализ проводится на последнем этапе (после того, как определено вещество).

Осуществление количественного анализа.

Количественный анализ заключается в сравнении реакции какого–либо количества вещества (информация извлекается в течение данного процесса) с реакцией вещества в определенном количестве (которое хранится в базе данных количественного анализа).

База данных количественного анализа будет рассмотрена в данном руководстве позже.

Выполнение количественного анализа с помощью программного обеспечения GC/MSD ChemStation

Ниже приведено краткое описание того, как программное обеспечение определяет количество вещества в образце. Данный процесс состоит из 2 этапов.

Первый этап — получение данных

Первый этап, который заключается в *сборе информации*, кратко описан ниже.

Процесс проходит следующим образом: образец помещается в ГХ/МСД, нагревается, подвергается давлению, вследствие чего распадается на отдельные элементы, а на последнем этапе проходит через детектор программного обеспечения ChemStation. Весь процесс выполняется согласно выбранному методу.

Детектор определяет уникальную структуру вещества, а программное обеспечение сравнивает данную структуру с уже имеющимися в библиотеке образцами в соответствии с выбранным методом. Если есть совпадение, программное обеспечение ChemStation сообщит об этом.

Таким образом, если структура одного из веществ, находящихся в образце, совпадет со строением вещества xxx, находящегося в библиотеке для выбранного метода, программное обеспечение ChemStation сообщит об этом.

Сбор данных представляет собой крайне сложный процесс и полностью не описывается в данном руководстве. Чтобы получить более подробную информацию, воспользуйтесь интерактивной справочной системой.

В учебнике, приведенном в конце данного документа, будет рассмотрена работа функции AutoQuant Setup с использованием метода по умолчанию, демонстрационного файла данных и демонстрационной библиотеки спектров, прилагаемой к программному обеспечению ChemStation.

Второй этап — количественный анализ данных

Второй этап заключается в определении количества вещества в пробе. Это этап процесса — *количественный анализ данных*, который кратко описан ниже и подробно рассмотрен в разделе Учебник по использованию AutoQuant Setup на стр. 69.

Чтобы определить количество вещества, находящегося в пробе, программное обеспечение ChemStation сравнивает то, что обнаруживает (какое–то количество вещества xxx), с веществом xxx в определенном количестве, определяет количественное соотношение и сообщает результат.

На данном этапе используется база данных количественного анализа.

Таким образом, библиотека данных хранит образцы строения определенных веществ, а база данных количественного анализа хранит эту информацию, а также следующие данные:

- Какова реакция вещества при различных количествах (например, 10 мкг/л).
- Целевой ион вещества.
- Квалифицирующие ионы данного целевого иона вещества.

Таким образом, после того, как программное обеспечение *идентифицировало* вещество (путем сравнения с библиотекой данных), оно определяет *количество вещества* путем сравнения реакции вещества, находящегося в пробе, с реакциями, приведенными в базе данных количественного анализа.

Например, если компонент в базе данных количественного анализа представлен в количестве 10 мкг/л, а количество обнаруженного вещества превышает данное количество в 2 раза, это будет составлять 20 мкг/л.

ПРИМЕЧАНИЕ Данное описание процесса является очень упрощенным. Однако целью настоящего руководства не является подробное описание процесса сбора информации и количественного анализа.

Для получения информации о настройке базы данных количественного анализа см. Учебник по использованию AutoQuant Setup на стр. 69.

База данных количественного анализа

Введение

Описание базы данных количественного анализа

В базе данных количественного анализа содержится вся важная информация о каждом искомом веществе.

Информация базы данных количественного анализа

Для каждого вещества, количество которого необходимо определить, в базе данных количественного анализа должна содержаться следующая информация:

- Запись, идентифицирующая искомое вещество, включающая:
  - Время удерживания.
  - Параметры количественного анализа.
  - Критерии идентификационного отбора.
  - Метод вычисления коэффициентов квалифицирующих ионов.
  - Определение границ приемлемой реакции.
  - Способ математической обработки при классификации данных вещества.
  - Используемые точки калибровочной кривой.
- Запись, идентифицирующая целевой ион (обычно основной ион) в искомом веществе.
- Две или более записи для ионов, которые в дальнейшем будут определять наличие вещества. (Так, например, эти ионы всегда будут появляться вместе с основным ионом вещества в одном и том же соотношении).
- Любой из внутренних стандартов.

Может показаться, что это очень сложно, однако, функция AutoQuant Setup может определить эти ионы автоматически. Для получения более подробной информации см. Создание базы данных количественного анализа с помощью функции AutoQuant на стр. 66.

Объем базы данных количественного анализа

Для определения количества вещества необходимо, чтобы в базе данных количественного анализа было указано минимум три параметра:

- Основной ион вещества.
- Два дополнительных иона, которые определяют наличие основного иона.

Дополнительный элемент, который выбирают пользователи в качестве внутреннего стандарта.

База данных количественного анализа будет увеличиваться в зависимости от количества веществ, которые необходимо определить в количественном отношении, а также от элементов классификации данных.

Создание базы данных количественного анализа

Существует два способа добавления информации о веществах в базу данных количественного анализа:

- Вручную.
- Полуавтоматически с помощью AutoQuant Setup.

Оба способа описаны ниже.

Создание базы данных количественного анализа вручную

Данный раздел содержит краткое пошаговое описание процедуры создания базы данных количественного анализа вручную.

Чтобы создать базу данных количественного анализа вручную, необходимо тщательно осмотреть хроматограмму, выбрать отдельно каждое вещество, целевой ион и квалифицирующие ионы, а затем присвоить им название и сохранить в базе данных количественного анализа. Это соответствует этапам 2–8 в разделе Краткая информация о создании базы данных количественного анализа вручную на стр. 64.

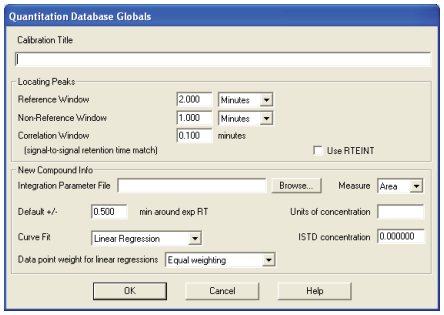
После раздела с описанием настройки базы данных количественного анализа вручную приведен раздел, посвященный созданию базы данных количественного анализа с помощью функции AutoQuant Setup. Работа функции AutoQuant Setup представляет собой полуавтоматический процесс, при котором программное обеспечение проверяет хроматограмму и отбирает вещества, целевые ионы, квалифицирующие ионы (на основе относительного содержания), а также указанную библиотеку.

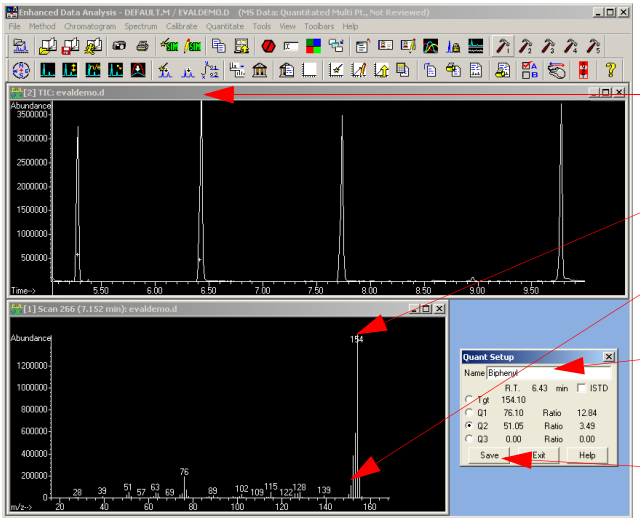
Обратите внимание, что данные разделы содержат только краткую информацию. Для получения более подробной информации см. раздел Учебник по использованию AutoQuant Setup на стр. 69.

Краткая информация о создании базы данных количественного анализа вручную

Чтобы самостоятельно настроить базу данных количественного анализа, необходимо выполнить следующие действия.

1 Загрузите файл данных, содержащий измеренный стандарт для веществ, которые необходимо калибро–вать. Введите общую информацию обо всех веществах, которые будут содержаться в базе данных количественного анализа в окне Quantitation Globals (глобальные параметры количественного анализа), щелкните **OK**. Чтобы открыть окно **Quantitation Database Globals** (глобальные параметры базы данных количественного анализа), выберите **Calibrate/Set Up Quantitation...** (калибровать/настроить количественный анализ…).





2 Просмотрите хроматограмму, сгенерированную файлом данных измеренной пробы.

3 Выберите отдельно каждое вещество. Для этого щелкните по его пику.

4 Выберите целевой ион в показанном спектре.

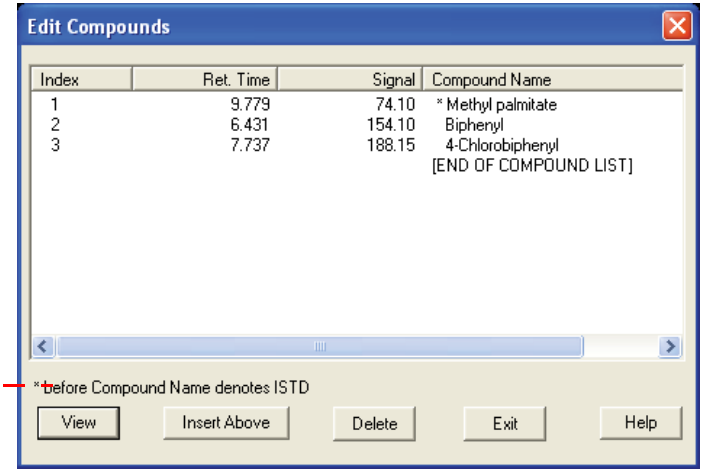
5 Выберите квалифицирующие ионы для данного вещества.

6 Присвойте название веществу. Если данное вещество является выбранным внутренним стандартом, пометьте соответствующую опцию.

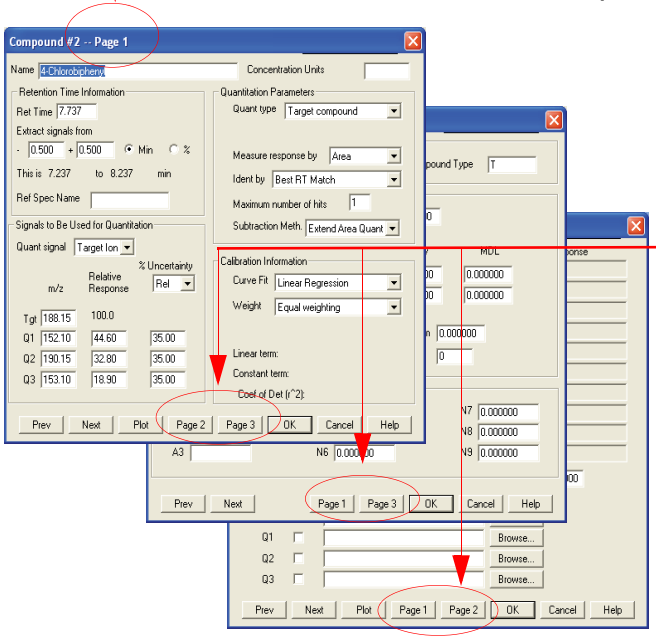
7 Сохраните информацию о данном веществе в базе данных количественного анализа.

8 Повторите п. 2–7 для каждого вещества, которое необходимо занести в базу данных количественного анализа.

9 После того, как в базу данных занесены все необходимые веще–ства, выберите **Calibrate/Edit Compound...** (калибровать/изменить данные о веществе). На экране появится полный список занесенных в базу данных количественного анализа веществ (в окне **Edit Compounds** (изменение данных о веществах)).



10 В окне **Edit Compounds** (изменение данных о веществах) выберите любое вещество и щелкните **View** (просмотреть). На экране появится первая страница с информацией о данном веществе. Для каждого вещества в базе данных количествен–ного анализа содержится 3 страницы с информацией (3 окна).



Используйте кнопки, расположенные в нижней части окна, для перехода по страницам.

Спектральная информация и информация, введенная в окне Globals (глобальные параметры), будет добавлена на эти страницы (страницы 1, 2, 3 отчета базы данных количественного анализа).

После этого *вручную* обновите экраны веществ (страницы 1, 2 и 3) для каждой записи в базе данных.

Создание базы данных количественного анализа с помощью функции AutoQuant

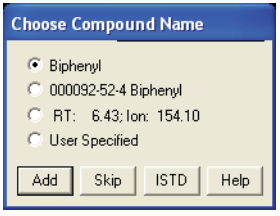
При создании базы данных количественного анализа вручную необходимо тщательно просмотреть хроматограмму и выбрать отдельно каждое вещество, присвоить названия и сохранить необходимые вещества и ионы в базе данных количественного анализа. Работа функции AutoQuant Setup представляет собой полуавтоматический процесс, при котором программное обеспечение проверяет хроматограмму и автоматически идентифицирует вещества, целевые ионы, квалифицирующие ионы на основе их относительного содержания и данных библиотеки.

Обзор создания базы данных количественного анализа с помощью AutoQuant

Для настройки базы данных количественного анализа с помощью AutoQuant Setup необходимо выполнить следующие действия.

1 Первый шаг совпадает с первым этапом выполнения количественного анализа вручную. Для получения информации см. Краткая информация о создании базы данных количественного анализа вручную на стр. 64.

2 Шаги 2–8 ручного процесса предусматривают выбор веществ и ионов вручную. Однако программа AutoQuant выполняет эти действия автоматически. Завершив выбор параметров на экране **Database Globals** (глобальные параметры базы данных), нажмите **OK** (п. 1). Программное обеспечение автоматически начнет поиск наиболее высоких пиков. Для каждого обнаруженного пика ПО сравнит данные с указанной библиотекой и покажет вещество на экране, который выглядит аналогично изображенному ниже.



На этом экране:

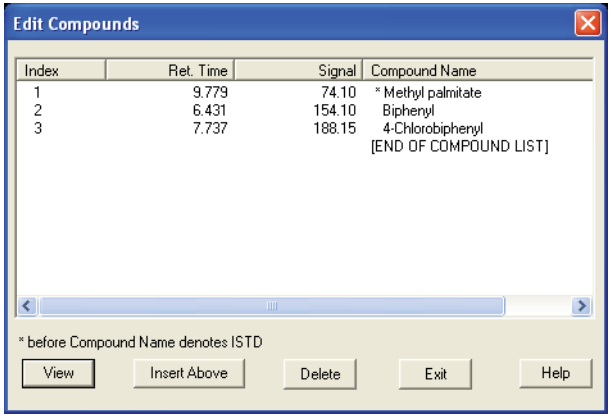
Add Добавить данное *вещество*, его *целевой ион*, и *три квали–фицирующих иона* в базу данных количественного анализа.

Skip Программное обеспечение выводит на экран следующее вещество, которое также было обнаружено в базе данных.

ISTD Добавить данное вещество в базу данных количествен–ного анализа и идентифицировать его, как внутренний стандарт.

ПРИМЕЧАНИЕ Внутренний стандарт должен предшествовать остальным веществам. Он отмечается звездочкой в списке всех веществ.

3 После обнаружения всех веществ, перечисленных в файле данных, на экране появится окно **Do you want to Quantitate Now?** (произвести количественный анализ сейчас?). Щелкните **Yes** (да), появится окно калибровки, а затем **Edit Compound Screen** (экран изменения данных о веществе), где будет отображаться заполненная база данных количественного анализа (это соответствует п. 9 в ручном режиме).



В окне **Edit Compounds** (изменение данных о веществах) выберите любое вещество и щелкните **View** (просмотреть). На экране появится первая страница с информацией о данном веществе, как описано п. 10 при сборе информации вручную.

Принцип работы функции AutoQuant Setup

Функция *AutoQuant Setup* осуществляет идентификацию веществ в определенном файле данных, используя выбранную библиотеку, а также самостоятельно выбирает целевой ион и квалифицирующие ионы для каждого вещества, опираясь на их относительное содержание в данном веществе. После подтверждения выбранных параметров AutoQuant Setup самостоятельно завершает все необходимые записи в базе данных количественного анализа.

Требование. Обязательным условием для использования функции AutoQuant Setup является наличие библиотеки с данными целевых веществ. Кроме того, калибровочный стандарт не должен содержать совместно элюирующие вещества.

Учебник по использованию AutoQuant Setup

В данной главе описываются основные шаги по созданию базы данных количественного анализа с помощью AutoQuant Setup. Данное упражнение должно продемонстрировать, насколько быстро можно создать и использовать базу данных количествен–ного анализа с помощью AutoQuant Setup. Выполнение процедуры занимает около 5 минут.

При выполнении данного упражнения будет создан метод, содержащий базу данных количественного анализа, для определения содержания и количества следующих веществ: бифенил, хлоробифенил и метилпальмитат.

Для этого потребуется выполнить следующее.

1. Загрузить метод по умолчанию **DEFAULT.M**, предлагаемый программным обеспечением ChemStation.
2. Загрузить демонстрационный файл данных **EVALDEMO.D**.
3. Использовать демонстрационную библиотеку спектральных данных **DEMO.L**.
4. Использовать функцию AutoQuant Setup для создания базы данных количественного анализа, содержащей следующие вещества:
   - Додекан.
   - Бифенил.
   - Хлоробифенил.
   - Метилпальмитат.

Этот метод и база данных количественного анализа позволяют определить содержание и количество бифенила, хлоробифенила и метилпальмитата.

Процедура создания базы данных количественного анализа с использованием AutoQuant Setup

1 Создайте копии файлов **DEFAULT.M** и **EVALDEMO.D** перед выполнением упражнения.

2 В режиме *Data Analysis* (анализ данных) загрузите два файла:

Демонстрационный метод **C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M.**

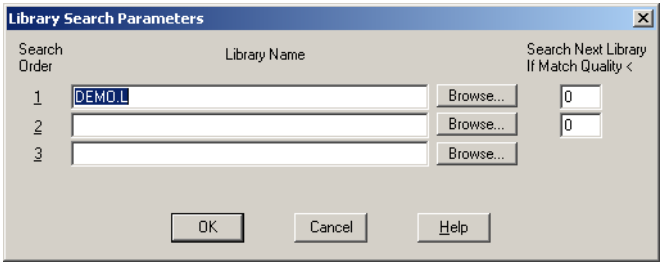
Демонстрационный файл данных **C:\MSDCHEM\1\DATA\EVALDEMO.D.**

При выполнении этих действий для создания собственной базы данных количественного анализа этот файл данных бу–дет получен при выполнении цикла с калибровочной пробой.

3 Выберите библиотеку **Spectrum/Select Library** (спектр/выбрать библиотеку) или щелкните по значку:

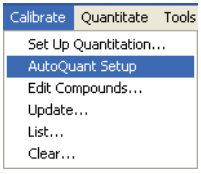


Выберите **DEMO.L** .



4 Выберите **Calibrate/AutoQuant Setup** (калибровать/автоматическая настройка количественного анализа) или щелкните по значку:





5 Когда на экране появится диалоговое окно **Quantitation Database Globals** (глобальные параметры базы данных количественного анализа), обратите внимание на информацию, которая указана по умолчанию (она взята из предыдущего диалогового окна). Можно изменить ее в соответствии с требованиями метода.

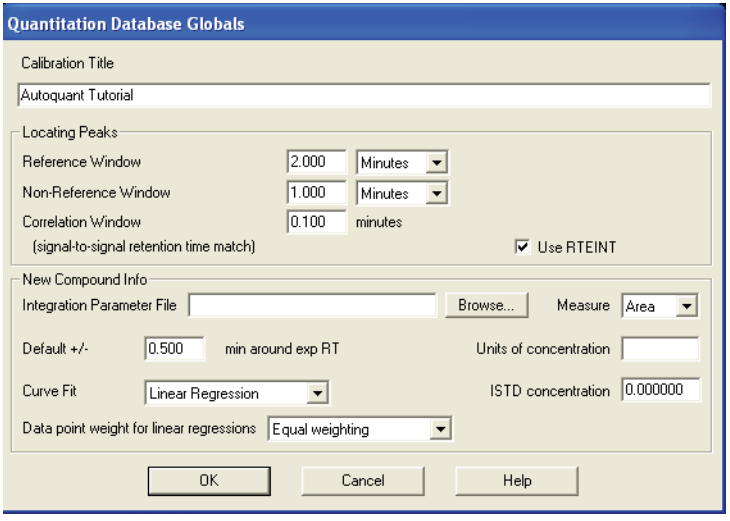
Содержащиеся на этом экране параметры называются глобальными, т.к. информация, указанная на этом экране, является общей для всех веществ и автоматически заполняется для каждого вещества, которое добавлено в базу данных количественного анализа.

6 После появления диалогового окна **Quantitation Database Globals** (глобальные параметры базы данных количественного анализа) введите следующее:

a В поле **Calibration Title** (название калибровочного процесса) введите **AutoQuant Tutorial** (учебник AutoQuant). Эта строка будет появляться в каждом количественном отчете.

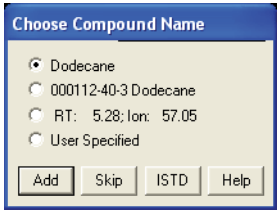
b Пометьте опцию **Use RTEINT** (использовать RTEINT), чтобы использовать интегратор RTE.

c Щелкните **OK**.



После нажатия **OK** программа начнет искать значимые пики в файле данных. Когда система найдет первый пик, она сравнит его с имеющимися пиками в существующей библиотеке (п. 3) и выведет на экран название первого вещества, найденного в библиотеке. Как только на экране будет показано каждое ве–щество, необходимо определить, что сделать с этим веществом.

7 В данном случае первым найденным веществом является додекан. Можно выполнить три действия:



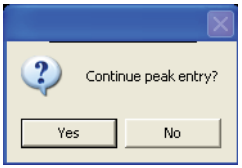
Add Добавить данное *вещество*, его *целевой ион* и *три квалифицирующих иона* в базу данных количественного анализа.

Skip Программное обеспечение выводит на экран следующее вещество, которое также было обнаружено в базе данных.

ISTD Добавить данное вещество в базу данных количест–венного анализа и идентифицировать его, как внутренний стандарт.

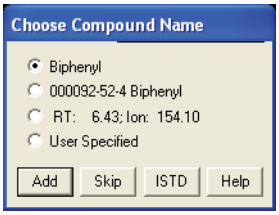
При появлении диалогового окна **Choose Compound Name** (выбор названия вещества) для додекана нажмите **Skip** (перейти к сле–дующему). Для наглядности пока пропустим данное вещество. Позднее еще раз рассмотрим этот процесс и добавим его данные в базу данных количественного анализа.

При появлении диалогового окна **Continue peak entry?** (продолжить ввод пиков?) нажмите **Yes** (да).

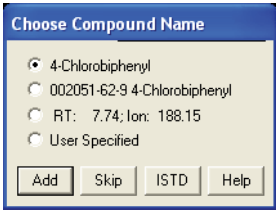


Если нажать **No** (нет), на экране появится диалоговое окно **Quantitate now?** (выполнить количественный анализ сейчас?), см. п. 11.

8 Затем появится бифенил (так как он элюирует после додекана в этом образце). Сохраните название по умолчанию и нажмите **Add** (добавить), чтобы добавить это вещество в базу данных количественного анализа.

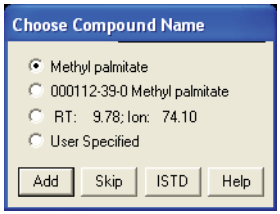


9 Затем появится 4–хлоробифенил. Сохраните название по умолчанию и нажмите **Add** (добавить).



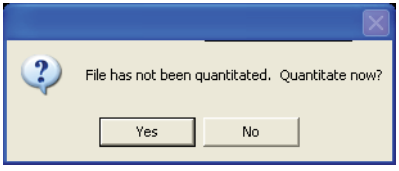
10 Затем появится метилпальмитат.

Чтобы обозначить его в качестве внутреннего стандарта, нажмите **ISTD**. Для наглядности, идентифицируем его, как внутренний стандарт. Внутренний стандарт — это вещество, которое вводится в каждую пробу для определения коэффициента нормализации и основы для сравнительного анализа.



При нажатии **ISTD** вещество добавится в базу данных количественного анализа и будет находиться *в начале списка веществ в базе данных количественного анализа*. Это важно, т.к. внутренние стандарты должны предшествовать всем веществам, которые будут с ними сопоставляться.

11 Когда в программе появится запрос **Quantitate now?** (выполнить количественный анализ сейчас?), нажмите **Yes** (да).



После выполнения количественного анализа на экране появится диалоговое окно **Update Calibration** (обновить калибровку).

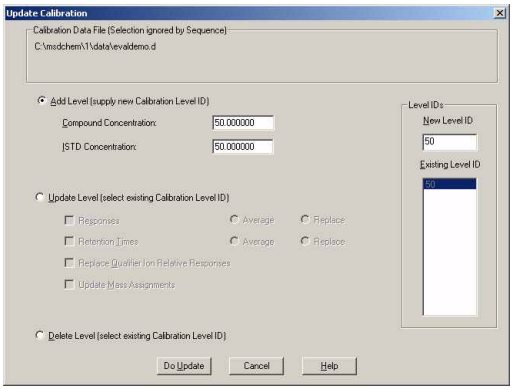
12 Выберите **Add Level** (добавить уровень), укажите новый идентификатор калибровки и введите следующее:

New Level ID (новый идентификатор уровня) = 50
Это только описательная пометка.

Compound Concentration (концентрация вещества) = 50
Подготовленная концентрация вещества.

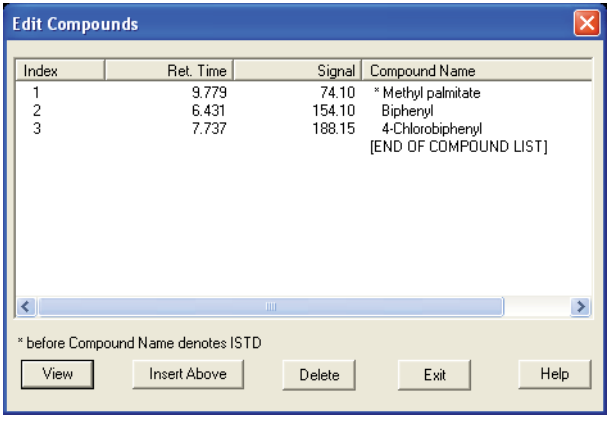
ISTD Concentration (концентрация ISTD) = 50
Подготовленная концентрация внутреннего стандарта.

Затем щелкните **Do Update** (обновить).



13 Появится окно **Edit Compounds** (изменение данных о веществах), в котором будет показан весь список веществ в имеющейся базе данных. Обратите внимание на следующее:

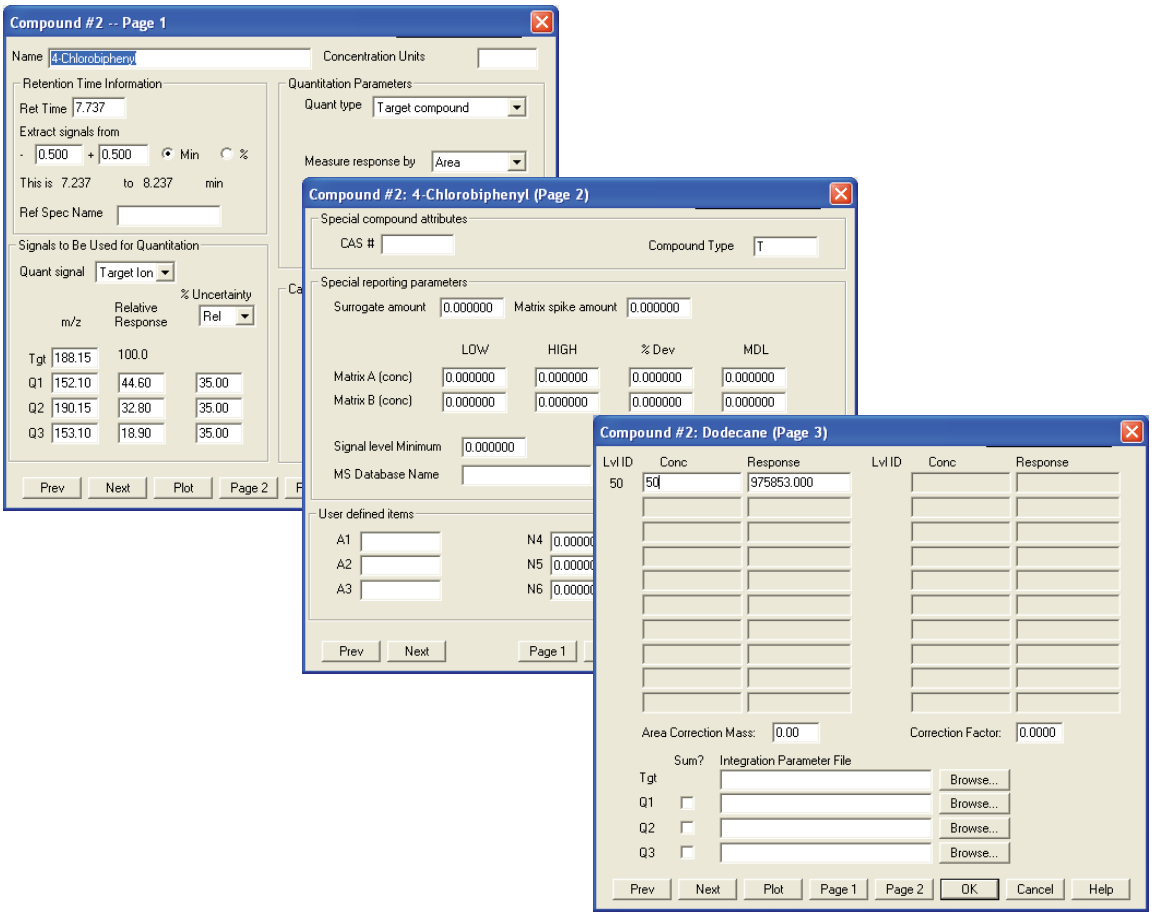
- Метилпальмитет (вещество, идентифицируемое как внут–ренний стандарт) перемещено в начало списка (даже если оно элюировало после двух других веществ в группе) и отмечено звездочкой.
- *Звездочка* (*) показывает, что это вещество является внутренним стандартом.
- Внутренний стандарт *должен предшествовать* веществам, которые к нему относятся. В противном случае порядок не имеет значения в базе данных количественного анализа.



14 Ввод записей для этой одноуровневой базы данных количественного анализа завершен.

Выберите любое вещество в списке и щелкните **View** (просмотр), чтобы проверить параметры вещества на страницах 1, 2 и 3. Щелкните **OK** или **Cancel** (отмена), чтобы вернуться к диалоговому окну **Edit Compounds** (изменение данных о веществах).

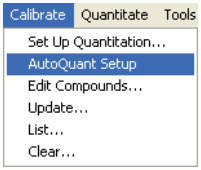
15 Щелкните **Exit** (выход), чтобы закрыть диалоговое окно.



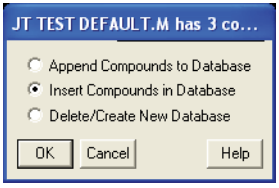
16 Вернемся к выполненной ранее процедуре и добавим вещество, которое было пропущено в п. 7.

Чтобы ввести это вещество в базу данных количественного анализа, выберите **Calibrate/AutoQuant Setup** (калибровать/автоматическая настройка количественного анализа) или щелкните по значку:

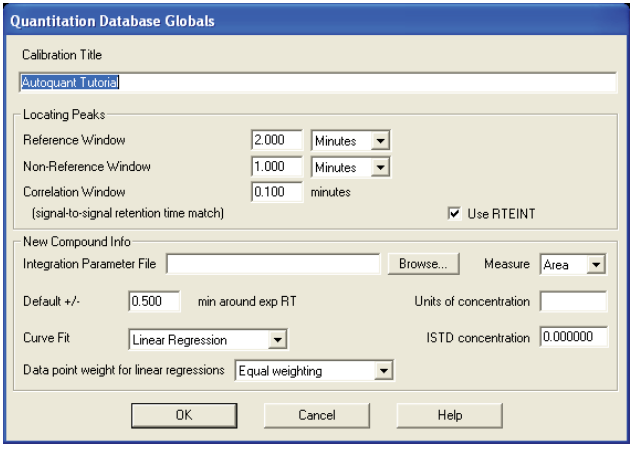




17 Выберите **Insert Compounds in Database** (вставить вещества в базу данных) и щелкните **OK**.



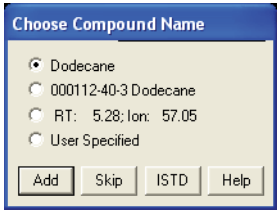
18 Не изменяйте параметры в диалоговом окне **Quantitation Database Globals** (глобальные параметры базы данных количественного анализа).



Щелкните **OK**. База данных снова начнет процесс идентифи–кации пиков.

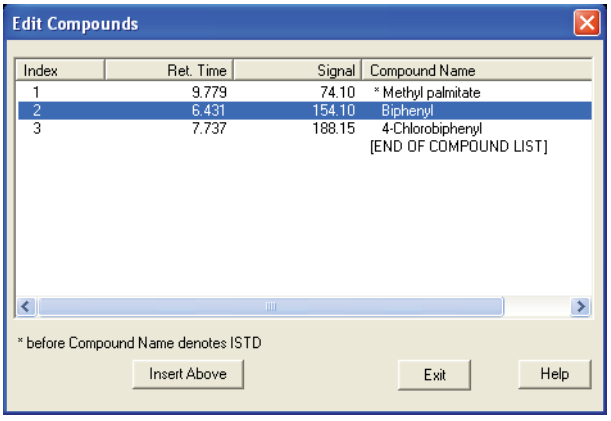
Появится диалоговое окно **Choose Compound Name** (выбор названия вещества).

19 Когда додекан появится в диалоговом окне, сохраните название по умолчанию и нажмите **Add** (добавить).



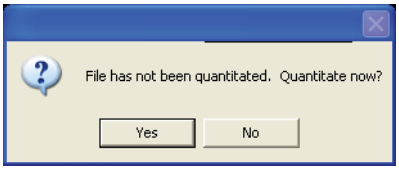
Появится диалоговое окно **Edit Compounds** (изменение данных о веществах).

20 Выберите точку для вставки. Для этого выберите Biphenyl (бифенил) и щелкните **Insert Above** (вставить выше).



21 Появится диалоговое окно **Choose Compound** (выбор вещества) для оставшихся веществ. Когда потребуется выбрать название вещества, нажмите **Skip** (перейти к следующему) для каждого из трех оставшихся веществ в файле данных и щелкните **Yes** (да), чтобы продолжить ввод пиков.

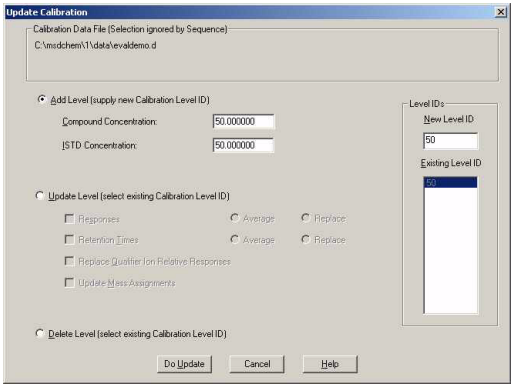
22 Когда появится запрос на подтверждение количественного анализа базы данных, нажмите **Yes** (да).



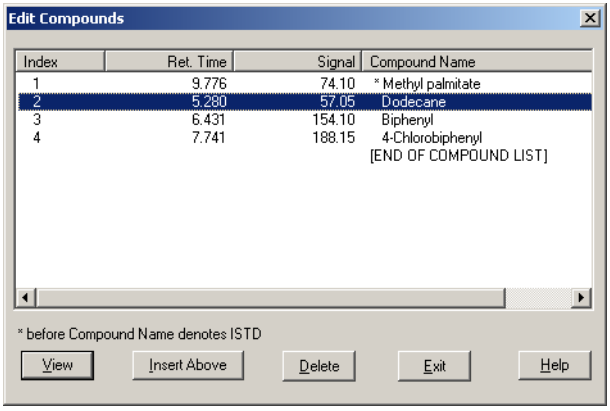
23 Когда появится диалоговое окно **Update Calibration** (обновить калибровку), выберите: **Recalibrate** (калибровать повторно) (в раскрывающемся списке), **Replace** (заменить) (в раскрывающемся списке) в полях Responses (реакции) и Retention Times (времена удерживания).

При повторной калибровке все значения вспомогательных реакций и времена удерживания для указанного идентификатора уровня будут приведены в соответствие со значениями, содержащимися в загруженном файле данных. Все остальные компоненты, выбранные для вещества, будут снова установлены.

Щелкните **Do Update** (обновить).



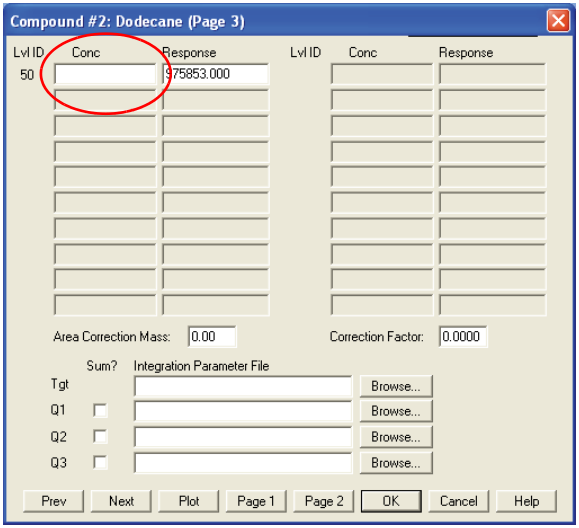
24 Появится окно **Edit Compounds** (изменение данных о веществах). Щелкните **View** (просмотр), проверьте страницу 3 всех четырех веществ в базе данных количественного анализа.



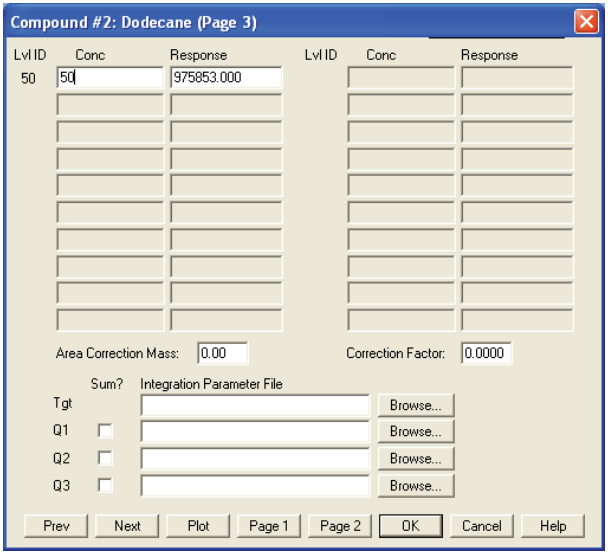
Обратите внимание, что добавленный додекан не имеет значения концентрации.

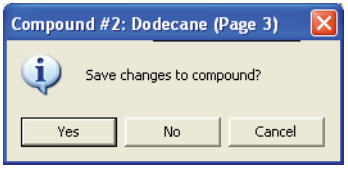
Нажмите **Prev** (предыдущее) или **Next** (следующее), чтобы проверить страницу 3 других веществ. У других веществ значение концентрации составляет 50.

Данное значение было введено в качестве глобального параметра при создании этого уровня (см. п. 12).



25 Введите **50** в поле Concentration (концентрация) для уровня 50. Нажмите **OK**, а затем **Yes** (да), чтобы сохранить изменение.

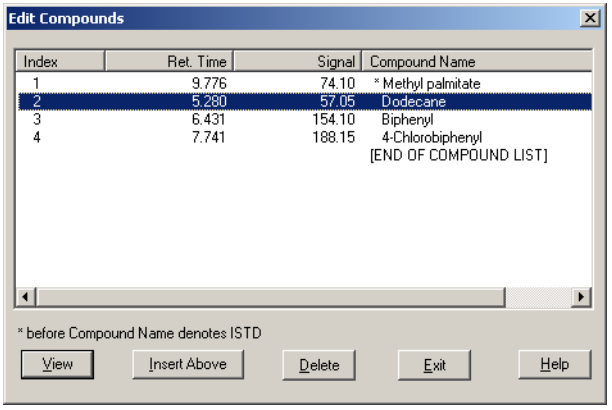




26 Снова откроется окно **Edit Compounds** (изменение данных о веществах). Созданная база количественного анализа будет обновлена и готова к использованию.

Щелкните **Exit** (выход), чтобы завершить процесс.

В результате был создан метод, содержащий базу данных количественного анализа для определения наличия и количест–ва следующих веществ: бифенил, додекан, хлоробифенил и метилпальмитат.



Теперь вы можете легко создавать собственные базы данных количественного анализа, используя любые другие вещества.

ПРИМЕЧАНИЕ

Чтобы получить более подробную информацию об использовании ПО GC/MSD ChemStation, воспользуйтесь интерактивной справочной системой.

Полную информацию о работе, обслуживании и устранении неполадок см. на прилагаемом компакт–диске или диске DVD–ROM.

3 Использование программы Custom Reports

Custom Reports 84
Создание шаблона отчета 86
Настройка отчетов 90
Выбор ячеек, строк и столбцов 95
Печать отчетов 97
Создание базы данных настраиваемых отчетов 100
Выбор нескольких файлов данных 103
Просмотр и печать графиков 105
Кнопки на панели инструментов программы Custom Reports 106

Custom Reports

Обзор

Программа Custom Reports позволяет передавать результаты количественного анализа из модуля Data Analysis (анализ данных) в программу настраиваемых отчетов, в которой можно создавать собственные настраиваемые отчеты.

С помощью этой программы также можно создавать настраива–емые отчеты на основе различных проб, а затем просматривать и печатать графики данных.

После создания шаблона отчета или базы данных и связывания его с методом можно автоматически печатать или изменять базу данных настраиваемых отчетов при запуске метода.

Настраиваемые отчеты можно использовать только для количественных данных.

Начальные сведения

В данной главе описаны основные действия для создания шаблона настраиваемого отчета или базы данных. Описанные ниже шаги помогут ознакомиться с программой Custom Reports.

Внимательно изучите параметры программы. Попробуйте различные функции. Чтобы получить более подробную информацию о различных функциях, воспользуйтесь интерактивной справочной системой.

Запуск программы Custom Reports

В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **Quantitate/Custom Reports** (выполнить количественный расчет/настраиваемые отчеты) или щелкните по значку настраиваемых отчетов.



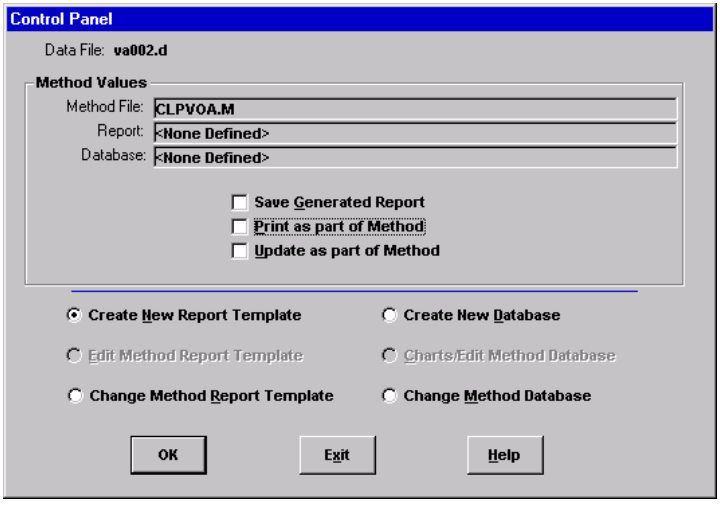
Если текущий метод не имеет количественной базы данных или файл данных не был загружен, программа предложит использовать значения по умолчанию.

Щелкните **OK**. Появится окно **Custom Reports Paper Size** (размер бумаги для настраиваемых отчетов), щелкните **OK**.

Создание шаблона отчета

Через несколько секунд после запуска программы Custom Reports появится окно Control Panel (панель управления) (см. ниже).

1 Выберите **Create New Report Template** (создать новый шаблон отчета) и щелкните **OK**.



Create New Report Template	Позволяет создать шаблон настраиваемого отчета с помощью мастера настройки отчета.
Edit Method Report Template	Позволяет изменить шаблон отчета.
Change Method Report Template	Позволяет выбрать шаблон отчета для определенного метода.
Create New Database	Позволяет создать базу данных настраиваемых отчетов с помощью мастер настройки базы данных.
Chart/Edit Method Database	Позволяет просматривать графики и вносить изменения в базы данных настраиваемых отчетов.
Change Method Database	Позволяет выбрать базу данных для определенного метода.

2 В окне Report Wizard (мастер настройки отчета) выберите элемент в списке **Report Contents** (содержание отчета) справа. В окне слева в списке **Possible Items for Report** (возможные элементы отчета) перечислены все элементы, необходимые для создания шаблона отчета. В правом окне **Report Contents** (содержание отчета) перечислены все выбранные элементы.

3 Выберите элемент в расположенном справа списке **Possible Items for Report** (возможные элементы отчета).

4 Дважды щелкните по выбранному элементу или нажмите **Add** (добавить). Выбранный элемент появится справа после выделенных элементов.

5 Аналогично (шаги 1–4) выберите все необходимые для отчета элементы. Можно использовать кнопку **Remove** (удалить), чтобы удалить элементы из списка **Report Contents** (содержание отчета) справа.

6 В области слева в списке **Possible Items for Report** (возможные элементы отчета) перечислены все элементы, необходимые для создания шаблона отчета. Элементы Globals (глобальные) в области Graphics (графика) добавляются в раздел **Reports Content Header** (заголовок содержания отчетов), а элементы Compound (вещество) — в разделы **All Compound** (все вещество).

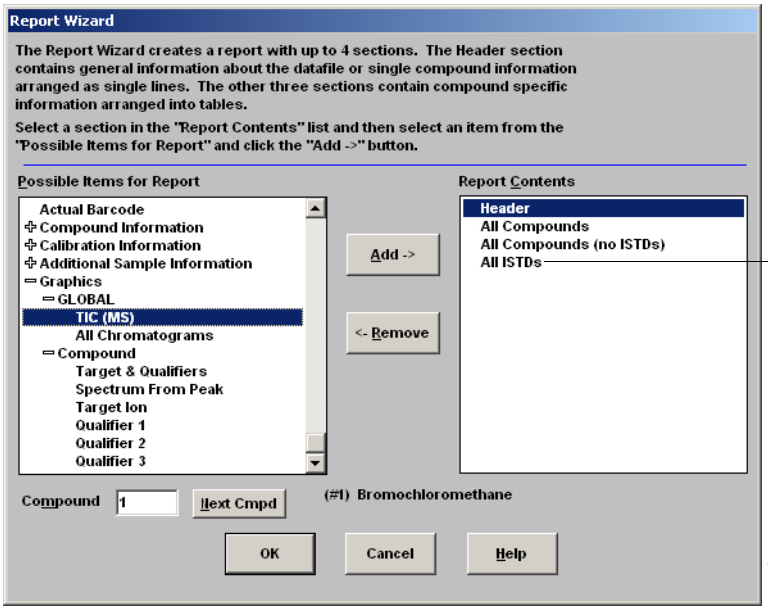
7 После выбора элементов отчета с помощью мастера отчетов щелкните **OK**.

На основе выбранных параметров будет создан шаблон.

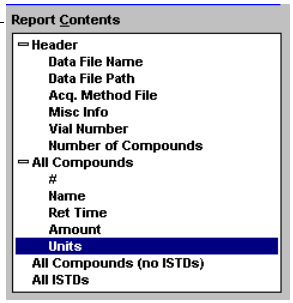
8 В появившемся листе 1 настраиваемого отчета (см. ниже) можно выбрать **File/Save** (файл/сохранить) или щелкнуть по значку **Save** (сохранить) и сохранить данный шаблон отчета.

9 Затем появится диалоговое окно **Link with Method** (связать с методом). Это диалоговое окно позволяет выбрать шаблон в качестве используемого по умолчанию для определенного метода, чтобы он автоматически печатался при запуске этого метода.

10 Для выхода из программы Custom Reports выберите **File/Exit** (файл/выход).

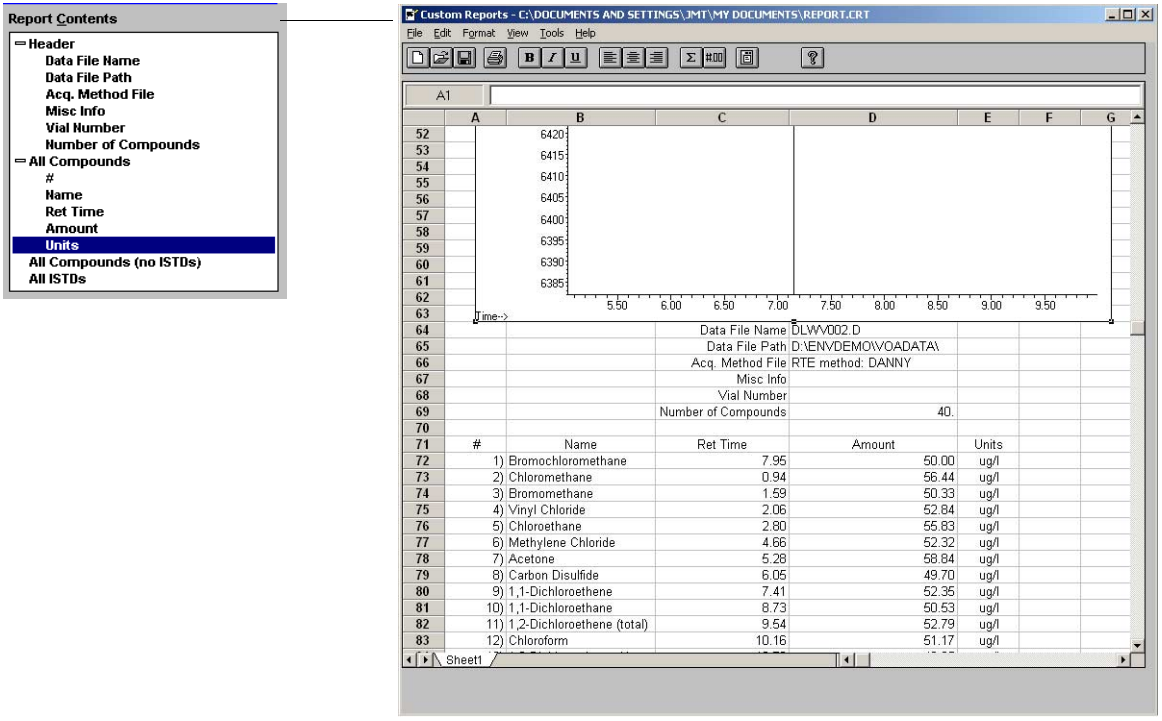


Пример



+ Щелкните по значку плюса, чтобы открыть список подпунктов

— Щелкните по значку минуса, чтобы закрыть список подпунктов


Report Contents
Header
Data File Name
Data File Path
Acq. Method File
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds
All Compounds
#
Name
Ret Time
Amount
Units
All Compounds (no ISTDs)
All ISTDs
Custom Reports - C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\JMT\MY DOCUMENTS\REPORT.CRT
File Edit Format View Tools Help
A1
Time-->
Data File Name DLWV002.D
Data File Path D:\ENVDEMO\VOADATA\
Acq. Method File RTE method: DANNY
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 7.95 50.00 ug/l
2) Chloromethane 0.94 56.44 ug/l
3) Bromomethane 1.59 50.33 ug/l
4) Vinyl Chloride 2.06 52.84 ug/l
5) Chloroethane 2.80 55.83 ug/l
6) Methylene Chloride 4.66 52.32 ug/l
7) Acetone 5.28 58.84 ug/l
8) Carbon Disulfide 6.05 49.70 ug/l
9) 1,1-Dichloroethene 7.41 52.35 ug/l
10) 1,1-Dichloroethane 8.73 50.53 ug/l
11) 1,2-Dichloroethene (total) 9.54 52.79 ug/l
12) Chloroform 10.16 51.17 ug/l
Sheet1

Настройка отчетов

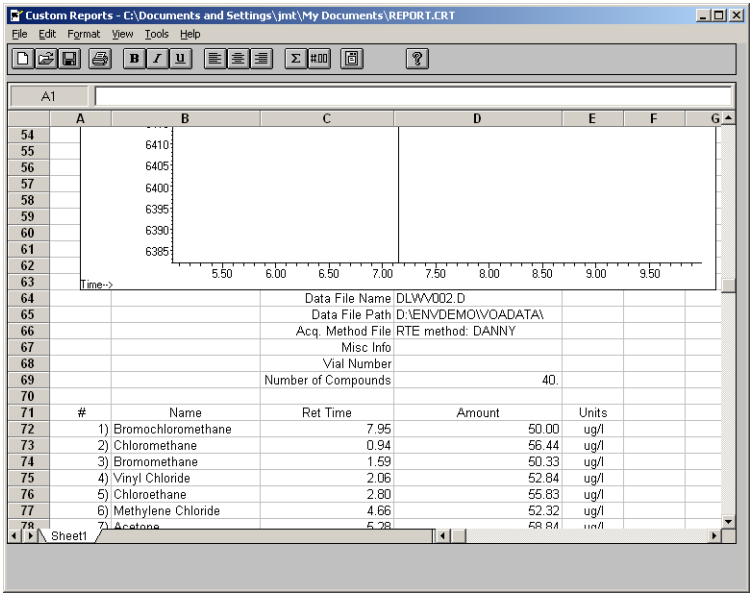
Редактирование отчета

1 Выберите **Quantitate/Custom Reports** (выполнить количественный анализ/настраиваемые отчеты) или щелкните по значку **Custom Report**. Появится окно Control Panel (панель управления). Выберите **Edit Method Report Template** <report.CRT> (редактировать шаблон отчета метода). Под заголовком Method Values (значения метода) появится отчет *(<report.CRT> — это* имя шаблона отчета для изменения).



Если имя отчета не показано, нажмите **Change Method Report Template** (изменить шаблон отчета метода) на панели инструментов и выберите нужный отчет. Когда окно панели управления появится снова, выберите **Edit Method Report Template** (редактировать шаблон отчета метода).

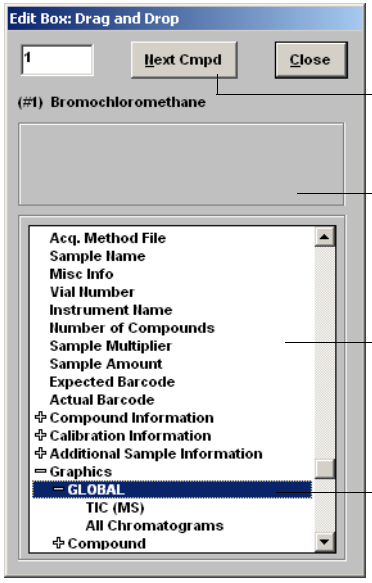
Щелкните **OK**, чтобы открыть шаблон отчета *<report.CRT>*.



2 Можно вносить изменения в любую ячейку таблицы. Для внесения изменений используйте окно **Edit Box** (окно редактирования) (см. ниже). Необходимо периодически сохранять внесенные изменения, чтобы не потерять информацию.

3 Чтобы получить доступ к этому окну, выберите **View/Edit Box** (вид/окно редактирования) или щелкните по значку **Edit Box** (окно редактирования) на панели инструментов.

4 После внесения всех изменений сохраните данный шаблон отчета.



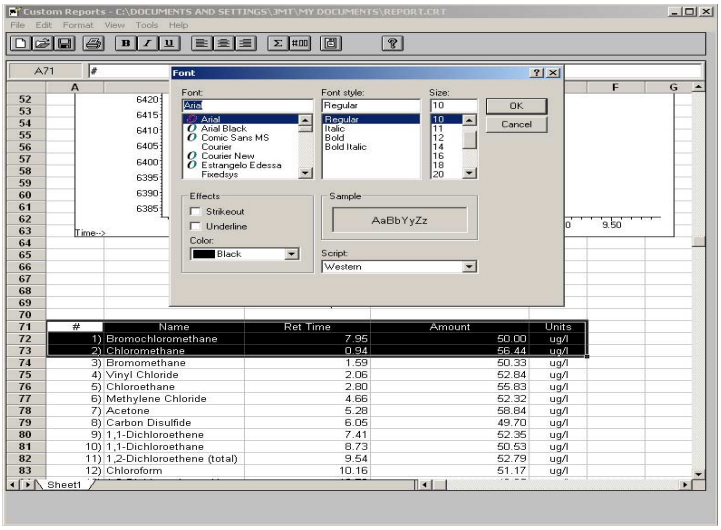
Чтобы просмотреть другие вещества нажмите кнопку Next Cmpd (следующее вещество) или введите номер.

В данном поле содержится описание элемента и его текущее значение.

Можно выбрать элемент и перенести его значение в любую ячейку в таблице.

К отчету можно также добавлять изображение.

Форматирование отчета



При создании шаблонов отчетов программа автоматически выполняет форматирование. С помощью меню Format (формат) или мыши можно самостоятельно настраивать формат отчета. Изменения форматирования сохраняются при сохранении шаблона отчета.

1 Выделите ячейку или несколько ячеек для форматирования.

2 Выберите формат одним из перечисленных способов:

   – В меню Format (формат) выберите нужный параметр. Введите данные в диалоговом окне и щелкните **OK**.

   – Нажмите кнопку на панели инструментов (например, Bold (выделение жирным) или Left Align (выравнивание по левому краю)).

   – Настройте ширину столбца или высоту строки (см. ниже).

3 Настройте необходимый вид отчета.

4 Периодически сохраняйте изменения, чтобы не потерять измененное форматирование. После завершения настройки сохраните шаблон отчета.

Настройка ширины столбца и высоты строки

Настройка высоты строки

1. Наведите указатель под цифру, обозначающую номер строки, вид указателя должен измениться.
2. Нажмите и переместите границу строки вверх или вниз.

Настройка ширины столбца

1. Поместите указатель рядом с буквенным обозначением столбца, вид указателя должен измениться.
2. Нажмите и переместите границу столбца.

Создание нескольких строк одной высоты

1. Нажмите и удерживайте кнопку мыши, а затем выделите номера строк.
2. Настройте высоту одной строки, и все остальные строки будут иметь одинаковую высоту.

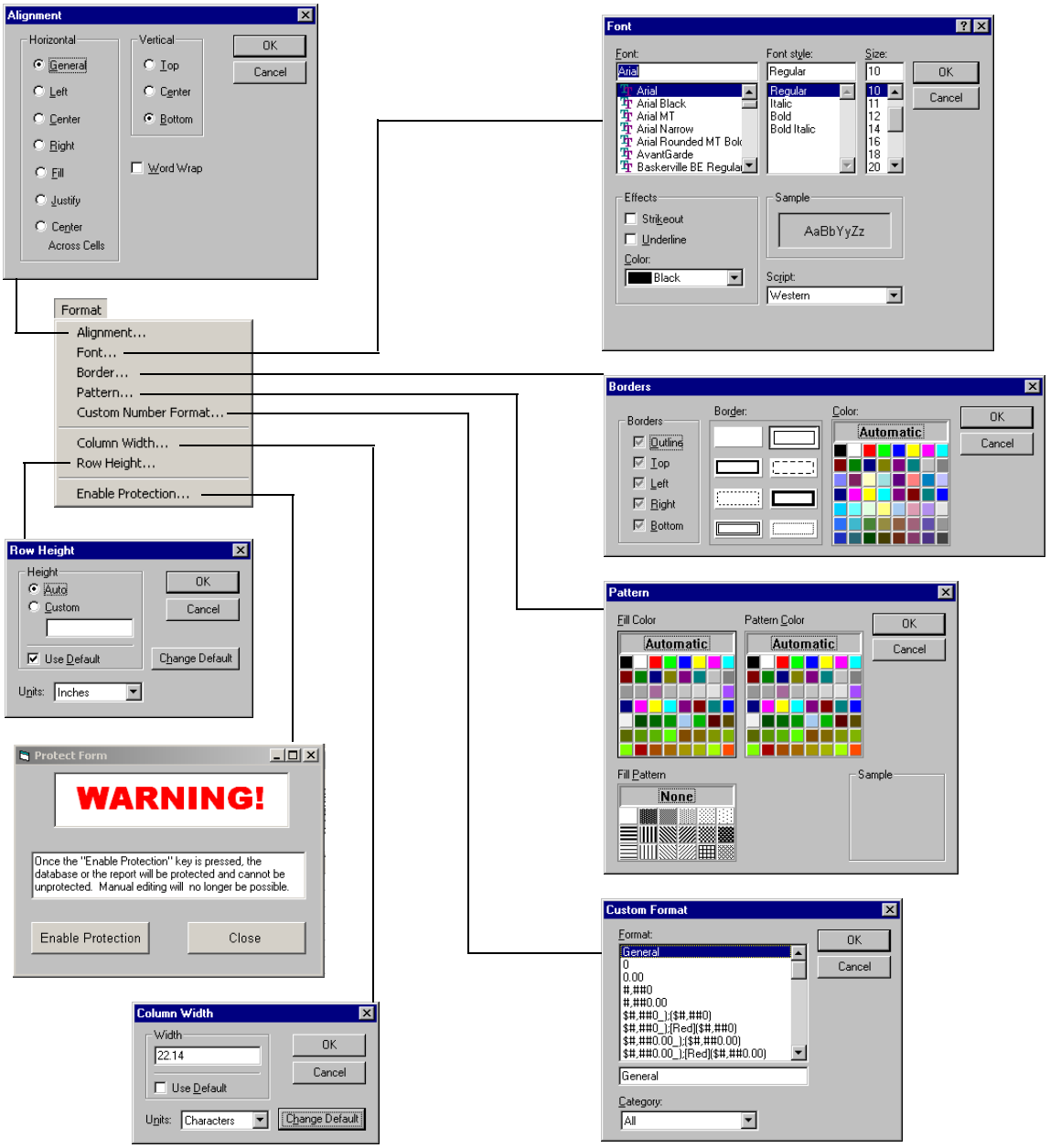
Создание нескольких столбцов одной ширины

1. Нажмите и удерживайте кнопку мыши, а затем выделите буквы, обозначающие столбцы.
2. Настройте ширину одного столбца, и все остальные столбцы будут иметь одинаковую ширину.

Сохранение отчета

1. Выберите **File/Save** (файл/сохранить) или щелкните по значку **Save** (сохранить) на панели инструментов.
2. Введите название файла (*не* вводите расширение CRT) и нажмите **Save**. Появится окно **Link with Method** (связать с методом). Это диалоговое окно позволяет выбрать шаблон в качестве используемого по умолчанию для определенного метода, чтобы он автоматически печатался при запуске этого метода.
3. Пометьте или снимите пометки с необходимых опций и щелкните **OK**.
4. Чтобы завершить работу программы Custom Reports, выберите **File/Save** (файл/сохранить) или щелкните по значку **Save** (сохранить) на панели инструментов.

Меню Format (формат)



Выбор ячеек, строк и столбцов

Выбор группы ячеек

Удерживая левую кнопку мыши, выделите группу ячеек в таблице.

Выбор строки или столбца

Щелкните по номеру строки или букве столбца.

Выбор нескольких строк или столбцов

Удерживая левую кнопку мыши, выделите номера строк или буквы столбцов.

Выбор нескольких не расположенных рядом ячеек

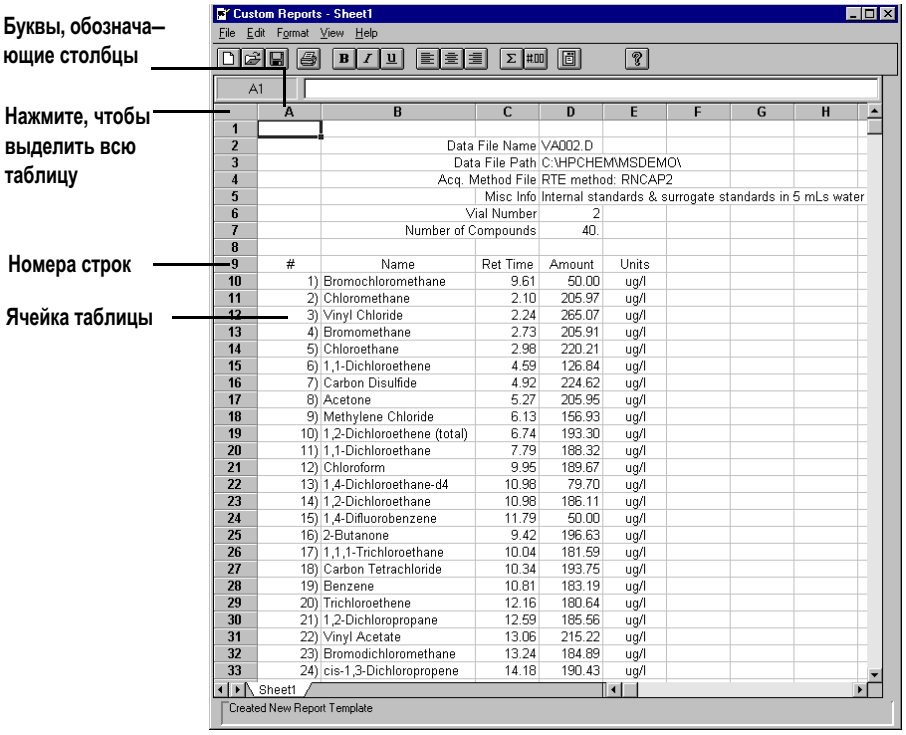
Удерживая клавишу [Ctrl], нажмите на нужные ячейки.

Выбор нескольких не расположенных рядом строк или столбцов

Удерживая клавишу [Ctrl], нажмите на номера строк или буквы столбцов.

Выбор нескольких расположенных рядом элементов

Нажмите на первый элемент (ячейку, столбец, строку) и, удерживая клавишу [Shift], нажмите на последний элемент в группе. Будут выбраны все элементы между первым и последним.


Буквы, обозначающие столбцы
Нажмите, чтобы выделить всю таблицу
Номера строк
Ячейка таблицы
Custom Reports - Sheet1
File Edit Format View Help
A1
Data File Name VA002.D
Data File Path C:\HPCHEM\MSDEMO\
Acq. Method File RTE method: RNCAP2
Misc Info Internal standards & surrogate standards in 5 mLs water
Vial Number 2
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 9.61 50.00 ug/l
2) Chloromethane 2.10 205.97 ug/l
3) Vinyl Chloride 2.24 265.07 ug/l
4) Bromomethane 2.73 205.91 ug/l
5) Chloroethane 2.98 220.21 ug/l
6) 1,1-Dichloroethene 4.59 126.84 ug/l
7) Carbon Disulfide 4.92 224.62 ug/l
8) Acetone 5.27 205.95 ug/l
9) Methylene Chloride 6.13 156.93 ug/l
10) 1,2-Dichloroethene (total) 6.74 193.30 ug/l
11) 1,1-Dichloroethane 7.79 188.32 ug/l
12) Chloroform 9.95 189.67 ug/l
13) 1,4-Dichloroethane-d4 10.98 79.70 ug/l
14) 1,2-Dichloroethane 10.98 186.11 ug/l
15) 1,4-Difluorobenzene 11.79 50.00 ug/l
16) 2-Butanone 9.42 196.63 ug/l
17) 1,1,1-Trichloroethane 10.04 181.59 ug/l
18) Carbon Tetrachloride 10.34 193.75 ug/l
19) Benzene 10.81 183.19 ug/l
20) Trichloroethene 12.16 180.64 ug/l
21) 1,2-Dichloropropane 12.59 185.56 ug/l
22) Vinyl Acetate 13.06 215.22 ug/l
23) Bromodichloromethane 13.24 184.89 ug/l
24) cis-1,3-Dichloropropene 14.18 190.43 ug/l
Sheet1
Created New Report Template

Печать отчетов

Создайте (или загрузите) шаблон отчета

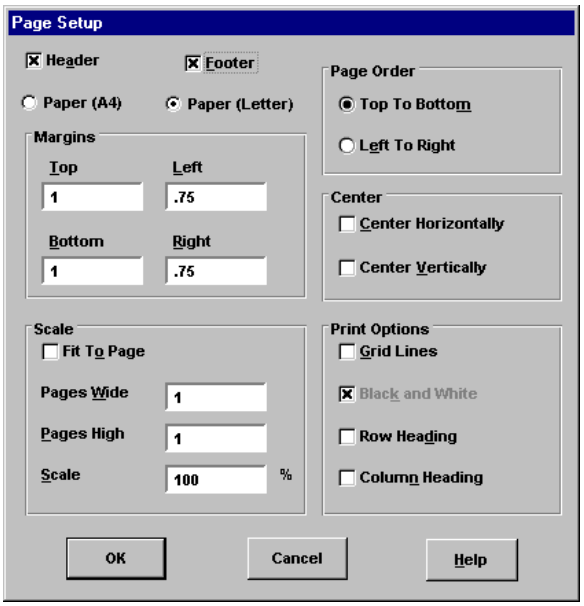
Предварительный просмотр отчета перед печатью

1. Выберите **File/Print Preview** (файл/предварительный просмотр). Появится изображение отчета, которое будет напечатано.
2. Чтобы переходить по страницам, используйте команды **Next Page** (следующая страница) и **Prev Page** (предыдущая страница).
3. Щелкните **Print** (печать). Область предварительного просмотра закроется, и начнется печать.

Печать отчета

1. Выберите **File/Save** (файл/сохранить) или щелкните по значку **Print**. Откроется диалоговое окно **Print** (печать).
2. Настройте параметры (диапазон печати, количество копий, качество печати) и щелкните **OK**.

Чтобы установить ориентацию бумаги, выберите диалоговое окно **File/Page Setup** (файл/параметры страницы) и щелкните **Help** (справка), чтобы просмотреть параметры.



Автоматическая печать отчетов

Существует два способа настройки автоматической печати отчета при запуске метода:

- Создайте (либо загрузите) шаблон отчета, выберите **Print as part of Method** (печать, как часть метода) в разделе Method Values (значения метода) в окне Control Panel (панель управления).
- При сохранении шаблона отчета откроется диалоговое окно **Link with Method** (связать с методом). Выберите **Print Report as part of the Run Method** (напечатать отчет, как часть метода цикла) и щелкните **OK**.

Автоматическая печать нескольких отчетов

1 Создайте (или загрузите) шаблон отчета.

2 Выберите **File/Multiple File Select** (файл/выбрать несколько файлов). Откроется диалоговое окно **Multiple File Select** (выбор нескольких файлов).

3 Выберите каталог (если не выбран), в котором хранятся нужные файлы данных.

4 Выделите файл для печати.

- Выберите файл данных.
- Дважды щелкните по выбранному файлу (или нажмите на стрелку справа).
- Повторите описанные выше действия для оставшихся файлов, пока все нужные файлы не отобразятся в разделе **Files Selected for Processing** (выбранные для обработки файлы).

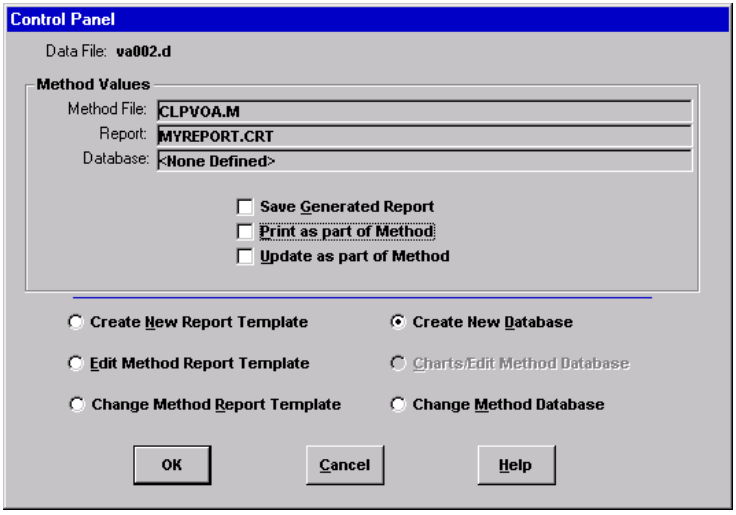
ПРИМЕЧАНИЕ Можно выбирать файлы по одному либо использовать обычный метод Windows для выделения группы файлов.

5 Щелкните **OK**. Файлы будут напечатаны в указанном порядке с использованием текущего шаблона.

Создание базы данных настраиваемых отчетов

Подготовка

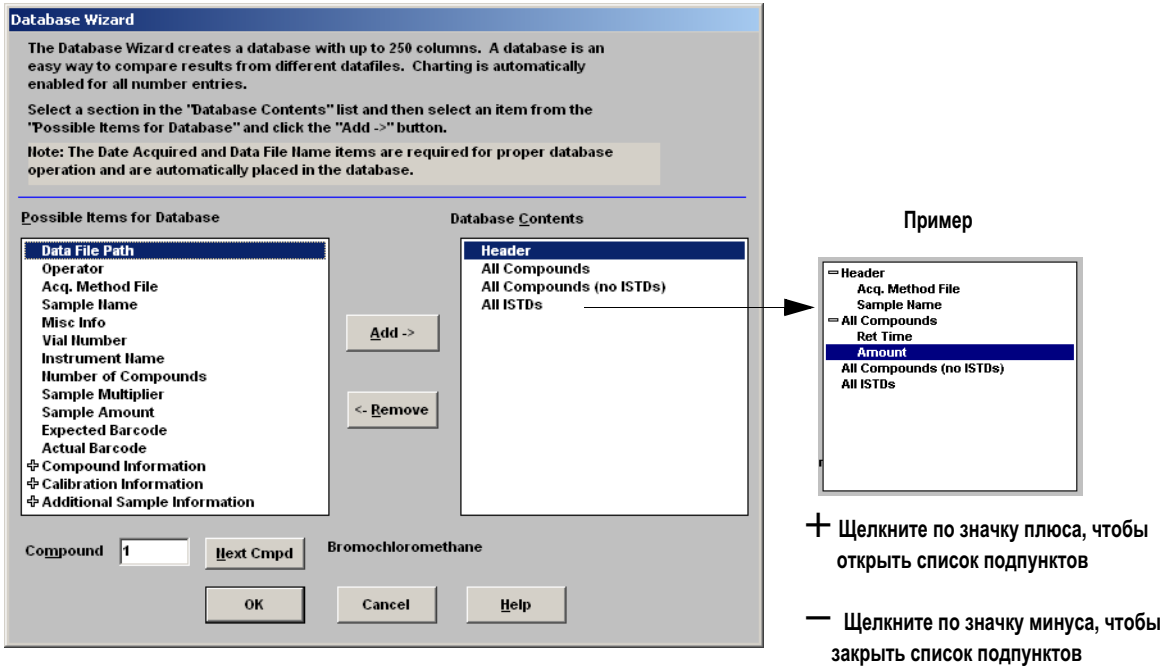
- В режиме просмотра Data Analysis (анализ данных) выберите **Quantitate/Custom Reports** (выполнить количественный расчет/настраиваемые отчеты).
- Если текущий метод не имеет базы данных количественного анализа или файл данных не загружен, программа предложит использовать значения по умолчанию. Щелкните **Yes** (да), появится окно **Control Panel** (панель управления).



Создание базы данных

1 Выберите **Create New Database** (создать новую базу данных) в окне панели управления и щелкните **OK**.

2 Появится окно **Database Wizard** (мастер настройки базы данных). В расположенном слева списке **Possible Item for Database** (возможные элементы базы данных) перечислены все элементы, которые можно включить в базу данных настраиваемых отчетов. В расположенном справа списке **Database Contents** (содержание базы данных) перечислены все элементы, выбранные для включения в базу данных настраиваемых отчетов.



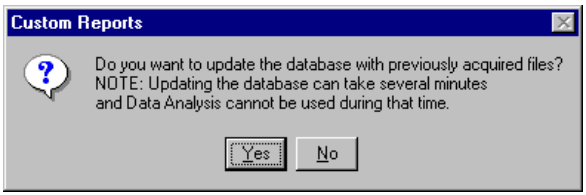
a В списке справа выберите **Database Contents** (содержание базы).

b Выберите нужный элемент в расположенном слева списке **Possible Items for Database** (возможные элементы базы данных).

c Дважды щелкните по выбранному элементу или нажмите **Add** (добавить). Выбранный элемент появится справа под выделенным заголовком.

d Щелкните **OK** после завершения выбора необходимых элементов базы данных.

При нажатии **OK** в окне мастера настройки базы данных появится следующее сообщение, предлагающее обновить базу данных:

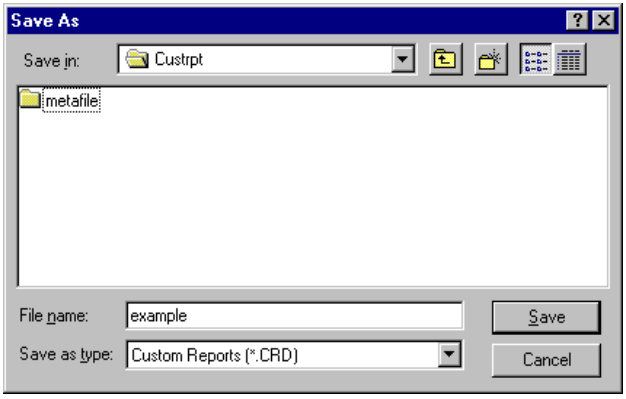


Нажмите **No** (нет), если не требуется выполнять обновление базы данных. Появится окно **Control Panel** (панель управления).

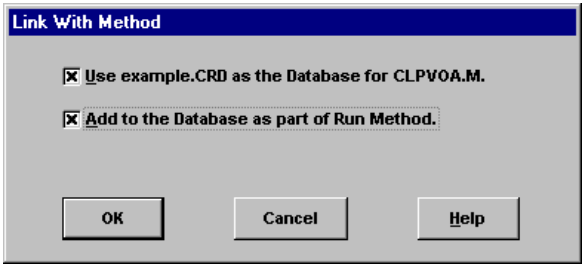
3 В противном случае, чтобы обновить базу данных, выполните следующее.

– Нажмите **Yes** (да), появится диалоговое окно **Multiple File Select** (выбор нескольких фалов). Выберите файлы для добавления в базу данных и щелкните **OK.**

4 В окне **Save As** (сохранить как) введите имя файла и нажмите **Save** (сохранить).



5 Когда появится диалоговое окно **Link With Method** (связать с методом), пометьте или снимите пометки с необходимых опций и щелкните **OK.** База данных будет обновлена.

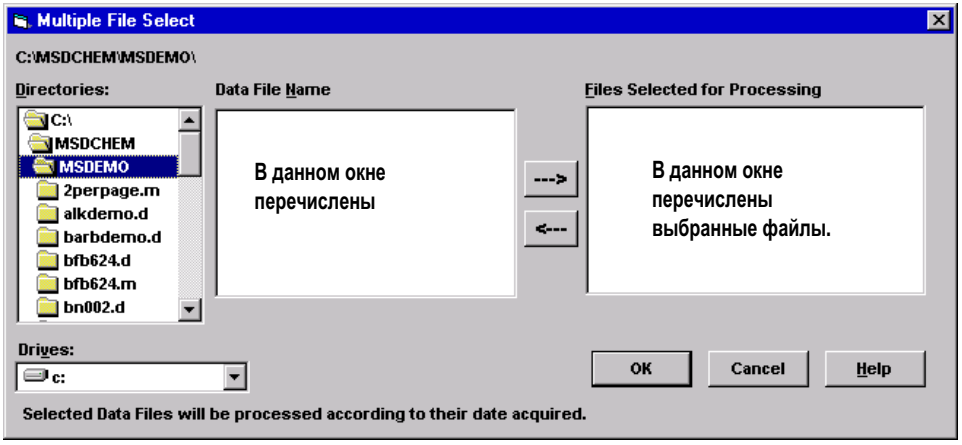


Выбор нескольких файлов данных

Данное диалоговое окно позволяет напечатать одновременно несколько отчетов или загрузить несколько выбранных файлов в базу данных

Чтобы открыть это окно, выберите **File/Multiple File Select** (файл/выбор нескольких файлов).

1. Выберите каталог, в котором хранятся нужные файлы данных.
2. Выберите файл в окне **Data File Name** (имя файла) и нажмите на стрелку справа (либо дважды щелкните по названию файла).
3. Щелкните **OK** для обработки выбранного файла.



Выбор нескольких расположенных рядом файлов

Щелкните по нужному файлу и, удерживая кнопку мыши, выделите группу файлов.

Или

Нажмите на первый нужный файл. Удерживая клавишу [Shift], щелкните по последнему файлу в группе.

Выбор нескольких не расположенных рядом файлов

Удерживая клавишу [Ctrl], нажмите на каждый файл.

Отмена выбора

Удерживая клавишу [Ctrl], нажмите на выделенный файл.

Для отчетов

Выбранные файлы данных будут напечатаны с использованием текущего шаблона. Отчеты выводятся на печать в том порядке, в котором отображаются файлы.

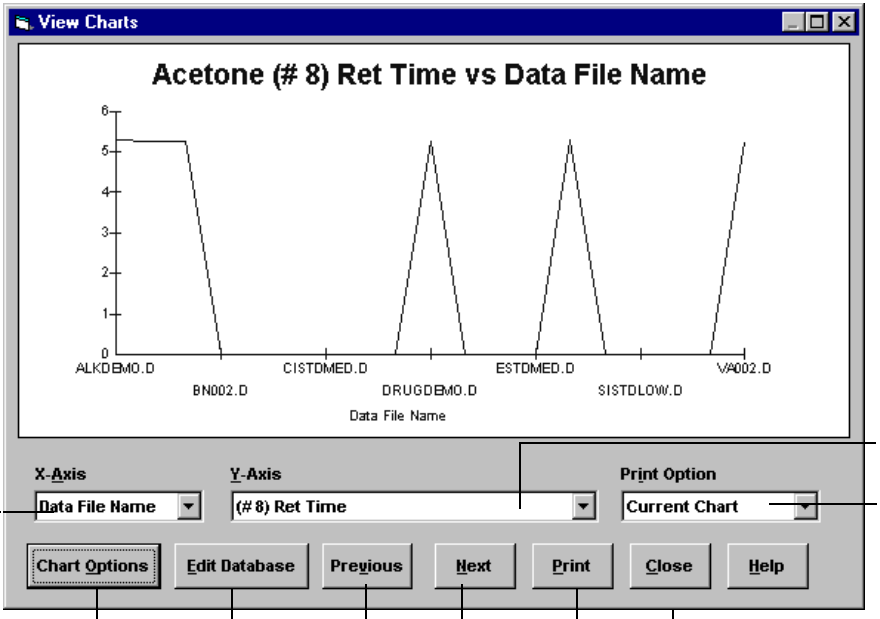
Для баз данных

Выбранные файлы загружаются в текущую базу данных. Файлы автоматически сортируются в хронологическом порядке по дате занесения в базу данных.

Просмотр и печать графиков

При выборе **Charts/Edit Method Database** (графики/редактировать базу данных метода) в окне панели управления появится диало–говое окно. Щелкните **Charts** (графики) на панели инструментов и выберите **Charts/View Charts** (графики/просмотреть графики). Это окно используется для просмотра и печати графиков.

ПРИМЕЧАНИЕ Щелкните по графику, чтобы открыть диалоговое окно **Individual Chart Options** (параметры графика).



Выбор нужного элемента графика на X–Axis (ось X). Значениями по умолчанию являются имя файла и дата.

Выбор нужного элемента графика на Y–Axis (ось Y) (только числовое значение).

Позволяет выбрать печать текущего графика и печать всех графиков данной базы данных.

Открытие диалогового окна Chart Options (свойства таблицы).

Выход из окна View Charts (просмотр графиков) в режим редактирования текущей базы данных.

Переход к следующему или предыдущему графику в списке Y–Axis (ось Y).

Печать текущего графика или всех графиков, указанных в окне Print Option (параметры печати).

Выход из окна View Charts (просмотр графиков) в окно панели управления.

Кнопки на панели инструментов программы Custom Reports


Открытие окна Control Panel (панель управления).


Открытие файла шаблона настраиваемого отчета (.crt) или базы данных (.crd).


Сохранение отчета или базы данных и открытие диалогового окна Link With Method (связать с методом).


Печать отчета или базы данных.


Применение (или отмена) выделения жирным к выделенному тексту.


Применение (или отмена) выделения курсивом к выделенному тексту.


Применение (или отмена) выделения подчеркиванием к выделенному тексту.


Выравнивание содержимого выбранных ячеек по левому краю.


Выравнивание содержимого выбранных ячеек по центру.


Выравнивание содержимого выбранных ячеек по правому краю.


Вставка в выбранную ячейку формулы, которая суммирует предыдущие ячейки.


Открытие диалогового окна Custom Format (настройка форматирования).


Открытие диалогового окна Edit Box: Drag & Drop (окно редактирования: перенос).


Открытие диалогового окна View Charts (просмотр графиков). Данная кнопка доступна только в режиме работы с базами данных.


Открытие первой страницы интерактивной справочной системы.



Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc.

Отпечатано в США, июнь 2006 г.

G1701-91061