

安捷伦化学工作站



化学工作站 B.03.01 版升级 准备指南



Agilent Technologies

注意

© 安捷伦科技有限公司, 1994-2007

根据美国和国际版权法, 未经安捷伦公司书面许可, 本书内容不得以任何形式复制 (包括电子存储修改或翻译)。

Microsoft® 是微软公司在美国的注册商标。

手册部件号

G2170-97228

版本

2007年2月

德国印刷

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

软件修订版

1. 本指南适用于安捷伦化学工作站软件 B.03.0x 版。
2. 本指南中所有关于 A.0X.0X/B.01.03 版本以及 16 位版本化学工作站的内容都仅适用于英文版。

声明

本书内容如有改变, 恕不另行通知。安捷伦科技公司对本材料, 及由此引出的任何商务和特种用途不承担责任。安捷伦科技公司对本手册中可能有的错误或与装置、性能及材料使用有关内容而带来的意外伤害和问题不负任何责任。如果安捷伦与用户对本书中的警告术语有不同的书面协议, 这些术语与本书中的警告术语冲突, 则以协议中的警告术语为准。

技术许可

本书对硬件和 / 或软件的介绍已获得特许, 未经许可, 不得使用或复制。

权利限制说明

如果在履行美国政府某项重要合同或转包合同时要用此软件, 将以以下方式提供并授权软件: DFAR 252.227-7014 (1995年6月) 定义的“商业计算机软件”; FAR2.101 (a) 定义的“商业项目”; FAR 52.227-19 (1987年6月) 或任何同等机构规定或合同条款定义的“受限计算机软件”。软件的使用、复制或公开必须遵守安捷伦科技公司的标准商业许可条款的规定, 美国政府的任何非 DOD 部门和机构所拥有的权利不得超出 FAR 52.227-19(c)(1-2) (1987年6月) 中定义的“有限权利”的范围。美国政府用户拥有的权利不得超出 FAR 52.227-14 (1987年6月) 或 DFAR 252.227-7015 (b)(2) (1995年11月) 中定义的“有限权利”的范围 (适用于所有技术数据)。

安全警告

小心

小心提示表示危险。提醒您在操作过程中注意, 如果执行不当, 将影响产品或丢失重要数据。不要忽视小心提示。

警告

警告提示表示危险。提醒您在操作过程中注意, 如果执行不当, 将导致人身伤害或死亡。不要忽视警告提示。

内容提要

本指南将介绍安捷伦化学工作站软件的升级和配置分析系统的步骤。进行化学工作站升级前应参考本文档。

1 简介

本章将概述与安捷伦化学工作站以前的版本相比 B.03.01 版中所做的更改以及本指南的内容。

2 升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件

本章列出了成功运行安捷伦化学工作站软件的最低要求。

其中详细说明了要确保安捷伦化学工作站正常运行所必须满足的要求。这些要求包括：PC 类型和性能、网络协议、打印机类型、 GPIB/LAN 卡、 USB-GPIB 接口、操作系统和分析仪器的固件版本。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版

本章将介绍如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版（升级过程中包括附加解决方案）。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版

本章涵盖了与以前的版本相比较为显著的更改（例如，由于长文件名所做的图形和设计更改）。升级软件包附带的其他手册对新功能进行了详细说明，例如，“了解您的化学工作站”中对新的积分参数的说明。

对于从 A 版系统进行更新，额外说明了从 16 位到 32 位化学工作站的升级过程和修改。

5 法规适应性认证说明

本章对软件升级认证进行了概要说明，并介绍了关于操作认证/性能验证 (OQ/PV) 用法的修改。

6 对自定义解决方案的影响

本章将介绍有关使用和编写自定义解决方案的信息以及适应 Unicode 格式的必要操作。

7 附录

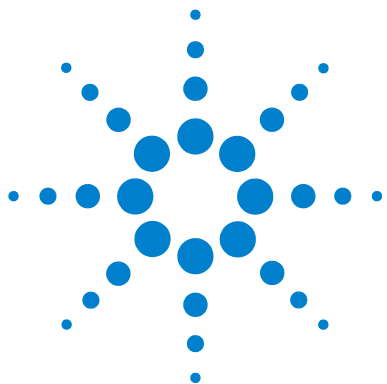
目录

1	简介	9
	安捷伦化学工作站 B.03.01 版简介	10
	化学工作站 B.03.01/B.02.01 版中的新技术和更改的技术	11
	关于本手册	13
	可用的用户说明文档	14
2	升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件	15
	安捷伦化学工作站 PC 硬件详细信息	16
	安捷伦化学工作站的最低 PC 硬件要求	17
	非 HP 计算机	17
	用于安捷伦化学工作站的打印机	18
	高级电源管理（不受分析硬件支持）	20
	操作系统要求	21
	GC 仪器固件要求	22
	通讯元件	24
	使用 LAN 通讯	24
	使用 GPIB 和 USB-GPIB 通讯	25
3	如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版	27
	从早期的化学工作站进行升级	28
	化学工作站系统的常规升级步骤	28
	化学工作站 B.03.0x 版中的许可	28
	将化学工作站从 B.0x.0x 版自动升级到 B.03.01 版	29
	仪器特定的升级说明	29
	GC 特定的升级说明	30
	GC 色谱柱目录	30
	35900E	30

安装了附加解决方案的化学工作站系统	
升级步骤	31
化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品	32
使用安装的附加解决方案进行升级	34
使用附加解决方案从化学工作站 B.0x.0x 版进行升级	34
常规附加解决方案	36
ChemStore (最高为 B.03.02)	36
ChemStore (B.03.02 SR1 以上)	36
安全软件包	36
LC 特定的附加解决方案	37
GC 特定的附加解决方案	38
保留时间锁定	38
助手	38
顶空	38
配置您的仪器	39
	40
4 首次启动化学工作站 B.03.01 版	41
B.03.01 中引入的启动更改	43
B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改	46
浏览项目	46
浏览按钮	46
化学工作站资源管理器	46
对“方法和运行控制”视图使用的增强	49
样品信息	49
序列参数	49
序列表	50
使用首选项采集序列数据	50
采集执行重新校准的序列数据	52
数据文件结构	53
可用的方法	54
对“数据分析”视图使用的增强	55

浏览表	55	
“首选项” – “信号 / 浏览” 选项卡		57
浏览表浏览和重新处理	57	
长文件名	59	
命名规则	62	
化学工作站文件名和子目录的最大长度		63
前缀 / 计数器	64	
从化学工作站 A.xx.xx 版调用数据		65
数据文件	65	
方法	65	
序列	66	
超级序列 (仅适用于 LC 化学工作站)		66
批量文件	66	
报告样式	66	
紫外库 (仅适用于 LC 3D 化学工作站)		67
5 法规适应性认证说明	69	
升级 B.03.01 版的常规法规适应性认证说明		70
概述	70	
软件升级验证	70	
升级验证	71	
升级 HPLC 1100 OQ/PV 方法和序列文件		72
适用于新安装的 HPLC 1100 OQ/PV 示例文件		72
6 对自定义解决方案的影响	73	
宏解决方案	74	
自定义工具栏	74	
自定义菜单栏	74	
对化学工作站宏的数据结构的影响		74
专有文件夹创建启用	74	
专有文件夹创建关闭	75	

7 附录	77	
化学工作站报告		78
概述	78	
示例色谱 1	78	
示例色谱 2	78	
索引	81	
内容提要		84



1 简介

安捷伦化学工作站 B.03.01 版简介	9
化学工作站 B.03.01/B.02.01 版中的新技术和更改的技术	10
关于本手册	12
可用的用户说明文档	13

安捷伦化学工作站 B.03.01 版简介

安捷伦科技很荣幸地向您介绍 LC、GC、A/D、CE、CE/MS 和 LC/MS 多功能化学工作站的新版本。多功能化学工作站系列是一种广泛应用的系统，它可以同时提供仪器控制以及数据采集和管理。该系统采用模块化设计，可以随实验需要的增长进行扩展和增加。该系统提供了一种新的设计、基于树状的浏览以及全新的、灵活的数据管理功能。



化学工作站 B.03.01/B.02.01 版中的新技术和更改的技术

化学工作站 B.03.01 版中包括以下更改和新功能：

- 化学工作站软件与双核处理器兼容
- 化学工作站引入了两种数据存储方式，用户可以选择适合工作流程的数据存储方式：
 - 方式 1：专有文件夹创建启用 – 保持样品数据的一致性
 - 方式 2：将所有数据保存在一个目录中，如同以前的化学工作站版本那样（专有文件夹创建关闭）
- 可用于自定义报告格式的性能参数
- 方便地在浏览表中检查采集参数
- 自定义在线帮助中的目录
- 用于结果数据的增强型 XML 接口
- 针对 GC
 - 对 Agilent 7890A GC 新系统的引入和完整支持
 - 从 Agilent 6890 到 Agilent 7890A GC 的方法转换
 - Agilent 7890A GC 支持的 GC 重叠进样
 - 用户界面支持输入负的流量设定值，可用于连接到第二个压力源的以 Agilent 7890A GC 系统反冲的色谱柱。负的流量表示流向更改
 - 将保留时间锁定 (RTL) 集成到 GC 化学工作站软件中
 - 支持新的安捷伦实验室监控和诊断软件
- 针对 LC
 - 支持 G1315D Agilent 1200 二极管阵列检测器
 - 支持 G1365D Agilent 1200 多波长检测器
 - 支持 G1329B Agilent 1200 自动进样器 SL

- 针对 LC/MS
 - 引入并完全支持新的 Agilent 6100 Single Quad 系列 LC/MS G6110A、G6120A、G6130A 和 G6140A LC/MS
 - 以中文和日文本地化的 LC/MS 软件

化学工作站 B.02.01 版中包括以下更改和新功能：

- 新的和改进的化学工作站用户界面设计
- 新的基于树状和基于表格的浏览，可以在多种化学工作站视图中进行快速和灵活的数据处理
- 数据、方法和序列的灵活存储位置
- 使用数据分析浏览表改进的数据检查和重新处理功能
- 新的打包概念保证了序列和单个运行样品数据的一致性
- 附加信号选项可以分配特定方法的信号选项以改进数据检查
- 可以在数据分析方法中保存手动积分事件以及新采集的数据文件
- 集成了在线帮助的化学工作站教程，使您可以在使用自己的方法和数据工作的同时学习软件
- 对高分辨率显示器和可用屏幕空间的增强利用
- 支持 G1312B Agilent 1200 二元泵 SL（包括脱气机）
- 支持 G1367C Agilent 1200 高性能自动进样器 SL
- 支持 G1314B Agilent 1200 可变波长检测器 SL
- 支持 G1316B Agilent 1200 柱温箱 SL
- 支持 Agilent 1200 LC 系列
- 直接链接到新的 Agilent LC 诊断工具的软件
- 软件支持新的 G1315C Agilent 1100 二极管阵列检测器 (DAD) 和新的 G1365C Agilent 1100 多波长检测器 (MWD)
- 支持多模式源
- 支持多方法 FIA
- 支持 NIST 谱库搜索算法的最新版本
- 支持用于数据交换的 NETCDF 协议

1 简介

安捷伦化学工作站 B.03.01 版简介

- 支持较长的文件名
- 增强的积分仪以及增强的积分事件和新的积分参数
- 软件的安装速度、启动速度以及在视图之间的切换速度更快
- 序列编辑器中用户可以配置的色谱柱
- 优化为 1024 × 768 显示分辨率的软件屏幕和窗口
- 通过“添加 / 删除”对话框简化了从操作系统的卸载
- 用于双定量环自动进样器 (HPLC 1100) 的新的重叠进样模式
- 支持 6850 系列 GC 的增强功能
- 支持 G2924AA 集成了顶空控制软件的 Agilent G1888A 和 G1289B/G1290B 顶空进样器
- 安装 GC 化学工作站过程中，自动安装助手软件

关于本手册

注意

“安捷伦化学工作站 B.03.01 版升级准备指南”仅适用于升级现有的化学工作站的用户。本文档仅涉及与化学工作站的早期版本相比较所做的更改。

注意

仅 Windows XP 支持化学工作站 B.03.01 版。Windows NT 4.0 或 Windows 2000 都支持化学工作站 A.09.03，要升级到化学工作站 B.03.01 版，必须在升级化学工作站之前更新操作系统。请同时检查是否满足 PC 最低要求，从第 17 页开始的第 2 章“安捷伦化学工作站的最低 PC 硬件要求”。

本文档将对现有的安捷伦化学工作站系统的以下两个升级过程进行说明：

从 A.09.03 或更高版本升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版

从 B.0x.0x 升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版

本档概述了更新的技术部分，以及特定的新功能的影响和对系统所做的更改。如果某章只是关于从版本 A 升级到版本 B，则标题中会加入该信息。

用户手册和在线帮助中对新功能进行了详细说明。

“安装您的化学工作站”和“了解您的化学工作站”手册已经相应地进行了更新并将随新的软件版本一起发布。

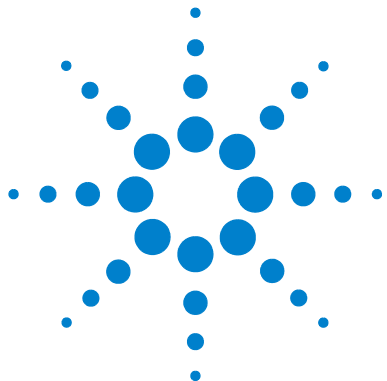
可用的用户说明文档

安捷伦化学工作站产品说明文档由包含参考信息的手册和有关任务标题的在线说明文档组成。硬拷贝手册以及所需的 Adobe Acrobat Reader 也位于 CD-ROM（CD 2 – 用户文档和附件）中的 *manuals* 目录下。

有关安装其他分析仪器（例如，布线，即连接至分析仪器）的详细信息，请参阅系统相应的**安装化学工作站**手册。

1 简介

安捷伦化学工作站 B.03.01 版简介



2

升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件

安捷伦化学工作站 PC 硬件详细信息	16
安捷伦化学工作站的最低 PC 硬件要求	17
非 HP 计算机	17
用于安捷伦化学工作站的打印机	18
高级电源管理（不受分析硬件支持）	20
操作系统要求	21
GC 仪器固件要求	22



安捷伦化学工作站 PC 硬件详细信息

本部分说明要成功安装和操作安捷伦化学工作站所必须满足的 PC 硬件和操作系统要求。

安捷伦化学工作站 B.03.01 及更高版本需要 Intel Pentium IV 1.5 GHz（或更高）的个人计算机的支持。

如果使用 GPIB 接口，则需要一个 PCI 插槽。有关 GPIB 和 USB-GPIB 接口要求的详细信息，请参阅 LC 或 CE 安装手册。

如果分析设备要使用 LAN 连接，则需要操作系统支持的 LAN 接口，而且必须安装 Microsoft TCP/IP 协议。

所有 PC 硬件和外围设备必须列在 Microsoft 硬件兼容性列表 (HCL) 中，该列表可以从互联网上的 Microsoft 主页 (<http://www.microsoft.com>) 中获得。如果 HCL 中未列出您的 PC 硬件，则安捷伦化学工作站软件可能无法在该系统上正常运行。

安捷伦化学工作站的最低 PC 硬件要求

表 1. 基于 Windows XP 系统的最低 PC 硬件要求

处理器	Pentium IV, 1.5 GHz
屏幕分辨率	Super VGA (1280 × 1024)
大容量存储器	40 GB 硬盘和 CD-ROM
单台 2D/3D 仪器的最小内存	512 MB RAM
多仪器的最低内存	512 MB RAM
使用 Agilent ChemStore C/S 数据库模块 (B.03.03 SR2 版) 进行的仪器配置	512 MB RAM

非 HP 计算机

安捷伦化学工作站可以在各种兼容的个人计算机上成功运行，条件是这些计算机配备的附件和外围设备符合适用于 Intel PC 平台和 Microsoft Windows 操作系统的编程标准。

安捷伦科技主要在惠普设备上测试了安捷伦化学工作站软件。本手册中列出的所有配置信息均已针对惠普 / 康柏 Kayak、Vectra 和 EVO 计算机进行了优化。介绍的这些配置可能尚未对其他供应商的 PC 进行优化。例如， GPIB 接口的标准配置可能与非 HP 计算机的内存配置存在冲突。

其他附件接口板可能引起硬件相关的资源 (I/O 端口、中断设置、DMA 通道) 发生冲突。

对于非惠普计算机，请使用制造商提供的安装实用程序配置您的计算机和附件。检查提供的说明文档以避免安装过程中可能的资源冲突，尤其是有关 GPIB 接口的配置。

用于安捷伦化学工作站的打印机

安捷伦化学工作站可以使用与操作系统兼容的打印机。安捷伦科技没有对 Windows 环境支持的所有打印机和打印机驱动程序的组合进行测试。打印性能和结果可能会随其他制造商的打印机和相应驱动程序发生变化。

安捷伦支持已使用安捷伦化学工作站 A B.03.01 版成功测试的打印机。已成功测试的打印机的完整列表位于化学工作站 CD-ROM (CD 2 – 用户文档和附件) 的 support\drivers 目录下的“readme.txt”文档内。本手册印刷之时, 表 2 中列出的打印机均已成功通过测试。

表 2. 已使用安捷伦化学工作站 B.03.01 版进行了成功测试的打印机

打印机型号	驱动程序注释
HP LaserJet 2200d	HP PCL 6
HP LaserJet 2300dn	HP PCL 6
HP LaserJet 2300D	HP PCL5e 或 PCL 6
HP LaserJet 2420D	HP PCL5e 或 PCL 6
HP LaserJet P3005D	HP PCL6

注意

请注意, 此列表并不全面, 其中并不包括本手册发行之后加入的可用打印机和打印机驱动程序。如果您的打印机未在此处列出, 这并非表示您的打印机不能与安捷伦化学工作站一起使用。只表示尚未对它进行测试。

注意

建议您使用 Hewlett-Packard LaserJet 打印机。

由于受打印性能（每分钟少于 8 页）和纸盒容量（少于 150 页）的限制，某些低端打印机可能不适合在无人照管的情况下进行安捷伦化学工作站的高数据量操作（例如，多仪器配置或运行进样数量大而运行时间相对较短（例如小于 5 分钟）的大序列时），即使这些打印机包括在第 18 页上的表 2（“已使用安捷伦化学工作站 B.03.01 版进行了成功测试的打印机”）中也不行。

2 升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件

安捷伦化学工作站 PC 硬件详细信息

高级电源管理（不受分析硬件支持）

许多现代 PC 的 BIOS 和操作系统都支持高级电源管理 (APM)。指定的空闲时间过后，BIOS 会通过关闭计算机的显示器、硬盘和其他设备来将系统切换到待机模式。这样可以减少 PC 电源消耗并降低内部时钟频率以节约能源。

内部时钟速度的降低和硬盘速度的减缓可能是 PC 无法处理仪器控制和数据采集的实时需求的表现。通常，这将导致内部仪器缓冲区溢出，即数据丢失。安捷伦科技建议当您的化学工作站软件和分析仪器正在运行时，关闭系统的 APM。

操作系统要求

化学工作站 B.03.01 版提供英文版和日文、中文的本地化版本。根据您选择的化学工作站，需要相应的 Microsoft Windows XP Professional (*Service Pack 2*) 操作系统：

- Microsoft Windows XP Professional (*Service Pack 2*) 英文版
- Microsoft Windows XP Professional (*Service Pack 2*) 日文版
- Microsoft Windows XP Professional (*Service Pack 2*) 中文版

注意

安捷伦无法对其他非英文版操作系统提供支持声明。

Window XP Professional 是安捷伦化学工作站数据采集和分析软件唯一支持的操作系统。

有关支持的操作系统的最新信息，请与您当地的服务和支持中心联系。

注意

Windows 2000 Professional 不支持化学工作站 B.03.01 版。

如果使用 LAN 连接分析仪器，则必须安装和配置 Microsoft TCP/IP 协议。

2 升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件

GC 仪器固件要求

GC 仪器固件要求

GC 化学工作站软件需要以下最低固件版本以与表 3 中列出的设备一起使用。

表 3. GC 仪器固件要求

GC 仪器	产品编号	固件版本	部件号
GC 系统			
Agilent 7890A GC 系统	G3440A	A.01.01	未指定*
Agilent 6890N	G1530N、 G1540N	GC 固件 N.05.05 LAN 组件 04.7B3	未指定 *
Agilent 6890Plus、 6890A	G1530A、 G1540A	A.03.08	G1530-61706
Agilent 6850 系列 GC 序列号 >= US10243001	G2630A	GC 固件 A.05.04 LAN 组件 04.7B3	未指定 *
Agilent 6850 系列 GC 序列号 <= US00003200	G2630A	A.03.03	未指定 *
适用于 6850 的手持控制 模块	G2629A	A.05.06	未指定 *
5890 系列 II	5890	A.03.02	主板 ROM 05890-80320 ; GPIB/RS232 PCB 19257-80040
GC 自动进样器			
7683B 自动进样器	G2913A	A.11.02	未指定 *

表 3. GC 仪器固件要求

GC 仪器	产品编号	固件版本	部件号
7673C 自动进样器	G1513A	A.09.15	未指定 *
7683A/6890Plus ALS 接口板	G2612A	A.02.01	未指定 *
7683A 自动进样器模块	G2613A	A.10.07	未指定 *
6850 自动液体进样器	G2880A	A.10.05	未指定 *
GC 样品盘			
7673C 样品盘	18596C	没有版本	
与 5890 配套的 7683 ALS 样品盘	G2916A	A.02.01	未指定 *
7683A 样品盘模块	G2614A	A.02.01	未指定 *
GC 控制器			
7673C ALS 控制器	G1512A	A.01.12	未指定 *
适用于 6890A 和 5890 系列 II GC 的 7683B ALS 控制器	G2912A	A.02.01	未指定 *
A/D 转换器			
35900E	35900E	E.01.02	未指定 *

* Agilent 7890A GC 系统、6890N、6850、自动进样器 (ALS) 和 35900E 仪器有 ROM 闪存。GC 固件更新实用程序位于化学工作站 CD-ROM (CD 1 – 安装) 的 Support 目录下。
可以从以下安捷伦科技网站下载最新固件：
http://www.chem.agilent.com/scripts/cag_firmware.asp

有关安装其他分析仪器（例如，布线，即连接至分析仪器）的详细信息，请参阅系统相应的“安装您的化学工作站”手册。

通讯元件

使用 LAN 通讯

如果您使用标准 LAN 连接来连接仪器，则必须确保 PC 和分析仪器之间可以正常通讯。该通讯使用的是 TCP/IP 协议，需要将该协议作为网络协议安装在您的 PC 上。用于将分析仪器连接到 LAN 的 LAN 组件或 Jet Direct 或 G1369A LAN 卡的当前配置在升级过程中保持不变。

从 GPIB 控制仪器进行升级时，必须安装所需的 LAN 通讯元件，并重新配置您的仪器。在相应的特定色谱技术的“安装您的化学工作站”手册中对必要的步骤进行了描述。

使用 LAN 通讯或从 GPIB 移到 LAN 连接的用户必须使用安捷伦 BootP 服务作为化学工作站 B.03.01 版的通讯元件。当前使用 CAG BootP 服务器的用户需要删除该元件。由于 CAG BootP 服务器将不再受支持，必须安装安捷伦 BootP 服务。安捷伦 BootP 服务程序可以从化学工作站 CD-ROM (CD 1 - 安装) 中获得。

使用 GPIB 和 USB-GPIB 通讯

某些通过 GPIB 与安捷伦化学工作站 A.xx.xx 版进行通讯的分析仪器可能继续使用 GPIB 连接以与化学工作站 B.03.0x 版进行通讯。此外，还可以使用 USB-GPIB 接口。有关详细信息，请参阅第 25 页的表 4。

注意

使用 GPIB 通讯的 Agilent LC 1100 和 35900E 不再受化学工作站 B.03.01 版的支持。这些系统需要先升级到 LAN 连接，才能升级到化学工作站 B.03.0x 版。

表 4. GPIB 与分析硬件兼容性表

仪器类型	Agilent 82350 A	Agilent 82350 B	Agilent USB-GPIB 接口 82357A
HP 1090 LC	是	是	是
HP 1046 FLD	是	是	是
HP 1049 ECD	是	是	是
G1600A 毛细管电泳	是	是	是

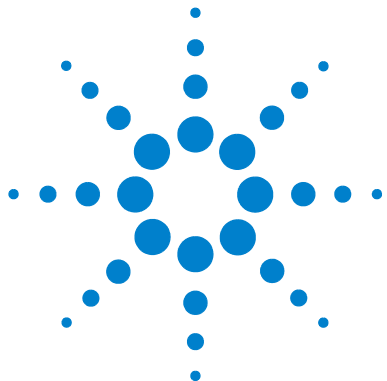
小心

GPIB 板对静电敏感，因此触摸时应谨慎。一定要拿住板的边缘，而不要触摸电子组件。在安装过程中应使用接地垫和腕带等抗静电设备。

在相应的特定色谱技术的“安装您的化学工作站”手册中对配置 GPIB 卡、USB-GPIB 接口和相关的仪器参数的必要步骤进行了描述。

说明 SICL 库的安装以控制 GPIB 系统的文档位于化学工作站 CD-ROM (CD 2 – 用户文档和附件) 的 Manual 下的 Installation 文件夹中。

2 升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版的必备条件 通讯元件



3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版

从早期的化学工作站进行升级	28
化学工作站系统的常规升级步骤	28
将化学工作站从 B.0x.0x 版自动升级到 B.03.01 版	29
仪器特定的升级说明	29
GC 特定的升级说明	30
安装了附加解决方案的化学工作站系统 升级步骤	31
化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品	32
使用安装的附加解决方案进行升级	34
使用附加解决方案从化学工作站 B.0x.0x 版进行升级	34
常规附加解决方案	36
LC 特定的附加解决方案	37
GC 特定的附加解决方案	38
配置您的仪器	39



从早期的化学工作站进行升级

化学工作站系统的常规升级步骤

注意

升级系统之前，强烈建议您对整个系统进行备份。

注意

在开始升级之前，请仔细阅读有关常规升级以及特定仪器的升级信息的小节。如果您已安装了附加解决方案软件，请先阅读从第 31 页开始的第 3 章，“安装了附加解决方案的化学工作站系统升级步骤”一节，然后再开始升级。请检验您的附加解决方案在化学工作站 B.03.01 上是否受支持。如果您已使用 GPIB 通讯，请先阅读从第 24 页开始的第 2 章，“通讯元件”一节，然后再开始升级。

化学工作站 B.03.0x 版中的许可

使用化学工作站 A.xx.xx 版的许可号通常可以升级到化学工作站 B.03.0x 版。此外，还可以使用为化学工作站 A.xx.xx 版购买的许可号进行全新安装。

安捷伦培训许可 (tx0000xxxx) 对化学工作站 B.03.0x 版无效。如果您的系统是使用培训许可安装的，则在升级之前或升级期间需要使用“添加许可”实用程序安装有效的完整许可。

将化学工作站从 B.0x.0x 版自动升级到 B.03.01 版

从现有的化学工作站 B.0x.0x 版升级到 B.03.01 版不需要类似于从化学工作站 A 版升级到 B 版的特定要求。请参阅相应仪器的“安装您的化学工作站”以进行从 B.0x.0x 版到 B.03.01 版的升级。

仪器特定的升级说明

仪器特定的升级说明可能根据系统是从化学工作站 A.xx.xx 版还是 B.0x.0x 版升级到化学工作站 B.03.01 版而变化。仪器特定的升级信息的标题将指明该信息适用于常规的升级安装还是仅适用于特定的升级（例如从 A 版升级到 B 版）。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版 仪器特定的升级说明

GC 特定的升级说明

GC 色谱柱目录

用户定义的色谱柱条目随方法一起保存，升级后仍和方法在一起。但是，升级中用户定义的色谱柱不会直接传送到 GC 色谱柱目录。从 G2070AA 升级到 G2070BA 化学工作站后，必须使用色谱柱数据库实用程序将用户定义的 GC 色谱柱传送到色谱柱目录。

该实用程序位于化学工作站 CD-ROM（CD 2 – 用户文档和附件）上的 support 目录下。

35900E

G2072BA 和 G2073BA A/D 产品需要使用 LAN 通讯的 35900E。

安装了附加解决方案的化学工作站系统 升级步骤

注意

升级之前，请检验您安装的附加解决方案在化学工作站 B.03.01 上是否受支持。请参阅第 32 页上的表 5，“化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品”以查看支持的附加解决方案和最低版本。

在进行任何从现有化学工作站版本到化学工作站 B.03.0x 版的自动升级之前，均需要卸载所有的附加软件产品。无法对附加产品进行自动升级。下表概述了有关卸载的不同行为。升级化学工作站之后，必须重新安装附加软件。

安装附加解决方案的过程中，特定信息将被写入一个特定文件（位于系统的 Windows 目录中）以维护以下附加解决方案程序：

- 化学工作站 A 版：win.ini
- 化学工作站 B 版：chemstation.ini

升级过程中，升级程序将读取所有 win.ini/chemstation.ini 条目，并按照该文件中附加解决方案的条目对这些解决方案进行检测。升级过程中，在未删除附加解决方案的情况下卸载化学工作站软件将引起警报。

安装的增强型化学工作站系列产品（例如 ChemStore 或 ChemAccess）必须使用标准的 Windows 卸载步骤（“开始” > “设置” > “控制面板” > “添加 / 删除程序”）进行卸载。请先使用 Windows 例程卸载这些产品，然后再升级化学工作站。

此外，某些附加程序将在 win.ini/chemstation.ini 文件中创建卸载过程中无法删除的特定条目；这些条目可能需要在卸载附加解决方案之后（但在升级安装之前）从 win.ini/chemstation.ini 文件中手动删除。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版 安装了附加解决方案的化学工作站系统 升级步骤

化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品

注意

升级之前，请检验您安装的附加解决方案在化学工作站 B.03.0x 上是否受支持。最初，并不是每个附加解决方案软件均受支持。第 32 页上的表，“适用于化学工作站 B.03.01 版的附加解决方案”中对受支持的附加解决方案进行了说明。

请查阅以下要安装在化学工作站 B.03.01 版上的受支持的附加解决方案版本：

表 5. 化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品

适用于化学工作站 B.03.01 版的附加解决方案	化学工作站 B.03.01 版所需的版本	从化学工作站 B.03.01 版卸载
G2181BA ChemStore 客户端 / 服务器端	B.03.03 SR2， 仅可与 数据存储模式： 唯一数据容器开启	通过“控制面板”中的“添加 / 删除程序”完全卸载，包括 chemstation.ini 中的条目。
G2183BA 安全软件包	B.03.03 SR2	由 ChemStore 完成卸载
G2080BA GC 的保留时间锁定	与 GC 化学工作站一起 安装	无法卸载 RTL
GC 助手	与 GC 化学工作站一起 安装	无法卸载助手
G2924AA 适用于 GC 的集成顶空软件	A.01.05	通过“控制面板”中的“添加 / 删除程序”完全卸载，包括 chemstation.ini 中的条目。

表 5. 化学工作站 B.03.01 版支持的附加解决方案产品 (续)

适用于化学工作站 B.03.01 版的附加解决方案	化学工作站 B.03.01 版所需的版本	从化学工作站 B.03.01 版卸载
数据浏览器	A.03.01	通过“控制面板”中的“添加 / 删除程序”完全卸载, 包括 chemstation.ini 中的条目。
G2201BA CE/MS	B.03.01	通过“控制面板”中的“添加 / 删除程序”完全卸载, 包括 chemstation.ini 中的条目。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版

使用安装的附加解决方案进行升级

使用安装的附加解决方案进行升级

使用附加解决方案从化学工作站 B.0x.0x 版进行升级

使用安装的附加解决方案进行化学工作站 B.01.0x 版的升级所需执行的步骤。以净化为例：

- 1 使用标准的 Windows 卸载步骤（“控制面板” > “添加 / 删除程序”）卸载附加解决方案软件。在此卸载过程中，系统将删除与刚刚卸载的附加解决方案程序相对应的附加解决方案条目。如果系统上安装了多个附加解决方案，则每个附加解决方案均需要使用“添加 / 删除程序”来删除。

表 6. 化学工作站 B.0x.0x 版附加解决方案卸载说明 – 摘要

适用于化学工作站 B.0x.0x 的附加解决方案	版本	ChemStation.ini 中的附加条目 (通过“添加 / 删除程序”进行卸载之后，可能需要手动删除)	从 Windows 添加 / 删除程序
G2181BA ChemStore 客户端 / 服务端	启动 B.03.02 SR1	[PCS] ChemStore C/S =C:\CHEM32\ChemStor\database [PCS, 仪器编号] ADDONS=x (其中 x 是安装的附加解决方案的编号) ADDONx=C:\CHEM32\ChemStor\hpdif00.mcx ChemStore C/S =C:\CHEM32\ChemStor\database	是，彻底删除 chemstation.ini 中的所有相关条目
G2183BA 安全软件包	启动 B.03.02 SR1	win.ini 中没有附加条目	否，将在 ChemStore 卸载过程中卸载
净化	启动 B.01.01	[PCS, 仪器编号] ADDONS=x (其中 x 是安装的附加解决方案的编号) ADDONx=C:\Purify\bin\inl_puri.mcx [净化] 版本号 = xx.xx 路径 =c:\Purify	是，彻底删除 chemstation.ini 中的所有相关条目

表 6. 化学工作站 B.0x.0x 版附加解决方案卸载说明 – 摘要 (续)

适用于化学工作站 B.0x.0x 的附加解决方案	版本	ChemStation.ini 中的附加条目 (通过“添加 / 删除程序”进行卸载之后, 可能需要手动删除)	从 Windows 添加 / 删除程序
方法认证软件包	最高为 A.02.01	[PCS, 仪器编号] ADDONS=x (其中 x 是安装的附加解决方案的编号) ADDONx=C:\CHEM32\CORE\hpca.mac MVPprevSeqFile=... MVPprevSeqPath=... MethodValidationMode=1	是, 彻底删除 chemstation.ini 中的所有相关条目
G2080BA GC 的保留时间锁定	启动 B.01.02	[PCS, 仪器编号] ADDONS=x (其中 x 是安装的附加解决方案的编号) ADDONx=C:\CHEM32\RTL\RTLTOP.MAC	是, 彻底删除 chemstation.ini 中的所有相关条目
GC 助手	没有版本	包括在 GC 化学工作站中。无法卸载助手。	否
G2924AA 适用于 GC 的集成顶空软件	启动 A.01.04	[PCS, 仪器编号] ADDONS=x (其中 x 是安装的附加解决方案的编号) ADDONx=C:\CHEM32\HS\HSAAddn.MAC	是, 但是需要从 chemstation.ini 中手动删除附加条目

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版 使用安装的附加解决方案进行升级

常规附加解决方案

在进行任何从化学工作站的 A.09.03 或更高版本到化学工作站 B.03.0x 版的升级之前，均需要卸载所有附加软件产品。无法对以下常规附加产品进行自动升级：ChemStore 和增强型化学工作站安全软件包。化学工作站升级之后，必须对附加软件进行升级。

ChemStore（最高为 B.03.02）

化学工作站上的 G2181BA ChemStore 软件不能升级到 ChemStore B.03.03 软件。该软件需要根据《ChemStore C/S 安装指南》的卸载部分进行卸载。此外，需要从 win.ini 文件中删除以下条目：

在 [PCS] 部分：

```
ChemStore C/S =C:\CHEM32\ChemStor\database
```

在所有 [PCS,x] 部分：

```
ADDONS=x（其中 x 是安装的附加解决方案的编号）
```

```
ADDONx=C:\CHEM32\ChemStor\hpdif00.mac
```

```
ADDON(x+1)= C:\CHEM32\Core\mv.mac（仅适用于 G2184A）
```

```
ChemStore C/S =C:\CHEM32\ChemStor\database
```

ChemStore（B.03.02 SR1 以上）

化学工作站 B 版上的 G2181BA ChemStore 软件不能升级到 ChemStore B.03.03 软件。该软件需要根据《ChemStore C/S 安装指南》的卸载部分进行卸载。此外，取消安装程序将删除 chemstation.ini 文件中的所有相关部分。

安全软件包

ChemStore 卸载程序将删除与安全软件包相关的所有项目。不能进行单独卸载。

LC 特定的附加解决方案

在进行任何从 G2170AA/G2180AA 化学工作站到 G2170BA/G2180BA 化学工作站 B.03.01 版的升级之前，均需要卸载所有附加软件产品。化学工作站升级之后，必须对附加软件进行升级。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版 使用安装的附加解决方案进行升级

GC 特定的附加解决方案

在进行任何从 G2070AA 化学工作站到 G2070BA 化学工作站 B.03.01 版的升级之前，均需要卸载所有附加软件产品。
化学工作站升级之后，必须对附加软件进行升级。

保留时间锁定

必须使用“控制面板”中的“添加 / 删除程序”删除 G2080AA 保留时间锁定 (RTL) 附加软件。此外，安装 B.03.0x 版本的 GC 化学工作站之前，还必须手动删除 win.ini 文件中的 RTL 附加条目。

从 B.03.01 开始，RTL 现已集成在 GC 化学工作站中。

助手

必须使用“控制面板”中的“添加 / 删除程序”删除助手附加软件。此外，还必须手动删除 win.ini 文件中的助手附加条目。

从 B.01.01 开始，G2070BA GC 化学工作站安装时都将包括化学工作站助手。

顶空

化学工作站 G2070BA 支持 G2924AA 集成顶空软件。

G2922AA 集成顶空软件仅在 G2070AA/G2071AA 化学工作站上受支持，并且在升级到 GC 化学工作站 B.03.01 版之前必须用“控制面板”中的“添加 / 删除程序”将其卸载。此外，还必须手动删除 win.ini 文件中的顶空附加条目。

请注意，G2922AA 注册号不会调用 G2924AA 软件。将需要购买 G2924AA 软件。

G2401AA A.01.01 顶空软件是独立的单一程序，它不受 G2070BA/G2071BA 化学工作站的支持。

配置您的仪器

升级过程将检测已配置的仪器并会基于当前配置建立仪器设置。进行升级时，除了从 GPIB 移动到 LAN 通讯可能是必需的配置外，不需要其他配置。在相应的“安装化学工作站”手册中，对 LAN 和 GPIB 通讯以及通讯更改时的仪器配置进行了说明。

从 GPIB 控制的仪器进行升级时，必须安装所需的 LAN 通讯元件，并在升级前重新配置您的仪器。在相应的特定色谱技术的“安装您的化学工作站”手册中对必要的步骤进行了描述。

使用 LAN 通讯或从 GPIB 移动到 LAN 连接的用户必须使用安捷伦 BootP 服务作为化学工作站 B.03.01 版的通讯元件。

当前使用 CAG BootP 服务器的用户需要删除该元件。由于 CAG BootP 服务器将不再受支持，所以必须安装安捷伦 BootP 服务。安捷伦 BootP 服务程序可以从化学工作站 CD-ROM (CD 1 – 安装) 中获得。

注意

在使用化学工作站 B.03.0x 版的 Windows XP Professional 上，第 25 页上的表 4，“GPIB 与分析硬件兼容性表”中列出的所有分析硬件均支持 Agilent 82350 A/B 卡。

注意

升级到化学工作站 B.03.0x 版之前，需要将包括 Agilent LC 1100 模块或通过 GPIB 进行通讯的 35900E 的系统升级到 LAN 连接。

Agilent LC 1100 和使用 GPIB 进行通讯的 35900E 不再受化学工作站 B.03.0x 版的支持。

3 如何升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版 配置您的仪器

4

首次启动化学工作站 B.03.01 版

B.03.01 中引入的启动更改	43
B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改	46
浏览项目	46
浏览按钮	46
化学工作站资源管理器	46
对“方法和运行控制”视图使用的增强	49
样品信息	49
序列参数	49
序列表	50
使用首选项采集序列数据	50
采集执行重新校准的序列数据	52
数据文件结构	53
对“数据分析”视图使用的增强	55
浏览表	55
“首选项” – “信号 / 浏览”选项卡	57
浏览表浏览和重新处理	57
手动积分	59
长文件名	59
命名规则	62
化学工作站文件名和子目录的最大长度	63
前缀 / 计数器	64
从化学工作站 A.xx.xx 版调用数据	65
数据文件	65
方法	65
序列	66
超级序列（仅适用于 LC 化学工作站）	66
批处理文件	66



4 首次启动化学工作站 B.03.01 版

报告样式 66

紫外库（仅适用于 LC 3D 化学工作站） 67

B.03.01 中引入的启动更改

从 B.02.01 版开始，化学工作站引入了新的数据组织模式（如第 46 页上的“B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改”一章中所述），它提供了许多便利：

- 序列数据不会被覆盖。每次序列采集都会将结果数据文件以唯一名称保存在自己的序列容器中
- 有了序列容器概念，数据存储时已带有数据分析所需的所有必要信息，即序列文件的副本和随序列使用的所有方法。这些方法可用针对序列的输入更改，而不影响原始主方法。因此，容器概念加强了序列的意义，即共同用于生成结果的数据文件和方法的集合
- 通过浏览表，可在“数据分析”视图中同时实现数据检查和数据再处理
- 数据容器概念为化学工作站与安捷伦企业内容管理器 (ECM) 的集成提供了最佳的预调节

但是，有时用户可能希望如同在化学工作站 B.01.03 或更早版本中那样保存数据，并根据相应工作流程工作：

- 在方法的开发期间，采集和数据分析只用一种方法较为方便，这样将来的采集和已采集数据的重新分析都可以自动使用更改
- 分几次采集的数据必须放在一个文件夹中，例如部分采集的情况
- 为较早版本设计的化学工作站系统上自定义的宏解决方案可能会要求根据旧的数据组织模式存储数据、方法或序列
- 如果运行化学工作站 B.03.01 的实验室中，还有其他运行化学工作站 B.01.03 或更早版本的系统存在，则在所有系统上使用相同的数据组织模式可能更方便

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版

B.03.01 中引入的启动更改

为了能如同在 B.02.01 版本之前的化学工作站中那样使用数据存储概念，“首选项”对话框的“序列”选项卡有一个“数据存储”部分。在这里您可以选择“专有文件夹创建启用”或“专有文件夹创建关闭”（图 1）。缺省情况下将选中“专有文件夹创建启用”。选择“专有文件夹创建启用”可启用以下第 46 页上的“B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改”中所述的数据存储概念。使用“专有文件夹创建关闭”，您可以像在化学工作站 B.01.03 或更早版本中那样存储数据。“新的化学工作站工作流程入门”手册中有更详细的说明。

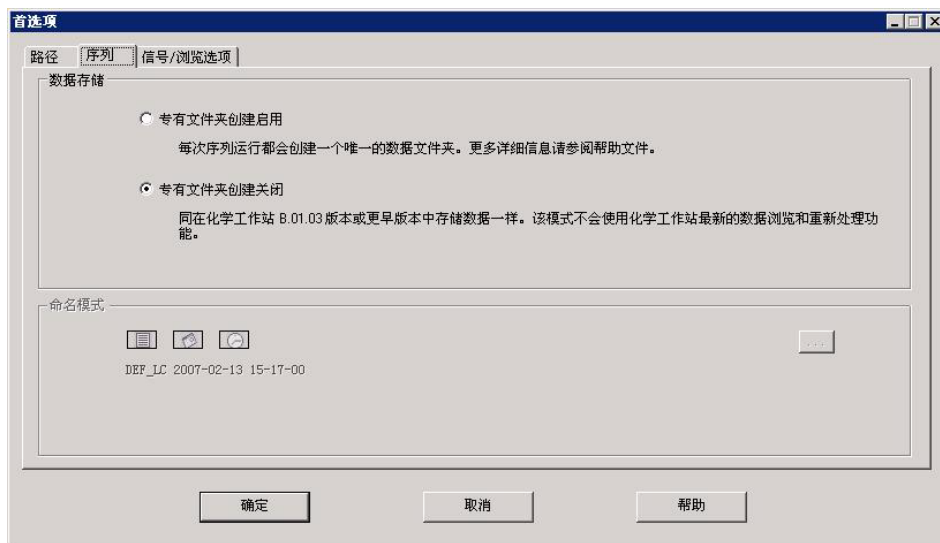


图 1. 首选项对话框 / 序列选项卡

注意

在“专有文件夹创建启用”和“专有文件夹创建关闭”之间切换只影响将来的采集，但不会改变已采集数据的数据组织。

注意

建议您开始工作时就决定好用哪种模式，不要在两者之间切换。

如果已集成化学工作站 ECM 或已安装 ChemStore / 安全软件包，则不能切换到“专有文件夹创建关闭”。

和化学工作站 B.02.01 一起引入的增强型化学工作站用户界面（见下面的第 46 页上的“B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改”一章）在“专有文件夹创建关闭”时也可用。但是，在此模式中有些功能无法使用。同样的限制适用于用 B.02.01 之前的化学工作站采集的运行。

- 序列调入浏览表时，数据再处理工具组将显示为灰色。在此数据存储模式中采集的序列，只能用“序列参数”中的“仅再处理”选项在“方法和运行控制”视图中进行再处理
- 采用方法使用选项“使用来自数据文件的方法”和“使用序列方法”时，每当双击浏览表中的某个运行时，若单个方法 / 序列方法不存在，则都会显示警告信息。如上所述，这些方法不会随数据存储。在这种情况下，对于数据检查来说唯一有意义的选项就是“使用当前方法”

B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

化学工作站从 B.020.01 版开始，提供了新的设计、基于树状的浏览以及一种全新的、灵活的数据管理。浏览项目使您可以使用鼠标右键单击功能轻松地进行数据处理（例如调用数据文件）。图形用户界面项目已进行了改进和重新组织，从而使操作更加灵活，并可以利用基于树状的浏览。图形操作项目（图标）的功能和这些项目的化学工作站视图位置没有改变。要支持这些图形更改，请注意支持的屏幕分辨率是 1280x 1024。

浏览项目

所有化学工作站视图的左侧均包含一个基于树的浏览窗格。该**浏览窗格**包含自动隐藏功能，并提供一些标准功能（例如调整浏览按钮区域的大小和重排浏览按钮区域）。浏览窗格包含以下两个项目：

浏览按钮

浏览按钮使您可以通过单击特定的浏览按钮来切换化学工作站视图。可以将浏览按钮部分最小化、展开或重排。

化学工作站资源管理器

化学工作站资源管理器的内容取决于视图。对于“方法和运行控制”、“数据分析”和“报告布局”，化学工作站资源管理器使您可以浏览不同的化学工作站元素。默认情况下，这些元素由配置编辑器的设置决定。因此，与化学工作站的早期版本相同，方法和序列位于 `chem32\n\methods` 和 `chem32\n\sequence` 文件夹（此处 `n` 是指仪器编号）中。现在可以展开这些路径，并使用视图菜单中新引入的“首选项”选项来指定方法、序列和数据位置的新节点。这些路径包含用于采集的主方法和序列模板。

表 7. 浏览窗格项目

浏览按钮	化学工作站资源管理器元素
方法和运行控制	序列模板 (*.s)/ 主方法 (*.m)
数据分析	数据 (*.d)/ 主方法 (*.m)
报告格式	主方法
认证 (LC 和 LC/MS)	认证视图特定的快捷方式
诊断 (LC)	诊断视图特定的快捷方式
调谐 (LC/MS)	调谐视图特定的快捷方式

可以使用鼠标右键单击操作或双击操作来调用化学工作站资源管理器元素（例如方法和数据文件）。这些变化直接反映在基本的化学工作站图形界面中。另外，还可以通过鼠标右键单击来调用有关特定视图项目的在线帮助。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改



图 2. 显示了化学工作站资源管理器和浏览按钮的浏览窗格

对“方法和运行控制”视图使用的增强

“方法和运行控制”视图的化学工作站资源管理器可以使方法和序列模板直接调用。“视图”菜单中新引入的“首选项”选项使您可以设置要包含在化学工作站资源管理器中的其他路径。“首选项”选项带来了新的灵活性，例如可用于数据存储。

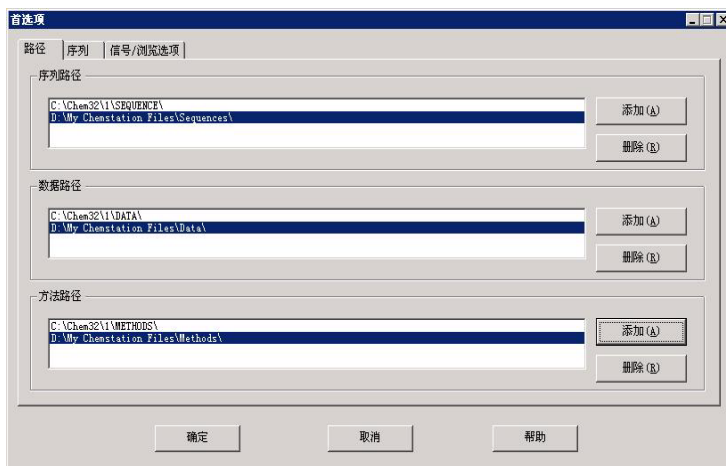


图 3. 化学工作站资源管理器的路径首选项

样品信息

在“样品信息”对话框中，可以选择可用于数据存储的路径。可以使用“视图”菜单中的“首选项”对话框指定其他数据路径。添加数据路径后，可以在“样品信息”对话框中“路径”项目的下拉菜单中选择新的路径。数据文件的位置不再局限为化学工作站的 chem32/n/data 文件夹（或配置编辑器中用户定义的设置）。

序列参数

在“序列参数”对话框中，可以选择可用于数据存储的路径。可以使用“视图”菜单中的“首选项”对话框指定其他数据路径。添加数据路径后，可以在“序列参数”对话框中“路径”项目的下拉菜单中选择新的路径。数据文件的位置不再局限为化学工作站的 chem32/n/data 文件夹（或配置编辑器中用户定义的设置）。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

序列表

为了设置序列表，系统为您提供了浏览可用方法的便利工具。方法的位置不再局限为化学工作站的 `chem32/n/method` 文件夹（或配置编辑器中用户定义的设置）。化学工作站资源管理器中可用的方法是“主”方法，序列表中的方法字段将链接到上一次使用的“主”方法文件夹。方法的开发完成后，主方法通常保持不变。

序列表和序列参数以及其他与序列有关的参数存储在 `sequence.s` 文件中。默认情况下，序列（*.s 文件）位于 `chem32/n/sequences` 下。现在可以使用首选项指定存储序列 *.s 模板的其他位置。这些序列将被作为序列模板进行处理，并可用于重新运行（但不能重新处理）序列。

使用首选项采集序列数据

运行某个序列时，将采用并执行调用的 `sequence_name.s` 模板：系统将根据定义的序列行来执行预定的运行。从化学工作站 B.02.01 版开始，`sequence_name.S` 文件将用作序列模板，并结合化学工作站首选项提供了新的灵活性。

序列数据存储在有已定义的序列容器名称的序列数据容器中。在“首选项”对话框的“序列”选项卡中，可以为这些序列容器指定命名规则（名称模式）。“序列”选项卡只能用于数据采集，因此仅用于出现在在线系统中。



图 4. 用于序列命名的首选项

序列名称模式可以包含多个部分，如果未做任何选择，则默认的序列名称模式为：

- 序列名称时间日期

系统将根据选定的部分，为您的序列数据容器创建一个名称模式。所有属于这个特定序列的数据文件、方法、序列日志、sequence_name.s 文件以及 sequence_name.b 文件均存储在该序列数据容器中。每次启动某个序列时，均将创建一个新的序列数据容器。

现在，序列 (.S) 文件可以用作序列模板，这一新概念使您可以多次运行任意 sequences.s 文件，而无需覆盖现有数据或更改序列参数。如果序列名称模式中既没有使用计数器，也没有使用时间，则系统将自动引入一个计数器，以避免覆盖数据。对于第二个、第三个及以后所有使用同一序列模板的序列，将在序列容器名称中添加计数器。

由于序列数据容器这一概念，需要在“数据分析”视图对使用化学工作站 B.02.01 版或更高版本创建的序列数据进行重新处理。化学工作站 B.01.03 版及以前的版本中采集的序列数据，或者 B.03.01 中专有文件夹创建关闭时采集的序列数据，必须在“方法和运行控制”视图中重新处理。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

注意

从化学工作站 B.02.01 版开始，需要在您的仪器的离线仪器会话中执行数据分析任务。现在运行采集时，不再可以切换到在线系统的“数据分析”视图。

因此，请注意，需要在系统的离线会话中检查 snapshot.d 文件。使用“程序组”项目打开离线化学工作站会话，或使用“视图 / 重新处理副本”在化学工作站中启动重新处理副本。

采集执行重新校准的序列数据

要在某个序列中执行重新校准，您需要选择已校正的方法、选择样品类型“校准”并指定序列列表中的重新校准选项。

重新校正某个序列后，系统将根据定义的序列名称模式创建序列数据容器。所有与序列有关的方法将复制到此序列数据容器中，系统将存储采集的数据文件。由于序列逐行执行，因此用于计算单个数据文件数量的更新的校正表将存储在该数据文件的数据分析方法 (D.A.M) 中。序列完成后，更新的校正表将存储在序列方法中。如果现在要使用更新的序列容器方法进行数据采集，您需要将此方法从序列数据容器复制到定义的方法路径之一。然后，新 / 已更新的方法将作为主方法存在于化学工作站资源管理器的方法视图中。

数据文件结构

从化学工作站 B.02.01 版开始，便引入了新的数据存储概念以用于采集的序列数据。所有属于已执行序列 (*.S) 文件的项目均使用唯一的名称存储在序列数据容器中：

- 序列数据文件 (*.D)
 - 用于单个数据文件的采集方法 ACQ.M
 - 用于单个数据文件的数据分析方法 DA.M

与数据文件一起存储的两个单个方法是所使用方法的副本，其中包含的参数与采集数据时的参数完全一致

- 在序列过程中使用的所有方法 (*.M) 文件
- 原始序列模板 (*.S) 文件
- 与序列有关的批处理 (*.B) 文件
- 与序列有关的日志 (sequence_name.log) 文件

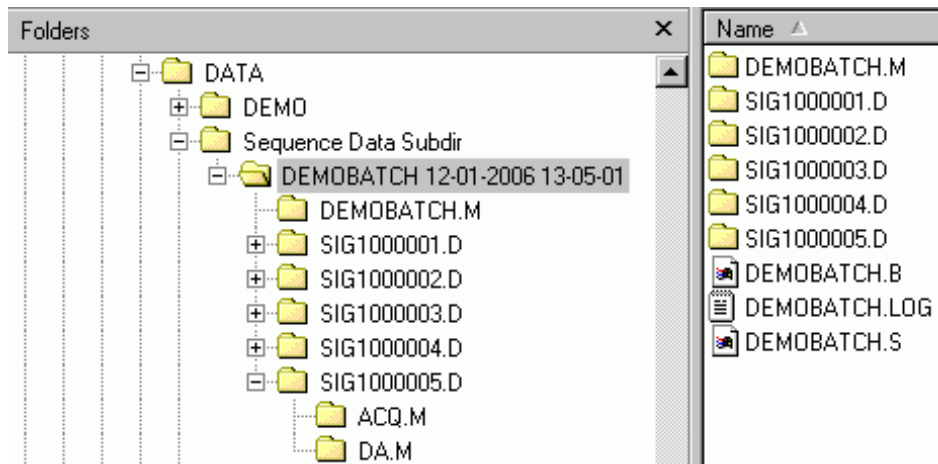


图 5. 序列数据容器目录

序列数据容器文件用于在数据分析中进行检查和重新处理，而无需更改主方法或主序列模板。


可用的方法

方法的名称最多可包含四十个字母数字字符，后跟扩展名 .M。现在，方法最多可以存储在化学工作站中的三个位置：

- 主方法存储在方法子目录中，可以在化学工作站资源管理器的某个“方法”节点中找到，并且不与任何数据容器直接关联。这些方法用于采集数据
- 运行序列时，用于序列的所有主方法的副本均与序列数据文件一起存储在序列数据容器中。这些方法直接链接到序列，而且在重新处理此序列时也要使用这些方法。对这些方法所做的更改不会传送给主方法。在重新处理序列的过程中，对这些方法的更改将影响序列方法和单个方法
- 另外，用于运行样品的方法的两个副本将与数据文件一起存储：ACQ.M 为采集方法，DA.M 为数据分析方法。如果选中了“首选项”对话框的“信号选项”选项卡中的“从数据文件调用 DA 方法”复选框，则与数据文件一起调用的方法是 DA.M。对此方法所做的更改（例如，手动积分）均特定于关联的数据文件，并且不会传送给序列方法或主方法

对“数据分析”视图使用的增强

“数据分析”视图的化学工作站资源管理器使您可以调用数据集和方法。化学工作站结构的概念显示了特定子目录下可用的序列数据容器集和单次运行集。您可以使用以下方式来调用数据集：通过鼠标右键单击选项“调用”、通过在数据集上双击或使用菜单功能调用单个数据文件。

 序列数据容器

 单次运行数据

调用的数据集将以一个个数据文件的形式显示在“数据分析”视图顶部的浏览表中。

浏览表

浏览表是只读表，它提供了标准表格配置功能，例如排序、将列移动到其他位置的拖放选项、列选择等。另外，它还可以针对列进行分组，例如，按照列“操作符”对调用的文件进行分组，可以显示一个特定操作符的单次运行。

浏览表提供了鼠标右键单击功能来调用信号、叠加信号、输出数据、打印报告等。通过单击浏览表中每一行起始处的 +（加）号来展开浏览表的行，可以配置针对信号的选项。



日期时间	操作者	瓶	数据文件	样品名称	方法名称	样品量	ISTD 含量
1994-4-19 7:44:14	a.g.h.	5	005-0101.D	Isocratic Std. 1	DEMO.M	0	0
1994-4-19 7:52:24	a.g.h.	5	005-0102.D	Isocratic Std. 1	DEMO.M	0	0
1994-4-19 8:00:34	a.g.h.	5	005-0103.D	Isocratic Std. 1	DEMO.M	0	0
1994-4-19 8:08:45	a.g.h.	5	005-0104.D	Isocratic Std. 1	DEMO.M	0	0
1994-4-19 8:16:14	a.g.h.	5	005-0105.D	Isocratic Std. 1	DEMO.M	0	0

说明	调用?
DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100	<input checked="" type="checkbox"/>
DAD1 B, Sig=230,4 Ref=550,100	<input checked="" type="checkbox"/>
DAD1 C, Sig=280,4 Ref=550,100	<input checked="" type="checkbox"/>

图 6. 数据分析中的浏览表

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

请记住，“首选项”选项使您可以设置要显示在化学工作站资源管理器中的其他路径。另外，“首选项”对话框还包含信号 / 浏览选项，这些选项对数据浏览具有显著影响。

“首选项” – “信号 / 浏览” 选项卡

“首选项”中的“信号选项”选项卡使您可以指定调用信号时要进行的操作。该选项卡的第一部分“调用信号选项”指定调用运行中的哪些信号，以及是否在调用后直接对色谱进行积分并报告结果。

在第二部分“数据浏览选项”中，您可以配置在“浏览表”中的运行之间自动步进的间隔。

本部分的其余部分指定从浏览表调用运行时，数据检查期间调用哪个方法。它们仅适用于数据检查，不适用于数据再处理。

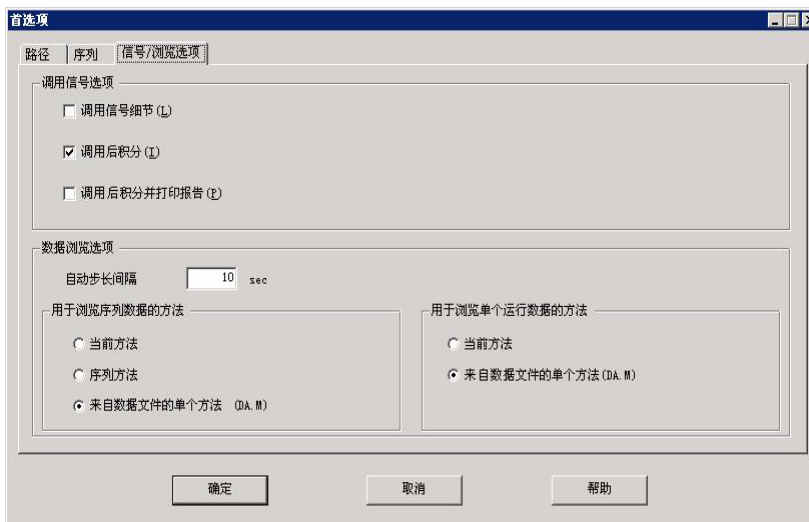


图 7. 信号选项的首选项

浏览表浏览和重新处理

可以在“数据分析”视图将附加的检查和重新处理功能用于所有数据集和通过 B.02.01 版或更高版本采集的序列。此新功能在“新的化学工作站工作流程入门”手册和在线帮助中进行了详细说明。通过化学工作站 B.01.03 版及以前的版本采集的序列数据需要使用“方法和运行控制”视图中的“重新处理”选项进行重新处理。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

数据检查： 新的浏览表浏览功能使您可以自动逐个查看调用的信号，并且可以根据在“首选项”/“信号/浏览选项”中定义的性能指标自动执行某些操作，例如对信号进行积分以及为每个文件打印报告。

如果选择了“首选项”/“信号/浏览选项”中的“使用当前方法”选项，系统将使用当前调用的方法进行检查和生成报告。方法名称将显示在状态栏中。

如果选择了“使用序列方法”选项，系统将总是调用与您从浏览表调用的运行对应的序列方法。这些序列方法位于序列容器中。方法名称将显示在状态栏中，括号中添加了“序列”。

如果选择了“使用来自数据文件的单个方法 (DA.M)”选项，系统将调用和数据文件一起存储的单个数据分析方法 (DA.M)。对于浏览表中的每一行，将调用选定数据文件的链接的 DA.M，并使用此 DA.M 进行检查和生成报告。方法名称显示在状态栏中，系统会在括号中添加“来自数据文件”，以提醒您所调用的方法是数据文件的单个方法。

数据重新处理 (使用化学工作站 B.02.0x 版采集的数据)： 使用重新处理功能，可以修改数据容器的 `sequence.s` 文件（以更改乘积因子、稀释因子等）、方法设置，也可以使用其他方法进行重新处理。`sequence.s` 是序列数据容器的一部分，在数据分析中打开。默认情况下，数据分析中 `sequence.s` 文件的序列参数“运行方法的部分”会设置为“仅重新处理”，且选中“使用序列表信息”选项。这些预定义的默认值使您可以更改 `sequence.s` 文件并继续进行重新处理，而无需再次编辑数据分析序列参数。重新处理的过程中，数据文件的单个方法 DA.M 和 `batch.b` 文件均会得到更新。

如果您尚未更改 `sequence.s` 文件中的方法，系统将使用存储在序列数据容器中的方法来重新处理序列。这些方法是数据采集过程中使用的原始方法。如果需要更改某些特定的参数（例如指定打印到 `*.xls` 文件），则需要对序列容器中的方法进行修改并保存。然后，这一基本更改将在重新处理的过程中应用于所有数据文件。

如果现在要使用更新的序列容器方法进行数据采集，您需要将此方法从序列数据容器复制到定义的方法路径之一。然后，新 / 已更新的方法将作为主方法存在于化学工作站资源管理器的方法视图中。

手动积分

对于包含 DA.M 单个方法的数据文件，可以仅保存特定于此数据文件的手动积分事件。需要将新添加的手动积分项复制到 DA.M，而且需要保存 DA.M。

注意

浏览表不会取代复杂的批处理功能。“批处理”视图在“数据分析”视图中仍然可用，并且批处理功能保持不变。

长文件名

化学工作站 B.0x.0x 版支持对以下化学工作站文件使用长文件名：

- 数据
- 方法
- 序列、超级序列
- 批处理
- 光谱库
- 报告模板
- 宏文件
- 子目录
- 样品名称（B.01.03 版及更高版本）

长文件名影响化学工作站的图形界面和报告布局。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

由于接受了长文件名，因此已对所有化学工作站屏幕的大小进行了调整。对图形元素进行了放大，方法、序列等的长文件名将相应地显示在所有化学工作站屏幕和输入/输出字段中。由于图形原因，图形视图中的长文件名最长为 18 个字符。



图 8. “方法和运行控制” 屏幕快照

对所有的化学工作站报告（数据报告、方法 / 序列打印输出等）进行了重新设计以支持长文件名。化学工作站日志还将扩展格式用于系统消息：可以完整打印长的信息字符串，如果需要，可以将信息打印为多行。
 某些报告（例如序列报告）可能会将长文件名截断，以使所有信息都能够合适地放置到报告模板上。

Method and Injection Info Part:

Line	Location	SampleName	Method	Inj	SampleType	InjVo
		DataFile	LimsID	FractSt	TargetMass	
1	Vial 1	1	DEMOCAL1BUTEXTENDED	1	Calib	0.5
		<u>A</u> longDataFileNameWit	10483LimsId	P1-S1	0.5:4.5	
1	Vial 1	1	DEMOCAL1BUTEXTENDED	1	Calib	0.5
		<u>A</u> longDataFileNameWit	10483LimsId	P1-S1	0.5:4.5	

图 9. 序列报告摘要

注意

几乎所有的屏幕都反映了对长文件名的接受。已对显示数据文件 / 序列 / 方法名称的工具栏的大小进行了调整，使其可以显示至少 18 个字符。

命名规则

以下规则使化学工作站可以创建和处理文件和目录的有效名称：

文件或目录名称中不允许包含以下字符：

< > : " / \ | * ? 空白（空格）

此外，还要遵循以下规则：

表 8. 受限制的字符

化学工作站参数	字符
方法文件名称：	% 和 .（小数点）不允许包含在内
数据子目录和序列子目录：	[] += ; ; . (小数点)、空白（空格）是不允许使用的

不能将以下保留的设备名用作文件名：

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

也不能在这些名称后附加扩展名（例如 Nul.txt）。

注意

使用英文、日文和中文版操作系统来检验命名规则。
安捷伦无法对非英文版操作系统及其特殊字符提供支持声明。

化学工作站文件名和子目录的最大长度

下表列出了安捷伦化学工作站对文件名和子目录的说明：

表 9. 化学工作站文件名和子目录的最大长度

数据文件 / 子目录 / 路径	最大输入长度	自动附加	示例
数据文件名	38	. D	Demodad.d
带有前缀 / 计数器的数据文件名	15	. D	longname000001.d
方法	40	. M	def_lc.m
序列		. S	def_lc.s
超级序列		. HYP	def_lc.hyp
谱库		. UVL	demodad.uvl
自定义报告模板		. FRP	areapct.frp
数据文件子目录	40		demo (在样品信息中)
数据序列子目录	40		demo (在序列参数中)
序列数据容器名称	40		test_date_time (使用序列首选项创建)
数据路径	100	100	c:\chem32\1\data
方法路径			c:\chem32\1\methods
序列路径			c:\chem32\1\sequence
超级序列路径			c:\chem32\1\hyper
谱库路径			c:\chem32\spectlib
自定义报告模板路径			c:\chem32\repstyle

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

前缀 / 计数器

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

数据文件和序列中的前缀 / 计数器元件已得到扩展，可以使用长文件名。由前缀 / 计数器定义的数据文件名最多可包含十五个字符再加 .d 扩展名：共 17 个字符。

前缀 / 计数器字段遵循以下规则：

- 计数器自身最多可包含六个字符
- 如果前缀少于九个字符，则计数器将自动扩展为六位数
- 计数器中给出的数字是增量的起始数字

表 10. 前缀 / 计数器

前缀	计数器	得到的文件名
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

从化学工作站 A.xx.xx 版调用数据

化学工作站 B.0x.0x 版使用基于 32 位的软件结构，使用的字符集为 Unicode。本节概述了对上传的数据、方法、序列等的处理。

数据文件

B.0x.0x 版未对上传的数据文件做任何更改。
可以在 B.01x.0x 版中集成和使用数据文件，且该数据文件仍可以向后兼容。
由于已修改了数据结构，因此使用 B0x.0x 版采集的数据文件不能向后兼容。

注意

现在无法再将 PASCAL 文件和 3365 文件输入到 B.0x.0x 版中。如果需要这些文件，首先要将这些文件输入到化学工作站 A.xx.xx 版中，然后将其转换为化学工作站文件。

通常，可以将化学工作站以前版本中使用旧数据结构的所有文件（方法、序列、日志文件等）调用到 B.0x.0x 版中，且系统会在保存过程中将这些文件转换为新的 32 位结构。转换为新的结构集之后，这些文件将无法向后兼容。因此，系统将提示您将文件保存为不同的名称，这样就可以根据需要使用 16 位和 32 位文件集。16 位文件将保持不变，并且仍可与化学工作站 A.xx.xx 版一起使用。

方法

使用化学工作站早期版本创建的所有方法均可以调用到 B.0x.0x 版中。如果方法包含“旧的”光谱 / 纯度选项或包含使用增强积分仪的“标准积分仪”或“高级基线”选项的积分，将显示一条警告（请参阅第 65 页的图 10）。这些方法参数将自动转换为新的 B.0x.0x 版本功能。此方法将得到“方法已修改”标记以反映这些更改。

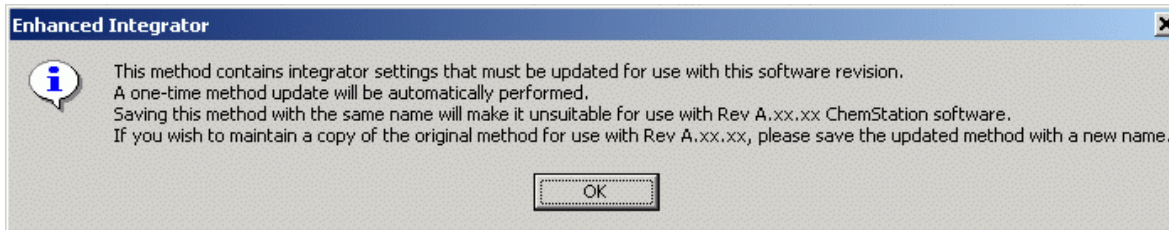


图 10.

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改

由于已修改了数据结构，因此在 B0x.0x 版中创建的方法不能向后兼容。

序列

使用化学工作站早期版本创建的所有序列均可以调用到 B.0x.0x 版中。系统将检测某个序列是否具有 16 位结构，并对该序列进行相应的处理。将对前缀 / 计数器和自动命名规则进行重置，以使用八字符集。这样就可以重新处理上传的序列。

保存上传的序列时，系统将提示您将其保存为其他名称。这种情况下，原序列将保持旧的数据结构并可以向后兼容。

由于已修改了数据结构，因此在 B0x.0x 版中创建的序列不能向后兼容。

超级序列（仅适用于 LC 化学工作站）

使用化学工作站早期版本创建的所有超级序列均可以调用到 B.0x.0x 版中。系统将检测某个超级序列是否具有 16 位结构，并对该超级序列进行相应的处理。将对前缀 / 计数器和自动命名规则进行重置，以使用八字符集。这样就可以重新处理上传的超级序列。

保存上传的超级序列时，系统将提示您将其保存为其他名称。这种情况下，原序列将保持旧的数据结构并可以向后兼容。

由于已修改了数据结构，因此在 B0x.0x 版中创建的超级序列不能向后兼容。

批处理文件

使用化学工作站早期版本创建的所有批处理文件均可以调用到 B.0x.0x 版中。可以执行批处理，还可以将手动积分事件保存到批处理中。如果没有即时保存批处理文件，您必须在此特定批处理重载完毕后立即保存它。

保存上传的批处理文件时，系统将提示您将其保存为其他名称。这种情况下，原批处理文件将保持旧的数据结构并可以向后兼容。

报告样式

使用化学工作站早期版本创建的所有报告样式均可以调用到 B.0x.0x 版中。

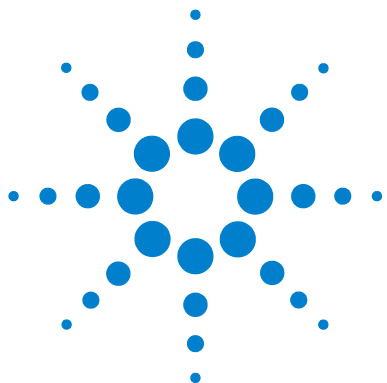
保存上传的报告样式时，系统将提示您将其保存为其他名称。这种情况下，原报告格式将保持旧的数据结构并可以向后兼容。

紫外库（仅适用于 LC 3D 化学工作站）

使用化学工作站早期版本创建的所有紫外库均可以调用到 B.0x.0x 版中。需要通过“旧的”光谱 / 纯度选项建立的紫外库适合“新的”光谱 / 纯度集。

保存上传的紫外库时，系统将提示您将其保存为其他名称。这种情况下，原紫外库将保持旧的数据结构并可以向后兼容。

4 首次启动化学工作站 B.03.01 版 B.02.0x 和 B.01.0x 中引入的启动更改



5 法规适应性认证说明

升级 B.03.01 版的常规法规适应性认证说明	70
概述	70
软件升级验证	70
升级 HPLC 1100 OQ/PV 方法和序列文件	72
适用于新安装的 HPLC 1100 OQ/PV 示例文件	72



升级 B.03.01 版的常规法规适应性认证说明

概述

在计算机上安装了安捷伦 化学工作站系统软件并配置了分析系统之后，内部验证程序可能需要评定安装的正确性和完整性，并验证该分析系统是否完全可操作。

软件升级验证

对您的化学工作站软件进行任何重要的升级时，安捷伦都建议在安装 B.03.01 版之后执行完整的安装验证 (IQ) 和操作认证 (OQ/PV)。该操作有助于根据您的验证主计划满足验证需要，验证主计划中还应包括设计认证 (DQ) 和性能认证 (PQ)。

安捷伦的操作认证服务将提供记录的证据，证明您的新化学工作站的运行情况符合公认的性能参数。特别需要指出的是，它还将新的积分仪算法作为色谱验证测试的一部分进行验证。它将覆盖的其他重要领域是仪器通讯和控制以及数据安全和访问控制。

安捷伦的 NDS 认证服务的一个非常重要的特征是其高度的自动化以及与认证的系统的密切相互作用。这不仅减少了系统停止运行的时间，而且确保了该过程执行的可靠性和一致性，从而在审核之前使风险降到最低。

升级验证

在计算机上升级了安捷伦化学工作站系统软件并配置了分析系统之后，内部验证程序可能需要评定安装的正确性和完整性，并验证该分析系统是否完全可操作。

安捷伦化学工作站安装验证实用程序使用厂家提供的安装参考文件来验证所需的安捷伦化学工作站系统文件（可执行程序文件、二进制寄存器文件、宏文件、初始化文件、帮助文件、自定义报告模板）是否存在，及其正确性和完整性。该程序可以是安装验证 (IQ) 的一部分。

文件完整性的验证是通过比较已安装文件的 32 位交叉冗余校验 (CRC) 的校验和与安捷伦科技安装盘上记录的原始文件的校验和来完成的。安装盘中文件的详细信息位于所谓的**参考文件**中。已修改或损坏的文件具有不同的校验和，因此会被 IQ 实用程序检测到。

对参考文件本身完整性的跟踪也是借助校验和来进行的。如果提供的安装验证实用程序所包含的参考文件在生成后已被修改，则报告中将对此进行标记（可参阅“**无效的参考文件**”一节）。

此外，IQ 实用程序还检查安捷伦化学工作站可执行系统文件 (*.EXE、*.DLL) 的版本号。

升级 HPLC 1100 OQ/PV 方法和序列文件

安捷伦化学工作站 B.03.01 版的功能与以前版本中出现的“认证视图”相同，但是该功能不包括 1100 OQ/PV 方法和序列的样品文件，这些文件可用于帮助在 1100 系列 LC 系统上执行认证。

但是，由于样品文件与 B.03.01 版兼容，因此，从 A.10.02 版开始，您可以继续使用相同的样品文件。为了进行此操作，您必须在完成 B.03.0x 版的安装之后，使用与以前相同的结构将这些文件从备份的 CHEM32 目录复制到新的化学工作站目录。

请记住，升级安装使用的是 A.09.03 版或更高版本安装的原始安装路径信息。

“METHODS”文件夹下的一个 OQPV 文件夹（位于每个仪器会话中）。

- 应该将 C:\CHEM32_backup\X\METHODS\OQPV 复制到：
 - C:\CHEM32\X\METHODS\OQPV，其中 x 是仪器编号

“SEQUENCE”文件夹下的一个 OQPV 文件夹（位于每个仪器会话中）。

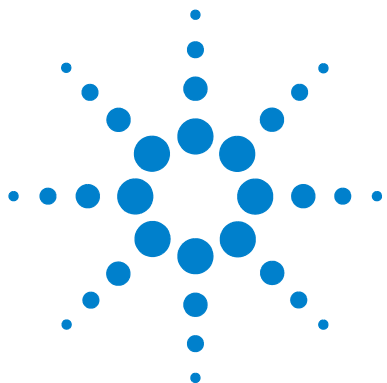
- 应该将 C:\CHEM32_backup\X\SEQUENCE\OQPV 复制到：
 - C:\CHEM32\X\SEQUENCE\OQPV，其中 x 是仪器编号

适用于新安装的 HPLC 1100 OQ/PV 示例文件

当 1100 OQ/PV 样品文件无法从以前的安装中获取时，可以从安捷伦购买。此外，CD-ROM 中包含 QO/PV 帮助文件，该文件已从 A.10.02 版的化学工作站获得。请使用以下参考文件：

P/N 01100-60050 “1100 验证样品文件 CD-ROM”

安捷伦 OQ/PV 认证服务中包括这些文件，因此，安捷伦执行您的仪器认证时无需收集这些文件。



6 对自定义解决方案的影响

宏解决方案	74
自定义工具栏	74
自定义菜单栏	74
对化学工作站宏的数据结构的影响	74



宏解决方案

从化学工作站 B.02.01 版开始，引入了一个显著更新了的用户界面 (UI) 和一个新的浏览概念。此概念的所有元素以及化学工作站 UI 中的新控件都是基于 Microsoft.NET Framework 的。

自定义工具栏

由于使用了 Microsoft.NET Framework，化学工作站的工具栏命令已在化学工作站 B.03.01 版中进行了更改。使用工具栏命令的当前自定义解决方案（适用于化学工作站 B.01.03 版及其之前版本）将无法在未修改的化学工作站 B.03.01 版上执行。有关详细信息，请查看在线帮助。

自定义菜单栏

没有对使用化学工作站宏语言的添加 / 修改菜单栏进行修改。通常，当前自定义解决方案应该可以在化学工作站 B.03.01 版上运行而无需修改。

对化学工作站宏的数据结构的影响

从化学工作站 B.02.01 版开始引入了新的数据组织概念，化学工作站 B.03.01 还提供其他增强。通过定义“首选项”中的“专有文件夹创建启用”和“专有文件夹创建关闭”，可以在软件内选择使用哪个数据组织概念来采集数据。缺省情况下将选中“专有文件夹创建启用”。使用“专有文件夹创建关闭”，您可以像在化学工作站 B.01.03 或更早版本中那样存储数据。《化学工作站新工作流程入门》手册中有更详细的说明。

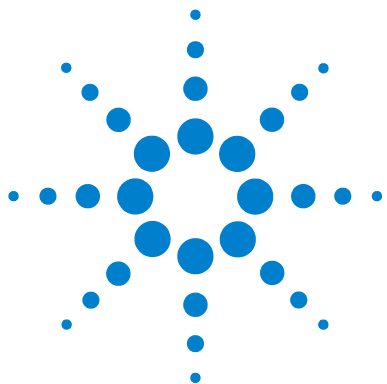
专有文件夹创建启用

该数据存储模式利用了化学工作站 B.02.01 引入的新数据结构。请检查您的化学工作站宏，如果需要的话改编新的路径项目。

专有文件夹创建关闭

用该数据存储模式，可以像在化学工作站 B.01.03 或更早版本中那样存储数据。用该模式，化学工作站 B.01.03 和更早版本上创建的化学工作站宏无需修改。

6 对自定义解决方案的影响 宏解决方案



7 附录

化学工作站报告	78
概述	78



化学工作站报告

概述

附录中列出了各种化学工作站报告，用于说明从化学工作站 A.10.02 版到化学工作站 B.01.01 版的升级。

示例色谱 1

B.01.01 版：

- 2 使用化学工作站 B.01.01 版中上传的方法来重新处理相同的样品文件。生成峰面积百分比报告（请参阅第 79 页上的图 11，“样品 005-0104.d 的面积百分比报告 – 使用化学工作站 B. 01.01 版生成”）。

示例色谱 2

B.01.01 版

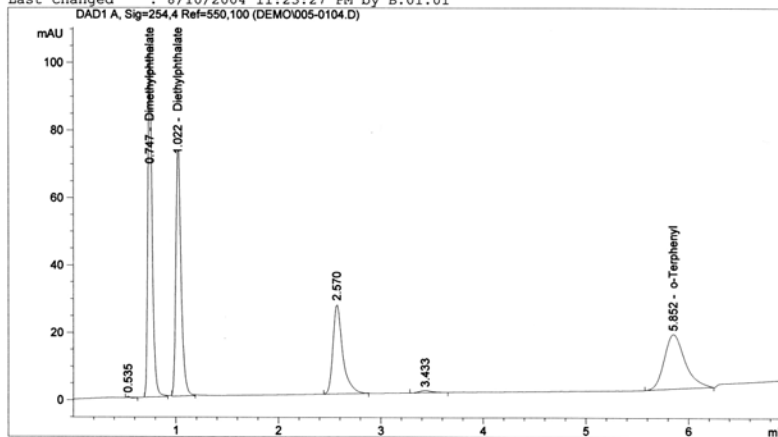
- 3 使用每个校准级别的“取代”选项重新校正化学工作站 B.01.01 版中上传的方法。使用相同的样品文件重新处理结果并生成 ESTD 报告（请参阅第 80 页上的图 12，“样品 005-0106.d 的 ESTD 报告 – 使用化学工作站 B.01.01 版生成”）。

示例色谱 1
B.01.01 版:

Data File C:\CHEM32\1\DATA\DEMO\005-0104.D
Sample Name: Isocratic Std. 1

```

=====
Injection Date : 4/19/94 8:08:45 AM           Seq. Line : 1
Sample Name    : Isocratic Std. 1             Location  : Vial 5
Acq. Operator  : a.g.h.                       Inj       : 4
Acq. Instrument: HP LC 1050                   Inj Volume: 2 µl
Acq. Method    : DEMO.M
Analysis Method: C:\CHEM32\1\METHODS\DEMO1_32A.M
Last changed   : 8/10/2004 11:23:27 PM by B.01.01
=====
    
```



Area Percent Report

```

=====
Sorted By      : Signal
Calib. Data Modified : Tuesday, August 10, 2004 11:23:24 PM
Multiplier    : 1.0000
Dilution      : 1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs
    
```

Signal 1: DAD1 A, Sig=254,4 Ref=550,100

Peak #	RetTime [min]	Type	Width [min]	Area [mAU*s]	Area %	Name
1	0.535	BB	0.0214	2.85319e-1	0.0295	?
2	0.747	BB	0.0449	294.85150	30.4851	Dimethylphthalate
3	1.022	BB	0.0524	261.41324	27.0279	Diethylphthalate
4	2.570	BB	0.1011	175.88335	18.1848	?
5	3.433	BB	0.1228	5.45111	0.5636	?
6	5.852	BV	0.2125	229.31276	23.7090	o-Terphenyl

Totals : 967.19728

*** End of Report ***

图 11. 样品 005-0104.d 的面积百分比报告 — 使用化学工作站 B.01.01 版生成

示例色谱 2
B.01.01 版

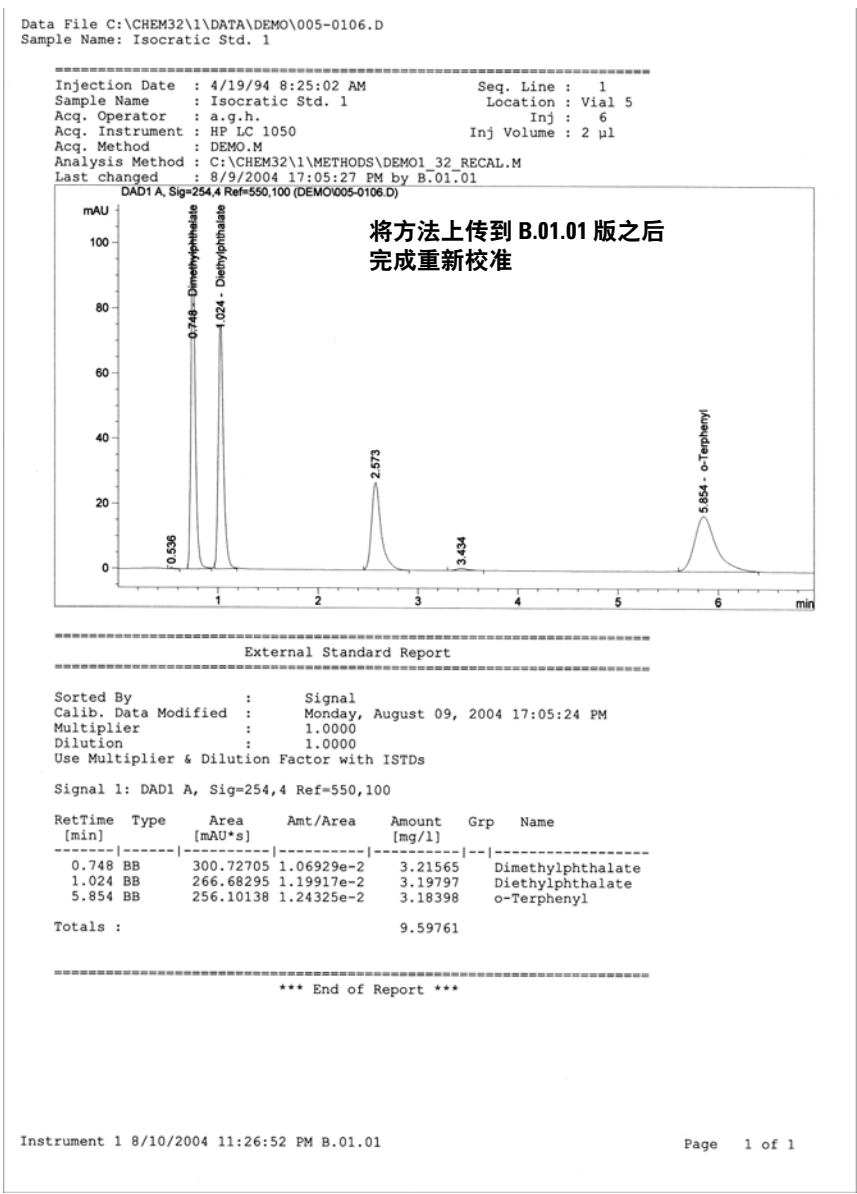


图 12. 样品 005-0106.d 的 ESTD 报告 – 使用化学工作站 B.01.01 版生成

索引

数字

35900E, 30

英文

APM, 20

ChemStore, 34, 36

DQ, 70

GC 色谱柱目录, 30

GC 特定的升级, 30

GC 助手, 35

GPIB 接口, 16

IQ, 70, 71

LAN 连接, 24

OQ/PV, 70

PQ, 70

TCP/IP, 24

A

安捷伦 1100 系列, 43

连接, 43

安全软件包, 34, 36

安装

硬件, 16

安装验证, 70, 71

B

保留时间锁定, 35

报告, 78

不支持的升级, 29

C

参考文件, 71

操作认证, 70

常规升级步骤, 28

长文件名, 59

D

打印机, 18

顶空, 38

F

方法认证软件包, 35

非 HP 计算机, 17

附加解决方案, 31

G

高级电源管理, 20

固件版本, 22

H

化学工作站

连接安捷伦 1100 系列, 43

化学工作站报告, 78

J

集成顶空软件, 35

兼容性

报告样式, 66

超级序列, 66

方法, 65

批量文件, 66

数据文件, 65

序列, 66

紫外库, 67

校验和, 71

净化, 34

L

连接

打印机电缆, 13

L

浏览窗格, 46

M

命名规则, 62

P

配置仪器, 29

Q

前缀 / 计数器, 64

R

认证, 70, 71

软件

要求, 19

S

色谱柱目录, 30

设计认证, 70

升级步骤

常规, 28

受限的字符, 62

W

文件名

长, 59

X

性能认证, 70

许可, 28

Y

仪器配置, 29

索引

硬件

安装, 16

要求, 19

Z

助手, 38

资源冲突, 17

自动升级, 29

字符

受限的, 62

www.agilent.com

内容提要

将安捷伦化学工作站从 A/B.xx.xx 版升级到 B.03.01 版时，请使用本手册。

本手册介绍了升级到安捷伦化学工作站 B.03.01 版需要执行的必要步骤，还对比以前的化学工作站版本对所做的修改进行了详细说明，并介绍了如何使用更新的化学工作站文件（例如方法、序列等）进行操作。

本手册列出了要成功升级和操作安捷伦化学工作站需要满足的 PC 硬件和软件需求。

© Agilent Technologies 1994-2007

德国印刷
2007 年 2 月



G2170-97228



Agilent Technologies