



Agilent OpenLab CDS  
版本 2.4

## 发布说明

# 声明

## 手册部件号

M8410-97011 Rev. 2.4  
2019 年 2 月

## 版权所有

© Agilent Technologies, Inc. 2019

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

Agilent Technologies, Inc.  
5301 Stevens Creek Blvd.  
Santa Clara, CA 95051  
USA

## 软件版本

本指南适用于 2.4 或更高版本的 Agilent OpenLab CDS 软件，直至其替换为新版。

## 担保说明

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

## 技术许可

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

## 权力限制说明

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

## 安全声明

### 小心

**小心**提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。不要忽视**小心**提示，直到完全理解和符合所指出的条件。

### 警告

**“警告”**声明表示存在危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会导致人身伤害或死亡。除非已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视**“警告”**声明而继续进行操作。

# 目录

|          |                    |           |
|----------|--------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>简介</b>          | <b>4</b>  |
|          | 对于我们管理的客户          | 4         |
| <b>2</b> | <b>OpenLab CDS</b> | <b>5</b>  |
|          | 版本 2.4             | 5         |
|          | 版本 2.3             | 11        |
|          | 版本 2.2             | 14        |
|          | 版本 2.1             | 17        |
| <b>3</b> | <b>版本历史</b>        | <b>21</b> |

# 1

## 简介

本文档提供了每次发布 OpenLab CDS 软件及附加软件时对其所做的主要功能修改列表。

此外，还提供有关已知问题和解决方法的产品文档的参考信息。

### 对于我们管理的客户

当 Agilent 软件作出任何更改时，用户/客户需要重新确定软件的验证状态。

更改软件时，不仅为单个更改验证执行验证分析，而且要确定整个软件系统中更改的范围和影响。

## 2 OpenLab CDS

### 版本 2.4

#### 基础设施支持

OpenLab CDS 2.4 版本可在以下配置中运行：Workstation Plus、基于文件存储的工作站和客户端/服务器。

工作站、客户端和 Agilent 仪器控制器 (AIC) 支持以下操作系统：

- Windows 10，企业版或专业版 64 位（1703、1709 或 1803 版本）<sup>1</sup>
- Windows 7 SP1，企业版或专业版 64 位

此外，对于网络版部署，客户端和 AIC 支持：

- Windows Server 2012 R2，标准版或数据中心，64 位
- Windows Server 2016，标准版或数据中心，64 位

新支持 OpenLab ECM 作为 OpenLab CDS 的网络版安全存储库。支持的 OpenLab ECM 软件：

- 需要 OpenLab ECM 3.5 Update 6 或更高版本
- OpenLab ECM 3.6 版本

自 v2.3 开始未移除任何操作系统支持。

---

<sup>1</sup> 最新版本的支持信息请咨询 Agilent 代表

## 版本 2.4

### 采集

#### 优先样品提交

- 能够添加优先样品。用户可提交当前进样完成后优先采集的样品。

#### 编辑待运行的序列

- 能够编辑待运行的序列。用户可预览待运行序列并在不中断运行队列的情况下修改序列中所有待运行的行。

#### 支持使用 LC/MSD 的多增益采集

- 能够为相同的质量使用不同的增益设置以采集数据，并提高吞吐量（详见 [LC/MS 驱动程序更新](#)）。

#### SIM 离子覆盖

- 提交序列时，允许用户设置与采集方法当前设置不同的目标 SIM 离子。

#### 终止原因（详见[数据完整性增强](#)）

#### 控制客户端（详见[数据完整性增强](#)）

### Data Analysis 和 Reporting

#### 支持 MS 轮廓图模式

- 在轮廓图模式下采集和查看 MS 数据并通过从谱图峰提取的色谱图进行定量。

#### 改进自定义计算器表达式编辑器

- 采用通用脚本标准以提高可读性
- 自动填充和错误突出显示
- 缩进和嵌入式帮助

#### 多 MS 谱库检索

- 能够在处理方法中选择最多 10 个谱库来搜索 NIST 格式库中的谱图

## 版本 2.4

### CSV 文件的自动批导出功能

- CSV 文件包括质量、峰面积、峰高和保留时间。

### 自动计算 UV 纯度灵敏度值

- 能够根据化合物的灵敏度设置自动计算方法中所有化合物的纯度阈值。

### 签名顺序和签名锁定结果 (详见[数据完整性增强](#))

## 数据完整性增强

### 改善签名工作流程支持

- 能够实施可自定义的签名路径
- 能够在同一级别批准/拒绝多次

### 签名顺序和签名锁定结果

- 管理员现在可以配置和实施签名顺序。启用后，Data Analysis 中的签名必须遵循项目签名设置中规定的顺序和意图。对“签名设置”页面进行了额外增强，允许在第一次签名时自动锁定所有结果。

### 终止原因

- 如果为结果修改启用了原因，则用户故意终止运行队列项时会提示用户提供原因。

### 模糊锁定窗口

- 如果 OpenLab CDS 被锁定，则应用程序中的文本会模糊处理，以避免显示测试或描述中的机密或敏感信息。

### 控制客户端

- 在多用户环境中，有手动控制仪器权限的用户可以“控制”仪器以修改其设置。其他用户仍然可以向仪器运行队列提交运行，但一次只能有一个用户修改这些设置。这样可减少用户重叠错误，拥有控制权限的用户也可对仪器设置进行正确更改。

## 版本 2.4

### 附加软件

为 OpenLab CDS WorkStation Plus 和客户端/服务器推出 QualA 附加软件

- 新软件验证工具，允许客户自行为未来的次要软件发布执行软件验证评估。

Migration Tools for OpenLab 1.4 版本附加软件，支持以下软件迁移到 CDS 2.4（工作站到工作站）：

- ChemStation C.01.05、C.01.06 或 C.01.07
- EZChrom A.04.05、A.04.06 或 A.04.07

支持在 OpenLab CDS 工作站和客户端/服务器软件中创建和自动导出 Allotrope 文件。Allotrope Data Format (ADF) 文件是一种通用文件格式，Allotrope Data Format 及其结构的详细说明请见 Allotrope Foundation 网站 (<https://www.allotrope.org>)。

结果集/进样完成时自动创建 Allotrope Data Format。包含 LC-UV 分析原始数据（色谱图+光谱）以及元数据和原始 OpenLab CDS 文件。

- 手动导出结果集或序列



## 版本 2.4

### 驱动程序更新

随 OpenLab CDS 2.4 提供的 Agilent 仪器驱动程序数据包

| RC.NET 仪器驱动程序          | 驱动程序软件版本           | OpenLab CDS 2.4 默认安装 |
|------------------------|--------------------|----------------------|
| Agilent LC             | A.02.19.18 SR3     | x                    |
| Agilent ELSD           | A.01.07 (build 12) |                      |
| Agilent LC/MS SQ       | 2.2.2260           | x                    |
| Agilent GC             | 3.0.532            | x                    |
| Agilent GC/MS SQ       | 1.3 (build 54)     | x                    |
| Agilent 490 Micro GC   | B.01.12.1.2125     |                      |
| Agilent Headspace      | B.01.07.3          |                      |
| Agilent 35900E A/D 转换器 | 2.3 (build 53)     | x                    |
| Agilent SS420X A/D 转换器 | A.01.01 (build 65) | x                    |
| Agilent Data Player    | 2.2.6              | x                    |
| Agilent CTC PAL 3      | A.01.04.1          |                      |
| Agilent CTC PAL-xt     | B.01.08            |                      |

### 非 Agilent 仪器控制驱动程序

有关支持的非 Agilent 仪器的最新列表，请访问 OpenLab CDS 产品页面：  
[www.agilent.com/chem/openlabcds](http://www.agilent.com/chem/openlabcds)

### LC/MSD 驱动程序更新

#### 使用增益编辑方法

- 方法编辑现在支持使用增益代替 EMV。之前方法中的 EMV 将重置为 Gain=1。在方法中使用恒定增益让用户无需在严格控制的环境中控制增量 EMV 的变化。

#### 两种扫描类型与方法手动解析

- 驱动程序现在指定两种扫描类型：单离子监控 (SIM) 和扫描。“扫描”扫描类型在运行期间一直存在。如果扫描方法存在差异，则会显示带悬浮提示的“手动解析”窗口，供用户调整其方法。此外，用户可以选择“每秒目标点数”框以设置峰上的点数。驱动程序软件将自动计算扫描时间和驻留时间，以符合“每秒目标点数”设置。

#### 时间段在审计跟踪中而不在 UI 中

- 因为扫描在整个时间段内都会运行，所以审计跟踪反映了时间段的变化，而 UI 不再显示时间段。

#### 区分重叠质量扫描谱图

- 如果多个“扫描”扫描段中存在重叠质量且所有参数（碎裂电压，增益，极性）相同时，在 Data Analysis 中用户将无法区分重叠质量来自的扫描谱图。如果上述任何参数不同，用户即可根据 DA 中显示的参数区分谱图数据。

## 版本 2.3

# 版本 2.3

OpenLab CDS 2.3 版本可在以下配置中运行：Workstation Plus、基于文件存储的工作站和客户端/服务器。

工作站、客户端和 Agilent 仪器控制器支持以下操作系统：

- Windows 10，企业版或专业版 64 位，1607 或更高版本
- Windows 7 SP1，企业版或专业版 64 位

许可更新

- 升级时，OpenLab CDS 2.3 版本需要从 SubscribeNet 更新许可证文件。

升级安装后的功能验证

## 采集

运行队列中的 LC 关闭选项可让用户设置关闭操作

对运行队列中的运行/序列进行排序

- 用户可以编辑运行队列中等待中项目的顺序。

可以显示目前使用相同仪器的所有用户

自动序列总结报告

- 可以在序列提交时指定序列总结报告。

样品位置图形化显示

- 使用大多数 Agilent LC 进样器时，可选择在序列表中显示样品的位置。

## 版本 2.3

### Data Analysis 和 Reporting

从 3D 矩阵光谱中提取 2D (UV) 信号

- 可以定义指定色谱图提取参数，并对已提取色谱图中的化合物进行识别和定量。

交互光谱和信号提取的等吸收线图 UI

- 可以将 3D UV 矩阵光谱显示为等吸收线图，并提供用于方法优化的工具。

MS 峰纯度

- SCAN 和 SIM/SCAN 数据的 MS 峰纯度。用户可在处理方法中进行设置，以计算已识别峰和全部峰的 MS 峰纯度。

质量注释

- 可以使用基峰 m/z 来标记 UV 和 MS 色谱图峰。

色谱图平滑

- 可以在处理方法中设置平滑参数。

从其他项目调用方法

- 允许经过授权的用户浏览其他项目，打开方法，并将方法的副本保存到当前项目，或将其与结果集关联。

重叠不同项目中的色谱图

- 允许用户调用其他项目的数据来比较结果。

MS 调谐报告

- 可以显示进样树中所选进样的 MS 调谐报告。

增强条件格式和报告

- 改进表格、字段和矩阵的条件格式，包括多种颜色的选择。

自动导出 ChemStation 和 AIA 文件

- 作为自动处理方法的一部分，能够在运行序列中定义原始数据 (ANDI/AIA, CH) 的自动导出。

调用 ChemStation/EZChrom 方法

- 用户可以打开 ChemStation 或 EZChrom 中的结果集（可以自动导入和关联多个方法）。

OpenLab CDS Data Analysis 更新为真正的原生 64 位支持，可以处理较大的文件/数据。

## 版本 2.3

### 驱动程序更新

OpenLab CDS 2.3 版本安装的驱动包（版本）：

|                     |            |
|---------------------|------------|
| Agilent LC          | A.02.19    |
| Agilent LC/MSD      | A.01.02.35 |
| Agilent GC          | B.01.03    |
| Agilent GC/MSD      | A.01.02    |
| Agilent 35900E A/D  | 2.3.0      |
| Agilent SS420x 接口   | A.01.01    |
| Agilent Data Player | A.02.01    |

USB 介质中其他 RC.NET 驱动程序：

|                      |           |
|----------------------|-----------|
| CTC PAL3             | A.01.04   |
| PAL XT               | B.01.08   |
| ELSD                 | A.01.07   |
| Agilent 490 Micro GC | 1.12.3    |
| Agilent Headspace    | B.01.07.2 |

### 非 Agilent 仪器控制驱动程序

有关支持的非 Agilent 仪器的最新列表，请访问 OpenLab CDS 产品页面：  
[www.agilent.com/chem/openlabcds](http://www.agilent.com/chem/openlabcds)

## 版本 2.2

# 版本 2.2

## 基础设施支持

OpenLab CDS 2.2 版本可在以下配置中运行：Workstation Plus、基于文件存储的工作站以及客户端/服务器。

工作站、客户端和 Agilent 仪器控制器可在以下系统中运行：

- Windows 10，企业版或专业版 64 位
- Windows 7 SP1，企业版或专业版 64 位
- Windows 8.1，企业版或专业版 64 位

## 采集

自动创建序列结果文件夹和名称

支持模板文件共享的项目增强功能

- 可以共享多个项目中的序列和模板。

用于确保运行连续性的故障转移状态

- 出现网络连接故障时，可通过 AIC 提交样品。

实现从 68xx 到 78xx 和 Intuvo 的方法转换

- 可以打开 68xx 上创建的采集方法并在 78xx 或 Intuvo 上使用。

## 数据分析

通过 Data Analysis 捕获快照

- 可以查看、处理和打印正在采集的样品。

实现对 MSD ChemStation 数据格式的转换以导入 OpenLab CDS

## 版本 2.2

增强 Data Analysis 中的用户权限和版本访问

- 使用电子签名时自动锁定结果集
- 结果集签名或锁定后，版本标签不会改变
- 用户可以为锁定的结果集签名
- 允许加载可用的旧版处理方法和单次运行结果集
- 针对 MS 功能增强了用户权限控制

报告增强

- 使用鼠标滚轮即可放大/缩小报告预览
- 可以在页眉或页脚中添加任何数据字段
- 在筛选、分组和排序表达式中使用复杂的自定义字段
- 为自定义表格提供更多格式设置
- 添加了新选项，在使用已命名组时可以删除重复峰
- 为重复表格定义排序

集成模板文档工具

- 允许模板作者记录报告模板的设计。

MS 数据增强，包括：

- 表格和单个字段中报告方法覆盖参数的单个值
- 打印定性离子图形结果（限制线）和缺失的定性离子

## 附加软件

OpenLab CDS 支持以下附加软件（\*可能需要额外的许可证）：

- 支持用于 OpenLab 的 Sample Scheduler
- 支持凝胶渗透色谱 (GPC)\* 附加元件
- 手动导出旧有格式的数据文件：
- ChemStation Edition \*.D（包括 ch）
- AIA
- 支持用于 OpenLab 的 Match Compare\*

## 版本 2.2

### 驱动程序更新

OpenLab CDS 2.2 版本安装的驱动包（版本）：

|                     |           |
|---------------------|-----------|
| Agilent LC          | A.02.16.6 |
| Agilent LC/MSD      | A.01.02   |
| Agilent GC          | B.01.02   |
| Agilent GC/MSD      | A.01.01   |
| Agilent 35900E A/D  | 2.3.0     |
| Agilent SS420x 接口   | A.01.01   |
| Agilent Data Player | A.01.02   |

USB 介质中其他 RC.NET 驱动程序：

|                      |           |
|----------------------|-----------|
| CTC PAL3             | A.01.03   |
| PAL XT               | B.01.08   |
| ELSD                 | A.01.07   |
| Agilent 490 Micro GC | B.01.12   |
| Agilent Headspace    | B.01.07.2 |

### 非 Agilent 仪器控制驱动程序

- 包括对 Waters e-Alliance、Alliance、Acquity 和 Acquity H-Class LC 仪器的驱动程序支持
- 包括对 Bruker/Varian CP-3800/3900 和 Scion 430/450/456 GC 仪器的支持
- 包括对 Valco Instruments Valves 的支持：EMHCA-CE、EMHA-C、EMTCA-C
- 包括对 Shimadzu GC 和 LC 仪器的支持
- 包括对 Thermo Accela / Surveyor LC 仪器的支持



# 版本 2.1

## 基础设施支持的变更

### OpenLab CDS 工作站

- 第二个工作站产品的简介：基于文件的工作站（安全/非安全）。除了 Workstation Plus（使用 Content Management – 之前被称为“OpenLab CDS 工作站”），现在还有足迹更小的全新工作站，使用的是基于文件的存储。此外，还可以选择对项目文件夹进行保护，防止从 OpenLab CDS 外被修改。

### Windows 10 支持

- 工作站、客户端和 Agilent 仪器控制器可在 Windows 10 下运行（仍然支持 Windows 7 和 8.1）。

## 采集

### 双同步进样

- 用户可以创建双同步序列，以便让双塔 Agilent GC 实现高通量。

### 动态仪器配置

- 用户可以在采集客户端中对已配置的仪器进行有限的配置更改，无需从仪器控制面板对仪器进行重新配置，例如 LC 自动进样器毛细管配置、GC 进样口衬垫和进样针配置、GC 色谱柱配置、将 7890 GC 上的进样器从前进样口移动到后进样口等。有了此功能后，也无需在更新固件后对仪器进行重新配置。

### 从采集客户端打印：

- 可以从采集客户端预览和打印采集方法和序列列表。打印前，需要先保存采集方法和序列列表。用户可以将其另存为 PDF、Word 或 Excel，也可通过打印机打印。也可以在仪器状态面板打印配置报告。

### 方法参数覆盖功能：

- LC/MS 采集方法覆盖列（源参数和裂解电压）和化合物含量列被引入序列列表。在采集期间和进行后运行数据处理时，用户可以在该表中覆盖方法参数。

## 版本 2.1

LC/MS 的同步 SIM 和 SCAN 采集

运行后关灯：

- 引入了全局仪器设置，能够在可定义的运行空闲时间后自动关闭 LC 检测器的灯。

## 数据分析

空白扣除

- 使用空白扣除计算仅包含分析物的干净的色谱图。

定性离子支持

- 存在相对于目标离子来说含量适当的定性离子，为正确识别目标化合物提供依据。

在方法中存储手动积分

- 可以将手动积分校正复制到关联的处理方法中。

DA 搜索工具

- 在使用 Content Management 的工作站和客户端/服务器系统上，用户可以按照文本或时间段检索结果。

更高质量的报告

- 矢量图替代位图（色谱图和质谱/光谱图）。增加长期存储 PDF 报告格式（PDF/A-1b 格式）。

## 版本 2.1

### 驱动程序更新

新的软件版本更新了所有的驱动包。包括一些新的 RC.NET 驱动程序：

OpenLab CDS 2.1 版本安装的驱动包（版本）：

|                      |               |
|----------------------|---------------|
| Agilent LC           | A.02.14       |
| Agilent LC/MS SQ     | A.01.01       |
| Agilent GC           | A.03.02       |
| Agilent GC/MS SQ     | A.01.01       |
| Agilent 35900E A/D   | B.01.01.15272 |
| Agilent SS420x 接口（新） | A.01.01       |
| Agilent Data Player  | A.01.02       |

USB 介质中其他 RC.NET 驱动程序：

|                      |         |
|----------------------|---------|
| CTC PAL3             | A.01.03 |
| PAL XT               | B.01.08 |
| ELSD                 | A.01.05 |
| Agilent 490 Micro GC | B.01.12 |
| Agilent Headspace    | B.01.07 |

## 版本 2.1

### 非 Agilent 仪器控制驱动程序

- 包括对 Waters Acquity 和 Acquity H-Class 系统的驱动程序支持 (v A.1.2)
- 包括对 Bruker/Varian CP-3800/3900 和 Scion 430/450/456 GC 仪器的支持 (A.02.01)
- 包括对 Valco Instruments Valves 的支持：EMHCA-CE、EMHA-C、EMTCA-C (A.01.01)
- 进一步支持第三方仪器（单独发布，并不在 CDS 2.1 安装介质上）
- Shimadzu GC 和 LC（计划）
- Thermo Accela / Surveyor LC（计划）
- Waters e-Alliance LC（计划）

## 3 版本历史

有关发布时 OpenLab 软件的已知问题和解决方法，请参见网站中的“软件状态公告”文件：

[http://www.agilent.com/en-us/support/software-informatics/openlab-software-suite/openlab-chromatography-data-system-\(cds\)/m84xx](http://www.agilent.com/en-us/support/software-informatics/openlab-software-suite/openlab-chromatography-data-system-(cds)/m84xx)

您也可以访问 [www.agilent.com](http://www.agilent.com)，了解所有 Agilent 软件产品的最新发布信息。

# 内容提要

本文档提供了每次发布 OpenLab CDS 软件时对其所做的主要功能修改列表。

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

© Agilent Technologies, Inc. 2019

版本 02/2019

M8410-97011

