

GC-460
气相色谱仪
使用说明书

上海辉世仪器设备有限公司

【请仔细阅读本说明书；并妥善保管以备日后查阅或维修】

警告用语：

说明：此信息是厂商对仪器特别声明内容，值得你关注。

注意：此信息是值得你关注的重要内容。

警告：此信息是提醒你特别注意，如不按本规定操作可能导致你（他人）的人身伤害或本仪器的损坏。

危险：此信息表示高度危险，要警惕。

高压危险：

●在仪器运行时，严禁拆卸仪器盖板。仪器运行时，仪器的内部有可能导致人身伤害的高电压存在，拆卸仪器盖板时，可能使一些电器部件暴露。

●更换保险丝及拆装维护仪器时，应先拔掉电源插头。关闭仪器的电源开关只是停止仪器运行，此时并未完全切断高压。

●如果电源线老化或损坏，必须立即更换。

高温危险：

●仪器工作时或关机后一段时间内，仪器的进样器、检测器、柱箱及后出风口等部件会有一定的高温，应避免与其接触以防止烫伤。如需更换部件，一定要待仪器温度降低以后或使用保护措施后进行！

●要注意仪器降温时排出的灼热气体，防止烫伤；

●仪器背面严禁放置易燃物品，以免排出的灼热气体点燃易燃物品！

●聚氯乙烯等气路管道应避开仪器的后出风口，避免排出的灼热气体熔化气源管路造成危险！

气源危险：

●对于仪器所使用的气瓶、气源，应遵循有关的气瓶运输、储存、管理和安全使用规则。

●当使用氢气作载气或 FID 燃气时，要注意氢气可能会泄漏进入柱箱引起爆炸危险。所以在管路连接前一定要关闭气源，安装色谱柱并正确连接进样器和检测器的接头，对所有的管路连接点和阀进行检漏后，才能打开氢气气源，防止氢气泄漏发生爆炸。

●当进行特殊样品分析（如有毒）时，仪器可能排出有毒的物质，应将仪器的排空物质排放到室外安全处，以防止室内污染造成事故。

本说明文件中的信息如有更改，恕不另行通知。由于技术进步而造成的仪器升级（硬件及软件），厂家不再另行书面通知。

未经书面许可严禁翻印、摘录。

目 录

1. 仪器的介绍	
1.1 气相色谱仪的工作原理	
1.2 GC-460 色谱仪的特点	
1.3 GC-460 气相色谱仪的型号和技术指标	
1.3.1 GC-460 型气相色谱仪	
1.3.2 检测器技术指标	
1.4 GC-460 系列主要配置说明	
1.4.1 色谱柱箱	
1.4.2 填充柱汽化器	
1.4.4 热导检测器 (TCD)	
1.4.6 电子捕获检测器 (ECD)	
1.4.7 火焰光度检测器 (FPD)	
1.4.8 氮磷检测器 (NPD)	
1.5 仪器的应用环境	
1.5.1 安装环境	
1.5.2 电源环境	
1.5.3 气体环境	
2. 仪器的安装	
2.1 仪器的拆箱	
2.2 仪器的安装	
2.2.1 气源的选择	
2.2.2 减压阀的安装	
2.2.3 外气路的安装	
2.2.4 系统检漏	
2.3 工作站软件的安装	
2.3.1 软件运行环境	
2.3.2 工作站软件的安装	
2.3.3 工作站软件的卸载	
2.3.4 工作站软件的升级	
2.4 系统的开机	
2.4.1 计算机的网络设定	
2.4.2 色谱仪的网络参数设定	
2.4.4 系统的联调初测	
3. 色谱仪器的操作	
3.1 键盘操作	
3.1.1 温度控制的查看与设定	
3.1.2 开启或关闭控温系统操作	
3.1.3 程序升温的查看与设定	
3.1.4 网络参数的查看与设定	
4. 色谱仪工作站的操作	
4.1 工作站主界面功能	
4.2 下拉式菜单介绍	
4.2.1 文件 (F)	
4.2.2 系统 (S)	
4.2.3 帮助 (F)	
4.3 色谱仪管理	
4.3.1 设备机标识别	
4.3.2 设备名称	

4.3.3 设备序号 (MODBUS/TCP 通信 ID 码)	
4.3.4 其他信息	
4.4 谱图显示参数的查看与设置	
4.4.1 开始分析	
4.4.2 停止分析	
4.4.3 放弃分析	
4.4.4 上一视图	
4.4.5 下一视图	
4.4.6 基线扣除	
4.4.7 文件命名	
4.4.8 检测器设置	
4.4.9 基线数据	
4.4.10 谱图的显示	
4.4.11 停止时间	
4.4.12 结束后显示	
4.4.13 结束后打印	
4.4.14 基线调零	
4.4.15 暂停刷新	
4.4.16 多通道谱图对比	
4.4.17 仪器设置与方法设置的切换	
4.5 仪器的设置	
4.5.1 仪器的状态显示	
4.5.2 温度/流量的设定	
4.5.3 气路流量的设定	
4.5.4 程序升温和外设事件的设定	
4.5.5 进样器的设定	
4.5.6 网络参数的设定	
4.5.7 开始控温及结束控温	
4.5.8 开始分析及结束分析	
4.6 方法的建立	
4.6.1 基本概念	
4.6.2 仪器参数	
4.6.3 定量结果计算	
4.6.4 积分事件	
4.6.5 打印报告的设置	
5. 谱图的离线处理	
5.1 界面	
5.1.1 界面概述	
5.1.2 标题栏	
5.1.3 下拉菜单	
5.1.4 谱图操作工具条	
5.1.5 积分事件工具条	
5.1.6 谱图窗口	
5.1.7 方法编辑	
5.1.8 结果显示	
5.2 分析方法	
5.2.1 归一法操作步骤	
5.2.2 校正归一法操作步骤	
5.2.3 单点校正法 (单点外标或单点内标) 操作步骤	
5.2.4 多点校正法 (多点外标或多点内标) 操作步骤	
5.2.5 配合自动进样器操作步骤	
5.3 报告的打印	

6. 仪器的维护与保养	
6.1 进样器的清洗	
6.2 氢火焰离子化检测器的清洗	
6.3 色谱柱的安装	
6.3.1 填充柱的安装	
6.3.2 毛细管柱的安装	
6.4 气体净化器的维护	
7. 仪器的故障与排除	
7.1 开机问题	
7.1.1 开机无反应	
7.1.2 开机初始化不通过	
7.1.3 不联机	
7.1.4 联机但基线不走	
7.2 色谱峰问题	
7.2.1 无基线	
7.2.2 没有色谱峰	
7.2.3 正常滞留时间而灵敏度下降	
7.2.4 拖尾峰	
7.2.5 伸舌峰	
7.2.6 色谱峰分离不好	
7.2.7 平顶峰	
7.2.8 基线突变	
7.2.9 恒温操作时有不规则基线波动	
7.2.10 滞留时间延长灵敏度低	
7.2.11 出峰时信号突然回到低于基线并且灭火	
7.2.12 基线不回零	
7.2.13 不规则距离中有尖刺峰	
7.2.14 在相等间隔中有一定的毛刺	
7.2.15 圆顶峰	
7.2.16 基线噪音大	
7.2.17 额外峰	
7.2.18 锯齿型基线	
7.2.19 反峰	
7.2.20 没有进样而基线单方向变化 (FID)	
7.2.21 单方向基线漂移	
7.2.22 升温时不规则基线变化	
7.2.23 周期性基线波动	
7.2.24 程序升温后基线变化	
8. 热导检测器的维护	
8.1 热导检测器注意事项	
8.2 热导检测器常见故障分析与排除	
8.2.1 进样不出峰	
8.2.2 信号输出幅度太大 (未进样时)	
8.2.3 基线噪音大	
附录 A 电器条件细则	
附录 B 接 地	

欢迎您成为上海辉世仪器设备有限公司 GC-460 网络气相色谱仪的用户！

1. 仪器的介绍

1.1 气相色谱仪的工作原理

气相色谱分析技术是一种多组分混合物的分离、分析的技术。它主要利用样品中各组份的沸点、极性及吸附系数在色谱柱中的差异，使各组份在色谱柱中得到分离，并对分离的各组份进行定性、定量分析。

气相色谱仪以气体作为流动相（载气），当样品被送入进样器并气化后由载气携带进入填充柱或毛细管柱，由于样品中各组份的沸点、极性及吸附系数的差异，使各组份在柱中得到分离，然后由接在柱后的检测器根据组份的物理化学特性，将各组份按顺序检测出来，最后通过网络送至色谱工作站，由色谱工作站将各组份的气相色谱图记录并进行分析从而得到各组份的分析报告。其工作原理简图如下图所示：

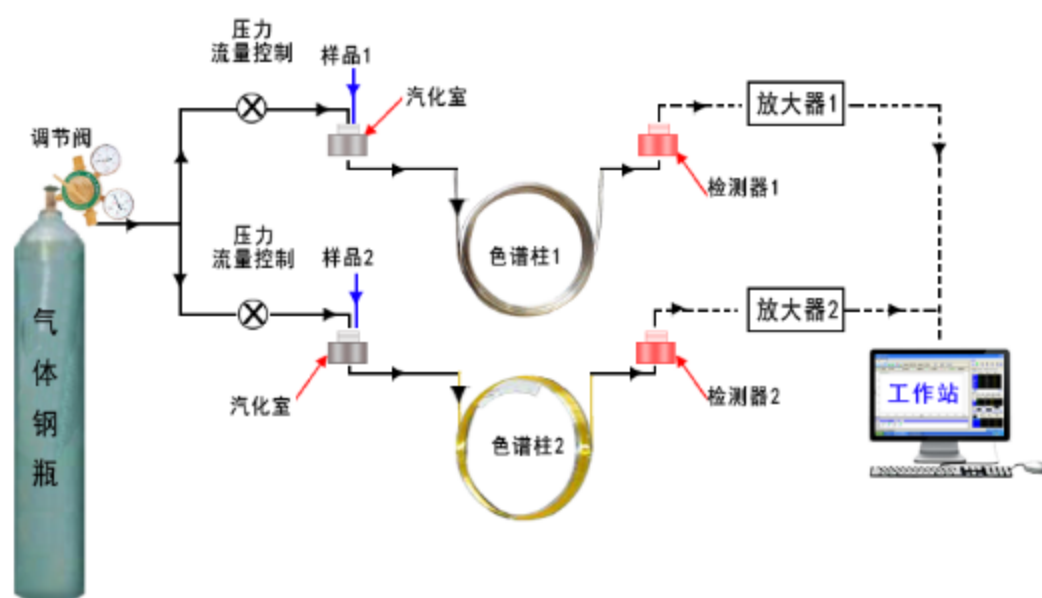


图 1.1 气相色谱仪工作原理简图

由于该分析方法有分离效能高、分析速度快、样品用量少等特点，因此已广泛地应用于石油化工、生物化学、医药卫生、卫生检疫、食品检验、环境保护、食品工业、医疗临床等部门。气相色谱法在这些领域中解决了工业生产的中间体和工业产品的质量检验、科学研究、公害检测、生产控制等问题。

1.2 GC-460 色谱仪的特点

传统气相色谱仪是以 1 台色谱仪、1 套工作站、1 台计算机、1 台打印机的方式工作。这种工作方式使得色谱仪配备较多的化工厂、实验室、院校等用户在使用和管理上非常不便，并且设备重复投资、浪费严重。配备大量的计算机也给

用户在设备管理和数据管理上带来诸多不便。同时这种传统的模式往往要采用一个厂家的气相色谱仪，又要采用另外一个厂家的工作站配合才能使用，使得系统整体的功能难以发挥、系统的性能也难以提高，对于用户提出的功能增加就更无从谈起了（比如数据的远程传输、多台仪器的监控等）。

针对这一传统气相色谱仪的使用弊端，上海辉世仪器设备有限公司应用工程师历数近十年的开发成果，采用全新的工业设计，将当前主流的网络通讯技术应用于气相色谱仪，开发出具有国际先进技术的新型气相色谱仪。仪器采用最新的高集成度的工业级芯片、总线技术、以太网技术以及数据处理软件、优化了温控精度和气体控制精度，从根本上提高了仪器的可靠性。

GC-460 气相色谱仪由于采用了网络通讯技术，并内置了高精度 **AD** 转化电路，实现多台色谱仪共用 **1** 套计算机完成数据分析、打印、存储；并实现了仪器的远距离控制和色谱数据的远距离传输，方便企业管理人员对产品质量的实时跟踪管理。

下图为 **GC-460** 色谱仪工作方式简图：

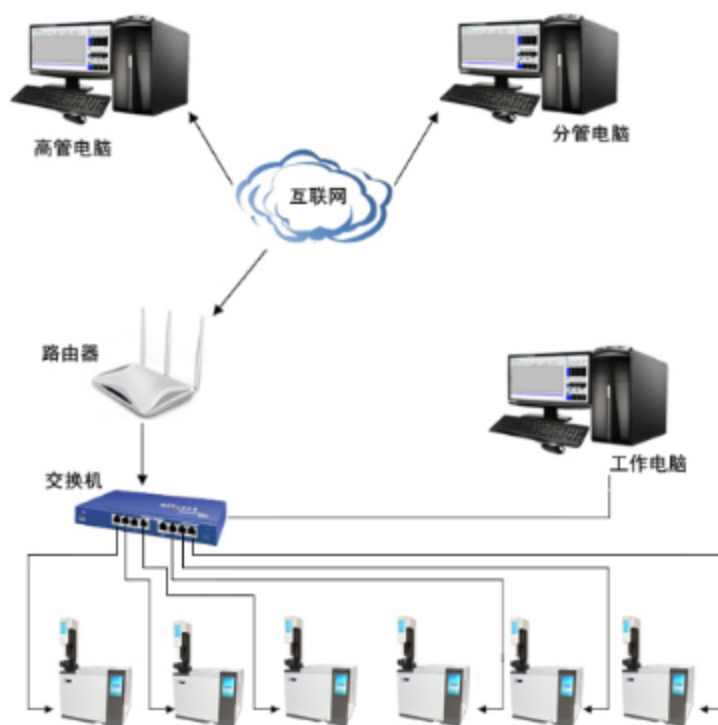


图 1.2 **GC-460** 气相色谱仪工作方式简图

GC-460 气相色谱仪特点：

★ 采用了技术先进的百兆/千兆以太网通信接口、并内置 IP 协议栈、使仪器可以通过企业内部局域网、互联网实现远距离的数据传输；方便实验室的架设、简化实验室的配置、方便分析数据的管理；

★ 仪器内部设计 3 个独立的连接 IP 地址，可以连接到工作电脑（实验室现场）、分管电脑（如质检科、生产部等）、以及高管电脑（如环保局、技术监督局等），需要时可实时监控仪器的运行以及分析数据结果；

-
- ★ 仪器配备的专用工作站可以同时支持多台色谱仪接入，实现数据处理以及仪器反向控制，简化文档管理；
 - ★ 仪器可以通过互联网连接到生产厂家，实现远程诊断、远程更新等（需用户设置）；
 - ★ 仪器配备的8吋彩色液晶触摸屏，支持热插拔，可作手持控制器使用；
 - ★ 仪器采用了多处理器并行工作方式，使仪器更加稳定可靠；可选配多种高性能检测器选择，如FID、TCD、ECD、FPD和NPD，最多可同时安装三个检测器，满足复杂样品的分析需求。
 - ★ 仪器采用模块化的结构设计，后期维护简单方便。
 - ★ 全新的微机温度控制系统，控温精度高，可靠性和抗干扰性能优越；具有八路完全独立的温度控制输出，可实现二十阶程序升温，具有柱箱自动后开门系统，近室温控制能力得到提高，升/降温速度更快；
 - ★ 仪器配置先进的电子流量控制单元（EFC）、电子压力控制单元（EPC）实现了气路的数字化控制，大大提高了仪器的稳定和分析结果的重现性；
 - ★ 色谱机内置低噪声、高分辨率24位AD电路，并具有基线存储、基线扣除的功能。
 - ★ 标配的工作站适于 WinXP、Win2000、Win7、Win8、Win10 等操作系统。
 - ★ 具有完全自主知识产权的色谱仪微机系统具有 MODBUS/TCP 的标准协议，可以对接 DCS 系统。

1.3 GC-460 气相色谱仪的型号和技术指标

GC-460 气相色谱仪由进样器、检测器、色谱柱箱、气体流量控制系统、加热控制系统、信号检测系统及网络数据传输工作站等组成。

1.3.1 GC-460型气相色谱仪

GC-460 型气相色谱仪具有网络远程控制功能，使仪器在无人值守、分散监测、集中控制成为现实。

主要技术指标：

- 操作显示：8 吋彩色液晶触摸屏，可作手持控制器使用
- 温控区域：8 路
- 温控范围：室温以上4℃～450℃，增量： 1℃， 精度：±0.1℃
- 程序升温阶数：20阶
- 程升速率：0.1～60℃/min
- 量程：0～0.25Mpa（压力）；0～1000mL/min（流量）
- 外部事件：8路；辅助控制输出2路
- 进样器种类：填充柱进样、毛细管进样、六通阀气体进样、自动进样器

- 检测器数目：3个（最多）；FID、TCD、ECD、FPD和NPD任选
- 启动进样：手动、自动可选
- 通信接口：以太网：IEEE802.3

1.3.2 检测器技术指标

氢火焰离子化检测器 (FID)

- 检测限： $\leq 5 \times 10^{-12} \text{ g/s}$ (正十六烷)
- 基线噪声： $\leq 3 \times 10^{-14} \text{ A}$;
- 基线漂移： $\leq 1 \times 10^{-13} \text{ A} / 30 \text{ min}$

- 线性范围： $\geq 10^6$

热导检测器 (TCD)

- 灵敏度： $S \geq 5000 \text{ mV} \cdot \text{ml} / \text{mg}$ (苯/甲苯)
- 基线噪声： $\leq 0.05 \text{ mV}$
- 基线漂移： $\leq 0.1 \text{ mV} / 30 \text{ min}$ / 30min

- 线性范围： $\geq 10^4$

电子捕获检测器 (ECD)

- 检测限： $\leq 1 \times 10^{-13} \text{ g/ml}$ (丙体六六六-异辛烷溶液)
- 基线噪声： $\leq 0.03 \text{ mV}$
- 基线漂移： $\leq 0.2 \text{ mV} / 30 \text{ min}$
- 线性范围： 10^3
- 放射源： ^{63}Ni

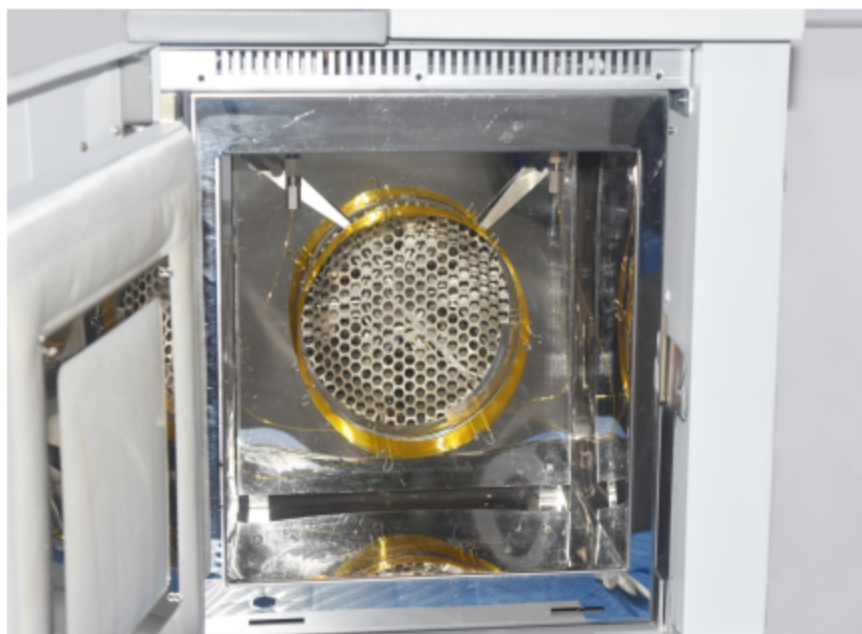
火焰光度检测器 (FPD)

- 检测限： $(\text{S}) \leq 5 \times 10^{-11} \text{ g/s}$ 、 $(\text{P}) \leq 1 \times 10^{-12} \text{ g/s}$ ；甲基对硫磷-无水乙醇溶液)
- 基线噪声： $\leq 3 \times 10^{-13} \text{ A}$
- 基线漂移： $\leq 2 \times 10^{-12} \text{ A} / 30 \text{ min}$
- 线性范围：对硫 $\geq 10^2$ 、对磷 $\geq 10^3$

1.4 GC-460 系列主要配置说明

1.4.1 色谱柱箱

GC-460 系列气相色谱仪的柱箱容积大，可方便安装填充柱或毛细管柱；内置大功率加热丝并具有后开门结构，使升降温速度大为提高；柱箱控温保护采用双重软件保护，确保色谱柱的安全；热搅拌采用低噪声电机及优质不锈钢风页，仪器运行平稳。



1.4.2 填充柱汽化器

GC-460 气相色谱仪的填充柱汽化器安装在柱箱顶部左前侧，其结构如图 1.7 所示。由微机控制器设置并控制其温度。进样器的最上部是一个散热帽，散热帽的下部嵌装有硅橡胶进样垫。进样器的载气进口和气路控制系统中的输出口相连接。



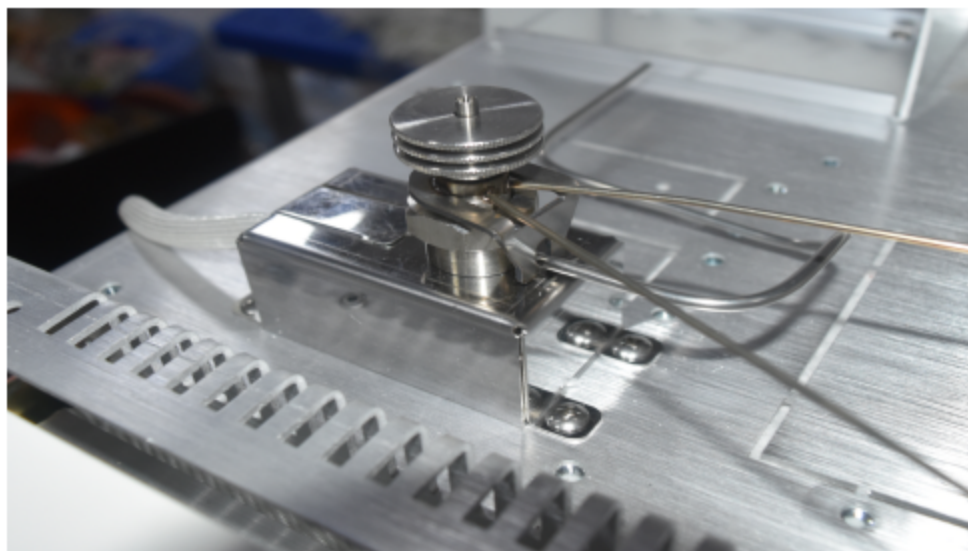
1 散热帽 2 进样垫 3 导向件 4 汽化管 5 铂电阻 6 加热管

图 1.7 GC-460 气相色谱仪进样器结构示意图

注：1. GC-460 系列气相色谱仪配备多个进样器安装，最多同时安装 3 根填充色谱柱；

2. GC-460 系列气相色谱仪的进样器可以直接安装外经为 $\Phi 4\text{mm}$ 的填充柱，通过加装衬管，还可以安装外经为 $\Phi 3$ 的填充柱；

3. GC-460 系列气相色谱仪可以安装专用的毛细管隔膜清扫分流进样器来实现毛细管分流/不分流进样。最多同时安装 2 个。

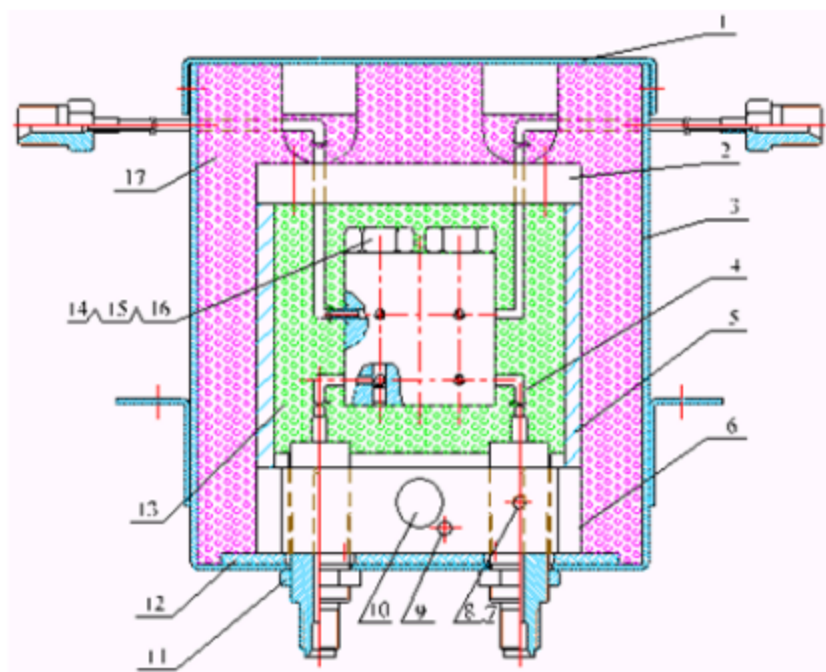


- 1 导向器(毛细) 2 螺帽(毛细) 3 进样器 4 垫片 5 六角螺帽 6 O 型垫圈
7 气化的(毛细) 8 滑套 9 导管 10 铂电阻 11 加热丝 12 垫片 13 接头

图 1.8 隔膜清扫分流进样器结构示意图

1.4.4 热导检测器 (TCD)

GC-460 系列气相色谱仪可配备热导检测器 (TCD)。TCD 检测器结构如图 1.9 所示。



1 外壳盖 2 上盖 3 TCD 盒 4 TCD 检测器 5 导热体 6 底座 7 螺钉 8 压片 9 铂电阻
10 加热丝 11 螺母 12 石棉隔热垫 13 空气浴室 14 螺母 15 垫圈 16 钨丝 17 保温棉

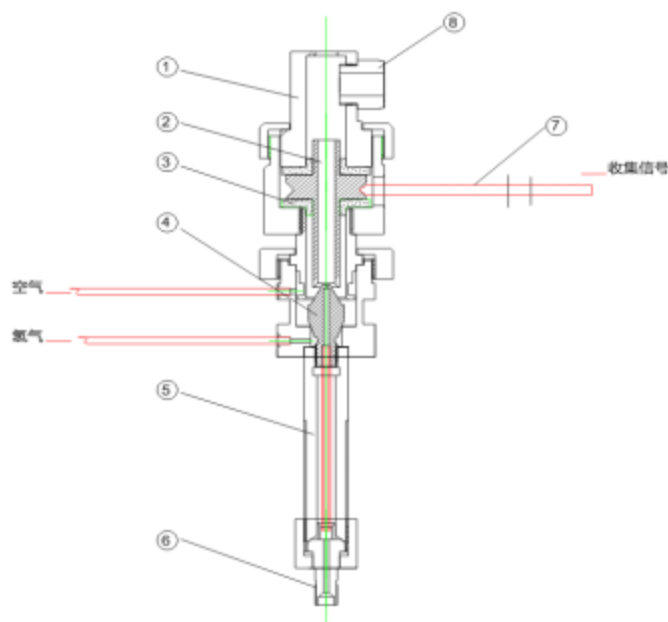
图 1.9 TCD 检测器结构示意图

它的结构及工作原理是：在一个导热体中加工四个对称的腔室，每个腔室中各放一个热敏元件。其中，两个腔室是测量池，另外两个是参比室。测量池和参比池内的热敏元件组成了惠斯登电桥的四个臂。该电桥接入热导检测器信号处理板以控制电桥的工作及色谱数据的处理。在热导检测器内还装有电热元件和温度测量传感器，与温度控制系统相接以控制其加热温度。

TCD 参比池仅通过载气气流，从色谱柱流出的组份同载气一起进入测量池。当参比池和测量池只流过载气时，同一气体其导热系数相同，这时电桥平衡，色谱仪输出基线信号。当进样的时候，样品被分离后，由载气携带进入测量池，由于载气的导热系数和组份的导热系数不同，造成电桥平衡破坏，色谱仪输出谱峰信号。

1.4.5 火焰离子化检测器 (FID)

FID 检测器属于质量型检测器，不仅具有灵敏度高、线性范围宽的特点，而且对操作条件变化相对不敏感，稳定性好。特别适合做常量或微量的常规分析，因为响应快所以与毛细管分析技术配合使用可完成痕量的快速分析，是气相色谱仪器中应用最广泛的检测器；GC-460 系列气相色谱仪可配备两个独立的氢火焰离子化检测器。



1 防尘帽 2 收集极 3 收集极隔热垫 4 喷嘴 5 汽化室 6 毛细柱接头 7 信号输出筒 8 点火电极

图 1.10 FID 检测器结构示意图

FID 检测器置于主机的顶部前端。其基座安装在一个导热体内，该导热体同时还装有电热元件和温度测量传感器，与温度控制系统相接以控制其加热温度。极化极接至 FID 微电流放大器的极化电压输出。收集极输出信号是通过低噪声电缆线与 FID 微电流放大器相连。氢气和空气由不锈钢管从主机上方的气路控制系统的接头处进入。

火焰离子化检测器的原理是：被测样品在氢火焰中燃烧，产生离子流，在极化电场的作用下使正负离子定向的移动，到达收集极从而产生了微弱的电流信号，经过微电流放大器放大、处理后，再输送到色谱数据处理系统。

警告：在仪器工作时，捕集极存在 200 伏特高压，请防止电击！

1.4.6 电子捕获检测器 (ECD)

电子捕获检测器 (electron capture detector, ECD)。电子捕获检测器也是一种离子化检测器，它是一个有选择性的高灵敏度的检测器，它只对具有电负性的物质（如含卤素、硫、磷、氮）有响应，物质的电负性越强，也就是电子吸收系数越大，检测器的灵敏度越高，而对电中性（无电负性）的物质，如烷烃等则无信号。

ECD 检测池中封入得放射源 (^{63}Ni) 所产生的放射线 (β 线) 使惰性气体 (N_2) 电离，在检测池的收集极上施加脉冲电压，捕获电子产生电流。当强电负性分子进入其中，吸收电子，形成负离子。由于带负电荷的分子比自由电子的移动速度慢，到达正电极的时间长，而且与正离子再结合的概率也增大，使检测器中的电子密度减小，一个脉冲捕获的电子数减少。根据电子数减少的程度相应加上多次脉冲，以保持每个单位时间内电子数的电流恒定，则脉冲数的变化与强电负性分子的密度成正比。

ECD 装置原理图如下：

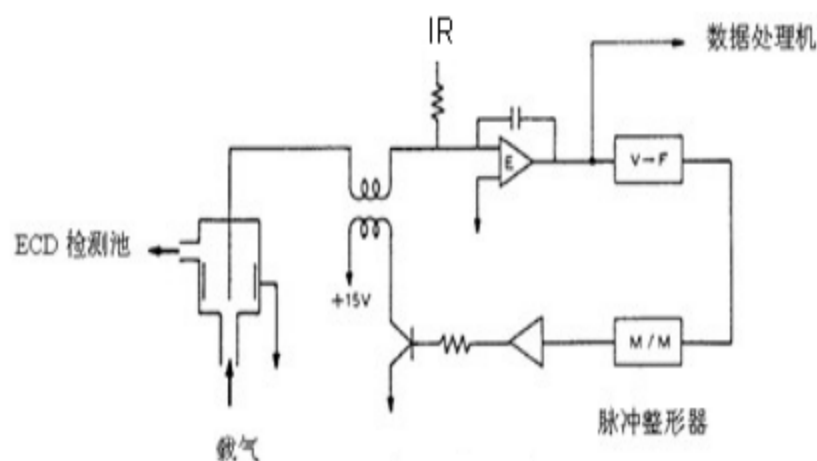


图 1.11 ECD 装置简图

通过放大器 E，比较设定电流 I_R 与 ECD 检测池形成的平均脉冲电流，将两者相等时的电压送入下段的电压—频率变换器（VFC）。VFC 发出的脉冲调到适当的脉冲幅度和脉冲高度后送到 ECD 检测池，构成控制电路。

警告：严禁不采取专业的保护措施拆卸 ECD 检测器！（放射源（ Ni^{63} ）将会使您的健康受到伤害）

放射源（ Ni^{63} ）是受严格管控材料，严禁 ECD 检测器做普通废弃物丢弃！设备报废，放射源（ Ni^{63} ）请有专业资质的厂家回收处理！

1.4.7 火焰光度检测器(FPD)

火焰光度检测器(flame photometric detector,FPD)是气相色谱仪用的一种对含磷、含硫化合物有高选择型、高灵敏度的检测器。试样在富氢火焰燃烧时，含磷有机化合物主要是以 HPO 碎片的形式发射出波长为 526nm 的光，含硫化合物则以 S_2 分子的形式发射出波长为 394nm 的特征光。光电倍增管将光信号转换成电信号，经微电流放大纪录下来。此类检测器的灵敏度可达几十到几百库仑/克，最小检测量可达 10^{-11} 克。同时，这种检测器对有机磷、有机硫的响应值与碳氢化合物的响应值之比可达 10^4 ，因此可排除大量溶剂峰及烃类的干扰，非常有利于痕量磷、硫的分析，是检测有机磷农药和含硫污染物的主要工具。

如图1.12所示，FPD主要由二部分组成：火焰发光和光、电信号系统。

火焰发光部分由燃烧器和发光室组成，各气体流路和喷嘴等构成燃烧器，又称燃烧头。通用型喷嘴由内孔和环形的外孔组成。气相色谱柱流出物和空气混合后进入中心孔，过量氢从四周环形孔流出。这就形成了一个较大的扩散富氢火焰、烃类和硫、磷确化合物在火焰中分解，并产生复杂的化学反应，发出特征光。硫、磷在火焰上部扩散富氢焰中发光，烃类主要在火焰底部的富氧焰中发光，故在火焰底部加一不透明的遮光罩挡住烃类光，可提高 FPD 的选择性。为了减小发光室的体积，可在喷嘴上方安一玻璃或石英管，以降低检测器的响应时间常数。

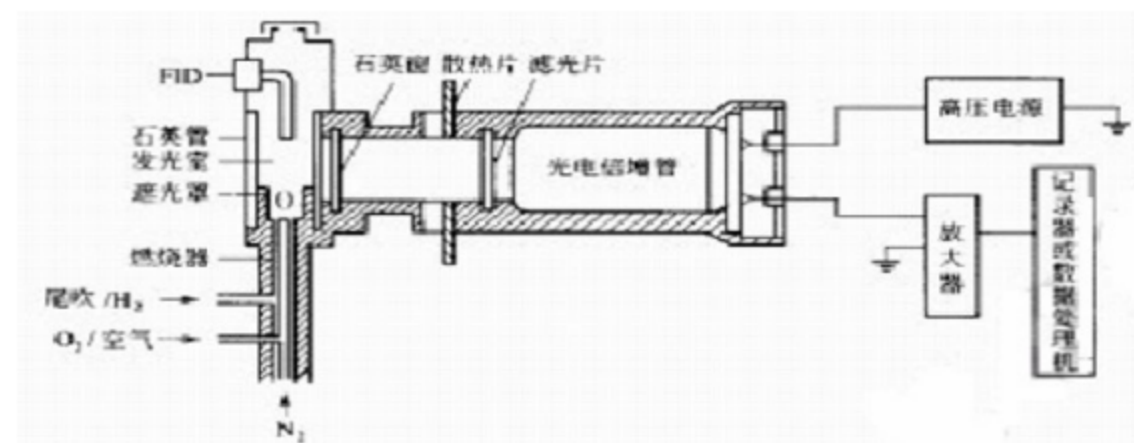


图 1.12 FPD 系统示意图

右为光、电信号部分，为了避免发光中产生的大量水蒸气，燃烧产物和高温对光、电系统的影响，用石英窗和散热片将发光室和光电系统隔开。因 FPD 不

是将所有的光变成电信号，而是用滤光片选择硫、磷特征光。

警告：严禁在检测器漏光的情况下打开高压电源！

1.4.8 氮磷检测器(NPD)

氮磷检测器(NPD)又称热离子化检测器(TID)是分析含 N、P 化合物的高灵敏度、高选择性和宽线性范围的检测器。1961 年 Cremer 等最初研制的火焰热离子化检测器是在 FID 检测器的喷嘴上方加热碱源。由于采用的碱源为挥发性碱金属，寿命短、检测器灵敏度不稳，无推广价值；1974 年 Kolb 采用不易挥发性碳酸铷和二氧化硅烧结成硅酸铷珠，解决了铷珠寿命短的缺点，由于铷珠在冷氢焰中用电加热。因此检测器的稳定性明显改善、灵敏度显著提高，背景基流从 10^{-9}A 降至 10^{-13}A ，从而使 NPD 一越为气相色谱仪中最常装备的检测器之一，成为检测痕量氮、磷化合物的气相色谱专一检测器广泛被用于环保、医药、临床、生物化学、食品等领域。

NPD 的结构与操作因产品型号不同而异，典型结构如图 1.13 所示

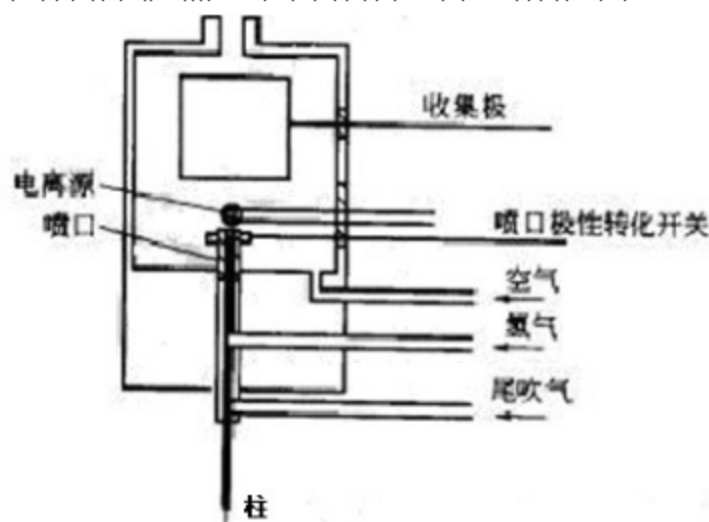
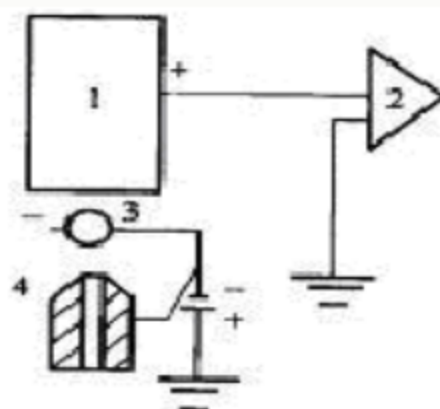


图 1.13 NPD 的结构图

GC-460 检测器 NPD 的操作方式为氮磷型操作，喷嘴不接地，如图所示，



1—收集极 2—放大器 3—离子源 4—喷嘴

图 1.14 喷嘴不接地简图

空气和氢气流量较小 [$V_{\text{空气}} < 150 \text{ ml/min}$, $V_{\text{H}_2} < (4 \sim 9 \text{ ml/min})$] 被电加热至红热的电离源, 在电离源周围形成冷焰, 含 N、P 的有机化合物在此发生裂解和激发反应, 形成 N、P 的选择性检测, 对烃的选择性可达 $10^3 \sim 10^4$ 。

1.4.9 显示屏与键盘

GC-460 系列的显示屏均为 8 寸彩色液晶触摸屏, 用户可一目了然的查看仪器的工作状态。

触摸屏界面设计简洁明了、功能齐全、操作简单、易学易用。

1.4.10 外部事件控制与通信输出

GC-460 系列气相色谱仪的外部事件控制在仪器的内部。控制主板右侧一列为外部事件控制输出。自下而上二个端子为一组。分别为: 事件 1、事件 2、事件 3、事件 4、事件 5、事件 6、事件 7、事件 8、事件 9、事件 10

仪器的通信采用百兆/千兆自适应以太网接口。通过网线与安装工作站的计算机连接

注: 为了保持仪器的高分辨率、高稳定性, 在仪器的内部集成了 24 位的 AD 电路, 常规的模拟信号不再输出, 且只能与本公司的工作站相接。

1.4.11 电源开关

电源开关仅为机器的电源开关。

警告: 当打开机器, 可能触及电气部分时, 应将电源插头拔离电源! 关闭电源开关, 色谱仪器内部部分电器仍有高压存在!

1.4.12 GC-460 气相色谱仪工作站 (网络版)

为适应气相色谱仪的网络化需求, 从根本上解决传统色谱仪的使用弊端, 公司研发了突破传统的专用工作站。该工作站适用于气相色谱仪。

工作站除保留了传统工作站的功能外, 增添了多个创新功能。工作站采用的机理先进、通信容量大、接口方便的以太网通信方式, 可以支持多台色谱仪的多个通道的数据同时处理 (最多支持 5000 个色谱仪接入); 由于支持多台色谱仪, 谱图文件的管理系统设计了自动生成色谱仪文件夹、自动生成时间文件夹、以及按时间、班次或序列命名谱图文件功能, 简化了文档管理, 方便了用户使用。

该网络版工作站突破了传统工作站的只能纸质输出报告的模式, 开发了可以将分析结果通过多种传输方式 (互联网、CAN 总线、MODBUS/TCP、GPRS 通信、3G 通信、无线专网等) 远程地传输到客户需要的地方。这一功能极大地方便了用户的使用, 使人工送样 (配合自动进样)、人工传送报告成为了历史, 节省了人力物力。

该网络版工作站可配备“组份含量监控系统”, 完成色谱组份含量的统计、分析、监控, 可用于化工产品生产中 (如: 反应、分流、精馏等) 对样品进行各个组份的数据统计、含量变化趋势、阈值检测、阈值报警, 使组分含量变化趋势一目了然, 当天或当班的数据自动存档, 免去了人工分析谱图、人工整理谱图、人工判断结果, 提高了工厂的自动化水平。

特点与功能:

- 色谱数据处理与仪器操作控制有机的结合, 使得操作方便, 界面友好;
- 采用 10/100M 或千兆自适应以太网通信技术; 通信速率高、支持远距离传送和控制;
- 采用多线程技术实现信号采集、数据处理、用户管理三者同时协同工作;

- 独特的软件架构，实现了一个系统多个监控座席的丰富配置；使得仪器数量不多的用户可以在单一电脑上完成分析结果的查看管理；仪器数量较多的用户可以配备多个监控座席以满足多人同时工作；
- 配备分析结果扩展通信接口，支持用户二次开发和功能扩展；
- 独有的谱峰智能辨识技术，最大程度的减少需要用户设置的谱图处理参数，基本实现判峰、基线校正、重叠峰分割的自动处理；
- 可由符合 A/A(美国分析学会)标准的 CDF 文件读入采样数据，由此可与 Agilent、Waters 等色谱工作站接轨；
- 采用独有的高保真数字滤波算法，拥有强大的抗噪声干扰能力，可以检测与基线噪声同级的弱小峰；
- 数据处理具有：归一法、校正归一法、单点校正法（单点内标法、单点外标法）、多点校正法（多点内标法、多点外标法）；
- 工作站支持 MODBUS/TCP 协议，可以方便接入 DCS，完成分析结果的 DCS 处理；

1.5 仪器的应用环境

1.5.1 安装环境

GC-460 气相色谱仪应在温度和相对湿度分别为 5~35℃和 0~85%的范围内使用。但最好是在人们感到舒适的环境下使用（适当的恒温、恒湿条件）。这样仪器才能发挥最佳的性能，仪器的使用寿命也最长。

若将仪器暴露在腐蚀性物质（不管是气体、液体还是固体）中，就会危及 GC-99 气相色谱仪材料和零部件，应避免。

安装 GC-460 气相色谱仪的试验台必须稳固。试验台的震动会影响仪器的稳定性。为了能使柱炉的热空气的排出，仪器的背后还应留出至少 30cm 的空间（且在后面不要放置易燃物品！），以及 30—40cm 的通道，以便安装、检修色谱仪。

GC-460 气相色谱仪需要 10/100M 或千兆的以太网。可以用 HUB 或交换机等构建以太网。

1.5.2 电源环境

GC-460 气相色谱仪的接入电源为 220V±10%（50Hz±0.5 Hz），电能提供的功率不小于 2600W。为了保护人身的安全，GC-460 气相色谱仪的面板和机壳按照国际电工技术协会的要求，用三芯电源线接地。

注：为了减少仪器的电器噪音，必须接地良好。

警告：严禁将水管、煤气管、零线等代替接地线！

1.5.3 气体环境

检测器	气体作用	气体名称	纯度
FID	载气	He 或 N2	不小于 99.999%

TCD	载气	N2 或 He	不小于 99.999%
ECD	载气	N2	不小于 99.999% (脱氧)
NPD	载气	N2 或 He	不小于 99.999%
FPD	载气	N2 或 He	不小于 99.999%
	尾吹气	N2	不小于 99.99%
	燃气	H2	不小于 99.99%
	助燃气	Air	洁净、干燥

为了发挥 GC-460 气相色谱仪最佳性能，使用气体必须达到相应纯度级别。我们推荐如下的纯度值。

我们建议在气路上要装上净化器！气体净化器在使用了一段时间后，应将气体净化器内的分子筛和硅胶进行活化处理。

2. 仪器的安装

2.1 仪器的拆箱

仪器到货后请及时检查仪器外包装的质量，如有损坏，请立即与厂家或销售商联系。拆箱后，请对照发货单清点配套部件，如发现配套部件不符或仪器外观有破损现象，请立即与厂家或销售商联系，以便您免受不必要的经济损失或延误您的工作。

2.2 仪器的安装

检查无误后，将仪器小心放置在工作台合适的位置。工作台必须稳固。仪器后面不要堆放易燃物品并留有检修的空间。

2.2.1 气源的选择

使用 GC-460 气相色谱仪之前请参照 1.5.3 所述，并根据你欲使用的检测器的种类配备气源。

气源请安装在安全之处。如采用钢瓶气源，钢瓶应加以固定以防止翻倒造成事故。无论选择何种形式的气源（如：气体发生器，钢瓶气源，空气压缩机等），皆应仔细查阅所产生气体的质量是否满足 GC-460 气相色谱仪的气源要求。以免影响分析结果或造成色谱仪的污染甚至损坏！

2.2.2 减压阀的安装

如采用钢瓶式气源，其减压阀安装步骤如下：

1. 将二只氧气减压阀和一只氢气减压阀的低压出口头分别拧下，接上减压阀接头，旋上低压输出调节杆（不要旋紧）；

2. 将减压阀装到钢瓶上，旋紧螺帽后，打开钢瓶高压阀，减压阀高压表应有所指示；
3. 关闭钢瓶高压阀后，减压阀高压表指示不应下降，否则就有漏气之处，应予以排除后才能使用。

2.2.3 外气路的安装

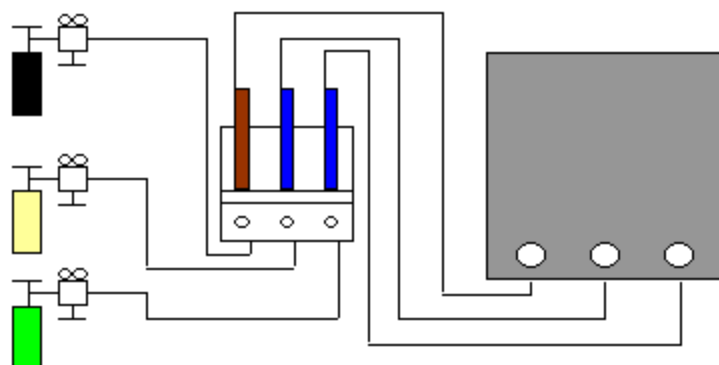


图 2.1 外气路连接示意图

GC-460 气相色谱仪采用 $\Phi 3 \times 0.5$ 外径的不锈钢或紫铜管来作为外气路的连接管。
其连接方法如上图 2.1

注意：

1. 气路分流失空口和检测器放空口应采用管道将气体通到室外，以免分析有毒有害物质时造成室内空气污染；
2. 在实操中，注意经常检漏！一旦某处发生泄露，轻则影响仪器正常工作，重则造成意外事故（如氢气泄露就可能引起爆炸）！
3. 载气输入到色谱仪的压力：0.5MPa；
4. 空气输入到色谱仪的压力：0.5MPa；
5. 氢气输入到色谱仪的压力：0.4MPa；

2.2.4 系统检漏

外气路安装完成后，需进行检漏，以免造成事故发生。检漏按如下步骤执行：

- (1) 将主机电源关闭
- (2) 将钢瓶低压调节杆处于放松状态，开启钢瓶高压阀，再缓慢调节低压调节杆，使低压表指示为 0.5 MPa；
- (3) 关闭钢瓶高压阀。此时减压阀上的低压表指示不应下降。否则，外气路中存在漏气，应仔细检查并予以排除。

2.3 工作站软件的安装

2.3.1 软件运行环境

GC-460 气相色谱仪不同于一般的气相色谱仪，它需要一个 10/100M 的自适应网络环境（当需要通过互联网远程数据传输时，还需要互联网的接入服务）以及一套已经装了中文 Windows2000、XP、win7、win8 操作系统的计算机。

构建网络环境非常简单。如果用户的实验室已经具备了网络环境（本网络环境还有 IP 剩余的情况下），则可以直接用网线将仪器接入这个网络。如果用户的实验室没有网络或有意将仪器的网络与办公网络隔离时，可采用交换机、HUB 等构建一个专用的网络。交换机、HUB 等可以在当地的计算机商店采购，也可以在仪器订购时由厂家或经销商代为采购。

本仪器的工作站软件运行的计算机没有特殊要求。计算机要求为：

- 1、奔腾 CPU 2.0G 以上，内存 1G 以上；
- 2、安装了中文 Windows2000、XP、win7、win8 操作系统；
- 3、10/100M 自适应网口；
- 4、安装有光驱（如果要备份刻录谱图数据，可以选用带刻录功能的光驱）；
- 5、安装有本地打印机或网络打印机。

2.3.2 工作站软件的安装

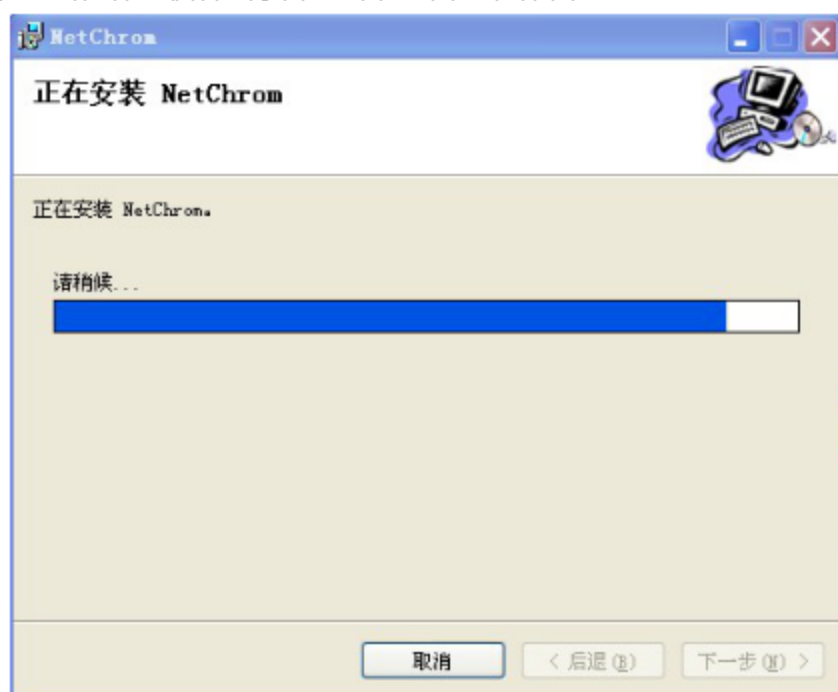
将软件光盘放入光盘驱动器，双击 setup 文件，会启动安装程序。界面上会显示：



单击“取消”则退出安装，单击“下一步”即进入安装。



系统将默认将文件安装在“C:\NetChrom\”目录里。如果此时要退出安装，则单击“取消”；如果要返回上一步，则单击“后退”；如果确定安装到这个目录，则单击“下一步”则启动程序安装；如果选择安装其他目录，则在“预览”里选择安装目录后再单击“下一步”启动程序安装；“数据处理”软件安装完毕后会进入“工作站”软件的安装，会显示如下界面：



如果此时要退出安装，则单击“取消”。继续安装则稍等几秒钟会出现如下界面：



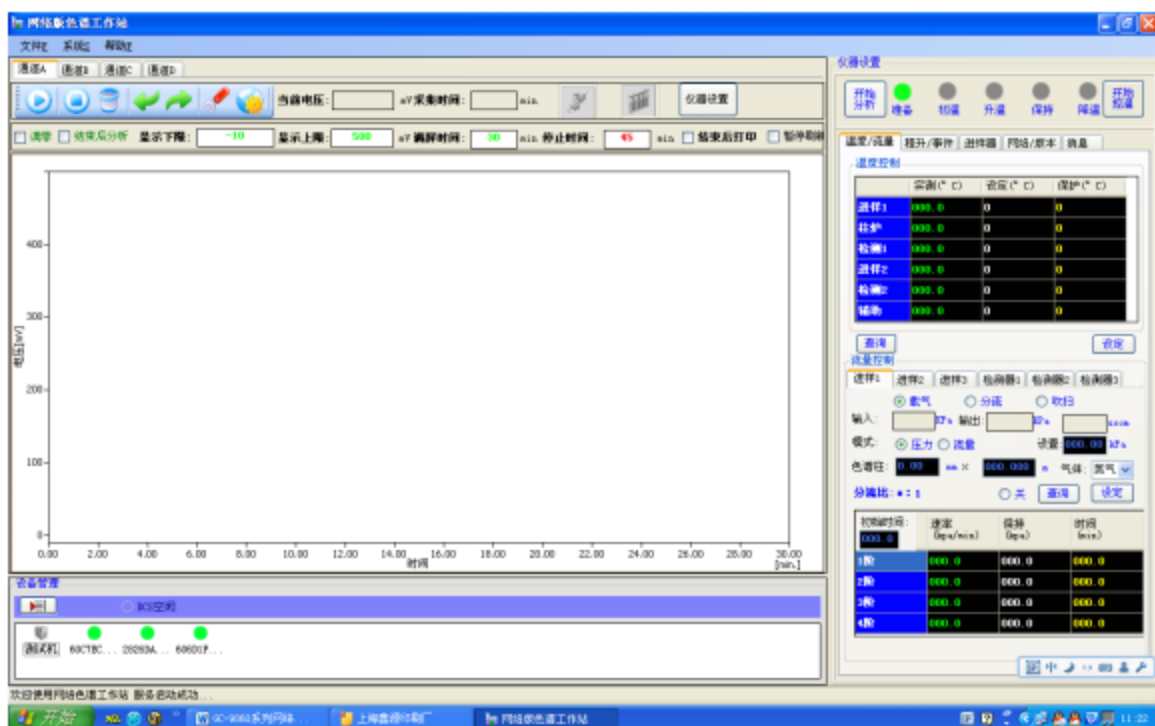
表示软件安装完毕，单击“关闭”即可。

单击“关闭”，该界面自动消失，桌面即会出现“NetChrom”和“NetChromoffline”两个图标。



其中“NetChrom”为网络色谱工作站，“NetChromoffline”为离线处理工作站。

双击“NetChrom”图标，则运行网络色谱工作站。界面如下图所示：



其详细使用见后第 4 和第 5 章节。

2.3.3 工作站软件的卸载

当需要卸载本系统时，点击开始—>所有程序—>NetChrom 中的卸载，则弹出如下界面。



如果放弃卸载，点击取消返回；如果确认要卸载，点击确定，则进入系统卸载状态；如下图所示：



卸载完毕，界面退出。

2.3.4 工作站软件的升级

详见：4.2.3.3 检查更新。

2.4 系统的开机

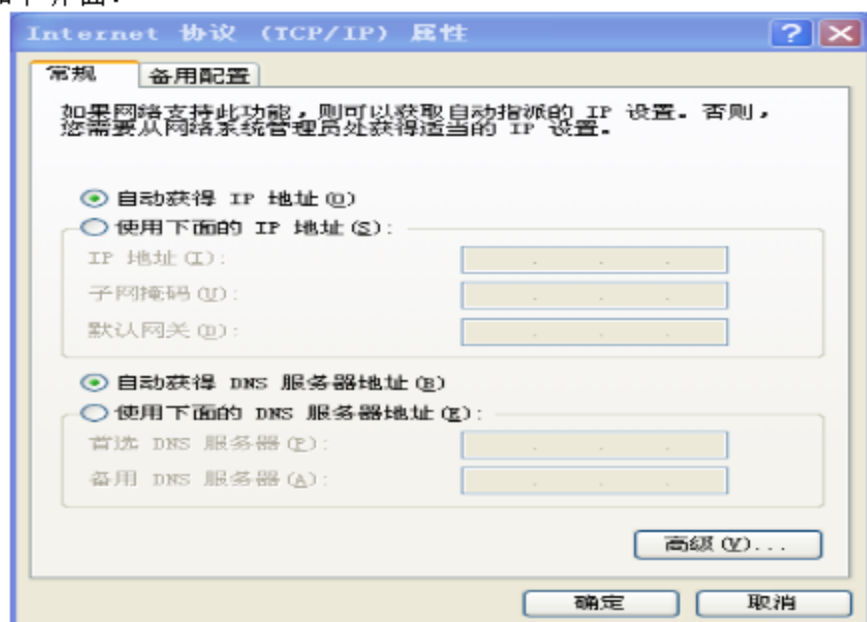
当系统构建完毕，就可以开机以及网络参数的设置了。

网络参数（这里包括计算机和色谱仪）的设置是本系统中一个重要的设定。如果设置不正确，会使系统部分功能不能实现甚至系统不能运行。所以在设定本系统的 IP 地址前一定要规划好 IP 地址的分配，不要使本网络的 IP 地址与其他计算机或设备的 IP 冲突。在使用路由器并且使用路由器的“DHCP”功能时，本系统的计算机和网络色谱仪要尽量避免使用“DHCP”的 IP 段，以防其他计算机或设备分配到本系统设定的 IP 地址。

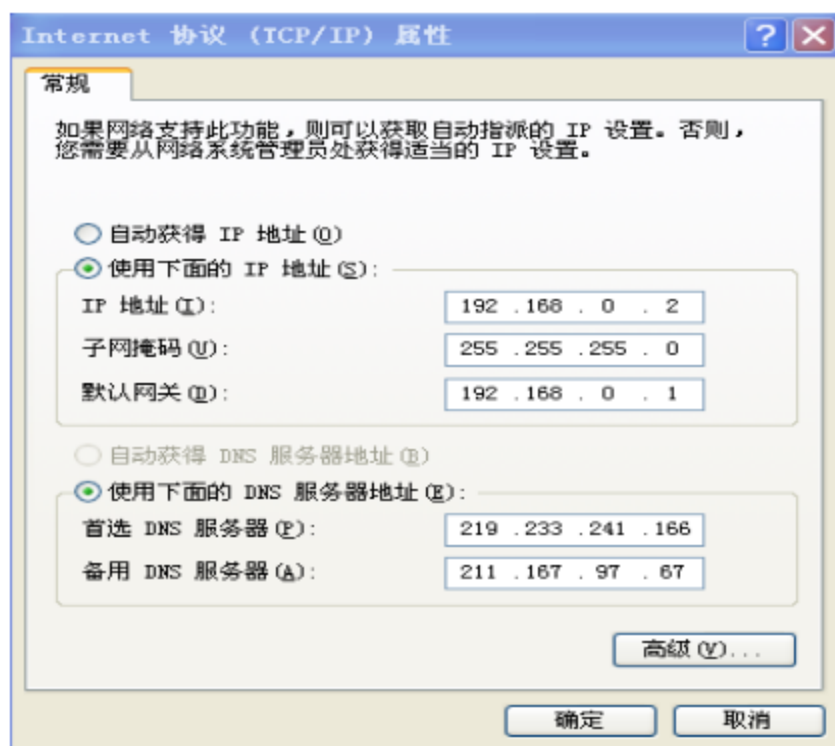
2.4.1 计算机的网络设定

首先将“本地处理计算机”以及“单位主管计算机（如果需要）”的 IP 地址、网关、子网掩码设定。设定网络参数时应避免与本网络中的其他的网络设备（如其它电脑、网络打印机、网络色谱仪、网络电话等）的 IP 地址冲突。

设定计算机的 IP 地址可参照如下方法：在操作系统的桌面上的“网上邻居”单击点右键，选择“属性”单击；选“本地连接”击点右键，选择“属性”单击；单击“Internet 协议（TCP/IP）”再单击“属性”或双击“Internet 协议（TCP/IP）”，将显示如下界面：



单击“使用下面的 IP 地址（S）”，依次输入“IP 地址（I）”、“子网掩码”、“默认网关”，按“确定”即可。如下图所示：即是本计算机的 IP 地址设置为“192.168.0.2”。



注：如果用户的这台电脑还需要登录互联网（俗称：上网），则需要设定 DNS 服务器地址。DNS 服务器地址可咨询互联网服务商。

2.4.2 色谱仪的网络参数设定

设置网络色谱仪的 IP 地址同样要遵循 2.4.1 的原则。只需将本色谱仪的 IP 地址设置为一个空余的 IP 地址即可

注：不同厂家的路由器配置访问的界面会有所不同，但大同小异。

2.4.4 系统的联通初测

完成上述几项配置，就可以开始系统的联通初测了。分别运行计算机“NetChrom”工作站软件并打开色谱仪电源。如果联机正常，在“NetChrom”软件的“设备管理”处会出现彩色（灰色表示这台色谱仪没联机）的图标（图标的下方是本色谱仪的 ID 码）。双击该图标，右侧功能区会显示该仪器的运行参数，谱图区会显示空走的基线。此时就可以进行系统的操作了。

3. 色谱仪器的操作

3.1 键盘操作

GC-460 气相色谱仪设计有六路控温算法，可以对八个温度控制区域进行独立的控温设定和温度控制。并且色谱柱箱具有的 20 阶程序升温功能。柱箱后门会根据柱箱的控温算法自动启闭。

GC-460 的显示屏均为 7 吋汉字液晶显示触摸屏，可一目了然的查看仪器的工作状态。虚拟键盘设计简洁明了，功能齐全，操作简单，一看就会。

开始控温 键为控温开始键，开机第一次按动，**开始分析**为信号处理、程序升温开始键（控温状态以后）。

注意：如在准备灯未被点亮时，按**开始分析**键程升无效。

结束分析 键为结束信号分析或程序升温状态下的停止程序升温的按键；

帮助 键用户可以查看到本公司联系方式、色谱仪的操作简要及自动进样信息；

准备完成 灯长亮表示允许控温的各路控制单元的实测温度达到了设定值，其中柱炉温度为设定值的 $\pm 1^{\circ}\text{C}$ ，其他为设定温度的 $\pm 6^{\circ}\text{C}$ ，此时可以进样。

3.1.1 温度控制的查看与设定

仪器开机自检后进入温度控制界面，其他页面下查看或修改温度参数，直接按**温度**即可进入温度界面，可以查看各路温控运行状态并进行重新设定温度参数。

实测是显示 8 路控温的实测温度。

保护是显示 8 路控温的保护温度。该温度是仪器根据用户设定的温度自动计算出来的，无需修改。

3.1.2 开启或关闭控温系统操作

在仪器开机的状态下，第一次按**开始控温**键使仪器进入温度控制状态，会自动打开气路控制。。

当柱箱温度达到设定的 $\pm 1^{\circ}\text{C}$ 、其余使能为开的各路温度达到设定的 $\pm 3^{\circ}\text{C}$ 时，“准备完成”灯被点亮，

注：当“准备完成”灯被点亮时，如再按**开始分析**键将启动工作站进入分析状态；同时，如果程序升温参数、外部事件参数有效时，将同时使仪器进入程序升温状态、外部事件控制状态。

在仪器温控的状态下，按**关闭控温**键即关闭控温。此时会听到仪器内部有继电器释放的响声，后开门会自动打开进行降温。

3.1.3 程序升温的查看与设定

在仪器开机的状态下，按**程升**键使仪器进入程序温度显示状态

程序升温是指在样品分析过程中，柱箱温度需按照设定值而程序上升的过程。

注：程升终止温度设置要高于柱炉的设定温度，下一阶温度要高于上一阶温度。

注：当某一阶的升温速率为 0 时将使该阶以及此后阶的程序升温无效；第 1 阶升温速率为 0 将使整个程序升温内容无效。

程序升温操作:

在仪器开机的状态下,按**开始控温**键仪器进入温度控制系统,当仪器的处于“准备完成”状态后,再按**开始分析**键将使仪器开始程序升温控制。

当色谱仪执行升温程序时,仪器进入初始温度保持状态时,显示区显示“初温”;

当色谱仪执行升温程序时,仪器进入升温状态时,显示区显示“升温”;

当色谱仪执行升温程序时,仪器进入程升温度保持状态时,显示区显示“保持”;

当色谱仪执行升温程序时,仪器进入降温状态时,显示区显示“降温”;

当仪器执行完一个完整的程序升温周期后,状态显示区域的计时秒表将结束计时并清零;仪器会自动打开柱箱后门,以使柱箱内温度迅速下降到初始温度,缩短仪器的降温时间。当柱箱内温度降至初始温度时($\pm 1^{\circ}\text{C}$),“准备”灯被再次点亮,等待下一次程序升温开始。如此反复。

在仪器执行程序升温时,在温度控制系统下,按“**停止控温**”键将中断程序升温状态,仪器将返回恒温状态。

注: TCD 检测器的工作,必须遵守“先通气,后升温,再电流”的规则。亦即当 TCD 检测器未通载气时,千万不可设置桥路电流,否则,会损坏钨丝!关机时,一定要先关桥流、再降温、待 TCD 温度降至室温附近后再关载气!

注: TCD 操作时,请尽量不要用太高的电流。高电流的操作会加快钨丝的氧化,有损于 TCD 检测器的寿命。

注: 为防止 TCD 检测器的损坏,在本机的设计中采用桥流设定数值不被关机保存。即机器开机时 TCD 桥流设定数值自动为 0 毫安。

警告: 载气中含有氧气时,会使 TCD 钨丝的寿命缩短。载气一定要彻底除氧!

3.1.4 网络参数的查看与设定

在仪器开机的状态下,按**网络(或配置)**键使仪器进入网络参数的显示状态。

注: 当修改色谱仪的网络参数后,会使色谱仪与工作站的链接中断,并试图初始化色谱仪的本身的网络参数重新链接到工作站。

由于以太网技术及其复杂,很难在有限的篇幅里描述清楚。IP 地址的信息设定请参阅相关的书籍或由网管人员设定。这里只做基本的描述。

“本机 IP”是指本色谱仪的 IP 地址。一般设定一个与本企业局域网同一个网段的且其他仪器或电脑未使用的 IP 地址。

“子网掩码”设定一个本企业局域网使用的同一个子网掩码。一般为 255.255.255.0。

“网关”设定一个本企业局域网使用的相同网关。一般为: 192.168.×.1

“工作电脑”是指工作站软件工作的计算机的 IP 地址。也就是设置成工作站软件工作的计算机 IP 地址。这个参数一定要设置正确,否则色谱仪将无法连接到工作站软件。

工作站软件工作的计算机的 IP 地址可以在“网上邻居”的属性的“本地连接”的属性的“Internet 协议 (TCP/IP)”里查看。也可以在操作系统的命令状态里用“IPCONFIG”命令查看。(详见后 4.2.2)。

“主管电脑”是指本单位的业务主管(如总工、质检主管等)为了关注本色谱仪的运行状态和分析数据而将工作站软件安装在自己工作的计算机的 IP 地址。如果要使用这一功能,这个参数一定要设置正确,否则色谱仪将无法连接到业务主管的工作站。当然,如果业务主管不关注色谱仪的运行状态以及分析数据,可以不安装工作站软件,只要将该项 IP 地址设置为本局域网内不使用的 IP 地址即可。

“领导电脑”是指本单位的上级行政主管单位(如:技术监督局、卫生局、环保局等)为了监控色谱仪的运行状态和分析数据而建立的监控系统的公网 IP 地址(一般要通过互联网)。如果上级主管没有这样的要求,只要将该项 IP 地址设置为本局域网内不使用的 IP 地址即可。“上级主管”后面显示<—>标志,表示色谱仪和工作站连接成功;如无此显示的,则色谱仪没有和工作站连接成功。**注:在局域网的情况下,色谱仪的 IP 地址和工作站电脑 IP 地址一定在同一个网段内。即:IP 地址的前 3 组数据一致!**

注:色谱仪的 IP 地址以及工作站软件计算机的 IP 地址不能与其它网络设备的 IP 地址冲突(一致)。

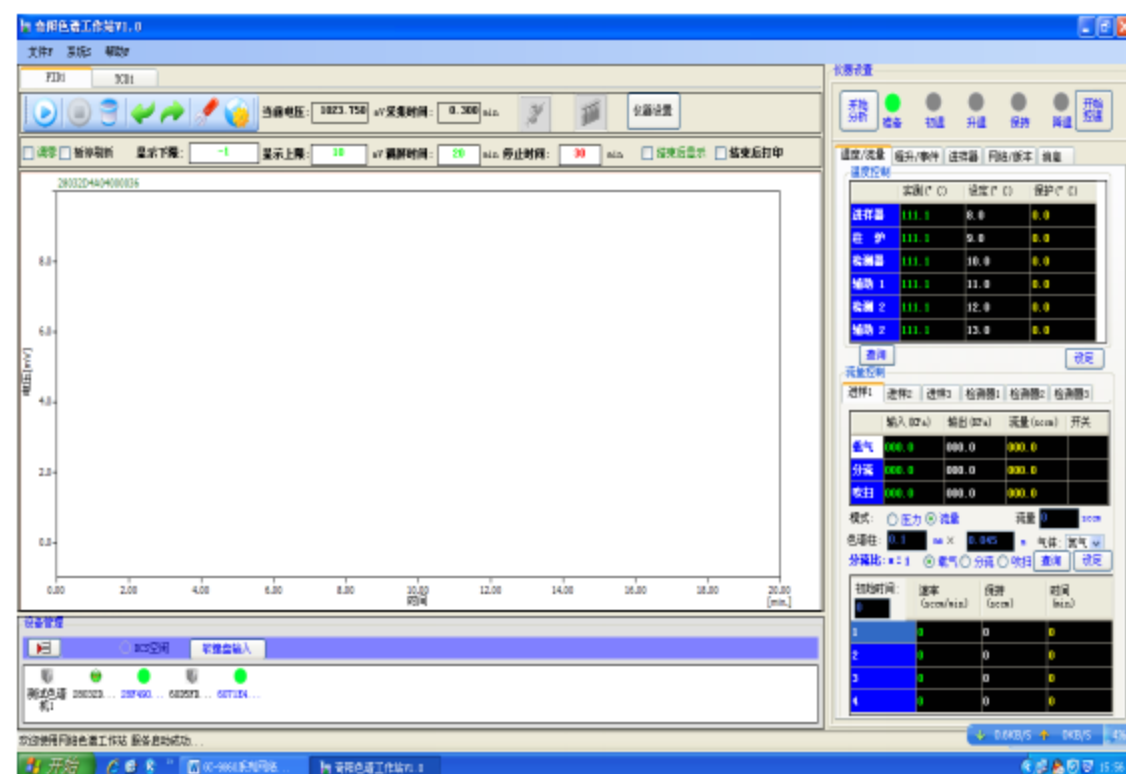
注:色谱仪的 IP 地址采用静态 IP 地址工作模式。不支持“自动获取 IP 地址”功能。

注:由于本色谱仪的工作方式是开机后自动连接工作站。为了系统的稳定工作,所以工作站计算机的 IP 地址一定要固定。工作站计算机的 IP 地址应采用静态 IP 地址工作模式,不要采用“自动获取 IP 地址”模式。

警告:色谱仪中设定的本地电脑、主管电脑、领导电脑**严禁相同**!这样会使工作站的基线数据不正常!**如果业务主管、上级主管没有使用,可将这 2 个 IP 地址设置成本局域网不存在的 IP 地址。**

4. 色谱仪工作站的操作

4.1 工作站主界面功能



界面的上方是下拉式菜单；下拉式菜单的下方是检测器的运行参数和屏幕显示参数；中部是谱图数据显示区；最下方是色谱仪状态指示区；左下角显示了通信服务连接状态是否成功；右面是色谱仪的运行参数及谱图处理参数。点击“仪器设置”按钮，界面的右面“运行参数”及“谱图处理参数”切换。

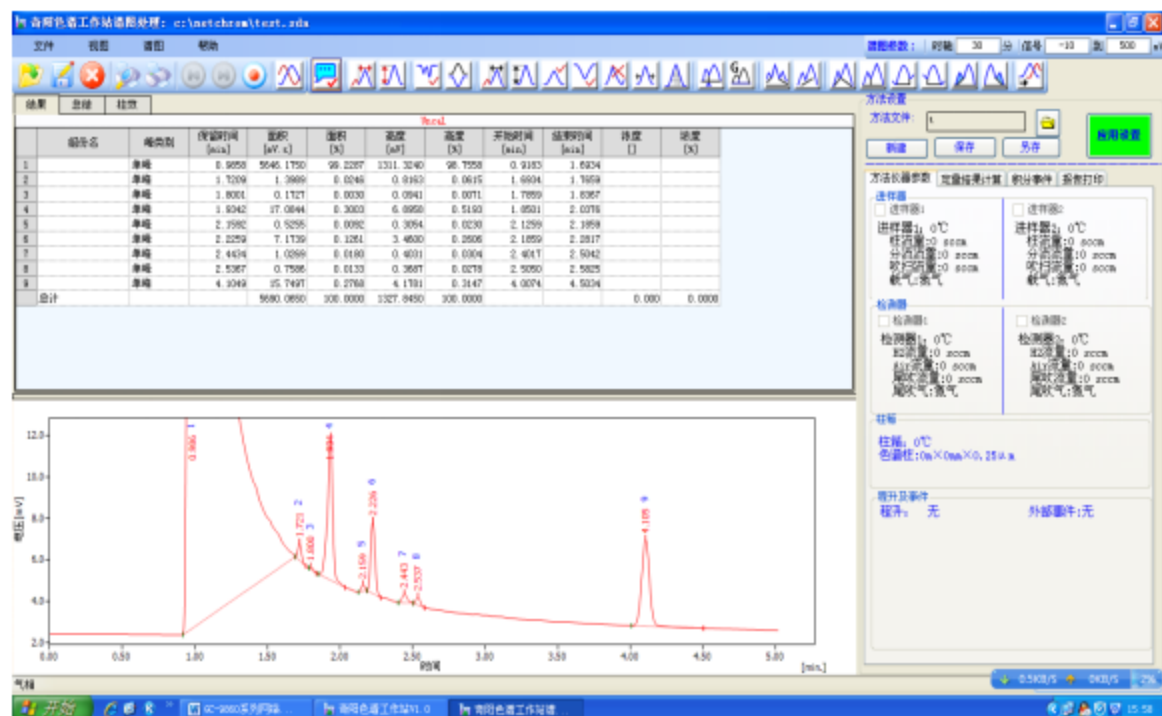
4.2 下拉式菜单介绍

4.2.1 文件(F)

文件菜单中从上到下有：谱图处理、编辑组分表、退出。移动鼠标，单击被选择项则可进入下一步操作。

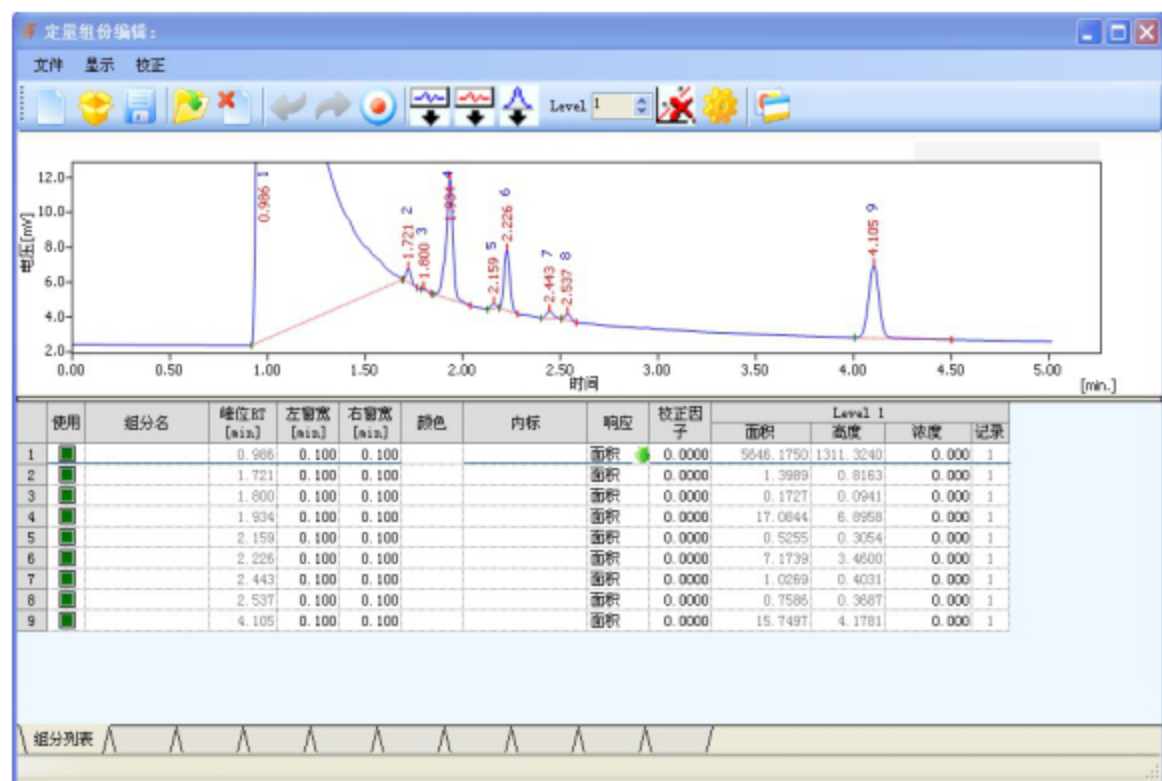
4.2.1.1 谱图处理

“谱图处理”为执行谱图的后处理。点击“谱图处理”后会弹出谱图后处理的界面，即：谱图的离线处理界面。谱图处理详见第 5 章。



4.2.1.2 定量组份编辑

“定量组份编辑”为执行谱图的后处理。点击“谱图处理”后会弹出谱图后处理的界面，即：谱图的离线处理界面。谱图处理详见第 5 章。



4.2.2 系统 (S)

4.2.2.1 选项

在“选项”可以配置工作站的谱图显示的颜色、谱图的存放目录、用户的密码等。

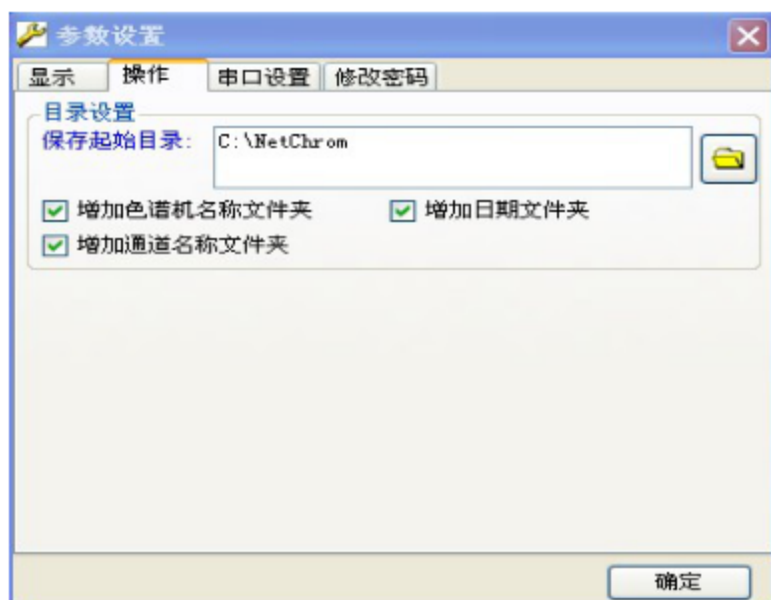
在显示选项卡里可以根据您的喜好配置谱图背景颜色、基线颜色、采样颜色、网格颜色。单击色块系统会弹出调色板，选取您喜欢的颜色，点击“确定”即可；



同时，在该选项卡里还可以设置网格线、程升曲线、峰间分割线、保留时间是否显示以及谱图显示时谱图超出时间轴范围是否“平移”或“缩进”。

注：最好不要将“基线”、“采样线”等与“背景”的颜色一致，这样会使谱图无法看到。

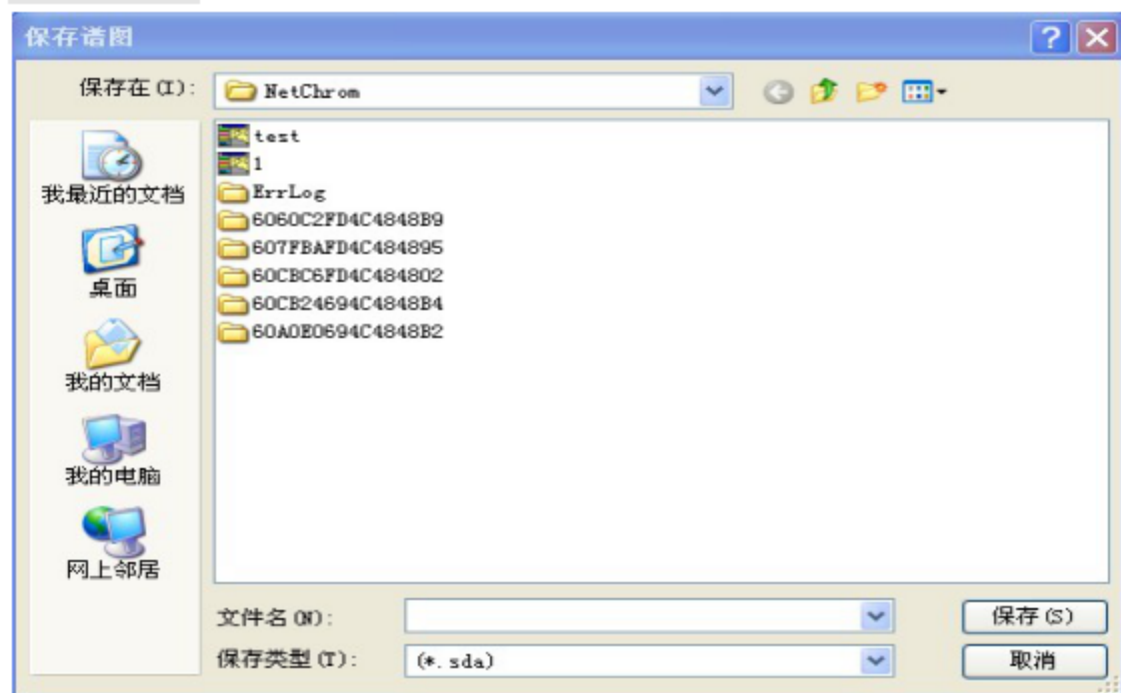
在操作选项卡里可以设置谱图存放的目录以及谱图文件的命名方式。



谱图文件工作目录是本系统中所有仪器产生的谱图文件将要保存的目录。

设置该目录时，请先自建一个目录（为了数据的安全，不建议用户在C盘上建立文件夹）并选定这个目录。

并可根据需要选择是否让系统自动生成色谱机名称文件夹、日期文件夹、通道名称文件夹。



此时选取已嫁接谱图的保存路径以及文件名称，点击“保存”即可。

4.2.3 帮助 (F)

4.2.3.1 帮助

在“帮助”下拉菜单里，单击会调出本使用说明书的电子文档。上面有详细的操作说明，可翻阅查看。

4.2.3.2 关于

在“关于”栏目里，会显示软件名称、版本号等信息。



4.2.3.3 检查更新

“检查更新”是本工作站软件设计的支持远程升级更新的功能。点击后软件会检查是否有更新的软件版本需要安装。如果有新的版本，则系统弹出如下界面：



在组件名及版本号栏目里会显示响应的提示。此时如果点击“下一步”则进行软件的升级；如果点击“取消”，则退出升级。

如果您的软件已是最新的版本，则组件名栏目为空，此时点击“取消”即可。注“检查更新”功能的实现必须您的计算机已经成功接入互联网！否则无法升级。

警告：当一旦确认了升级操作（有升级版本，且点击了“下一步”），中途不要点击“取消操作，否则有可能造成未知的关键故障！

警告：一旦软件升级错误，造成 NetChrom 工作站无法正常运行，此时在“开始”→“所有程序”→“NetChrom”→“远程升级”里进行升级修复即可。如果升级不成功，请致电生产厂家。

4.3 色谱仪管理



如上图所示，该界面显示了本系统以前所连接的色谱仪（或其他分析仪器）的信息。灰色图标表示该仪器现在没有连接，彩色图标表示该仪器已经连接上，方框上有红勾则表示主界面显示的是该台仪器的谱图曲线和仪器参数等信息。如想查看其他仪器的谱图曲线和色谱仪参数**双击**其对应的图标即可。

如在某一图标上点右键，再点“编辑”，则弹出色谱仪基本信息的编辑界面：



4.3.1 设备机标识符

“设备机标识符 (ID 号)”为色谱仪的 ID 码 (该 ID 码可以在“保修卡”获得, 亦可以直接从色谱仪上读取, 详见: 3. 1. 8 网络参数的查看与设定)。不可修改!

4.3.2 设备名称

在“设备机名称 (助记符)”处填写您喜欢的、容易记忆的名字, 比如: 一车间、质检科 1、质检科-FID、中心化验室-TCD 等。

4.3.3 设备序号 (MODBUS/TCP 通信 ID 码)

“设备序号”为 MODBUS/TCP 通信时的 ID 码。当本系统需要接入 DCS 或通过 MODBUS 读取分析结果时, 该 ID 码一定要设置, 并且不能重复。

4.3.4 其他信息

在“所属单位部门”以及“其他备注信息”处填写该台仪器的一些相关信息。该信息只是标注使用, 不会影响系统的运行, 也可以不填。填写好上述信息, 按“保存”即可。

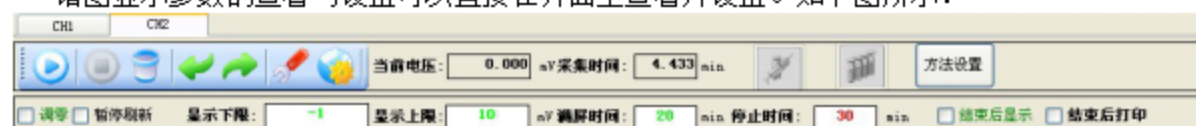
如果要删除某一色谱机, 单击“删除”即可。

注:“设备机名称 (助记符)”是一个极其重要的仪器参数。它将在建立仪器文件目录以及谱图文件存储中要用到。也就是说, 您填写什么样的名字 (比如: 质检科 1), 将自动建立什么样的文件目录 (质检科 1 文件夹) 以及存储什么样的谱图文件 (质检科 1_FID1_2008 年 12 月 01 日_8 时 58 分 58 秒.SDA);

注：正处于联机状态的色谱仪是不能删除的。

4.4 谱图显示参数的查看与设置

谱图显示参数的查看与设置可以直接在界面上查看并设置。如下图所示：



当鼠标放在这几个图标上时，鼠标下会自动显示图标的功能，其功能从左至右依次为开始采样、停止采样、放弃采样、上一视图、下一视图、基线扣除、检测器设置。单击图标即启动其对应的功能。

4.4.1 开始分析

单击只开始本通道的谱图采样。

4.4.2 停止分析

单击只停止本通道的谱图采样，并执行谱图处理，计算出分析结果。

4.4.3 放弃分析

单击是放弃当前的采样基线或空白基线。

4.4.4 上一视图

单击是查看上一幅显示的基线。

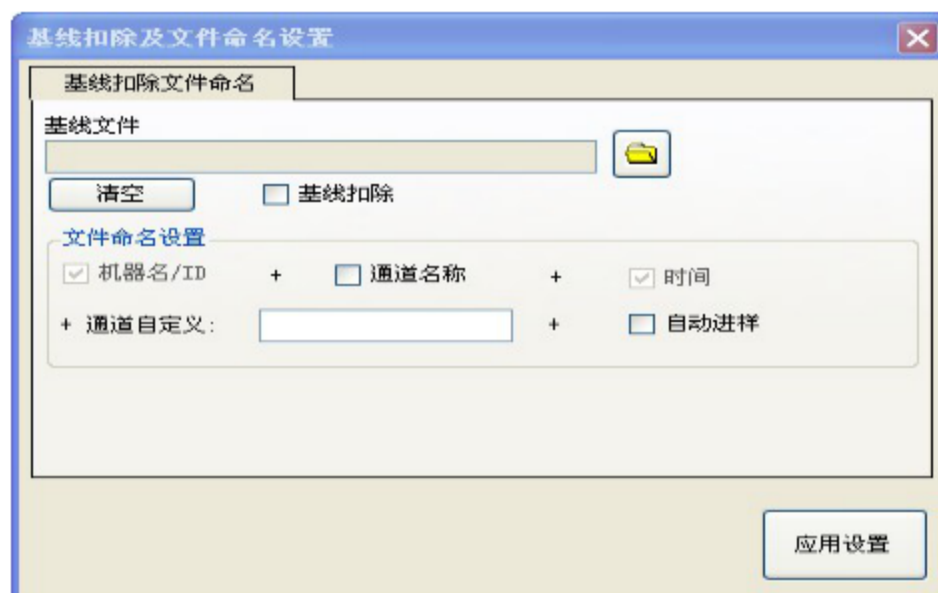
4.4.5 下一视图

单击是查看上下幅显示的基线。

4.4.6 基线扣除

基线扣除是指用户在不进样的情况下先做程序升温、程序升压（升流）得到一个空白的基线谱图文件，而将这个空白的基线谱图文件作为以后基线扣除的参照，从而达到在以后的样品分析时工作站能自动扣除因程序升温、程序升压（升流）造成的基线漂移。

如果要 workstation 在每次运行后自动扣除存储的基线文件，请选择“**基线文件**”框。指定基线文件名，然后在**基线扣除**前打勾。色谱图分析将在执行扣除后进行。



当未选取基线扣除文件或选取的文件格式不正确，在**基线扣除**前打勾时系统会弹出无法操作的提示框：



当该通道开始采样时，选择的基线扣除文件已经被删除，系统将提示“基线扣除文件不存在，请检查！”。

注：选择的基线文件应包括完整、正确的文件路径及文件名。

4.4.7 文件命名

系统生成文件名的方式也是可以根据需要选取的。其中机器名、时间参数是系统必须采用的；通道名称、随机号、自动进样、自定义内容是否加入到谱图文件的命名中，是用户自由勾选的。如下图所示：



注：通道名称是色谱仪的通道名称。如 FID1、TCD2 等。

注：通道自定义是您根据自己的需要而填写的内容，该内容将被引用到文件名中。

注：自动进样是当选取自动进样器进行进样分析时，为了标注谱图文件而加入的“第几号样品--第几次分析”。

4.4.8 检测器设置

检测器设置是设置仪器检测器（如 FID、TCD、FPD、ECD、NPD）的运行参数。

其中单击，系统会弹出如下查询设置界面。



设置相应的参数，按“确定”即可；如果不予设置，按“取消”即可。

注：“极性”是控制该通道输出信号的极性是不是取反（改变数据的符号）；

注：“仪器基线扣除”是控制该通道的输出信号是否先完成基线扣除再输出；

注：选定“扣除”前，必须先按实际要求空走基线，并记录在色谱仪内；
注：不同的检测器，弹出的查询设置界面是不同的。

4.4.9 基线数据

在每台仪器的每个通道都有该通道的基线数值显示窗口——当前电压和采集时间。

当前电压是该检测器实际输出信号值（非调零状态下）或调零后的输出信号值。单位是 **mV**（毫伏）。

采集时间是基线的计时。单位是 **min**（分钟）。当基线放弃或开始采样时，该计时会清零。

注：当前电压和采集时间是仪器以及当前通道是否工作正常的重要体现。当设备正常，当前电压会有毫伏级的上下跳动，采集时间也会计时正常。当采集时间停止，就反应该仪器或该通道工作不正常。

4.4.10 谱图的显示

在系统中设计显示下限、显示上限、满屏时间。修改这些参数可使基线显示在合适的屏幕里，而便于观察。

同时在“系统”→“显示”里可以设置谱图超出时间轴范围是否“平移”或“缩进”。根据需要在相应的选择框里打勾即可。



为了方便用户便于谱图的局部放大，系统设计谱图的局部放大功能。在预放大的区域按住鼠标的左键拖动画矩形框后放开左键，即可放大显示该区域；在谱图上双击鼠标，即恢复原来的显示尺寸。

在谱图放大状态下，为了不使谱图移动而有碍与观察，可在暂停刷新前打勾。观察完毕后，将打勾取消。

注：显示上限应大于显示下限！

4.4.11 停止时间

停止时间是指开始采样后系统会自动停止分析的时间。该时间由用户根据实际需要设定。

注：停止时间不可以设定为 0，为 ≥ 1 的整数。

4.4.12 结束后显示

结束后显示是指当人工停止分析或停止时间到后分析结果是否弹出。

注：当不选中结束后显示时，分析结果依然会保存在您指定的谱图工作目录，只是不显示而已。

4.4.13 结束后打印

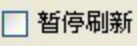
结束后打印是指当人工停止分析或停止时间到后分析结果是否打印输出。

注：当选中结束后打印时，您必须设置正确打印机的配置，否则操作系统会报错。

4.4.14 基线调零

当  打勾激活时，将对该通道的基线数据进行调零。当该通道无需调零时，请将打勾激活取消。

4.4.15 暂停刷新

当  打勾激活时，该通道的基线数据将暂停刷新，当放大基线时，暂停基线的后移，以便于观察基线的细节。

4.4.16 多通道谱图对比

在每台色谱仪的第一数据通道显示界面，将有“全显”选项。当全显打勾激活时，将在第一通道基线显示界面显示该色谱仪多个通道的基线，以便于相关色谱峰的对比。

注：每个通道的 Y 轴（电压）标尺为单独设定，X 轴（时间）标尺为第一通道的时间刻度。

4.4.17 仪器设置与方法设置的切换

本系统显示窗口的右面是仪器设置与方法设置共用界面。当点击仪器设置或方法设置时界面会切换，从而完成相关的设置。详见：4.5 和 4.6 章节。

4.5 仪器的设置

4.5.1 仪器的状态显示

当系统切换到仪器设置界面，屏幕的右上方显示仪器的温度状态：



五个信号灯分别为准备、初温、升温、保持、降温。其显示意义如下所述：

准备：当色谱仪各路控温区的实际温度已达到设定温度，该灯被点亮；

初温：当色谱仪执行升温程序时，仪器进入初始温度保持状态时，该灯被点亮；

升温：当色谱仪执行升温程序时，仪器进入升温状态时，该灯被点亮；

保持：当色谱仪执行升温程序时，仪器进入程升温度保持状态时，该灯被点亮；

降温：当色谱仪执行升温程序时，仪器进入降温状态时，该灯被点亮。

4.5.2 温度/流量的设定

当选择“温度/流量”显示卡时，界面会显示如下界面：



分别是 6 个控温区的实测温度、设定温度和保护温度。

当需要设置时，点击相应的设置窗口，输入数字，点击设置即可。

注：当某个控区的名称为红色时，表示该路控温处于关闭状态。

注：保护温度为设定温度自动加上 20°C。系统会根据设定温度自动改变。但本仪器最高使用温度为 450°C，因此保护温度的最高值为 450°C。另外柱炉温度的保护温度是在程升升温设置的最高温度上加上 20°C。

注：第一列控温区名称显示为红色表示此路为关闭状态，如为蓝色则表示打开状态。此线路的开/闭状态可以通过下拉菜单中的“系统”中的“温控配置”中的“使能”来控制。可参照 4.2.2.3。

注：如某一路控温输入没有接入测温器件（PT100），则实测温度显示栏的温度不是真实温度。

4.5.3 气路流量的设定

单击“温度/流量”页面，则流量的运行参数处于工作站界面的右侧中间，如下图所示：

	输入 (KPa)	输出 (KPa)	流量 (sccm)	开关
载气	000.0	000.0	000.0	
分流	000.0	000.0	000.0	
吹扫	000.0	000.0	000.0	

模式: ☐ 压力 ☒ 流量 流量 0 sccm

色谱柱: 0.1 mm × 0.045 m 气体: 氮气

分流比: 1:1 ☒ 载气 ☐ 分流 ☐ 吹扫 查询 设定

初始时间:	速率 (sccm/min)	保持 (sccm)	时间 (min)
0			
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	0	0	0

单击流量控制下面的各路图标如上图进样 1 则会显示该气路的运行情况，击相应设置区的数值，修改数字，按“设置”即可。实测值是仪器实际测出的数值，不可更改。

每路 EFC 模块均输出输入压力、输出压力及输出流量。并口工作在压力模式或流量模式。

为了模块的正确运行，相关参数必须正确。如：色谱柱当需要设置时，点击相应的设置窗口，输入数字，点击设置即可。

4.5.4 程序升温 and 外部事件的设定

单击“程升/事件”页面，将显示程序升温 and 外部事件显示、设置界面。程升控制的参数处于最上部，事件控制的参数处于下部，如下图所示：

温度/流量
程升/事件
进样器
网络/版本
消息

程升控制
初始时间: 0

阶号	升温速率	保持温度	保持时间
1	1	200	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	0	0	0
5	0	0	0
6	0	0	0
7	0	0	0
8	0	0	0

查询
设定

事件控制

阶号	事件1 [min]	事件2 [min]	事件3 [min]	事件4 [min]
1	1	2	3	4
2	1	2	3	4
3	0	0	0	0
4	0	0	0	0
5	0	0	0	0
6	0	0	0	0
7	0	0	0	0
8	0	0	0	0

程序升温是指在样品分析过程中，柱箱温度需按照设定值而程序上升的过程。单击相应设置区的数值，修改数字，按“设置”即可。

注：程升终止温度设置要高于柱炉的设定温度，下一阶温度要高于上一阶温度，第一阶程升速率为 0 时，程升无效。程升曲线会在谱图显示区域自动显示出来(当选中标识程升曲线时，详见：4.2.2.1)。

为了使仪器控制一些额外的部件（如：进样阀），完成一些特定的功能（如：进样），仪器设计有 8 路独立的外部事件控制输出。因此在仪器控制中需要设置 8 路外部事件的参数。8 路独立的外部事件控制输出在仪器的主控板上。一般由生产厂家出厂时加装相应的设备，并根据实际分析需要设置相关的时间参数。单位为分钟。

单击相应设置区的数值，修改数字，按“设置”即可。

注：程序升温及外部事件的开始是由开始分析触发。

4.5.5 进样器的设定

“进样器”是指随仪器配备的液体进样器（如：AOC-20i 等）。

单击“进样器”页面，将切换到“进样器”查看设置的界面。如下图：

温度/流量 程升/事件 进样器 网络/版本 消息

状态
进样器状态: **在线** **空闲** 瓶号/针号: /

程序设置

起始瓶号	终止瓶号	进样量 [μL]	次/瓶	间隔 [min]
0	0	1	3	10
0	0	1	3	10
0	0	1	3	10
0	0	1	3	10

基本设置

☐ 安装 型号: AOC-20i 进样口: 0

进样前溶剂清洗: 1 次 进样前样品清洗: 3 次

进样后溶剂清洗: 3 次 泵样次数: 2 次

粘度延时: 0.1 秒 进样后驻留: 0.1 秒

延时启动: 0.1 小时 取样方式: 0

进样速度: 慢速 针芯速度: 慢速

型号查询 型号设定 查询 设定

自动进样

进样次数: 0 次 时间间隔: 0 min

背光时间: 99 秒 查询 设定

界面的上部为自动进样器的当前状态，如“在线”、“离线”、“空闲”、“进样”等。当前瓶号是指在实际进样时，自动进样器已经执行到第几号样品以及该样品的第几次分析。

界面的中部为设置自动进样器的批处理程序设置。如从第 2 号到第 3 号样品瓶，每次进样量为 1 微升，每样品瓶重复做 3 次分析，每次分析的时间间隔为 10 分钟。

界面的基本设置为自动进样器的基本参数。

界面的下部是设置控制仪器自动进行进样分析的参数设置。该区设置参数有别与液体自动进样器的批处理设置。液体自动进样器的批处理设置是控制液体自动进样器的自动进样，而自动进样中的进样次数及时间间隔是控制仪器进入自动进样状态并按设定值而进样分析，如控制外部事件、程序升温自动启动。

注：系统选择进样器安装时，仪器将进行拔针信号的判断；**探测不到拔针信号，仪器将发送开始采样命令。**

注：当没有配备自动进样器时，该项参数无意义。

注：自动进样器的基本参数是由所配备的进样器型号而决定的。不同型号的自动进样器所设置的参数也略有区别，请认真翻阅所配备的自动进样器使用说明！

警告：自动进样器是精密的仪器，安装使用自动进样器，请严格按照其说明书操作，以免损坏！

4.5.6 网络参数的设定

单击“网络/版本”页面，将显示该联机色谱的网络参数及硬件的版本信息。仪器的网络信息如下图所示：

色谱机网络参数	
本地 IP:	192.168.18.12
子网掩码:	255.255.255.0
网 关:	192.168.18.1

工作站网络参数	
本地主管:	192.168.18.200
业务主管:	192.168.18.199
上级主管:	192.168.18.198

流量节省 查询 设定

单击相应设置区的数值，修改数字，按“设置”即可。

注：网络参数的设置方法以及注意事项请参阅：“3.1.4 网络参数的查看与设定”以及“2.4.1 计算机的网络设定”。

注：当修改色谱仪的网络参数后，会使色谱仪与工作站的链接中断，并试图初始化色谱仪的本身的网络参数以及链接到工作站。

在该界面里将显示仪器各控制电路的版本信息。本信息为只读信息，不可修改。

4.5.7 开始控温及结束控温

当系统切换到仪器设置界面，屏幕的右上方显示仪器的温度状态：



单击开始控温即启动这台色谱仪开始控温及 EFC 模块的工作，同时图标会自动变成结束控温。单击结束控温即关闭这台色谱仪的控温，同时图标会自动变成开始控温。

4.5.8 开始分析及结束分析

单击开始分析则启动色谱仪开始采样。此时工作站基线变为采样后所选定的颜色（本软件默认颜色为黄色），同时图标变为结束分析，且开始采样图标  由绿色变灰色 ，停止采样图标  由灰色变为红色 ；

单击结束分析则色谱仪停止采样，此时工作站基线变为所选定的颜色如绿色（本软件默认颜色为绿色），同时图标变为开始分析，开始采样图标有灰色变为绿色，停止采样图标由红色变为灰色。

在“准备”灯被点亮的情况下，单击工作站上开始分析图标或者  图标或者按色谱仪操作键盘上的开始键，色谱仪开始程序升温控制，同时开始采样分析；

单击工作站上“结束采样”图标或者“结束”图标或者按色谱仪操作键盘上的结束键，色谱仪将结束采样分析，并开始降温至温控设置温度，工作站显示走基线状态。

注：单击开始分析为开始本仪器上所有通道的分析。

注：单击结束分析为结束本仪器上所有通道的分析。

注：单击  图标为开始该通道的分析。

注：单击  图标为结束该通道的分析。

4.6 方法的建立

方法是指为把色谱仪传送来的基线数据进行有效合理的处理，并根据每个组份的色谱峰进行定量计算的参数集合。

任何时候采集和（或）重新处理数据文件时都会使用方法。它包含以下内容的说明：仪器运行参数、数据采集（运行时间、采样速率等）、积分、校正和峰信息、报告，以及可选功能（如数据导出和用户程序）。每种方法都能从单张色谱图中采集多个独立通道的数据。每个通道都有其自身完全独立的方法文件。尽管方法文件是独立的文件，但包含在方法中的信息在采集时保存在原始数据文件中。这样，就可以复制原始方法（即使随后修改了方法文件）。

4.6.1 基本概念

为了了解谱图的处理，有必要先了解一下谱图处理、色谱峰鉴定和定量计算的概念。

谱图处理的主要任务是正确地将谱图中的峰检测到，并为这些峰确立恰当的基线，以及为重叠的峰确立恰当的分割线。程序在采集谱图的过程中会对谱图进行实时处理，但您也可在谱图采集结束后，调节“谱图处理参数”或制定“谱图

处理方案”后对谱图进行再处理，直至满意为止。这一步完成后，程序就获得了谱图中所检测到的峰的位置、面积和高度等有关峰的信息。

色谱峰鉴定是基于色谱峰保留时间来鉴定色谱峰。当一个色谱峰的保留时间与定义的窗口相匹配时，该色谱峰被认为一个化合物。

定量计算是将色谱峰面积或色谱峰高转化成化合物浓度(或量)。有不同的校准方法(外标法 ESTD, 内标法 ISTD, 归一法 Norm%)可以将色谱峰响应(面积或高度)转化成浓度或相对浓度。

这里将重点介绍定量方法

4.6.1.1 校正因子

校正因子是定量计算公式中的比例常数，其物理意义是单位面积所代表的被测组分的量。可用下式表示：

$$m_i = f_i \cdot A_i$$

m_i —i 组分的量； f_i —i 组分的校正因子； A_i —i 组分的峰面积

定量分析的依据是被测组分的量与响应信号成正比，但相同含量的物质由于物理、化学性质的差别，即使在同一检测器上产生的信号也不同，直接用响应信号定量，必然导致较大误差。故引入校正因子。

4.6.1.2 归一法

将样品中所有组份的含量之和定为 100%。计算其中某一组份百分含量的定量方法：

其中：

$$X_i \% = \frac{f_i A_i}{\sum (f_i A_i)} \times 100$$

X_i —试样中组份 i 的百分含量

f_i —组份 i 的校正因子

A_i —组份 i 的峰面积或峰高

注：如果改为峰高定量则公式中以峰高替代峰面积。

4.6.1.3 校正归一法

这也是一种计算百分浓度的定量方法，与归一法不同的是：这种定量方法需要在定量组份表中设置所有需要参与计算的组份的校正因子。

如果所设的各组份校正因子都相等，则此方法实际上就转化为归一法，但这种归一法可以有选择挑选需要参与归一计算的峰，而非象真正的归一法那样所有检测到的峰全部都参与计算。

样品浓度 = $(K \cdot A + B) / \sum (K_i \cdot A_i + B_i) \cdot SF$

其中：

K 是校准曲线的斜率

B 是校准曲线的截距

A 峰面积

SF 比例因子，在样品量中输入。

校准曲线以横坐标为：标样峰面积 纵坐标为：标样浓度 作图求出。

注：如果改为峰高定量则公式中以峰高替代峰面积。

4.6.1.4 外标法

在相同分析条件下，比较标准物质与样品的色谱峰面积或峰高。

也就是用已知的标准品配成不同浓度的标准样，测量各种浓度的峰高或峰面积，绘制响应信号与百分含量的关系曲线；再测量样品的峰面积或峰高，在校正曲线上计算其对应的百分含量。要求：进样量、色谱分析条件严格不变；

样品浓度 $= (K \cdot \text{峰面积} + B) / \text{样品量} \cdot 100$

其中：

K 是校准曲线的斜率

B 是校准曲线的截距

校准曲线以横坐标为：标样峰面积 纵坐标为：标样浓度*标样样品量/100
作图求出。

注：1. 如果改为峰高定量则公式中以峰高替代峰面积。

2. 如果用户无需使用公式中样品量参数，请设置为 100 即可。（因为分子分母可相互约去）

4.6.1.5 内标法

选择合适的物质作为欲测组份的参比物，定量加到样品中去，依据被测组份和参比物在检测器上的响应值之比和参比物加入量进行定量分析。

内标物的要求：

- ① 样品中不存在且方便得到；
- ② 不与样品或固定相反应；
- ③ 能与样品完全互溶；
- ④ 与被测组份很好分离；
- ⑤ 保留时间又比较接近；
- ⑥ 加入内标的量要接近被测组份。

基本公式：
$$\begin{array}{ll} m_i = f_i \cdot A_i & \text{被测组分} \\ m_s = f_s \cdot A_s & \text{内标组分} \end{array}$$

于是得：

$$m_i = \frac{f_i}{f_s} \cdot \frac{A_i}{A_s} \cdot m_s = f_{is} \cdot \frac{A_i}{A_s} \cdot m_s \quad (1)$$

首先用被测物标准品和内标物配制标准溶液，求得校正因子比值，即相对校正因子：

$$f_{is} = \frac{f_i}{f_s} = \frac{m_i \cdot A_s}{m_s \cdot A_i} \quad (2)$$

然后，在样品中同样加入已知量的内标物，得到各自的响应值，利用相对校正因子不变，由式（1）来计算结果。

$f_{is} = f_i / f_s$ - 内标物与被测组份校正因子的比值；

m_i - 被测组份 i 的含量； m_s - 加入内标物的量

A_s - 内标物的峰面积；

A_i - 组份 i 的峰面积；

也可以用以下公式来表示：

$$\text{样品浓度} = (K * (\text{峰面积}/\text{内标峰面积}) + B) * (\text{内标量}/\text{样品量}) * 100$$

其中：

K 是校准曲线的斜率

B 是校准曲线的截距

校准曲线以

{横坐标为：标样峰面积/标样内标峰面积}

{纵坐标为：标样含量/标样内标含量}

作图求出。

注：1. 如果改为峰高定量则公式中以峰高替代峰面积。

2. 如果用户无需使用公式中样品量参数，请设置为 100 即可。（因为分子分母可相互约去）

4.6.1.6 指数法

由于 FPD 检测器对 S 的响应是指数的关系，所以对于这类检测器，要采用指数法来计算样品浓度：

$$\text{样品浓度} = \exp(K * \ln A + B)$$

其中：

K 是校准曲线的斜率

B 是校准曲线的截距

A 为样品峰面积

校准曲线以横坐标为：ln(标样峰面积) 纵坐标为：ln(标样浓度) 作图求出。

注：如果改为峰高定量则公式中以峰高替代峰面积。

4.6.1.7 单级校正

是指用一个浓度(水平)的标准样品的运行中创建一个一级校准曲线。每个峰的校准曲线成为一条通过原点和一个数据点的线，该数据点代表标准品色谱峰的面积/高。

这是日常分析工作中最常用到的校正方式。

使用这种定量方法需要先配制一个浓度的标准样品，由其计算得到各个待测组份的校正因子并放在定量组份表中，再由定量组份表中的校正因子反算待测样品中各个组份的浓度。

在峰表的浓度级别1栏内填入各个峰的含量。并且“内标 (ISTD.ID)”一定不要输入内标峰ID，否则工作站认为是进行内标校正。另外，零位一定要选中，因为单级校正实际是一个单一的浓度点和零点二者之间进行拟合。如果不选中零位，则只是一个孤立的点，无法得到一条直线。

对于有内标物的单点校正法，定量公式如下：

$$C_i = \frac{W_{\text{内标}} f_i A_i}{A_{\text{内标}}}$$

其中：

C_i : 待测样品中组份 i 的浓度

A_i : 待测样品中组份 i 的峰面积（或峰高）

f_i : 组份 i 的校正因子

$W_{\text{内标}}$: 待测样品中内标物的添加量（重量或体积）

$A_{\text{内标}}$: 待测样品中内标物的峰面积 (或峰高)

如果没有内标物, 上面的计算公式被简化为:

$$C_i = f_i A_i$$

注: 如果有内标物, 在计算校正因子前就还应在“定量组份表”中“浓度”一列填上内标物的添加量 (重量或体积)。

4.6.1.8 多级校正

与单级校正一样, 这也是一种计算待测样品绝对浓度的定量方法, 计算出来的浓度的单位与所配标样的浓度单位一致。

使用这种定量方法需要先配制一系列 (而不是一个) 浓度的标准样品, 由这一系列不同浓度标样的测试结果计算得到各组份的工作曲线 (即组份峰面积或峰高与组份浓度的关系曲线), 再根据待测样品中各组份的实测峰面积 (或峰高), 由工作曲线反算出待测样品中各组份的浓度。所以用此方法计算待测样品中组份的浓度时, 必须事先得到所有组份的工作曲线, 同时必须填写定量组份表以指明谱图中究竟是哪些峰需要引用工作曲线计算浓度, 程序将自动按顺序为它们引用工作曲线。

在使用本方法时若指定了内标物, 则以上所提到的待测组份的“峰面积 (或峰高)”就改为待测组份的“峰面积 (或峰高) 与内标物的峰面积 (或峰高) 之比”。

在单级校正的基础上, 可以先在峰/组的校正表中填好第二级到最后一级的浓度等数据, 保存方法, 调出第二级浓度的数据, 点击分析菜单下分析/单级校正, 校正级别选2, 但是不选清除全部校正, 点击开始进行校正, 然后调出第三级的数据, 重复上面这些步骤, 注意校正级别要与数据对应。

通过在校正曲线内点击右键弹出的菜单, 我们可以方便的设置很多参数, 比如:

- ☆是否拟合的曲线强制过零点。

- ☆查看或更改拟合类型, 比如线性、平方等。

- ☆更改响应因子的定义, 是含量/面积还是面积/含量。

- ☆通过比例来更改拟合的结果。比如 $\log(\text{数量})/\log(\text{响应值})$ 就是对于FPD检测器常用的拟合方式。

4.6.1.9 定量根据

可以根据需要, 采用: 峰面积、峰高、峰面积平方根或峰高平方根作为定量的计算依据。

对硫化物, 在选用单点校正法定量时, 可选用“峰面积平方根”或“峰高平方根”进行计算。其中“峰面积平方根”实际是组成峰的各切片高度的平方根之和。

4.6.1.10 工作曲线计算

使用多点校正法需要先计算待定量组份的工作曲线, 即求得这些待定量组份的浓度与峰面积 (或峰高) 的关系式。要计算工作曲线, 必须先配制一系列

不同浓度的标准样品，然后分别进样，测得待定量组份在不同浓度下的峰面积（或峰高）。每次测得的待定量组份的峰面积或峰高数据，连同各组份的已知浓度必须在“定量结果表”中“存档”。注意，本软件中“档”的一个重要作用就是贮存这些用于计算工作曲线的数据。当所有浓度标准样品的测量结果都存档后，就可以在“定量方法表”中指定要计算的工作曲线的阶次，如一阶（直线）、二阶（抛物线）、三阶或更高阶次的曲线，并单击“定量方法表”中工作曲线组合框中的“计算”按钮，程序即回归出各组份的工作曲线。

对一些物质（如硫化物）的检测，浓度不是与“峰高”而是与“峰高的平方根”成正比。做这样的工作曲线时，在本软件中只要将“定量方法表”中的“定量根据”从常规的“峰高”改为“峰高平方根”然后做工作曲线即可，并不需要专门做横轴、纵轴都取对数的工作曲线（即我们通常说的“指数法”定量 $Y=kX^a$ ，相当于 $\lg Y=b+a*\lg X$ ）。另外，若选择做“对数”工作曲线，则不管选择工作曲线的阶次是多少以及是否强制过零，只能做形如 $\lg Y=b+a*\lg X$ 的不强制过零的一次曲线。

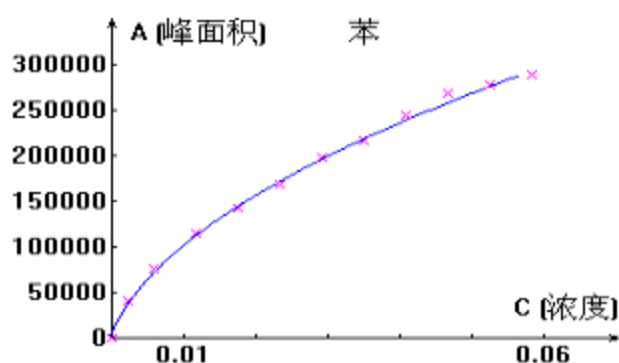
由几次平行样得到的结果可分别直接存档，由于这些档在浓度数据上是相同的（但峰面积或峰高会略有差异），故在这些档的数据被取出用于计算工作曲线之前，程序会自动在内部将这些档综合为一个平均档后再参与工作曲线的计算。

如果只“存”了一档浓度与峰面积或峰高的关系数据就计算工作曲线，则程序会自动地将工作曲线取为通过零点的直线。零点意味着当组份浓度为 0 时这个组份的峰面积（或峰高）也为 0，这时的多点校正法实际上就是单点校正法，直线的斜率实际上就等于单点校正法中的校正因子。

工作曲线的纵轴在通常情况下为峰面积（或峰高），但如果计算工作曲线时在定量组份表中指定了内标物，则工作曲线的纵轴将变为当前组份与内标物的峰面积比（或峰高比）再乘以内标量。内标量应填写在“定量组份表”中属于内标物的浓度一格里。

对“定量组份表”中定义的各个组份，日后用“多点校正法”计算浓度时每个组份就依次取用一条工作曲线，有多少条工作曲线就能计算多少个组份。如果标准样品里只有一个组份，而以后待测样品中有多个类似组份都需要使用它计算出来的工作曲线进行定量，就可以将标准样品的“定量结果表”里只有一行的内容复制（用鼠标右键）成多行后再“存档”，以计算出多条相同的工作曲线。这样，日后对待测样品中的多个类似组份（如各种硫化物）进行“多点校正法”计算时就能有足够数量的工作曲线取用。由于“档”对所有打开的谱图窗口都是公用的，所以存档的“定量结果表”不必非得来自同一个谱图窗口。每一个打开的谱图窗口也都可以从“档”中取出所有数据，在各自的窗口中计算并得到工作曲线。这里计算得到的工作曲线将与其它表格数据一样随谱图文件而保存，所以以后再次打开这个文件时，以前计算得到的工作曲线仍然存在。工作曲线也可用“文件”菜单里的“存为模板”命令保存到专门记载表格内容的模板文件中，如果所存模板文件名为“默认模板.tab”，则以后新建的谱图窗口中将自动引进相同的工作曲线。**工作曲线显示**在计算得到工作曲线后，可以在工作曲线组合框中任意选择一个组份显示其工作曲线。用于计算工作曲线的原始数据点，在工作曲线图中以“x”标出，如下图所示：

如果这些原始数据点都靠近回归出的工作曲线，则表示工作曲线对原始数据点拟合得较好。若有个别数据点大大偏离工作曲线，则表明这个数据点可疑，需要重新分析一次这个数据点所对应的标样（在“定量结果表”里单击“清档”



按钮，根据入档序号清除此数据点对应的档，然后再用相应浓度的标样补做一个档，或调出原来谱图文件错误之处进行调整后重入一个档，再重新计算一下工作曲线）。如果大多数数据点都有规律地偏离工作曲线，则需要根据这些数据点所显示出的变化趋势（如直线、抛物线）指定一个新的曲线阶次，再重算一下工作曲线。

4.6.2 仪器参数

仪器参数是该方法中仪器运行的重要参数。它包括：仪器的温度参数、程序升温参数、流量参数等。如下图所示：

方法仪器参数		定量结果计算	积分事件	报告打印
进样器 ☒ 进样器1 进样器1: 131℃ 柱流量: 0 sccm 分流流量: 0 sccm 吹扫流量: 0 sccm 载气: 氮气 ☐ 进样器2 进样器2: 135℃ 柱流量: 0 sccm 分流流量: 0 sccm 吹扫流量: 0 sccm 载气: 氮气				
检测器 ☒ 检测器1 检测器1: 133℃ H2流量: 0 sccm Air流量: 0 sccm 尾吹流量: 0 sccm 尾吹气: 氮气 ☐ 检测器2 检测器2: 134℃ H2流量: 0 sccm Air流量: 0 sccm 尾吹流量: 0 sccm 尾吹气: 氮气				
柱箱 柱箱: 132℃ 色谱柱: 0.1m×0.045mm×0.25μm				
程升及事件 程升: 无 外部事件: 1.00 2.00 3.00 4.00 1.00 2.00 3.00 4.00				
获取仪器参数		下载到仪器		

在该界面中，各个参数被设计成只读方式。您可以通过对仪器参数的设置（详见：4.5 仪器的设置），通过“获取仪器参数”按钮加载到本界面中来，成为方法中的仪器参数。

它将记载产生本通道分析结果的仪器运行条件。

在进样器 1、进样器 2、检测器 1、检测器 2 前面后打勾选择框。该选择表示本数据通道是使用哪个进样器以及哪个检测器。该选择会保存在该通道的方法里。在谱图的后处理时，您会看到产生该谱图的仪器条件。

当你重新选取了另一个方法后，可以点击“下载到仪器”而将该方法中的仪器参数下载到仪器中去执行。

注：在谱图后处理软件里，您同时会看到该仪器参数。该项参数是不可修改的。

4.6.3 定量结果计算

点击定量结果计算选项卡，将显示如下界面：

方法仪器参数
定量结果计算
积分事件
报告打印

定量组份表文件

结果显示

☐ 隐藏内标峰
☒ 显示所有检测峰
☐ 显示所有识别峰
☐ 显示所有校正峰

柱校计算

非保留峰时间 [min]
柱长 [mm]
☐ 静态时间 ☒ 50%宽起始

☒ 匹配峰使用缩放 (结果乘数)

缩放因子
稀释

缩放后单位

加减谱图

☐ 加 ☒ 减

谱图

匹配方式

结果总结

浓度

内标浓度

定量组份表文件包含了全部的校正和峰信息。

在定量组份表文件里，选择已经制作的定量组份表文件，也就是峰鉴定文件。如果该项没有选择定量组份表文件，系统将用归一法进行样品分析。

在结果显示里，您可以根据需要选择隐藏内标峰（在定量结果比表中将不显示内标物组份结果）；以及显示所有检测峰（显示所有识别出的组份）、显示所有识别峰（组份结果表中显示所有与组份表能够匹配上的组份）或显示所有校正峰（组份结果表中显示所有组份表中存在的组份，未匹配组份置空）。

在匹配峰使用缩放里，您可以根据需要选择缩放或稀释因子。它是表示您是否将待测样品进行了浓缩或稀释。缩放后单位可以根据实际而填写（如 mg、ng/ml 等）。缩放因子默认为 1。

在加减谱图里，您可以将现有谱图与其他谱图进行加减运算，从而进行比对。

加减的匹配方式有三种：

无变化：直接两张谱图时间对齐加减；

偏移谱图：将两张谱图最高峰对齐相加减；

缩放谱图：同上，但不是平移而是缩放的，两谱图起始时刻同为 0。

在柱校计算里，您需根据实际分析结果以及实际色谱柱长输入，从而在分析报告里计算出柱校。给柱效计算设置参数：非保留时间，柱长。

在结果总结选项里，主要功能为对分析出来的数据汇总浓度进行汇总，如果不填程序默认将所有浓度进行相加得出总浓度值，此时计算浓度百分比时除数为个浓度相加的总浓度，如果我们已经确定知道了总浓度数，在这里您可以填写，作为计算浓度百分比的分母项，此时计算出来的总浓度百分比可能大于 100%或小于 100%，用于判断此次进样是否合格，当然越接近 100%时越准确。

结果总结选项里，内标物的浓度在定量组分表里修改。

注：当选择“归一法”进行谱图计算方法时，无需调入定量组份表文件；当选取“校正归一法”、“外标法”、“内标法”、“指数法”进行谱图计算方法时，则**必须**调入定量组份表文件。

注：当选用“校正归一法”、“外标法”、“内标法”、“指数法”进行谱图计算方法时，则在定量组份表文件中设定。

4.6.3.1 定量组份表文件

当选取“校正归一法”、“外标法”、“内标法”、“指数法”进行谱图计算方法时，则**必须**调入定量组份表文件。

4.6.3.2 定量组份表文件的调入和清除

如果要采用校正归一法、外标法、内标法、指数法，则必须选择定量组份表文件。

在“定量组份表文件”栏目点击“打开”，选择已制作的定量组份表文件(.cal)即可，点击“应用设置”激活。

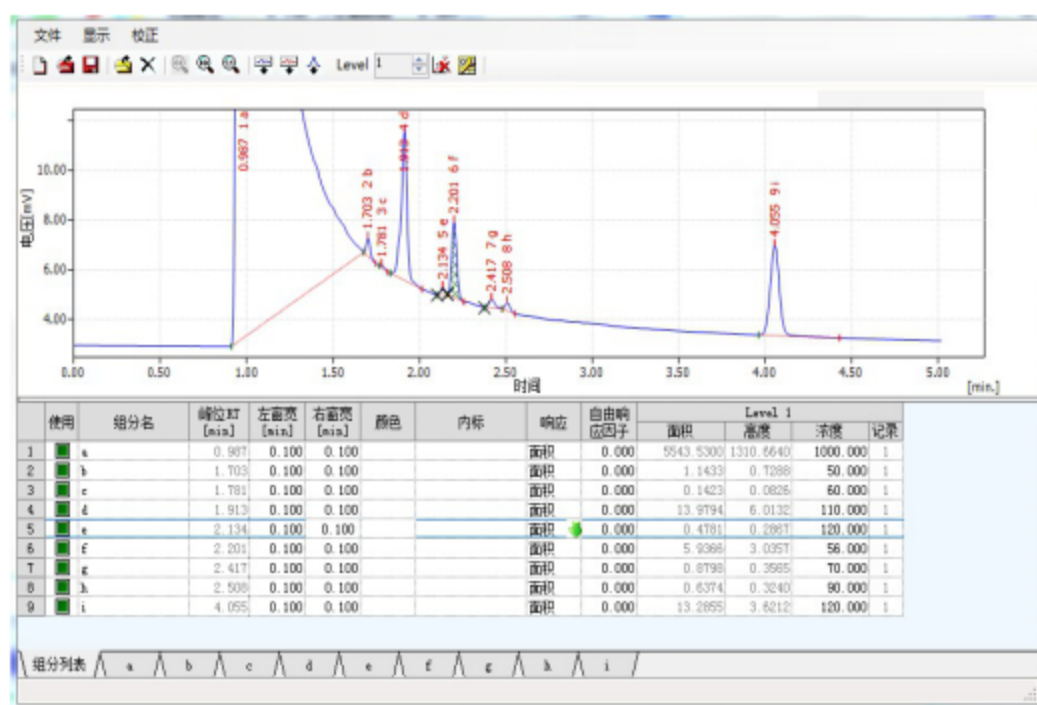
如果采用归一法，则点击“清楚”按钮定量组份表文件(.cal)即可，点击“应用设置”激活。

4.6.3.3 制作组份表文件

制作校正曲线，是数据处理的重点，是将标样谱图的信息与数据做成一个标准，供处理样品谱图时使用。

在本系统中，您可以从多个入口打开“定量组份编辑表”。比如：文件→编辑组份表；定量组份表→根据标样新建；以及在谱图后处理系统中也可从上述入口新建编辑。

编辑组份表窗口如下图所示：



快捷按钮栏：

新建组分表：初始化组分表窗口；

打开组分表：打开组分表文件；

保存组分表：保存组分表文件；

打开标样：打开经过预处理的标样谱图；

关闭标样：关闭标样谱图；

添加所有峰：将标样谱图所有峰信息添加到组分表当前 Level；

添加已有组份：将标样谱图及组分表中同时有的峰添加到组分表当前 Level；

添加峰：将标样谱图中选择的峰添加到组分表当前 Level；

Level：选择组分表当前浓度级；比如当需要制作多个浓度级别的组分表文件。

删除组份：删除组分表当前选择的组份；

选项：设置组分表文件的属性。

窗口上部为标样谱图显示区，下部为组分表。

说明：1、校正体系总计 20 个浓度级别，即一个组份最多可有 20 个校正点；

2、首先确定 Level 级，三个“添加”按钮会自动添加峰信息到该组份当前选择的 Level 级；

3、Level 级原本记录数为 1，每“添加”一次，该 Level 级记录数加 1。

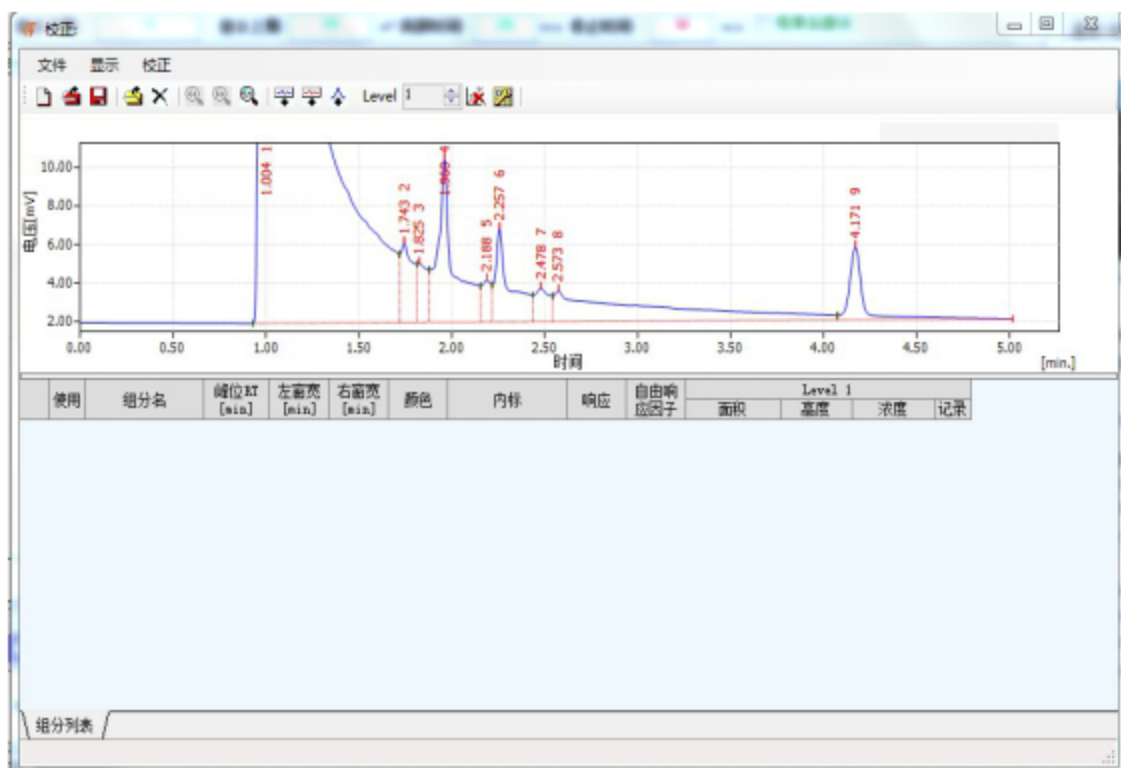
当 Level 中含有多记录时，“再校正”方式受“选项”设置制约；

4、关于“再校正”，当一个 Level 级有多个记录时，涉及再校正问题。“平均”方式会将该 Level 所有记录的面积/高度值取平均，“替换”会用新值覆盖原值。

4.6.3.4 标样预处理

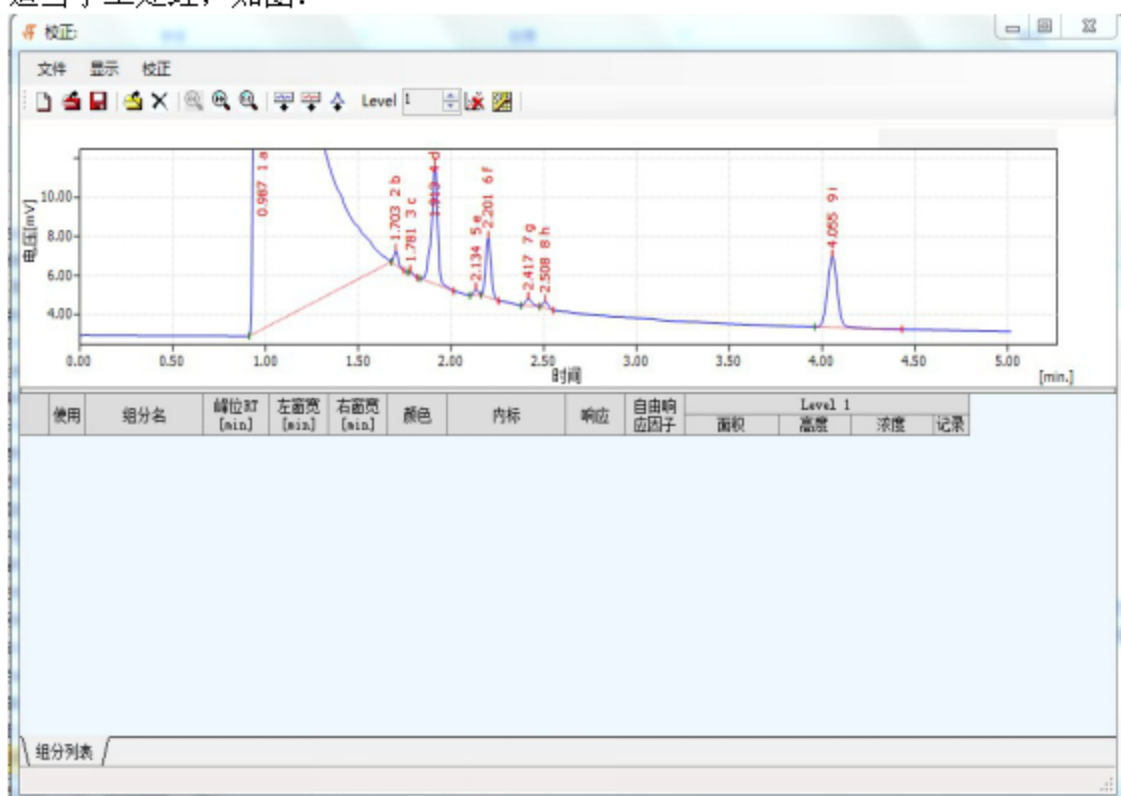
制作校正曲线前，应当先进行标样的预处理，如剔除一些不必要的峰，及观察判峰情况。进行之前最好先了解一下谱图窗口。[参考 谱图处理.手动积分]

现以已经采集的标样工程为例，如图所示，该标样有 4 张标样，打开“1.sda”进行适当处理。



打开标样谱图

适当手工处理，如图：



手工处理 - 标样 1

同理处理 2.sda、3.sda、4.sda

4.6.3.5 制作组份表

1、打开“定量组份编辑”，将“LEVEL”设置成“1”，调入待处理的谱图文件。如下图：



- 2、根据实际需要按“添加所有峰”、“添加已有组份”或“添加单组份”
- 3、填入组份名称（如果已知），调整保留时间的“左窗宽”和“右窗宽”。
- 4、在“定量组份编辑”里填上标样中各组份的浓度。
- 5、如果标样中添加了内标物，则需要在“内标”一列中指定哪一个组份是“内标”，并且在“浓度”一列中填上内标物的添加量（重量或体积）。
- 6、点击“取校正因子”按钮，即可计算出组份的校正因子。如果需要由几针同样的标准样品计算平均校正因子，则将“校正选项”中的“再校正”勾选平均，即可计算出平均校正因子。

7、“LEVEL”设置成“2、3、4.....”，再打开由这一系列平行样生成的谱图文件，重复 4 至 6 步骤，即可生成其他浓度的平均校正因子及浓度曲线。

8、选择“文件”菜单中的“保存”或“另存”，保存这个组份表文件。

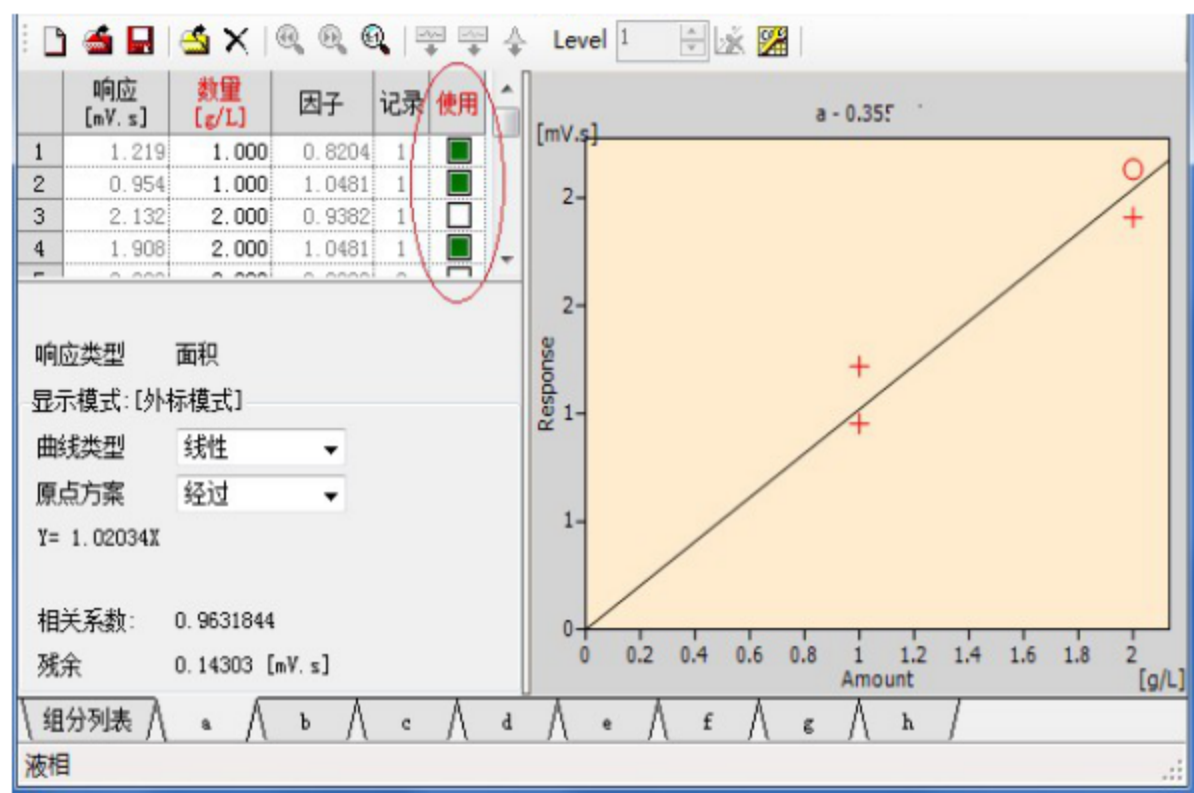
注：初次构建组分表（无组分时），最简单的就是“添加所有峰”。

关闭 01.saq，打开第二张谱图，修改 Level 级 2，点击“添加已有组分”，即将组分表中已有的组分，且谱图上也有的组分，添加到组分表 Level 2。同理，将 03.saq、04.saq 分别添加到 Level3、Level4 上，这样 4 个 Level 级即各组分含 4 个校正点，每个 level 级仅含 1 个记录；观察 4 张标样谱图可发现 01、02 数据（面积/高度）十分接近，类似重复进样，03、04 也十分接近，这样可以考虑使用两个 Level 级，Level 1 包含 01、02，Level 2 包含 03、04，则 Level 中记录数为 2。最后写入数量（Amount）。这里，将 Level1、2 的数量设为 1，将 Level3、4 的数量设为 2。

4.6.3.6 内标、外标方程

现在为各组分设置方程：将各组分的前面四个点的“使用”勾选，即右方图像上有四个标样点（使用的点标识为十，未使用的标识为○），默认选中。

选取



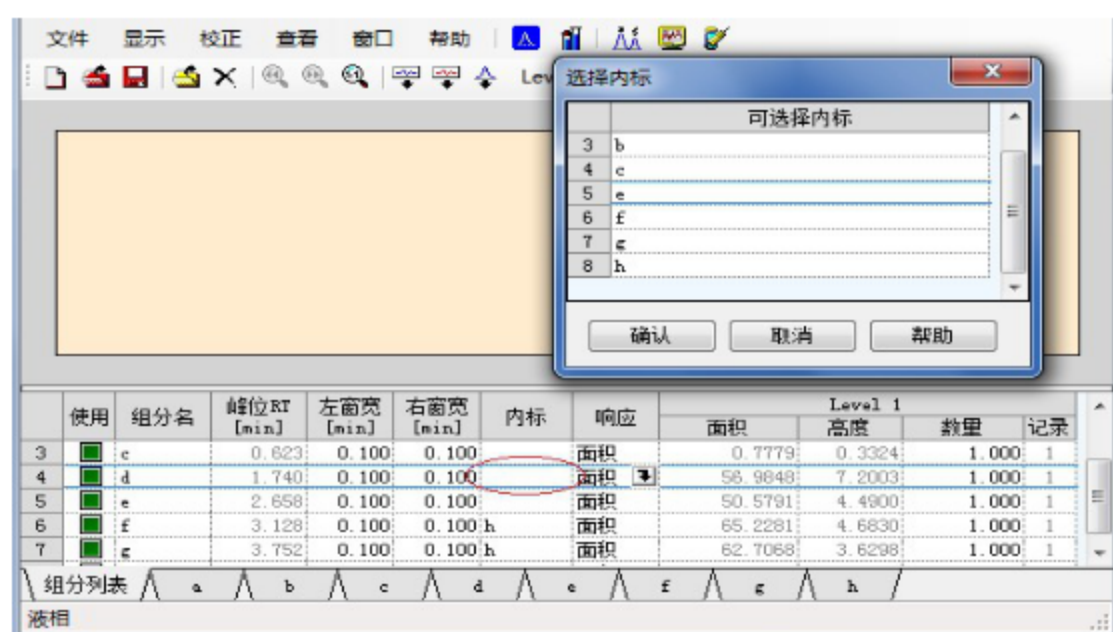
校正点

所有方程均可调整曲线类型及原点方案。

这里白酒标样中：各组分均有四个点供选择。

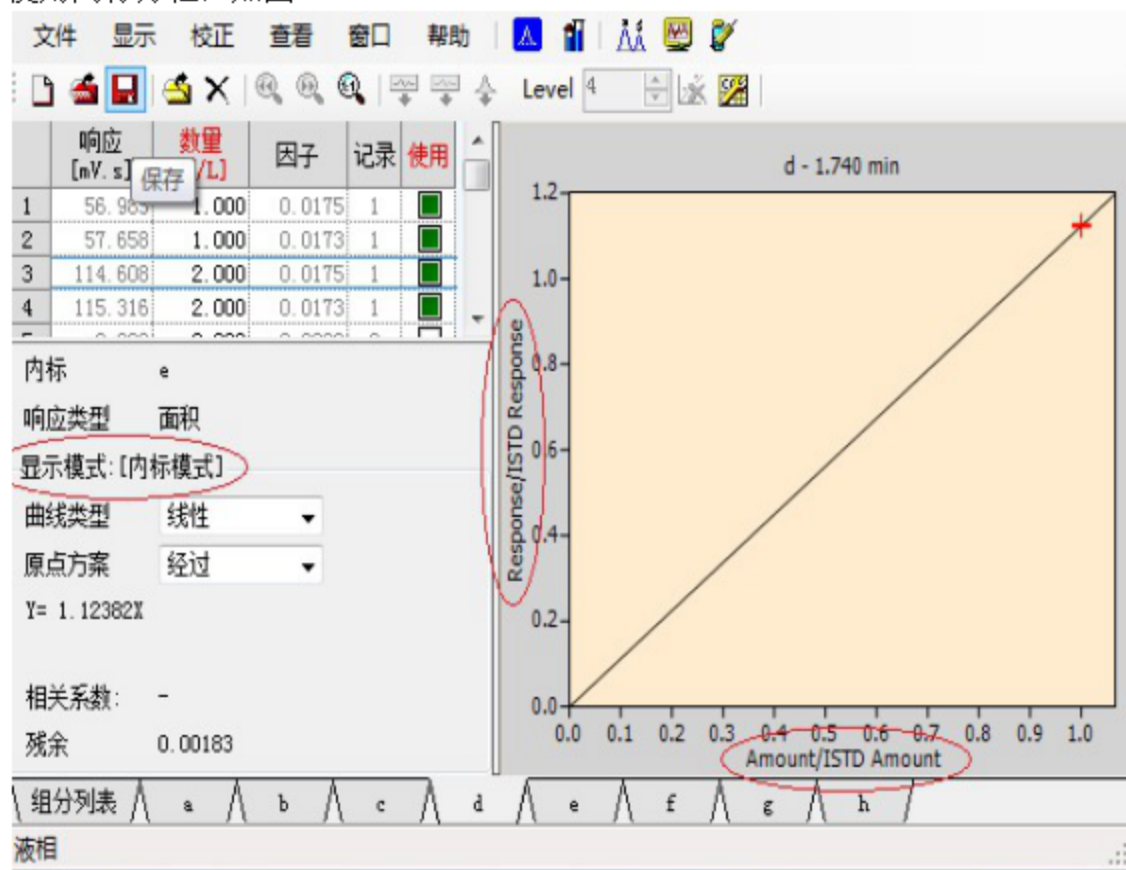
以上看到的外标模式，即各组分的外标方程，如果要制作内标校正，则可以在校正选项中设置显示模式：内标模式。各组分均提供外标、内标两个方程。内标模式：

制作内标，需要在组分表中设置内标，任意组分可设置不同内标，如图，f、g 组分均以 h 做内标；而 d 组分选择 e 做内标。



设置内标

查看各组分：没有内标的组分，及内标组分，显示同外标方程。有内标的组分，使用内标方程，如图：



内标方程

到此，校正曲线制作完毕，“保存”：xxxx.cal 文件，在“4. 6. 4. 2 定量组份的设定”选择这个文件即可。

4.6.4 积分事件

当向积分事件表添加积分事件时，积分更改将用于使用该方法进行分析的所有随后样品（假定保存了该方法）。这是通常用于修改峰积分的事件的缺省选择。

当单击积分事件选项卡，界面将显示：

方法仪器参数 定量结果计算 积分事件 报告打印				
积分事件				
	谱图处理	开始时间 [min]	结束时间	值
1	峰宽参数			0.0100 min
2	峰高参数			0.0150 mV
3	峰斜率			0.0500

在该表中，系统默认有峰宽参数、峰高参数、峰斜率。开始时间以及结束时间均不填写（表示谱图处理的全部时间里均有效）。其默认数值分别为：**0.01min**、**0.015mV**、**0.05**。它是识别色谱峰以及过滤色谱峰的重要参数。

峰宽参数为 **0.01min** 表示：峰宽小于 **0.01** 分钟的色谱峰将被过滤，而不作为色谱峰处理。这一参数是消除色谱信号中的低频噪声干扰用的控制信号。

峰宽的确切定义为峰的半高宽度，在本系统中单位为分钟。设置原则为以略小于色谱中最窄峰的半峰宽作为设置值。这一参数的设置可以过滤掉一些很尖锐的干扰毛刺。但当用于高速色谱的数据处理时，应根据实际情况调整该参数。

峰高参数为 **0.015mV** 表示：峰高小于 **0.015mV** 的色谱峰将被过滤，而不作为色谱峰处理。这一参数的设置可以过滤掉基线上的一定大小噪音。但当用于基线噪音良好，而实际信号又比较小时（如用于微量分析时），应根据实际情况调整该参数。

峰斜率是判别峰起点的重要参数，是用于判别峰起点、终点。峰斜率设定值要恰当。

设定值太小，会把基线上的一些波动误作为峰，在谱图上打出很多的峰，甚至会把峰顶部把一个峰分离成二个或更多个峰。

设定值太大，会把一些较为尖锐的峰漏掉。

系统的默认值是根据常规分析而设定的经验值。可根据实际判峰情况调整该参数。

除系统默认的 3 个参数外，在积分事件表里，您还可以根据需要添加其他的峰处理参数。如下表所示：

名称	开始时间	结束时间	值	功能
峰-重置.检测负峰			无	基线重置并检测负峰

峰-反转负峰			无	将检测到的负峰翻转为正峰
峰-最小峰宽			X (min)	检测当前峰是否小于最小峰宽
峰-最小峰高			X (mV)	检测当前峰是否小于最小峰高
峰-添加正峰			无	在时间段里添加正峰
峰-添加负峰			无	在时间段里添加负峰
峰-剔除峰			无	在时间段里删除峰
峰-最小半峰宽			X (min)	大于最小峰半峰宽的峰有效
峰-最小面积			X (mV)	大于最小峰面积的峰有效
峰-谷点			无	相邻的两个色谱峰之间的点
峰-溶剂峰			无	标注此峰峰类型为溶剂峰
峰-流速标识			无	添加流速标识
峰-添加组			A-Z	添加单峰或多峰为一组
峰-剔除组			A-Z	剔除组/从该组剔出峰
基线-肩切参数			X, X, X	在不影响左右相邻峰的基线情况下调整此峰基线到谷点
基线-谷.谷斜率			X	从当前谷点重新设定峰斜率
基线-整合基线			无	基线拉直（基线不经过谷点）
基线-向前水平			无	峰基线调整为水平直线，峰终点不变（峰分离后无效）
基线-向后水平			无	峰基线调整为水平直线，峰起点不变（峰分离后无效）
基线-前切			无	调整此峰起点
基线-尾切			无	调整此峰终点（可用作拖尾峰处理）
噪声评估			X (min)	计算当前基线噪声（不进样且仪器稳定情况下结果有效）
漂移评估			X (mV/ min)	计算当前基线漂移（不进样且仪器稳定情况下结果有效）
检测器延时	无	无	X (min)	调整全局保留时间(可用以解决不同分析人员之间的操作手法带来的保留时间差异)

当需要设置积分事件时，将鼠标移至积分事件的需要修改或添加处，点击右键系统弹出如下界面：



根据需要选择添加行、插入行、删除行、上移或下移；“添加行”命令仅在光标所在的位置添加一个新的空白行。“插入行”命令仅在光标所在的位置插入一个空白行。“删除行”命令删除当前单元格或选定行的内容。“重置”命令清除整个电子表格的内容（恢复系统默认值）。

如需要添加积分事件，在电子表格添加一个新行，在添加行的单击“事件”字段点击左键，系统会弹出积分事件的选项，如下图所示：



并选择想要添加的事件，根据该积分事件参数需要依次填入开始时间、结束时间以及值（如果需要）即可。

重复上述步骤，可添加其他的积分事件。

4.6.5 打印报告的设置

点击报告打印选项卡，系统弹出打印报告的设置界面：

在标题里填写您需要的内容。如：甲烷样品测试。如果这个“标题”被设置为空白，则程序在出分析报告时会自动将“分析报告表”中“报告头”中的第一行取出当作标题)

勾选您需要的打印选项，以确定分析报告中各部分的内容。

在报告头、报告尾中填写好“报告头”和“报告尾”，这两部分的内容将分别被原封不动地插入到分析报告的头部和尾部。

在文件格式中选择用 **Word**、写字板或自带程序来生成打印报告的格式。

5. 谱图的离线处理

在本系统中，采样结束时系统会立即本通道采用的分析方法进行谱图的分析计算，分析报告会自动保存在您设定的工作目录中。

无论是当前结束采样的通道是否在当前显示操作界面，都不影响谱图分析计算的执行。这是 **NetChrom™** 工作站的一大技术突破！

被保存的谱图文件在工作站谱图目录→色谱仪名称文件夹→日期文件夹→通道名文件夹。

如果需要，您可以调用谱图离线处理进行谱图的结果查看、重分析以及打印。

单击选择本系统的文件→谱图处理下拉菜单，系统会弹出谱图离线处理的软件界面，如下图所示：



5.1 界面

5.1.1 界面概述

本软件的界面是标准的 32 位 Windows 程序界面，其框架由标准的界面元素即菜单、工具条、状态条等构成，在工具条和状态条之间为谱图窗口显示区域以及谱图处理方法区域（有时为了扩大谱图窗口显示区域，可以取消谱图处理方法区域的显示）。

5.1.2 标题栏

标题栏位于程序窗口的顶部。上面所示的应用程序窗口标题栏从左至右顺序包含如下组成：

谱图处理: c:\netchrom\test.sda

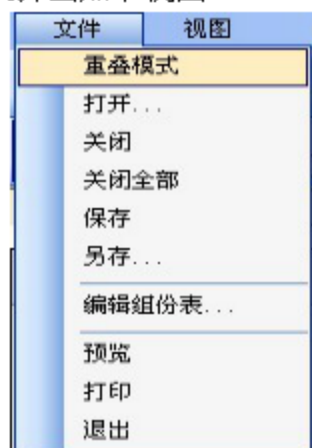
应用程序窗口控制菜单图标、应用程序的名称、当前打开谱图文件的路径及文件名。

5.1.3 下拉菜单

系统的下拉菜单包括：文件、视图、谱图、帮助。如下图所示：

5.1.3.1 文件

点击文件下拉菜单，系统弹出如下视图：



现将本下拉菜单各个部分分别描述。

➤ 重叠模式

是否在同一谱图显示区同时显示多谱图。这一功能方便不同谱图文件的谱图的比对。系统默认是**非重叠模式**。

当系统处于**重叠模式**时，下拉菜单的**重叠模式**前会打勾；同时重叠模式



图标

会打勾提示。当系统处于**非重叠模式**时，下拉菜单的**重叠模式**前会打勾

会取消；同时重叠模式图标的打勾会取消。

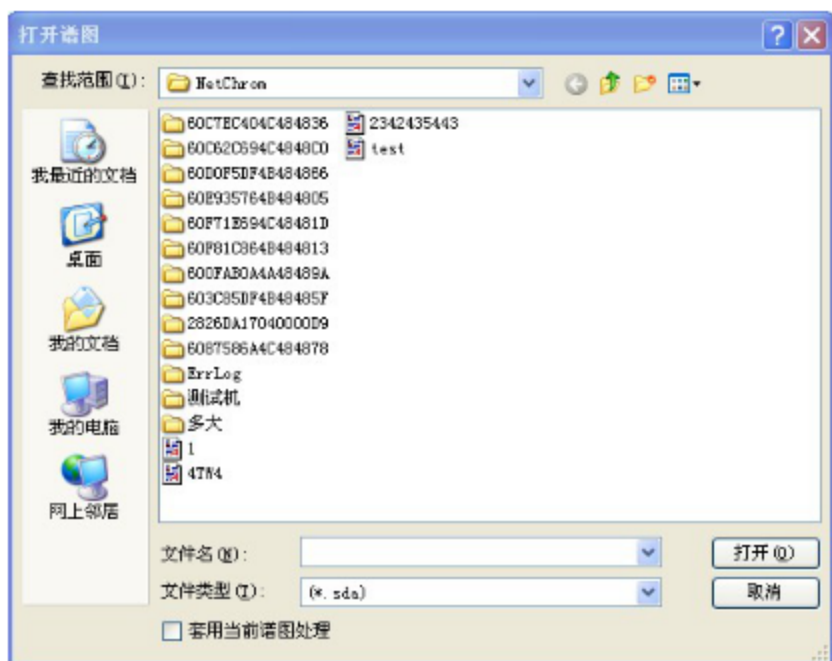
在**重叠模式**下，仅调取第一幅谱图的方法文件。

在**非重叠模式**下仅显示单幅谱图。打开一个新的谱图，原有谱图会自动关闭。

➤ 打开：

使用这个命令打开一个或多个已有的谱图文件将其中内容载入谱图窗口中。

点击打开命令，系统会弹出打开谱图文件提示框：



选取您要打开的文件类型，再选择您要选取的文件目录，点击要打开的文件，点击打开即可。当要套用原有已打开谱图文件的方法文件，在套用当前谱图处理前打勾。系统默认是不套用。

注：系统默认文件类型是以“sda”为后缀名的“色谱工作站数据文件”（简称“谱图文件”）。如果在此处选择“所有文件类型”，则文件列表框中将列出当前文件夹下包括谱图文件在内的所有类型的文件，如本软件生成的后缀名为“tab”的模板文件。但非谱图文件类型的文件用这个文件打开对话框是打不开的，只可对它们用鼠标右键快捷菜单中提供的功能进行删除、复制等操作。

- **关闭：**关闭当前已经打开的谱图文件，如没有打开的谱图文件则不做任何操作。
- **关闭所有：**关闭所有打开的谱图（比如：在**重叠模式**下打开的所有谱图）。
- **保存：**这个命令使用原有的文件名称和位置保存当前的谱图窗口的谱图文件。如果打算将已有文件名的谱图窗口保存到别的名称或位置的文件中，请选择**另存为**命令，并可将文件名输入您需要的。
- **另存：**将打开的谱图存储为另外文件。

用此命令将谱图窗口中当前的内容（往往在原内容基础上进行了改动，例如在窗口中重新采集了谱图）保存到另一个与原谱图文件不同名的新的谱图文件中，这样可继续保留原谱图文件中的内容。若要使用原有的谱图文件名称保存修改后的谱图窗口中的内容，请使用保存命令。

保存为对话框

这个对话框主要用于为待存谱图窗口中的内容指定谱图文件名称。可以在其中的文件名编辑框中直接键入谱图文件名，程序将自动在此文件名后添加上默认的后缀“**.SDA**”。

此对话框与文件打开对话框都是标准的文件对话框，实际上这两个对话框还具有对文件、文件夹进行管理的功能。您可以在这两个对话框

中删除文件或文件夹、创建新的文件夹，还可以对某一文件夹中的所有文件按名称或时间进行排序。您可以按照 Windows 的“树形”目录结构，将色谱工作站生成的谱图文件分门别类地存放到不同的文件夹中，并利用这两个对话框对形成的谱图库进行管理。一个谱图库管理系统无非应具有增、删、改、查、排序的功能，而这两个对话框已完全具备了这些功能。

- 编辑组份表：打开组份表编辑窗口，进行组份文件制作。详见：4. 6. 4.2 定量组份的编辑
- 预览：打印谱图处理结果预览
- 打印：打印谱图处理结果打印。
- 退出：关闭谱图处理窗口

注：卸载或重新安装本软件时都不会删除硬盘中已保存的谱图文件，即使它们被保存在安装目录下。您应定期将硬盘上的谱图文件备份到软盘或光盘中，以防硬盘出现故障或被病毒破坏时日常积累的谱图文件被毁于一旦！将谱图文件备份到软盘中时，应采用诸如 Winzip、“备份”程序之类的边备份、边压缩的工具软件，这样可将备份的谱图文件压缩至仅原来 1/4 左右的大小。另外，可以利用 Windows“开始”菜单中的“查找文件”功能，查找所有符合指定条件的文件，如查找的起始位置、文件的“创建日期”（不要选“修改日期”）、所属文件类型（即“HW 谱图文件”）等，然后对列出的查找到的文件直接用鼠标右键进行复制、Winzip 备份、删除等操作。

5.1.3.2 视图

- 后退：退回上一显示，同在谱图显示区双击；
- 前进：如果曾经后退显示，可向前回复；
- 复位：对当前谱图实施全时段第二峰高逻辑显示，双击显示区右上角谱图名则为全时段第一峰高逻辑显示；

5.1.3.3 谱图

- 创建标识：在谱图显示区域创建文本或线条标识。
- 移除标识：删除在谱图中创建的文本或线条标识。

5.1.3.4 帮助

- 帮助：打开帮助文档
- 关于：关于本软件介绍对话框。

5.1.4 谱图操作工具条

常用工具条的左面设计了谱图操作工具条。图标按钮提供了访问菜单中一些常用命令的快捷方式。此工具条上的按钮分别为打开、保存、关闭、打印预览、打印、前进、后退、复位及重叠模式。这与菜单里的命令相对应。谱图操作工具条如图所示：



当鼠标放置在工具条上时，在其下方会显示该工具的名称。
详解如下：

- **打开**：打开谱图文件；同菜单命令。
- **保存**：保存谱图文件；同菜单命令。
- **关闭**：关闭谱图；同菜单命令。
- **打印预览**：打印预览；同菜单命令。
- **打印**：打印；同菜单命令。
- **前进**：谱图放大缩小上一视图；同菜单命令。
- **后退**：下一视图；同菜单命令。
- **复位**：恢复谱图全尺寸状态；同菜单命令。
- **重叠模式**：将多个谱图文件在同一谱图显示区打开；同菜单命令。

5.1.5 积分事件工具条

手动积分是用于自定义色谱图的特定峰或区域的积分。

有两种方式可以将积分定时事件添加到方法中：通过手动向积分定时事件表添加事件，或通过单击色谱图以图形方式添加。

在系统的工具条集成了手动积分的工具条。如图所示：



当鼠标放置在工具条上时，在其下方会显示该工具的名称。

5.1.5.1 积分事件的操作

单击图标使该功能处于激活状态（鼠标移植谱图显示区域，会显示一条垂直的虚线），将虚线移至谱图上的预开始处点击鼠标左键，再移至谱图上的预结束处点击鼠标左键即可。如果该事件需要参数，还将弹出界面要求你调整或输入参数。此时将在积分事件里添加该事件。

基本始终点：单峰的起始及结束谷点，对于有肩切延展的峰，延展出去的谷点不作主峰的基本谷点。

命令作用范围：很多命令有作用范围，选取命令后，在谱图显示区点击两次即设置作用范围的起始/结束点，如果该命令需要赋值，则会弹出临时对话框。

感应取值：很多命令需要赋值，可以在弹出的临时对话框中输入，也可以点击“...”感应按钮，从谱图显示区选择感应范围从而得到参考值，该值会自动填写到临时对话框上的值文本框中。感应的操作过程都是相同的，但不同命令有不同的感应参量，比如“最小峰宽”命令感应选择域的时间宽，“最小峰高”命令感应选择域的振幅而非起始-结束点的绝对信号差。

命令取消：添加命令的过程可能被取消，即添加命令失败。比如进行范围选取（或感应选择域选取）时，鼠标移出谱图显示区，会造成命令取消。

如果系统无法处理您设置的积分事件，该事件将以红色提示。对于无法处理的积分事件并不耽误系统的运行，可以点击该事件，再点击鼠标右键，选“删除行”将其删除。

5.1.5.2 积分事件

对工具套的名称及作用汇总如下：

动态帮助

“动态帮组”是指当动态帮助使能时（图标有打勾标识），当操作激活下列积分事件时，界面底部会同步提示该操作的含义。不使能时（图标打勾标识取消），不提示。

峰宽参数

“峰宽参数”事件用于计算出一个峰宽值，在应用积分算法之前用该值作为整个谱图处理的最小峰宽参数。

注：在大多数情况下，基于色谱图中最窄峰的“宽度”初始值用于对所有峰进行适当积分足够大。但是，应在每次峰宽增大为原来的两倍时输入新的宽度定时事件。

峰高参数

“峰高参数”事件用于计算出一个峰高值，在应用积分算法之前用该值作为整个谱图处理的最小峰高参数。

检测负峰

此事件将导致一定时间段内划在基线以下的部分色谱图使用正常峰逻辑进行积分，并报告为真实峰。

负峰反转

此事件将导致一定时间段内的负峰反转成为正峰，并报告为真实峰。

最小峰宽

此事件是设置指定时间范围内谱图处理的最小峰宽。小于此峰宽值的峰不被标识。

最小峰高

此事件是设置指定时间范围内谱图处理的最小峰高。

添加正峰

使用此命令以图形化方式定义以前没有检测到的正峰。当您想要强迫某个峰的积分，但不更改整体积分参数时，这将非常方便。

添加负峰

使用此命令以图形化方式定义以前没有检测到的负峰。当您想要强迫某个峰的积分，但不更改整体积分参数时，这将非常方便。

删除峰

此事件可以在指定的范围内关闭色谱图的峰识别。如果您对色谱图的特定区域不感兴趣，并且不想对该区域的峰生成报告，则此事件将很有用。

最小半峰宽

此事件是设置指定时间范围内谱图处理的最小半峰宽。

最小半峰面积

此事件是设置指定时间范围内谱图处理的最小峰面积。

手动基线

此事件使您不必更改积分参数即可更改峰基线的绘制方式。当您想要更改某个峰基线的绘制位置，而不更改色谱图中其他峰基线的绘制方式时，这将非常方便。

要绘制新基线，选择“**手动基线**”命令，然后在所需基线开始点单击鼠标，并在所需基线的结束点再次单击鼠标。

添加组

是将一段保留时间内的所有色谱峰作为一个峰进行定量计算。

切肩参数

按参数进行肩切运算。

这是一个局部命令，需要设置作用范围及相关参数。这里着重对参数及算法进行说明，有面积比，斜率比，左肩切系数，右肩切系数等四个参数。一个最小的肩切过程，在重叠峰组中以面积最大的峰为主峰，将被肩切的前/后峰（组）为肩切峰，当满足一定的条件，主峰则进行前/后肩切延展。要进一步向前/后延展时，主峰的面积、斜率等参量按上次延展后的当前值。

面积比：主峰与肩切峰（组）的面积比值，要求大于等于该值，（一般主峰面积较大，值越大主峰面积要求越大。）

斜率比：肩切峰（组）与主峰的基线斜率绝对值的比值，要满足数学规范，比如前向肩切，肩切峰（组）基线必须左低右高。要求大于等于该值，（一般肩切峰（组）基线较陡，值越大肩切峰（组）基线要求越陡。）

左/右肩切系数：对“斜率比”的调整，即真正使用的斜率比是“斜率比”与该系数的乘积。右肩切系数一般会小些，体现主峰拖尾。

谷.谷斜率

判定峰是否重叠的谷点-谷点斜率边界值，小于等于该值时前面的峰判作单峰，否则与后续峰(组)进行谷点垂切整合。

经过谷点（峰谷到峰谷）

此事件会导致未完全分离（即没有返回到基线）的峰的基线被绘制到峰间最小的点上。如果不使用此事件，则会将基线设置到色谱图返回到基线的下一个点上，并为未到达基线的峰划一条垂线。

需要选择范围的命令，两次点击即确定命令作用范围：第一次点击确定[起始点]，第二次点击确定[结束点]。

整合基线

调整峰（组）为单峰；

向前水平

此事件使您可以在为事件指定的时间内设置水平向前的基线。

向后水平

该事件用于将水平基线的方向强迫为色谱图开始时的方向。反向水平基线将在由该事件指定的时间内创建。

尾切（后切线撤去）

此事件用于对位于大峰后沿的小峰进行积分。小峰的基线成为从大峰的峰谷到色谱图上的切点之间绘制的切线。

使用“切线撤去”事件的积分

前切（前切线撤去）

此事件用于强迫子峰的切线基线在母峰的前沿。

信号延时

信号延迟,平衡多采集卡下不同信号间的时间差。

5.1.6 谱图窗口

每一个谱图窗口含有谱图原始采样信号数据、谱图处理参数及定量结果等信息。

谱图处理参数及定量结果同 4.6 章节-方法的建立。这里不再赘述。

在谱图区,您可以观察原始谱图及一些程序添加的附属标记。用鼠标放大或缩小谱图的显示;也可以修改时轴和信号值显示参数来修改谱图的显示,以便于观察。

谱图参数: 时轴 5 分 信号 -10 到 100 mV

如果要完整地观察谱图,可单击“原始谱图”按钮,使信号曲线在纵向和横向上正好充盈整个谱图区域。

系统在检测到的峰的起点和重叠峰间的谷点处打上绿色短线标记,在峰的终点处打上红色短线标记,同时在峰顶点处标出峰顶时间。

系统对峰终点和谷点的区分关系到它对谱图中峰群的划分,所以在观察谱图中的判峰情况时,应特别注意系统是否正确区分了峰终点(被打上红色短线标记)和谷点(被打上绿色短线标记)。系统在划分了一个峰群后,立即显示为此峰群确立的基线以及为其中的峰确立的分割线(这些附加线都是灰色的)。由于基线和分割线的位置对每一个峰的面积的计算影响甚大,所以请您也要注意观察程序为峰群确立的基线校正方案和分割方案是否合理,必要时使用“谱图处理表”中的峰重叠、峰分离方案重新划分峰群。

对定量组份表里设置的所有套峰时间,程序将在谱图区域底部用竖短线(称为套峰线)标明它们在谱图中的相应位置。若某个套峰线落在了谱图中某个峰的起点及终点标记范围之间,则程序认为定量组份表中此套峰时间处的组份即与谱图中的这个峰相对应;若某个套峰线没有落在谱图中程序检测到的任何峰的起止范围内,则意味着定量组份表中此套峰时间处的组份在谱图中未找到。若同时有多个套峰线落在谱图中某一个峰的起止范围内,则程序只认为最靠近此峰顶点的那个套峰线对应此峰。

如上所述,程序在原始谱图中添加了各种辅助标记,当需要不受干扰地观察谱图时,可以在“工具”菜单中的“选项”命令中关闭各种附加标记的显示。需要解释的是,程序之所以留出可以让谱图区背景显示为黑色的选项,是因为这样即使长时间观察谱图也不容易造成视觉的疲劳。

5.1.7 方法编辑

同 4.6.1 仪器参数,只是在此处“仪器参数”不可再修改的。

5.1.8 结果显示

结果显示区域共计三个选项卡,分别为:结果、总结、柱效。如下图:

结果	总结	柱效	
组份名	峰类别	保留时间 [min]	面积 [mV.s]
1 A123123	单峰	0.9808	5681.0420
2 B213123	单峰	1.7151	1.3100
3 C12312	单峰	1.7942	0.1582

5.1.8.1 分析结果的显示:

分析结果区显示当前谱图分析的结果。默认显示列如图所示，主要包含：组份名称、峰类别、峰保留时间、峰面积、面积百分比、峰高度、高度百分比、峰开始结束时间、按照对应方法计算的浓度及浓度百分比。

组份名	峰类别	保留时间 [min]	面积 [mV.s]	面积 [%]	高度 [mV]	高度 [%]	开始时间 [min]	结束时间 [min]	浓度 []	浓度 [%]
1 组份0	单峰	0.3358	0.3590	0.0111	0.0186	0.0014	0.2533	0.7667		
2 组份1	重叠峰	1.1433	3127.9600	96.7474	1318.0710	95.8333	1.1008	1.2442		
3 组份2	重叠峰	1.2575	0.9585	0.0296	0.5995	0.0436	1.2442	1.2750		
4 组份3	重叠峰	1.2909	1.0259	0.0317	0.6729	0.0489	1.2750	1.3092		
5 组份4	重叠峰	1.3400	1.9154	0.0592	0.8297	0.0603	1.3092	1.3667		
6 组份5	重叠峰	1.3959	4.1609	0.1287	2.5227	0.1834	1.3667	1.4309		
7 组份6	重叠峰	1.4684	37.1333	1.1495	23.5189	1.7100	1.4309	1.5184		
8 组份7	重叠峰	1.5692	19.6403	0.6075	11.3000	0.8216	1.5184	1.6184		
9 组份8	重叠峰	1.6475	3.4547	0.1069	1.9062	0.1366	1.6184	1.6634		
10 组份9	重叠峰	1.6742	2.9962	0.0927	1.6778	0.1220	1.6634	1.7609		
11 组份10	重叠峰	1.8217	0.6184	0.0191	0.2178	0.0158	1.7609	1.8392		
12 组份11	重叠峰	1.8717	0.8538	0.0264	0.2810	0.0204	1.8392	1.9226		
13 组份12	重叠峰	1.9592	0.1769	0.0055	0.0644	0.0047	1.9226	2.0209		
14 组份13	单峰	2.2184	31.4696	0.9734	13.6051	0.9892	2.0534	2.3042		
15 组份14	单峰	2.8017	0.3308	0.0102	0.0757	0.0055	2.7225	2.9592		

如果要调整显示的信息内容，在结果列表区点击右键，系统会弹出如下界面：

0.0436	1.2442	1.2750
0.04	列设置...	0.92
0.06	恢复默认列设置	0.67
0.18	清除组份名	0.09
1.71		1.84
0.8216	1.5184	1.6184
0.1366	1.6184	1.6634

根据需要，您可以选择列设置、恢复默认列设置、清除组份名。
当选择列设置，系统会弹出列设置的选择窗口，如下图：



您可以根据自己的要求将关注的选项移至“显示列”，将不关注的选项移至“隐藏列”，点击确认即可。

当选择恢复默认列设置，系统将恢复出厂时的列设置选项。

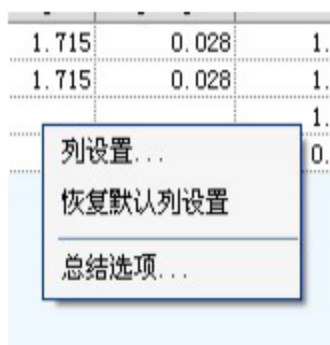
当选择清除组份名，系统将清除组份名。

注：分析结果显示区对组份名列单元格内进行双击，能够快捷的修改对应的组份名，同时也可在制作组份表时根据保留时间以及时间窗设置组份名称。

5.1.8.2 结果总结及结果平均：

在结果总结及结果平均里，可以显示当前分析谱图的各个组份的参数以及对多个谱图的同一种分析结果的平均值以及相对标准偏差%（RSD）。

在结果列表区点击右键，系统会弹出如下界面：



选中“列设置”可以设置您要关注的内容。



☆在“一般列”里，您可以将关注的谱图文件内容移到右边，将不关注的谱图文件内容移到左边。

☆在“总结列”里，您可以将关注的谱图参数内容移到右边，将不关注的谱图参数内容移到左边。如将“保留时间”、“浓度”、“峰面积”、“峰高”作为关注的对象，可参照下图所示：



选择“恢复默认列设置”可以恢复出厂时的显示内容；
选择“总结选项”将弹出如下设置框，可根据需要勾选。



当需要对同一样品的多次进样的分析结果进行平均计算及其计算其定量重

复性时，选择“谱图叠加打开”  方式，打开同一组份的一个谱图文件，
调用其分析方法进行结果计算，再依次打开同一组份的其他谱图文件，并调用同

一分析方法进行结果计算，在结果显示区域，将计算出这些谱图的同一组份的平均值及其 RSD 值，如下图所示：

结果	总结	柱效					
	谱图	样品 浓度	体积 [μ l]	A			
				保留时间 [min]	半峰宽 [min]	浓度	面积 [mV.s]
1	1			0.987	0.061	10.000	5543.530
2	2			0.990	0.063	10.270	5692.979
3	平均值					10.135	5618.254
4	R S D					1.884	1.881

5.1.8.3 柱效计算：

点击“柱效”选项卡，系统会显示柱效的显示页面：

结果	总结	柱效							
	保留时间 [min]	半峰宽 [min]	对称性 [-]	容量 [-]	效率 [th.pl]	柱效 [t.p./m]	对称性/ 拖尾[-]	分辨率 [-]	组份名
1	0.9808	0.0625	1.5556	-0.0192	1365.5880	13655.8800	1.6171		A123123
2	1.7151	0.0275	1.4167	0.7150	21563.9400	215639.4000	1.2037	9.6261	B213123
3	1.7942	0.0283	2.9231	0.7942	22232.9500	222329.5000	1.9286	1.6731	C12312
4	1.9292	0.0342	0.6607	0.9292	17676.8000	176768.0000	0.8492	2.5488	D123123
5	2.1534	0.0283	0.8966	1.1534	32034.3000	320343.1000	0.9375	4.2321	E1212
6	2.2201	0.0325	1.1818	1.2201	25877.6400	258776.4000	1.1081	1.2932	F • 1233
7	2.4392	0.0408	1.3947	1.4392	19789.3400	197893.4000	1.2143	3.5286	G213123
8	2.5309	0.0342	1.3333	1.5309	30429.6800	304296.6000	1.1667	1.4422	H324234
9	4.0999	0.0575	0.9846	3.0999	28179.7100	281797.2000	1.0068	20.1962	Y23434

峰保留时间：

被分离样品组分从进样开始到柱后出现该组分浓度极大值时的时间，也即从进样开始到出现某组分色谱峰的顶点时为止所经历的时间，称为此组分的保留时间，用 t_R 表示，常以分 (min) 为时间单位。溶质通过色谱柱所需时间，即待测组分从进样到出现峰最大值所需的时间。

保留时间决定因素：保留时间是由色谱过程中的热力学因素所决定，在一定的色谱操作条件下，任何一种物质都有一确定的保留时间，有着类似于比移值相同的作用，可作为色谱定性分析的依据。

半峰宽：

色谱峰高一半处的峰宽度，又称半宽度。即通过峰高的中点作平行于峰底的直线，此直线与峰两侧相交两点之间的距离。其表示单位与峰宽相同。半峰宽等于 2.354 倍标准偏差。

对称性：

峰左右部分比值。

容量：

对给定色谱体系和操作条件，在一定时间内，最多能从色谱柱洗出达到一定分离度的色谱峰个数。峰容量决定于色谱柱理论塔板数和最后一个峰的保留时间与死时间之比。提高色谱柱理论塔板数，提高柱内固定相体积，降低相比，均会使峰容量增加。

效率：

柱效率的高低在一般的色谱曲线(常称为微分曲线)中直观地表现为峰谱带的集中或扩散，柱效率高的谱带集中、峰窄，反之谱带扩散、峰宽。

柱效率用塔片数 n 表示，而塔片数又有理论塔片数和有效塔片数之分，计算有效塔片数比较常用的公式是：

$$n_{\text{有效}} = 5.54 \cdot \left(\frac{t_r'}{2\Delta t_{1/2}} \right)^2$$

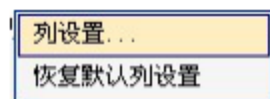
柱效：

柱效是指色谱柱保留某一化合物而不使其扩散的能力。柱效能是一支色谱柱得到窄谱带和改善分离的相对能力。

分辨率：

分辨率是定量描述混合物中相邻两组分在色谱柱中分离情况的主要指标。色谱分辨等于相邻两组分色谱峰保留值之差与两个组分色谱峰基线宽度总和之半的比值：式中： $t_R(1)$ 、 $t_R(2)$ 分别为两组分保留时间； $y(1)$ 、 $y(2)$ 为相应组分在基线上的宽度，与保留时间用同样单位。色谱分辨率标志着色谱柱对某一“物质对”分离的效能。 R 值 ≥ 1 时，两个峰有比较明显的分离。 $R=1.5$ 时，两个峰完全分离。色谱分辨率概括了色谱过程的动力学特性和热力学特性，比较全面地评述了柱效能。

了解了“柱效计算”的相关名称及其意义，您可以根据自己关注的内容选择柱效列表内容。如果要调整显示的信息内容，在结果列表区点击右键，系统会弹出如下界面：



根据需要，您可以选择列设置、恢复默认列设置。

当选择列设置，系统会弹出列设置的选择窗口，如下图：



您可以根据自己的要求将关注的选项移至“显示列”，将不关注的选项移至“隐藏列”，点击确认即可。

当选择恢复默认列设置，系统将恢复出厂时的列设置选项。

5.2 分析方法

5.2.1 归一法操作步骤

- 1、将定量组份表文件清空。
- 2、进样后，按开始键启动谱图的采集并处理待测样品的谱图数据。
- 3、按结束键停止采样。
- 4、保存该谱图文件。

5.2.2 校正归一法操作步骤

- 1、按照“4.6.4.3 制作组份表文件”操作生成组分表文件。
- 2、在定量组份中调入“组份表文件”。
- 3、进样后，按开始键启动谱图的采集并处理待测样品的谱图数据。
- 4、按结束键停止采样。
- 5、保存该谱图文件。

5.2.3 单点校正法（单点外标或单点内标）操作步骤

- 1、按照“4.6.4.3 制作组份表文件”制作单一浓度级别的组份表文件。
- 2、在定量组份中调入“组份表文件”。
- 3、进样后，按开始键启动谱图的采集并处理待测样品的谱图数据。
- 4、按结束键停止采样。
- 5、保存该谱图文件。

5.2.4 多点校正法（多点外标或多点内标）操作步骤

- 1、按照“4.6.4.3 制作组份表文件”制作多个浓度级别的组份表文件。
- 2、在定量组份中调入“组份表文件”。
- 3、进样后，按开始键启动谱图的采集并处理待测样品的谱图数据。
- 4、按结束键停止采样。
- 5、保存该谱图文件。

5.2.5 配合自动进样器操作步骤

该气相色谱仪支持与自动进样器的连接。自动进样器的使用详见所配备自动进样器的使用说明。安装了自动进样器的色谱仪在自动进样状态下会自动触发本软件进入分析状态。

安装自动进样器后，待分析的样品可能比较多。所以在系统中可以在“文件命名设置”中勾选“自动进样”选项。此时生成的文件名中将包含该信息，即可很方便的区分出该谱图文件是几号样品以及该样品的第几次进样。

5.3 报告的打印

系统将根据“4.6.5 打印报告的设置”的设置，打印出分析结果报告。

在未知打印报告样式时，可以点击打印预览按钮，查看报告是否满意。如不满意，可关闭预览继续调整；如满意，按打印即可。

6.仪器的维护与保养

6.1 进样器的清洗

进样器比较容易污染，特别是汽化管容易污染，为此清洗进样器就显得比较重要，进样器汽化管可用溶剂棉球直接穿洗，穿洗后用大气流吹一下（主要吹掉棉球纤维并吹干溶剂），然后装好汽化管衬垫和密封螺母。

6.2 氢火焰离子化检测器的清洗

可拆下 FID 外罩，取下电极和绝缘垫圈，把外罩、电极和绝缘垫圈用丙酮或酒精清洗然后烘干。如果污染严重，可以将待清洗零件放入超声波清洗液中，经超声后，用清水淋洗干净然后用酒精清洗并烘干。如果是色谱固定液沾污检测器，则选择能溶解固定液的溶剂予以溶解。

6.3 色谱柱的安装

6.3.1 填充柱的安装

填填充柱在进样器和检测器两处的安装是类似的。填充柱的进样器一端应留出足够的一段空柱（至少 50mm），以防插入的注射器针触到填在柱端的玻璃纤

维或柱填充物；在检测器一端，也应留出足够的一段空柱(至少 4mm)，以防喷嘴底端触到填在柱端的玻璃纤维或柱填充物。如下图 6.1 所示：

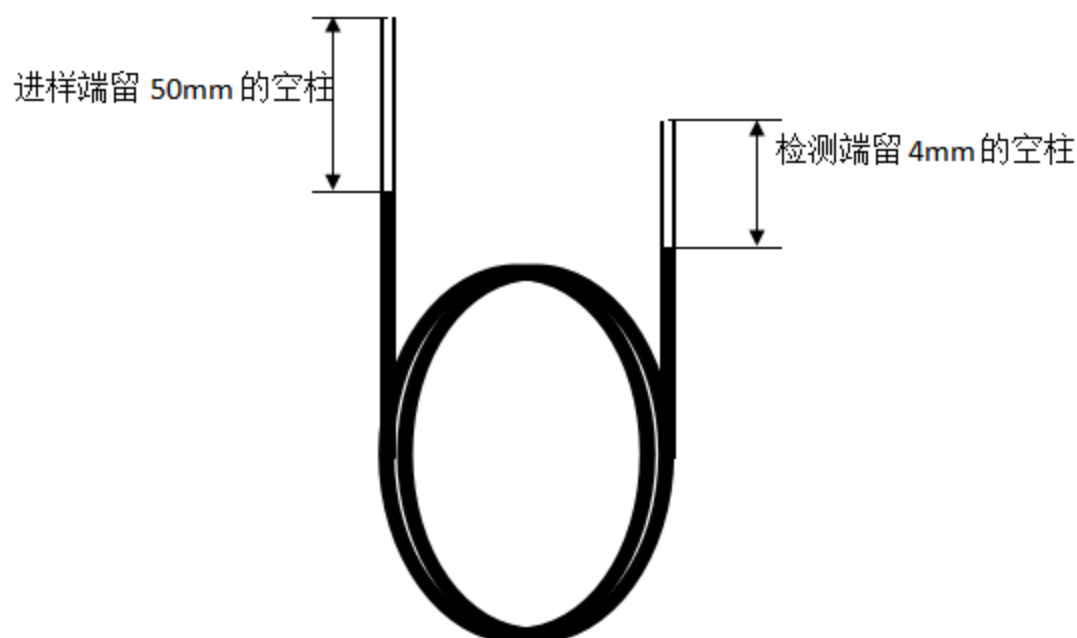


图 6.1 填充柱两端留空管部分示意图

由于玻璃的刚性，玻璃填充柱必须同时在进样器和检测器两端安装。每端的安装程序一样，检测器端的柱安装请根据所用检测器参见相应章节。

GC-460 气相色谱仪 $\Phi 3$ 、 $\Phi 4$ mm 填充色谱柱与进样器的连接。

安装步骤如下：

- 1) 将 $M10 \times 1 \ \Phi 3$ mm 柱螺母先套入色谱柱的两端；
- 2) 在色谱柱的两端装上 $\Phi 3$ mm 石墨圈，再装上相应内径的衬管。向上推入检测器底部（要推到底），旋紧螺帽；
- 3) 进样器端要根据具体要求调整色谱柱的高低，旋紧螺帽；
- 4) 用中性皂液检漏，不应有漏气现象；
- 5) 擦干皂液；
- 6) $\Phi 4$ mm 色谱柱安装步骤同上；

注：填充柱的进样端应保持有长度约 50mm 的空管，不至于在进样时发生困难，色谱柱的进样端不能和检测器端搞混，应当在灌装填充柱时做上标志。在检测器

一端，也应留出足够的一段空柱(至少 4mm)，以防喷嘴底端触到填在柱端的玻璃纤维或柱填充物。

6.3.2 毛细管柱的安装

熔融硅毛细管柱很规整，不需要加以整理。但柱端应新切、无毛口、边缘齐整，除掉来自柱、固定相、密封垫圈的微粒物质，这些很重要。

为此，柱端要新切，用一适宜的玻璃切割工具，在欲切断的部位划痕。通常先装上柱螺母和垫圈以后再进行切割。

注意：戴上防护眼镜以防在处理切割玻璃或熔融硅毛细管柱时产生的飞扬的颗粒物质对眼睛的可能伤害。处理毛细管柱时也应小心防止皮肤被扎伤。由于柱子具有相当的刚性，因此在处理毛细管柱时，事先注意这些十分重要。

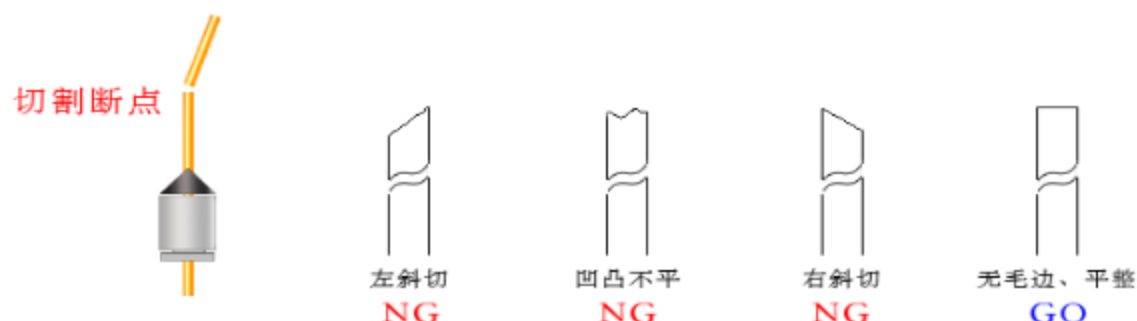


图 6.2 :准备熔融硅毛细管柱

毛细管柱绕在金属框上，此框悬挂在柱箱内的毛细管柱架上。悬挂位置取决于框的直径，最好使柱位于柱箱中央。柱两端由框底部伸出，平顺弯曲朝向进样器接口和检测器接口，不要让柱的任何部位碰到柱箱内壁。石墨垫圈穿过柱时可能会污染柱，可按“准备熔融硅毛细管柱”中的说明切割柱端。

6.4 气体净化器的维护

流路控制系统中，接有过滤器，其中就置放有 5A 分子筛。5A 分子筛需要定期更换或活化。活化温度为 350℃，时间 4 小时。

7.仪器的故障与排除

7.1 开机问题

7.1.1 开机无反应

故障判断	检查方法和修理
市电问题	检查市电
保险丝熔断	检查保险丝，并更换
显示屏不点亮	检查显示屏

7.1.2 开机初始化不通过

故障判断	检查方法和修理
电源板电源故障	检查电源板的+12V、+5V、+15V、-15V
电部件 RS485 器件故障	依次拆除信号板，逐一排除信号板的问题
显示板 RS485 器件故障	依次拆除显示板，排除信号板的问题

7.1.3 不联机

故障判断	检查方法和修理
网线问题	检查网线，在 PC 上 PING 这台 GC
IP 地址设置错误	检查 IP 地址，设置正确
计算机操作系统防火墙阻止	取消防火墙的阻拦
计算机杀毒软件阻止	取消杀毒软件的阻拦
电脑或色谱仪网络指示灯不亮	检查网线、交换机、色谱仪或计算机
联机但时断时通	检查网络以及 IP 地址是否冲突

7.1.4 联机但基线不走

故障判断	检查方法和修理
监测器信号板故障 1	在 GC 上检查是否识别到该检测器
监测器信号板故障 2	在 GC 上检查该检测器信号是否正常
监测器信号板故障 3	检查同类型的检测器板号是否设置重复

7.2 色谱峰问题

7.2.1 无基线

故障判断	检查方法和修理
检测板没有安装	检查检测板是否安装
检测板故障	更换检测板
基线和背景颜色设成了一致的颜色	修改颜色
采样速率不正确	修改采样速率（20 次/秒）
色谱仪与计算机没有联机	检查网络以及网络参数

7.2.2 没有色谱峰

故障判断	检查方法和修理
进样器温度太低	增加进样器温度
注射器堵塞	更换注射器
放大器电源断开	检查放大器，
没有载气通过	检查载气流路是否堵塞、气瓶中气体用完
硅橡胶漏气	更换硅橡胶
无火焰	点火
FID 极化电压没有	排除极化电压连接不良现象

7.2.3 正常滞留时间而灵敏度下降

故障判断	检查方法及修理
注射器漏气	更换注射器
灵敏度的选择不当	选择适当的灵敏度
载气漏	探漏并做相应的处理
氢气和空气流量选择不当 (FID)	调正它们的流量
检测器无高压 (FID)	装上高电压

7.2.4 拖尾峰

故障判断	检查方法及修理
进样管污染	清洗进样器管子
层析柱炉温太低	增加层析柱温度
进样温度太低	调高进样器温度
层析柱选择不当	选择适当的色谱柱

7.2.5 伸舌峰

故障判断	检查方法及修理
样品量太大	降低样品量
样品凝集在系统中	先提高柱温，再选择适当的进样器、色谱柱、检测器温度

7.2.6 色谱峰分离不好

故障判断	检查方法及修理
柱过短	选择较长色谱柱
固定液流失	更换层析柱或老化色谱柱
柱温度太高	降低柱温
固定液选择不正确	选择适当色谱柱
载气流速太高或太低	调整载气流速

7.2.7 平顶峰

故障判断	检查方法及处理
放大器输入饱和	降低样品量，降低放大器灵敏度
记录器零点位置发生变化	检查记录器零点位置并做相应的处理

7.2.8 基线突变

故障判断	检查方法及处理
外电场干扰	排除影响仪器正常工作的外电场干扰
电源插头接触不良	把电源插座安装牢固
氢气、空气流量选择不当	重新调整氢气和空气的流量

7.2.9 恒温操作时有不规则基线波动

故障判断	检查方法及修理
仪器安装的位置不好	把仪器安装在无强烈振动处，最好把仪器放在没

	有振动的水泥台上。
仪器接地不好	检查并做好相应良好接地
固定液不适当	固定液选择适当
载气流速选择不当	把载气流速调节适当
载气漏	探漏
检测器污染	清洗检测器
氢气、空气选择不当 (FID)	适当调节氢气、空气的流量

7.2.10 滞留时间延长灵敏度低

故障判断	检查方法及修理
载气流速太慢	增加载气流速
进样后载气流速变化	换进样器硅橡胶
进样器硅橡胶漏	换进样器硅橡胶

7.2.11 出峰时信号突然回到低于基线并且灭火

故障判断	检查方法及修理
样品量太大	降低样品量
载气流速太高	选择合适的载气流速
氢气或空气流量太低	重新调节氢气、空气流速
火焰喷嘴污染	清洗火焰喷嘴
层析柱里面的固定液流失	重新老化层析柱

7.2.12 基线不回零

故障判断	检查方法及修理
检测器污染	清洗检测器
放大器故障	检查放大器

7.2.13 不规律距离中有尖刺峰

故障判断	检查方法及修理
绝缘子漏电	探漏，并做相应的处理
放大器故障	流路中消除杂质
火焰跳动	调节合适的氢气和空气流量
高频信号线故障	检查高频信号线
检测器有灰尘	洗耳球吹除

7.2.14 在相等间隔中有一定的毛刺

故障判断	检查方法及修理
水冷凝在氢气管路中	从管路中消除水并调换或活化干燥剂
流路中有堵塞现象	流路中消除杂质
漏气	探漏，并做响音的处理
火焰跳动	调节合适的氢气和空气流量

7.2.15 圆顶峰

故障判断	检查方法及修理
超过检测器线性范围	降低样品量
放大器选择不当	重新选择适当的放大器

7.2.16 基线噪音大

故障判断	检查方法及修理
色谱柱污染	更换色谱柱
载气污染	更换或再生载气过滤器
载气流速太高	重新调节载气流速
接地不良	检查并做好良好的接地
高阻污染	清洗污染的高阻
进样器污染	清洗进样器中进样管
空气或氢气流速太高或太低 (FID)	重新调节空气或氢气的流速
空气或氢气污染	更换氢气或空气过滤器
水冷凝在 FID 中	增加 FID 温度清除水分
高频信号线故障	检查高频信号线

7.2.17 额外峰

故障判断	检查方法及修理
前一样品的高阻分峰	待前一次样品全部流出后再进样
冷凝在层析柱中的水分在出峰	安装或再生净化器的操作条件要适当选择
样品分解	降低进样器温度
样品被污染	保证样品干净

7.2.18 锯齿型基线

故障判断	检查方法及修理
稳流阀膜片疲劳	换膜片或修理阀
载气瓶减压阀输出压力变化	调节载气阀减压的压力在另一位置
气流的流量不当	重新设置气流的流量

7.2.19 反峰

故障判断	检查方法及修理
氢气流里过大 (FID)	调整氢气流里
正负开关弄错	改变正负开关到正确的位置
参比池与测量池的钨丝引线搞错 (TCD)	检查参比池与测量池钨丝的引线情况。

7.2.20 没有进样而基线单方向变化 (FID)

故障判断	检查方法及修理
检测器温度太低	提高检测器温度
谱柱温停止加温或失控	检修控温系统和加热丝铂电阻
漏气	探漏

7.2.21 单方向基线漂移

故障判断	检查方法及修理
检测器温度大幅度变化	稳定检测器温度
放大器零点漂移	检修放大器各部件
柱温大幅度增加或减少	稳定色谱柱温度
漏气	探漏

7.2.22 升温时不规则基线变化

故障判断	检查方法及修理
柱流失过多	选择适当色谱柱，使用柱温应远低于固定液最高使用温度，老化柱子
没有选择好合适的操作条件	选择合适的操作条件
色谱柱被污染	更换色谱柱

7.2.23 周期性基线波动

故障判断	检查方法及修理
检测器温控不良	检查接触是否良好
载气流里压力太低	更换载气瓶
色谱柱炉温调节不当	检查铂电阻接触是否良好
载气流里调节不当	重新调节载气流速
空气、氢气调节不当（FID）	重新调节氢气、空气流量

7.2.24 程序升温后基线变化

故障判断	检查方法及修理
温度上升时，柱流失增加	选择适当的色谱柱或老化色谱柱
柱流速没有矫正好	矫正柱流速
色谱柱被污染	更换色谱柱

8. 热导检测器的维护

8.1 热导检测器注意事项

在 TCD 检测器使用期间，一定要注意和遵守下列内容

- 没有通入载气时，禁止设定桥流，以免造成钨丝烧毁的事故。
- 初次老化柱子时，不要将柱后载气接入热导池，应直接放空在柱箱内；老化时不能用氢气！！一般是用氮气。老化期间也绝对禁止设定桥流。
- 热导池检测器是个精密的部件，请勿自行拆装池体内钨丝，以免造成不必要的损失。

8.2 热导检测器常见故障分析与排除

8.2.1 进样不出峰

故障判断	检查方法及修理
未设定电流	首先设定电流
钨丝断了	更换钨丝
TCD 热导电源部件内部接插件及连接线未插好	重新插好与之相关的插头插座
注射器漏气或堵塞	更换注射器
硅橡胶漏气	更换硅橡胶

8.2.2 信号输出幅度太大（未进样时）

故障判断	检查方法及修理
体内钨丝碰池壁	与厂方联系维修
钨丝阻值不配对	与厂方联系维修
TCD 热导电源部件内部接插件及连接线未插好	重新插好与之相关的插头插座

8.2.3 基线噪音大

故障判断	检查方法及修理
载气不纯（载气纯度非常重要）	将载气净化后再做如脱氧、干燥
热导池受污染	清洗池体及进样器
色谱柱未老化	重新老化色谱柱。
硅橡胶漏气	更换硅橡胶
气路系统及与色谱柱连接处漏气	探漏查出漏气处，做相应的处理。
TCD 工作电流设置太大	降低工作电流设定值到合适数值。
热导电源不稳定	与厂方联系维修

附录 A 电器条件细则

一个合格的电器技术员应当能给该系统送上合适的电源。无论是改造现存的电器设备，还是安装全新的设备时都要求如此。

- * 估计一下该地区的电力总需要量。
- * 装上比较方便的输出线。
- * 制订电器安全方面的计划。
- * 要保证所有的配线都符合当地的规范。

确定电源功率的需求量

算出你地区所需的电量。

注意：总电量该包括原订的设备再加上以后计划扩建时要增加的设备。

电压极限

在任何安装仪器的地点，当系统已送电的时候相线—中线电压，都应保持在额定电压的 +10% ~ -10% 范围内，电压应从系统的电源输入一侧进行测量。

频率极限

允许线路频率极限取决于系统内极限范围最窄的设备（在仪器的电源线输入处测量）。GC-460 网络气相色谱仪的极限很宽可在 50Hz 至 60Hz 的范围内操作。

谐波数量

仪器馈线的谐波最高总量不得超过 5%（仪器送上电后在仪器的电源输入处测量）。

电源的意外情况

在某些地区，仪器系统所用的电源线可能会出现过份的电压下降现象，或出现冲击电压，瞬变电压，断电或其它意外情况，这样，仪器系统的操作就不可靠了。因此，必须对供电的质量进行检查。如果在检查中发现有某些项目不符合系统的要求，即应纠正。

电源噪声

GC-460 网络分析仪器的结构设计是能耐受合理的输入线噪声的。但是从其它用电的公用工程来的许多噪声，GC-460 网络分析仪器是无法控制的。这种电噪声的主要来源是来自仪器附近的其它电气设备，例如，电机、电磁阀，可控硅整流器和 X 光机等。

此外，还可能由于中线的接触不良而引起的“中线——接地噪声”和由于楼层接地不良所引起的“接地——接地”噪声。最大的电线允许噪声为 3V(rms)，从 30Hz 到 50Hz。

可用一台示波器来测量小的“地——中线”电压，因为，如果电压有畸变偏差，模拟表头上的读数就会失真。一般来说，如果电压低于测量结果就有问题。

噪声的消除

如果要消除现有电气设备或将来安装的电气设备的噪声，我们坚持这样的建议即在主配电盘与仪器分配电盘之间要装一根合格的馈线。要检查中线接触和接地是否良好（请参阅下面“接地”一节）。如果在装上合格的馈线之后，仍有不良的瞬变现象，那就要装一台能降低输入电噪声的设备了。

电源干扰

对电源输出产生干扰的输入电源噪声，或干扰系统中的信号线的输入电源噪声都会使仪器系统的功能失常。这些输入干扰可归纳为冲击，压降和瞬变，现分述于下：“冲击”和“下跌”是输入电压的正、负值的突然变化，其延续时间在 5 毫秒之间。一般来说“冲击”和“下跌”都不应超过正常额定线电压的 $\pm 15\%$ 左右，而且在 17 毫秒（60Hz）和 20 毫秒（50Hz）之内恢复到稳定态。

“电源电压瞬变”是输入电压的正负值发生突然变化，其延续时间在 1 毫秒和 5 毫秒之间。如果这种瞬变时间大于额定电压的 20%（取决它的能量）就会使仪器的功能失常。

在监测输入电质量的好坏和评价干扰的特性时，有一台电源输入干扰监测仪是很有用的。因为电源线的干扰可能会每小时，每天和每星期都发生，所以该监测器应至少接上一个星期。也不要吧所测得的结果当成绝对值，因为季节的变化，其干扰值也会不同。

试验方法是，使用 0.5 微秒上升时间，10 微秒脉冲持续时间的尖峰信号，其幅度为电源电压的两倍。

电源处理设备

如果在装上专用的馈线和接地后，仍有瞬变现象，那么就应安装能降低输入电源线干扰的设备了。能完成这一任务的装置基本上有四种：

-
- 1.隔离变压器
 - 2.电源电压调节器
 - 3.电动机—发电机设备
 - 4.不受干扰的供电系统

线路调节设备的功率必须满足现在和将来的需要。我厂建议的最低额定值为 5KVA，这即可满足现在的要求，也可满足将来扩建的要求。

附录 B 接 地

要想使仪器能安全可靠地运行，仪器的接地良好是非常重要的。一般来说，大多数国家和地区都要求给电器设备安装地线，以确保人身的安全。

安全接地

各种标准一般都要求给电器设备安装安全导体。标准中一般都有这样的要求：每根火线回线（中线）都要伴随一个安全导体。安全导体的大小必须与火线的大小一样。

一般来说，安全标准都要求把安全导体接到操作人员可能会碰到的电器设备的导电表面上，或由于电器事故可能激励起来的导电表面。在正常操作情况下，这根线不应带返回的交流电。如果仪器的框架没接地，或者火线偶然碰到框架上，该框架上的电压很可能会达到一定的危害程度。

把安全地线接到仪器的底盘上即可避免触电的危险，因为这样就形成一个极低阻抗回路，会使电路的闸刀跳闸或保险丝烧断。每台仪器产品中都有安全接地装置，只要把仪器接到有地线的接头上，或将仪器中的接地环按用户所提出的规格接到地线上，这个回路就算完成了。

如下所述，仪器中的安全地线通常是通过绝缘的接地装置接在建筑物的导管上，这样，反过来又使分电路的配电接地。在任何情况下都必须符合当地的和国家的安全规范。

安全地线必须正确接在总配电接地母线的端子上。一般都应当懂得，从任何负载返回总接地母线的地线阻抗必须小于 11 欧姆。

无噪声接地

为了使 GC-460 网络色谱仪运行情况良好，我们坚持建议采用无噪声接地装置。这种接地也称作“绝缘接地”因为它是与建筑物中的其它电器接地装置分开的。当把 GC-460 网络色谱仪和其它仪器连接起来时，使用“绝缘接地”将有助于保持系统的可靠性。

在大多数情况下，普通的接地是不能满足要求的，因为该接地装置不可能不带进一点接地不良所引起的噪声。噪声还可能来自射频播音器，这根地线还可能带有一般稳定的电流。

典型的容易产生噪声的接地情况如下：

- 1、导管
- 2、房顶和建筑物的横梁
- 3、洒水管（把地线接到这些管子是大数消防规范所不容许的）。
- 4、提升地板的支撑结构。
- 5、煤气管

把地线接到这些管子上很容易受到由于接地不良所产生的建筑物噪声的影响，同时，由于天线的影响，它们还会接收到电频的干扰。

可以接地的东西如下（应和当地电器检查部门商量，选用当地可以接受的接地方法）：

- 1、用一根尺寸合适的电线接到楼房的总管线上或接到总导管的入地处。
- 2、把接地用的长钉子打进潮湿的土层里并接到入地处。
- 3、也可以接到其它可靠的入地处。

绝缘的地线必须牢固地接在装置上。不要用夹子把地线夹在管子或接地柱上。也不要使用其它会使接头松动的方法来连接。接头必须用铜焊或锡焊，尽可能减小接地接头处绝缘电阻的下降。如果按装得不合适，在接头处就可以量到电阻，再加上地线上的电阻就会使绝缘的接地装置上产生我们所不希望的电势。在安装地线的时候要预防它偶然和其它地线接触这会给绝缘带来不良的影响。绝缘线必须接在配电盘的绝缘母线上，再从配电盘上通过接头和电源地线分别接到仪器系统的各个单元上。绝缘母线可由配电盘上的接地板构成。

所用的电线尺寸应使最远一点到主配电盘接地处的接地电阻最低。请与当地的电器检查部门商量所用的电线规格。

当多层建筑物中安装了电网处理装置时，应把电网处理装置的外壳与建筑物结构中的钢筋接起来，这样才能减少接地噪声。地线的一端应接到线路处理装置的外壳上，另一端应焊接在最近的楼房竖梁钢筋上。把地线接到建筑物的钢筋上比把地线接到地下室单独的接地柱上要好。

中线—地线连接质量的测定

市场上可以买到几种专门用于测定接地系统质量的设备。这些设备包括接地检测仪，用来引导地线中的电流，然后进行测试，并能指示接地的质量（显示灯或以欧姆表示的刻度）。还有一种是地线测试仪，用来测定接地系统的电阻。

如果接地阻抗太高，因对几个项目进行检查。如果没有装电网处理设备，也没有指定的接地装置就因检查一下建筑物总配电盘上中线—地线（N—G）的连接是否良好，如果已装了线路处理设备，也应再一次检查线路处理装置上的 N—G 接点。如果当时的 N—G 接头装的地方不合适应移装到合适的位置上，因为装的位置不合适，接地导线上就可能会产生不希望有的电流。

应检查一下接地导线的连接是否良好。如果接地导线的尺寸小于电路上的导线，或者，如果接地导线没有绝缘，我们建议换成一根尺寸与电路中导线相同的绝缘导线。

电负荷的平衡

使用三相和分流相系统的电负荷平衡是很重要的。因为：

- 能减少外部电压降和电压改动对单独变压器带动的设备所产生的不利影响。
- 能提高绝缘变压器的性能。
- 延长变压器的使用寿命。

不平衡的负荷会在中线和地线之间产生电压差。测量这个电压就可知道负荷是否平衡。在平衡负荷时，要使用一只夹式安倍计。首先应量一下每相的电流，然后从仪器系统配电盘上拆下动力线，再重新安排负荷，然后再测量一次。要反复这个程序，直至中线电流降至最低值为止。

测量中线与地线之间的电压差也可用来证明负荷是否平衡。给仪器送上电后，用一台示波仪来测量仪器电源输入端子上中线和地线之间的电压差。地线夹子探

针的连接越短越好。把电源线从系统配电盘上拿下来，重新安排负荷，然后再反复测量。反复进行这个程序，直至中线—地线的电压降至最低值为止。

在平衡其它馈线的负荷时，中线—地线电压可能会进一步降下来，或者在加大馈线的尺寸时，它也会降下来。如果系统配电盘上的中线—地线电压太高，就从总配电盘中挂出一条专用馈线。