

第一章 软件安装

1.1 工作站软件的安装

1.1.1 软件运行环境

IbrainChrom 工作站需要一台已经装了中文 Windows2000、XP、win7、win8 或者 win10 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 或者 win10 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。

1.1.2 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：



图 2.2 安装操作说明一

单击“取消”则退出安装，单击“下一步”即进入安装。



图 2.3 安装操作说明二

系统将默认将文件安装在“C:\Program Files (x86)\IBrainChrom\IBrainChrom\”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：



图 2.4 安装操作说明三

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：



图 2.5 安装操作说明四

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“IBrainChrom.exe”和“XP-IBrainChrom.exe”两个图标。



图 2.5 安装操作说明五

其中“IBrainChrom.exe”为网络色谱工作站，“XP-IBrainChrom.exe”为 XP 系统处理工作站。双击“IBrainChrom.exe”图标，则运行网络色谱工作站。界面如下图所示：

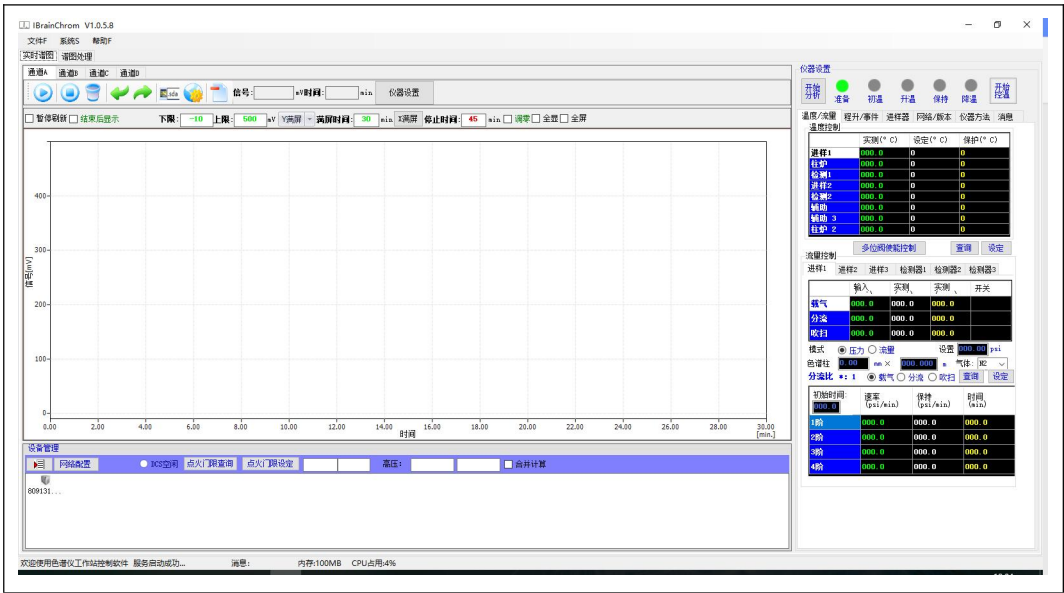


图 2.7 安装操作说明六

其详细使用见后第 4 和第 5 章节。

1.1.3 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—>IBrainChrom 中的卸载，则弹出如下界面。



图 2.7 卸载操作说明一

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：

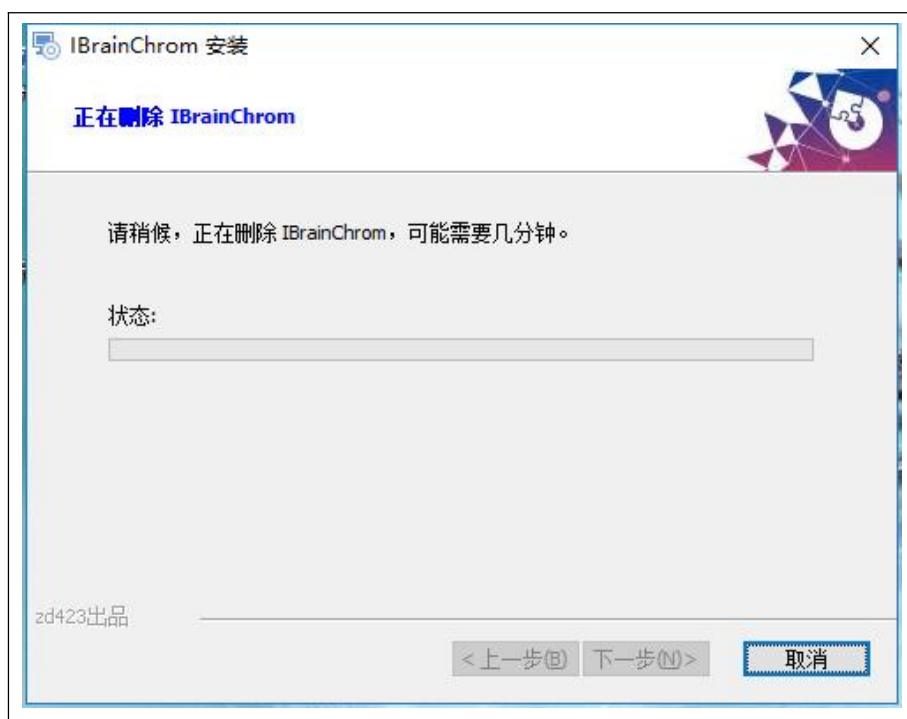


图 2.8 卸载操作说明二

卸载完毕，界面退出。

1.1.4 工作站软件的升级

详见：4. 2. 3 检查更新。

1.2 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开使用“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。

1.2.1 计算机的网络设定

首先在工作站界面左下角找到网络配置



单击网络配置，跳出一个新界面，点击搜索后，左下角会出现一个绿色图标：



网络配置结束。

1.2.2 多色谱仪的网络参数设定

在仪器显示屏界面找到网络界面，找到仪器色谱仪 IP，在最后一位数值默认为 2，若是多仪器联机使用，需要单独更换最后一位的数值，在达到仪器数据不冲突。

1.2.3 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 “IBrainChrom.exe” 工作站软件并打开色谱仪电源。如果联机正常，在 “IBrainChrom.exe” 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。

第二章 色谱仪工作站的操作

2.1 工作站主界面功能

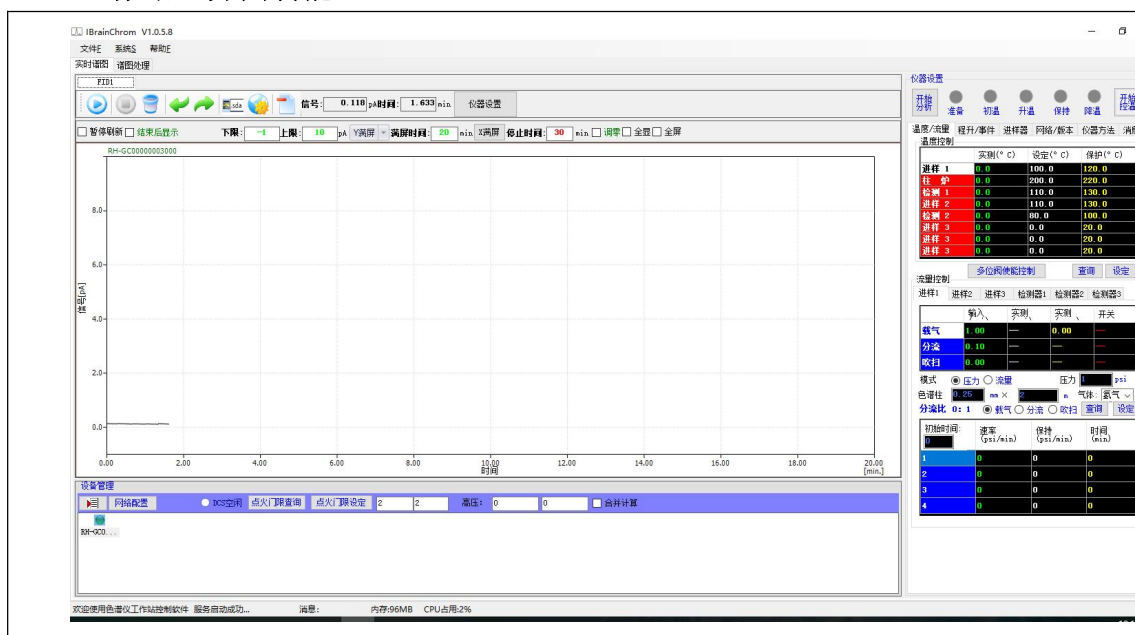


图 4.1 工作站主界面

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。

2.2 下拉式菜单介绍

2.2.1 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。

2.2.1.1 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。谱图处理详见第五章。

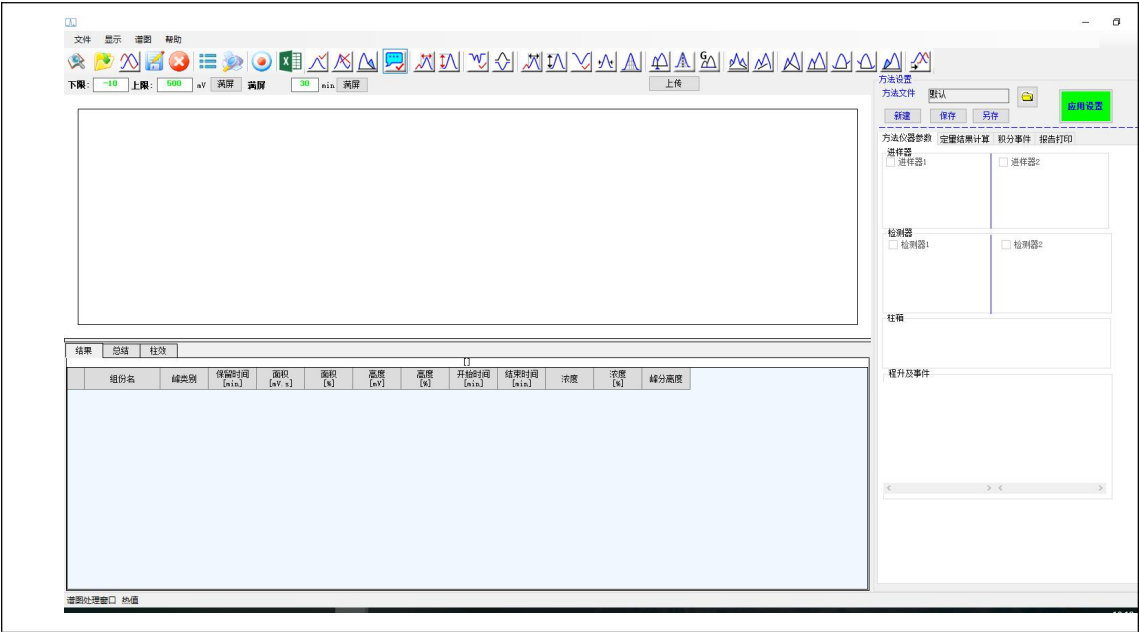


图 4.2 结果主界面

2.2.1.2 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。谱图处理详见第五章。

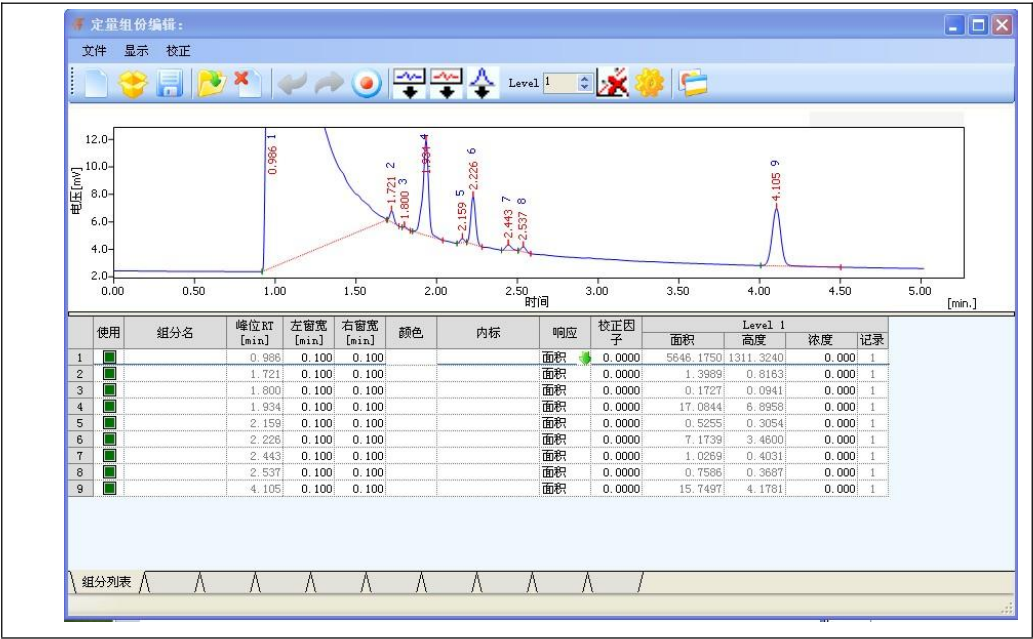


图 4.3 工作站主界面

2.2.2 系统 (S)

2.2.2.1 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“确认”即可；

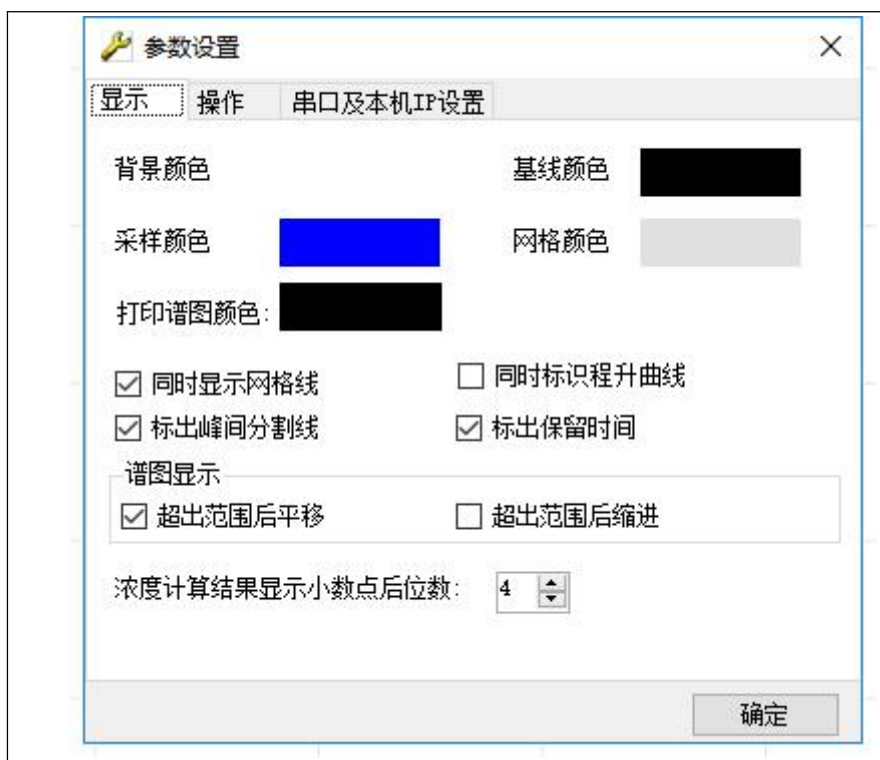


图 4.4 选项界面

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。

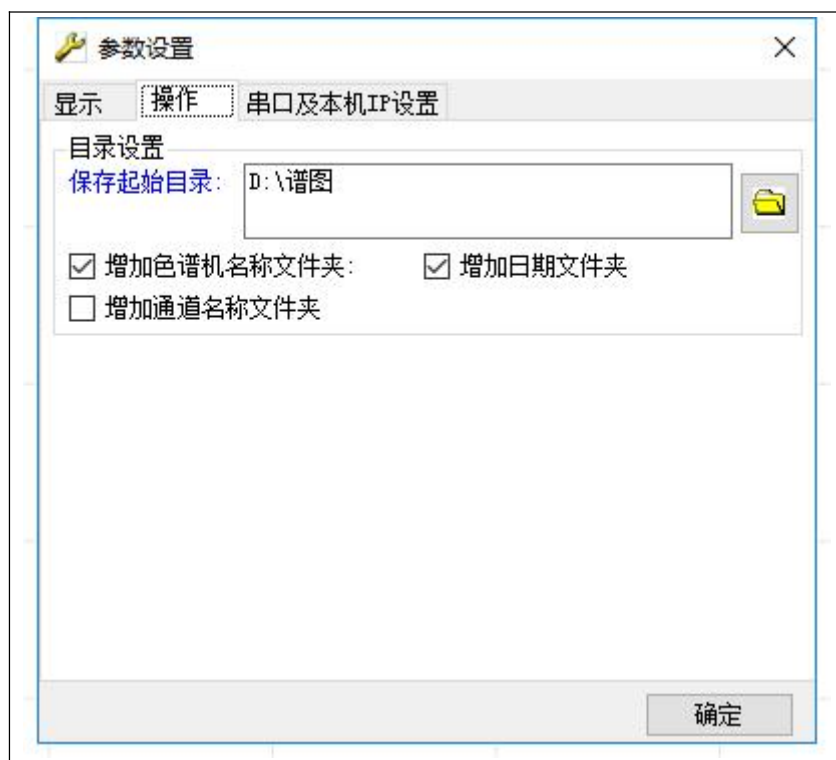


图 4.5 参数界面

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。

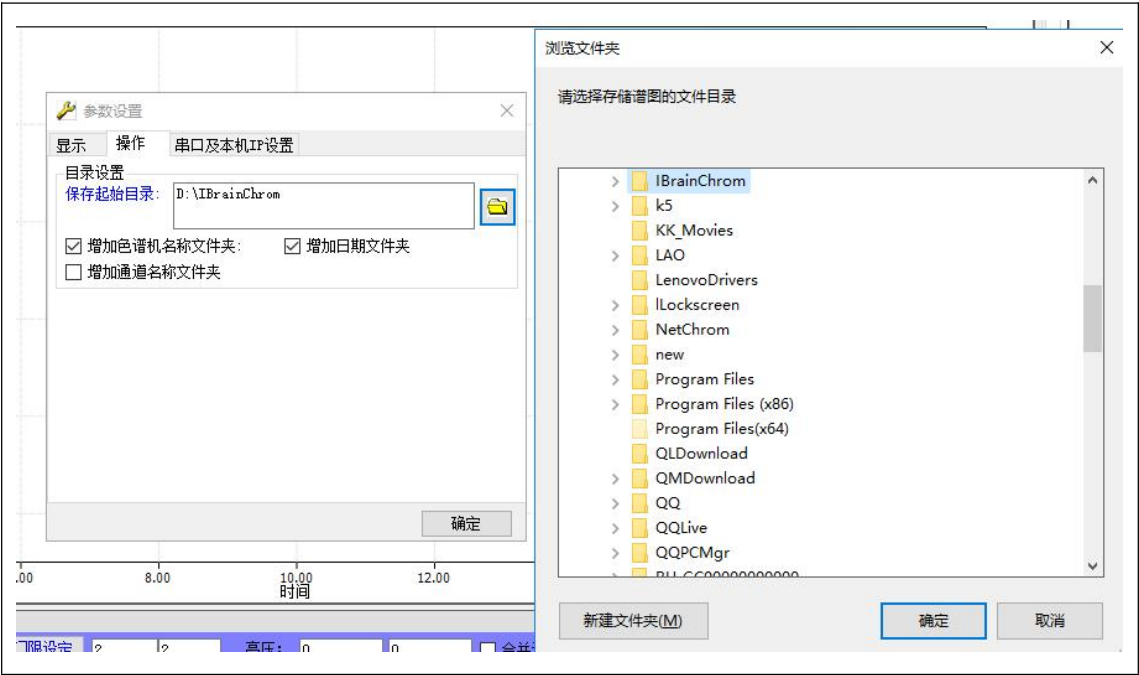


图 4.6 文件界面

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。

2.2.3 帮助 (F)

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。

在“关于”栏目里，会显示软件名称、版本号等信息。



图 4.7 版本界面

2.3 色谱仪管理



图 4.9 设备管理界面

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：

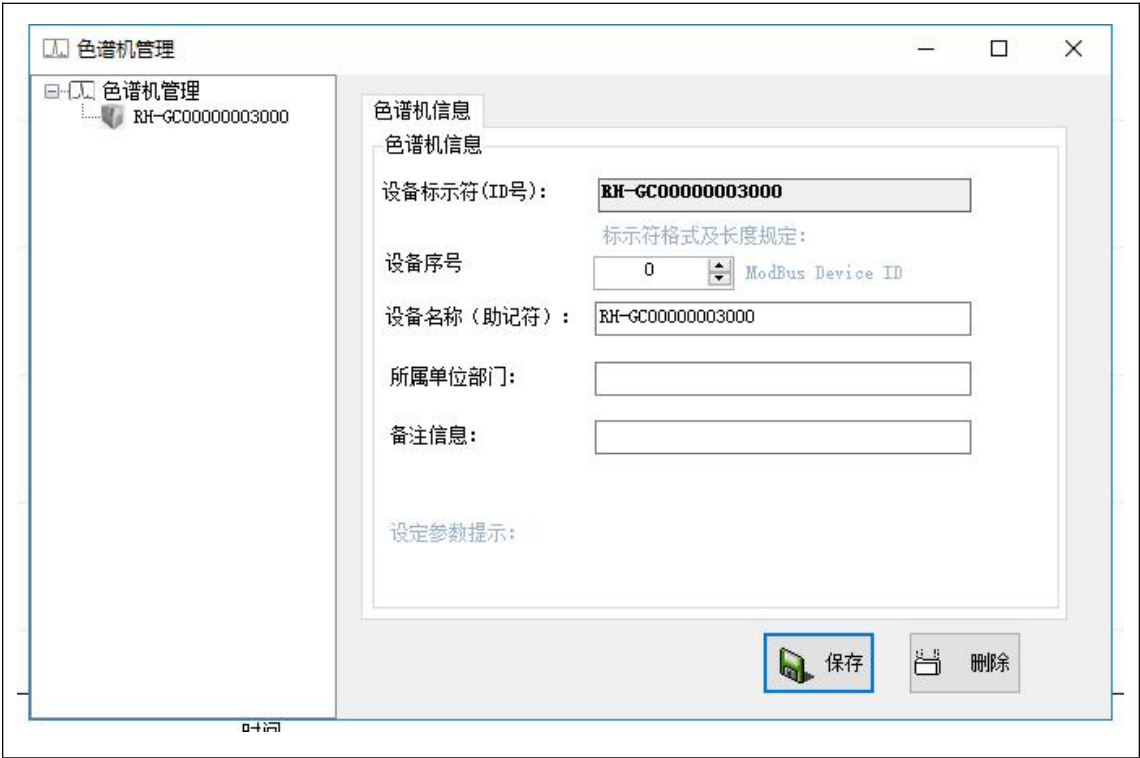


图 4.10 设备管理界面

2.3.1 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. 4 网络参数的查看与设定）。不可修改！

2.3.2 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：车间 1、质检科 1、质检科-FID、中心化验室-TCD 等。

2.3.3 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 MUDBUS 读取分析结果时，该 ID 码一定要设置，并且不能重复。

2.3.4 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。”

2.4 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：



图 4.11 谱图显示界面

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、谱图命名、检测器设置。单击图标即启动其对应的功能。

2.4.1 开始分析

单击只开始本通道的谱图采样

2.4.2 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。

2.4.3 放弃分析

单击是放弃当前的采样基线或空白基线。

2.4.4 上一视图

单击是查看上一幅显示的基线。

2.4.5 下一视图

单击是查看上下幅显示的基线。

2.4.6 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：

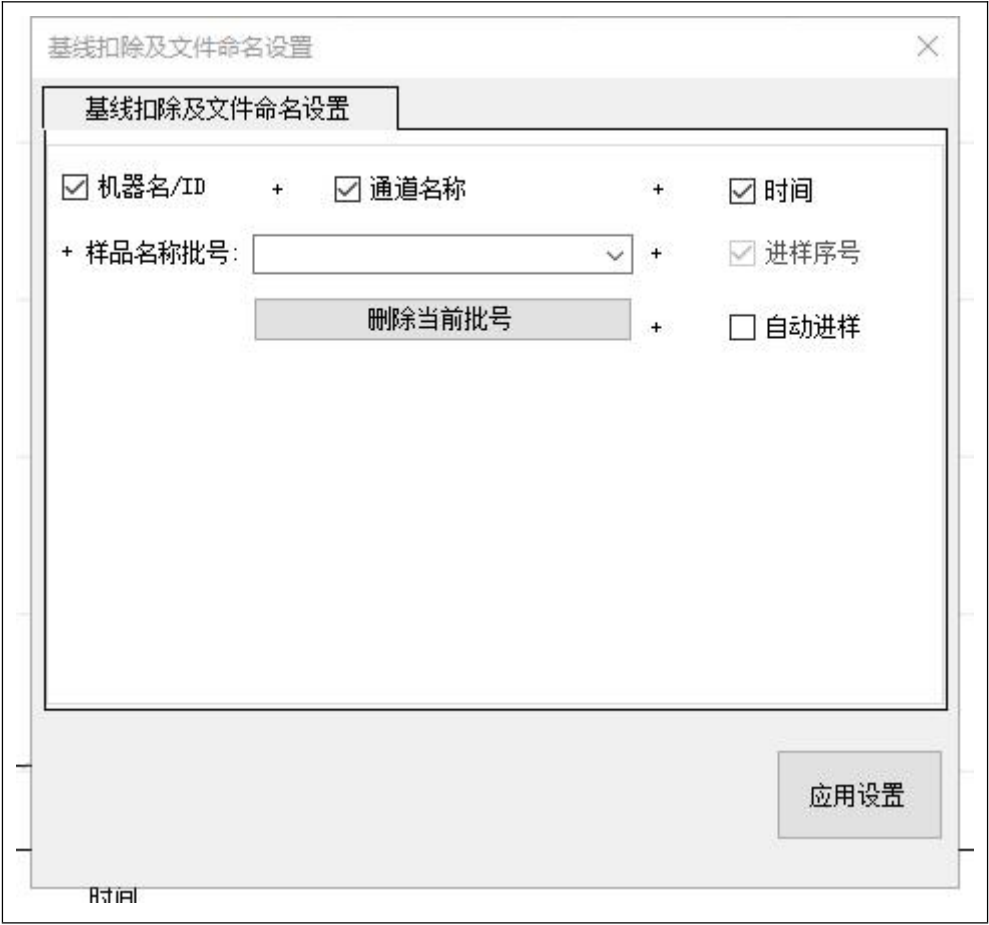


图 4.13 基线扣除命名界面

-  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”

2.4.7 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。



图 4.14 检测器参数设置界面

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

2.4.8 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 pA。

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。

2.4.9 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。

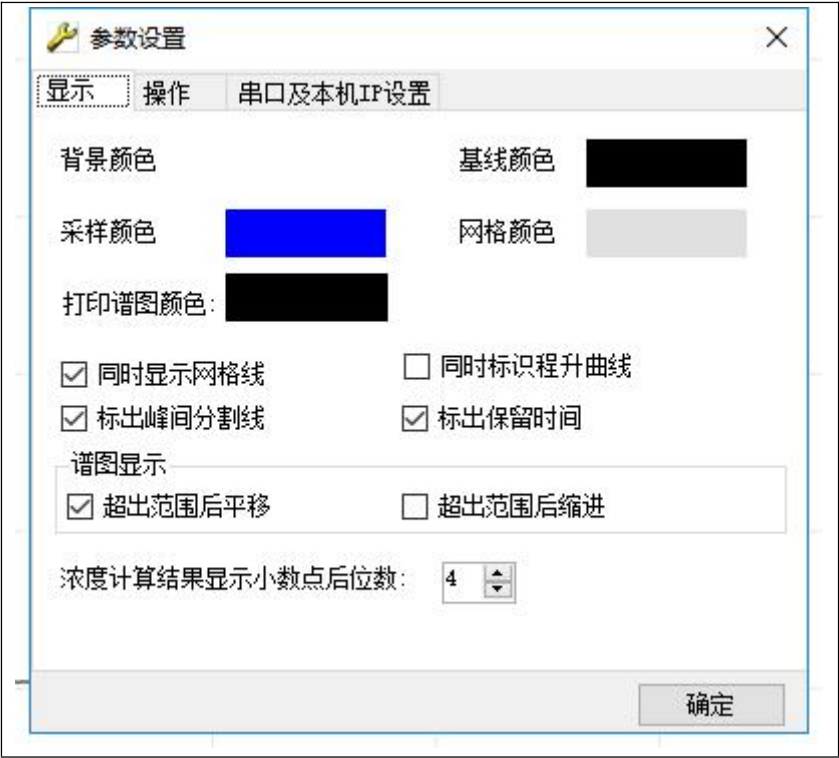


图 4.15 局部放大界面界面

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！

2.4.10 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。

2.4.11 结束后显示

结束后显示是当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。

2.4.12 结束后打印

结束后打印是当指当人工停止分析或停止时间到后分析结果是否立即打印输出。



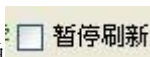
注：当选中结束后打印时，您必须设置正确打印机的配置，否则操作系统会报错。

2.4.13 基线调零



当 ☒ 调零 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。

2.4.14 暂停刷新



当 ☐ 暂停刷新 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。

2.4.15 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。

2.4.16 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。

2.5 仪器的设置

2.5.1 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。

2.5.2 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：



图 4.16 温控界面

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℃。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℃，因此保护温度的最高值为 450℃。另外柱炉温度的保护温度是在程升温设置的最高温度上加上 20℃。
-  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。

2.5.3 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：

流量控制

进样1

进样2

进样3

检测器1

检测器2

检测器3

	输入、	实测、	实测、	开关
载气	1.00	—	0.00	—
分流	0.10	—	—	—
吹扫	0.00	—	—	—

模式 ☒ 压力 ☐ 流量
 压力 psi

色谱柱 mm × m 气体: 氢气

分流比 0:1 ☒ 载气 ☐ 分流 ☐ 吹扫

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

图 4.17 压力流量控制界面

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。

2.5.4 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：

程升控制

初始时间

0

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

查询

设定

事件控制

事件开关

查询

设定

阶号	事件1 [min]	事件2 [min]	事件3 [min]	事件4 [min]	事件5 [min]
1	0	0	0	0.01	0
2	0	0	0	1	0
3	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0

<

>

图 4.18 事件控制界面

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。

2.5.5 进样器的设定

“进样器”是指随仪器。单击“进样器”页面，将切换到“进样器”查看设置的界面。如下图：

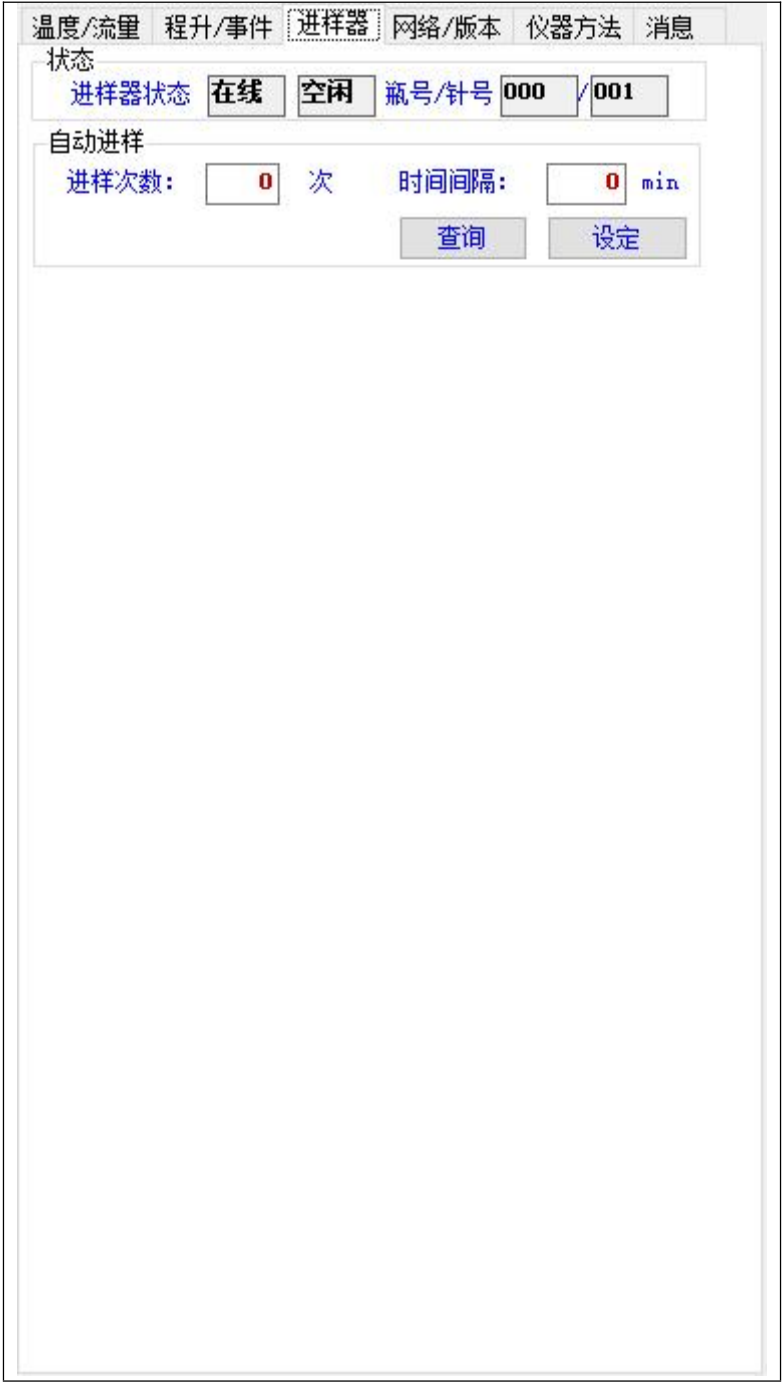


图 4.19 进样器控制界面

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。

2.5.6 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：



图 4.20 网络设置界面

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. 8 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本身的网络参数以及链接到工作站。
-  注：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。

2.5.7 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。

2.5.8 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

黑色），同时图标变为结束分析，且开始采样图标  由蓝色变灰色，停止采样图标  灰色变为蓝色  ；

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。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。单击 图标为



结束该通道的分析

2.6 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）。

2.6.1 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，该色谱峰被认为是一个化合物。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。

2.6.1.1 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。

2.6.1.2 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。可用下式表示：

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

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。

2.6.1.3 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，而非像真正的归一法那样所有检测到的峰全部都参与计算。

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

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。

2.6.1.4 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*标样品量/100 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。



注：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）

2.6.1.5 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： $m_i = f_i \cdot A_i$ 被测组份 $m_s = f_s \cdot A_s$ 内标组分

于是得：

$$m_i = \frac{f_i}{f_s} \cdot \frac{A_i}{A_s} \cdot m_s = f_{is} \cdot \frac{A_i}{A_s} \cdot m_s$$

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：

$$f_{is} = \frac{f_i}{f_s} = \frac{m_i \cdot A_s}{m_s \cdot A_i}$$

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：

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

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/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）

2.6.1.6 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：

$$\text{样品浓度} = \exp(K \cdot \ln A + B)$$

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。

2.6.1.7 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。

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

C_i 对于有内标物的单点校正法，定量公式如下：

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）

$$C_i = f_i A_i$$

如果没有内标物，上面的计算公式被简化为：

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）。

2.6.1.8 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。

2.6.1.9 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。

2.6.1.10 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。

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：

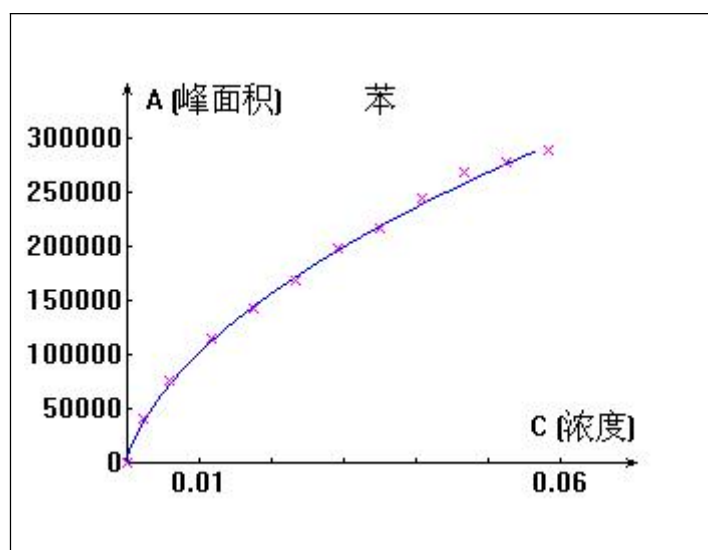


图 4.21 工作曲线示例

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。

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1:100℃ 柱流量1 sccm 分流流量0.1 sccm 吹扫流量0 sccm 载气:氮气		☐ 进样器2 进样器2:110℃ 柱流量10 sccm 分流流量9 sccm 吹扫流量0 sccm 载气:氮气		
检测器				
☒ 检测器1 检测器1:110℃ H2流量30 sccm Air流量0 sccm 尾吹流量0 sccm 尾吹气:N2		☐ 检测器2 检测器2:80℃ H2流量0 sccm Air流量0 sccm 尾吹流量150 sccm 尾吹气:N2		
柱箱				
柱箱:200℃				
程升及事件				
程升: 无		外部事件: 00.00 00.00 00.00 00.01 00. 00.00 00.00 00.00 01.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00. 00.00 00.00 00.00 00.00 00.		
< > < >				
获取仪器参数		下载到仪器		

图 4.22 仪器的方法参数界面

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。

2.6.3 定量结果计算

点击定量结果计算选项卡，将显示如下界面：

图 4.23 定量结果计算界面

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。

在加減谱图里，您可以将现有谱图与其他谱图进行加減运算，从而进行比对。加減的匹配方式有三种：无变化：直接两张谱图时间对齐加減；

偏移谱图：将两张谱图最高峰对齐相加減；

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。

2.6.3.1 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。

2.6.3.2 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。

2.6.3.3 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：

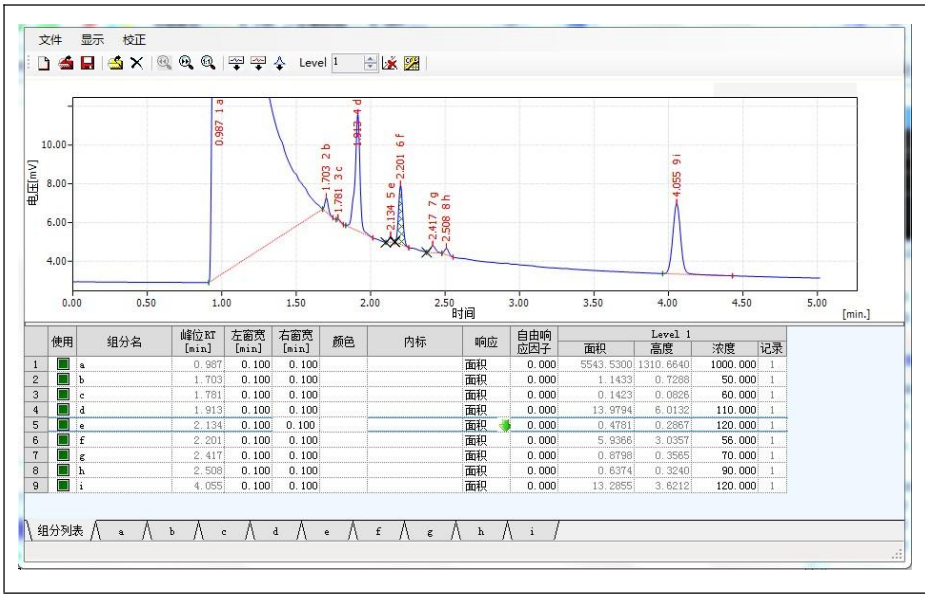


图 4.24 编辑组份界面

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。

2.6.3.4 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。

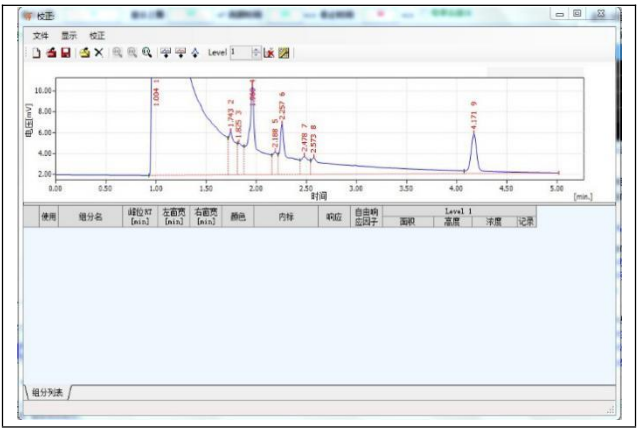


图 4.25 标样数据图谱

适当手工处理，如图：

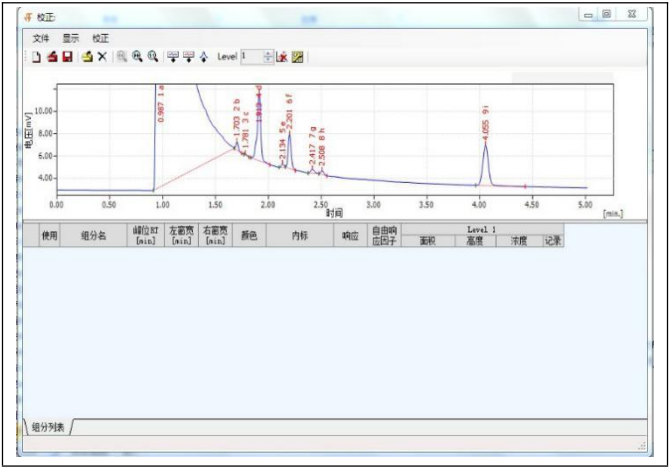


图 4.26 手工处理标样

同理处理 2.sda、3.sda、4.sda

2.6.3.5 制作组份表

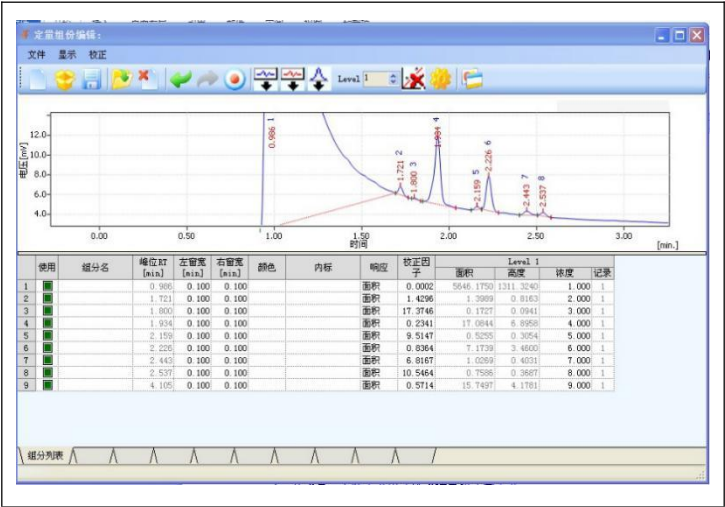


图 4.27 制作组份表

- 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。如上图。
- 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“左窗宽”。
- 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。

2.6.3.6 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。

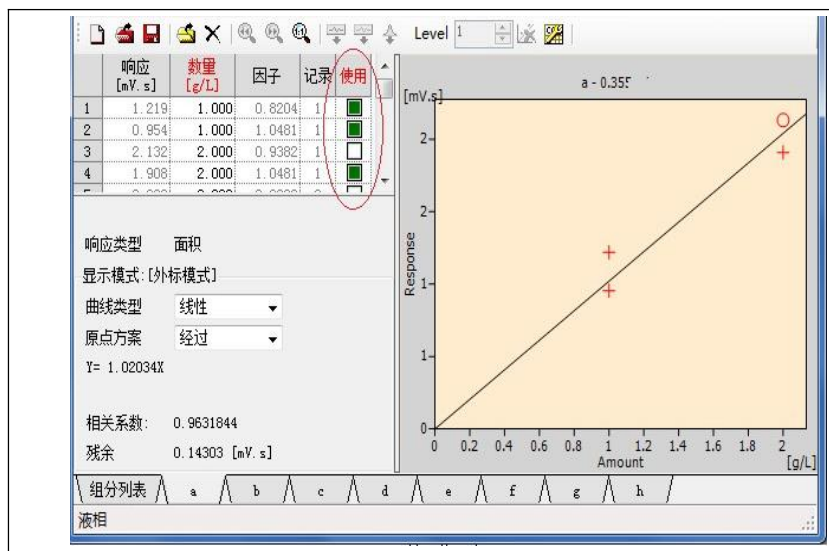


图 4.28 选取校正点

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 c 做内标。

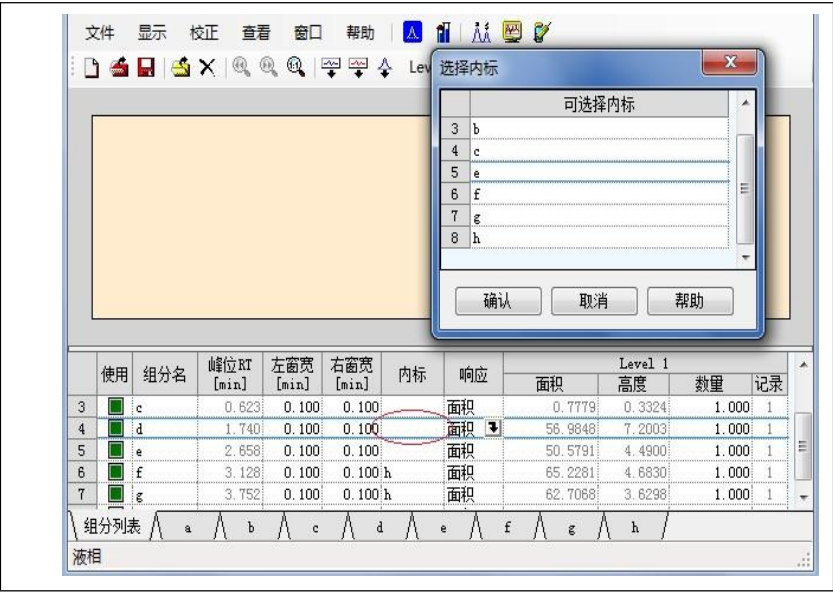


图 4.29 设置内标

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：

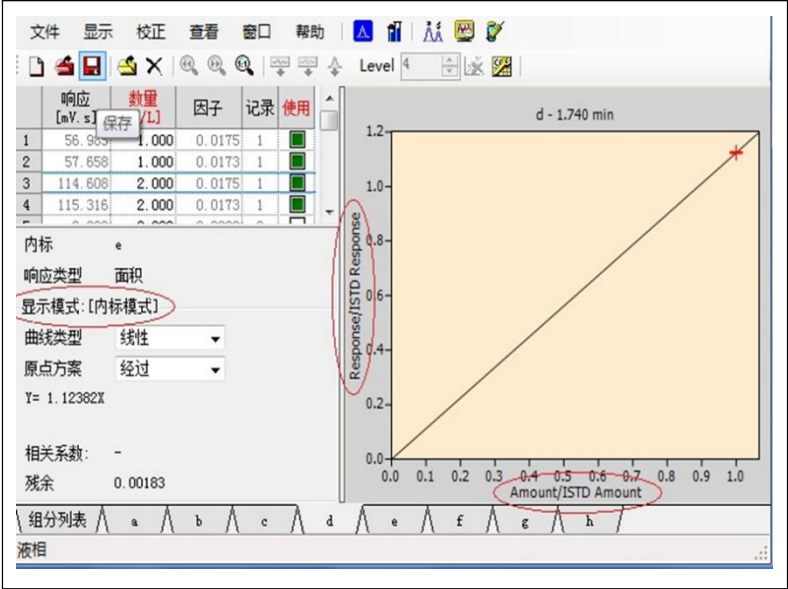


图 4.30 内标方程

到此，校正曲线制作完毕，“保存”：xxxx.cal 文件，在“4.6.4 定量组份的设定”选择这个文件即可。

2.6.4 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

图 4.31 积分事件选项卡

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：

表 4-1 处理参数列表

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：

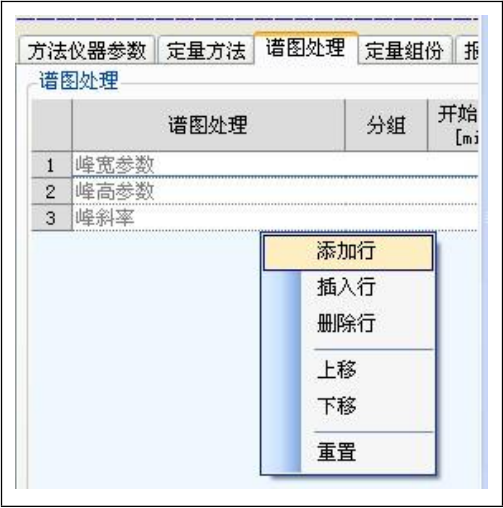


图 4.32 图谱处理选项卡

根据需要进行添加行、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：



图 4.33 图谱处理选项卡

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。

2.6.5 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：

图 4.34 打印报告选项卡

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。

第三章 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 IBrainChrom.exe 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：



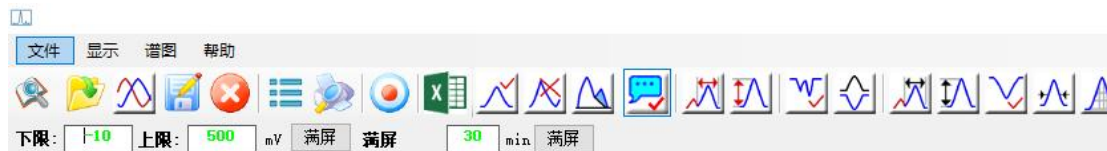
图 5.1 图谱处理选项卡

3.1 界面

3.1.1 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）。

3.1.2 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：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。

3.1.3 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：没有图。

3.1.3.1 文件

点击文件下拉菜单，系统弹出如下视图：



图 5.2 文件菜单

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：

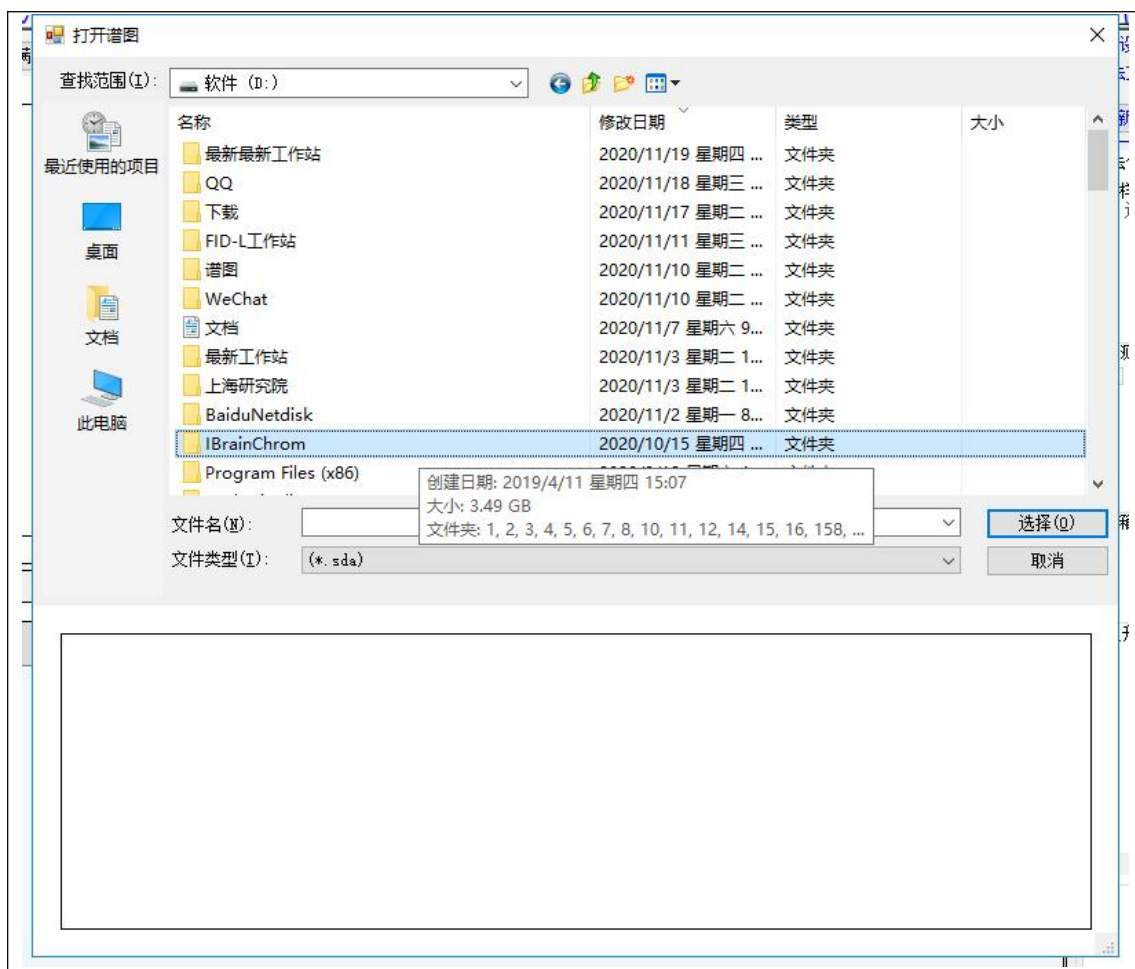


图 5.3 文件界面

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。

3.1.3.2 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；

3.1.3.3 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。

3.1.3.4 帮助

★ 帮助：打开帮助文档

★ 关于：关于本软件介绍对话框。

3.1.4 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。

3.1.6.1 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。

3.1.7 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。



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。

3.1.8 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。

3.1.9 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

图 5.4 文件界面

3.1.9.1 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	1.1485	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	0.1386	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		

图 5.5 分析结果界面

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：

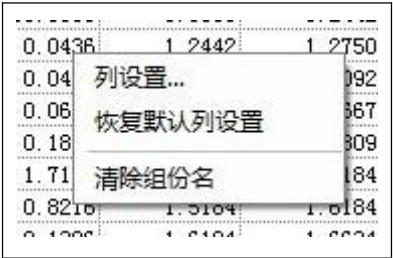


图 5.6 分析结果调整界面

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：



图 5.7 结果列表列设置界面

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。

3.1.9.2 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：



图 5.8 总结列表界面

选中“列设置”可以设置您要关注的内容。



图 5.9 总结列表列设置界面

- ★ 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面。
- ★ 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面。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：



图 5.10 总结列表设置界面

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。



图 5.11 总结列表表选项



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 [ul]	A		
					保留时间 [min]	半峰宽 [min]	面积 [mV.s]
1	1				0.987	0.061	5543.530
2	2				0.990	0.063	5692.979
3	平均值						10.135
4	R S D						1.884

图 5.12 总结列表结果界面

3.1.9.3 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							组份名
		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[-]	
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	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	3.5266 G213123
8		2.5309	0.0342	1.3333	1.5309	30429.6600	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

图 5.13 柱效界面

★ 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：

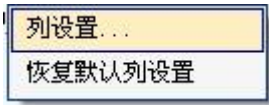
柱效是指色谱柱保留某一化合物而不使其扩散的能力。柱效能是一支色谱柱得到窄谱带和改善分离的相对能力。

★ 对称性：

★ 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：



图 5.14 设置界面

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。

3.2 分析方法

3.2.1 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。

3.2.2 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。

3.2.3 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。

3.2.4 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。

3.2.5 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。

3.3 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。

