

Wheatstone

WH609X 过程气相色谱仪 使用说明书

V3.3

江苏惠斯通机电科技有限公司

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。

高压危险：

- 在仪器运行时，严禁拆卸仪器，可能使一些电器部件暴露致高压触电。
- 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些的高温，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；仪器排气口严禁放置易燃物品，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免仪器的排气口，避免排出的灼热气体融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, FPD 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。
- 当使用氢气作载气或 FID, FPD 燃气时，要注意其排出口可能含有少量氢气，需要将其排放到室外安全处，防止氢气积聚发生爆炸。
- 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。
- 仪器停止运行时，样品气源和氢气气源等可燃气体气源要立即关闭，防止可能发生的意外。
- 仪器内部管路有过拆装后要气密检查方可使用。方法堵上排气口，对管路通入 0.4MPa 的氮气，关闭气源，10min 无明显下降。

防爆要求：

- 控制器的生产制造必须符合 GB3836.1-2010、GB3836.2-2010 和 GB3836.4-2010 的要求。已取得防爆合格证 CE19.4377X。检测器的生产制造必须符合 GB3836.1-2010、GB3836.2-2010 的要求。已取得防爆合格证 CE19.4026X。
- 控制器和检测器的安装、使用应符合 GB/T3836.15 标准要求，检查和维修应符合 GB/T3836.16 标准要求，检修应符合 GB3836.13 标准要求。
- 内接地应通过电源 PE 线与内接地螺钉可靠连接，且有防松防腐措施；设备外接地应通过不小于 4mm² 黄绿接地线与现场公共接地端可靠连接。
- 产品的操作人员应经过防爆培训。

目录

1. 仪器的介绍.....	- 1 -
1.1. 特点.....	- 1 -
1.2. 外形图.....	- 1 -
1.3. 型号和技术指标.....	- 2 -
1.3.1. 过程气相色谱仪控制器型号.....	- 2 -
1.3.2. 过程气相色谱仪控制器技术参数.....	- 2 -
1.3.3. 过程气相色谱仪检测器型号.....	- 2 -
1.3.4. 过程气相色谱仪检测器技术参数.....	- 2 -
1.4. 主要配置说明.....	- 2 -
1.4.1. 色谱柱箱.....	- 3 -
1.4.2. 热导检测器 (TCD)	- 3 -
1.4.3. 火焰离子化检测器 (FID)	- 3 -
1.4.4. 火焰光度检测器 (FPD).....	- 3 -
1.4.5. 显示屏.....	- 3 -
1.4.6. Max-S Chrom 工作站.....	- 4 -
1.5. 环境.....	- 4 -
1.6. 电源.....	- 5 -
1.7. 气源.....	- 5 -
2. 仪器的安装.....	- 5 -
2.1. 仪器的拆箱.....	- 5 -
2.2. 主机的安装.....	- 5 -
2.2.1. 无分析柜主机.....	- 5 -
2.2.2. 有分析柜主机.....	- 6 -
2.3. 仪器的安装.....	- 7 -
2.3.1. 样品预处理部分管路图及安装.....	- 7 -
2.3.2. 气源的安装.....	- 8 -
2.3.3. 减压阀的安装.....	- 8 -
2.3.4. 外气路的安装.....	- 8 -
2.3.5. 系统检漏.....	- 9 -
3. 色谱仪工作站的操作.....	- 9 -
3.1. 工作站主界面功能.....	- 9 -
3.2. 下拉式菜单介绍.....	- 9 -
3.2.1. 文件 (F)	- 9 -
3.2.2. 系统.....	- 10 -
3.2.3. 帮助.....	- 15 -
3.3. 色谱仪管理.....	- 15 -
3.3.1. 设备机标识符.....	- 16 -
3.3.2. 设备名称.....	- 16 -
3.3.3. 设备序号 (MODBUS/TCP 通信 ID 码)	- 16 -

3.3.4. 其他信息.....	- 16 -
3.4. 谱图显示参数的查看与设置.....	- 17 -
3.4.1. 开始分析.....	- 17 -
3.4.2. 停止分析.....	- 17 -
3.4.3. 放弃分析.....	- 17 -
3.4.4. 上一视图.....	- 17 -
3.4.5. 下一视图.....	- 17 -
3.4.6. 检测器设置.....	- 17 -
3.4.7. 基线数据.....	- 18 -
3.4.8. 谱图的显示.....	- 18 -
3.4.9. 停止时间.....	- 19 -
3.4.10. 结束后显示.....	- 19 -
3.4.11. 结束后打印.....	- 19 -
3.4.12. 暂停刷新.....	- 19 -
3.5. 仪器的设置.....	- 19 -
3.5.1. 温度/流量的设定.....	- 20 -
3.5.2. 气路流量的设定.....	- 20 -
3.5.3. 程序升温和外部事件的设定.....	- 21 -
3.5.4. 进样器的设定.....	- 22 -
3.5.5. 网络参数的设定.....	- 23 -
3.5.6. 开始分析及结束分析.....	- 24 -
3.6. 方法的建立.....	- 24 -
3.6.1. 基本概念.....	- 24 -
3.6.2. 仪器参数.....	- 25 -
3.6.3. 定量结果计算.....	- 26 -
3.6.4. 积分事件.....	- 33 -
3.6.5. 打印报告的设置.....	- 35 -
4. 谱图的离线处理.....	- 36 -
4.1. 界面.....	- 37 -
4.1.1. 界面概述.....	- 37 -
4.1.2. 标题栏.....	- 37 -
4.1.3. 下拉菜单.....	- 37 -
4.1.4. 谱图操作工具条.....	- 40 -
4.1.5. 积分事件工具条.....	- 40 -
4.1.6. 谱图窗口.....	- 42 -
4.1.7. 方法编辑.....	- 42 -
4.1.8. 结果显示.....	- 42 -
4.2. 分析方法.....	- 49 -
4.2.1. 归一法操作步骤.....	- 49 -
4.2.2. 校正归一法操作步骤.....	- 49 -

4.2.3. 单点校正法（单点外标或单点内标）操作步骤.....	- 49 -
4.2.4. 多点校正法（多点外标或多点内标）操作步骤.....	- 49 -
4.3. 报告的打印.....	- 49 -
5. 仪器维护.....	- 49 -
5.1. 气体净化器的维护.....	- 49 -
5.2. 开机问题.....	- 49 -
5.2.1. 开机无反应.....	- 50 -
5.2.2. 开机初始化不通过.....	- 50 -
5.2.3. 不联机.....	- 50 -
5.2.4. 联机但基线不走.....	- 50 -
5.3. 色谱峰问题.....	- 50 -
5.3.1. 无基线.....	- 50 -
5.3.2. 没有色谱峰.....	- 50 -
5.3.3. 正常滞留时间而灵敏度下降.....	- 51 -
5.3.4. 拖尾峰.....	- 51 -
5.3.5. 伸舌峰.....	- 51 -
5.3.6. 色谱峰分离不好.....	- 51 -
5.3.7. 平顶峰.....	- 51 -
5.3.8. 基线突变.....	- 51 -
5.3.9. 恒温操作时有不规则基线波动.....	- 52 -
5.3.10. 滞留时间延长灵敏度低.....	- 52 -
5.3.11. 出峰时信号突然回到低于基线并且灭火.....	- 52 -
5.3.12. 基线不回零.....	- 52 -
5.3.13. 没有进样而基线单方向变化（FID）.....	- 52 -
5.3.14. 在相等间隔中有一定的毛刺.....	- 52 -
5.3.15. 圆顶峰.....	- 53 -
5.3.16. 基线噪音大.....	- 53 -
5.3.17. 额外峰.....	- 53 -
5.3.18. 锯齿型基线.....	- 53 -
5.3.19. 反峰.....	- 53 -
5.3.20. 单方向基线漂移.....	- 53 -
5.3.21. 升温时不规则基线变化.....	- 53 -
5.3.22. 周期性基线波动.....	- 54 -
5.3.23. 程序升温后基线变化.....	- 54 -

1. 仪器的介绍

1.1. 特点

过程气相色谱仪是目前应用比较广泛的在线分析仪器之一，它利用先分离，后检测的原理进行工作，是一种大型、复杂的仪器，具有选择性好，灵敏度高，分析对象广以及多组分分析等优点。

1) 一体化设计，结构紧凑，恒温系统或程序升温系统控制，保证产品长期运行过程中的环境适应性和可靠性。

2) 触摸屏电脑操作，针对过程气相色谱仪的监测的需求设计软件，优良的人工交互性

3) PID 温度控制；

4) 隔爆型防爆，防爆等级：Exd II BT4+H2 可用钢瓶供气，解决现场无压缩空气的困扰

5) 防护等级 IP65；

6) 仪表输出：三种方式，组分的 4-20MA 输出、RS-485 输出或 TCP/IP 输出，可选配；

7) 仪器采用模块化的结构设计，后期维护简单方便。

8) 控制器的生产制造必须符合 GB3836.1-2010、GB3836.2-2010 和 GB3836.4-2010 的要求。已取得防爆合格证 CE19.4377X。检测器的生产制造必须符合 GB3836.1-2010、GB3836.2-2010 的要求。已取得防爆合格证 CE19.4026X。

9) 控制器和检测器的安装、使用应符合 GB/T3836.15 标准要求，检查和维护应符合 GB/T3836.16 标准要求，检修应符合 GB3836.13 标准要求。

10) 内接地应通过电源 PE 线与内接地螺钉可靠连接，且有防松防腐措施；设备外接地应通过不小于 4mm² 黄绿接地线与现场公共接地端可靠连接。

11) 产品的操作人员应经过防爆培训。。

1.2. 外形图



1.3. 型号和技术指标

1.3.1. 过程气相色谱仪控制器型号

M609-A

1.3.2. 过程气相色谱仪控制器技术参数

- 1) 额定电压：220VAC/50Hz；
- 2) 功率：150W；
- 3) 显示尺寸：10.4' ；
- 4) 触摸操作：是；
- 5) 操作系统：windows7
- 6) 控制器尺寸：450(W)×410(D)×300(H) (mm)
- 7) 防爆等级：EX d ia [ia] IIB+H2 T4 Gb(注：仪器安装地点要需要确认该防爆等级满足要求，不可在高于该防爆等级要求的场合使用。)
- 8) 防护等级：IP65

警告：爆炸性危险环境严禁开盖；使用屈服应力 $\geq 640\text{MPa}$ 的紧固件

1.3.3. 过程气相色谱仪检测器型号

M609-B	-TCD	-1	M	
厂标	-TCD	-1	恒温系统	M 机械阀流量控制
	-FID	-2	恒温系统+程序升温系统	E 电子流量控制
	-FPD	-3	恒温系统+甲烷化器	

1.3.4. 过程气相色谱仪检测器技术参数

- 1) 额定电压：220VAC/50Hz；
- 2) 功率：1500W；
- 3) 操作系统：windows7
- 4) 检测器尺寸：480(W)×410(D)×500(H) (mm) (mm)
- 5) 整机尺寸：620(W)×453(D)×1356(H) (mm)
- 6) 测量范围：（取决于分析条件）
TCD： 100ppm~100%
FID： 1ppm~100%
FPD： 0.1ppm~0.1%
- 7) 重复性误差：满量程的 $\pm 1\%$
- 8) 防爆等级：EX d IIB+H2 T4 Gb(注：仪器安装地点要需要确认该防爆等级满足要求，不可在高于该防爆等级要求的场合使用。)
- 9) 防护等级：IP65

警告：爆炸性危险环境严禁开盖；使用屈服应力 $\geq 640\text{MPa}$ 的紧固件

1.4. 主要配置说明

1.4.1. 色谱柱箱

WH609X 过程气相色谱仪的柱箱容积大，可方便安装填充柱或毛细管柱；柱箱控温保护采用双重软件保护，确保色谱柱的安全。

1.4.2. 热导检测器 (TCD)

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。

1.4.3. 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、线形范围宽的特点，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。

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！

1.4.4. 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。

警告：严禁在检测器漏光的情况下打开高压电源！

1.4.5. 显示屏

WH609X 过程气相色谱仪的显示屏均为 10 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。

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！

1.4.6. Max-S Chrom 工作站

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。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。开发了可以将分析结果通过多种传输方式（互联网、MODBUS/TCP、GPRS 通信、3G 通信、4-20mA 等）远程地传输到客户需要的地方。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，满足用户在线监测的要求。

特点与功能：

1. 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；
2. 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；
3. 独特的软件架构，实现了一个控制器控制最多台检测器的工作；
3. 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；
4. 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；
5. 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；
6. 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）；
7. 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. 环境

(1) 海拔

安装地点的海拔高度不超过 2000m。

(2) 周围空气温度

周围空气温度为 $-20^{\circ}\text{C} \sim +40^{\circ}\text{C}$ 。

(3) 大气条件

安装地点的最湿月的月平均最大相对湿度为 90%，同时该月的月平均最低温度为 25°C ，并考虑到因温度变化在产品表面上的凝露。

(4) 污染等级

污染等级 3 级。

(5) 危险场所

爆炸危险场所为 1 区、2 区，具有 II A、II B 类和氢气的 T1~T4 组爆炸性气体或蒸气混合物。

(6) 使用环境

无显著摇动和冲击振动的地方，无破坏绝缘的气体或蒸气的环境。

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

安装 WH609X 过程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。

在 WH609X 过程气相色谱仪的两侧面需要预留至少 60cm 的检修空间，以便于维护。

1.6. 电源

WH609X 过程气相色谱仪的接入电源为 $220V \pm 10\%$ ($50Hz \pm 0.5Hz$)，电能提供的功率不小于 1650W。为了保护人身的安全，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。

1.7. 气源

为了发挥 WH609X 过程气相色谱仪最佳性能，使用气体必须达到规定纯度级别。

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

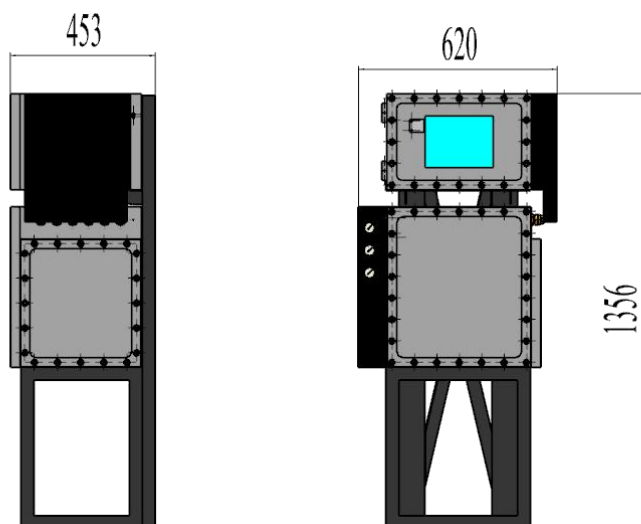
2.1. 仪器的拆箱

产品出厂前已经依据相应的工业标准和管理规范进行出厂测试。并附有出厂测试报告及质量检验报告。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。

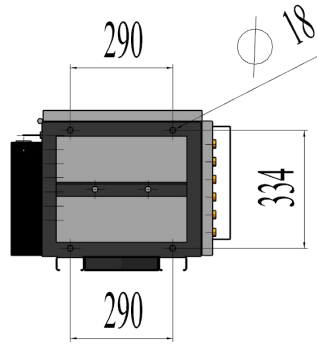
2.2. 主机的安装

2.2.1. 无分析柜主机

仪器外形图如下：



仪器安装图如下：



2.2.2. 有分析柜主机

1. 分析小屋采用框架式结构，外壁采用 2mm 不锈钢板，内壁采用 1mm 不锈钢板，屋内底部采用一块固定花纹钢板，窗户设置双层钢化玻璃。在墙外壁应装有横撑连着 5~6mm 厚的钢板，墙里面也装有 3mm 钢板，钢板同墙的支架连接在一起，以保证墙坚固可靠可以承载安装于后面的分析仪和相关设施及取样系统。

2. 分析小屋内可选装防爆 LED 灯、防爆排气扇以及通风过滤网，排气扇和通风过滤网安装在小屋两侧，分析小屋附属电气设备、接线箱是防爆型分析仪表，其防爆等级不低于 2 区，B、C、D 组，防护等级不低于 IP65，小屋可满足现场防火要求，墙和屋顶采用绝热设计。

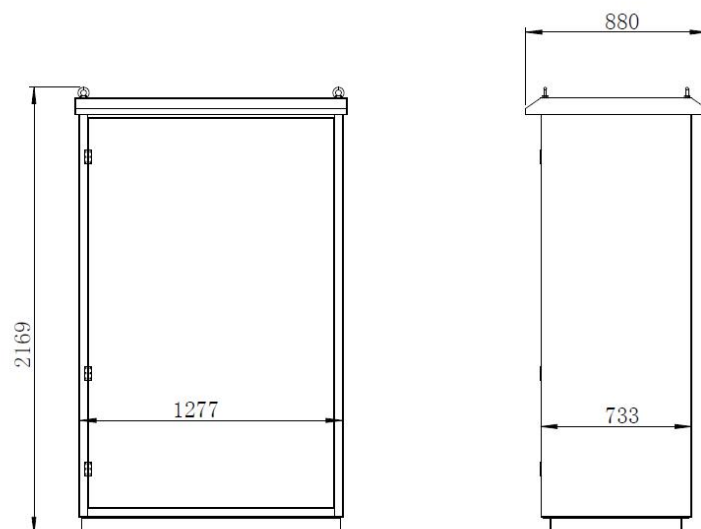
3. 分析小屋开孔，连接仪表进出口电缆接头，开孔数量及尺寸经业主确认，孔之间留有安装螺纹间距。

4. 分析小屋以保证在线分析工作为目的，可安装防爆空调，其防爆等级不低于 2 区，B、C、D 组，防护等级不低于 IP65，防爆空调具备制冷、制热、除湿功能，能保持小屋内的温度和湿度，便于分析仪及其它配套设备运行。

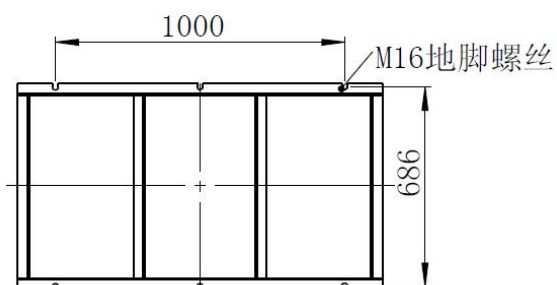
5. 分析小屋应采用撬座型钢结构基础形式，有足够强度、焊接牢固。对沿着墙外壁安装的取样系统、载气、标气瓶安装系统，有固定架及防雨遮阳措施。

6. 分析小屋可配备的安全设施，如门边的紧急用门档，紧急报警按钮，气体检测器，火灾监视系统。分析小屋内设置可燃气，氢气，硫化氢气体检测探头各一台，当有毒气体或可燃气体浓度超过正常范围时，小屋门外的报警灯就发出闪光报警信号，同时启动排气扇进行空气置换。

7. 分析小屋对每个支路设置开关。所有设备应符合防爆要求。
分析小屋外形图如下：



仪器安装图如下：



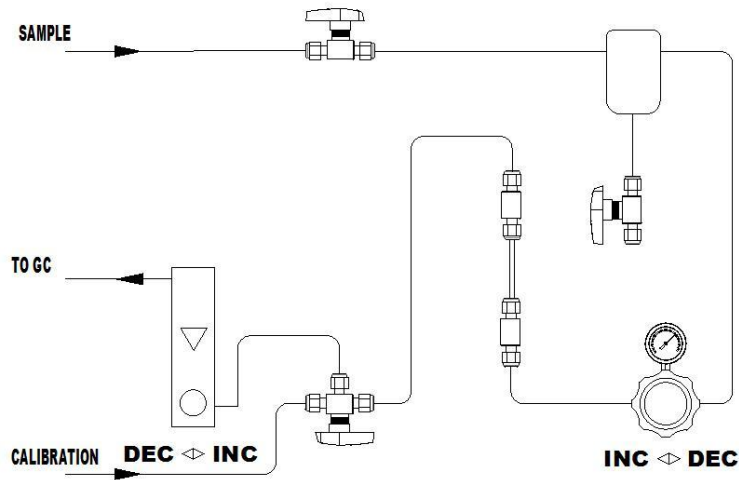
2.3. 仪器的安装

检查无误后，将仪器小心固定在合适的位置，必要时用地脚螺丝固定。必须稳固并留有检修的空间。

2.3.1. 样品预处理部分管路图及安装

对此分析流程，前处理是先进行固体颗粒物的过滤，并进行样品回流，保证取样新鲜无滞后，过滤后进行汽化和减压，将样品的压力降低到略高于常压，再进入液体过滤器或沉降器，把气体样品中的液体过滤掉，最后再进行流量调节，控制到需要流量。

M609 Sampling pre-treatment system



2.3.2. 气源的安装

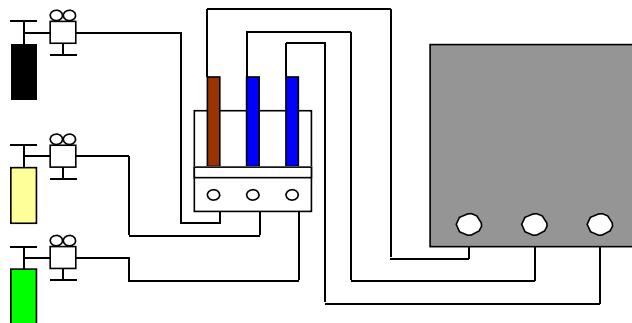
气源请安装在安全之处。如采用钢瓶气源，钢瓶应加以固定以防止翻倒造成事故。无论选择何种形式的气源（如：气体发生器，钢瓶气源，空气压缩机等），皆应仔细查阅所产生气体的质量是否满足 WH609X 过程气相色谱仪的气源要求。以免影响分析结果或造成色谱仪的污染甚至损坏！

2.3.3. 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。

2.3.4. 外气路的安装



外气路示意图

WH609X 过程气相色谱仪采用 1/8 不锈钢管来作为外气路的连接管。其连接方法如上图
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. 在实际操作中，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；

2.3.5. 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：

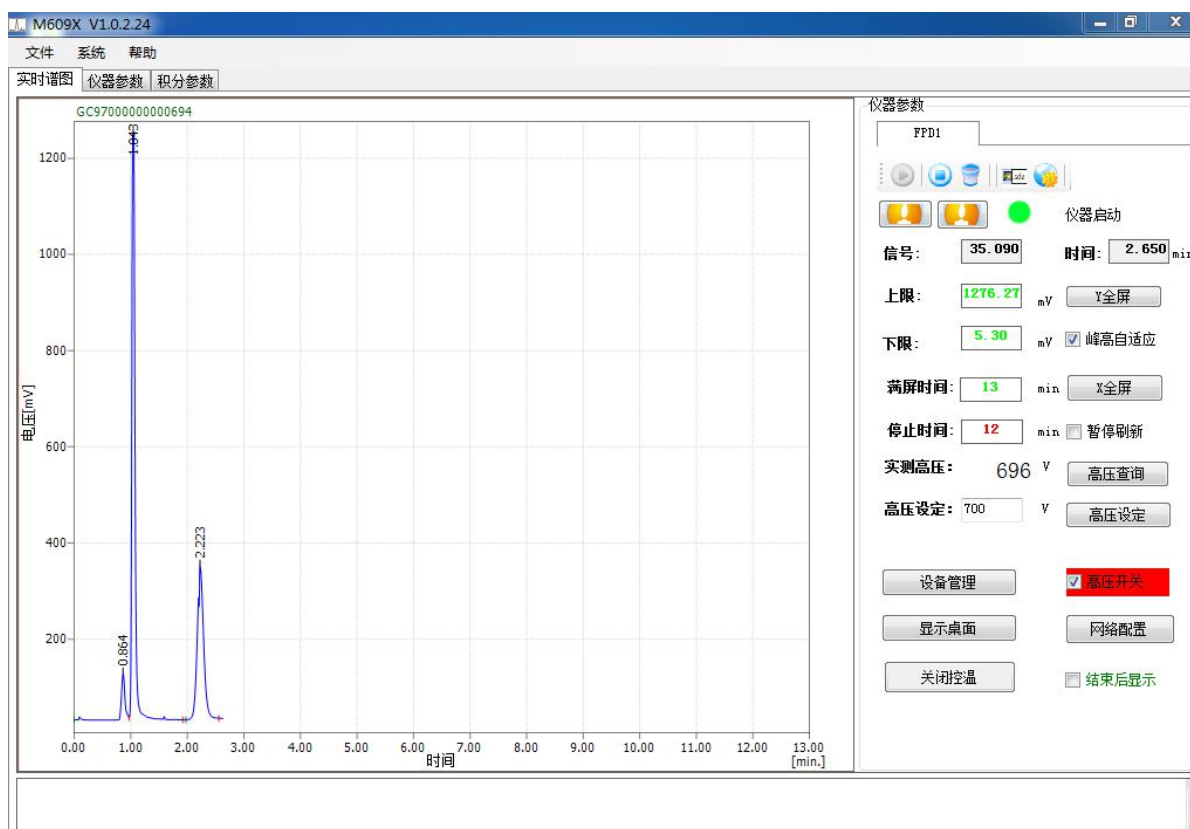
(1) 将主机电源关闭

(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0.5MPa；

(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。

3. 色谱仪工作站的操作

3.1. 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。

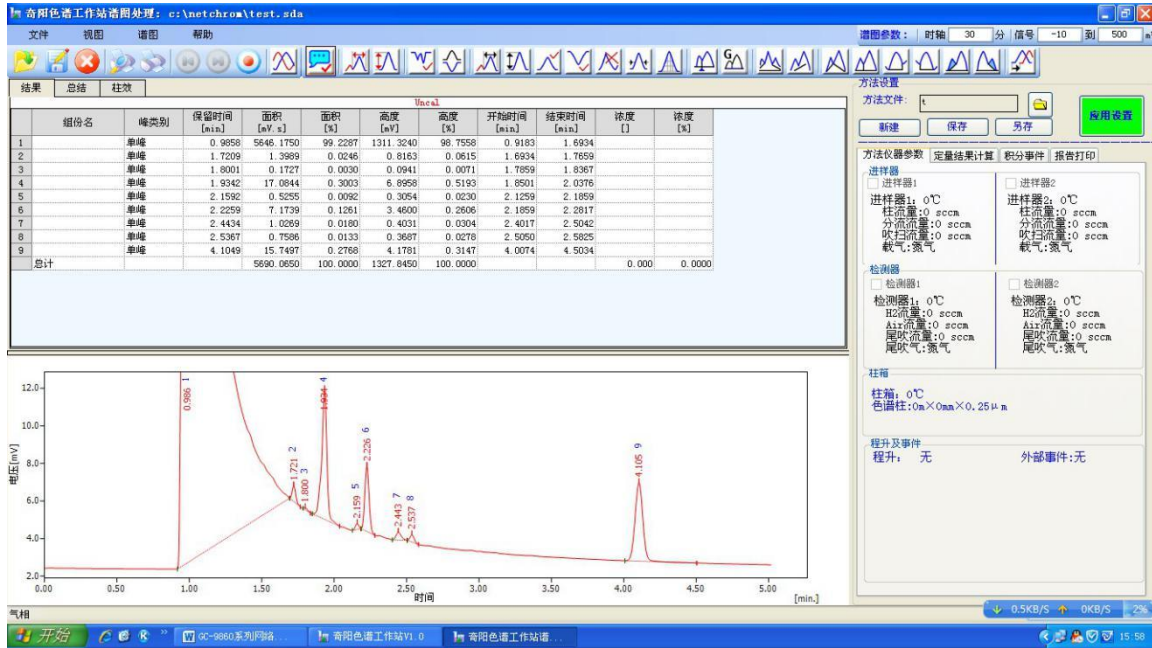
3.2. 下拉式菜单介绍

3.2.1. 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。

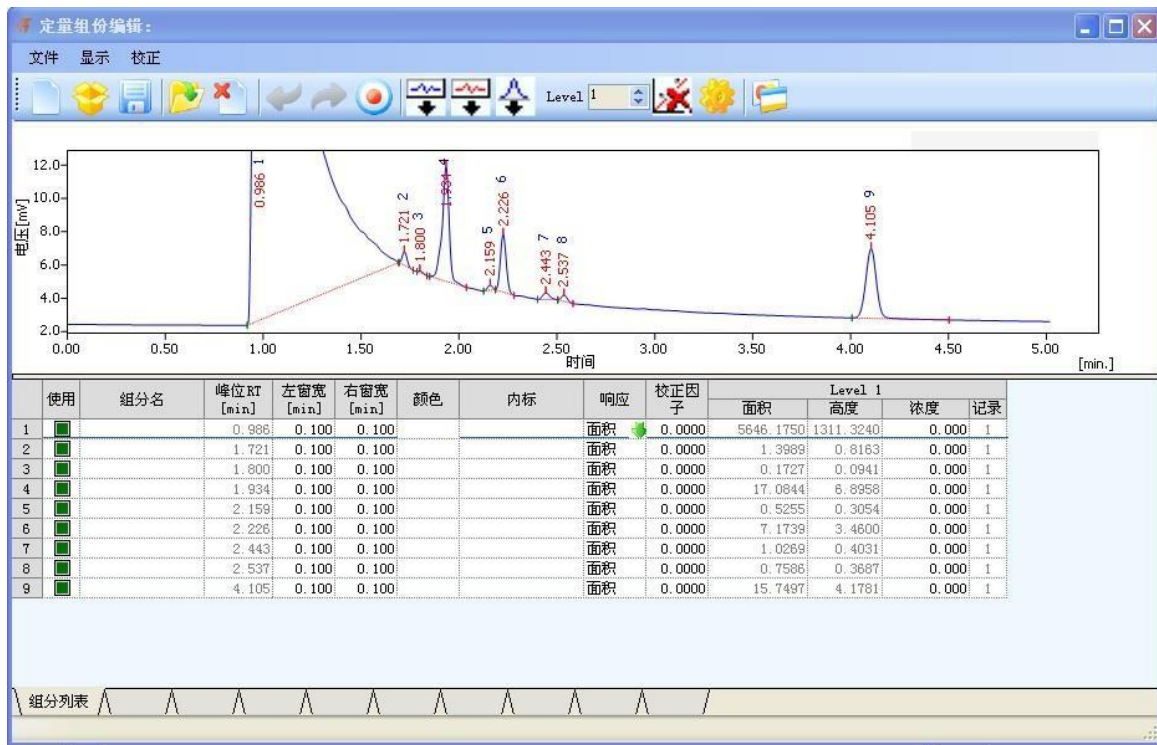
3.2.1.1. 谱图处理

“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。



3.2.1.2. 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。



3.2.2. 系统

3.2.2.1. 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；



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”。

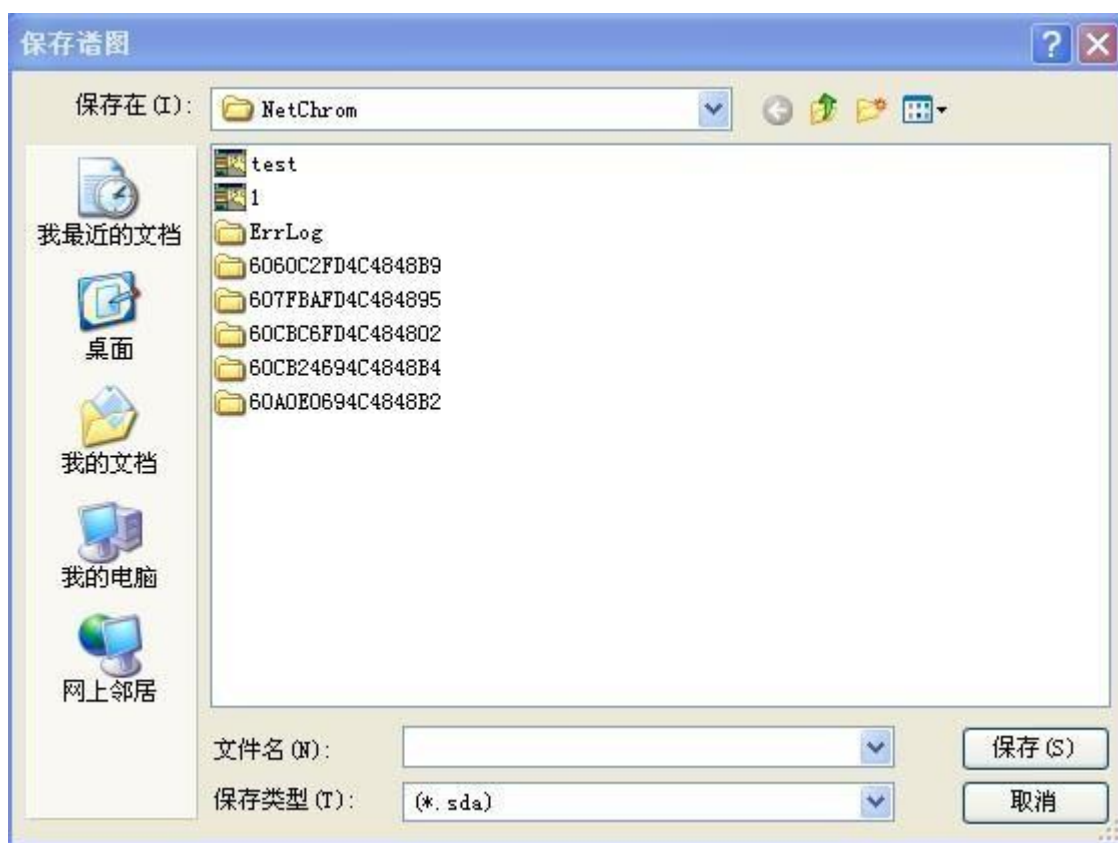
注：最好不要将“基线”、“采样线”等与“背景”的颜色一致，这样会使谱图无法看到。

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。

3.2.2.2. 校正时钟

本系统提供了远程校正色谱仪时钟的功能（时钟亦可以在色谱仪上直接通过键盘修改）。单击下拉式菜单的“系统”，再单击“校正时钟”即完成时钟的校正。

3.2.2.3. 控温配置

单击该菜单，可以查看、配置六路控温的中、英文名字及使能，如下图所示：



其中中、英文名称应根据实际情况编辑。上图为出厂默认名称。更改后的名称将传送到色谱仪对应位置。如使能下的方框为没有勾选状态时，表示对应的控区为关闭状态，相反，勾选状态表示对应的控区为打开状态。

3.2.2.4. 时间程序

工作站设计有通过时间程序分别取自其他检测器信号来实时合成另一张谱图的功能。该功能可以有效的将单次进样多个检测器输出谱图的有效部分合成到一张谱图上，为定量计算以及谱图打印提供了方便。该方法是通过设置时间程序从而产生一个虚拟通道的方法来实现。



比如上图的设置，从开始采样到 0.1 分钟止取自 FID1 信号，自 0.1 分钟至 0.2 分钟取自 TCD1 信号，依次类推。

注：当时间程序全部为零时，将不产生虚拟通道。

3.2.2.5. 基线平齐

工作站设计有基线平齐功能。该功能是将有波动的一段无效基线进行平齐，达到谱图完美的目的。



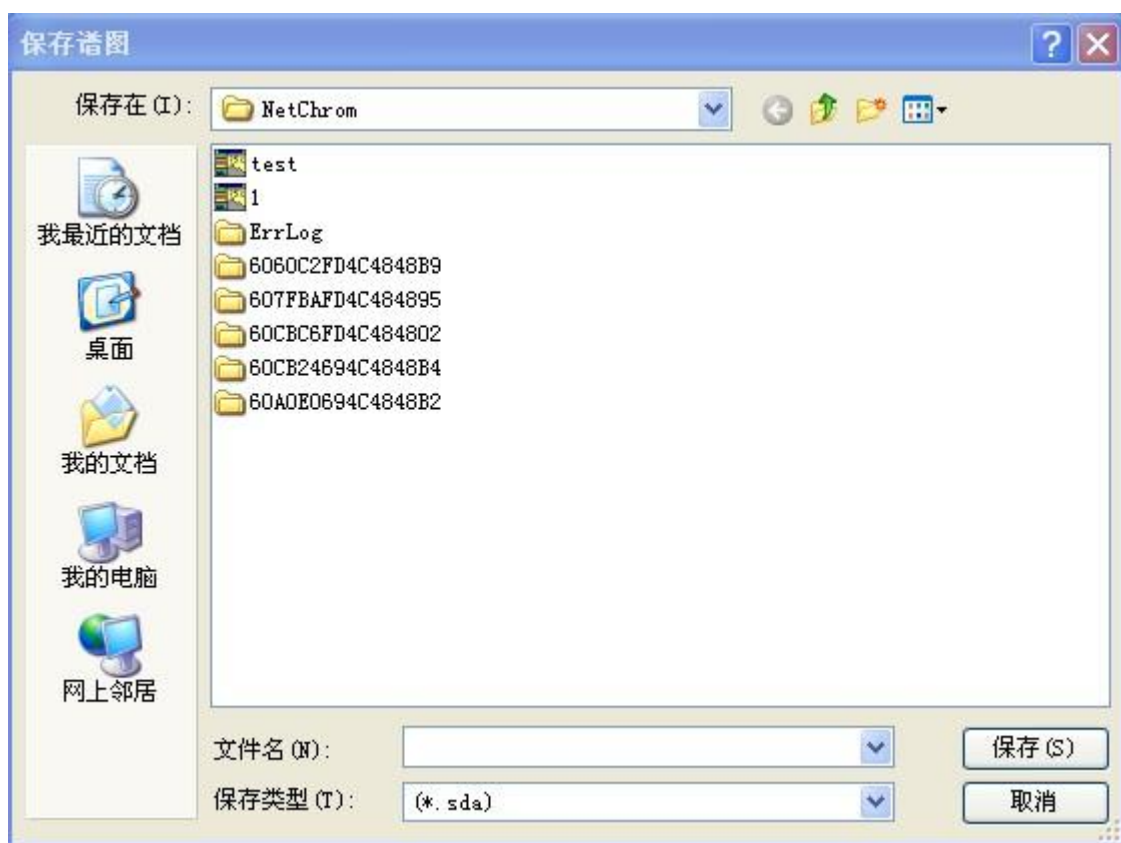
比如上图的设置则完成 1.00 分钟至 1.20 分钟的基线取平齐。

3. 2. 2. 6. 谱图嫁接

单击该菜单，会弹出“谱图嫁接”界面：



此时依次选择谱图 1、谱图 2，点击“另存为”界面会弹出如下对话框：



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。

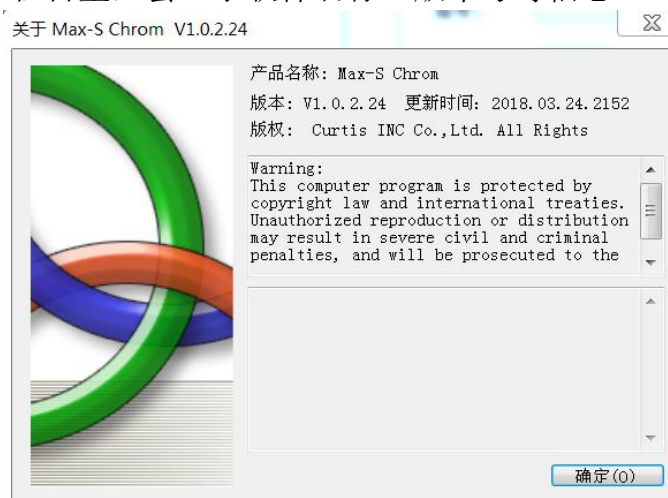
3.2.3. 帮助

3.2.3.1. 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。

3.2.3.2. 关于

在“关于”栏目里，会显示软件名称、版本号等信息。



3.3. 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：



3.3.1. 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！

3.3.2. 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。

3.3.3. 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。

3.3.4. 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。

3.4. 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、检测器设置。单击图标即启动其对应的功能。

3.4.1. 开始分析

单击只开始本通道的谱图采样。


3.4.2. 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。

3.4.3. 放弃分析

单击是放弃当前的采样基线或空白基线。

3.4.4. 上一视图


单击是查看上一幅显示的基线。

3.4.5. 下一视图

单击是查看上下幅显示的基线。

3.4.6. 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。

3.4.7. 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。

3.4.8. 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！

3.4.9. 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。

3.4.10. 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。

3.4.11. 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。

3.4.12. 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。

3.5. 仪器的设置

3.5.1. 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：



The screenshot shows a software interface for temperature control. At the top, there are several tabs: '温度/流量' (Temperature/Flow), '程升/事件' (Program/Event), '进样器' (Injector), '网络/版本' (Network/Version), and '消息' (Message). The '温度/流量' tab is selected. Below the tabs is a title '温度控制' (Temperature Control). The main area contains a table with three columns: '实测(°C)' (Actual °C), '设定(°C)' (Setpoint °C), and '保护(°C)' (Protection °C). The table has six rows, each representing a different temperature zone. The first column of the table is highlighted in blue. Below the table are two buttons: '查询' (Query) and '设定' (Set).

	实测(°C)	设定(°C)	保护(°C)
进样器	111.1	111.0	400.0
柱 炉	111.1	111.0	400.0
检测器	111.1	111.0	400.0
检测 2	111.1	111.0	400.0
辅助 1	111.1	111.0	400.0
辅助 2	111.1	111.0	400.0

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。

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。

3.5.2. 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：



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。

3.5.3. 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。

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。

3.5.4. 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：



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！

3. 5. 5. 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


单击相应设置区的数值，修改数字，按“设置”即可。

3.5.6. 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。

3.6. 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）。

3.6.1. 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。

1. 校正因子
2. 归一法
3. 校正归一法
4. 外标法
5. 内标法
6. 指数法
7. 单级校正
8. 多级校正
9. 定量根据
10. 工作曲线计算

3.6.2. 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 <input checked="" type="checkbox"/> 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				<input type="checkbox"/> 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 <input checked="" type="checkbox"/> 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				<input type="checkbox"/> 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			
<input type="button" value="获取仪器参数"/>				<input type="button" value="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，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。

3.6.3. 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

打开

清除 查看 根据标样新建

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 1 [min]

柱长 100 [mm]

静态时间 50%宽起始

匹配峰使用缩放 (结果乘数)

缩放因子 1 稀释

缩放后单位

加减谱图

加 减

谱图

匹配方式 无变化 置空

结果总结

浓度

内标浓度 结果表中修改

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，在这里你可以填写，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。

3.6.3.1. 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。

3.6.3.2. 定量组份表文件的调入和清除

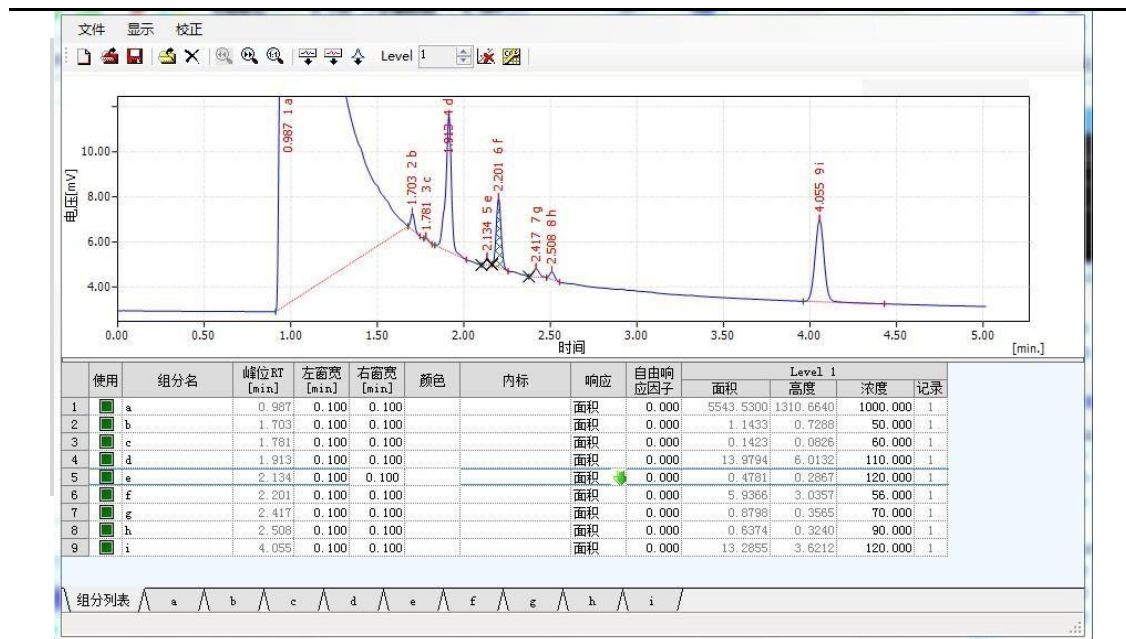
如果要采用校正归一法、外标法、内标法、指数法，则必须选择定量组份表文件。

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。

3.6.3.3. 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：初始化组份表窗口；

打开组分表：打开组份表文件；

保存组分表：保存组份表文件；

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：将标样谱图及组份表中同时有的峰添加到组份表当前 Level；

添加峰：将标样谱图中选择的峰添加到组份表当前 Level；

Level：选择组份表当前浓度级；比如当需要制作多个浓度级别的组分表文件。

删除组份：删除组份表当前选择的组份；

选项：设置组份表文件的属性。

取校正因子：当调入标样谱图文件，添加了组分峰，输入了标样组分的浓度，点击该按钮，工作站软件将计算出组分的校正因子。

窗口上部为标样谱图显示区，下部为组份表。

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；

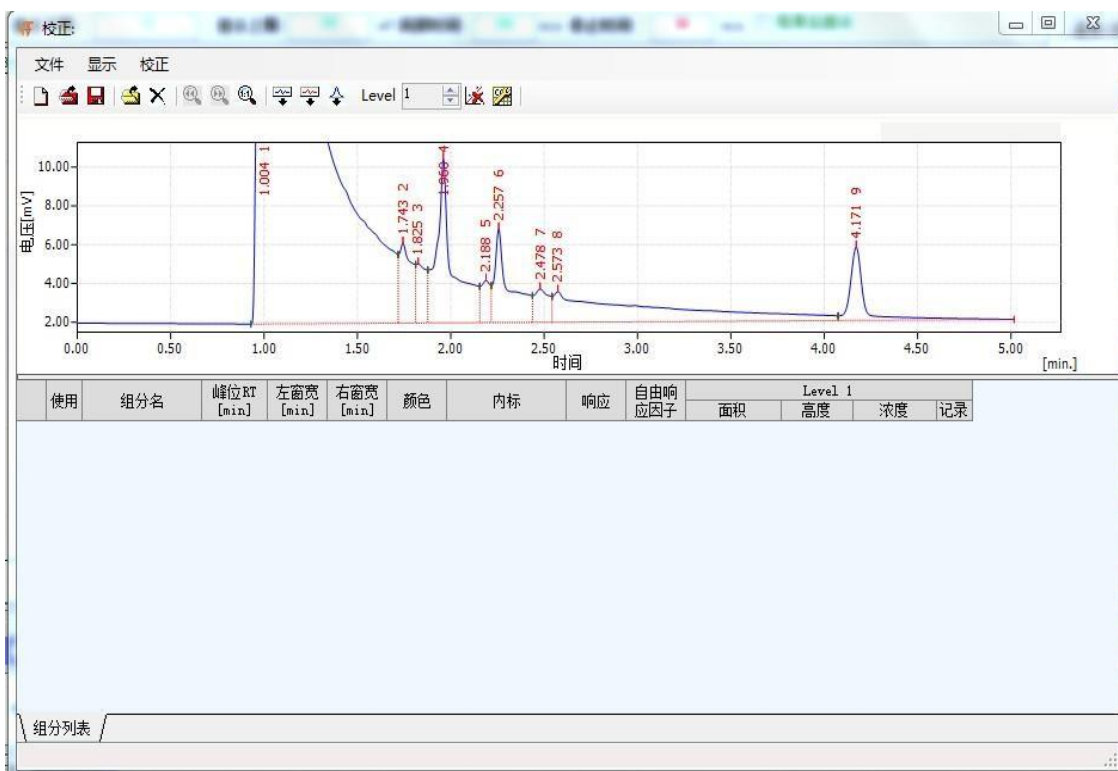
4、关于“再校正”，当一个 Level 级有多个记录时，涉及再校正问题。“平均”方式会将该 Level 所有记录的面积/高度值取平均，“替换”会用新值覆盖原值。

5、标样的浓度单位在“校正选项”—>“组分单位 ”里设定；

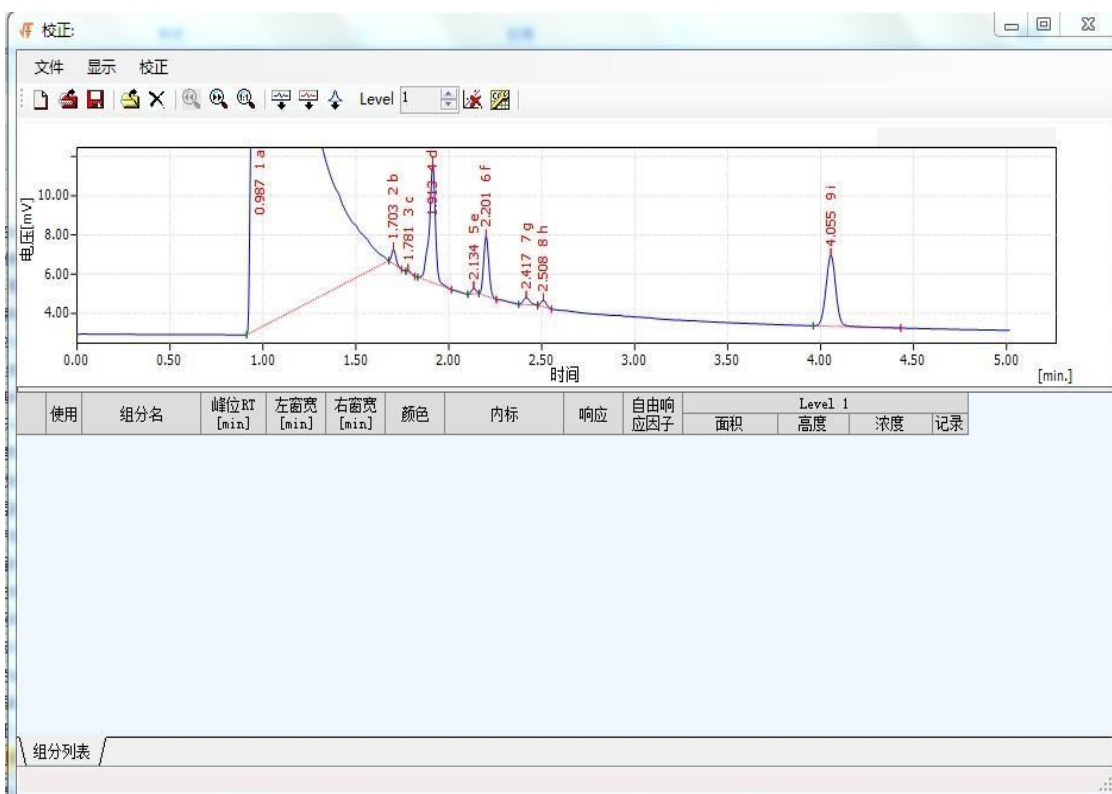
3.6.3.4. 标样预处理

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。



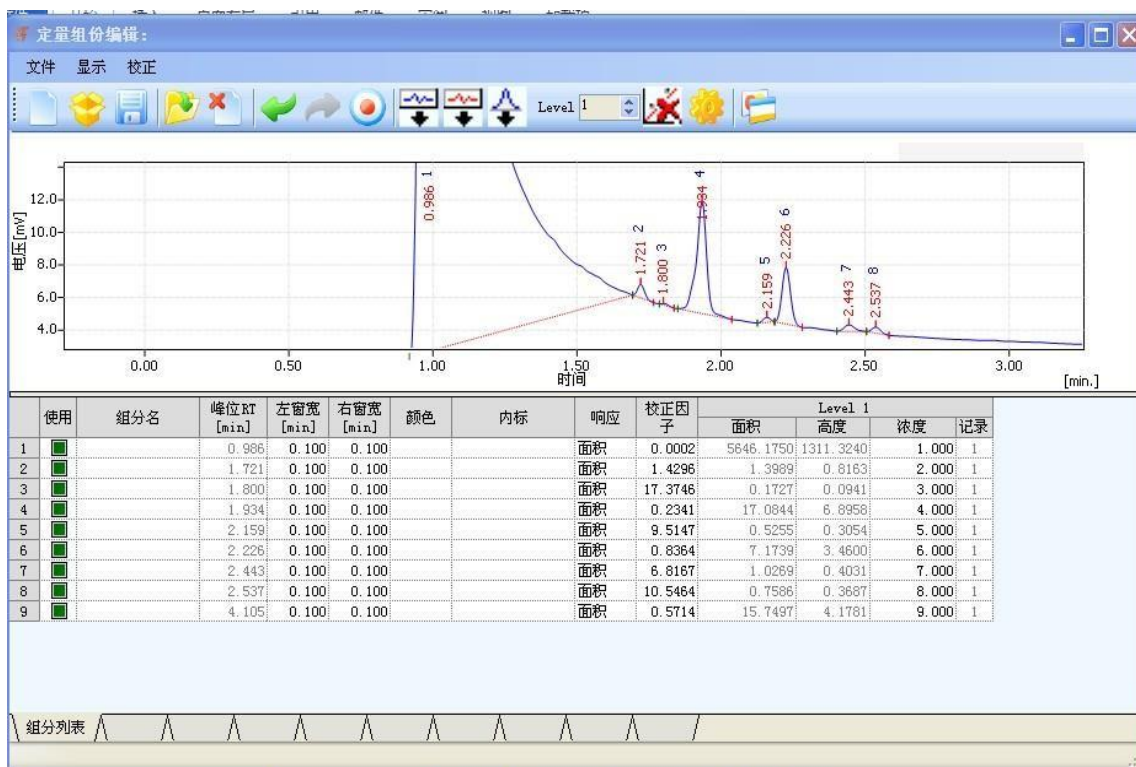
适当手工处理，如图：
打开标样谱图



手工处理-标样 1
同理处理 2. sda、3. sda、4. sda

3.6.3.5. 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。

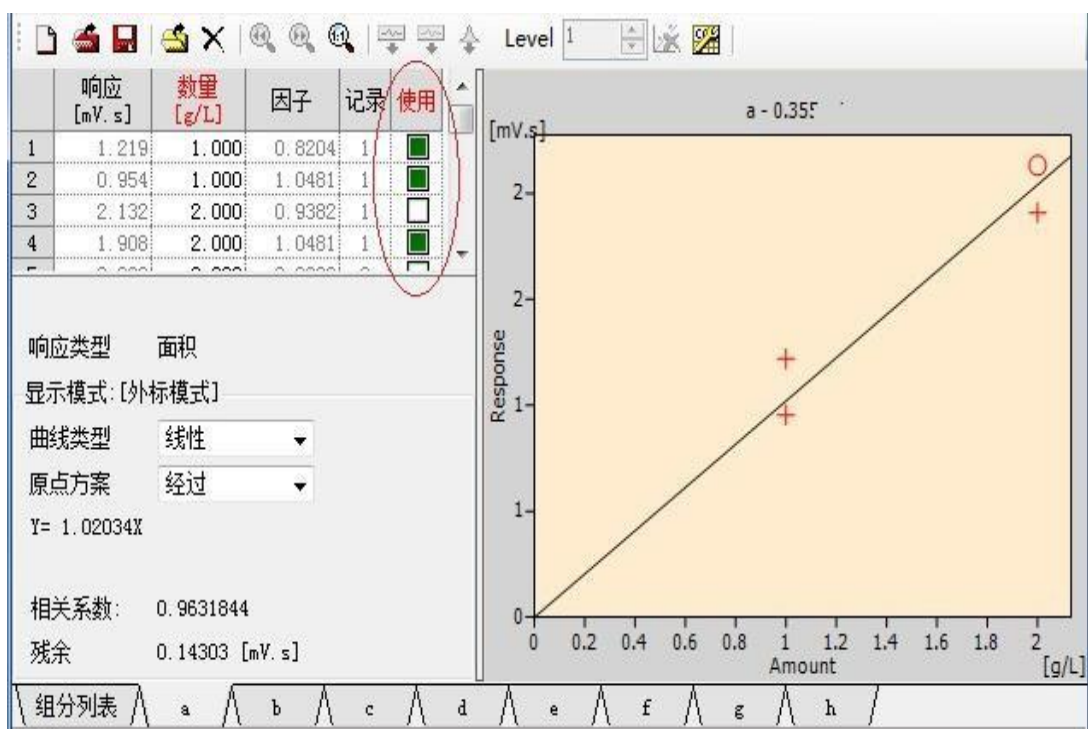
7、“LEVEL”设置成“2、3、4……”，再打开由这一系列平行样生成的谱图文件，重复4至6步骤，即可生成其他浓度的平均校正因子及浓度曲线。

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 Level2。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，Level1 包含 01、02，Level2 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。

3.6.3.6. 内标、外标方程

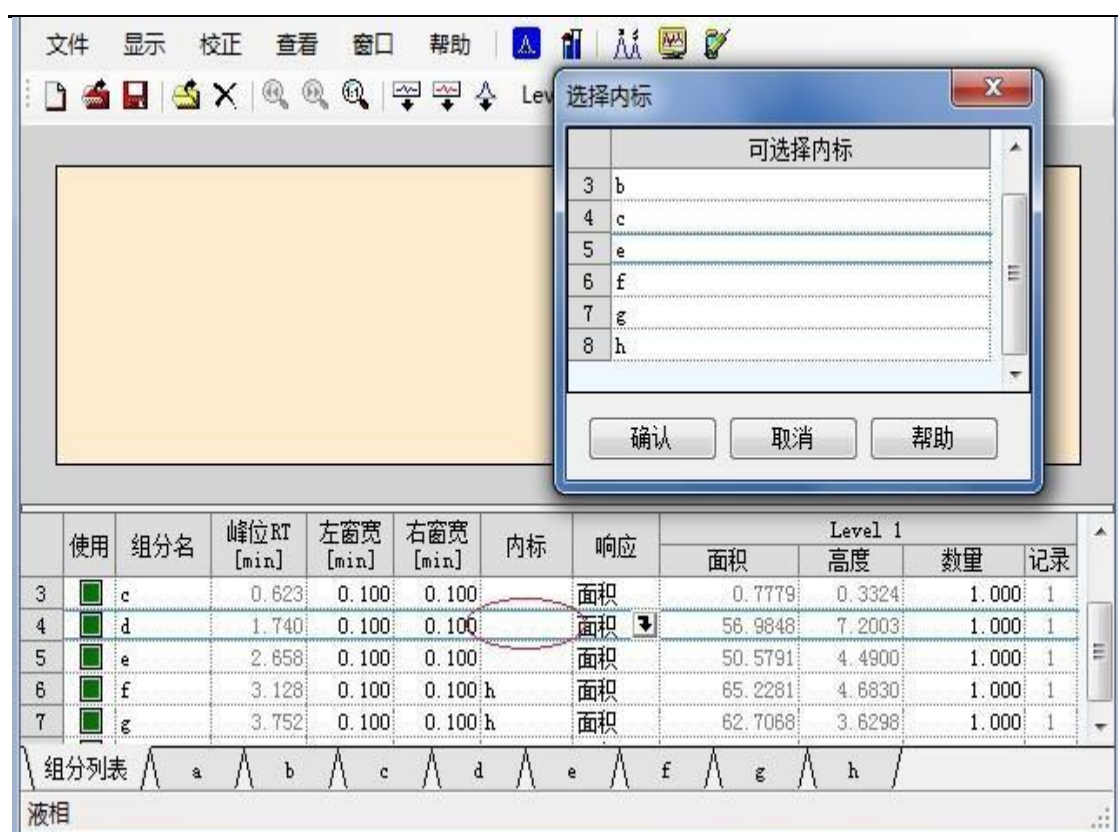
现在为各组分设置方程：将各组分的前面四个点的“使用”勾选，即右方图像上有四个标样点（使用的点标识为十，未使用的标识为○），默认选中。



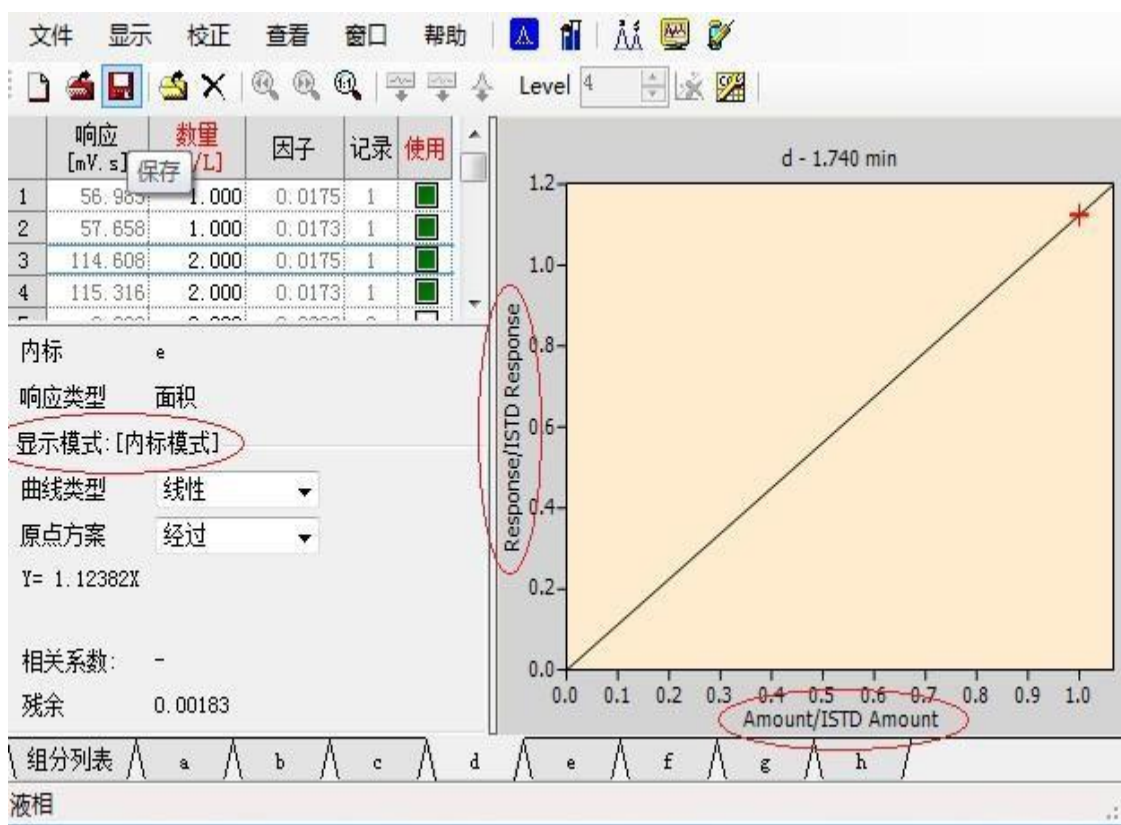
选取校正点所有方程均可调整曲线类型及原点方案。这里白酒标样中：各组分均有四个点供选择。

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：



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

3.6.4. 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/从该组剔除峰
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。

3. 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：

方法仪器参数 | 定量结果计算 | 积分事件 | 报告打印

打印内容

标题:

打印时间 进样时间 工作曲线原始数据
 文件名 结果数据 谱图加框 字号: 4
 谱图 宽: 1326 高: 526 谱线加粗

表格内容

序号 保留时间 组份名称 校正因子
 浓度 峰面积 峰高 半峰宽高 峰标志
 浓度百分比 峰面积百分比 峰高百分比
 工作曲线方程 相关系数 峰分离度
 柱效 有效塔板数 容量因子 拖尾因子

报告头

报告尾

预览

Word 程序自带

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。

4. 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。这是本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：




4.1. 界面

4.1.1. 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）。

4.1.2. 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。

4.1.3. 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：



4.1.3.1. 文件

点击文件下拉菜单，系统弹出如下视图：



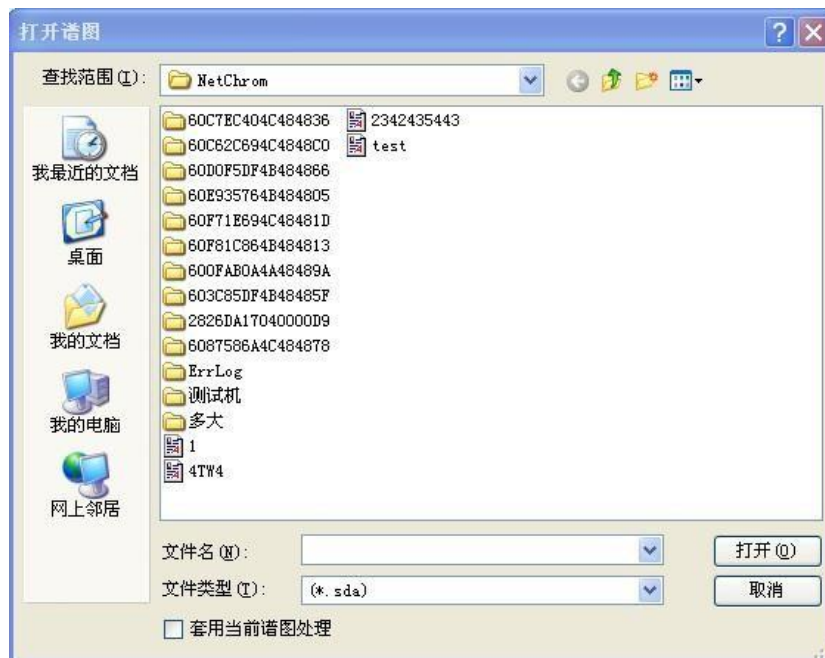
现将本下拉菜单各个部分分别描述。

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。

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。

4.1.3.2. 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；

4.1.3.3. 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的文本或线条标识。

4.1.3.4. 帮助

帮助：打开帮助文档

关于：关于本软件介绍对话框。

4.1.4. 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。

4.1.5. 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。

4.1.5.1. 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。

4.1.5.2. 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，并为未达到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。

4.1.6. 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。

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。

4.1.7. 方法编辑

此处“仪器参数”不可再修改的。

4.1.8. 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：

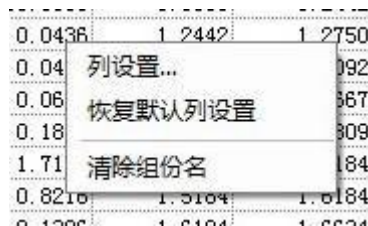
结果	总结	柱效		
	组份名	峰类别	保留时间 [min]	面积 [mV.s]
1	A123123	单峰	0.9808	5681.0420
2	B213123	单峰	1.7151	1.3100
3	C12312	单峰	1.7942	0.1582

4.1.8.1. 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 [g]	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	0.2610	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：



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。

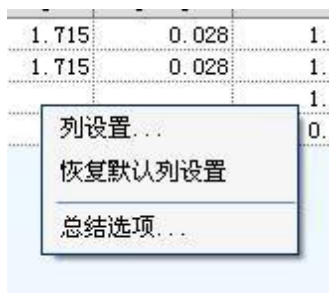
当选择清除组份名，系统将清除组份名。

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。

4.1.8.2. 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：



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	A				
	谱图	样品浓度	体积 [ul]	保留时间	半峰宽	浓度	面积
				[min]	[min]		[mV.s]
1	1			0.987	0.061	10.000	5543.530
2	2			0.990	0.063	10.270	5892.979
3	平均值					10.135	5618.254
4	R S D					1.884	1.881

4.1.8.3. 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	3.5266	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

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 tR 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:

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

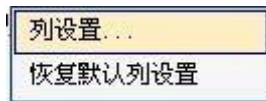
柱效:

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。色谱分辨率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。

4.2. 分析方法

4.2.1. 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。

4.2.2. 校正归一法操作步骤

- 1、按照“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。

4.2.3. 单点校正法（单点外标或单点内标）操作步骤

- 1、按照“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。

4.2.4. 多点校正法（多点外标或多点内标）操作步骤

- 1、按照“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。

4.3. 报告的打印

系统将根据“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。

5. 仪器维护

5.1. 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。

5.2. 开机问题

5.2.1. 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

5.2.2. 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

5.2.3. 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

5.2.4. 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

5.3. 色谱峰问题

5.3.1. 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

5.3.2. 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

5.3.3. 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

5.3.4. 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

5.3.5. 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

5.3.6. 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	调整载气流量

5.3.7. 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

5.3.8. 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

5.3.9. 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	检查并做好相应的良好接地
固定液不当	固定液选择适当
载气流量选择不当	把载气流量调节适当
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

5.3.10. 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
进样后载气流量变化	换进样器硅橡胶
进样器硅橡胶漏	换进样器硅橡胶

5.3.11. 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
火焰喷口污染	清洗火焰喷口
层析柱里面的固定液流失	重新老化层析柱

5.3.12. 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

5.3.13. 没有进样而基线单方向变化（FID）

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

5.3.14. 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

5.3.15. 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

5.3.16. 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

5.3.17. 额外峰

故障判断	检查方法及修理
前一样品的高阻分峰	待前一次样品全部溜出后再进样
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

5.3.18. 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

5.3.19. 反峰

故障判断	检查方法及修理
氢气流量过大 (FID)	调整氢气流量

5.3.20. 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

5.3.21. 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

5.3.22. 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
载气流量压力太低	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
载气流量调节不当	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

5.3.23. 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