

LabSolutions™

LC 入门指南

1	启动	12
2	设置仪器参数	16
3	单次分析	21
4	数据处理	23
5	批处理分析	29
	创建批处理表	29
	批处理分析	34
6	多个数据处理	38
7	关机	46



声明

- 本指南版权归株式会社岛津制作所所有。未经本公司许可不得转载、复制部分或全部内容。
- 本指南内容如有改动恕不另行通知。
- 本指南内容力求准确，如有错误或遗漏敬请原谅。
- 本产品备件的供货期为产品停产后七年。其后可能无法提供备件，请谅解。但是，非本公司生产备件的供货期请参照相关厂家的规定。
- 计算机硬盘中的内容有时会因意外情况而丢失。请务必备份以保护数据。
- 如果用户或使用场所发生改变，请将本指南转交给后续用户。

© 2011-2019 Shimadzu Corporation. All rights reserved.

本指南是英文版《LabSolutions LC入门指南》(223-60086)(修订版D 2019年3月)的译文。

说明书的类型

LabSolutions 随附有五种使用说明书。

您还可以显示 [帮助] 菜单来确认各参数的含义以及设置范围。

以下内容对如何充分利用这些说明书进行说明。

■ 入门指南

本指南供新手用户使用。

请按照本指南中所述步骤的顺序进行分析，以了解基本的 LabSolutions 操作。

■ 操作说明书

本说明书提供有关 LabSolutions 中总体数据采集操作的综合信息，例如，系统配置、数据处理、批处理以及报告功能。

■ 管理说明书

本说明书供系统管理员使用。

本说明书对系统管理和数据管理进行说明。

■ 理论说明书

本说明书对样品成分的峰检测和定量进行说明 (供高级用户使用)。

■ 安装维护说明书

本说明书对 LabSolutions 软件的安装和维护进行说明。

■ 帮助

参照 [帮助] 可了解有关所显示子窗口的更多信息。

可单击屏幕上的 [帮助] 按钮或键盘上的 [F1] 键显示[帮助]。

本说明书中所用符号的含义如下所示。



提示

关于简便操作仪器的说明



参考

记载操作说明书中的参考位置

LabSolutions 可以做什么

LabSolutions 软件是一款既易于使用, 又兼具了多种高级功能的软件。其为连续数据采集和分析操作的自动化和效率化提供了强大支持。可以使用 LabSolutions 执行以下功能。

- 控制分析仪器和数据采集
- 进行数据处理并查看数据
- 创建和打印各种自定义报告

系统结构

本系统指南就系统使用以下设备采集数据时进行说明。



文件类型

数据文件 (.lcd)

该文件包含来自以下文件的所有分析结果和数据采集信息。

方法文件 (.lcm)

测定条件、
分析条件、
校准曲线信息等。

批处理文件 (.lcb)

该文件用于
对多个样品进行
连续数据采集。

报告格式文件 (.lsr)

该文件用于打印
数据采集结果。

-操作之前的检查-

数据采集流程

步骤 ①

设置条件

设置适用于待测定化合物的数据采集条件。

开始数据采集之前，在 LabSolutions 上设置数据采集条件。

对于本说明书中所述的数据处理操作，请进行如下设置：

色谱柱	Shim-pack VP-ODS (150 mm L × 4.6 mm i.d. 5 μm)
流动相	泵 A = 水，泵 B = 乙腈
流速 (流动相)	1.0 mL / min
色谱柱温度	40 °C
检测波长	254 nm
进样体积	10 μL
样品	对羟基苯甲酸酯 (对羟基苯甲酸酯混合样品) 10、20 和 40 ppm 标准样品，以及 2 份未知样品的混合物

步骤 ②

数据采集

完成设置数据采集条件后，开始进行数据的采集。

在 LabSolutions 上，逐一进行样品分析的操作被称为“单次分析”。

确定数据采集条件、更改数据采集条件、测定标准样品和未知样品，并检查目标成分的分​​离状态。

使用提供最佳分离状态的数据采集条件对其他样品执行数据采集。



参考

3 单次分析第 21 页

设置数据采集条件并且优化数据处理参数对于获得更佳的数据采集结果十分重要。本章对数据处理的基本流程进行说明。

步骤 ③



分析

处理采集的数据，并应用分析条件。

通常情况下，会分析多个数据以确定积分条件，从而获取稳定的分析结果 (例如，保留时间和峰面积重现性、目标成分的检测限以及线性)。

数据处理条件确定后，会根据已采集标准样品的数据处理结果对未知样品执行定量计算 (即调查样品中含有多少目标成分)。

要执行定量，必须根据标准样品的已知浓度和峰面积值制作校准曲线。该校准曲线用于计算未知样品的浓度。



4 数据处理第 23 页

步骤 ④



批处理分析

对多个样品进行批处理分析。

通过执行单次分析确定数据采集条件，执行批处理分析以连续测定多个样品。





5 批处理分析第 29 页



6 多个数据处理第 38 页

LabSolutions 主窗口

【仪器】
连接到 PC 的分析仪器会作为图标显示。
双击  将启动 [分析] 程序，可以在其中进行数据采集设置和采集数据。

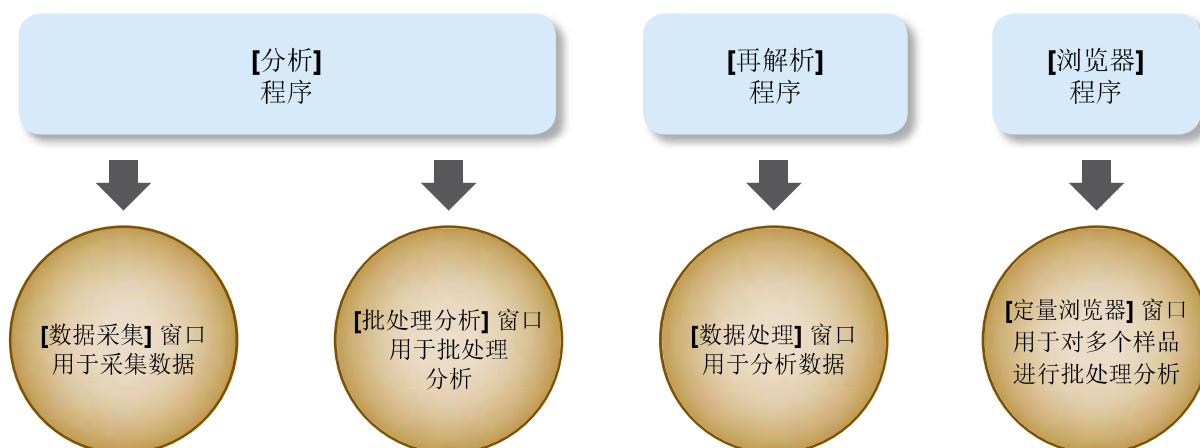


【处理工具】
显示 [再解析] 程序 (数据分析) 和 [浏览器] 程序的图标 (色谱图显示和定量计算结果)。

【管理工具】
显示系统管理程序的图标，可以使用这些程序设置安全策略、用户管理以及日志浏览器。

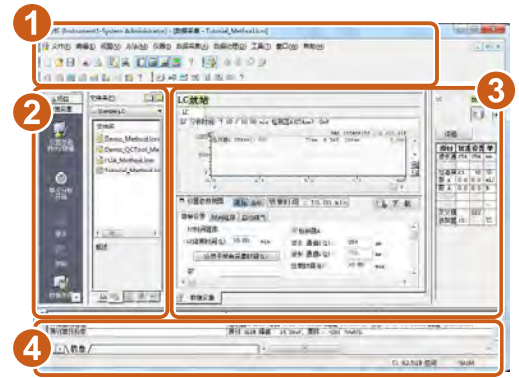
【手册】
显示各种 PDF 说明书的图标以及 LabSolutions 附带的帮助菜单。

LabSolutions 的主要程序和主要窗口



LabSolutions 窗口

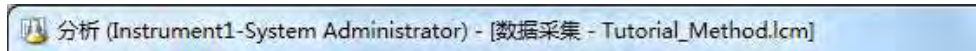
以下示例对
[分析] 程序窗口进行说明。



1

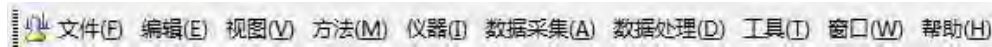
标题栏

该栏显示当前程序、窗口、加载文件的名称以及其他信息。



菜单栏

该栏会根据当前用户的操作权限显示当前可用的窗口和菜单。



工具栏

该栏显示用于操作分析仪器的常用菜单项目和图标。



2

助手栏

该栏显示常用数据采集操作的图标。



数据管理器

该子窗口显示所选文件夹中文件的名称。



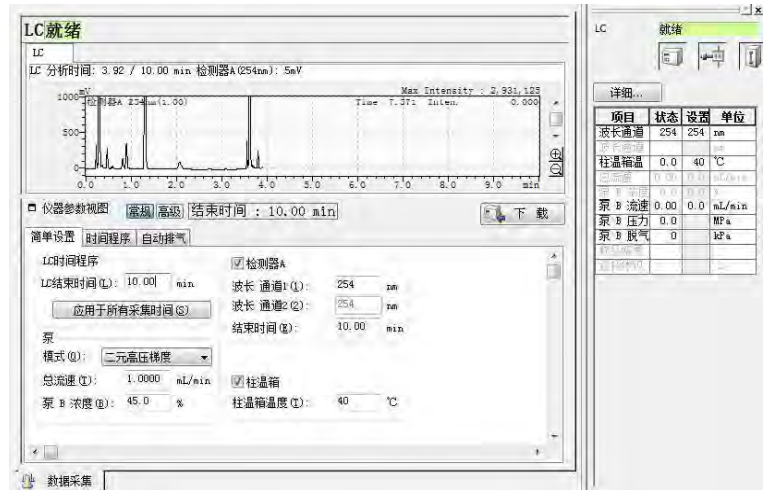
3

窗口

在 [分析] 程序中, [数据采集]、[批处理分析] 以及其他窗口会在助手栏上作为图标显示。

在 [再解析] 程序中, 会显示 [数据处理]、[PDA 数据处理]、[校准曲线]、[报告格式] 和其他窗口。

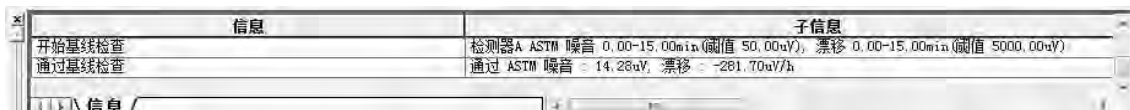
通过单击助手栏上的图标来切换窗口。仪器监视器 (窗口的右侧) 检查采集条件和连接情况。



4

输出窗口

该窗口显示操作历史记录和出现的错误信息。



如何打开窗口

设置数据采集参数并执行单次分析：
从主窗口中打开 [数据采集] 窗口。



2 设置仪器参数第 16 页



3 单次分析第 21 页

▼[分析] 程序

▼[数据采集] 窗口

▲主窗口

多个样品的连续数据采集：
从主窗口中打开 [批处理分析] 窗口。



5 批处理分析第 29 页

▼[分析] 程序

▼[批处理分析] 窗口

▲主窗口

次序	分析	样品编号	样品名称	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件
1	1	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514001.dat
2	1	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514002.dat
3	1	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514003.dat
4	2	1	Farolan Mixture	Standard 20ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514004.dat
5	2	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514005.dat
6	2	1	Farolan Mixture	Standard 20ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514006.dat
7	2	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514007.dat
8	3	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514008.dat
9	3	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514009.dat
10	3	1	Farolan Mixture	Standard 10ppm	1标准	Tutorial_Method 2m	tutorial_514010.dat
11	3	1	Sample A	Unknown1	0未知	Tutorial_Method 2m	tutorial_514011.dat
12	3	1	Sample B	Unknown2	0未知	Tutorial_Method 2m	tutorial_514012.dat

数据处理和定量计算：
从主窗口中打开【数据处理】窗口。



4 数据处理第 23 页

▲主窗口

▼[再解析] 程序

▼[数据处理] 窗口

峰号	化合物	保留时间	峰面积	高度
1	2054	342818	10	
2	2054	24818	0	
3	4514	27754	6	
4	5781	48495	4	
总计		2184281	20	

多个数据处理和定量计算：
从主窗口中打开【定量浏览器】窗口。



6 多个数据处理第 38 页

▲主窗口

▼[浏览器] 程序

▼[定量浏览器] 窗口

数量级	数量级名称	样品名称	方法名称	化合物	值	单位	处理
1	Tutorial_3_4002_1ml	教程 (保留时间)					教程
2	Tutorial_3_4002_1ml	教程 (保留时间)					教程
3	Tutorial_3_4002_1ml	教程 (保留时间)					教程
4	Tutorial_3_4004_1ml	教程 (保留时间)					教程
5	Tutorial_3_4002_1ml	教程 (保留时间)					教程
6	Tutorial_3_4002_1ml	教程 (保留时间)					教程
7	Tutorial_3_4007_1ml	教程 (保留时间)					教程
8	Tutorial_3_4000_1ml	教程 (保留时间)					教程
9	Tutorial_3_4000_1ml	教程 (保留时间)					教程
10	Tutorial_3_4000_1ml	教程 (保留时间)					教程
11	Tutorial_3_4002_1ml	教程					教程

Chapter 1

启动

本章对如何启动 LabSolutions 进行说明。

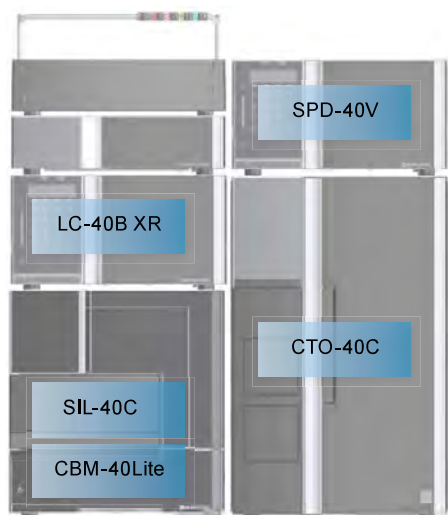


有关 "数据采集" 窗口的详情, 请参考操作说明书中的 "LC 数据采集"。

1 检查连接。

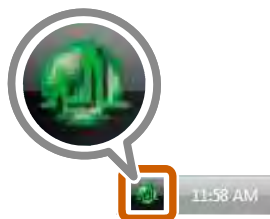
确保分析仪器的所有单元 (泵、自动进样器、柱温箱以及检测器) 都已连接到系统控制器和光纤连接电缆。

2 打开各仪器的电源。



3 打开 PC 和打印机。

PC 启动后, 确认任务栏上 System Tray 中的 [LabSolutions 服务] 图标呈绿色显示。



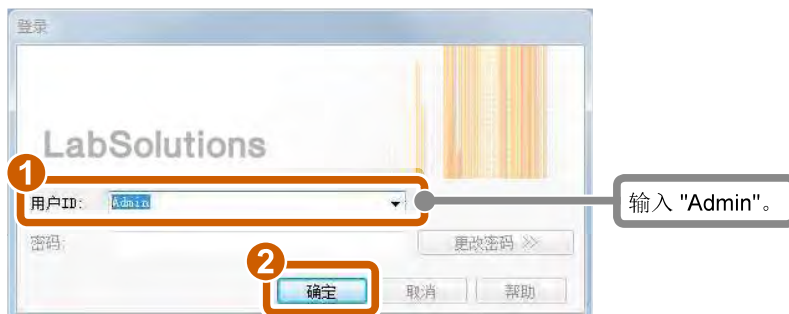
如果该图标呈黄色显示, 则表示 LabSolutions 正在启动中。请稍等片刻。

如果该图标呈红色显示, 则表示发生了错误。重新启动 PC。

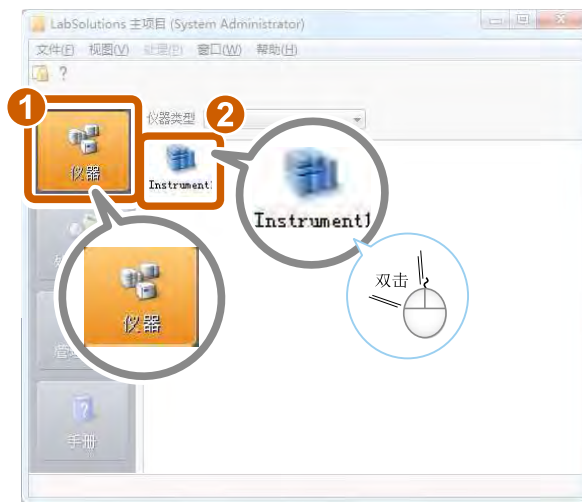
4 双击桌面上的 。

[登录] 子窗口打开。

5 登录。

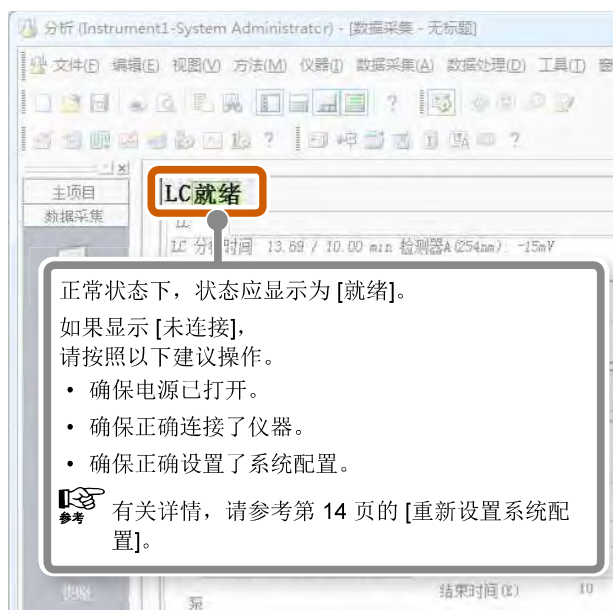


6 打开 [分析] 程序。



续下页 

7 打开 [数据采集] 窗口。



LabSolutions

应用

"我想要连接到系统。"

"我想要更改系统配置。"

在这种情况下

重新设置系统配置。

1 打开 [系统配置] 子窗口。



[系统配置] 子窗口打开。

2 设置通讯。

1 双击 [仪器通讯设置]。 [仪器] 子窗口打开。

2 选择要使用的系统控制器。

3 单击 [通讯设置]。

4 选择 [RS-232C] 或 [Ethernet]。如果使用 [Ethernet] 连接，输入 [IP 地址]。

5 单击 [确定]。

使用光电二极管阵列 (PDA) 检测器时，在 [PDA] 行的 [型号] 列表中选择所需的检测器，然后在 [通讯设置] 处选择 [SCSI 端口] 或 [IP 地址]。

单击此处，可在 [系统配置] 子窗口中的 [用于分析的单元] 处显示当前连接到系统控制器的每台仪器。

仪器	型号	通讯	设置信息
LC	CBM-40Lite	Ethernet	192.168.200.99
LHS	无	无	无
PDA	无	无	无
CLDD	无	无	无
MWD	无	无	无
ADC	无	无	无

3 检查系统配置是否正确。

1 双击单元，并设置每个单元的属性。

2 单击此处将设置发送到 LC。

Chapter 2

设置仪器参数

在 [数据采集] 窗口中的 [仪器参数视图] 中设置数据采集方法 (仪器参数) 后, 将被保存到方法文件中。

本章就如何设置仪器参数进行说明。

1 打开 [数据采集] 窗口。

2 在 [简单设置] 标签上设置每个参数。

LC 结束时间: 10 min

1 常规

2 简单设置

3 LC时间程序
LC结束时间 (L): 10 min

4 泵
模式 (M): 二元高压梯度
总流速 (T): 1 mL/min
泵 B 浓度 (B): 45 %

5 检测器 A
波长通道 1 (1): 254 nm
波长通道 2 (2): 254 nm
结束时间 (E): 10 min

6 柱温箱
柱温箱温度 (T): 40 °C

将 [检测器 A] 设置为 [checked].
波长通道 1 : 254 nm
结束时间 : 10 min

将 [柱温箱] 设置为 [checked].
柱温箱温度: 40 °C

项目	状态	设置	单位
波长通	254	254	nm
柱温箱	0.0	40	°C
总流速	0.0	1.0	mL/min
泵 B	45.	45.	%
泵 B	0.0		MPa
泵 B	0.		kPa



参考

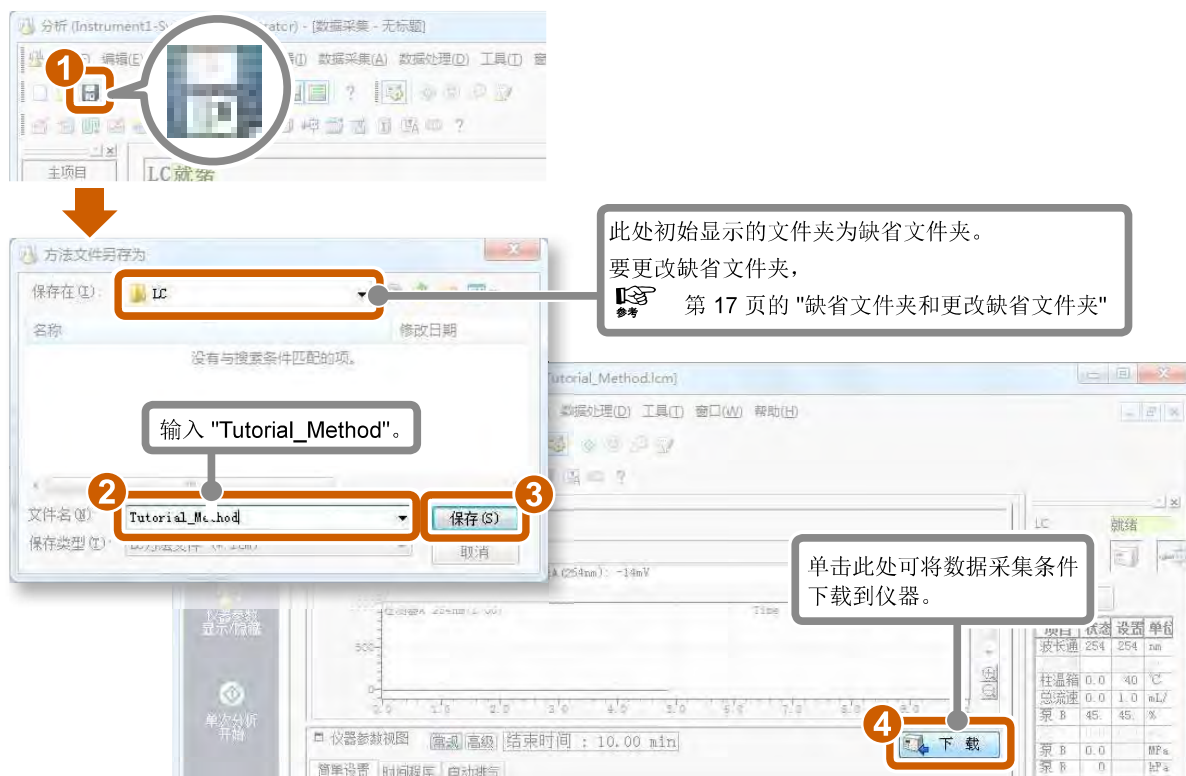
有关数据采集条件的详情, 请参考第 6 页。



参考

有关仪器参数的详情, 请参考操作说明书中 "LC 数据采集" 章节的 "设置仪器参数"。

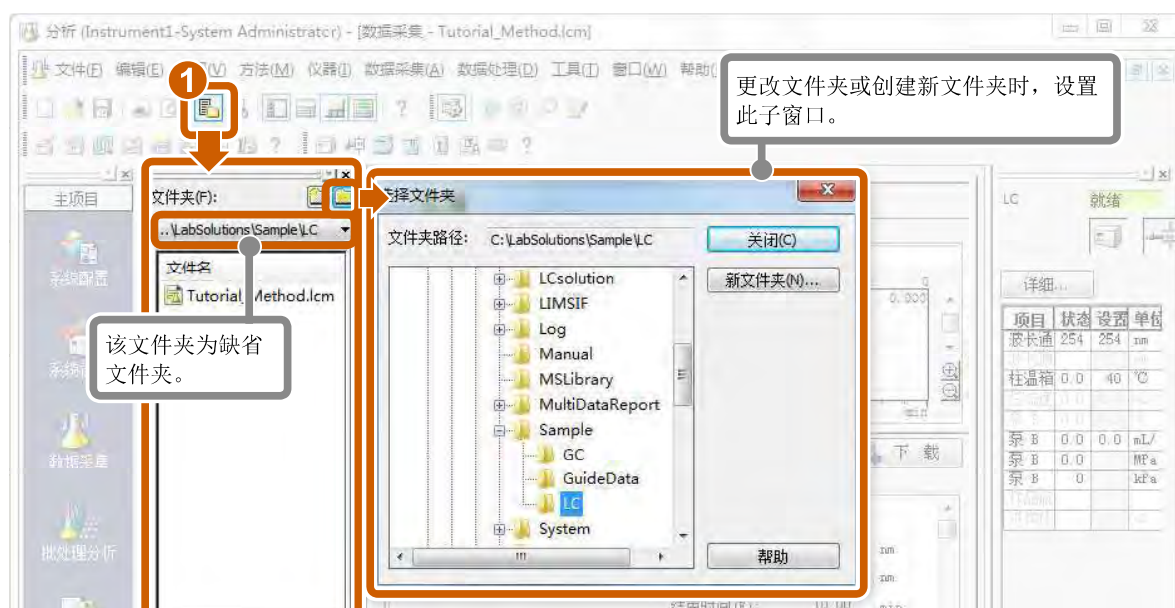
3 保存数据采集条件。



LabSolutions

应用

缺省文件夹和更改缺省文件夹



应用

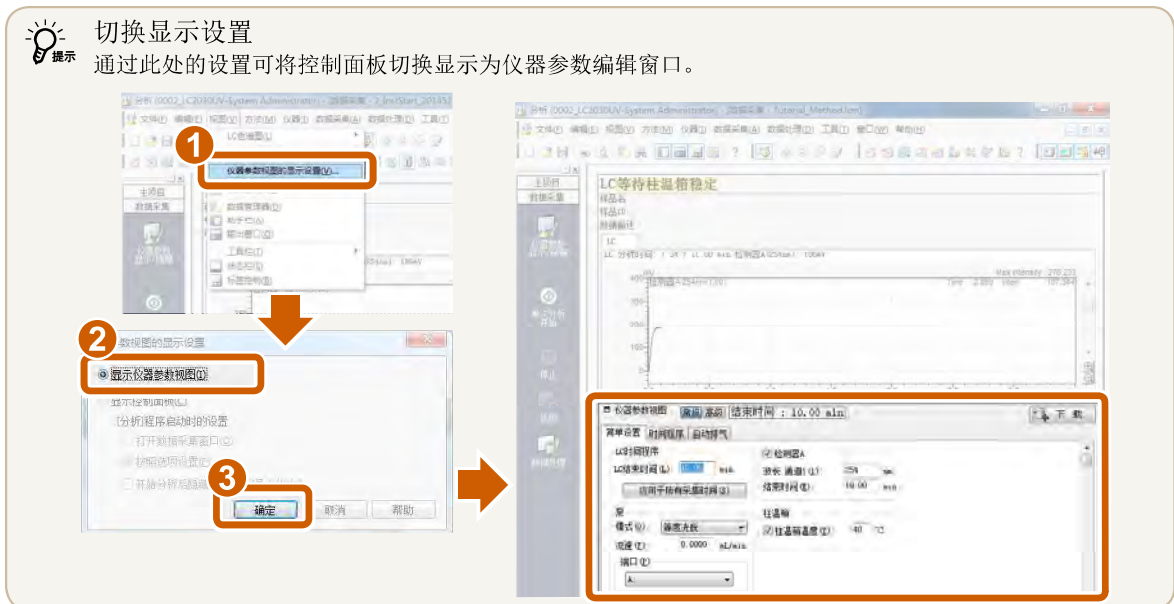
控制面板

在控制面板进行数据采集方法 (仪器参数) 的编辑、仪器状态的确认和仪器的控制。此处就仪器参数的设置进行说明。



切换显示设置

通过此处的设置可将控制面板切换显示为仪器参数编辑窗口。



LabSolutions

应用

基线检查

通过基线检查可以确认设置时间范围内的基线噪音和漂移值是否小于阈值。
基线检查参数保存在方法文件中。

1 设置 [基线检查参数]。



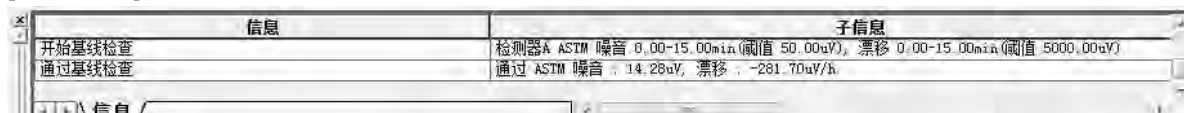
在 [基线检查] 子窗口中，可以更改噪音计算方法，还可设置当在设置时间范围内，基线检查结果为 [失败] 时的最大延迟时间。有关详情，请参考帮助。

2 执行基线检查。



测定结束后，检查结果会在 [基线检查结果] 子窗口和 [输出窗口] 中显示。

[输出窗口]



基线检查结果



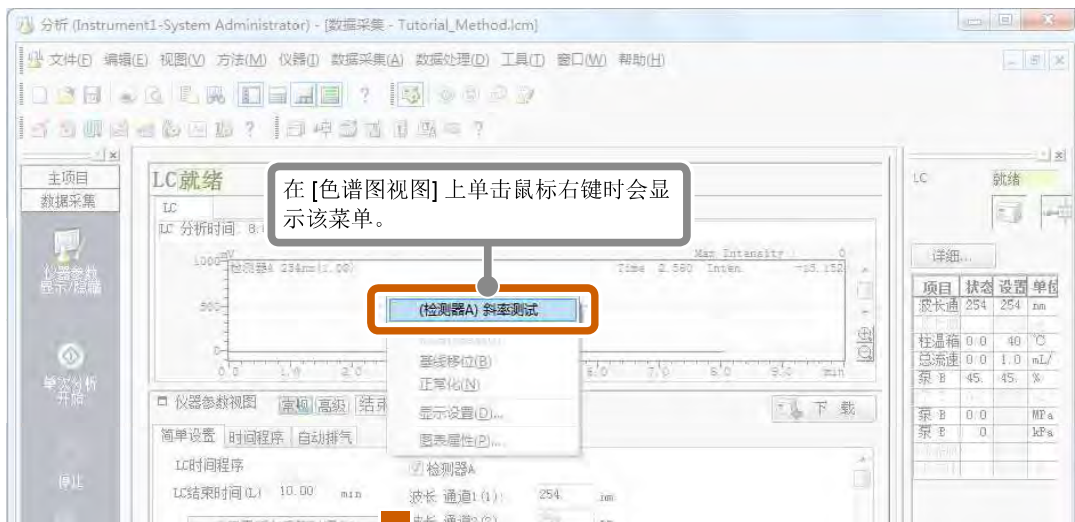
斜率测试

通过执行斜率测试，可以根据数据采集前的噪音和漂移状态，自动设置积分参数的峰检测灵敏度。

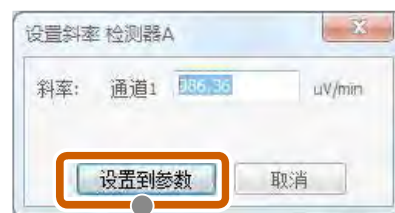
本节就斜率测试进行说明。



- 斜率值是指用于确定峰开始和结束点的数值。
具体而言，当正斜率超过设定值时被作为峰开始点，而当负斜率低于设定值时则被作为峰结束点。
- 通过斜率测试，可以从数据中获得最佳斜率值。



测试结束时将显示测定结果。



要将测定结果应用到积分参数，请单击此处。



为使设定值更易理解，可以进行上舍入，将数值设置为大于所显示斜率值的整数。

例如，可以将 "986.36" 设置为 "1000"。

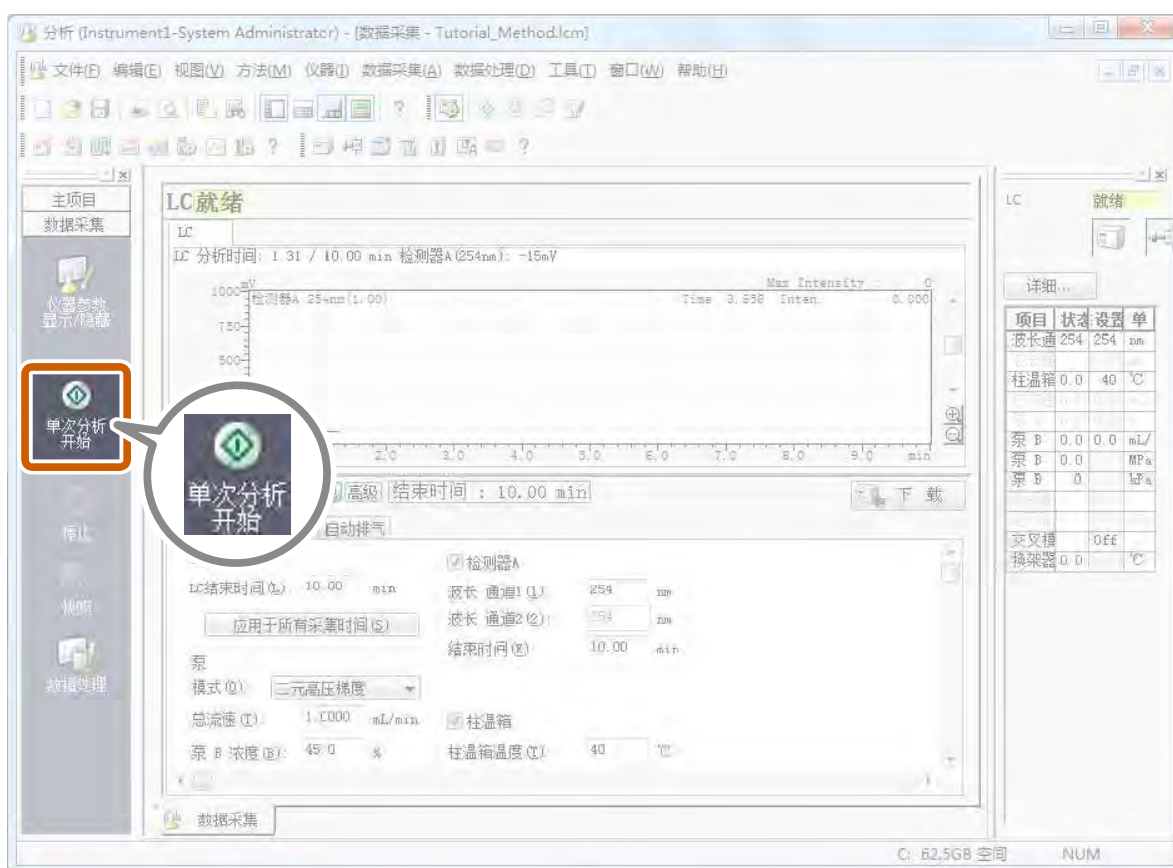
Chapter 3 单次分析

本章就使用保存的方法文件 "Tutorial_Method.lcm" 对标准样品只进行一次测定 (单次分析) 的操作进行说明。

首先, 使用标准样品执行单次分析。

1 打开 [数据采集] 窗口。

2 打开 [单次分析] 子窗口。



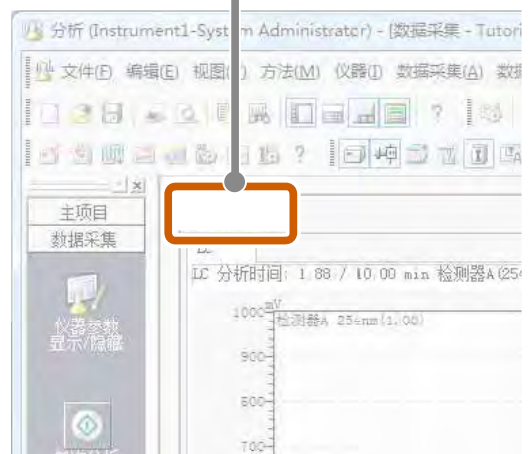
[单次分析] 子窗口打开。

3 设置单次分析的条件。

在本例中，设置将 10 ppm 的对羟基苯甲酸酯混合样品倒入自动进样器上的 1 号样品瓶中，并注入 10 μL 该样品的条件。



提示 超过方法文件中设置的 [LC 结束时间] 时会自动结束数据采集。



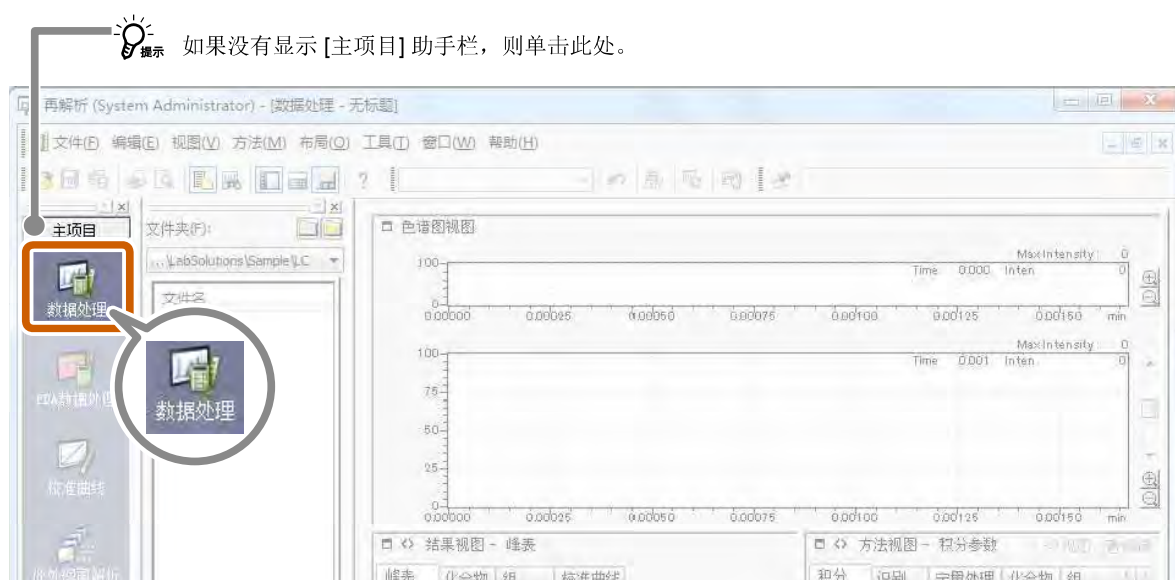
Chapter 4 数据处理

单次分析结束后，检查数据以确认是否正确检测了峰。
本章就如何更改数据文件 "Test.lcd" (通过执行单次分析获得) 的积分条件以优化积分参数进行说明。

1 打开 [再解析] 程序。

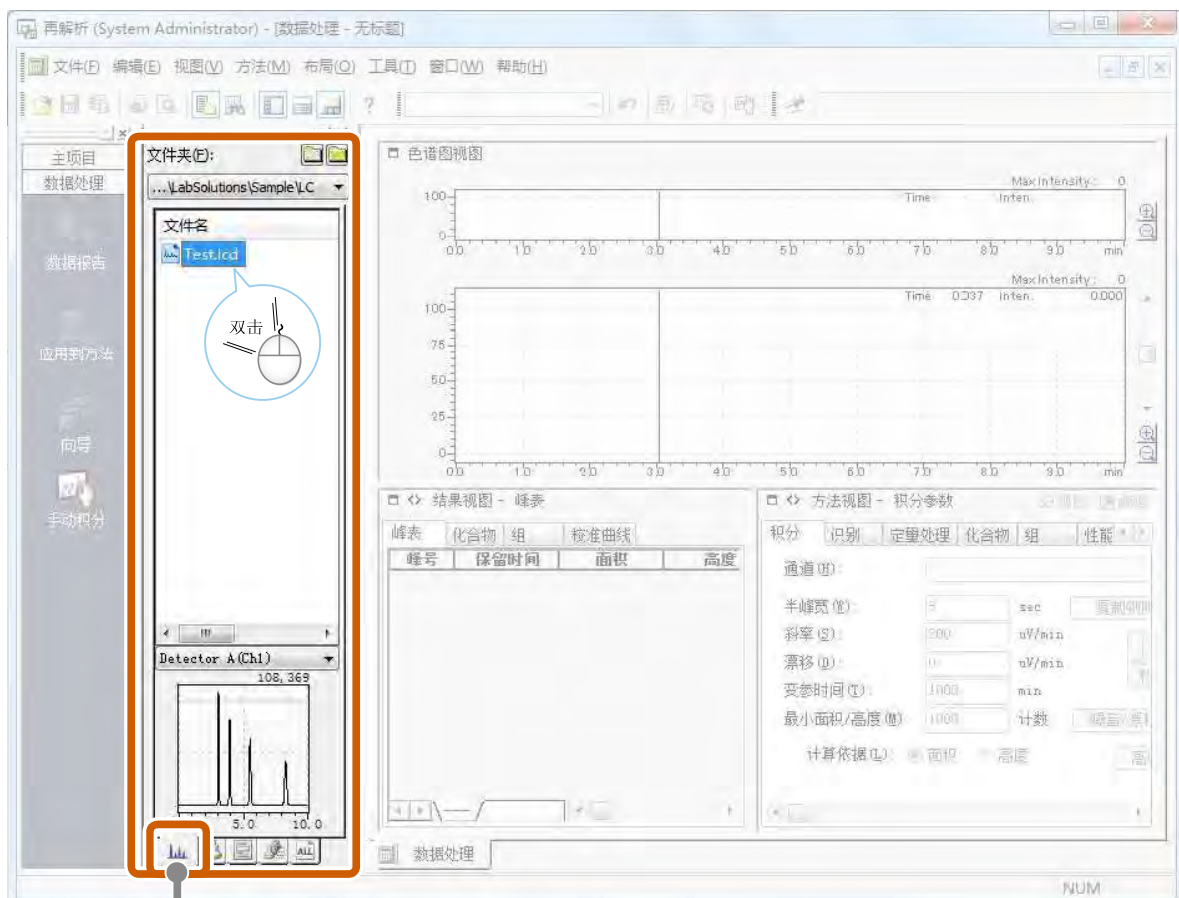



2 打开 [数据处理] 窗口。



[数据处理] 窗口打开。

3 显示 "Test.lcd"。



单击 [数据管理器] 子窗口上的 , 然后双击 "Test.lcd"。



有关 "数据处理" 窗口的详情, 请参考操作说明书中的 "数据处理" 章节。

续下页 

4 输入积分参数。

单击 **编辑** 编辑每个参数值。
单击 **视图** 在数据上执行处理，处理结果会在 [色谱图视图] 和 [结果视图 - 峰表] 中显示。

峰号	保留时间	面积	高度
1	1.864	5435	10
2	3.050	582618	10
3	3.929	524834	8
4	5.614	527234	6
5	0.200	494039	4
总计		2134241	28

斜率: 1000 uV / min
半峰宽: 5 sec



提示 半峰宽是指检测峰的最小半峰宽值 (1/2 高度处的峰宽)。

可以通过优化半峰宽值去除噪音峰。

使用斜率值确定峰的开始点和结束点。

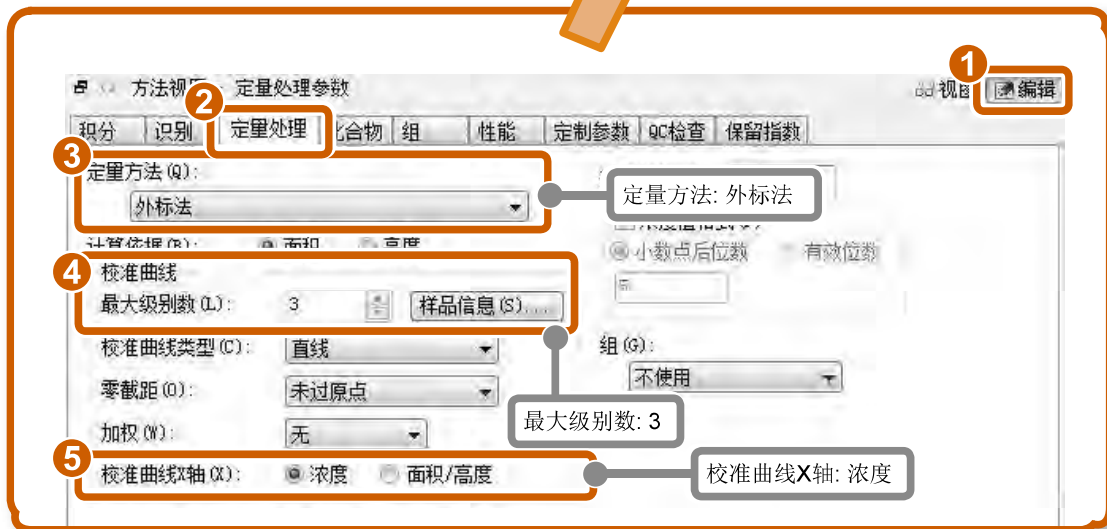
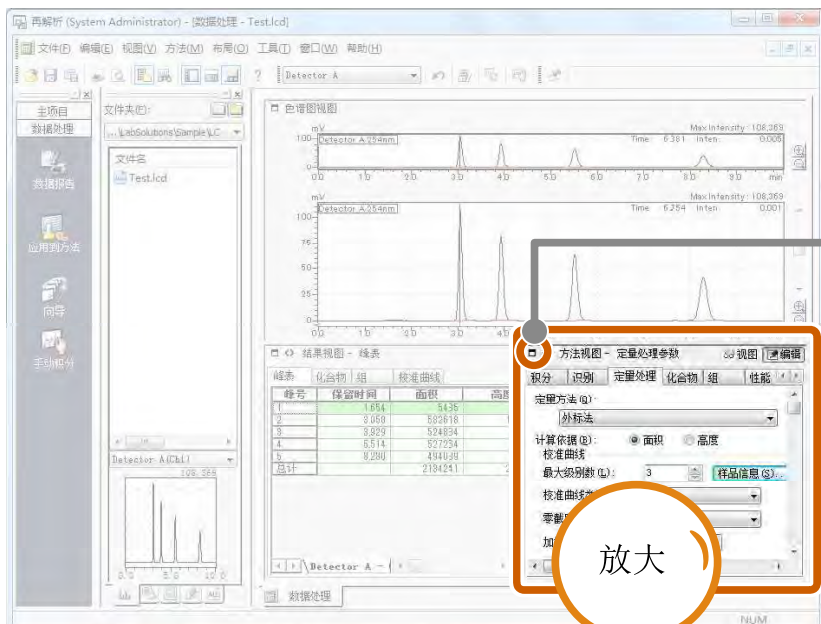
当基线斜率的绝对值变为上述值的位置时，将被作为峰的开始点和结束点。



参考

有关积分参数的详情，请参考操作说明书中“数据处理”章节的“积分参数”。

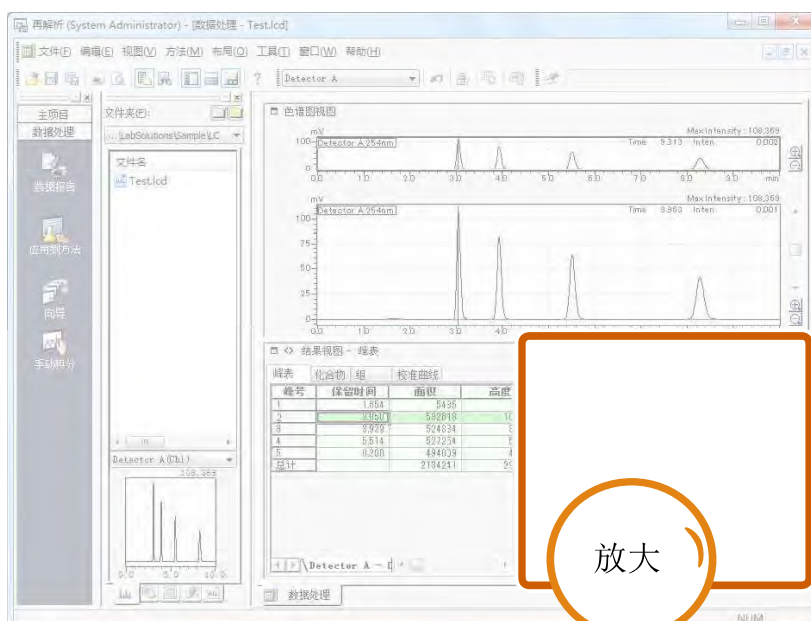
5 输入定量处理参数。



- [外标法] 方法包括使用基于标准样品的校准曲线，根据未知样品的峰面积 (高度) 计算浓度。
- 在 [最大级别数] 处，设置创建校准曲线所需的标准样品的浓度点数。
- 使用最小二乘法创建校准曲线时，将 [校准曲线X轴] 设置为 [浓度]。

续下页

6 填充化合物表。

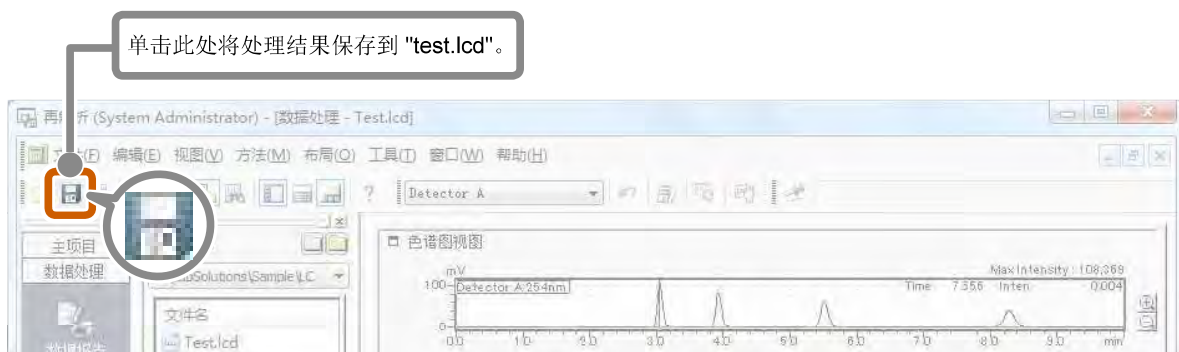


- 执行数据采集所获得的结果将用于 [保留时间 (min)]。
- 选择 [保留时间 (min)] 单元格，然后单击 [色谱图视图] 中的峰，该峰的保留时间将自动输入到当前选择的 [保留时间 (min)] 单元格中。
只需单击鼠标即可设置保留时间。

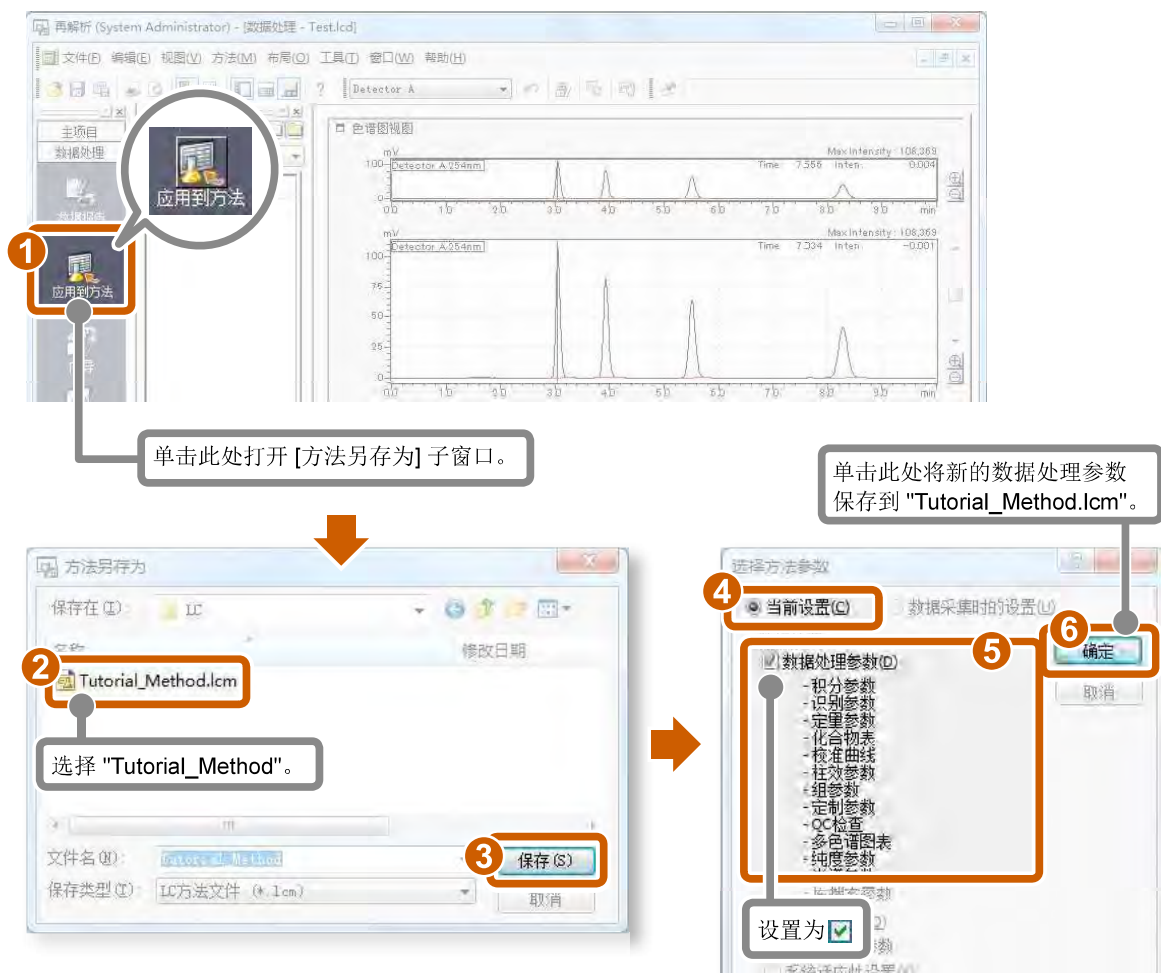


有关设置保留时间的详情，请参考操作说明书中 "数据处理" 章节的 "使用鼠标得到的化合物表保留时间"。


7 将处理结果保存到数据文件。



8 保存方法文件。



提示 要想将已保存的数据处理参数用于其他数据，执行下列任一操作，将新的数据处理参数保存到方法文件（本例中为 "Tutorial_Method.lcm"）。

- 单击 [文件] 菜单上的 [保存数据文件 / 方法文件]。
- 在 [数据处理] 助手栏上单击  (应用到方法) (在上述步骤 8 中操作)。

Chapter 5 批处理分析

对多个样品连续进行数据采集 (批处理分析) 时, 必须首先创建批处理表。使用 LabSolutions 的表简单设置功能可以轻松创建批处理表。

5.1 创建批处理表

在以下示例中, 通过将标准样品设置到第 1 ~ 第 3 行, 并将未知样品设置到第 4 和第 5 行来创建批处理表。

1 打开 [分析] 程序。



2 打开 [批处理分析] 窗口。



[批处理分析] 窗口打开。

3 编辑批处理表。

将 [标准样品] 设置为 。
 样品瓶号: 1 ~ 3
 进样体积: 10 µL
 进样次数: 3
 数据文件名: Tutorial_Std

选择 [新建]。

将 [未知样品] 设置为 。
 样品瓶号: 4 ~ 5
 进样体积: 10 µL
 数据文件名: Tutorial_Unk

单击此处创建含有 11 行的批处理表。

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1			1:标准 (I)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2
7	3	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3
8	3	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3
9	3	1			1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3
10	4	1			0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0
11	5	1			0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk002.lcd	0



在批处理表中，可设置每个样品的样品信息以及输出报告。



有关编辑批处理表的详情，请参考操作说明书中“批处理分析”章节的“编辑批处理表”以及“校准曲线”章节的“编辑批处理表”。

在 [样品瓶号] 中输入“-1”，可以在未从自动进样器进样时获得数据。

续下页

4 复制单元格。

文件表: C:\LabSolutions\Sample\LC

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1				Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2

1 选择此处。

2 向下填充(N)

3 行号(包): 1 9

4 样品名: Paraben Mixture

5 确定

↓

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1	Paraben Mixture		1:标准 (I)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2
7	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3
8	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3
9	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3
10	4	1			0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0

5 输入序列号。

文件表: C:\LabSolutions\Sample\LC

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1	Paraben Mixture		1:标准 (I)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2
7	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3
8	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3
9	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3
10	4	1			0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0
11	5	1			0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk002.lcd	0

选择此处。

1 填充系列(I)

2 行号(包): 10 11

3 样品ID: Unknown01

4 确定

5 确定

↓

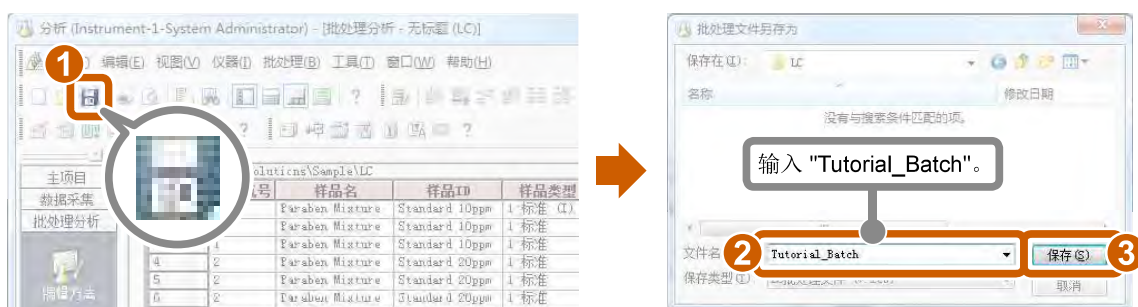
分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1	Paraben Mixture		1:标准 (I)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2
7	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3
8	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3
9	3	1	Paraben Mixture		1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3
10	4	1		Unknown01	未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0
11	5	1		Unknown02	未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk002.lcd	0

6 直接在批处理表中输入剩余项目以创建如下所示的批处理表。

文件夹 : C:\LabSolutions\Sample\LC

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号
1	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1:标准 (1)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1
2	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1
3	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1
4	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2
5	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2
6	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2
7	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3
8	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3
9	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3
10	4	1	Sample A	Unknown01	0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0
11	5	1	Sample B	Unknown02	0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk002.lcd	0

7 保存批处理文件。



LabSolutions

应用

通过快速批处理分析创建批处理表

可通过快速批处理分析创建批处理表。

1 快速批处理分析(F6)

2 输入样品信息。

3 选择样品类型和样品瓶。

4 添加到批处理表

单击此处，将添加到批处理表中。该图像为标准样品批处理表的创建示例。
重新设置未知样品的 ② 和 ③，并添加到批处理表中。

5 开始批处理分析。

开始批处理分析。

编辑	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	进样体积	输出报告
6	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	2	10	
7	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	3	10	
8	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	3	10	
9	3	1	Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	3	10	
10	4	1	Sample A	Unknown001	0 未知	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	0	10	
11	5	1	Sample B	Unknown002	0 未知	Tutorial_Method.lcm	(自动命名文件)	0	10	



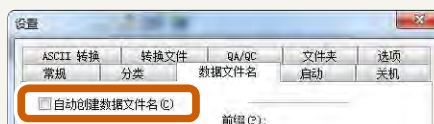
参考

有关详细的操作方法和对应型号请参考帮助。



提示

如果数据文件名显示为“(自动命名文件)”，将无法直接输入。需要直接输入文件名时，单击 [快速批处理分析] 窗口中的 [设置] 按钮，取消选择 [设置] 窗口中 [数据文件名] 标签的 [自动创建数据文件名]。



5.2

批处理分析

使用创建的批处理表执行批处理分析。

1 将样品放入自动进样器中。

样品瓶 1 (级别 1)	对羟基苯甲酸酯混合样品	10 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 2 (级别 2)	对羟基苯甲酸酯混合样品	20 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 3 (级别 3)	对羟基苯甲酸酯混合样品	40 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 4	未知样品 (将要进行定量)	
样品瓶 5	未知样品 (将要进行定量)	

2 开始批处理分析。

分析	样品瓶号	样品瓶架	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别
1	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1 标准 (1)	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4001.lcd	
2	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4002.lcd	
3	1	1	Paraben Mixture	Standard 10ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4003.lcd	
4	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4004.lcd	
5	2	1	Paraben Mixture	Standard 20ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4005.lcd	
			Paraben Mixture	Standard 20ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4006.lcd	
			Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4007.lcd	
			Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4008.lcd	
			Paraben Mixture	Standard 40ppm	1 标准	Tutorial_Method.lcm	tutorial_St4009.lcd	
			Sample A	Unknown01	0 未知	Tutorial_Method.lcm	tutorial_Unk001.lcd	
			Sample B	Unknown02	0 未知	Tutorial_Method.lcm	tutorial_Unk002.lcd	

LC正在分析

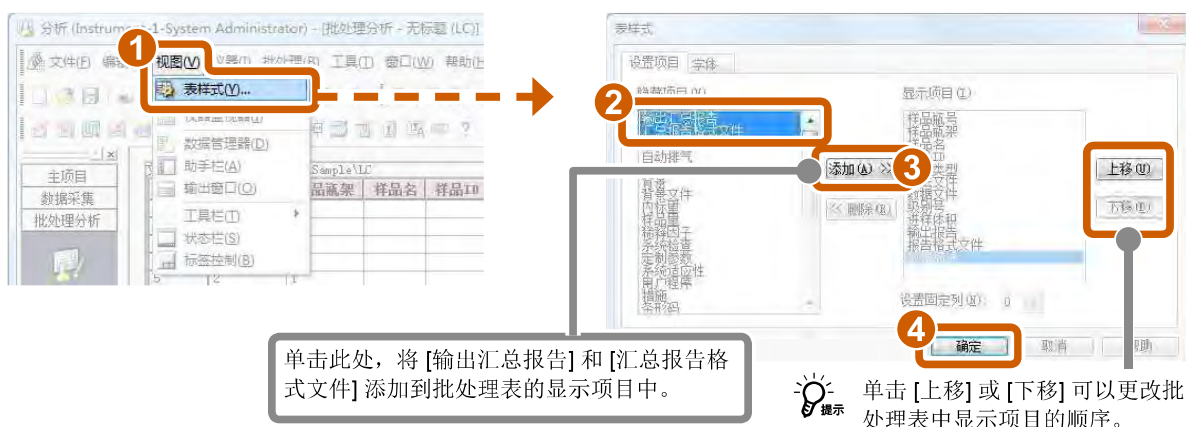
单击此处可中途取消数据采集。
要在批处理分析期间编辑批处理表的内容, 单击 [暂停] 图标可暂停批处理分析。

LabSolutions

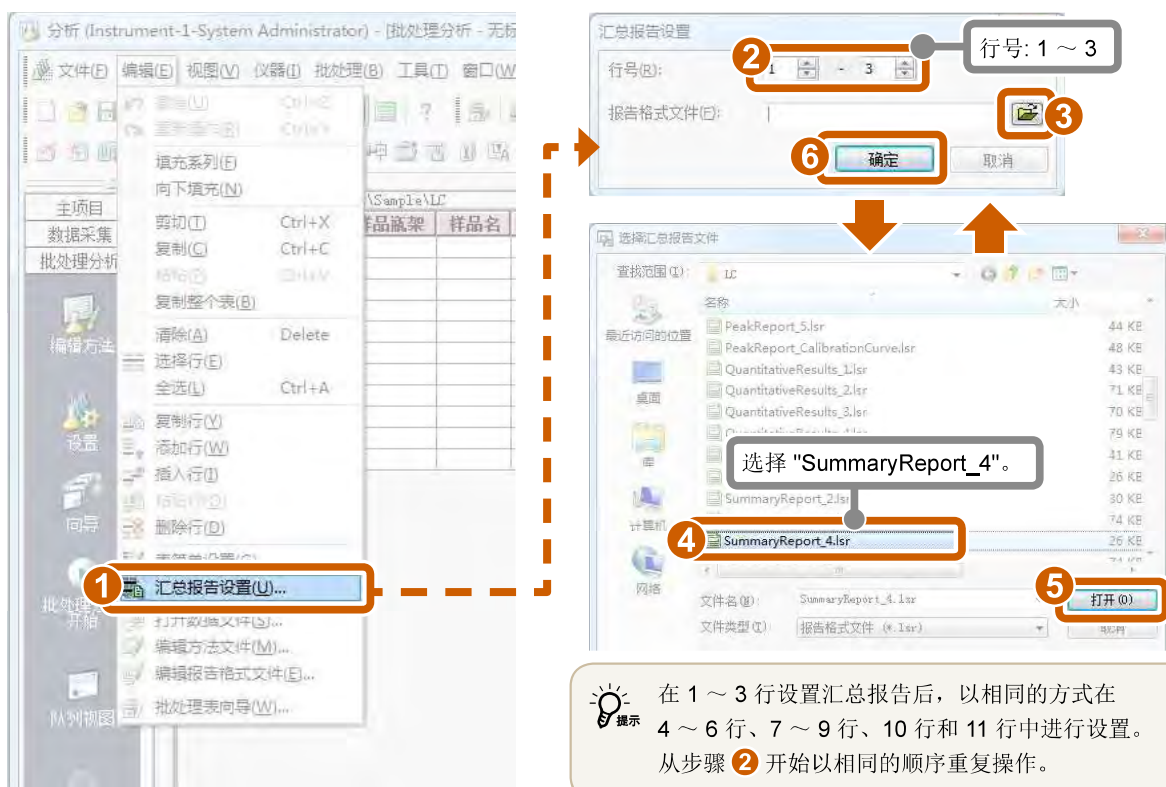
应用

打印汇总报告

1 添加批处理表中显示的项目。



2 设置汇总报告。



续下页

3

检查汇总报告的输出配置。

分析	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	识别号	进样体积	报告格式文件	输出汇总报告	汇总报告格式文件
1	Standard 10ppm	1:标准 (L)	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std001.lcd	1	10	PeakReport_1.lsr	汇总开始	SummaryReport_4.ls
2	Standard 10ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std002.lcd	1	10	PeakReport_1.lsr	汇总分析	
3	Standard 10ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std003.lcd	1	10	PeakReport_1.lsr	汇总结束	
4	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std004.lcd	2	10	PeakReport_1.lsr	汇总开始	SummaryReport_4.ls
5	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std005.lcd	2	10	PeakReport_1.lsr	汇总分析	
6	Standard 20ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std006.lcd	2	10	PeakReport_1.lsr	汇总结束	
7	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std007.lcd	3	10	PeakReport_1.lsr	汇总开始	SummaryReport_4.ls
8	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std008.lcd	3	10	PeakReport_1.lsr	汇总分析	
9	Standard 40ppm	1:标准	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Std009.lcd	3	10	PeakReport_1.lsr	汇总结束	
10	Unknown01	0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk001.lcd	0	10	PeakReport_1.lsr	汇总开始	SummaryReport_1.ls
11	Unknown02	0:未知	Tutorial_Method.lcm	Tutorial_Unk002.lcd	0	10	PeakReport_1.lsr	汇总结束	

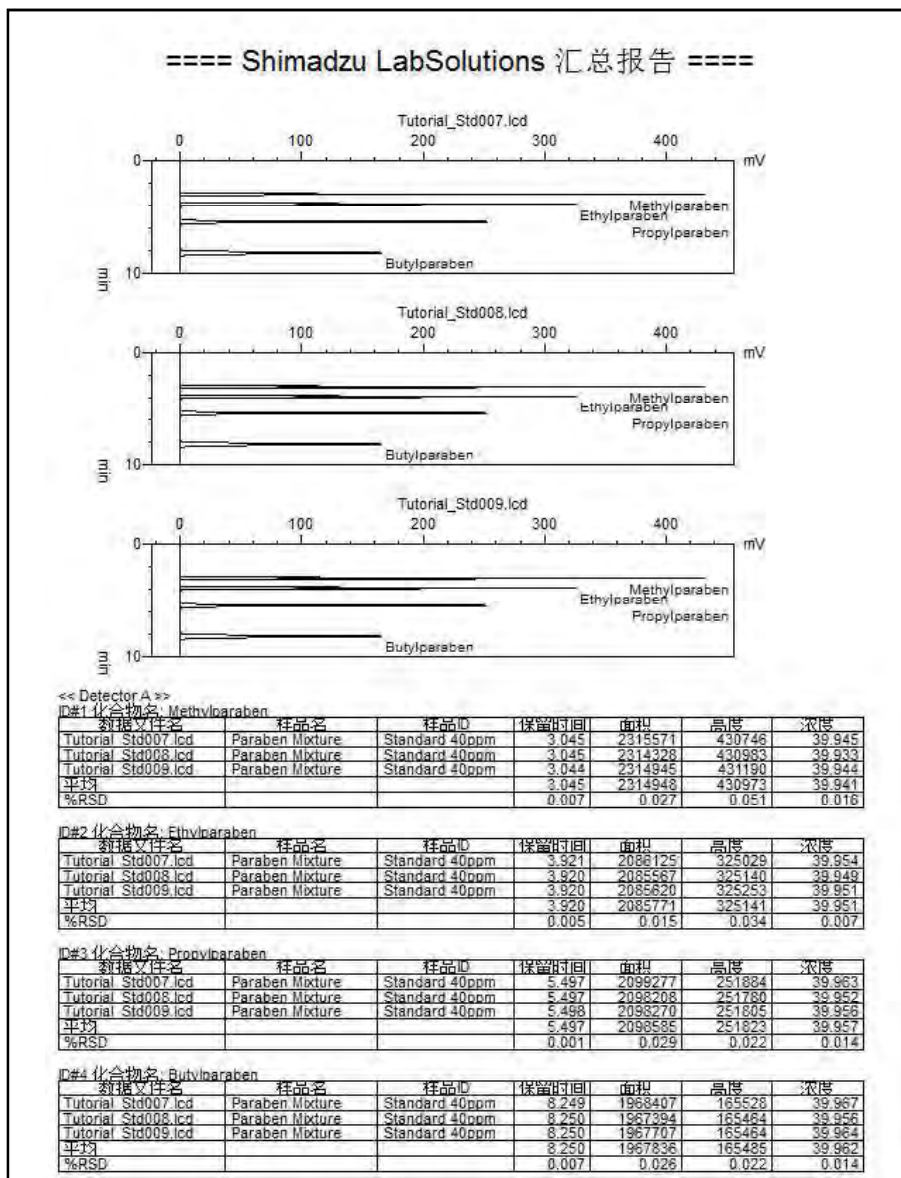
完成汇总报告的输出配置后，执行批处理分析以打印汇总报告。



有关执行批处理分析的详情，请参考第 34 页的 "5.2 批处理分析"。

■ [打印输出示例]

标准样品

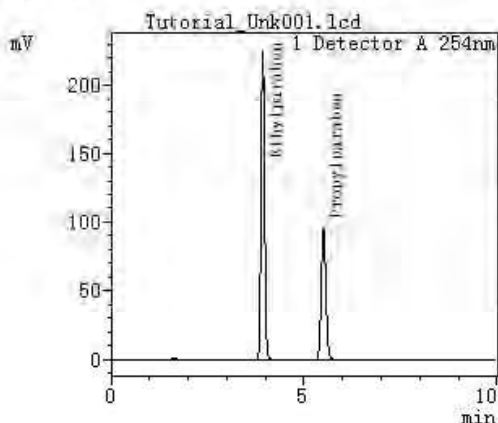


未知样品

==== Shimadzu LabSolutions 汇总报告 ====

样品名称 : Sample A
 样品ID : Unknown01
 进样体积 : 10 uL
 数据文件名 : Tutorial_Unk001.lcd
 方法文件名 : Tutorial_Method.lcm
 批处理文件名 : Tutorial_Batch.lcb
 进样体积 : 10 uL
 分析日期 : 2009/5/12 20:54:52
 处理日期 : 2010/7/9 12:02:56

分析者 : System Administrator
 处理者 : System Administrator

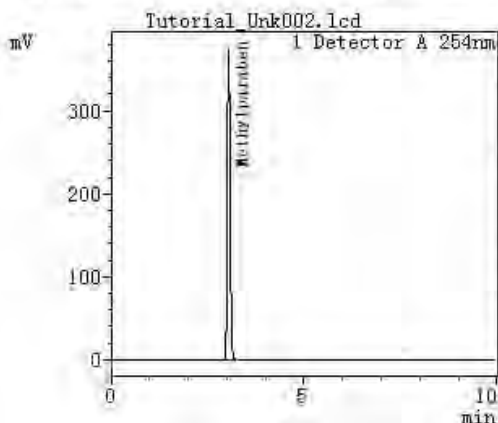


峰号	保留时间	面积	高度	ID
1	1.630	7980	521	
2	2.048	2420	262	
3	3.925	1431436	224742	2
4	5.503	790700	95203	3
总计		2232536	320730	

ID#	化合物名	浓度	浓度单位
1	Methylparaben	--	mg/L
2	Ethylparaben	27.361	mg/L
3	Propylparaben	14.965	mg/L
4	Butylparaben	--	mg/L

样品名称 : Sample B
 样品ID : Unknown02
 进样体积 : 10 uL
 数据文件名 : Tutorial_Unk002.lcd
 方法文件名 : Tutorial_Method.lcm
 批处理文件名 : Tutorial_Batch.lcb
 进样体积 : 10 uL
 分析日期 : 2009/5/12 21:05:26
 处理日期 : 2010/7/9 12:03:01

分析者 : System Administrator
 处理者 : System Administrator



峰号	保留时间	面积	高度	ID
1	1.609	9804	599	
2	2.098	6145	476	
3	3.046	1940550	373650	1
总计		1956500	374624	

ID#	化合物名	浓度	浓度单位
1	Methylparaben	33.449	mg/L
2	Ethylparaben	--	mg/L
3	Propylparaben	--	mg/L
4	Butylparaben	--	mg/L

Chapter 6

多个数据处理

LabSolutions 的 [浏览器] 程序便于检查多个数据的定量计算结果和色谱图。在 [浏览器] 程序的 [定量浏览器] 窗口中，可以检查多个数据，更改当前所选方法文件的数据处理参数以调整校准曲线，以及在多个数据上执行批处理再解析。

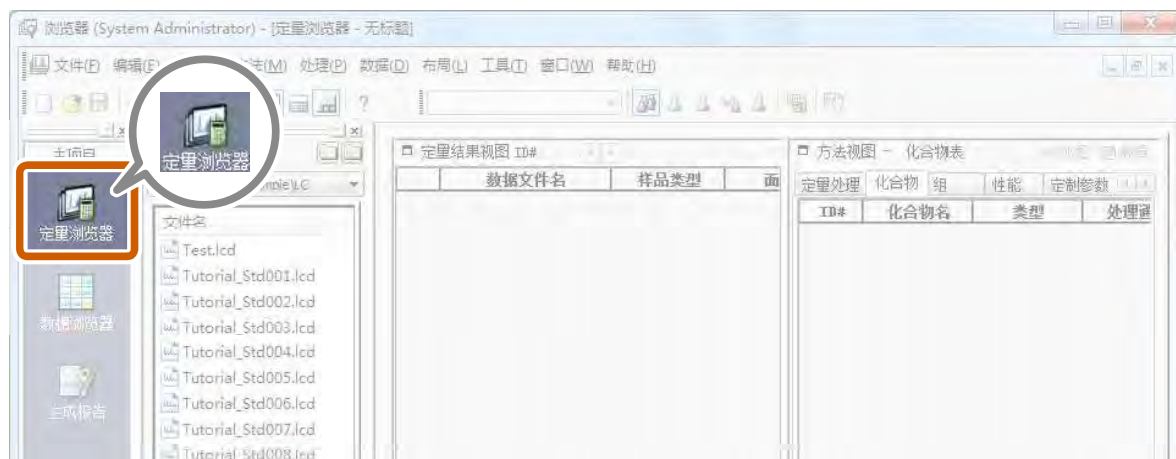


有关 "定量浏览器" 窗口的详情，请参考操作说明书中的 "定量浏览器" 章节。

1 打开 [浏览器] 程序。

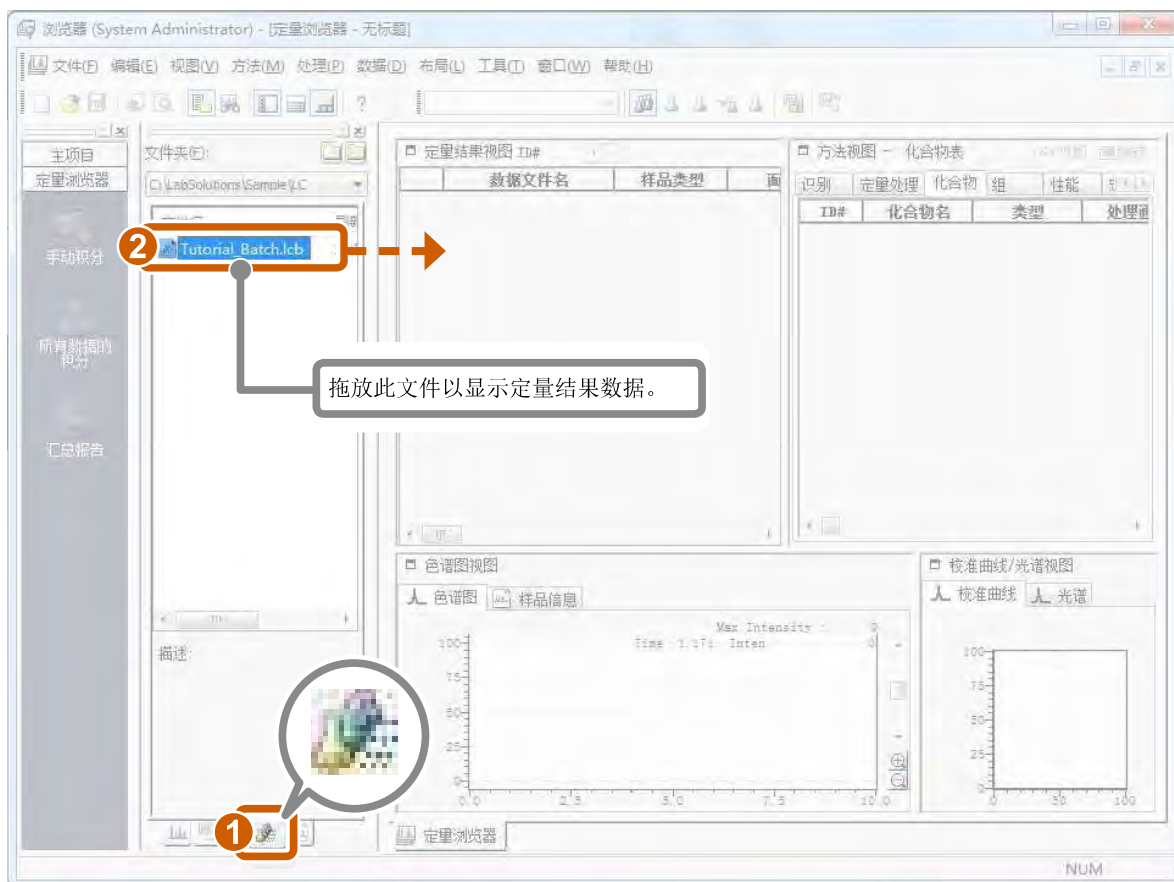


2 打开 [定量浏览器] 窗口。



打开 [定量浏览器] 窗口。

3 加载批处理文件。



续下页 

4 确认定量结果。

The screenshot displays the LabSolutions software interface for a quantitative analysis of Methylparaben. The main window is titled "定量浏览器 - Tutorial_Method.lcm".

定量结果视图 (ID# 1): This table lists 11 samples. The first 9 samples are identified as "标准 (校准点)" (Standard/Calibration Point), and the last two are "未知" (Unknown). The table is highlighted with a red border.

ID#	化合物名	类型	处理通
1	Methylparaben	目标	Detector A
2	Ethylparaben	目标	Detector A
3	Propylparaben	目标	Detector A
4	Butylparaben	目标	Detector A

方法视图 - 化合物表: This table provides details for the identified compounds, including their IDs, names, types, and the detector used.

色谱图视图: The chromatogram shows the detector response over time (0.0 to 10.0 minutes). The y-axis represents intensity, with a maximum of 100. The x-axis represents time in minutes. The plot is titled "Detector 4: 254nm Time: 4.541 Inten: -0.000".

校准曲线/光谱视图: The calibration curve shows a linear relationship between concentration and intensity. The regression equation is $y = 57642.99x + 12444.51$ with $r^2 = 0.9898000$ and $x = 0.9$. The plot is titled "校准曲线/光谱视图" and "人 校准曲线 人 光谱".

LabSolutions

应用

调整校准曲线

1

确认积分参数。

峰检测不正确时确认积分参数。

单击此处, 在所有数据上执行批处理再解析。

放大

确认已对这些值进行了适当设置。

数据文件名	样品类型
Tutorial_Std001.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std002.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std003.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std004.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std005.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std006.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std007.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std008.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std009.Lcd	标准 (校准点)
Tutorial_Std001.Lcd	未知
Tutorial_Unk002.Lcd	未知

方法视图 - 积分参数

通道 (C): Detector A - Ch1 (254nm)

半峰宽 (W): 5 sec

斜率 (S): 1000 uV/min

变参时间 (T): 1000 min

最小面积/高度 (M): 1000 计数

计算依据 (L): 面积 高度

校准曲线/光谱视图

人 校准曲线 人 光谱

$Y = 57642.99X + 12444.51$
 $r^2 = 0.9999066$ $r = 0.9$

续下页

2

确认识别参数。

没有正确识别峰时，确认识别参数和化合物表。

放大

确认已对这些值进行了适当设置。

校准曲线/光谱图

人 校准曲线 人 光谱

$Y = 57642.89X + 12444.51$
 $r^2 = 0.9999000 \quad r = 0.9999500$

NUM

3

确认化合物表。

放大

确认已进行了适当的时间设置。

校准曲线/光谱图

人 校准曲线 人 光谱

$Y = 57642.89X + 12444.51$
 $r^2 = 0.9999056 \quad r = 0.9999528$

NUM

积分	识别	定量	化合物	组	性能	定制参数	QC检查	保留指数
	ID#	化合物名	类型	处理通道				
	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)				
1	Methylparaben	目标	检测器A - Ch					
2	Ethylparaben	目标	检测器A - Ch					
3	Propylparaben	目标	检测器A - Ch					
4	Butylparaben	目标	检测器A - Ch					
5		目标	检测器A - Ch					

4 确认校准点。

放大

确认校准曲线。

数据文件名	高度	浓度 (ng/L)	标准浓度	面积%	高度	校准点
1 Tutorial_St4001.lcd	108,362	9.891	10	27.299	36.77	<input checked="" type="checkbox"/>
2 Tutorial_St4002.lcd	108,360	9.889	10	27.309	36.71	<input type="checkbox"/>
3 Tutorial_St4003.lcd	108,206	9.885	10	27.309	36.690	<input type="checkbox"/>
4 Tutorial_St4004.lcd	218,591	20.172	20	27.398	36.765	<input type="checkbox"/>
5 Tutorial_St4005.lcd	218,192	20.168	20			<input type="checkbox"/>
6 Tutorial_St4006.lcd	218,269	20.162	20			<input type="checkbox"/>
7 Tutorial_St4007.lcd	430,746	39.955	40			<input type="checkbox"/>
8 Tutorial_St4008.lcd	430,983	39.933	40			<input type="checkbox"/>
9 Tutorial_St4009.lcd	431,190	39.944	40			<input type="checkbox"/>
10 Tutorial_Unk001.lcd						<input type="checkbox"/>
11 Tutorial_Unk002.lcd	373,550	33.449		99.185	99.713	<input type="checkbox"/>

确认将第 1 行上的校准点设置为 。

校准曲线/光谱图

$$Y = 57842.39X + 12444.51$$

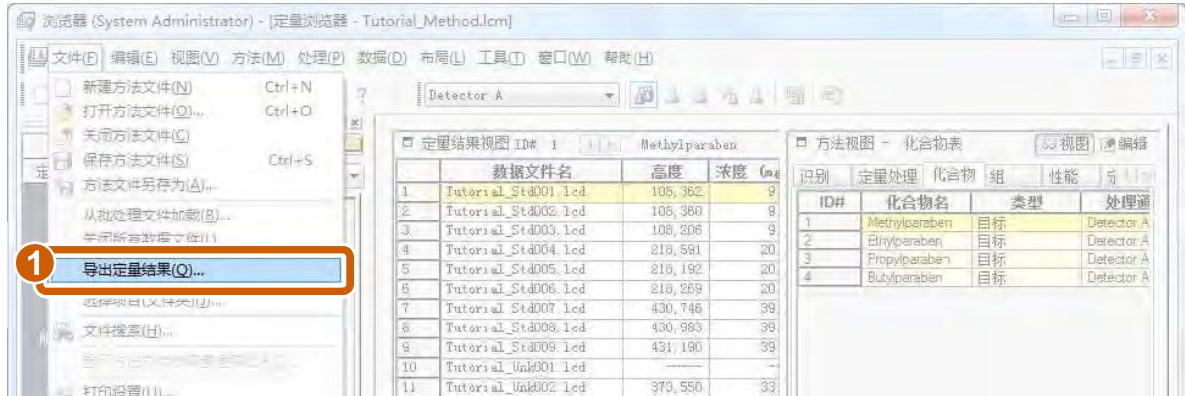
$$r^2 = 0.9998000 \quad r = 0.9999$$

5 保存方法文件和数据文件。

1

导出定量计算结果

本节就如何将定量计算结果保存为文本文件进行说明。



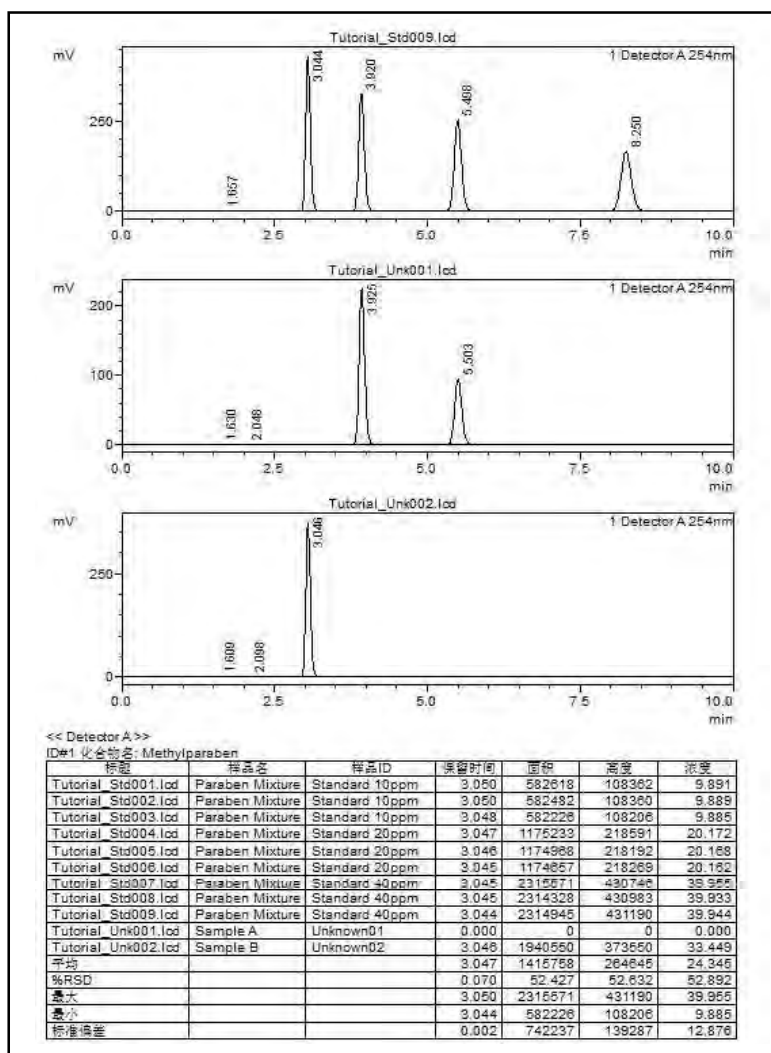
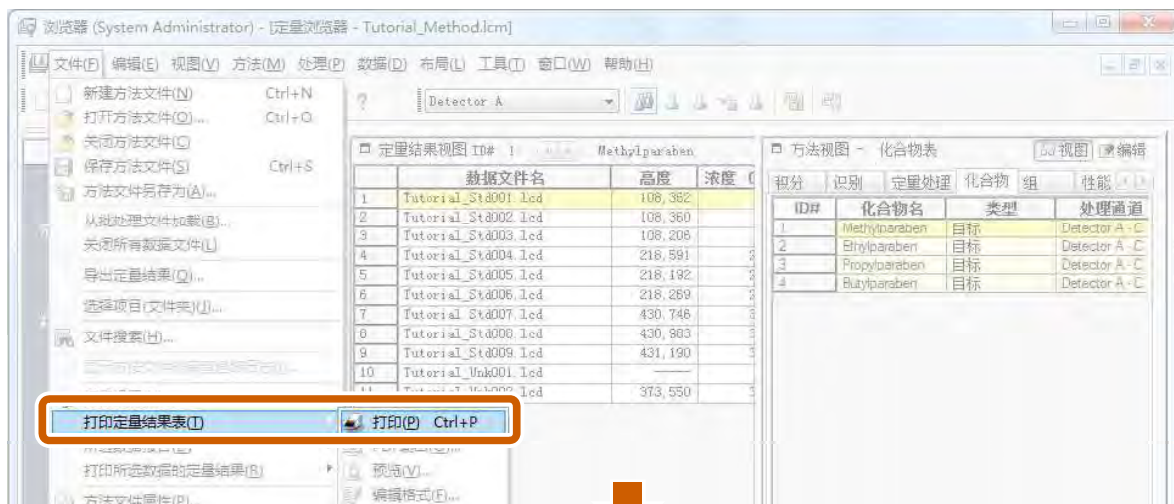
有关导出定量结果的详情，请参考操作说明书中“定量浏览器”章节的“导出定量结果”。

LabSolutions

应用

打印定量结果表

要打印浏览器报告，选择 [文件] 菜单上 [打印定量结果表] 处的 [打印]。



提示 要编辑报告格式，从 [文件] 菜单上的 [打印定量结果表] 中选择 [编辑格式]。

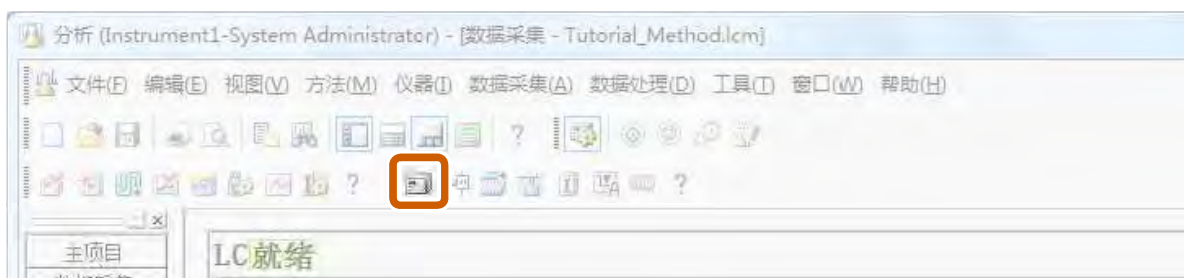
Chapter 7 关机

最后，本章对如何退出 LabSolutions 进行说明。

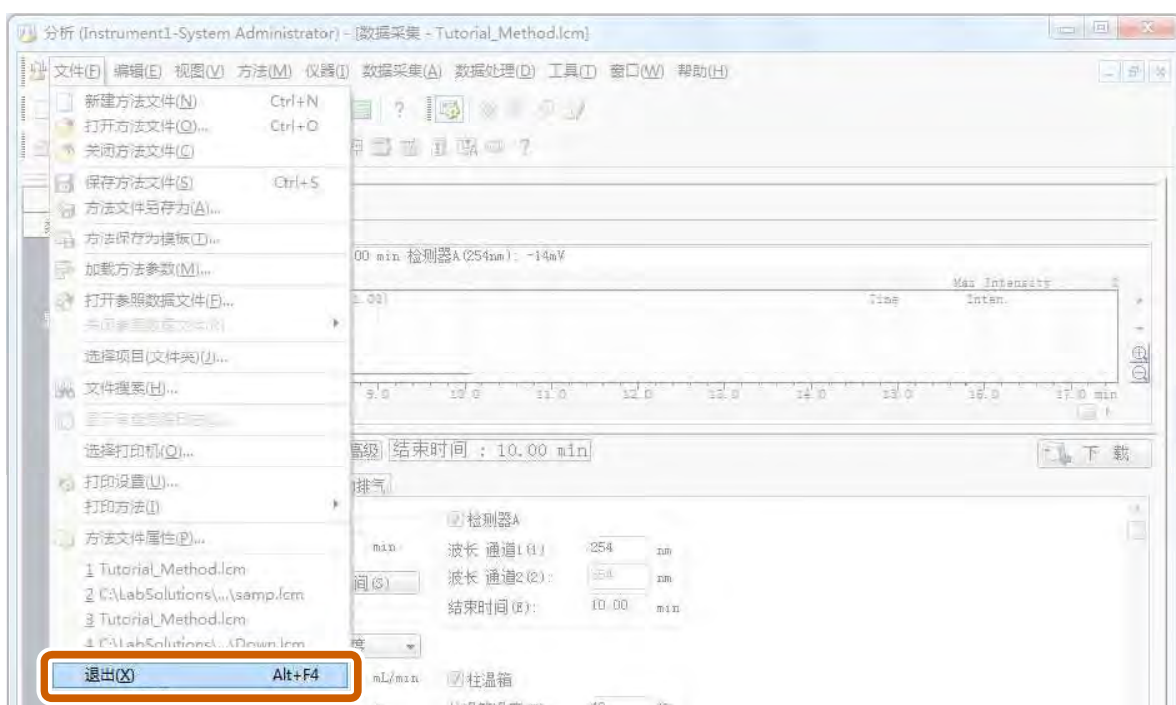
1 停止仪器操作。

停止泵的溶剂送液以及柱温箱的加热。

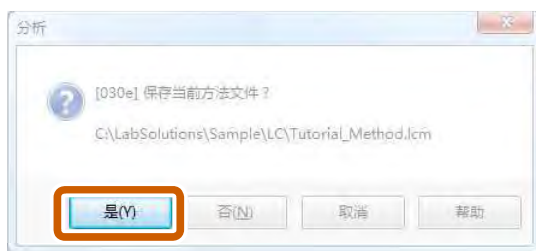
2 将 设置为 OFF。



3 柱温箱冷却后选择 [退出]。



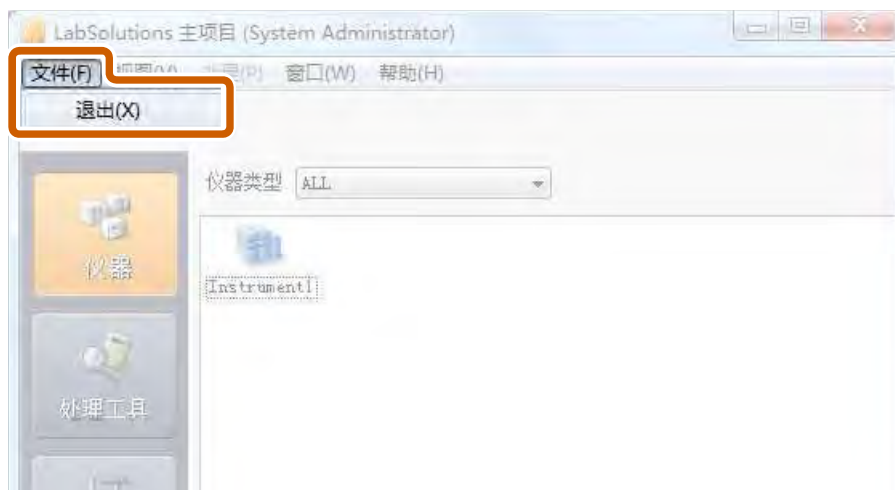
4 单击 [是]。



如果有尚未保存的文件，退出 [分析] 程序时会打开确认是否要保存文件的窗口。

5 退出 LabSolutions。

如果正打开 [再解析] 程序或 [浏览器] 程序，单击每个程序 [文件] 菜单上的 [退出] 以退出相应的程序。



6 关闭 Windows 系统，然后关闭 PC 和打印机。

7 关闭各仪器电源。