

LabSolutions

GC 入门指南

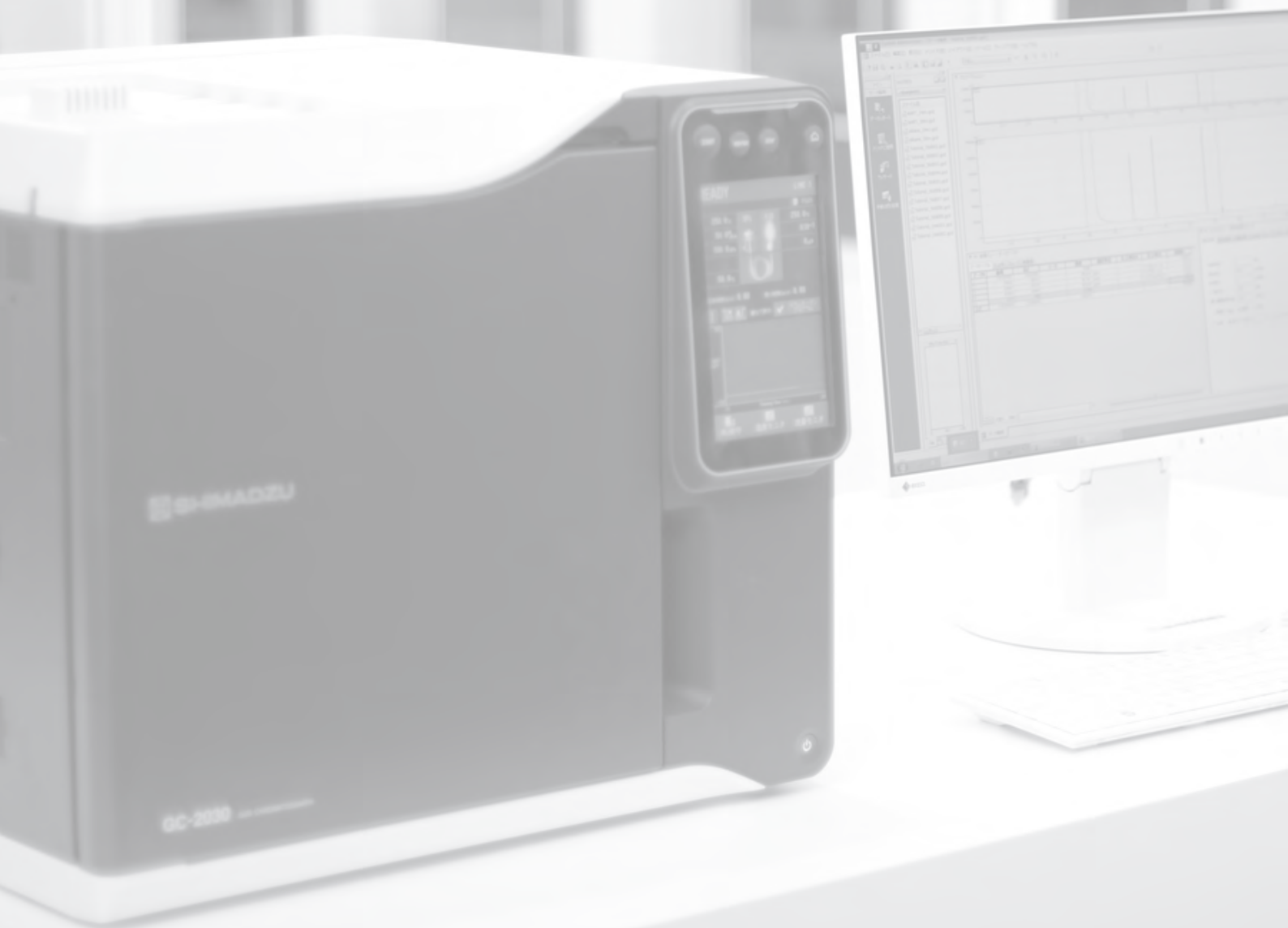
1	启动.....	12
2	设置仪器参数.....	18
3	单次分析.....	25
4	数据处理.....	27
5	批处理分析.....	33
	创建批处理表.....	33
	批处理分析.....	38
6	多个数据处理.....	42
7	关机.....	50

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。

© 2011-2016 Shimadzu Corporation. All rights reserved.

本指南是英文版《LabSolutions GC 入门指南》(223-60220)(修订版 B 2016 年 4 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。

气相色谱仪 **GC-2030 / GC-2010**

- | | |
|---------------------------|--|
| • 自动进样器 | AOC-20i |
| • 分流 / 不分流 | 进样单元 (SPL) |
| • 毛细管柱 | Stabilwax ，内径 30 m × 0.32 mm ，膜厚 0.5 μm |
| • 火焰离子化检测器 (FID) | |

文件类型

数据文件 (.gcd)

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 (.gcm)

测定条件、
分析条件、
校准曲线信息等。

批处理文件 (.gcb)

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：

柱温箱温度	50 °C (保留时间: 3 min) → 150 °C (保留时间: 2 min) (温度上升速度: 10 °C / min)
进样口温度	250 °C
载气	氮气, 线速: 40 cm / sec, 线速模式
进样方法	分流法
分流比	1: 25
检测器温度	250 °C
样品	醇类混合样品, 100、500 和 1000 ppm 标准样品, 以及 2 份未知样品

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。



3 单次分析第 25 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 27 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。

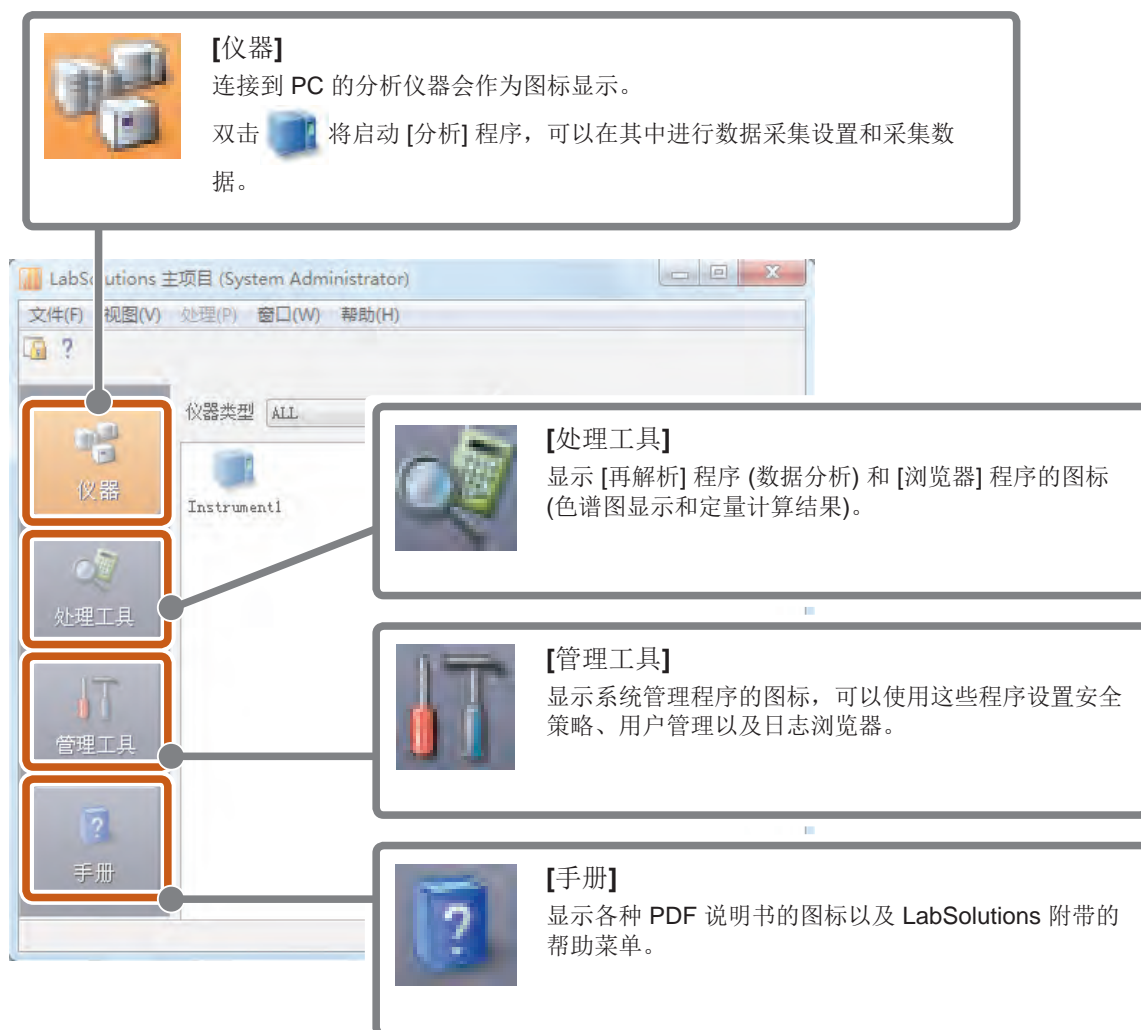



5 批处理分析第 33 页



6 多个数据处理第 42 页

LabSolutions 主窗口



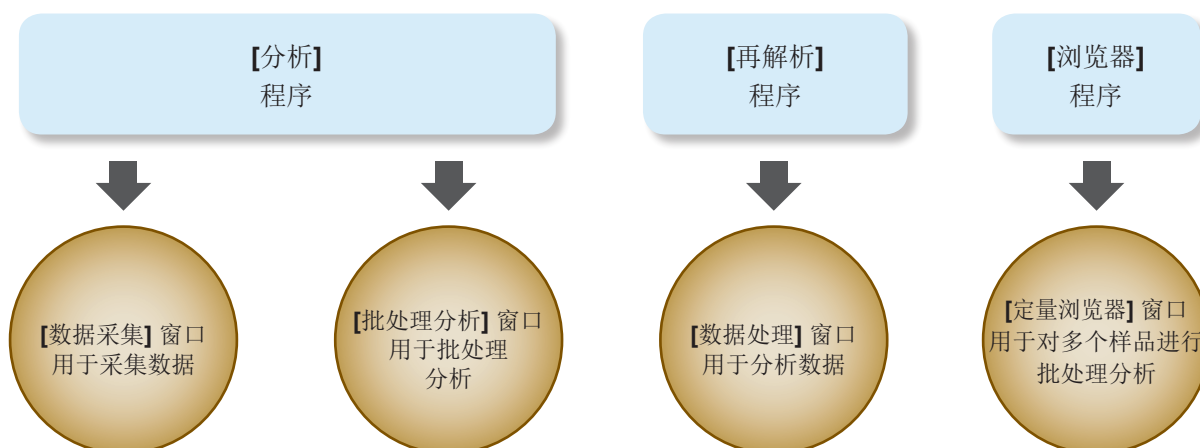
【仪器】
连接到 PC 的分析仪器会作为图标显示。
双击  将启动 [分析] 程序，可以在其中进行数据采集设置和采集数据。

【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。

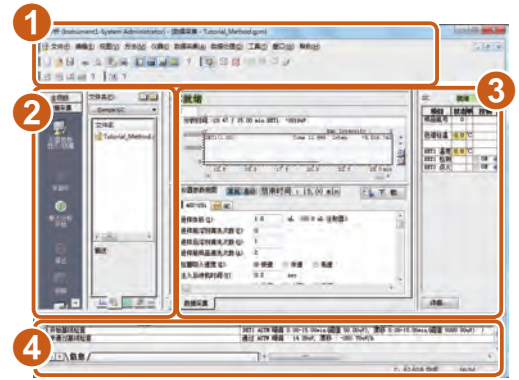
【手册】
显示各种 PDF 说明书的图标以及 LabSolutions 附带的帮助菜单。

LabSolutions 的主要程序和主要窗口



LabSolutions 窗口

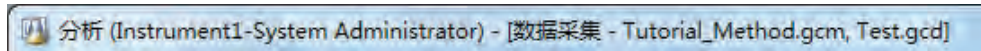
以下示例对 [分析] 程序窗口进行说明。



1

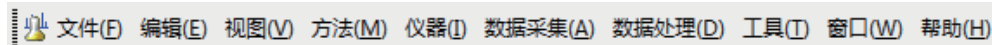
标题栏

该栏显示当前程序、窗口、加载文件的名称以及其他信息。



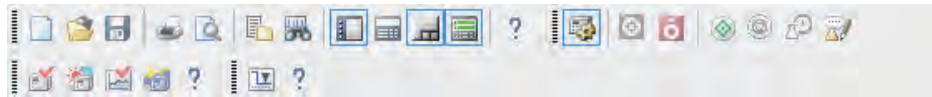
菜单栏

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。



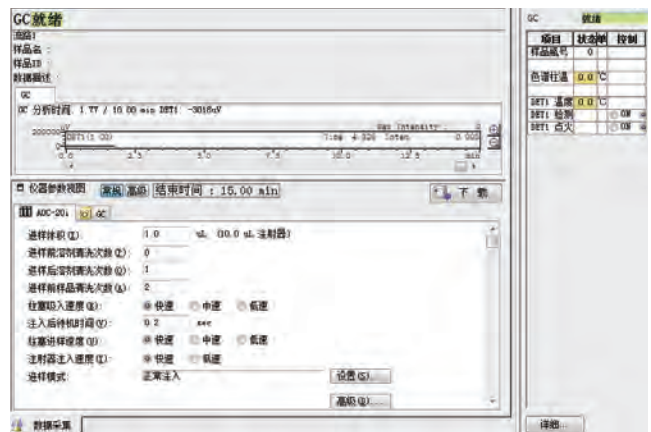
3

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。

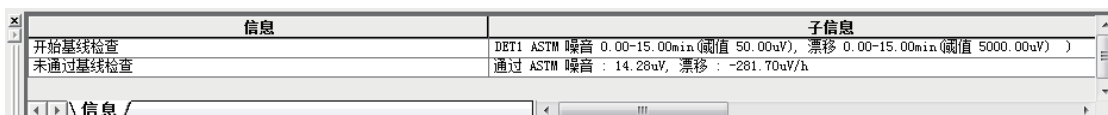
通过单击助手栏上的图标来切换窗口。仪器监视器 (窗口的右侧) 检查采集条件和连接情况。



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 18 页



3 单次分析第 25 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 33 页

▼[分析] 程序

▼[批处理分析] 窗口

▲主窗口

分析	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出汇总报告	汇总报告格式文件
1	1:标准 (1)	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14001.gcd	1	汇总报告	SummaryReport_1.rpt
2	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14002.gcd	1	汇总报告	SummaryReport_2.rpt
3	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14003.gcd	1	汇总报告	SummaryReport_3.rpt
4	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14004.gcd	2	汇总报告	SummaryReport_4.rpt
5	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14005.gcd	2	汇总报告	SummaryReport_5.rpt
6	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14006.gcd	2	汇总报告	SummaryReport_6.rpt
7	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14007.gcd	3	汇总报告	SummaryReport_7.rpt
8	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14008.gcd	3	汇总报告	SummaryReport_8.rpt
9	1:标准	Tutorial_Method.gem	Tutorial_S14009.gcd	3	汇总报告	SummaryReport_9.rpt
10	0:未知	Tutorial_Method.gem	Tutorial_Unknown.gcd	0	汇总报告	SummaryReport_10.rpt
11	0:未知	Tutorial_Method.gem	Tutorial_Unknown.gcd	0	汇总报告	SummaryReport_11.rpt

数据处理和定量计算：
从主窗口中打开 [数据处理] 窗口。

参考 4 数据处理第 27 页

▼[再解析] 程序

▼[数据处理] 窗口

▲主窗口

峰号	保留时间	面积	高度
1	8.705	293120785	211
2	8.708	77942	
3	8.674	85118	
4	8.705	84398	
总计		293194791	211

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。

参考 6 多个数据处理第 42 页

▼[浏览器] 程序

▼[定量浏览器] 窗口

▲主窗口

数据文件名	样品类型	积分	识别	定量处理	化合物	组
Tutorial_S18001.gcd	标准 标准					
Tutorial_S18002.gcd	标准 标准					
Tutorial_S18003.gcd	标准 标准				1-Phenylalcohol	目标
Tutorial_S18004.gcd	标准 标准				Isobutylalcohol	目标
Tutorial_S18005.gcd	标准 标准				Isobutylalcohol	目标
Tutorial_S18006.gcd	标准 标准					
Tutorial_S18007.gcd	标准 标准					
Tutorial_S18008.gcd	标准 标准					
Tutorial_S18009.gcd	标准 标准					
Tutorial_Web001.gcd	标准 标准					
Tutorial_Web002.gcd	标准 标准					

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"GC 数据采集"。

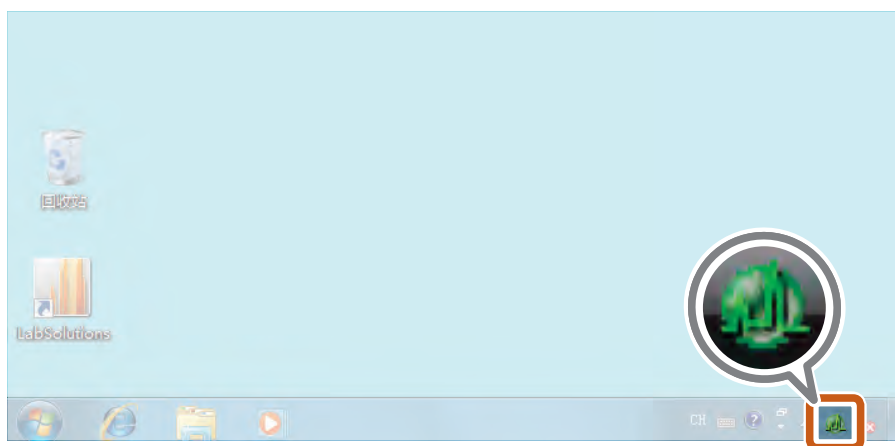
1 向 GC 供气。

打开载气和其他气体的主阀以向 GC 供气。

2 打开 GC 和外围设备。

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。

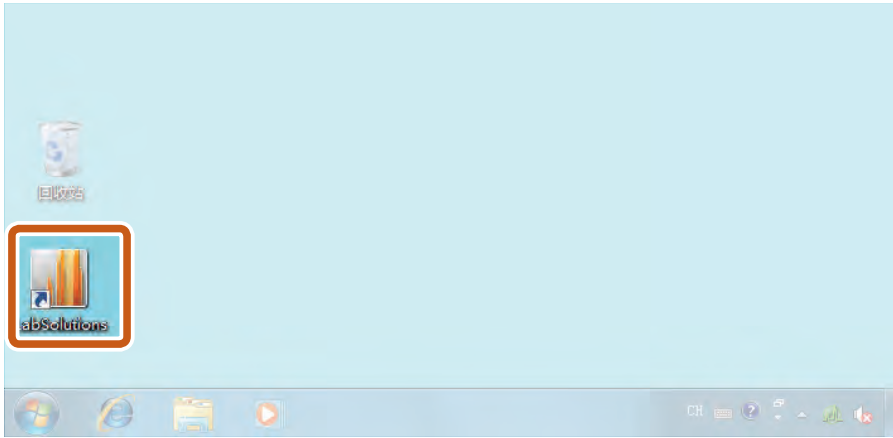


如果该图标呈黄色显示，则表示 LabSolutions 正在启动中。
请稍等片刻。

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 。

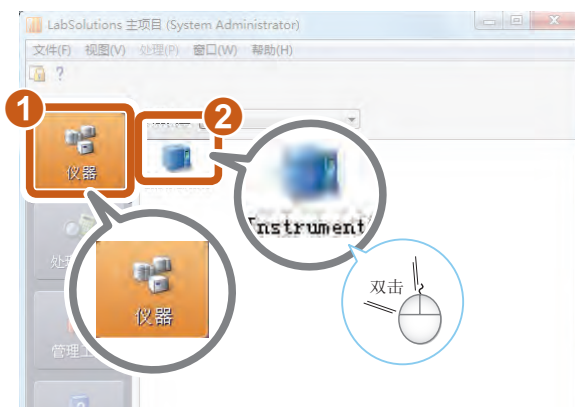
[登录] 子窗口打开。



5 登录。



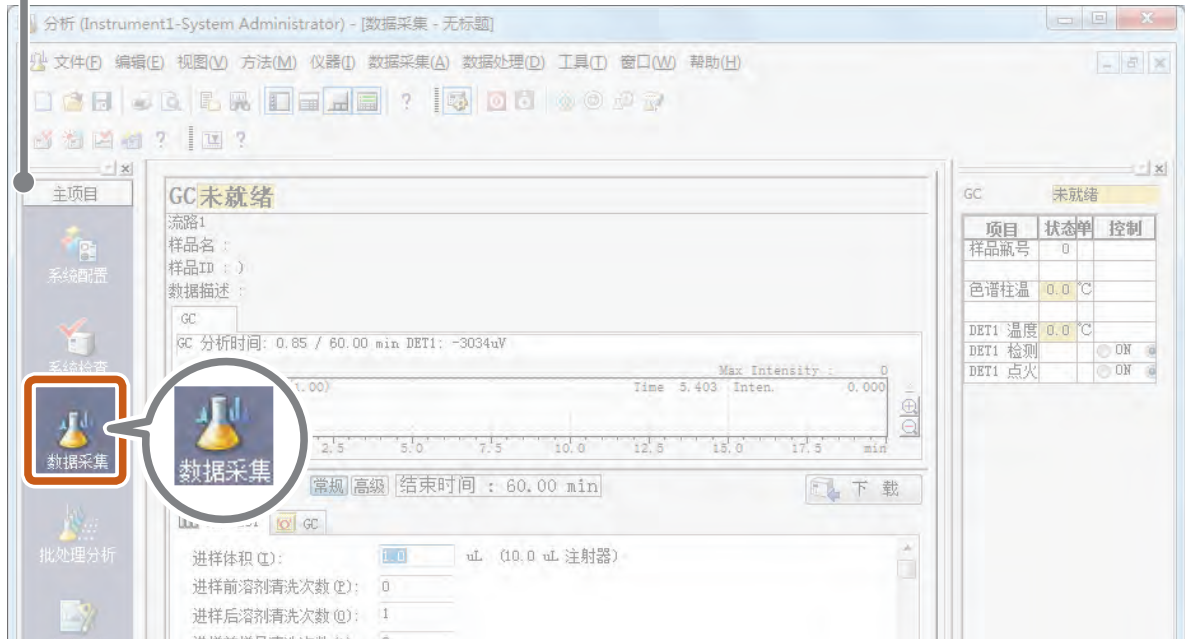
6 打开 [分析] 程序。



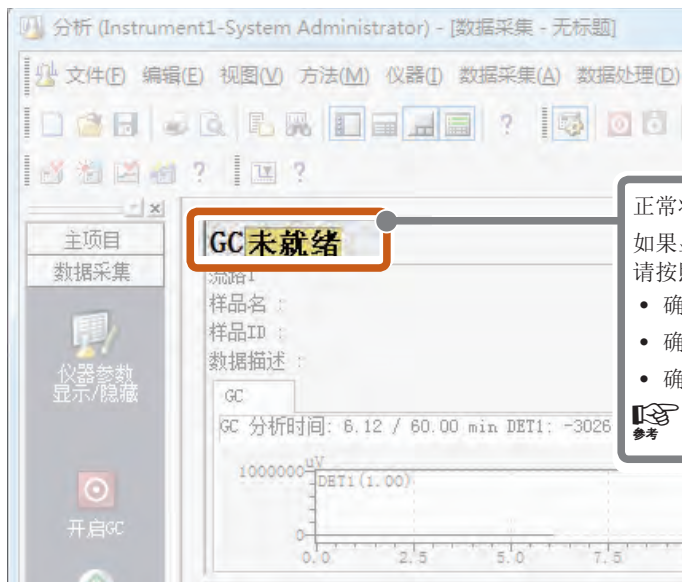
续下页 

7 打开 [数据采集] 窗口。

 提示 如果未显示 [主项目] 助手栏，则单击此处。




8 检查状态。



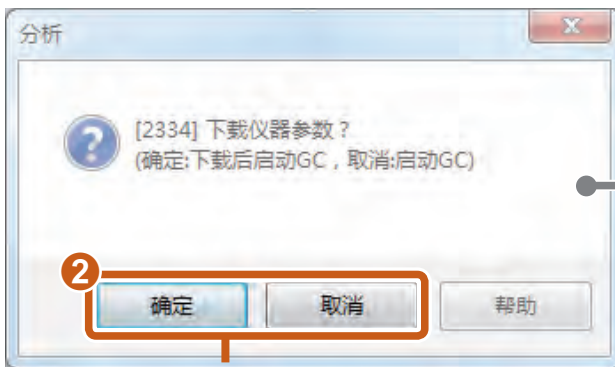
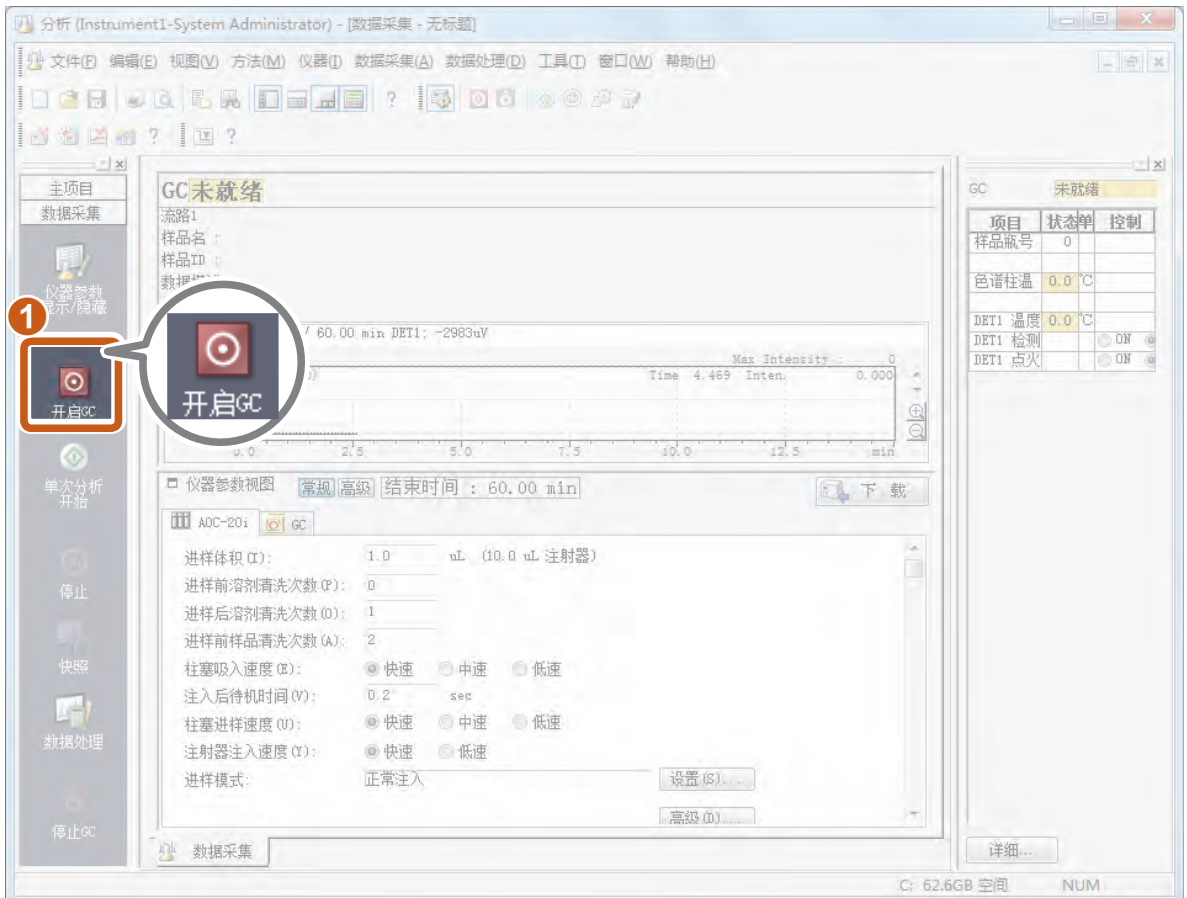
正常状态下，状态应显示为 [未就绪] 或 [就绪]。

如果显示 [未连接]，请按照以下建议操作。

- 确保电源已打开。
- 确保正确连接了仪器。
- 确保正确设置了系统配置。

 参考 有关详情，请参考第 16 页。

9 启动 GC。



有时不显示该信息。



确认在达到 GC 温度和其他预设值后，状态显示为 [就绪]。

应用

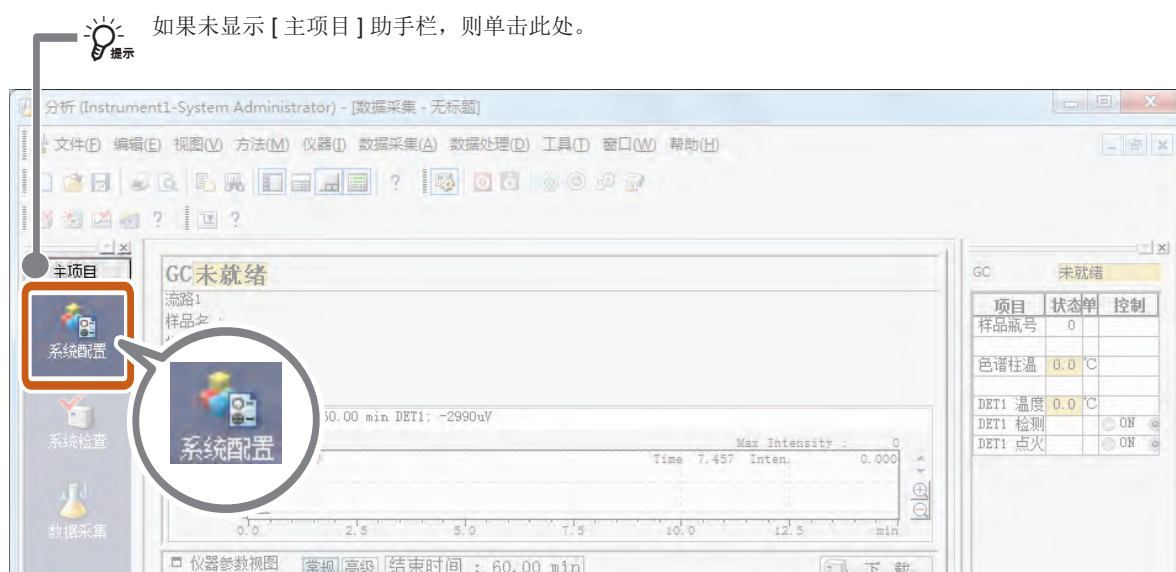
"我想要连接到系统。"

"我想要更改系统配置。"

在这种情况下，

重新设置系统配置。

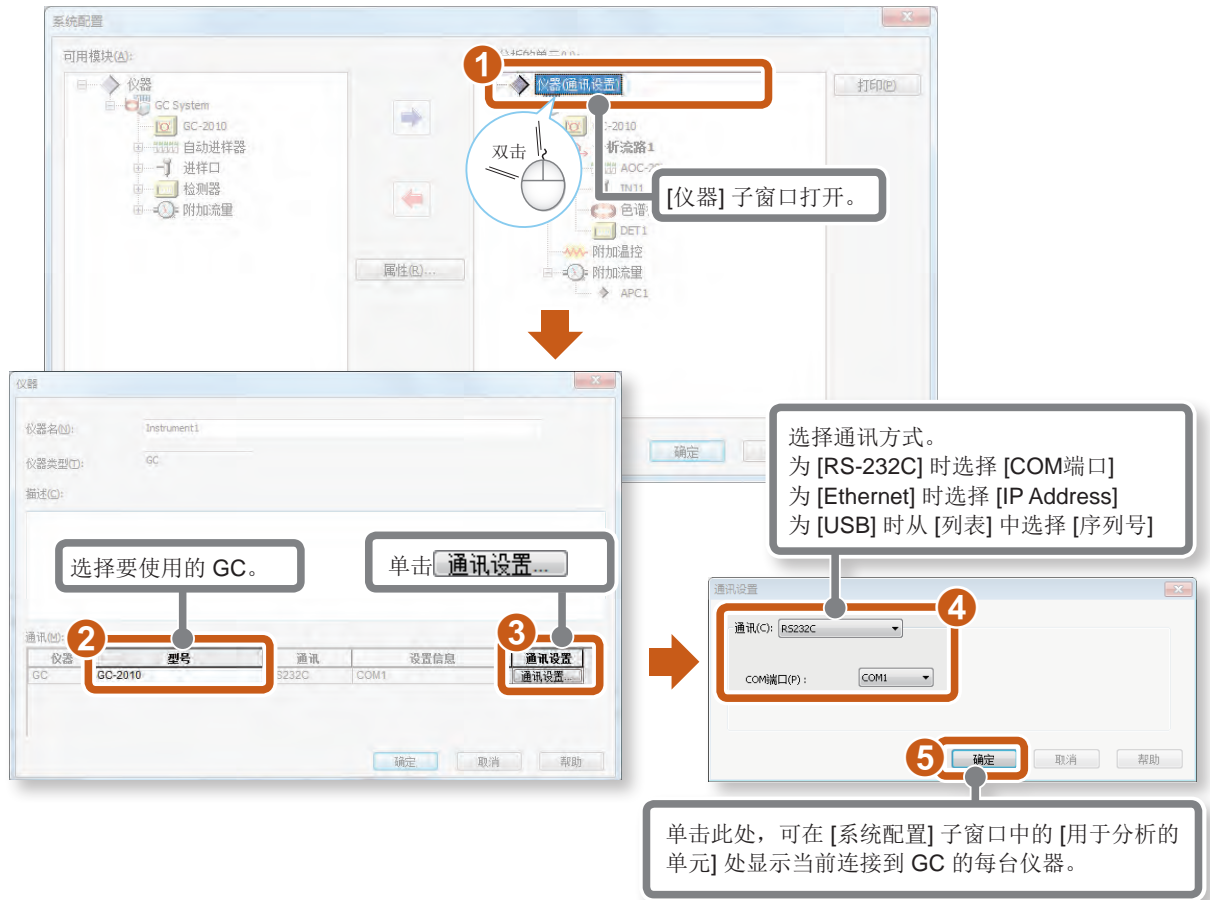
1 打开 [系统配置] 子窗口。



[系统配置] 子窗口打开。

2 设置通讯。

系统控制器和PC之间有3种类型的连接：RS-232C 电缆、USB电缆和LAN电缆。



3 检查系统配置是否正确。



Chapter 2

设置仪器参数

在 [数据采集] 窗口中的 [控制面板] 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。

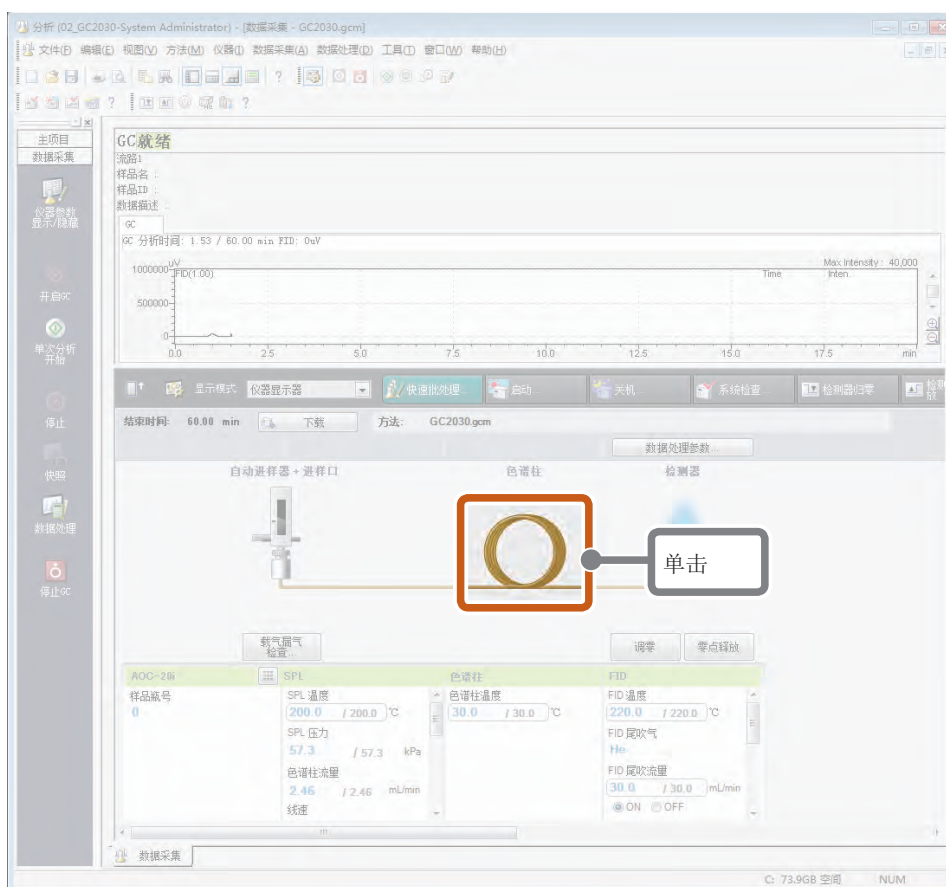


切换显示设置

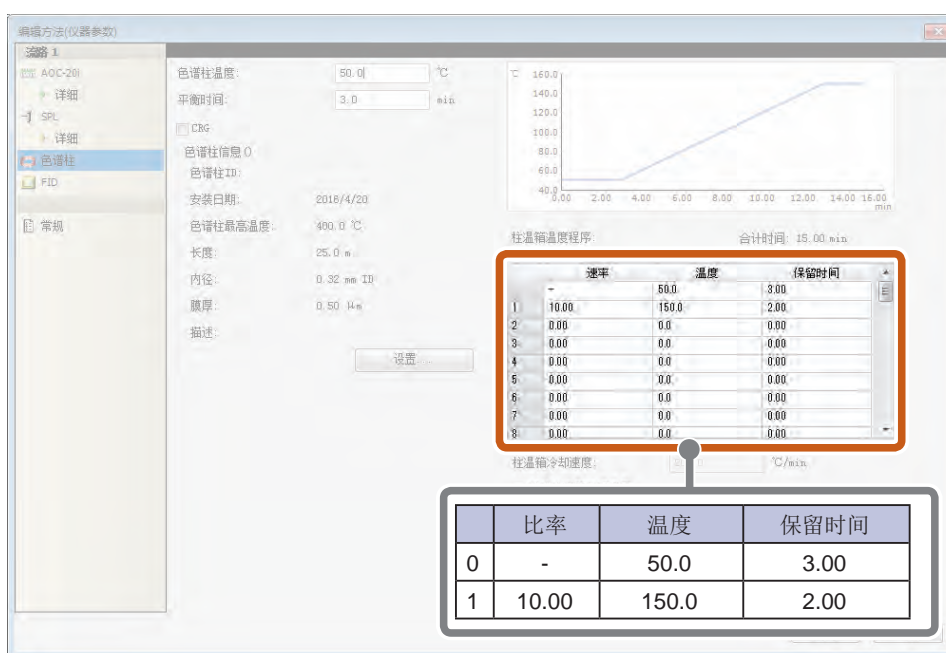
在 [视图] 菜单的 [仪器参数视图的显示设置] 窗口设置是显示 [控制面板] 还是显示 [仪器参数视图]。在 [仪器参数视图] 窗口还可设置分析条件。

- 连接GC-2030时、可在 [控制面板] 的 [显示模式] 中通过选择 [仪器显示器] 和 [仪器参数] 简单进行切换。

2 单击 [控制面板] 的 [色谱柱]。



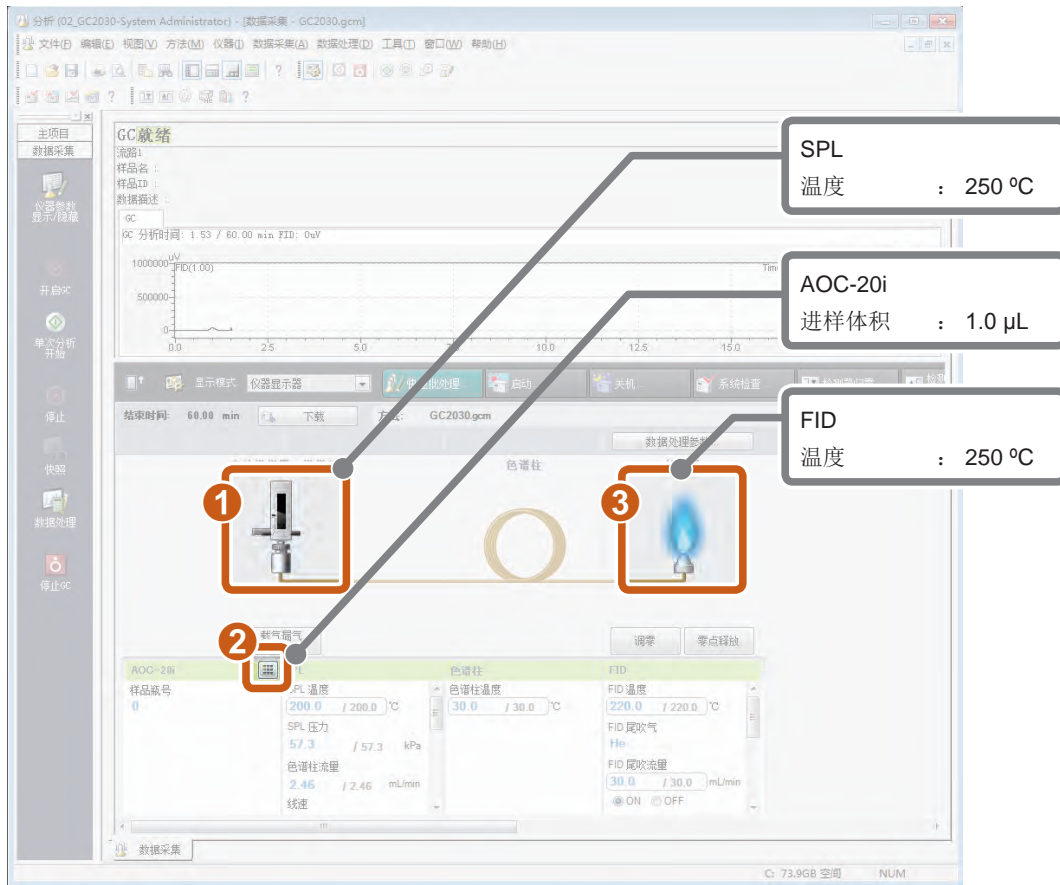
3 编辑色谱柱温度程序的时间表。



续下页 

4

单击其他单元后设置各项目。



连接 GC-2030 时，在编辑方法 (仪器参数) 高级窗口中的浏览器栏单击单元后也可切换要编辑的单元。



连接 GC-2010 时，单击方法编辑 (仪器参数) 窗口中的单元标签也可切换要编辑的单元。



5 保存数据采集条件。

此处初始显示的文件夹为缺省文件夹。要更改缺省文件夹，
 请参考 第 24 页的"缺省文件夹和更改缺省文件夹"

输入 "Tutorial_Method"。

单击此处可将数据采集条件下载到仪器。

4 下载

GC就绪

样品名：
 样品ID：
 数据描述：

GC

GC 分析时间：1.97 / 15.00 min DET1: -2998uV

方法文件另存为

保存在：GC

名称

没有与搜索条件匹配的项。

修改日期

文件名称 (F): Tutorial_Method

保存类型 (T):

保存 (S)

取消

结束时间：60.00 min 方法：GC2030.gcm

快速批处理 启动 关机 系统检查 检测器归零

自动进样器 + 进样口 色谱柱 检测器

载气/燃气 检查 调整 零点释放

AOC-200	SPL	色谱柱	FID
样品瓶号	SPL 温度 200.0 / 200.0 °C	色谱柱温度 30.0 / 30.0 °C	FID 温度 220.0 / 220.0 °C
	SPL 压力 57.3 / 57.3 kPa		FID 尾吹气 He
	色谱柱流量 2.46 / 2.46 mL/min		FID 尾吹流量 30.0 / 30.0 mL/min
	流速		ON OFF

C: 73.9GB 空间 NUM

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]。



提示 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。

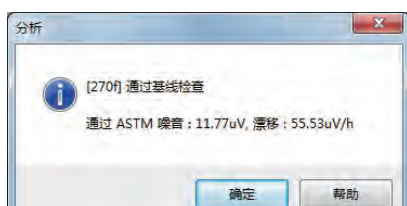


测定结束后，检查结果会在 [基线检查结果] 子窗口和 [输出窗口] 中显示。

[输出窗口]

信息	子信息
开始基线检查	DET1 ASTM 噪音 0.00-15.00min(阈值 50.00uV), 漂移 0.00-15.00min(阈值 5000.00uV/h)
未通过基线检查	通过 ASTM 噪音 : 14.28uV, 漂移 : -281.70uV/h

基线检查结果



应用

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。



提示

- 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。

在 [色谱图视图] 上单击鼠标右键时会显示该菜单。

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。



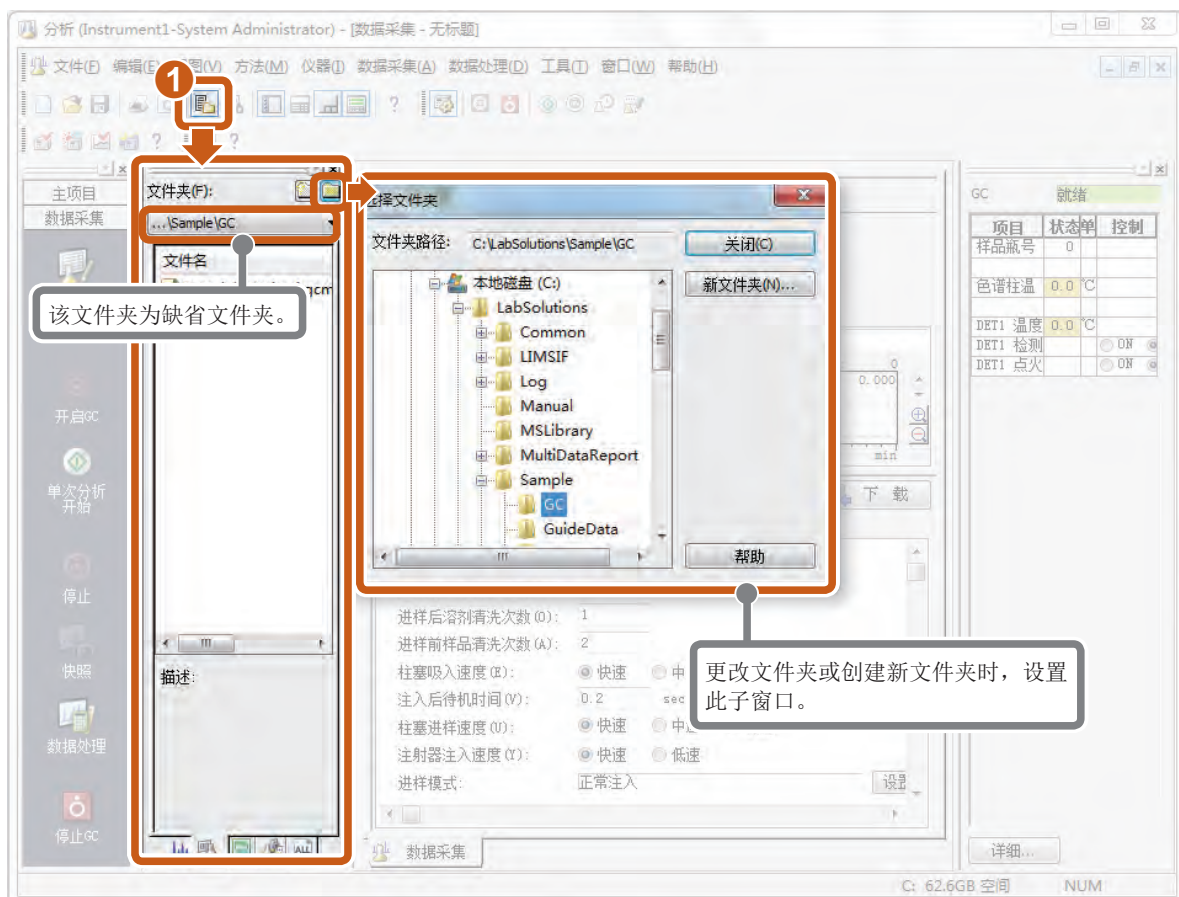
提示

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"。

应用

缺省文件夹和更改缺省文件夹



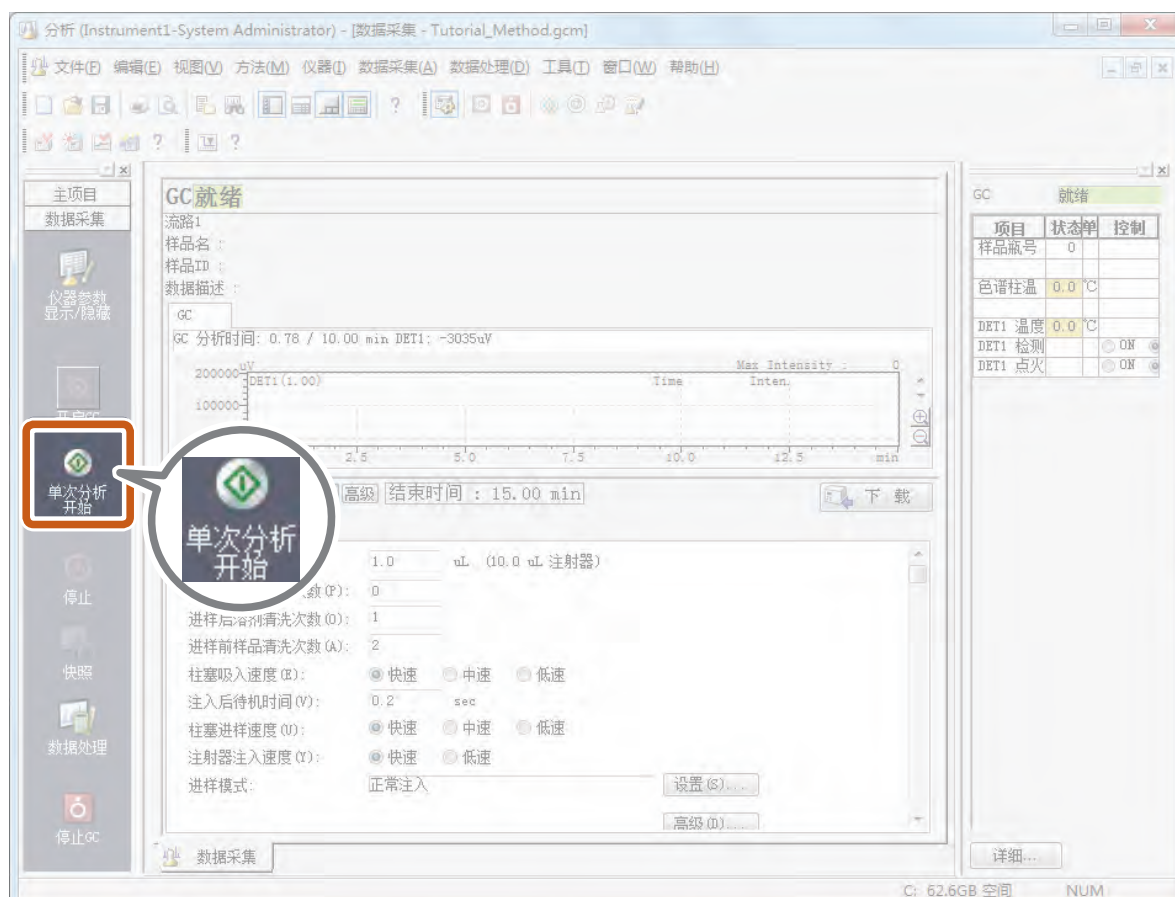
Chapter 3 单次分析

本章就使用保存的方法文件 "Tutorial_Method.gcm" 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。

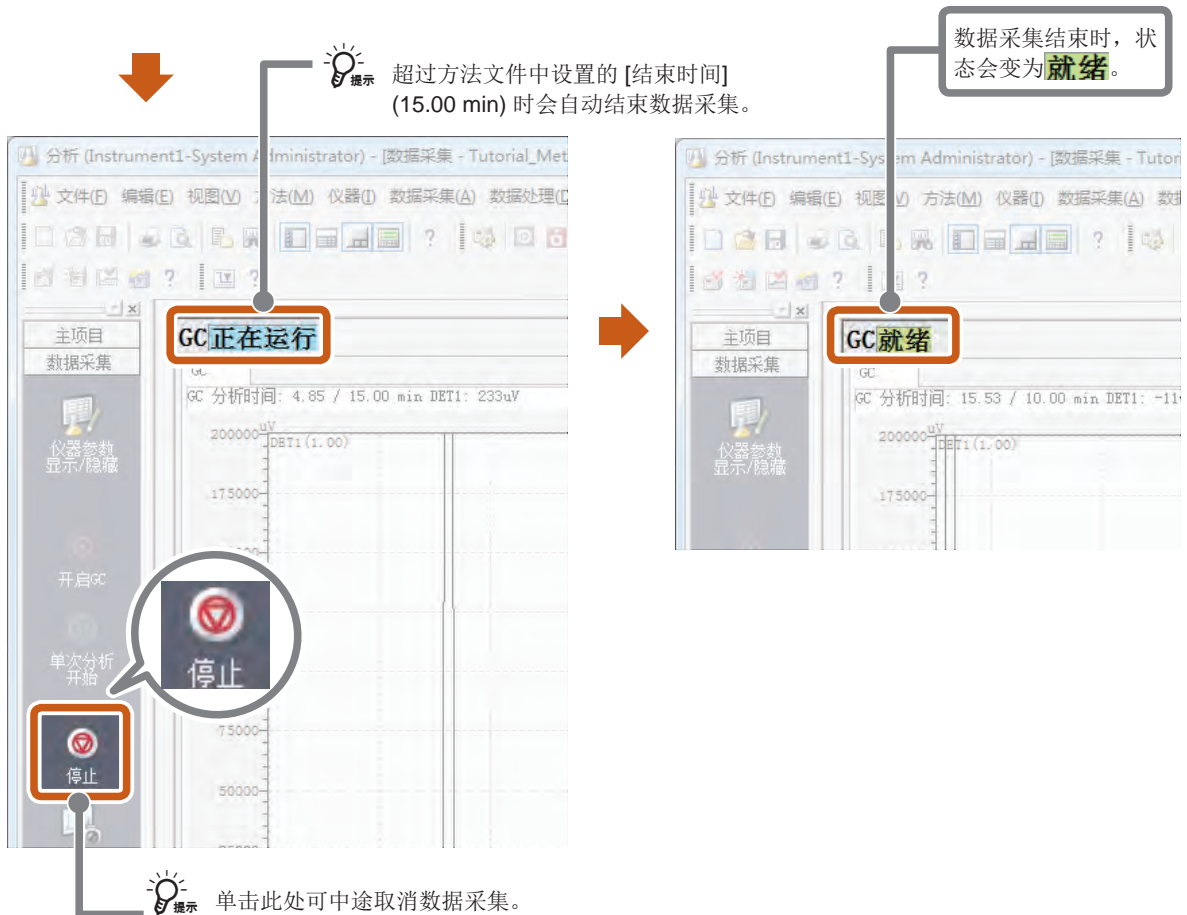


[单次分析] 子窗口打开。

续下页 

3 设置单次分析的条件。

在本例中，将 100 ppm 的醇类混合样品倒入自动进样器中的 1 号样品瓶后，设置进样条件。



Chapter 4

数据处理

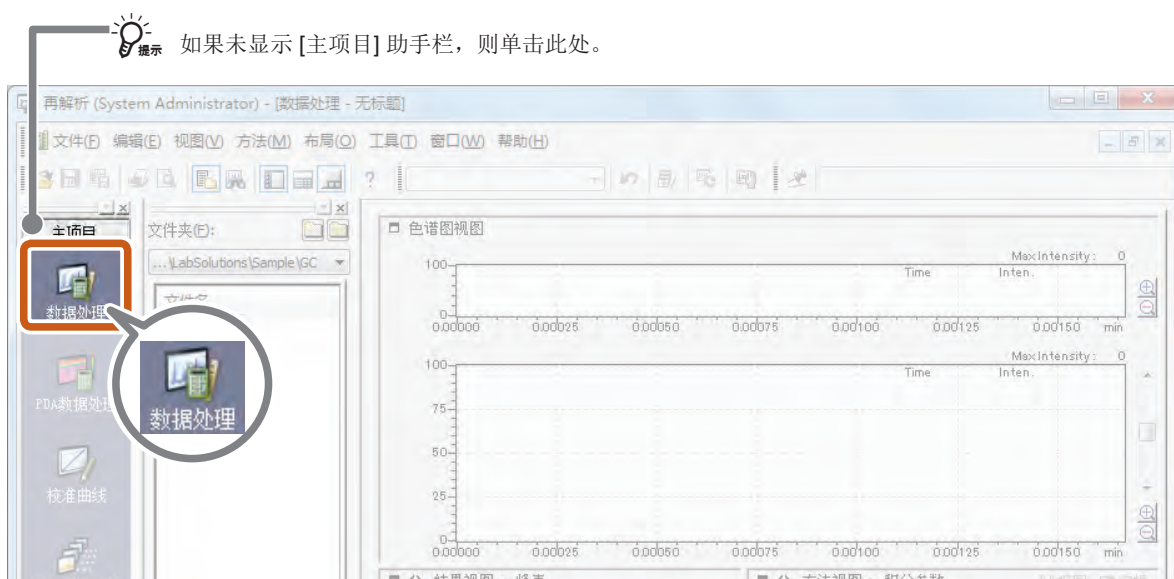
单次分析结束后，检查数据以确认是否正确检测了峰。

本章就如何更改数据文件 "Test.gcd" (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。

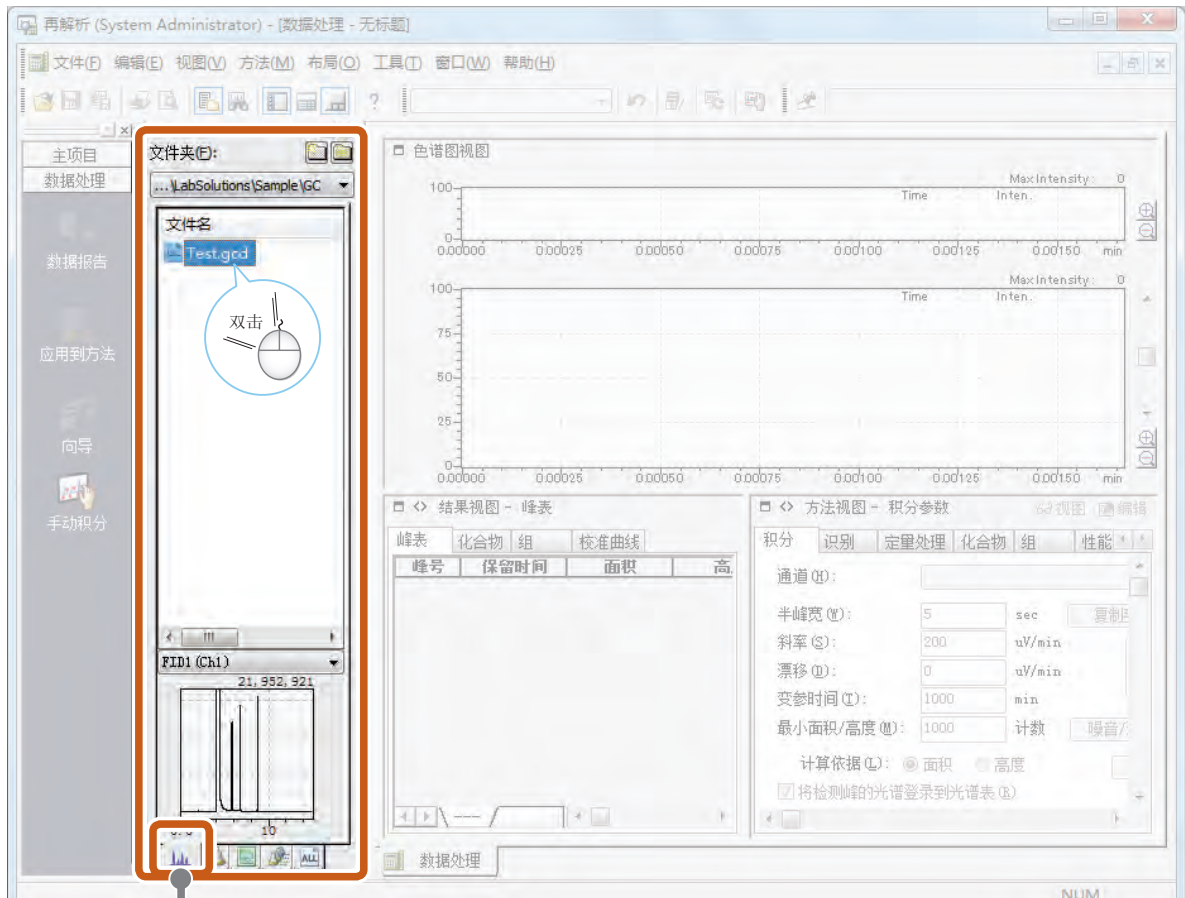



[数据处理] 窗口打开。

续下页 

3

显示 "Test.gcd"。



单击 [数据管理器] 子窗口上的 , 然后双击 "Test.gcd"。



参考

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。

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
1	4.276	233039765
2	5.754	27542
3	6.674	33118
4	8.705	34336
总计		233134761

积分 识别 定量处理 化合物 组 性能

半峰宽 (W): 3 sec

斜率 (S): 1000 uV/min

漂移 (D): uV/min

计算依据 (U): 面积 高度

斜率: 1000 uV / min

半峰宽: 3 sec



半峰宽值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。

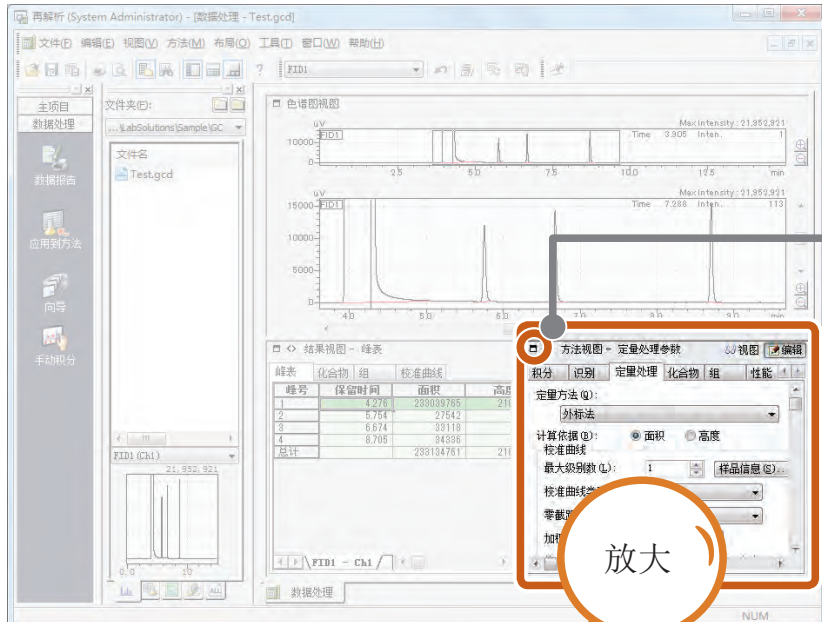


参考

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”。

续下页

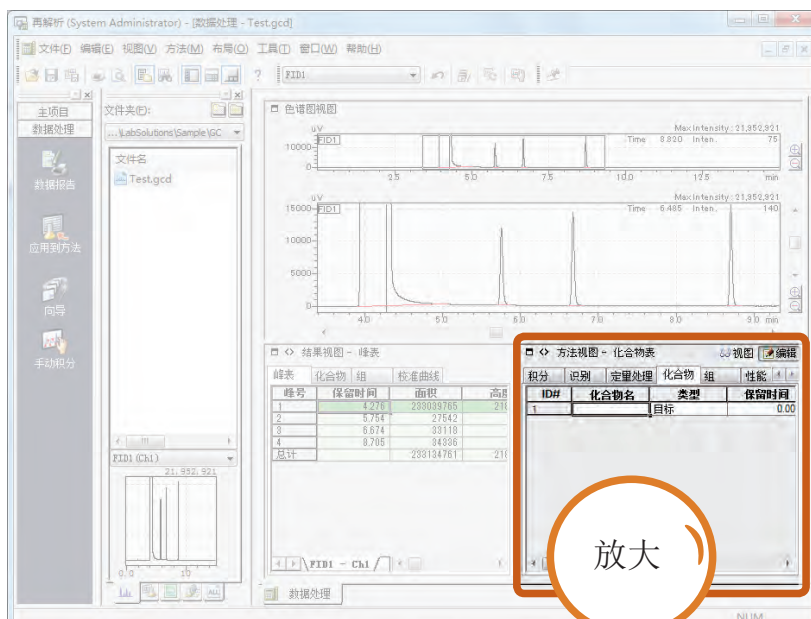
5 输入定量处理参数。



提示

- [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]。

6 填充化合物表。



方法视图 - 化合物表

ID#	化合物名	类型	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)
1	1-Propylalcohol	目标	5.754	100	500	1000
2	Isobutylalcohol	目标	6.674	100	500	1000
3	Isoamylalcohol	目标	8.705	100	500	1000

单击 视图将单元格的背景颜色更改为黄色以固定新编辑的参数。

名称	类型	保留时间 (min)	浓度 (1)	浓度 (2)	浓度 (3)
1-Propylalcohol	目标	5.754	100.000	500.000	1000.000
Isobutylalcohol	目标	6.674	100.000	500.000	1000.000
Isoamylalcohol	目标	8.705	100.000	500.000	1000.000



提示

- 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。



参考

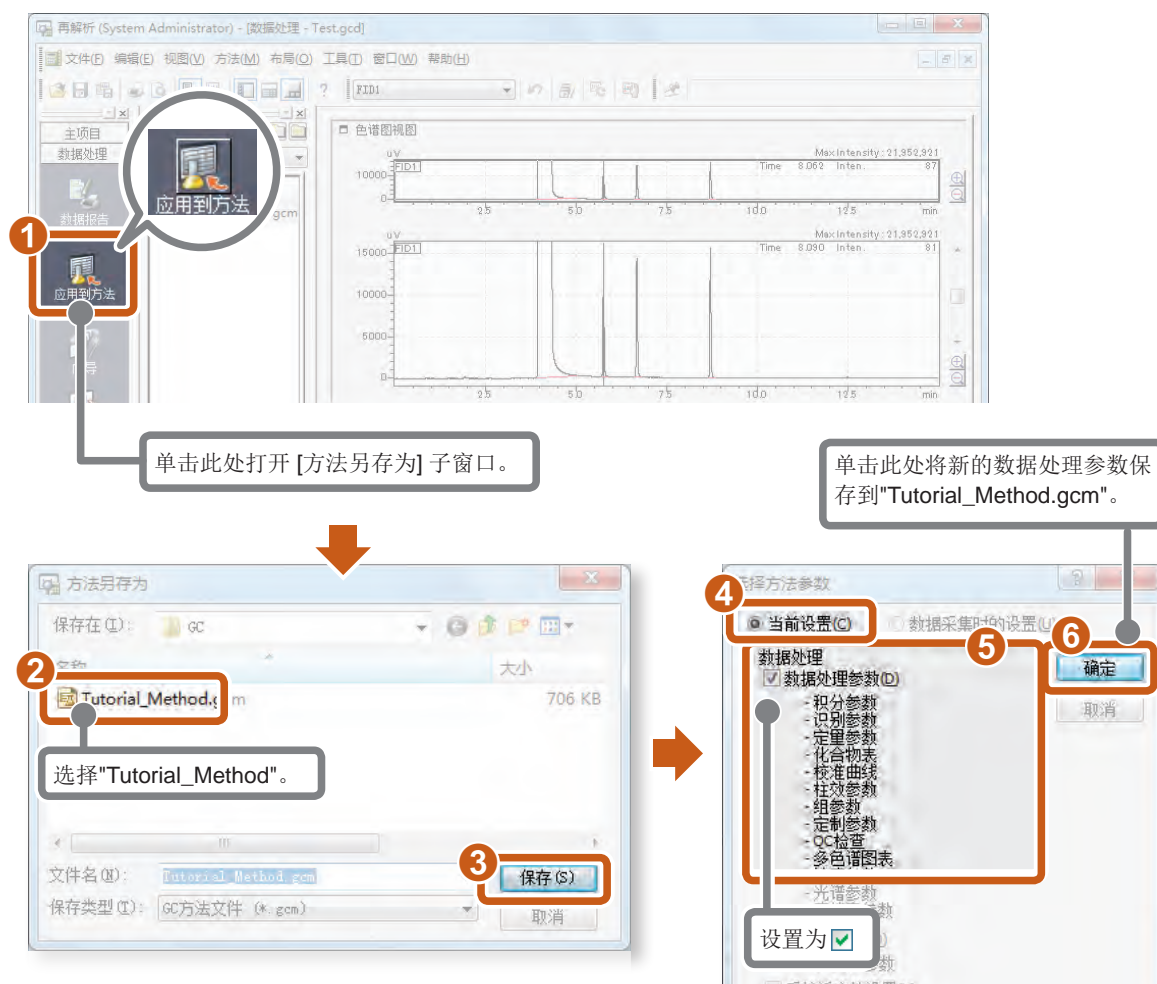
有关设置保留时间的详情，请参考操作说明书中“数据处理”章节的“使用鼠标得到的化合物表保留时间”。


续下页


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.gcm"）。

- 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。

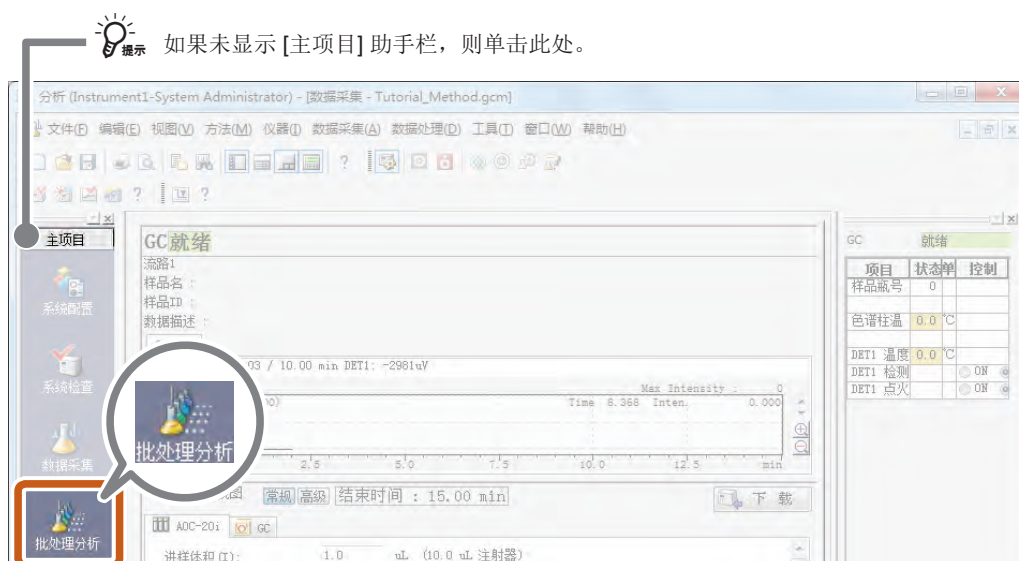
5.1 创建批处理表

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。

续下页

4 复制单元格。

文件夹：C:\LabSolutions\Sample\GC

分析	样品ID	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出报
1	1	填充系列(F)			utorial_Method.gcm	Tutorial_Std001.gcd	1	
2	1	向下填充(N)			utorial_Method.gcm	Tutorial_Std002.gcd	1	
3	1	剪切(I)			utorial_Method.gcm	Tutorial_Std003.gcd	1	
4	2	复制(C)			utorial_Method.gcm	Tutorial_Std004.gcd	2	
5	2	粘贴(P)			utorial_Method.gcm	Tutorial_Std005.gcd	2	
6	2				utorial_Method.gcm	Tutorial_Std006.gcd	2	
7	3				utorial_Method.gcm	Tutorial_Std007.gcd	3	
8	3				utorial_Method.gcm	Tutorial_Std008.gcd	3	
9	3				utorial_Method.gcm	Tutorial_Std009.gcd	3	
10	4				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk001.gcd	0	
11	5				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk002.gcd	0	

样品名

行号(R): 1 9

样品名: Alcohol Mixture

自动递增(A) 重复次数(R): 1

确定 取消 帮助

文件夹：C:\LabSolutions\Sample\GC

分析	样品ID	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出报
1	1	Alcohol Mixture		1:标准 (I)	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std001.gcd	1	
2	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std002.gcd	1	
3	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std003.gcd	1	
4	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std004.gcd	2	
5	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std005.gcd	2	
6	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std006.gcd	2	
7	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std007.gcd	3	
8	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std008.gcd	3	
9	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std009.gcd	3	
10	4				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk001.gcd	0	
11	5				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk002.gcd	0	

5 输入序列号。

文件夹：C:\LabSolutions\Sample\GC

分析	样品ID	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出报
1	1	Alcohol Mixture		1:标准 (I)	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std001.gcd	1	
2	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std002.gcd	1	
3	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std003.gcd	1	
4	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std004.gcd	2	
5	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std005.gcd	2	
6	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std006.gcd	2	
7	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std007.gcd	3	
8	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std008.gcd	3	
9	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std009.gcd	3	
10	4				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk001.gcd	0	
11	5				utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk002.gcd	0	

样品 ID

行号(R): 10 11

样品 ID: Unknown01

自动递增(A) 重复次数(R): 1

确定 取消 帮助

文件夹：C:\LabSolutions\Sample\GC

分析	样品ID	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出报
1	1	Alcohol Mixture		1:标准 (I)	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std001.gcd	1	
2	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std002.gcd	1	
3	1	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std003.gcd	1	
4	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std004.gcd	2	
5	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std005.gcd	2	
6	2	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std006.gcd	2	
7	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std007.gcd	3	
8	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std008.gcd	3	
9	3	Alcohol Mixture		1:标准	utorial_Method.gcm	Tutorial_Std009.gcd	3	
10	4	Unknown01		:未知	utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk001.gcd	0	
11	5	Unknown02		:未知	utorial_Method.gcm	Tutorial_Unk002.gcd	0	

续下页

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\GC

分析	样品编号	样品名	样品ID	样品类型	方法文件	数据文件	级别号	输出报
1	1	Alcohol Mixture	Standard 100ppm	1:标准 (1)	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std001.gcd	1	
2	1	Alcohol Mixture	Standard 100ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std002.gcd	1	
3	1	Alcohol Mixture	Standard 100ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std003.gcd	1	
4	2	Alcohol Mixture	Standard 500ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std004.gcd	2	
5	2	Alcohol Mixture	Standard 500ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std005.gcd	2	
6	2	Alcohol Mixture	Standard 500ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std006.gcd	2	
7	3	Alcohol Mixture	Standard 1000ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std007.gcd	3	
8	3	Alcohol Mixture	Standard 1000ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std008.gcd	3	
9	3	Alcohol Mixture	Standard 1000ppm	1:标准	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Std009.gcd	3	
10	4	Liquor	Unknown01	0:未知	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Unk001.gcd	0	
11	5	Whiskey	Unknown02	0:未知	Tutorial_Method.gcm	Tutorial_Unk002.gcd	0	

7

保存批处理文件。

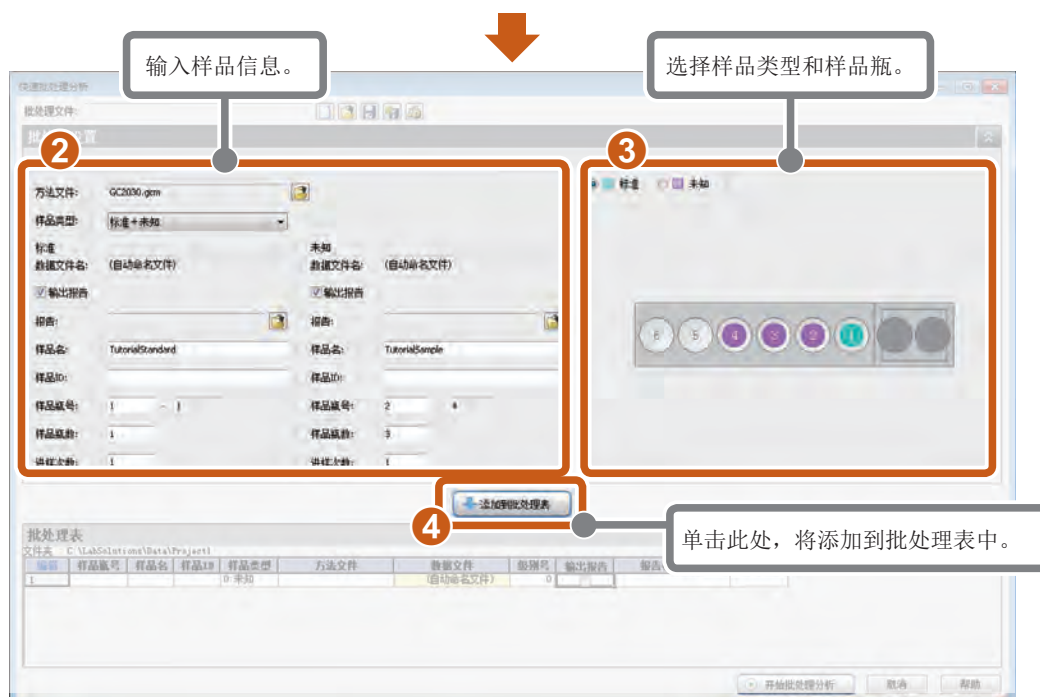


LabSolutions

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。



有关详细的操作方法和对应型号请参考帮助。



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)	醇类混合样品	100 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 2 (级别 2)	醇类混合样品	500 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 3 (级别 3)	醇类混合样品	1000 ppm 溶液 (标准溶液)
样品瓶 4	溶液 (未知样品)	
样品瓶 5	威士忌酒 (未知样品)	

2 开始批处理分析。

单击此处同时打开 [批处理分析] 和 [数据采集] 窗口，然后从批处理表的第 1 行开始数据采集。

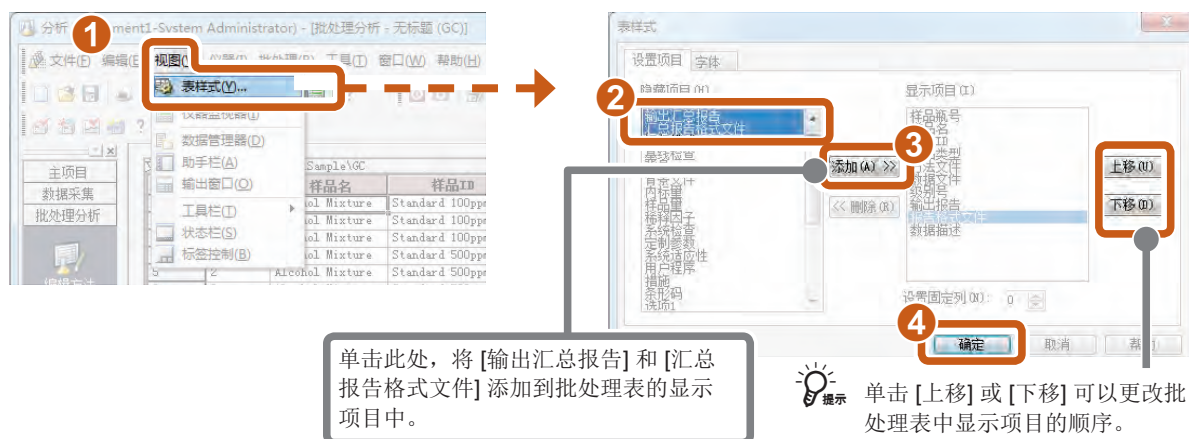
GC正在运行

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]。

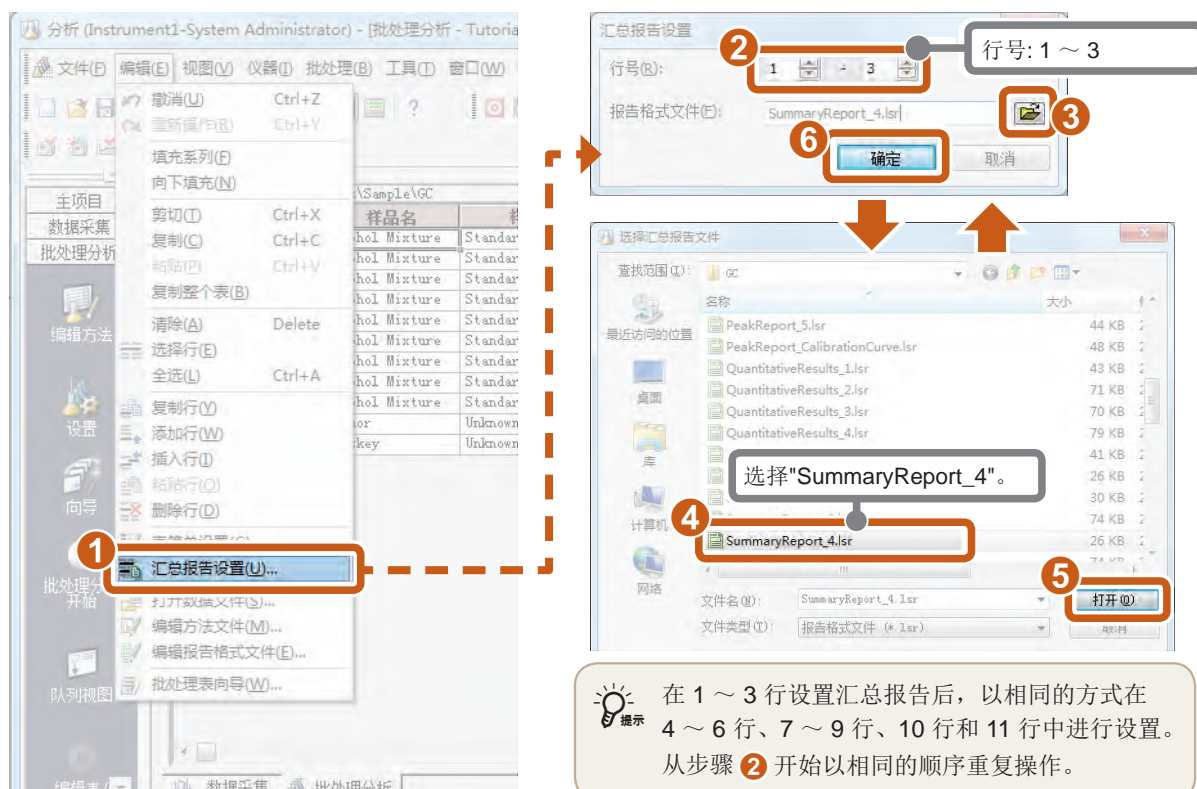
LabSolutions

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。



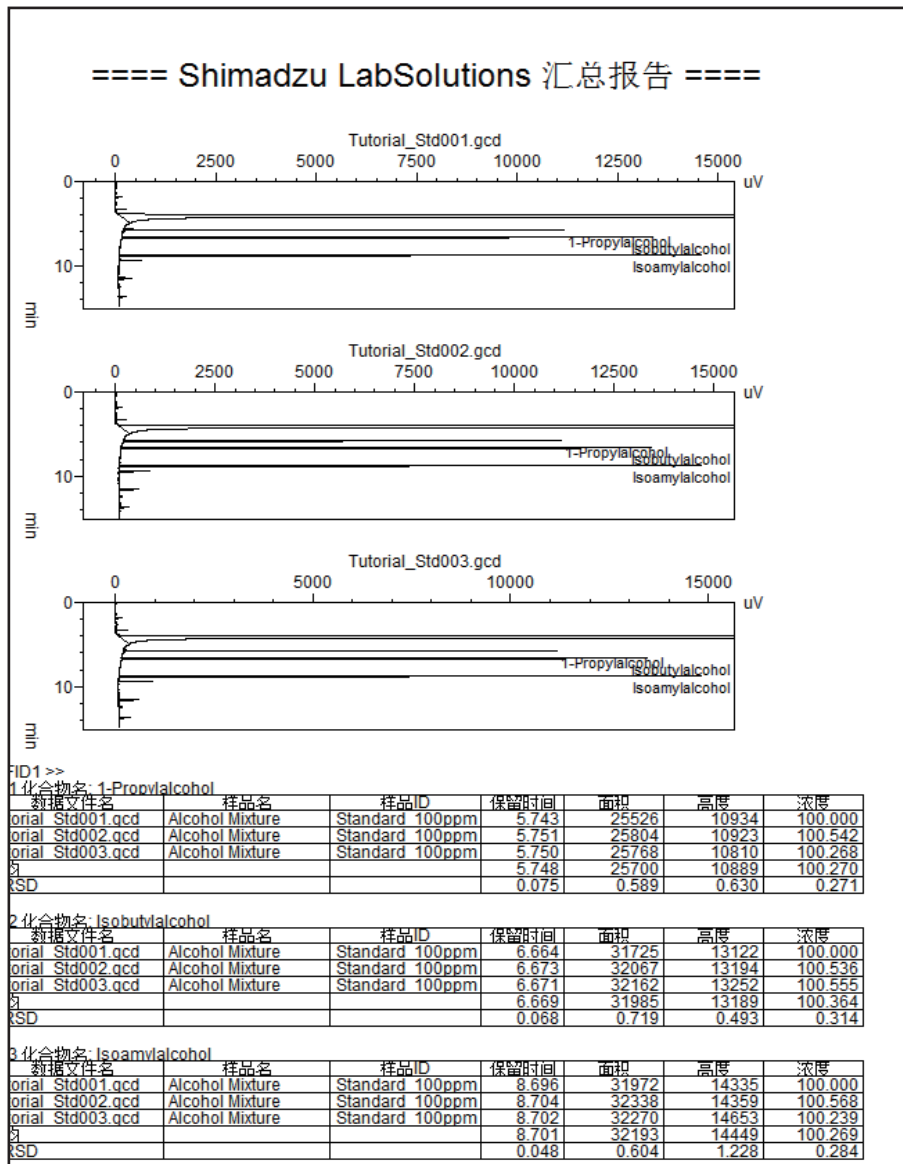
完成汇总报告的输出配置后，执行批处理分析以打印汇总报告。



有关执行批处理分析的详情，请参考第 38 页的“5.2 批处理分析”。

■ [打印输出示例]

标准样品

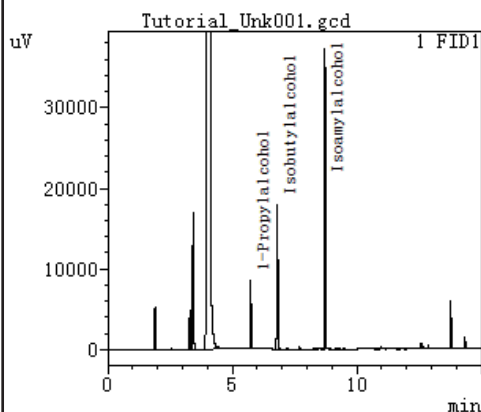


未知样品

==== Shimadzu LabSolutions 汇总报告 ====

样品名称 : Liquor
 样品ID : Unknowm01
 进样体积 : 1 uL
 数据文件名 : Tutorial_Unk001.gcd
 方法文件名 : Tutorial_Method.gcm
 批处理文件名 : Tutorial_Batch.gcb
 进样体积 : 1 uL
 分析日期 : 2009/4/9 18:33:04
 处理日期 : 2010/7/9 12:05:36

分析者 : System Administrator
 处理者 : System Administrator

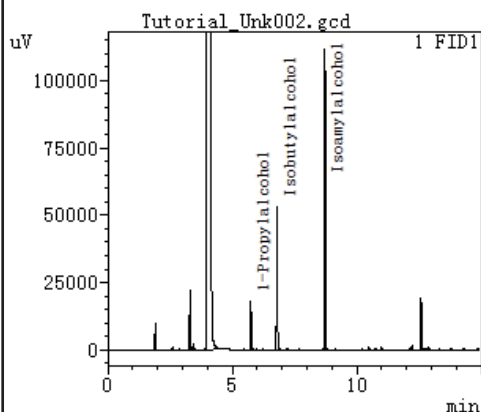


峰号	保留时间	面积	高度	ID
1	1.900	7737	5018	
2	3.299	10799	4830	
3	3.426	41993	16732	
4	4.080	42735188	8790611	
5	5.733	20659	8448	1
6	6.802	45081	17880	2
7	8.722	90812	36867	3
8	12.596	2747	680	
9	13.766	14329	5873	
10	14.336	3850	1453	
总计		42973196	8888393	

ID#	化合物名	浓度	浓度单位
1	1-Propylalcohol	85.137	ppm
2	Isobutylalcohol	143.676	ppm
3	Isoamylalcohol	277.442	ppm

样品名称 : Whiskey
 样品ID : Unknowm02
 进样体积 : 1 uL
 数据文件名 : Tutorial_Unk002.gcd
 方法文件名 : Tutorial_Method.gcm
 批处理文件名 : Tutorial_Batch.gcb
 进样体积 : 1 uL
 分析日期 : 2009/4/9 18:54:45
 处理日期 : 2010/7/9 12:05:40

分析者 : System Administrator
 处理者 : System Administrator



峰号	保留时间	面积	高度	ID
1	1.908	16371	9651	
2	2.632	1945	989	
3	3.305	49735	22059	
4	3.438	5679	1993	
5	4.118	64884225	11137946	
6	5.742	43193	17713	1
7	6.798	126351	52765	2
8	7.684	1424	666	
9	8.726	263828	110858	3
10	10.489	2765	1054	
11	10.983	2300	893	
12	12.223	2935	1336	
13	12.585	47370	18734	
14	12.869	2493	1116	
15	13.773	1625	623	
总计		65452236	11378396	

ID#	化合物名	浓度	浓度单位
1	1-Propylalcohol	168.318	ppm
2	Isobutylalcohol	394.559	ppm

ID#	化合物名	浓度	浓度单位
3	Isoamylalcohol	791.143	ppm

多个数据处理

LabSolutions 的 [浏览器] 程序可方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。

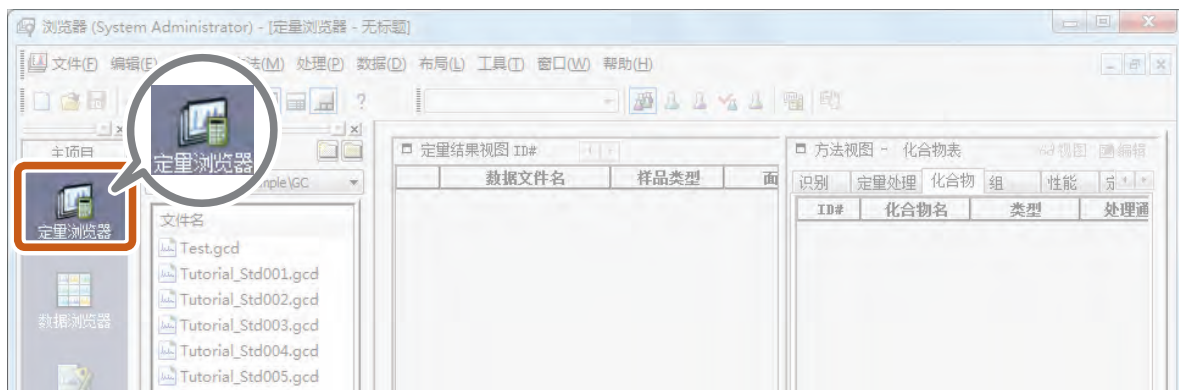


有关"定量浏览器"窗口的详情，请参考操作说明书中的"定量浏览器"章节。

1 打开 [浏览器] 程序。

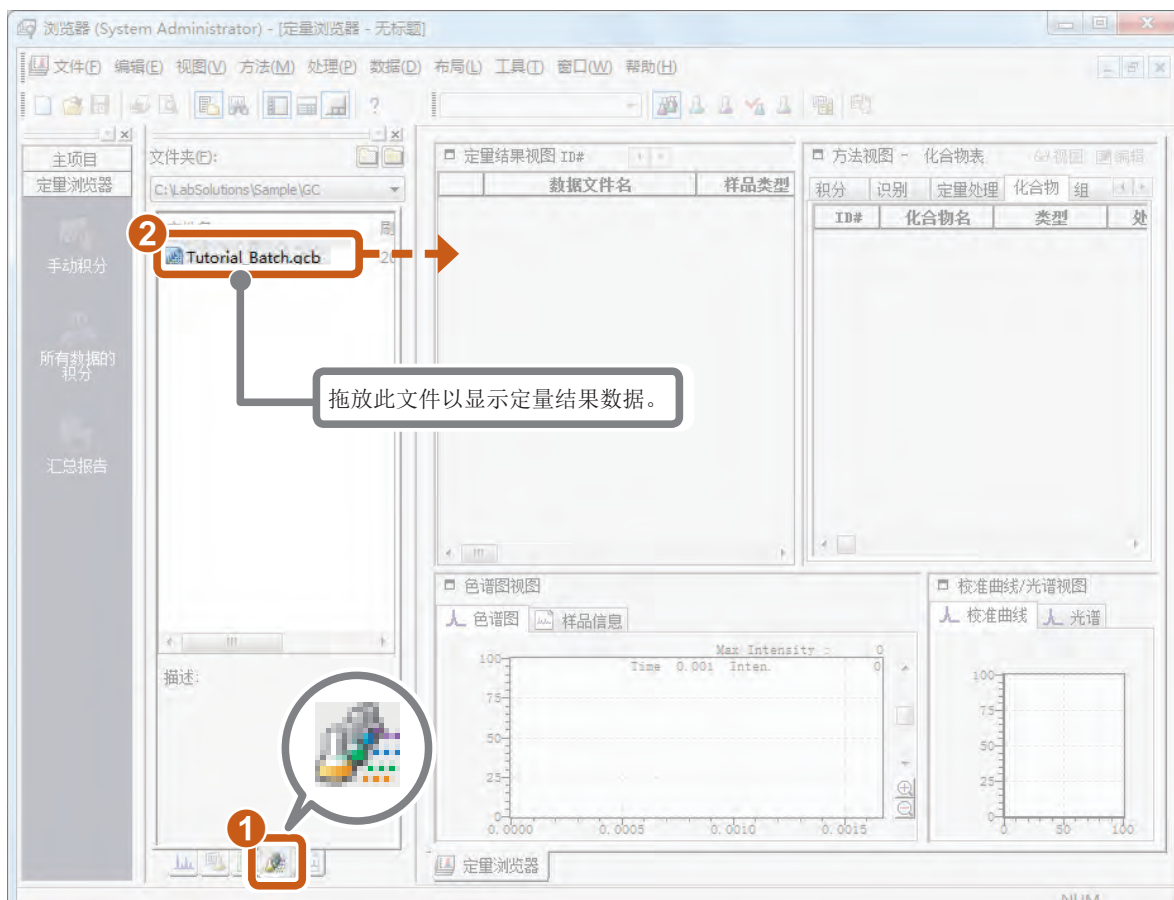


2 打开 [定量浏览器] 窗口。



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 '定量浏览器' (Quantification Browser) software interface. The main window is titled '浏览器 (System Administrator) - [定量浏览器 - Tutorial_Method.gcm]'. The interface is divided into several panels:

- Left Panel:** Contains navigation options: '主项目', '定量浏览器', '手动积分', '所有数据的积分', and '汇总报告'.
- Top Panel:** Shows the current method 'DET1' and the sample name '1-Propylalcohol'.
- Table:** A table titled '定量结果视图' (Quantification Results View) with columns 'ID#', '数据文件名', and '样品类型'. The table lists 11 entries, with the first 9 being 'Tutorial_Std001.gcd' through 'Tutorial_Std009.gcd' (all '标准 (校准)' type) and the last two being 'Tutorial_Unk001.gcd' and 'Tutorial_Unk002.gcd' (both '未' type). The first row is highlighted in yellow.
- Right Panel:** A table titled '方法视图 - 化合物表' (Method View - Compound Table) with columns '积分', '识别', '定量处理', '化合物', and '组'. It lists three compounds: '1-Propylalcohol', 'Isobutylalcohol', and 'Isoamylalcohol', all with '目标' (Target) type.
- Bottom Left Panel:** A chromatogram titled '色谱图视图' (Chromatogram View) showing 'FID1' intensity vs. time. The y-axis ranges from 0 to 15000, and the x-axis from 5.0 to 10.0. A peak is labeled 'Inten.' with a maximum intensity of 21,027.876.
- Bottom Right Panel:** A calibration curve titled '校准曲线/光谱视图' (Calibration Curve/Spectrum View) showing '浓度' (Concentration) vs. '面积' (Area). The regression equation is $Y = 270.9025X - 2405.1$ with $r^2 = 0.9998318$ and $r = 0.9999158$.

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。

放大

单击此处，在所有数据上执行批处理再解析。

确认已对这些值进行了适当设置。

Y = 270.9025X - 2405.05
R² = 0.9998318 r = 0.9999158

续下页

2 确认识别参数。

未正确识别峰时，确认识别参数和化合物表。

放大

2 方法视图 - 识别参数

3 识别方法 (M): 时间窗 时间带

时间窗 (W): 5 %

时间带 (B): 0.01 min

识别方法 (M): 绝对保留时间

峰选择 (P): 所有峰

将未识别峰作为面积 (高度) 为“0”的峰显示 (D)

将面积 (高度) 为“0”的峰添加到校准点 (C)

保留时间校正 (R): 未更改 替换 平均

4 视图 编辑 1

确认已对这些值进行了适当设置。

校准曲线/光谱视图

人 校准曲线 人 光谱

$Y = 270.9025X - 2405.0$
 $r^2 = 0.9998318$ $r = 0.9999154$

3 确认化合物表。

放大

2 方法视图 - 化合物表

3 保留时间

4 视图 编辑 1

确认已进行了适当的时间设置。

ID#	化合物名	类型	保留时间	浓度(1)	浓度(2)	浓度(3)
1	1-Propylalcohol	目标	5.754	100	500	1000
2	Isobutylalcohol	目标	6.674	00	500	1000
3	Isoamylalcohol	目标	8.705	00	500	1000
4		目标	0.001	00	500	1000

校准曲线/光谱视图

人 校准曲线 人 光谱

$Y = 270.9025X - 2405.0$
 $r^2 = 0.9998318$ $r = 0.9999154$

4 确认校准点。

放大

确认校准曲线。

确认将第 1 行上的校准点设置为 。

数据文件名	样品类型
Tutorial_St4001.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4002.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4003.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4004.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4005.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4006.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4007.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4008.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4009.gcd	标准 (校准)
Tutorial_Unk001.gcd	未
Tutorial_Unk002.gcd	未

数据文件名	面积	高度	浓度 (ppm)	标准浓度	面积%	高度	校准点
Tutorial_St4001.gcd	25,526	10,934	103.103	100	0.012	0.1	<input checked="" type="checkbox"/>
Tutorial_St4002.gcd	25,804	10,923	104.131	100	0.012	0.0	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4003.gcd	25,768	10,810	103.999	100	0.012	0.052	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4004.gcd	131,414	56,785	493.976	500	0.061	0.269	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4005.gcd	131,138	56,542	492.957	500	0.061	0.269	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4006.gcd	131,109	56,645	492.848	500	0.061	0.269	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4007.gcd	269,780	118,063	1,004.735	100	0.012	0.0	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4008.gcd	269,331	117,871	1,003.076	100	0.012	0.0	<input type="checkbox"/>
Tutorial_St4009.gcd	268,816	116,155	1,001.176	100	0.012	0.0	<input type="checkbox"/>
Tutorial_Unk001.gcd	20,659	8,448	85.137	---	---	---	<input type="checkbox"/>
Tutorial_Unk002.gcd	43,193	17,713	168.318	---	---	---	<input type="checkbox"/>

校准曲线/光谱图

$I = 270.9025X - 2405.0$
 $r^2 = 0.9998318$ $r = 0$

5 保存方法文件和数据文件。

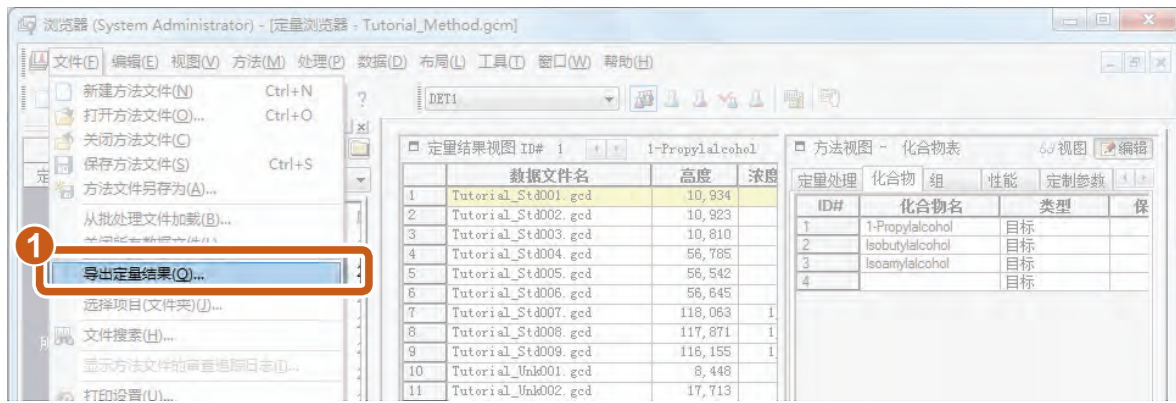
保存方法文件和数据文件。

数据文件名	样品类型
Tutorial_St4001.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4002.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4003.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4004.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4005.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4006.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4007.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4008.gcd	标准 (校准)
Tutorial_St4009.gcd	标准 (校准)
Tutorial_Unk001.gcd	未
Tutorial_Unk002.gcd	未

积分	识别	定量处理	化合物	组
1	1-Propylalcohol	目标		
2	Isobutylalcohol	目标		
3	Isoamylalcohol	目标		

应用 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。



选择 [输出文件]，并输入 "定量结果" 作为文件名。

选择 [当前显示项目]。

选择 [所有 ID]。

单击此处，将 "定量结果" 文件保存到 Sample 文件夹中。

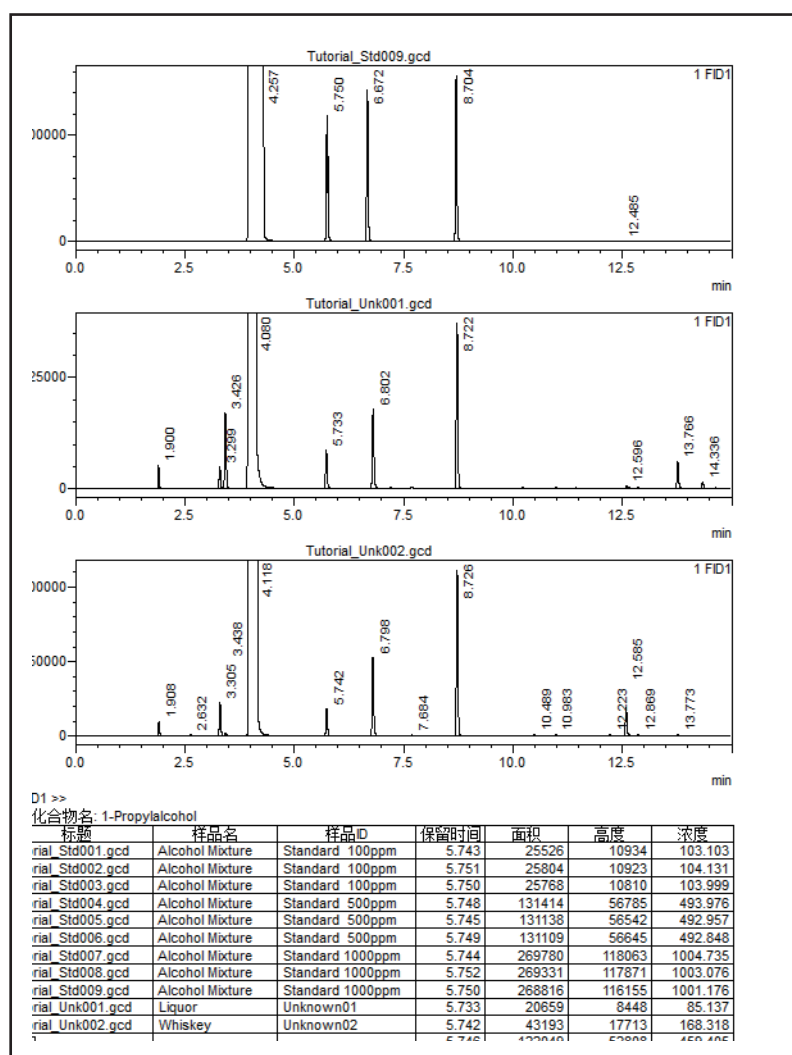
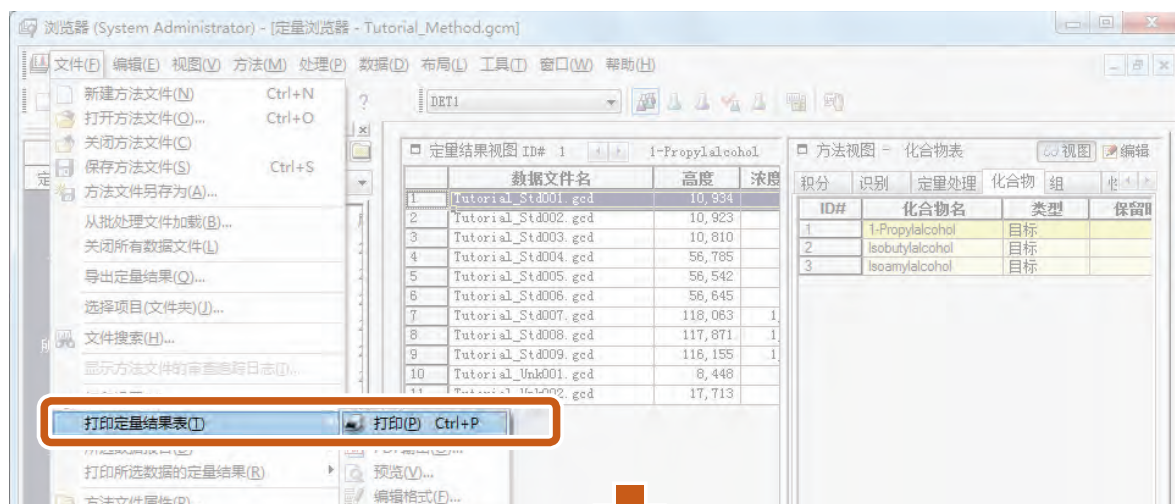


有关导出定量结果的详情，请参考操作说明书中"定量浏览器"章节的"导出定量结果"。

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]。



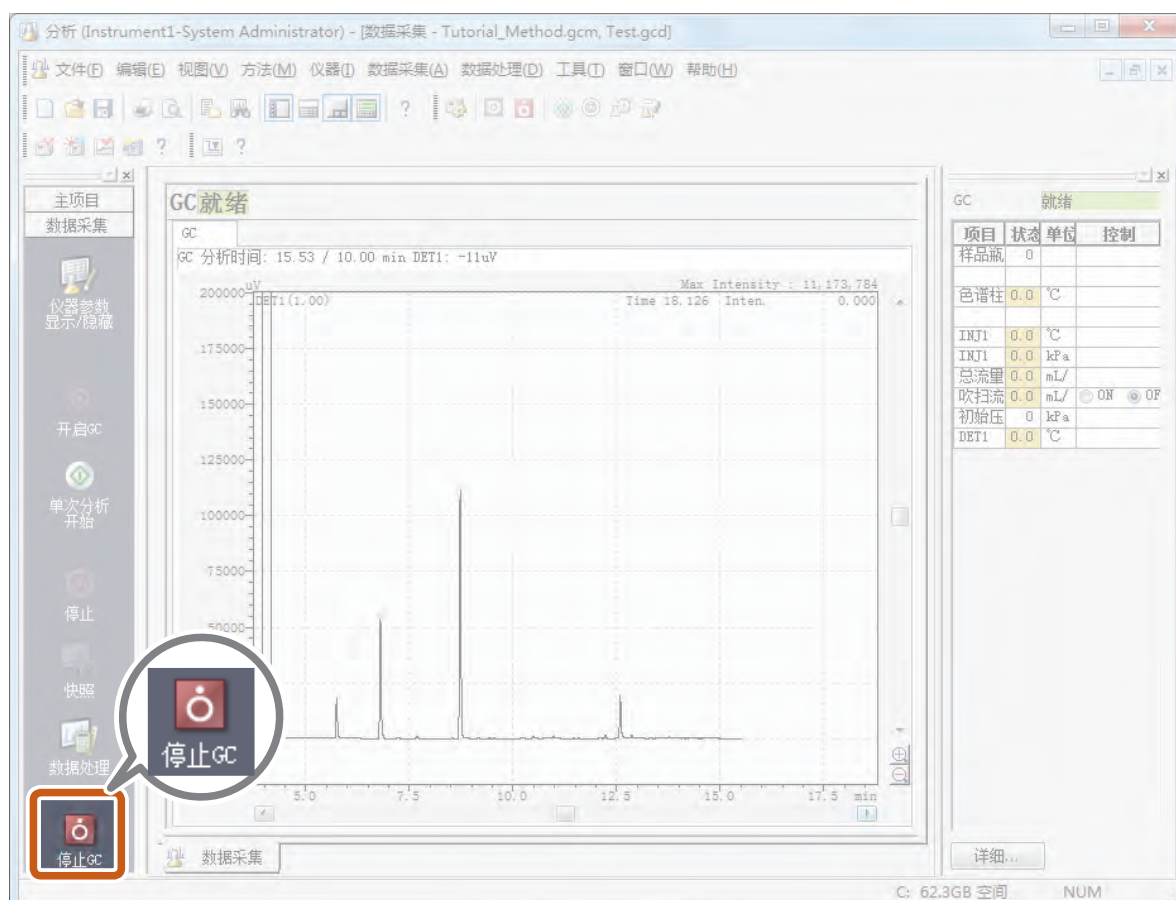
提示 要编辑报告格式，从 [文件] 菜单上的 [打印定量结果表] 中选择 [编辑格式]。

Chapter 7

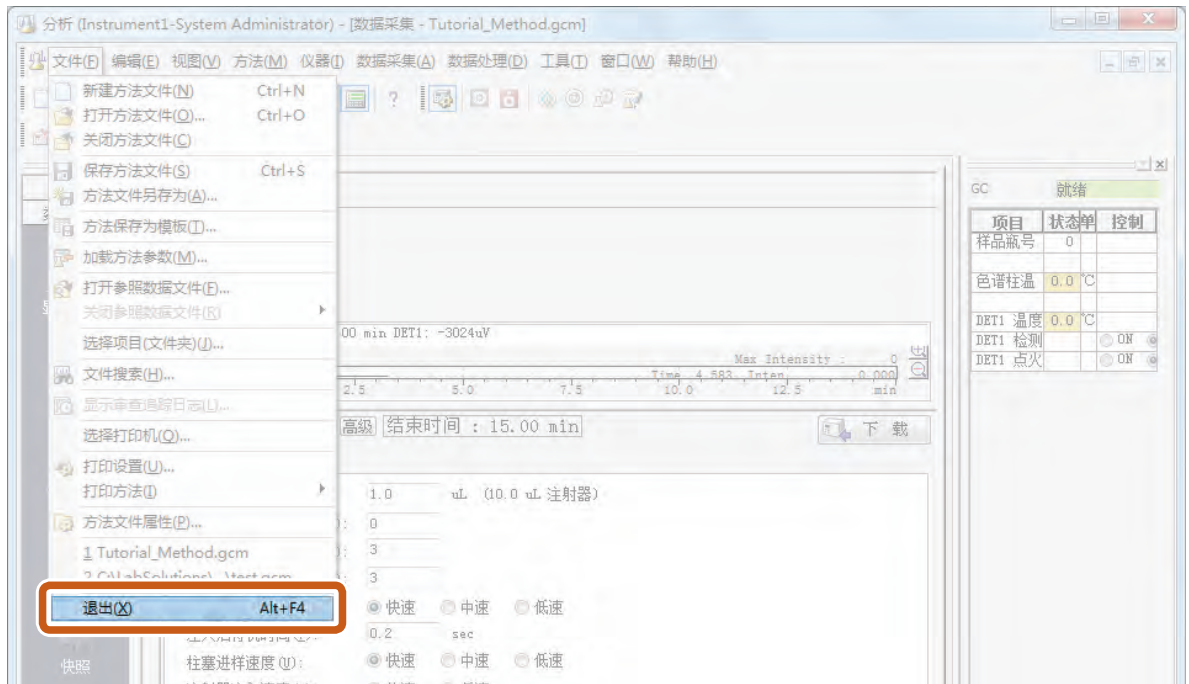
关机

最后，本章对如何退出 LabSolutions 进行说明。

1 停止 GC。



2 柱温箱冷却后选择 [退出]。



3 单击 [是]。

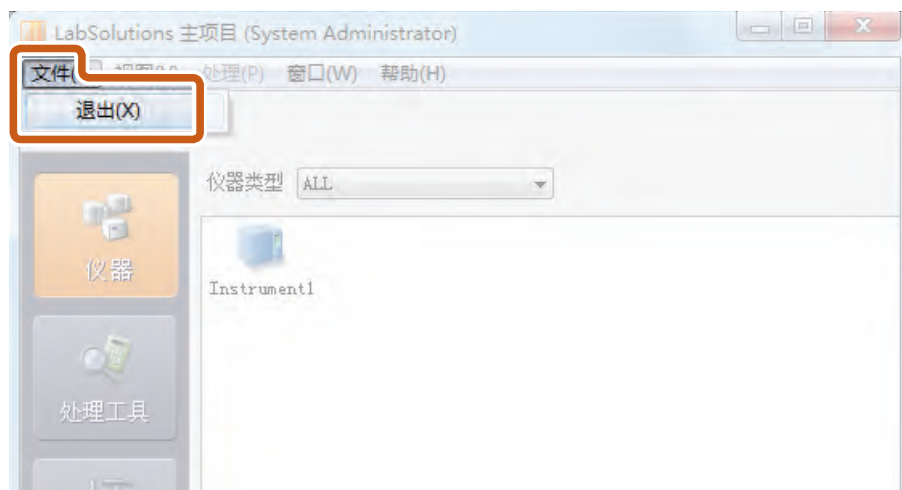


 提示 如果有尚未保存的文件，退出 [分析] 程序时会打开确认是否要保存文件的窗口。

续下页 

4 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。



5 关闭 Windows 系统，然后关闭 PC 和打印机。

6 关闭 GC 和外围设备。

7 关闭载气和其他气体的主阀。