



CLARITY演示

Clarity Demo Software

Chinese

版本号/修正: M003-CHS80A
日期: 2020/4/1

电话: +420 251 013 400
传真: +420 251 013 401
clarity@dataapex.com
www.dataapex.com

DataApex Ltd.
Petrzilkova 2583/13
158 00 Prague 5
The Czech Republic

Clarity[®], DataApex[®] 和 ▲[®] 是 DataApex Ltd. 持有并注册的商标。Microsoft[®] and Windows[™] 是微软持有并注册的商标。
DataApex 具有自主更改手册的权利。最新版的手册可以前往 www.dataapex.com 下载。

作者：MP

目录/内容

1 Clarity工作站简介	1
1.1 演示版相关性能	1
1.2 硬件和软件需求	1
2 主要特点	3
2.1 控制模块	4
2.2 Clarity扩展	4
3 Clarity演示版安装	5
4 软件的结构和控制	6
5 Clarity工作站概览	7
6 运行单一分析	8
6.1 仪器窗口	8
6.2 单一分析对话框	9
6.3 数据采集窗口	11
6.4 色谱图窗口	12
7 运行序列	14
7.1 序列窗口	14
7.2 校准窗口	15
7.3 关联校准与色谱图	18
7.4 关联校准和方法	19
7.5 将校准与一系列已测得的色谱图关联起来	19
8 选择演示工程	21
8.1 GPC演示工程	22
8.2 PDA演示工程	22
8.3 NGA演示工程	22
8.4 EA演示工程	23
8.5 演示DHA工程	23
8.6 MS演示工程	23
8.7 GCxGC演示工程	24

本指南中使用不同的字体来区分**Clarity演示**手册和**Clarity**色谱工作站内容。不同字体的含义如下：

仪器 (蓝色字体) 代表了文章中提到的窗口名称。

打开文件 (斜体字) 代表了菜单栏的选项和**Clarity**中某些区域的名称, 这些区域可以输入一些参数或者窗口或对话框名称(当您当前打开的工作站界面和我们描述相同时)。

WORK1(大写字母) 代表了文件或文件夹的名称。

ACTIVE(大写斜体) 代表了工作站或者某些部分的当前状态。

加粗的文本有时也用于文本的重要部分和**Clarity**工作站的名称。此外, 有些章节是用普通文本以外的格式编写的。这些部分的格式如下：

注释: 提示读者相关信息。

注意: 警告用户可能有危险或非常重要的信息。

标记问题声明或复杂问题。

描述: 对问题提出更详细的信息, 描述其原因等。

解决方案: 标记对问题的响应, 给出一个如何删除它的流程。

1 Clarity工作站简介



建议使用本**Clarity**帮助指南来练习演示版。

Clarity色谱工作站是获取、处理和评估数据的有效工具。它允许从几乎任何气相或液相色谱仪采集数据。可以同时连接多达4台色谱仪，每台色谱仪可以配备多达32个检测器。每个色谱仪可以使用添加组件，如扩展(例 **CE, EA, GPC, GCxGC, MS...**) 和控制 (**LC, GC, AS control...**)。

Clarity满足 **FDA's 21 CFR Part 11** 要求。

Clarity Lite演示版工作站和本指南中提到的完整版**Clarity**演示版工作站的功能会不同。有关差异的完整概述，请参见D007数据表：**Clarity x Clarity Lite 对比表**可以在 **DataApex** 下载中心 (www.dataapex.com/downloads)获得。

1.1 演示版相关性能

演示版工作站包含所有的完整版工作站的功能，但却有如下限制：

不能控制仪器。

不能采集数据。

不能导入色谱图。

“**演示**”两个字被显示在主窗口**Clarity**的标题和所有打印好的文档中。

Clarity演示版允许在没有转换器电路板的情况下模拟采集数据的行为，因为必须的数据文件是由模拟数据文件提供的。

Clarity演示版工作站仅仅使用“演示数据”，它不能够采集或者导入真实的数据。

如果客户需要评估自己的数据，请通过 sales@dataapex.com 与我们联系。**Clarity**可以通过客户的AIA文件 (*.CDF) 来导入色谱图。

也可以通过下面的这些包括了信号数值的ASCII文本文件来导入色谱数据：

多检测器文件 (*.chr)

文本文件 (*.txt)

字符分隔值 (*.csv)

EZChrom ASCII 文件 (*.asc)

1.2 硬件和软件需求

Clarity 工作站在以下的 windows 系统中可以安装并使用 (任何语言)：7^{SP1}, 8.1 和 10，并且是64位的操作系统。

推荐的电脑配置是PC奔腾4/2 GHz以上，4GB 内存。最低配置是奔腾4,2GB内存。

建议的显示器分辨率1280x1024或1680x1050, 64K(16位-高颜色)。最低要求是1024x768像素, 64K(16位-高颜色)。

了解更多内容, 可以查看 **Clarity** 兼容性表数据表 (D016 - 从 www.dataapex.com/downloads 下载)。

典型的安装需要大约1GB的空闲硬盘空间。最低要求是至少350 MB, **完整**安装需要1.2 GB硬盘空间。

2 主要特点

测量-同时从多达4个32检测器的色谱仪(4×32配置)采集数据。

积分-具有修饰和处理色谱图的广泛可能性。色谱图可以通过输入全局参数进行基线的修改或者用户交互式直接修改基线。

重叠-同时显示无数量限制的色谱图和它们的数学修正。例如：相互推论或推导的任何顺序。

校准-内标法和外标法，峰组和参考峰的校准功能用于更好的识别色谱峰。

自动测量支持-配置或无配置自动进样器都可以编辑一组样品的序列列表。

后运行-在测量结束后自动显示，打印，输出和运行其它的程序。

总结结果表-显示和打印从所有同时显示的色谱图中选择的结果。

用户设置-用户选择峰显示的相关参数，例如：轴范围，大量的峰颜色选择。文本标签和线，作为区域的一部分或固定在色谱图上，也可以插入。

输出-可选的以各种不同的格式，输出各种结果包含或不包含色谱图，导出至文件或剪贴板内。

导入-从其他的色谱数据转化成的文本文件或AIA文件，导入色谱图或数学曲线。

方法和校准历史-每一个色谱图都可以以相同的条件在打印，输出，或保存时显示。

色谱柱性能-根据对称性、效率和分辨率计算峰值;通过几种方法(切线法、时间点法，等。)

批处理-自动批处理，显示，输出或打印一些色谱数据。

用户计算-用户可以自定义计算结果和总结表。使用集成编辑器，可以从原始列和单独的数学函数创建自己的列。

用户账户-设置访问权限和密码(包括他们的参数，例如，最小长度，有效期，等。) 每个用户可以定义自己的工作外观。

审计追踪-将选定的事件和操作记录到一个特殊文件中。将选定的操作直接记录到色谱图中。

电子签名-每一个色谱图都可以被电子签名。签名选择基于用户名或签名证书。

2.1 控制模块

软件模块为色谱仪提供接口如下：GC和HPLC系统，自动进样器，馏分收集器和阀。直接控制方式可以允许设备在**Clarity**环境下被控制和监管。控制该装置的仪器方法保存在测得的色谱图数据中。

2.2 Clarity扩展

软件扩展模块可以增强**Clarity**数据工作站的某些能力。**Clarity**提供的扩展功能用于特定类型的分析或特定的任务。目前我们可提供的扩展模块如下：

- **SST**(系统适应性)-用于监控分析处理质量的附加集成模块。
- **GPC**-用于执行和评估GPC/SEC分析的附加集成模块(GPC=**凝胶渗透色谱**, SEC=**体积排阻色谱**)。
查看**GPC**扩展功能打开仪器**我的GPC**。
- **PDA**-用于评估和分析PDA的附加集成模块(**Photo-Diode Array**也叫**DAD-二极管阵列检测器**)。
查看**PDA**扩展功能打开仪器**Agilent 1100 DAD检测器**。
- **CE**-用于执行和评估**毛细管电泳**分析的附加集成模块。将**CE**术语引入**Clarity**。
- **NGA**(天然气分析)-根据选定的天然气和液化石油气分析规范对计算结果进行评估的附加模块。
查看**NGA**扩展功能请参考第8章-**选择演示项目**。
- **EA**-用于执行和评估**元素分析**的附加模块。
查看**EA**扩展功能请参考第8章-**选择演示项目**。
- **DHA**-(**烃类物质分析**)-用于测定确定火花点火发动机燃料中的单组分的附加模块(**PIONA**, 等)。
查看**DHA**扩展功能请参考第8章-**选择演示项目**。
- **MS**(质谱)-用于测量和评估质谱检测器分析的附加模块。
查看**MS**扩展功能请参考第8章-**选择演示项目**。
- **GCxGC**-用于评估二维气相分析的附加集成模块。
这个扩展功能仅能在**完整**安装了**Clarity演示版**后才可以进入。这个安装流程在3中有相关描述-**Clarity演示版安装**。
查看 **GC x GC**扩展功能请参考第8章-**选择演示项目**。

3 Clarity演示版安装

Clarity演示版可以通过以下两个方式获得：通过USB安装盘或从www.dataapex.com/downloads下载。

Clarity演示版使用USB安装盘安装：

插入USB。

运行INSTALL.EXE文件。

下载安装文件安装：

下载Clarity演示版。

如果安装软件不能自动运行，双击INSTALL.EXE文件。

安装向导将指导完成整个安装过程。选择目标目录之后，可以选择典型、自定义或完整版三种安装模式。

可以选择典型安装模式来完成整个安装过程。

注释： 典型安装虽然不会安装一些控制模块，但会安装一个成功的演示版所需的所有组件。自定义安装将会显示一个可选的表供用户选择需要安装的组件。

注意： 安装前请先卸载所有电脑中已安装的Clarity演示版软件，并且在安装向导中选择无需请求就覆盖所有文件能够遵循本手册在第7页第**"Clarity工作站概览"**节。

安装完软件后，在开始-所有程序菜单中会创建Clarity演示快捷方式并且

电脑桌面上回显示Clarity演示图标。安装过程中将会在系统配置下预配置四台仪器：有自动进样器的GC，LC，GPC扩展和DAD扩展。参考下图。

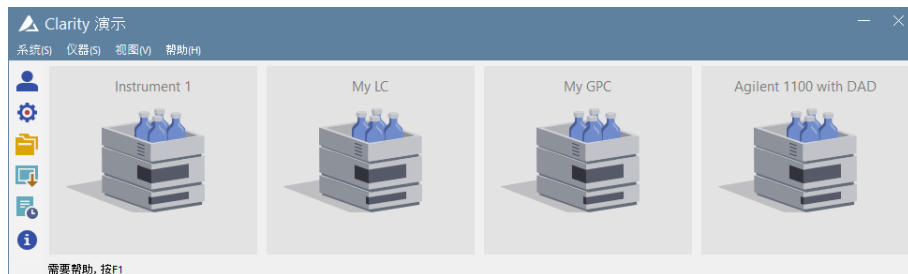


图1 Clarity演示版

审核其他Clarity扩展和项目参考在第21页第**"选择演示工程"**节。

4 软件的结构和控制

Clarity软件是分级结构。在启动了主窗口**Clarity**后,已配置的仪器将会被显示。

点击色谱图片后输入用户名(更多关于用户名的信息可以在**参考手册**内查看),**仪器**窗口将会显示。这个窗口被用来采集和处理来自自己连接的色谱仪的数据。

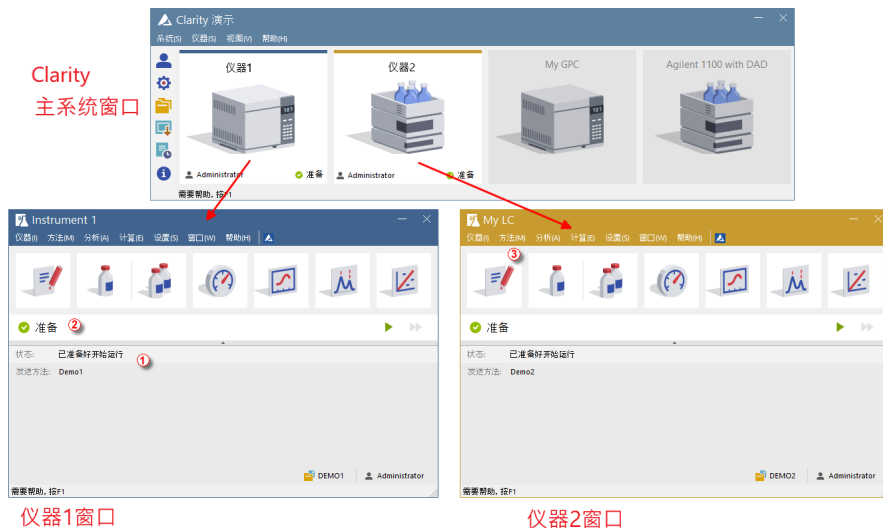


图2 Clarity和仪器窗口。

注释: **Clarity**工作站与对应的仪器联机工作。连接在同一台仪器上的所有检测器的时间轴是相同的。

主窗口**Clarity**可以设置工作站配置,选择登录权限和保存数据的路径。**仪器**窗口被用来测量和评估来自一个选定色谱仪的数据。在工作站的主窗口**Clarity**点击对应的色谱仪可以打开仪器窗口。根据仪器的数量,最多可显示四个**仪器**窗口。

每一个**仪器**窗口会包括信息表①,状态栏②,和分析-处理图③。通过分析处理图中的线条颜色和标头中的仪器名称来区分不同的仪器。可以通过点击**仪器**窗口相关的菜单栏或点击对应的图标来进入**仪器**窗口对应的相关对话框。

5 Clarity工作站概览

接下来两个章节将一步一步引导您完成单一分析(在第8页第“运行单一分析”节.), 以及序列进样和相关的过程(在第14页第“运行序列”节.). 这些章节显示为一系列的步骤, 所有的步骤都应该按照给定的顺序执行。有些部分可能被跳过, 因为我们准备了它们的输出供稍后使用。会在这些章节有相关的备注。此外, 整个过程还提供了注释——其中描述的过程是可选的, 您不需要执行它们来实现目标。

Clarity软件是直观的, 易于掌握的, 并且没有经历过相关培训的人都可以快速上手。第一次分析可以在安装工作站和配置硬件后不到一分钟内运行。

本概览主要是为了安装了**Clarity演示版**的用户编写。

注释: 虽然这只是一个针对**Clarity**初学者的概述, 但它假定用户具有基本的色谱原理知识和了解校正的基本流程。

6 运行单一分析

有一个简单的工程是针对仪器2(**My LC**)的基本功能编写的。它演示了如何开始单一分析。监控数据采集和处理色谱图结果。

6.1 仪器窗口

打开**Clarity演示**工作站。主窗口**Clarity**将会显示，并且会显示四个被配置过的仪器。

通过点击 **My LC**图标打开第二台仪器。**登录对话框**会打开。选择工程**DEMO2**。

用户名**Administrator**是预选择的。这个账户不需要输入密码，直接点击**OK**按钮。方法设置修改对话框将会显示。点击**确定**并按方法要求在**方法设置**对话框修改方法。本案例中使用的是**Demo2**工程，点击**确定**按钮。另外，可以点击**帮助**去了解更多方法调整内容。现在**仪器**窗口会显示在界面上。

注释：可以在主窗口**Clarity**菜单栏中系统-用户账号。。。添加属于自己的账号。

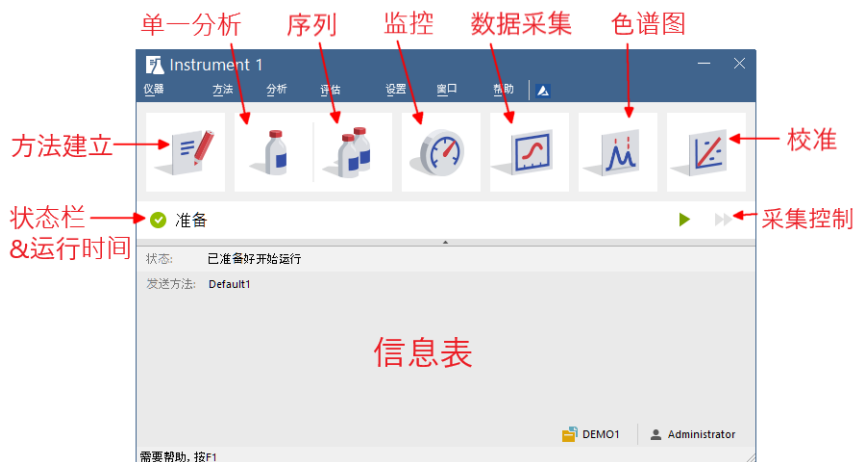
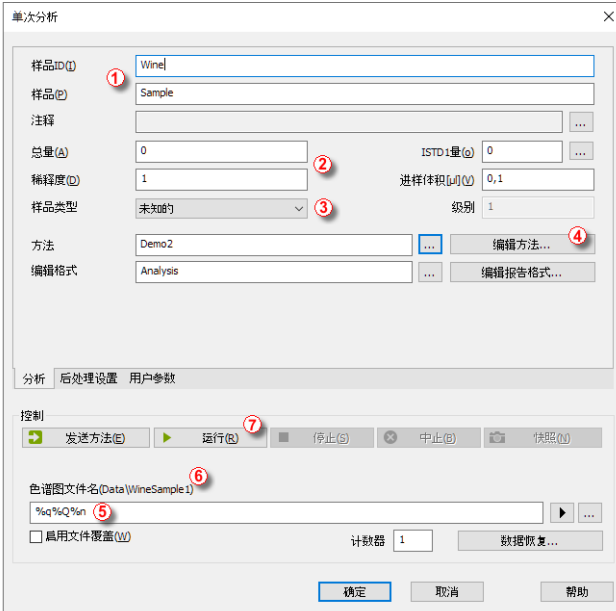


图3 仪器窗口

仪器窗口会打开；第8页第**图3**。中会显示最重要的几个图标。本次概述，我们将会讨论所有用这些图标点开的窗口。

6.2 单一分析对话框

在**仪器**窗口点击**单一分析**  图标可以打开**单一分析**对话框。



单一分析对话框包含以下元素：

- 样品ID (I)**: 输入框，显示 "Wine1" (标注 1)
- 样品 (P)**: 输入框，显示 "Sample"
- 注释**: 输入框，右侧有省略号按钮
- 总量 (A)**: 输入框，显示 "0" (标注 2)
- ISTD 1量 (Q)**: 输入框，显示 "0" (标注 2)
- 稀释度 (D)**: 输入框，显示 "1" (标注 2)
- 进样体积 (V)**: 输入框，显示 "0.1" (标注 2)
- 样品类型**: 下拉菜单，显示 "未知物" (标注 3)
- 级别**: 输入框，显示 "1" (标注 3)
- 方法**: 输入框，显示 "Demo2"，右侧有省略号按钮 (标注 4)
- 编辑方法...**: 按钮 (标注 4)
- 编辑格式**: 输入框，显示 "Analysis"，右侧有省略号按钮
- 编辑报告格式...**: 按钮
- 分析** 选项卡: 后处理设置 用户参数
- 控制** 区域:
 - 发送方法 (M)
 - 运行 (R) (标注 7)
 - 停止 (S)
 - 中止 (H)
 - 快照 (P)
- 色谱图文件名 (Data) (WineSample1)**: 输入框 (标注 6)
- %q%Q%n**: 输入框 (标注 5)
- 启用文件覆盖 (O)
- 计数器**: 输入框，显示 "1"
- 数据恢复...**: 按钮
- 确定**、**取消**、**帮助**: 底部按钮

图4 单一分析对话框

分析选项卡下的所有区域用来输入样品的相关信息。所有必要的参数都已经设置好了，但是我们仍然需要浏览它们。

样品ID和样品区域①仅仅是样品的相关信息，总量，稀释度，ISTD量和进样体积区域②的数据将来会用来做计算。

在样品类型下拉选项中选择标准，在级别区域③输入对应的标准品级别。这个样品将会被标记成标准品，并且色谱图将会保存至CALIB子目录。

样品采集将会按照**仪器**窗口中打开的示例方法所显示的实际值运行。编辑方法按钮④可以修改当前选择的示例方法中的参数。点击该按钮进入**方法设置**对话框，检查启用**自动停止**参数(启用**自动停止**是可选的并且**运行时间**设置成**7.5**分钟)。点击**确定**按钮返回**单一分析**对话框。

色谱图文件名⑤区域用来输入运行样品得到的色谱图文件名。可以使用纯文本和时间、日期、样本名称或其他参数的变量来创建唯一的色谱图文件名。最终得到的色谱图文件名和以上区域⑥输入的保持一致。

注释： 在点击了该区域并选择  图标后，可以看见所有可选的变量。

点击**运行**按钮⑦运行单一分析。此时**单一分析**对话框会关闭，如果再次打开该对话框，三个按钮将可用(**停止**，**中止**，**快照**)。它们将会允许停止

或中止分析，或者快照(查看在第11页第"**数据采集窗口**"节.)。
关闭**单一分析**对话框并返回**仪器**窗口。

6.3 数据采集窗口

在**仪器**窗口查看状态栏(查看第8页第图3.)。现在采集窗口被标识为运行状态并且当前的运行时间会显示在窗口中。

点击**数据采集图标**可以查看采集过程并且可以在该界面控制仪器,(查看第8页第图3.进入**数据采集窗口**)

在**数据采集窗口**可以看见两个信号。这是因为当前的仪器被配置了两个检测器①。



图5 数据采集窗口

在采集窗口底部的**状态栏**会显示采集信号的时间②、每个检测器③的实时信号和对应的单位。

注释: 如果超出检测器范围,则在检测器对应的状态栏中显示红色字体的OVER字符串。

通过点击**停止**和**放弃**图标,可以取消当前的数据采集。点击**停止**,Clarity会保存所有已采集得到的数据并且取消后面的进样,但是中止不仅仅会不再采集数据也不会保存当前进样已采集得到的数据。

点击**快照图标**,可以创建已采集数据的预览。点击后,色谱图窗口将打开与已测部分数据对应的色谱文件(更多关于**色谱图窗口**的信息可以前往在第12页第“**色谱图窗口**”节查找)。快照得到的**色谱图**会以不同的文件名被预保存在文件\另存为目录下,并且它会在采集结束后被完整的数据覆盖。

7分30秒后方法采集会自动停止(此时间是示例方法里设置的采集时间),并且**色谱图窗口**会打开。

注释: 可以通过**停止**或**放弃**图标在任何时间停止当前的数据采集。

工作站的设置,使得采集结束后**色谱图窗口**会自动打开。可以在**单个运行窗口**的**后运行**栏找到相关设置。同时可以在后运行栏设置数据的输出或运行外部程序功能。

6.4 色谱图窗口

可以在**仪器**窗口点击**色谱图**图标来打开**色谱图**窗口。

色谱图窗口被分成两个部分：上部是**图形窗格**，下部是**结果窗格**。

按住鼠标左键，选择要放大的区域，放大色谱图的任何部分。双击图，返回整个色谱图视图。

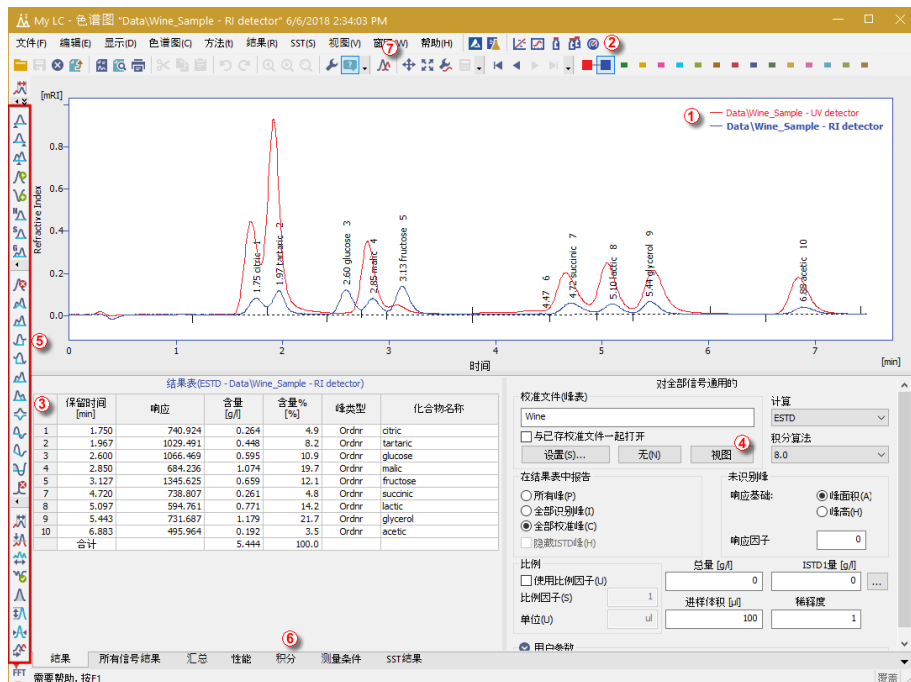



图6 色谱图窗口



此时的色谱图中只有一个信号被执行。从图例部分可以通过右上角的图形①识别出活动信号(活动信号以粗体显示)，在工具栏的重叠图标上②(活动的信号图标■会被高亮显示)或者通过色谱图轮廓颜色或表标题颜色来识别哪个是活动信号。表中的数值可以通过激活信号来改变。通过在图例部分双击活动信号的名称①来更改活动信号。通过点击工具

栏中重叠功能后选择未使用的颜色■来更改活动信号的颜色。在前面步骤提到的**色谱图**窗口所有部分都会修改颜色。在重叠工具栏②对应的活动信号图标(■)返回到对应的信号。

点击**结果表**③的任意行。之前单击的行对应的峰(或多个峰)将根据信号的颜色更改颜色。这些改变将会持续到鼠标的选择从**结果表**中取消。

点击**结果表**右侧的**视图**按钮④，为色谱峰添加永久图标。这个操作将会链接进校准文件。在校准汇总表，找到峰颜色列(查看第17页第图9)。

在需要修改颜色的峰对应的行中，选择适当的颜色并单击**确定**。通过菜单栏的图标返回**色谱图**窗口。现在在**校准**窗口设置的色谱峰颜色会显示在当前色谱图上。

可以使用**色谱**窗口左侧的工具栏对应的图标或者直接点击下部的**积分**标签来修改当前活动的色谱峰的积分。使用任何方式对积分进行修改都将反应在**积分表**中，并且可以被保存至示例的方法下。可以通过**方法-保存成模板**来完成保存。

注释： 如果需要使用改动后的积分表来分析色谱图，复制**积分表**并粘贴至模板方法。新的色谱图将会用模板中已经修改后的积分参数自动进行积分。已经得到的数据结果可以重新处理。(更多信息请参考第**19**页第**关联校准和方法**节)。

在对**仪器 1 (My GC+AS)**进行操作前，先关闭**仪器 2 (My LC)**。两个**仪器**界面同时打开进行参数设置可能会发生混淆，并不是软件不支持两个工作站同时打开。关闭工作站时，工作站会提示保存所有已修改但未保存的文件。

7 运行序列

序列操作允许自动测量大量样品，用于配备了自动进样器的色谱仪。**Clarity**提供了选择**主动**(由工作站控制的启动)或**被动**(由自动进样器控制的启动)序列两种选择。也可以重新处理已经测量的序列。

注释： 不需要**AS控制**模块即可使用自动采样器；即使没有启动同步，也可以执行启动同步。然而，控制模块可以添加直接控制从**Clarity**自动发送小瓶位置，进样体积等，而不需要从AS自带的键盘编辑。

本章节和**仪器1**中准备好的**Clarity**演示工程将会引导您完成用于自动进样测量的序列，校准和方法设置窗口中相关的设置以及如何准备方法模板。

7.1 序列窗口

在主窗口**Clarity**，打开**仪器1**(被标识为**My GC+AS**)。

登录对话框会显示预先选择的**Administrator**用户，点击**确定**按钮。

在**仪器**窗口点击**序列**按钮进入**序列**窗口。






图7 序列窗口


查看序列表。通过**起始瓶**，**终止瓶**和**进样次数**①的设置可以在每一行定义一次或多次进样分析。如图例中所示，第一到第四行都是各定义了一个进样(它们的**起始瓶**和**终止瓶**是相同的，**进样次数**是1)，第五行定义了八个进样(它的**起始瓶**是5，**终止瓶**是8，总共是4个样品瓶，**进样次数**是2，每个进两次样)。


也注意一下**样品类型**和**等级**②两列，前面四个样品被标记为标准品，级别是1-4。这几行运行得到的数据将会自动建立校准(如果校准汇总表内有相关数据将会重新校准)。

方法名列③可以选择示例方法来测量样品。**报告格式列**④用来设置被测样品的报告打印类型。每一行可以选择各自的方法和报告类型，一个序列中可以使用多个方法。


文件名列⑤用来设置测量得到的色谱图数据文件名。可以使用几种变量来表达色谱图文件名，例如**%Q**表示文件名将直接引用来自**样品列**输入的名称。可以将这些变量与纯文本或符号组合在一起，为每个色谱图创建一个唯一的文件名。在点击了该区域并选择图标后，可以看见所有可选的变量。


点击  图标 ⑥，可以检查序列的正确性。**Clarity** 将会将正确无误的每一行的前面标志修改为绿色()，这意味着这些行已经就绪；有警告的行也会有  信息，这意味着这些行有错误设置需要修改。




注释： 本示例中仅仅为了演示，所以可以尝试序列中有错误并检查序列。例如，修改第**3**行的样品列为 **Std_1**，马上就可以看见警告显示在第三行前面-1和3。点击  图标，警告消息出现，显示有两行将产生具有相同文件名的色谱图。将鼠标放在任何一个字段上面，都将显示导致问题的工具提示。将序列设置回原始状态并继续下一步。

点击  图标 ⑦ 运行序列。主动序列状态切换至等待进样，并且自动进样器将会检测到就绪信号，序列运行将开始。

注释： 即使自动进样器没有连接，**Clarity演示版** 也会得到就绪的信号，从而开始序列运行。但是，不可能为每个色谱图生成单独的演示数据，因为所有色谱图都是相同的。所有需要的演示数据都已经准备好了。可以在**数据采集**窗口或**序列**窗口立刻或稍后停止/中止序列运行。

当序列列表中的第一行运行结束后，仪器将会切换成进样等待状态，自动进样器将通过发送就绪信号开始新的测量。在**数据采集**窗口或**序列**窗口点击**停止**  按钮可以停止序列运行。(单击意味着当前采集结束后序列停止，双击意味着马上停止序列运行)。所有测量得到的数据将被保存。

或者使用**中止**  按钮中止运行(不会保存任何色谱图)。

已经完成运行的行的状态栏将从绿色()变成小色谱图()。如果从这一行得到色谱图，小三角形就会出现在图标中- 。鼠标左键点击三角形将会显示打开色谱图的选项。可以点击色谱图的名称去打开色谱图或选择所有需要重叠的色谱图来打开这些色谱图。需要了解更多关于**序列**的信息可以点击**F1**调用**帮助**。

注释： 甚至在运行期间也可以编辑序列。

在**序列**窗口的右边可以在每一行检查相应的色谱图是否打开、打印或导入校准窗口。

7.2 校准窗口

下面介绍如何进行校准。

在**仪器**窗口点击校准  按钮来打开**校准**窗口。

注释： 如果需要跳过接下来的创建新的校准步骤，可以打开(点击**文件-打开**)我们准备好的校准文件 **DEMO1.CAL** 这个文件是预留的用来测试**校准**窗口相关功能的文件。本案例中可以按照在第**18**页第**"关联校准与色谱图"**节继续。

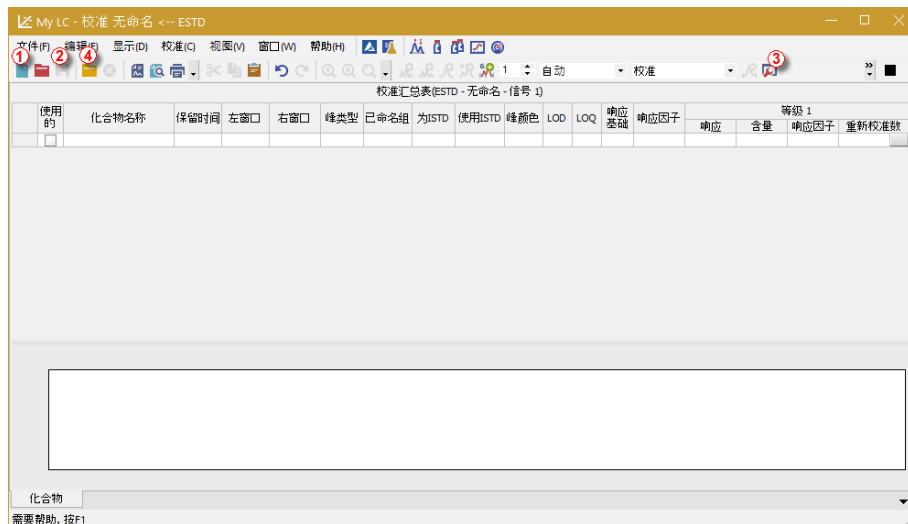


图8 校准窗口-空

现在需要创建新的校准。点击 **新校准** 图标①来建立新的校准。在本示例中校准保存在 **CALIBDEMO** 文件下。

注释： 必须在保存校准文件时修改文件名，并且至少填入第一行化合物名称。(无命名.CAL是工作站保留文件不能被修改)。可以通过以下方式保存校准文件：点击 **保存校准** 图标②；菜单栏点击 **文件-保存或文件-另存为**。

点击 **校准选项** 图标③，在校准选项对话框中将显示模式修改成 **ISTD** (在对话框的右上角)，点击 **确定** 按钮。

接下来需要导入标准品数据。使用 **打开标准** 图标(黄色)④打开 **STD1.PRM** 数据文件。现在在 **校准** 窗口的下方会显示标准品的色谱图。

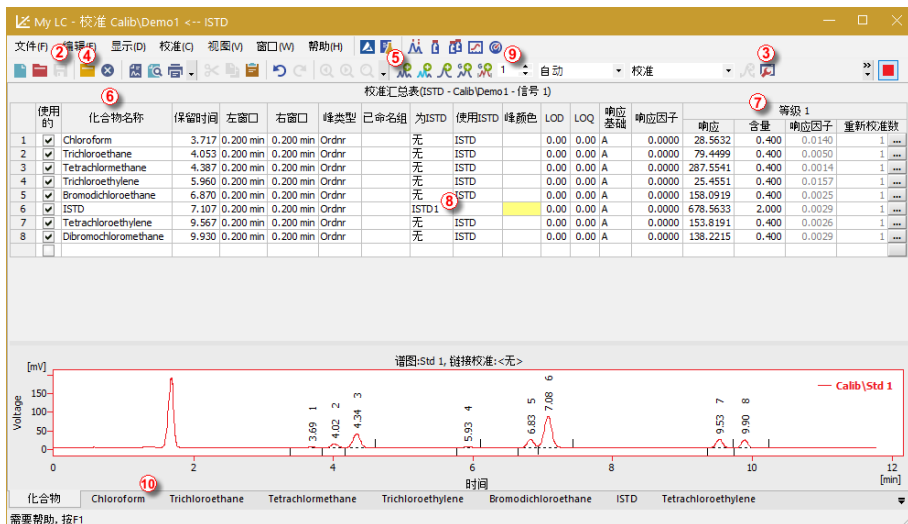



图9 校准窗口-打开标准



为了设置校准级别是1需要检查当前级别区域⑨已经设置成1。点击增加所有图标(蓝色)⑤将所有已定义的色谱峰添加至校准表。校准窗口中的校准汇总表将按第17页第图9显示。


在校准中可以清楚地看到,现在只根据保留时间来定性色谱峰。按照第17页第图9所示填写化合物名称列⑥。也可以在峰颜色列为一些峰设置峰颜色,例如内标物峰。

根据对应的化合物浓度填写含量列⑦的数值。在本混合标准品中,除了第六个色谱峰,其余化合物的含量都是0.4。


第六个峰被标记为ISTD峰。在为ISTD列更改该化合物的类型为ISTD1⑧,并在含量列将数值修改为2。


校准的第一个级别已建立结束。在下面的对应各个化合物页签⑩(根据化合物名称定义)点击开可以查看对应化合物的单级校准曲线。

接下来设置其他的校准级别。操作非常简单直接-再次点击打开标准图标(黄色)④,打开另一个标准品数据STD2.PRM。在当前等级栏⑨将校准级别设置成2并点击添加所有峰图标(蓝色)⑤。将所有色谱峰的含量设置成1.0(除去内标物峰,它将继续使用2这个数值)。

使用STD3.PRM的数据文件作为第三个校准级别的数据,含量设置为3.0;使用STD4.PRM的数据文件作为第四个校准级别的数据,含量设置为5.0;每个级别中ISTD的含量都保持2不变。可以在下部的对应各化合物页签⑩中查看四点的校准曲线。点击保存校准图标②来保存校准文件;校准文件被保存在默认路径下的CALIBDEMO.CAL文件中。

7.3 关联校准与色谱图

任何色谱图都可以关联到校准文件，从而自动计算出定量结果。在 **仪器** 窗口点击 **色谱图**  图标打开 **色谱图** 窗口。

点击 **打开色谱图**  图标根据您刚刚创建的校准打开色谱数据。在默认文件夹中选择 **SAMPLE_VIAL_6-1.PRM** 文件。目录中的其他文件也没有经过校准，但稍后将使用它们。

数据是未经校准的，没有关于单个化合物名称的信息；**结果表** 中的峰只是根据它们的保留时间来描述的。要改变这一点，应该将对应的校准文件与这些数据联系起来。

选择 **结果** 选项卡并查看屏幕右侧的部分。在校准文件(峰表) 栏中点击 **设置按钮**，选择上一章节创建的校准文件(它应该在默认文件夹下被命名为 **CALIBDEMO.CAL**)。校准中出现的所有峰现在都可以在色谱图中以其名称识别出来。

注释： 如果你跳过了自己校准的过程，请用 **DEMO1.CAL** 替代 **CALIBDEMO.CAL**。

7.4 关联校准和方法

如果有大量的色谱图，将校准结果分别与每个文件连接起来将是一个耗时的过程。为了解决这个问题，校准可以自动链接到结果色谱图。

返回**仪器**窗口并点击**方法-校准**菜单可以直接打开**方法设置**中的**校准**选项卡①。或者，可以通过菜单栏中其他的选项，例如：**积分**，**测量**或**采集**，来进入校准选项卡。所有这些选项都是方法设置的一部分。

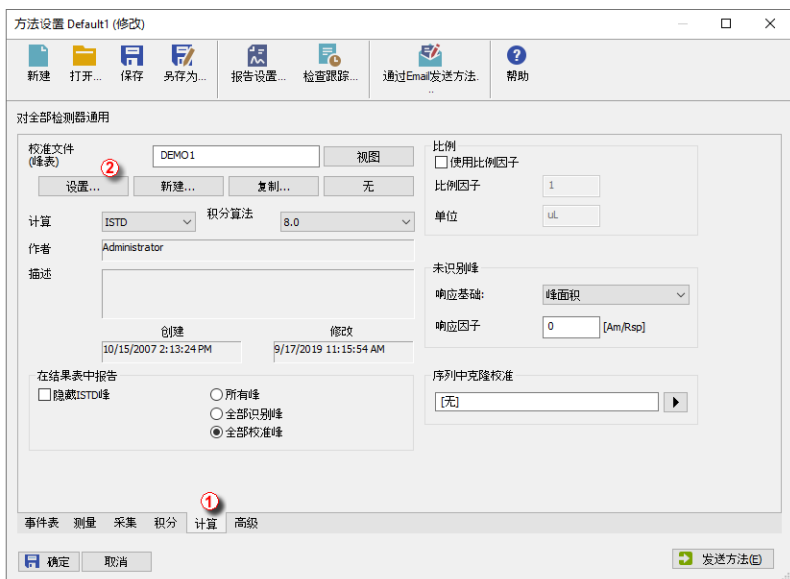


图10 方法设置-计算对话框

点击**设置**按钮②选择校准文件并关联至方法。

点击**确定**按钮退出**方法设置**对话框。单击此按钮将应用此更改并将其保存到模板方法。

今后用这种模板法分析的任何色谱图都将与当前校准相关联。

7.5 将校准与一系列已测得的色谱图关联起来

如果已经得到了一系列的色谱图，希望修改或更新新的校准和它们相关联，可以通过单击**批处理**来完成。

如果有大量已测数据并且希望分析修改它们，这个功能是非常有用的。

揭下来的步骤会具体描述如何在已测量的色谱图中修改校准文件。

进入**仪器**窗口，点击**分析-批量**菜单。

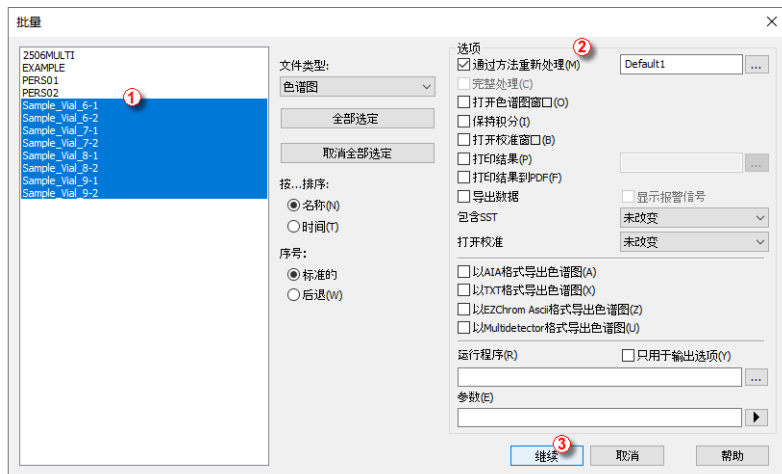




图11 批量对话框会要求选择色谱图。

在对话框的左侧①选择需要重新处理的文件；可以通过 **Ctrl** 或 **Shift** 键和鼠标左键选择多个数据文件。在 **DATA** 文件夹下选中所有以 **SAMPLE_VIAL_X-Y** 命名的文件夹进行重新处理，勾选 **通过方法重新处理**②复选框，并且点击 **继续**③按钮。使用当前已有校准文件的方法对需要校准的数据进行处理后，所有已选择的色谱数据目前都具有了校准。

注释： 此外，需要批量处理的色谱图需要保存在当前项目文件夹中。

打开 **色谱图** 窗口，调用任一个已经被重新处理的文件（例如 **SAMPLE_VIAL_7-2.PRM**）查看 **结果表**。校准中出现的所有峰现在都已被识别并校准。

可同时显示多个色谱图。在 **重叠** 工具栏中点击 **重叠**  按钮可以切换到重叠模式。图 Fig "Chromatogram window" 第⑦) 然后点击 **文件-打开色谱图** 或 **打开色谱图**  图标。现在可以 **打开在打开色谱图** 对话框中选择多个数据文件。

8 选择演示工程

Clarity演示版打开的时候有四个默认的项目：**GC**、**LC**、**GPC**和**PDA**。**GC**和**LC**项目已经在本手册的前几章中进行了描述。另外还有一些项目：**EA**（元素分析），**NGA**（天然气分析），**DHA**（碳氢化合物分析），**MS**（质谱）和**GCxGC**（二维气相色谱）。

使用如下方式查看附加工程：

Launch Manager用来将Clarity演示版设置成需要的状态。

参考你能找到的相应的手册

通过安装的USB文件(所有的**Clarity** 手册/扩展)

或者从www.dataapex.com网站下载

Launch Manager

在Windows开始菜单中调用可用的**Launch Manager**①。

Select Clarity Profile对话框将会打开。

选择需要的工程并点击**Launch**按钮②。

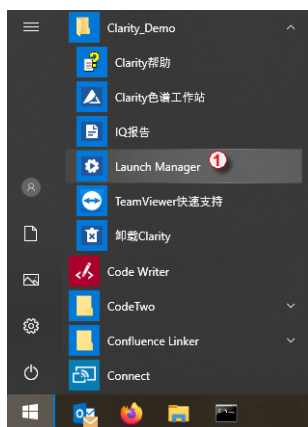


图12 开始菜单

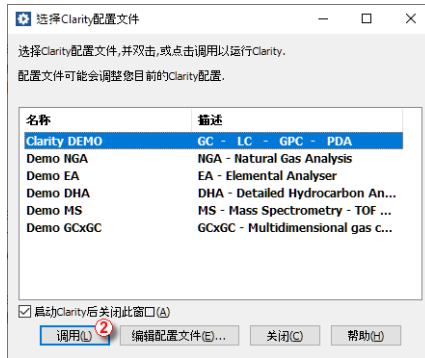


图13 Launch Manager

8.1 GPC演示工程

GPC是凝胶渗透色谱的缩写(它也叫**SEC-体积排阻色谱**)。**Clarity**工作站提供**GPC**分析的几种校准模式(窄,宽,渐进)在仪器3中被标记为**My GPC**的工程被用来测试具有**GPC**扩展的**Clarity**工作站的能力。工作站中有二十个色谱图和五个校准文件用来做测试。了解更多**GPC**模块的功能,请查看**GCxGC**扩展手册(前往www.dataapex.com下载)。

8.2 PDA演示工程

Clarity工作站也可以处理来自**PDA(二极管阵列检测器)**也叫**DAD(二极管阵列检测器)**的数据。光谱数据的第三维可以以多种方式显示,包括3D显示。在仪器4中被标记为**Agilent 1100 with DAD**的工程被用来测试具有**PDA**扩展的**Clarity**工作站的能力。已准备好几个色谱图和两个校准用来做测试。了解更多**PDA**模块的功能,请查看**PDA**扩展手册(前往www.dataapex.com下载)。

8.3 NGA演示工程

Clarity工作站包括一个**NGA(天然气分析)**模块,该模块用于天然气和液化石油气的数据处理。在**Clarity**包括了整套的完整流程后,就不再需要外部工具进行相关的计算。这个流程可以进行数据采集,峰校准,根据相关的规范和报告要求的气体特性计算。可以从很多的信号和色谱图来进行气体的总结计算。**NGA**扩展中的计算目前支持以下几点:

天然气

ISO 6976-95

ASTM D 3588-98

GPA 2172-09

液化石油气

ASTM D 2421-02

ASTM D 2598-02

ISO 8973-97 / EN589-04

该工程(仪器被标记为**NGA**)能够启动包括**NGA**扩展的工作站。**Clarity**已准备好两个色谱图和一个校准用来做测试。了解更多**NGA**模块的功能,请查看**NGA**扩展手册(前往 www.dataapex.com 下载)。

8.4 EA演示工程

Clarity工作站包括一个**EA(元素分析)**软件模块,这个模块被用来测定碳,氢,氮,氧,硫(**CHNS-O**),这些物质的分析也是化学分析中的基本需求。**EA**扩展提供了**Clarity**用户界面的简化版本,通过配备自动进样的元素分析仪加速了工作流程。**EA**扩展是**Clarity**软件的一个可选的附加功能,它不能作为一个独立的程序使用。它对用户界面进行了优化,可以最大限度地提高重复任务的效率。使用针对**EA**分析的特性,如标准表、来自分析天平的自动称重输入和其他改进,**EA**扩展提供了一个交互式的自动工具来测定碳、氢、氮、氧和硫(**CHNS-O**)未知内容。

该工程(仪器被标记为**EA**)能够启动包括**EA**扩展的**Clarity**工作站。已准备好几个色谱图和一个校准用来做测试。了解更多**EA**模块的功能,请查看**EA**扩展手册(前往 www.dataapex.com 下载)。

8.5 演示DHA工程

Clarity工作站包括一个精细烃类物质分析的软件模块,这个模块被叫做**DHA(精细烃类分析)**。它允许测定火花点火发动机燃料中的单个成分。**Clarity**能够直接在数据工作站中计算样本的属性,并根据支持的规范和报告完成数据采集、峰校准、**DHA**计算等工作流程。这些方法通常被称为**PONA**, **PIONA**, **O-PONA**, 等。工作站中可以创建符合实验室条件的自定义规范。**DHA**扩展中的计算目前支持以下几点:

ASTM D-6730

自定义方法-允许创建符合实验室条件的自定义规范。

该工程(仪器被标记为**DHA**)能够启动包括**DHA**扩展的**Clarity**工作站。已准备好几个色谱图和两个校准用来做测试。了解更多**DHA**模块的功能,请查看**DHA**扩展手册(前往 www.dataapex.com 下载)。

8.6 MS演示工程

ClarityMS(质谱)扩展包是一个用来处理采集自质谱检测器的数据的工具。质谱数据和色谱数据构成了三维色谱图。

Clarity的**MS**扩展包具有交互式质谱图分析,峰纯度分析和谱库检索的能力。该扩展可用于单四极质谱探测器和TOF质谱探测器。**Clarity**可以同时采集和检测来自四台色谱仪的数据(可以支持大量的检测器)。任何**Clarity**内的仪器都可以使用**MS**扩展功能。

所有数据都保存在一个文件中;任何m/z值的色谱图,甚至仅仅是一个光谱,在分析之后都可以简单地回顾。使用质谱检测器获取的质谱可以从色谱信号中交互选择,以便进行视觉检查和比较。该光谱还可用于峰纯度测定和通过光谱库进行成分鉴定。可以导入AIA (cdf)、mzXML、MzML和mzData格式的MS数据。

该工程(仪器被标记为**MS - TOF**)能够启动包括**MS**扩展的**Clarity**工作站。已准备好几个色谱图和一个校准用来做测试。该数据集包含使用统一精度的TOF MS检测器获取的数据。了解更多**MS**模块的功能,请查看**MS**扩展手册(前往www.dataapex.com下载)。

8.7 GCxGC演示工程

ClarityGCxGC (二维气相) 扩展是一个设计给二维气相色谱数据做可视化与处理的工具。它是只有在**Clarity6.0**版本或以上的一个可选扩展包。通过在配备两个色谱柱和一个调制器的任何气相色谱仪上测量色谱图,提供相互分析和化合物识别功能,扩展了**Clarity**分析能力。

在一台经典的二维气相色谱系统中,第一根色谱柱的分离取决于化合物的沸点,第二根色谱柱的分离取决于化合物的极性。这将生成高度结构化的二维色谱图。

在仪器中被标记为**My GCxGC**的工程被用来测试具有**GCxGC**扩展的**Clarity**工作站的能力。已准备好几个色谱图和一个校准用来做测试。了解更多**GCxGC**模块的功能,请查看**GCxGC**扩展手册(前往www.dataapex.com下载)。