Empower PDA 软件

入门指南

Waters
34 Maple Street
Milford, MA 01757

715030315MD，版本 A

声明

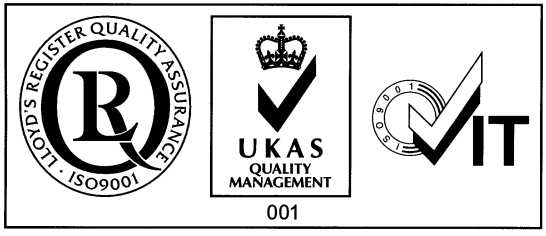
本文档中的信息如有更改，恕不另行通知，不应认为是 Waters Corporation 的义务。Waters Corporation 对本文档中可能出现的任何错误不负任何责任。本文档在出版时被认为是完整并且准确的。任何情况下，对与使用本文档有关或因使用本文档而导致的偶发或继发的损害， Waters Corporation 不负任何责任。

© 2002 WATERS CORPORATION。在美国印刷。保留所有权利。未经出版商的书面允许，不得以任何形式转载本文档或其中的任何部分。

Millennium 和 Waters 是 Waters Corporation 的注册商标，Empower 是 Waters Corporation 的商标。

Microsoft、 Windows 和 Windows NT 是 Microsoft Corporation 的注册商标。

所有其它商标或注册商标均为其各自所有者的专有资产。



目录

前言 ix

第 1 章
PDA 软件概述 1

1.1 什么是 PDA 软件？ 1
1.2 指南概述 3
1.3 还原 PDA 项目 4

第 2 章
查看 PDA 数据 9

2.1 指南概述 9
2.2 在 “查看”中查看数据 9
2.3 显示 3D 图 16
2.4 放大图 18
2.5 提取色谱 20
2.6 提取光谱 24
2.7 标注色谱和光谱 29
2.7.1 添加注释 30
2.7.2 删掉注释 33
2.7.3 注释工具 34

第 3 章
峰纯度处理 35

3.1 指南概述 35
3.2 衍生色谱 36
3.3 开发 PDA 处理方法 39
3.3.1 查看、修改和保存方法组 53
3.3.2 查看峰纯度计算 55

3.4 查看峰纯度结果 57
3.4.1 使用光谱指数 57
3.4.2 使用结果窗口 62

第 4 章
谱库匹配 69
4.1 指南概述 69
4.1.1 创建库的步骤 69
4.1.2 谱库匹配的步骤 70
4.2 创建新库 71
4.3 将光谱与谱库匹配 78
4.3.1 为进行谱库匹配修改现有处理方法 78
4.3.2 为谱库匹配创建新处理方法 84
4.3.3 执行谱库匹配 97
4.4 查看谱库匹配结果 99

第 5 章
打印报告 105
5.1 预览报告 105
5.2 后台打印 108

附录 A
缺省 PDA 报告 111

索引 131

图形列表

1-1 Empower 登录对话框 4
1-2 Empower Pro 窗口 5
1-3 配置管理器 6
1-4 还原项目向导 - 启动软件页 7
1-5 带有还原的 PDA_Default 项目的配置管理器 8

2-1 Empower Pro 窗口 10
2-2 “浏览项目”对话框 11
2-3 项目窗口 12
2-4 用 PDA 数据查看，不提取色谱 13
2-5 3D 布局中最大化的查看 - 主窗口 14
2-6 “查看”工具条按钮 15
2-7 样品 3D 图窗口 17
2-8 创建缩放框 18
2-9 轮廓线图的缩放视图 19
2-10 缩放选项卡 20
2-11 254 纳米波长处提取的色谱 21
2-12 280 纳米波长处提取的色谱 22
2-13 波长 254 和 280 纳米处的重叠色谱 23
2-14 在 1.388 分钟提取的光谱 25
2-15 重叠的提取光谱 26
2-16 光谱表 27
2-17 归一化的光谱 28
2-18 查看光谱点：吸光度与波长 29
2-19 注释工具 30
2-20 对象的 “标记对象属性”对话框 31
2-21 文本的 “标记对象属性”对话框 32
2-22 注释示例 33

3-1 PDA_Default 项目的项目窗口 37
3-2 查看带有最大值图色谱的主窗口 38
3-3 查看 254 纳米色谱的主窗口 39
3-4 处理方法向导对话框 40
3-5 新处理方法对话框 40
3-6 积分 - 峰检测 1 页面，全视图 41
3-7 设置峰宽参数 42
3-8 积分 - 峰检测 2 页面 43
3-9 设置阈值参数 44
3-10 积分 - 积分区域页面 45
3-11 积分 - 剔除峰页面 46
3-12 名称和保留时间页面 47
3-13 PDA 纯化 / 匹配页面 48
3-14 PDA 光谱对照页面 49
3-15 设置噪音间隔 50
3-16 处理方法名页 51
3-17 查看中的积分色谱 52
3-18 方法组编辑器窗口 53
3-19 方法组目录区 54
3-20 保存当前的方法组对话框 54
3-21 修改和保存后的方法组编辑器窗口 55
3-22 峰表中的纯度角度和纯度阈值 56
3-23 顶点光谱 58
3-24 与最大不纯度光谱重叠的顶点光谱 59
3-25 峰 1 光谱已缩放的最大不纯度光谱 60
3-26 峰 2 光谱已缩放的最大不纯度光谱 61
3-27 峰 3 光谱已缩放的最大不纯度光谱 62
3-28 结果窗口 63
3-29 纯度图 64
3-30 图属性对话框 65
3-31 带有最大不纯度指示标记的纯度图 66

4-1 谱库匹配的步骤 70
4-2 为库选择数据 71
4-3 查看主窗口 72
4-4 “打开现有的方法组”对话框 73
4-5 对羟基苯甲酸酯标准样色谱 74
4-6 “创建新的库”对话框 75
4-7 选中了光谱的 “查看光谱” 76
4-8 “添加光谱到库”对话框 77
4-9 PDA_Default 项目的项目窗口 79
4-10 查看 - 主窗口 80
4-11 积分 254 纳米处的混合物色谱 81
4-12 处理方法窗口 82
4-13 PDA 库查询选项卡 83
4-14 “处理方法向导”对话框 84
4-15 “新处理方法”对话框 85
4-16 积分 - 峰检测 1 页面，全视图 86
4-17 设置峰宽参数 87
4-18 积分 - 峰检测 2 页面 87
4-19 设置阈值参数 88
4-20 积分 - 积分区域页面 89
4-21 积分 - 剔除峰页面 90
4-22 名称和保留时间页面 91
4-23 PDA 纯化 / 匹配页面 92
4-24 PDA 光谱对照页面 93
4-25 设置噪音间隔 94
4-26 PDA 匹配库页 95
4-27 处理方法名页 96
4-28 有谱库匹配结果的处理过的色谱 97
4-29 有谱库匹配结果的积分后的色谱 98
4-30 有谱库匹配的光谱指数 99
4-31 重叠的谱库匹配光谱 100
4-32 显示谱库匹配图的结果窗口 101

4-33 谱库匹配图和谱库匹配选项卡 102
4-34 三重图：谱库匹配 103

5-1 项目窗口 105
5-2 打开报告方法对话框 106
5-3 预览示例报告 107
5-4 项目窗口 108
5-5 后台处理及生成报告对话框 109
5-6 样品报告 110

前言

*Empower PDA 软件入门指南*介绍了如何使用 Empower™ PDA 选项开发峰纯度和谱库匹配的 PDA 处理方法以及查看 PDA 结果的基础知识。

本指南适合于从精通电脑和软件的专家到初学者的广大用户。

结构

本指南包含以下内容：

第 1 章 介绍 Empower PDA 软件。

第 2 章 介绍查看 PDA 数据的基础知识。

第 3 章 介绍如何衍生色谱以及如何开发峰纯度处理方法。

第 4 章 介绍如何创建谱库并将光谱与谱库匹配。

第 5 章 介绍打印报告的基础知识。

附录 A 给出了 Empower 软件中可用的各种 PDA 报告的示例。

相关文档

Waters 许可、担保和支持：提供软件许可和担保信息、介绍培训和扩展支持、解释 Waters 公司如何处理运输、损坏、索赔和退货事宜。

在线文档

Empower 帮助：介绍基本软件以及软件选项的所有 Empower 窗口、菜单、菜单选项和对话框。还包括使用 Empower 软件所需执行的所有任务的参考信息和过程。它们是 Empower 软件的组成部分。

Empower 自述文件：介绍产品功能与改进、帮助性提示、安装和 / 或配置注意事项以及自前一版本后的更改。

Empower LIMS 帮助：介绍如何使用“Empower LIMS 界面”导出结果和导入工作列表。

Empower Toolkit 专业版帮助：介绍如何使用公共对象模型、基于信息的协议，以便使用 Empower 软件与来自第三方的应用程序进行通信。

基本产品的印刷文档

Empower 软件入门指南：介绍 Empower 软件的入门知识。介绍使用 Empower 软件采集数据、开发处理方法、查看结果和打印报告的基本方法。还介绍有关管理项目和配置系统的基本信息。

Empower 软件数据采集和处理原理指南：介绍与数据采集、峰检测和积分以及样品组份定量有关的原理。

Empower 系统安装和配置指南：介绍 Empower 软件的安装，包括 Personal 独立工作站、 Workgroup 配置和 Enterprise 客户机 / 服务器系统的安装。讨论如何将计算机和色谱仪器配置为 “Empower 系统”的组成部分。此外，还介绍采集服务器的安装、配置及使用，如：LAC/E^{32} 模块、 busLAC/E™ 卡以及用于与串行仪器通讯的接口卡。

Empower 系统升级和配置指南：介绍如何添加硬件以及使用导入 - 导出升级方法对 Empower 软件进行升级。

Empower 软件系统管理员指南：介绍如何对 Empower Enterprise 客户机 / 服务器系统和 Workgroup 配置进行管理。

Empower 软件版本注释：包含产品的最新信息。此外，还提供具体 Empower 软件版本的相关补充信息。

软件选项的印刷文档

Empower System Suitability 快速参考指南：介绍 Empower System Suitability 选项的基本功能及其使用的公式。

Empower PDA 软件入门指南：介绍使用 Empower PDA 选项开发 PDA 处理方法和查看 PDA 结果的基本方法。

Empower GC 软件入门指南：介绍如何使用 Empower GC 选项开发 GC 处理方法和查看 GC 结果。

Empower GPC 软件入门指南：介绍如何使用 Empower GPC 选项开发 GPC 处理方法和查看 GPC 结果。

Empower GPCV 软件入门指南：介绍如何使用 Empower GPCV 选项开发 GPCV 处理方法和查看 GPCV 结果。

Empower Light Scattering 软件入门指南：介绍如何使用 Empower Light Scattering 选项开发光散射处理方法和查看光散射结果。

Empower ZQ Mass Detector 软件入门指南：介绍 ZQ 质谱检测器的安装、配置、校正和调整方法以及如何使用 Empower 软件对其进行操作。

Empower Chromatographic Pattern Matching 软件入门指南：介绍如何使用 Chromatographic Pattern Matching 选项开发色谱匹配处理方法并查看色谱匹配结果。

Empower Dissolution System 软件快速入门指南：介绍如何使用 Empower 软件操作 Alliance® Dissolution System。

Empower Toolkit 程序员参考指南：介绍如何使用公共对象模型、基于消息的协议，以便使用 Empower 软件与来自第三方的应用程序进行通信。

Waters Integrity System 入门指南：介绍 Waters Integrity® System 的功能，并提供循序渐进的指南，指导用户使用 “Empower 质谱分析 (MS)” 选项。

Empower AutoArchive 软件安装和配置指南：介绍如何安装和配置 Empower AutoArchive 选项。

Web 上的文档

可在 “环球网” 上找到相关产品信息及文档。网址为 http://www.waters.com。

文档约定

本指南中使用以下约定：

约定	使用情况
粗体	粗体代表用户操作，如：要按的键、菜单选项以及命令。例如，“单击**下一步**转到下一页。”
斜体	斜体表示需要您提供的信息，如变量。它也表示强调和文档标题。例如，“以实际文件名替换 *file_name*。”
`Courier`	Courier 表示源代码和系统输出示例。例如，“`SVRMGR>` 提示出现。”
`Courier 粗体`	在源代码示例中，Courier 粗体表示输入的字符或所按的键。例如，“在 `LSNRCTL>` 提示符处，输入 **`set password oracle`** 以访问 Oracle。”
键	*键*指小键盘或键盘上的计算机键。*屏幕键*指位于屏幕正下方仪器上的键。例如，“2414 检测器上的 A/B 屏幕键显示选定的通道。”
…	三个句点指示可以任意跟随多个同类项。例如，“可以在每个文件夹中存放*文件名 1*、*文件名 2*...。”
>	菜单选项之间的右箭头表示应该顺次选择每个选项。例如，“选择**文件 > 退出**”是指应先在菜单条中选择**文件**，然后从“文件”菜单中选择**退出**。

注

“注”介绍对操作员有帮助的信息。例如：

注：在进行下一步之前，先记录您的结果。

注意

“注意”提供有关防止对系统或设备造成损害的信息。例如：

注意：为了避免损坏检测器的流动池，不要触摸流动池窗口。

小心

“小心”提供保证操作员安全所需的重要信息。例如：

***小心：**为避免被灼伤，在拆下灯泡进行更换或调整前，请至少提前 30 分钟关闭灯泡。*

***小心：**为避免电击事故和人身伤害，请务必在执行维护工作前关闭检测器并拔下电源线。*

***小心：**为避免化学或电气危险，在操作系统时，请务必遵守实验室的安全规定。*

第 1 章
PDA 软件概述

本章介绍用于 PDA 检测器的 Empower™ 软件的基本功能、本指南的概述以及在您的工作站或客户机上还原样品 PDA 数据的过程。加载样品数据后，即可以多种方式查看和操作数据，如第 2 章，查看 PDA 数据中所述。

1.1 什么是 PDA 软件？

Empower Photodiode Array (PDA) 软件允许用 Empower 软件采集和处理光谱及色谱数据。 PDA 软件与“Waters® 996 PDA 检测器”和 / 或“Waters 2996 PDA 检测器”配套使用。

PDA 软件的功能

“Empower 系统”是色谱分析和结果的综合管理系统，能满足各种色谱分析需求。Empower 系统由以下几部分组成：

- 运行 Empower 软件的计算机。基本硬件配置为：
  - Personal – 运行 Empower 软件的独立工作站
  - Workgroup – 运行 Empower 软件的小型网络，最多有四台计算机
  - Enterprise – 运行 Empower 软件的客户机 / 服务器网络
- Empower 软件
- Empower 数据库

Empower PDA 软件是 Empower 软件的集成部分。用 PDA 软件进行 PDA 数据的采集、处理和报告需要使用 LC Empower 软件基础包。

LC Empower 软件基础包的功能

Empower 软件提供了基于图标的图形化用户界面，用于采集、处理和管理色谱数据。 Empower 软件在 Windows® 2000 专业版和 Windows XP 专业版操作系统下运行。Empower 软件还支持多任务操作，允许同时打开多个窗口。可在生成先前采集数据的摘要结果的同时查看实时数据采集的运行。

LC Empower 软件基础包提供用于以下操作的工具：

- 创建项目
- 配置色谱系统
- 开发仪器方法以控制色谱系统
- 从样品和标准样采集数据
- 开发处理方法以执行积分、校正和定量
- 处理数据和获取结果
- 创建报告方法以生成自定义报告
- 查看和打印报告
- 备份、删除、还原和复制单个项目的内容

PDA 软件功能

Empower PDA 软件支持下列功能：

- **PDA 仪器对话框** – 允许定义“996 PDA 检测器”和“2996 PDA 检测器”的控制参数。
- **实时 PDA 数据采集显示** – 允许绘制在“运行样品”中最新采集的光谱和波长，最多可绘制四个单独的实时数据采集图。
- **3D 背景扣除** – 允许使用方法组从第二 3D 色谱 （样品或标准样）减去标记的 3D 色谱 （溶剂背景），并在 “查看”中显示差异。此功能用于消除包含强紫外线吸收化合物的流动相的影响。
- **PDA 校正** – 允许检查波长校正、参比光谱、暗电流，以及曝光时间对光电二极管饱和度的影响。

- **PDA 诊断** – 允许在 “996 PDA 检测器” 和 “2996 PDA 检测器” 上运行内部和外部诊断。
- **查看** – 允许使用 “轮廓线” 图 （该图允许从 3D 数据提取、积分和处理 2D 色谱及光谱）和 “光谱指数” 图 （该图显示为 “色谱” 图中出现的峰选择的光谱）查看色谱和光谱。显示多个 PDA 纯度通道的最大不纯度。此外，还显示 “查看结果” 窗口，该窗口显示纯度和谱库匹配结果。
- **查看光谱光谱图** – 允许在 “查看” 中显示谱库、峰和提取的光谱、对库光谱进行搜索、创建衍生光谱以及创建和维护谱库。
- **查看光谱表** – 允许在 “查看” 中显示光谱和匹配结果数据，如：
  - “光谱” 表，该表提供所有已提取光谱和峰顶点光谱的图像，以及每一光谱上的完整数据，包括波长范围和采集 PDA 数据时采用的分辨率。
  - 带有谱库搜索结果的 “谱库匹配” 表
  - “光谱点” 表，提供波长和吸光度吸光度数据点

1.2 指南概述

本指南*不*涉及采集数据、优化积分、生成校正曲线、定量未知样、获取 2D 色谱结果以及执行特定 PDA 过程等方面的内容。有关这些主题的详细信息，请参阅 *Empower 软件入门指南*或 *Empower 帮助*。

本指南说明如何：

- 从 “Empower 软件选项” CD-ROM 中还原 PDA 数据。此数据用于本指南中的所有示例。
- 提取色谱和光谱。
- 开发处理方法。
- 计算峰纯度并检查峰纯度结果。
- 构建 UV 谱库并将未知光谱与谱库中的光谱进行匹配，同时检查谱库匹配结果。
- 生成报告。

开始操作前的准备

注：本指南使用 Empower Pro 界面。如果没有访问此界面的权限，请与系统管理员联系。

执行本指南中所述的过程之前，必须确保：

- 已经按 *Empower 系统安装和配置指南*或 *Empower 系统升级和配置指南*中的说明安装或升级了 Empower 软件。
- 已经查看并遵照了 *Empower 软件入门指南*中所述的基本操作过程，包括数据采集。
- 已经阅读了 *Waters 996 PDA 检测器操作指南*或 *Waters 2996 PDA 检测器操作指南*。
- 已正确配置打印机，以便与 Empower 软件配套使用。

1.3 还原 PDA 项目

要完成本指南，需还原名为 PDA_Default 的 PDA 示例项目。该项目包含本指南所有示例中均使用的样品 PDA 数据。使用 “配置管理器”中的 “还原项目向导”将项目数据还原到您的计算机中。 PDA 项目位于 “Empower 选项” CD-ROM 中。

要还原 PDA 项目 PDA_Default：

1. 双击 **Empower 登录**桌面图标，启动 Empower 软件。也可以选择**开始 > 程序**（对于 Windows XP，为**所有程序**）**> Empower > Empower 登录**。将显示 “Empower 登录”对话框 （图 1-1）。

Personal 系统　　Workgroup 或 Enterprise 系统

图 1-1 Empower 登录对话框

2. 输入用户名和密码。如果不知道用户名或密码，请与系统管理员联系。
3. 如果使用 Empower Enterprise 系统，请从“数据库”列表选择正确的数据库。此列表只在连接到客户机 / 服务器系统时出现。
4. 单击**高级**并检查“需要的界面”字段是否设置为 Pro。如果不能选择 Empower Pro 界面，请与系统管理员联系。
5. 单击**确定**。出现 Empower Pro 窗口，其上显示登录用户的名称 （图 1-2）。

图 1-2 Empower Pro 窗口

6. 单击**配置系统**（图 1-2），用视图表中显示的可用项目打开“配置管理器”（图 1-3）。

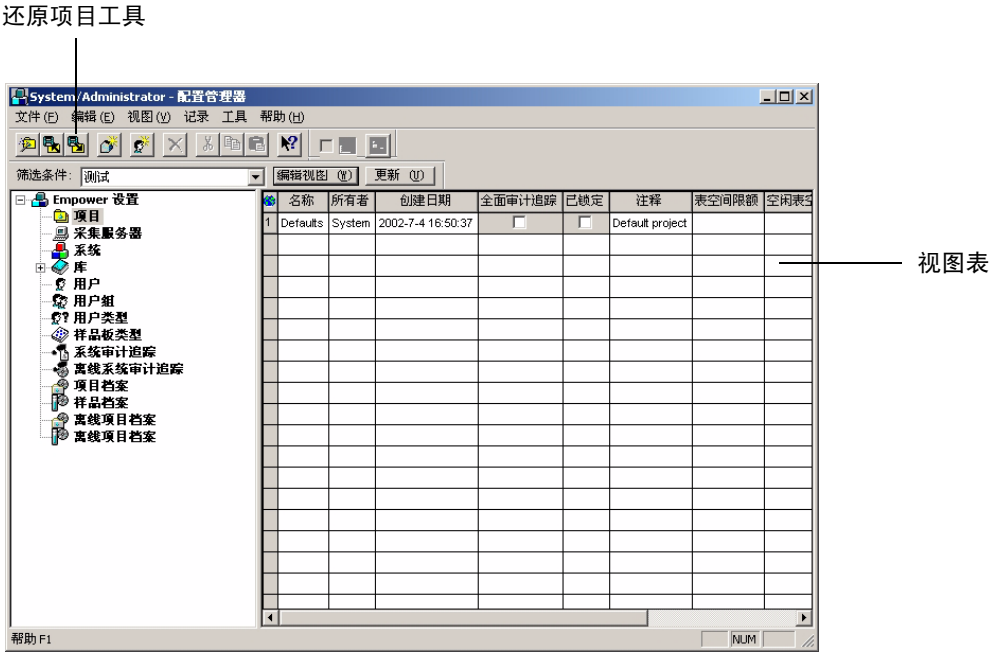


图 1-3 配置管理器

7. 单击 （还原项目）（图 1-3），启动“还原项目向导”（图 1-4）。

8. 单击**浏览**按钮，选择 CD-ROM 驱动器路径，如图 1-4 所示。驱动器盘符可能与图 1-4 中的盘符不同。

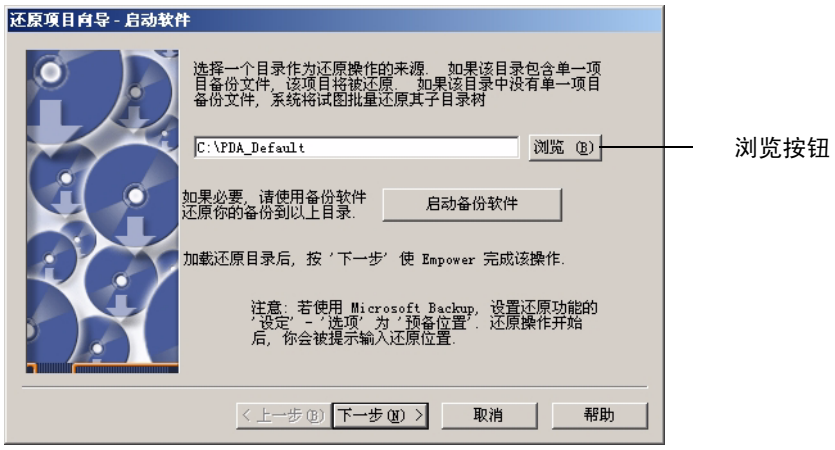


图 1-4 还原项目向导 - 启动软件页

9. 单击**下一步**并按照各页上的说明完成本向导。

   ***注：**如果有信息出现，指示还原的项目需要更新，请单击**确定**。*

10. 单击最后一页上的**完成**、“还原显示”以完成还原操作。还原的项目 PDA_Default 出现在 “配置管理器项目”视图表中 （图 1-5）。如果该项目未出现，请选择**视图 > 刷新**。
11. 选择**文件 > 退出**，关闭 “配置管理器”。

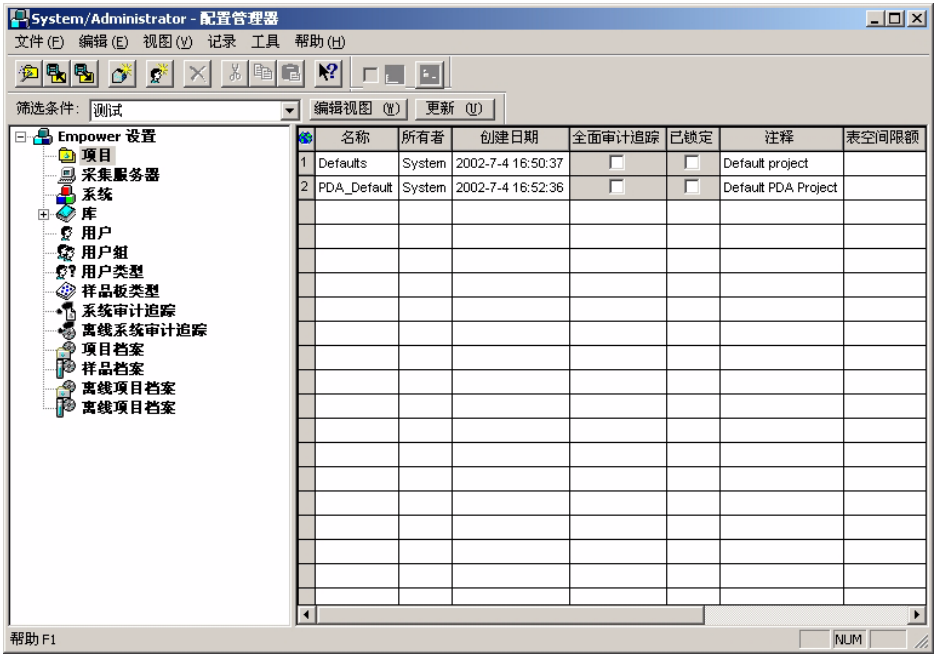


图 1-5 带有还原的 PDA_Default 项目的配置管理器

现在一切就绪，可以用 Empower 软件查看 PDA 数据了。

第 2 章
查看 PDA 数据

本章阐述查看色谱和光谱的详细步骤。

2.1 指南概述

本指南介绍使用 Empower 软件查看 PDA_Default 项目中数据的基本方法。将 PDA 样品数据还原到 Empower 工作站后，就可以用多种方式对其进行检查。本章中的步骤是使用 PDA 软件的基石，同时还是第 3 章，峰纯度处理和第 4 章，谱库匹配中所述过程的基础。本章介绍查看 Empower 软件随附的 PDA 数据的简单方法，包括：

- 使用 “查看”以及查看 “轮廓线”图
- 显示 3D 图
- 放大图
- 提取色谱
- 提取光谱
- 标记色谱和光谱

2.2 在 “查看”中查看数据

“查看”是 Empower 软件的应用程序，使用它可查看和操作从 “项目”窗口传入的 2D 和 3D 色谱数据。“查看”由菜单、工具条、“色谱”图、“通道”表、“轮廓线”图、“查看光谱”光谱图和 “查看光谱”表组成。本节将对以上各项予以解释。

要在 “查看” 中查看 PDA 数据文件：

1. 在 Empower Pro 窗口中 （图 2-1），单击**浏览项目**，打开 “浏览项目” 对话框 （图 2-2）。

图 2-1 Empower Pro 窗口

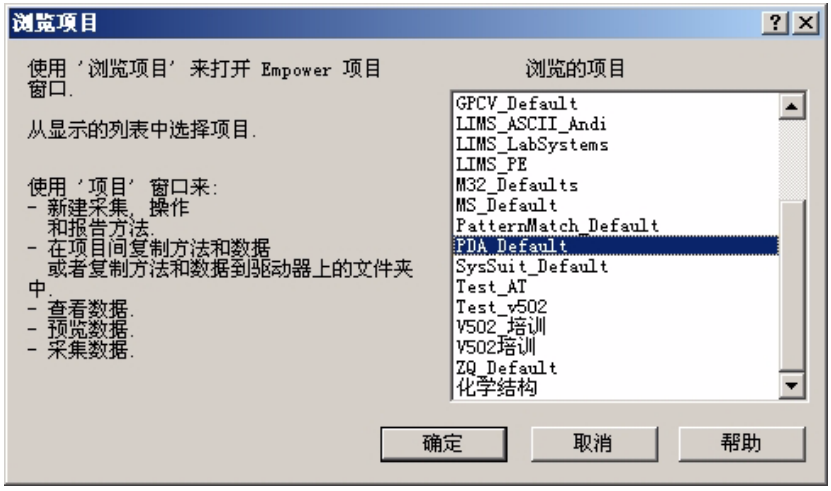


图 2-2 “浏览项目”对话框

2. 在“浏览的项目”列表中，选择 **PDA_Default**，然后单击**确定**。将打开项目窗口 （图 2-3）。

***注：**如果 PDA_Default 未在“浏览的项目”列表中出现，请检查是否已按照第 1.3 节，还原 PDA 项目中所述将其还原。*

图 2-3 项目窗口

3. 单击“项目”窗口中的**通道**选项卡，然后在“通道视图”表中选择**混合物**。单击 （查看）或选择**工具 > 查看**（图 2-3）。显示“查看”，屏幕中的未处理数据与图 2-4 所示类似。（如果屏幕与图 2-4 不一样，请选择**窗口 > 主窗口**。）

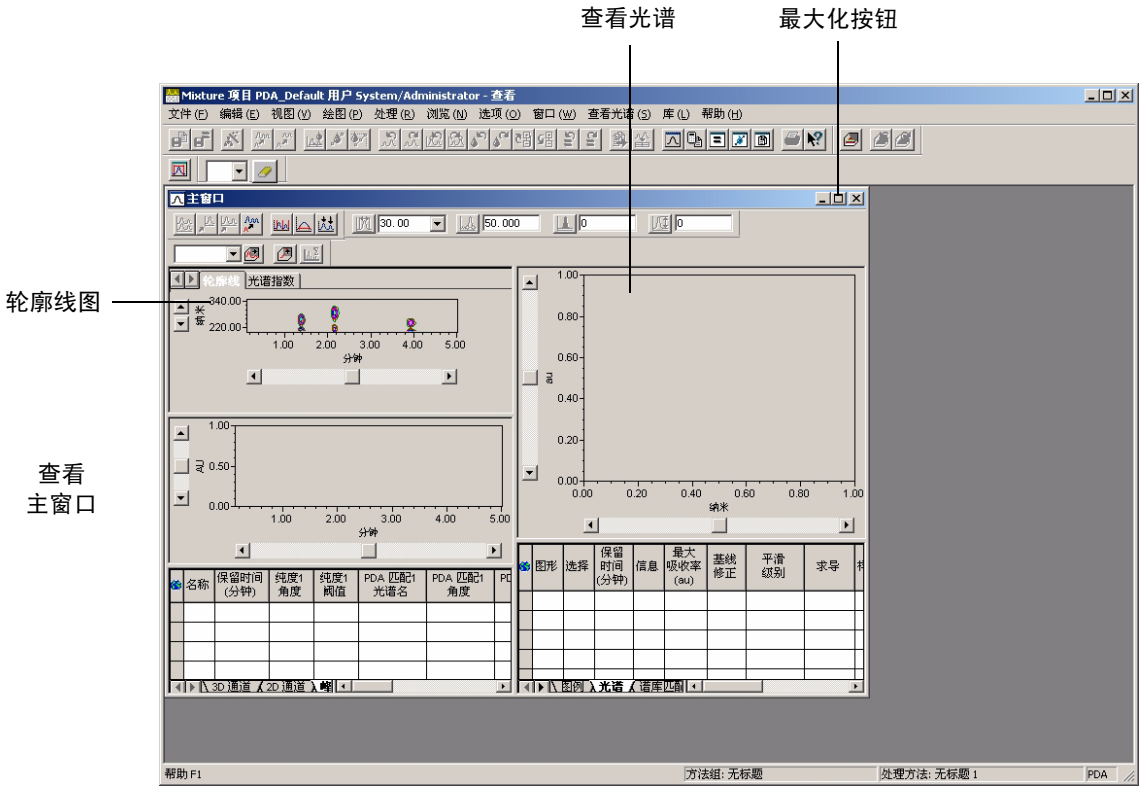


图 2-4 用 PDA 数据查看，不提取色谱

4. 如果“查看”窗口未最大化，请单击 （最大化）（图 2-4）。主窗口和子窗口都将被最大化。

注：如果未出现“轮廓线”图和“查看光谱”，请选择视图 > 3D 布局。

在图 2-5 显示的“查看”中，“查看 - 主窗口”已被最大化。“轮廓线”图是三维数据文件的俯视图，其中 x 轴表示时间，y 轴表示波长。色谱图显示提取的色谱。“查看光谱”显示提取的光谱。

注：此时未提取色谱或光谱。

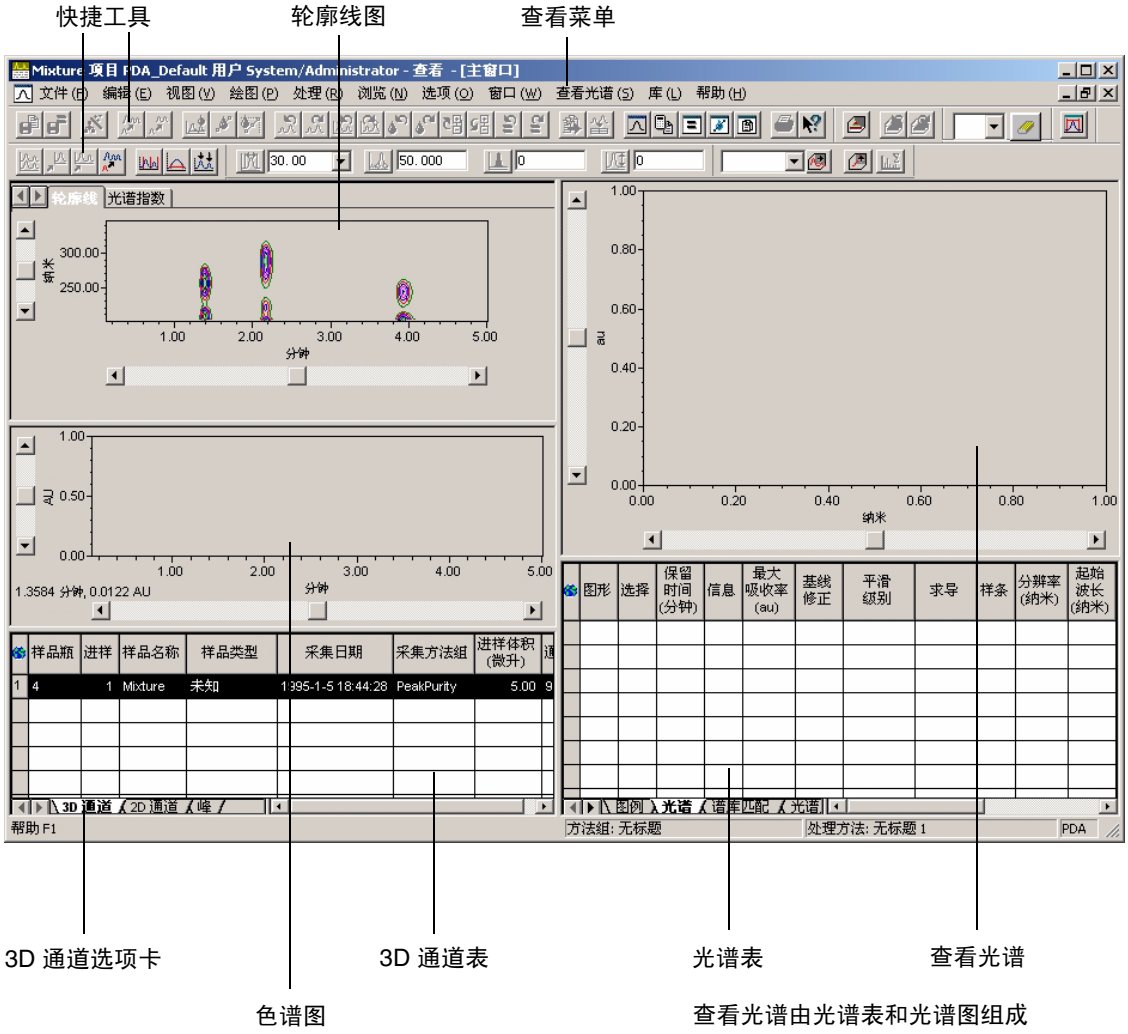


图 2-5 3D 布局中最大化的查看 - 主窗口

5. 单击“查看”底部的 **3D 通道**选项卡（图 2-5），查看有关数据文件的信息，如样品名称、类型、日期、采集时间等。
6. 图 2-6 显示“查看”中可用作快捷方式的工具。此图将工具条分成两行显示以标注这些工具。

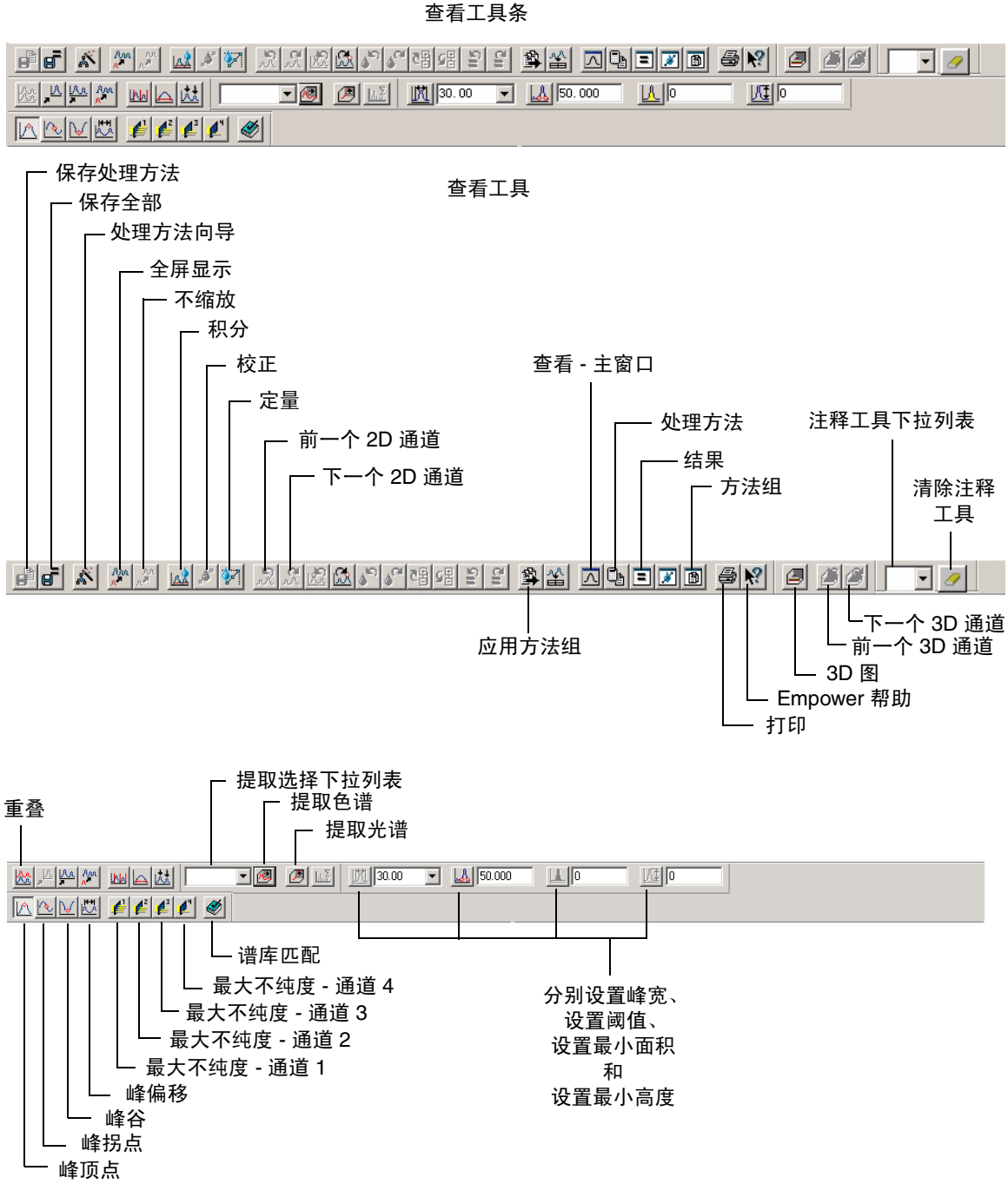

查看工具条
保存处理方法
保存全部
处理方法向导
全屏显示
不缩放
积分
校正
定量
前一个 2D 通道
下一个 2D 通道
查看工具
查看 - 主窗口
处理方法
结果
方法组
注释工具下拉列表
清除注释工具
应用方法组
下一个 3D 通道
前一个 3D 通道
3D 图
Empower 帮助
打印
重叠
提取选择下拉列表
提取色谱
提取光谱
谱库匹配
最大不纯度 - 通道 4
最大不纯度 - 通道 3
最大不纯度 - 通道 2
最大不纯度 - 通道 1
峰偏移
峰谷
峰拐点
峰顶点
分别设置峰宽、
设置阈值、
设置最小面积
和
设置最小高度

图 2-6 “查看”工具条按钮

2.3 显示 3D 图

3D 图提供了 PDA 数据的三维视图。数据在三个轴上绘制：

- **X 轴** – 代表时间。
- **Y 轴** – 代表吸光度单位。
- **Z 轴** – 代表波长。

可旋转 3D 图，从以下不同视角查看数据：

- 正视图显示色谱， x 轴表示时间， y 轴表示吸光度单位。
- 侧视图显示 UV 光谱， x 轴表示波长， y 轴表示吸光度单位。
- 顶视图显示轮廓线图， x 轴表示时间， y 轴表示波长。

要显示 3D 图：

1. 当 PDA 数据在“查看”中打开时，单击“查看”右下方的**图例**选项卡以显示吸光度的图例。该图例定义 “轮廓线”图和 3D 图使用的颜色。
2. 单击 （3D 图）或选择**窗口 > 3D 图** （图 2-6），查看 3D 图。
3. 可旋转 3D 图上的手柄 （图 2-7），从以下不同视角查看该图：
   - **正视图** – 将手柄移动到窗口的上中央。
   - **侧视图** – 将手柄移动到窗口的右上角。
   - **顶视图** – 将手柄移动到窗口的下中央。

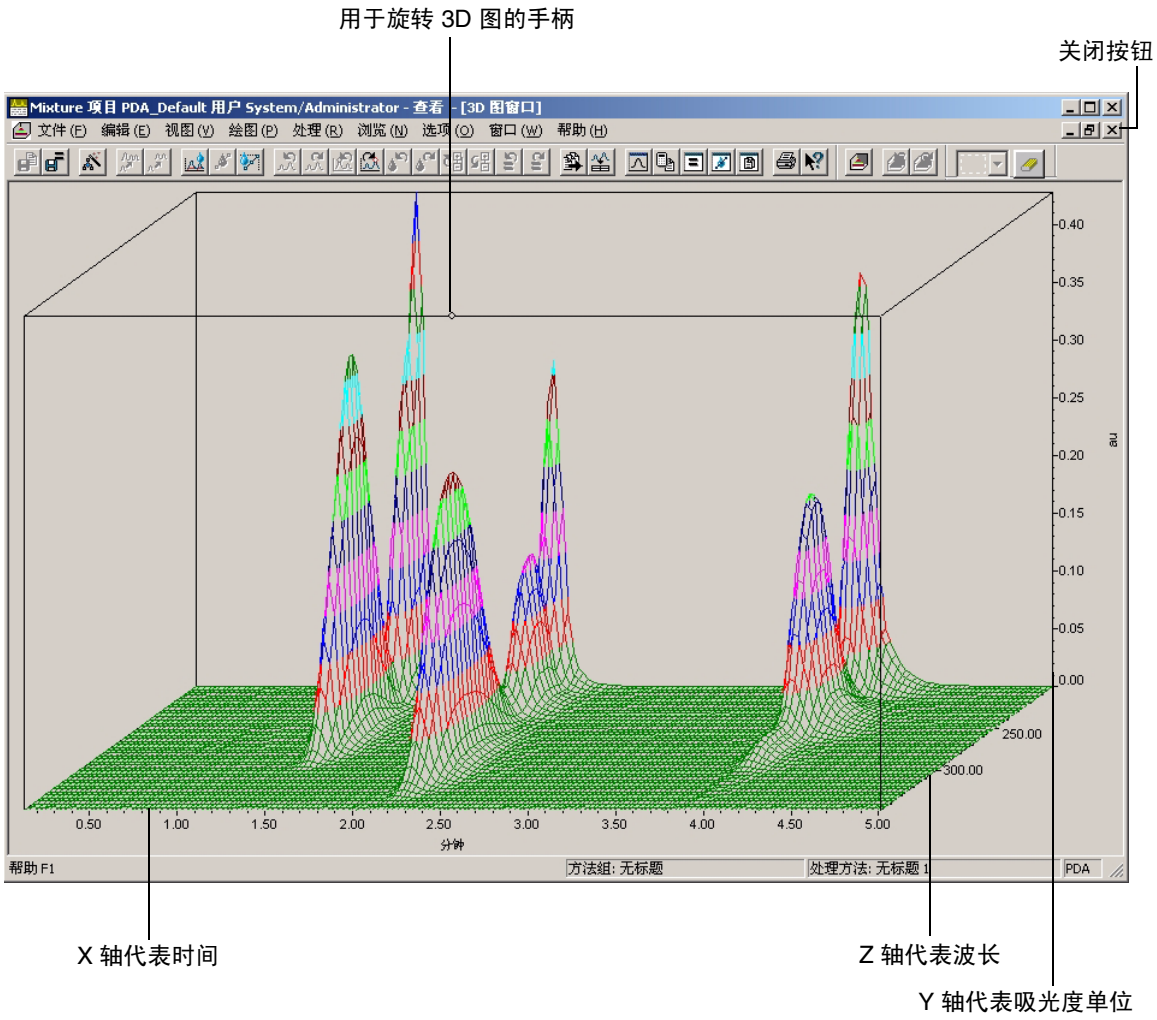


图 2-7 样品 3D 图窗口

4. 要退出“3D 图”窗口并返回到“查看 - 主窗口”，请单击子窗口（而非主窗口）右上角的 ☒（关闭）按钮（下方的关闭按钮）。

2.4 放大图

可使用缩放框详细查看图像局部。可放大“色谱”图、“轮廓线”图和“光谱”图。还可使用此技术查看色谱中的基线噪音。

要创建缩放框，请按住鼠标左键，并围绕要放大的部分拖动鼠标。该区域外围将出现一个包围框 （图 2-8）。在该框大小和位置合适时释放鼠标左键。

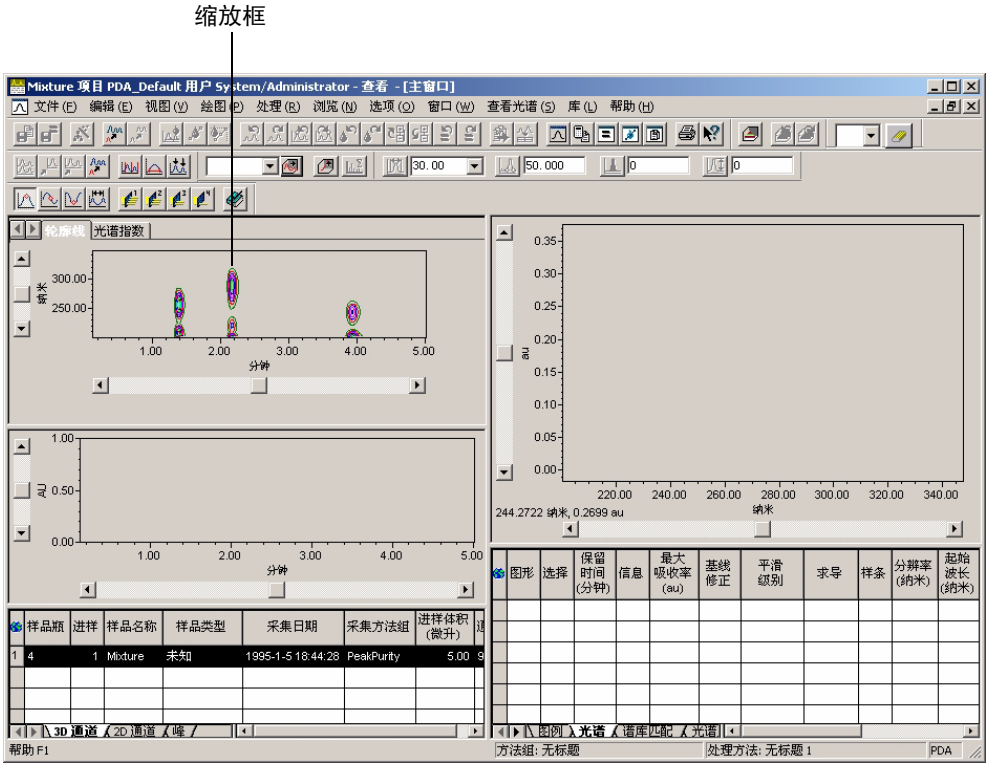


图 2-8 创建缩放框

图 2-9 显示缩放后的区域。

***注：**如果在缩放“轮廓线”图后查看 3D 图，则 3D 图的同一数据区域也将被缩放。在“3D 图”窗口中没有直接缩放功能。有关查看 3D 图的信息，请参阅第 2.3 节，显示 3D 图。*

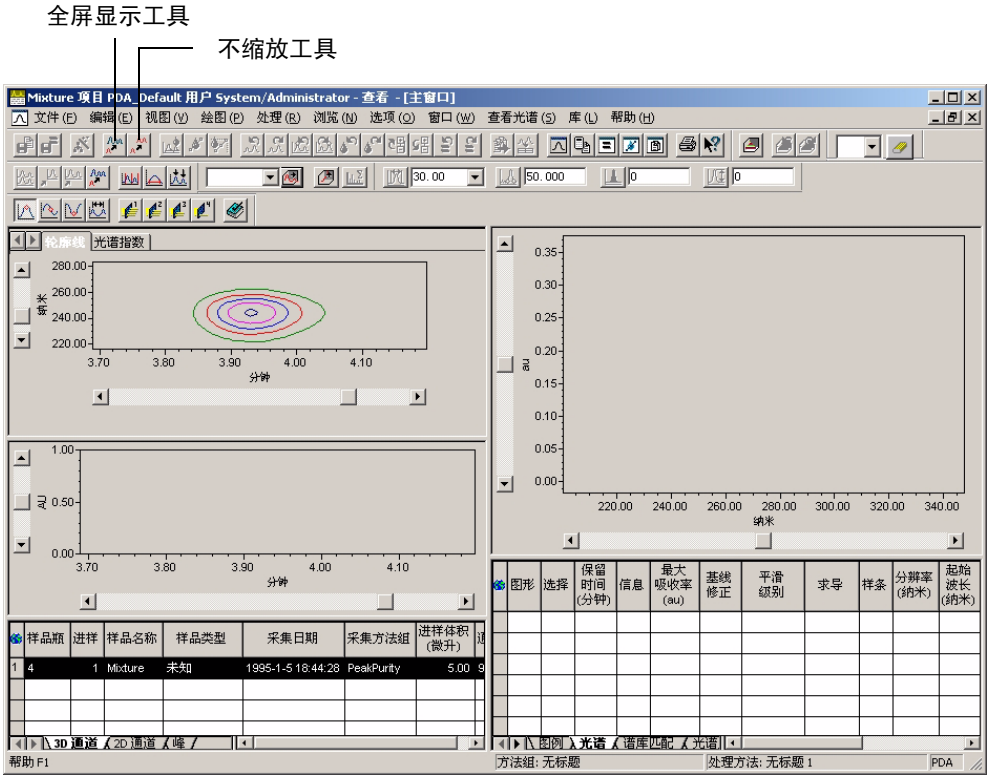


图 2-9 轮廓线图的缩放视图

改变图的比例

可通过下列方式之一恢复到未缩放的图：

- **全视图** – 将图恢复到其原始比例。要激活“全视图”，请单击 （全视图）或在“轮廓线”图中右键单击，然后选择**全视图** （图 2-9）。
- **不缩放** – 如果已多次缩放，返回到上一缩放图。要激活“不缩放”，请单击 （不缩放）或在“轮廓线”图中右键单击，然后选择**不缩放** （图 2-9）。

保存缩放参数

如果要重复查看同一缩放区域，可保存缩放框的参数。要保存缩放参数：

1. 右键单击所需图，然后选择**属性**以访问 “图属性”对话框。
2. 单击**缩放**选项卡，然后单击**从图中取值**，在选项卡的 “缩放”部分填入图中的值（图 2-10）。也可以手工输入 X 开始值、X 结束值、Y 开始值和 Y 结束值。
3. 单击**确定**，应用设置。

***注：**有关如何自定义显示设置的详细信息，请参阅* Empower 帮助 *中的 “在 ‘查看’中自定义数据显示”主题。*

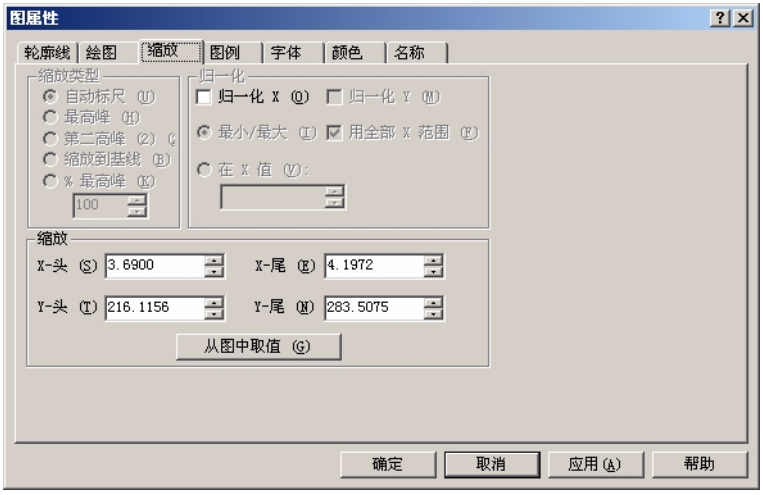


图 2-10 缩放选项卡

2.5 提取色谱

通过手动提取色谱可查看所收集波长范围内任意波长处的色谱。可从多个波长提取色谱，然后将其重叠以进行进一步比较。

要手动提取色谱：

1. “查看”中有 PDA 数据显示时，从**提取选择**列表中选择 **254.0**，以在色谱图中显示波长标记和提取的 254.0 纳米色谱 （图 2-11）。

   注：254.0 纳米选项是缺省值，会自动出现在列表中。

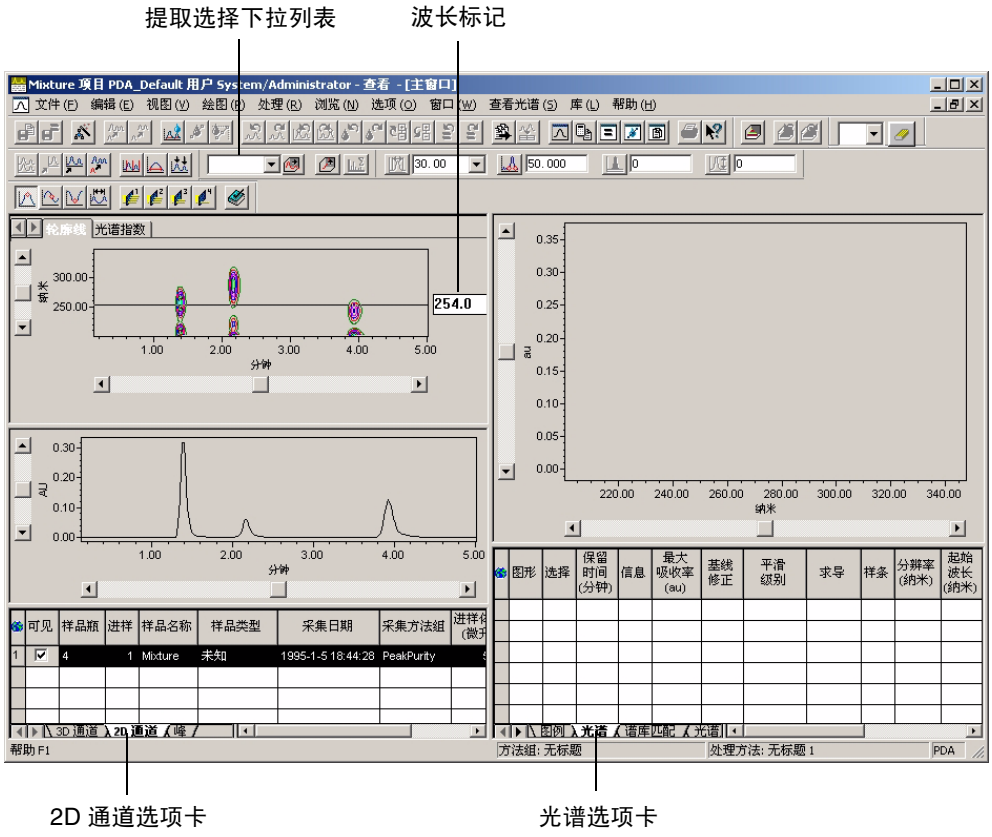


图 2-11 254 纳米波长处提取的色谱

2. 使用以下方法之一查看不同波长处的色谱：

   - 在“提取选择”列表中，选择顶部的空选项。将波长标记拖动到所需波长处，例如 **280.0**。拖动波长标记时，“色谱”图中的色谱会自动更新 （图 2-12）。

- 在“提取选择”列表中，选择列表顶部的空选项。双击波长标记并输入所需波长，例如 **280.0**，然后按 **Enter** 键 （图 2-12）。
- 在“提取选择”列表中输入所需波长，例如 **280.0**，然后单击 （提取色谱）（图 2-12）。

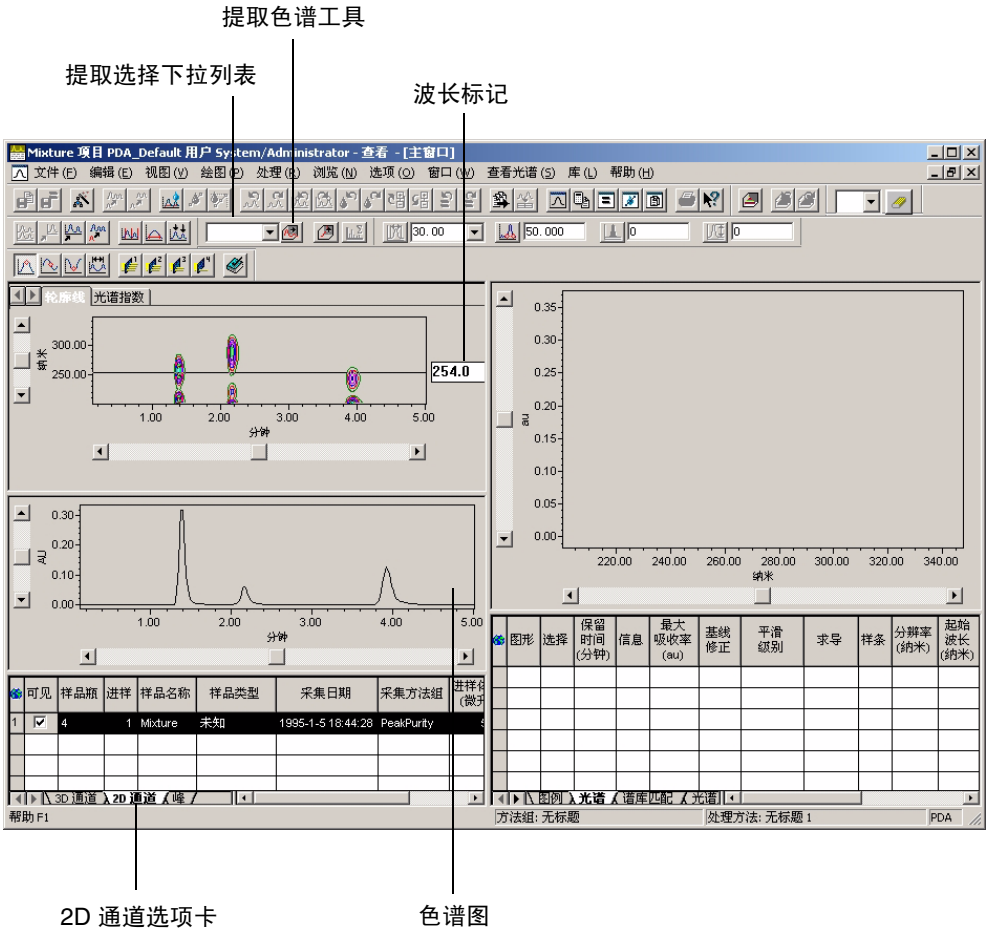


图 2-12 280 纳米波长处提取的色谱

3. 要重叠色谱，请单击 （重叠）或选择**图 > 重叠**。重叠的色谱显示在“色谱”图中，如图 2-13 所示。“2D 通道”选项卡列出所有提取的色谱。“通道说明”字段指示提取的波长 （可能需要滚动到表的右侧才能看到此字段）。
4. 再次单击 （重叠）或选择**图 > 重叠**，可切换回单个色谱。显示在“2D 通道”选项卡中所选的提取色谱。

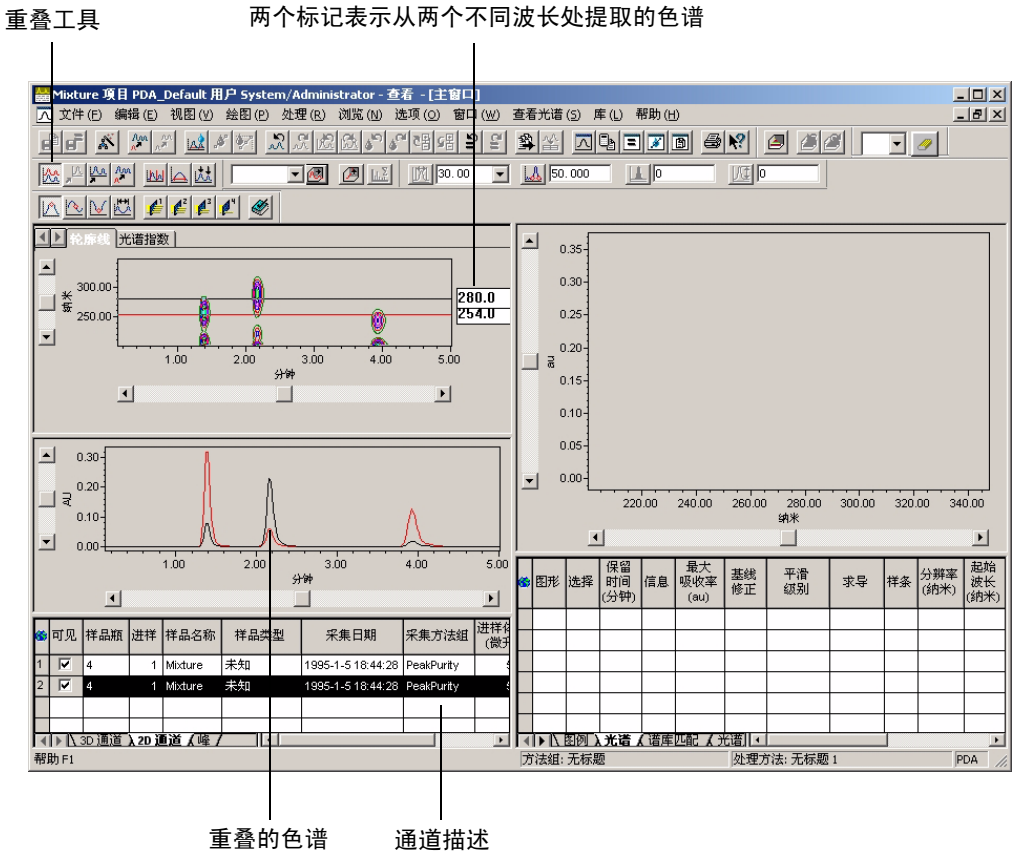


图 2-13 波长 254 和 280 纳米处的重叠色谱

2.6 提取光谱

手动提取光谱时，在色谱运行的任何时间内都可查看光谱。可在多个洗脱时间提取光谱，然后将其重叠以进行进一步比较。也可使用提取的光谱来构建光谱库。

要手动提取光谱：

1. “查看”中有 PDA 数据显示时，单击 （提取光谱），在“轮廓线”图的左下角会显示一个光谱标记，并在“查看光谱”中显示提取的光谱。
2. 使用下列方法之一更改光谱标记：
   - 将光谱标记拖动至所需时间，例如 **1.388**（第一个峰顶点的保留时间）。注意，拖动标记时，“查看光谱”中的光谱将自动更新 （图 2-14）。
   - 双击光谱标记并输入所需时间，例如 **1.388**，然后按 **Enter** 键 （图 2-14）。
   - 右键单击光谱标记并选择**编辑**。输入所需时间，例如 **1.388**，然后按 **Enter** 键 （图 2-14）。

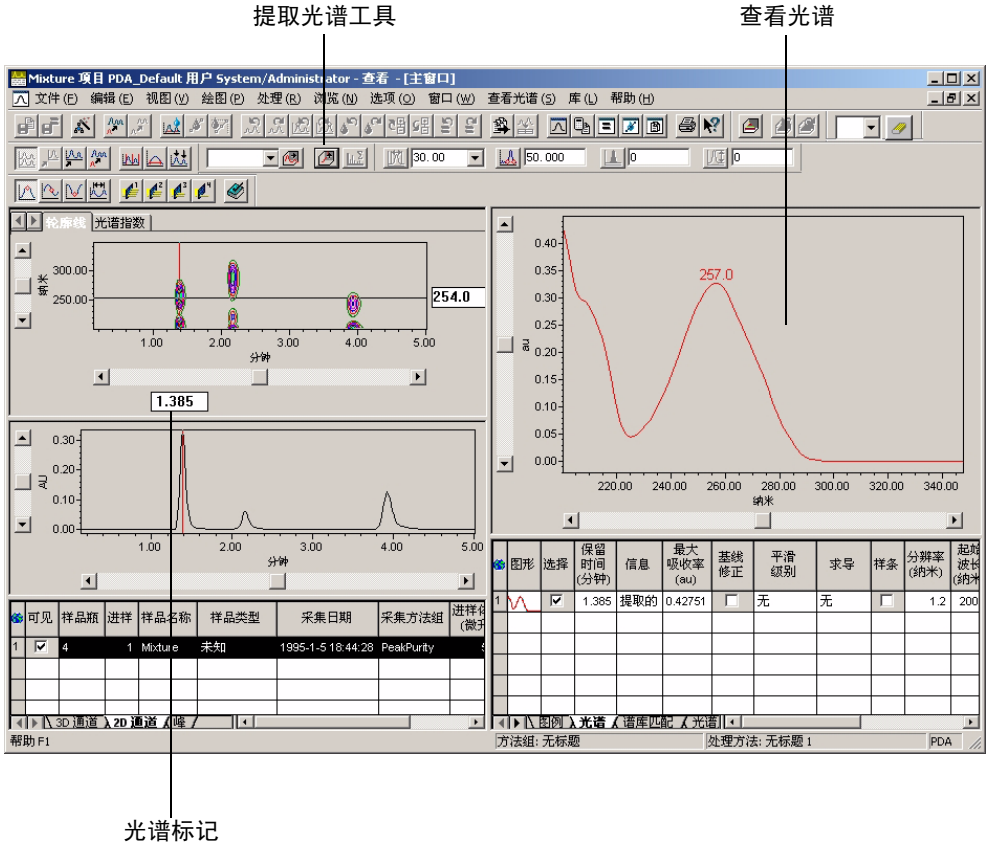


图 2-14 在 1.388 分钟提取的光谱

3. 单击 （提取光谱），提取另一光谱。
4. 将光谱标记更改为 **2.159** （第二个峰顶点的保留时间）。在 “查看光谱”中，下一光谱被前一光谱所覆盖 （图 2-15）。

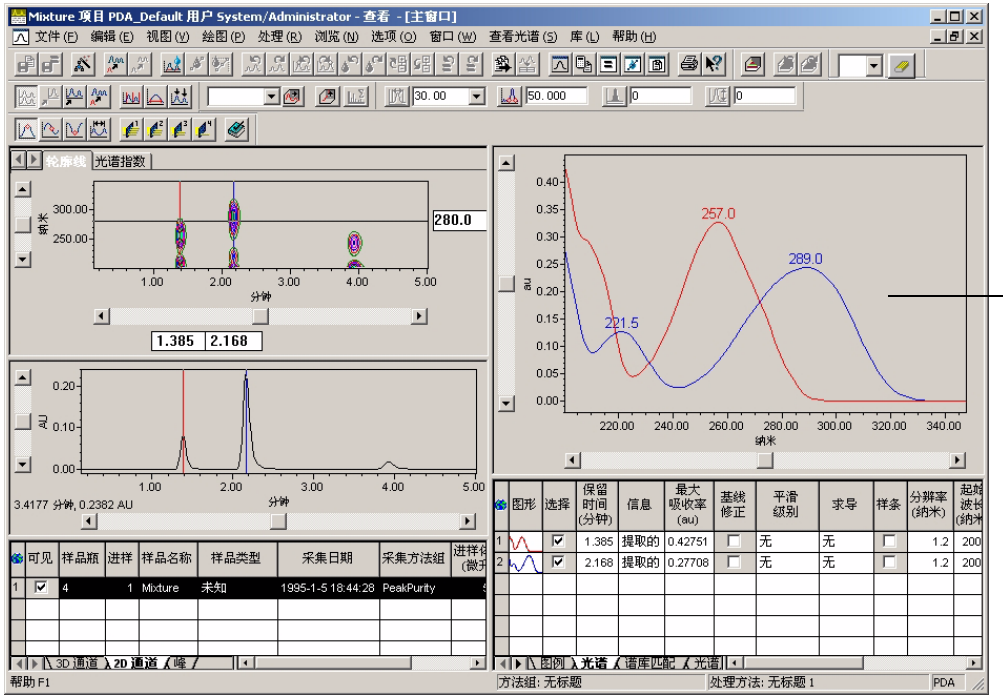


图 2-15 重叠的提取光谱

5. 单击窗口右下角的**光谱**选项卡 （图 2-16），在 “查看光谱”中查看关于光谱的信息。

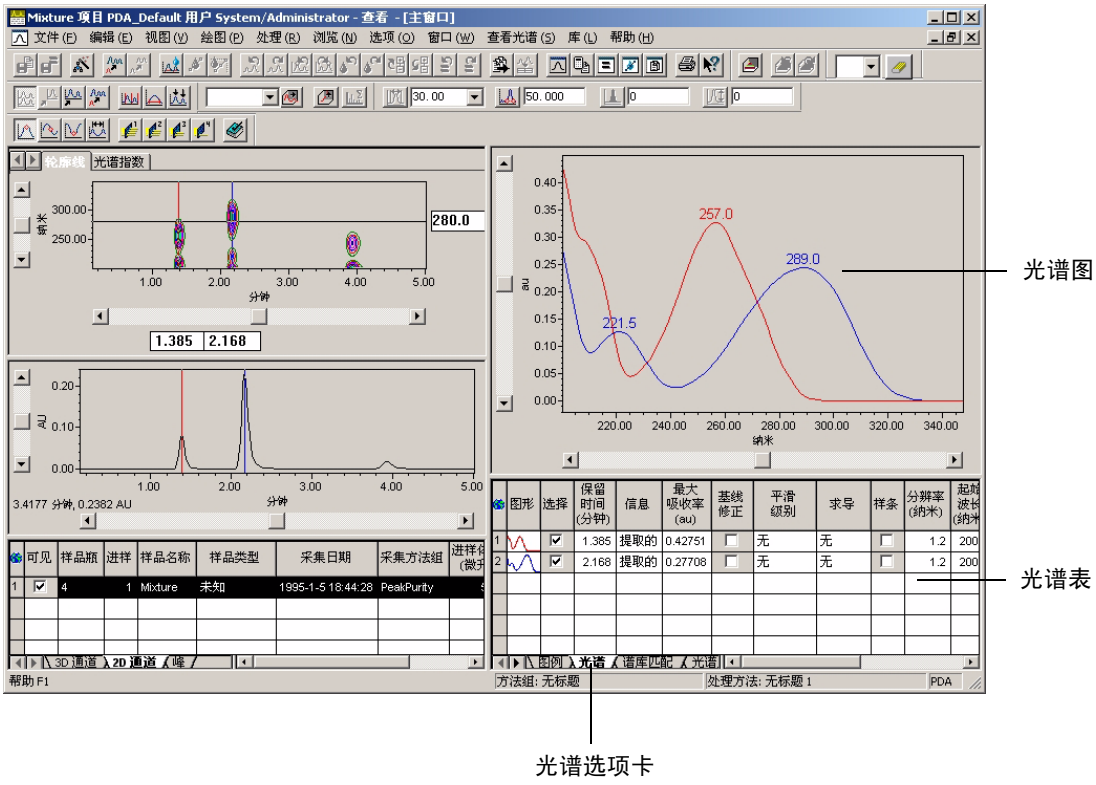


图 2-16 光谱表

6. 要以归一化形式查看重叠的光谱，请在“光谱”图内部双击。注意，y 轴不显示吸光度单位。查看归一化的光谱可修正浓度差异，并能够基于其形状差异比较 UV 光谱 （图 2-17）。

   在 “光谱”图内部再次双击，可恢复缺省比例 （自动缩放）。

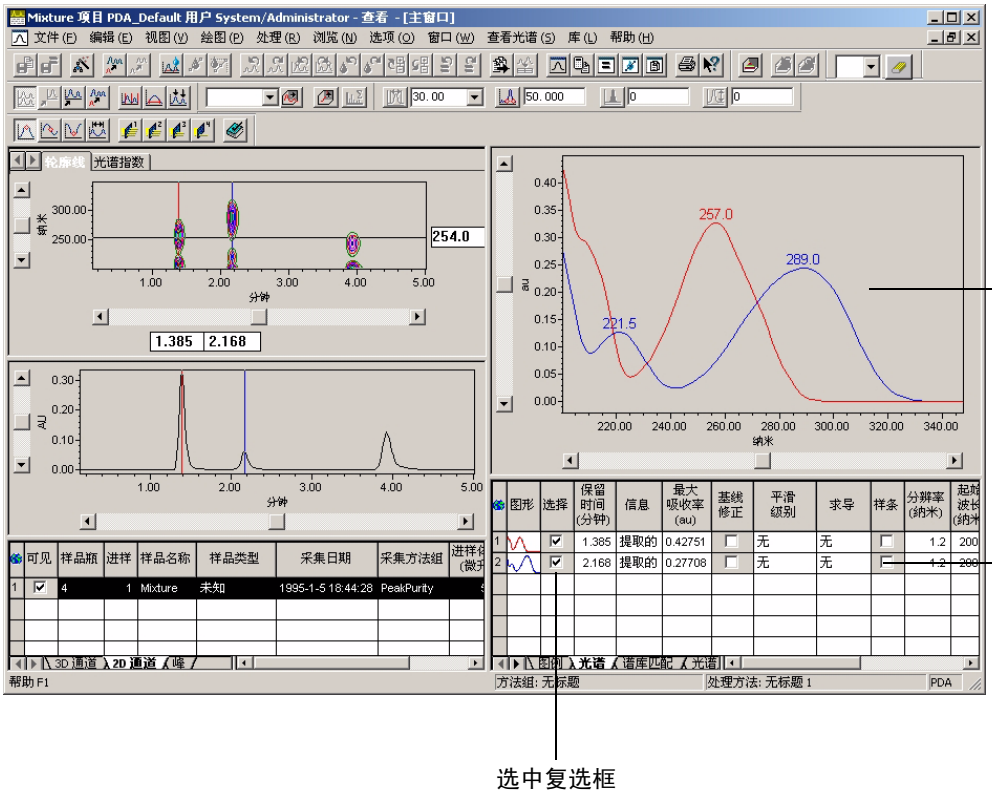


图 2-17 归一化的光谱

7. 在“查看光谱”下的“光谱”表中，单击**选择**复选框清除所有光谱，只保留其中一个（图 2-17）。
8. 在“光谱”表下包含选项卡的区域中滚动，然后单击**光谱点**选项卡，显示光谱的原始数据点，如图 2-18 所示。

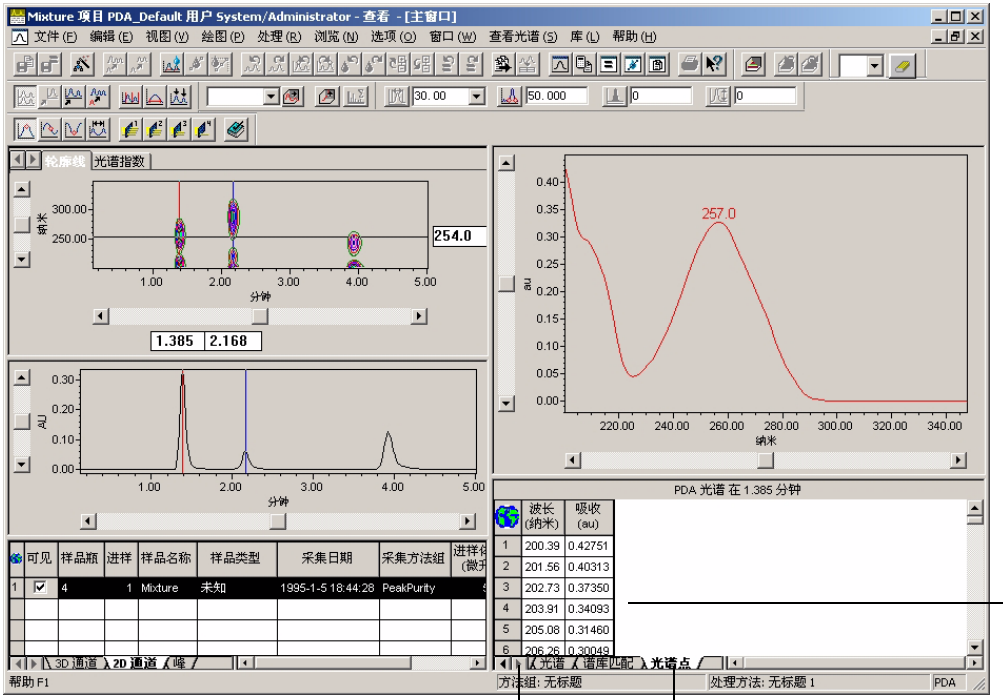


图 2-18 查看光谱点：吸光度与波长

2.7 标注色谱和光谱

Empower 软件有一组 “注释”工具。在 “查看”中，使用这些工具可在以下情况下将注释添加到色谱和光谱：

- 将光谱或色谱复制到文档或视图中
- 打印光谱和色谱以便参考

注：退出 “查看”时不保存注释。

2.7.1 添加注释

下例中，将通过绘制一个箭头并添加支持文本来标注色谱。

绘制箭头

要在色谱上绘制箭头：

1. “查看”中有 PDA 数据显示，从“注释工具”列表中选择 ⟵（箭头工具）（图 2-19）。

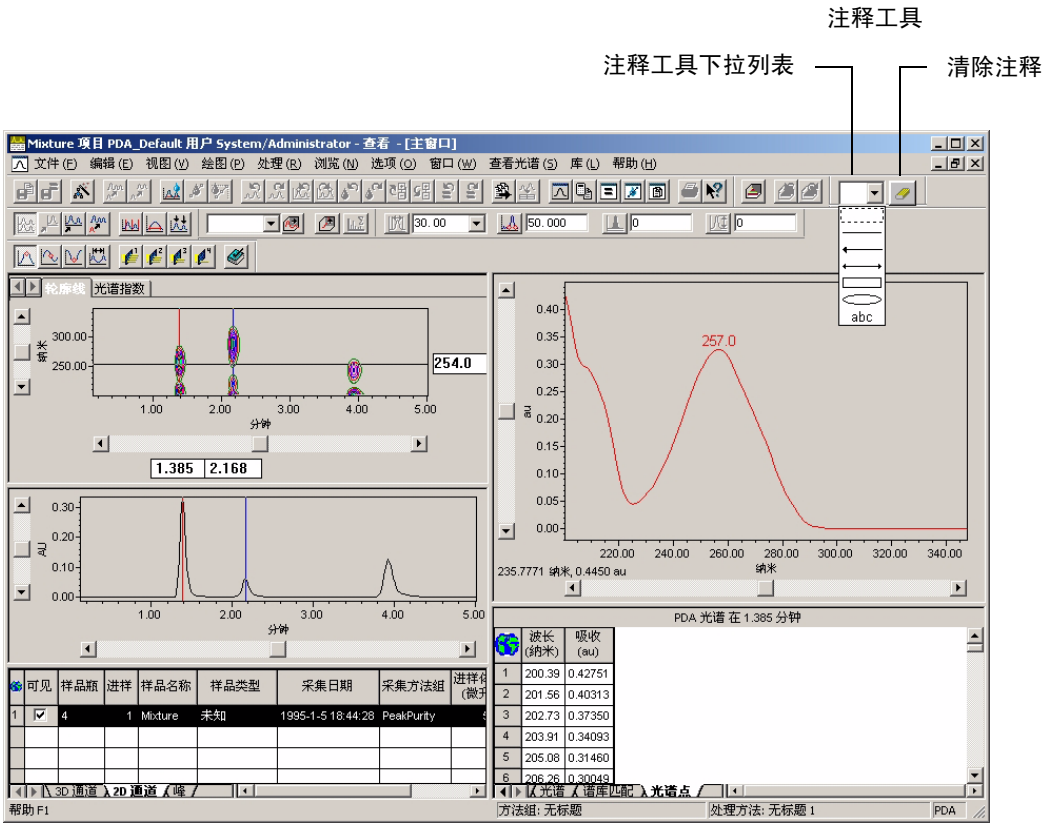


图 2-19 注释工具

2. 将鼠标移动到“色谱”图。光标将变成箭头工具。

3. 按住鼠标左键，将箭头拖动到最高峰。完成拖动后，释放鼠标键。
4. 单击箭头将其选定。光标将变成手形指针，且箭头被选定 （每端都出现黑色手柄）。选定箭头后，即可：
   - 将箭头移动到另一位置，方法为单击箭头上除黑色手柄以外的某一部分并将其拖到所需位置。
   - 旋转箭头，方法为按住某个黑色手柄并将其转到所需方向。
   - 调整箭头大小，方法为拖动某一黑色手柄。
   - 删除箭头，方法为按 **Delete** 键。

   如果不想改变箭头，请在 “色谱”图中其它位置单击以取消选定。
5. 右键单击箭头，然后选择**注释 > 属性**，打开 “标记对象属性”对话框 （图 2-20）。在此对话框中可更改箭头的样式、粗细和 / 或颜色。

图 2-20 对象的 “标记对象属性”对话框

添加文本

要将文本添加到色谱：

1. 从 “注释工具”列表中选择 abc （文本工具）。
2. 将鼠标移动到 “色谱”图。光标变成 **+abc**。

3. 单击要添加文本的图区域以打开 “标记对象属性”对话框 （图 2-21）。

图 2-21 文本的 “标记对象属性”对话框

4. 在 “文本”字段中键入要添加到色谱的文本。在此对话框中还可指定文本的对齐方式、字体和字号等属性。完成后，单击**确定**，将文本添加到色谱中。
5. 单击文本将其选定。光标将变成手形指针，且文本被选定 （角上出现黑色手柄）。选定文本后，即可：
   - 将文本移动到另一位置，方法为单击文本上除黑色手柄以外的某一部分并将其拖到所需位置。
   - 调整文本框的大小 （如果未显示任何文本），方法为拖动某一黑色手柄。
   - 删除文本，方法为按 **Delete** 键。

   如果不想对文本进行以上更改，请在图中其它位置单击，取消选定文本。
6. 要更改文本和 / 或文本的属性，请右键单击文本并选择**注释 > 属性**，打开 “标记对象属性”对话框。

图 2-22 显示 “色谱” 图中的注释示例。

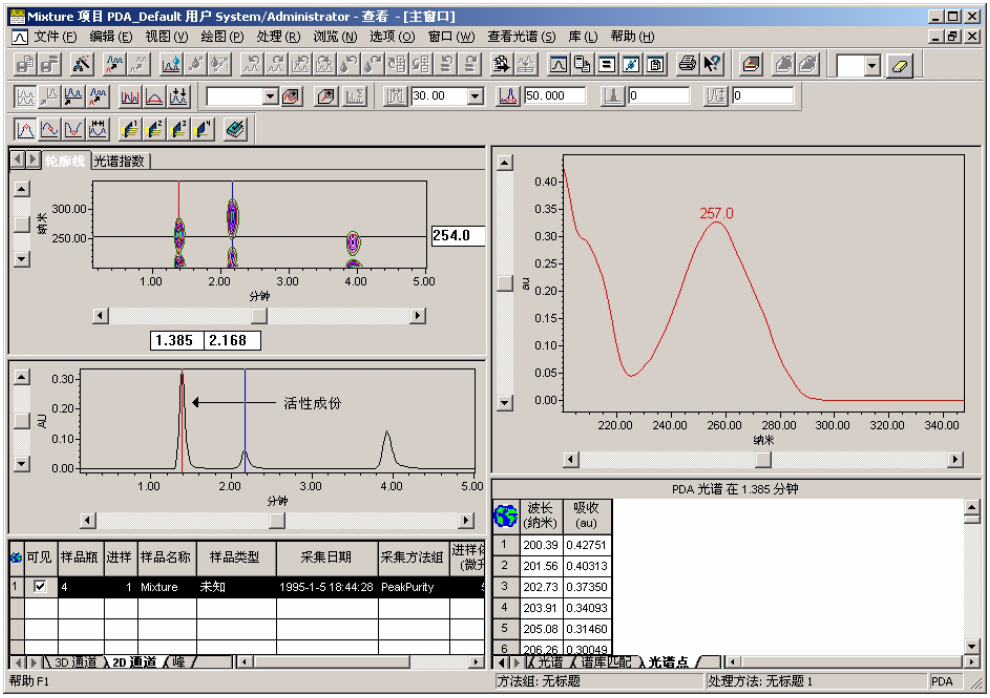


图 2-22 注释示例

2.7.2 删掉注释

单击 （清除注释）可删除*所有*注释。选择各个注释然后按 **Delete** 键，可以只删除个别注释。

2.7.3 注释工具

其余 “注释”工具 （除了文本工具）的功能与箭头相同。本列表介绍了每种 “注释”工具及其执行的操作或创建的对象。

工具	操作或对象
——	绘制线。
←——	绘制一端有箭头的线。
←——→	绘制两端全部带有箭头的线。
▭	绘制矩形。
⬭	绘制椭圆。
abc	添加文本。

退出查看

要退出 “查看”：

1. 单击 ☒（关闭）或选择**文件 > 退出**（图 2-18）。将出现一个对话框，警告不能保存修改的方法组。
2. 单击**确定**。

后续步骤

在 “查看”中检查完 PDA_Default 数据后，可有如下选择：

- 可开发峰纯度的处理方法，如第 3 章，峰纯度处理中所述。
- 可以创建谱库并开发将未知光谱与谱库进行匹配的处理方法，如第 4 章，谱库匹配中所述。

第 3 章
峰纯度处理

本章为开发确定峰纯度的 PDA 处理方法提供了逐步说明。

3.1 指南概述

本指南可让您熟悉 Empower PDA 软件工具和用于开发确定峰纯度的 PDA 处理方法的步骤。计算峰纯度的目的是确定峰的光谱一致性。光谱的不一致性可表明存在共流出物。两种或多种光谱明显不同的化合物的共流出物可产生光谱不一致的峰。

本指南说明如何：

- 衍生色谱。
- 使用“处理方法向导”开发一种确定峰纯度的处理方法，在该向导中定义积分和确定峰纯度的关键参数。
- 在“光谱指数”中检查峰纯度结果。
- 在“结果”窗口的“纯度”表和“纯度”图中查看峰纯度结果。

计算峰纯度的步骤

以下为计算峰纯度的步骤：

1. 将 PDA 数据从“PDA_Default 项目”引入“查看”中 （第 3.2 节）。
2. 衍生色谱 （第 3.2 节）。
3. 建立 PDA 处理方法 （第 3.3 节）。

4. 查看结果 （第 3.4 节）。
   - 峰顶点光谱
   - 最大不纯度通道 1 光谱
   - 纯度表
   - 纯度图和最大不纯度点

3.2 衍生色谱

开发计算峰纯度的处理方法前，必须衍生一个色谱。衍生色谱是指从指定波长的三维 PDA 数据提取的二维色谱。

注：*“最大值图”色谱是一个衍生的色谱，它绘制出在各时间点测量的最大光谱吸光度图。无论各峰的 lambda 最大值（最大吸光度处的波长）是多大，都可用它查看样品中所有的色谱峰。在确定处理方法的适当噪音间隔时，“最大值图”色谱非常有用。此外，在检查“最大值图”色谱的吸光度范围时也要用到它。获取纯度结果时，在 3D 数据的任何区域中，样品都不能超过 1.0 AU，这一点非常重要（请参阅第 3.2 节中的步骤 4）。但是，在开发处理方法时，在某个特定波长提取的数据通常用于设定处理参数和定量。由于 “最大值图”使用采集数据时选定范围中所有波长的吸光度，所以用它生成校正曲线和定量数据没有意义。*

要衍生色谱，请：

1. 在 Windows 任务栏中选择 PDA_Default 项目，打开 “项目”窗口，即已在第 2 章，查看 PDA 数据中打开的窗口。

2. 在“项目”窗口的“通道”选项卡中（图 3-1），选择**混合物**。单击 （查看）或选择**工具 > 查看**。出现 “查看”窗口。

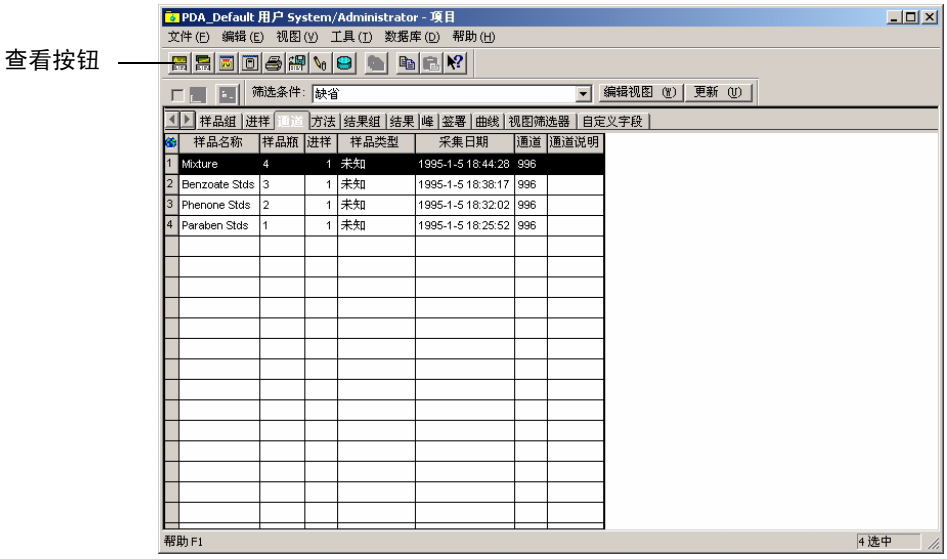


图 3-1 PDA_Default 项目的项目窗口

3. 在 “查看”的 “提取选择”列表中，选择**最大值图**，提取 “最大值图”色谱。该色谱出现在 “色谱”图中 （图 3-2）。

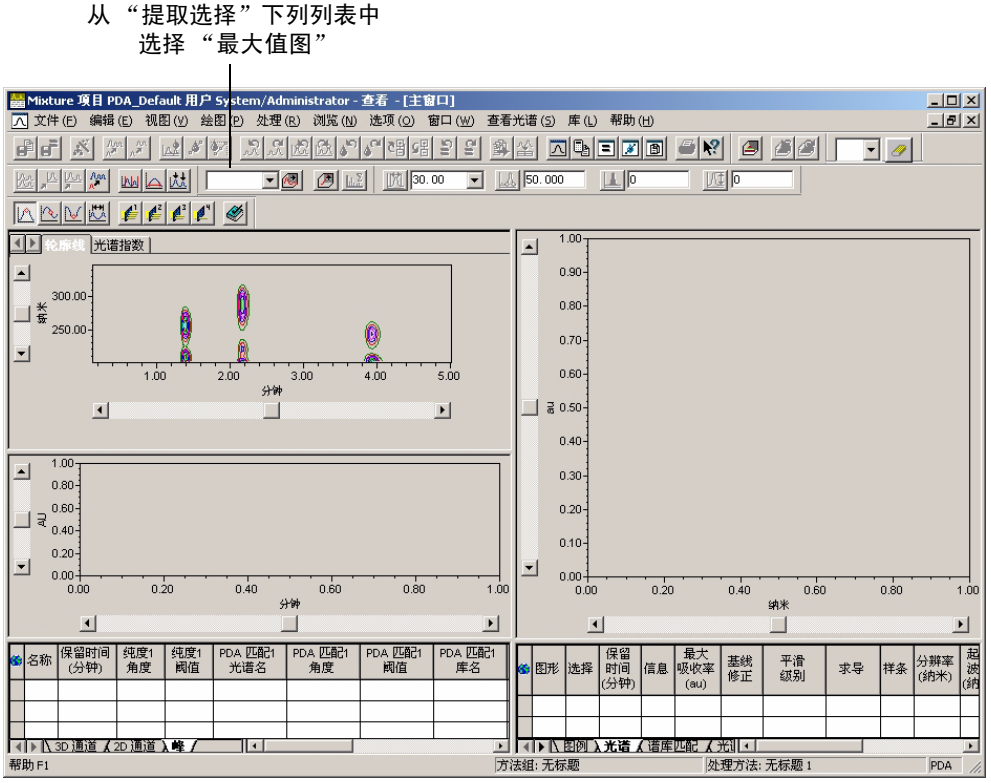


图 3-2 查看带有最大值图色谱的主窗口

4. 确保色谱中所有峰的吸光度低于 1 AU （吸光度单位）。计算纯度结果时，为使这些结果有效，此标准是必需的。如果吸光度低于 1 AU，则继续下一步。如果任一峰的吸光度大于 1 AU，请适当稀释样品然后再采集。
5. 在 “提取选择” 列表中，选择 **254**，提取 254.0 纳米处的色谱。“最大值图” 色谱被新提取的色谱替换 （图 3-3）。将使用 254 纳米提取通道来确定最佳的积分参数。

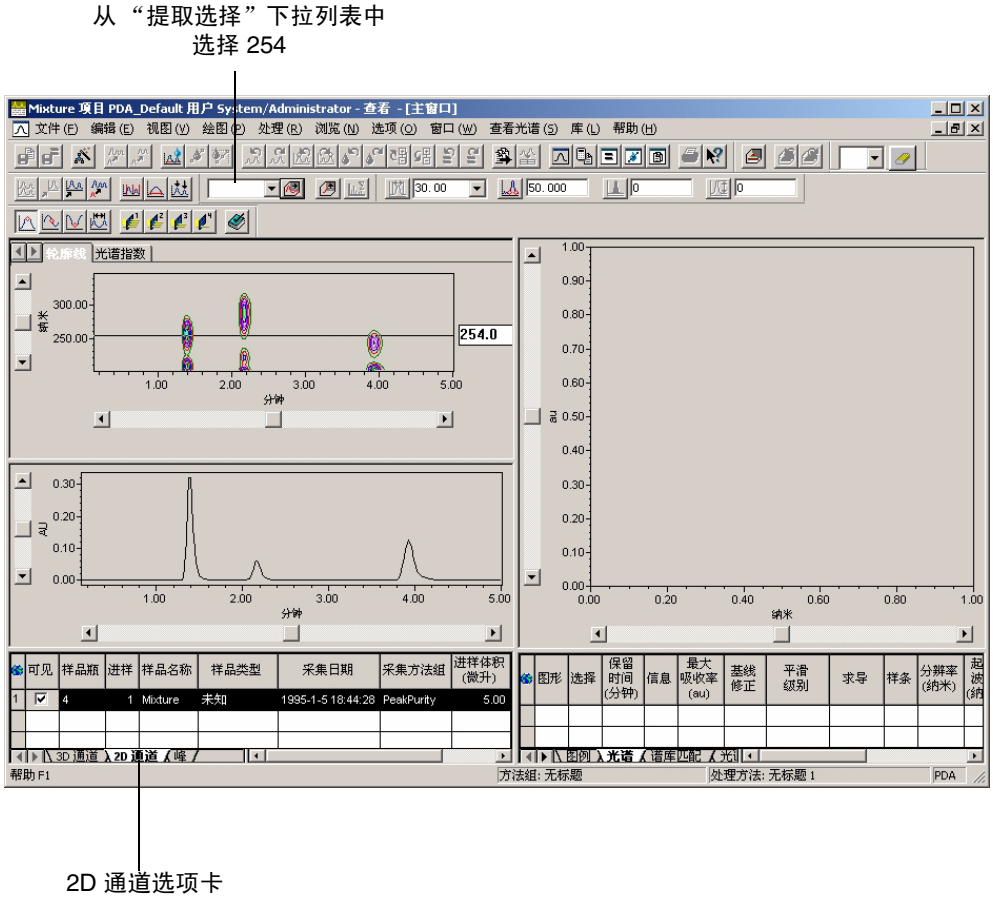


图 3-3 查看 254 纳米色谱的主窗口

3.3 开发 PDA 处理方法

在验证每个峰的吸光度都低于 1 AU、并提取所需波长的色谱后，即可建立处理方法，以积分色谱和评估峰纯度。建立 PDA 处理方法的最简单方法是使用 “处理方法向导”。

***注：**此过程假定 “使用 V3.0X 的峰宽和阈值确定方法” 系统策略已经启用 （缺省设置）。如果系统尚未启用此系统策略，“处理方法向导” 将会略有不同。有关此系统策略的详细信息，请参阅* Empower 帮助。

本过程使用的是传统的积分算法，而不是 ApexTrack 积分算法。有关这些处理算法的详细信息，请参阅 Empower 软件采集和处理原理指南 *或* ApexTrack Integration: Theory and Application （ApexTrack 积分：理论和应用）*白皮书 （转至 www.waters.com）。*

注：*确保在 “通道” 选项卡中选择了 254 纳米通道 （图 3-3）。*

要建立 PDA 处理方法：

1. 单击 （处理方法向导）或选择**文件 > 新建 > 处理方法**，启动向导并打开“处理方法向导”对话框 （图 3-4）。

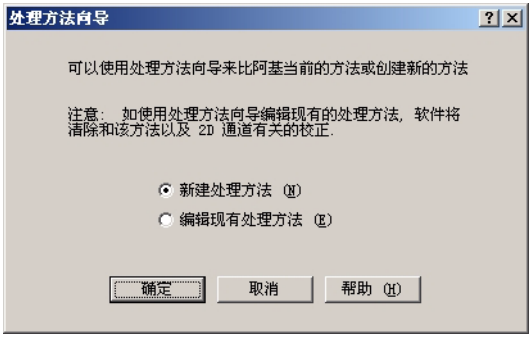


图 3-4 处理方法向导对话框

2. 单击**新建处理方法**，然后单击**确定**打开 “新处理方法”对话框 （图 3-5）。

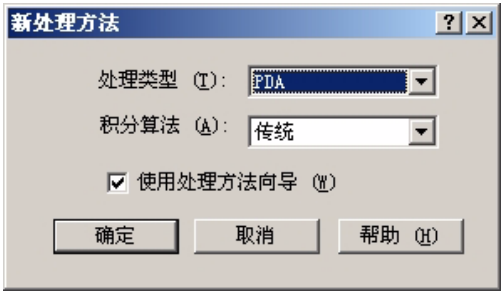


图 3-5 新处理方法对话框

3. 在“处理类型”列表中，选择 **PDA**。如果显示“积分算法”列表，请选择**传统**。确保已选中**使用处理方法向导**复选框，然后单击**确定**转至 “积分 - 峰检测 1”页面 （图 3-6）。

注 *仅当在系统策略中启用 ApexTrack 积分，且在 PDA_Default 项目中启用了 ApexTrack 时，才会显示 “积分算法” 列表。*

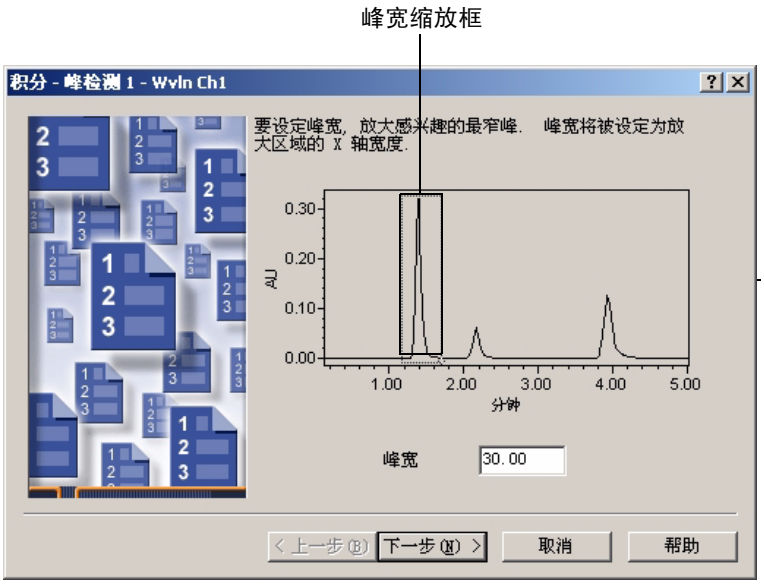


图 3-6 积分 - 峰检测 1 页面，全视图

利用此页面可设置处理方法中的峰宽参数。峰宽确定用作过滤器及生成用于进行峰检测的单个点而组合在一起的点的数量 （尽管积分期间会使用所有数据点）。

4. 按向导的说明用鼠标绘制将所关注的最窄峰（1.39 分钟时的峰 1）的峰起点和峰落点围起的缩放框。软件将显示缩放后的选中部分并确定适当的峰宽 （图 3-7）。

***注：**右键单击该图，访问“全视图 / 不缩放”快捷菜单选项。如果不能确定哪个峰最窄，可以通过重复缩放和不缩放每个峰对不同的峰进行检查。每次缩放时，软件会计算并显示相应的峰宽。适当缩放（可能需进行多次）使峰开始位于图中显示的 x 轴的开始处，峰结束位于图中显示的 x 轴的结束处。*

如果缩放正确，此数据中的峰具有几乎完全相同的宽度，且都产生 15 秒的“峰宽”设置。因此选择哪个峰没有关系，但有些数据确实包含各种宽度的峰。在此情况下，应使用合适的峰。

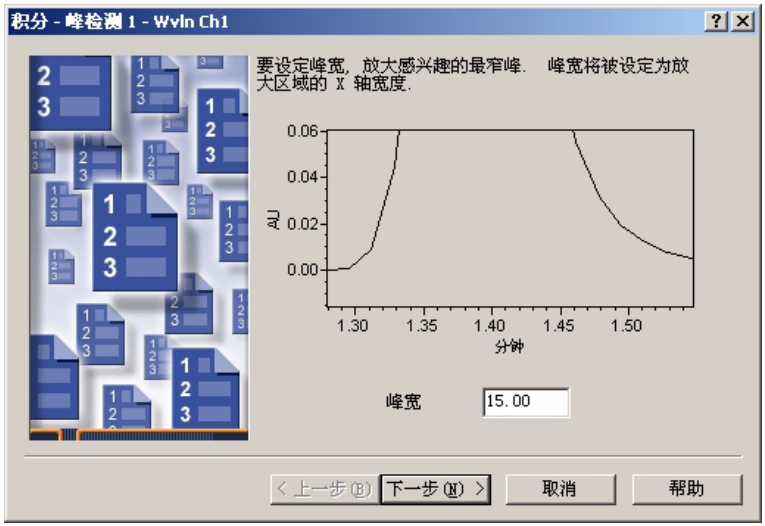


图 3-7 设置峰宽参数

5. 单击**下一步**转至 “积分 - 峰检测 2”页面 （图 3-8）。

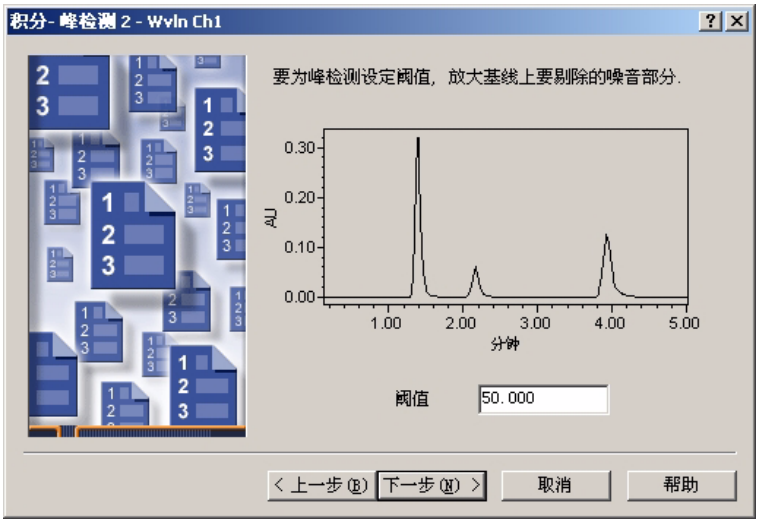


图 3-8 积分 - 峰检测 2 页面

利用此页可根据选定的基线区域在处理方法中设置阈值参数。阈值是一个斜率设置，它通过确定跨三个数据点的斜率是否超过确定的斜率阈值来定义峰起点和峰落点。它用于剔除基线噪音。

6. 按向导的说明用鼠标绘制缩放框，将包含最大量噪音和非感兴趣的峰的基线区域围起 （约 0.2 到 1.2 分钟）。软件会显示缩放后的选中部分并确定适当的阈值 （图 3-9）。

***注：**通常，需要几次缩放基线以确保所选区域中没有感兴趣的峰。*

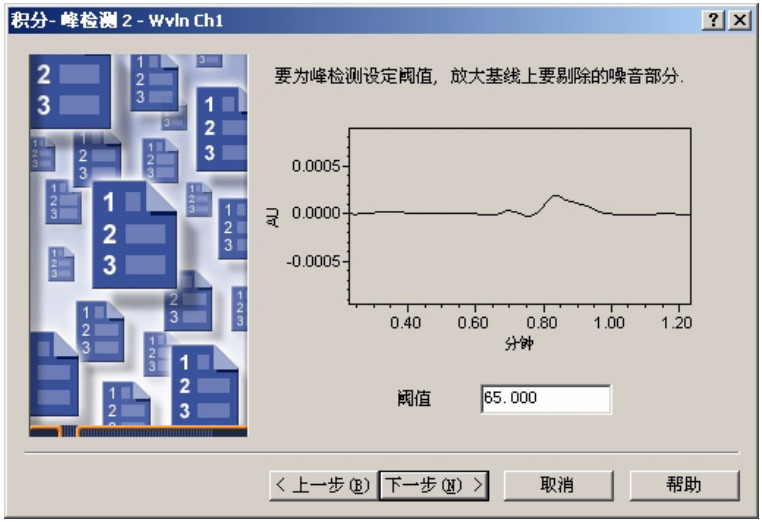


图 3-9 设置阈值参数

7. 单击**下一步**，转至 “积分 - 积分区域”页面 （图 3-10）。

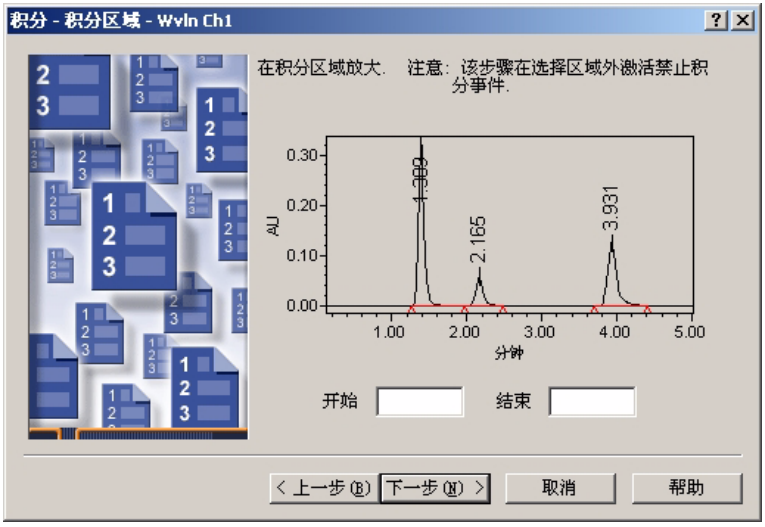


图 3-10 积分 - 积分区域页面

此页允许通过使用 “禁止积分”事件指定不发生积分的时间区域，以细化积分。

8. 如果想禁止积分，请按向导说明用鼠标绘制缩放框，将想发生积分的区域围起。缩放框*外部*区域中将禁止进行积分。软件会显示放大的选中部分。单击**下一步**，转至 “积分 - 剔除峰”页面 （图 3-11）。

   对此特定数据而言，无需执行此步骤。如果不想禁止积分，请不要在此对话框中进行任何操作，单击**下一步**。

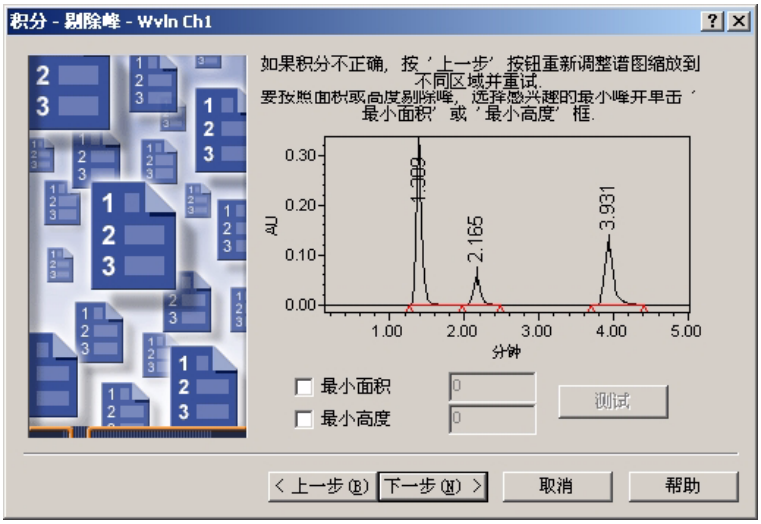


图 3-11 积分 - 剔除峰页面

3

使用此页剔除不感兴趣的小峰。对此特定数据而言，无需执行此步骤，因为没有已积分的不需要的基线噪音。单击**下一步**转至 “校正 - 常规” 页面。

***注：**要使用此设置，请选择最小的感兴趣的峰，用红色加亮显示。选中**最小面积**或**最小高度**复选框，将最小面积或高度设置为选定峰面积或高度的 95%。*

有必要使用 “最小面积” 或 “最小高度” 参数时，通常只使用其中一个，而不同时使用两个。有关详细信息，请参阅 Empower 帮助 *中的 “最小面积” 和 “最小高度” 主题。*

9. 接受缺省设置并单击**下一步**。出现一条信息，指示通道需要有通道名才能执行跨通道内标处理。在此对话框中单击**否**。出现 “名称和保留时间” 页面（图 3-12）。

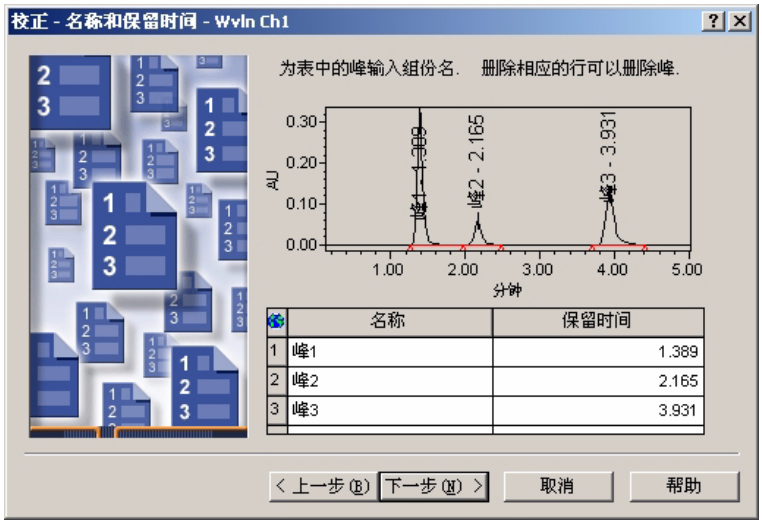


图 3-12 名称和保留时间页面

10. 单击首行中“名称”列左侧的 **1**。按住 **Shift** 键，单击第三行中“名称”列左侧的 **3**。此时所有行都被加亮。在键盘上按 **Delete** 键，从此表中移除全部输入值。单击此页及后续页面中的**下一步**，直至出现“PDA 纯化 / 匹配”页面为止（图 3-13）。

注：*仅当想处理标准样、生成校正曲线及定量未知样时，才有必要输入组份名称和含量。由于本指南只侧重生成纯度和库匹配数据，因此不必输入此信息。有关校正和定量的信息，请参阅* Empower 软件入门指南 *或* Empower 帮助。

图 3-13 PDA 纯化 / 匹配页面

11. 对于问题 “要对所有峰进行峰纯度测试吗？”，请确保选中了**是**。对于问题 “要同 PDA 库进行光谱匹配吗？”，请单击**否** （图 3-13）。单击**下一步**转至 “PDA 光谱对照”页面 （图 3-14）。

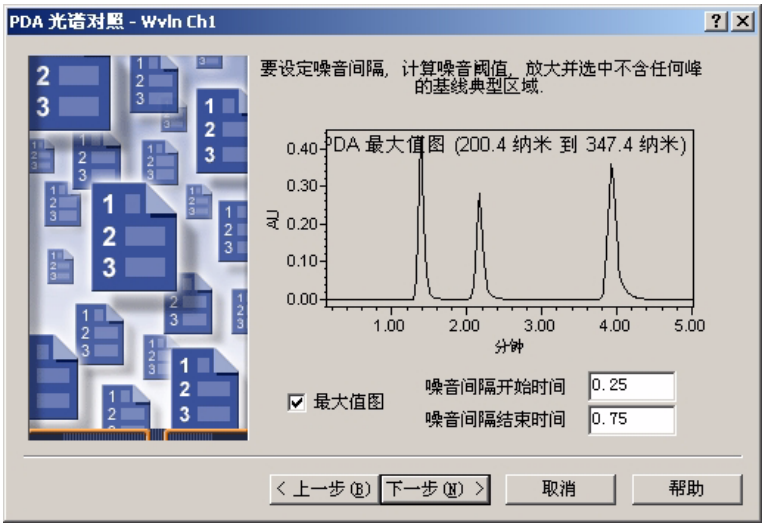


图 3-14 PDA 光谱对照页面

使用此页，可通过选择不含峰的基线片段来设置噪音间隔。您必须选择一个时间长度至少为一分半钟的基线片段。

***注：**缺省情况下，“最大值图”复选框处于选中状态，无论启动“处理方法向导”前所提取的色谱属于哪种类型，都可使“最大值图”色谱显示在“PDA 光谱对照”页面中。设置噪音间隔时，建议使用“最大值图”色谱，以确保此参数设置在不会发生与化合物相关的光谱吸光度的基线区域。*

选中“最大值图”复选框后，软件会显示从中采集数据的整个波长范围的“最大值图”色谱。如果不使用采集的全部波长范围来查看“最大值图”色谱，则必须创建“开始波长”和“结束波长”适当的“最大值图”色谱，方法为在方法组中创建衍生通道，然后在启动“处理方法向导”之前应用该方法组。“开始波长限制”和“结束波长限制”在处理方法的“纯度”选项卡中设置。（这些设置在使用“处理方法向导”时不可用。必须通过单击 *（处理方法）或通过选择**窗口 > 处理方法**查看处理方法。）*

通常需将波长开始范围定义在 190 纳米以上，以消除流动相吸光度的影响。

12. 选择约为 3.00 到 3.50 分钟的基线段 （图 3-15）。

    通过使用鼠标放大所需区域，可选择基线区域，或者也可通过在 “噪音间隔开始时间”和 “噪音间隔结束时间”文本框中，分别键入所需区域的开始和结束时间，来指定基线区域。

    缩放时，可右键单击并选择**全视图**或**不缩放**，在缩放级别间切换。在决定噪音间隔的正确区域前，请执行此操作来查看多个基线区域。

    有关选择噪音间隔的详细信息，请参阅 *Empower 帮助*中的 “确定噪音间隔”主题。

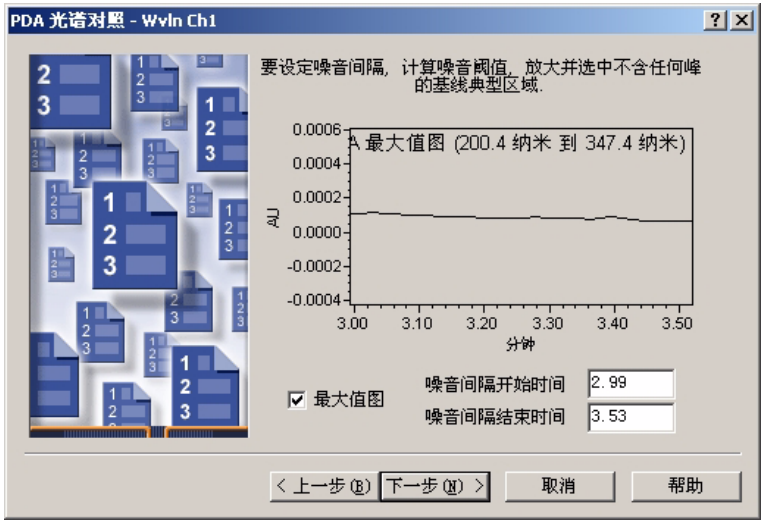


图 3-15 设置噪音间隔

13. 单击**下一步**，转至 “处理方法名”页 （图 3-16）。

图 3-16 处理方法名页

14. 在 “方法名” 字段中，输入处理方法名，例如 **Purity**，然后单击**完成**。此时处理方法被保存，并出现 “查看 - 主窗口”，显示已处理的色谱 （图 3-17）。处理方法的名称在状态条的右侧显示。

    注：*Empower PDA 软件将处理方法中的 “阈值判据” 自动设置为 “自动阈值”。有关详细信息，请参阅* Empower 帮助 *中的 “光谱对照的阈值判据注意事项 (PDA)” 主题。*

    *本程序假定 “自动应用方法组” 和 “新方法组”：在 “查看” 中启用了 “启动 ‘查看’ 时创建新方法组” 选项。要验证或更改这些设置，请选择****选项 > 方法组选项****。如果未启用 “自动应用方法组” 选项，则色谱不会被自动处理。要处理色谱，请单击* *（应用方法组），或单击****处理 > 应用方法组****。*

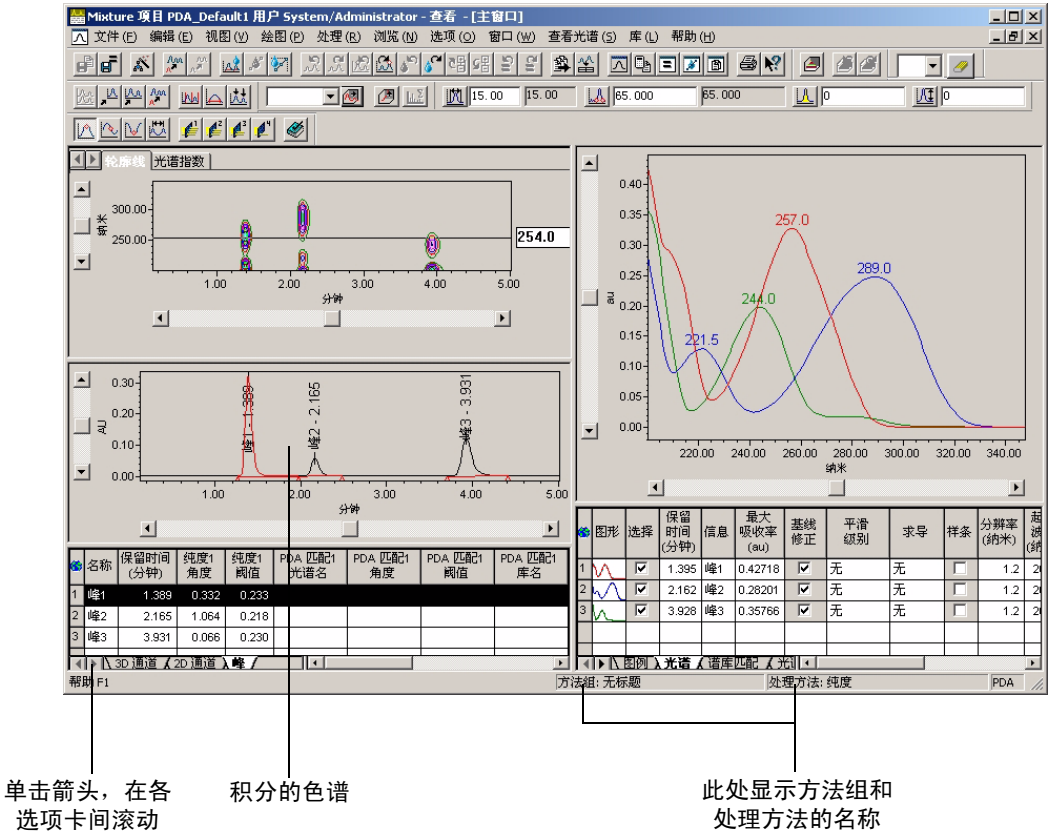


图 3-17 查看中的积分色谱

用 PDA 处理方法处理提取的数据时，必须指定所用的提取通道和处理方法。如果需要，也可指定多个提取通道和对每个通道使用不同处理方法。当象在第 3.2 节，衍生色谱中那样提取通道时，它们自动添加到您的方法组中。尽管不需要其它操作，但仍建议在方法组中验证此信息，并将衍生通道的名称从软件指定的通用名重命名为对您更有意义的名称。

3.3.1 查看、修改和保存方法组

1. 单击 （方法组）或选择**窗口 > 方法组**，打开 “方法组编辑器”窗口 （图 3-18）。

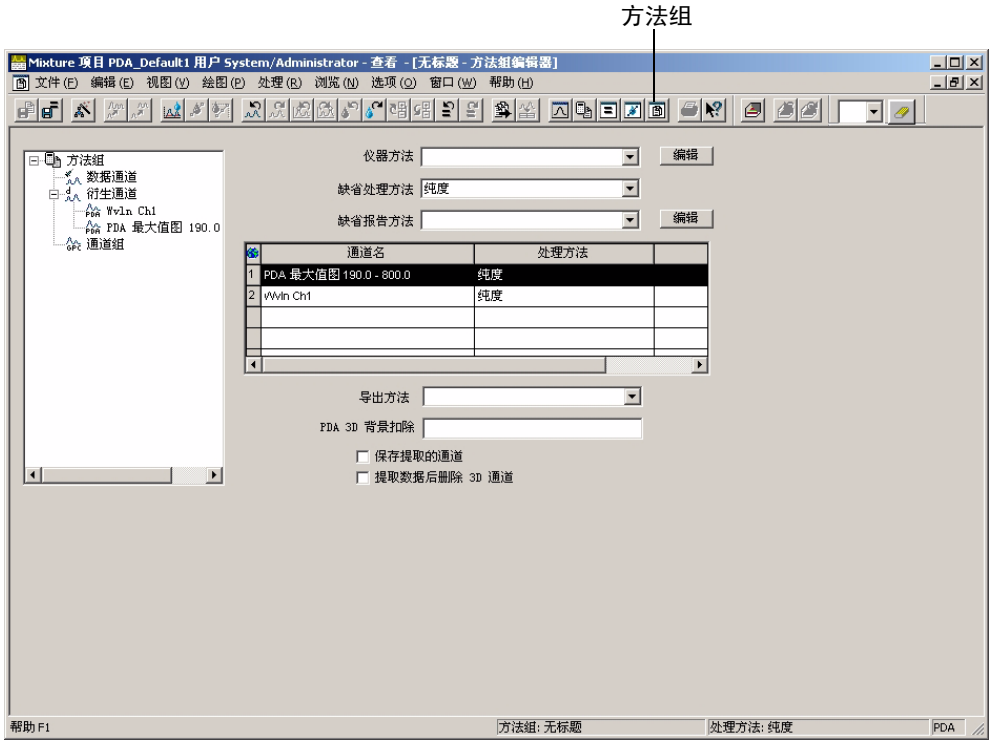


图 3-18 方法组编辑器窗口

请注意，较早提取的 “最大值图”和 254 纳米（命名为 Wvln Ch1）色谱列在 “通道”表的 “通道名”列中。刚创建的处理方法也在此表中指定给 254 纳米色谱。

2. 在 “方法组编辑器”窗口左侧的目录区中，右键单击 **Wvln Ch1** 衍生通道。从快捷菜单选择**重命名**。 Wvln Ch1 即被选中（图 3-19）。为此衍生通道输入新名称，例如 **254nm**。

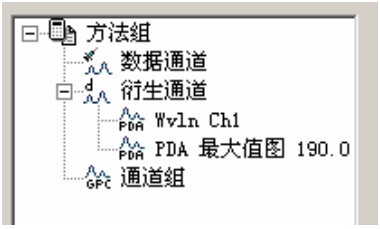


图 3-19 方法组目录区

3. 单击 “通道” 表中第一行，选择 “最大值图” 色谱 （图 3-18）。按键盘上的 **Delete** 键，从表中移除此行。
4. 选择**文件 > 另存为 > 方法组**，打开 “保存当前的方法组” 对话框（图 3-20）。

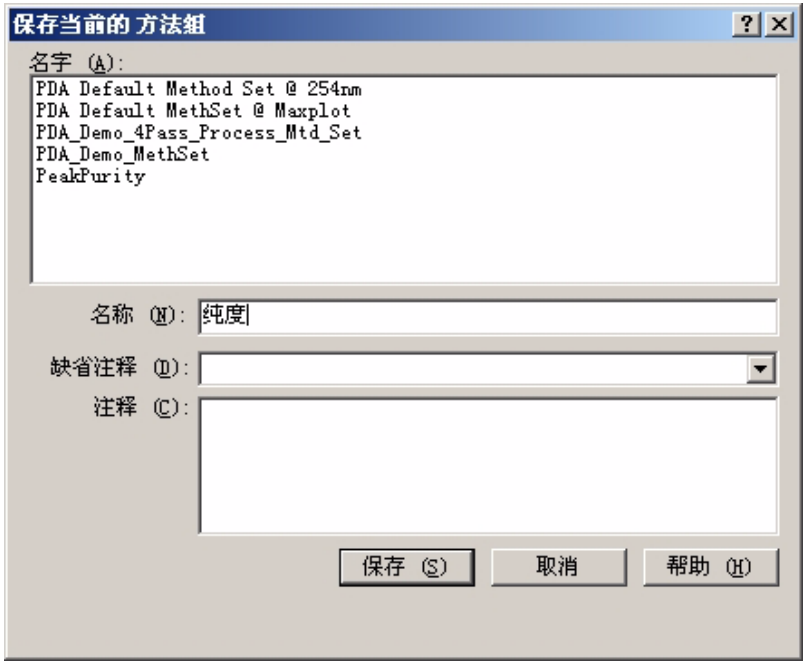


图 3-20 保存当前的方法组对话框

5. 在 “名称” 字段键入名称，例如 **Purity**，然后单击**保存**。方法组的名称出现在 “方法组编辑器” 窗口的标题栏中，应如 图 3-21 所示。

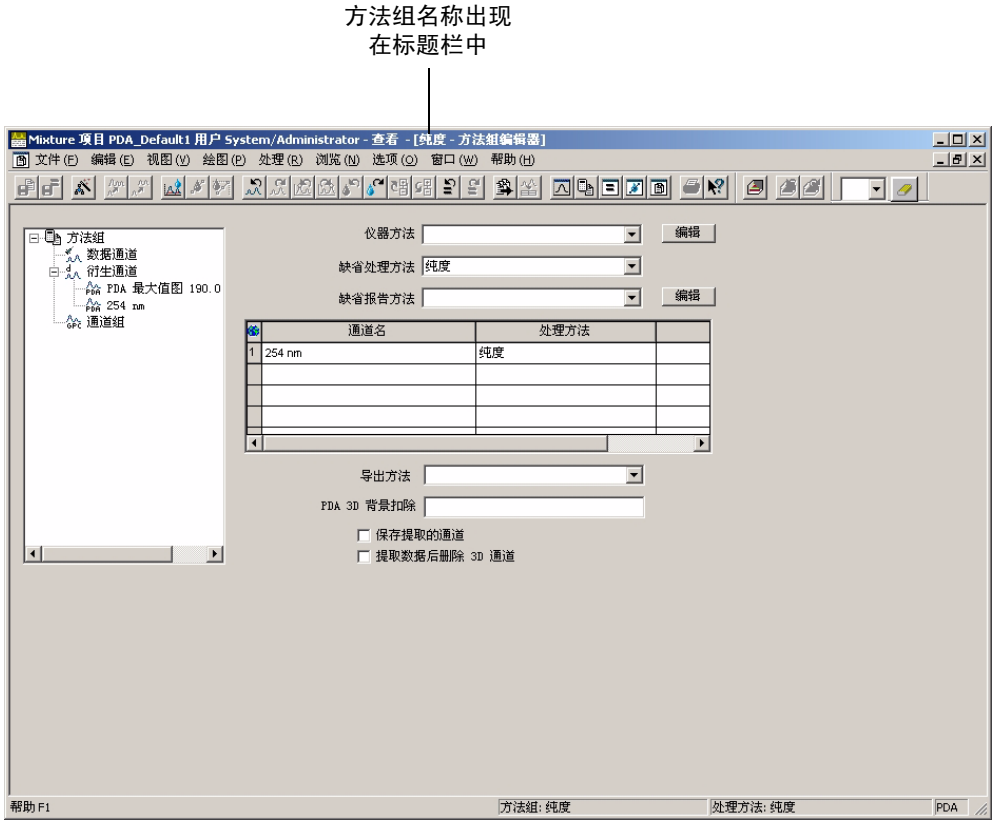


图 3-21 修改和保存后的方法组编辑器窗口

3.3.2 查看峰纯度计算

1. 单击 （查看 - 主窗口）或选择**窗口 > 主窗口**，返回到“查看 - 主窗口”。
2. 单击 （应用方法组）或选择**处理 > 应用方法组**，提取并处理在创建的方法组中所指定的通道 （图 3-22）。

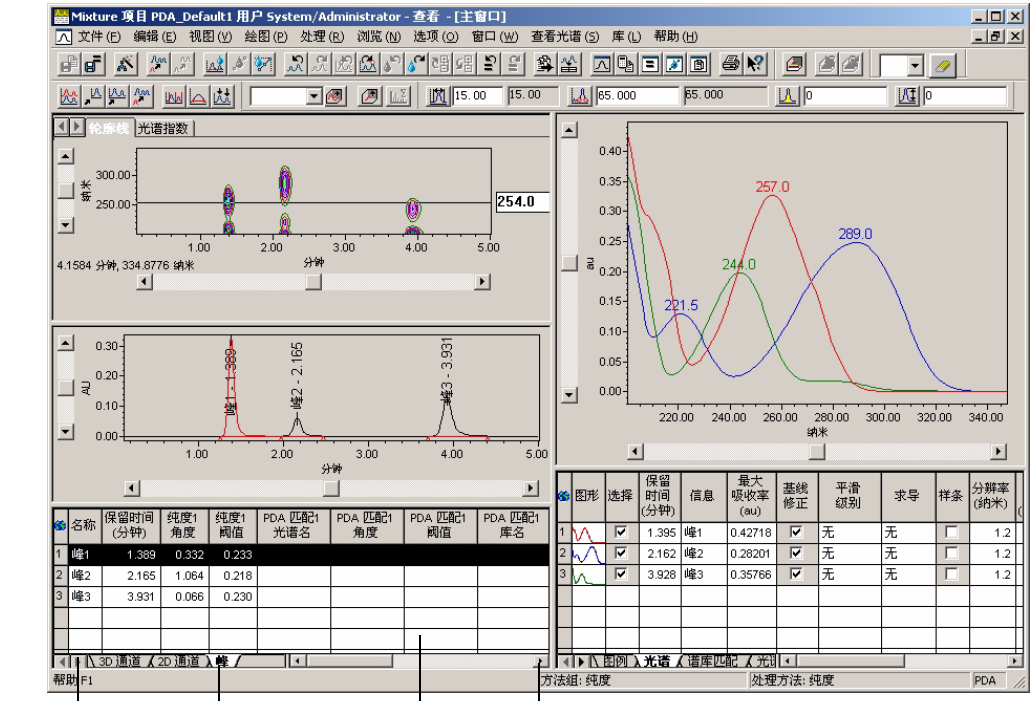


图 3-22 峰表中的纯度角度和纯度阈值

3. 选择窗口左下角的滚动箭头以使 “峰” 选项卡可见 （图 3-22）。要查看峰纯度计算的数值结果，请单击 “查看 - 主窗口” 底部的**峰**选项卡。
4. 用鼠标拖动分隔条上下移动 “色谱” 图，调整 “色谱” 图和 “峰” 表的大小。“峰” 表显示 “纯度角” 和 “纯度阈值” 值 （图 3-22）。如果 “纯度角” 和 “纯度阈值” 值不可见，可在 “峰” 表内滚动以将其显示。
5. 如果 “纯度角” 小于 “纯度阈值”，则此峰光谱均匀。在表中向下滚动以查看各积分峰的值。请注意，“峰 1” 和 “峰 2” 光谱不一致；而 “峰 3” 光谱一致。有关峰纯度结果的详细解释，请参阅 *Empower 帮助*中的 “解释峰纯度结果 (PDA)” 主题。

3.4 查看峰纯度结果

计算峰纯度后，即可以不同方式查看结果。例如，可在“光谱指数”中检查顶点光谱和最大不纯度光谱（请参阅第 3.4.1 节）。或者，也可使用“结果”窗口检查“纯度”图和查看峰纯度结果 （请参阅第 3.4.2 节）。

3.4.1 使用光谱指数

使用 “光谱指数”可查看积分峰的顶点光谱。要查看 “光谱指数”：

1. 在 “查看 - 主”窗口中，单击**光谱指数**选项卡 （图 3-23）。出现每个积分峰的顶点光谱，并且在工具条中出现附加的 “光谱指数”工具 （如果它们以前未出现）。

   注：如果 “光谱指数”工具未出现，可右键单击工具条并选择光谱指数，或选择视图 > 工具条 > 光谱指数。

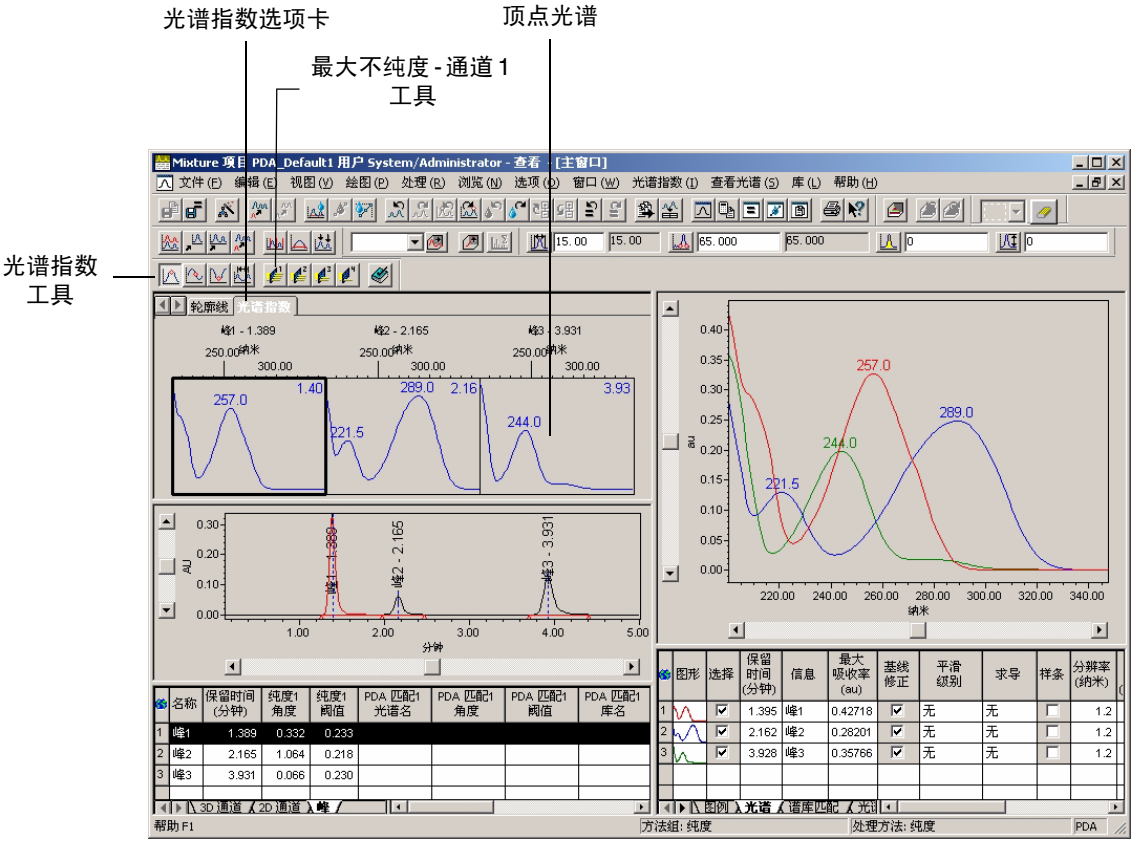


图 3-23 顶点光谱

2. 单击 （最大不纯度 - 通道 1）（图 3-23），以显示 “光谱指数”图中的最大不纯度光谱 （图 3-24） 。此时即可查看被积分峰内与顶点光谱差别最大的光谱所重叠的顶点光谱。对每个积分峰都显示此图形。“色谱”图中的虚线表示各峰内采集这些光谱的位置。缺省情况下，各光谱的 lambda 最大值 （即最大吸光度的波长）在 “光谱指数”图中标记出。

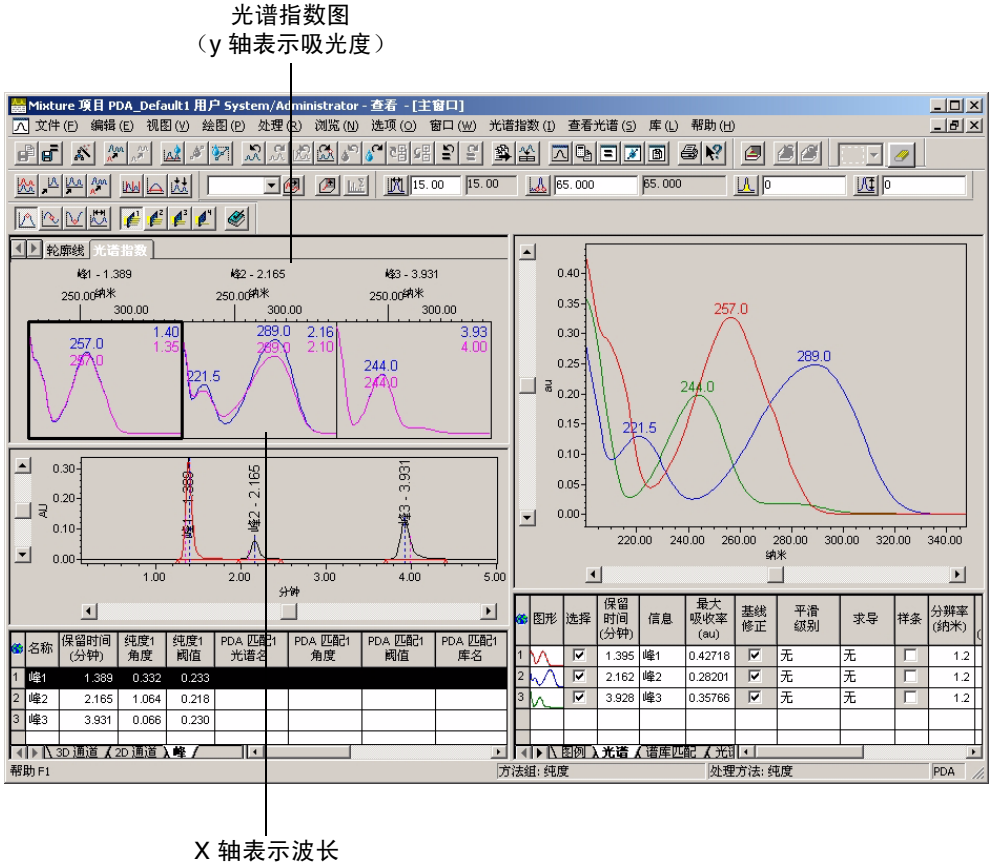
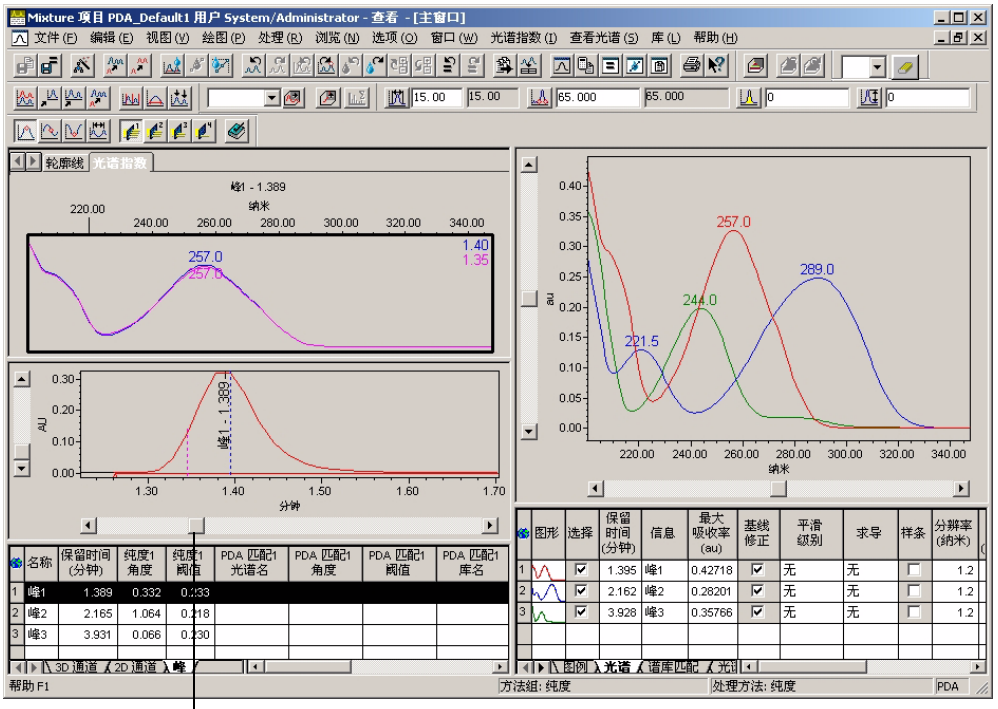


图 3-24 与最大不纯度光谱重叠的顶点光谱

3. 在 “色谱” 图中，放大第一个峰，检查重叠峰并注意光谱间的细微差异 （图 3-25）。记住此峰是光谱不纯净峰。



滚动到右侧以进行检查后续峰

图 3-25 峰 1 光谱已缩放的最大不纯度光谱

4. 滚动到右侧并从第二个峰开始检查光谱，注意光谱间的显著差异（图 3-26）。记住此峰是光谱不纯净峰。

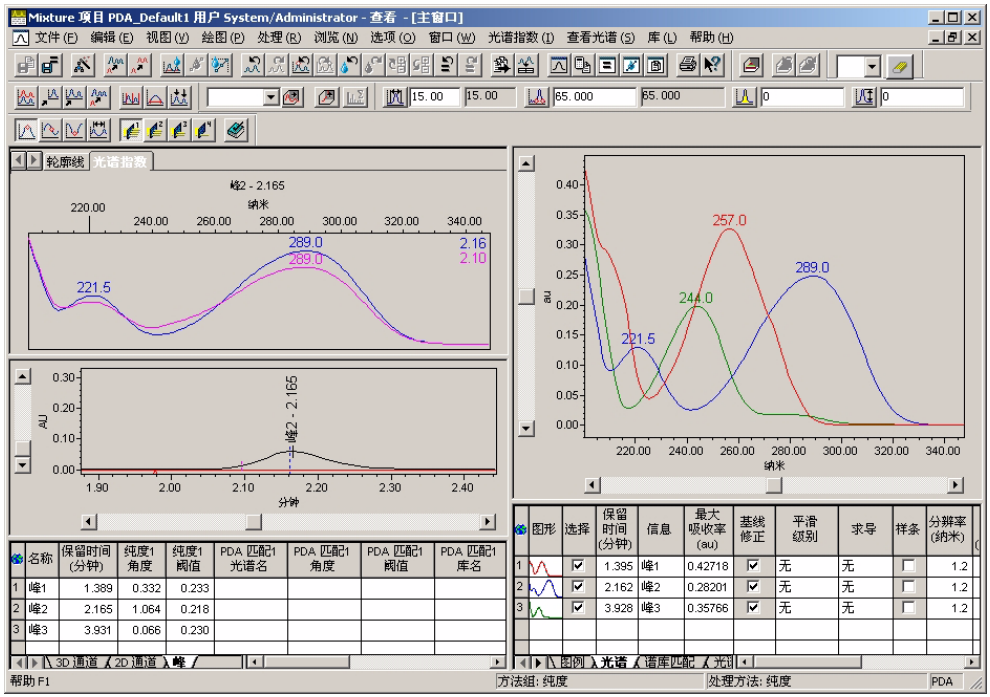


图 3-26 峰 2 光谱已缩放的最大不纯度光谱

5. 滚动到右侧并从第三个峰开始检查光谱 （图 3-27）。光谱重叠得非常好。

   第一个峰和第二个峰的光谱不一致，需要进一步研究。第三个峰具有光谱一致性。这验证了在也榭捶宕慷燃扑阌步骤 5 中讨论的结果。

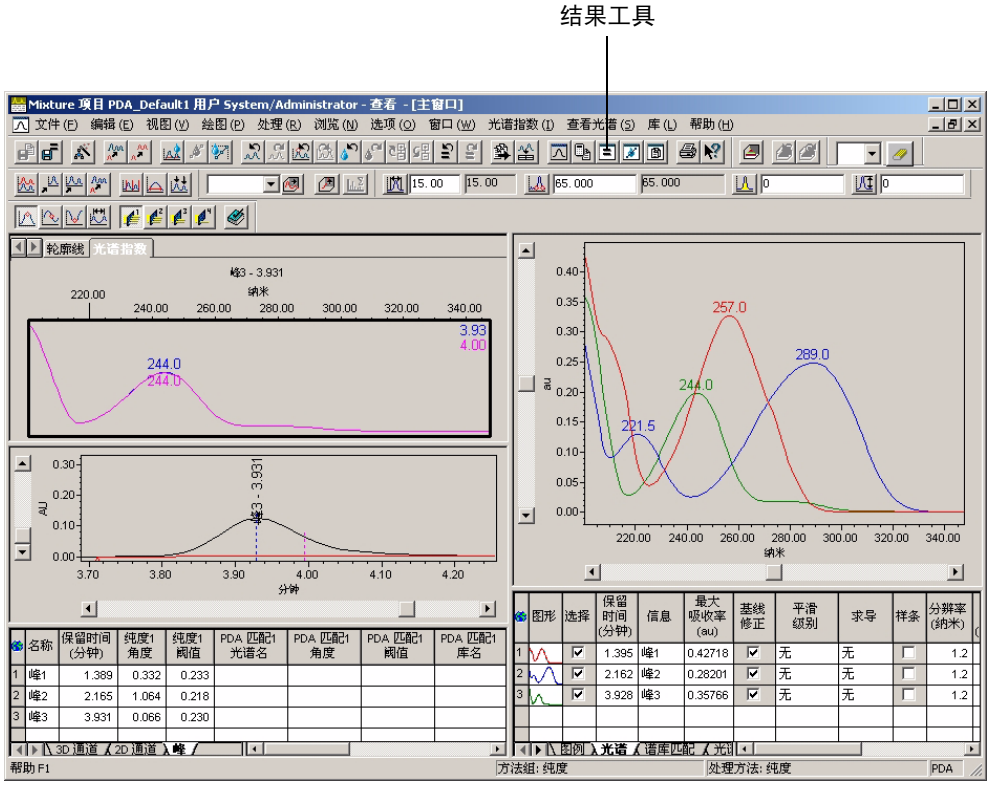


图 3-27 峰 3 光谱已缩放的最大不纯度光谱

3.4.2 使用结果窗口

要在 “结果” 窗口中查看 “纯度” 图：

1. 单击 （结果）或选择**窗口 > 结果窗口**（图 3-27），打开 “结果” 窗口（图 3-28）。必要时，最大化 “结果” 窗口，或拖动分隔条调整不同窗格的大小。

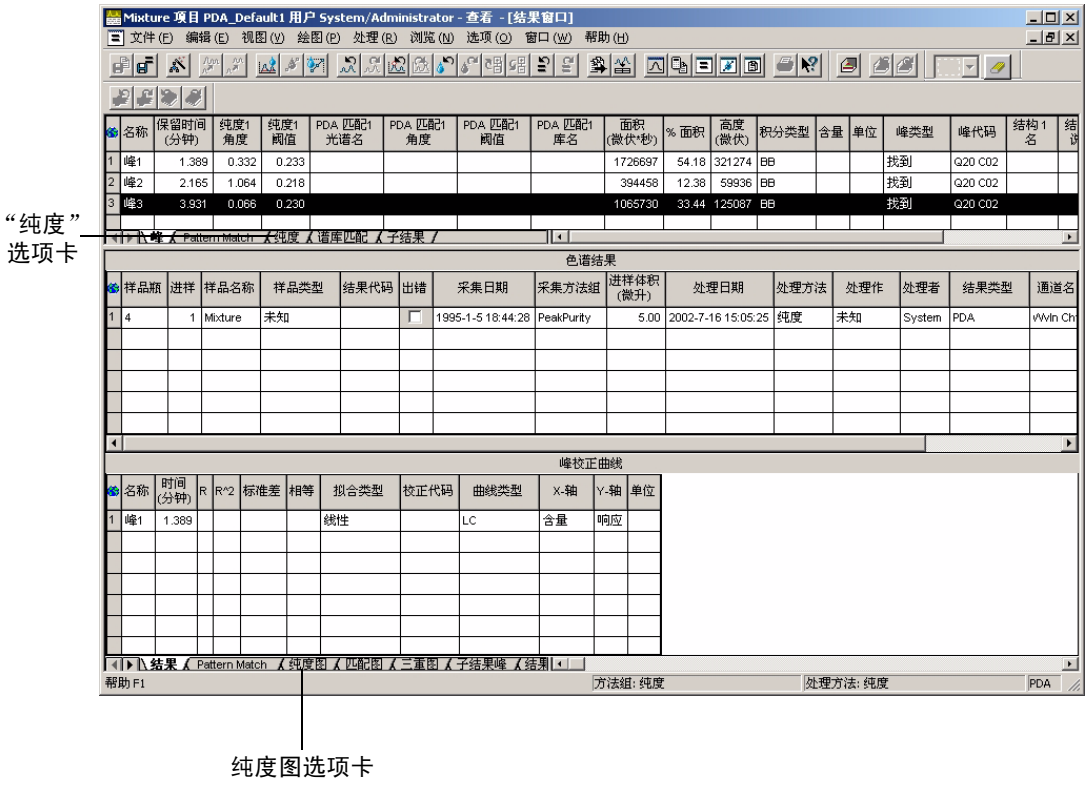


图 3-28 结果窗口

2. 在“结果”窗口中，单击顶部窗格中的**纯度**选项卡和底部窗格中的**纯度图**选项卡。“纯度”图（图 3-29）显示当前活动（选定）的色谱峰并绘制整个峰范围内的“纯度角”和“纯度阈值”值。注意，左侧 y 轴以吸光度单位为单位，右侧 y 轴以“光谱对照”度为单位。“纯度”选项卡以数字格式显示每个峰的纯度信息。使用“峰”列表选择每个峰（图 3-29）。

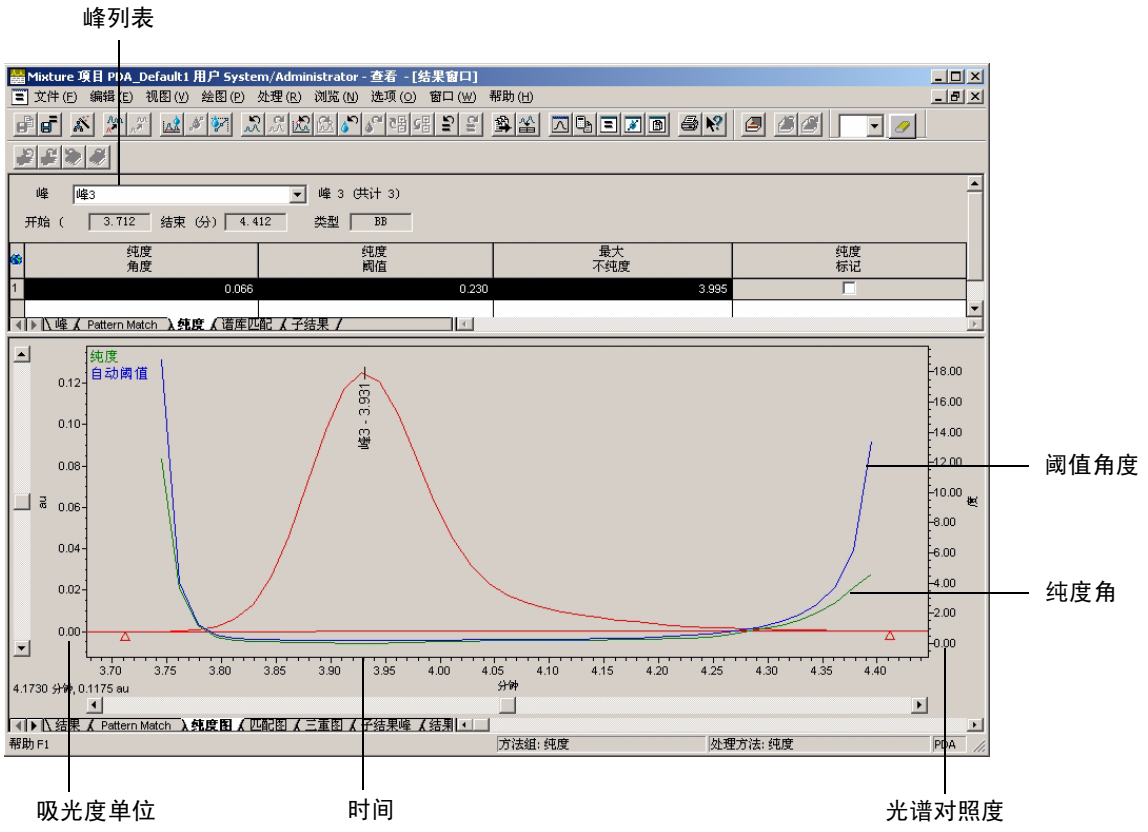


图 3-29 纯度图

对于光谱一致的峰，“纯度角”始终小于 “阈值角度”。对于 1.389 分钟处的峰，其前部分的 “纯度角”大于 “阈值角度”，表示该峰在此区域不具有光谱一致性。

“纯度图”绘制峰顶点光谱和所有其它峰光谱之间的 “光谱对照角度”。有关详细信息，请参阅 *Empower 帮助* 中的 “光谱对照角 (PDA)” 主题。由于基线噪音的影响，峰尾部的 “纯度角”将增加。

3. 在 “峰” 列表中选择下一个峰 （图 3-29），显示在 2.165 分钟处的下一个峰的 “纯度” 图。在峰前部分，“纯度角” 大于 “阈值角”，表示该峰在此区域不具有光谱一致性。
4. 在 “峰” 列表中选择下一个峰 （图 3-29），显示在 3.931 分钟处的下一个峰的 “纯度” 图。在整个峰内，“纯度角” 都小于 “阈值角”，表示该峰具有光谱一致性。
5. 右键单击 “纯度” 图，然后选择**属性**，打开 “图属性” 对话框 （图 3-30）。

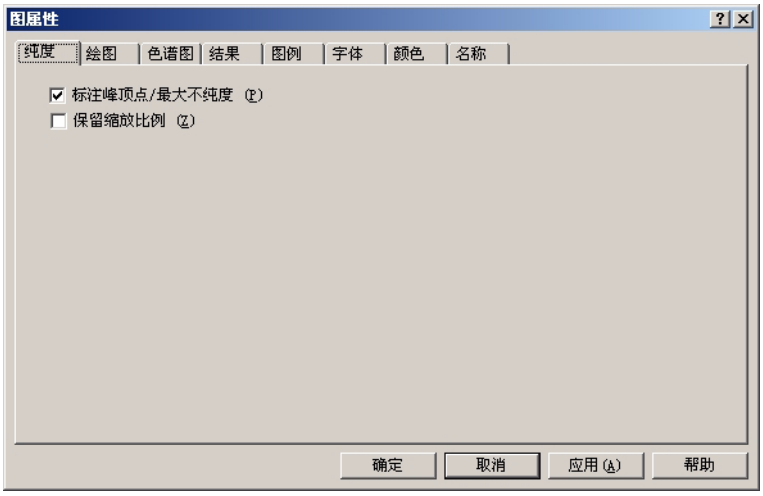


图 3-30 图属性对话框

6. 在 “纯度” 选项卡中，选中**标注峰顶点 / 最大不纯度** 复选框，然后单击**确定**。最大不纯度的点出现在 “纯度” 图中，并以 “M” 标记 （图 3-31）。峰顶点以一条从峰顶点到基线的垂直线进行标记。

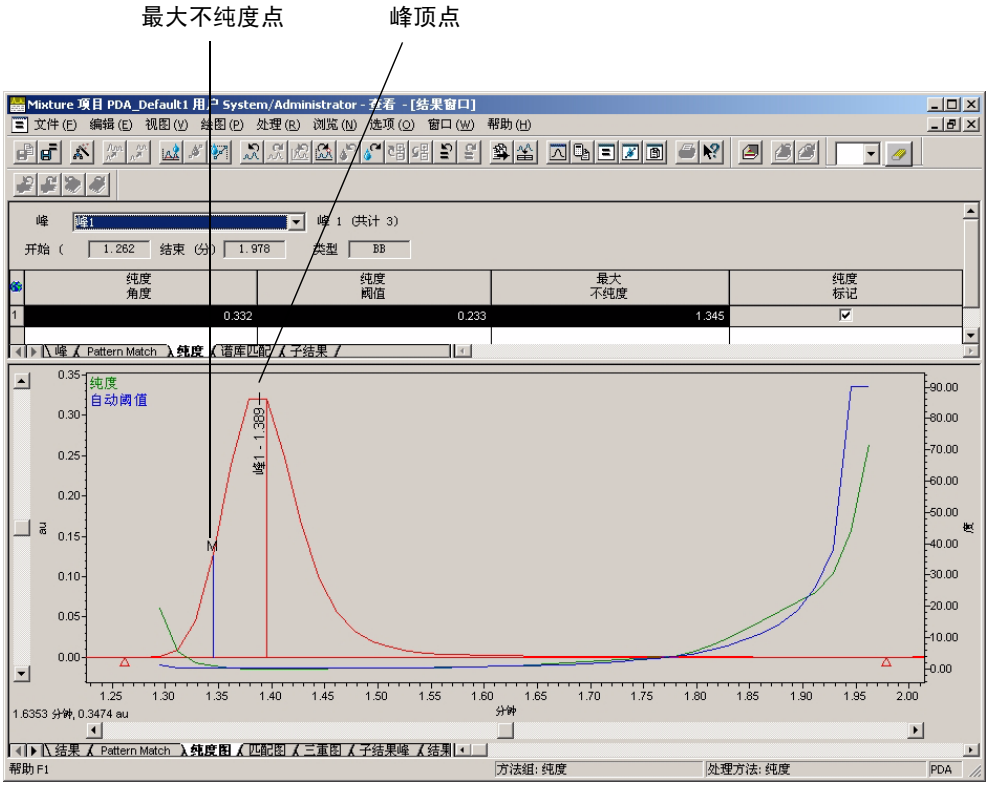


图 3-31 带有最大不纯度指示标记的纯度图

7. 保存结果以便可将其打印到报告中。要保存结果，请选择**文件 > 保存 > 结果**。如果**保存 > 结果**不可用，请先选择**保存 > 处理方法**。
8. 单击 （关闭）或选择**文件 > 退出**，退出 “查看”。

后续步骤

开发评估峰纯度的处理方法后，可进行以下操作：

- 修改现有的处理方法以将库匹配包括在内，如第 4 章，谱库匹配中所述。
- 修改用于多组份峰纯度的处理方法。有关详细信息，请参阅 *Empower 帮助*中的“多组份峰纯度测试 (PDA)”主题。
- 打印结果，如第 5 章，打印报告中所述。

3

第 4 章
谱库匹配

本章为逐步的自学指南，介绍创建库并将未知光谱或采集光谱与库中光谱相匹配的方法。

4.1 指南概述

本指南可让您熟悉 Empower 软件工具以及用于创建谱库并将光谱与谱库进行匹配的程序。使用谱库匹配，可通过比较未知峰的光谱和已知峰的光谱对峰进行识别。本指南说明如何：

- 利用现有标准样创建库。
- 将未知光谱与库中光谱相匹配。
- 查看谱库匹配结果。

第 4.1.1 节，创建库的步骤，列出了创建库的步骤。第 4.1.2 节，谱库匹配的步骤 显示了进行谱库匹配的步骤。按照第 3 章 “峰纯度处理”中的说明，可使用已开发的处理方法并进行修改以将谱库匹配包括在内。

4.1.1 创建库的步骤

以下创建库的步骤在节 4.2 中有说明：

1. 选择数据的 “PDA 3D 通道”。
2. 将数据引入 “查看”。
3. 打开现有的方法组。
4. 创建新库。
5. 将光谱添加到库。

4.1.2 谱库匹配的步骤

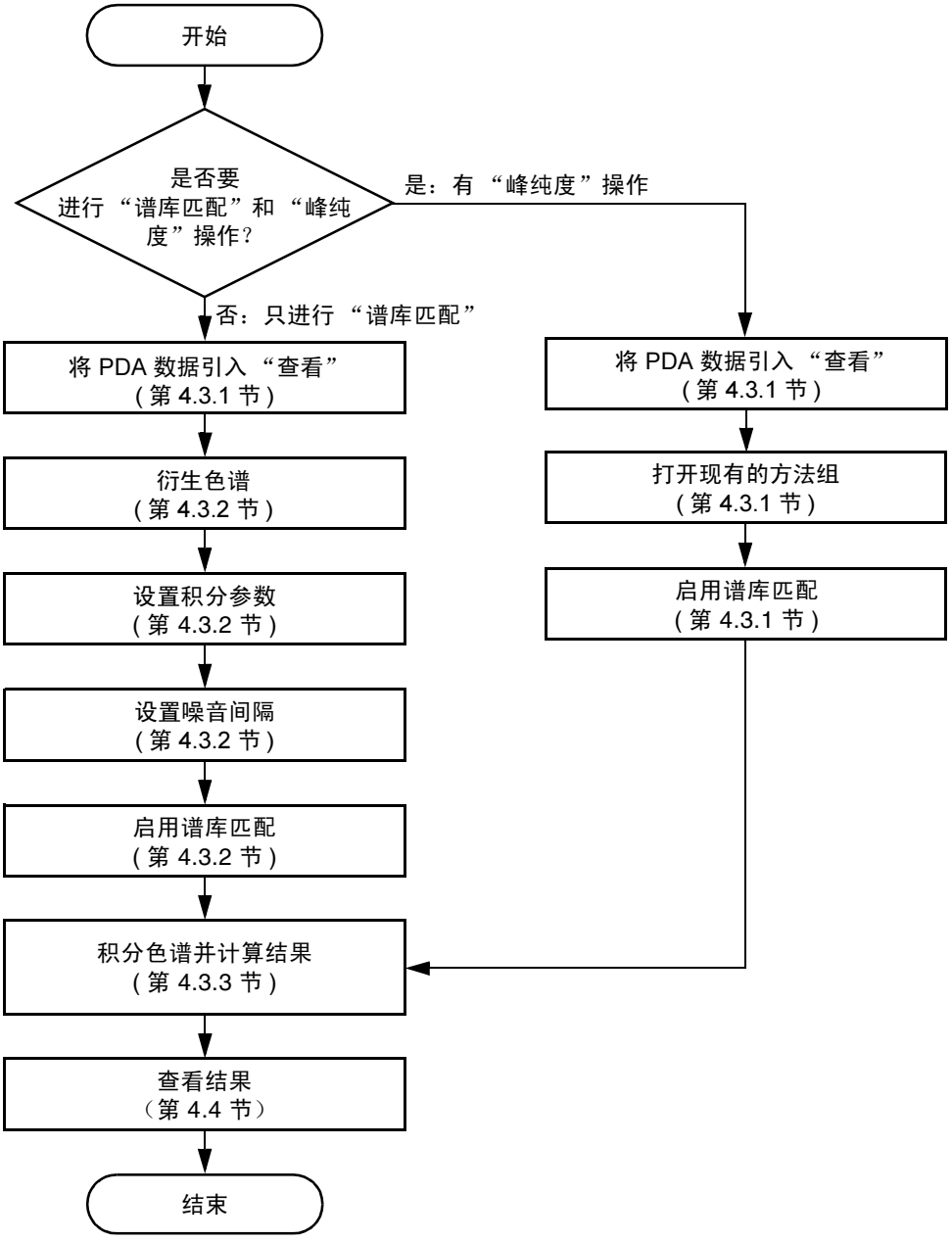


图 4-1 谱库匹配的步骤

4.2 创建新库

必须创建已知光谱库，然后才可将未知光谱与其匹配。创建库的第一步是选择要添加到库中的光谱。在此过程中，将“对羟基苯甲酸酯标准样”、“酚标准样”和“对羟基苯甲酸盐标准样”的光谱添加到库中。

要创建库：

1. 在“项目”窗口“通道”视图中（在第 2 章“查看 PDA 数据”中打开的视图）选择**对羟基苯甲酸酯标准样**、**酚标准样**和**对羟基苯甲酸盐标准样**，然后单击 （“查看”）或选择**窗口 > 查看**（图 4-2）打开“查看 - 主窗口”（图 4-3）。

   ***注：**在 Empower 软件中，可以通过按住 Ctrl 键单击（多个不连续的行）或按住 Shift 键单击（多个连续的行）在表中同时选择多个项目。*

   *如果未显示“查看 - 主窗口”，请单击 （“查看 - 主窗口”）或选择**窗口 > 主窗口**（图 4-3）。*

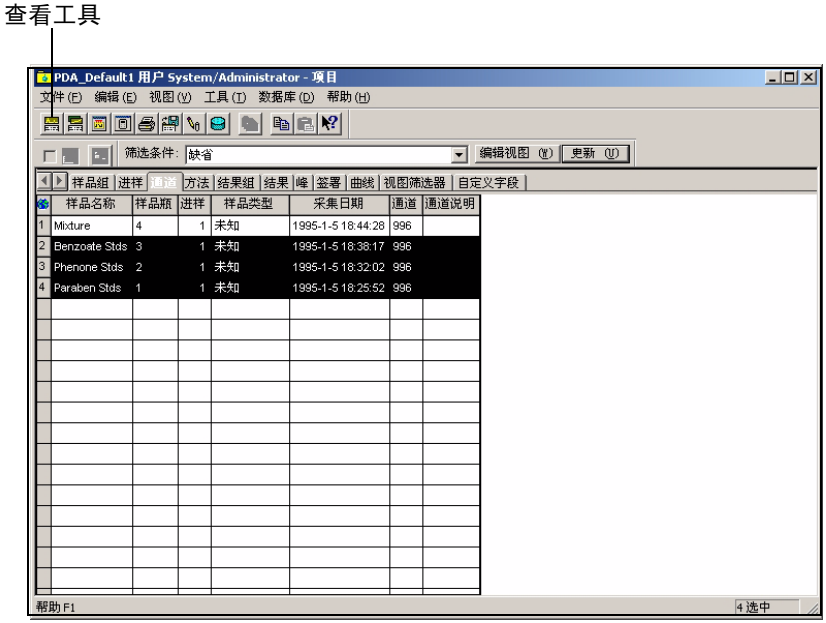


图 4-2 为库选择数据

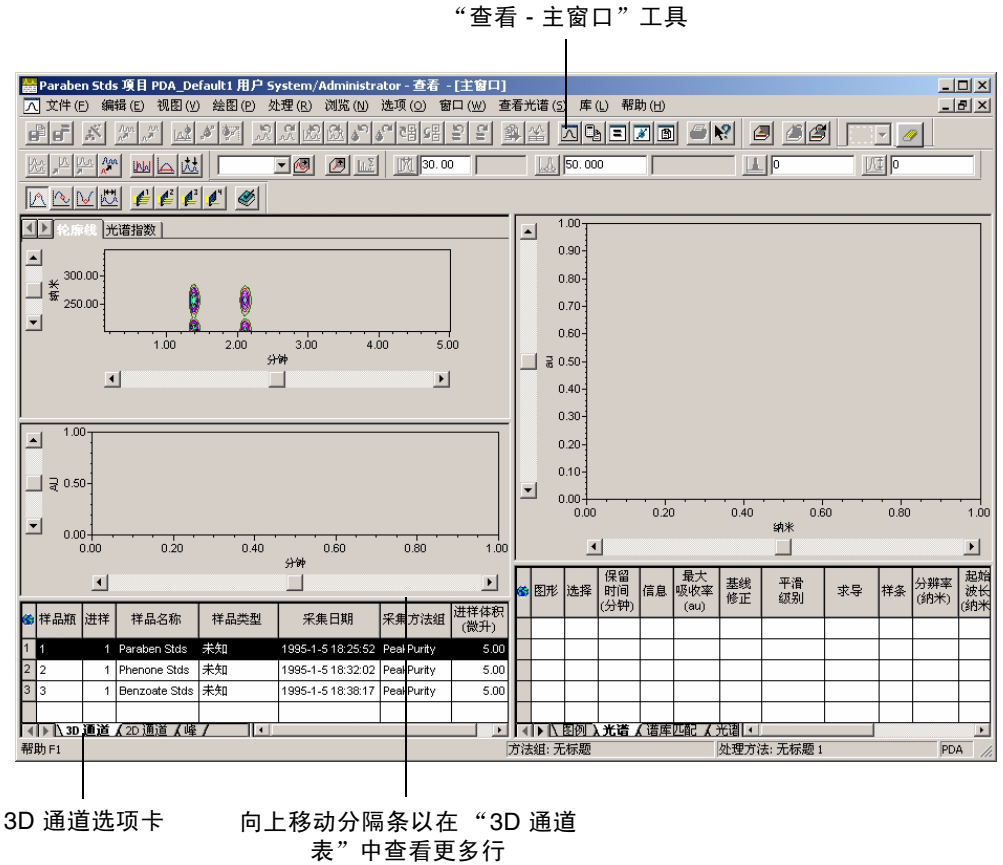


图 4-3 查看主窗口

2. 在“查看 - 主窗口”底部，单击 **3D 通道**选项卡 （图 4-3）。务必选中“对羟基苯甲酸酯标准样”。
3. 如果有必要扩大“3D 通道”表，请用鼠标将“3D 通道”表上方的分隔条在屏幕上向上拖动，如图 4-3 所示。
4. 选择**文件 > 打开 > 方法组**打开“打开现有的方法组”对话框 （图 4-4）。

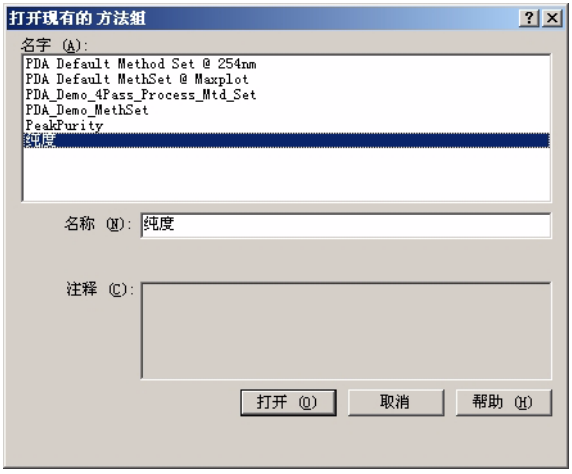


图 4-4 “打开现有的方法组”对话框

5. 在“名称”列表中，选择**纯度**或在第 3 章 “峰纯度处理”中创建的方法组，然后单击**打开**。“纯度”方法组自动应用到“查看”窗口中的数据。“对羟基苯甲酸酯标准样”在 254 纳米处的色谱将出现在“查看 - 主窗口”（图 4-5）中，各峰的顶点光谱出现在 “查看光谱”中。

   ***注：**如果未创建方法组，请选择 **PDA_Demo_MethSet**。处理期间提取色谱需要使用方法组。*

   *如果 “方法组选项”对话框中的 “自动应用方法组”复选框未启用（选择**选项 > 方法组选项**可查看其缺省设置），则不会自动应用该方法组。要应用方法组，请单击* *（“应用方法组”）或选择**处理 > 应用方法组**。*

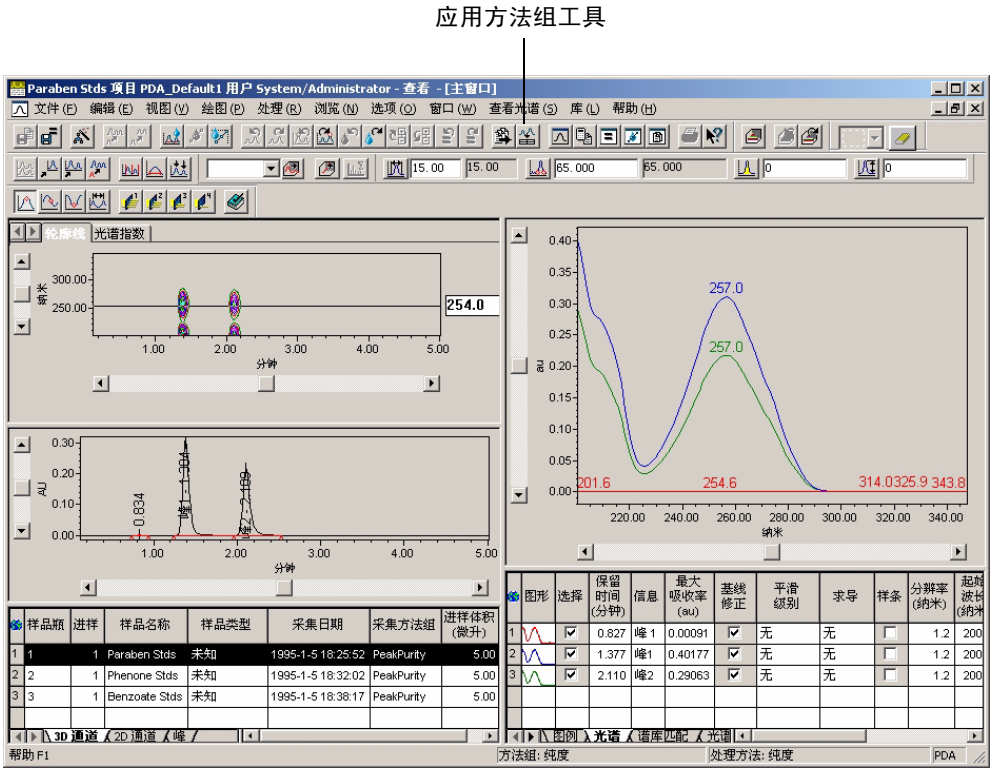


图 4-5 对羟基苯甲酸酯标准样色谱

6. 选择**库 > 新库**打开 “创建新的库” 对话框 （图 4-6）。

注: *峰保留时间与 “光谱” 选项卡中显示的保留时间不匹配。提取顶点光谱所使用的方法与用来确定保留时间所使用的方法稍有不同。*

图 4-6 “创建新的库”对话框

7. 在“名称”字段中，键入新库的名称，例如 **My Library**，然后单击**创建**创建新库。

向谱库中添加光谱

1. 在“光谱”表中，确保只为图 4-7 中所示的两个主峰选中“选择”列中的复选框。这两个光谱出现在“查看光谱”中。

   ***注：**向库中添加光谱时，使用“光谱”表中的“选择”列选择光谱。没有选中“选择”字段的光谱不会添加到库中。*

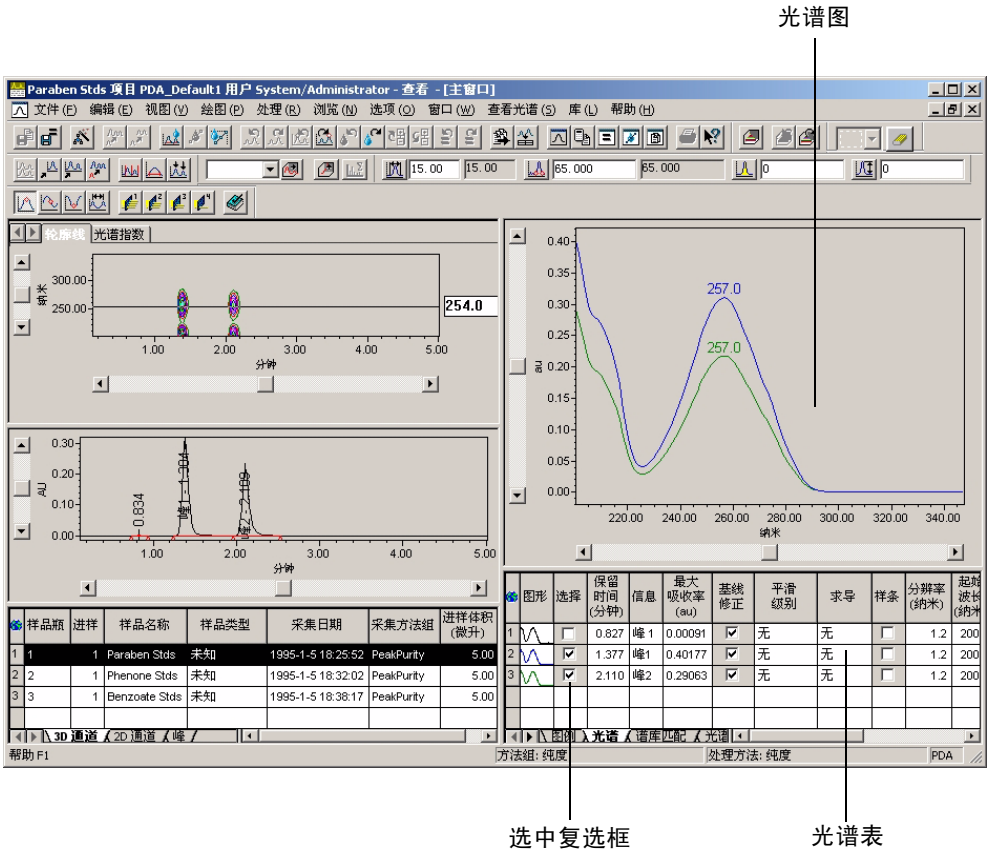


图 4-7 选中了光谱的 “查看光谱”

2. 选择**库 > 添加到库 My Library** 打开 “添加光谱到库”对话框 （图 4-8）。
3. 在 “名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 2* 更改为 **Methyl Paraben**，然后单击**确定**。“添加光谱到库”对话框重新出现，以对下一光谱进行操作。

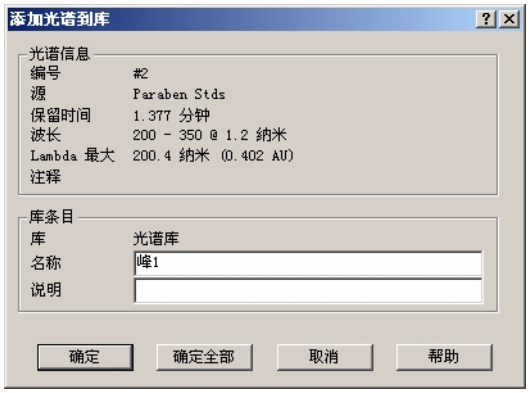


图 4-8 “添加光谱到库”对话框

4. 在“名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 3* 更改为 **Ethyl Paraben**，然后单击**确定**。光谱添加到库中，且出现在 “光谱”表中 （未选中）。
5. 在 “3D 通道”表中，选择**酚标准样**。显示 “酚标准样”的已处理色谱。对此样品中的 “峰 2”和 “峰 3”重复步骤 1 和 2。
6. 在“名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 2* 更改为**苯乙酮**，然后单击**确定**。“添加光谱到库”对话框重新出现，以对下一光谱进行操作。
7. 在 “名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 3* 更改为 **Propriophenone**，然后单击**确定**。光谱添加到库中，且出现在 “光谱”表中 （未选中）。
8. 在 “3D 通道”表中，选择**对羟基苯甲酸盐标准样**。显示 “对羟基苯甲酸盐标准样”的处理过的色谱。对此样品中的“峰 1”和“峰 2”重复步骤 1 和 2。
9. 在 “名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 1* 更改为 **Ethyl Paba**，然后单击**确定**。“添加光谱到库”对话框重新出现，以对下一光谱进行操作。
10. 在 “名称”文本框中，将名称由缺省名称*峰 2* 更改为 **Benzoic Acid**，然后单击**确定**。光谱添加到库中，且出现在 “光谱”表中 （未选中）。
11. 选择**文件 > 退出**。

4.3 将光谱与谱库匹配

创建谱库后，可将未知光谱与库中的光谱进行比较。如图 4-1 所示，可以下列方式之一创建处理方法：

- 如果要使用峰纯度和谱库匹配，可修改第 3 章“峰纯度处理”中创建的现有处理方法，以将谱库匹配包含在内。请参阅第 4.3.3 节 “为进行谱库匹配修改现有处理方法”。
- 如果要只进行谱库匹配，可创建一个仅进行谱库匹配的新处理方法。请参阅第 4.3.4 节 “为谱库匹配创建新的处理方法”。

完成创建处理方法后，请继续第 4.3.5 节 “执行谱库匹配”。

4.3.1 为进行谱库匹配修改现有处理方法

要修改现有的处理方法：

1. 在“项目”窗口（图 4-9）中（在第 2 章“查看 PDA 数据”中打开的窗口），从“通道”视图选择**混合物**，然后单击 （“查看”）或选择**工具 > 查看**打开 “查看 - 主窗口”。

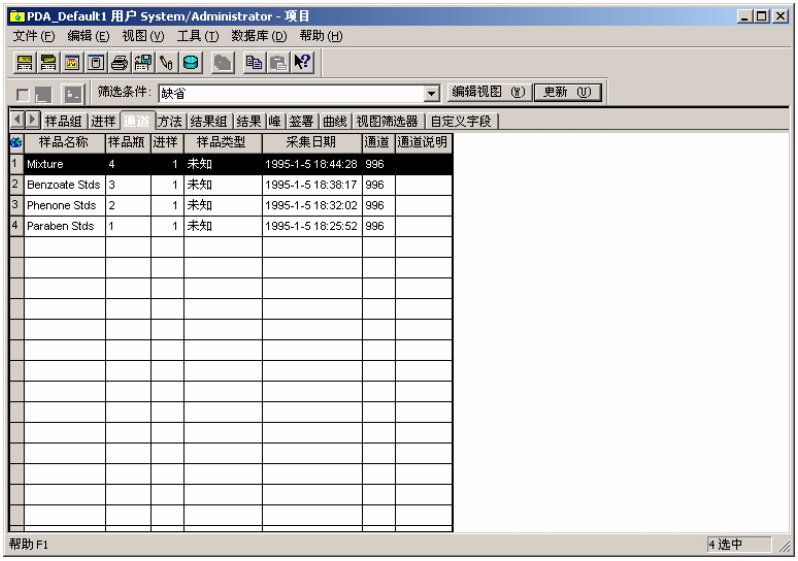


图 4-9 PDA_Default 项目的项目窗口

“查看”窗口显示未经处理的数据 （图 4-10）。

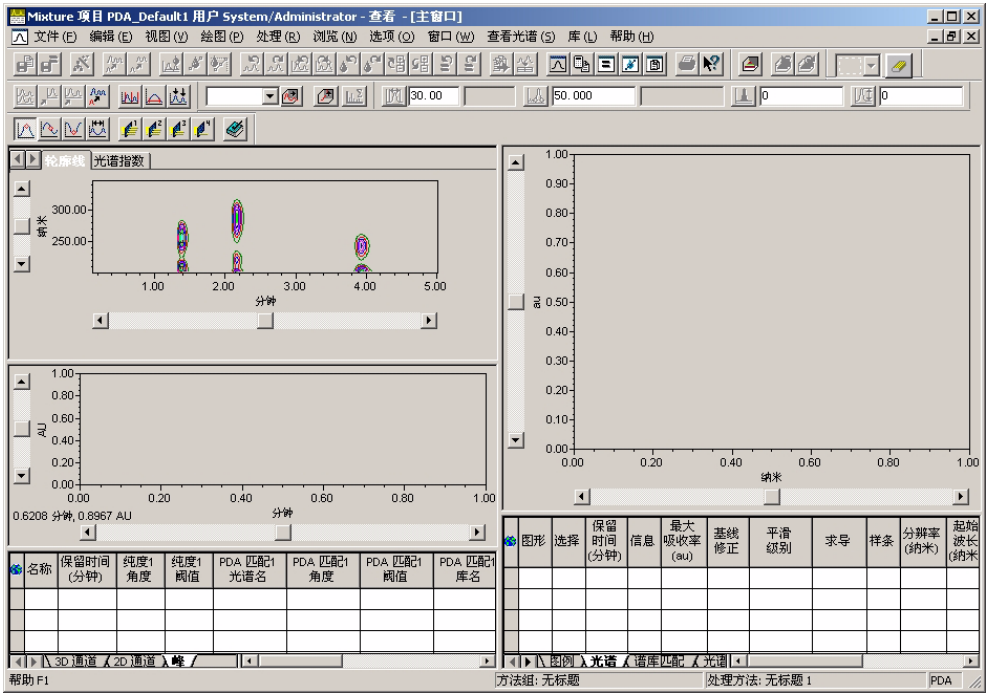


图 4-10 查看 - 主窗口

2. 选择**文件 > 打开 > 方法组**打开 “打开现有的方法组”对话框。
3. 在 “名称”列表中，选择**纯度**或在第 3 章 “峰纯度处理”中创建的方法组，然后单击**打开**。“纯度”方法组自动应用到 “查看”窗口中的数据。“混合物”在 254 纳米处的色谱将出现在 “查看 - 主窗口”中 （图 4-11），各峰的顶点光谱出现在 “查看光谱”中。

***注：**如果未创建方法组，请选择 **PDA_Demo_MethSet**。处理期间提取色谱需要使用方法组。*

*如果 “方法组选项”对话框中的 “自动应用方法组”复选框未启用 （选择**选项 > 方法组选项**可查看其缺省设置），则不会自动应用该方法组。要应用方法组，请单击* *（“应用方法组”）或选择**处理 > 应用方法组**。*

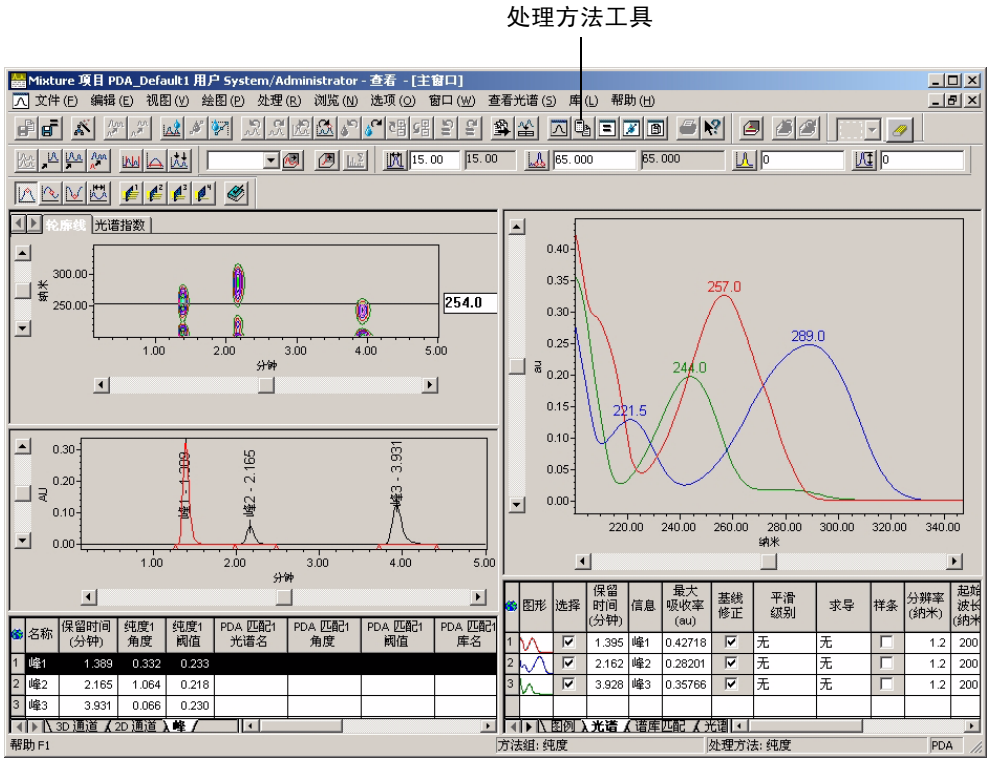


图 4-11 积分 254 纳米处的混合物色谱

4. 单击 （“处理方法”）或选择**窗口 > 处理方法**打开 “处理方法”窗口，然后为进行谱库匹配修改现有处理方法（图 4-12）。如有必要，将窗口最大化。

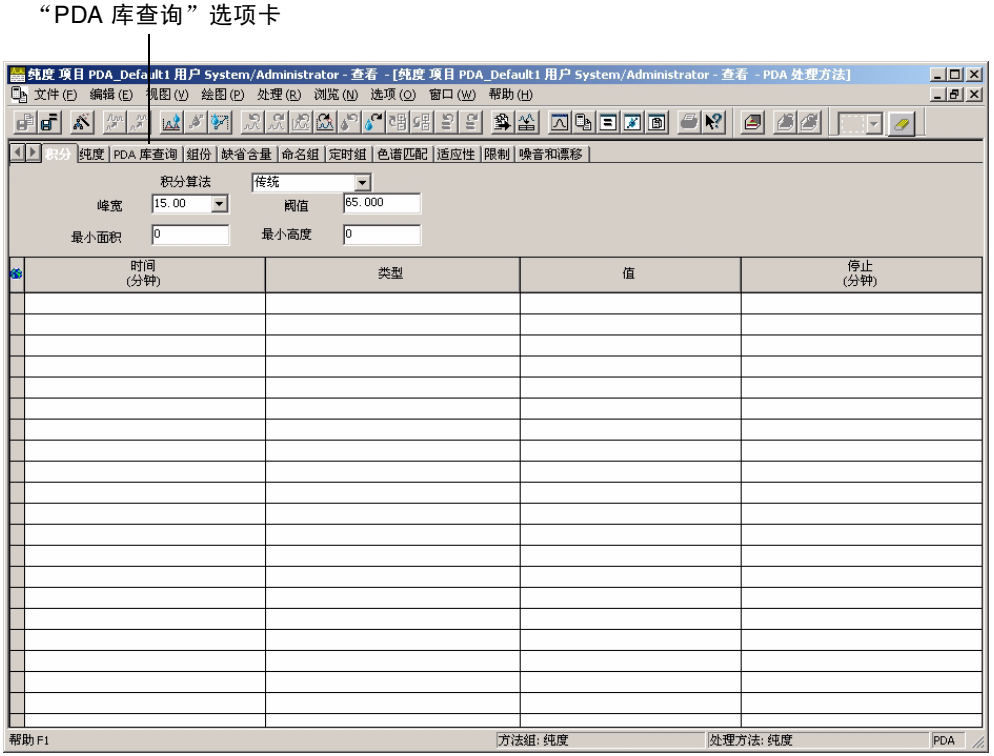


图 4-12 处理方法窗口

5. 单击 **PDA 库查询**选项卡。在“库”列表框中，选中要搜索的库的复选框，例如 **My Library**（图 4-13）。

   注：*有关设置溶剂角的信息，请参阅* Empower 帮助 *中的“溶剂角估计指南 (PDA)”主题。就本示范而言，将保留溶剂角的设置 1.0。通常，此值需要根据经验确定并相应进行设置。*

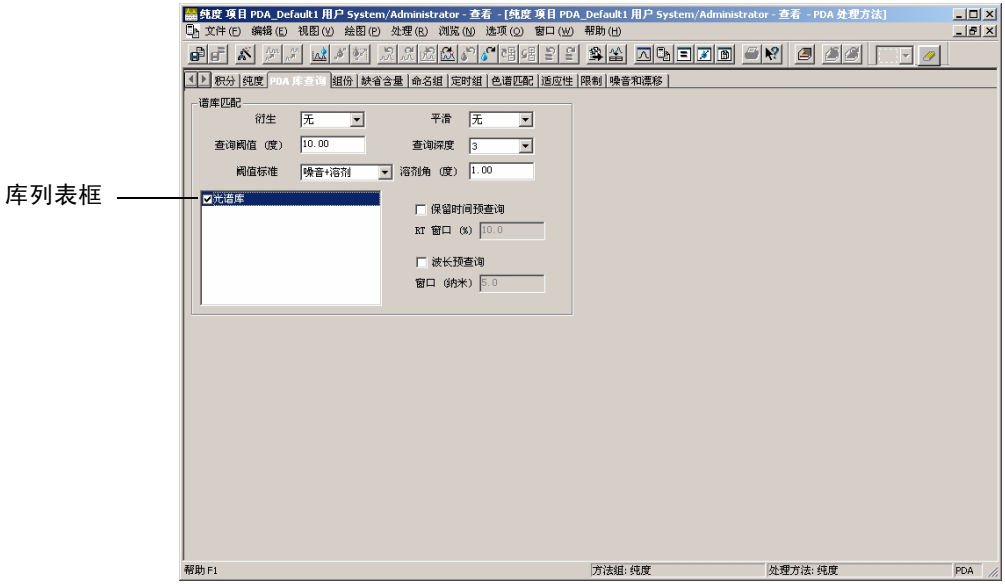


图 4-13 PDA 库查询选项卡

6. 单击 （“查看 - 主窗口”）或选择**窗口 > 主窗口**返回到“查看 - 主窗口”。
7. 要保存对现有处理方法的更改，请选择**文件 > 保存 > 处理方法**。

   要将修改后的方法保存为不同名称，请选择**文件 > 另存为 > 处理方法**。在“名称”字段中键入名称，例如**纯度和谱库匹配**，然后单击**保存**。
8. 要将修改后的方法组保存为不同的名称，请选择**文件 > 另存为 > 方法组**。在文本框中键入名称，例如**纯度和谱库匹配**，然后单击**保存**。

   注：*修改处理方法或方法组后，应单击 （“方法组”）或选择**窗口 > 方法组**，并验证所需处理方法是否在相应通道的“通道”表中指定。如果进行了任何修改，请保存方法组。*
9. 继续第 4.3.5 节 “执行谱库匹配”以完成谱库匹配的步骤。

4.3.2 为谱库匹配创建新处理方法

如果要只进行谱库匹配，而不进行峰纯度操作，可创建一个仅进行谱库匹配的新处理方法。建立 PDA 处理方法的最简单方法是使用 “处理方法向导”。

注：此过程假定 “使用 V3.0X 的峰宽和阈值确定方法” 系统策略已经启用 （缺省设置）。如果系统尚未启用此系统策略，“处理方法向导” 将会略有不同。

要为谱库匹配建立 PDA 处理方法：

1. 开始前，必须按第 2.5 节，提取色谱中所述衍生一个色谱。
2. 单击 （“处理方法向导”）或选择**文件 > 新建 > 处理方法**启动向导并打开 “处理方法向导” 对话框 （图 4-14）。

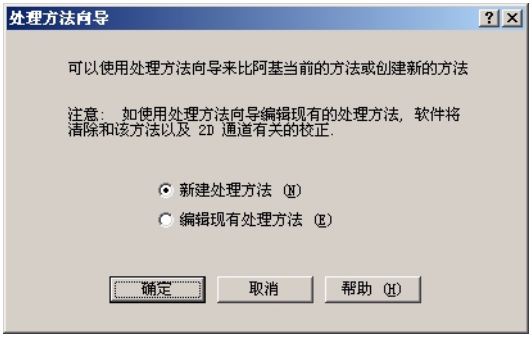


图 4-14 “处理方法向导” 对话框

3. 单击**新建处理方法**，然后单击**确定**打开 “新处理方法”对话框 （图 4-15）。

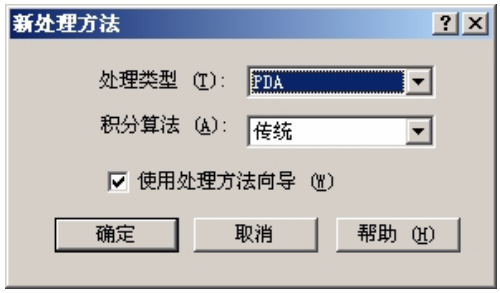


图 4-15 “新处理方法”对话框

4. 在 “处理类型”列表中，选择 **PDA**。如果显示 “积分算法”列表，请选择**传统**。确保已选中**使用处理方法向导**复选框，然后单击**确定**转至 “积分 - 峰检测 1”页面 （图 4-16）。

   注：*仅当在系统策略中启用 ApexTrack 积分，且在 PDA_Default 项目中启用了 ApexTrack 时，才会显示 “积分算法”列表。*

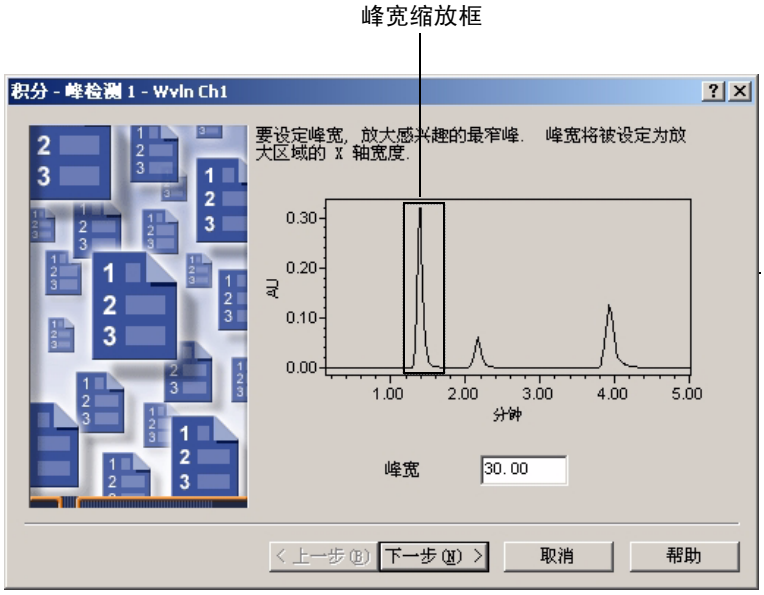


图 4-16 积分 - 峰检测 1 页面，全视图

利用此页面可设置处理方法中的峰宽参数。峰宽确定用作过滤器及生成用于进行峰检测的单个点而组合在一起的点的数量（尽管积分期间会使用所有数据点）。

5. 按向导的说明用鼠标绘制将所关注的最窄峰（1.39 分钟时的峰 1）的峰起点和峰落点围起的缩放框。软件将显示缩放后的选中部分并确定适当的峰宽（图 4-17）。

***注：**右键单击该图，访问“全视图 / 不缩放”快捷菜单选项。如果不能确定哪个峰最窄，可以通过重复缩放和不缩放每个峰对不同的峰进行检查。每次缩放时，软件会计算并显示相应的峰宽。适当缩放（可能需进行多次）使峰开始位于图中显示的 x 轴的开始处，峰结束位于图中显示的 x 轴的结束处。*

如果缩放正确，此数据中的峰具有几乎完全相同的宽度，且都产生 15 秒的“峰宽”设置。因此选择哪个峰没有关系，但有些数据确实包含各种宽度的峰。在此情况下，应使用合适的峰。

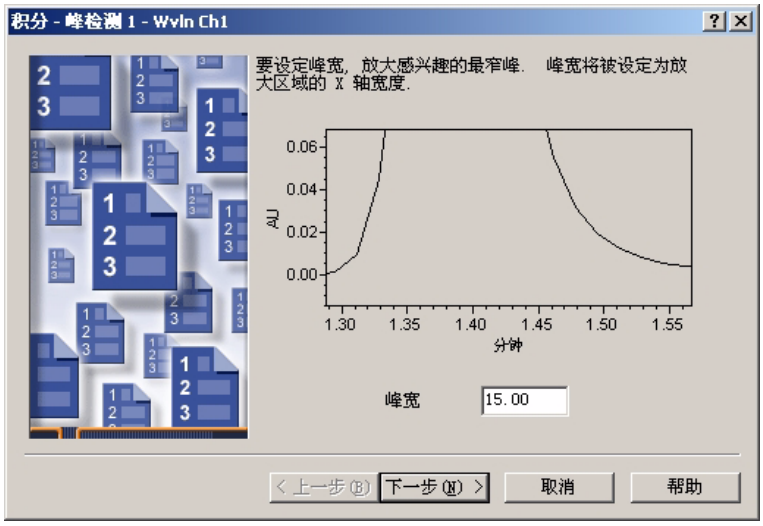


图 4-17 设置峰宽参数

6. 单击**下一步**转至 “积分 - 峰检测 2” 页面 （图 4-18）。

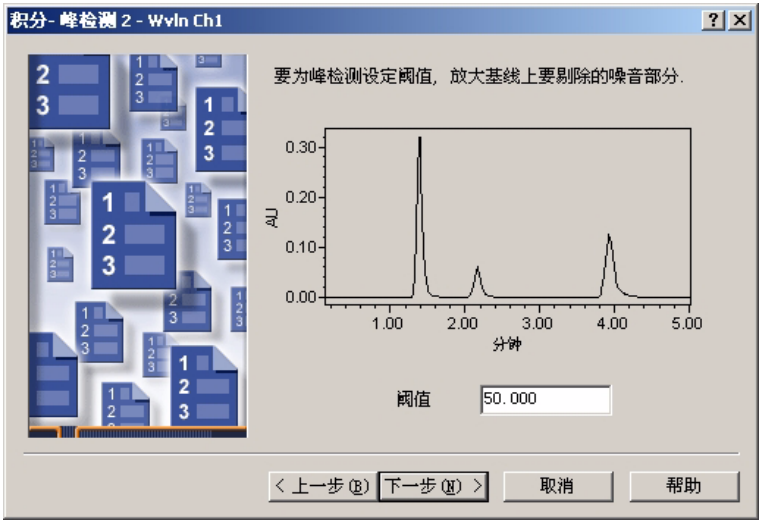


图 4-18 积分 - 峰检测 2 页面

利用此页可根据选定的基线区域在处理方法中设置阈值参数。阈值是一个斜率设置，它通过确定跨三个数据点的斜率是否超过确定的斜率阈值来定义峰起点和峰落点。它用于剔除基线噪音。

7. 按向导的说明用鼠标绘制缩放框，将包含最大量噪音和非感兴趣的峰的基线区域围起 （约 0.2 到 1.2 分钟）。软件会显示缩放后的选中部分并确定适当的阈值 （图 4-19）。

   注：*通常，需要几次缩放基线以确保所选区域中没有感兴趣的峰。*

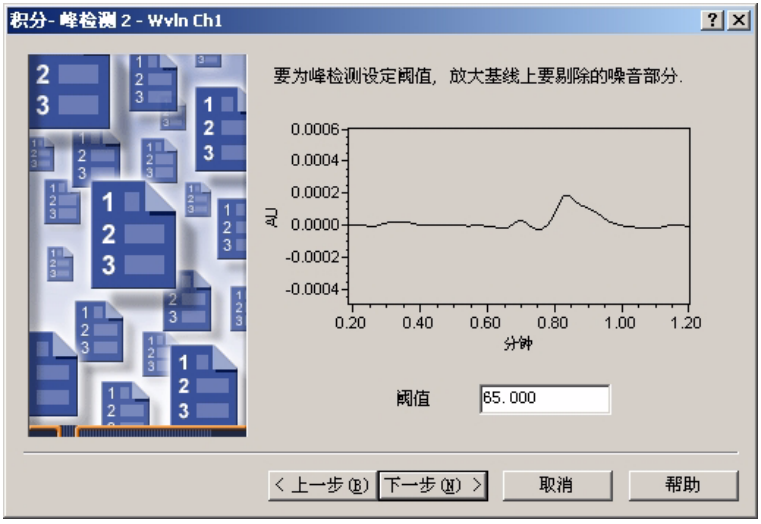


图 4-19 设置阈值参数

8. 单击**下一步**转至 “积分 - 积分区域”页面 （图 4-20）

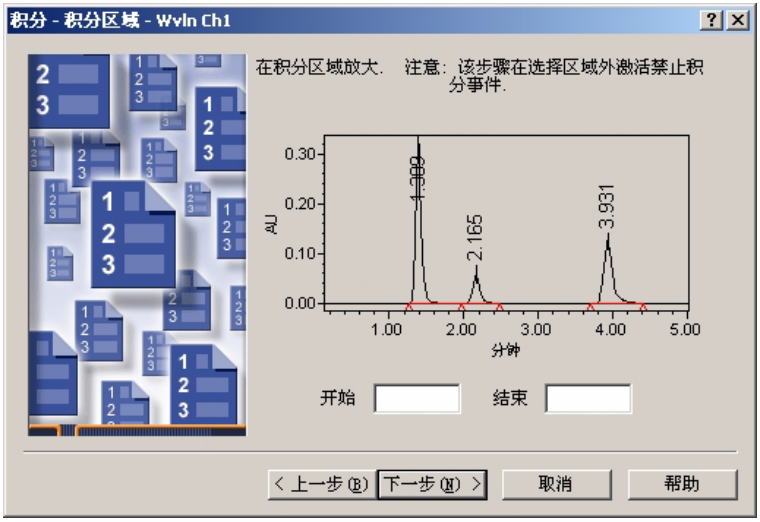


图 4-20 积分 - 积分区域页面

此页允许通过使用 “禁止积分”事件指定不发生积分的时间区域，以细化积分。

9. 如果想禁止积分，请按向导说明用鼠标绘制缩放框，将想发生积分的区域围起。缩放框*外部*区域中将禁止进行积分。软件会显示放大的选中部分。单击**下一步**转至 “积分 - 剔除峰”页面 （图 4-21）。

   对此特定数据而言，无需执行此步骤。如果不想禁止积分，请不要在此对话框中进行任何操作，单击**下一步**。

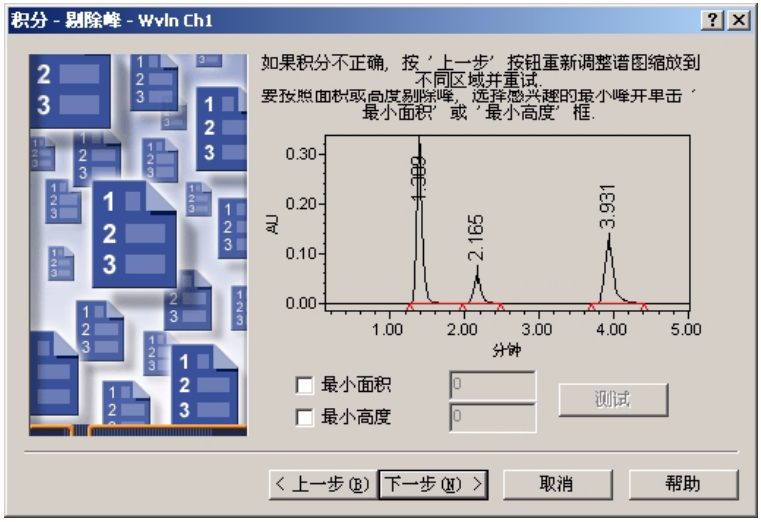


图 4-21 积分 - 剔除峰页面

使用此页剔除不感兴趣的小峰。对此特定数据而言，无需执行此步骤，因为没有已积分的不需要的基线噪音。单击**下一步**转至 “校正 - 常规” 页面。

***注：**要使用此设置，请选择最小的感兴趣的峰，以用红色将其突出显示。选择**最小面积**或**最小高度**复选框将最小面积或高度设置为选定峰面积或高度的 95%。*

有必要使用 “最小面积” 或 “最小高度” 参数时，通常使用一个或另一个，但不同时使用两个。有关详细信息，请参阅 Empower 帮助 *中的 “最小面积” 和 “最小高度” 主题。*

10. 接受缺省设置并单击**下一步**。出现一条信息，指示通道需要有通道名才能执行跨通道内标处理。在此对话框中单击**否**。出现 “名称和保留时间” 页面（图 4-22）。

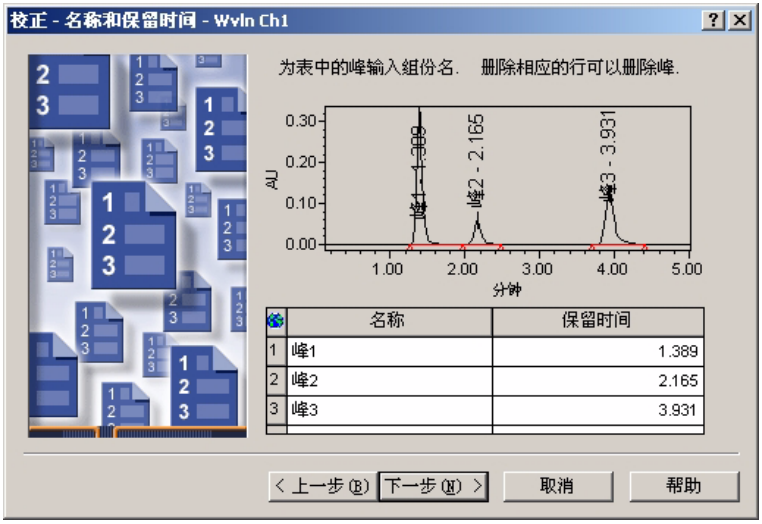


图 4-22 名称和保留时间页面

11. 单击首行中“名称”列左侧的 **1**。按住 **Shift** 键，单击第三行中“名称”列左侧的 **3**。此时所有行都被突出显示。按键盘上的 **Delete** 键从此表中移除全部输入值。单击此页及后续页中的**下一步**，直至出现“PDA 纯化 / 匹配”页为止（图 4-23）。

注：*仅当想处理标准样、生成校正曲线及定量未知样时，才有必要输入组份名称和含量。由于本指南只侧重生成纯度和谱库匹配数据，因此不必输入此信息。有关校正和定量的信息，请参阅* Empower 软件入门指南 *或* Empower 帮助。

图 4-23 PDA 纯化 / 匹配页面

12. 对于问题 “要对所有峰进行峰纯度测试吗？”，请单击**否**。对于问题 “要根据 PDA 库光谱来匹配光谱吗？”，请单击**是**。单击**下一步**转至 “PDA 光谱对照”页面 （图 4-24）。

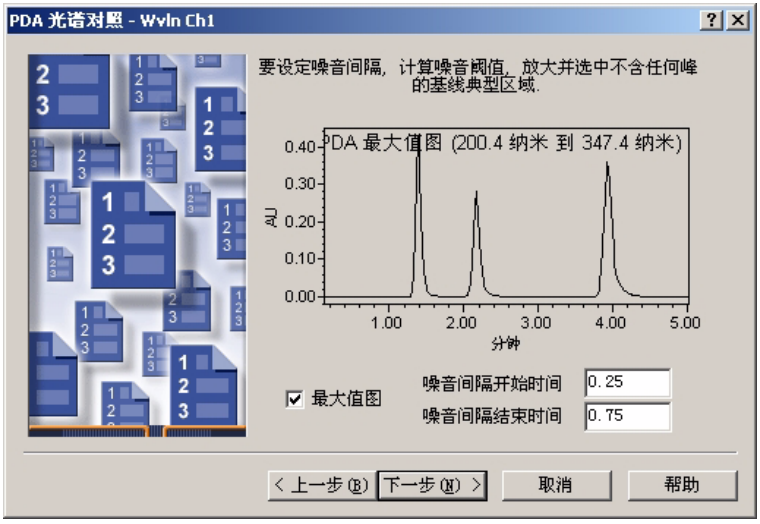


图 4-24 PDA 光谱对照页面

使用此页，可通过选择不含峰的基线片段来设置噪音间隔。您必须选择一个时间长度至少为一分半钟的基线片段。

注：*缺省情况下，“最大值图”复选框处于选中状态，无论启动“处理方法向导”前所提取的色谱属于哪种类型，都可使“最大值图”色谱显示在“PDA 光谱对照”页面中。设置噪音间隔时，建议使用“最大值图”色谱，以确保此参数设置在不会发生与化合物相关的光谱吸光度的基线区域。*

选中“最大值图”复选框后，软件会显示从中采集数据的整个波长范围的“最大值图”色谱。如果不使用采集的全部波长范围来查看“最大值图”色谱，则必须创建“开始波长”和“结束波长”适当的“最大值图”色谱，方法为在方法组中创建衍生通道，然后在启动“处理方法向导”之前应用该方法组。“开始波长限制”和“结束波长限制”在处理方法的“纯度”选项卡中设置。（这些设置在使用“处理方法向导”时不可用。必须通过单击 *（“处理方法”）或通过选择* ***窗口 > 处理方法*** *查看处理方法。）*

通常需将波长开始范围定义在 190 纳米以上，以消除流动相吸光度的影响。

13. 选择约为 3.00 到 3.50 分钟的基线段 （图 4-25）。

    通过使用鼠标放大所需区域，可选择基线区域，或者也可通过在 “噪音间隔开始时间” 和 “噪音间隔结束时间” 文本框中，分别键入所需区域的开始和结束时间，来指定基线区域。

    缩放时，可右键单击并选择**全视图**或**不缩放**，在缩放级别间切换。在决定噪音间隔的正确区域前，请执行此操作来查看多个基线区域。

    有关选择噪音间隔的详细信息，请参阅 *Empower 帮助* 中的 “确定噪音间隔” 主题。

    缺省情况下， Empower PDA 软件将 “阈值判据” 设置成 “噪音” 加上 “溶剂”，同时将 “溶剂角” 设置为一度。有关详细信息，请参阅 *Empower 帮助* 中的 “光谱对照的阈值判据注意事项 (PDA)” 主题。

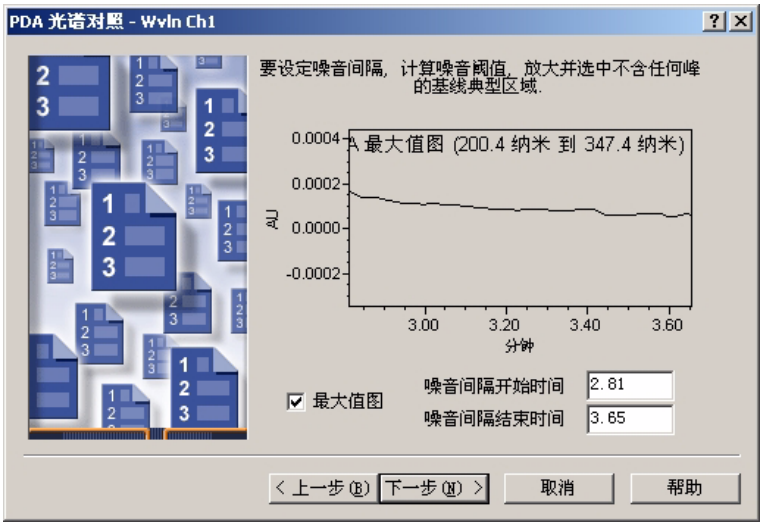


图 4-25 设置噪音间隔

14. 单击**下一步**转至 “PDA 匹配库” 页面 （图 4-26）。

图 4-26 PDA 匹配库页

15. 选中要根据其进行匹配的库的复选框，例如 **My Library**，然后单击**下一步**转至 “处理方法名”页 （图 4-27）。

图 4-27 处理方法名页

16. 在“方法名”字段中，输入处理方法名，例如**仅限谱库匹配**，然后单击**完成**。处理方法被保存，并出现“查看 - 主窗口”，显示已处理的“最大值图”色谱。处理方法的名称在状态条的右侧显示。

使用 PDA 处理方法时，必须保存处理方法和方法组。然后就可对后续数据应用保存的方法组，以确定谱库匹配。

保存方法组

1. 选择**文件 > 另存为 > 方法组**打开“保存当前的方法组”对话框。
2. 在“名称”字段中，输入名称，例如**仅限谱库匹配**，然后单击**保存**。此时处理方法被保存，并出现“查看 - 主窗口”，显示已处理的色谱（图 4-28）。处理方法的名称在状态条的右侧显示。

注：*本程序假定“自动应用方法组”和“新方法组”：在“查看”中启用了“启动‘查看’时创建新方法组”选项。要验证或更改这些设置，请选择**选项 > 方法组选项**。如果未启用“自动应用方法组”选项，则色谱不会被自动处理。要处理色谱，请单击* *（“应用方法组”）或单击**处理 > 应用方法组**。*

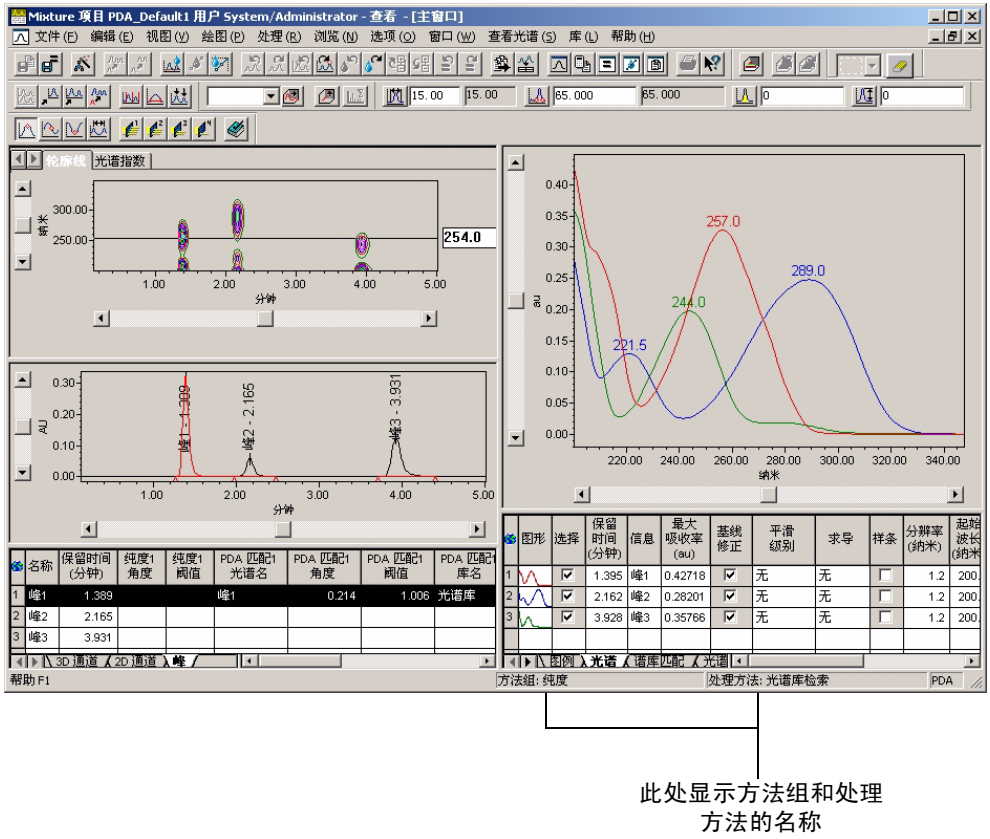


图 4-28 有谱库匹配结果的处理过的色谱

4.3.3 执行谱库匹配

创建或修改处理方法后，即可执行谱库匹配。应用适当的方法组计算每个峰的谱库“匹配角”和“阈值角”。

1. 如果未显示“查看 - 主窗口”，请单击 （“查看 - 主窗口”）或选择**窗口 > 主窗口**（图 4-29）。
2. 单击 （“应用方法组”）或选择**处理 > 应用方法组**。

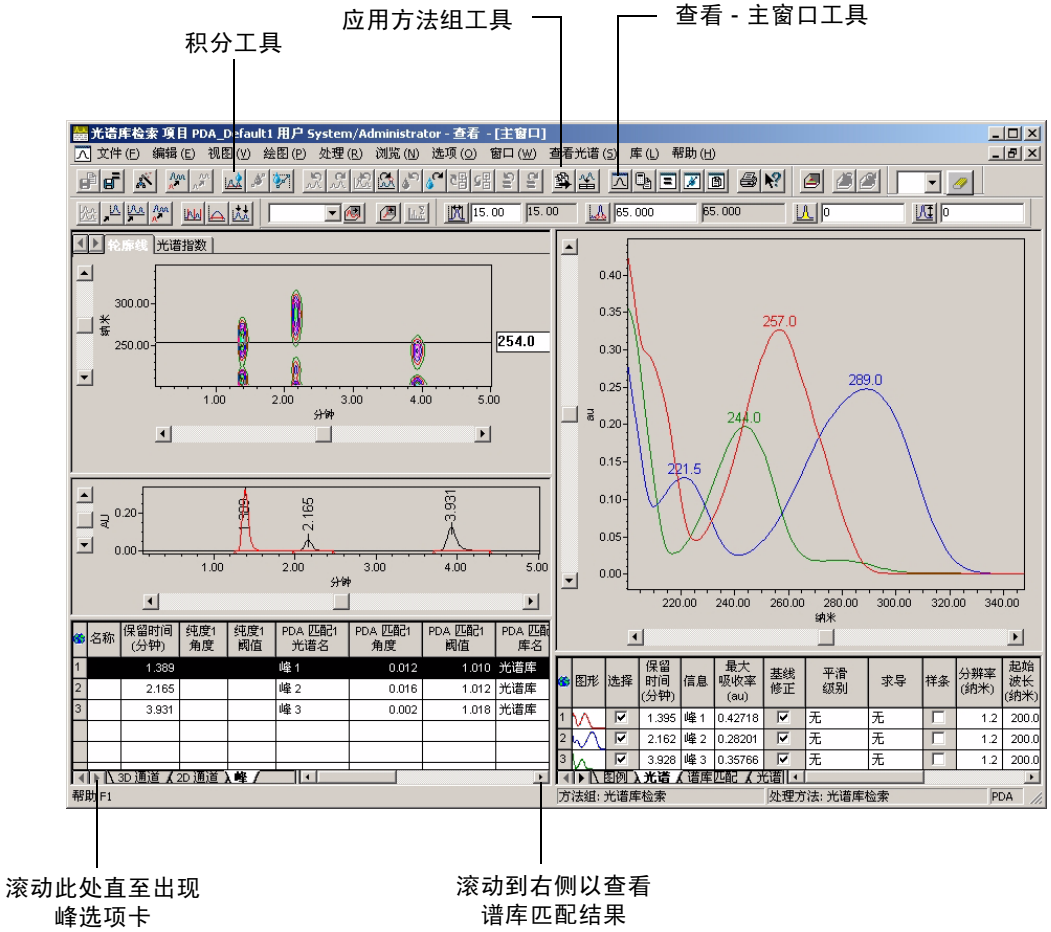


图 4-29 有谱库匹配结果的积分后的色谱

3. 使用 “峰”表底部的箭头滚动，直至出现 “峰”选项卡 （图 4-29）。单击**峰**选项卡。“峰”表显示谱库匹配的结果。

4. 必要时，滚动到 “峰”表 （图 4-29）的右侧，查看列出匹配结果的表部分。

   小于 “匹配阈值”的 “匹配角”表示匹配度高。大于 “匹配阈值”的 “匹配角”表示匹配度低。“匹配 1”是最接近 （最佳）的库光谱匹配； “匹配 2”是第二最接近的库光谱匹配； “匹配 3”是第三最接近的库光谱匹配。有关详细信息，请参阅 *Empower 帮助*中的 “解释 PDA 谱库匹配结果”主题。

4.4 查看谱库匹配结果

确定谱库匹配后，即可以不同方式查看结果。例如，可分别使用 “光谱指数”和 “结果”窗口检查顶点光谱和 “三重”图。

要查看谱库匹配结果：

1. 单击**光谱指数**选项卡以在 “查看 - 主窗口”中查看 “光谱指数”（图 4-30）。

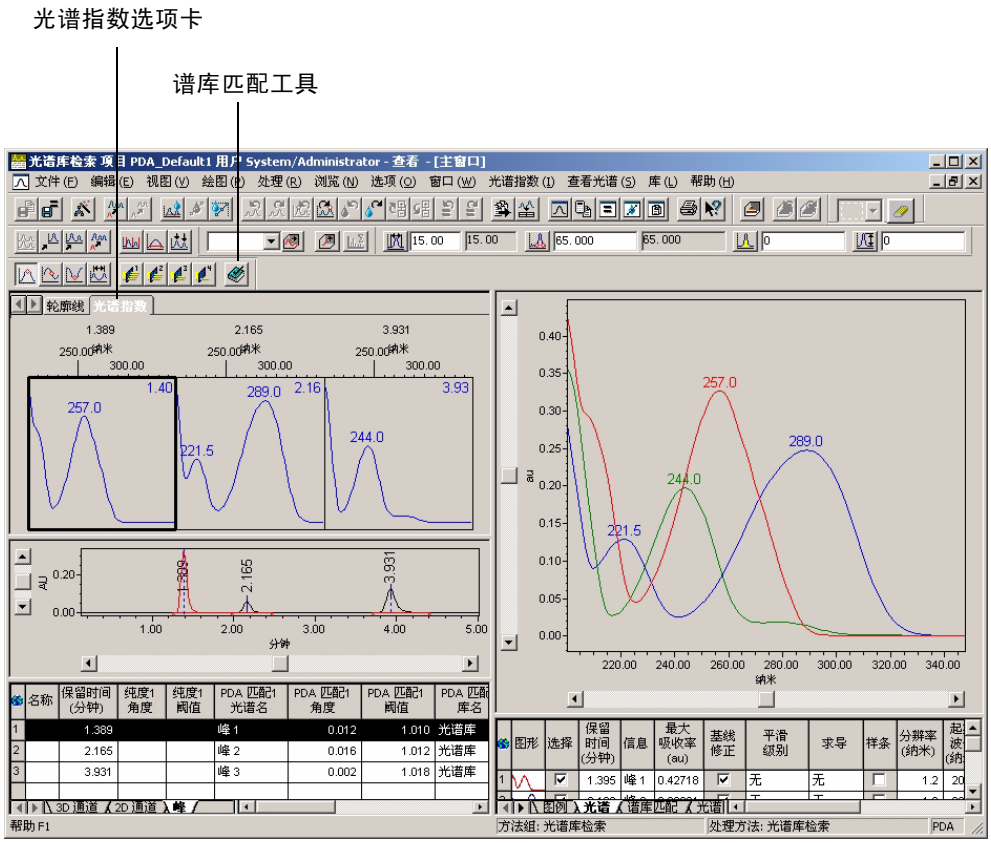


图 4-30 有谱库匹配的光谱指数

2. 单击 （“谱库匹配”）用“光谱指数”图中的峰光谱重叠谱库匹配光谱（图 4-31）。

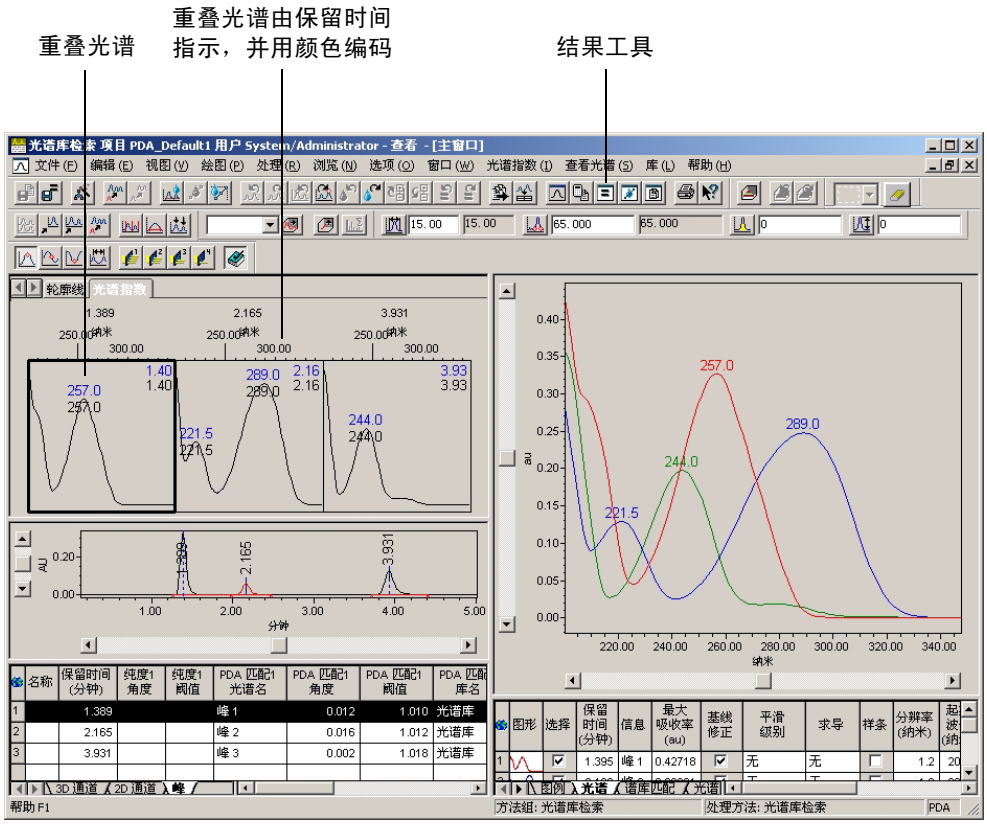


图 4-31 重叠的谱库匹配光谱

缺省情况下，黑色的光谱是库光谱，蓝色的光谱是峰顶点光谱。如果这些类型的光谱重叠得非常好，则定性表示匹配度高。

***注：** 您的软件中显示的颜色可能与此处所述不同。*

3. 要查看谱库匹配结果的另一视图，请单击 （“结果”）或选择**窗口 > 结果**打开 “结果”窗口，其中包含 “谱库匹配”表和 “匹配图”（图 4-32） 。必要时，最大化 “结果”窗口，或拖动分隔条调整不同窗格的大小。

4. 在“结果”窗口中，单击**匹配图**选项卡（图 4-32）。“谱库匹配”图显示与库光谱的任何可能匹配相重叠的峰光谱。库光谱的名称显示在图的右上侧。在此窗口上部窗格的“峰”选项卡中选择特定的峰时，“匹配”图显示该选定峰相应的匹配数据。可为每个顶点光谱最多显示三个匹配。

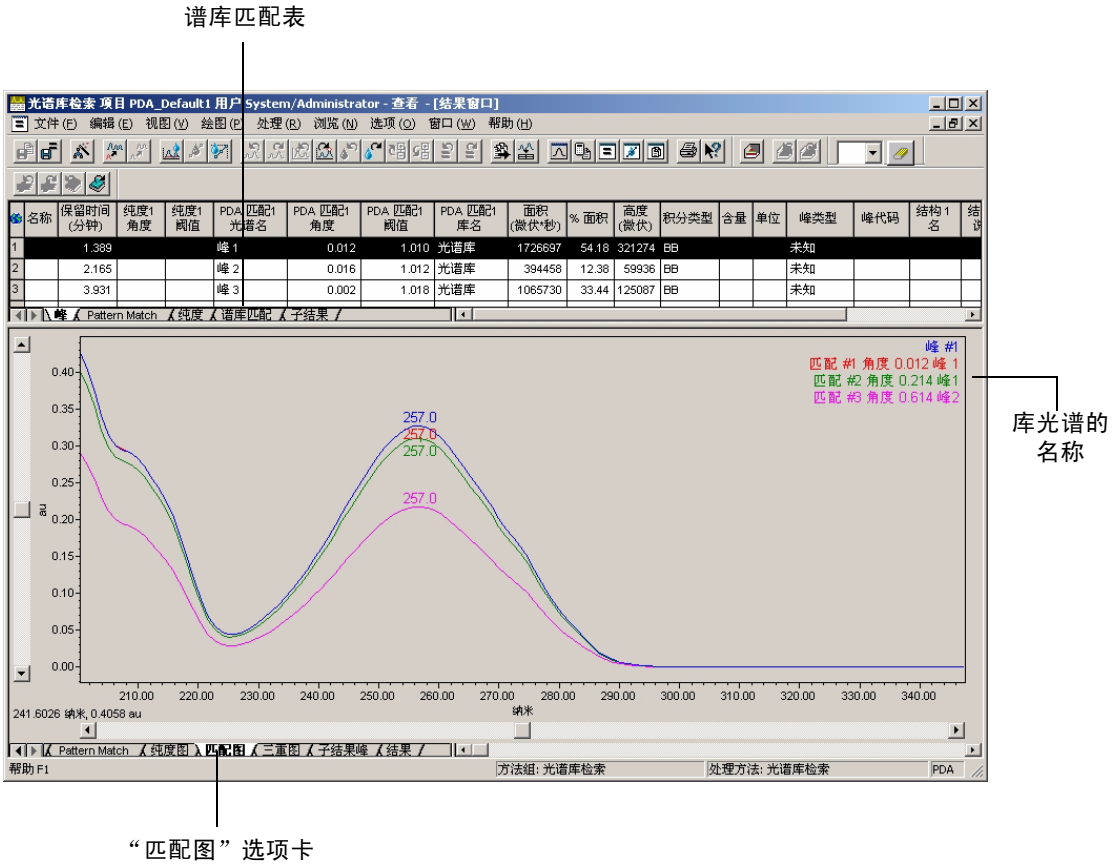


图 4-32 显示谱库匹配图的结果窗口

5. 单击上部表中的**谱库匹配**选项卡（图 4-33）。“谱库匹配”选项卡以数字格式显示每个峰的匹配信息。使用 “峰”下拉列表选择每个峰。可为每个顶点光谱最多显示三个匹配。

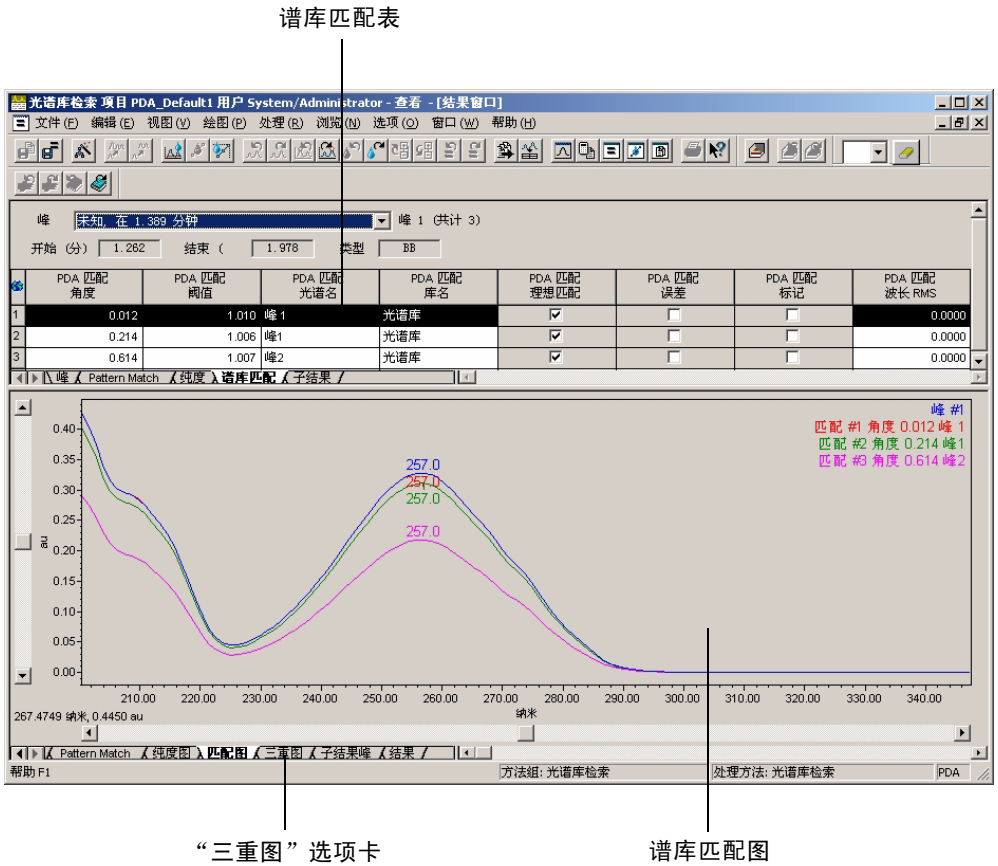


图 4-33 谱库匹配图和谱库匹配选项卡

***注：**可归一化光谱以目视检查匹配。右键单击“谱库匹配”图，然后选择**属性**打开“图属性”对话框。单击**缩放**选项卡，然后选择**归一化 Y**，然后单击**确定**。*

6. 在下窗格中，单击**三重图**选项卡（图 4-34）。“三重”图显示峰光谱、库光谱以及差异光谱，后者显示峰光谱与库光谱之间的差异。可再次使用 “谱库匹配”选项卡中的 “峰”下拉列表或通过选择 “峰”选项卡中相应的行在各峰间浏览。

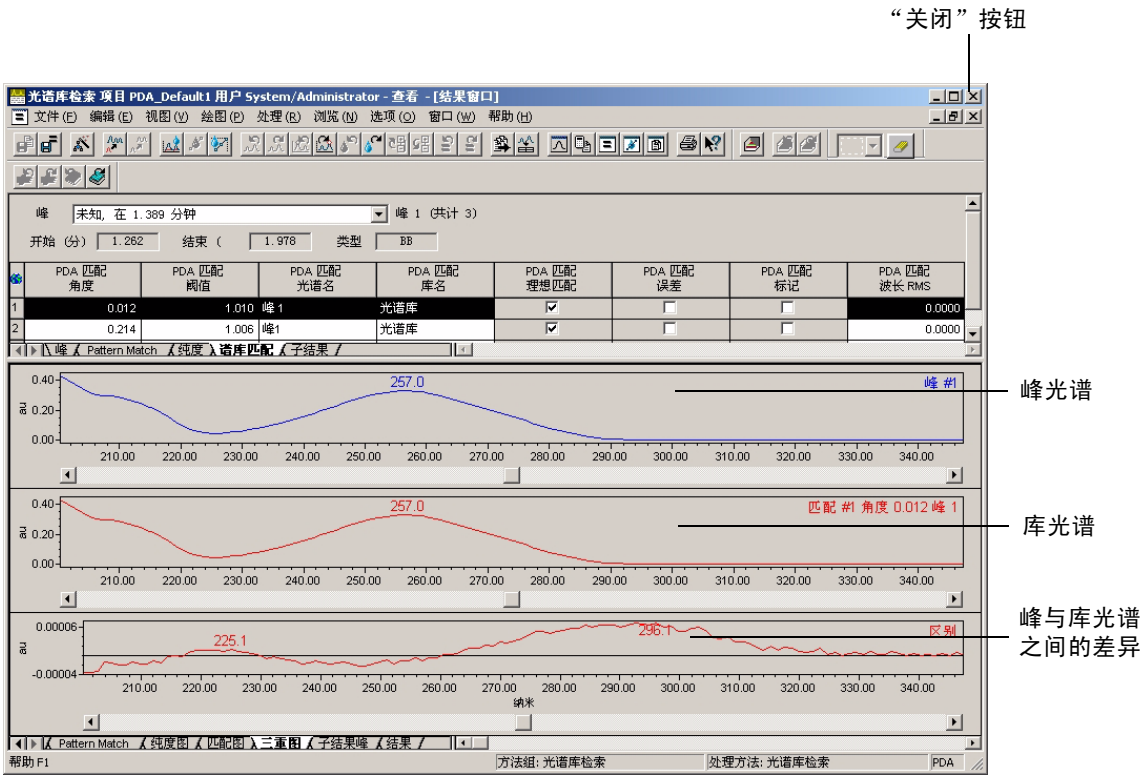


图 4-34 三重图：谱库匹配

7. 保存结果以便可将其打印到报告中。要保存结果，请选择**文件 > 保存 > 结果**。如果**保存 > 结果**不可用，请先选择**保存 > 处理方法**。
8. 单击 ☒（关闭）或选择**文件 > 退出**退出 “查看”。

下一步

现在可继续阅读第 5 章 “打印报告”，打印出结果。

4

第 5 章
打印报告

要打印 PDA 数据报告 （使用 Empower 软件），可：

- 在打印前预览报告。
- 在后台打印。

5.1 预览报告

要在打印前预览报告：

1. 转至在第 2 章，查看 PDA 数据中打开的 “项目”窗口 （图 5-1）。如果 “项目”窗口已在 Windows 工具条中最小化，请将其最大化。

图 5-1 项目窗口

2. 单击**结果**选项卡 （图 5-1），在 “项目” 窗口中查看 “结果” 视图。
3. 选择要打印的数据，然后单击 （预览）或选择**工具 > 预览 / 出版**，打开 “打开报告方法” 对话框 （图 5-2）。

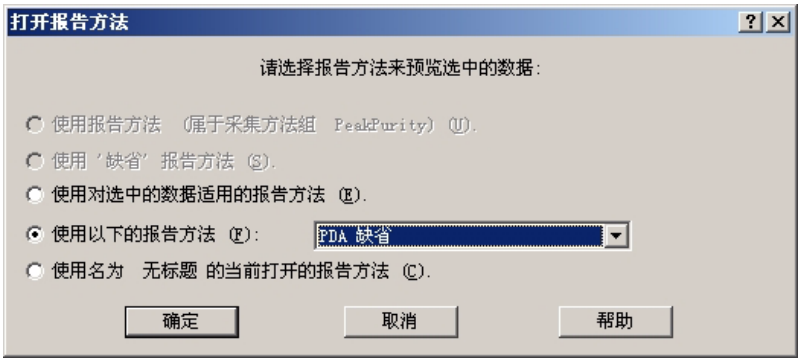


图 5-2 打开报告方法对话框

4. 单击**使用以下报告方法**选项按钮，然后从列表中选择 **PDA 缺省**并单击**确定**，以预览报告 （图 5-3）。

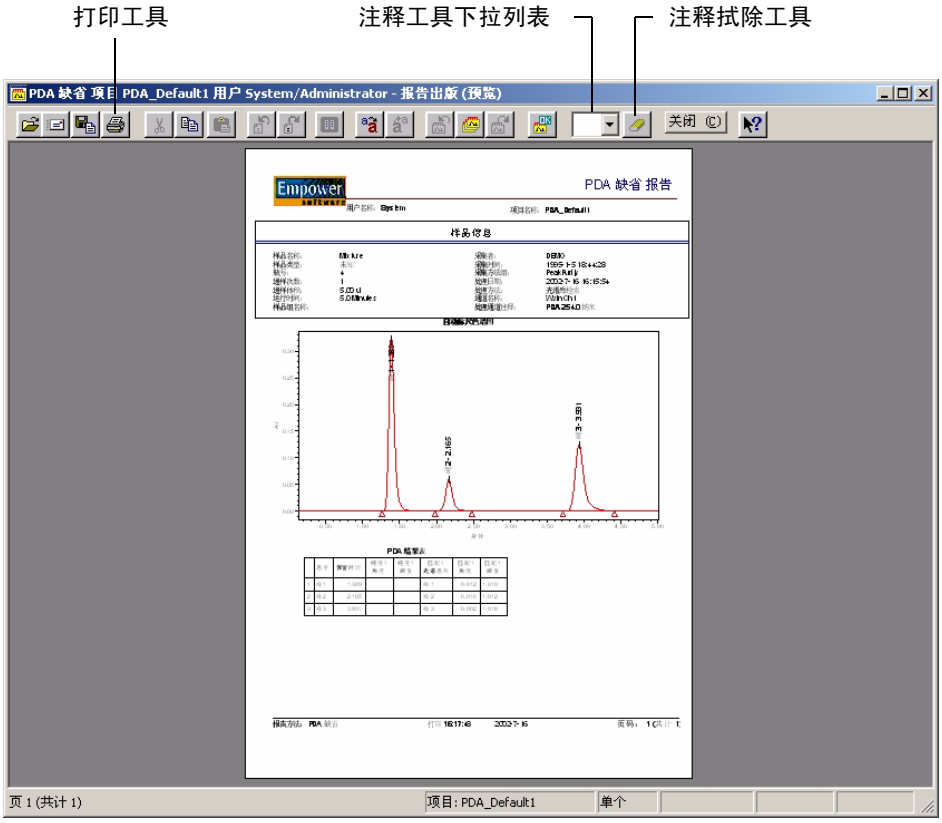


图 5-3 预览示例报告

5. 在 “预览”中可进行以下操作：

   - 添加注释。有关使用 “注释”工具的详细信息，请参阅第 2.7 节，标注色谱和光谱。在 “预览”中添加注释后，保存报告并随后打印时，它们将出现在报告上，当然，注释不会成为报告方法的一部分，并且不会与方法一起保存。

   注：*要修改方法以使所有使用该方法的报告都包含注释，请使用 “报告出版”的报告组树中的绘制对象。有关这些工具的详细信息，请参阅* Empower 帮助。

   - 报告形式与所期望的一致时，请单击 （打印）（图 5-3）。出现 “打印”对话框。确保选定了正确的设置，然后单击**确定**。打印出的报告与图 5-6 相似。

- 如果要更改报告的外观，可用“报告出版”对其进行修改。有关详细信息，请参阅 *Empower 帮助*中的 “报告出版”主题。
- 要退出而不打印，请单击 （关闭），或选择**文件 > 退出**。

5.2 后台打印

要在后台打印：

1. 转至在第 2 章，查看 PDA 数据中打开的 “项目”窗口 （图 5-4）。如果 “项目”窗口已在 Windows 工具条中最小化，请将其最大化。

图 5-4 项目窗口

2. 单击**结果**选项卡。“结果”视图出现在 “项目”窗口中。
3. 选择要打印的数据，然后单击 “项目”窗口中的 （打印）（图 5-4）。出现 “后台处理及生成报告”对话框 （图 5-5）。

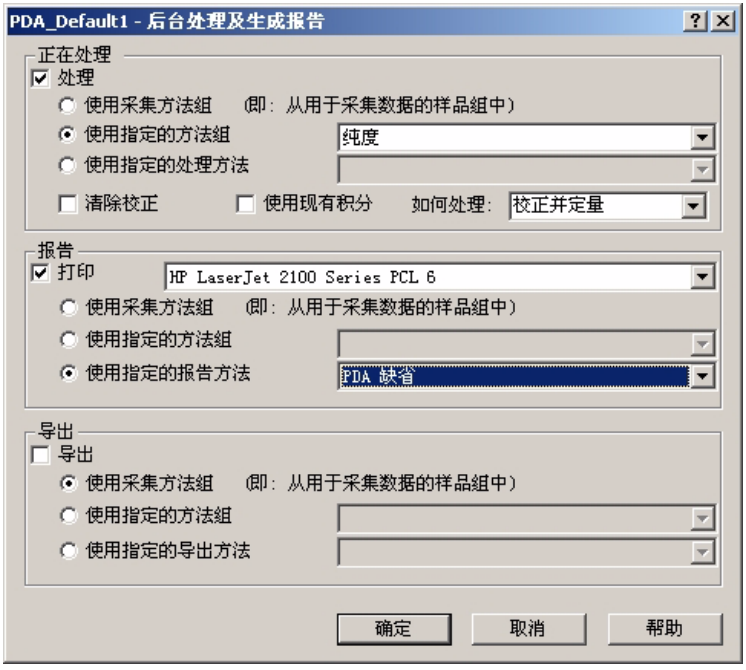
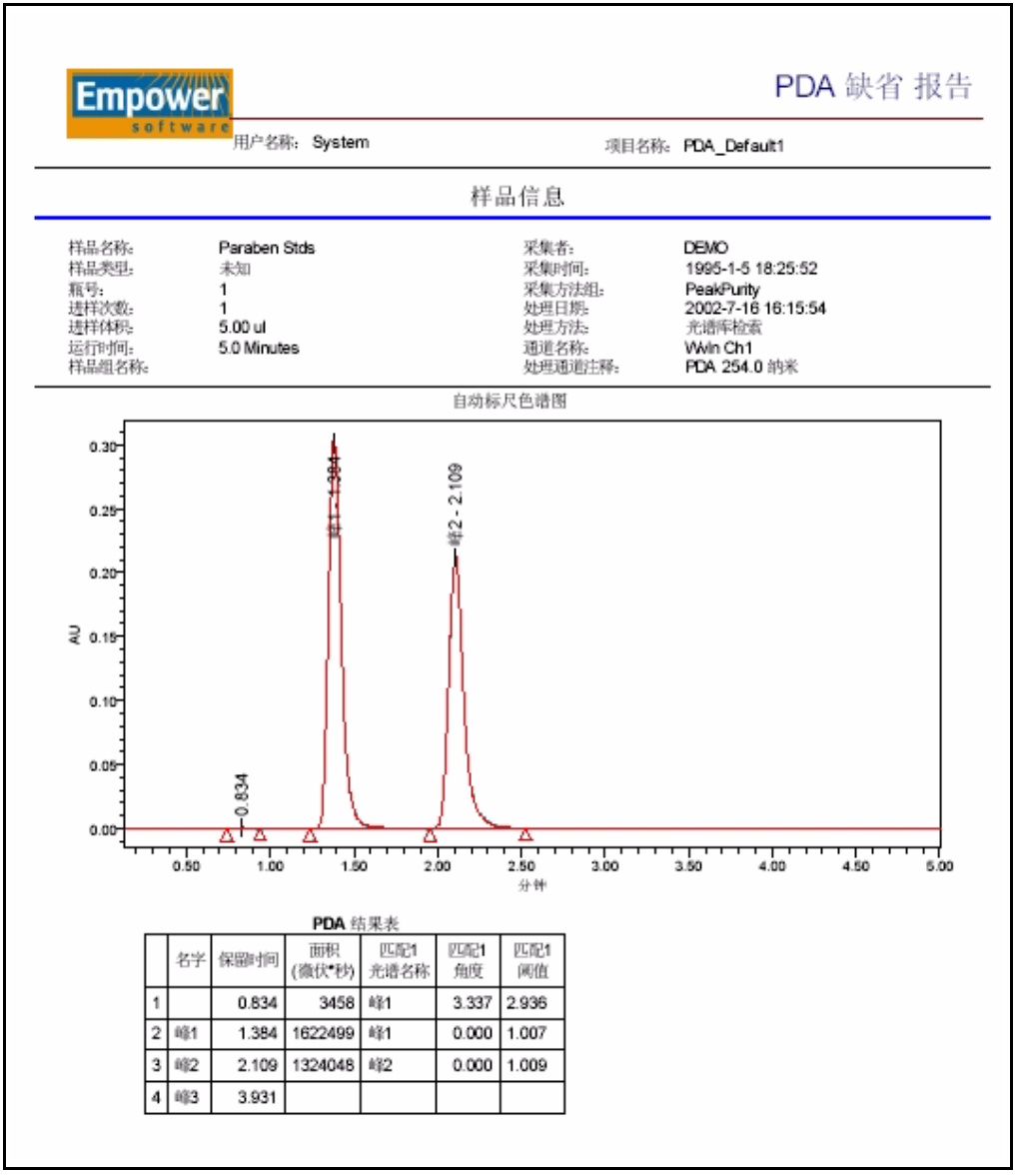


图 5-5 后台处理及生成报告对话框

4. 在“报告”部分，确保选中**打印**和**使用指定的报告方法**。
5. 从“使用指定的报告方法”选项按钮旁的下拉列表中，选择 **PDA 缺省**，然后单击**确定**。打印出的报告与图 5-6 相似。



PDA 缺省 报告

用户名称: System

项目名称: PDA_Default1

样品信息

样品名称:	Paraben Stds	采集者:	DEMO
样品类型:	未知	采集时间:	1995-1-5 18:25:52
瓶号:	1	采集方法组:	PeakPurity
进样次数:	1	处理日期:	2002-7-16 16:15:54
进样体积:	5.00 ul	处理方法:	光谱库检索
运行时间:	5.0 Minutes	通道名称:	Wvln Ch1
样品组名称:		处理通道注释:	PDA 254.0 纳米

自动标尺色谱图

PDA 结果表

	名字	保留时间	面积 (微伏*秒)	匹配1 光谱名称	匹配1 角度	匹配1 阈值
1		0.834	3458	峰1	3.337	2.936
2	峰1	1.384	1622499	峰1	0.000	1.007
3	峰2	2.109	1324048	峰2	0.000	1.009
4	峰3	3.931				

图 5-6 样品报告

附录 A
缺省 PDA 报告

在“PDA 缺省”项目中有九个可用的缺省报告。这些报告可以直接使用，也可在此基础上创建自定义报告。可从“PDA 缺省”项目中复制这些报告并粘贴到其它项目中。也可将这些报告从一个项目中拖放到另一个项目中，对它们进行移动。

本附录提供了样品报告的示例。下列报告位于 “PDA 缺省”项目中：

- 1 号通道峰纯度报告
- 254 纳米提取示例报告
- 3D 图报告
- 4 号通道峰纯度报告
- LC 缺省单个报告
- PDA 缺省报告
- PDA 纯度库匹配报告
- PDA 纯度图报告
- PDA 光谱指数图报告

A.1 1 号通道峰纯度报告

Empower software

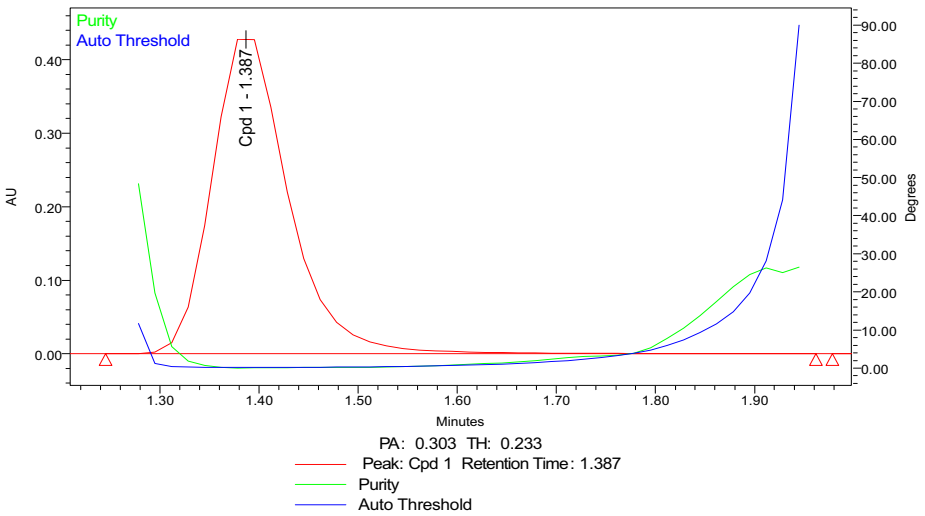
1Pass Peak Purity

Reported by User: System Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:06:11 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	Maxplot 200 350nm
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (200.0 nm to 350.0 nm)

Purity Plot



PA: 0.303 TH: 0.233

Peak: Cpd 1 Retention Time: 1.387

Purity

Auto Threshold

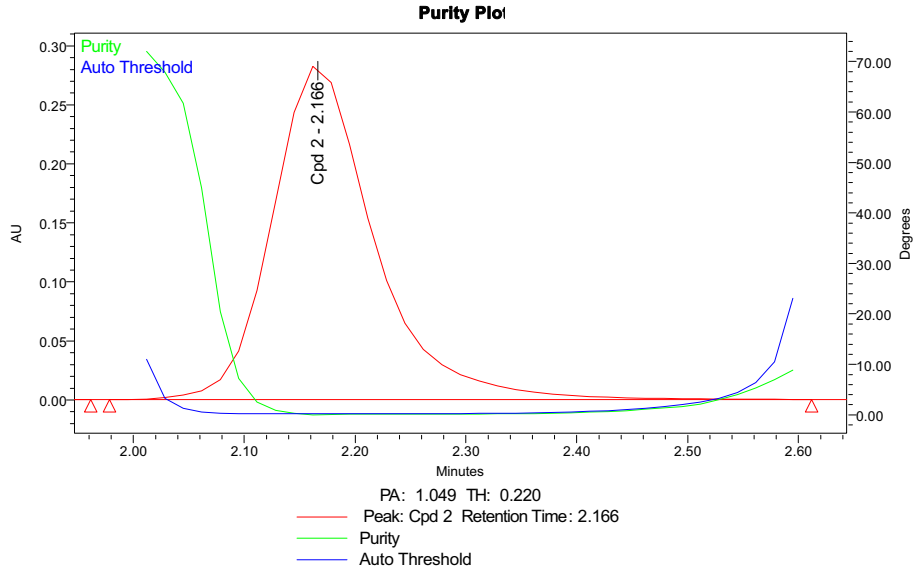
Report Method: 1Pass Peak Purity Printed 10:34:38 PM 4/24/2002 Page: 1 of 3

Empower software

1Pass Peak Purity

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default



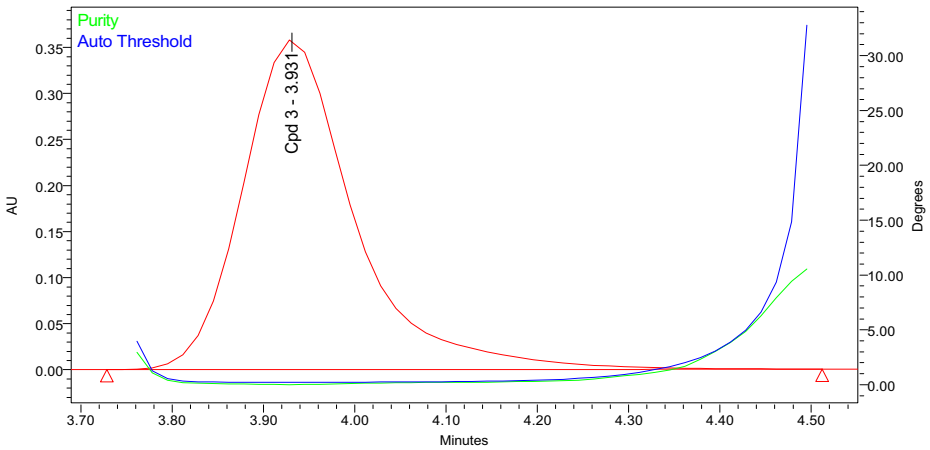
Empower software

1Pass Peak Purity

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

Purity Plot



PA: 0.066 TH: 0.230

Peak: Cpd 3 Retention Time: 3.931

Purity

Auto Threshold

PDA Result Table

	Name	RT	Purity (#1) Angle	Purity (#1) Threshold
1	Cpd 1	1.387	0.303	0.233
2	Cpd 2	2.166	1.049	0.220
3	Cpd 3	3.931	0.066	0.230

A.2 254 纳米提取示例报告

Empower software

254 nm Extraction Example

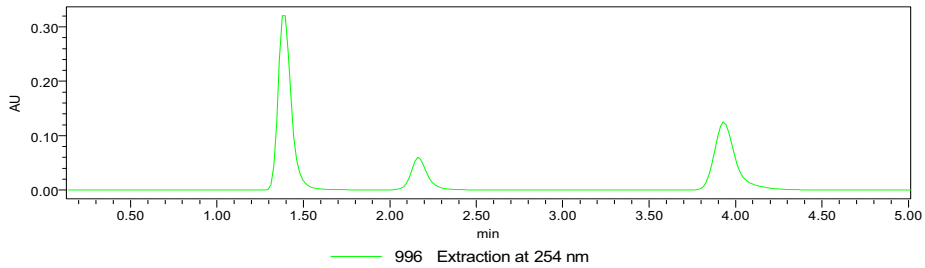
Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:06:11 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	Maxplot 200_350nm
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (200.0 nm to 350.0 nm)

254 nm Chromatogram



Example Extraction Table
Time: 4.000 min
Channel: 996

	Wavelength (nm)	Absorbance (au)		Wavelength (nm)	Absorbance (au)		Wavelength (nm)	Absorbance (au)
1	220.37	0.01562	15	236.87	0.07518	29	253.41	0.06030
2	221.55	0.01787	16	238.05	0.07940	30	254.60	0.05359
3	222.72	0.02056	17	239.23	0.08295	31	255.78	0.04675
4	223.90	0.02371	18	240.41	0.08582	32	256.96	0.04002
5	225.08	0.02739	19	241.59	0.08802	33	258.15	0.03372
6	226.26	0.03135	20	242.78	0.08946	34	259.33	0.02809
7	227.44	0.03558	21	243.96	0.08996	35	260.51	0.02323
8	228.62	0.04013	22	245.14	0.08941	36	261.70	0.01919
9	229.80	0.04506	23	246.32	0.08782	37	262.88	0.01592
10	230.97	0.05023	24	247.50	0.08525	38	264.07	0.01338
11	232.15	0.05539	25	248.68	0.08181	39	265.25	0.01147
12	233.33	0.06044	26	249.87	0.07751	40	266.44	0.01012
13	234.51	0.06545	27	251.05	0.07242	41	267.62	0.00921
14	235.69	0.07043	28	252.23	0.06662	42	268.81	0.00863

Report Method: 254 nm Extraction Example Printed 10:35:47 PM 4/24/2002 Page: 1 of 2

Empower software

254 nm Extraction Example

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

Example Extraction Table
Time: 4.000 min
Channel: 996

	Wavelength (nm)	Absorbance (au)
43	269.99	0.00828
44	271.18	0.00810
45	272.36	0.00802
46	273.55	0.00804
47	274.74	0.00809
48	275.92	0.00815
49	277.11	0.00822
50	278.30	0.00827
51	279.48	0.00827
52	280.67	0.00821
53	281.86	0.00808
54	283.05	0.00785
55	284.23	0.00758
56	285.42	0.00730
57	286.61	0.00695
58	287.80	0.00661
59	288.99	0.00622
60	290.17	0.00576
61	291.36	0.00526
62	292.55	0.00471
63	293.74	0.00414
64	294.93	0.00355
65	296.12	0.00302
66	297.31	0.00255
67	298.50	0.00211
68	299.69	0.00180

A.3 3D 图报告

Empower software

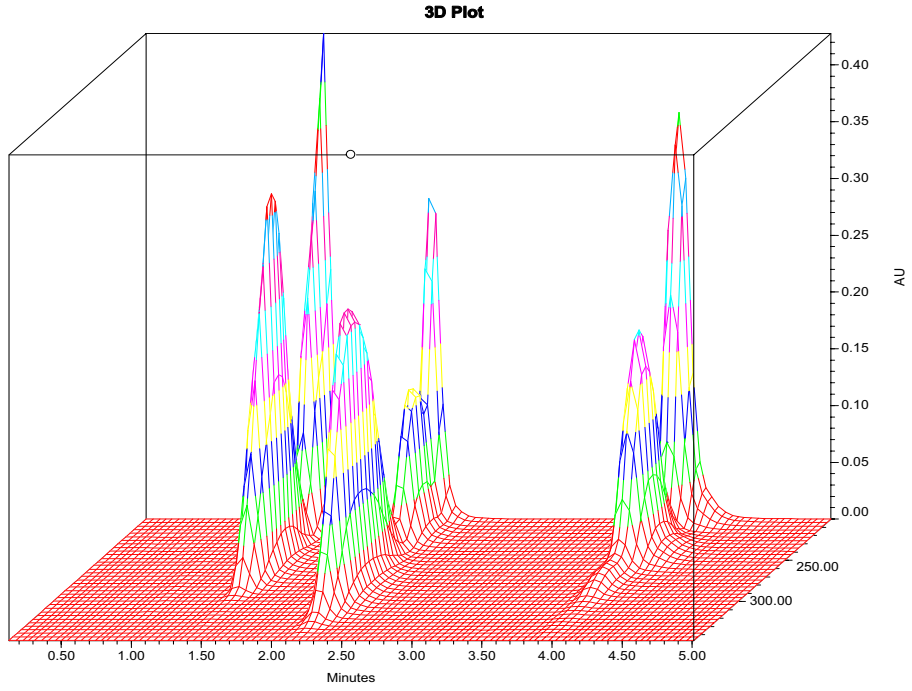
3D Plot

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:06:11 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	Maxplot 200_350nm
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (200.0 nm to 350.0 nm)



Report Method: 3D Plot Printed 10:36:51 PM 4/24/2002 Page: 1 of 1

A.4 4 号通道峰纯度报告

Empower software

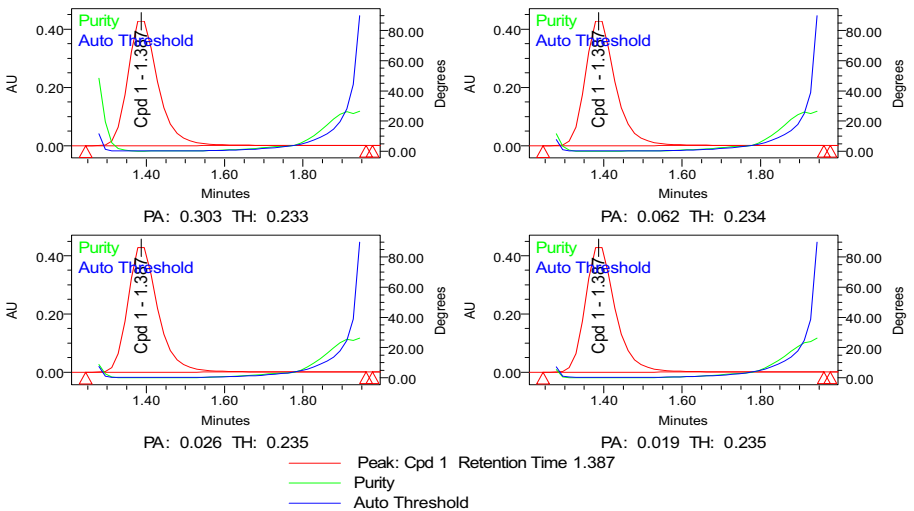
4 Pass Peak Purity

Reported by User: System　　Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

Purity Plot



PA: 0.303 TH: 0.233　　PA: 0.062 TH: 0.234

PA: 0.026 TH: 0.235　　PA: 0.019 TH: 0.235

Peak: Cpd 1 Retention Time 1.387
Purity
Auto Threshold

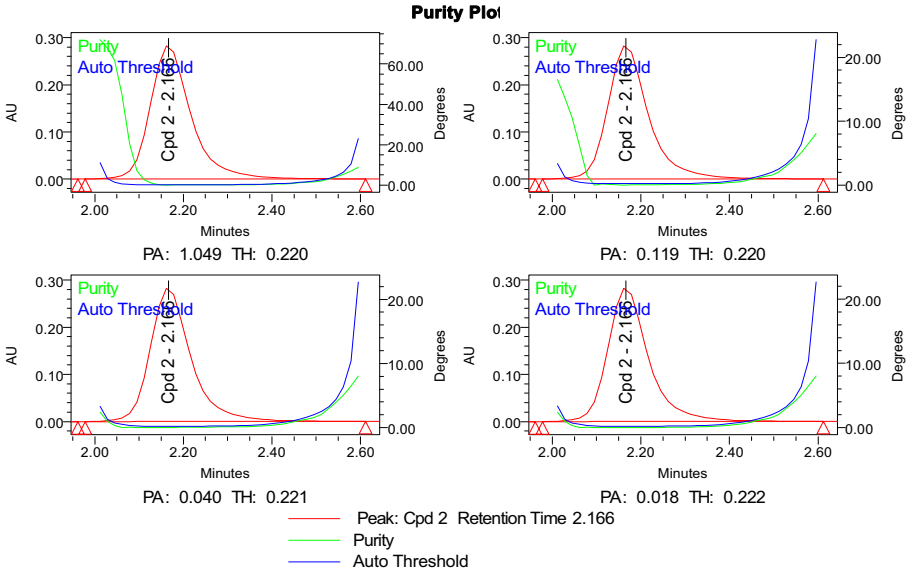
Report Method: 4 Pass Peak Purity　　Printed 10:38:10 PM 4/24/2002　　Page: 1 of 3

Empower software

4 Pass Peak Purity

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default



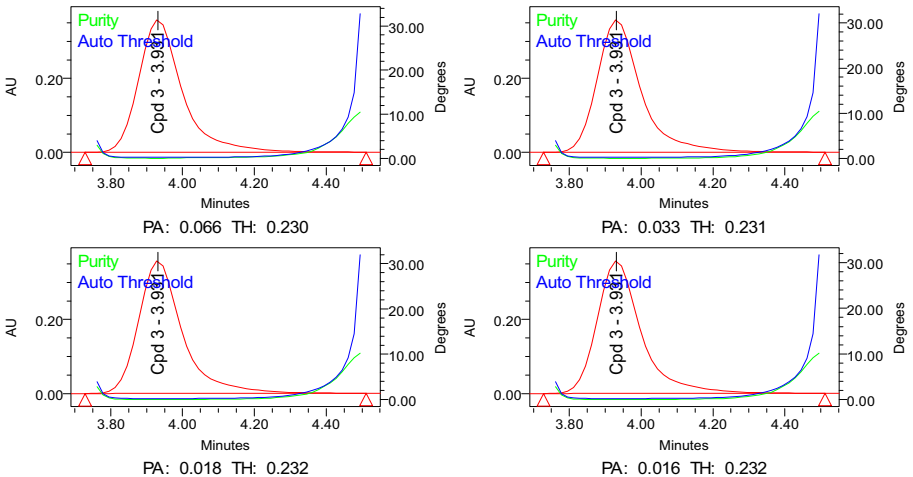
Empower software

4 Pass Peak Purity

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

Purity Plot



PA: 0.066 TH: 0.230

PA: 0.033 TH: 0.231

PA: 0.018 TH: 0.232

PA: 0.016 TH: 0.232

Peak: Cpd 3 Retention Time 3.931
Purity
Auto Threshold

PDA Result Table

	Name	RT	Purity (#1) Angle	Purity (#1) Threshold	Purity (#2) Angle	Purity (#2) Threshold	Purity (#3) Angle	Purity (#3) Threshold
1	Cpd 1	1.387	0.303	0.233	0.062	0.234	0.026	0.235
2	Cpd 2	2.166	1.049	0.220	0.119	0.220	0.040	0.221
3	Cpd 3	3.931	0.066	0.230	0.033	0.231	0.018	0.232

PDA Result Table

	Purity (#4) Threshold	Purity (#4) Angle
1	0.235	0.019
2	0.222	0.018
3	0.232	0.016

A.5 LC 缺省单个报告

Empower software

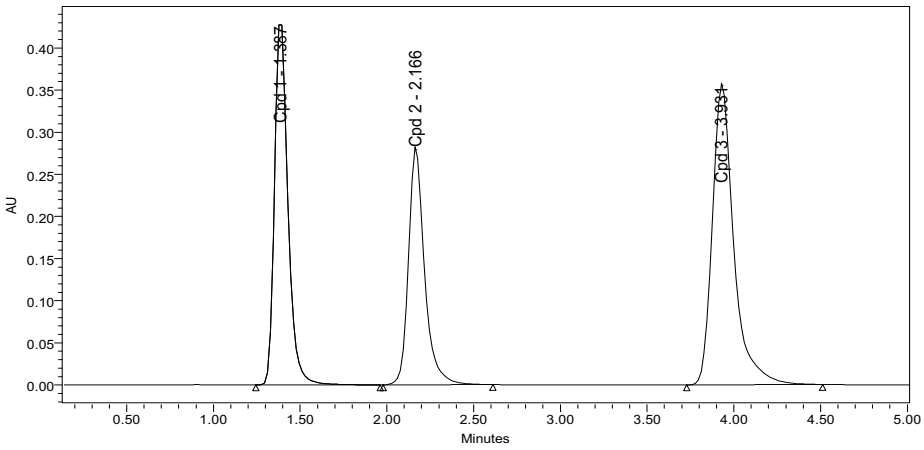
LC Default Individual Report

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)



	Peak Name	RT	Area	% Area	Height
1	Cpd 1	1.387	2319720	32.24	431888
2	Cpd 2	2.166	1816222	25.24	281385
3	Cpd 3	3.931	3059836	42.52	357284

Report Method: LC Default Individual Report Printed 10:39:53 PM 4/24/2002 Page: 1 of 1

A.6 PDA 缺省报告

Empower software

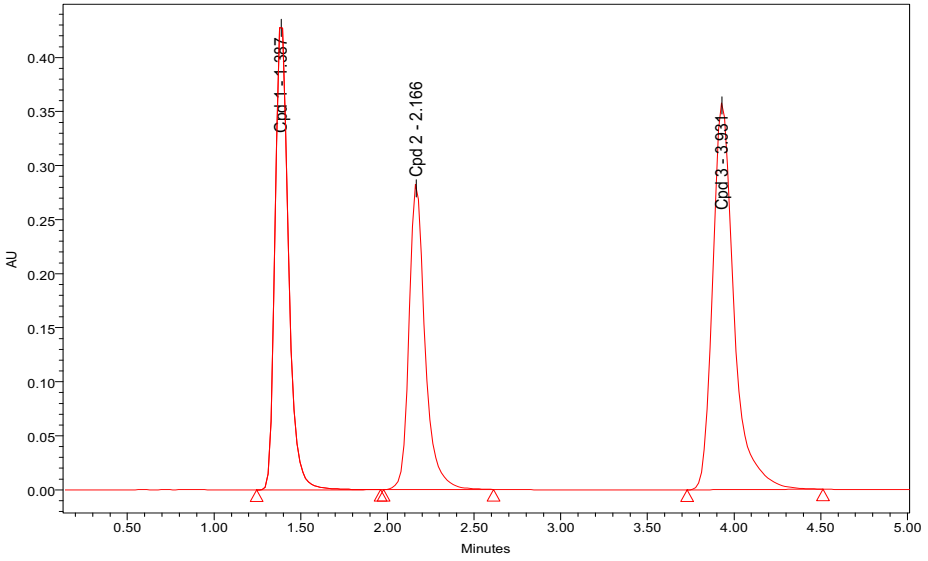
PDA Default

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)



PDA Result Table

	Name	RT	Area	Purity (#1) Angle	Purity (#1) Threshold	Purity Flag	Match (#1) Spect. Name	Match (#1) Angle	Match (#1) Threshold	PDA Match Flag
1	Cpd 1	1.387	2319720	0.303	0.233	Yes	Methylparaben	0.316	0.206	Yes
2	Cpd 2	2.166	1816222	1.049	0.220	Yes	Ethyl paba	0.325	0.207	Yes
3	Cpd 3	3.931	3059836	0.066	0.230	No	Propiophenone	0.049	0.209	No

Report Method: PDA Default Printed 10:41:14 PM 4/24/2002 Page: 1 of 1

A.7 PDA 纯度库匹配报告

Empower software

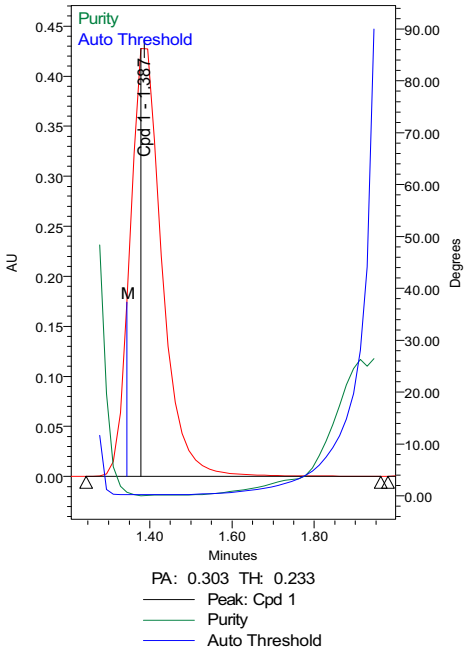
PDA Purity Lib Match Report

Reported by User: System Project Name: PDA_Default

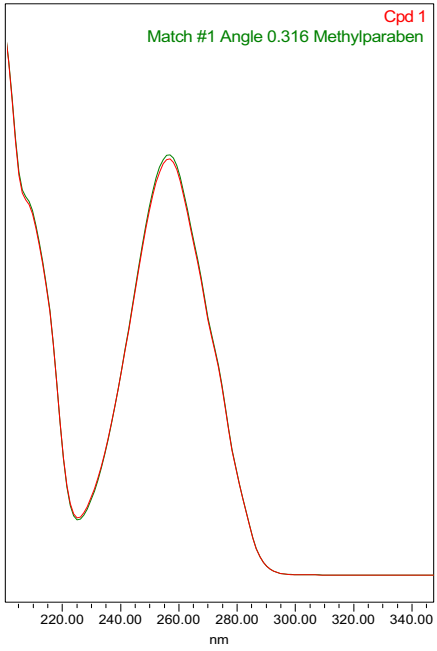
SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

Purity Plot



Library Match Plot



PDA Result Table

	Name	RT	Area	Purity Angle	Purity Threshold	Purity Flag	Match Spect. Name	Match Angle	Match Threshold	Match Flag
1	Cpd 1	1.387	2319720	0.303	0.233	Yes	Methylparaben	0.316	0.206	Yes

Report Method: PDA Purity Lib Match Report Printed 10:43:13 PM 4/24/2002 Page: 1 of 3

Empower software

PDA Purity Lib Match Report

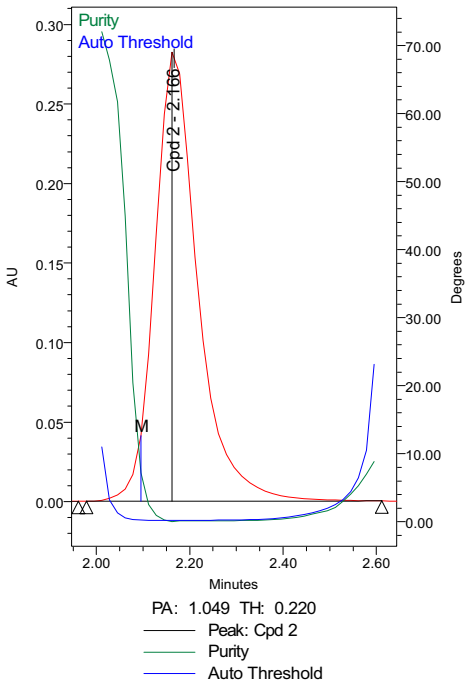
Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

Purity Plot



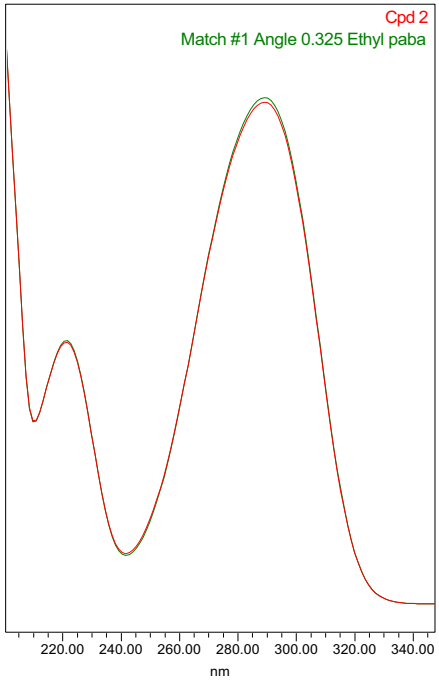
PA: 1.049 TH: 0.220

Peak: Cpd 2

Purity

Auto Threshold

Library Match Plot



PDA Result Table

	Name	RT	Area	Purity Angle	Purity Threshold	Purity Flag	Match Spect. Name	Match Angle	Match Threshold	Match Flag
1	Cpd 2	2.166	1816222	1.049	0.220	Yes	Ethyl paba	0.325	0.207	Yes

PDA Purity Lib Match Report

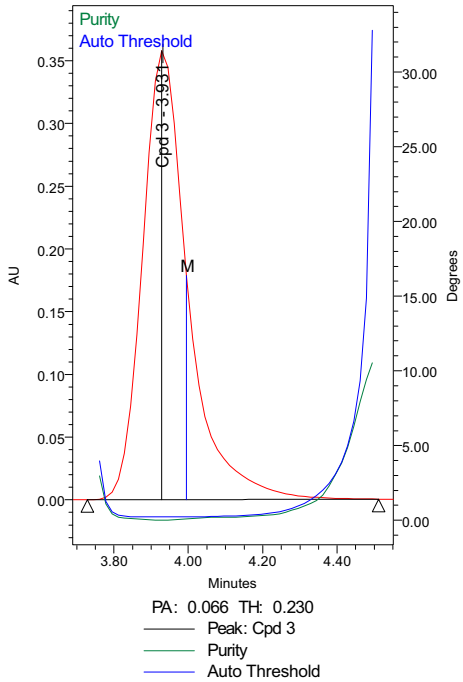
Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

Purity Plot



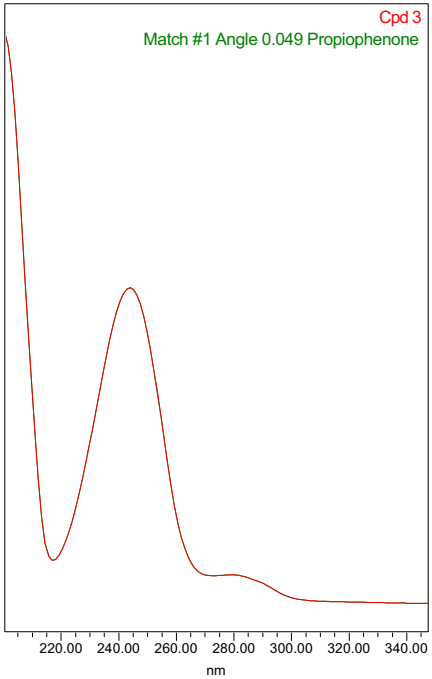
PA: 0.066 TH: 0.230

Peak: Cpd 3

Purity

Auto Threshold

Library Match Plot



PDA Result Table

	Name	RT	Area	Purity Angle	Purity Threshold	Purity Flag	Match Spect. Name	Match Angle	Match Threshold	Match Flag
1	Cpd 3	3.931	3059836	0.066	0.230	No	Propiophenone	0.049	0.209	No

A.8 PDA 纯度图报告

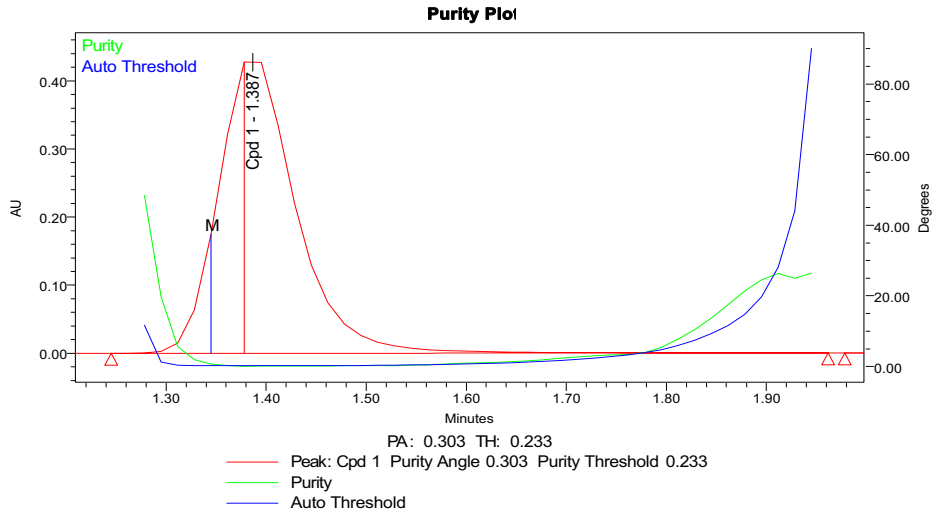
Empower software

PDA Purity Plot

Reported by User: System Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

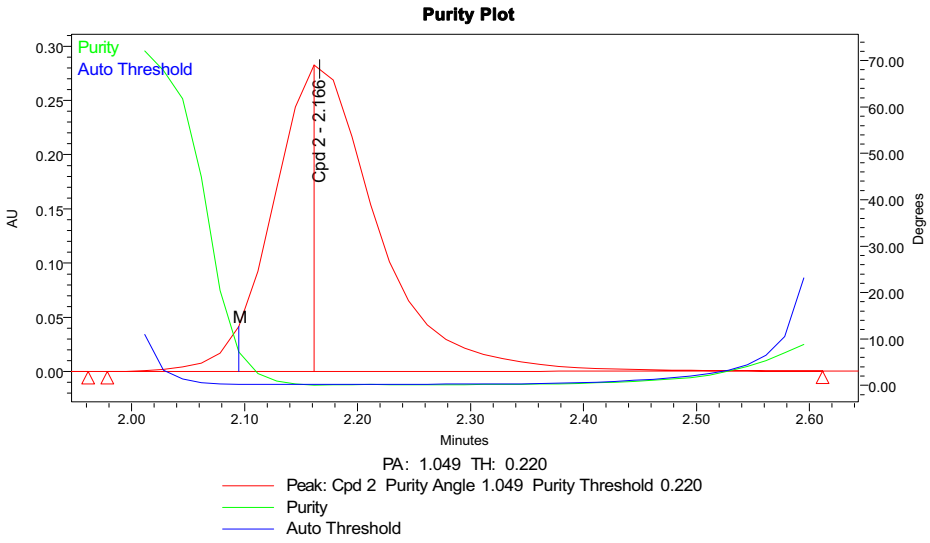


Empower software

PDA Purity Plot

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default



PA: 1.049 TH: 0.220

Peak: Cpd 2 Purity Angle 1.049 Purity Threshold 0.220

Purity

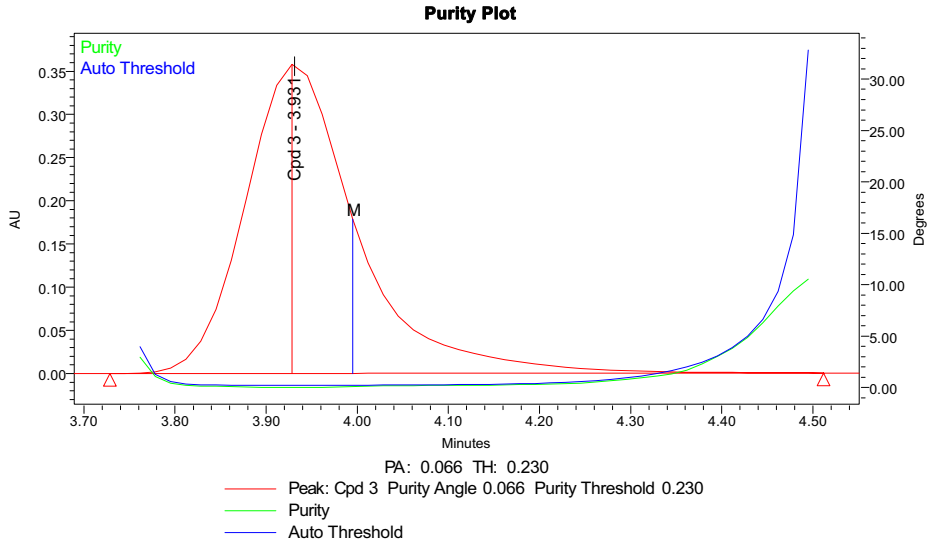
Auto Threshold

Empower software

PDA Purity Plot

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default



PA: 0.066 TH: 0.230

Peak: Cpd 3 Purity Angle 0.066 Purity Threshold 0.230

Purity

Auto Threshold

Empower software

PDA Purity Plot

Reported by User: System

Project Name: PDA_Default

PDA Result Table

	Name	RT	Purity (#1) Angle	Purity (#1) Threshold	Match (#1) Spect. Name	Match (#1) Angle	Match (#1) Threshold
1	Cpd 1	1.387	0.303	0.233	Methylparaben	0.316	0.206
2	Cpd 2	2.166	1.049	0.220	Ethyl paba	0.325	0.207
3	Cpd 3	3.931	0.066	0.230	Propiophenone	0.049	0.209

A.9 PDA 光谱指数图报告

Empower software

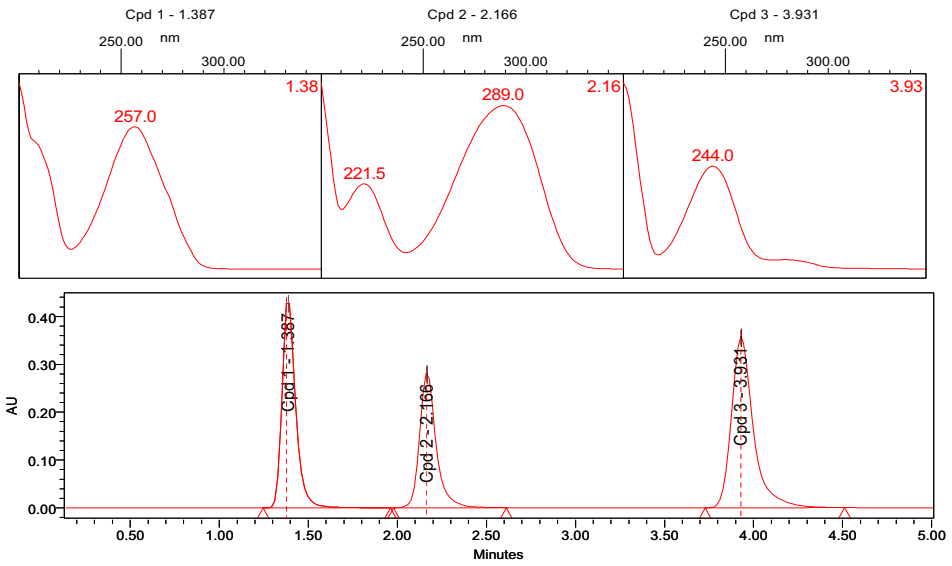
PDA Spectrum Index Plot

Reported by User: System Project Name: PDA_Default

SAMPLE INFORMATION

Sample Name:	Mixture	Acquired By:	DEMO
Sample Type:	Unknown	Date Acquired:	1/5/1995 6:44:28 PM
Vial:	4	Acq. Method Set:	PeakPurity
Injection #:	1	Date Processed:	8/20/2001 10:05:42 PM
Injection Volume:	5.00 ul	Processing Method:	PDA_Demo_4Pass_Processing
Run Time:	5.0 Minutes	Channel Name:	PDA Max Plot 190.0 - 800.0
Sample Set Name:		Proc. Chnl. Descr.:	PDA MaxPlot (190.0 nm to 800.0 nm)

Spectrum Index Plo



PDA Result Table

	Name	RT	Area	Purity (#1) Angle	Purity (#1) Threshold	Purity Flag	Match (#1) Spect. Name	Match (#1) Angle	Match (#1) Threshold	PDA Match Flag
1	Cpd 1	1.387	2319720	0.303	0.233	Yes	Methylparaben	0.316	0.206	Yes
2	Cpd 2	2.166	1816222	1.049	0.220	Yes	Ethyl paba	0.325	0.207	Yes
3	Cpd 3	3.931	3059836	0.066	0.230	No	Propiophenone	0.049	0.209	No

Report Method: PDA Spectrum Index Plot Printed 10:45:14 PM 4/24/2002 Page: 1 of 1

索引

数字

3D 数据 9, 13
    3D 图 16
    查看 14
3D 通道表 14
    扩大 72
3D 图 16
    工具 15
    旋转 17
    颜色 16
    最大化 17
996/2996 光电二极管阵列检测器 1
    Waters 2996 PDA 检测器操作指南 4
    Waters 996 PDA 检测器操作指南 4

B

保存
    处理方法 53, 96
    方法组 53, 96
    结果 103
    缩放参数 20
报告
    打印 105
    缺省 PDA 111
    修改 108
    样品 110
    预览 107
报告出版 108
比较光谱 27
表
    3D 通道 14
    峰 56, 98
    光谱 3, 14, 26, 28, 75
    光谱点 3, 29, 30
    谱库匹配 3, 100
    通道 9
    通道视图 12
标记对象属性对话框 31
    文本 32
标记，色谱 21
波长，标记 21
不缩放窗口 19
不缩放工具 15

C

采集时间 14
查看
    报告预览 106
    菜单 14
    纯度图 62
    顶点光谱 57
    峰 36, 63
    工具 14
    光谱指数 99
    库与数据文件光谱 102
    谱库的匹配 101
    三维数据 14
    色谱 21
    数据 9, 10
    缩放或不缩放数据 19
    项目 10
    摘要 3, 9
    最大化 13
查看 - 主窗口
    部分 14
    峰纯度结果 56
    工具 15
查看光谱 3, 14
    *另请参阅*光谱图

查看主窗口 13
    最大化 13
处理方法
    保存 53, 96
    峰纯度 35, 39
    工具 15
    名称 50
    谱库匹配 69, 78, 84
    向导 39, 84
    修改 69, 78, 81
处理方法向导工具 15
创建库 71
    流程图 69
    指定名称 74
窗口
    不缩放 19
    查看 - 主 14
    改变比例 19
    结果 63, 101, 106
    全视图 19
    项目 9, 10, 36, 106
    最大化 13
纯度角 56, 63, 64
纯度图 62, 63
纯度阈值 56, 63

D

打开
    方法组 72, 80
    PDA_Default 项目 10
    项目窗口 36
打印 105
    报告预览 106
    后台 108
打印工具 15
登录缺省设置 4
顶点光谱 57, 58, 99
    已缩放 59
定量 3

E

Empower 帮助工具 15
Empower PDA 软件的必备条件 4
Empower PDA 软件需求 4
Empower PDA 软件，
    必备条件 4
Empower 配置
    Enterprise 1
    Personal 1
    Workgroup 1
Empower 软件
    功能 2
    还原程序 4
    LC 软件基础包概述 2
    PDA 软件概述 2
    图标 15
Empower 软件工具 15
Empower 系统安装和配置指南 4

F

方法组
    保存 53, 96
    打开 72, 80
方法组工具 15
峰
    查看 36, 63
    顶点 65
峰表 56, 98
峰纯度 35
    查看结果 57
    处理方法 40, 84
    解释结果 56
    选择 48

G

光谱
- 比较 27
- 比较库与数据文件 102
- 顶点 57, 99
- 归一化 27, 102
- 匹配结果 101
- 缩放 18
- 提取 24
- 添加到库 71
- 形状差异 27
- 重叠 25, 58, 59, 100
- 最大不纯度 58

光谱表 3, 14, 26, 28, 75
光谱点表 3, 29, 30
光谱对照角 64
光谱匹配 *请参阅*谱库匹配
光谱图 3, 9, 14, 24, 75
- 归一化 27
- 缩放 18

光谱一致性 35, 56
光谱指数 9, 57, 99
归一化
- 光谱 27, 102
- 谱库匹配图 102

H

后台打印 108
还原
- 程序 4
- 工具 6
- 项目向导 6

还原项目 4

J

积分 3
积分的色谱 52
积分工具 15
计算峰纯度 35
基线噪音 18, 64
校正曲线 3
结果
- 保存 103
- 峰纯度 56
- 工具 15
- 谱库匹配 98, 99, 101

结果窗口
- 纯度图 62, 63
- 谱库匹配 101
- 项目窗口 106, 108
- 最大不纯度 65

解释
- 峰纯度结果 56
- 谱库匹配结果 98

K

库
- 创建 71
- 创建，流程图 69
- 光谱 102
- 名称 75
- 添加光谱 71
- *另请参阅*谱库匹配

快捷方式 14, 15

L

lambda 最大 36, 58
流程图
- 库创建 69
- 谱库匹配 70

轮廓线图 9, 14
- 缩放 18
- 颜色 16

M

密码，缺省设置 4

P

PDA 查看窗口，访问 12
PDA 检测器 1
PDA 缺省报告 111
PDA 软件 2
    必备条件 4
PDA_Default 项目 4, 10
    还原 7
    加载样品数据 4
配置管理器 6
匹配角 98
匹配阈值 98
谱库匹配 69, 98
    处理方法 78, 84
    结果 98, 99
    流程图 70
    选择 82, 92
    正在执行 97
谱库匹配表 3, 100
谱库匹配工具 15
谱库匹配图，
    归一化 102

Q

全屏显示工具 15
全视图命令 19
缺省 PDA 报告
    1 号通道峰纯度报告 112
    254 纳米提取示例报告 115
    3D 图报告 117
    4 号通道峰纯度报告 118
    概述 111
    LC 缺省单个报告 121
    PDA 纯度库匹配报告 123
    PDA 纯度图报告 126
    PDA 光谱指数图报告 130
    PDA 缺省报告 122

R

任务栏 36

S

三维数据
    3D 图 16
    查看 9, 14
    轮廓线图中 13
三重图 102
色谱
    标记 21
    积分 52
    全视图 19
    缩放 18
    提取 20
    图 9, 14, 18, 22
    显示峰 63
    衍生 36
    在不同波长处 20
    重叠 23
    最大值图 36
色谱图 9, 14, 18, 22
设置噪音间隔 49, 93
视图
    保存参数 20
    全图 19
    已缩放 18
数据
    采集 3
    采集时间 14
    查看 9
    缩放 18

显示 10, 12
样品 PDA 4
样品类型 14
样品名称 14
缩放
顶点光谱 59
图 18
缩放参数 20
缩放框 18
缩放选项卡 20

T

提取
光谱 24
色谱 20
提取 Max/Tic 图工具 38, 39
提取色谱工具 15, 21
添加光谱到库 71
通道表 9
通道视图表 12
图
3D 16
纯度 62
光谱 3, 9, 14, 24, 27, 75
轮廓线 9, 14, 16
全视图 19
三重 102
色谱 22
色谱图 9, 14
缩放 18
图标。*请参阅* Empower 软件工具
图属性对话框 20

W

Waters 2996 PDA 检测器操作指南 4
Waters 996 PDA 检测器操作指南 4
Waters 996/2996 PDA 检测器 1
Windows 任务栏 36
文档
相关 ix
约定 xii

X

X 轴 13, 63
吸光度
不同波长 28
图例 16
最大 36
吸光度图例 16
系统
密码 4
显示
不同波长处的色谱 21
纯度图 62
顶点光谱 57
峰 36, 63
库与数据文件光谱 102
轮廓线图 9
三维数据 16
向导
处理方法 39, 84
还原项目 6
相关文档 ix
项目
打开 10, 36
还原 4
PDA_Default 4, 7, 10
项目窗口 9
查看数据选择模式 10
打开 36
带有结果 106, 108
最小化 36
修改
报告 108
处理方法 69, 78, 81

选择
    峰纯度测试 48
    谱库匹配 82, 92
旋转 3D 图 17

Y

Y 轴 13, 63
衍生色谱 36
样品
    报告 109
    类型 14
    名字 14
硬件
    Waters 996 或 2996 PDA 检测器 4
    用于 Empower 系统 1
应用方法组工具 15
预览报告 106
预览工具 106
阈值
    解释 51, 94
    判据 51, 94
约定，文档 xii

Z

噪音间隔 49, 93
重叠
    光谱 25
    色谱 23
重叠工具 15, 23
注释
    标记对象属性对话框 31
    工具 34
    删掉 33
    说明 29
    添加到色谱和光谱 30
    文本 31
    选择，调整大小，旋转，删除，移动 31
注释工具 34
    箭头 30
自动阈值参数 51
最大不纯度
    点 65
    光谱 58
最大不纯度通道 1 工具 15
最大化
    3D 图窗口 17
    查看 13
    查看主窗口 13
最大吸光度 36
最大值图色谱 36