

Thermo

EASY-nLC 系列

Xcalibur 数据系统用户手册

Xcalibur 2.1 或更高版本

60053-97267 修订版 A 2013 年 11 月



Thermo
SCIENTIFIC

© 2013 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

EASY-nLC、EASY-Column、AFC、Foundation、IFC 和 LTQ XL 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 的商标，Xcalibur 和 LTQ 是其注册商标。

下列名称是在美国和其他国家（地区）的注册商标：Microsoft 和 Windows 是 Microsoft Corporation 的注册商标。McAfee 和 VirusScan 是 McAfee, Inc. 的注册商标。

所有其他商标都是 Thermo Fisher Scientific 及其子公司的财产。

Thermo Fisher Scientific Inc. 为购买产品的客户提供本文档，供其在操作产品时参考。本文档受版权保护，未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 书面许可，严禁复制本文档或本文档的任何部分。

本文档的内容可能随时更改，恕不另行通知。本文档中的所有技术信息仅供参考。本文档中的系统配置和规格将取代购买者先前获得的所有信息。

Thermo Fisher Scientific Inc. 不保证本文档的完整性和准确性，而且对于可能因使用本文档（即使是在正确遵循本文档中的说明信息的情况下）而导致的任何错误、疏忽、损害或损失，Thermo Fisher Scientific Inc. 概不负责。

本文档不属于 Thermo Fisher Scientific Inc. 和购买者之间的销售合同的一部分。任何情形下，都不得使用本文档来取代或修改任何“销售条款与条件”，若两份文档信息发生冲突，则以“销售条款与条件”中的信息为准。

发行历史：修订版 A，2013 年 11 月

软件版本：Foundation 平台版 1.0.2 SP2 或更高版本，Xcalibur 数据系统版本 2.1 或更高版本（安装在 Foundation 平台上），EASY-nLC 设备驱动版 2.7 或更高版本

仅供研究使用。不可用于诊断。

目录

	前言	v
	相关文档	vi
	系统要求	vii
	数据系统计算机设置	viii
	注意事项和特殊注意事项	viii
	联系我们	ix
第 1 章	安装 EASY-nLC 控制软件	1
	检查系统先决条件	1
	移除旧版本的仪器控制软件	2
	安装现行版本的仪器控制软件	3
	从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC	4
第 2 章	设置 Foundation 仪器配置	7
	将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机	7
	将系统设备添加至仪器配置	8
	设置 EASY-nLC 的配置	9
	设置样品布局和起始位置	15
第 3 章	创建 Xcalibur 仪器方法	17
	设置 EASY-nLC 仪器的方法参数	17
	Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面	19
	Gradient（梯度）页面	20
	Pre-Column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面	23
	Auto-Sampler（自动进样器）页面	25
	保存仪器方法	28
第 4 章	创建和运行队列	29
	创建队列	29
	采用 Sample Position Selector（样品位置选择器）设置进样位置	34
	运行队列	36
	为运行时间错误采取纠正措施	38
第 5 章	查看 Information（信息）视图中的运行状态	39
	索引	41

前言

本手册介绍了如何从 Thermo Foundation™ 平台上配置 Thermo EASY-nLC™ 虚拟仪器（VI）控制软件，在 Thermo Xcalibur™ 数据系统的 Instrument Setup（仪器设置）窗口上为 LC/MS（液质联用）仪器方法设置液相色谱（LC）参数，在 Xcalibur 数据系统的 Sequence Setup（队列设置）视图上设置进样队列的进样位置和进样体积。

重要信息 若要建立与 EASY-nLC 仪器的通信连接，并避免队列运行期间数据采集提前终止，按照第 viii 页上的“数据系统计算机设置”中的说明设置数据系统计算机。

目录

- 相关文档
- 系统要求
- 数据系统计算机设置
- 注意事项和特殊注意事项
- 联系我们

❖ 若要对文档或 Help（帮助）提出更改建议

在 www.surveymonkey.com/s/PQM6P62 中在线填写问卷调查。
在此先对您的帮助表示感谢。



相关文档

Thermo Fisher Scientific 在与 EASY-nLC 仪器一起运送的数据系统计算机和 USB 闪存驱动器中提供 PDF 格式的手册：

- *EASY-nLC 系列预安装要求手册 (EASY-nLC Series Preinstallation Requirements Guide)*
- *EASY-nLC 系列入门手册 (EASY-nLC Series Getting Started Guide, 采用独立式触屏应用程序)*
- *EASY-nLC 系列故障排除和维护手册 (EASY-nLC Series Troubleshooting and Maintenance Guide)*
- *EASY-nLC 系列 Xcalibur 数据系统用户手册 (EASY-nLC Series User Guide for the Xcalibur Data System)*

该数据系统也为 EASY-nLC 虚拟仪器控制软件提供 Help（帮助）。

❖ 若要访问数据系统计算机上的 EASY-nLC 手册

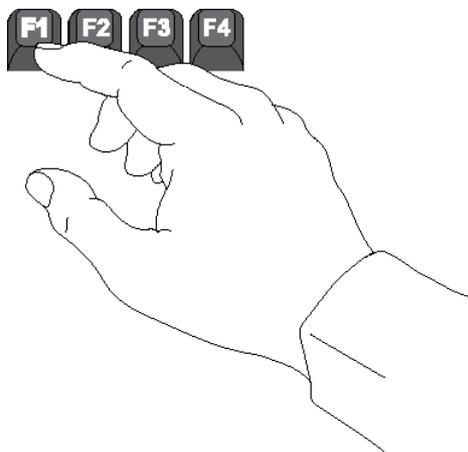
选择 **Start（开始） > Programs（程序）** 或 **All Programs（所有程序） > Thermo Instruments（Thermo 仪器） > Manuals（手册） > LC Devices（液相色谱设备） > Thermo**。

❖ 若要从 Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图上打开 Help（帮助）

- 若要打开 Thermo EASY-nLC Help（Thermo EASY-nLC 帮助）的 Welcome（欢迎）页面，从菜单栏上选择 **Help（帮助） > Thermo EASY-nLC Help（Thermo EASY-nLC 帮助）**。
- 若要打开 Thermo EASY-nLC 视图当前页面上的 Help（帮助）主题，执行以下其中一种操作：
 - 从菜单栏上选择 **Help（帮助） > Help On Current Item F1（当前项目上的帮助 F1）**。
 - 按计算机键盘上的 F1 键。

❖ 若要从 Foundation Instrument Configuration（Foundation 仪器配置）窗口的 Thermo EASY-nLC Configuration（Thermo EASY-nLC 配置）对话框打开 Help（帮助）

按计算机键盘上的 F1 键。



系统要求

表 1 列出了 EASY-nLC 设备驱动程序的数据系统计算机硬件和软件要求。LC Devices DVD（液相色谱设备 DVD）上提供了设备驱动程序，该设备驱动程序设计与 Thermo Xcalibur 数据系统或等效的 Thermo Scientific 质谱仪应用程序一起使用。

重要信息 在用户安装 LC Devices DVD（液相色谱设备 DVD）上提供的设备驱动程序之前，确保数据系统计算机具有一个 *Thermo LC Devices x.x.x Release Notes* 中所注释的兼容版本的 Foundation 平台，其中 *x.x.x* 是用户想要安装的版本。用户可以在 LC Devices DVD（液相色谱设备 DVD）上找到包含系统要求的 Release Notes（版本注释）文件。

表 1. 数据系统计算机硬件和软件要求

硬件	最低要求						
数据系统计算机	<ul style="list-style-type: none"> • 1 GB RAM、2 GHz 处理器 • DVD-ROM 驱动 • 80 GB 硬盘容量 • 显示分辨率 1280 × 1024 • 2 个网卡 • NTFS 格式 						
软件	要求						
操作系统	Microsoft™ Windows™ 操作系统： <ul style="list-style-type: none"> • Windows 7 Professional（32-位和 64-位^a） – 或 – <ul style="list-style-type: none"> • Windows XP Workstation SP3 						
第三方软件	Adobe™ Reader™ 9.0 或更高版本						
Thermo Scientific 软件	<table border="1"> <thead> <tr> <th>LC Devices (液相色谱设备) EASY-nLC 设备驱动程序</th> <th>Foundation 平台</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2.8.0 或更高版本</td> <td>1.0.2 SP2 或更高版本</td> </tr> <tr> <td>2.7.0</td> <td>1.0.2 SP2 或 2.0.0 SP1</td> </tr> </tbody> </table>	LC Devices (液相色谱设备) EASY-nLC 设备驱动程序	Foundation 平台	2.8.0 或更高版本	1.0.2 SP2 或更高版本	2.7.0	1.0.2 SP2 或 2.0.0 SP1
LC Devices (液相色谱设备) EASY-nLC 设备驱动程序	Foundation 平台						
2.8.0 或更高版本	1.0.2 SP2 或更高版本						
2.7.0	1.0.2 SP2 或 2.0.0 SP1						

^a LC Devices（液相色谱设备）2.8.0 及其更高版本均与 Windows 7，32-位和 64-位兼容

数据系统计算机设置

表 2 列出了队列运行期间要求用于避免数据采集提前终止的计算机设置。它也提供了与 EASY-nLC 仪器建立通信连接所要求的病毒扫描程序设置。

重要信息 用户在 Windows 7 计算机上安装完 Thermo EASY-nLC 设备驱动程序之后，从计算机病毒扫描程序的 Prevent IRC Communication（防止 IRC 通信）列表中排除 Thermo EASY-nLC 软件（参阅第 4 页上的“从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC”）。

若不从 Prevent IRC Communication（防止 IRC 通信）列表中排除 Thermo EASY-nLC 软件，该数据系统计算机无法与 EASY-nLC 仪器建立通信连接。

表 2. 数据系统计算机设置

类别	设置
Power saver（省电）	<ul style="list-style-type: none"> Screen saver（屏幕保护）：None（无） Hibernate（休眠）：Not enabled（不启用）或 Never（从不） Turn off hard disk（关闭硬盘）：Never（从不） Turn off monitor（关闭显示器）：Never（从不）
Windows updates（Windows 更新）	若数据系统计算机联网，关闭自动 Windows updates（Windows 更新）。
Virus scanner（病毒扫描程序）	对于 Windows 7 操作系统，从 Virus scanner（病毒扫描程序）中排除 Thermo EASY-nLC 软件。

注意事项和特殊注意事项

确保遵循本手册中发布的注意事项和特殊注意事项。注意事项和特殊注意事项出现在方框中；这些相关的安全或可能出现的系统损坏也具有相应的注意事项符号。

本手册使用以下类型的注意事项和特殊注意事项。



注意事项 强调对人体、财产或环境可能会造成的危害。每个“注意事项”都会标有适当的“注意事项”符号。

重要信息 强调防止软件损害、数据丢失或无效测试结果必需的信息；或可能包含获得系统最佳性能的重要信息。

注释 强调普遍关注的信息。

提示 强调能够帮助简化工作的信息。

联系我们

可以通过多种方式联系 Thermo Fisher Scientific，获取所需信息。

❖ 若要联系 EASY-nLC 仪器的技术支持

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
网站	www.proxeon.com
邮箱	(北美和南美) us.techsupport.analyze@thermofisher.com (其他洲) eu.techsupport.cmf@thermofisher.com
知识库	www.thermokb.com

若要下载更新和配套软件，访问：mssupport.thermo.com。

❖ 若要订购 EASY-nLC 仪器的耗材和备件

对于 EASY-nLC 1000 仪器，转至

www.proxeon.com/productrange/nano_lc_easy-nlc_1000/accessories_spares/index.html。

对于 EASY-nLC II 仪器，转至

www.proxeon.com/productrange/nano_lc/accessories-spares/index.html。

❖ 若要获得本地销售或服务联系信息

转至 www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus。

❖ 若要从互联网复制手册

转至 mssupport.thermo.com，同意相关条款和条件，然后单击窗口左侧的 **Customer Manuals**（用户手册）。

❖ 若要对文档或 Help（帮助）提出更改建议

- 在 www.surveymonkey.com/s/PQM6P62 中在线填写问卷调查。
- 向 Technical Publications Editor（技术出版编辑）发送电子邮件，邮箱地址为 techpubs-lcms@thermofisher.com。

安装 EASY-nLC 控制软件

本章介绍了如何从 LC Devices（液相色谱设备）的 DVD 上安装 EASY-nLC 虚拟仪器（VI）控制软件。也介绍了如何确保数据系统计算机和 EASY-nLC 仪器之间的通信连接。

目录

- [检查系统先决条件](#)
- [移除旧版本的仪器控制软件](#)
- [安装现行版本的仪器控制软件](#)
- [从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC](#)

检查系统先决条件

LC/MS（液质联用）系统包含一台 EASY-nLC 仪器、一台 Thermo Scientific 质谱仪和一台数据系统计算机。

在安装 EASY-nLC VI 控制软件之前，执行以下操作：

- 安装与 Thermo Foundation 平台和 Xcalibur 数据系统（或等效的 Thermo Scientific 数据系统）兼容的版本。
- 确保用户具有管理员权限，以便为 Xcalibur 应用程序安装 EASY-nLC VI 控制软件。
- 移除数据系统计算机中早期版本的 EASY-nLC VI 控制软件（参阅第 2 页上的“[移除旧版本的仪器控制软件](#)”）。

在安装 EASY-nLC VI 控制软件之前或之后，执行以下操作：

- 将 EASY-nLC 仪器与数据系统计算机通过以太网进行连接（参阅第 7 页上的“[将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机](#)”）。
- 将 EASY-nLC 仪器与 Thermo Scientific MS（质谱）检测器通过一根触点闭合线缆连接。

该数据系统通过这根线缆使 LC（液相色谱）系统与质谱仪的运行时间同步。有关连接触点闭合线缆的信息，参阅 *EASY-nLC 系列入门手册*（*EASY-nLC Series Getting Started Guide*）。

1 安装 EASY-nLC 控制软件

移除旧版本的仪器控制软件

- 检查实验室局域网（LAN）端口，该端口用于连接网络至远程支持服务器。对于远程诊断，实验室必须有带网络连接的 LAN 端口。

网络防火墙必须允许从 EASY-nLC 仪器至远程支持服务器在 IP 地址 195.41.108.93，端口 22 进行传输控制协议 / 互联网协议（TCP/IP）通信。

安装 EASY-nLC VI 控制软件后，根据第 4 页上的“从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC”中的描述将该软件从病毒扫描程序中排除。

移除旧版本的仪器控制软件

❖ 若要移除以前安装的 EASY-nLC Xcalibur VI 版本

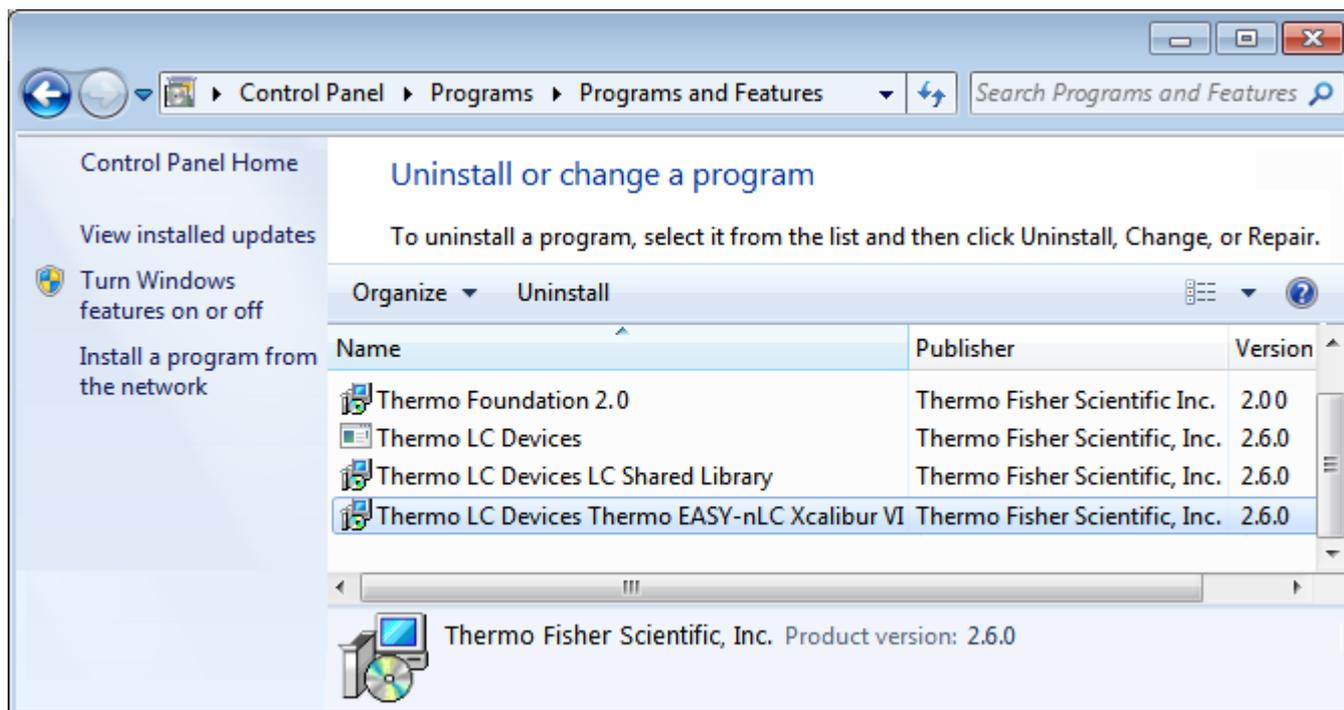
1. 根据 Windows 操作系统执行以下其中一种操作：

- 对于 Windows 7，选择 **Control Panel（控制面板） > Uninstall a Program（卸载程序）**。

已安装程序列表出现（参阅图 1）。

- 对于 Windows XP，选择 **Start（开始） > Settings（设置） > Control Panel（控制面板） > Add or Remove Programs（添加或移除程序）**。

图 1. Windows 7 操作系统的卸载窗口



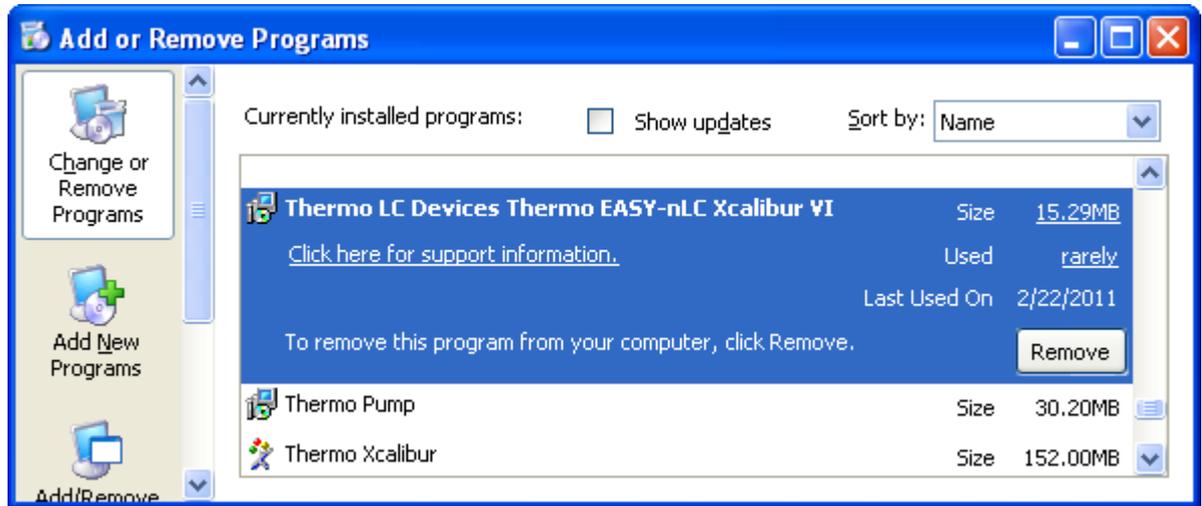
2. 在已安装程序列表中，找到 **Thermo LC Devices Thermo EASY-nLC Xcalibur VI（Thermo 液相色谱设备 Thermo EASY-nLC Xcalibur VI）**。

3. 根据操作系统执行以下其中一种操作：

- 对于 Windows 7，双击 **Thermo LC Devices Thermo EASY-nLC Xcalibur VI（Thermo 液相色谱设备 Thermo EASY-nLC Xcalibur VI）** 或点击 **Uninstall（卸载）**。等待程序从列表中移除。

- 对于 Windows XP，点击 **Remove**（移除）（参阅图 2）。等待程序从列表中移除。

图 2. Windows XP 操作系统的 Add or Remove Programs（添加或删除程序）窗口

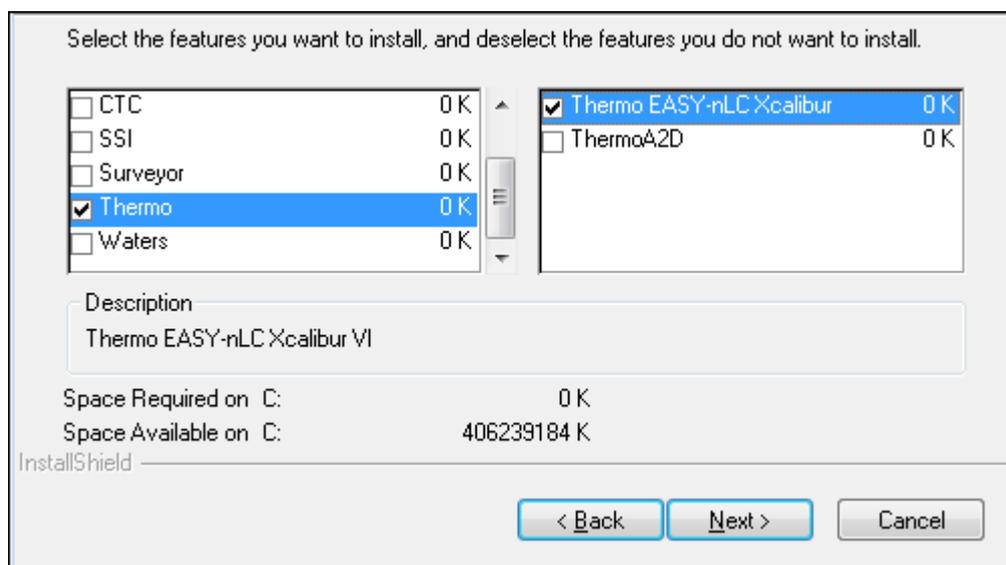


安装现行版本的仪器控制软件

❖ 若要安装 EASY-nLC Virtual Instrument（EASY-nLC 虚拟仪器）软件

1. 检查 Foundation 平台和 Xcalibur 数据系统的安装版本，确保这些版本与用户正安装的 LC Devices（液相色谱设备）的版本兼容（参阅第 vii 页上的“系统要求”）。
2. 在启动安装之前关闭所有正在运行的程序。
3. 移除已安装的 EASY-nLC VI 软件的旧版本（若适用，参阅第 2 页上的“移除旧版本的仪器控制软件”）。
4. 将 LC Devices（液相色谱设备）的 DVD 装入数据系统计算机，按照 Thermo LC Devices InstallShield Wizard（Thermo 液相色谱设备安装向导）中的说明进行操作。
5. 在向导的 Select Features（选择功能）页面上选择左侧的 **Thermo** 复选框，然后选择右侧的 **Thermo EASY-nLC Xcalibur** 复选框（参阅图 3）。

图 3. Thermo LC Devices InstallShield Wizard (Thermo 液相色谱设备安装向导) 的 Select Features (选择功能) 页面



6. 安装完成以后, 重启数据系统计算机。

当用户重新登录时, 安装完成。

从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC

当数据系统计算机使用 Windows 7 操作系统时, McAfee™ VirusScan™ Enterprise 软件拦截 Thermo EASY-nLC 软件。

重要信息 对于 Windows 7 操作系统, 用户必须从 McAfee 拦截列表中排除 EASY-nLC VI 软件。对于 Windows XP 操作系统, 仅当 EASY-nLC 仪器出现通信连接问题时, 从 McAfee 拦截列表中排除 EASY-nLC VI 软件。

❖ 若要从 VirusScan Enterprise 8.7.0i 软件中排除 EASY-nLC 软件

1. 以管理员身份登录数据系统计算机。
2. 按照以下步骤打开 McAfee VirusScan Console 应用程序:
 - a. 执行下列操作之一:
 - 在 Windows 7 任务栏上, 右击 McAfee 图标, , 选择 **Manage Features (管理功能) > VirusScan Enterprise**。
 - 或 –
 - 从 Windows 7 的桌面上选择 **Start (开始) > All Programs (所有程序) > McAfee > VirusScan Console**。
3. 在 Task (任务) 列上, 右击 **Access Protection (访问保护)** 并从快捷菜单中选择 **Properties (属性)**。

Access Protection Properties (访问保护属性) 对话框出现。

4. 若要打开 Rules（规则）对话框，执行以下操作：
 - a. 在 Categories（类别）下面，选择 **Anti-virus Standard Protection（防病毒标准保护）**。
 - b. 在 Rules（规则）下面，选择 **Prevent IRC Communication（防止 IRC 通信）**。
 - c. 单击 **Edit（退出）**。
Rules Details（规则详细信息）对话框打开。
5. 修改这些设置：
 - 在 Processes to Include（要包含的进程）框中，删除星号。

注释 当 Processes to Include（要包含的进程）框中仅包含一个星号时，病毒扫描程序阻止所有进程的 IRC 通信。
 - 在 Processes to Exclude（要排除的进程）框中，输入 **Thermo***。

注释 当 Processes to Exclude（要排除的进程）框中包含文本 Thermo* 时，互联网中继聊天（IRC）通信进程的 Access Protection（访问保护）服务会忽略以 Thermo 起始的进程。
6. 单击 **OK（确定）** 以关闭 Rules Details（规则详细信息）对话框。
7. 单击 **OK（确定）** 以关闭 Access Protection Properties（访问保护属性）对话框并接受新设置。
8. 关闭 VirusScan Console 应用程序。

设置 Foundation 仪器配置

本章介绍了如何设置 EASY-nLC 设备驱动程序的仪器配置。

用户设置仪器配置之前，将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机，打开 EASY-nLC 仪器并以管理员的身份登录仪器。然后，通过 Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口上的 Thermo EASY-nLC Configuration（Thermo EASY-nLC 配置）对话框设置并测试 EASY-nLC 仪器的网络连接，指定计划使用的托盘类型并确定溶剂瓶 A 和 B 中的流动相溶剂。

目录

- 将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机
- 将系统设备添加至仪器配置
- 设置 EASY-nLC 的配置
- 设置样品布局和起始位置

将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机

EASY-nLC 仪器和 Thermo Scientific 质谱仪与数据系统计算机通过以太网建立通信连接，此连接用以太网交换机作为路由。

以下是数据系统计算机和 EASY-nLC 仪器的默认 IP 地址。

表 3. LC（液相色谱）系统的默认 IP 地址

系统模块	IP 地址
数据系统计算机	172.16.0.101
EASY-nLC 仪器	172.16.0.103

❖ 若要将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机

1. 将屏蔽网线连接至 EASY-nLC 仪器背面面板上的 LAN 端口上。
2. 将网线的另一端连接至以太网交换机。
3. 再使用一根屏蔽网线将以太网交换机连接至数据系统计算机上安装的网卡上。

有关设置通信线缆的更多信息，参阅 *EASY-nLC 系列入门手册 (EASY-nLC Series Getting Started Guide)*。

重要信息 避免 IP 地址与网络上的其他单元发生冲突，特别是与质谱仪。

将系统设备添加至仪器配置

Thermo Scientific LC/MS（Thermo Scientific 液质联用）系统包含一台 Thermo Scientific 质谱仪和一台 EASY-nLC 仪器。若要从 Xcalibur 数据系统上控制这些仪器，用户必须将已安装的设备驱动程序添加至仪器配置中。

注释 Xcalibur 数据系统和 Foundation Instrument Configuration（Foundation 仪器配置）窗口不能同时打开。

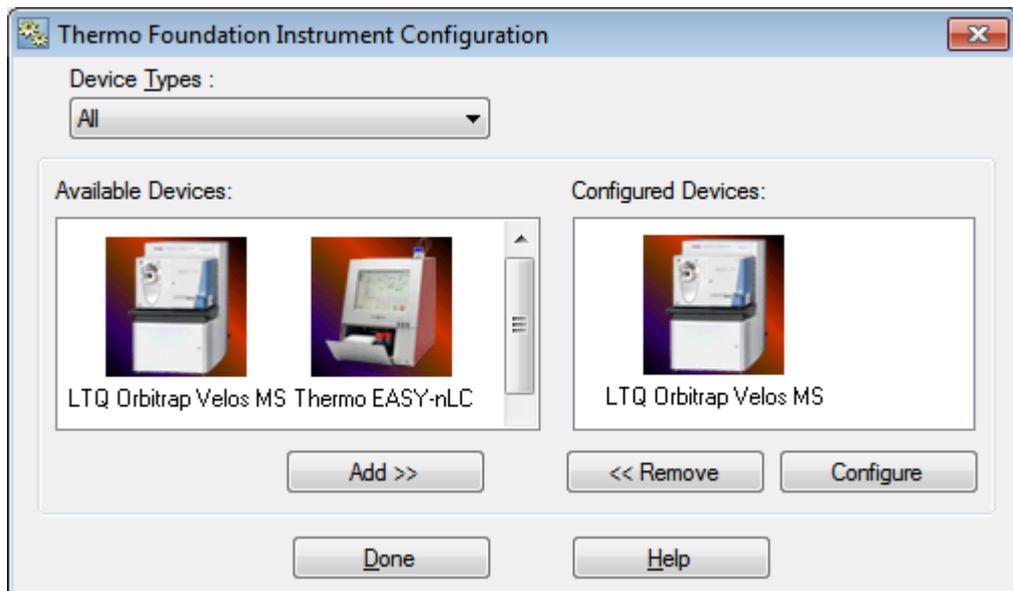
❖ 若要将设备添加至仪器配置中

1. 若 Xcalibur 数据系统已打开，将其关闭。
2. 从 Windows 任务栏上选择 **Start（开始） > Programs（程序）（或 All Programs [所有程序]） > Thermo Foundation x.x > Instrument Configuration（仪器配置）**，其中，x.x 是 Thermo Foundation 的已安装版本。

Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口打开（参阅图 4）。已安装设备列在 Available Devices（可用设备）列表中。已配置设备列在 Configured Devices（已配置设备）列表中。

图 4 显示了含 Thermo Scientific 质谱仪的仪器配置，该质谱仪已添加至 Configured Devices（已配置设备）列表中。

图 4. Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口



提示 若要访问 Help（帮助），按 F1 或点击 **Help（帮助）**。

3. 按照以下步骤将 EASY-nLC 仪器添加至仪器配置中：
 - a. 确保将 Device Types（设备类型）列表设置为 **All（所有）** 或 **AS（自动进样器）**。
若将 Device Type（设备类型）列表设为 LC（液相色谱），Xcalibur 设备的 EASY-nLC VI 不会出现在 Available Devices（可用设备）列表中。
 - b. 在 Available Devices（可用设备）列表中，双击 **Thermo EASY-nLC** 图标。

Thermo EASY-nLC 图标的副本出现在 Configured Devices（已配置设备）列表中。

4. 设置每个已配置设备的配置选项。

有关 EASY-nLC 配置参数的信息，参阅下一个主题，“[设置 EASY-nLC 的配置。](#)”

5. 点击 **Done（完成）** 以关闭 Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口。

提示 用户在打开 Xcalibur 数据系统之前，必须先关闭 Instrument Configuration（仪器配置）窗口。这两个应用程序不能同时打开。

设置 EASY-nLC 的配置

通过 Thermo EASY-nLC Configuration（Thermo EASY-nLC 配置）对话框设置并测试与数据系统计算机的通信连接，以指定自动进样器的模式、用户所使用样品板的类型并确定流动相溶剂。点击 Autosampler Configuration（自动进样器配置）区域的 Edit（编辑）按钮，打开 Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框，在此设置样品布局（行优先还是列优先）及 Xcalibur 进样队列的起始位置。

❖ 若要设置 Foundation 平台上的 EASY-nLC 配置

1. 若用户还没有将 EASY-nLC 仪器添加至 Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口的 Configured Devices（已配置设备）列表中，将其按照第 8 页上的“[将系统设备添加至仪器配置](#)”中的描述进行添加。
2. 在 Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口的 Configured Devices（已配置设备）列表中双击 **Thermo EASY-nLC** 图标。

Thermo EASY-nLC Configuration（Thermo EASY-nLC 配置）对话框打开（参阅图 5）。

图 5. Thermo EASY-nLC Configuration（Thermo EASY-nLC 配置）对话框

3. 确保:

- EASY-nLC 仪器已通过以太网交换机连接至数据系统计算机（参阅第 7 页上的“[若要将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机](#)”）。
- EASY-nLC 仪器已打开，用户以管理员的身份登录至仪器。

4. 按照以下步骤设置 EASY-nLC 仪器的网络配置:

- a. 在适合的框内输入 EASY-nLC 仪器的 IP 地址和用户名。

用户必须在 EASY-nLC 仪器上拥有同一个用户名的账户。默认用户名为“admin”，但是用户可以将其更改为 EASY-nLC 仪器上任一已存在的用户账户。

提示 EASY-nLC IP 地址列在 About（关于）框中，用户可通过触屏左上角的 THERMO 标志将其打开。当前用户列在触屏的左下角。

如有必要，在触屏软件的 Configuration（配置）> Network（网络）页面上更改 IP-地址。

- b. 点击 **Test Connection（测试连接）** 以测试与 EASY-nLC 仪器的连接，并将仪器配置信息下载至数据系统计算机。

5. 检查 Test Connection（测试连接）按钮右侧状态框中的消息。

- 若已建立连接，状态框变绿（参阅图 6）并出现 LC（液相色谱）设备驱动程序和仪器的相关信息。
- 若未建立连接，状态栏变成红色。检查网线的连接、EASY-nLC 仪器的 IP 地址、数据系统计算机上已安装网卡的 IP 地址（参阅第 7 页上的“[将 EASY-nLC 仪器连接至数据系统计算机](#)”）。
- 若防病毒程序或防火墙拦截了该连接，应用程序显示以下错误信息：

An established connection was aborted by the software in your host machine.（已建立的连接被用户主机上的软件中止。）

联系本地 IT 管理员获得帮助。

有关从 McAfee 防病毒扫描软件中排除 EASY-nLC 软件的信息，参阅第 4 页上的“[从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC](#)”。

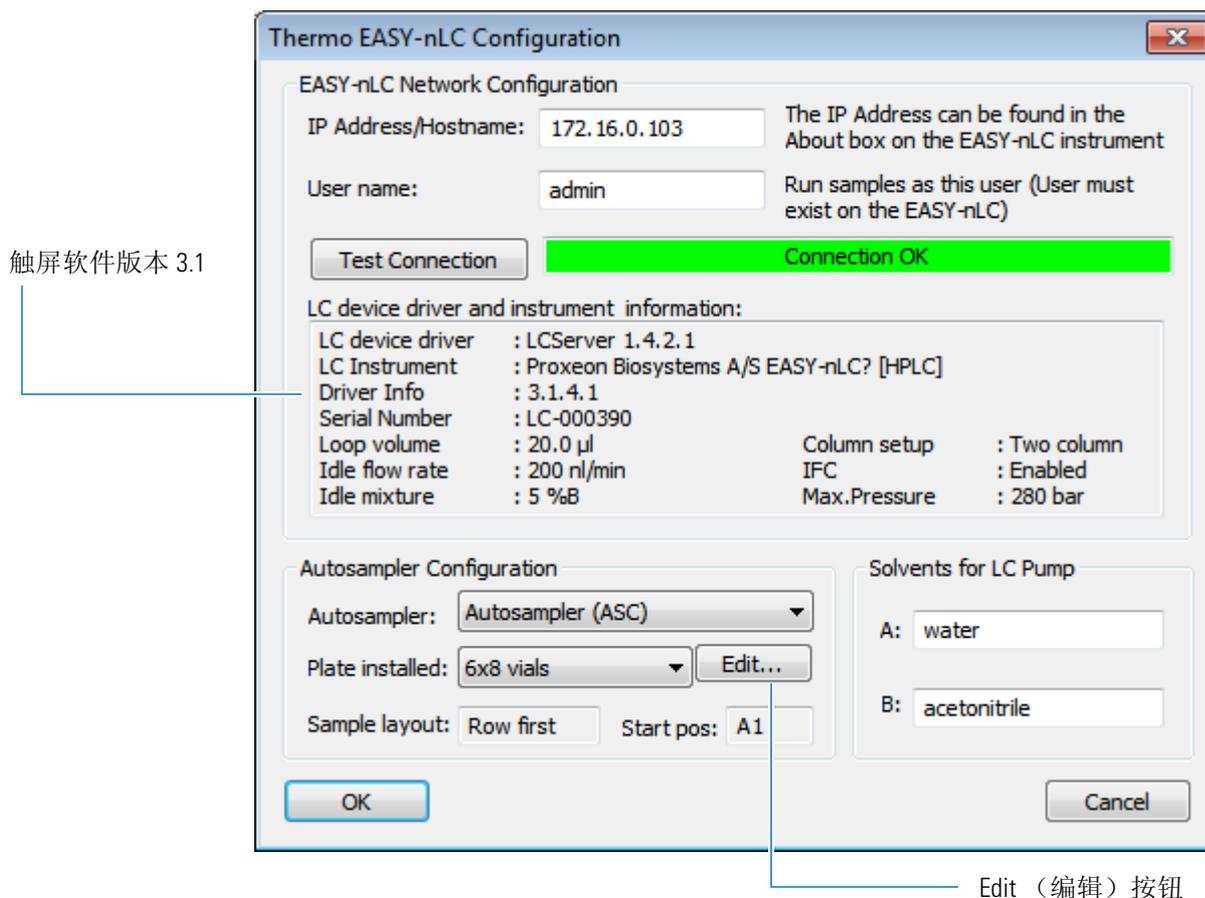
6. 检查仪器信息。如有必要，按照第 11 页上的“[若要更改定量环体积、色谱柱设置、闲置混合物或闲置流速](#)”中的描述更改仪器信息。

7. 按照以下步骤在 Autosampler Configuration（自动进样器配置）区域设置自动进样器配置:

- a. 选择自动进样器模式（Autosampler ASA [**自动进样器 ASA**] 或 Autosampler ASC [**自动进样器 ASC**]）。
- b. 选择样品板的类型（**96-** 或 **384-多孔板**，或一个 **4 × 6 (ASA)** 或 **6 × 8 (ASC)** 的样品瓶架）。

注释 ASC 模式的所有样品板格局的一侧额外有六个样品瓶位置。当用户设置 Xcalibur 队列时，这些样品瓶的编号为 1-V1 至 1-V6。

图 6. Thermo EASY-nLC Configuration (Thermo EASY-nLC 配置) 对话框



- c. (可选) 当按照第 15 页上的“设置样品布局和起始位置”中的描述创建新的 Xcalibur 队列时，设置欲使用的默认样品布局和起始位置。
8. 在 Solvents for LC Pump (液相色谱泵的溶剂) 区域，在框中输入溶剂瓶 A 和 B 的溶剂名。
通常，溶剂瓶 A 中存放 0.1% 的 LC/MS (液质联用) 级甲酸水溶液。通常，溶剂瓶 B 中存放 0.1% 的 LC/MS (液质联用) 级甲酸乙腈溶液。
9. 若 OK (确定) 按钮不可用，点击 **Test Connection (测试连接)** 以将新配置设置下载至数据系统计算机。
10. 单击 **OK (确定)** 以接受设置并关闭 Thermo EASY-nLC Configuration (Thermo EASY-nLC 配置) 对话框。
11. 点击 **Done (完成)** 以关闭 Thermo Foundation Instrument Configuration (Thermo Foundation 仪器配置) 窗口。

用户在打开 Xcalibur 数据系统之前必须先关闭 Foundation 应用程序。Xcalibur 数据系统和 Thermo Foundation Instrument Configuration (Thermo Foundation 仪器配置) 窗口不能同时打开。

❖ **若要更改定量环体积、色谱柱设置、闲置混合物或闲置流速**

1. 通过仪器的触屏执行以下操作：
 - a. 打开 **Maintenance (维护) > Devices (设备)** 页面。

- b. 在 Devices（设备）列表中，选择 **EASY-nLC (HPLC)**，然后按 **Properties（属性）** 选项卡。

Maintenance（维护）> Devices（设备）页面上 HPLC 设备的 Properties（属性）视图打开（图 7）。

图 7. EASY-nLC (HPLC) 的属性视图（触屏软件 3.0 版或更高版本）

The screenshot displays the 'Properties' tab for the EASY-nLC™ [HPLC] device. It features three input fields: 'Loop volume' set to 20.0 µl, 'Idle flow rate' set to 50 nl/min, and 'Idle mixture' set to 90 %B. To the right, there are two unchecked checkboxes: 'One column setup' and 'Load speed protection (LSP)'. At the bottom, there are three buttons: 'Factory', 'Reset', and 'Apply'.

- c. 按相应的框以打开小键盘并键入这些参数的适合数值：
- 对于 Loop Volume（定量环体积），输入安装在阀 S 上的样品定量环的标定体积（5、20 或 50 µL）。
 - 对于 Idle Flow Rate（闲置流速），输入适合的数值，单位为 nL/min。闲置时，仪器以指定的流速运输指定的溶剂混合物。
 - 对于 Idle Mixture %B（闲置混合物 %B），输入一个从 0 至 100 的值。
- d. 视情况选择或清除这些复选框：**One Column Setup（一根色谱柱设置）** 和 **Load Speed Protection（上样速度保护，LSP）**。

注释 LSP 复选框在 EASY-nLC 触屏软件 3.0 版或更高版本中可用。

- e. 点击 **Apply（应用）**。
2. 点击 Foundation Instrument Configuration（Foundation 仪器配置）窗口 EASY-nLC Configuration（EASY-nLC 配置）对话框上的 **Test Connection（测试连接）**。然后验证新设置。

EASY-nLC Configuration（EASY-nLC 配置）对话框参数

当建立 EASY-nLC 仪器和数据系统计算机的连接时，该对话框显示用户指定的定量环体积、闲置流速、闲置混合物和色谱柱设置。按照上面“若要更改定量环体积、色谱柱设置、闲置混合物或闲置流速。”中的介绍，从 EASY-nLC 触屏-软件上设置这些参数。

表 4 描述了 Thermo EASY-nLC Configuration (Thermo EASY-nLC 配置) 对话框中的参数。

表 4. EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
EASY-nLC Network Configuration (EASY-nLC 网络配置)	
使用该区域指定 EASY-nLC 仪器的 IP 地址。	
IP Address/Hostname (IP 地址 / 主机名)	指定 EASY-nLC 仪器的 IP 地址。该值必须与仪器所贮存的值匹配。 提示 若要检查仪器所贮存的 IP 地址和主机名, 按 EASY-nLC 触屏左上角的公司标志。
User Name (用户名)	指定用户名。 注释 用户在框中输入的用户名必须与用户登录至仪器的用户名匹配。用户名列在 EASY-nLC 触屏的左下角。有关登录至 EASY-nLC 仪器的信息, 参阅 <i>EASY-nLC 系列入门手册 (EASY-nLC Series Getting Started Guide)</i> 。
Test Connection (测试连接) 按钮	检测数据系统计算机与 EASY-nLC 仪器的以太网连接。若已建立连接, 按钮右边的状态框变绿并包含以下信息: Connection OK. (已连接。 此外, LC (液相色谱) 设备驱动程序和仪器信息出现在状态栏下面的框中。 重要信息 若出现以下信息, 按照第 4 页上的“从 VirusScan Enterprise 中排除 EASY-nLC”中的说明从 McAfee 病毒扫描软件中排除 Thermo EASY-nLC 软件: An established connection was aborted by the software in your host machine. (已建立连接被用户主机上的软件中止。) 联系本地 IT 管理员获得帮助。
LC Device Driver (LC 设备驱动程序) 及仪器信息	
LC Device Driver (LC 设备驱动程序)	显示 LC (液相色谱) 设备驱动程序的版本。
LC Instrument (液相色谱仪器)	显示仪器类型。
Driver Info (驱动程序信息)	显示仪器的触屏软件版本。
Serial Number (序列号)	显示列在仪器背面面板上的序列号。
Loop Volume (定量环体积)	显示 EASY-nLC 仪器贮存的用户指定的定量环体积。
Idle Flow Rate (闲置流速)	显示仪器在进样队列结束时所维持的用户指定的闲置流速。 输入 0 值停用该功能。 提示 长期维持发射器的稳定性 (含玻璃发射器) 可能需要整个系统有一个持续的溶剂流路。
Idle Mixture (闲置混合物)	显示仪器在进样队列结束时仪器向系统泵送的用户指定的溶剂组分 (%B)。
Column Setup (色谱柱设置)	显示用户指定的选项。显示 One Column (一根色谱柱) 或 Two Column (两根色谱柱)。

表 4. EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
IFC (智能流路控制)	显示是否启用了智能流路控制 (IFC™) 模式。IFC 模式是触屏软件 2.8 版上的一个用户可选的选项。
Max Pressure (最大压力)	显示最大系统压力。
Autosampler Configuration (自动进样器配置)	
使用该区域选择自动进样器的类型、样品板的类型、样品布局和起始样品瓶位置。	
Autosampler (自动进样器)	指定自动进样器的模式： <ul style="list-style-type: none">• ASC— 含冷藏室并附加 6 个样品瓶的自动进样器• ASA— 含冷却板但不附加 6 个样品瓶的自动进样器
Plate Installed (已安装的样品板)	指定欲使用的样品板类型：96 孔多孔板、384 孔多孔板或 6 × 8 样品瓶板。
Sample Layout (样品布局)	显示进样队列默认的样品布局 (样品瓶或微孔板位置)。
Start Position (起始位置)	显示进样队列默认的起始进样位置。
Edit (编辑) 按钮	打开 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框, 在此选择样品布局和 Xcalibur 队列的起始进样位置 (参阅第 15 页上的“设置样品布局和起始位置”)。
Solvents for LC Pump (LC 泵的溶剂)	
使用该区域介绍组成梯度的溶剂。	
A	指定溶剂瓶 A 中的溶剂。
B	指定溶剂瓶 B 中的溶剂。

设置样品布局和起始位置

当从 Thermo EASY-nLC Configuration (Thermo EASY-nLC 配置) 对话框中打开 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框时, Number of Samples to Select (选择的样品数) 框和 Select (选择) 按钮均不可用。

当设置 EASY-nLC 仪器的配置选项时, 采用 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框设置进样队列的样品布局和起始样品瓶位置或微孔板位置。

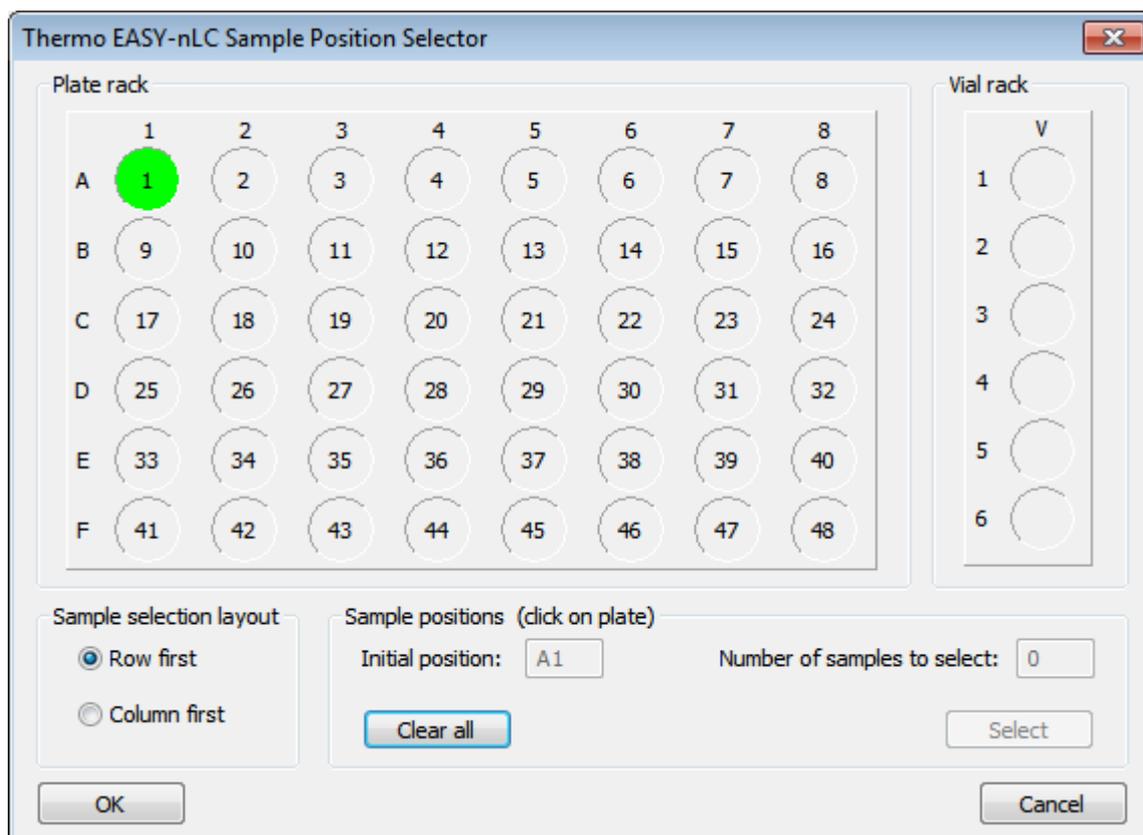
有关使用 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框交互选择进样队列的样品瓶或微孔板位置的信息, 参阅第 34 页上的“采用 Sample Position Selector (样品位置选择器) 设置进样位置”。

❖ 若要设置 Xcalibur 进样队列的样品布局和起始位置

1. 在 Autosampler Configuration (自动进样器配置) 区域, 点击 **Edit (编辑)**。

Thermo EASY-nLC Sample Position Selector (Thermo EASY-nLC 进样位置选择器) 对话框打开。Number of Samples to Select (选择的样品数) 框不可用 (参阅图 8)。

图 8. Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框



2. 在 Sample Positions (样品位置) 区域, 点击 **Clear All (清除全部)**。
3. 在 Plate Rack (样品板架) 区域, 点击一个位置以选择默认的起始进样位置。
4. 在 Sample Selection Layout (样品选择布局) 区域, 选择 **Row First (行优先)** 或 **Column First (列优先)** 选项。

5. 点击 **OK**（确定）以保存更改并退出 Thermo EASY-nLC Sample Position Selector（Thermo EASY-nLC 进样位置选择器）对话框。

注释 用户也可以通过点击 Xcalibur New Sequence Template（Xcalibur 新队列模板）对话框 Samples（样品）区域的 Select Vials（选择样品瓶）来打开 Thermo EASY-nLC Sample Position Selector（Thermo EASY-nLC 进样位置选择器）对话框（参阅第 31 页上的图 13）。

Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框参数

表 5 介绍了 Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框中的参数。当用户从 EASY-nLC Configuration（EASY-nLC 配置）对话框上访问该对话框时，仅 Sample Position Layout（样品位置布局）和 Initial Position（起始位置）参数可用。

表 5. Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框参数

参数	描述
Plate Rack（样品板架）	
	使用该区域选择或清除样品位置。
Vial Rack（样品瓶架）	
	对于配置 ASC 模式自动进样器的 EASY-nLC 仪器（EASY-nLC 1000 仪器的标配），用户可以从另外 6 个样品瓶中选择或清除一个样品位置。
	注释 附加的样品瓶位于支架 1 上并称为 1-V1 至 1-V6。
Sample Selection Layout（样品选择布局）	
Row First（行优先）	当选择 Row First（行优先）选项时，数据系统逐行填充队列表的样品位置。
Column First（列优先）	当选择 Column First（列优先）选项时，数据系统逐列填充队列表的样品位置。
	注释 当用户通过点击 Plate Rack（样品板架）和 Vial Rack（样品瓶架）区域的一组样品来选择样品瓶或多孔板位置时，队列编辑器忽略 Sample Selection Layout（样品选择布局）选项。
Sample Positions（样品位置，点击样品板）	
Initial Position（起始位置）	指定队列表中第一个样品瓶或微孔板的位置。
Number of Samples to Select（选择的样品数）	指定添加至队列表中的样品数以及起始样品瓶位置。
Clear All（清除全部）按钮	清除所有的 Plate Rack（样品板架）和 Vial Rack（样品瓶架）项和 Initial Position（起始位置）项。
Select（选择）按钮	按序选择 Number of Samples to Select（选择的样品数）框中指定数量的样品瓶或多孔板位置。已选样品瓶或多孔板在 Plate Rack（样品板架）和 Vial Rack（样品瓶架）区域以绿色高亮显示。样品瓶或多孔板根据样品选择布局选项按序排列。
对话框按钮	
OK（确定）	接受设置并关闭对话框。
Cancel（取消）	不接受任何更改，关闭对话框。

创建 Xcalibur 仪器方法

本章介绍了如何为 EASY-nLC 仪器设置仪器方法参数。

Xcalibur 仪器方法 (.meth) 包含 LC/MS (液质联用) 系统的色谱和数据采集参数。当创建新仪器方法时, 设置所有已配置仪器的参数。

目录

- 设置 EASY-nLC 仪器的方法参数
- 保存仪器方法

注释 有关设置质谱仪仪器方法参数的信息, 参阅质谱仪的 Help (帮助)。

设置 EASY-nLC 仪器的方法参数

采用 Xcalibur 数据系统的 Instrument Setup (仪器设置) 窗口创建 LC/MS (液质联用) 系统的仪器方法。若要创建仪器方法, 输入质谱仪的数据采集设置参数以及 LC (液相色谱) 系统的进样和色谱设置参数。

❖ 若要打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口

从 Xcalibur Home Page (Xcalibur 主页) 中, 进行以下其中一种操作:

- 选择 **GoTo (转至) > Instrument Setup (仪器设置)**。

– 或 –

- 点击 Home Page (主页) 的 Roadmap (导航图) 视图上的 **Instrument Setup (仪器设置)** 图标。

Instrument Setup (仪器设置) 窗口打开。视图栏中包括已配置设备的图标。

❖ 若要设置 EASY-nLC 的仪器方法参数

1. 在 Instrument Setup (仪器设置) 窗口的视图栏上点击 **Thermo EASY-nLC** 图标。

EASY-nLC 视图在 Instrument Setup (仪器设置) 窗口中打开, 显示 Sample Pickup and Loading (样品吸取和上样) 页面 (参阅图 9)。在视图的底部, Solvents (溶剂) 区域列出了仪器配置中指定的溶剂。若要更改流动相溶剂的名称, 参阅第 9 页上的“[设置 EASY-nLC 的配置](#)”。

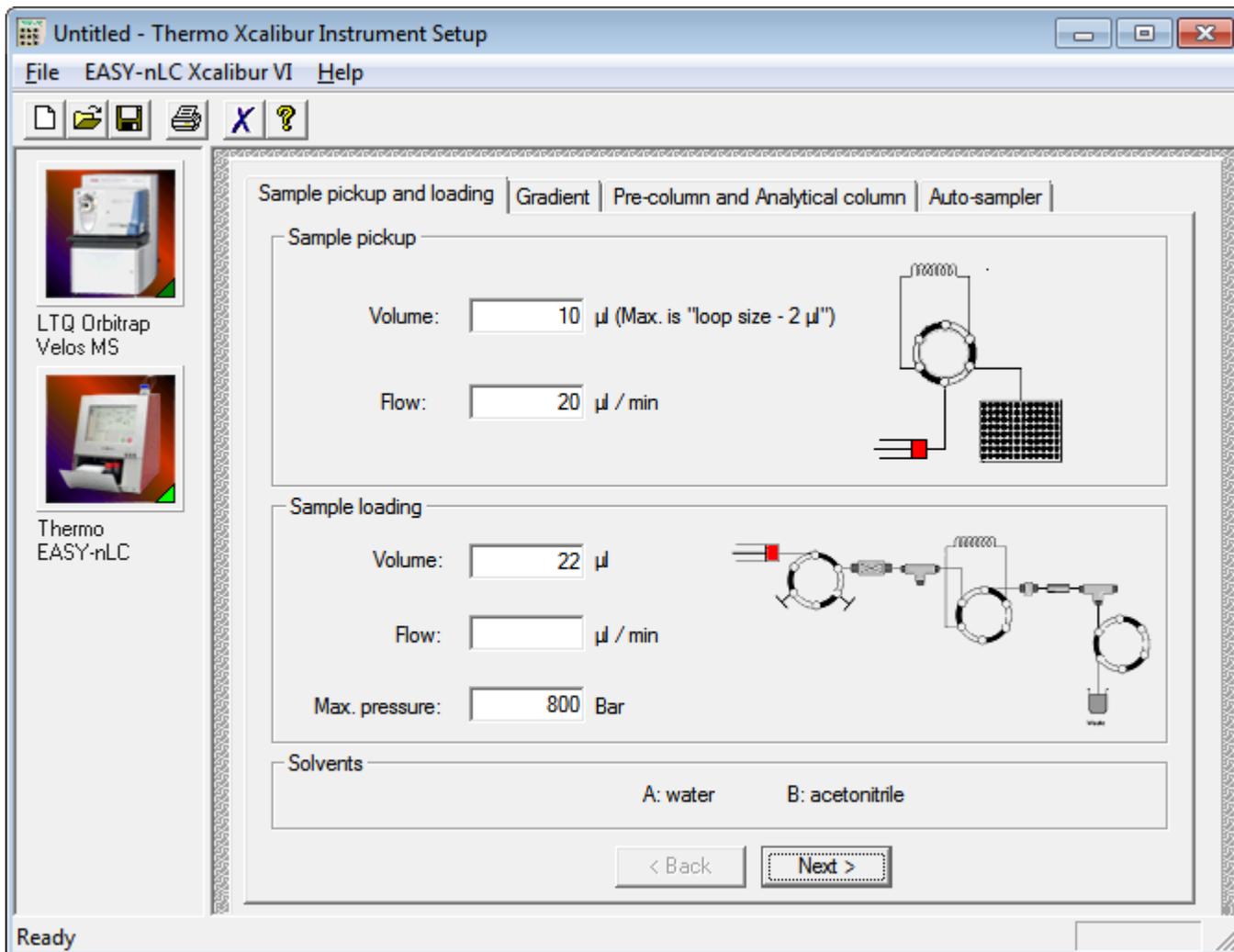
2. 为 EASY-nLC 仪器输入适合的仪器方法设置参数。点击 **Next (下一步)** 逐页打开 EASY-nLC 视图的余下三页。

3 创建 Xcalibur 仪器方法

设置 EASY-nLC 仪器的方法参数

图 9 显示了 EASY-nLC 视图的 Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面，该页面含 EASY-nLC 1000 仪器及一个水性基质样品的典型样品吸取和上样设置。

图 9. Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图



有关 EASY-nLC 视图的页面相关信息，参阅以下标题：

- 第 19 页上的“Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面”
- 第 20 页上的“Gradient（梯度）页面”
- 第 23 页上的“Pre-Column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面”
- 第 25 页上的“Auto-Sampler（自动进样器）页面”

Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面

采用 Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面指定以下内容：

- 自动进样器从 Xcalibur 进样队列中的样品瓶或微孔板中吸取的样品体积（进样体积），以及自动进样器将样品吸入样品定量环的流速。
- 泵 A 用于将样品从样品定量环中冲出并推送至色谱柱所使用的溶剂体积，以及样品上样步骤的流速和最大压力。

❖ 若要打开 Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面

1. 打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图。
2. 若 Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面未显示，点击 **Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）** 选项卡。

Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面参数

表 6 介绍了 Instrument Setup（仪器设置）窗口上 EASY-nLC 视图的 Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面上的参数。

表 6. Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Sample Pickup（样品吸取）	
Volume (μL) (体积, μL)	指定自动进样器从 Xcalibur 队列中指定的样品瓶或微孔板位置中吸取的样品体积。 最大体积 = 样品定量环体积 - 2 μL Home（主页）> Overview（概况）页面（触屏）上的图形显示了样品定量环的规格。
Flow (μL/min) (流速, μL/min)	指定泵 S 将样品吸取至样品定量环的流速。 范围：0 至 40 μL/min。当样品吸取体积大于 0 时，流速必须大于 0。 提示 对于水性样品基质，将流速设置为 20 μL/min。
Sample Loading（上样）	
Volume (μL) (体积, μL)	指定仪器用于将样品冲出样品定量环并推送至预柱（两根-色谱柱设置）或分析柱（一根-色谱柱设置）的溶剂 A 的体积。 一般，样品吸取体积的两倍加上 2 μL 就足够了。 范围：0 到 137 μL 重要信息 最大允许输入量是 137 μL；但是，对于 Xcalibur 队列的运行，上样体积加预柱平衡体积，再加上分析柱平衡体积的总和必须小于 120 μL。 参阅第 38 页上的“为运行时间错误采取纠正措施”。
Flow (μL/min) (流速, μL/min)	指定泵 A 运输溶剂 A 通过仪器将样品冲出定量环并推送至预柱或分析柱的流速。 若 Flow（流速）框为空白，则仪器在设定的压力下运行。 范围：0 至 100 μL/min

表 6. Sample Pickup and Loading（样品吸取和上样）页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Max Pressure (bar) (最大压力, bar)	指定上样步骤的最大压力。 若 Max Pressure（最大压力）框为空白，则仪器在设定的流速下运行。 EASY-nLC II 范围：0 至 280 bar EASY-nLC 1000 范围：0 至 980 bar

提示 若 Max Pressure（最大压力）框和 Flow（流速）框中均为空白，则仪器在最大仪器压力下运行。若用户想要仪器在尽可能大的流速下运行（最大仪器压力限值允许的流速下），将这些框留为空白。

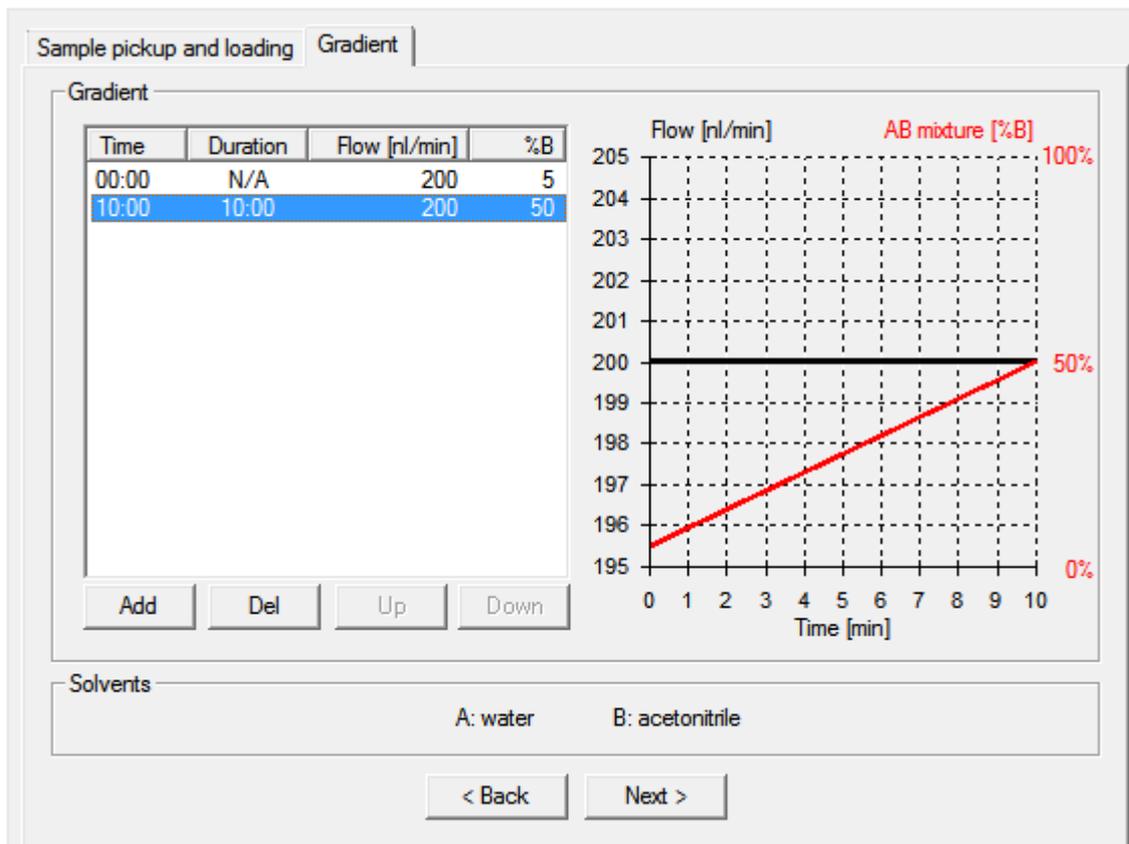
Gradient（梯度）页面

通过 Gradient（梯度）页面设置梯度程序（参阅图 10）。

❖ 若要打开 Gradient（梯度）页面

1. 打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图。
2. 点击 **Gradient（梯度）** 选项卡。若用户没有看到 Gradient（梯度）选项卡，点击 **Next（下一步）**。

图 10. Gradient（梯度）页面



❖ 若要设置梯度程序

1. 在 Time = 0.00 (时间 = 0.00) 行, 执行以下操作:
 - 在 Flow (nL/min) (流速, nL/min) 列, 输入一个 **1** 至 **2000** 的值。
 - 在 %B (溶剂 B 的百分比) 列, 输入一个 **0** 至 **100** 的值。
2. 若要添加其他时间点 (表格行), 点击 **Add (添加)**。
3. 在梯度表的 2 行或更多行中, 执行以下操作:
 - a. 在 Duration (持续时间) 列, 输入一个 **0.01** 至 **9999.49** 的值。

Duration (持续时间) 列中的值是指用户想要仪器达到指定流速和 %B (溶剂 B 的百分比) 条件所用的时间。当用户在 Duration (持续时间) 列中输入一个值时, Time (时间) 列中的值更改为当前的 Duration (持续时间) 值加上前一行中的值。
 - b. 在 Flow (nL/min) (流速, nL/min) 列, 输入一个 **1** 至 **2000** 的值。
 - c. 在 %B (溶剂 B 的百分比) 列中, 输入一个 **0** 至 **100** 的值。

各时间点之间的流速和 %B (溶剂 B 的百分比) 组分均呈线性变化。
4. 按照以下步骤编辑表格:
 - 若要删除一行, 选中该行并点击 **Del (删除)**。
 - 若要对行进行重新排序 (如适用), 选中该行并点击 **Up (上移)** 或 **Down (下移)**。

Gradient（梯度）页面参数

表 7 介绍了 Instrument Setup（仪器设置）窗口上 EASY-nLC 视图的 Gradient（梯度）页面上的参数。

表 7. Gradient（梯度）页面参数

参数	描述
表	
Time（时间）	指定仪器达到流速列和 %B（溶剂 B 的百分比）列中指定条件所需的运行时间。
Duration （持续时间）	指定前一个时间点和当前时间点之间的时间间隔。 范围：0.01 至 9999.59 分钟
Flow (nL/min) （流速， nL/min）	指定当前时间点的流动相流速。 范围：1 到 2000 nL/min
%B （溶剂 B 的百分比）	指定当前时间点时，溶剂 B 在流动相组分中的百分比。
按钮	
Add（添加）	为梯度程序添加一行。
Del（删除）	从梯度程序中删除已选行。
Up（上移）	将已选行上移。
Down（下移）	将已选行下移。
图	
Flow (nL/min) （流速， nL/min）	图左侧的 y 轴显示了流速刻度。 黑线代表流速随时间发生的变化。
AB mixture (%B) （AB 混合物， %B）	图右侧的 y 轴显示了溶剂 B 的百分比。 红线代表 %B 随时间发生的变化。
Time (min) （时间， min）	x 轴显示了梯度程序的运行时间。

Pre-Column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面

通过 Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面设置柱平衡步骤（参阅图 11）。

❖ 若要打开 Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面

1. 打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图。
2. 点击 **Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）** 选项卡。若用户没有看到 Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）选项卡，点击 **Next（下一步）**。

图 11. Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面

The screenshot shows the 'Pre-column and Analytical column' tab selected in the software interface. It contains three main sections: 'Pre-column equilibration', 'Analytical column equilibration', and 'Solvents'. Each section includes input fields for Volume, Flow, and Max. pressure, along with a schematic diagram of the chromatography system. The 'Pre-column equilibration' section has Volume: 4 µl, Flow: (empty), and Max. pressure: 800.00 Bar. The 'Analytical column equilibration' section has Volume: 12 µl, Flow: (empty), and Max. pressure: 800 Bar. The 'Solvents' section shows A: water and B: acetonitrile. At the bottom, there are '< Back' and 'Next >' buttons.

Section	Volume	Flow	Max. pressure
Pre-column equilibration	4 µl		800.00 Bar
Analytical column equilibration	12 µl		800 Bar

Solvents: A: water, B: acetonitrile

Navigation: < Back, Next >

Pre-Column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面参数

表 8 介绍了 Instrument Setup（仪器设置）窗口上 EASY-nLC 视图的 Pre-column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面上的参数。

注释 有关决定预柱和分析柱平衡步骤中适当流速的相关信息，参阅 *EASY-nLC 系列入门手册*（*EASY-nLC Series Getting Started Guide*）。

表 8. Pre-Column and Analytical Column（预柱和分析柱）页面参数

参数	描述
Pre-column Equilibration（预柱平衡）	
Volume (μL) (体积, μL)	指定了预柱平衡步骤过程中，泵 A 运输溶剂 A 通过预柱至废液所需的溶剂体积。 范围：0 至 137 μL 重要信息 最大允许输入量是 137 μL；但是，对于 Xcalibur 队列的运行，上样体积加预柱平衡体积，再加上分析柱平衡体积的总和必须小于 120 μL。
Flow (μL/min) (流速, μL/min)	指定预柱平衡步骤的流速。若 Flow（流速）框为空白，则仪器在设定的压力下运行。 范围：0 至 100 μL/min
Max Pressure (bar) (最大压力, bar)	指定预柱平衡步骤的最大压力。若 Max Pressure（最大压力）框为空白，则仪器在设定的流速下运行。 EASY-nLC II 范围：0 至 280 bar EASY-nLC 1000 范围：0 至 980 bar
提示 若 Max Pressure（最大压力）框和 Flow（流速）框中均为空白，则仪器在最大仪器压力下运行。若用户想要仪器在尽可能大的流速下运行（最大仪器压力限值允许的流速下），将这些框留为空白。	
Analytical Column Equilibration（分析柱平衡）	
Volume (μL) (体积, μL)	指定了分析柱平衡步骤中，泵 A 运输溶剂 A 通过分析柱所需的溶剂体积。 范围：0 至 137 μL 重要信息 最大允许输入量是 137 μL；但是，对于 Xcalibur 队列的运行，上样体积加预柱平衡体积，再加上分析柱平衡体积的总和必须小于 120 μL。 参阅第 38 页上的“为运行时间错误采取纠正措施”。
Flow (μL/min) (流速, μL/min)	指定分析柱平衡步骤的流速。若 Flow（流速）框为空白，则仪器在设定的压力下运行。 范围：0 至 3 μL/min
Max Pressure (bar) (最大压力, bar)	指定分析柱平衡步骤的最大压力。 EASY-nLC II 范围：0 至 280 bar EASY-nLC 1000 范围：0 至 980 bar
注释 若 Max Pressure（最大压力）框和 Flow（流速）框中均为空白，则仪器在最大仪器压力下运行。若用户想要仪器在尽可能大的流速下运行（最大仪器压力限值允许的流速下），将这些框留为空白。	

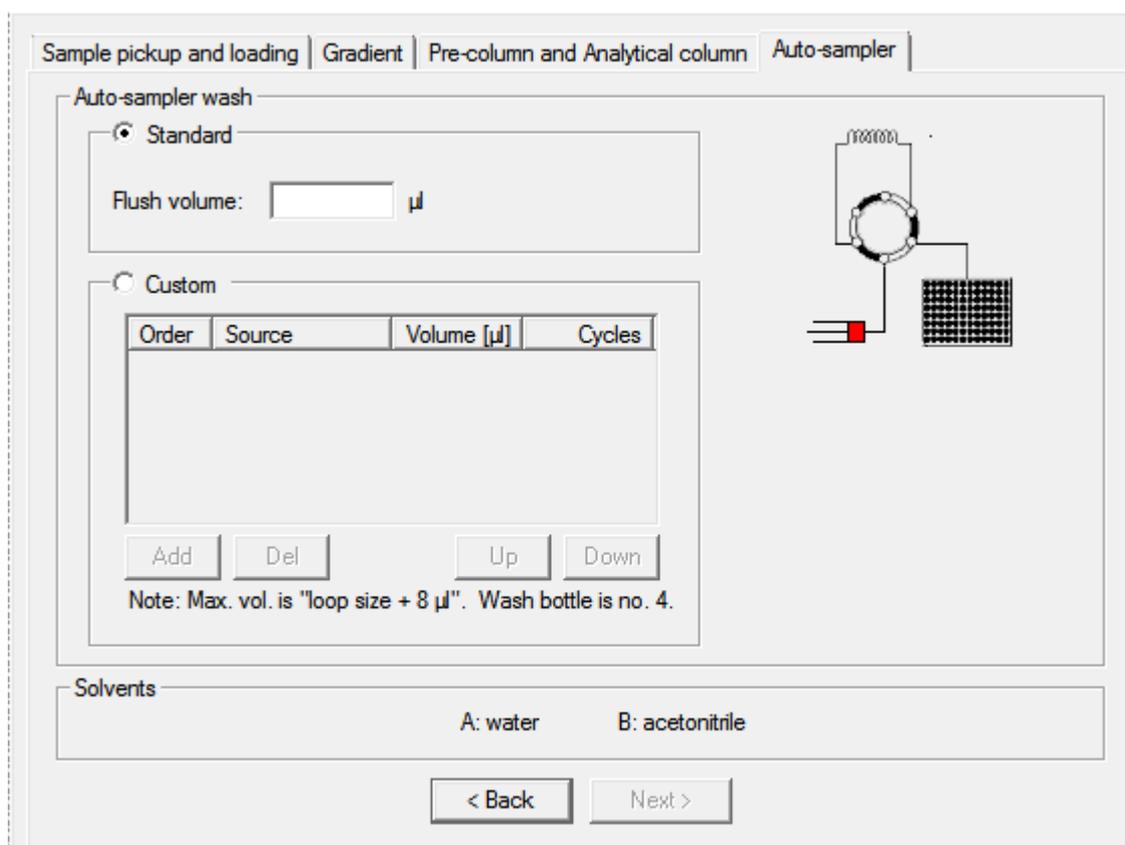
Auto-Sampler（自动进样器）页面

通过 Auto-sampler（自动进样器）页面设置针和样品定量环的清洗步骤（参阅图 12）。

❖ 若要打开 Auto-sampler（自动进样器）页面

1. 打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口的 EASY-nLC 视图。
2. 点击 **Auto-sampler（自动进样器）** 选项卡。若用户没有看到 Auto-sampler（自动进样器）选项卡，点击 **Next（下一步）**。

图 12. Auto-sampler（自动进样器）页面



❖ 若要设置自动进样器标准清洗步骤

1. 选择 **Standard（标准）** 选项。
2. 在 Flush Volume (µL)（冲洗体积，µL）框中，输入自动进样器用于洗针和样品定量环的溶剂 A（在洗瓶 3 中）的体积。

该范围取决于样品定量环的规格（参阅第 26 页上的表 9）。

❖ 若要设置自定义清洗程序

1. 选择 **Custom（自定义）** 选项。
自定义清洗表格变为可用。
2. 点击 **Add（添加）**，以添加欲添加至程序中的每一行。
每行可以选择不同的清洗溶剂。

3. 按照如下步骤编辑每一行：

- 在 Source（清洗源）列中，选择清洗溶剂的来源：**Bottle 1（瓶 1）**、**Bottle 2（瓶 2）** 或 **Bottle 3（瓶 3）**。

重要信息 EASY-nLC 托盘室最多可容纳四个洗瓶：

- 位置 W1 和 W2 上的瓶 1 和瓶 2 可以容纳自定义清洗溶剂。
- 位置 W3 上的瓶 3 必须容纳溶剂 A。
- 位置 W4 上的瓶 4 必须包括进样针清洗插件。

在一个自定义清洗程序过程中，自动进样器执行以下操作：

- 清空泵 S 中的内容物，放入洗针瓶（W4）中。
- 执行自定义清洗程序中的步骤。每次循环中，自动进样器从指定瓶中吸取溶剂，然后将溶剂喷入洗针瓶（W4）中。
- 执行最后一个清洗循环，采用瓶 3（W3）中预设体积的溶剂 A 执行。
- 采用瓶 3（W3）中的溶剂 A 重新注满泵 S，以备用于下次进样。

- 在 Volume (μL)（体积，μL）列中输入一个值，该数值为 **0** 至 *样品定量环规格* 之间的一个值加上 8 μL。

若用户输入的体积高于 58 μL，会出现一个 Invalid Method Parameter（无效的方法参数）信息框，程序将体积重新设置为最大允许值。

- 在 Cycles（循环）列中，输入一个 **0** 至 **10** 的值。

Auto-sampler（自动进样器）页面参数

表 9 介绍了 Instrument Setup（仪器设置）窗口上 EASY-nLC 视图的 Auto-sampler（自动进样器）页面上的参数。

表 9. Auto-sampler（自动进样器）页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Standard（标准）	
Standard（标准）选项	选中该选项以启用标准清洗选项。
Flush Volume (μL) (冲洗体积, μL)	指定泵 S 冲洗样品定量环所用的冲洗体积。 20 μL 样品定量环的范围为：30.25 至 100.75 μL 50 μL 样品定量环的范围为：60.26 至 70.75 μL
Custom（自定义）	
Custom (自定义) 选项	选中该选项以启用自定义清洗程序。 在一个自定义清洗程序过程中，有关自动进样器所执行步骤的信息，参阅第 25 页上的“若要设置自定义清洗程序”。

表 9. Auto-sampler（自动进样器）页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
自定义清洗表格列	
Order（顺序）	指定自定义清洗步骤的顺序。
Source（清洗源）	指定当前清洗步骤中清洗溶剂的来源。 选项：Bottle 1（瓶 1）、Bottle 2（瓶 2）或 Bottle 3（瓶 3） 注释 Bottle 1（瓶 1）和 Bottle 2（瓶 2）中含自定义清洗溶剂。Bottle 3（瓶 3）中含溶剂 A。
Volume (μL) (体积, μL)	指定每个清洗循环中的清洗溶剂体积。 运行时的最大允许体积： <i>样品定量环规格</i> 加上 8 μL。 注释 EASY-nLC 仪器的 Xcalibur 方法编辑器不知道已配置的样品定量环规格。当用户提交一个含仪器方法的队列时，Xcalibur 采集服务会根据已配置的样品定量环规格验证自定义清洗所用的体积。若要避免将溶剂吸入泵 S，该程序将体积限制为 <i>样品定量环规格</i> 加 8 μL 有关在触屏软件的 Maintenance（维护）> Devices（设备）页面上更改样品定量环规格的相关信息，参阅第 11 页上的“若要更改定量环体积、色谱柱设置、闲置混合物或闲置流速”。
Cycles（循环）	指定清洗步骤中清洗循环的次数。 范围：1 至 10 注释 对于每次循环，自动进样器吸取指定来源、指定体积的清洗溶剂进入进样针，然后将清洗溶剂排放到洗瓶 4（W4）。
按钮	
Add（添加）	为清洗程序添加一行。
Del（删除）	从清洗程序中删除已选行。
Up（上移）	将已选行上移。
Down（下移）	将已选行下移。

保存仪器方法

用户设置 LC/MS（液质联用）系统的仪器方法参数后，将该仪器方法保存至适当的目录中。

❖ 若要保存当前仪器方法

1. 选择 **File（文件） > Save As（另存为）**。

Save As（另存为）对话框打开。

2. 在 File Name（文件名）框内，输入新仪器方法的名称。
3. 点击 **Save（保存）**。

File Summary Information（文件总结信息）对话框打开。

4. 点击 **OK（确定）**。

创建和运行队列

本章描述了如何在 Xcalibur Sequence Setup（Xcalibur 队列设置）视图中创建和运行队列。

目录

- 创建队列
- 采用 Sample Position Selector（样品位置选择器）设置进样位置
- 运行队列
- 为运行时间错误采取纠正措施

创建队列

在 Xcalibur 数据系统中，包含样品进样信息的表格被称为队列。除每次进样的数据文件名外，队列还必须包含样品组中样品的样品瓶或微孔板位置（未知样、校准标样、质控标样等）、欲使用的仪器方法和进样体积。用户可以为每次进样指定不同的仪器方法。

提示 用户无法在 Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）的 Sequence Setup（队列设置）视图中更改 EASY-nLC 仪器的 Tray Type（托盘类型）。若从菜单栏中选择 **Change（更改） > Tray Name（托盘名称）**，出现以下 Home Page（主页）信息：

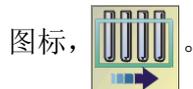
The configured autosampler does not offer any selection of trays.（已配置的自动进样器没有提供任何托盘选项。）

若要更改 Tray Type（托盘类型），关闭 Xcalibur 数据系统。然后，打开第 9 页上的“[设置 EASY-nLC 的配置](#)”中所介绍的 EASY-nLC Configuration（EASY-nLC 配置）对话框并选择适合的托盘类型。

❖ 若要在 Xcalibur 数据系统中创建队列

1. 执行以下其中一种操作打开 Home Page – Sequence Setup（主页 - 队列设置）视图：

- 从 Home Page – Roadmap（主页 - 导航图）视图上点击 **Sequence Setup（队列设置）**



- 从任意 Home Page（主页）视图上选择 **View（视图） > Sequence Setup View（队列设置视图）**。
- 从 Instrument Setup（仪器设置）窗口上点击 **Home Page（主页）** 图标，，然后选择 **View（视图） > Sequence Setup View（队列设置视图）**。

2. 若要打开 New Sequence Template（新队列模板）对话框，执行下列操作之一：

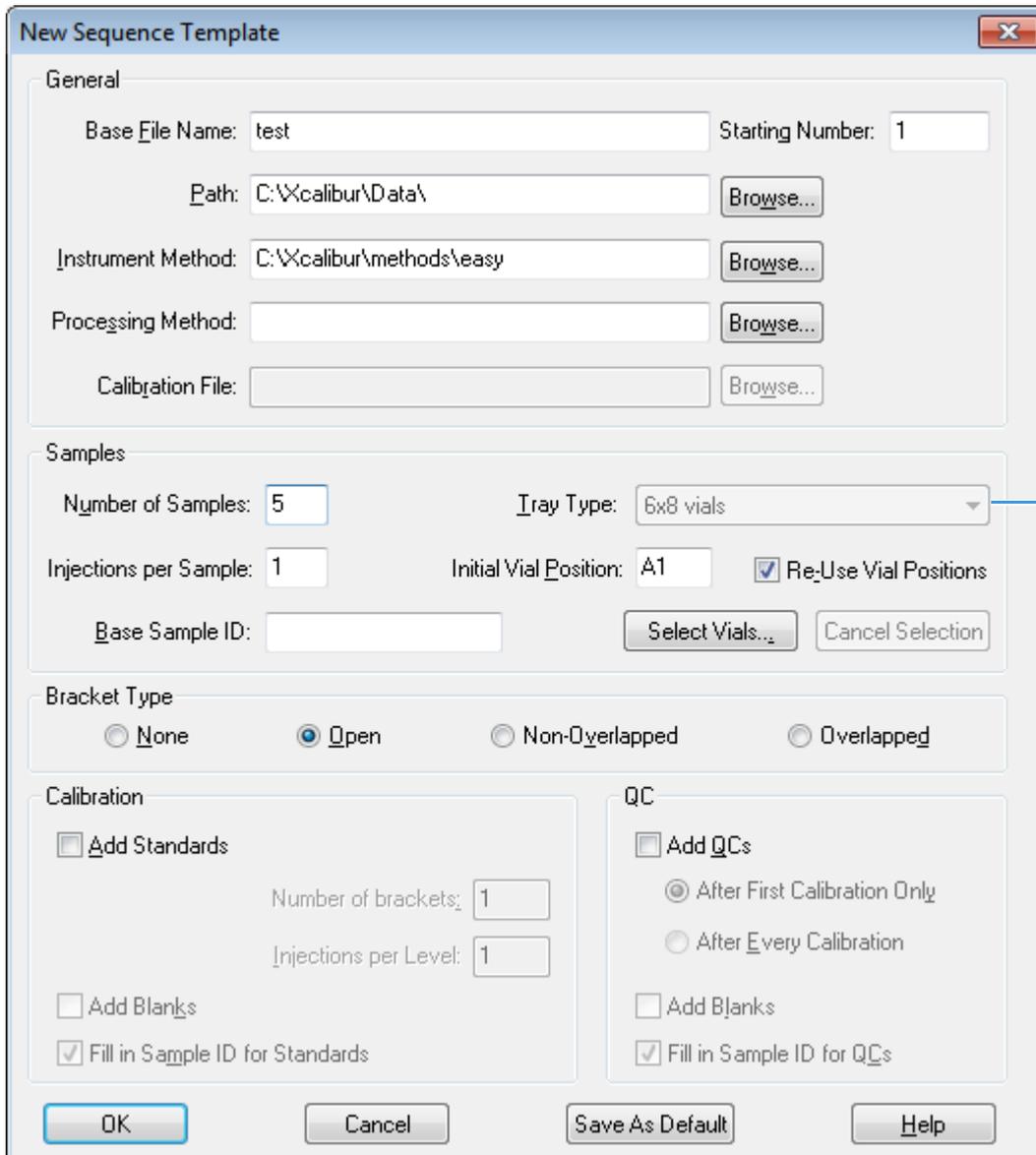
- 选择 **File（文件） > New（新建）**。

– 或 –

- 点击工具栏上的 **New Sequence（新队列）** 图标，。

New Sequence Template（新队列模板）对话框打开（参阅图 13）。

图 13. New Sequence Template（新队列模板）对话框



对于 EASY-nLC 仪器，用户无法更改 Sequence Setup（队列设置）视图中的托盘类型。Tray Type（托盘类型）是只读参数。

3. 在 General（常规）区域中，执行以下操作：

- 输入数据文件的基本文件名。
- 输入数据系统附加在基本文件名后面的起始编号。
- 浏览以在 Path（路径）框中选择数据文件的目录位置。
- 浏览以在 Instrument Method（仪器方法）框中选择仪器方法。

4. 执行以下其中一种操作以设置样品瓶或微孔板的位置：

- 若要使用 New Sequence Template（新队列模板）对话框 Samples（样品）区域的文本框，转至步骤 5。

– 或 –

- 若要使用 Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框，转至第 34 页上的“采用 Sample Position Selector（样品位置选择器）设置进样位置”。

提示 用户可以采用三种方式设置队列的进样位置：

- 在 New Template Sequence（新模板队列）对话框的 Samples（样品）区域，在 Number of Samples（样品数）框中输入样品数，在 Initial Vial Position（起始样品瓶位置）框中输入起始样品瓶位置。
- 在 Sample Position Selector（进样位置选择器）对话框中，执行下列操作之一：
 - 在 Number of Samples to Select（选择的样品数）框中输入样品数，然后单击 **Select（选择）**（参阅第 34 页上的图 15）。
 - 单击 Plate Rack（样品板架）和 Vial Rack（样品瓶架）区域的位置。使用该方法设置非连续、非队列或非连续且非队列的位置。

5. 按照以下方法采用 New Sequence Template（新队列模板）的 Samples（样品）区域设置样品瓶或微孔板的位置：

- 在 Number of Samples（样品数）框中，输入进样队列的样品数。
- 在 Injections per Sample（每个样品的进样次数）框中，输入用户采用自动进样器进样每个样品的次数。
- 若要重复进样，执行以下操作：
 - 若用户想要采用自动进样器从同一个样品瓶或微孔板上重复进样，选中 **Re-Use Vial Positions（重新使用样品瓶位置）** 复选框。确保样品瓶或微孔板中含有足够的样品体积。
 - 若用户想要采用自动进样器从不同的样品瓶或微孔板上重复进样，清除 **Re-Use Vial Positions（重新使用样品瓶位置）** 复选框。使自动进样器载入足够数量的重复样品。
- 在 Initial Vial Position（起始样品瓶位置）框中，输入第一个进样的样品瓶位置。对于字母与数字组合的条目，采用大写字母（参阅第 38 页上的“为运行时间错误采取纠正措施”）。

注释 队列编辑器根据在 Foundation Instrument Configuration（Foundation 仪器配置）窗口中选取的起始位置、样品数、重复进样的次数以及样品选择布局选项，采用连续的样品瓶或微孔板位置填充队列表格的 Positions（位置）列。

- 选择仪器配置应用程序上的 Row First（行优先）选项会立即提示队列编辑器逐行填充样品瓶位置（例如，A1–A8、B1–B8 等）。
- 选择仪器配置应用程序上的 Column First（列优先）选项会立即提示队列编辑器逐列填充样品瓶位置（例如，A1–F1、A2–B2 等）。
- 清除 Re-Use Vials（重新使用样品瓶）复选框会立即提示队列编辑器输入每次重复进样的其他样品瓶或微孔板位置。

6. 若要设置 New Sequence Template（新队列模板）对话框中的其余参数，参阅 Sequence Setup（队列设置）视图中的 Help（帮助）。

7. 点击 **OK (确定)** 以创建样品队列。

队列信息出现在 Sequence Setup (队列设置) 视图中 (参阅图 14)。

图 14. Xcalibur Home Page (Xcalibur 主页) 上的 Sequence Setup (队列设置) 视图

	File Name	Path	Inst Meth	Position	Inj Vol
1	AssayC1	C:\Xcalibur\Data\	D:\Xcalibur\methods\Protein Assay	A1	-1.0
2	AssayC2	C:\Xcalibur\Data\	D:\Xcalibur\methods\Protein Assay	A2	-1.0
3	AssayC3	C:\Xcalibur\Data\	D:\Xcalibur\methods\Protein Assay	A3	-1.0
4	AssayC4	C:\Xcalibur\Data\	D:\Xcalibur\methods\Protein Assay	A4	-1.0
*					0.0

当 Inj Vol (进样体积) 列列出的值为 -1 时, 仪器采用仪器方法中指定的 Sample Pickup (样品吸取) 体积。

8. 检查以下内容:

- Position (位置) 列中的样品瓶或微孔板值。确保条目有效且使用大写字母。
- Inj Vol (进样体积) 列中的数值。当该值为 -1 时, 数据系统采用仪器方法中指定的样品吸取体积。

重要信息 队列表格中包含一个名为 Inj Vol (进样体积) 的列。若该列未出现, 选择 **Change (更改) > Column Arrangement (列布置)** 并将 Inj Vol (进样体积) 列添加至已显示列中。

若要确保按照规定使用仪器方法中指定的进样体积, Inj Vol (进样体积) 列中的默认值设置为 -1, 该值为无效进样体积。当 Xcalibur 数据系统在运行期间检测到无效值时, 其会自动从相应的仪器方法文件中提取实际进样体积, 以正确的值取代 -1 值。

运行期间, 自动进样器吸取指定的进样体积 (Sample Pickup [样品吸取] 体积) 至样品定量环。然后, 系统将指定上样量的样品从定量环冲洗至 LC (液相色谱) 色谱柱。指定的上样体积不足会导致空白进样或进样重现性差, 因为系统未上样或仅将部分样品上样至 LC (液相色谱) 色谱柱。

在队列的 Inj Vol (进样体积) 列中指定不同的值来更改样品吸取体积, 不会更改仪器方法中指定的样品上样体积。若要防止不匹配的设置, 避免使用 Inj Vol (进样体积) 列更改进样体积。而是创建不同的仪器方法, 其中每种仪器方法包含样品上样与样品吸取体积相匹配的设置 (参阅第 19 页上的“[Sample Pickup and Loading \(样品吸取和上样\) 页面参数](#)”)。用户可以为每个队列行使用不同的仪器方法。

采用 Sample Position Selector (样品位置选择器) 设置进样位置

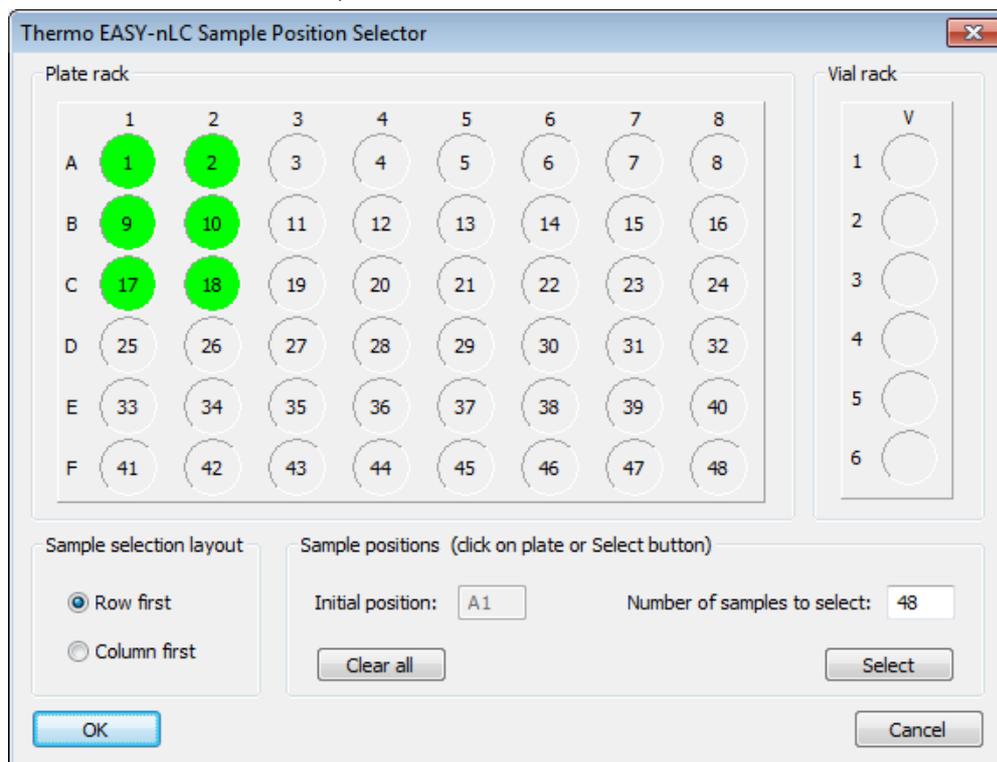
有关 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框中参数的信息, 参阅第 16 页上的表 5。Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框上的功能取决于用户从哪里访问该对话框:

- 当用户从 Thermo Foundation > Instrument Configuration (仪器配置) 窗口的 EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框中打开 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框时, 采用该对话框设置进样队列的样品布局和起始样品瓶或微孔板的位置 (参阅第 15 页上的“设置样品布局和起始位置”)。
 - 当用户从 Xcalibur Sequence Setup (Xcalibur 队列设置) 视图的 New Sequence Template (新队列模板) 对话框中打开 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框时, 按照以下程序中的介绍通过该对话框交互设置进样队列的样品瓶或微孔板位置。
- ❖ **若要打开 New Sequence Template (新队列模板) 对话框中的 Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框并设置样品位置**

1. 点击 Samples Area (样品区域) 上的 **Select Vials (选择样品瓶)** (参阅第 31 页上的图 13)。

Thermo EASY-nLC Sample Position Selector (Thermo EASY-nLC 进样位置选择器) 对话框打开 (参阅图 15)。6 × 8 样品瓶托盘的行标记为 A–F, 列标记为 1–8。Vial Rack (样品瓶架) 区域的其他六个样品瓶编号为 1-V1 至 1-V6。

图 15. Thermo EASY-nLC Sample Position Selector (Thermo EASY nLC 进样位置选择器) 对话框



2. 遵循以下其中一种程序:

- 若要通过 Plate Rack (样品板架) 和 Vial Rack (样品瓶架) 区域选择样品瓶或微孔板
- 若要采用 Select (选择) 按钮按序选择连续的样品瓶或微孔板

3. 若要设置 New Sequence Template (新队列模板) 对话框中的其余参数, 参阅 Sequence Setup (队列设置) 视图中的 Help (帮助)。

4. 点击 **OK (确定)** 以创建样品队列。

队列信息出现在 Xcalibur Home Page (Xcalibur 主页) 上的 Sequence Setup (队列设置) 视图中 (参阅第 33 页上的图 14)。

❖ 若要通过 Plate Rack (样品板架) 和 Vial Rack (样品瓶架) 区域选择样品瓶或微孔板

1. 在 Sample Positions (样品位置, 点击样品板或 Select [选择] 按钮) 区域, 点击 **Clear All (清除所有)**。

这样就清除了 Initial Position (起始位置) 框及所有 Plate Rack (样品板架) 和 Vial Rack (样品瓶架) 上的任意已选位置。

2. 按照用户想要进样的顺序点击 Plate Rack (样品板架) 和 Vial Rack (样品瓶架) 区域的位置, 以按序或非按序的方式选择连续或非连续的样品瓶或微孔板。

点击一个位置使其呈绿色显示。用户点击的第一个位置成为队列表格中的起始位置。队列编辑器忽略 Sample Selection Layout (样品选择布局) 区域的已选选项并按照用户选择的顺序填充其余各行。

3. 点击 **OK (确定)** 以返回至 New Sequence Template (新队列模板) 对话框。

❖ 若要采用 Select (选择) 按钮按序选择连续的样品瓶或微孔板

1. 在 Sample Positions (样品位置, 点击样品板或 Select [选择] 按钮) 区域, 点击 **Clear All (清除所有)**。

这样就清除了 Initial Position (起始位置) 框及所有 Plate Rack (样品板架) 和 Vial Rack (样品瓶架) 上的任意已选位置。

2. 在 Sample Selection Layout (样品选择布局) 区域, 选择 **Row First (行优先)** 或 **Column First (列优先)** 选项。

3. 在 Number of Samples to Select (选择的样品数) 框中, 输入样品瓶或微孔板的数量。

4. 点击 **Select (选择)**。

Plate Rack (样品板架) 区域将已选位置显示为绿色。

5. 点击 **OK (确定)** 以返回至 New Sequence Template (新队列模板) 对话框。

运行队列

用户采用适合的数据文件名、仪器方法和进样位置创建一个队列后，可以从 Sequence Setup（队列设置）视图上运行队列的一行或多行。

❖ 若要运行单个样品、一定范围的样品或整个队列组

1. 在 Sequence Setup（队列设置）视图中，执行下列操作之一：

- 若要进样单个样品，选中队列表格中的指定行。然后，选择 **Actions（操作） > Run This Sample（运行该样品）**，或者点击 Sequence Editor（队列编辑器）工具栏上的 **Run Sample（运行样品）** 图标，。
- 若要进样一定范围的样品，选中队列表格中用户想要进样的样品。然后，选择 **Actions（操作） > Run Sequence（运行队列）**，或者点击 Sequence Editor（队列编辑器）工具栏上的 **Run Sequence（运行队列）** 图标，。

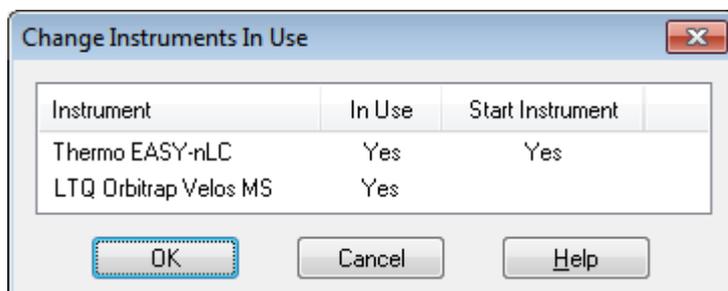
– 或 –

- 若要进样整个队列，选择 **Actions（操作） > Run Sequence（运行队列）**，或者点击 Sequence Editor（队列编辑器）工具栏上的 **Run Sequence（运行队列）** 图标，。

执行下列操作之一：

- 若数据系统检测到新的仪器配置，Change Instruments In Use（更改使用的仪器）对话框打开（参阅图 16）。转至步骤 2。
- 若自上次队列运行以来，仪器配置没有变化，Run Sequence（运行队列）对话框打开（参阅图 17）。转至步骤 3。

图 16. Change Instruments In Use（更改使用的仪器）对话框

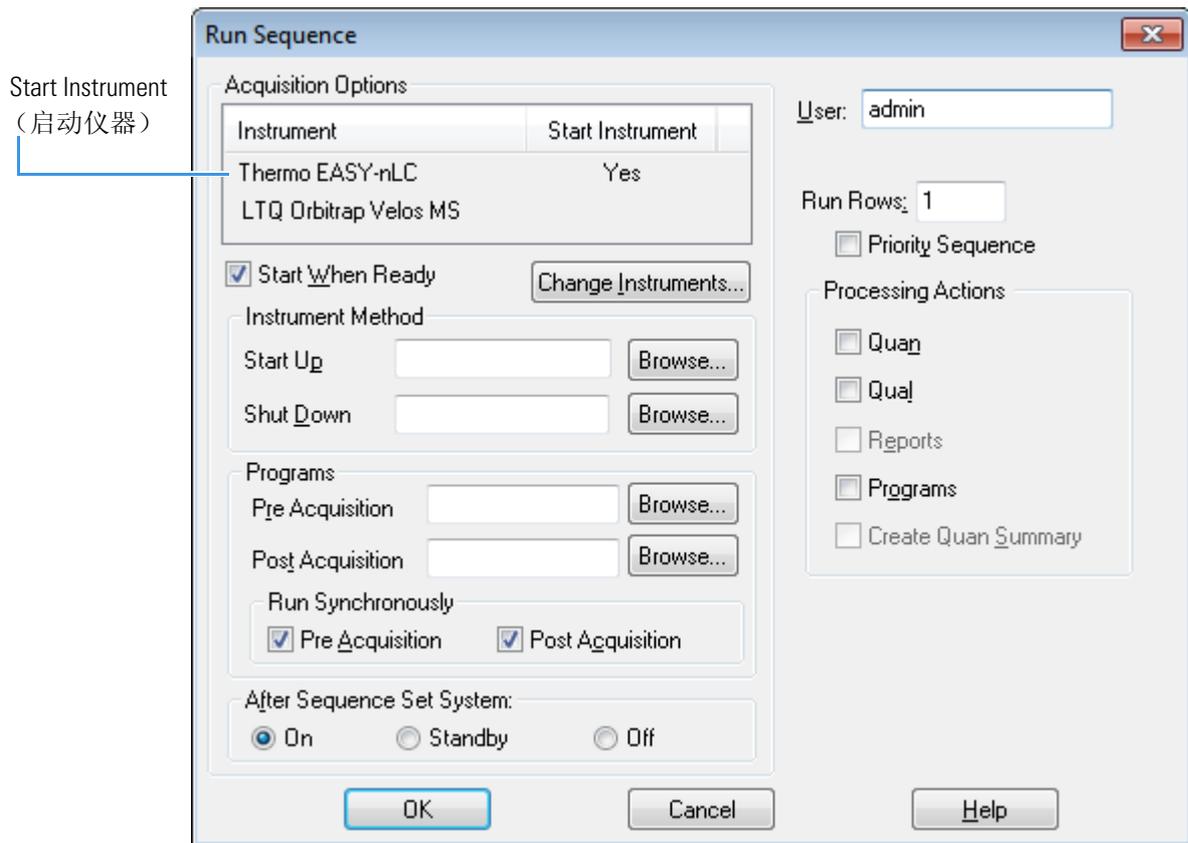


2. 若 Change Instruments In Use（更改使用的仪器）对话框打开，执行以下其中一种操作：

- 若 EASY-nLC 仪器没有被列为 Start Instrument（启动仪器），点击 Start Instrument（启动仪器）列中的 EASY-nLC 行并选择 **Yes（是）**。然后，点击 **OK（确定）** 以接受新设置并关闭对话框。
- 若 EASY-nLC 仪器被列为 Start Instrument（启动仪器），点击 **OK（确定）** 以关闭该对话框。

Run Sequence（运行队列）对话框打开（参阅图 17）。

图 17. Run Sequence (运行队列) 对话框



3. 检查 Acquisition Options (采集选项) 区域, EASY-nLC 仪器是否被列为启动仪器。
Start Instrument (启动仪器) 列将触发数据采集的仪器显示为 Yes (是)。当 EASY-nLC 仪器开始其梯度程序时, 其向 MS (质谱仪) 检测器发出信号以开始进行数据采集。该信号通过触点闭合线缆传送。
4. 根据是否将 EASY-nLC 仪器列为启动仪器, 执行以下其中一种操作:
 - 若 EASY-nLC 仪器被列为启动仪器, 转至步骤 5。
 - 若未将 EASY-nLC 仪器列为启动仪器, 按照以下步骤将其设为启动仪器:
 - a. 点击 **Change Instruments (更改仪器)**。
 - Change Instruments In Use (更改使用的仪器) 对话框打开。
 - b. 点击 Start Instrument (启动仪器) 列中的 Thermo EASY-nLC 行。
然后, 该空格显示为 Yes (是)。
 - c. 单击 **OK (确定)** 以接受新设置并关闭对话框。
5. 在 Run Sequence (运行队列) 对话框中, 执行以下操作:
 - a. 确保选中 **Start When Ready (就绪后启动)** 复选框。
 - b. 检查 Run Rows (运行行) 框中的范围。
 - c. 点击 **OK (确定)** 以将样品运行提交给采集队列。

为运行时间错误采取纠正措施

Instrument Setup（仪器设置）窗口 EASY-nLC 视图上的方法编辑器检查每个参数条目；然而，其不检查条目之间的体积冲突。

若用户指定了一个无效的上样体积、色谱柱平衡或梯度程序，当用户试图采用 Sequence Setup（队列设置）视图上的仪器方法运行样品时，会出现一条错误消息。

表 10 介绍了由 Xcalibur 仪器方法上的不匹配设置导致的常见运行时间错误的纠正措施。

表 10. 由仪器方法上的不匹配设置导致的运行时间错误

消息	纠正措施
Sample pickup flow must be greater than 0 when pickup volume is not 0.（当吸取体积不是 0 时，样品吸取流速必须大于 0。）	在 Sample Pickup and Loading Page（样品吸取和上样页面）的 Sample Pickup（样品吸取）区域的 Flow（流速）框中输入一个非零的流速值。
Solvent A consumption in the method is greater than 120.0 during precolumn, analytical column, and sample loading.（预柱、分析柱和上样期间，方法中溶剂 A 的消耗量大于 120.0。）	修改该方法以使样品上样、预柱平衡和分析柱平衡步骤的总体积消耗小于 120 μL 。
Gradient: Solvent A consumption is greater than 132 μL .（梯度：溶剂 A 的消耗量大于 132 μL 。）	检查梯度表格。减少梯度中溶剂 A 的体积用量。
Autosampler wash flush volume out of range: 137 (30.25<—>100.75)（自动进样器冲洗体积超出用量范围：137[30.25<—>100.75]）	对于 20 μL 的样品定量环，在 Auto-sampler（自动进样器）页面 Standard Wash（标准冲洗）区域的 Flush Volume（冲洗体积）框中输入一个 30.25 至 100.75 μL 范围内的体积。

表 11 列出了由 Xcalibur 队列中的错误项导致的常见运行时间错误。

表 11. 由队列表中的错误项导致的运行时间错误

消息	解决方法
EASY-nLC devices reported an error during the Prepare for Run command.（EASY-nLC 设备报告了一项 Prepare for Run [准备运行] 命令期间的错误。）	减少进样体积（样品吸取体积）。 样品吸取体积不能大于样品定量环规格减去 2 μL ，也就是 20 μL 的样品定量环的吸取体积不能大于 18 μL 。

查看 Information（信息）视图中的运行状态

通过 Xcalibur Information（Xcalibur 信息）视图的 Status（状态）页面查看 EASY-nLC 仪器的运行状态。

❖ 若要从 Information（信息）视图上监测 EASY-nLC 仪器的运行状态

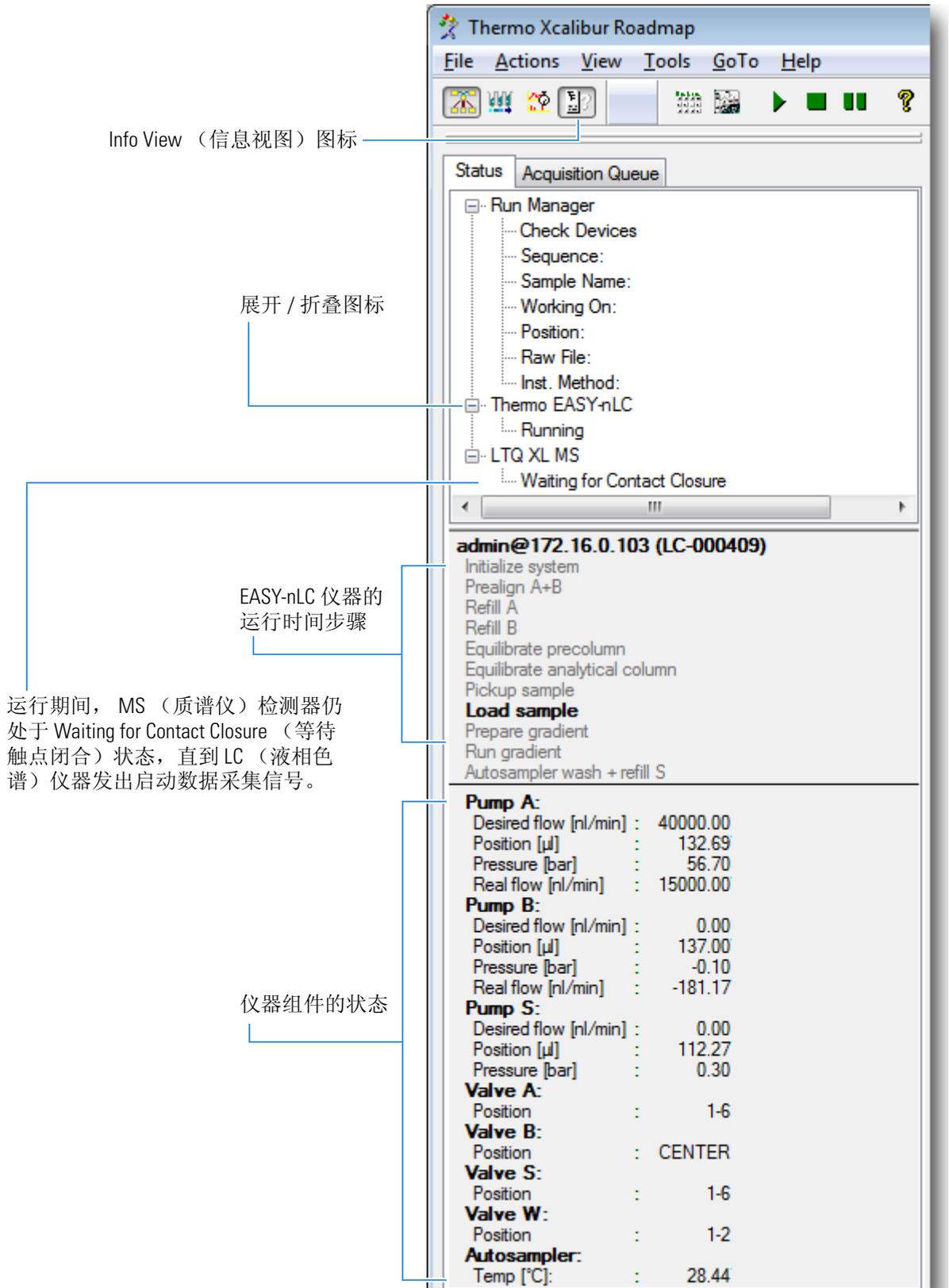
- 按照以下步骤打开 Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）窗口：
 - 从 Processing Setup（处理设置）窗口上选择 **GoTo（转至） > Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）**。
 - 从 Instrument Setup（仪器设置）窗口上点击工具栏上的 **Return to Home Page（返回主页）** 图标，。

注释 Qual Browser（定性浏览器）和 Quan Browser（定量浏览器）窗口在 Home Page（主页）窗口前面打开。

- 若 Information（信息）视图隐藏，点击 View（视图）工具栏上的 **Info View（信息视图）** 图标，（参阅第 40 页上的图 18）。
- 运行期间，点击 Thermo EASY-nLC 的展开 / 折叠图标以显示 EASY-nLC 运行程序并在 Status（状态）页面的底部显示仪器组件的读回。
- 若运行期间 MS（质谱仪）检测器仍处于 Waiting for Contact Closure（等待触点闭合）状态，执行以下操作：
 - 检查 EASY-nLC 仪器背面面板上的触点闭合引脚与 MS（质谱仪）检测器的 Start In（启动输入）引脚之间的触点闭合连接情况。
 - 检查 EASY-nLC 触屏应用程序的 **Configuration（配置） > Connections（连接）** 页面上的 MS（质谱仪）检测器选项（包括触点闭合线缆的部件号）。

图 18 显示了配置 EASY-nLC 仪器和 LTQ XL™ MS（LTQ XL™ 质谱仪）检测器的 LC/MS（液质联用）系统的 Status（状态）页面。EASY-nLC 仪器将样品上样至色谱柱组件上，MS（质谱仪）检测器等待来自 EASY-nLC 仪器的触点闭合信号。

图 18. Information (信息) 视图上的 Status (状态) 页面



索引

- A**
- About (关于) 框, 触屏软件 10
 - Acquisition Server (采集服务器) 错误消息 38
 - Auto-sampler (自动进样器) 页面 25
- B**
- 版本注释 vii
 - 泵溶剂, A 和 B 14
 - 病毒扫描程序, McAfee 4
- C**
- Change Instruments In Use (更改使用的仪器) 对话框 36
 - Change (更改) > Tray Name (托盘名称) 命令 29
 - Column first (列优先) 选项, Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 35
 - Custom (自定义) 选项, 自动进样器清洗步骤 26
 - Cycles (循环) 框, 自动进样器清洗步骤 27
 - 参数描述表
 - Auto-sampler (自动进样器) 页面 26
 - EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框 13
 - Gradient (梯度) 页面 22
 - Pre-column and Analytical Column (预柱和分析柱) 页面 24
 - Sample Pickup and Loading (样品吸取和上样) 页面 19
 - Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 16
 - 持续时间, 梯度程序 22
 - 触点闭合线缆 37, 39
 - 触屏软件
 - About (关于) 框 10
 - 版本 11
 - Maintenance (维护) > Devices (设备) 页面 11
 - 选择通过触点闭合连接至 EASY-nLC 仪器的 MS (质谱仪) 检测器 39
 - 错误消息, 运行时间 38
- D**
- Device Types (设备类型) 列表 8
 - Devices InstallShield Wizard (设备安装向导) 3
 - Driver Info (驱动程序信息) 读回 13
 - 当前用户, 触屏软件 10
 - 调查链接 ix
 - 读回
 - EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框 13
 - Status (状态) 页面, Information (信息) 视图 39
 - Tray Type (托盘类型) 框, New Sequence Template (新队列模板) 对话框 31
 - 端口 22, TCP/IP 通信 2
 - 队列运行
 - 从 Sequence Setup (队列设置) 视图开始 36
 - 设置进样队列表 29
 - 提前终止 v
- E**
- EASY-nLC VI 控制软件
 - Auto-sampler (自动进样器) 页面 25
 - EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框 13
 - EASY-nLC 视图, Instrument Setup (仪器设置) 窗口 17
 - Gradient (梯度) 页面 20
 - Pre-Column and Analytical Column (预柱和分析柱) 页面 23
 - Sample Pickup and Loading (样品吸取和上样) 页面 19
 - Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 15, 34
 - Edit (编辑) 按钮, EASY-nLC Configuration (EASY-nLC 配置) 对话框 14
- F**
- F1 键, 访问 Help (帮助) vi
 - Foundation 平台 vii
 - 防火墙, 网络 2

G

Gradient (梯度) 页面 20

故障排除

触点闭合问题 39–40

数据采集问题 viii

通信问题 viii, 7, 10

运行时间错误 38

H

Help (帮助), 访问 vi

Home Page (主页) 窗口的 Sequence Setup (队列设置) 视图 30

Home Page (主页) 图标 30

J

Idle Flow Rate (闲置流速) 读回 13

Idle Mixture (闲置混合物) 读回 13

Information (信息) 视图, Xcalibur 数据系统 39

Information (信息) 视图的 Status (状态) 页面, Home Page (主页) 窗口 39

Injection volume (进样体积) 19, 33

Initial Position (起始位置) 项 14

Intelligent Flow Control (IFC) 系统读回 14

IP 地址, EASY-nLC 仪器 13

IRC 通信 5

计算机

参阅数据系统计算机

技术支持, 联系 ix

K

空白进样 33

L

LAN 端口, EASY-nLC 7

Loop Volume (定量环体积) 读回 13

流速

分析柱平衡步骤 24

上样步骤 19

梯度程序 22

样品吸取步骤 19

预柱平衡步骤 24

M

McAfee 病毒扫描程序 4

MS (质谱) 检测器, 触发数据采集 37

MS (质谱仪) 检测器, 触发数据采集 39

N

New Sequence Template (新队列模板) 对话框, Xcalibur 30

P

Plate Rack (样品板架) 区域, Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 35

Position (位置) 列, Sequence Setup (队列设置) 视图 表格 33

Pre-Column and Analytical Column (预柱和分析柱) 页面 23

配置参数, EASY-nLC 13

屏幕保护设置 viii

Q

清洗, 自动进样器 26

R

Row First (行优先) 选项, Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 35

Run Sample (运行样品) 图标, Sequence Setup (队列设置) 视图 36

Run Sequence (运行队列) 对话框 36

Run Sequence (运行队列) 图标, Sequence Setup (队列设置) 视图 36

溶剂

洗瓶 W1 至 W3 26

在溶剂储液瓶中指定 11, 14

软件要求 vii

S

Sample Layout (样品布局) 和 Start Position (起始位置), 配置设置 15

Sample Pickup and Loading (样品吸取和上样) 页面 19

Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框

选取队列的样品瓶或微孔板位置 34

选择仪器配置的 Sample Layout (样品布局) 和 Start Position (起始位置) 15

Select Vials (选择样品瓶) 按钮, New Sequence Template (新队列模板) 对话框 34

Sequence Setup (队列设置) 视图的 Inj Vol (进样体积) 列中的负值 33

Source (清洗源) 列表, 自动进样器清洗步骤 27

Standard (标准) 选项, 自动进样器清洗 25–26

Start Position (起始位置) 读回 14

设备驱动程序

安装 3

系统要求 vii

卸载 2

省电设置 viii

手册, 从数据系统计算机中访问 vi

数据采集, 提前终止 v

数据系统计算机

病毒扫描程序设置 4

连接至 EASY-nLC 仪器 7

省电设置 [viii](#)
系统要求 [vii](#)

T

Test Connection (测试连接) 按钮 [10, 13](#)
Thermo 标志, 触屏软件 [10](#)
Thermo EASY-nLC Configuration (Thermo EASY-nLC 配置) 对话框 [9](#)
Thermo Foundation Instrument Configuration (Thermo Foundation 仪器配置) 窗口 [7](#)
Tray Type (托盘类型) [29](#)
体积
Analytical Column Equilibration (分析柱平衡) [24](#)
冲突 [38](#)
冲洗, 自动进样器清洗步骤 [26](#)
precolumn equilibration (预柱平衡) [24](#)
Sample Loading (上样) [19](#)
Sample Pickup (样品吸取) [19](#)
自定义清洗表格中的列 [27](#)
通信问题
测试以太网连接 [10](#)
由病毒扫描程序软件导致的 [4](#)
由以太网线缆或错误的 IP 地址导致 [7](#)
托盘类型 [14](#)

W

Waiting for Contact Closure (等待触点闭合) [39](#)
Vial Rack (样品瓶架) 区域, Sample Position Selector (进样位置选择器) 对话框 [34](#)
Windows updates (Windows 更新), 自动 [viii](#)
URLs, 订购备件 [ix](#)
User Name (用户名) 配置参数 [13](#)
网络防火墙 [2](#)
网络配置, EASY-nLC [10](#)
网卡 [vii](#)
微孔板 [14](#)
文档
调查 [ix](#)
在线 [ix](#)

X

Xcalibur 数据系统
Column Arrangement (列布置) 对话框, Sequence Setup (队列设置) 视图 [33](#)
Instrument Setup (仪器设置) 窗口 [17](#)
New Sequence Template (新队列模板) 对话框 [30](#)
Sequence Setup (队列设置) 视图 [29](#)
Status (状态) 页面, Information (信息) 视图, Home Page (主页) 窗口 [39](#)
系统要求 [vii](#)
先决条件, 安装 [1](#)
休眠设置 [viii](#)

Y

压力, 最大
参阅最大压力
样品板类型 [14](#)
样品布局, 选择 [14](#)
样品定量环规格 [38](#)
样品瓶架位置 [16](#)
样品瓶托盘 [14](#)
要求
计算机 [vii](#)
软件 [vii](#)
已安装的样品板, 选择 [14](#)
以太网连接 [7](#)
用户名, 默认 [10](#)
运行时间错误消息 [38](#)

Z

自动进样器的模式 [10, 14](#)
最大压力
分析柱平衡步骤 [24](#)
上样步骤 [20](#)
预柱平衡步骤 [24](#)