



# UV Probe 使用手册

岛津国际贸易（上海）有限公司

# 目 录

<b>第 1 章 绪论</b>	<b>1</b>
UV PROBE 简介	1
说明	1
UV PROBE 安装要求	1
计算机的最小硬件要求	1
最小软件要求	2
安装 UVPROBE	2
步骤 1 – 安装 Shimadzu 用户认证工具	2
步骤 2 – 安装 UVProbe	2
应用方式	3
启动 UVPROBE	5
UV PROBE 基本界面	6
输出窗口	6
仪器条	7
光度测定状态条	7
标准工具栏	8
使用模块	9
模块间面板的变化	9
专有菜单和工具栏	9
UV PROBE 功能	11
启动 UV Probe	11
系统管理	13
赋予用户的权限	14
权限	15
增加组	21
赋予组权限	22
除去组	23
添加用户	23
编辑用户	25
激活/停用用户	26
改变密码	27
使用模块	28
模块之间的面板之区别	28
专用的菜单和工具栏	29
UVPROBE 功能	29
与分光光度计通讯	29
快捷菜单和属性页	32
图象方式	33
文件，储元和数据集	35
内部数据处理的精确度	37
UV Probe 指南	38
第一部分 光谱模块	38
第二部分 光度测定模块	38
第三部分 动力学模块	39
第四部分—报告生成器	39
<b>第 2 章 光谱模块</b>	<b>1</b>
光谱窗口	2
光谱工具条	3
练习 1 – 基本测定	3
第 1 步 – 进行基线校正	3
第 2 步 – 建立数据采集方法	5

第 3 步 – 存储数据采集方法.....	6
第 4 步 – 采集数据.....	6
第 5 步 – 保存数据.....	8
练习 2 – 基本光谱操作.....	9
第 1 步 – 调节峰值检测表的参数.....	9
第 2 步 – 建立峰面积表.....	14
第 3 步 – 处理峰面积表和图象.....	16
第 4 步 – 建立新的区域.....	17
第 5 步 – 处理数据集.....	18
练习 3 – 先进的技术.....	21
第 1 部分 – 通过池定位装置采集数据.....	21
第 1 步 – 加载和修改存储在磁盘中的数据采集方法.....	21
第 2 步 – 配置池定位装置.....	22
第 3 步 – 从内存除去数据.....	23
第 4 步 – 采集数据.....	23
第 2 部分 – 使用 UV Probe 和视窗软件的写字板.....	25
第 1 步 – 复制和粘贴一个位图到写字板.....	25
第 2 步 – 复制和粘贴表格到写字板.....	25
<b>第 3 章    光度测定模块.....</b>	<b>1</b>
光度测定窗口.....	2
光度测定工具条.....	3
设置和编辑光度测定方法.....	4
练习 1 – 基本测定.....	7
第一节 建立标准曲线.....	7
第一步 – 建立数据采集方法.....	7
第二步 – 保存数据采集方法.....	9
第二节 – 测定标准样品.....	10
步骤 1 – 输入文件信息.....	11
步骤 2 – 填充标准表.....	11
步骤 3 – 读取标准样品的数据.....	12
步骤 4 – 查看标准曲线.....	14
步骤 5 – 保存标准表.....	14
第三节 读取未知样品.....	14
第一步 建立样品表.....	15
第二步 读取未知样品的数据.....	15
第三步 手工输入样品表数据.....	17
第四步 – 查看样品图形.....	18
第五步 保存数据.....	18
练习 2 – 基本光度测定操作.....	18
第一步 – 使用自动填充建立标准表 1.....	19
第二步 – 在使用重复功能填充标准表.....	20
第三步 – 使用不同的标准曲线计算未知浓度.....	21
第 4 步 – 显示统计.....	23
第 5 步 – 进行数据的倒数转换.....	24
练习 3 – 先进的光度测定技术.....	26
第 1 节 – 自定义方程式.....	26
第 1 步 –                建立使用自定义方程式的数据采集方法.....	28
第 2 步 – 保存数据采集方法.....	31
第 3 步 – 填充样品表.....	32
第 4 步 – 确认计算结果.....	33
第 5 步 – 显示必要的列.....	33
第 2 节 – 使用抽吸单元 采集数据.....	34
第 1 步 – 安装抽吸单元附件.....	35

第 2 步 – 修改数据采集方法，使用抽吸单元 .....	35
第 3 步 – 采集未知数据 .....	36
<b>第 4 章 动力学模块 .....</b>	<b>37</b>
动力学模块窗口 .....	38
动力学模块工具条 .....	39
练习 1 – 基本测定 .....	40
第 1 步 – 建立数据采集方法 .....	40
第 2 步 – 准备粉末样品 .....	41
第 3 步 – 读取时间扫描的读数 .....	42
练习 2 – 动力学的基本操作 .....	43
第 1 步 – 进行选点检测 .....	43
第 2 步 – 将选点检测表作为模板存储 .....	43
第 3 步 – 进行池空白操作 .....	44
第 4 步 – 采集另一个数据集 .....	44
第 5 步 – 打开一个以前保存的选点检测模板 .....	45
第 6 步 – 修改主表 .....	45
练习 3 – 先进的动力学技术 .....	47
第 1 步 – 进行 Michaelis-Menten 计算 .....	47
第 2 步 – 配置自定义动力学图象 .....	50
第 3 步 – 建立和填充抑制剂表 .....	51
<b>第 5 章 报告生成器 .....</b>	<b>56</b>
对象的操作方式 (选择对象) .....	56
编辑方式 .....	56
选择方式 .....	56
未选择方式 .....	57
嵌入对象对链接对象 .....	57
嵌入对象 .....	57
链接对象 .....	57
报告生成器的主窗口 .....	58
报告生成器工具条 .....	59
报告生成器对象工具条 .....	59
文本对象 .....	59
动力学对象 .....	60
光度测定对象 .....	60
光谱对象 .....	61
练习 1 – 建立带有嵌入对象的基本报告 .....	62
第 1 步 – 设定栅格间距和页边距 .....	62
第 2 步 – 嵌入图象 .....	62
第 3 步 – 建立报告表头 .....	63
第 4 步 – 打印和存储报告 .....	64
练习 2 – 建立带有链接对象的简单报告 .....	65
第 1 步 – 链接一个图象到现有的光谱模块 .....	65
第 2 步 – 链接一个峰值检测表到现有光谱模块 .....	66
第 3 步 – 建立表头和打印报告 .....	67
练习 3 – 高级技巧 .....	68
第 1 步 – 在每页重复插入文本对象 .....	68
第 2 步 – 配置快速打印功能 .....	70

# 第一章 绪论

## UV Probe 简介

---

欢迎使用 UV Probe 个人软件包。UV Probe 的标准组件能进行数据采集、分析和报告，操作简单，功能强大。

UV Probe 包括四个基本组成部分：

- 扫描和分析波长的光谱模块。
- 对时间变化和 Michaelis-Menten 计算的动力学模块。
- 分析定量数据的光度测定模块。
- 功能强大并可改变格式的报告生成器，可通过使用链接或嵌入数据建立并打印自定义报告；报告在任何模块内均可立即打印。

其他特色：

- 直观界面布局。可自定义包含单个图象和光度计控制键的简单布局到类似多图象和表的包含仪器履历和状态显示的复杂布局。
- 实时反馈的能显示在屏幕上的吸收值、透射率、能量或反射率可方便控制机器。
- 任意输出到文件或打印机。
- 用于显示、采集和控制数据的各种表。
- 在采集数据或采集完成后的三种图象方式。
- 其他快速处理程序，如选点检测，峰值检测和峰面积。
- 通过输入和输出来与其他的 WINDOWS 应用程序共享数据。
- 全面的在线帮助，包括每个对话框的相关的帮助。

## 说明

---

本手册能帮助用户熟练使用 UV Probe。本手册简要地介绍了主要的概念，说明软件的界面布局，并通过四个章节指导你有关基本使用方法。

指南包括每个模块的主要的基本使用法和一些高级技巧。在开始阅读指南之前，请先浏览下列内容。详细内容和过程请参考在线帮助。

## UV Probe 安装要求

---

介绍运行 UV Probe 的软件和硬件的最小配置，以及如何安装和卸载。

### 计算机的最小硬件要求

---

- 一台 IBM PC 或 PC 兼容机，Pentium™(200MHz) 处理器；建议使用 Pentium II™(300MHz)。
- 近似 128 MB RAM。

- 大约 350 MB 可用硬盘空间。
- SVGA, 800x600 监视器, 建议使用 1024x768 。
- 并行或串行适配器。.
- 图形打印机或 绘图仪(建议使用数据打印)。
- 鼠标或相似的定点设备。
- CD ROM。

## 最小软件要求

---

- Microsoft Windows XP/NT4.0/2000 操作系统

## 安装 UVProbe

---

安装 UVProbe 如下:

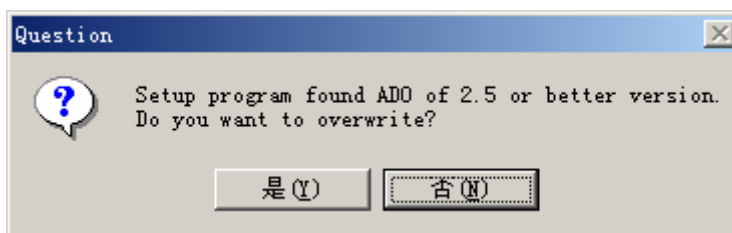
安装 Shimadzu 认证工具和 UVProbe 请按照下列步骤 1 到 2 进行。

如果安装选购软件“UVPC 认证软件”需要点击帮助键, 按照显示的步骤安装支持 UVPC 有效性认证的文件。

### 步骤 1 – 安装 Shimadzu 用户认证工具

---

- 1 点击 Shimadzu 用户认证工具。
- 2 出现欢迎对话框。仔细地阅读说明后点击“下一步”键。
- 3 安装开始后, 将出现下一个窗口。如果是第一次安装, 点击 Yes。如果是重新安装或 ADO 已经在安装 MS Office 等软件时安装了, 点击 否(N)。



- 4 安装完成后, 出现安装完毕对话框。如果立即重新启动 PC, 点击“完成”。如果以后再重新启动 PC, 先点击“不, 将在以后重新启动 PC”, 然后点击“完成”。

### 步骤 2 – 安装 UVProbe

---

- 1 从 CD-ROM 上启动 setup 文件, 然后点击 [UVProbe] 键。

注意: 安装程序也可在 MS-Windows/NT/2000/XP 环境下使用“运行”指令启动。选择 [开始] -> [运行], 打开“运行”对话框, 点击 [浏览] 键并从 CDROM 的根目录下选择 SETUP.EXE 程序, 点击 [OK] 键, 运行 setup 程序。

- 2 输入你的名称，公司和产品 ID 号到用户信息框中。点击下一步。(产品 ID 号在光盘的封面上。)
- 3 在选择目标位置对话框中，使用浏览键选择安装 UVProbe 的文件夹，或接受接受默认的文件夹 (Programme Files\Shimadzu\UVProbe)，点击下一步。
- 4 在选项选择对话框中，选择希望安装的 UVProbe 应用方式并点击下一步，各方式的详细情况，见本书的“应用方式”以及“UVProbe 帮助”。

## 应用方式

提供三种应用方式：常规、保密和 GLP。

不同的方式，功能有所区别。

功能	常规	保密	GLP 功能
保密功能	停用	激活	激活
GLP 功能	停用	停用	激活

### 保密功能

当保密功能被激活时，注册进入系统需要输入用户名和密码，限制对系统访问。给不同的用户赋予权限，限制可用的 UVProbe 功能。此外，用户注册进入时使用的用户名自动用作分析者名，而且此分析者名不能更改。

具体细节，见“前言”章的“UVProbe 功能”和“系统管理”。

注意：当保密功能生效时，在默认的状态下光度测定模块中没有覆盖文件的权限。

### GLP 功能

GLP 功能支持系统遵循 GXP 的要求(GLP: Good Laboratory Practices, GMP: Good Manufacturing Practices 等)。当 GLP 功能激活时，下列限制应用到各模块中。

#### 共同的

- UVProbe 系统可使用窗口 > 锁定指令加以锁定。
- 仪器履历的信息可发送到数据库中。
- 未保存的文件在退出 UVProbe 或打印时自动保存。

#### 动力学/ 光谱模块

- 新测定得到的和通过数据计算得到的数据集自动保存到磁盘中。
- 缝纫盒功能停用。
- 禁止重命名数据文件、储元和数据集，除非是酶文件。
- 禁止删除包含和储元和数据集的数据文件，除非是酶文件。

- 禁止使用已经有的文件名保存文件。

### **光度测定模块**

- 禁止删除样品行和标准行，只能排除。
- 禁止删除样品列和标准列。
- 不能选择“用户输入”作为样品表的数据采集方法。
- 禁止使用已经有的文件名保存文件。
- 文件保存后，标准表和样品表中的因子不能改变。

### **确认和更改应用方式**

在编辑菜单的选项中可以确认安装的 UVProbe 的应用方式。  
常规方式和保密方式之间还可以切换。

从常规方式切换到保密方式

- 1 从 UVProbe 的编辑菜单中选择选项。
- 2 点击保密方式键，作复选标记。
- 3 点击 OK 键，关闭对话框。
- 4 下一次启动时，显示所选择应用方式的信息。
- 5 在上述选择后，当 UVProbe 重新启动时，会显示注册进入的对话框，要求输入用户 ID 和密码。
- 6 管理员作为用户 ID 之一，已经登录并且拥有所有的权利，密码未设置。输入“admin”作为用户 ID，点击 OK 键。

注意：其他方式和 GLP 方式之间不能相互转换。此时，必须先卸载然后重新安装 UVProbe 才可重新选择。

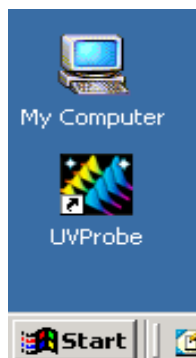


## 启动 UVProbe

当 UVProbe 启动后，窗口会显示与退出程序时相同的配置。例如，工具栏和窗口恢复到相同的位置；但不显示数据。

- 1 打开监视器，计算机和分光光度计的电源。
- 2 选择窗口开始 > 程序 > Shimadzu > UVProbe，或双击桌面上的 UVProbe 图标。

双击启动  
UVProbe



- 3 当保密功能激活时，需要输入用户名和密码到用户注册对话框中，然后点击 OK。当保密没有激活时，不出现该对话框。

注意：安装后首次启动系统时，管理员的用户 ID 是 “admin”，不必输入密码。

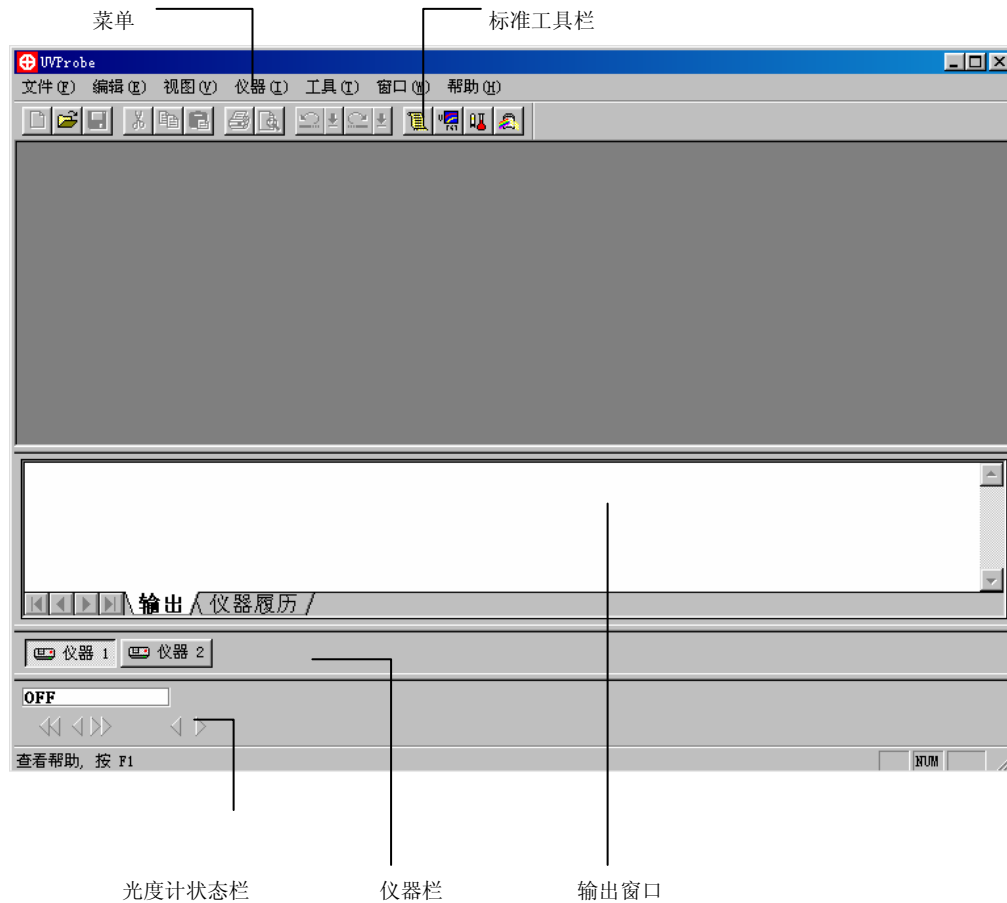


## 打开一个模块

在窗口菜单上，点击一个模块。

所有的模块可同时打开。使用窗口菜单快速地进行从模块到模块之间的切换，或使用层叠和平铺安排多个模块。模块可以拖曳和改变大小。

## UV Probe 基本界面



上图是没有打开任何模块的 UV Probe 的基本窗口的样例。这里包括菜单、标准工具栏、输出窗口、仪器栏和光度计状态栏。下列功能在打开任何模块或报告生成器之前都能使用。

- 1 设置选项
- 2 执行系统管理功能
- 3 增加、设定或删除仪器
- 4 向工具菜单增加自定义工具

完成以上功能的详细步骤，请参考在线帮助。

## 输出窗口

输出窗口是非锁定的并可放在 UV Probe 工作区中任何位置。输出窗口在 UV Probe 窗口底部显示有用的系统信息，并包括两个标签 — 输出和仪器履历。

- 5 输出选项显示软件在运行时的概要信息。这些信息是临时性的并在下一次系统重新启动时被清除。
- 6 仪器履历选项显示当前正使用的仪器的信息，如初始化时间，基线信息等等。当仪器转换时该项的信息也将转变以显示当前正使用的仪器的信息。

输出和历史仪器窗口的信息不能被打印或保存。

---

## 仪器条

---

仪器条能放置在 **UV Probe** 工作区中任何位置并可被固定在该位置。每一个键对应一种可用仪器。点击仪器条上的仪器键，可在相应的仪器间转换。

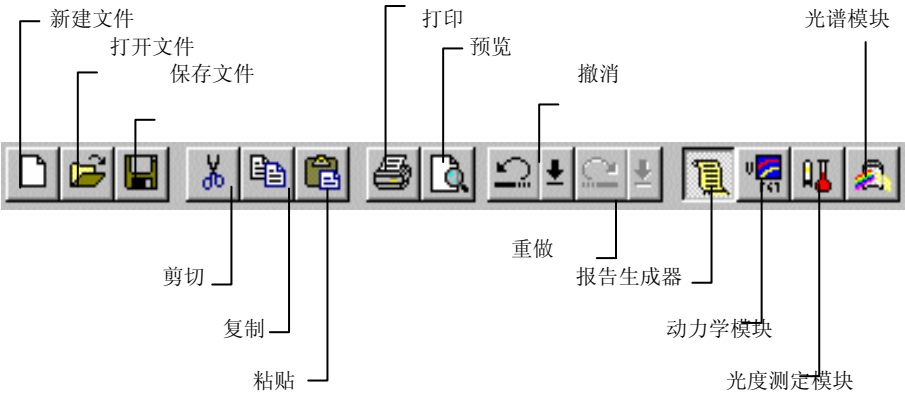
---

## 光度测定状态条

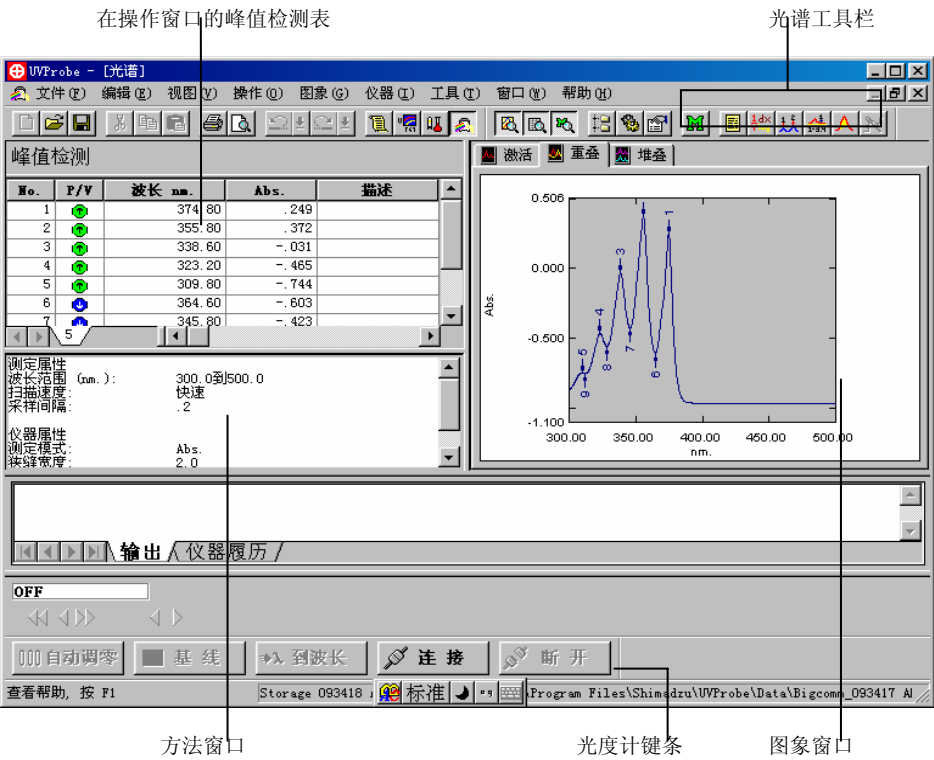
---

光度测定模块的状态条是可固定的，并且控制条可放在 **UV Probe** 工作区中任何位置。通过光度测定状态条可完成许多机器操作功能。通过配置字体风格、大小和颜色，状态条的背景颜色来改变光度测定状态条的外观。在光度测定状态条上单击鼠标的右键并选择属性可完成该步。详细资料请参考 **UV Probe** 帮助文件。

标准工具栏



使用模块



上图是打开了光谱模块的 UV Probe 窗口界面。光谱模块在 UV Probe 窗口内拥有自己的窗口，包括菜单、标准工具栏、光谱工具条、仪器工具条、光度计工具条和测光工具条。通过视图菜单可以激活/取消激活所有的工具条或者显示元件。

模块间面板的变化

光谱窗口被分割成几个面板，操作面板在左上角，右边是图象面板，底部是方法面板。动力学模块和光度测定模块同样包含面板。

每个面板都有自己的一个或多个功能。例如，光谱模块的图象面板显示三种不同类型的图象。方法面板显示有关当前数据采集方法的信息，操作面板显示通过各种操作采集或处理的数据，如选点检测或峰面积。

通过视图菜单可显示/隐藏面板。拖拉水平或垂直分界条可改变面板的尺寸。

专有菜单和工具栏

虽然模块拥有某些共用菜单，但当模块切换时相应的菜单以及菜单选项的连接选择也随之改变。例如，光谱模块和动力学模块都有图象菜单，但光度测定模块没有；同时，光谱模块和动力学模块中的图象菜单的选择结果是不相同的。

每个模块都拥有自己的工具条，包括共享工具和专有工具。

有关模块的详细叙述和功能描述，请参考该模块章节的介绍。

## UV Probe 功能

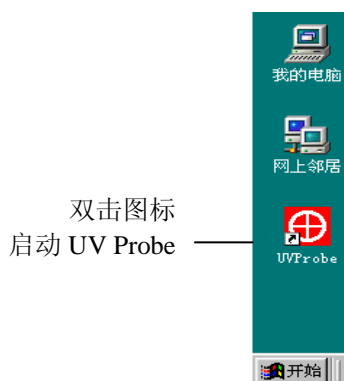
这部分讲述了在开始阅读指南之前必须了解的功能。包括：

- 启动 UV Probe 并打开模块
- 系统管理特色
- 与分光光度计通讯
- 快捷菜单和属性页
- 图象方式

## 启动 UV Probe

当 UV Probe 启动后，窗口将显示程序上次退出时的配置。例如，工具栏和窗口将放置在原来位置，但没有数据显示。

- 1 打开监视器、计算机和分光光度计。
- 2 选择 开始 > 程序 > Shimadzu > UV Probe, 或者双击在桌面上的 UV Probe 图标。



- 3 当安全管理被激活时，在用户登录对话框内输入用户名和密码，再点击**确定**。当安全管理被取消时，对话框不会出现。

**注：** 程序安装后第一次运行时，缺省系统管理员密码是 Shimadzu。



## 打开一个模块

在窗口菜单，点击一个模块。

所有的模块能同时打开，通过窗口菜单能进行模块间的快速切换；或者使用**层叠**和**平铺**选择排列模块。同时，模块能任意拖曳和伸缩。



## 系统管理

---

该章节阐述了基本的系统管理。当安全管理被取消且不再使用时，请跳至第 16 页的**分光光度计通讯错误！未定义书签。**。安全管理主要是使系统管理员对每个用户访问系统的权限进行设定。依次有三个步骤：增加组，分配组权限，增加用户。

当 UV Probe 安装完毕后，系统有两个预先设定的组 – Administrator 和 Guest。Administrator 组拥有所有的访问权限，例如，当一个用户被增加到该组中后，该用户可无限制的访问 UV Probe 系统。

为有效的控制对系统的访问，一般采取建立不同级别的组，再将用户分配到相应的组中。例如，某个组可能无法使用峰面积表或者报告生成器。组不能被取消对单个模块的所有访问权限。

使用安全管理控制对系统的访问，跟踪用户以及单独用户完成的操作。安全管理被激活时，自动输入用户名到和数据（在新数据集信息对话框）一起被保存的分析域。在输出窗口的仪器履历页，或文件属性对话框的履历页能查看用户和操作信息。在报告生成器模块下，登录的用户能被打印成报告。

在编辑菜单上点击安全显示管理对话框。使用该对话框对系统进行控制。

对于登录在管理员组中的用户，可以使用除了更改密码标签以外的所有标签 (页)。

## 赋予用户的权限

---

为了管理的方便，每个用户必须属于一个组。组内用户使用系统权限可被仔细地加以控制。用户和组应用下列规则。

- 组是用户的组合。
- 每个用户必须属于一个组，而且只能属于一个组。
- 组拥有权限。
- 组内所有的成员权限相同。

## 权限

限制操作的权限分成 18 种。UVProbe 已经编好了这 18 种权限或权限组合，具体说明如下：

此外，UVProbe 未给 Guest 组任何操作权限。

### ■ Shimadzu 活度表控制（动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	功能：复制活度表的行或列到剪贴板。	○	○	○

### ■ Shimadzu 指令容器

权限	说明	管理员	开发者	操作者
访问报告生成器	权限：使用报告生成器模块。该功能可建立/保存/读出报告文件和报告模板，在此模板中对象可以任意布局。	○	○	○
编辑选项	权限：使用编辑菜单中的选项。该功能可切换 UVProbe 应用方式 (仅常规方式和保密方式)。	○		
修改工具菜单	权限：使用工具菜单。该功能可插入其他应用软件到 UVProbe 的菜单指令中，插入程序到工具菜单中。	○	○	○

### ■ Shimadzu 数据打印控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制数据打印表的行或列到剪贴板。	○	○	○

### ■ Shimadzu 动力学主表控制

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制主表的行或列到剪贴板。	○	○	○
修改	权限：进行输入编辑，输入系数/注释到主表。还包括切换“显示/不显示”表中的列的权限。	○	○	○

### ■ Shimadzu 动力学模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
采集数据	权限：进行测定	○	○	○
活度表	权限：建立活度表。	○	○	○
池空白	权限：使用池空白功能	○	○	○
数据打印	权限：使用数据打印功能	○	○	○
编辑方法	权限：在编辑菜单中使用方法功能。该功能可建立/编辑测定方法。	○	○	
编辑设置	权限：在视图菜单中使用设置功能。该功能可设置显示数据位数，报告和模板的链接设置，是否显示信息，数据集名显示的格式，设置保存文本时使用的分隔符等...	○	○	
酶表	权限：建立酶文件。	○	○	○
文件属性	权限：使用文件属性。文件属性是一种功能，确认装载到 RAM 文件和更改名称，诸如文件名称，储元名称和数据集名称。	○	○	○
至波长	权限：进行波长转移	○	○	○
装载文件	权限：使用文件菜单中的打开功能。该功能可读出动力学文件、酶文件、测定方法和各种模板。	○	○	○
主表	权限：建立主表	○	○	○
处理	权限：使用数据处理。	○	○	○
峰面积	权限：建立峰面积表。	○	○	○
峰值检测	权限：使用操作菜单中的峰值检测功能。	○	○	○
进行自动调零	权限：使用自动调零功能	○	○	○
基线校正	权限：使用基线校正功能。	○	○	○
选点检测	权限：使用选点检测功能。	○	○	○
打印报告	权限：使用文件菜单中的打印预览和打印功能。这些功能可进行使用链接到各面板的报告模板打印。	○	○	○
属性	权限：使用在视图菜单中的属性功能。该功能可编辑或设置各面板中显示的图象和表格。	○	○	○
保存文件	权限：使用文件菜单中的打开功能。该功能可打开动力学文件、酶文件、方法文件和各种模板。	○	○	○
缝纫盒	权限：使用缝纫盒功能。	○	○	○

注意：在 GLP 方式中数据处理功能停用。

注意：在 GLP 方式中文件名、储元名和数据集名不能更改。

### ■ Shimadzu 处理控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
四则运算	权限：使用扣空白（应为：四则运算，译注）功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过指定的数据集与常数之间的四则运算，建立新的数据集。	○	○	○
扣空白	权限：使用扣空白功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过对指定数据集的空白校正建立新的数据集。	○	○	○
总平均	权限：使用总平均功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能对两个或两个以上指定的数据集，使用每点的平均值建立一个数据集。	○	○	○
数据集间运算	权限：使用数据集间运算功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能通过数据集间四则运算可建立新的数据集。	○	○	○
内插法	权限：使用内插法功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能可以任意步长内插数据集和建立一个新的数据集。	○	○	○
标准化	权限：使用标准化功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能使用户在重叠图象观察不同种类的测定值数据集时变得容易。	○	○	○
转换	权限：使用转换功能，该功能是操作菜单中的处理功能之一。该功能可建立新的数据集使用不同的转换，倒数转换和 Abs/T% 转换。	○	○	○

### ■ Shimadzu Michaelis-Menten 控制（动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制 Michaelis-Menten 表的行和列到剪贴板。	○	○	○
建立新数据	权限：建立新的 Michaelis-Menten 表。	○	○	○
删除行	权限：删除 (剪切) Michaelis-Menten 表的列。	○	○	○
编辑	权限：更改 Michaelis-Menten 表中的数值。	○	○	○

### ■ Shimadzu 峰面积控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制峰面积表的行和列。	○	○	○
编辑	权限：更改峰面积表中的数值和注释。	○	○	○
删除区域	权限：删除峰面积表中的面积。	○	○	○

### ■ Shimadzu 峰值检测控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制峰值检测表的行或列。	○	○	○
编辑	权限：更改峰值检测表的注释。	○	○	○

### ■ Shimadzu 光度测定模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
采集数据	权限：进行测定。	○	○	○
池空白	权限：使用池空白功能。	○	○	○
编辑方法	权限：在编辑菜单中使用方法功能。该功能可建立/编辑测定方法。	○	○	
编辑设置	权限：使用设置功能在视图菜单中。该功能可进行设置诸如报告模板的链接设置，是否显示信息，数据集名称显示格式和保存文本时使用的分隔符。	○	○	
至波长	权限：进行波长移动。	○	○	○
装载文件	权限：使用文件菜单中的打开功能。该功能可装载光度测定文件，标准文件，方法文件，等...	○	○	○
作标准	权限：使用操作菜单的作标准功能。该功能可移动样品表上的数据到标准表。	○	○	○
处理	权限：使用在操作菜单中的处理功能。	○	○	○
覆盖文件	权限：使用文件菜单上的保存功能。			
进行自动调零	权限：使用自动调零功能	○	○	○
基线校正	权限：使用基线校正功能。	○	○	○
打印报告	权限：使用文件菜单中的打印预览和打印功能。该功能可进行链接到各面板上的报告模板打印。	○	○	○
属性	权限：使用在视图菜单中的属性功能。该功能可进行各面板上图象和表的编辑/显示设置。	○	○	○
保存文件	权限：使用文件菜单上的保存和另存为功能。该功能可保存/覆盖光度测定文件，标准文件，ASCII 文件，方法文件，等...	○	○	○
统计分析	权限：使用统计分析功能在操作菜单中。该功能可插入列，显示样品表统计分析的计算结果(标准偏差和平均)。	○	○	○

■ Shimadzu 选点检测控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制选点检测表的行或列到剪贴板。	○	○	○
编辑	权限：更改选点检测表的波长和注释。	○	○	○
除去点	权限：删除选点检测表的行。	○	○	○

■ Shimadzu 报告生成器

权限	说明	管理员	开发者	操作者
修改	权限：建立/编辑报告文件。该功能可插入对象到报告中或更改对象的位置。	○	○	
打印	权限：使用文件菜单中的打印预览和打印功能。从报告生成器打印报告的功能。	○	○	○
保存文件	权限：使用文件菜单保存和另存为功能。该功能可保存建立的报告文件。	○	○	

■ Shimadzu 样品表控制（光度测定模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制行或列的样品表到剪贴板。	○	○	○
删除行	权限：删除样品表中的行。	○	○	○

注意：在 GLP 方式样品表的行不能删除。

#### ■ Shimadzu SEP 表控制（光度测定模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制 S.E.P 表的行或列到剪贴板。	○	○	○
删除行	权限：删除 S.E.P 表中的行	○	○	○

注意：在 GLP 方式中 S.E.P 表的行不能删除。

#### ■ Shimadzu 缝纫盒控制（光谱 / 动力学模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
修剪	权限：使用修剪功能，是操作菜单中缝纫盒的功能之一。该功能可剪切一部分选择的数据集。	○	○	○
缝合	权限：使用缝合功能，是操作菜单中缝纫盒的功能之一。该功能可连接两个数据集建立一个新的数据集。	○	○	○

#### ■ Shimadzu 光谱仪器栏

权限	说明	管理员	开发者	操作者
插入仪器	权限：使用仪器菜单的插入功能。该功能可插入要用的仪器到系统中。	○		
配置仪器	权限：使用仪器菜单的配置功能。该功能可进行登录仪器的 COM 口更改和仪器基线校正 (仅用于 UV-1600/1700 系列)。	○		
除去仪器	权限：使用仪器菜单的配置功能。该功能可进行登录仪器的 COM 口更改和仪器基线校正 (仅用于 UV-1600/1700 系列)。	○		

## ■ Shimadzu 光谱模块

权限	说明	管理员	开发者	操作者
采集数据	权限：进行测定。	○	○	○
数据打印	权限：使用数据打印功能	○	○	○
编辑方法	权限：在编辑菜单中使用方法功能。该功能可建立/编辑测定方法。	○	○	
编辑设置	权限：使用设置功能在视图菜单中。该功能可设置显示数据位数，报告和模板的链接设置，是否显示信息，数据集名显示的格式，设置保存文本时使用的分隔符，等...	○	○	
文件属性	权限：使用文件属性。文件属性是一种功能，确认装载到 RAM 文件和更改名称诸如文件名，储元名称和数据集名称。	○	○	○
至波长	权限：进行波长转移	○	○	○
装载文件	权限：使用文件菜单中的打开功能。该功能可读出 ASCII 文件，测定方法和各种模板。	○	○	○
处理	权限：使用数据处理功能。	○	○	○
峰面积	权限：建立光谱模块的峰面积表。	○	○	○
峰值检测	权限：使用操作菜单中的峰值检测功能。	○	○	○
进行自动调零	权限：使用自动调零功能	○	○	○
基线校正	权限：使用基线校正功能。	○	○	○
选点检测	权限：使用选点检测功能。	○	○	○
打印报告	权限：使用文件菜单中的打印预览和打印功能。这些功能可进行使用链接到各面板的报告模板打印。	○	○	○
属性	权限：使用在视图菜单中的属性功能。该功能可编辑或设置各面板中显示的图象和表格。	○	○	○
保存文件	权限：使用文件菜单中的保存，保存全部和另存为功能。该功能可保存/覆盖光谱文件，测定方法，各种模板和各种文件。	○	○	○
缝纫盒	权限：使用缝纫盒功能。	○	○	○

注意：在 GLP 方式中数据处理功能停用。

注意：在 GLP 方式中文件名、储元名和数据集名不能更改。



### ■ Shimadzu 标准表控制（光度测定模块）

权限	说明	管理员	开发者	操作者
剪贴板操作	权限：复制标准表的行和列。	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
删除行	权限：删除标准表的行。	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

注意：在 GLP 方式中，标准样品表的行不能删除。

## 增加组

组在管理对话框中的标签页内插入。



可插入已经存在的用户组以外的新的组。有两种插入组的方法：其一是建立新的组；其二是利用已经存在的组的权限。

建立一个新的组：

- 1 点击组标签页的插入键，打开编辑组对话框。
- 2 输入希望的组的名称到插入组的组对话框中和组的说明到说明的编辑框中。
- 3 →(到“组权限设置”“使用编辑组对话框”的步骤。)[TM3]

利用已经存在的组的权限

- 1 点击组标签页中列出组中的一个组。
- 2 点击复制键查看编辑组对话框。
- 3 输入希望的组的名称到插入组的组对话框中和组的说明到说明的编辑框中。
- 4 →(到“组权限设置”“使用编辑组对话框”的步骤 3。)

## 赋予组权限

组的权限在管理对话框的组标签页内设置。

有两种设置组的权限的方法：其一是使用对话框；其二是利用当前的权限目录。

使用编辑组对话框

- 1 在组标签页中点击组目录希望设置权限的组。
- 2 点击属性键打开编辑组对话框。
- 3 从对象组合框选择目标。
- 4 点击目标权限，然后点击箭头键在可用的功能目录和选择的功能目录之间转移权限。
- 5 重复步骤 3 和 4 设置权限。
- 6 当权限设置完毕，点击关闭键确认设置。



使用管理对话框

- 1 在组标签页中点击组目录内希望设置权限的组。
- 2 点击目标模块边上的 + 标记或当前的权限目录中的对象。
- 3 在各权限边上框中作标记和如图赋予权限。
- 4 重复步骤 2 和 3 设置权限。
- 5 当权限设置完毕，点击关闭键确认设置。



## 删除组

删除组在管理对话框的组标签页中进行。

- 1 点击组标签页内希望删除的组。
- 2 点击除去键并确认，该目标组从组目录被删除。
- 3 点击关闭键确认删除。

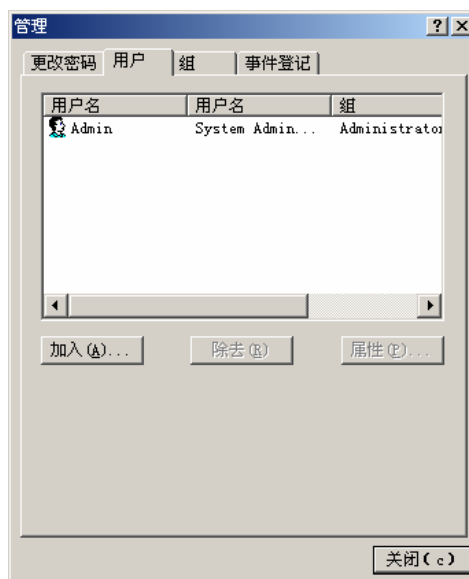
注意：当组内存在有用户，该组不能删除。

注册进入的组不能删除。

管理员组不能删除。

## 添加用户

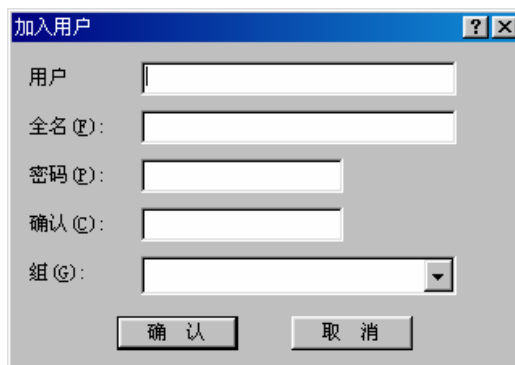
添加用户在管理对话框的用户标签页中进行。



可添加已经存在的用户以外的新的用户。

- 1 在用户标签页中点击加入，查看加入用户对话框。
- 2 输入希望用户 ID，用户名称和用户的密码。
- 3 从组的组合框中选择新的用户所属的组。
- 4 点击 OK 键关闭对话框。
- 5 点击关闭键确认用户已经被插入。

注意：一旦登录进入，该用户不能删除。



加入用户对话框的截图。对话框标题为“加入用户”，包含以下输入项：

- 用户：文本输入框
- 全名 (F)：文本输入框
- 密码 (P)：文本输入框
- 确认 (C)：文本输入框
- 组 (G)：下拉组合框

底部有两个按钮：“确认”和“取消”。

---

## 编辑用户

---

在管理对话框中的用户标签页内可进行用户的编辑。

此处可改变用户所属的组和密码。

- 1 用户标签页的用户目录中，点击希望编辑的用户。
- 2 点击属性键打开 编辑用户对话框。
- 3 编辑希望改变的项目。从组的组合框选择选择用户所属的组。更改用户密码，输入新的密码即可。
- 4 点击 OK 键。
- 5 点击关闭键关闭管理对话框。

注意：当 UVProbe 设置为 GLP 方式时，用户名和全称不能更改。  
此功能只有系统管理员可以使用。  
相同的用户不能属于多个组。

---

## 激活/停用用户

---

激活/停用用户在管理对话框的用户标签页中切换。

此处，注册进入的用户可以停用或停用的用户可以激活。

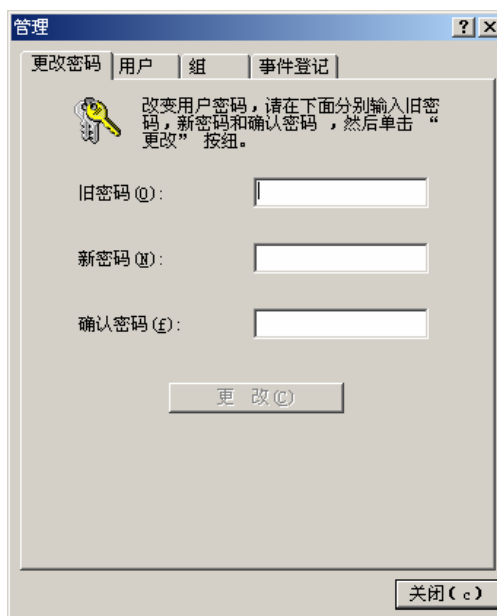
注意：注册进入的用户不能删除。

要切换激活/停用用户，需要输入理由。

- 1 用户标签页的用户目录中点击希望停用/激活用户。
- 2 点击激活 (停用) 键打开输入理由对话框。
- 3 在编辑对话框输入激活或停用用户的理由。
- 4 点击 OK 键关闭对话框。
- 5 确认目标用户已经激活或停用，然后点击关闭键确认变化。

## 改变密码

管理对话框中的更改密码标签页内可改变密码。



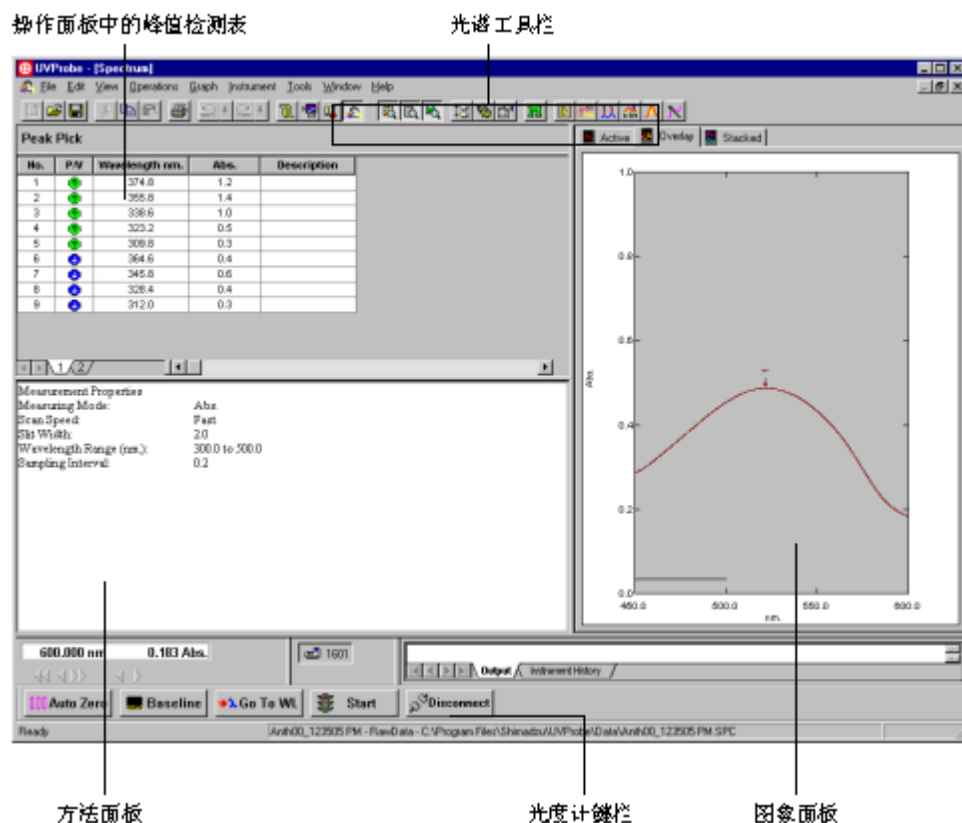
- 1 输入当前用户使用的密码。
- 2 输入新的密码。
- 3 在编辑框中再次输入刚才的密码加以输入。
- 4 点击更改键确认密码改变。

注意：Shimadzu 认证工具中输入了最少字符的小写字母的密码。

密码需要由数字和字符组合。

密码字符区分大小写。

## 使用模块



此图象是打开 UVProbe 光谱模块后出现的窗口。UVProbe 的光谱模块在大的窗口下又有几个窗口，包括菜单栏、标准工具栏、光谱工具栏、仪器栏、光度计键栏和光度计状态栏。使用视图菜单可激活/停用工具栏或显示的元件。

## 模块之间的面板之区别

光谱窗口分成面板，操作面板在左上方，图象面板在右面和方法面板在左下方。动力学和光度测定模块同样包含面板。

各面板有其特定的功能或一套功能。例如，光谱模块的图象面板显示三种不同类型的图象；方法面板显示当前的数据集数据采集方法的信息；操作面板显示采集数据或通过各种操作处理的数据，例如峰值检测或峰面积。

使用视图菜单可激活/停用面板。拖曳的办法可重新改变面板大小，以及改变水平和垂直分割栏。



## 专用的菜单和工具栏

虽然模块上有各种菜单，但是不同的模块其可用的菜单也可能会有不同。例如，光谱和动力学模块各有图象菜单，而光度测定模块则没有。然而，光谱或动力学模块中的图象菜单也有区别，取决于激活的是什么模块。

模块也有其自己的工具栏，这些工具栏也分成共享的和专用的。

各模块详细的说明和其用途的说明，请见各模块的前言。

## UVProbe 功能

本节说明的部分功能是用户在开始本教程前必须了解的基本知识，包括：

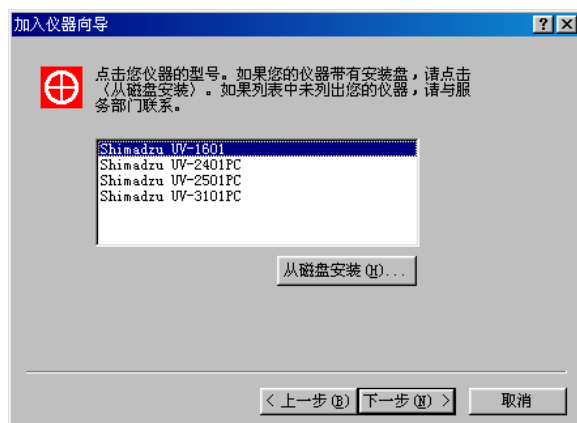
- 与分光光度计的通讯
- 快捷菜单和属性页
- 图象方式

## 与分光光度计通讯

当 PC 机和分光光度计已物理连接（参考仪器安装指南），且 UVProbe 系统已安装和启动时，软件已基本完成测量准备。最后一步是在 UVProbe 中增加和配置仪器。

### 增加和配置仪器

- 1 选择 视图> 仪器条。
- 2 选择 仪器 > 通过**增加仪器向导**进行增加
- 3 点击**下一步**，查看仪器列表。



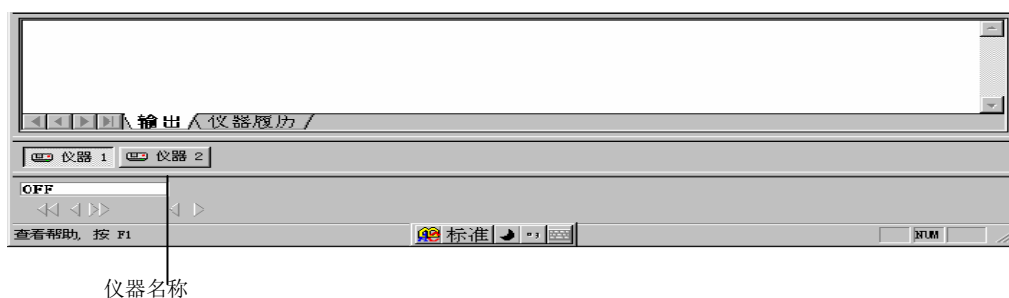
- 4 点击仪器型号，点击**下一步**。
- 5 在仪器名输入框中输入仪器的名称，该名称将显示在仪器键条上。

- 6 点击**配置**，然后选择仪器的通信端口，一般是 COM1 或 COM2。(不能确定时，查看计算机的背面。当通信端口未被标示时，参考 PC 硬件指南) 点击**确定**。
- 7 点击**下一步**。
- 8 输入仪器的型号名称和序列号。要分别输入，犹如各数据集不同的信息记录(汇总)。

**注：** 序列号在输入后将不能更改。当序列号不正确时，删除该仪器，然后重新添加。

一些仪器包含内在的序列号。此时，UV Probe 将自动输入此项信息。

- 9 点击**完成**，将在仪器条上显示出含刚安装的分光光度计的名称的键。屏幕如下图所示：



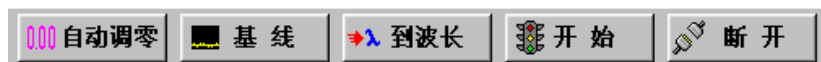
**注：** 在仪器条上沿着键移动鼠标将显示能标识仪器型号的工具栏提示。

## 和分光光度计相连

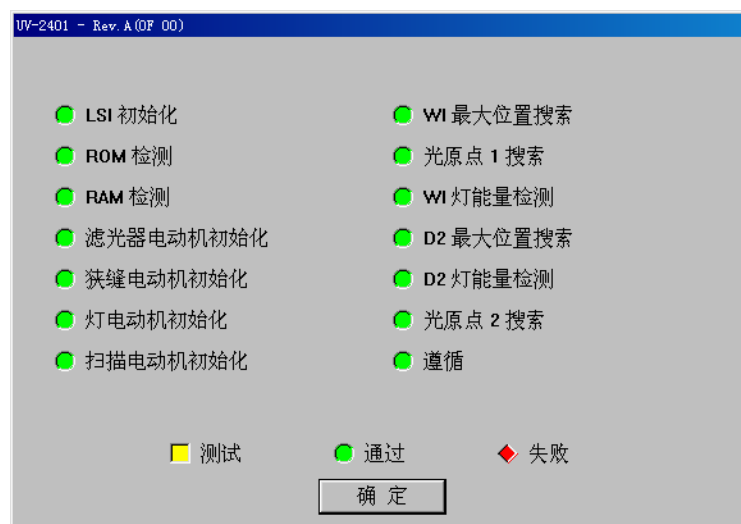
- 1 选择 窗口> 光谱，动态，或分光光度计。在和分光光度计 相连时，必须先运行一个模块。
- 2 在仪器条上，选择仪器键。当只安装了一个仪器时，将自动选择该仪器。
- 3 检查分光光度计是否打开，点击 **连接** 键。



当与仪器连接后，“连接”将显示为“开始”，并且光度计键将变成有效键，如下图所示。现在可以为任何模块建立数据采集方法并开始读取数据。



如果在与分光光度计连接时，仪器的初始化仍未完成，将出现一个类似与下面的窗体：



**注：** 对于一些仪器，电源打开时已完成初始化。如果初始化在软件与仪器连接之前完毕，该窗体将不会出现，并且仪器履历也不保存。为保证仪器履历被存储，在电源打开后立即连接仪器。

需要时可在完成初始化后点击 **确定**。UV Probe 将在仪器履历中保存初始化信息以备将来使用。


## 快捷菜单和属性页


快捷菜单就是与上下文有关并能通过单击鼠标右键访问的菜单。属性页是一个专用的面板对话框，可对当前面板和情况的特色或完成的特定操作进行设置。

例如，在光谱图象上单击鼠标右键以显示光谱图象特定选项的快捷菜单。或者，在包含活动的峰值检测表的光谱操作面板中单击鼠标右键，显示快捷菜单，点击**属性选项**显示峰值检测属性页。



## 使用属性页

属性页能固定显示在某一地方。固定属性页请点击左上角的 。当在窗体或模块之间切换时，属性页仍将显示，并根据当前活动窗体的信息动态更新。

属性页可以象其它的窗体和对话框一样任意移动。关闭属性页请单击 ；或者，当属性页不固定时，在属性页框体外单击。当数据输入到属性页时，按下回车键、Tab 键或在属性页框体外单击输入项都将产生影响。

---

## 图象方式

---

每一个模块都包含跟踪数据的图象。在光谱模块和动力学模块中都有三种方式：激活，重叠和堆叠。在动力学模块中还有自定义图象方式。光度测定模块只有两个图象：标准曲线图象和样品图象。

### 激活图象方式

激活图象方式显示描绘当前活动的数据集的单线。数据只有在采集后才能以该方式显示。如需查看 UV Probe 采集数据时图象的更新，请切换到重叠或堆叠方式下。该方式只能查看或操作在存储器内的数据。

### 重叠图象方式

该方式同时显示存储器内的所有数据集。例如，存储器内有三个数据集，该图象将为每一个数据集的描绘线。常常适用于在快捷菜单上的自动标尺功能以使所有数据都显示在图象中。该方式还包括了一个图例图象以帮助区别图象中不同的线。当图例不用时可以隐藏起来并可从快捷菜单中访问。

当使用分光光度计采集数据时，UV Probe 自动切换到重叠方式并在采集的同时实时显示。

### 堆叠图象方式

堆叠方式分开显示存储器中的每一个数据集。图象一层层堆叠。加载到存储器中的数据集越多，每个图象越小，直至在右边出现滚动条。那时，将需要滚动滚动条来查看图象。可将该滚动选项失效以压缩图象到整个测绘区域。X 轴将消失以留出空间。详细信息请查看在线帮助。

### 自定义图象方式

自定义图象方式仅仅在动力学模块的酶面板中显示自定义图象。该方式主要用于同时观察通过几个线性转换类型所获得的 Michaelis-Menten 数据。

### 标准曲线

标准曲线基于标准表的数据。UV Probe 使用标准表中的点计算出曲线并使用该曲线计算出样品表中未知样品的浓度值。Y 轴表示吸收值，X 轴表示浓度值。通

过设置 光度计>方法>仪器参数的测量方式，Y 轴能显示透射率，能量和反射率。

## 样品图象

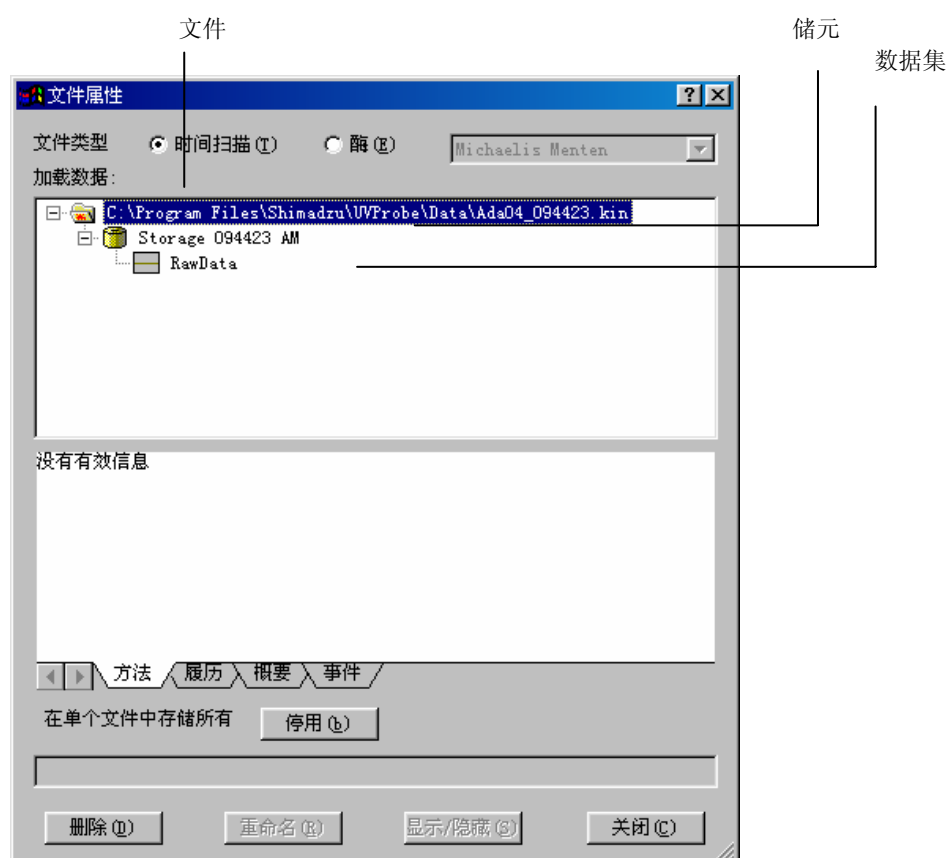
样品图象将样品表中每个输入项作为一个点显示。X 轴显示表中包含的每一个点的值，Y 轴显示每一个点的浓度值。在图象菜单中，图象的 Y 轴能改为显示每一个点的吸收值。

## 文件，储元和数据集

存储到文件中的数据被划分并存储在称为储元的采集单元内。每个储元包含一个或多个数据集。数据集除包含所有的方法，履历和概要信息外，还包括实际的数据。

最基本数据容器是文件，所有的数据都存储到文件内；文件可细分为储元，储元可再细分为数据集。每个文件最少包括一个储元，每个储元最少包括一个数据集。

为更好的理解，请看下面的例子，该例显示一个包含多个储元和数据集的文件对话框。



## 文件

在文件菜单中，属性指的是文件性质对话框（不同于属性页）。详细信息请参考在线帮助。

从该对话框可以：

- 7 确定加载的光谱文件。
- 8 在文件中列出储元和数据集。
- 9 查看方法，履历和概要信息。
- 10 重命名储元或数据集。
- 11 隐藏数据集。
- 12 显示隐藏的数据集。
- 13 在单个文件中存储所有数据。
- 14 从存储器中删除文件，储元和数据集。

## 储元

储元是包含在文件中的数据单元。每一次扫描都对应一个储元，每个储元有一个或多个数据集，包括自然数据集（在扫描中采集的数据）和所有处理数据时建立的数据集。

## 数据集

数据集是文件的一部分，包含扫描时采集的数据或通过其它途径建立的数据，如处理扫描数据。多个数据集可组成储元。

## 优点

当需要将所有数据存储到一个文件中时，文件、储元和数据集这种结构显现出很大的优点。如果采取这种存储方式，可能进行的选项：

- 用池定位器测量的数据可存储在一起。
- 任何一天的每个测量值可存储在同一文件下的不同储元内，从而减少磁盘内文件的数目。
- 类似样品的测量结果可存储在同一磁盘文件内。



## 内部数据处理的精确度

---

UV Probe 使用双精度浮点数进行计算。存储在文件中的数据采用同样的精确度。

显示或打印的数据以用户定义或缺省的位数方式进行四舍五入。该处理仅用于显示或打印图象，并且不影响存储的数据或以后的计算。例如，根据显示或打印的表式的数据并通过手工计算的校正曲线，可能与利用双精度浮点数的 UV Probe 的计算结果不同。

**注：** 双精度浮点：

使用 IEEE 的标准。尾数： 53 位，指数： 11 位。

换算成十进制：  $-16 \text{ digit} * 10^{\pm 308}$

舍入处理： 数字大于或等于五时进位，小于五时舍去。

## UV Probe 指南

---

软件安装完毕后，你可以开始阅读指南，指南分为四部分，分别是：光谱模块、光度测定模块、动力学模块和报告生成器。建议按照章节的顺序依次阅读；也可直接阅读你需要的章节。特别注意的是第四部分报告生成器用到第一部分中建立的文件，因此，第四部分不能与第一部分分开。

**UV Probe** 功能一节也很重要，请仔细阅读。（第十页 11），这对理解整个指南很有必要。

指南中需要的数据文件都可在 UV Probe 安装目录的 data 目录中找到，例如，

C:\Program Files\Shimadzu\UVProbe\Data

注： 该指南的所有过程均处于 GLP 模式和无安全模式下。

## 第一部分 光谱模块

---

### 基本测定

在练习 1 中，完成基线校正，建立和保存数据采集方法，采集和保存光谱数据。

### 基本光谱操作

练习 2 包含基本光谱操作，包括如何显示和配置峰值检测表，如何建立和处理峰面积表，如何对光谱数据集完成基本算术运算。

### 先进的技术

练习 3 中，利用池定位器获取数据。同时，位图图象从光谱模块中拷贝并粘贴在写字板™。

## 第二部分 光度测定模块

---

### 基本测定

练习 1，利用分光光度计的读取数据或用手输入数据到标准表中，并建立标准表和标准曲线。

## 基本光度测定操作

练习 2，使用各种标准曲线计算未知浓度。使用自动填充建立标准表并完成数据的倒数操作。

## 先进的技术

练习 3，通过分析跳跃酸建立自定义方程式。使用附件抽吸装置测量未知样品。

## 第三部分 动力学模块

---

### 基本测定

练习 1，在动力学模块下，建立动力学数据采集方法和采集时间扫描数据。

### 基本操作

练习 2，建立峰值检测表，将选点检测数据保存为模板，然后打开模板。同时，完成池空白操作，说明并管理活度表和主表。

### 先进的技术

练习 3，建立 Michaelis-Menten 表计算  $K_m$  和  $V_{max}$ ，根据计算的  $K_m$  和  $V_{max}$  建立抑制剂表，并建立一个自定义动力学图象结构。

## 第四部分—报告生成器

---

### 建立含嵌入对象的简单报告

练习 1，建立含有嵌入对象的简单报告。报告包括标题和光谱模块下的重叠图象。保存和打印报告。

## 建立含链接对象的简单报告

练习 2，建立含有链接对象的简单报告。报告将包括链接到正在使用的光谱模块中的图象对象和峰值检测表对象。

## 先进的技术

练习 3，在报告中链接自定义设置的对象和插入各种文本对象。在光谱模块下配置快速打印。

## 第二章 光谱模块

光谱模块的基本功能是控制分光光度计和扫描指定范围内的波长，并记录下扫描范围内各波长的吸收值、透射率、反射率或能量读数。

光谱模块操作简单灵活，允许设计简单的或复杂的数据采集方法。可采用不同类型的仪器和附件采集数据。用户可保存数据采集方法的参数，通过各种图象方式查看采集的数据，并按特定的方式处理数据，如数据打印、峰值检测、保存数据和在模块中直接打印报告。

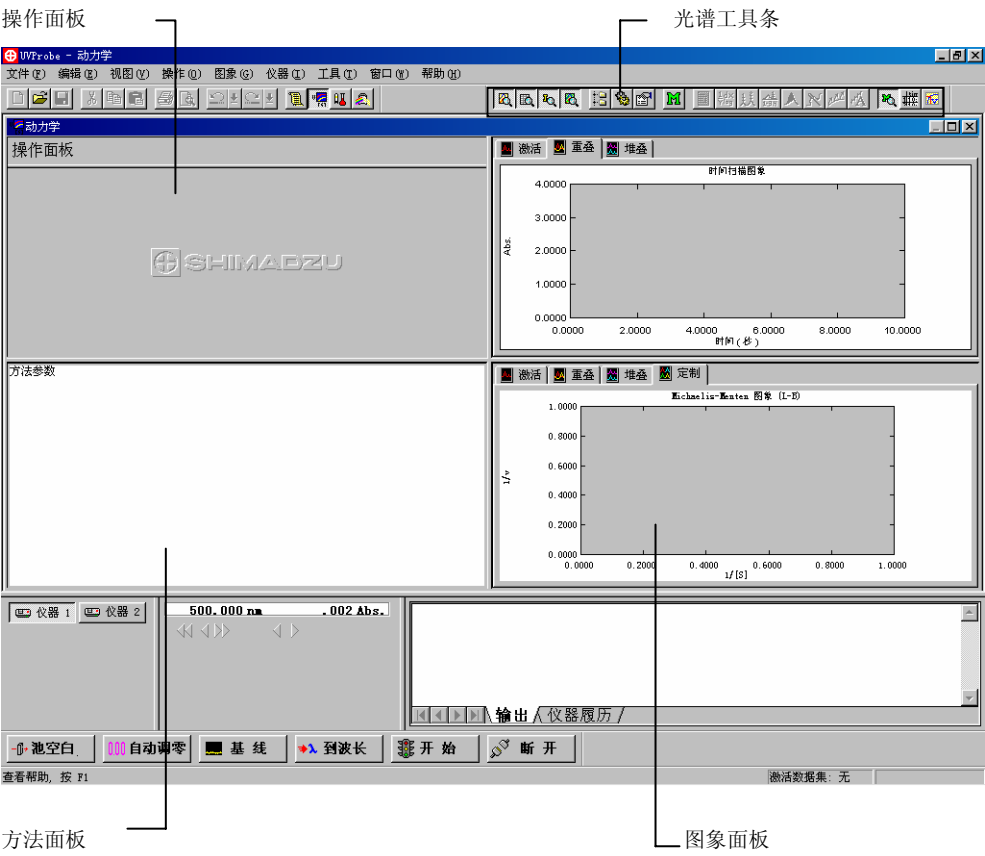
该模块包含三个窗口: 操作，方法，和图象。

- **操作面板** 位于左上角，包含查看和操作所有数据的功能，如数据打印，峰面积，峰值检测。
- **方法面板** 位于操作面板下方，显示激活数据集的数据采集方法信息。
- **图象面板** 位于右方，包含激活、重叠图象和堆叠图象。

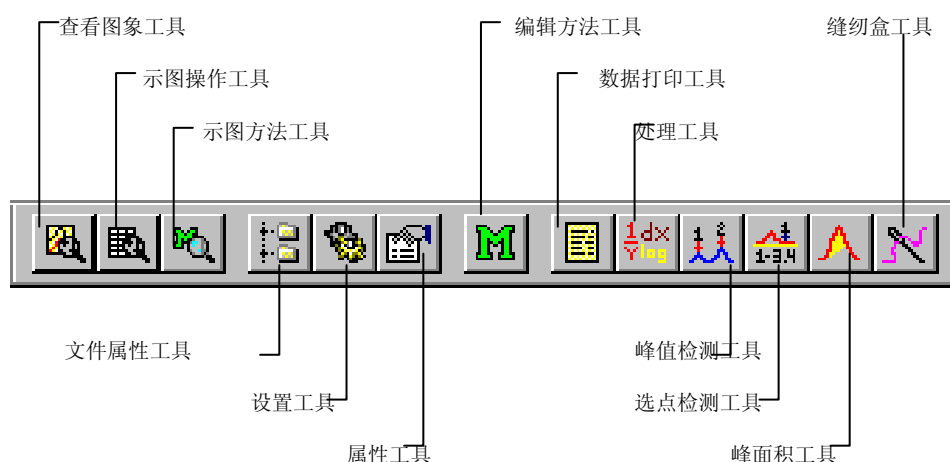
本章节包含下列练习：

- 基本测定
- 基本的光谱操作
- 先进的光谱技术

光谱窗口



## 光谱工具条



## 练习 1 – 基本测定

在这个练习中：

- 进行基线校正
- 建立数据采集方法
- 保存数据采集方法
- 采集数据
- 保存数据

开始之前，最大化 UV Probe 窗口，确保光度计状态条、光度计键条、仪器条和输出窗口都显示在屏幕上。当需要时，可使用视图菜单。

**注：** 如果尚未加入仪器，需要重新配置见简介。请参考第 29：与分光光度计通讯。

### 第 1 步 – 进行基线校正

基线校正设定当前选择的波长范围内的背景为零，在此范围内的所有后续的读数受其影响。基线校正确保在采集数据时有较好的参照点。

**注：** 定期进行基线校正可补偿漂移。

完成基线校正后，UV Probe 将基线校正的信息存储到仪器履历中，包括分析者、日期和时间。

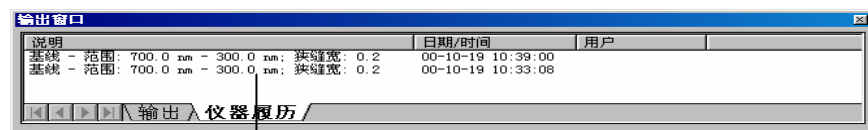
**注：** 在开始基线校正之前，确认样品或参比光束无任何障碍物，并且样品室中没有样品。如何辨别样品或参比光束请参考仪器使用指南。

## 进行基线校正和查看仪器履历

- 1 选择 窗口 > 光谱，打开光谱模块。

**注：** 当安装了多个仪器时，点击仪器条上的键，选择需要的仪器。

- 2 点击光度计键条中的“连接”来连接仪器。
- 3 点击光度计键条中的“基线”来进行基线的初始化操作。
- 4 当基线参数对话框弹出时，在开始波长和结束波长中分别输入 700 和 300。
- 5 点击“确定”。注意在基线校正过程中光度计状态窗口的读数变化。
- 6 当完成扫描后，点击输出窗口的仪器履历标签。查看列出的基线校正信息。



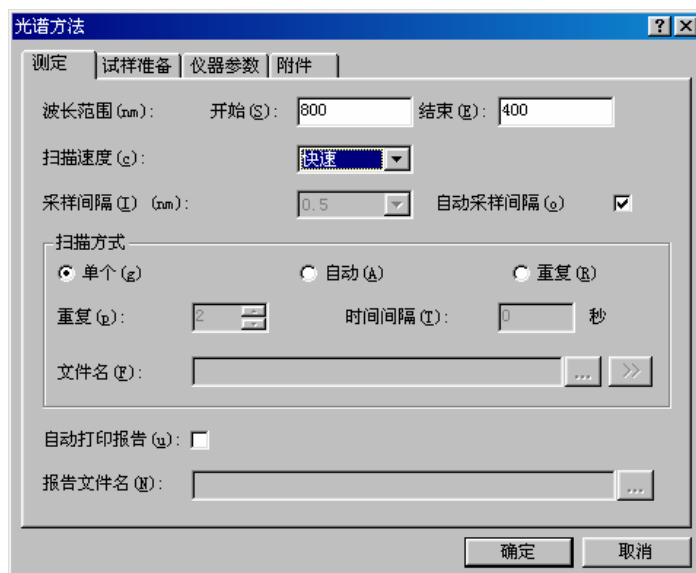
列出的基线校正履历



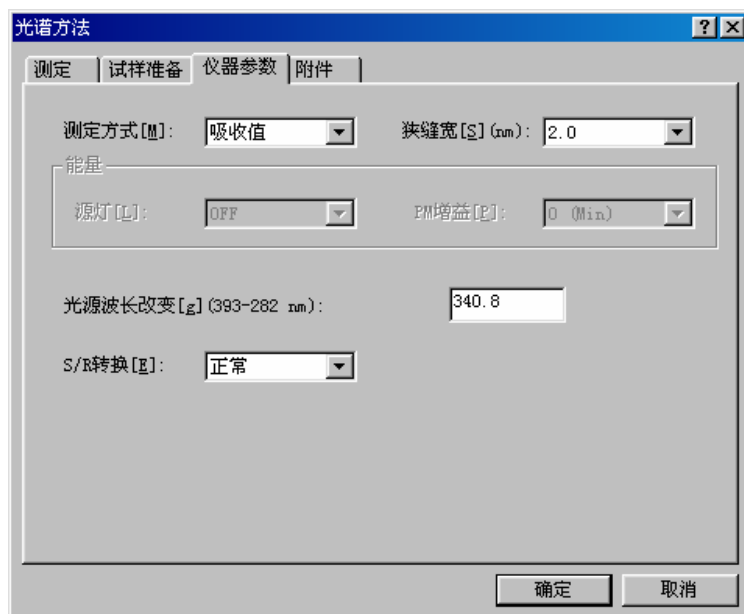
## 第 2 步 – 建立数据采集方法

建立一个数据采集方法，波长范围：600 ~ 450；扫描速度：中；取样间隔：1.0 nm。测定锗钨滤光片的吸收。（可用任何其他滤光片或样品替代。）

- 1 选择 编辑 > 方法，或点击方法图标 显示光谱方法对话框。



- 2 设置波长范围，在开始框和结束框中分别输入 600 和 450。
- 3 在扫描速度列表框中选择“中”。
- 4 在采样间隔目录中选择 1.0，。使仪器每 1.0 nm 采集一次数据。
- 5 在扫描方式下选择单精度。表示在指定波长范围内单次测定。
- 6 点击仪器参数标签。



- 7 在测定方式目录中选择“吸收”。

- 8 点击“确定”，将参数传给仪器。注意光度计状态条上显示的“光度计设置”信息(显示时间比较短暂)。

其他方法设置都处于默认值。有关这些设置的详细信息请参考在线帮助。要查询上下文相关帮助，在对话框的选项上单击右键，然后再点击“这是什么?”即可。

### 第 3 步 – 存储数据采集方法

数据采集方法可以存储起来，以后可调出使用。根据本章节练习 3 的内容将当前方法保存为一个\*.smd 文件

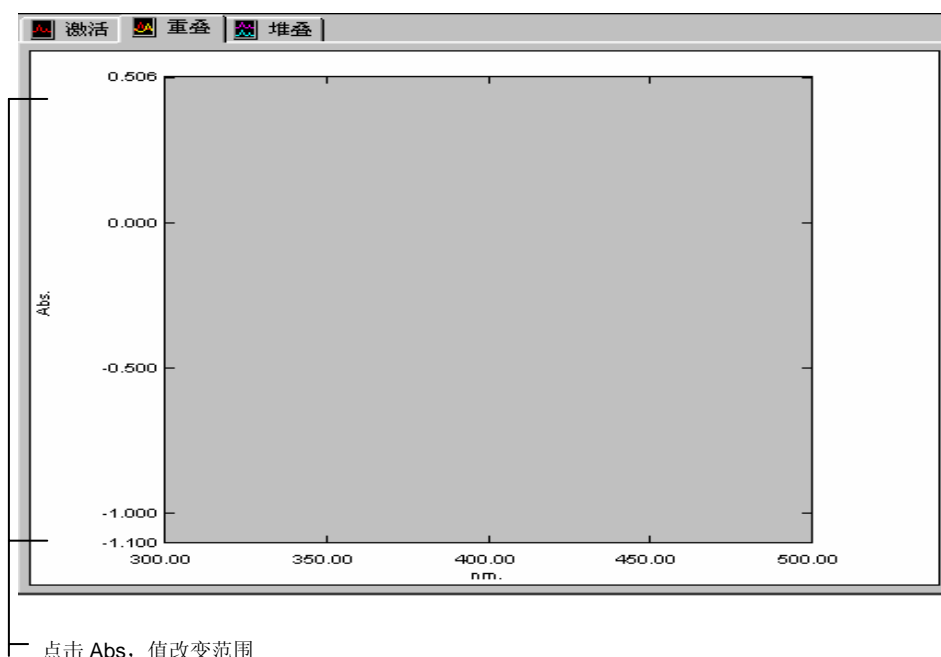
- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 在文件名输入框中，输入 SpecMeth。
- 3 在另存为类型列表框中，点击方法文件(\*.smd)，然后点击存储。

### 第 4 步 – 采集数据

使用上述方法测定锗钽滤光片的吸收光谱。首先，重叠图象的 Y-轴设置为显示采集的数据。一旦有数据传送过来，UV Probe 自动刷新图象，并将 X-轴设定为方法中指定的波长范围。注意，可能需要手工调整 Y-轴以适当地显示数据。

## 设置重叠图象

- 1 点击重叠图象标签，显示重叠方式的图象。
- 2 在 Y-轴上点击最小吸收值，将它改为-1。
- 3 在 Y-轴上点击最大吸收值，将它改为 3。

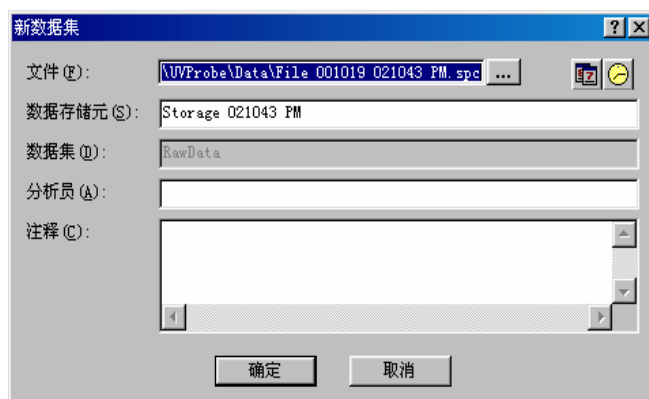


**注：** 在扫描完成后可采用下列技术。

- 确认所有测得的数据是否适当地显示在图象上，可使用“自动标尺”功能。扫描结束后，单击右键并在快捷菜单中选取自动标尺选项，以自动调节图象坐标使之适合数据。
- 缩放图象的某个区域，按住鼠标左键，在图象上拖曳出需要范围的方框，释放鼠标后图象立即自动调整显示刚才定义的大小。

## 进行光谱扫描

- 1 将锗钽滤光片放入分光光度计的样品室中。有关仪器详细信息请参考仪器说明书。
- 2 点击仪器条中的“开始”，启动扫描。
- 3 当扫描完成后，在弹出的新数据集对话框中输入“锗钽”作为文件名。



- 4 输入“Data1”作为数据储元名，点击“确定”。

---

## 第 5 步 – 保存数据

---

至此，数据已被采集并命名，但数据仅仅存储在内存中，而没有存储到磁盘上。如果此时关闭 UV Probe，数据将会丢失。要保存数据，应将其保存到文件中。

当保存一个光谱文件时，UV Probe 将在文件中以数据集的方式分别保存下列内容。

- 峰面积表
- 选点检测表
- 峰值检测表
- 方法信息
- 概要信息
- 履历信息

## 存储数据

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 在对话框顶部的保存位置中选择适当的路径。
- 3 输入“镨钕”作为文件名。
- 4 在保存类型中选择.spc。
- 5 点击“保存”。

**注：** 选择 文件 > 保存 来存储文件；但是存储文件到一个指定的文件夹中需要使用“另存为”指令。

**注意：** 可以通过两种方法显示数据集的参数。

1. 打开文件属性对话框并选择数据集图标。参数将显示在方法框架中。
2. 在图例窗口双击数据集，参数将显示在方法窗格中。

---

## 练习 2 – 基本光谱操作

---

在本练习中：

- 打开一个峰值检测表，调整阈值，和修改表使之对图象进行标注。
- 建立一个峰面积表。
- 使用四则运算和转换处理类型处理数据集并建立两个新的数据集。

### 第 1 步 – 调节峰值检测表的参数

---

峰值检测表显示在操作面板上，用来显示数据集中的所有的峰和谷，以及该点所代表的波长，吸收值，透射率或反射率的值。

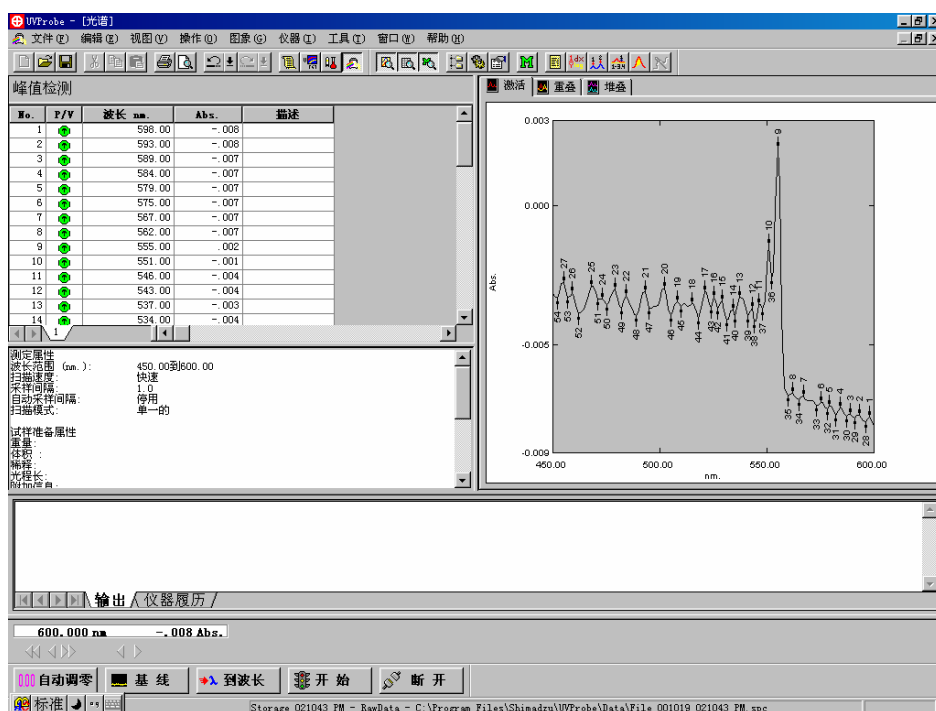
在这个练习中，查看峰值检测表，调节阈值，和使用峰值检测表属性页，通过激活和停用标注来标记图象。

## 打开文件并显示激活图象

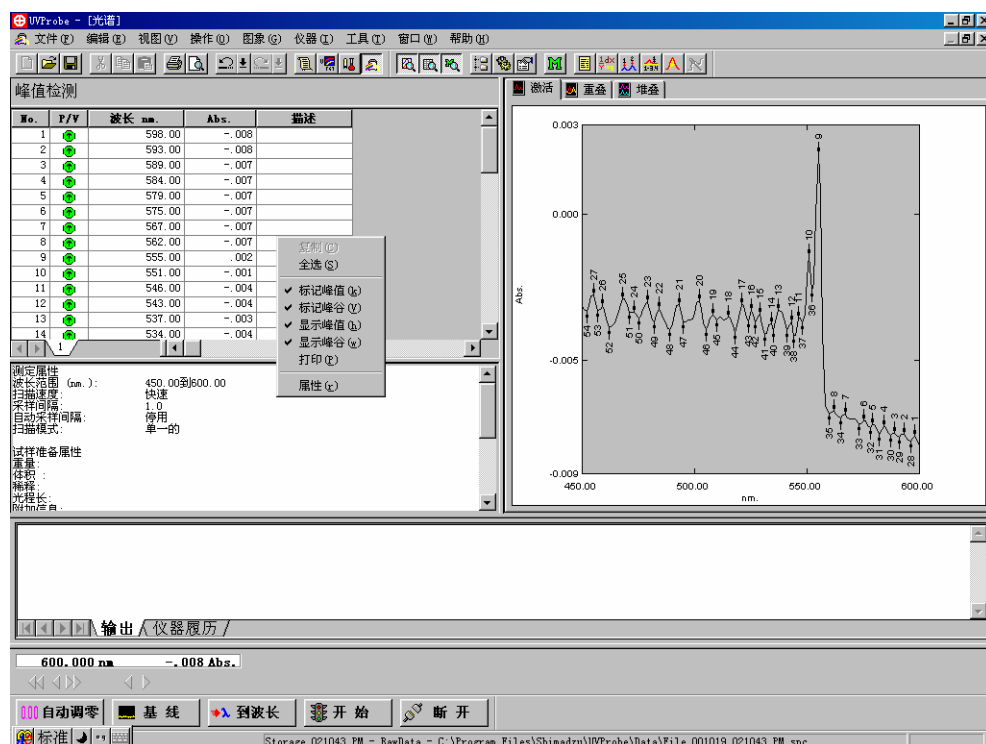
- 1 点击图象面板上的激活图象标签
- 2 选择 文件 > 打开。
- 3 双击文件数据文件夹中的“Holm\_ox.spc”。
- 4 在图象上单击右键，选择自动标尺设置图象显示所有的数据。注意，图象上的峰 和谷的编号。

## 显示峰值检测表


- 1 选择 操作 > 峰值检测。  
如果需要，使用示图菜单隐藏方法面板和输出窗口使屏幕上有更大的空间显示峰值检测表。屏幕显示如下图：

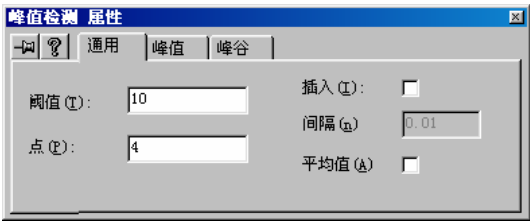


- 在峰值检测表中单击右键，选取快捷菜单上选择标记峰。重复以上步骤标记谷。注意，此时图象上峰和谷的标记将消失，如下图。



## 改变峰值检测的阈值

- 在峰值检测表中单击右键，选取快捷菜单中的属性选项。
- 点击属性页的  来固定属性页。



- 3 在阈值输入框内键入 10，按回车键，观察峰值检测表的变化。改变后的表如下图。

光谱

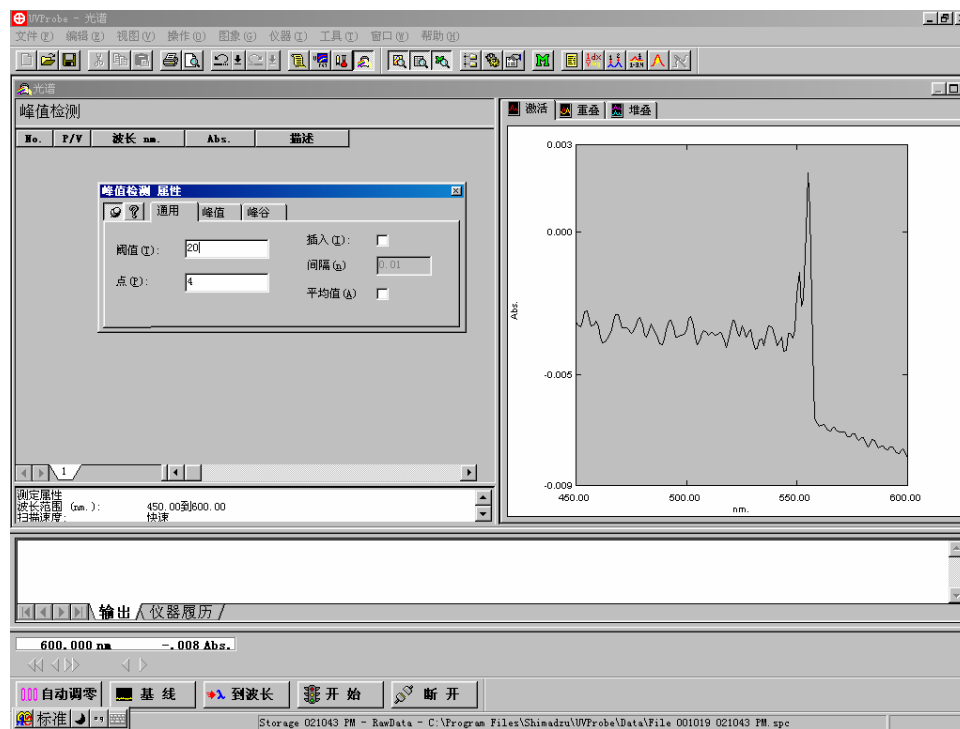
峰值检测

No.	P/V	波长 nm.	Abs.	描述
1	P	598.00	- .008	
2	P	593.00	- .008	
3	P	589.00	- .007	
4	P	584.00	- .007	
5	P	579.00	- .007	
6	P	575.00	- .007	
7	P	567.00	- .007	
8	P	562.00	- .007	
9	P	555.00	.002	
10	P	551.00	- .001	
11	P	546.00	- .004	
12	P	543.00	- .004	
13	P	537.00	- .003	
14	P	534.00	- .004	
15	P	529.00	- .003	
16	P	525.00	- .003	
17	P	521.00	- .003	
18	P	515.00	- .004	
19	P	508.00	- .003	
20	P	502.00	- .003	
21	P	493.00	- .003	

- 4 在阈值框键入 20，按回车键，可发现随着阈值的增加表中的条目随之减少。阈值越大，检测到的峰和谷越少。
- 更详细的关于峰值检测阈值的运算，请参考在线帮助。

## 图象上峰和谷的标注

- 1 把属性页向下拖曳，使之峰值检测表完全显示。



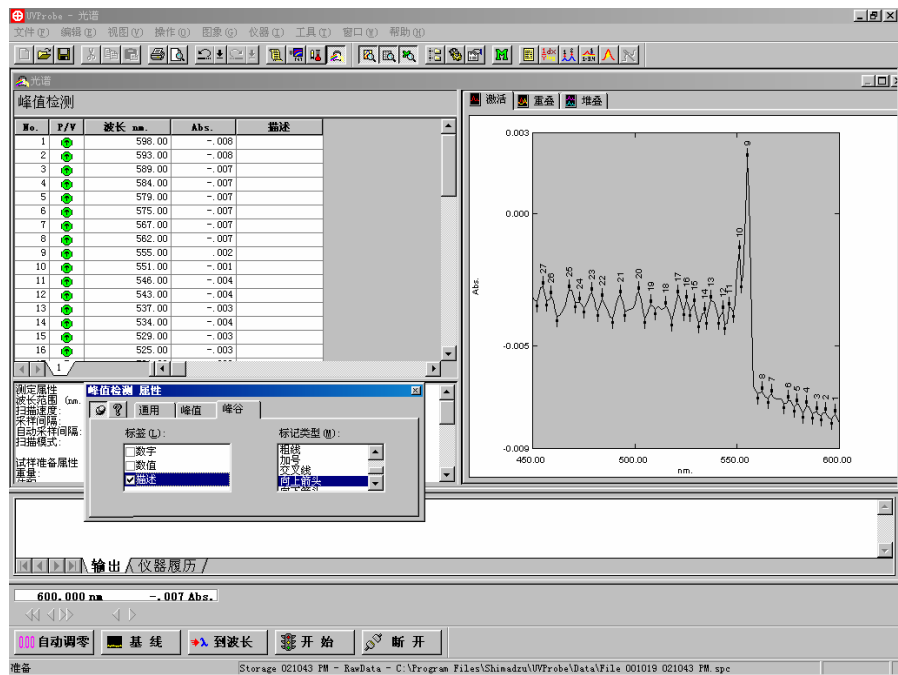


- 2 在峰值检测表的说明列中，输入下列信息。当标记峰和标记谷激活时，这些输入的信息将出现在图象上。

No.	Peaks	No.	Valleys
1	Peak A	13	Valley A
2	Peak B	14	Valley B
3	Peak C	15	Valley C
4	Peak D	16	Valley D
5	Peak E	17	Valley E
6	Peak F	18	Valley F
7	Peak G	19	Valley G
8	Peak H	20	Valley H
9	Peak I	21	Valley I
10	Peak J	22	Valley J
11	Peak K		
12	Peak L		

- 3 点击峰值检测属性页中的峰标签。
- 4 点击描述核选框。注意输入的说明显示在图象中的峰上。
- 5 点击编号核选框。图象上峰的编号不再显示。
- 6 点击峰值检测属性页中的谷标签。
- 7 点击描述核选框。注意输入的说明显示在图象的谷上。
- 8 点击编号核选框。图象上谷的编号不再显示。

经过上述操作屏幕上的图象如下。注意激活图象，每个峰 和谷都有刚才输入到峰值检测表中的说明。



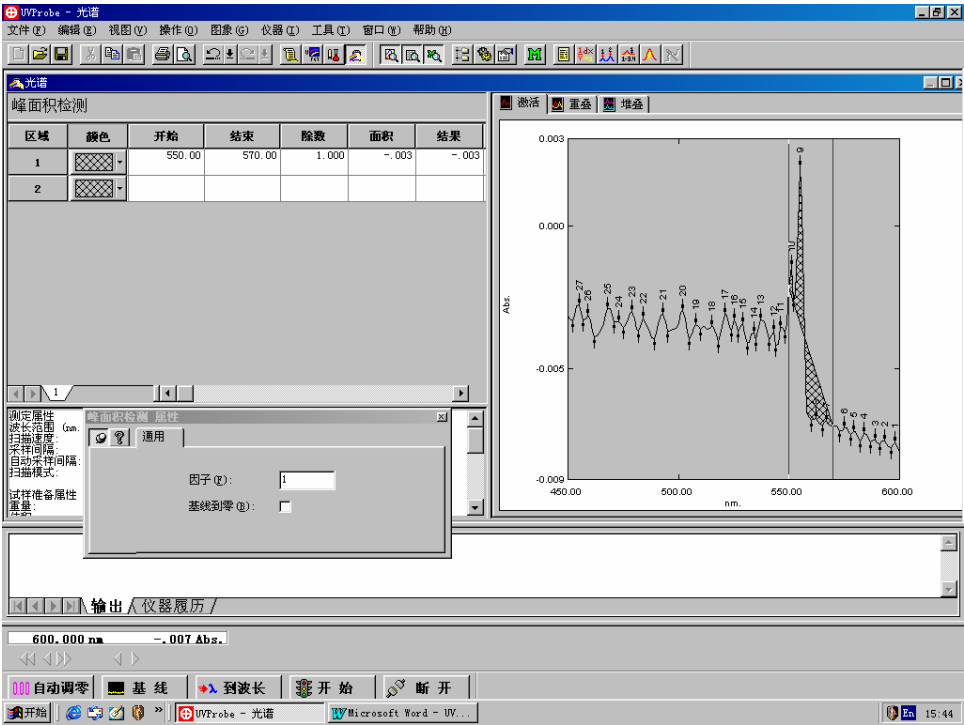
## 第 2 步 – 建立峰面积表

峰面积用于计算曲线下的区域。峰面积包含一个或多个区域，每个区域相当于表中的一列并且包含定义一个区域的开始波长和结束波长。输入定义一个区域的开始波长和结束波长，峰面积将返回区域值。每一个打开的数据集均可定义不受数目限制的区域。

现在，将图象的 X-轴的范围改变为 300 到 400nm。如何改变图象范围请参考页6 页。

## 在峰面积表上定义区域

- 1 选择 操作 > 峰面积，调整图象尺寸以在图象上显示峰面积表的每列(最后一列是描述列)。
- 2 选取峰面积表，点击“开始”列作为区域 1。
- 3 在开始波长中输入 350，按 Tab 或回车，然后在结束波长中输入 365。
- 4 按下回车键定义峰面积范围。屏幕的外观类似下图。注意，读数条 恰好在开始和结束波长的位置上，曲线下的面积涂有颜色并有一定的格式。区域 1 的颜色和涂色类型将于峰面积表中的颜色列中标出的相同。



### 第 3 步 – 处理峰面积表和图象

峰面积表和峰面积图象都可进一步被处理。在这一部分，改变表中的除数，观察其对结果列的影响。然后在图象上设置“基线到零”。

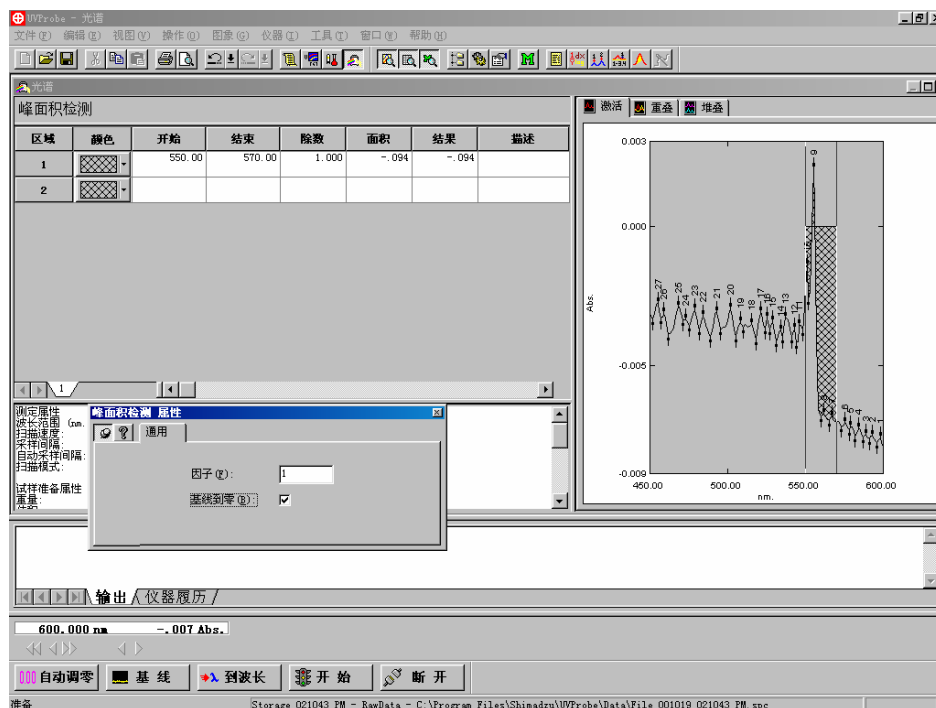
#### 改变除数

- 1 将峰面积表中除数列的除数改为 2。
- 2 按下回车键。观察除数的变化对峰面积表中结果列的影响。结果将是面积将除以 2，是面积值的一半。

区域	颜色	开始	结束	除数	面积	结果	描述
1		550.00	570.00	1.000	-1.003	-1.003	
2							

#### 改变基线到零

- 1 将 Y-轴的最小值改为-10，便于观察操作的结果。
- 2 点击峰面积表，更新销入的属性页。
- 3 在峰面积属性页中，点击“基线到零”核选框。注意计算得到的面积和结果将同时更新，图象上峰面积区域的基线变成零。



## 第 4 步 – 建立新的区域

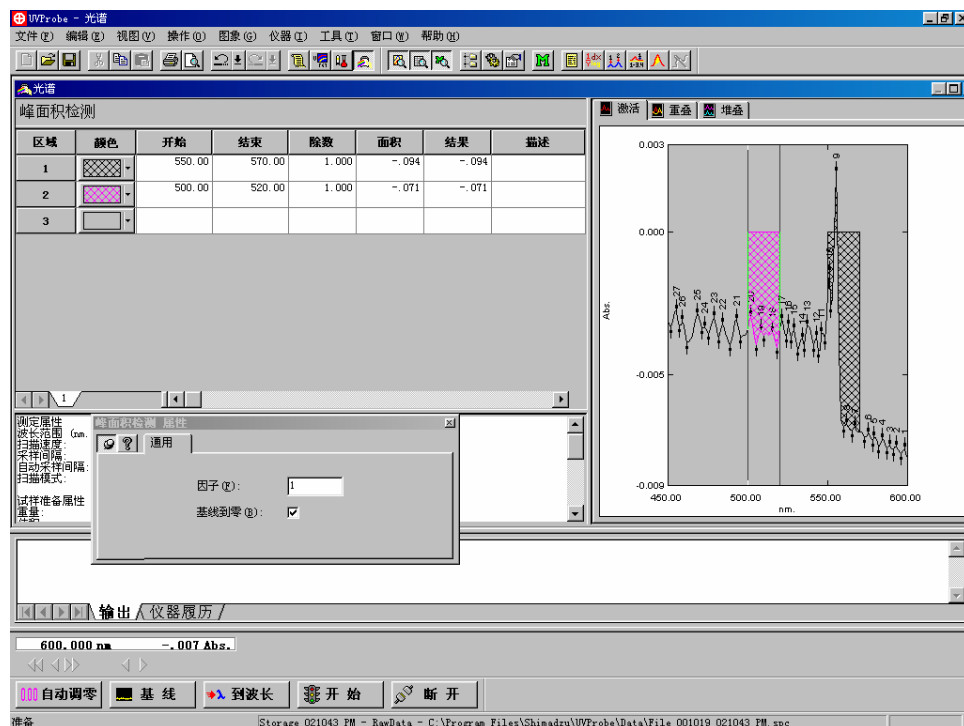
可在图象上使用读数条定义区域而不必在峰面积表上手动键入开始和结束值。

### 使用读数条建立区域

- 1 点击“基线到零”使基线返回原先的值。
- 2 点击峰面积表中的区域 2。
- 3 在图象中，拖曳左边的读数条到波长读数 310。
- 4 拖曳右边的读数条到 340。至此，在图象上定义了一个新的区域。

### 定义颜色和涂色类型

- 1 在峰面积表的区域 2 中，点击颜色列中的颜色键或颜色键边上的向下箭头。
- 2 选择与先前区域不同的颜色和涂色类型。点击确定
- 3 点击基线到零复选框。注意图象上区域 2 的颜色和涂色类型的变化，见下图。



**注：** 自定义颜色可通过颜色菜单中的 C(自定义)选项定义。如果定义的区域较多的话此功能非常有用。

## 保存数据

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 输入“峰”作为文件名。
- 3 类型选择为.spc，点击“保存”。

## 第 5 步 – 处理数据集

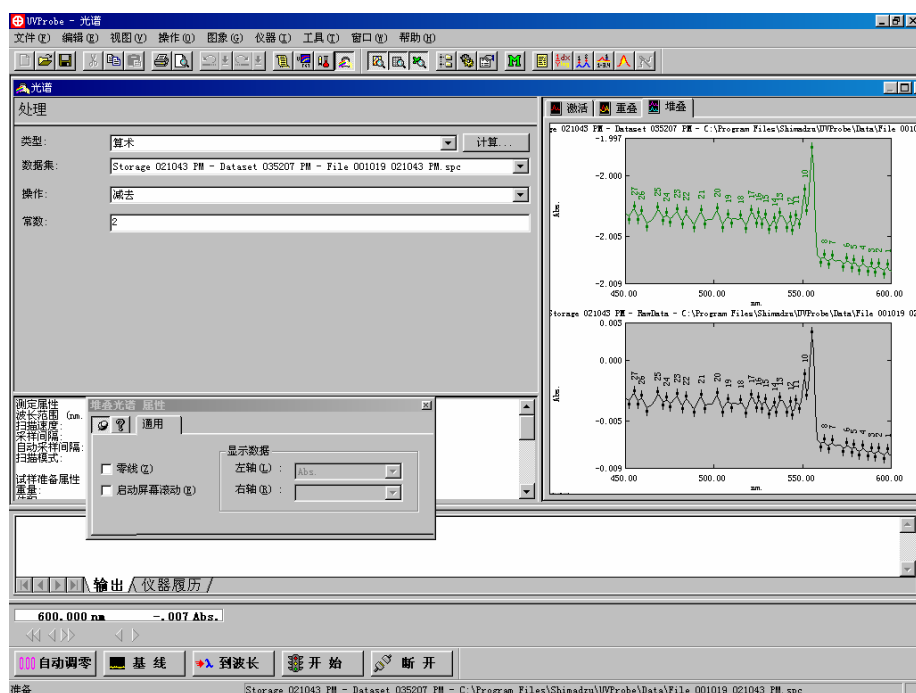
下面的练习应用处理功能，把文件 **anthracene.spc** 中的原始数据集处理建立两个新的数据集，并用堆叠图象的方式显示这些数据集。首先，先除去当前内存打开的文件，使堆叠图象只显示 anthracene.spc 的数据集。

## 从内存中删除文件

- 1 选择 文件 > 属性。
- 2 选择文件属性对话框，轮流点击各文件，然后点击“删除”。
- 3 当最后一个文件被删除后出现对话框，点击“确定”。
- 4 当所有文件都从内存中删除后点击“关闭”。

## 打开新文件和进行四则运算处理

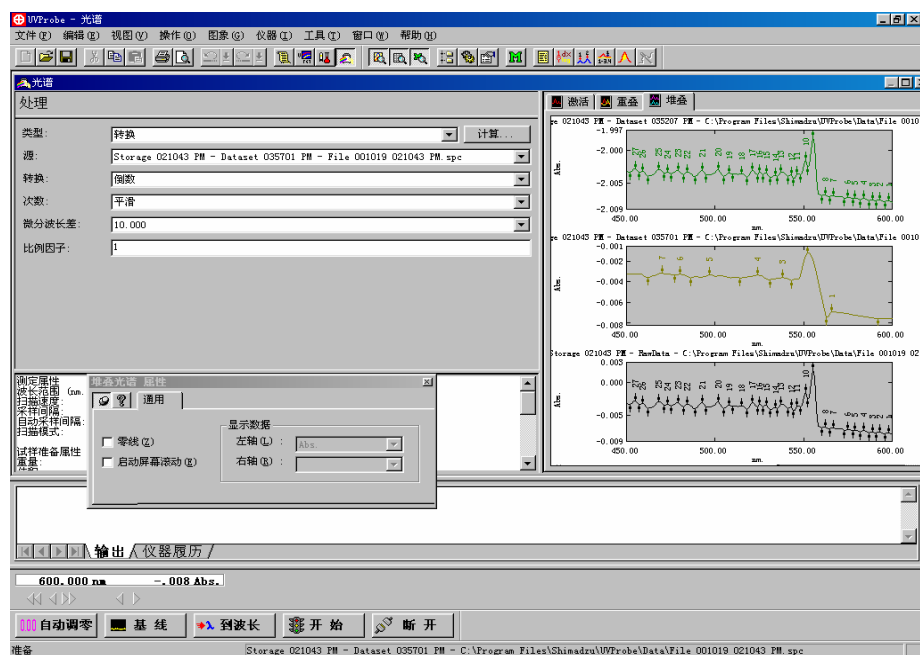
- 1 选择 文件 > 打开。
- 2 在数据路径中，选择打开文件 anthracene.spc。
- 3 选择 操作 > 处理。
- 4 确认操作面板上的处理类型是“四则运算”。
- 5 在数据集列表中，检查是否选择了“原始数据”。
- 6 在算符目录中，选择“减”。
- 7 在常量输入框中输入 2，点击“计算”。
- 8 在新数据集对话框中输入 SubTwo 作为数据集名。点击“确定”。
- 9 点击图象中堆叠标签以显示所有打开的数据集。注意，现在图象面板显示两个图象。一个图显示原始数据，另一个显示处理得到的数据，其吸收值在整个波长范围内比原始数据的吸收值小 2。



## 使用倒数转换建立数据集

- 1 在类型列表框中选择“转换”。
- 2 在源列表中选择原始数据。
- 3 在变换列表中选择“倒数”。
- 4 点击“计算”。
- 5 在新数据集对话框中，输入“倒数”作为数据集名，然后点击确定。

- 6 如下图所示。注意到有三个图象，每个数据集一个图象。



## 存储数据为别的文件

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 输入“处理”作为文件名。
- 3 点击“保存”。存储的文件有三个数据集。



---

## 练习 3 – 先进的技术

---

在这个练习中：

- 使用池定位装置和自动扫描功能采集数据。
- 使用 UV Probe 复制和粘贴位图和表格到写字板 ( 视窗软件包括的字处理功能)。

### 第 1 部分 – 通过池定位装置采集数据

使用练习 1 中存储的数据采集方法进行池定位装置和使用自动扫描功能采集数据。当没有池定位装置附件时，可跳过此练习。

制备三个光谱特性接近的样品。

### 第 1 步 – 加载和修改存储在磁盘中的数据采集方法

---

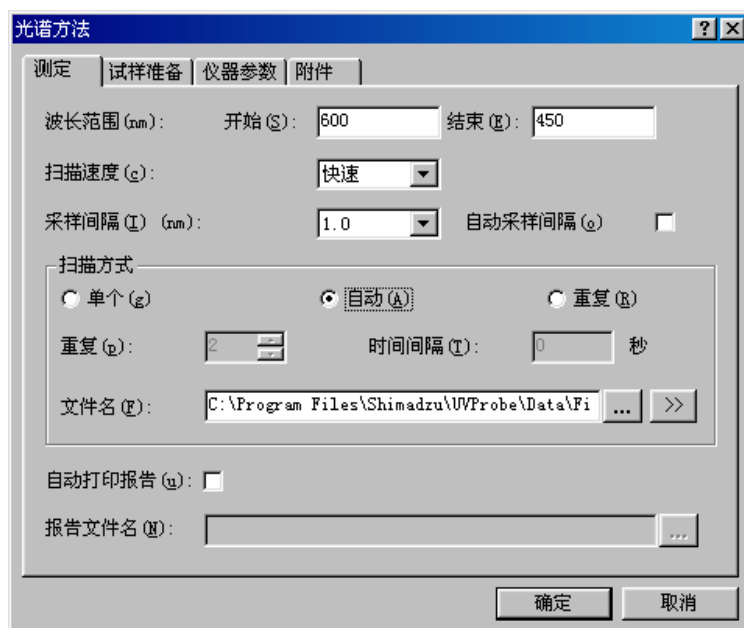
此处，打开一个先前存储的数据采集方法文件，然后把方法修改成使用多联池定位装置和自动扫描功能的方法采集数据。当自动扫描激活时，只要输入一个文件名，UV Probe 自动在此文件名后加上数字的后缀并把每次扫描得到的数据集存储到该文件中。

## 加载数据采集方法

- 1 选择 文件 > 打开。
- 2 在文件类型列表框中，选择方法文件(\*.smd)。
- 3 选择文件 SpecMeth.smd。
- 4 点击“打开”。

## 修改采集方法

- 1 点击“连接”(如果尚未连接仪器)。
- 2 选择 编辑 > 方法。

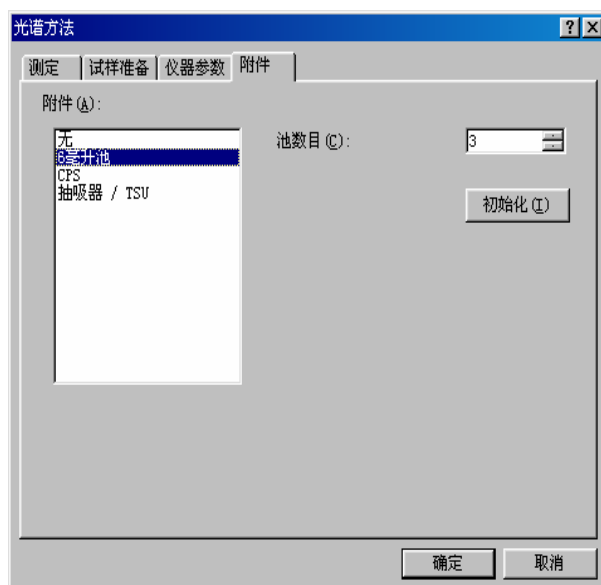


- 3 选择测定标签和确认下列各项：：
  - 15 开始波长： 600
  - 16 结束波长： 450
  - 17 扫描速度： 中
  - 18 采样间隔： 1.0
- 4 在扫描模式下，点击“自动”切换到自动扫描方式。
- 5 在文件名框中，输入“自动池”作为扫描得到数据的基础文件名。
- 6 点击仪器参数标签。
- 7 确认测定方式是吸收值。

## 第 2 步 – 配置池定位装置

下面将配置池定位装置，指定使用的池的个数并初始化附件。初始化池定位装置，准直和移动到正确的采集数据的位置。

- 1 点击光谱方式对话框的附件标签。



- 2 选择附件列表中的池定位装置（CPS）。
- 3 输入 3，指定使用的池数。
- 4 点击“初始化”，注意此时分光光度计移动池定位装置到适当的位置。
- 5 当池定位装置定位完毕，点击确定，光度计键条上将增加用于移动池的键。



### 第 3 步 – 从内存除去数据

内存中的文件“anthracene.spc”应该除去，这样只留下使用池定位装置采集的数据集。

- 1 选择 文件 > 属性。
- 2 在文件属性对话框的加载数据框内，展开数据树，轮流点击每个文件并点击删除。
- 3 当最后一个数据集被删除时将弹出一个提示对话框，点击“确定”。
- 4 当从内存中删除所有文件后，点击“关闭”。

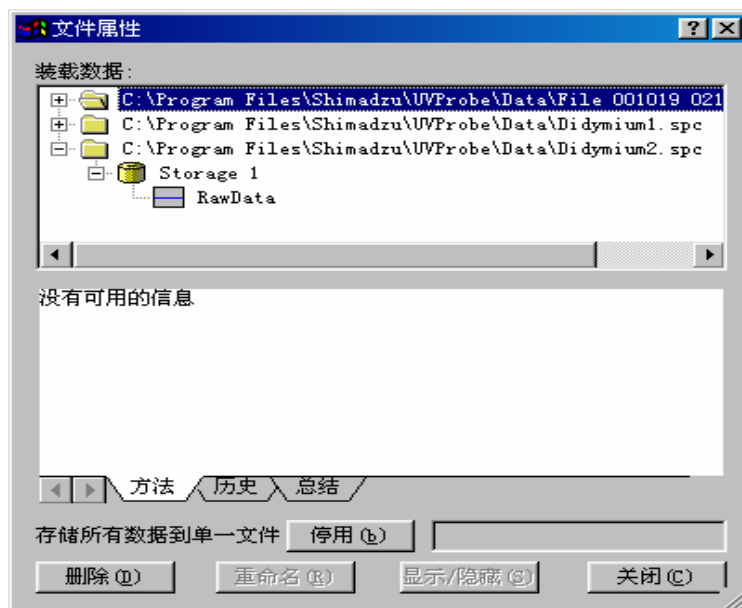
### 第 4 步 – 采集数据

选择将使用池定位装置采集三个样品的数据。

## 用池定位装置采集数据

- 1 把三个样品放入池定位装置样品室最前面池架中。更详细的信息请参考分光光度计的仪器说明书。

- 2 点击光度计键条上的开始键，启动扫描。当扫描完成后，池定位装置 将移动到下一个池。此时不会显示新数据集对话框，因为不是采用单次扫描方式。
- 3 重复上述步骤，测定其余样品。
- 4 当所有的扫描完成后，在重叠 图象上点击鼠标右键，然后选择自动标尺，显示全部数据。
- 5 选择 文件 > 属性。注意到在加载数据列表中有三个文件。每个文件名均包含基本名和时间戳。



- 6 点击“关闭”。

## 保存所有数据

- 选择 文件 > 存储全部。

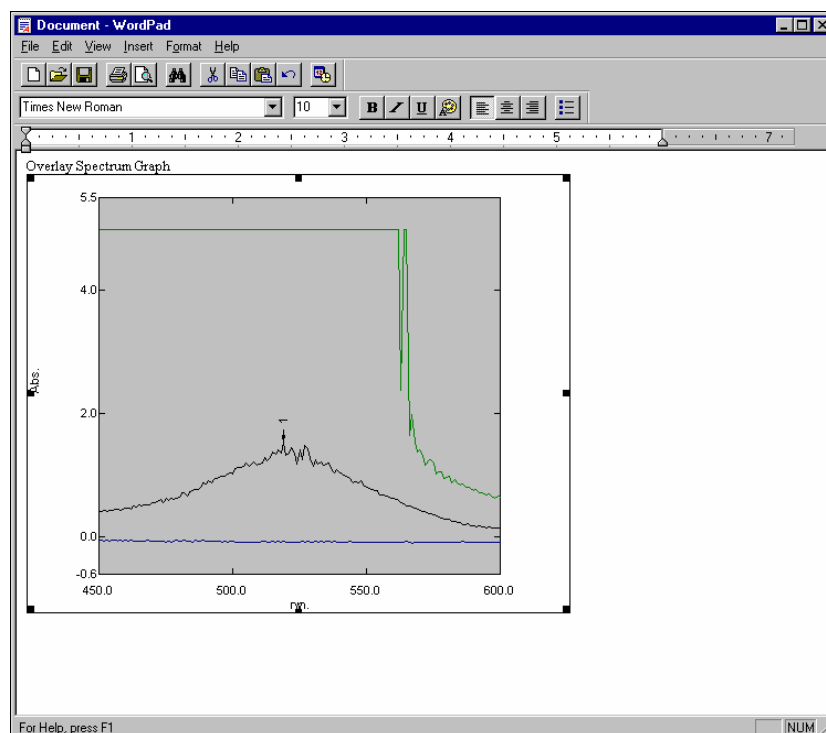
## 第 2 部分 – 使用 UV Probe 和视窗软件的写字板

在本节中，数据从光谱模块输出到写字板。写字板是视窗 9x/NT 操作系统中包括的一般目的的字处理器。写字板中使用的一些操作技巧与多数字处理软件的相同。

### 第 1 步 – 复制和粘贴一个位图到写字板

现在将复制重叠图象到写字板。从 UV Probe 复制的图象可以粘贴到其他文档中，UV Probe 把图象转换成位图(.bmp) 文件。位图文件是标准的图象信息文件，其格式通用于多数图象处理软件。

- 1 选择 开始 > 程序 > 附件 > 写字板。
- 2 键入“**重叠光谱图象**”到空白的写字板文档中，按返回键。
- 3 返回光谱模块并点击重叠图象。
- 4 选择 编辑 > 复制，复制图象。
- 5 返回写字板。选择 编辑 > 粘贴 来将一个光谱的位图图像粘贴到写字板文档中。如下图所示。

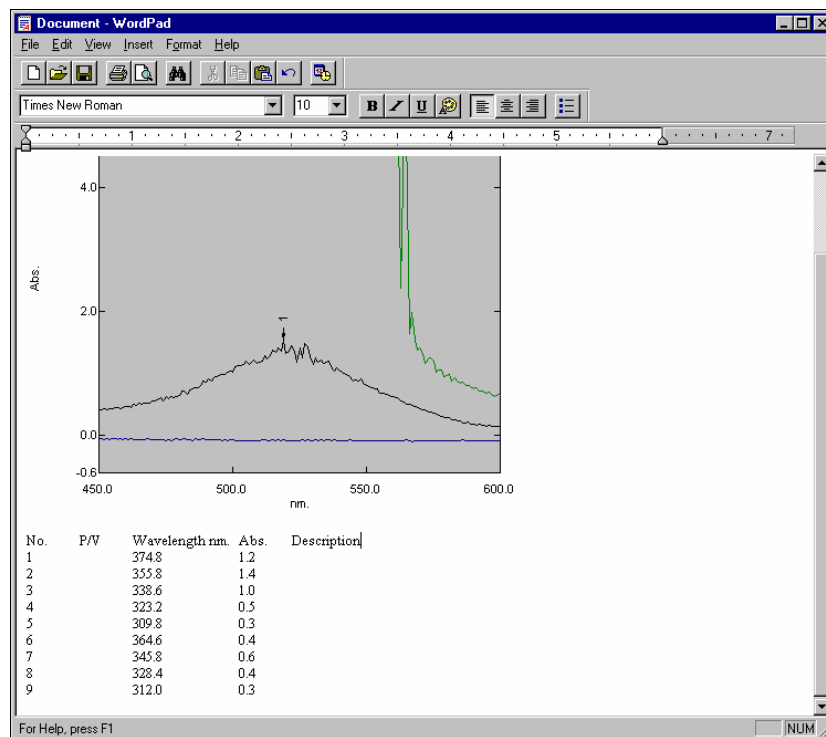


### 第 2 步 – 复制和粘贴表格到写字板

现在将把峰值检测表复制到写字板。在 UV Probe 中，当一个表格复制和粘贴到其他文档时，UV Probe 把表格转换成文本的形式。

- 1 返回光谱模块。
- 2 选择 操作 > 峰值检测。

- 3 在表上单击鼠标右键，显示快捷菜单并选择“全选”选项以选择整个峰值检测表。
- 4 选择 编辑 > 复制，或使用快捷菜单。
- 5 返回写字板，并在图下方粘贴表。



注： 数据也许需要进行适当的处理，使各列与其标题对准。

至此光谱部分完毕。

## 第三章 光度测定模块

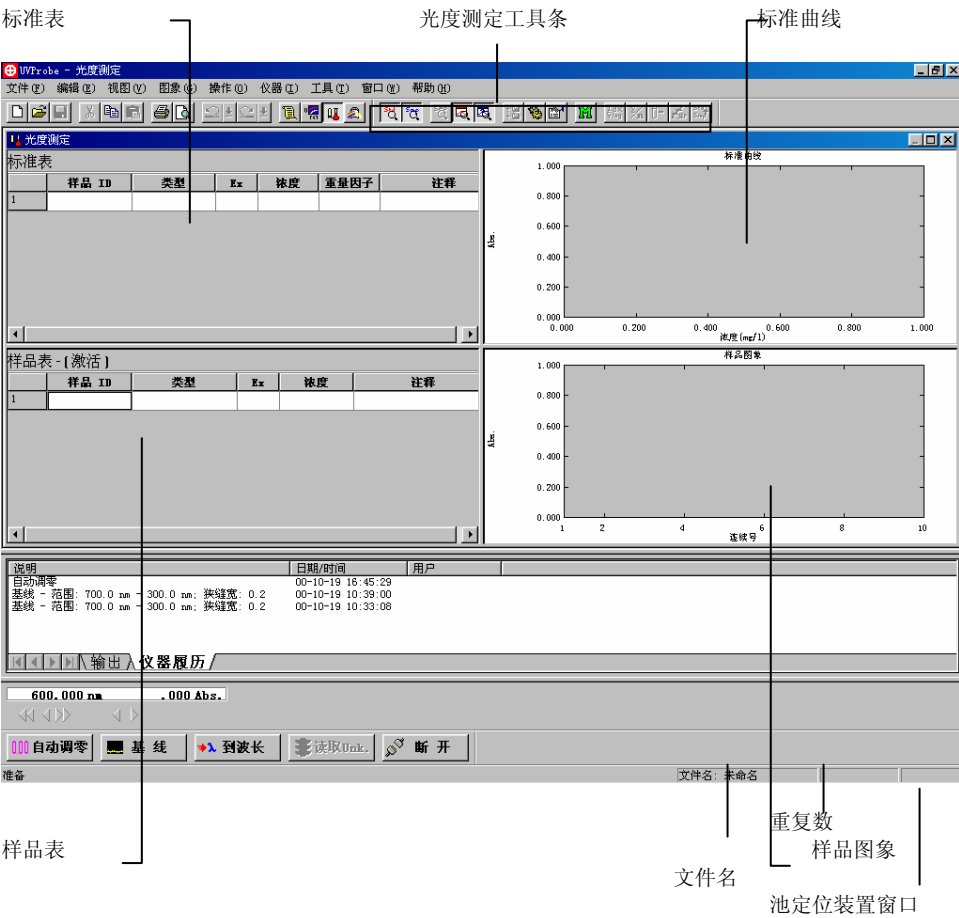
光度测定模块主要用于测定样品中某项物质的浓度；使用分光光度计进行测定并描绘标准曲线，然后通过曲线计算未知样品的浓度值；或通过建立和自定义的方程式推导该数值。

该模块包括四个面板—标准表，标准曲线，样品/S.E.P.表和样品图象面板。每个面板有其独特的功能，只有样品/S.E.P.表 面板除外，该面板可以显示样品表或预测标准误差表( 然后切换两个表见在线帮助)。

本部分包含三个练习：

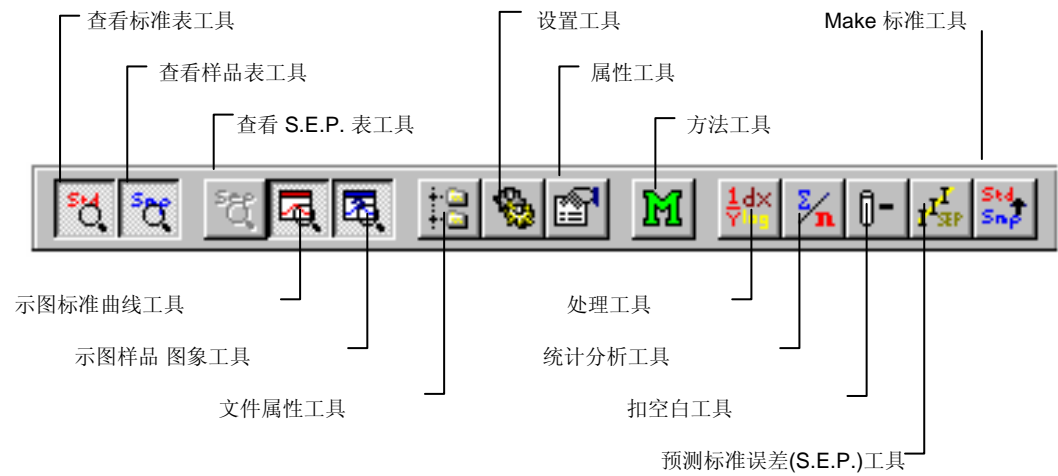
- 基本测定
- 基本的光度测定操作
- 先进的光度测定技术

光度测定窗口





光度测定工具条



---

## 设置和编辑光度测定方法

---

当建立新的光度测定方法时，光度测定方法 Wizard 启动。  
按照 Wizard 引导完成方法的设置。

如果光度测定方法已经建立或如果方法文件已经打开，Wizard 不启动，而打开光度测定方法的属性页。建立的测定方法可在此处编辑。然而，如果样品测定已经开始，有些参数禁止编辑。

新建测定方法  
编辑测定方法

新建测定方法  
当新建光度测定方法时，光度测定方法 Wizard 启动。  
按照 Wizard 引导，完成测定方法的建立。

- 1 当光度测定窗口没有打开时，在窗口菜单中选择光度测定，激活光度测定模块。
- 2 选择文件 > 新建。
- 3 选择编辑 > 方法。
- 4 光度测定方法 Wizard 启动。

设置波长

此窗口设置要测定的波长和波长范围。此处设置的波长或波长范围设置插入作为表中的列。测定的值将显示在各波长列或波长范围列中。

- 1 在波长类型框中选择点或范围。
- 2 如果选择的是点，请见下列：  
插入波长点。(测定波长)
- 3 如果选择的范围，请见下列：  
插入波长范围。(测定波长范围)
- 4 点击下一步键。

## 练习 1- 部分 1- 步骤 1

启动光度测定方法 Wizard

光度测定方法 Wizard — [波长] 标签页

光度测定方法 Wizard — [校准] 标签页

选择 [多点]或[单点]

选择 [K-因子] 或 [原始数据]

光度测定方法 Wizard — [测定参数(标准)] 标签页

光度测定方法 Wizard — [测定参数(样品)] 标签页

光度测定方法 Wizard — [文件属性] 标签页

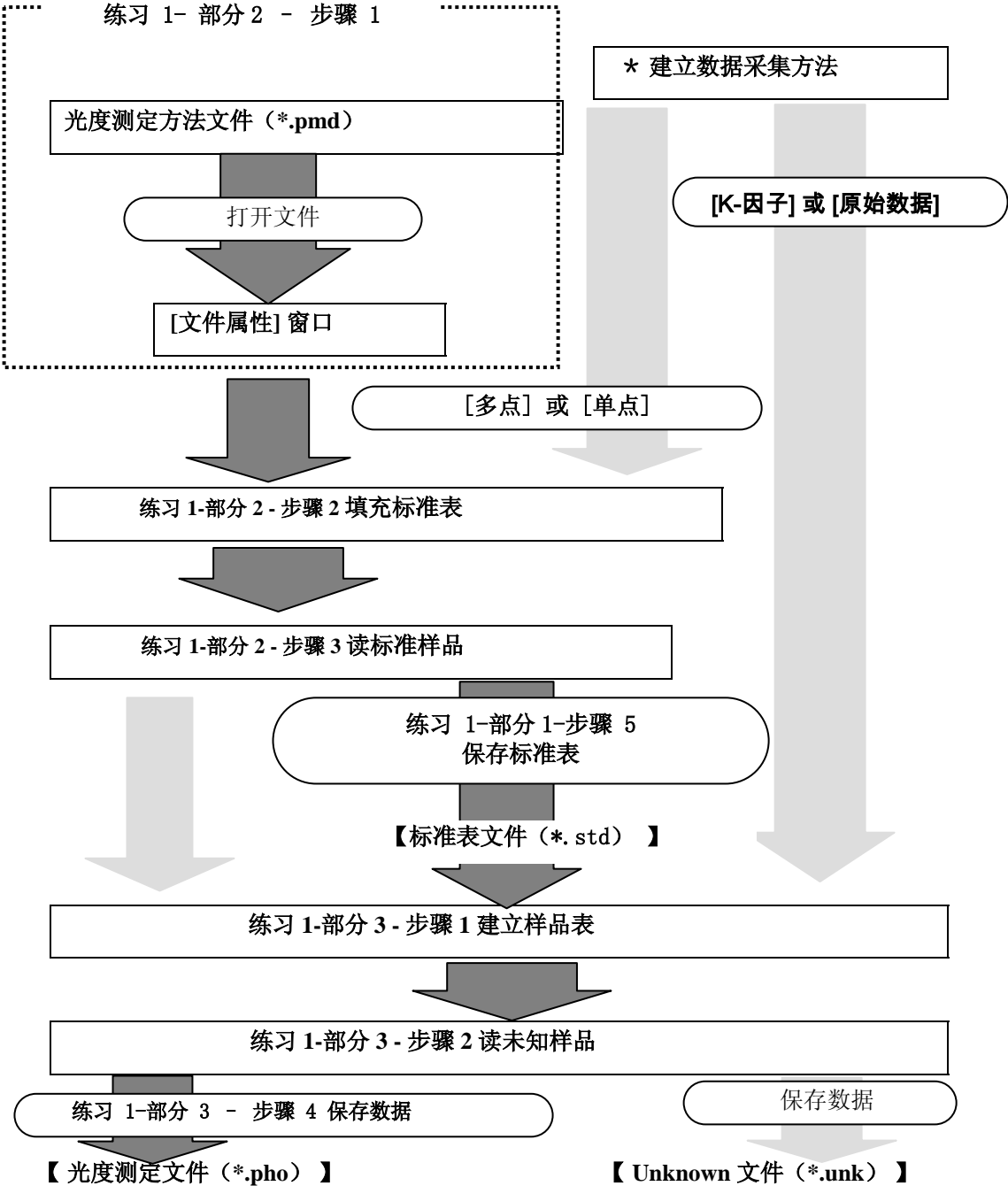
完成光度测定方法 Wizard

光度测定方法对话 — 设置其他参数

练习 1-部分 1-步骤 2 保存数据采集方法

【光度测定方法文件 (\*.pmd)】

填充标准或样品表 (下一页\*)



注： 光度测定文件包括标准和样品表的信息。

注： 未知文件包含样品表的信息。

---

## 练习 1 – 基本测定

---

在这个练习中：

- 建立标准曲线
- 读取未知样品的数据

### 第一节 建立标准曲线

开始之前：

- 准备五种性质相同浓度不同的标准样品。
- 选择 窗口 > 光度测定，打开光度测定模块。
- 确认仪器已经连接。
- 进行基线校正 (查看 第一部分,3页).

**注意** 当手工输入数据时，无需制备标准样品。按照下列步骤，依次进行手工输入。手动输入数据能使用户理解如何得到读数结果。

建立并查看标准曲线：

- 建立数据采集方法
- 填充标准表
- 利用分光光度计采集标准样品的读数
- 显示标准曲线面板

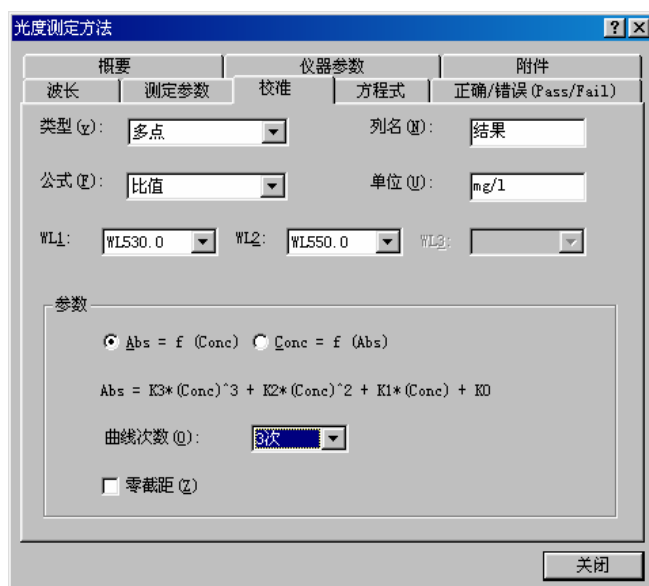
### 第一步 – 建立数据采集方法

---

- 1 选择文件 > 新建，或点击工具栏上的新建图标。
- 2 选择编辑 > 方法，或点击工具栏上的方法图标。
- 3 启动光度测定方法向导。



- 4 点击下一步，所有的其他的参数设置到默认的。

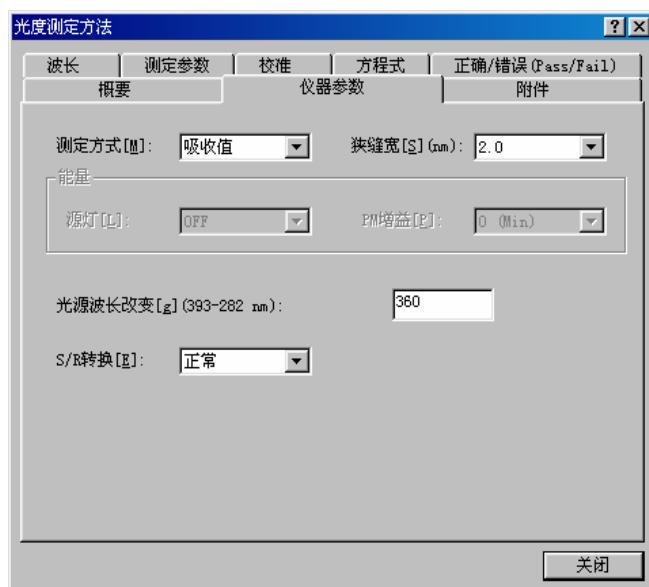


- 5 在类型框中，选择多点，标准曲线采用多个数据点。
- 6 在公式框中，选择比值。
- 7 在 WL1 框中，选择 WL530.0。
- 8 在 WL2 框中，选择 WL550.0。
- 9 确认列名框中建立了“结果”。进行各样品的读数后，结果列中将显示 530 nm 处吸收值的读数除以 550 nm 处吸收值读数的结果。
- 10 在曲线次数 框中，选择 3rd。
- 11 点击下一步。
- 12 将出现测定参数标准标签页。在此标签页中，可设置标准样品表的数据采集方法(手动或仪器)，此处不进行任何更改并点击下一步键。
- 13 将出现测定参数未知样品表的标签页。可设置未知样品表的数据采集方法(手动或仪器)，此处不进行任何更改并点击下一步键。

14 将出现文件属性标签页。不进行任何更改并点击“完成”键。

注意：该标签页设置文件要测定的数据的信息。当根据建立的测定方法执行测定时，输入文件名称等到此标签页中。本节说明建立和保存测定方法的步骤，而标签页设置不在此处说明。

15 光度测定测定方法窗口打开。点击仪器参数标签。



16 选择吸收值作为测定方式。

17 在狭缝宽(nm)框中，选择 2.0。(当仪器狭缝宽固定时，忽略此步骤。) 所有的其他的参数设置到默认。

18 点击关闭。确认标准和样品表中现在都包括了标注有 WL530.0、WL550.0 和结果的列。

## 第二步 保存数据采集方法

把编辑好的数据采集方法存储到磁盘中，以后可以调出使用。当前的方法 将存储为\*.pmd 文件和并用于以下的练习中。

- 1 选择 文件 > 另存为，然后确认数据 (文件夹)存在在存储框中。
- 2 在文件名框内，输入 PhotoMeth。
- 3 在另存为类型列表中，点击方法(\*.pmd)，和点击“保存”。

## 第二节 – 测定标准样品

进行下列操作建立和查看校准曲线 使用建立和保存在部分 1 的测定方法。

- 输入文件信息
- 建立标准样品表
- 测定标准样品
- 查看校准曲线

在开始前，制备 5 个不同浓度值的标准样品。

注意：如果手动输入数据就不必要制备标准样品。在此情况下，请练习操作如下。当输入数据时，输入相同的值作为手动结果。



步骤 1 — 输入文件信息

设置信息，如要测定数据的文件名称。如果使用已经存在的测定方法。需要在测定前输入。

注意：建立测定方法然后进行测定，在测定方法 wizard 中输入文件信息。  
本节说明使用保存的测定方法进行测定的步骤。

- 1 选择文件 > 新建，清除已经存在的测定方法。
- 2 选择文件> 打开。确认数据目录数据已经列出。
- 3 选择文件类型 > 测定方法文件(\*.pmd)。双击文件目录的“PhotoMeth.std”打开。
- 4 文件属性窗口打开。在文件名称对话框中输入“Photo 1”。没必要输入扩展名。
- 5 如果插入标题或注释到测定数据信息中时，分别输入标题和注释到对话框中。现在暂时空白。
- 6 点击关闭键。

步骤 2 — 填充标准表

标准表是已知浓度物质在指定波长或几个波长下采集得到数据 (吸收值，透射率，能量，或反射率) 的结果表。WL530.0，WL550.0，和结果列已经加入到表中。下面将要加入样品标识符和浓度值列建立完整的标准表。

在标准表中输入样品标识号和浓度。

- 1 点击标准表的任何位置激活标准表。(激活)将显示在标题中。

标准表 - [ 激活 ]									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	重量因子	注释
8									

- 2 在表中输入如下的样品标识号和浓度值。

样品 ID	浓 度
DyeA	0.0
DyeB	25.0
DyeC	50.0
DyeD	75.0
DyeE	100.0

输入后的表类似下图：

标准表 - (激活)									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	重量因子	注释
1 *	DyeA			.000				1.000	
2	DyeB			25.000				1.000	
3	DyeC			50.000				1.000	
4	DyeD			75.000				1.000	
5	DyeE			100.000				1.000	
6									

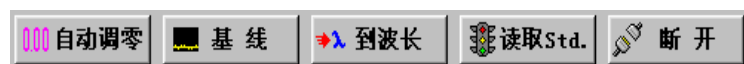
### 步骤 3 — 读取标准样品的数据

分光光度计可用于测量每个标准样品。UV Probe 将使用采集得到的数据建立标准曲线。

**注：** 如果采用手动输入而不是仪器读数的方法，请见下文的“手动输入标准曲线数据”。

### 读取样品的数据

- 1 点击光度计键条（见下图）上的“连接”。



- 2 将第一个标准样品放置到样品室。点击“读取”键，或者按 F9 键。(注：当显示下列信息时，请点击“确定”。“该标准无相应的空白，是否继续？”) 分光光度计将分别测定各波长的吸收值，V Probe 将在标准表的 WL530，WL550，和 Result 列中输入数值。
- 3 逐个把余下的样品放入样品室 如上采集读数。

**注意：** 当设定方法(波长,狭缝宽等)完成时，在标准表中输入样品 ID 和浓度后，此操作将激活<读标准> 键，可点击读出标准数据。

## 手工输入标准曲线数据（操作步骤）

**注意：** 当用分光光度计采集读数，跳过该步。

- 1 选择 编辑 > 方法 > 波长标签，确认“采集数据用”的栏目中选择的是“用户输入”，表示各波长列中的数值直接手动输入到表中。
- 2 点击“关闭”。

在标准表中输入下列数据：

样品 ID	浓 度	WL530.0	WL550.0
DyeA	0	0.040	0.040
DyeB	25	0.300	0.050
DyeC	50	0.520	0.030
DyeD	75	0.920	0.175
DyeE	100	1.080	0.070

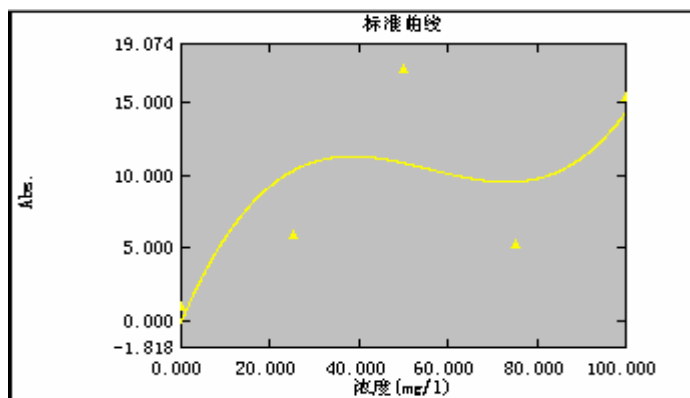
此后 UV Probe 自动计算结果，表的外观如下。

标准表 - [激活]									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	重量因子	注释
1 *	DyeA	Standard		.000	.040	.040	1.000	1.000	
2	DyeB	Standard		25.000	.300	.050	6.000	1.000	
3	DyeC	Standard		50.000	.520	.030	17.333	1.000	
4	DyeD	Standard		75.000	.920	.175	5.257	1.000	
5	DyeE	Standard		100.000	1.080	.070	15.429	1.000	
6									

## 步骤 4 — 查看标准曲线

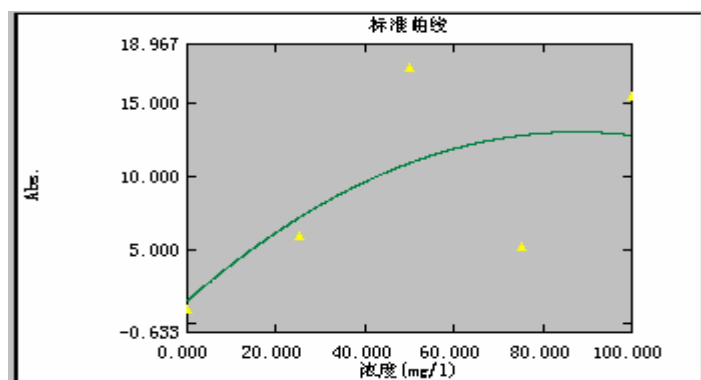
现在已经通过标准表建立了标准曲线，下面将查看标准曲线和改变曲线的次数。观察次数的改变对图象的影响。

- 1 选择示图> 标准曲线，显示如下的曲线：



注意到每个样品都有一个点与之对应。

- 2 改变曲线的次数，选择编辑> 方法，或点击“方法”图标。点击校准标签。改变曲线的次数到 2<sup>nd</sup> 状态，然后点击关闭。显示如下：



- 3 重复前面的步骤，将曲线的次数改为 1<sup>st</sup>。  
由图可见，3 次曲线最接近数据点，而 1 次曲线 (无图) 将是一条直线。
- 4 将曲线次数改回 3<sup>rd</sup>。

## 步骤 5 — 保存标准表

现在保存的标准表将在后面部分用到。

- 1 选择 文件> 另存为，检查保存对话框内的保存路径。
- 2 在文件名编辑框中输入 Standard1，文件类型选择标准文件(\*.std)。
- 3 点击“保存”

## 第三节 读取未知样品

现在，可用标准曲线来计算未知样品的浓度，并：

- 填充样品表
- 读取未知样品
- 查看样品图形

开始之前，制备五种性质类似的未知样品。

第一步 建立样品表

样品表是未知浓度物质的数值(吸收值，透射率，能量，或反射率)表。UV Probe 使用标准曲线计算样品表每个样品的浓度。

数据采集方法除了测定参数信息以外，两种表（标准和样品）应该完全相同。输入每个制备的未知样品的标识符。

- 1 激活样品表（在表的任何部位点击），在标题上显示“激活”。
- 2 在样品表的“样品 ID”列中输入：DyeF, DyeG, DyeH, DyeI, DyeJ。如下图所示。

样品表 - [ 激活 ]							
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果
1 *	DyeF						
2	DyeG						
3	DyeH						
4	DyeI						
5	DyeJ						
6							

第二步 读取未知样品的数据

现在可以开始读取未知样品的数据了（不包括手工输入）。用手工输入代替仪器读取，请按照下面的手工输入样品数据。

**注：** 如果通过手动输入标准样品表的数据。  
在样品表中中，光度测定测定方法的测定参数(标准样品)数据采集方法设置到手动。

- 1 将未知样品放入分光光度计的样品室。
- 2 点击“读取”键。



仪器将读取每个波长的数据，并根据计算结果和标准曲线的比较来测定样品的浓度。

- 3 重复以上过程，测定其余四项样品。注意查看结果。浓度值基于 标准曲线 获得。

**注：** 保存样品用于练习 2。

**注意：** 当设置方法(波长、狭缝宽等) 完毕，在样品表中输入样品 ID。此操作将使<读未知..> 键激活和可点击读出未知数据。



### 第三步 手工输入样品表数据

如果未知样品已经采集了读数，跳过下文到 [查看样品图象](#)。

- 1 选择 编辑 > 方法。
- 2 在测定参数(样品) 标签中，选择“用户输入”，激活手动输入各波长下的读数到表中。
- 3 点击“关闭”。
- 4 将下表中的值输入样品表中：

Sample ID	WL530.0	WL550.0
DyeF	0.150	0.035
DyeG	0.400	0.031
DyeH	0.650	0.095
DyeI	0.840	0.130
DyeJ	1.000	0.068

如下图所示：

样品表 - [激活]								
	样品	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	注释
1 *	DyeF	Unknown		7.009	.150	.035	4.286	
2	DyeG	Unknown		96.163	.400	.031	12.903	
3	DyeH	Unknown		12.503	.650	.095	6.842	
4	DyeI	Unknown		11.580	.840	.130	6.462	
5	DyeJ	Unknown		100.827	1.000	.068	14.706	
6								

**注：** 如果标准曲线的次数不是 3 次，结果将会不同。

### 第四步 - 查看样品图形

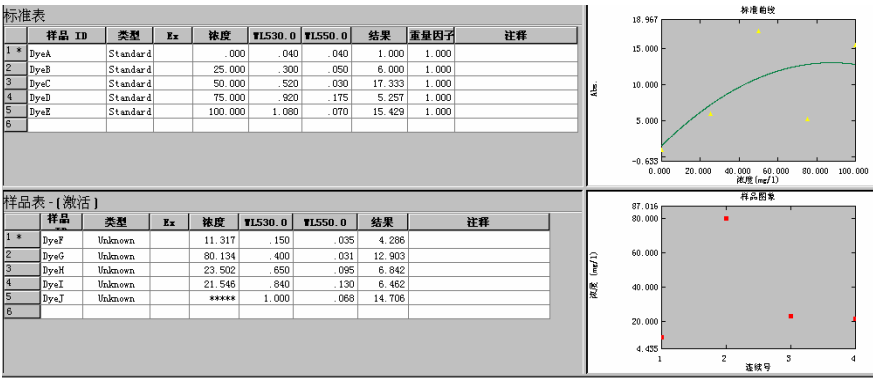
改变描绘曲线的次数，查看其对样品表和样品图象的影响。

### 改变描绘曲线的次数

- 1 选择 编辑 > 方法。
- 2 点击校准标签，然后 改变曲线的次数到 1<sup>st</sup>。
- 3 点击关闭并注意浓度值的改变。

样品表 - [激活]								
	样品	类型	E <sub>x</sub>	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	注释
1 *	DyeF	Unknown		8.045	.150	.035	4.286	
2	DyeG	Unknown		84.675	.400	.031	12.903	
3	DyeH	Unknown		30.778	.650	.095	6.842	
4	DyeI	Unknown		27.393	.840	.130	6.462	
5	DyeJ	Unknown		100.704	1.000	.068	14.706	
6								

- 4 重复上述步骤，改变曲线的次数到 2<sup>nd</sup>。注意，图中不出现第 5 个点。Dye J 这点用 2 次标准曲线不能求得。



- 5 改变曲线的次数到 3<sup>rd</sup>。

### 第五步 保存数据

以下数据存储标准和样品表。光度测定文件包含标准和样品表的信息。

当装载测定方法时设置了文件名称，覆盖保存它。

- 1 选择 文件 > 保存。

### 练习 2 – 基本光度测定操作

该练习中有：

- 使用自动填充和重复扫描来描绘标准表
- 使用重复测定建立标准表



- 使用各种标准曲线计算未知样品的浓度
- 显示统计表
- 进行数据的倒数操作

注： 使用的样品利用 练习 1 中的样品。

### 第一步 – 使用自动填充建立标准表 I

打开先前存储的方法并使用自动填充功能填充标准表，该表将存储到磁盘中以后用于本练习中。

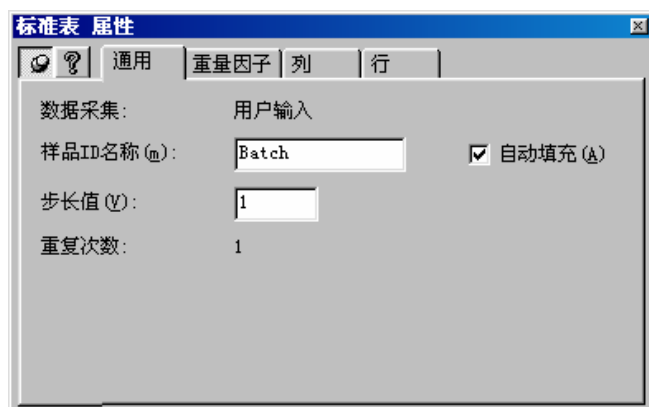
### 打开保存的方法。

- 1 选择 文件> 新建。
- 2 选择 文件 > 打开。确认打开了适当的数据文件夹。
- 3 在文件类型中，选择方式 (\*.pmd)，双击 PhotoMeth。

文件属性窗口打开。在此步骤中，文件没有保存。不进行任何更改并点击关闭键。

### 使用自动填充命名样品标识符

- 1 点击“方法”图标。
- 2 在“采集数据用”，点击仪器，再点击“关闭”。
- 3 在标准表中按下鼠标右键，选取快捷菜单中的属性。
- 4 点击自动填充核选框。注意样品标识符名和步长值被激活。
- 5 在样品标识符名中输入 Batch，点击标准表，关闭属性页。.



- 6 在标准表的样品标识符 Batch 行中，输入 1.0 到浓度列。
- 7 将标准样品放到仪器的样品室中。

- 8 点击读标准。(注：出现下列提示时点击是。“此标准无相应的空白。是否继续?”) 注意，读数完备自动输入下一个样品的样品标识符。
- 9 对其余四个浓度值分别为 2 至 5 的样品重复上列步骤。

## 保存标准表

- 1 选择 文件 > 另存为。确认数据 (文件夹) 在存入框中。。
- 2 在文件名输入框内输入 Auto Fill，保存类型选择标准文件(\*.std)。
- 3 单击“保存”。

## 第二步 – 在使用重复功能填充标准表

以下采用另一种方法建立标准表，同样使用 PhotoMeth.pmd，但采用重复测定的功能。

## 打开保存的方法

- 1 选择 文件 > 新建。
- 2 选择 文件 > 打开。确认打开的是数据文件夹。
- 3 在文件类型框内，选择方法类型文件(\*.pmd)， 双击 PhotoMeth 文件。

## 使用重复测定

- 1 选择 编辑 > 方法。确认是使用仪器采集数据。
- 2 点击测定参数标签，改变样品重复到 3，和点击关闭。

**注：** 测定完毕改变到下一个样品时如果需要显示提示信息，在测定参数页的“重复前提示”框中做标记。

- 3 在标准表中输入下列样品标识符和浓度

样品 ID	浓 度
BatchA	1
BatchB	3
BatchC	4
BatchD	6

- 4 将标准样品放到分光光度计的样品室中。

- 单击“开始读取”。(注：当显示下列信息时，请点击“确定”。“此标准无相应的空白，是否继续？”) 注意，仪器采集三个读数并自动更新样品标识符。

标准表 - [激活]									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	重量因子	注释
1 *	BytchA	Std-Repeat		1.000	1.053	5.000		1.000	
2	BytchA-2	Std-Repeat		1.000	5.000	5.000		1.000	
3	BytchA-3	Std-Repeat		1.000	5.000	5.000		1.000	
4	BytchA-Avg	Average		1.000	3.684	5.000	.737	1.000	平均值 - 3 样品
5	BytchB			3.000				1.000	
6	BytchC			4.000				1.000	
7	BytchD			6.000				1.000	
8									

- 重复步骤 4 和 5 测定其他 3 个样品。

**注意：** 在光度测定方法属性页的测定参数 (样品) 中设置未知样品的重复次数和设置样品重复次数。

## 隐藏重复

- 在标准表中单击右键。
- 点击显示重复，注意，在类型列中，只显示每个样品的平均值。

标准表 - [激活]									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	重量因子	注释
4	BytchA-Avg	Average		1.000	5.000	5.000	1.000	1.000	平均值 - 3 样品
8	BytchB-Avg	Average		2.000	1.459	.866	1.685	1.000	平均值 - 3 样品
12	BytchC-Avg	Average		3.000	.275	.197	1.396	1.000	平均值 - 3 样品
16	BytchD-Avg	Average		4.000	1.155	.689	1.676	1.000	平均值 - 3 样品
17									

## 保存标准表

- 选择 文件 > 另存为。检查路径是否正确。
- 在文件名输入框内输入 Repetition，保存类型选择标准文件 (\*.std)。
- 单击“保存”。

### 第三步 - 使用不同的标准曲线计算未知浓度

未知样品的浓度根据标准曲线计算得到。如果使用不同的标准曲线，浓度同样也会不同。请观察使用不同标准曲线对样品浓度的影响。

**注：** 这里使用在练习 1 中配置的未知样品。

## 打开标准表

- 选择 文件 > 新建，清除现有标准表。
- 选择 文件 > 打开。

- 3 在文件类型列表框中，选择标准文件(.std)，双击文件 Standard1.std。
- 4 文件属性窗口打开。在文件名称框中输入“浓度”。没必要输入扩展名。
- 5 如果插入标题或注释到测定数据信息中时，分别输入标题和注释到对话框中。现在暂时空白。
- 6 点击完毕键。

## 读取未知样品的数据

**注：** 在继续前，如果你通过手工输入样品表中的数据，请参考练习 1 中第16页的 *手工输入样品表数据*。

- 1 将未知样品放到分光光度计的样品室中。
- 2 在样品 ID 中依次输入：样品 A，样品 B，样品 C 和样品 D。
- 3 单击“开始读取”。仪器将采集各波长的读数，然后用计算结果与标准曲线比较得到未知样品的浓度。
- 4 重复以上步骤，完成所有样品的读取。

## 保存文件

**注意：** 当装载标准样品表时设置了文件名，覆盖和保存它。

- 19 选择 文件 > 保存。

## 比较不同标准表中样品的浓度。

- 1 选择 文件 > 打开。
- 2 文件类型选择标准文件，点击 AutoFill.std 文件。
- 3 文件属性窗口打开。此步骤文件没有保存。不进行任何更改并点击关闭键。
- 4 注意样品表浓度列数值的变化。

样品表 - { 激活 }								
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	注释
1	DyeF	Unknown		7.009	.150	.035	4.286	
2	DyeG	Unknown		96.163	.400	.031	12.903	
3	DyeH	Unknown		12.503	.650	.095	6.842	
4	DyeI	Unknown		11.580	.840	.130	6.482	
5	DyeJ	Unknown		100.627	1.000	.068	14.706	
6								

- 5 选择文件 > 打开。
- 6 从文件类型目录中选择标准样品文件(\*.std)和双击“AutoFill.std”打开该文件。

- 7 文件属性窗口打开。此步骤文件没有保存。不进行任何更改并点击关闭键。
- 8 注意样品表浓度列数值的变化。

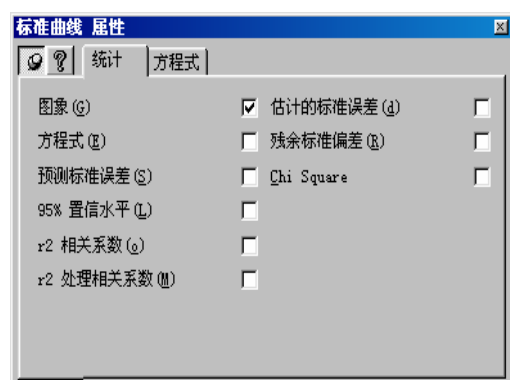
Sample Table - [ Active ]								
	Sample ID	Type	Ex	Conc	WL530	WL550	Result	Comments
1 *	DyeF	Unknown		8.045	0.150	0.035	4.286	
2	DyeG	Unknown		84.675	0.400	0.031	12.903	
3	DyeH	Unknown		30.778	0.650	0.095	6.842	
4	DyeI	Unknown		27.393	0.840	0.130	6.462	
5	DyeJ	Unknown		100.704	1.000	0.068	14.706	
6								

## 第 4 步 – 显示统计

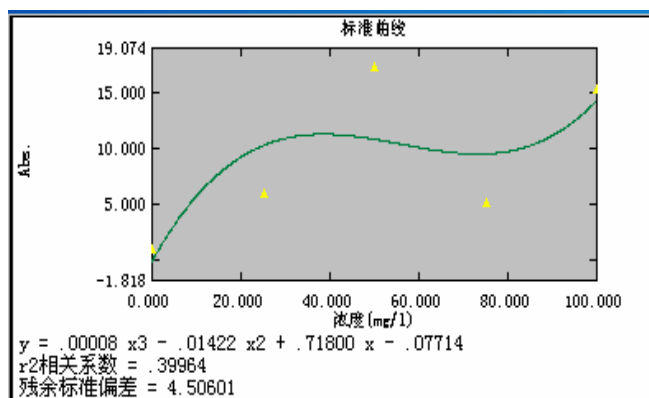
数字方程和图象统计 (95% 置信水准和预测的标准误差) 可使用标准曲线图象的属性页显示。95% 置信水准 (也称为 95% 置信带) 的定义是: 如果重复测定 100 次, 将有 95 次的结果位于该范围之内。预测的标准误差 (S.E.P.) 是非标准曲线点已知浓度 (湿化学分析结果) 的样品与使用的标准曲线预测到的浓度之间的差别。

## 显示标准曲线的方程式

- 1 选择 文件 > 打开。
- 2 在文件目录中双击 Photo1.pho。
- 3 选择 示图 > 属性。
- 4 销入属性页, 然后在标准曲线上点击鼠标右键, 显示如下图的标准曲线属性对话框。

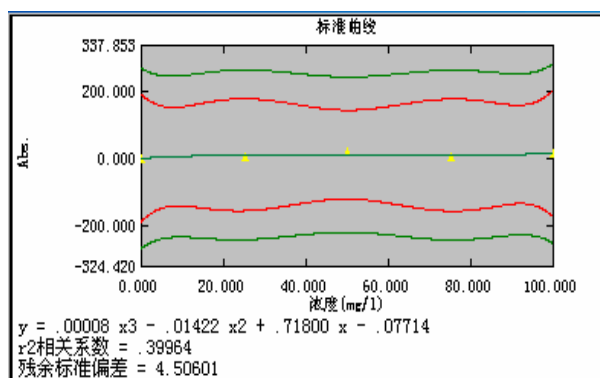


- 5 选取“方程式”核选框、“相关系数”, 和“残余标准偏差”。注意, 显示在标准曲线左下方的统计结果。



## 图象上显示标准曲线的统计结果

- 1 更改校准曲线的次数到 1 次。
- 2 打开属性页，点击 95% 置信水准 和预测的标准误差复选框。
- 3 标准曲线上点击鼠标右键，在快捷菜单上选择动标尺。注意，图象上出现 4 条新的曲线，见下图。



## 第 5 步 – 进行数据的倒数转换

下面对文件 Photo1.pho（该文件建立于在前面的练习中）进行处理操作并在样品表中建立新列。

- 1 激活样品表。
- 2 选择 操作 > 处理。
- 3 点击转换标签。
- 4 在源列框中，选择 WL550。
- 5 在算符框中选择 1/Y，然后点击加入。



6 点击“关闭”。注意到计算结果已被放到样品表中的 TRANSFORM\_1 列。

样品表 - [激活]									
	样品 ID	类型	Ex	浓度	WL530.0	WL550.0	结果	TRANSFORM_1	注释
1	DyeF	Unknown		7.009	.150	.035	4.286	28.571	
2	DyeG	Unknown		96.163	.400	.031	12.903	32.258	
3	DyeH	Unknown		12.503	.650	.095	6.842	10.526	
4	DyeI	Unknown		11.580	.840	.130	6.462	7.692	
5	DyeJ	Unknown		100.827	1.000	.068	14.706	14.706	
6									

7 选取 文件> 保存。

注： 如果不能完整地看到列名，可扩展列标题。详见在线帮助。

## 练习 3 – 先进的光度测定技术

本练习包括：

- 建立自定义方程式
- 利用抽吸单元附件进行数据采集

### 第 1 节 – 自定义方程式

下面将进行啤酒花酸分析，把啤酒和类似的饮料例如含 2，8-萘胺磺酸（ $\alpha$  酸）的饮料，除去二氧化碳后分析其中的啤酒花酸或 2，8-萘胺磺酸。此步骤便于用户进一步理解建立自定义方程式的数据采集方法。如果不想使用定义方程式此节可以跳过。

**注：** 在这部分练习中，用手工代替仪器进行数据的输入。

在本练习中定义方程式和因子如下：

$$\text{稀释因子(Dil)} = \frac{\text{vol dil A(L)} * \text{vol dil B(mL)} * \text{vol dil C(mL)}}{\text{sample weight(mg)} * \text{aliquot dil A(mL)} * \text{aliquot dil B(mL)}}$$

此处

A [VA] = 初始样品总量

B [VB] = 第一次稀释后的样品总量

C [VC] = 第二次稀释后的样品总量

Sample Weight [SW] mg = 样品的重量（单位 mg）

Aliquot dilA [ALQA] mL = A 的等分试样（mL）

Aliquot dilB [ALQB] mL = B 的等分试样（mL）



$\alpha$  酸 mg/L ,  $\beta$  酸 mg/L, 和背景 mg/L 使用下列方程式:

$$\alpha \text{ 酸(mg/L) [Aacids]} = ((-51.56*WL1)+(73.79*WL2)-(19.07*WL3))$$

$$\beta \text{ 酸(mg/L) [Bacids]} = ((55.57*WL1)-(47.59*WL2)+(5.10*WL3))$$

$$\text{背景(mg/L) [Bkg]} = ((8.34*WL1)-(15.74*WL2)+(37.19*WL3))$$

最终浓度的计算如下:

$$\% \alpha \text{ 酸(mg/L) [\%Aacids]} = \text{Aacids} * \text{Dil} * 100$$

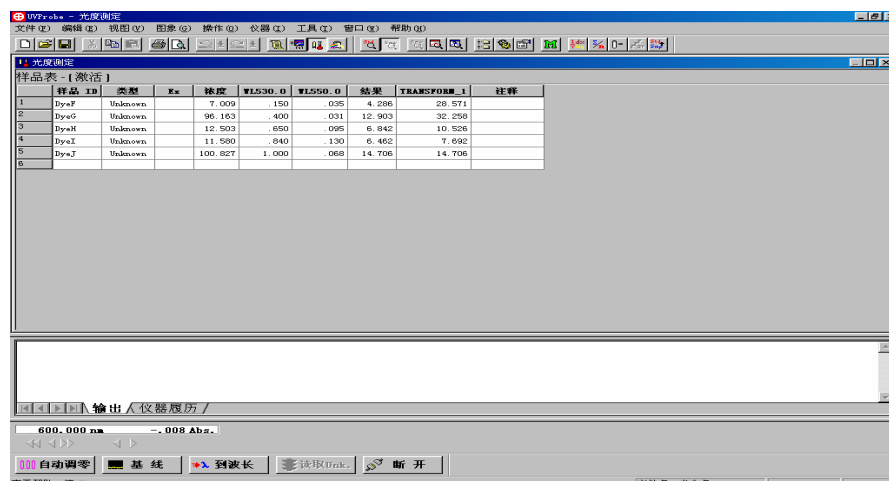
$$\% \beta \text{ 酸(mg/L) [\%Bacids]} = \text{Bacids} * \text{Dil} * 100$$

$$\% \text{背景(mg/L) [\%Bkg]} = \text{Bkg} * \text{Dil} * 100$$

$$\text{啤酒花储存指数[HIS]} = WL3/WL2$$

## 第 1 步 – 建立使用自定义方程式的数据采集方法

- 1 选择 文件 > 新建 清除现有样品表。
- 2 使用示图菜单隐藏标准表、标准曲线和样品图象，因为在本练习中将不使用。屏幕最终如下：



- 3 选择 编辑 > 方法，或点击方法图标。
- 4 在波长 (nm) 框中，输入 350。
- 5 将列名输入框中的 WL350 改为 WL1，然后单击“增加”。将在 Entries 列表中增加 WL1。(由于该表将有很多列，减小列名的字符有助于减少每列的列宽。)
- 6 在波长 (nm) 框中，输入 325，然后改变列名成 WL2。点击加入。
- 7 在波长 (nm) 框中，输入 275，然后改变列名成 WL3。点击加入：

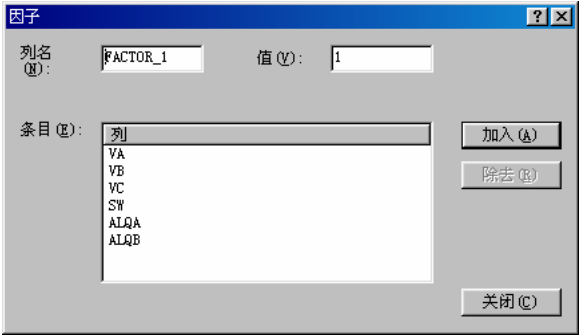


- 8 点击下一步键打开校准曲线标签页。
- 9 在校准方法框中选择光度测定测定。
- 10 点击下一步键和打开样品表的测定参数 (未知样品)。
- 11 在数据采集方法选择手动。

- 12 点击下一步键打开文件属性标签页。
- 13 在文件名称框中输入 HopsAcid。不必输入扩展名。
- 14 如果插入标题或注释到测定数据信息中时，分别输入标题和注释到对话框中。现在暂时空白。
- 15 点击完毕键。

加入因子

- 1 点击方程式标签,，然后点击因子键。
- 2 输入 VA 作为列名和点击加入。列名大小写都可以，因此输入大写字母。
- 3 重复第 2 步，依次输入： VB, VC, SW, ALQA, ALQB。如下图所示。



- 4 点击关闭，方程标签页仍然处于激活状态。

建立自定义方程式

- 1 在方程式页的类型目录中，选择**定制**，容许输入自定义方程式。
- 2 输入 Dil 作为列名。
- 3 在方程式输入框中，输入：  $((VA*VB*VC)/(SW*ALQA*ALQB))$ 。确保方程式中没有空格。方程式的两个字符间不允许有空格。

注： 另一种方法，用双击列名和算符的方法也可建立方程式。

- 4 点击加入，将 Dil 列加入表中。
- 5 参照前面的过程输入下列方程式。

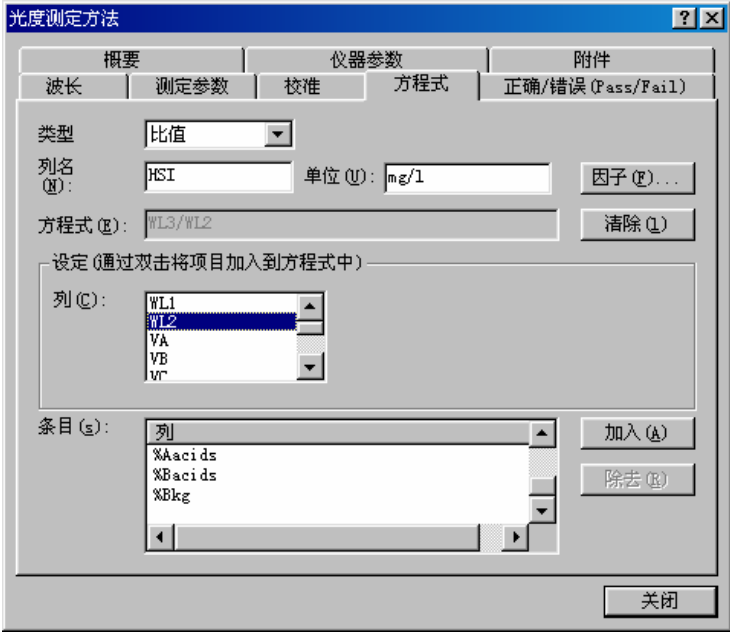
名称	方程式
Aacids	$((-51.56*WL1)+(73.79*WL2)-(19.07*WL3))$
Bacids	$((55.57*WL1)-(47.59*WL2)+(5.10*WL3))$
Bkg	$((8.34*WL1)-(15.74*WL2)+(37.19*WL3))$
%Aacids	$Aacids*Dil*100$
%Bacids	$Bacids*Dil*100$

名称	方程式
%Bkg	Bkg*Dil*100

屏幕显示将如下图所示：



- 6 在类型目录,中选择比值
- 7 输入 HSI 作为列名。
- 8 在列框中双击 WL3。
- 9 在列框中双击 WL2。



- 10 点击加入，然后点击关闭。

## 第 2 步 – 保存数据采集方法

---

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 在文件名输入框中输入 HopsAcid。
- 3 在保存类型列表框中，点击选取方法类型(\*.pmd)。
- 4 点击存储。

### 第 3 步 – 填充样品表

迄今，表已经建立和所有的列均已定义，用因子置填充表。

- 1 在样品表中输入 **Example1** 作为第 1 个样品的标识符。
- 2 输入下列因子到样品表中：

列	值
VA	0.01
VB	50
VC	25
SW	166.5
ALQA	1
ALQB	2

- 3 输入下列数值到各波长列中。正常情况下，应该是采用仪器读数的方法。

列	值
WL1	0.833
WL2	0.833
WL3	0.195

## 保存文件

注意：因为当装载标准样品表时设置了文件名，进行覆盖保存。

- 1 选择 文件 > 覆盖。



## 第 2 节 – 使用抽吸单元 采集数据

现在，将安装一个抽吸单元并用于采集未知数据。如果无抽吸单元，本节可跳过。

在开始前，制备三个未知样品用于测定。

在该练习中：

- 安装抽吸单元附件
- 装载光度测定文件
- 修改数据采集方式
- 采集未知数据



## 第 1 步 – 安装抽吸单元附件

- 1 选择 文件 > 新建。
- 2 在安装抽吸单元到样品室前，先要移去标准样品室，然后小心地对齐抽吸单元到正常的位置上。详见仪器说明书。
- 3 选择 编辑 > 方法。
- 4 点击仪器参数标签，然后选择最大的狭缝宽。狭缝宽越大，光斑越大。
- 5 用名片或厚纸挡住检测器。
- 6 选择仪器 > 配置 > 保养标签。

**注：** 只有连接仪器时才能激活保养标签。



- 7 点击“设置零次光”复选框。
- 8 点击确定，注意！此时检测器必须被挡住。

**注：** 不是所有仪器都有设置零次光的功能。此时该项指令将发灰，不能用。当没有此功能时，使用“到波长”键设置波长到 540 nm 代替上述步骤 6、7 和 8。

- 9 检查光束入射到抽吸单元池的中心。
- 10 准直完毕，点击确定。注意一旦关闭对话框零次光自动消失。

**注：** 如果抽吸元池需要准直时，调节池前的大螺丝。滑动池直到光束均匀地入射到池的中心位置。

## 第 2 步 – 修改数据采集方法，使用抽吸单元

- 1 选择文件 > 打开。选择光度测定作为文件类型。
- 2 打开文件 Photo1.pho。
- 3 如果尚未连接仪器点击光度计键条上的连接键。
- 4 选择 编辑 > 方法，或点击 方法 图标。
- 5 点击附件标签。

- 6 从附件列中选择 Sipper/TSU 或 Syringe Sipper（抽吸单元或注射式抽吸单元）。
- 7 不要改动其他设置，点击“关闭”。

### 第 3 步 – 采集未知数据

---

#### 抽吸单元的自动调零

- 1 点击光度计键条上的 Sip（抽吸）键，用纯水检查抽吸和等待时间是否足够。保证池中无气泡存在。



- 2 点击自动调零键利用流动池内的纯水进行仪器的自动调零。
- 3 激活样品表。
- 4 在表中输入三个样品 ID：样品 1，样品 2，样品 3。
- 5 把未知样品容器靠近仪器，插入抽吸管。按抽吸单元的按键采集读数。（点击“读未知”键不能启动抽吸单元。）
- 6 重复步骤 5，测定另外两个样品。

**注：** 当方法属性对话框关闭时，光度测定方法不改变单色器的波长。自动调零时请使用“到波长”设置单色器到要使用的波长。

**光谱章节结束**

## 第四章 动力学模块

本部分介绍动力学模块，通过分光光度计观测吸收值、透射率、反射率和能量随时间的改变而发生的变化。

该模块比较灵活且使用方便：

- 设计简单的或复杂的数据采集方法。
- 配置采集数据的各种仪器和附件类型。
- 保存采集参数，并在各种类型的图象和表中查看采集的数据，包括 Michaelis-Menten。
- 利用特性处理数据，如数据打印、峰值检测、保存数据以及在模块内直接打印数据。

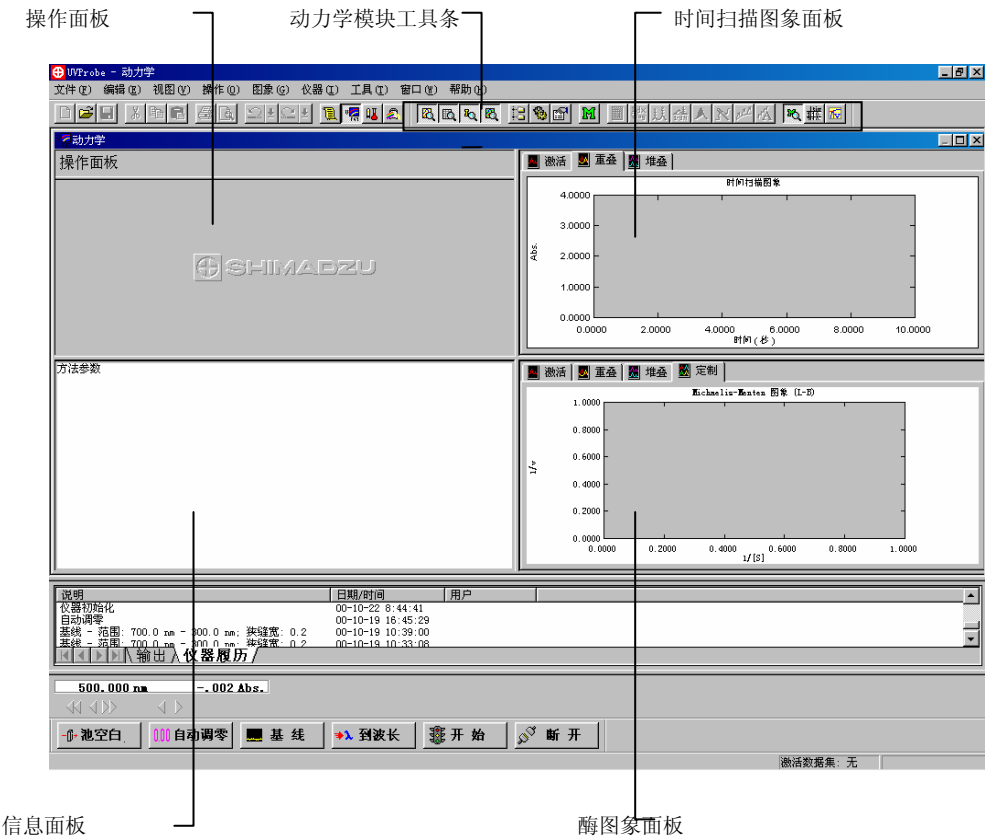
这个模块包括四个面板：操作，信息，时间扫描图象和酶图象。

- **操作面板** 显示在左上角，包含查看和处理所有数据的功能，如数据打印，峰面积和峰值检测。操作面板同时还显示主表和活度表。
- **信息面板** 在操作面板的下方，显示数据采集方法的信息，或事件表或 Michaelis-Menten 表。
- **时间扫描** 图象面板在屏幕右上角，显示随时间变化而变化的样品值（吸收值、透射率、反射率和能量）。X 轴显示时间，Y 轴显示值。
- **酶图象** 在时间扫描图象面板的下方，显示 Michaelis-Menten, Hill, 或抑制剂关系。

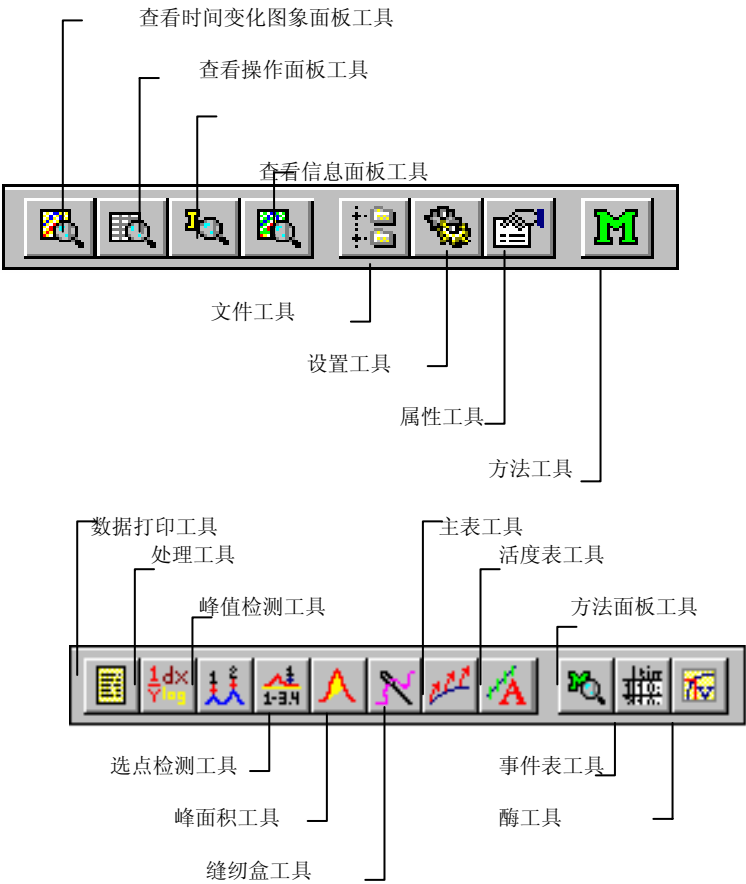
这部分包括三个练习：

- 基本测定
- 基本动力学模块的操作
- 先进的动力学技术

动力学模块窗口



动力学模块工具条



## 练习 1 – 基本测定

在本练习中：

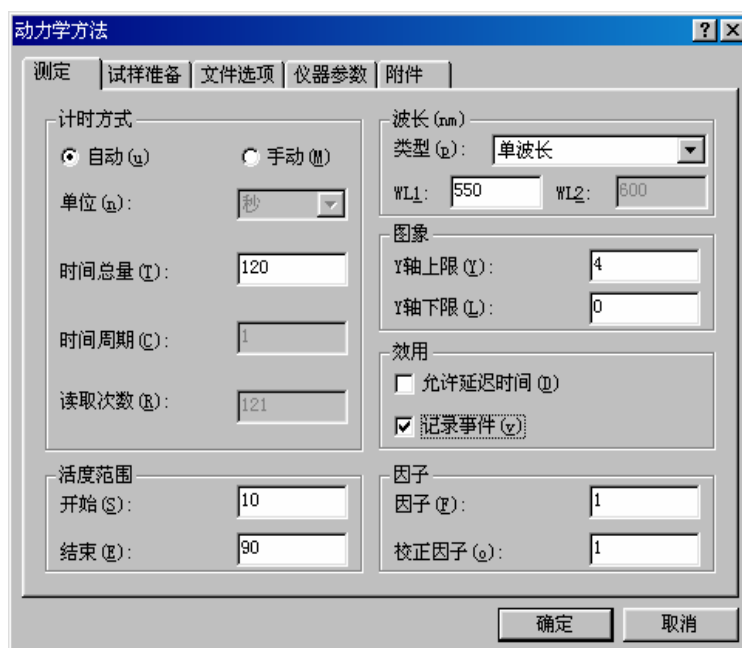
- 建立数据采集方法
- 准备乙二胺四乙酸(EDTA)的粉末样品和去离子水
- 读取随时间变化的数据

确保仪器正常连接。当仪器没有按照第 1 部分描述的那样被增加和配置，请看 29 页：绪论部分 与分光光度计通讯。

### 第 1 步 – 建立数据采集方法

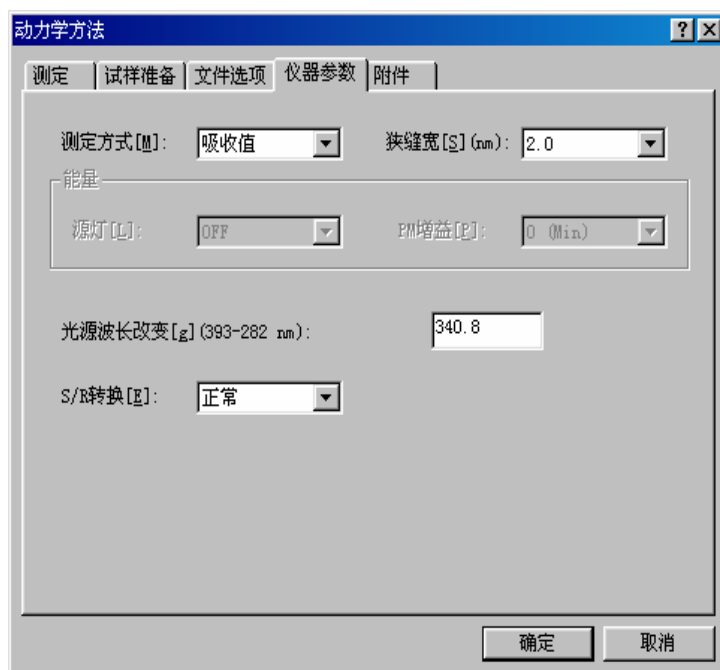
使用自动定时方式，建立测量粉末样品对波长为 550nm 光的吸收值的数据采集方法。

- 1 选择 窗口 > 动力学 打开动力学模块。
- 2 选择 编辑 > 方法，或点击方法图标来显示方法对话框。
- 3 当时间周期和读取次数输入后，选择手动定时方式以计算时间总量。注意到时间总量输入框不再处于活动状态，而时间周期和读取次数输入框的状态改为活动的。



- 4 点击自动定时方式，设定时间总量以自动计算时间周期和读取次数。该练习将使用自动定时方式。
- 5 在时间总量输入框中输入 120。
- 6 在波长类型框中，选择单波长。这意味着 UV Probe 只读取某一波长的数据。

- 7 在 WL1 输入框中输入 550 并保留其余选项的缺省设置，UV Probe 将测量样品对 550nm 波长的光的吸收值。
- 8 点击仪器参数属性页。



- 9 在测量方式下拉框中选择**吸收值**。
- 10 点击**确定**。光度计状态条将显示“回转”，随即显示为当前波长值 550 nm。

## 第 2 步 – 准备粉末样品

下一步，少量的 EDTA 和去离子水混合后成为一个粉末样品。在这个过程中，使用“自动调零”来对光度计单元在指定波长进行调零和校正细微变化，如因热效应引起的偏差。既然这样，在仪器的样品室中放置去离子水并针对 550nm 波长进行自动校零。

- 1 将装有去离子水的试管放到分光光度计的样品室中。
- 2 校验波长是否设置在 550 nm (可以使用 **λ到 WL** 键完成这项功能)。点击光度计键条的**自动调零**或按 F6 键。
- 3 自动调零结束后，光度计状态栏的吸收值的读数应为零。将试管从样品室中取出。

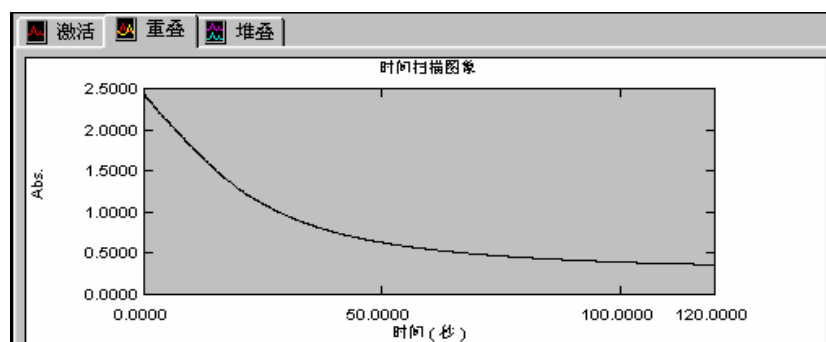


- 4 在有去离子水的试管中加入少量的 EDTA。
- 5 搅匀样品并将试管放在分光光度计的样品室中。
- 6 使光度计状态条上的吸收值的初始化值接近 1.5。如果吸收值偏低，加入 EDTA；如果吸收值偏高，加去离子水稀释。

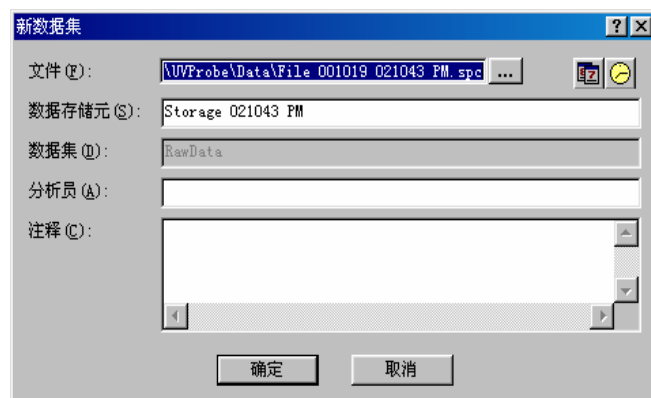
### 第 3 步 – 读取时间扫描的读数

按照目前方法测量粉末样品的吸收值，测得的数据将保存在一个时间扫描文件中。

- 1 在 Y 轴上，点击最小吸收值的值，将值改为 0.0。点击最大吸收值的值，将值改为 4.0。
- 2 搅匀样品并将试管放在分光光度计的样品室中。
- 3 点击光度计键条上的**开始测量** (或者按 F9 键) 来初始化时间扫描测量。每过一个时间间隔光度计的状态条将显示测量的吸收值，并在重叠时间扫描图上显示实时地数据。



- 4 当测量完成后，新的数据集对话框将弹出，输入 EDTA 作为文件名。
- 5 输入 Test 作为存储名。



- 6 点击**完成**。图象将自动处于活动状态。

### 保存时间扫描数据

- 1 选择 文件 > 保存。
- 2 在选择活动文件对话框中选择时间扫描文件 (\*.kin) 作为数据类型。
- 3 点击**确定**。



## 练习 2 – 动力学的基本操作

在本练习中：

- 进行选点检测并保存选点检测模板
- 进行池空白操作
- 采集第二组数据集来观测池空白操作的影响
- 打开以前保存的选点检测模板
- 修改主表重新计算数据集的活度

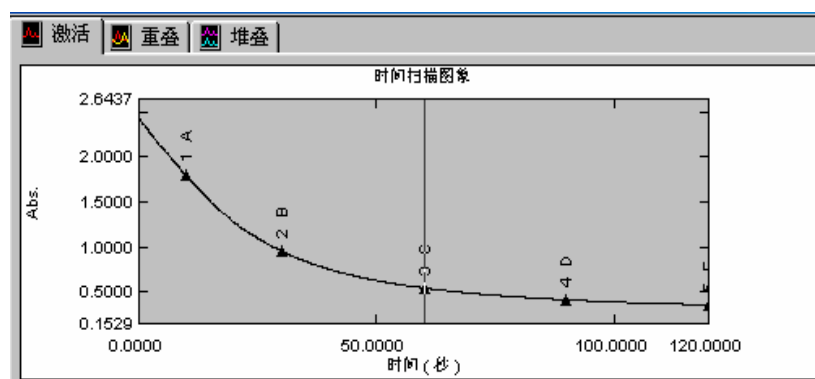
### 第 1 步 – 进行选点检测

现在，利用间隔为 30 秒的选点检测来建立选点检测表。如果在前一个练习已关闭 EDTA 文件，重新打开它。

- 1 选择 操作 > 选点检测，并将下列值输入到表中。

时间(秒)	描述
10	A
30	B
60	C
90	D
120	E

- 2 在选点检测表上单击右键，并选择快捷菜单中的属性选项。
- 3 在标签列表中，点击**描述**(当某选项被选中时将被打上标记)。
- 4 在标记类型列表框中，选择一种类型。
- 5 在选点检测表中再次单击右键，点击标记点并观察图象中的标记。



### 第 2 步 – 将选点检测表作为模板存储

选点检测表将存储成模板形式并在本章的后面部分使用。选点检测模板保存了输入表中的时间和描述但没有吸收值。当模板被打开时，将根据现有数据集重新计算吸收值。

- 1 选择 文件> 另存为。
- 2 检查保存路径。
- 3 输入 Point1 作为文件名，选择选点检测模板(\*.kpt) 作为文件类型，再点击保存。

### 第 3 步 – 进行池空白操作

现在将进行池空白的操作。当点击光度计键条上的**池空白**时，分光光度计测得一个读数，以后的检测中分光光度计测得的读数都将减去该数。池空白操作的目的在于消除试管对测量结果的影响。一个池空白的测量值在进行新的池空白测量或自动调零前将一直有效。

**注：** 确定分光光度计已被连接，光度计键条已显示出来。在采集数据时首先进行池空白操作。

- 1 将一个空的试管放到分光光度计的样品室中。
- 2 点击**池空白**键或按 F5 键以显示含池空白数据的对话框。点击**确定**，结束池空白操作。

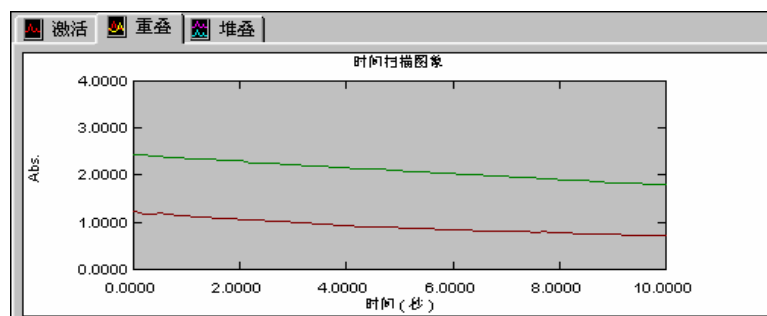
### 第 4 步 – 采集另一个数据集

利用本章练习 1 的数据采集方法和信息采集并保存另一个数据集。尽管池空白操作排除了试管对读数的影响，但对同一样品使用同一种数据采集方法其结果测出的吸收值仍有差别。

**注：** 如果完成练习 1 后改变了数据采集方法，请重新改回在练习 1 中使用的方法。

## 采集数据

- 1 摇动或搅拌粉末样品并将其放到分光光度计的样品室中。
- 2 点击光度计键条上的**开始**，在重叠时间扫描图象上显示实时数据。
- 3 在保存对话框中输入 EDTA2 作为文件名。
- 4 输入 Test2 作为数据储元名。
- 5 点击**完成**。观察到本次读数图象与第一次读数图象不同，这是进行了池空白操作的缘故。



## 保存数据

- 1 选择 文件 > 保存。
- 2 在选择激活文件对话框中选择时间扫描(\*.kin) 作为数据类型，点击**确定**。

### 第 5 步 – 打开一个以前保存的选点检测模板

---

现在，对 EDTA2 使用在练习 1 中保存的选点检测模板。

- 1 选择 操作 > 选点检测 显示空表。
- 2 选择 文件 > 打开。
- 3 选择选点检测文件(\*.kpt)作为文件类型
- 4 双击 Point1.kpt。

**注：** 鼠标可以在选点检测表下方的索引标签的编号上移动以显示数据集的名称。

注意到选点检测表中已填入保存过的时间和描述，并且在吸收值列中包含从现有数据集中得到的新的数据。

### 第 6 步– 修改主表

---

现在将从存储器中删除不需要的文件；修改主表，隐藏不必要的列以提供更多的屏幕空间。同时开始值和结束值也将改变，并且改变因子重新计算数据集的活度。

## 从存储器中删除文件

- 1 选择 文件 > 属性。
- 2 在文件属性对话框中，依次点击每一个要删除的文件，然后点击**删除**。
- 3 完成删除后点击**关闭**。

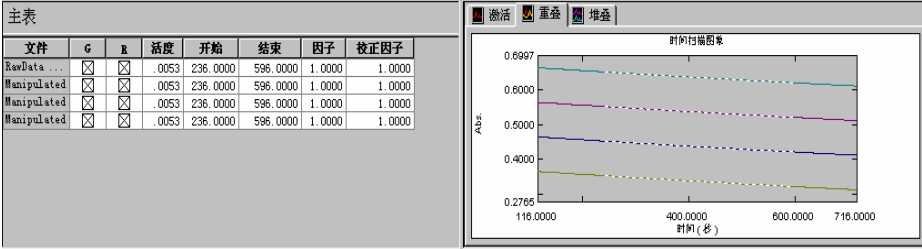
## 在主表中隐藏列

- 1 选择 文件 > 打开。
- 2 在文件类型框中，选择时间扫描类文件。
- 3 在数据目录选项，选取 Achn00.tmc, Achn01.tmc, Achn02.tmc, and Achn03.tmc (在选取文件的同时按下 Shift 键.)。点击“打开”。
- 4 选择 操作> 主表。
- 5 在主表中单击右键，从快捷菜单中选取属性选项。

- 6 在属性页中，通过双击隐藏下面这些列：样品 ID，波长，初始化读数，SD， mAbs/Min， 注释。而以下列应该保留：G， R， 活度， 开始， 结束， 因子和校正因子。
- 7 关闭属性页。不能点击**重新设置**， 否则将恢复到上一次的设置。

重新计算数据集的活度

- 1 通过点击 R 列的核选框以查看数据集的活度范围，在图象中显示为一条虚线。
- 2 将表中四个数据文件的开始值改成 200，结束值改成 600。注意到活度值被重新计算并且图象部分的活度范围也被更新。在活度图象面板中可通过**读数条**来修改开始值和结束值。
- 3 将因子改成 1， 4.5， 9 和 11 并按回车键。注意表中活度值的变化。



保存数据

- 1 选择 文件 > 另存为 显示动力学模块文件保存对话框。
- 2 点击**选取**显示数据集选择对话框并选取一个文件。(每次只能选取一个文件。文件将按照字母顺序排列并且当文件加入或被重命名时顺序也将改变。必须读取文件名)
- 3 输入 Kinetics1 作为文件名，点击“保存”。
- 4 按照步骤 1-3, 分别以 Kinetics2， Kinetics3， Kinetics4 来保存文件。

**注意:** 有两种显示数据集的参数的途径。

- 1. 打开文件属性对话框和选择数据集图标。参数将显示在方法标签中。
- 2. 在图例窗口，双击数据集。参数将显示在方法面板中。

---

## 练习 3 – 先进的动力学技术

---

在这个练习中：

- 进行 Michaelis-Menten 计算
- 配置自定义动力学图象
- 使用 Michaelis-Menten 表的数据建立抑制剂表
- 用池定位器获得数据

### 第 1 步– 进行 Michaelis-Menten 计算

---

现在，用四个样品时间扫描文件建立和填入 Michaelis-Menten 表并计算  $K_m$  和  $V_{max}$ 。

在开始之前，确保文件 Kinetics1，Kinetics2，Kinetics3 以及 Kinetics4 都已打开。

Michaelis-Menten 表包含酶作用物浓度和速度值，需要通过实验并通过 Michaelis-Menten 方程式计算出的  $K_m$  和  $V_{max}$ 。Michaelis-Menten 表计算基于选择的转化类型的  $K_m$  (Michaelis 常量) 和  $V_{max}$  值。

- $K_m$  是在实验条件下初始速度为最大速率一半时的酶作用物浓度。
- $V_{max}$  是最大初始速度。

$K_m$  值和酶作用物的稳定性相互影响。然而，使用 Michaelis-Menten 方程的线性表来计算，如 Lineweaver-Burk 或 Hanes， $K_m$  可以更为精确。使用 Michaelis-Menten 表在四个转换类型中快速转换并观察  $K_m$  和  $V_{max}$  的变化。

## 建立 Michaelis-Menten 表

**注：** 当文件没有被打开时，菜单中的主表选项无法使用。

- 1 选择 操作 > 主表。
- 2 选择 操作 > 酶表，在信息面板显示 Michaelis-Menten 信息。
- 3 在信息面板单击右键，然后单击快捷菜单中的新建选项，弹出新数据集信息对话框以开始建立新的 Michaelis-Menten 表。
- 4 输入 MM1 作为文件名，Kinetics 为储元名，Dataset1 为数据集名。
- 5 点击**完成**，建立空的 Michaelis-Menten 表。

方法: Lineweaver-Burk  $\frac{1}{v} = \frac{K_m}{V_{max}} \frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{max}}$

File	[S]	Weight	v	1/[S]	1/v
Load					

**注：** 要显示不同类型的酶表，可以从快捷菜单中选择抑制剂或 Hill 来改变当前活动表的类型。

# 用加载键填充 Michaelis-Menten 表

1 在 Michaelis-Menten 表中，在文件列中点击**加载**。

**注：** 数据文件也能从主表中拖曳到 Michaelis-Menten 表。详细用法请参考在线帮助。



2 在选择活动数据集对话框中，展开文件 Kinetics1 的树结构直至出现数据集 RawData。

**注：** 如不能显示完整文件名，可通过拖拉对话框右下角的边界来放大尺寸。

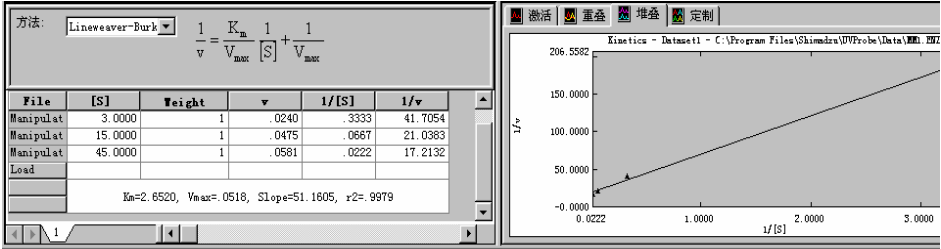
3 点击关联 Kinetics1 的数据集 RawData，在点击**确定**。

4 用同样的方法分别加载与 Kinetics2 文件，Kinetics3 文件和 Kinetics4 文件关联的数据集。

5 分别用值 0.3，3.0，15.0 和 45.0 来代替 Michaelis-Menten 表的酶作用物浓度 ([S] 列)，。

**注：** 酶作用物的浓度也可以输入上面选择的活性数据对话框中。

6 观察表底部的计算出的 Km 值和 Vmax 值。



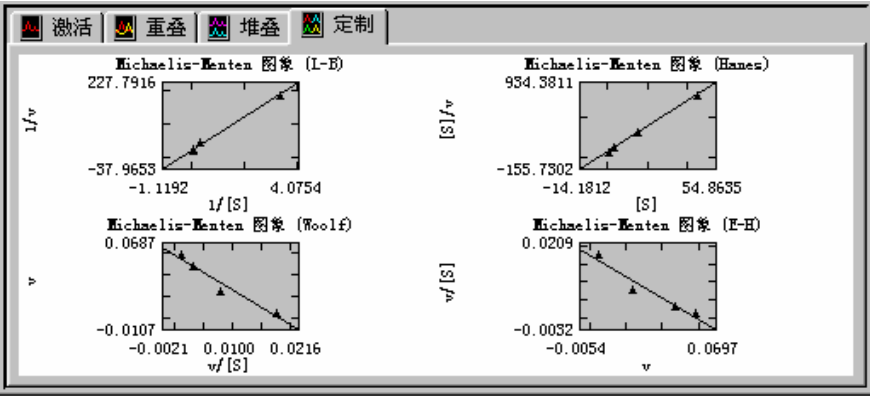
## 第 2 步- 配置自定义动力学图象

现在，酶图象面板将被自定义成显示当前表数据的每个线性转换类型：Lineweaver-Burk，Hanes，Wolf，和 Eadie-Hofstee。

- 1 点击酶图象面板的自定义标签。
- 2 在图象中单击右键，然后选取快捷菜单中的自定义选项。
- 3 在图象属性对话框中点击自定义图象标签。



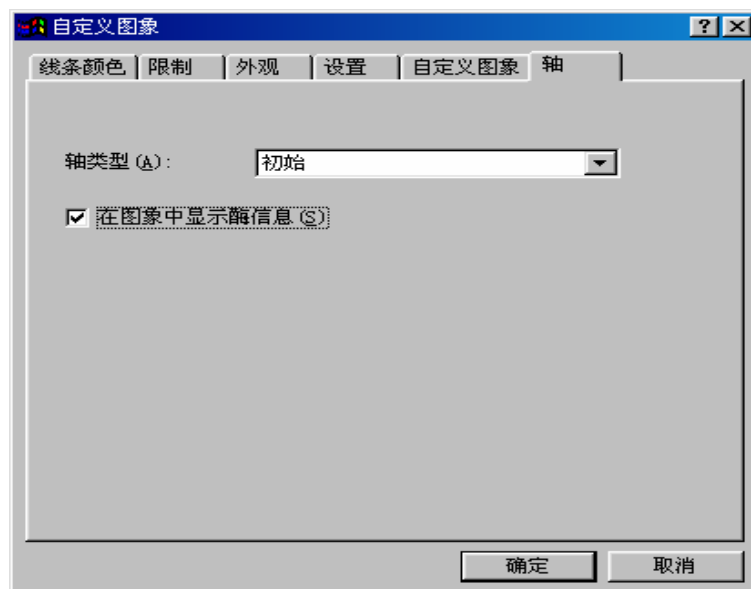
- 4 校验数据类型是否为 Michaelis-Menten。
- 5 在类型转换下拉框中，点取 Hanes，然后点击**增加**。从转换下拉框中选择 Wolf 和 Eadie-Hofstee 重复相同过程。
- 6 校验定向 是否为平铺，点击**确定**。
- 7 在酶图象面板中依次选择每个图象，单击右键并在快捷菜单中选择自动标尺，以显示包含一个图象的所有转换类型的图象面板，如下图所示。



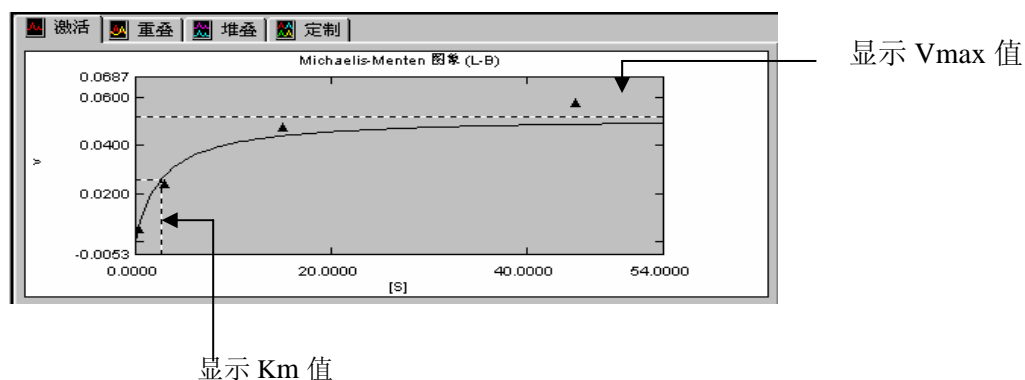


## Michaelis-Menten 图象中的轴变换式

1. 酶活度图象面板上点击鼠标右键显示快捷菜单。在菜单上选择“自定义”。
2. 在“自定义图象”对话框中点击“轴”标签。
3. 在“轴的类型”目录中选择“原始的”。在复选框“在图象上显示酶信息”。中作复选标记。点击[OK] 键。



4. 图象面板的 X 和 Y 轴分别转换从“1/V”到“V”并从“1/[S]”到“[S]”。双击图象或在图象上点击鼠标右键显示快捷菜单。然后选择“自动标尺”调节图象标尺。

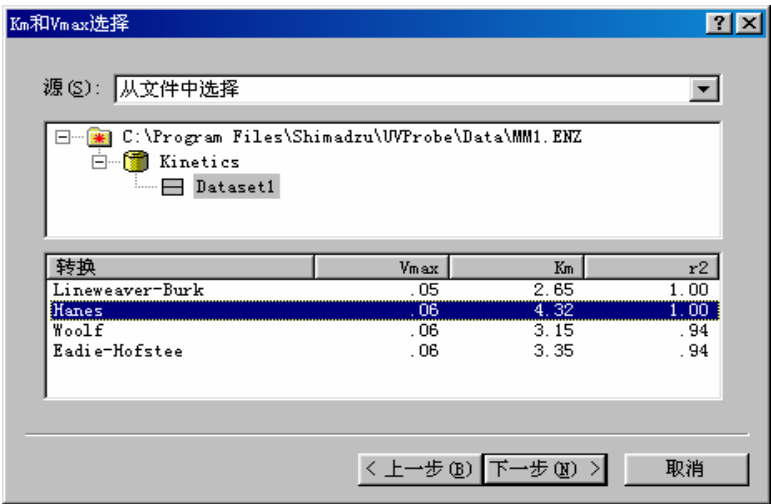


### 第 3 步– 建立和填充抑制剂表

现在，将使用 Michaelis-Menten 表的  $K_m$  值和  $V_{max}$  值来建立抑制剂表。抑制剂表类似于 Michaelis-Menten 表并包含一个代替酶 [S] 列的抑制剂 [I] 列。可用不同的酶作用物浓度来改变  $K_i$  的值。

建立抑制剂表

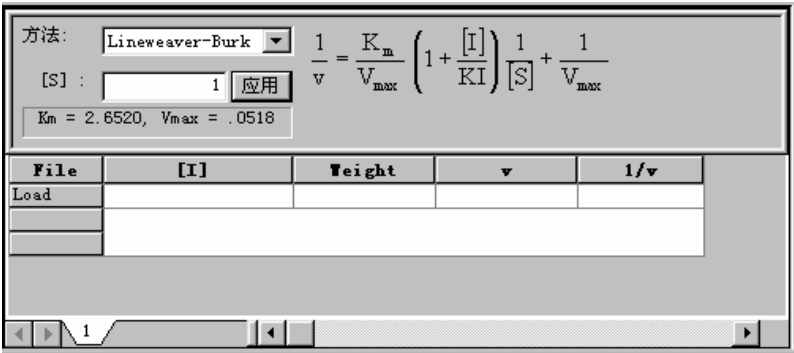
- 1 在 Michaelis-Menten 表中单击右键，选择快捷菜单上的抑制剂选项。
- 2 重新在 Michaelis-Menten 表中单击右键，选择快捷菜单中的新建选项来显示新数据集信息对话框以建立一个空的抑制剂表。
- 3 输入 MM2 作为文件名，Kinetic 作为储元名，Dataset2 作为数据集名，点击下一步。



- 4 从 Michaelis-Menten 表中选取 Km 值和 Vmax 值。点击 MM1 和 Kinetic 旁边的 ⊕，然后点击 Dataset1。

注：如要手工输入 Km 值和 Vmax 值，在对话框顶部的源列表框中选择编辑 Km 和 Vmax。

- 5 在转换选项中选择 Hanes，点击下一步。当出现设置公共酶作用物浓度对话框时，接受缺省值，点击完成，将出现如下图所示的空抑制剂表。



- 6 在酶图象面板中点击重叠标签显示 Dixon 图象。

填充抑制剂表

- 1 在抑制剂表中，点击加载键。

注： 数据文件也能从主表中拖曳到抑制剂表。详细用法请参考在线帮助。

- 2 在选择活度数据集对话框中，展开文件 Kinetics1 直至出现数据集 RawData 。
- 3 点击与 Kinetics1 关联的数据集 RawData 。



- 4 点击确定。
- 5 用同样的方法分别加载与 Kinetics2， Kinetics3 和 Kinetics4 相关联的数据集。
- 6 分别用下列各值.0.3， 3.0， 13.0 和 45.0 改变每个数据集的抑制剂浓度 ([I] 列)。所得表类似下图。

方法: Lineweaver-Burk  $\frac{1}{v} = \frac{K_m}{V_{max}} \left( 1 + \frac{[I]}{KI} \right) \frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{max}}$

[S] : 1 应用

Km = 2.6520, Vmax = .0518

File	[I]	Weight	v	1/v
RawData .	.3000	1	.0053	187.6741
Manipulat	3.0000	1	.0240	41.7054
Manipulat	13.0000	1	.0475	21.0383
Manipulat	45.0000	1	.0581	17.2132
Load				
KI=-22.5109, slope=-2.2727, r2=.3298				

- 7 在方法框中，将方法改为 Hanes。注意 KI 值的变化。



8 在酶作用物浓度[S] 框中，输入 3，然后点击**应用**。注意 KI 值的变化。

方法: Hanes

[S] :

**应用**

$\frac{1}{v} = \frac{K_m}{V_{max}} \left( 1 + \frac{[I]}{KI} \right) \frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{max}}$

Km = 4.3177, Vmax = .0633

File	[I]	Weight	v	1/v
RawData .	.3000	1	.0053	187.6741
Manipulat	3.0000	1	.0240	41.7054
Manipulat	13.0000	1	.0475	21.0383
Manipulat	45.0000	1	.0581	17.2132
Load				
	KI=-9.9983, slope=-2.2727, r2=.3298			

动力学模块部分结束。.

## 第五章 报告生成器

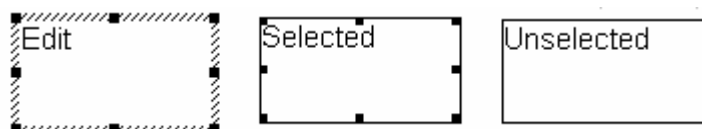
报告生成器是一个报告式化工具，可用来生成、定制格式、保存和打印用户自定义报告。报告可以含有图形、文本和嵌入对象，就象从 UV Probe 中链接数据一样。

本章节包含下列练习：

- 建立一个有嵌入对象的简单报告
- 建立一个有链接对象的简单报告
- 先进的技术

### 对象的操作方式 (选择对象)


用报告生成器建立一个报告，并插入一个对象(图象、表或文本对象)。报告生成器中的对象的操作状态有三种：编辑、选择和未选择。



### 编辑方式


当对象被插入时，将自动进入编辑方式。编辑框的边框是细切线，四角和每边中间各有一个尺寸控点，并且对象的内容是可编辑的，例如：改变文本对象的文本，或改变图象对象的参数或外观。

双击对象可使对象进入编辑状态。即使对象已处于选择状态，单击也不能使其进入编辑状态，对象要进入编辑状态必须对其双击(没有必要先退出选择状态)。要使对象退出编辑状态，可在报告的其它地方单击或点击其它对象。

在编辑状态下，当鼠标靠近对象边框时将变成 ，这时对象可被移动。

### 选择方式

要选择对象，先点击对象外围使其退出编辑方式，然后点击未选取对象。对象的边框将变成实线并且在四角和每边中间有尺寸控点。在这个状态下，对象的内容不能被编辑，但能被剪切或拷贝，属性菜单能进行对象特定操作。通过这种方法能在 Shimadzu 操作实例中链接现有数据。

在选择方式下鼠标变成 ，同时对象能被移动，这也是该方式于其它方式的区別。

---

## 未选择方式

---

要取消选择的对象，可在报告的其它地方或其它对象上点击。对象的边框将变成光滑线条组成的四边形。

---

## 嵌入对象对链接对象

---

在开始之前，应了解嵌入对象和链接对象的含义。一般来说，可通过不同的途径在报告中放置对象以及确定对象如何包含数据。

---

### 嵌入对象

---

嵌入对象到报告中，即是将对象复制到报告中并且复制后的对象不再与对象的源模块有任何联系。当修改模块中的对象时，报告中的复制对象不受影响;且当保存报告时仍旧保存复制的数据。嵌入对象是一个拥有自己数据的独立实体。

---

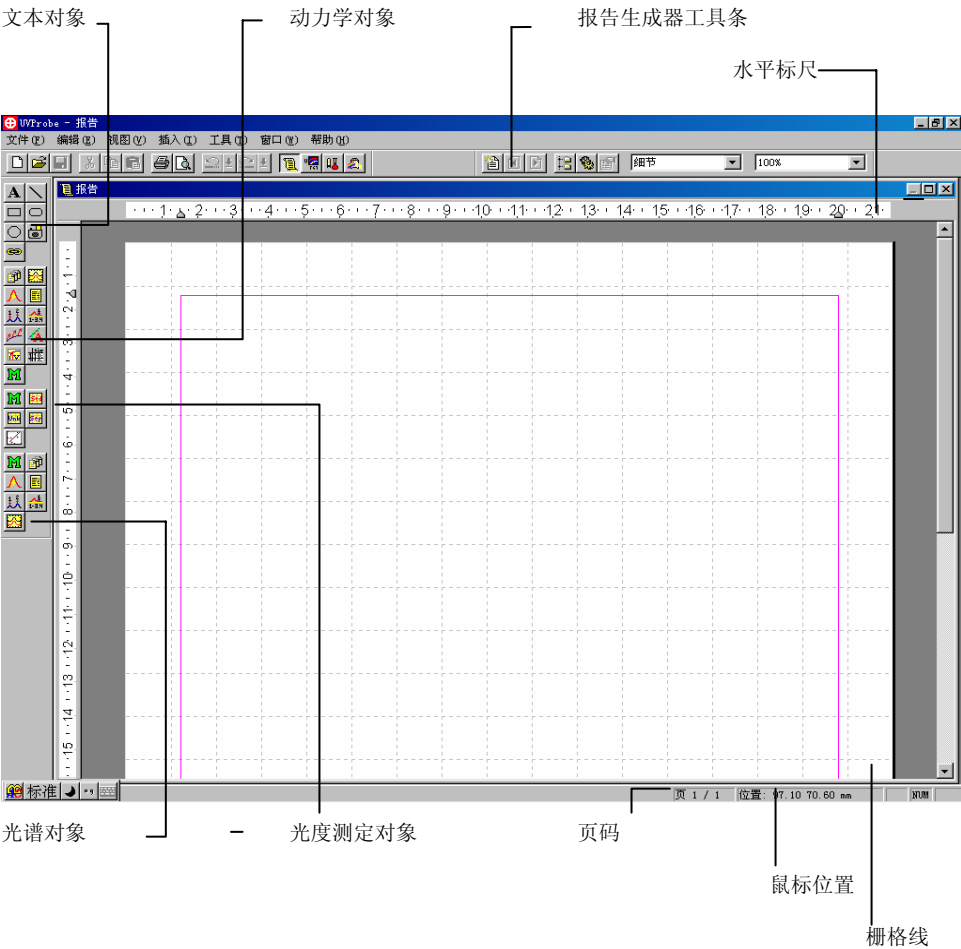
### 链接对象

---

当在报告中对象被链接时，将依赖于链接对象的模块。该对象只有在打印或预览时才从模块中接受数据，除此之外它没有自己的数据也不显示任何数据。在保存报告时，没有实际的数据被保存，而是保存对象的描述和如何链接。

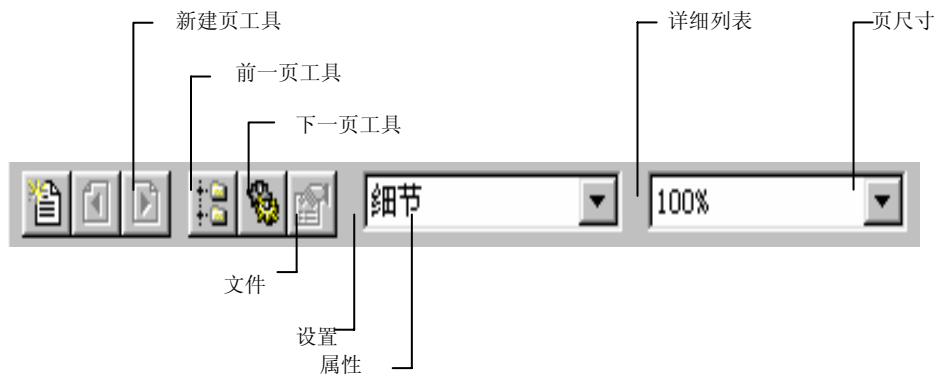
例如，在报告中加入光谱图象对象并且图象对象与现有数据集链接，链接的对象将随着光谱模块中的源图象的变化而变化。在打印时，UV Probe 从光谱模块中获得链接数据并将数据输入到图象中，也就是每次均用同一个报告打印不同的数据。

报告生成器的主窗口



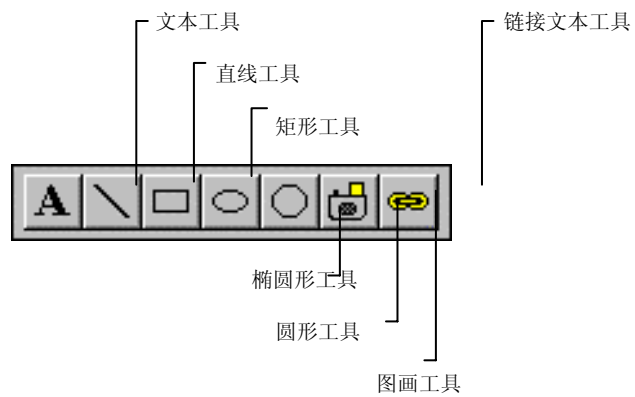


## 报告生成器工具条

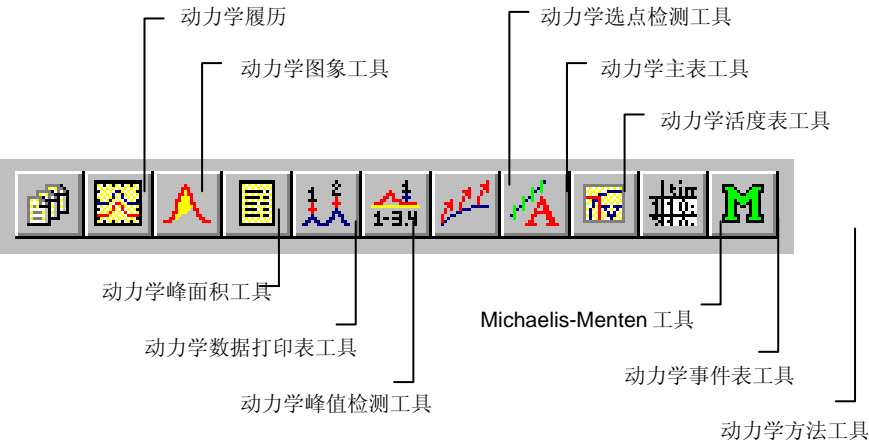


## 报告生成器对象工具条

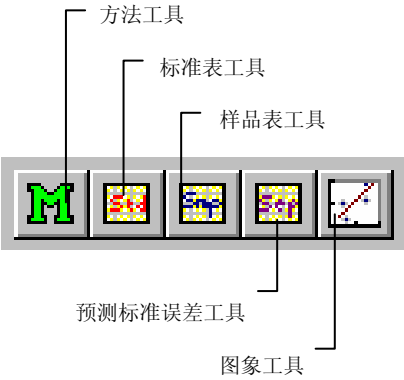
### 文本对象



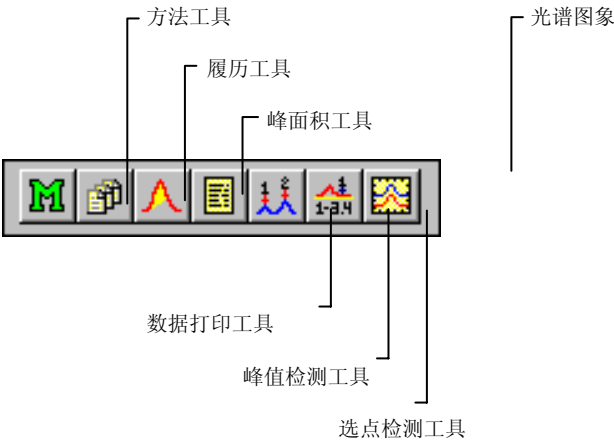
动力学对象



光度测定对象



光谱对象



---

## 练习 1 – 建立带有嵌入对象的基本报告

---

现在，利用在光谱模块章节的练习 1 中采集的数据，我们将建立带有嵌入对象的报告。

关闭仪器条，光度计状态条和输出窗口。通过检验视图菜单确保所有的工具条都已显示。

在这个练习中：

- 定制栅格间距为 5 英寸的空白报告页
- 从光谱模块中复制重叠图象，并将其嵌入到报告中
- 建立报告表头
- 打印报告

---

### 第 1 步 – 设定栅格间距和页边距

---

首先，将通过报告生成器设定一个栅格间距为 0.5 英寸、页边距为 0.5 英寸的报告。

#### 设定栅格

- 1 选择 视图 > 设置。
- 2 检验测量单位是否为英寸。
- 3 在间距输入框中输入 0.5，点击**确定**。

#### 设定页边距

- 1 选择 文件 > 页面设置。
- 2 在页边距部分，将所有的页边距(左，右，上，下)改为 0.5，点击**确定**。

**注：** 水平标尺的标记也能用来改变页边距。

---

### 第 2 步 – 嵌入图象

---

打开指南中光谱模块部分保存的 Didymium.spc 文件，拷贝重叠图象并将其嵌入报告。

#### 打开一个光谱文件 并拷贝一个重叠图象

- 1 选择 窗口 > 光谱。

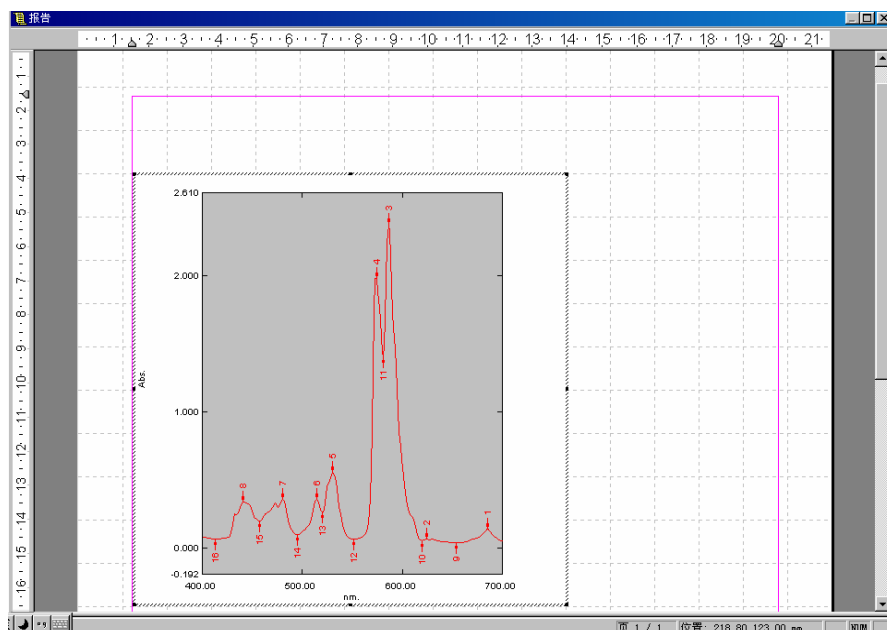
- 2 选择 文件 > 打开。
- 3 点击数据目录中的 Didymium，再点击打开。
- 4 在图象窗口，点击重叠图象标签。
- 5 在图象上单击右键，选择自动标尺。
- 6 选择 编辑 > 复制。

**注：** 当光谱窗口和报告生成器窗口都被打开时，也可以将光谱方式的图象拖曳到报告中。详细信息请参考在线帮助。

## 在报告中粘贴图象

- 1 选择 窗口 > 报告生成器，或点击工具条中的图标。
- 2 选择 编辑 > 粘贴 将重叠图象嵌入到报告中。注意到粘贴后的图象类似于光谱模块中具有编辑方式外形的图象。图象嵌入到报告中并与光谱模块不再有任何联系。
- 3 在图象以外的地方单击使图象进入未选择方式，单击图象使其进入选择状态。按下 Shift 键，将鼠标放到右下角并拖曳鼠标使图象扩展为 10 个栅格宽。左对齐图象并将图象下移两个栅格以放置表头。

**注：** 在选择方式下按下 Shift 键可使图象按比例扩展大小。(必须在选择方式下进行)



## 第 3 步 – 建立报告表头

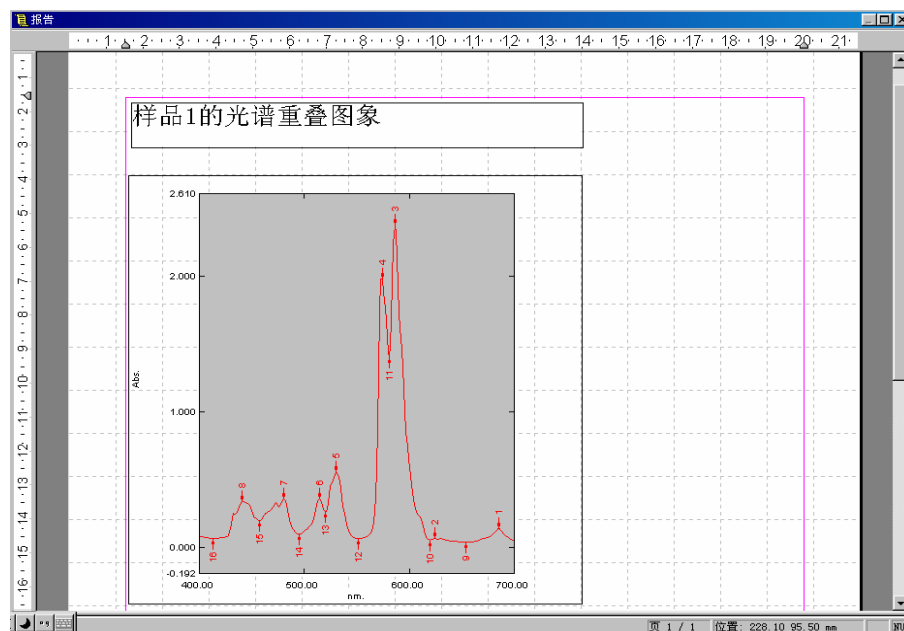
用报告生成器对象工具条中的文本键来建立放置表头的文本框。

- 1 点击文本对象图标
- 2 在文本框中输入“样品 1 的光谱重叠图象”作为表头。

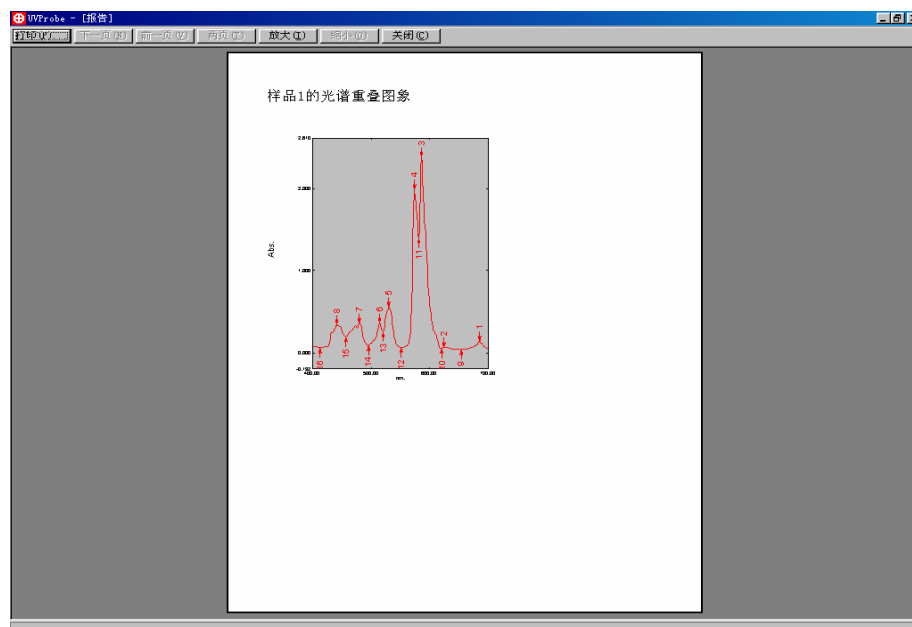
- 将文本框放置在图象上方并与之左对齐，扩展文本框以显示所有文本。如下图所示。

**注：** 在每页重复建立表头，请点击 插入> 表头。

- 在文本对象上单击右键并选择属性选项。
- 点击字体标签。选择字体和大小，然后单击报告。屏幕将如下图所示。



- 选择 文件 > 打印预览 查看将要打印的报告。



- 点击关闭，返回报告生成器。

#### 第 4 步 – 打印和存储报告

现在可以打印报告并存储报告以备后用。

## 打印报告

- 选择 文件 > 打印或点击打印图标。

**注：** 当点击打印图标时，报告生成器将立即打印而不显示打印对话框，即不能选择打印某页或某几页。

## 存储报告

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 输入 Report1 作为文件名。
- 3 点击保存。

## 练习 2 – 建立带有链接对象的简单报告

---

下一步，利用在光谱模块章节的练习 1 中采集的数据，我们将建立带有链接对象的报告。


在这个练习中：

- 链接一个图象对象到光谱模块
- 链接一个峰值检测表对象到光谱模块
- 建立一个报告的表头
- 打印报告

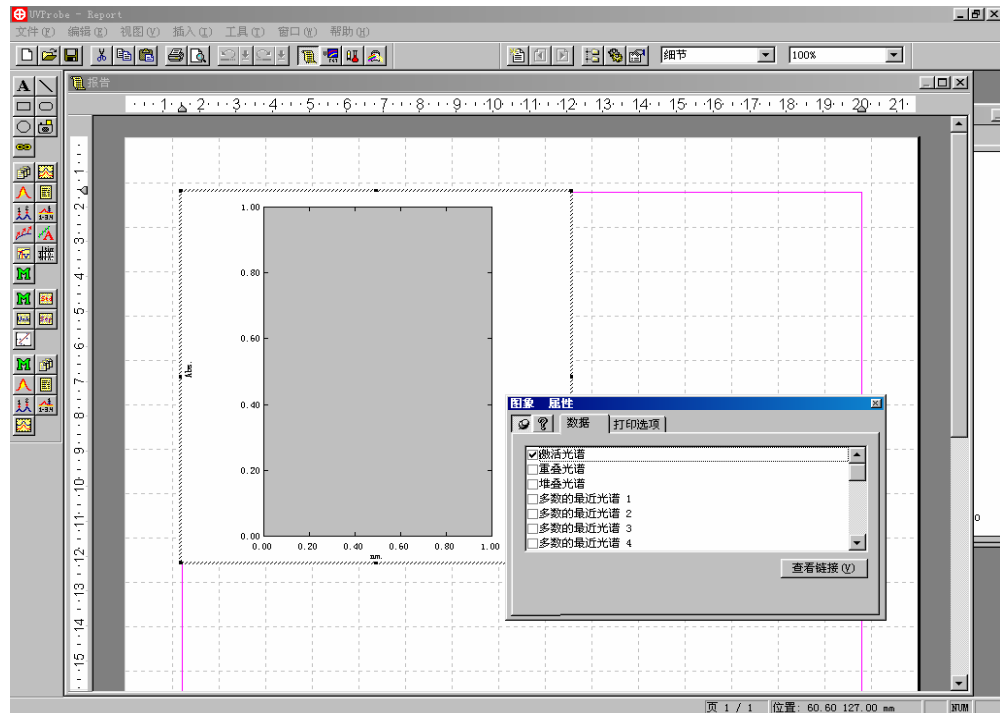
### 第 1 步 – 链接一个图象到现有的光谱模块

---

当一个图象链接到现有光谱模块，它将与光谱模块建立一个永久的链接。当进行打印或打印预览时，无论包含图象的报告何时打开，图象将从现有的光谱模块中获得数据。

- 1 选择 文件 > 新建。
- 2 通过点击对象工具条中的光谱图象图标，放置一个空的图象。此时图象中没有包含数据是因为还没有被链接到数据源。即使链接以后，在打印或打印预览以前图象仍显示为空。只有在打印或打印预览时才从光谱模块中获得现有数据。
- 3 在对象处于选择方式下单击鼠标右键，选择属性选项。
- 4 点击属性页的左上角的  来固定销入属性页。

**注：** 在下面三个练习中属性页保持销入状态。



- 5 检查数据标签是否被激活。
- 6 点击活动光谱核选框。现在图象已链接到活动光谱模块。选择 文件 > 打印预览来查看打印时图象的样式。注意到由于图象已链接到活动光谱模块所以在预览中图象已显示数据。当打印报告时，报告生成器将根据活动光谱模块修改数据并打印数据。点击关闭返回原界面。

**注：** 以上步骤仅在光谱模块中有文件打开时有效。当未打开文件时，没有数据被链接。

- 7 在图象上单击使其进入选择方式，然后将图象下移两栅格并左对齐。

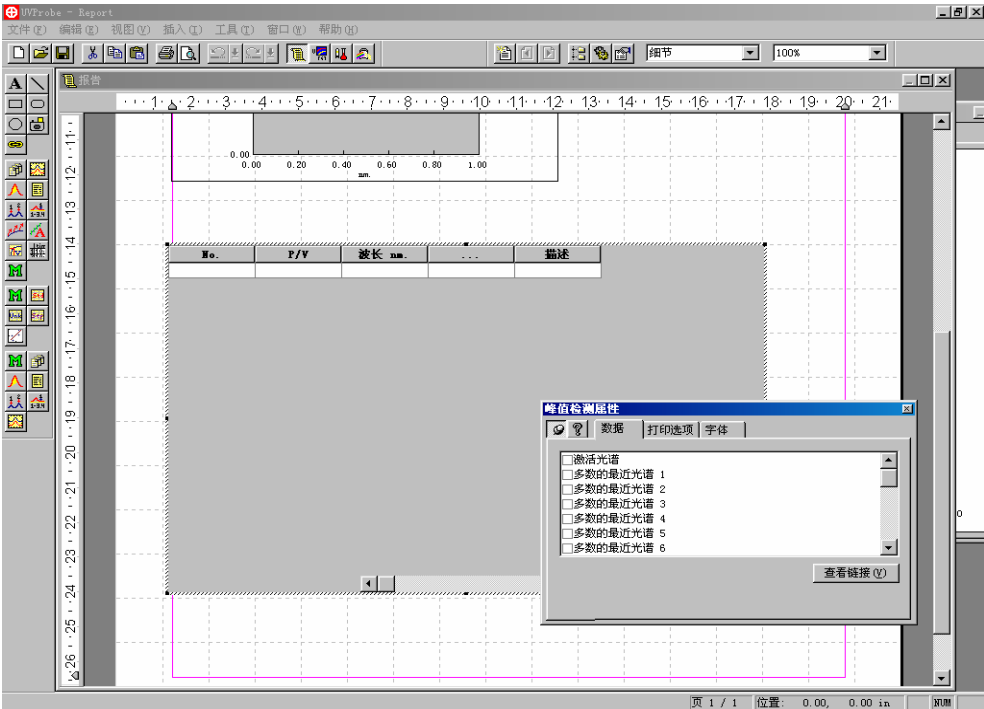
## 第 2 步 – 链接一个峰值检测表到现有光谱模块

峰值检测表显示被选择的数据集的所有的峰和谷的顶点。插入峰值检测表并链接到现有光谱模块。有关峰值检测表的详细信息请参考在线帮助。

### 链接峰值检测表

- 1 拖动滚动条到页底部。
- 2 点击对象工具条中的峰值检测图标，以放置一个空的峰值检测对象到报告中。注意到现在峰值检测表不含有数据。
- 3 将峰值检测表移到图象下方，拖曳对象右边界直至表宽度为 13 个栅格宽。页面将如下图所示。注意到在选取打印或打印预览之前，图象和表中都没有数据。





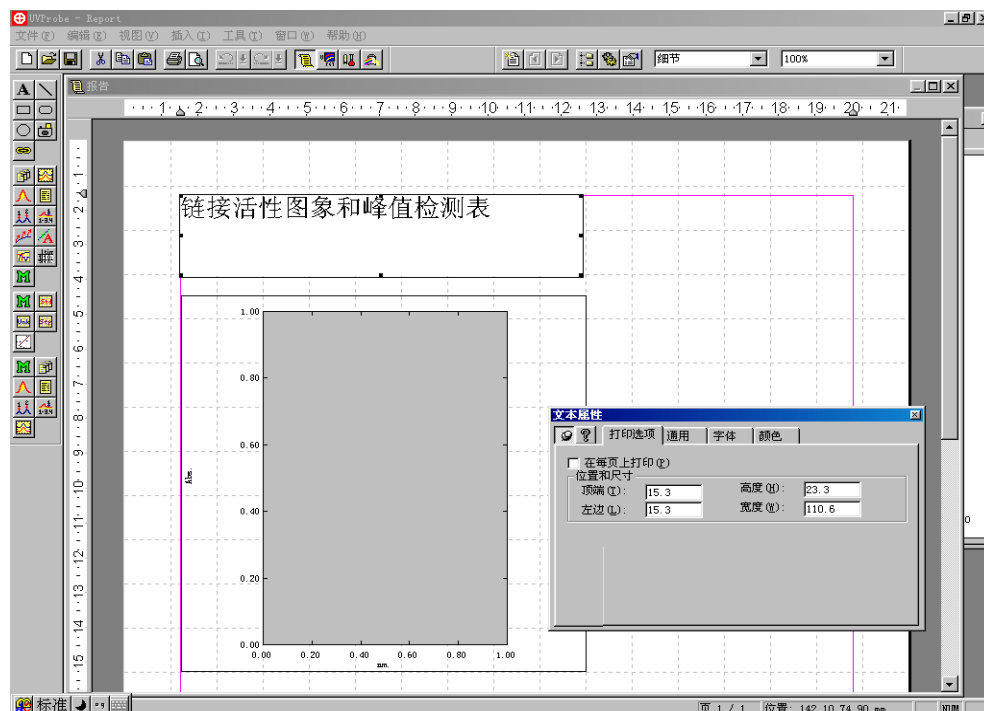
- 4 在属性页的数据标签，点击选取现有光谱，表将链接到现有光谱模块。选择文件> 打印预览 来查看打印的图象的形状。注意到现在表中包含从现有光谱模块中得来的数据。点击**关闭**，退出打印预览状态。

### 第 3 步 – 建立表头和打印报告

用报告生成器对象工具条的文本图标建立表头，然后打印报告。打印时图象和峰值检测表都包含数据。

### 建立表头

- 1 卷到页面顶端，点击文本键。
- 2 点击文本框，输入表头“链接活性图象和峰值检测表”。
- 3 扩展文本框显示所有文本并左对齐文本框。



注：可在属性页的打印选项标签中输入文本框的精确的位置和尺寸。

## 打印报告

- 选择 文件 > 打印 或打印图标。

## 保存报告

- 1 选择 文件 > 保存。
- 2 输入 Report2 作为文件名。
- 3 点击保存。

## 练习 3 – 高级技巧

在这个练习中：

- 向报告中增加页，数字及链接文本对象
- 在光谱模块中用保存过的报告配置快速打印
- 在光谱模块中快速打印

### 第 1 步 – 在每页重复插入文本对象

首先，在报告的每一页插入页码和日期。然后，增加一个可标识仪器类型的文本对象。

## 插入页码

- 1 滚动到页面底部。
- 2 选择 插入 > 页码。
- 3 在属性页中，点击打印选项标签并检查是否已选择选项“所有页上打印”。



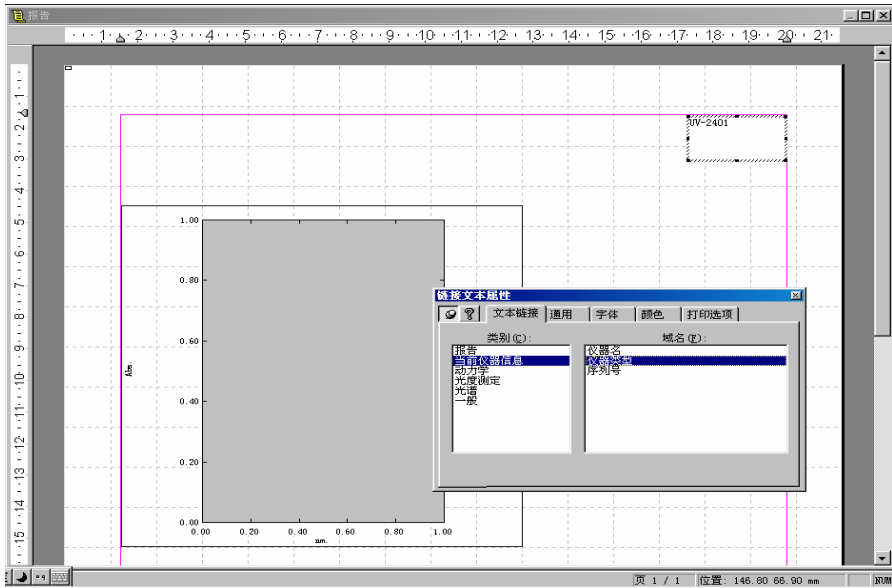
- 4 将文本框移到页面底部。报告中每页的相同部位将出现页码。

## 插入日期

- 1 选择 插入 > 日期。
- 2 在属性页中，点击打印选项标签，再点击选项“在所有页上打印”。
- 3 将文本框移到页面右下角。在报告每页的相同部位将出现日期。(属性页可能需要移动位置)

## 插入仪器类型

- 1 滚动到页面顶部并点击对象工具条的链接文本键。
- 2 在属性页中，点击文本链接标签。
- 3 在仪器类别列表框中，点取“当前仪器信息”。
- 4 在域名列表框中，双击**仪器类型**。注意到仪器类型出现在文本框中。
- 5 如下图所示，调整文本框使其正好显示所有文本并将其移到页面的右上角。



注： 报告生成器提供其它类型的文本链接，如用户日志、注册公司。详细信息请参考在线帮助的链接文本对象。

## 存储报告

- 1 选择 文件 > 另存为。
- 2 输入 Report4 作为文件名。
- 3 点击保存。

## 第 2 步 – 配置快速打印功能

现在，使用 Report2 配置光谱模块的快速打印功能。快速打印不用返回到报告生成器中选择报告，而能在模块中立即打印。

UV Probe 系统带有一系列预定义报告，在模块中选择 文件 > 打印时将打印这些报告。每个报告都有特定对象，如动力学模块中的光谱图象、峰值检测，光度测定模块中的标准表。

使用关联特定对象的自定义报告比使用系统自带的报告要好。本节将介绍关联光谱模块图象面板的自定义报告。

## 配置光谱图象面板的快速打印

- 1 选择 窗口 > 光谱。
- 2 选择 视图 > 设置，选择快速打印标签。



- 3 在打印表目录框中，点击光谱图象图标。
- 4 点击 **浏览**，选择 Report2，再点击 **打开**。
- 5 点击 **确定**。
- 6 点击图象面板，再点击打印图标。
- 7 到打印机中取回报告。当图象面板已激活时，选择文件 > 打印将从模块中打印报告 Report2。

**祝贺你，你已读完 UV Probe 指南!**

# INDEX

## 9

95%置信水准, 3-24

## K

Ki 值, 4-21

Km 值, 4-14, 4-19

Km 值, 4-12

## M

Michaelis-Menten 计算, 4-12

Hanes, 4-12, 4-16

Lineweaver-Burk, 4-12

Michaelis-Menten 表

加载, 4-14

Michaelis-Menten 表, 4-13

## U

UV Probe 功能, 1-9, 1-30

UVProbe 功能, 1-22

## V

Vmax 值, 4-14, 4-19

Vmax 值, 4-12

## 三划

工具条, 1-22

光度测定, 3-3

动力学, 4-3

报告生成器, 5-3, 5-4

报告生成器文本对象, 5-4

报告生成器对象, 5-4

报告生成器光度测定对象, 5-5

报告生成器光谱对象, 5-6

报告生成器动力学对象, 5-5

工具栏, 1-8

光谱, 2-3

标准工具栏, 1-7

## 四划

从内存中除去文件. 查看文件属性

分光光度计

连接, 1-23

通讯, 1-22

区域. 查看峰面积表

文件, 1-27, 1-28

文件属性

从内存中除去文件, 2-20

从存储器中删除文件, 4-10

方法

光度测定, 3-7

光谱, 2-5

动力学, 4-4

存储, 2-6

面板, 2-1

方程式类型, 3-33

日期

在报告中插入日期, 5-15

计时方式

手工, 4-4

自动, 4-4

计算结果, 3-36

## 五划

主表, 4-10

显示/隐藏列, 4-10

仪器

仪器条, 1-6, 1-23

初始化, 1-24

序列号, 1-23

配置, 1-23

增加, 1-23

履历, 1-6, 2-4

仪器参数, 2-5, 3-9, 4-5

写字板, 2-28

加载, 4-14, 4-19

四则运算处理, 2-21

处理, 3-26

数据集, 2-20

处理转换标签, 3-26

处理源列, 3-26

处理算符, 3-26

对象

嵌入, 5-2

链接, 5-2

打印预览, 5-11, 5-13

未知浓度, 3-24

比较标准表, 3-24

计算, 3-23

未知样品, 3-16

读取, 3-23

## 六划

光度计

状态, 2-6

键, 1-24

光度测定

存储文件, 3-24

状态条, 1-6

保存文件, 3-24

窗口, 3-2

键条, 3-13

光度测定方式

方程式, 3-31

方程式类型, 3-33

仪器参数, 3-9

打开存储的方法, 3-20

因子, 3-31

- 曲线次数, 3-9
- 自定义方程式, 3-32
- 抽吸单元附件, 3-39
- 光度测定方式公式, 3-8
- 光度测定方法
  - 建立, 3-7
- 光谱方法
  - 仪器参数, 2-5
  - 加载存储的方法, 2-24
  - 扫描方式, 2-5
  - 扫描速度, 2-5
  - 建立, 2-5
  - 波长范围, 2-5
  - 采样间隔, 2-5
  - 修改, 2-24
  - 测定方式, 2-6
- 光谱扫描, 2-7
- 列
  - 显示/隐藏, 3-36
- 动力学
  - 采集数据, 4-9
  - 窗口, 4-1
- 动力学方法
  - 仪器参数, 4-5
- 因子, 3-31
- 多数据点, 3-8
- 字体, 5-9
- 安装 UV Probe, 1-1
- 扫描方式, 2-5
- 扫描速度, 2-5
- 曲线次数, 3-9, 3-15, 3-19
- 池定位装置, 2-24
  - 采集数据, 2-26
  - 配置, 2-25
- 池空白操作, 4-8
- 自动标尺, 2-7
- 自动填充, 3-20
- 自定义方程式, 3-28, 3-31, 3-32
- 页码
  - 在报告中插入页码, 5-14

## 七划

- 位图
  - 复制和粘贴到写字板, 2-28
- 初始化. 查看仪器
- 启动 UV Probe, 1-5
- 启动 UV Probe, 1-9

## 六划

- 吸收值, 2-7
- 吸收值, 4-6

## 七划

- 快速打印
  - 配置, 5-16
- 快捷菜单, 1-25

- 抑制剂表, 4-18
  - 建立, 4-18
  - 填充, 4-19
- 抑制剂浓度, 4-20
- 报告
  - 打印, 5-10, 5-14
  - 存储, 5-10, 5-14
  - 设定栅格间距, 5-7
  - 页边距, 5-7
  - 表头, 5-8, 5-13
  - 拷贝图像, 5-7
  - 粘贴图像, 5-8
  - 插入日期, 5-15
  - 插入仪器类型, 5-15
  - 插入页码, 5-14
- 时间扫描
  - 读数, 4-6
- 时间扫描图象面板, 4-1
- 系统管理, 1-10

## 八划

- 图象
  - 面板, 2-1
  - 属性, 4-16
  - 嵌入, 5-7
  - 链接, 5-11
- 图象方式, 1-26
  - 自定义, 1-26
  - 标准曲线, 1-26
  - 重叠, 1-26
  - 样品图象, 1-26
  - 堆叠, 1-26
  - 激活, 1-26
- 定向, 4-16
- 抽吸单元, 3-37
  - 安装, 3-38
  - 自动调零, 3-39
- 波长范围, 2-5
- 组, 1-10
  - guest, 1-10
  - 系统管理员, 1-10
  - 增加, 1-18
- 表头, 5-9
- 转换, 4-16
- 转换标签, 3-26
- 软件需求, 1-1
- 采样间隔, 2-5

## 九划

- 信息面板, 4-1, 4-13
- 卸载 UV Probe, 1-3
- 标准
  - 读取样品, 3-13
- 标准曲线, 3-1, 3-15
  - 图象统计, 3-25
  - 统计, 3-24
  - 数值方程式, 3-25

- 标准表, 3-1
  - 打开, 3-23
  - 存储, 3-21, 3-23
  - 浓度, 3-12
  - 样品 ID, 3-12
  - 填充, 3-21
- 标准样品
  - 读取样品数据, 3-13
- 活度值, 4-10
- 测定方式, 2-6
- 统计
  - 方程式, 3-25
  - 残余标准偏差, 3-25
  - 相关系数, 3-25
- 选点检测
  - 表, 4-7
  - 将表作为模板存储, 4-8
- 重复, 3-21
  - 隐藏重复, 3-22
- 重叠图象
  - 设置, 2-6
- 除数, 2-18
- 面板, 1-8, 2-1, 4-1
  - 方法, 2-1
  - 图象, 2-1
  - 操作, 2-1

## 十划

- 倒数转换, 2-22, 3-26
- 峰面积表, 2-16
  - 处理, 2-18
  - 定义区域, 2-16
  - 定义颜色和涂色类型, 2-19
  - 除数, 2-18
- 峰值检测表, 2-10
  - 标注峰和谷, 2-14
  - 调节参数, 2-10
  - 阈值, 2-12
  - 链接到报告, 5-12
- 样品/S.E.P.表, 3-1
- 样品表, 3-16
  - 浓度列, 3-24
  - 填充, 3-35
- 样品标识符, 3-12, 3-16, 3-22
  - 自动填充, 3-20
- 粉末样品, 4-5
- 读数条, 2-17, 2-19
- 预测标准误差(S.E.P.), 3-25

## 十一划

- 啤酒花酸分析, 3-28
- 基线到零, 2-18
- 基线校正, 2-4
- 密码, 1-5, 1-9
- 菜单, 1-8, 1-22
  - 快捷菜单, 1-25
  - 颜色, 2-20

## 十二划

- 储元, 1-27, 1-28
- 属性页, 1-25, 3-20
  - 打印选项标签, 5-15
  - 固定, 1-25
  - 销入, 2-12, 5-11
- 嵌入对象, 5-2, 5-7
- 插入类型
  - 在报告中插入, 5-15
- 最小硬件要求, 1-1
- 登录对话框, 1-5, 1-9
- 窗格, 1-22
- 链接
  - 对象, 5-2
  - 图象, 5-11
  - 峰值检测表, 5-12

## 十三划

- 数据
  - 采集, 2-6
  - 保存, 2-9
- 数据集, 1-27, 1-28
  - 处理, 2-20
  - 活度值. 查看活度值
- 输出窗口, 1-6

## 十四划

- 模块, 1-8, 1-21
  - 打开, 1-5, 1-9
- 算符, 3-26
- 酶作用物浓度, 4-14, 4-22
- 酶图象面板, 4-1, 4-16
- 酶表, 4-13

## 十五划

- 颜色菜单, 2-20

## 十六划

- 操作方式, 5-1
  - 未选择方式, 5-2
  - 选择方式, 5-1
  - 编辑方式, 5-1
- 操作面板, 2-1, 4-1