新手快速入门之如何使用 CDS 软件编辑序列来进行样品运行?

刘炜

(富美实(上海)化学技术有限公司,上海 200000)

在先前的几节内容中,我们主要对 CDS 软件进行了一个系统的认识,了解了软件各部 分的组成以及学习了如何使用该软件进行方法参数的编辑。在本节中,我们将学习样品运 行序列的编辑。

样品运行有两种方式,一种是单针运行,适合少量或者单个样品运行。还有一种是编 辑序列表来进行运行,适合大批量样品分析。

1、单针运行进样:单针运行进样是一种方便快捷的进样方式,当我们只有一两个样品 时,那我们可以选择单针进样,这样就不用再去编辑序列表了。在主页菜单栏点击 Single Sample,进入单针进样分析界面,在这里我们需要编辑的主要是"运行信息"及"自动进 样器"两个部分。在"运行信息"中,我们需要输入样品名称、采集方法名称(右边点击 三个点,在方法路径下选择后缀名为.amx 的采集方法)、结果保存路径、结果名称。在 "自动进样器"中,我们主要是输入进样体积以及样品瓶位置信息,如果我们对进样量没 有特殊要求,那就默认使用采集方法内的进样体积,如果我们想减少或者增加进样体积, 那直接把"Use method"改为需要的进样量数值即可,样品瓶位置这个是容易遗漏的地方, 如果不输入或者未进行修改,那进样会错误或者进错样。

File	нот	e								
Take Release	Status	Method	Single Sample	F Sequence	 A B Copy → Copy → Delete ⇒ → Reset → 	Activity Log Instrument Status Run Queue	Online Signals Spectrum Status	Acquisition Method		
trument			Layouts	_		_	Windows			
Single Sample Analysis										
Run Information										
Samp	ole name	Test-1)-				>
Acq.	method	/Training/Metho	ds/Test.amx							
Proc.	method	1000								
Resu	lt path	/ _/Resul	ts/wash-shutdown	~	<i>_</i>					
Resu	lt name	Test-1		-	5					>
Aut	tosampler									
Injec	tion source	Als								•
Injec	tion volume	Use Method								•
Vial		2								
Samp	ole prep method									
 Processing Section Sample Description 										

上述这些内容编辑好后,点击下方运行,单针开始进样采集数据。此时如果我们想接着走下一个样品,那我们无需等待这一针运行结束,继续重复上述操作,提交运行,那么就会 在右侧序列表中看到有一个运行申请在等待中,待这一针走完会自动运行下一针。

2、序列运行进样:对于新建序列,我们点击菜单栏 Sequence,然后选择 Table,就进

入到了序列编辑界面。

File	Home Control	Agilent GC GC Plugins	- Acquisition			? – 🗆 X
itatus Me	thod Single Sample Sequ	ence	Activity Log Instrument Statu Run Queue	Online Signals s Status Sequence Creat Windows	tion Template	
Sequence F P D	e – Untitled ≞ 🗄 • 🔒 昌 • =		Template 🕨			
 General Properties Run Options Injections Table 	1 Inject	-b Vial -b 101	Sample type 👳 Rui Sample	n type 49 Leve	el -b Acq. method -b demo.amx -	Proc. method -b Inj/Vi
	Sample custom para Indicates Mandatory Er	meters Compound custo	m parameters Com	pound amounts	Description Create report	>
	Parameter	Value				Z
Result path Result name	C:\CDSProjects\demo\Results					Run

然后我们需要对序列进行编辑,我们可以看到序列表里面有很多列,需要填写不同的 信息,我们可以根据自己的需求来删减这些列。点击红色圈选按钮,弹出一个对话框,在 对话框中我们可以勾选我们想要在序列中体现的信息,并且把无关紧要的信息去除。

elease Status	Method Single Sample Sequence	K B Copy Activity tog X Delete Instrument Status S Reset Run Queue	omme signais sequence creation Spectrum Status Windows	emplate		
Sequence – Ur 🕀 🗗 🖻 🕒 🖶	ntitled ☐ ⊒- ∋-⊠ ಔ ^	/ Template 🕨 💸				
 General Properties Run Options Injections 	Sample type # Vial # Acq. method	×	Action & Proc. r Inj/	Via⊕ Volume⊕ Injection sot⊕ S 1 Use Met Als	ample name 😐 Data fil >	e ≪i Sample preç≪i >
Table	Choose Columns Choose Columns Method Override Columns Method Override Columns Sample rome Sample rome Target a Target a	<u>S</u>		Γ		
	Parameter Value	eters Compound amounts	Description Create report	Als		
Nesuri parin	<i>y.</i> A				Sequence has	invalid entries. 🔳 Run

在编辑完成第一行第一个样品信息后,我们需要增加行,那我们有两种方法,一种是 把鼠标左键放到第一行序列处,然后鼠标右击,我们可以看到有很多选项,选择增加或者 删除行,也可以在标记"1,2,3"快捷键处增减行。这里需要注意的是此款软件只能一行 行增加,删除的时候可以多选删除,有些厂商软件可以一下子增加 n 行。



行数增加完成后,对于相同信息的列,我们只需要在第一行向下填充即可,其余部分 内容可自己根据需要填写。序列编写完成后记得另存,输入序列名称,在运行序列前不要 忘记左下角数据存储路径及结果集名称的输入。

运行序列后我们可以在队列中查看序列运行状态,如果你有多个序列需要运行,那你可以全部编辑好依次进行序列运行提交,系统会自动运行完成一个序列后进行下一个序列的数据采集,即使是不同的采集方法也同样适用。本节中主要学习如何进行运行序列编辑,在下一节中我们将学习如何在 CDS 中进行数据分析。