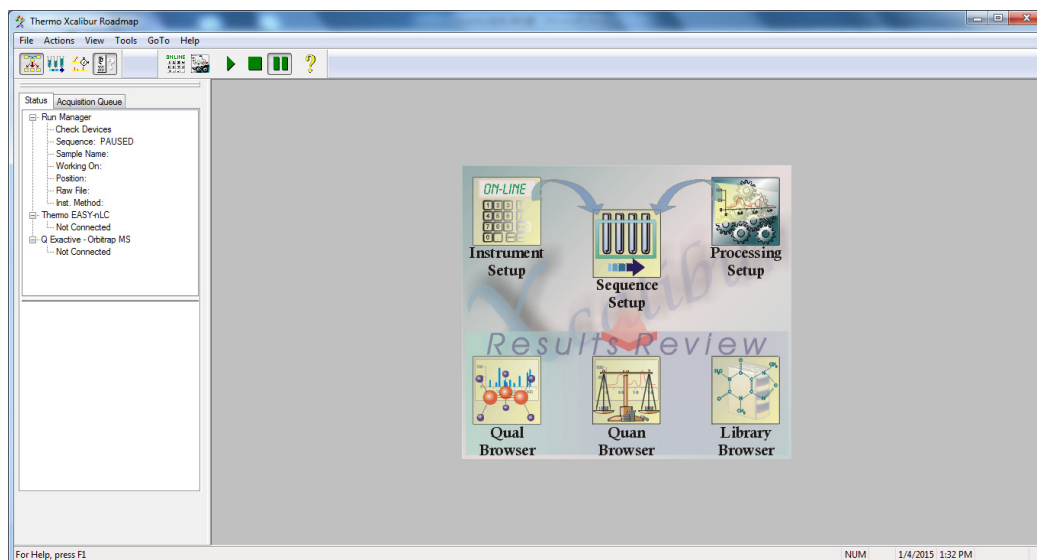
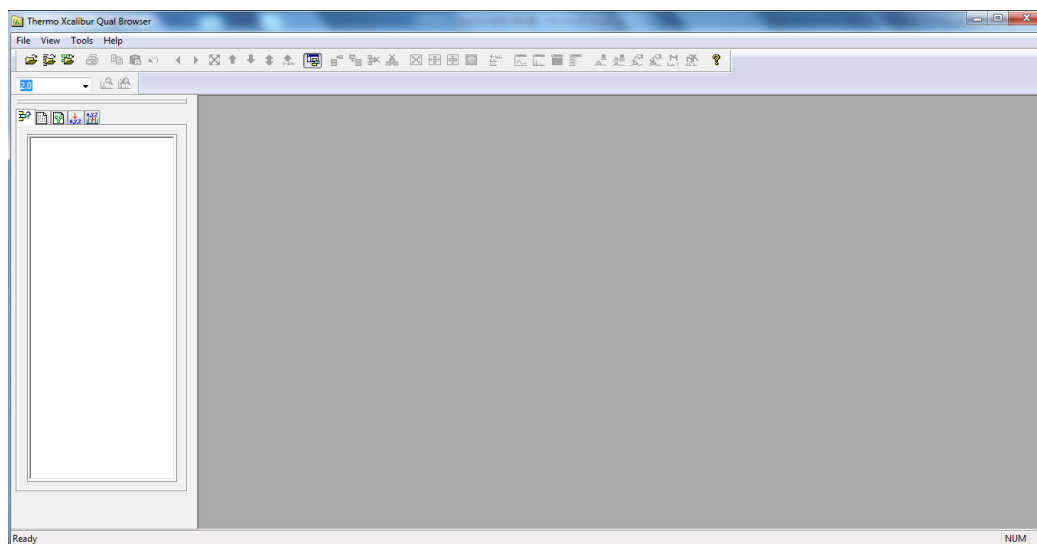


Xcalibur 定性浏览器

1 双击  图标，进入 Xcalibur 工作站



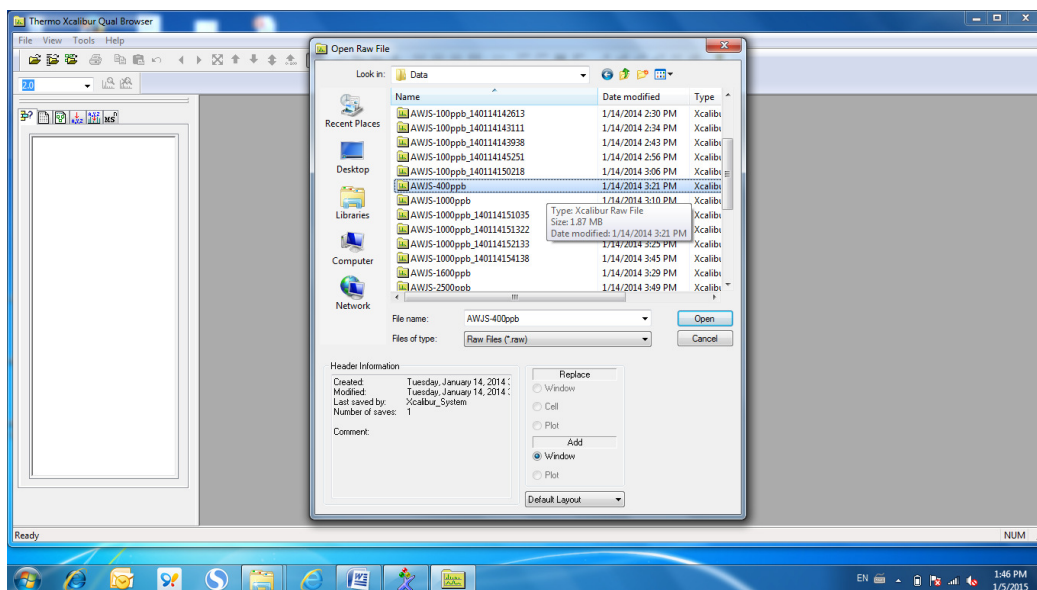
2 点击  进入定性浏览器



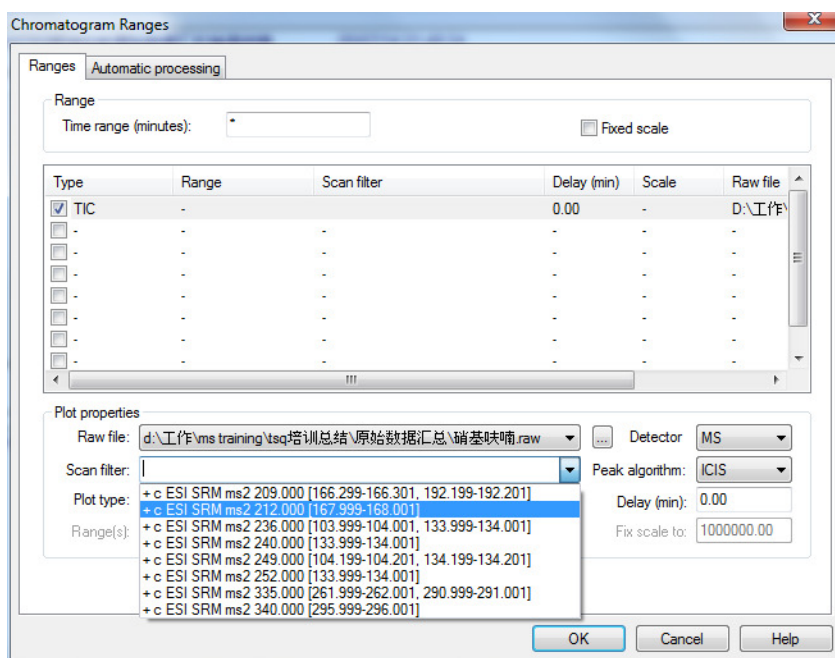
3 快捷图标解释如下：



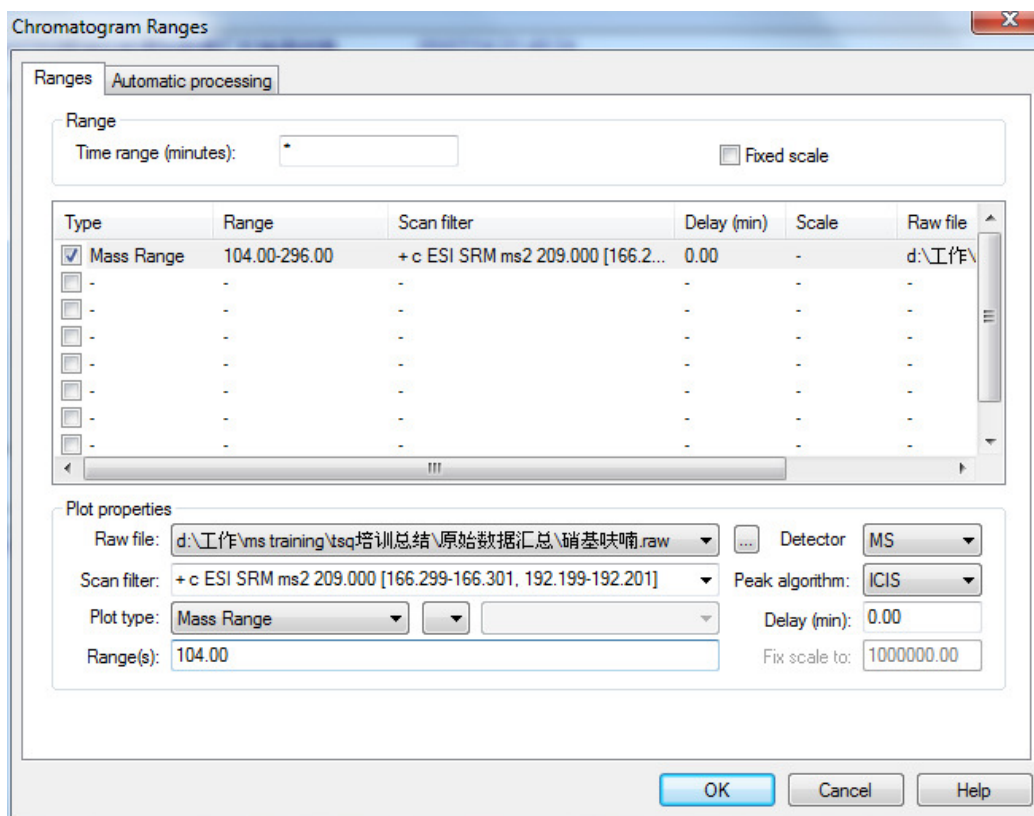
4 点击图标 打开一张谱图



5 提取不同的离子通道: 点击总离子流图右上角图钉激活窗口, 鼠标右键选择 Ranges 出现如下对话框, 点击 Scan filter 的下拉框选择不同的离子通道;

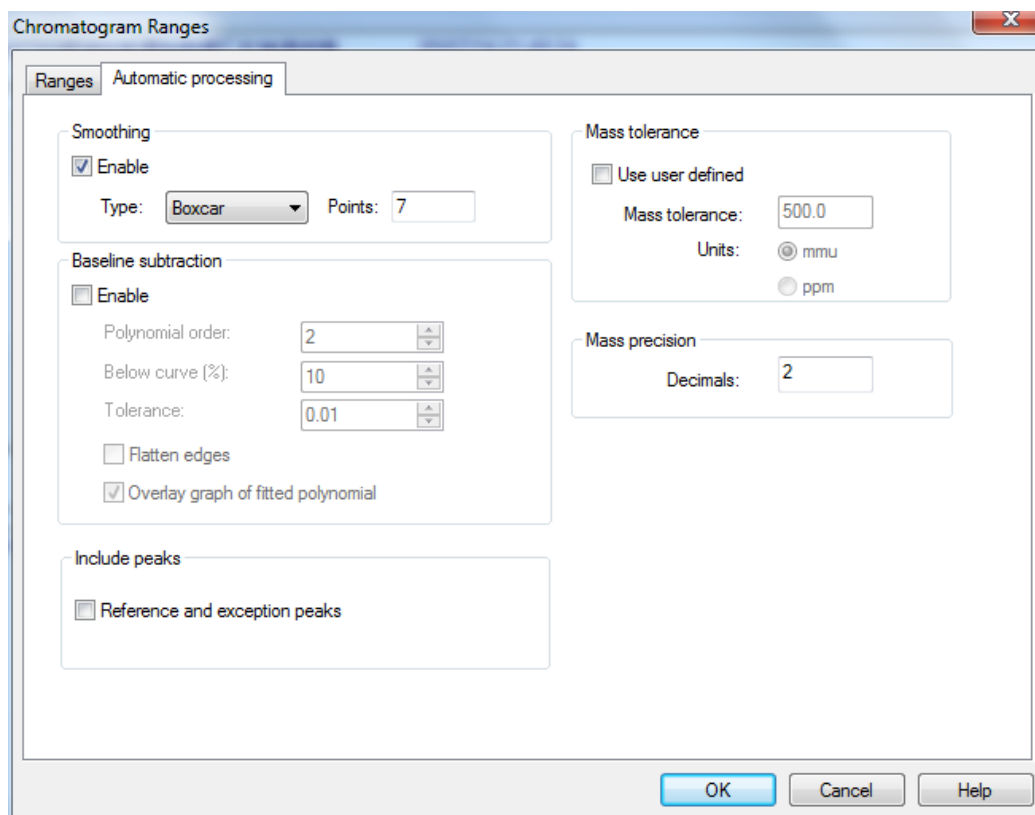


提取单个离子：在 Scan filter 中选完离子通道之后，将 Plot type 改为 Mass Range，在 Range(s) 中输入要提取的离子的质荷比。

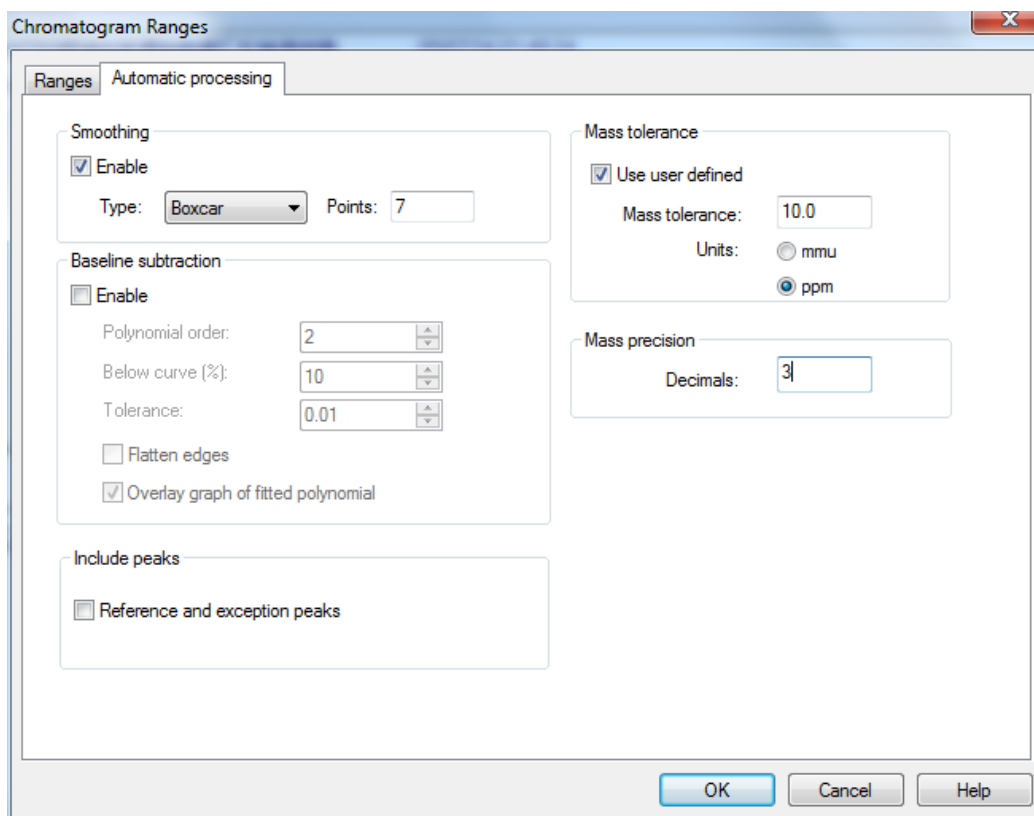


平滑点数：在数据图谱中任何位置点击鼠标右键选择 Ranges,在对话框中选择 Automatic processing, 在 Smoothing 中的 Enable 打钩，Points 中输入平滑点数，只能输入 1~15 之内的

奇数。

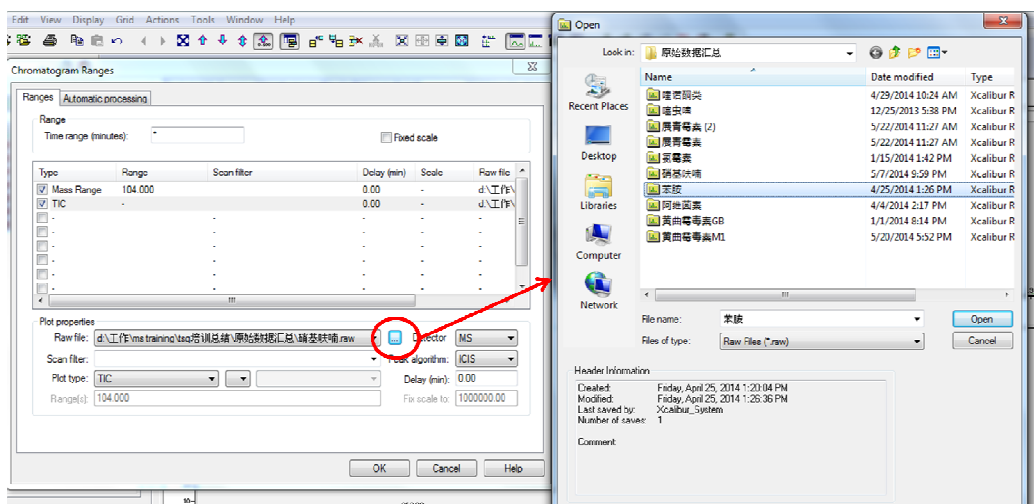


设置质量精度和小数点后位数，只适用于 Q Exactive，LTQ Orbitrap， Fusion 等高分辨质谱：在数据图谱中任何位置点击鼠标右键选择 Ranges,在对话框中选择 Automatic processing，在 Mass tolerance 中设置质量精度，一般设置 10ppm；Mass precision 设置精确到小数点后第几位。



6 将多张谱图添加到一个 cell 中进行比较

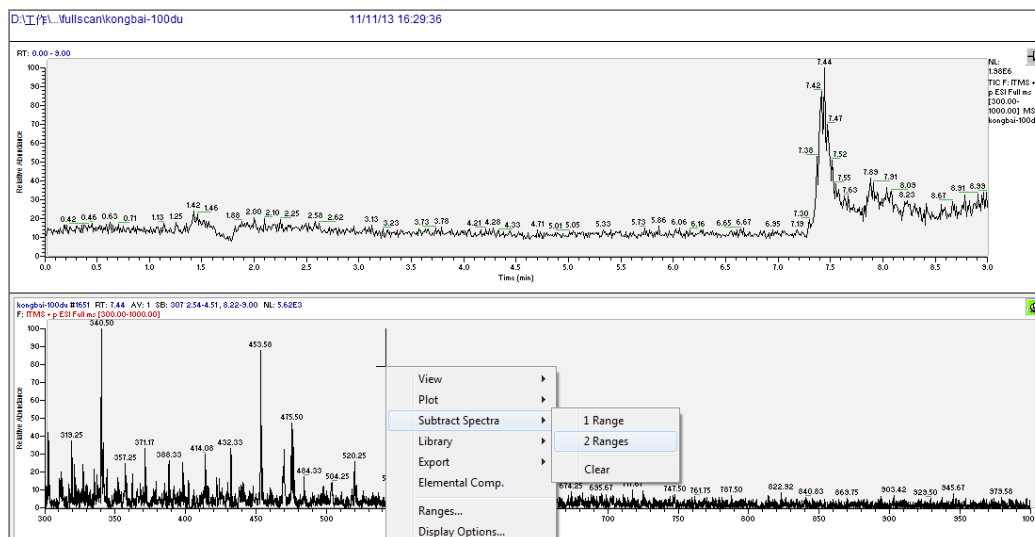
点击总离子流谱图右上角图钉激活，鼠标右键选择 Ranges 出现如下对话框，点击红色圈内的图标，选择另外一个样品图谱进行比较；



7 扣除背景

(1) 在原图上选择一段时间的扫描作为背景进行扣除

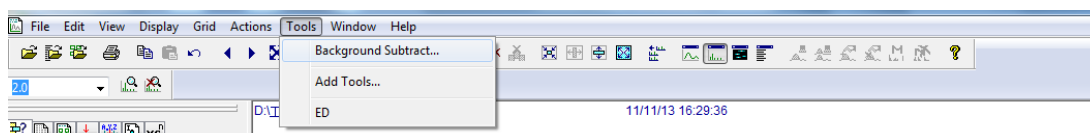
激活质谱图右上角图钉，鼠标右键 **Subtract Spectra**，选择一段 1 Range 或者两段 2 Ranges 时间扣除，在对应的总离子流谱图背景区域内拖动鼠标左键；

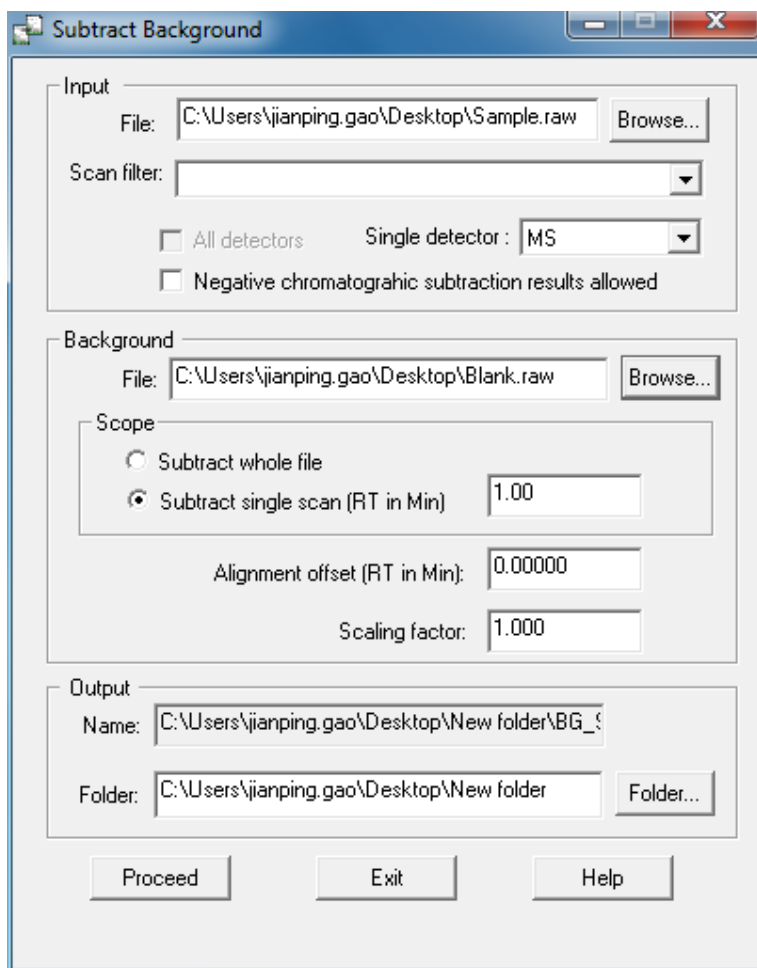


(2) 做一个基质空白作为背景进行整个样品背景扣除

菜单栏 **Tools/Background Subtract**，弹出如下窗口：

Input/File 中添加样品数据，**Background/File** 中添加空白基质数据，**Output/Name** 中是扣除基质空白之后样品的名称（不可修改），**Folder** 是保存路径（可修改）。

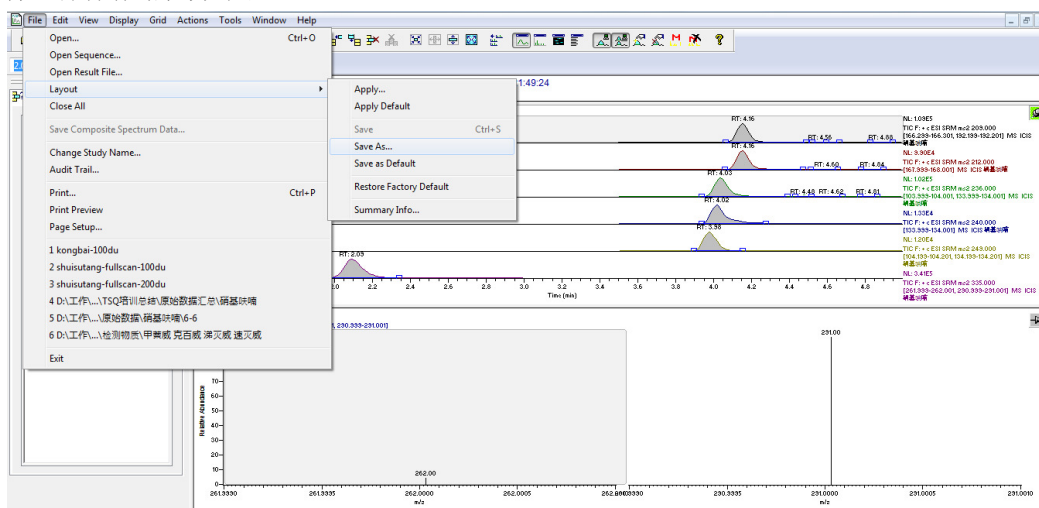


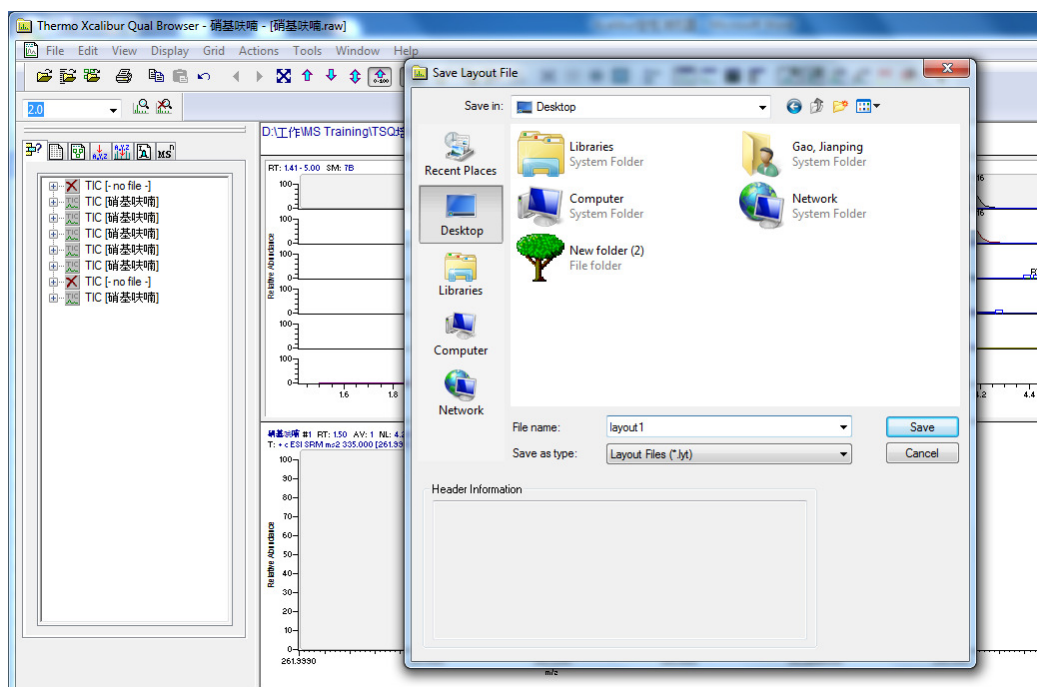


8 建立和使用 layout 文件

(1) 建立 layout 文件

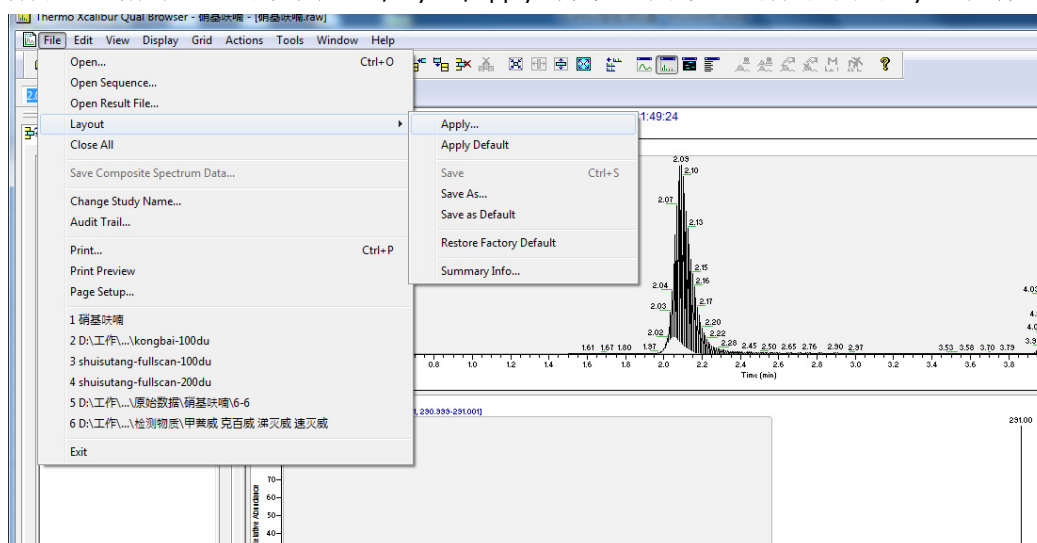
对谱图进行一系列处理之后，点击菜单栏 File/Layout/Save as，会弹出对话框，给 layout 文件选择保存路径并命名。

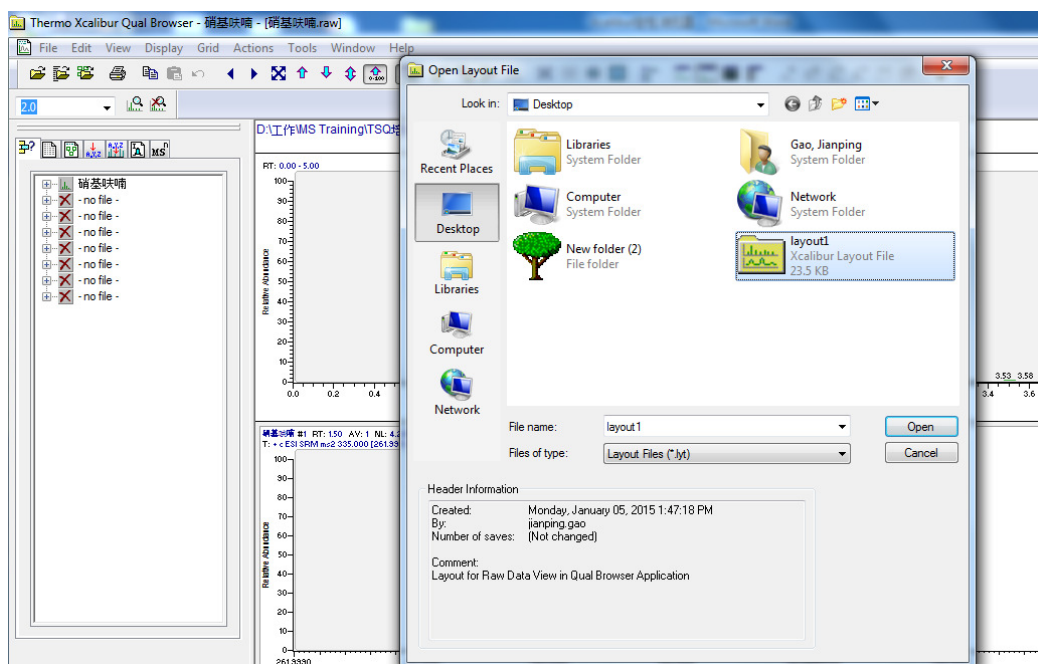




(2) 使用 layout 文件

打开一张谱图后，点击菜单栏 File/Layout/Apply，会弹出对话框，选择要应用的 layout 文件。





9 显示积分峰面积及信噪比信息

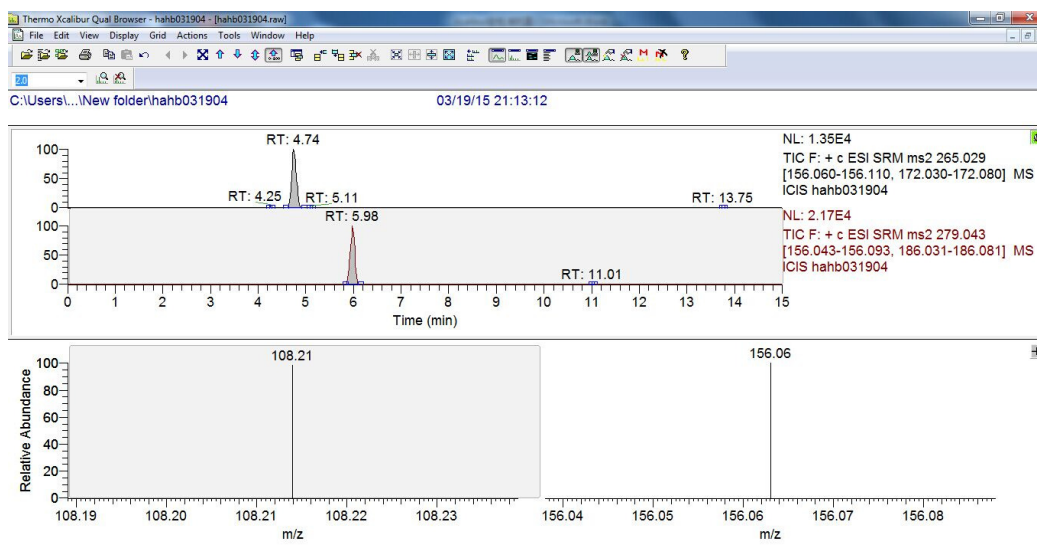
对色谱图进行积分:

(1) 自动积分

点击快捷图标  (对单个谱图进行积分)



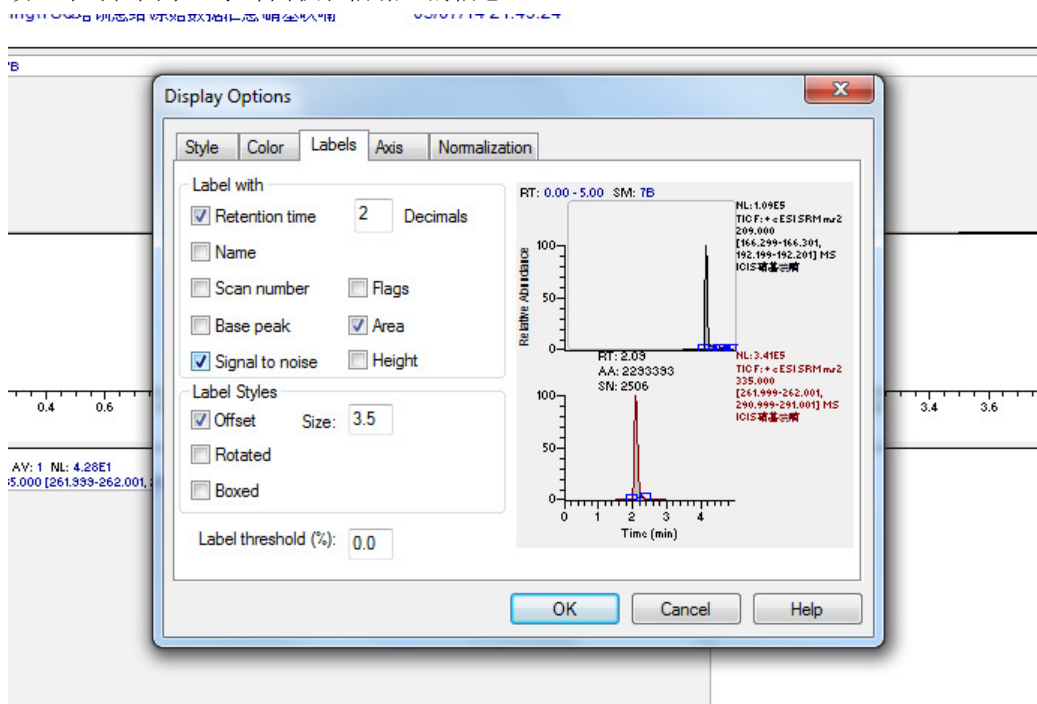
或者  (同时对一个 cell 中的所有谱图都进行积分)



(2) 手动积分

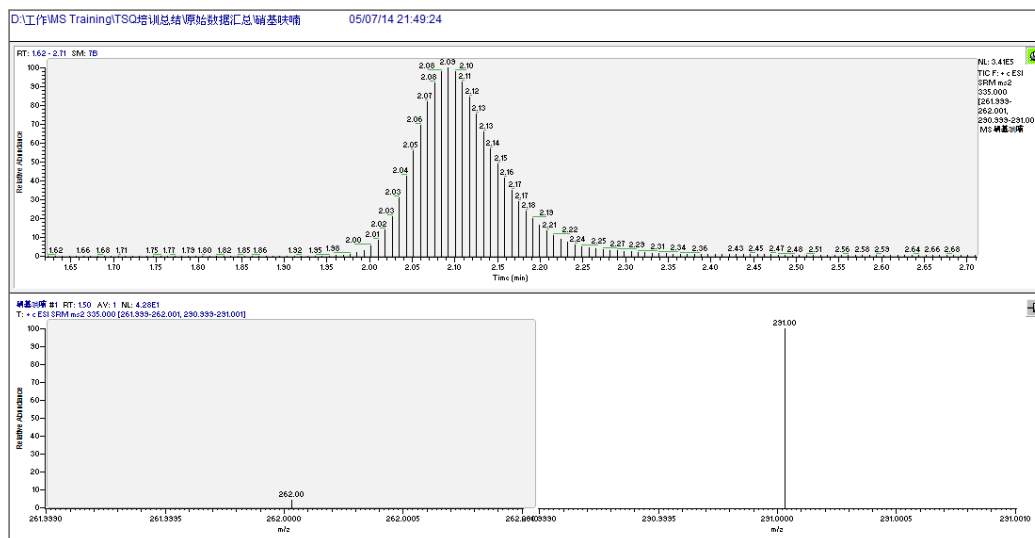
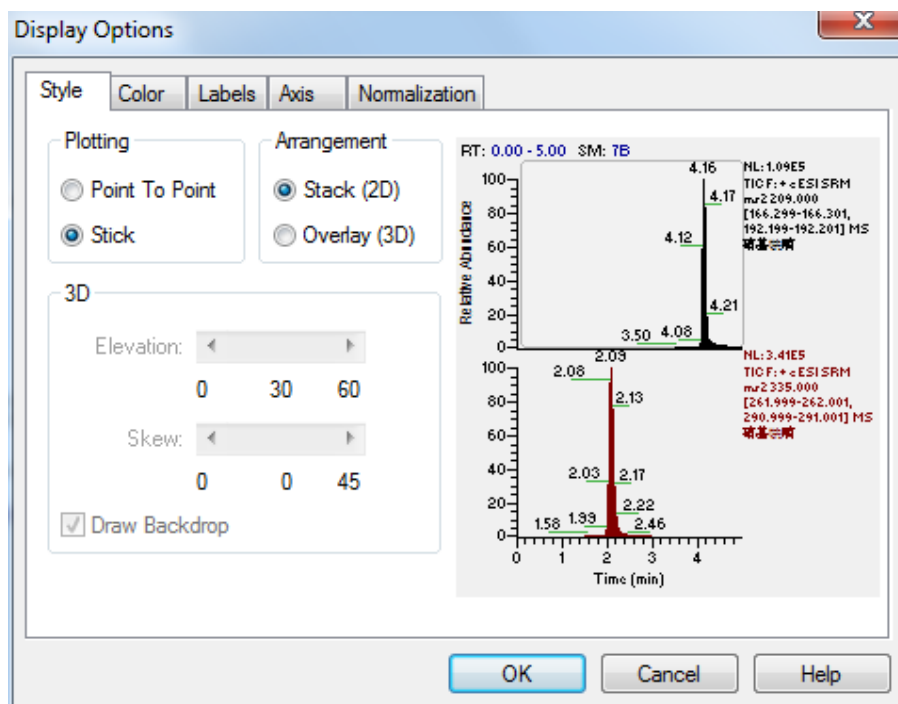
点击快捷图标, 鼠标左键从色谱峰开始处拖动至积分结尾处

对谱图进行积分之后, 点击鼠标右键 Display Options/Labels 选择 Area 和 Signal to noise 的选项, 即可在图中显示峰面积和信噪比的信息。

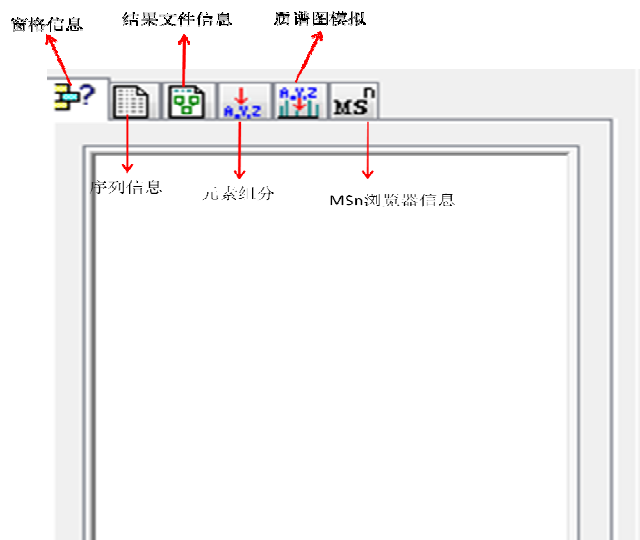


10 查看扫描点数

激活总离子流图, 点击鼠标右键 Display Options/Style/Plotting 中选择 Stick 选项, 即可更改总离子流图的显示形式, 每一根棒棒就是一个扫描点, 一个色谱峰里面最佳扫描点是 12~18 个。

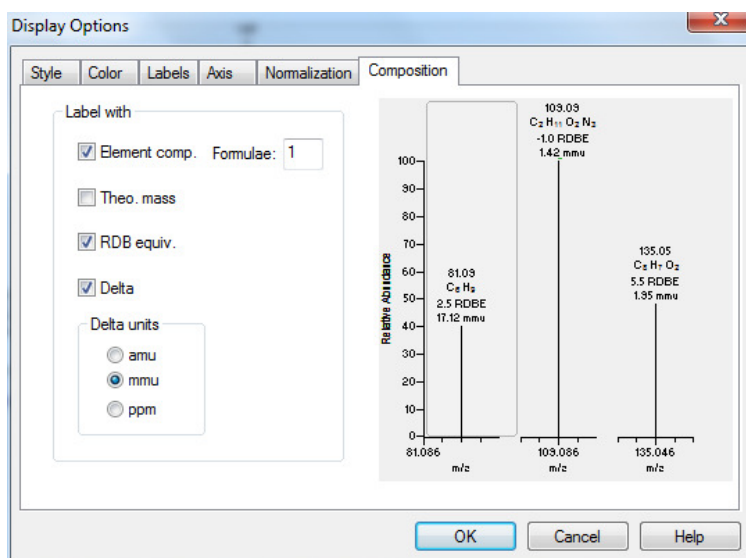


11 左侧信息栏内容



(1) 元素组分

激活一张质谱图，鼠标右键Display Options /Composition选项卡。选择Element comp.、RDB equiv、Delta。点击OK，在质谱图上就会显示元素组成的信息。



(2) 质谱图模拟

点击信息栏中的图标，在Chemical formula中输入分子式，在Adduct中选择加合离子，点击左上角New即可得到模拟的质谱图。

