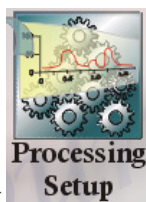
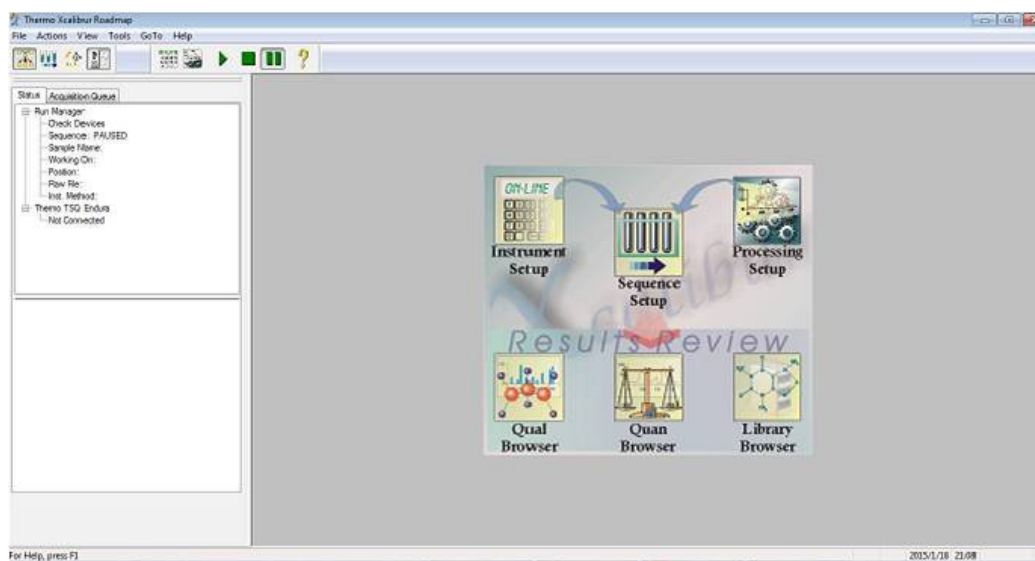


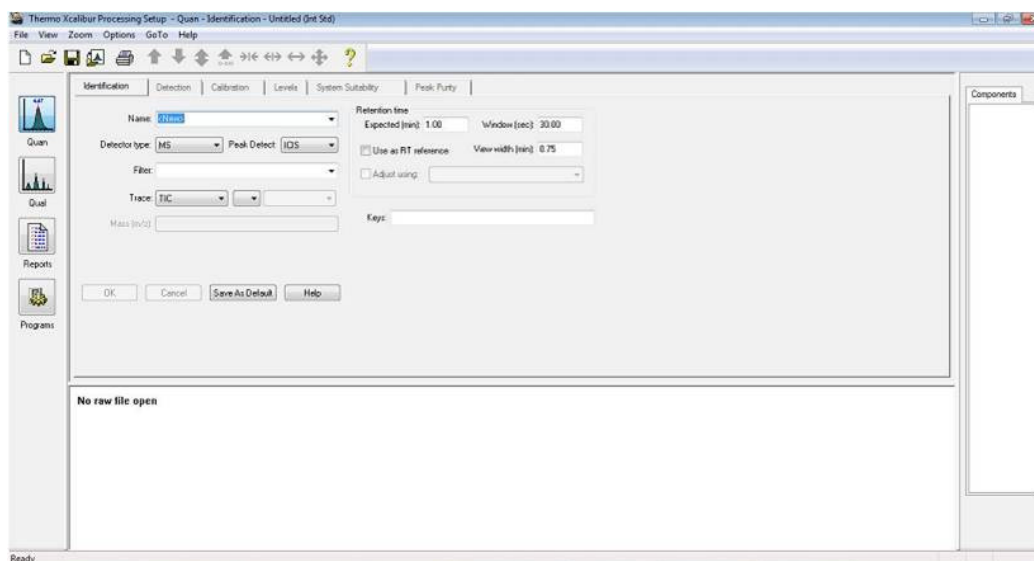
Xcalibur 定量数据处理流程



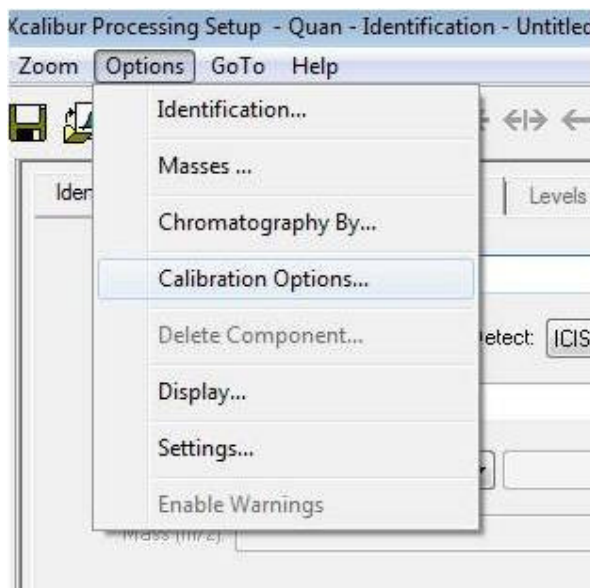
点击桌面上的 图标，进入 Xcalibur 工作站的主界面



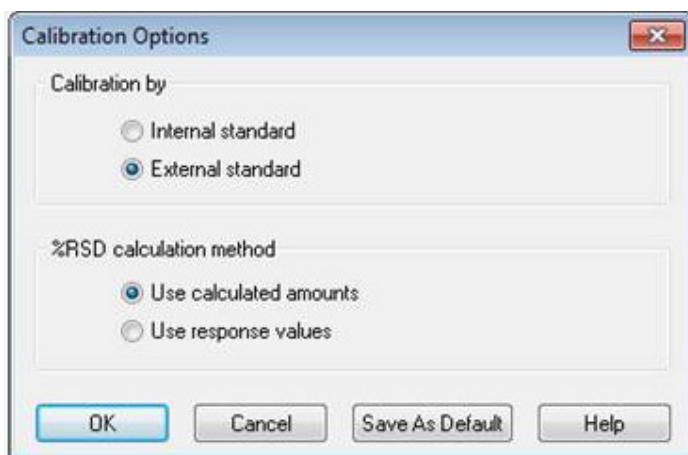
点击 图标，进入处理方法设置界面：



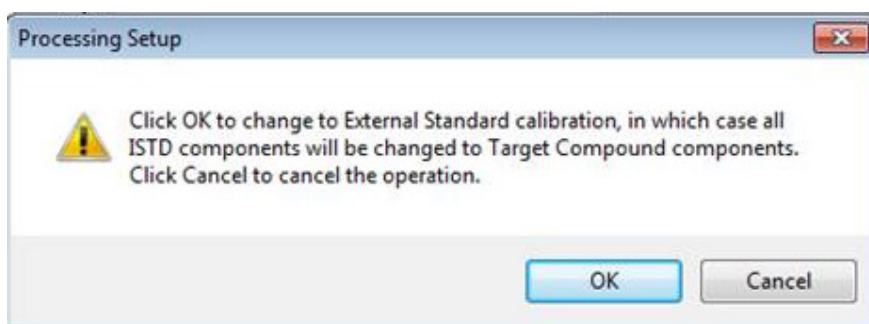
选择菜单“Options”选项中的“Calibration Options”，见下图：



出现如下对话框：

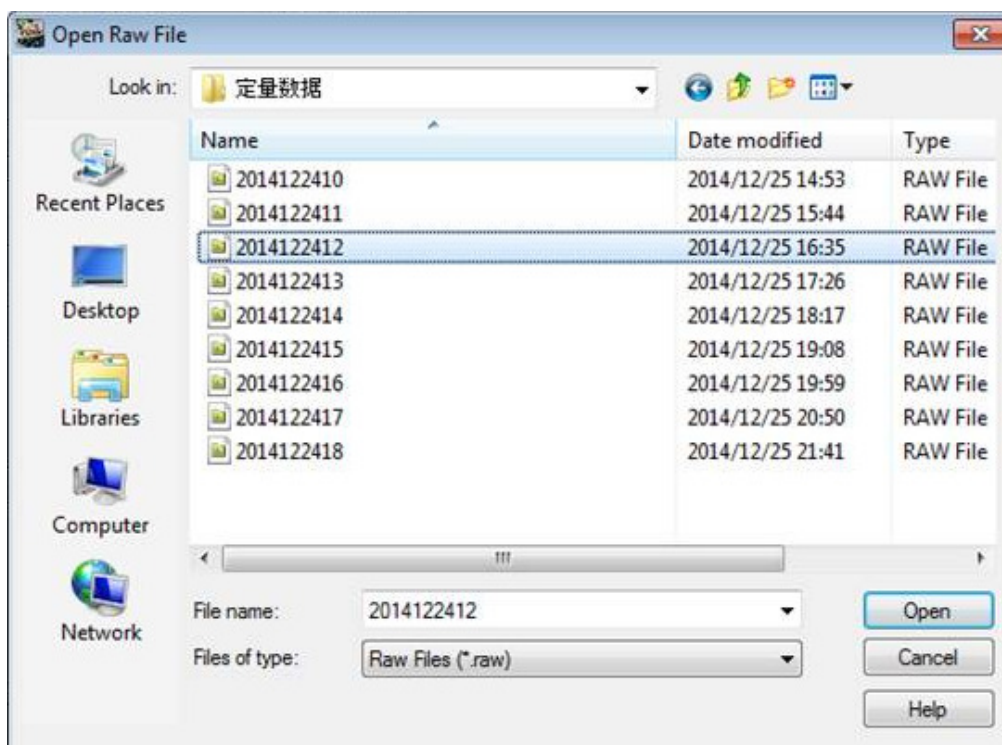


选择定量方法：Internal standard（内标法）或 External standard（外标法）。（注：软件默认为内标法，本教材示例为外标法，选择 External standard），出现如下对话框，提示方法更改为外标法：



点击“OK”。

点击 ，打开一张标准品的数据文件：



在界面左下窗口出现总离子流图，开始设置各参数：

在“Identification”中，设置提取组分色谱峰的相关参数：

Name: 键入组分名称

Detector: 选择 MS

Filter: 下拉选择对应组分的 Scan Event

Mass(m/z): 键入定量离子的质荷比

Peak Detect: 选择色谱峰积分方式 ICIS 或 Genesis

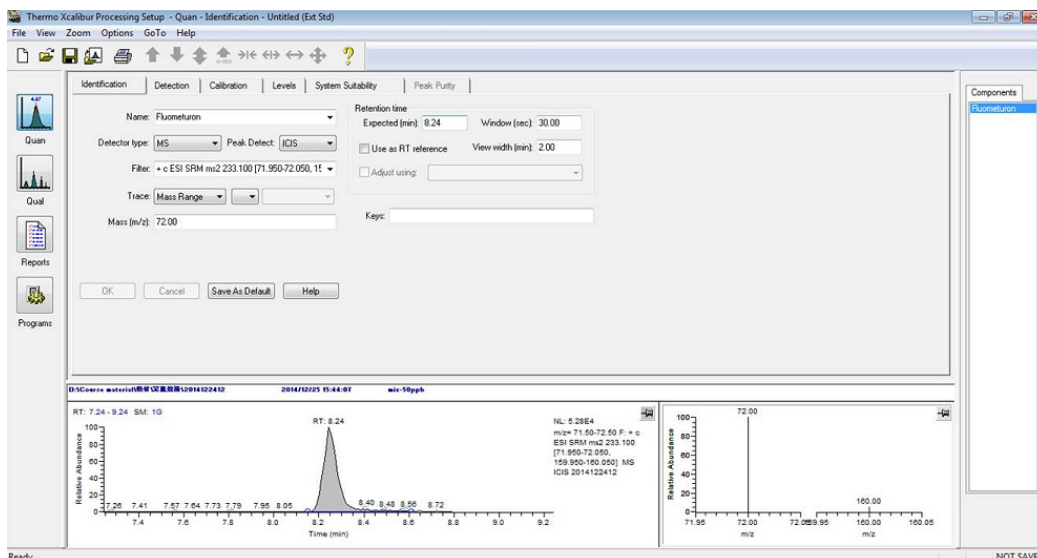
Retention Time 栏:

Expected(min): 键入组分的保留时间

Window(sec): 可容忍的时间偏差窗口

View Width(min): 色谱图可视时间宽度

点击“OK”，组分 Fluometuron 的色谱峰被提取出来，变为灰色，见下图



在“Detection”中，设置色谱峰积分参数：

The screenshot shows the 'Detection' tab of a software interface. It contains two main sections: 'ICIS Peak Integration' and 'ICIS Peak Detection'.
ICIS Peak Integration:
- Smoothing points: 3
- Baseline window: 18
- Area noise factor: 5
- Peak noise factor: 10
- ☐ Constrain peak width
- Peak height (%): 5.0
- Tailing factor: 1.0
There are two small graphs labeled 'Min' and 'Max' showing peak integration curves.
ICIS Peak Detection:
- ☐ Highest peak
- ☒ Nearest RT
- Minimum peak height (S/N): 3.0
At the bottom are buttons: OK, Cancel, Save As Default, Advanced..., and Flags...

在“ICIS Peak Integration”中，设置各积分参数，让色谱峰积分合理，见上图

Smoothing Points: 键入平滑点数

Baseline Window: 基线宽度

Area Noise Factor: 面积噪音

Peak Noise Factor: 峰噪音

在“ICIS Peak Detection”中，设置其他参数：

选择“Nearest RT”

Min Peak Height(S/N): 键入最小峰高

点击“OK”，进入“Calibration”界面，设置“Calibration”参数：

The screenshot shows the 'Calibration' tab of the software interface. It contains two main sections: 'Component type' and 'Target compounds'.
Component type:
- ☒ Target compound
- ☐ ISTD
ISTD:
- Amount: 1.000
- Units:
Target compounds:
- ISTD:
- Weighting:
 - ☒ Equal
 - ☐ 1/X
 - ☐ 1/X^2
 - ☐ 1/Y
 - ☐ 1/Y^2
 - ☐ 1/s^2
- Calibration curve: Linear
- Units:
- Origin:
 - ☒ Ignore
 - ☐ Force
 - ☐ Include
- Response:
 - ☒ Area
 - ☐ Height
At the bottom are buttons: OK, Cancel, Save As Default, Flags..., and Help.

Component Type: 若为外标法，该组分只能定义为 Target Compound（目标待测物）；

若为内标法，选择该组分是 Target Compound 或 ISTD（内标物）

ISTD: 若为内标法，“Amount”中键入内标物加入的量，“Unit”中键入内标物的单位，若为外标法，此处不可选。

Target Compound: 若为内标法，在 ISTD 中下拉选择待测物对应的内标物；若为外标法，此处不可选。

Calibration Curve Type: Linear（线性回归）

Origin: 选择忽略原点，强制过原点，包含原点

Response: Area（面积）

Weighting: Equal（权重）

点击“OK”，进入“Level”界面，设置“Level”参数：

	Cal Level	Amount
1	L1	10.000
2	L2	20.000
3	L3	50.000
4	L4	80.000
5	L5	100.000
*		0.000

Units:

	QC Level	Amount	% Test
*		0.010	0.00

OK Cancel Save As Default Help

设置标准曲线的几个浓度点：在“Cal Level”中键入每个浓度点的标示（可用任意数字或字母），在“Amount”中键入每个水平的浓度。

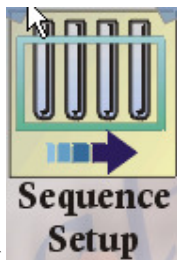
如果有 QC 样品，在“QC Level”中键入 QC 样品的浓度水平，并在“Amount”中键入每个水平的浓度，“%Test”键入占测试样品的比例。

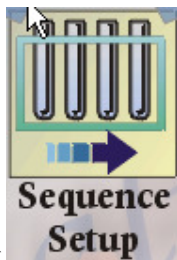
点击“OK”，组分 Fluometuron 的设置完成。

回到“Identification”界面，若为多组分定量，在“Name”中下拉选择“New”（如下左图），进入空白界面，按照以上设置 Fluometuron 的步骤设置另一个待测组分的定量方法。待所有组分均设置好后，右侧的 Component 栏中就会列出所有待测组分，如下右图：



点击 ，定义文件的存储路径及文件名，保存 process method。

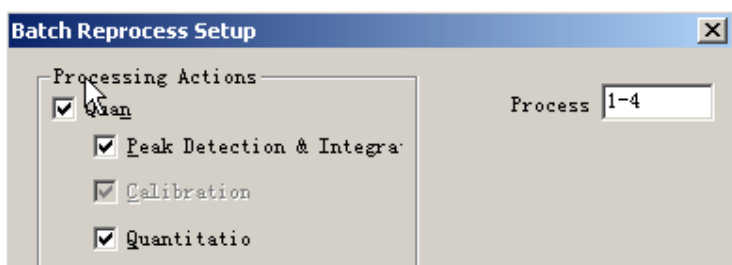


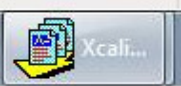
回到 Xcalibur 工作站的主界面，点击 ，进入序列表的编辑界面：

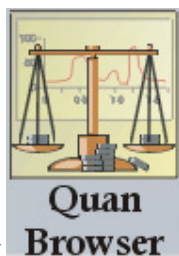
	Sample Type	File Name	Path	Inst Meth	Proc Meth	Position	Inj Vol	Level
1	Std Bracket	2014122410	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	L1
2	Std Bracket	2014122411	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	L2
3	Std Bracket	2014122412	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	L3
4	Std Bracket	2014122413	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	L4
5	Std Bracket	2014122414	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	L5
6	Unknown	2014122415	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	
7	Unknown	2014122416	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	
8	Unknown	2014122417	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	
9	Unknown	2014122418	D:\Course material		D:\Vest1	1	10.00	
*							0.00	

可调用之前进样时的序列，也可以手动将要处理的数据逐一添加至序列表。在“Sample Type”中下拉选择样品的类型（Std Bracket: 标准品, Unknow: 未知样, Blank: 空白, QC: 质控样品），在“Proc Meth”中调入之前保存的 process method，在“Level”中下拉选择每个标准品对应的 Level，在“File”菜单栏选择“Save as”存储此序列文件。

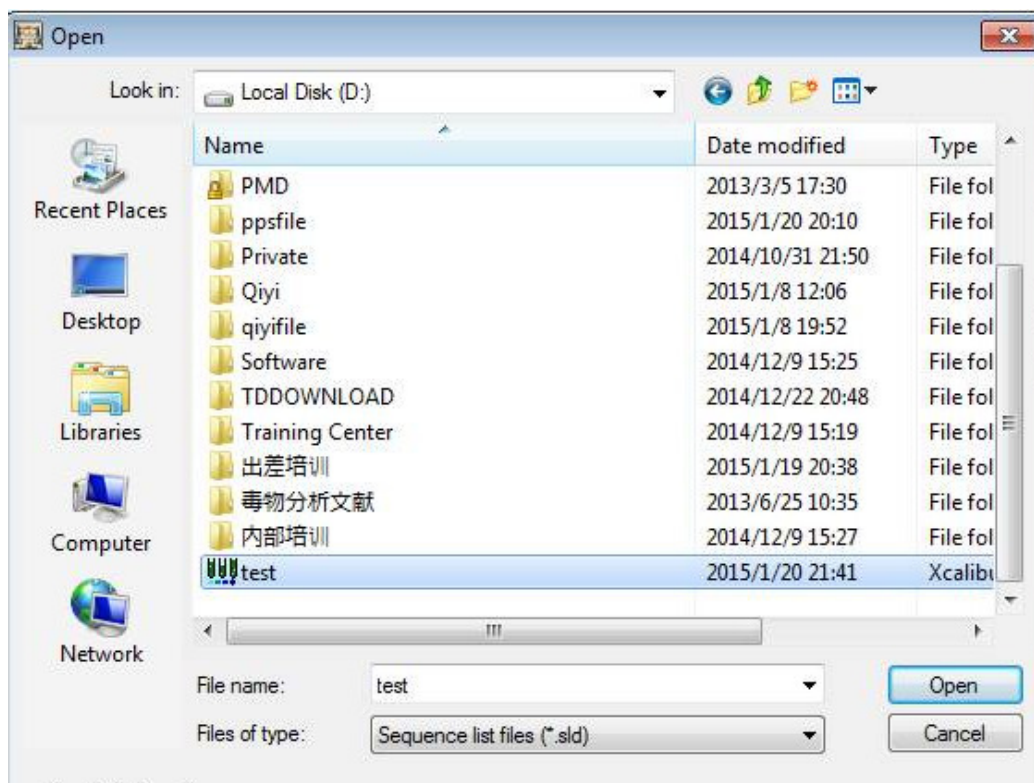
点击 ，在跳出的对话框中勾选“Quan”中的几项，见下图：



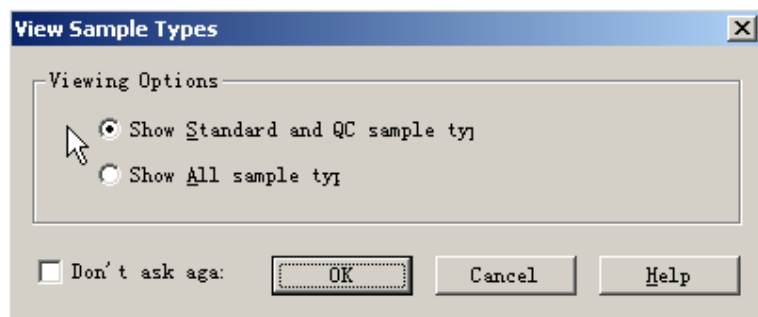
点击 OK，开始进行数据批处理，此时会出现图标 ，待该图标消失，批处理完成。



回到 Xcalibur 工作站的主界面，点击 **Quan Browser**，进入定量浏览界面：
跳出一个对话框，调出以上存储的序列文件（如下图），点击“Open”。



跳出如下对话框：



选择“Show All sample type”，定量处理完成，见下图：

