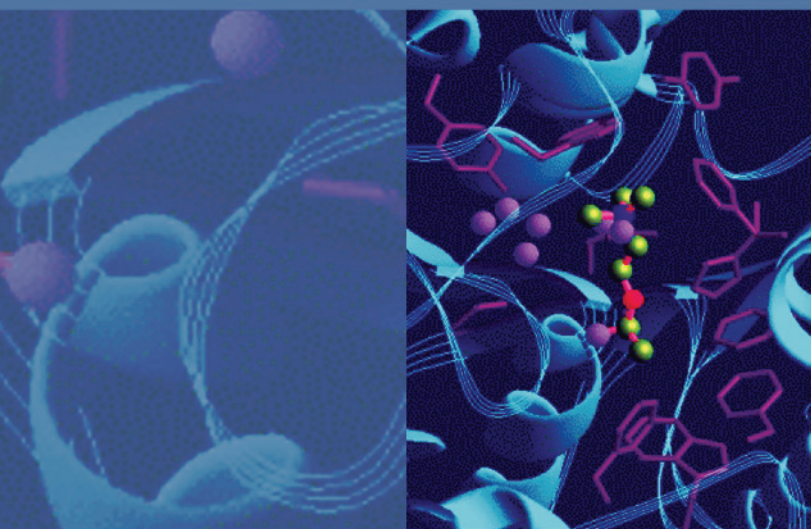




# Thermo Xcalibur

定量分析

版本 2.2

入门手册

XCALI-97352 修订版 B 2011 年 5 月



© 2011 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

Xcalibur、Surveyor 和 Accela 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标。

Microsoft、Windows、Excel 和 Windows Vista 是 Microsoft Corporation 在美国及其它国家和地区的注册商标。Adobe、Acrobat 和 Reader 是 Adobe Systems Inc. 在美国及其它国家和地区的注册商标。

下列是在美国和其它国家（地区）的注册商标：

Oracle 是 Oracle 公司及其子公司的注册商标。

LCQ 和 LCQuan 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 的商标。

所有其它商标均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 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。**

本文档不是 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：2011 年 1 月修订版 A（以反映 Windows 7 兼容性）；2011 年 5 月修订版 B

软件版本：Thermo Xcalibur 2.2。

仅供研究使用。不可用于诊断。

# 目录

|       |                                      |      |
|-------|--------------------------------------|------|
|       | 前言 . . . . .                         | vii  |
|       | 相关文档 . . . . .                       | viii |
|       | 特殊注意事项 . . . . .                     | viii |
|       | 联系我们 . . . . .                       | viii |
|       | . . . . .                            | ix   |
| 部分 1  | 教程                                   |      |
| 第 1 章 | Xcalibur 综述 . . . . .                | 1    |
| 第 2 章 | 创建一个处理方法 . . . . .                   | 7    |
|       | 打开 Processing Setup 窗口 . . . . .     | 8    |
|       | 指定 Quan 视图选项 . . . . .               | 10   |
|       | 打开原始数据文件 . . . . .                   | 11   |
|       | 指定分析组分的 Identification 设置 . . . . .  | 13   |
|       | 指定内标物的 Identification 设置 . . . . .   | 13   |
|       | 指定目标化合物的 Identification 设置 . . . . . | 19   |
|       | 输入峰积分和检测参数 . . . . .                 | 21   |
|       | 输入峰积分参数 . . . . .                    | 22   |
|       | 输入峰检测参数 . . . . .                    | 23   |
|       | 选择校正设置 . . . . .                     | 24   |
|       | 指定校正和 QC 浓度水平 . . . . .              | 26   |
|       | 指定目标化合物的校正水平 . . . . .               | 27   |
|       | 指定 QC 浓度水平 . . . . .                 | 28   |
|       | 保存处理方法 . . . . .                     | 29   |
| 第 3 章 | 批次处理数据文件 . . . . .                   | 31   |
|       | 将处理方法添加到序列中 . . . . .                | 32   |
|       | 批次处理序列生成结果文件 . . . . .               | 35   |
| 第 4 章 | 在 Quan Browser 中处理结果文件 . . . . .     | 37   |
|       | 在 Quan Browser 中查看序列文件 . . . . .     | 38   |
|       | 在 Quan Browser 中修改处理方法 . . . . .     | 40   |
| 第 5 章 | 预览、指定和打印报告 . . . . .                 | 43   |
|       | 在 XReport 中预览报告 . . . . .            | 44   |
|       | 指定处理方法中的报告模板 . . . . .               | 50   |
|       | 打印报告 . . . . .                       | 52   |

|       |                               |     |
|-------|-------------------------------|-----|
| 部分 2  | 系统配置和管理                       |     |
| 第 6 章 | 配置和设置 Xcalibur 系统组分           | 57  |
|       | 配置 Xcalibur 软件                | 57  |
|       | 打开 Xcalibur Configuration 对话框 | 57  |
|       | 选择默认文件夹                       | 58  |
|       | 更新客户信息                        | 58  |
|       | 配置字体                          | 60  |
|       | 选择默认峰检测算法                     | 61  |
|       | 选择默认质量数选项                     | 62  |
|       | 选择默认标记和比例选项                   | 63  |
|       | 选择错误处理选项                      | 64  |
|       | 定义数据组列表                       | 64  |
|       | 转换文件格式                        | 66  |
|       | 确认 Finnigan 安全服务器的属性          | 67  |
| 附录 7  | Xcalibur 系统管理参考               | 71  |
|       | 配置 Xcalibur 数据系统              | 71  |
|       | 配置系统                          | 78  |
|       | 配置仪器                          | 87  |
|       | Instrument Setup              | 89  |
|       | Instrument Setup 窗口的 View Bar | 89  |
|       | Instrument Setup 窗口的菜单        | 89  |
|       | Instrument Setup 窗口工具栏        | 91  |
| 附录 A  | 使用 Xcalibur 文件和样品             | 93  |
| 附录 B  | Home Page 参考指南                | 95  |
|       | 视图                            | 96  |
|       | Information 视图                | 97  |
|       | 导航图                           | 98  |
|       | Real Time Plot 视图             | 99  |
|       | 菜单                            | 99  |
|       | File 菜单                       | 100 |
|       | Change 菜单                     | 102 |
|       | View 菜单                       | 103 |
|       | GoTo 菜单                       | 107 |
|       | Edit 菜单                       | 107 |
|       | Actions 菜单                    | 109 |
|       | Tools 菜单                      | 113 |
|       | Help 菜单                       | 114 |
|       | 工具栏                           | 114 |
|       | View Toolbar                  | 115 |
|       | Roadmap Toolbar               | 115 |
|       | Sequence Editor Toolbar       | 117 |
|       | Plot Toolbar                  | 120 |
|       | Xcalibur 对话框                  | 122 |
| 附录 C  | Xcalibur 参考工具                 | 123 |

|                        |     |
|------------------------|-----|
| 命令行自变量 . . . . .       | 123 |
| ExcelExp.exe . . . . . | 126 |
| XConvert.exe . . . . . | 128 |
| 索引 . . . . .           | 131 |



# 前言

该指南包括一系列教程，展示如何利用 Thermo Xcalibur™ 质谱数据系统定量处理一系列原始数据文件。请参阅 *Quantitative Analysis User Guide* (定量分析用户指南)，获取有关数据采集的详细信息。

该指南还包括 Xcalibur 系统配置和其他管理以及参考信息。

使用这些教程处理一系列原始数据文件：

1. 创建一个处理方法
2. 批次处理数据文件
3. 在 Quan Browser 中处理结果文件
4. 预览、指定和打印报告

## 目录

- 相关文档
- 特殊注意事项
- 联系我们

若想要对此文档作出评论，请点击以下链接：在此先对您的帮助表示感谢。



## 相关文档

Thermo Fisher Scientific 为 Xcalibur 数据系统提供以下文档：

- *Xcalibur Getting Started (Quantitative Analysis)* Xcalibur 入门手册（定量分析）
- *Acquisition and Processing User Guide*（采集和处理用户手册）
- *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）
- *Qualitative Analysis User Guide*（定性分析用户手册）
- *Creating and Searching Libraries User Guide*（创建和检索库用户手册）
- *XReport User Guide*（XReport 用户手册）
- 软件中提供“Help”（帮助）

## 特殊注意事项

确保您遵循本指南中发布的事先声明。在方框内出现的特殊注意事项。

特殊注意事项包括下列内容：

**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

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

### ❖ 联系技术支持中心

|      |                                                                                                      |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 电话   | 800-532-4752                                                                                         |
| 传真   | 561-688-8736                                                                                         |
| 电子邮件 | <a href="mailto:us.techsupport.analyze@thermofisher.com">us.techsupport.analyze@thermofisher.com</a> |
| 知识库  | <a href="http://www.thermokb.com">www.thermokb.com</a>                                               |

若要下载更新和配套软件，请访问：[mssupport.thermo.com](http://mssupport.thermo.com)。



## ❖ 联系客户服务中心，获取订购信息

|      |                                                                                                                |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 电话   | 800-532-4752                                                                                                   |
| 传真   | 561-688-8731                                                                                                   |
| 电子邮件 | <a href="mailto:us.customer-support.analyze@thermofisher.com">us.customer-support.analyze@thermofisher.com</a> |
| 网站   | <a href="http://www.thermo.com/ms">www.thermo.com/ms</a>                                                       |

## ❖ 从互联网复制手册

访问 [mssupport.thermo.com](http://mssupport.thermo.com) 网页，点击窗口页面左边的 Customer Manuals（客户手册）。

## ❖ 对文档或“帮助”提出更改建议

- 若需在线填写读者调查问卷，请访问：  
<http://www.surveymonkey.com/s/PQM6P62>。
- 向技术出版编辑发送电子邮件，邮箱地址为 [techpubs-lcms@thermofisher.com](mailto:techpubs-lcms@thermofisher.com)。



# 教程

---



# Xcalibur 综述

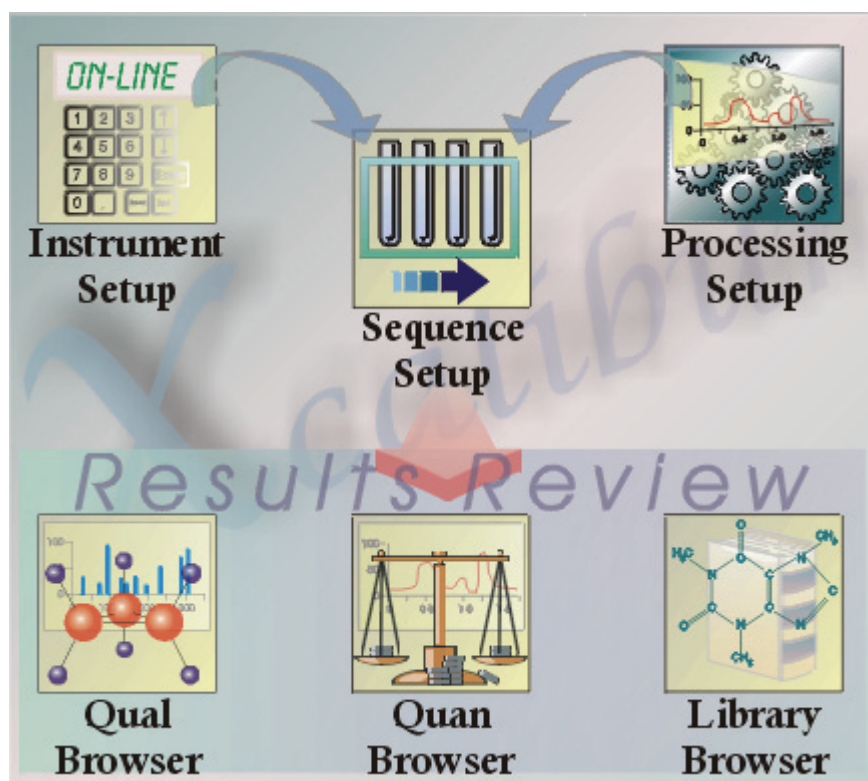
本手册提供教程，指导如何定量处理一系列原始数据文件。查看这些概述 Xcalibur 定量分析过程的图表。

## 目录

- [图 1](#): Xcalibur 应用程序的视图，主页 — 导航图（包括进入采集，处理，数据查看功能的按钮）
- [图 2](#): 采集系列样品（流程图）
- [图 3](#): 处理采集数据（流程图）
- [图 4](#): 利用 Xcalibur 系统和系统软件自动采集和处理（流程图）

图 1 显示打开 Xcalibur 应用程序时的视图。每个按钮引导您进入不同的视图，以执行采集，处理和查看数据功能。

图 1. Xcalibur 导航图



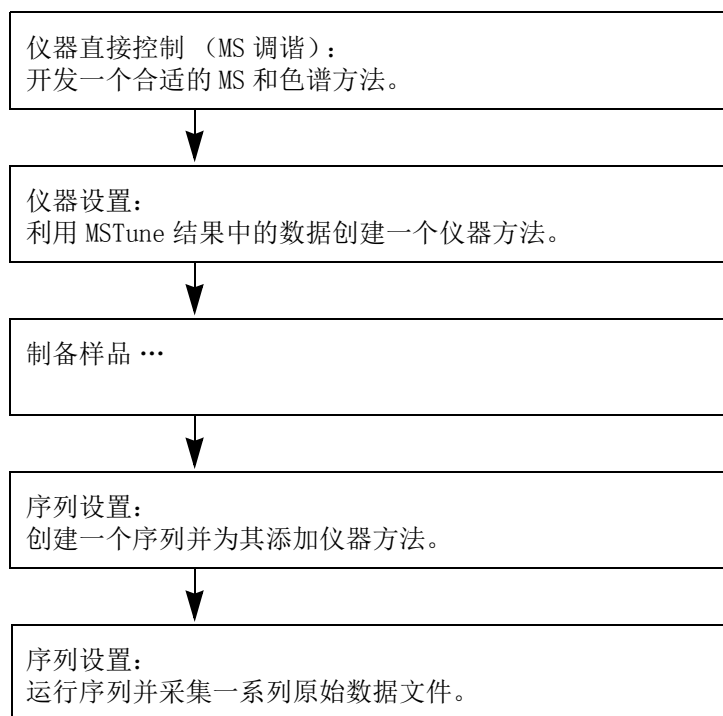
更多有关 Xcalibur 功能的信息，请参阅下列文档，其保存路径为 C:\Xcalibur\system\programs:

| 功能                         | 文档                                                                 | 文件名               |
|----------------------------|--------------------------------------------------------------------|-------------------|
| Instrument Setup<br>(仪器设置) | <i>Acquisition and Processing User Guide</i><br>(采集和处理用户手册)        | XCAL_Pro_Seq. pdf |
| Sequence Setup<br>(序列设置)   |                                                                    |                   |
| Processing Setup<br>(处理设置) |                                                                    |                   |
| Quan Browser<br>(定量浏览器)    | <i>Quantitative Analysis User Guide</i><br>(定量分析用户手册)              | XCAL_Quan_UG      |
| Qual Browser<br>(定性浏览器)    | <i>Qualitative Analysis User Guide</i><br>(定性分析用户手册)               | XCAL_Qual_UG      |
| Library Browser<br>(库浏览器)  | <i>Creating and Searching Libraries User Guide</i><br>(创建和检索库用户手册) | XCAL_Libraries_UG |

图 2 提供一个采集系列样品的流程图。

如果获得样品数据的有关信息不在本手册内，请参阅硬件随附文档和 the *Acquisition and Processing User Guide*（采集处理用户手册）。

图 2. 采集定量数据



一旦您完成数据采集，图 3 将提供处理数据的流程图。

如果使用序列和流程处理数据的有关信息不在本手册内，请参阅 *Acquisition and Processing User Guide*（采集和处理用户手册）。

图 3. 处理已采集的定量数据

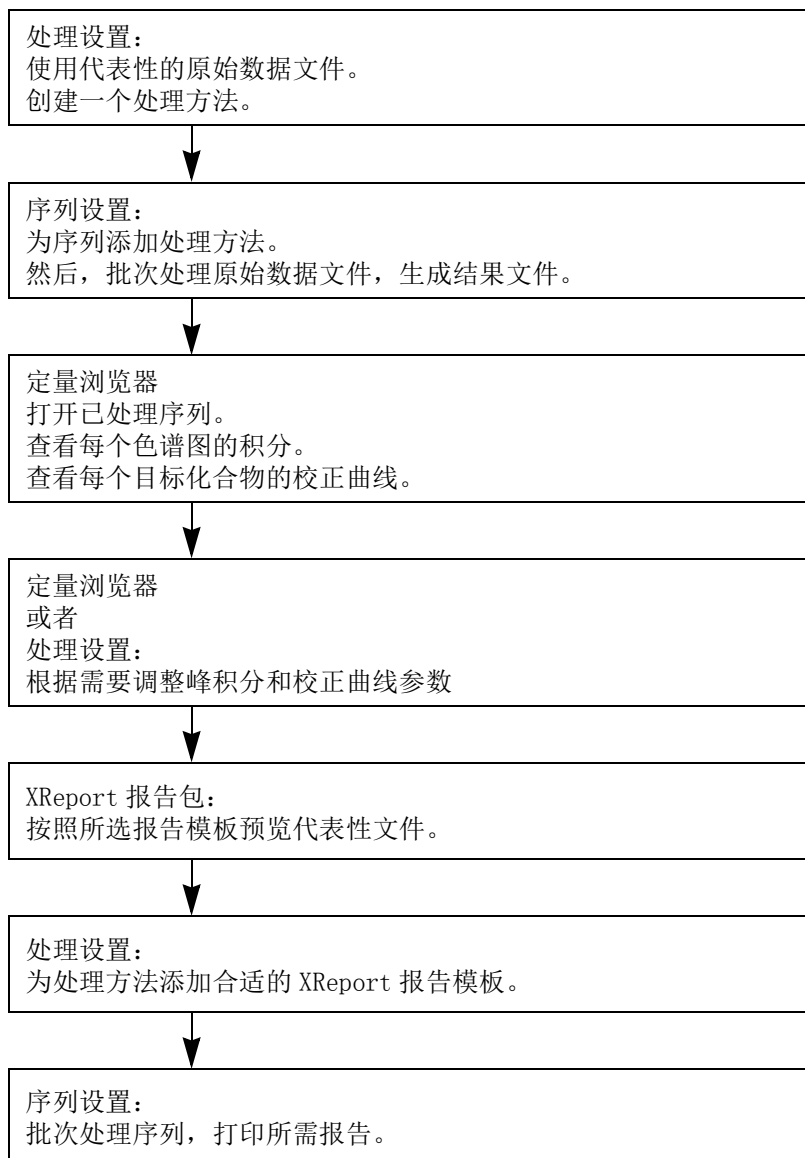
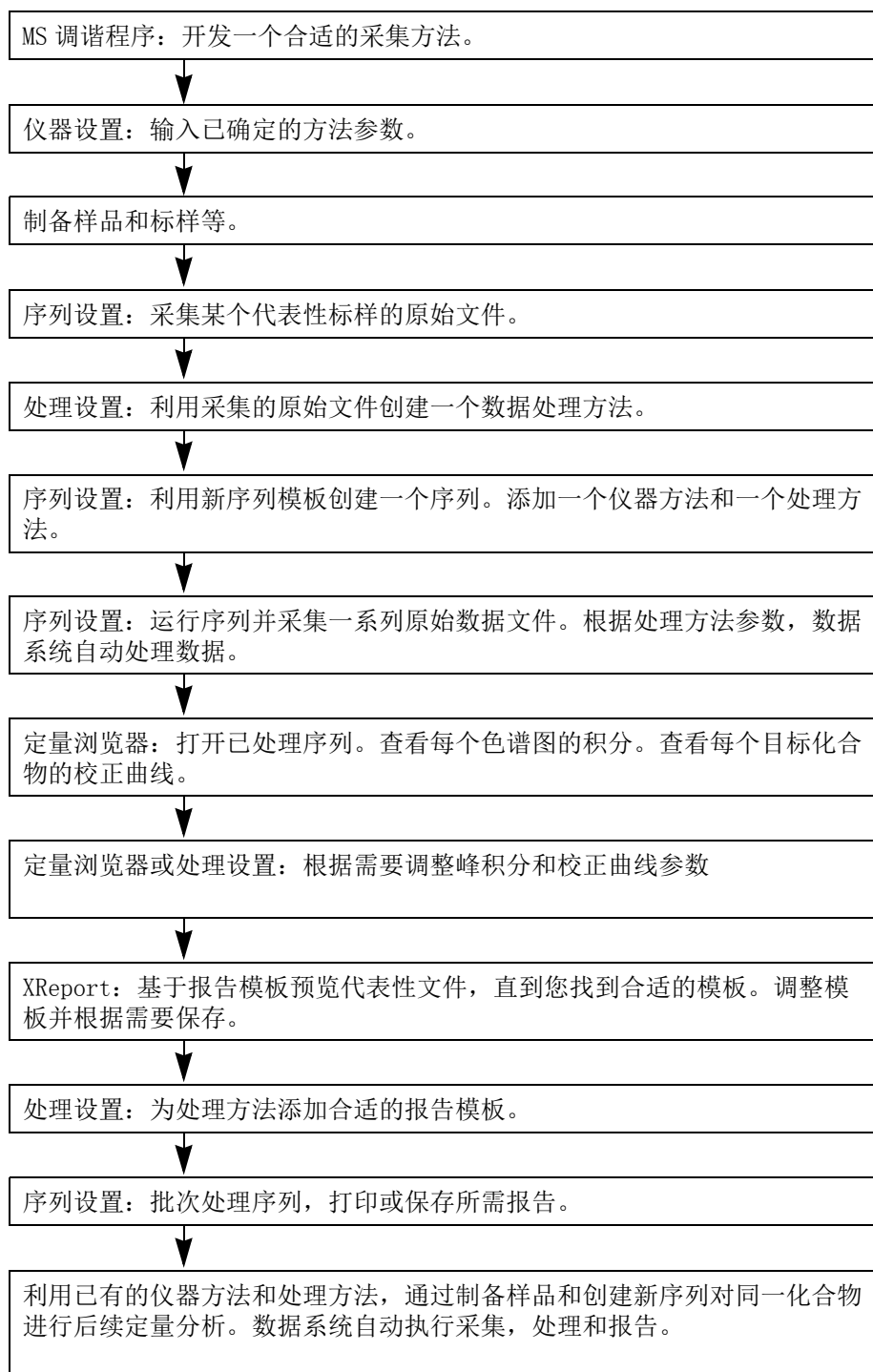




图 4 为一个流程图，说明如何利用 XCalibur 数据系统和与硬件配套的软件自动采集和处理数据。

图 4. 自动采集和处理数据





## 创建一个处理方法

利用下列程序和与 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx.sld 序列文件相关的原始数据文件为定量数据创建一个处理方法。

**注释** 本教程不讨论利用系统适用性参数测试色谱峰的内容。若要将报告模板添加到处理方法中，请参阅第 5 章，“预览、指定和打印报告。”

创建一个处理方法，通过依次执行下列程序定量 drugx 数据组中的目标化合物。

### 目录

- 打开 Processing Setup 窗口
- 指定 Quan 视图选项
- 打开原始数据文件
- 指定分析组分的 Identification 设置
- 输入峰积分和检测参数
- 选择校正设置
- 指定校正和 QC 浓度水平
- 保存处理方法

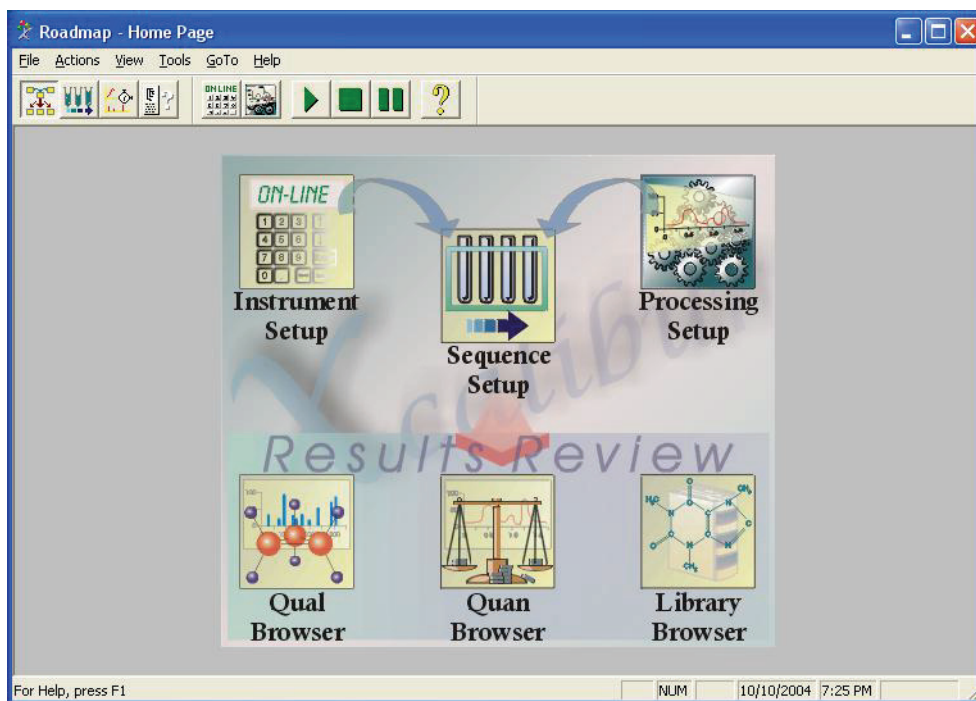
## 打开 Processing Setup 窗口

在 Processing Setup（处理设置）窗口中创建一个过程。

❖ 若要打开 Processing Setup 窗口

1. 单击 Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）上导航图的 （请参阅图 5）或选择 GoTo > Processing Setup。

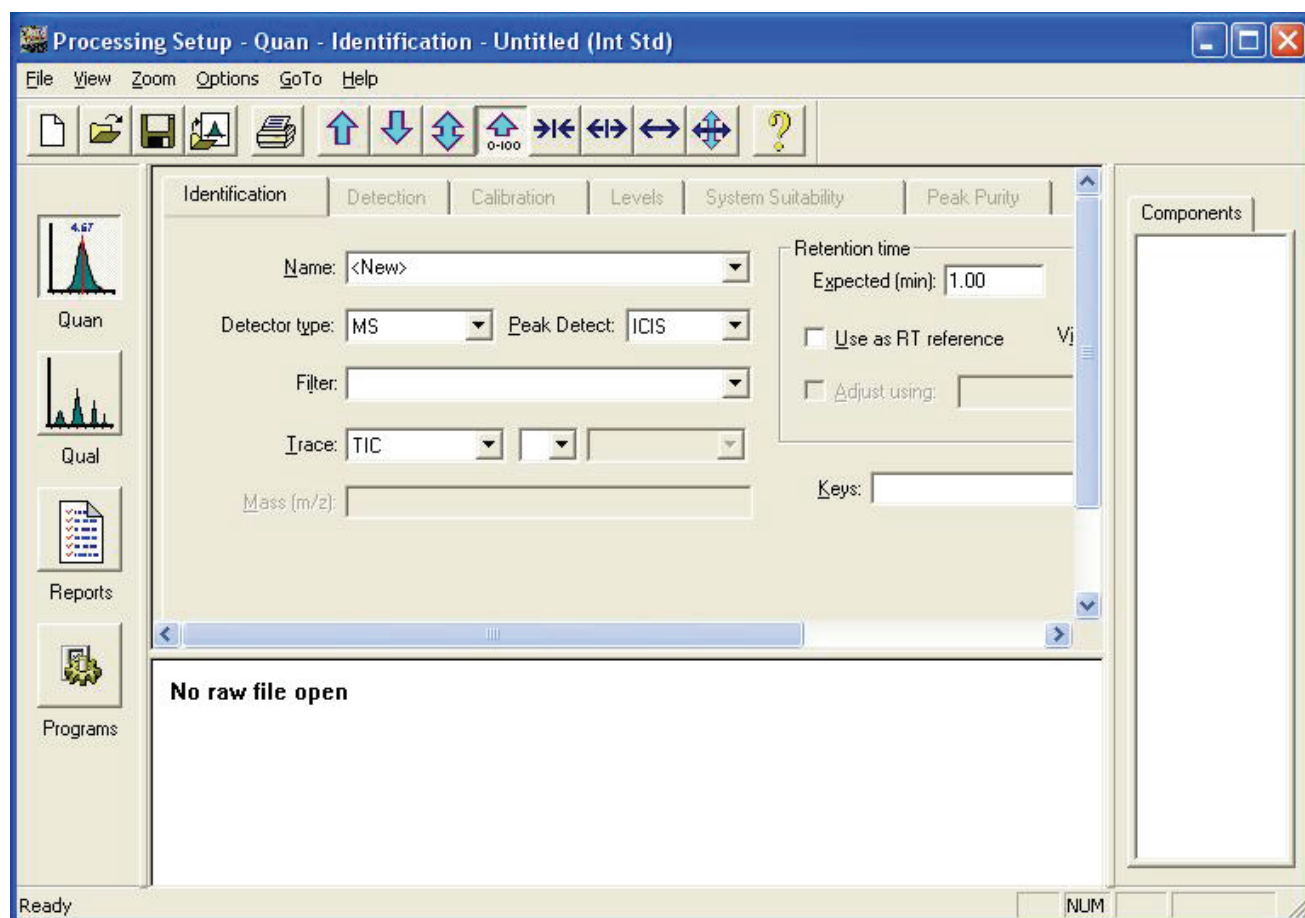
图 5. Xcalibur Home Page 窗口的导航视图



2. 单击  以显示尚未出现的 Quan（定量）视图。

- 单击 **Identification**（识别）选项卡。Quan 视图的 Identification 页面打开（请参阅图 6）。

图 6. Quan 视图的 Identification 页面



- 如果数据系统自动载入某个方法，请选择 **File**（文件）> **New**（新建）启动一个新的显示界面。

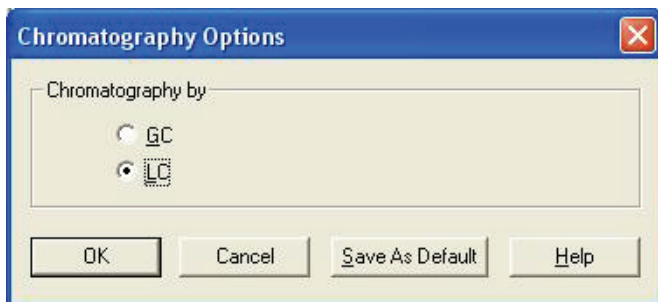
## 指定 Quan 视图选项

Processing Setup（处理设置）窗口中的这个选项菜单命令会随当前视图发生变化。在 Processing Setup 的 Quan（定量）视图中指定色谱仪和校正技术的类型。LC/MS 采集教程中所用的数据组，采用内标法定量 drugx 目标化合物。

### ❖ 若要指定色谱类型为 LC

1. 在 Processing Setup 窗口中选择 **Options（选项）> Chromatography By（色谱类型）**。Chromatography Options（色谱选项）对话框打开（请参阅图 7）。

图 7. 色谱选项对话框

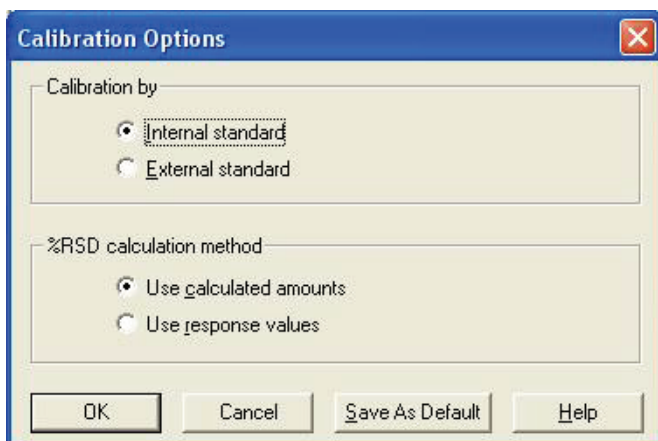


2. 若要指定色谱为 LC，请选择 LC 选项。
3. 单击 **OK（确定）** 关闭对话框。

### ❖ 若要指定内标校正技术

1. 在 Processing Setup 窗口中选择 **Options（选项）> Calibration Options（校正选项）**。Calibration Options 对话框打开（请参阅图 8）。

图 8. Calibration Options 对话框



2. 若要指定内标校正，请选择 **Internal Standard（内标）** 选项。
3. 单击 **OK** 关闭对话框。

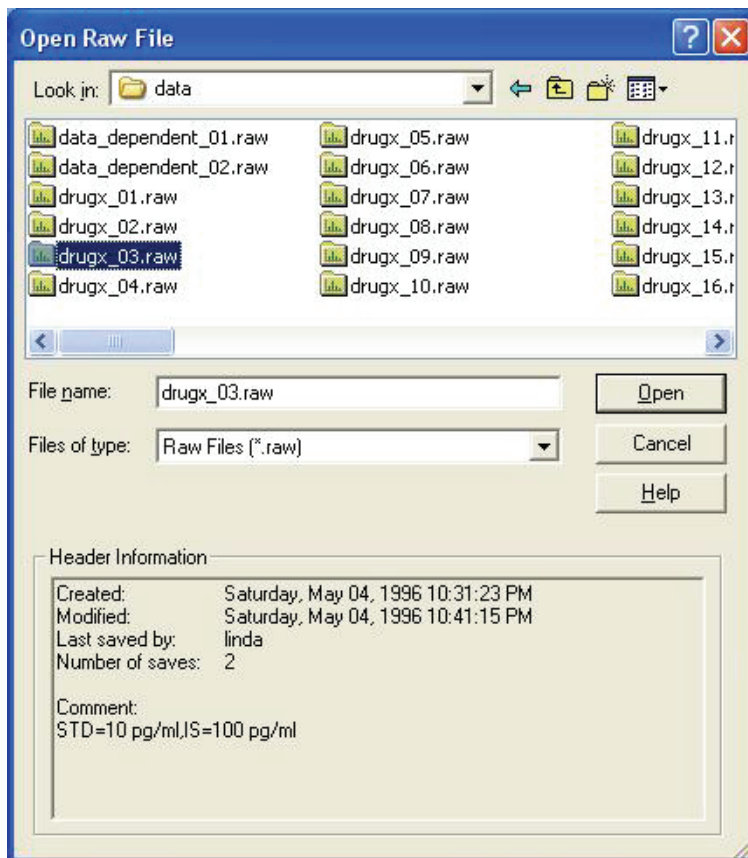
## 打开原始数据文件

从数据组打开一个代表性原始文件，为处理方法确定合适的峰检测和积分参数。在本教程中请使用 drugx\_03.raw 文件。总之，选择与低浓度校正标样对应的原始文件。

❖ 若要在 Quan 视图中打开一个原始数据文件。

1. 单击  或选择 File (文件) > Open Raw File (打开原始文件)。Open Raw File 对话框打开 (请参阅图 9)。

图 9. Open Raw File 对话框



2. 浏览至下列文件名称和位置:

C:\Xcalibur\examples\data\drugx\_03.raw.

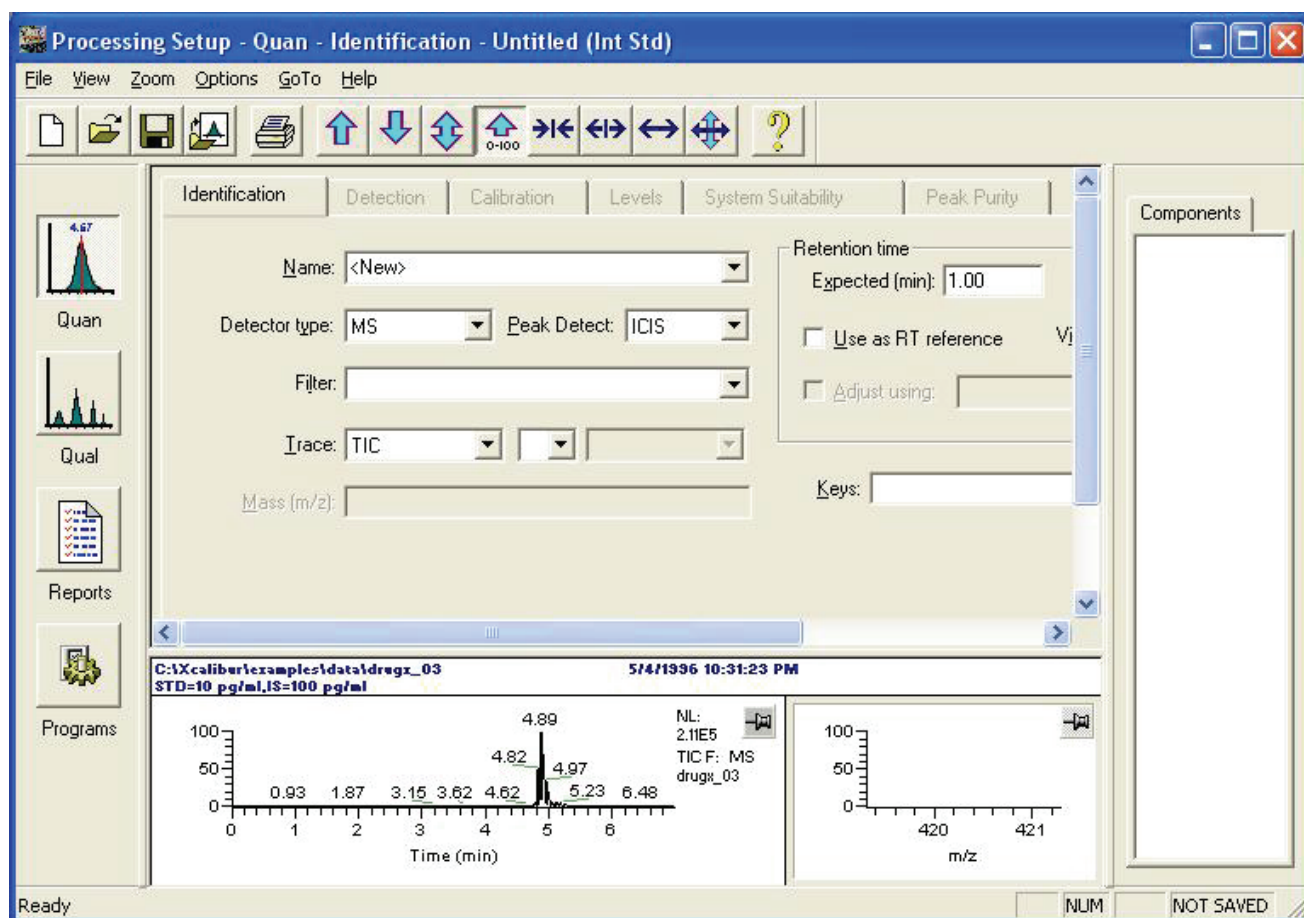
3. 选择 drugx\_03.raw, 然后单击 Open (打开)。

Processing Setup (处理设置) 打开 drugx\_03.raw 文件并显示未过滤的总离子色谱图 (请参阅图 10)。

## 2 创建一个处理方法

打开原始数据文件

图 10. Identification（识别）页面，显示 drugx\_03.raw 的总离子流色谱图（TIC）



**注释** 如果在原始文件打开时保存处理方法，原始文件名会被保存在处理方法中。无论何时打开处理方法，若要 Xcalibur 数据系统自动打开相关的原始文件，请在 Settings（设置）对话框的 Auto-Open Raw File（自动打开原始文件）选项中选择 On（打开）按钮。若要在 Processing Setup 的 Quan（定量）视图中打开这个对话框，请打开一个处理方法并选择 Options（选项）> Settings（设置）。



## 指定分析组分的 Identification 设置

该部分描述如何识别目标化合物和内标物，包括下列主题：

- 指定内标物的 Identification 设置

对于内标校正技术，每个校正标样包括一个或多个目标化合物，以及一个或多个内标物。

- 指定目标化合物的 Identification 设置

在本部分中，利用 Processing Setup（处理设置）的 Quan（定量）视图的 Identification（识别）页面命名样品组分、显示谱图和指定保留时间以及峰识别标准。

该教程所用的数据组包括一个目标化合物和一个内标物。目标化合物是 drugx。内标物是 D4。

## 指定内标物的 Identification 设置

Processing Setup（处理设置）需要组分识别信息将内标物与色谱峰关联起来。若要识别内标物，请依次执行下列程序。

1. 命名内标物
2. 选择 Detector Type
3. 选择峰检测类型
4. 为组分匹配扫描过滤器
5. 选择 Trace 类型
6. 自动输入保留时间

## 2 创建一个处理方法

指定分析组分的 Identification 设置

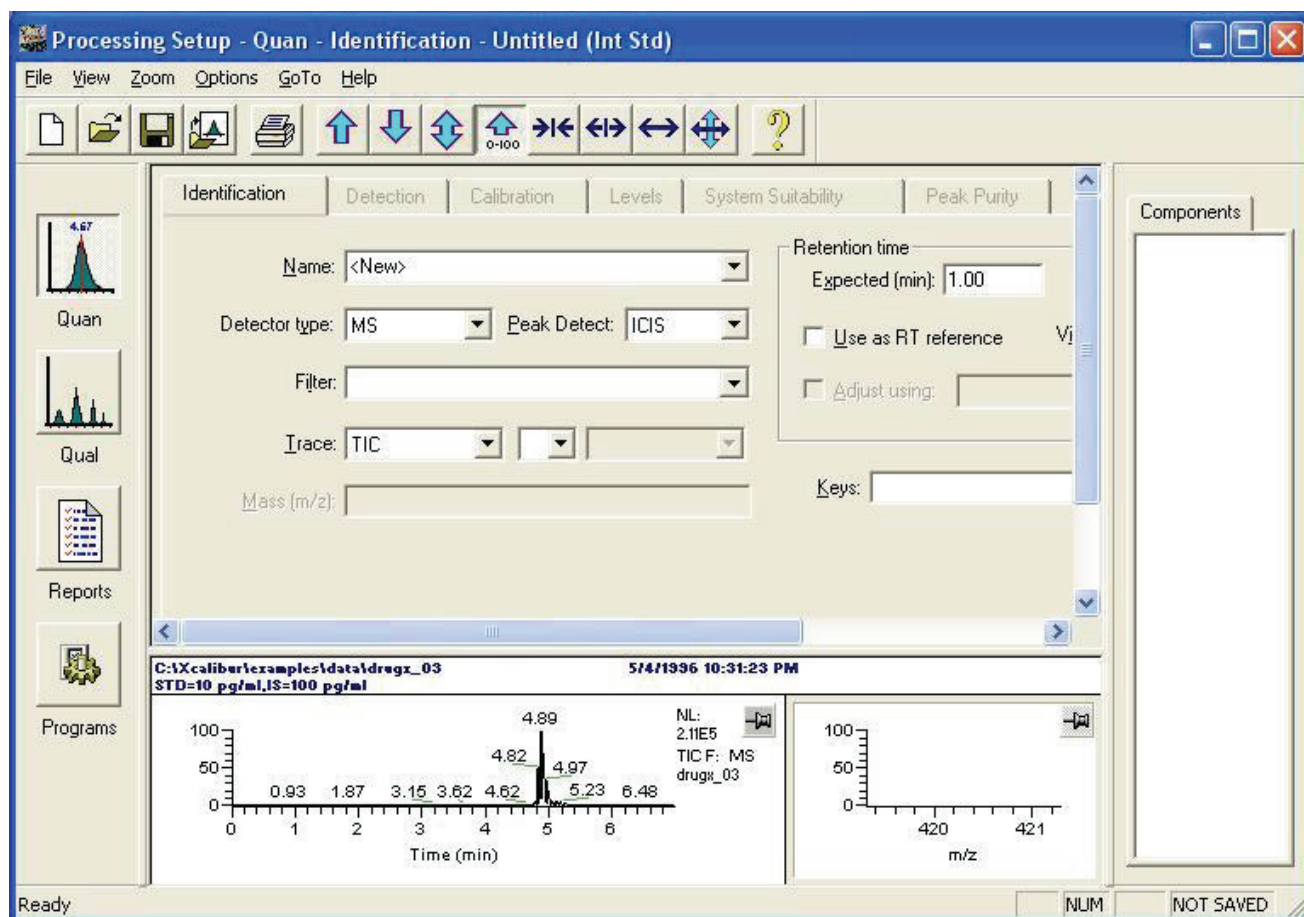
### 命名内标物

利用 Identification 页面的 Name（名称）列表命名样品组分。当更改设置时，Processing Setup 只改变命名组分的设置。

#### ❖ 若要在 Name 列表中输入内标物名称

1. 在 Name 列表中选择 **New**（新）并输入内标物名称 **D4**（请参阅图 11）。

图 11. Identification 页面



2. 点击 **OK**（确定）保存新名称。

**注释** 若要删除某个组分，在右侧的 Component（组分）列表中高亮显示该组分名。然后选择 **Options（选项） > Delete component name（删除组分名）**。

## 选择 Detector Type

利用 Identification 页面的 Detector Type（检测器类型）列表指定获取原始文件的检测器类型。

### ❖ 若要指定检测器类型

在 Detector Type 列表中选择 **MS**（质谱仪）。

## 选择峰检测类型

利用 Identification 页面的 Peak Detect（峰检测）列表指定用于分析原始数据的峰检测算法类型（ICIS、Genesis 或 Avalon）。

这些算法将执行下列操作：

- 执行平滑
- 利用扫描或质量数过滤器构造色谱图
- 分配峰数目
- 生成峰列表
- 确定峰的起点和终点。

所有算法提供组分峰检测和色谱峰检测。为 MS 数据选择 ICIS 或 Genesis 算法。为 PDA、UV 和模拟数据选择 Avalon 算法。

### ❖ 若要指定峰检测类型

在 Peak Detect（峰检测）列表中选择 **ICIS**。

## 为组分匹配扫描过滤器

Xcalibur 数据系统创建独特的扫描过滤器，根据仪器方法中指定的实验类型采集数据。当载入一个原始文件时，数据系统列出与 Filter（过滤器）框内原始文件相关的扫描过滤器。在本例中，应用程序利用交替的子离子扫描（drugx 和 D4）采集下列物质的选择反应监测（SRM）数据：

- 分子量为 465u 的专利药物（母离子  $m/z$  465；子离子  $m/z$  420）
- 分子量为 469u 的氘化内标物（母离子  $m/z$  469；子离子  $m/z$  424）

若要校正和定量 drugx，需过滤总离子流色谱图。

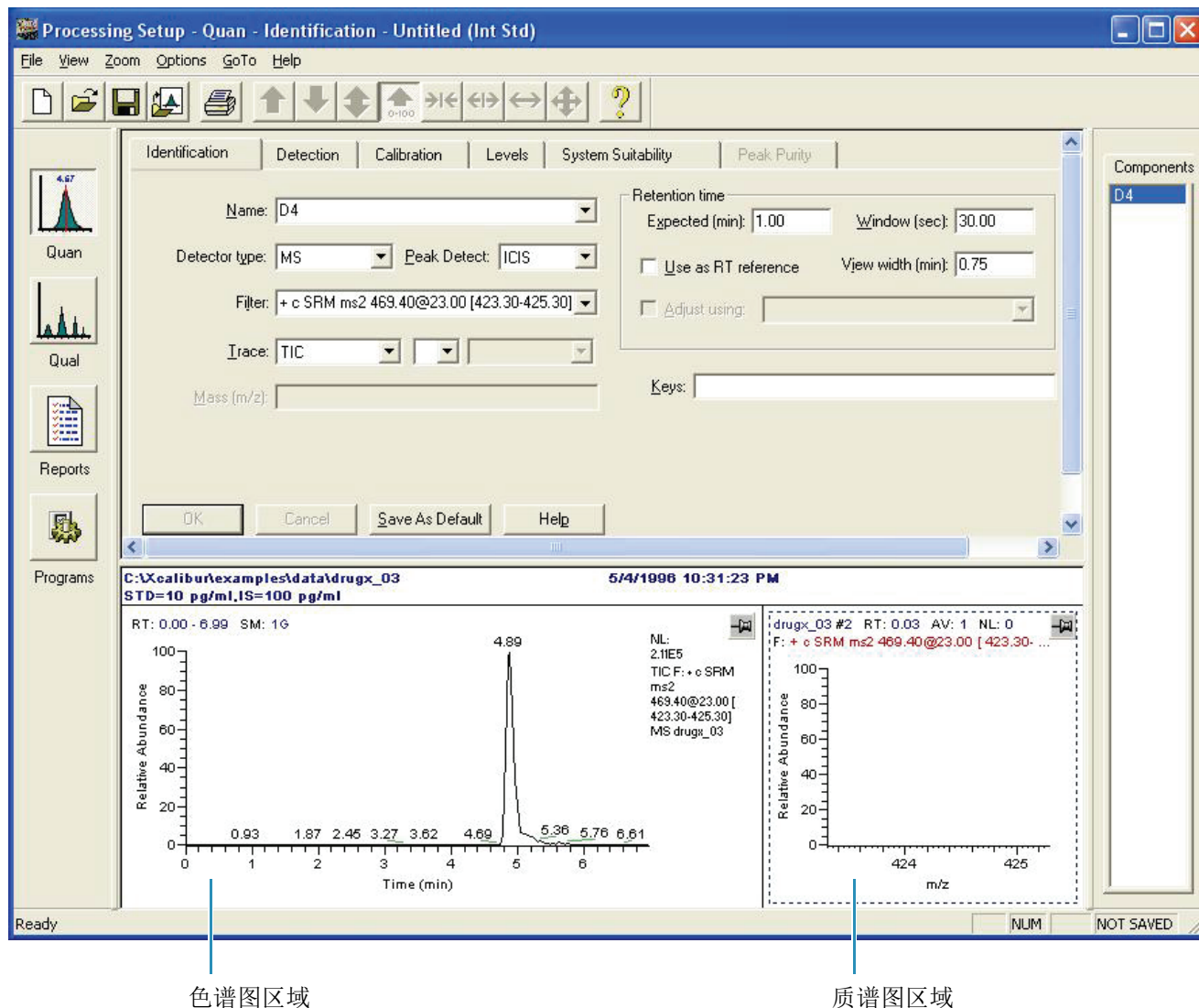
## 2 创建一个处理方法

指定分析组分的 Identification 设置

### ❖ 若要匹配 D4 及其扫描过滤器

1. 从 drugx\_03.raw 文件的 Filter 列表选择  
+ c SRM ms2 469.40@23.00[423.30-425.30] 作为 D4 的扫描过滤器。
2. 单击 OK（确定），显示 D4 的质谱图（请参阅图 12）。

图 12. D4 的扫描过滤色谱图和质谱图



### 选择 Trace 类型

利用 Quan 视图的 Identification 页面的 Trace（离子流图）列表指定用于处理的色谱图类型。

### ❖ 若要指定色谱图类型

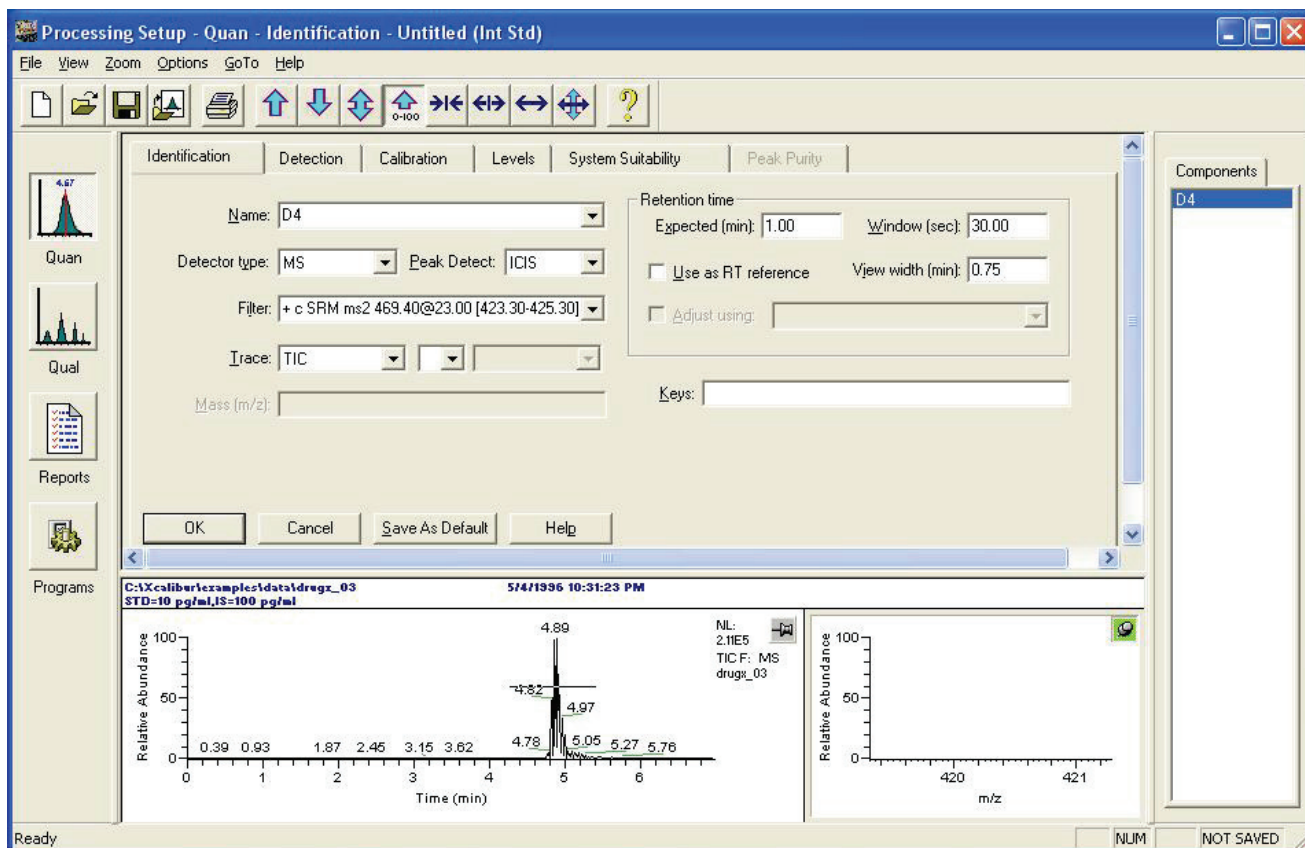
在 Trace 列表中选择 TIC 指定总离子流图。

## 自动输入保留时间

### ❖ 若要自动输入色谱峰的保留时间

- 若要激活质谱区域视图，点击右上角的 （请参阅图 12）。  
固定图标的背景变为绿色 ，且看上去像被固定在屏幕上。
- 在色谱图区域单击并拖曳光标横穿色谱峰，如图 13 所示。穿过峰中心的水平线显示了鼠标运动所选中的区域。

图 13. 选择对应最高峰的扫描



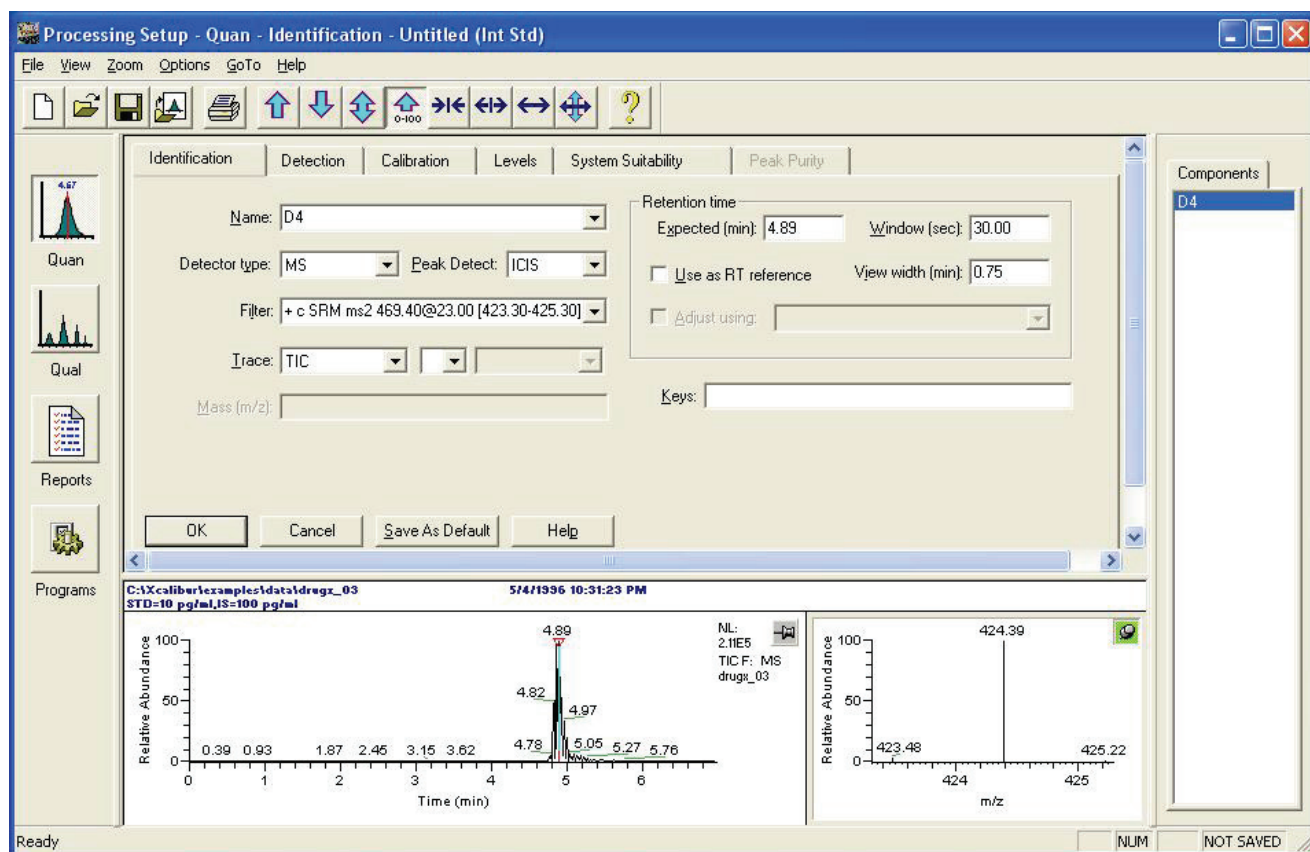
- 施放鼠标按键。Processing Setup 自动执行下列事件。

- 选择最高峰的保留时间，在色谱图区域中用红色标记高亮显示 LC 峰内选中的扫描。
- 将选中扫描对应的保留时间输入到 Retention Time（保留时间）区域的 Expected（预期保留时间）框内。
- 在质谱图区域显示子离子的质谱图（请参阅图 14）。

## 2 创建一个处理方法

指定分析组分的 Identification 设置

图 14. 带有保留时间标记的 Identification 页面（垂直线）



4. 若要将 D4 的实际保留时间用作 drugx 色谱图中其他组分的参考值，请选择 **Use as RT Reference**（用作 RT 参考）复选框。

**注释** 若要调整某个组分相对参考组分的预期保留时间，请选择 **Adjust Using**（调整使用）复选框。请参阅 12，第 20 页。

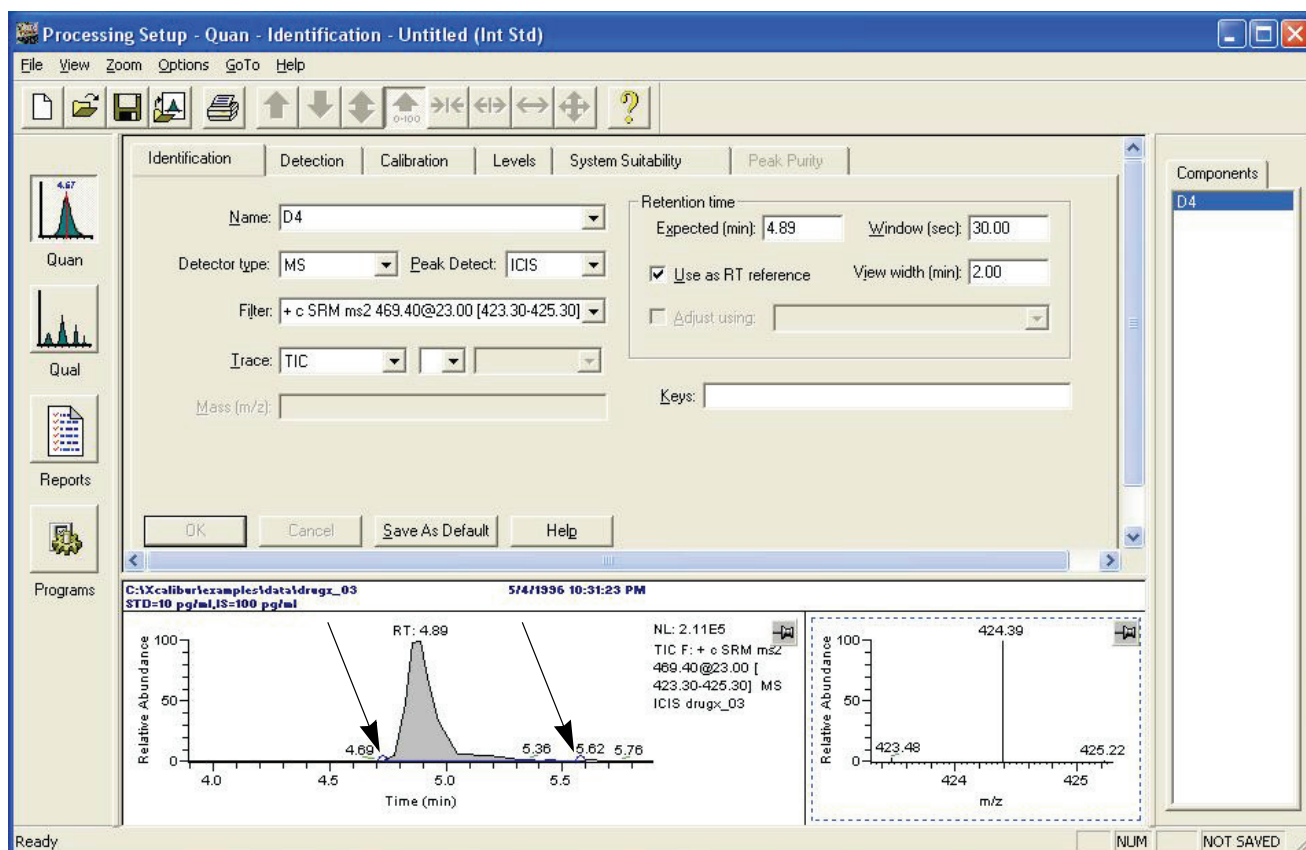
使 Window（窗口）框数字保留为 30 sec。这个参数控制算法检索的窗口宽度，以便定位组分。在本例中，算法在 RT4.89 左右两侧分别检索了 15 秒长的窗口找到 D4。

5. 在 View Width（查看宽度）框内输入 2.00。当查看组分时，View Width 控制应用程序显示的色谱图时间范围。
6. 若要保存 D4 的组分识别信息，请单击 **OK**。

在色谱图视图中，根据 4.9 的预期保留时间值和 2.00 的查看宽度值，系统显示 3.9–5.9 分钟时间段的色谱图。Processing Setup 自动将峰积分部分显示为灰色阴影，在峰积分的起点和终点处显示蓝色积分标记。连接积分标记的蓝线表示基线（请参阅图 15）。箭头指向积分标记：



图 15. 峰积分（灰色）和积分标记的区域



7. 检查积分峰并验证下列事项：

- 峰保留时间符合 Retention Time 区域 Expected 框内的值。
- Filter 框内的扫描过滤器与 Components 列表中正确的组分相匹配。

如果峰没有得到识别，请重复该程序。单击色谱图区域的 （色谱图右侧窗格），然后执行步骤 2，第 17 页。

如果峰没有得到正确识别，必须指定目标化合物的峰识别参数。

**提示** 当输入具有相似峰积分参数的多个组分时，请为其中一个组分输入所有的识别参数。单击 **Save As Default**（另存为默认值）。这些参数就会成为新组分的默认值。

## 指定目标化合物的 Identification 设置

### ❖ 若要指定目标化合物的设置

1. 在 Name（名称）列表中选择 **New（新建）**。如果启用了警告功能，Apply Changes（应用更改）对话框打开。单击 **Yes（是）**，应用更改。
2. 若要指定目标化合物的名称，请输入 **drugx**。
3. 单击 **OK（确定）** 保存新名称。
4. 如果尚未选择 Detector Type（检测器类型），请选择 **MS**。
5. 在 Peak Detect（峰检测）列表框中选择 **ICIS**。

## 2 创建一个处理方法

指定分析组分的 Identification 设置

6. 若要使目标化合物匹配其扫描过滤器，打开 Filter（过滤器）列表显示 drugx\_03.raw 文件中可用的扫描过滤器。
7. 选择 + c SRM ms2 465.30@23.00[419.30-421.30] 作为 drugx 的扫描过滤器。
8. 单击 **OK**，将扫描过滤器应用到总离子流图。Processing Setup 自动显示与目标化合物对应的色谱图。
9. 如果尚未选择，请在 Trace（离子流图）列表中选择 **TIC**（总离子流图）。
10. 若要显示当前组分的质谱图，并自动输入 LC 峰的保留时间，请执行下列事项：
  - a. 若要激活质谱图区域，请单击其右上角的灰色固定图标。  
固定图标的背景变为绿色 ()，且看上去像被固定在屏幕上。
  - b. 在色谱图区域单击并拖曳光标横穿色谱峰。
  - c. 释放鼠标按键。

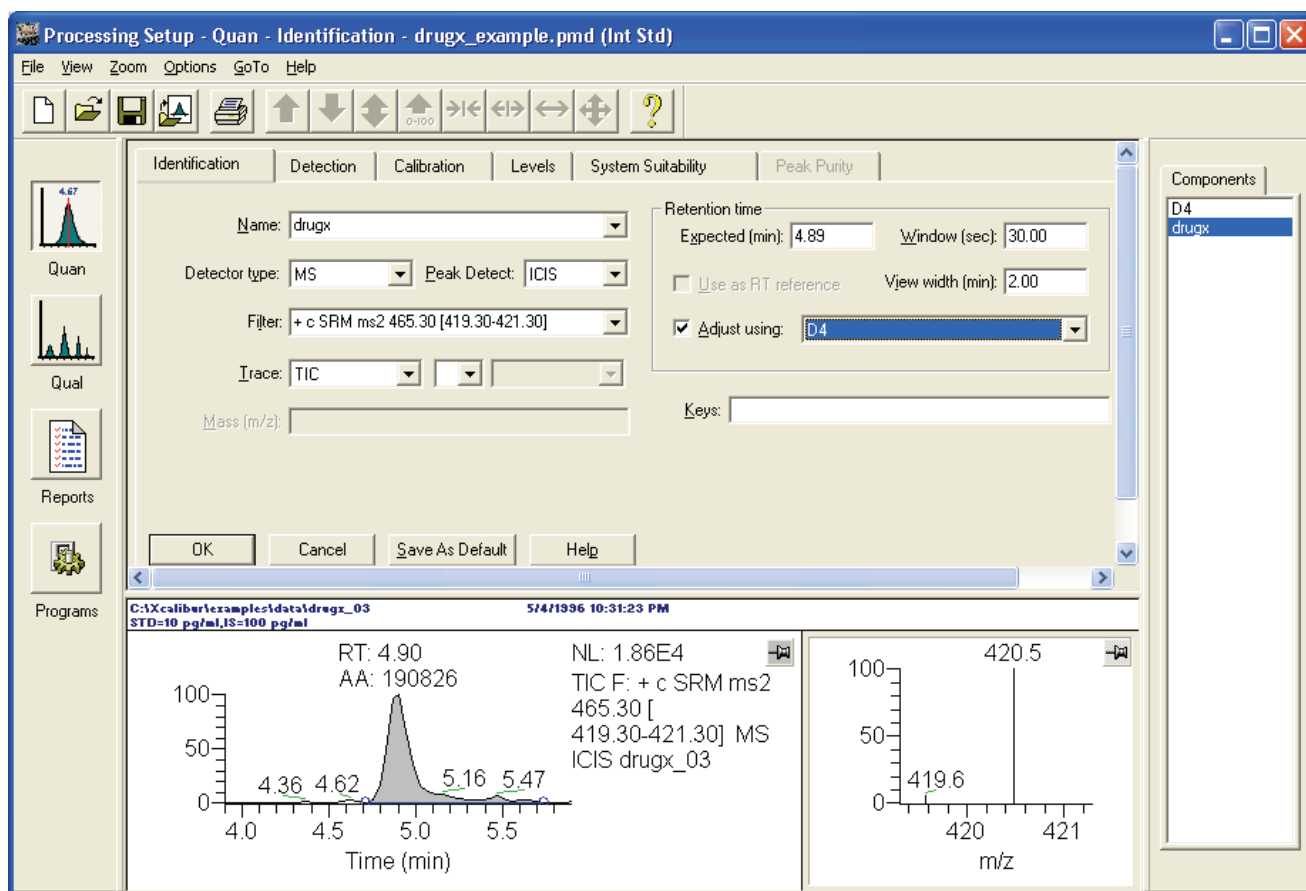
Processing Setup 自动执行下列事件：

- 选择最高峰的保留时间，在色谱图区域中用红色标记高亮显示 LC 峰内选中的扫描。
  - 将选中扫描对应的保留时间输入到 Retention Time（保留时间）区域的 Expected（预期保留时间）框内。
11. 在 View Width 框内输入 2.00。
  12. 若要通过改变 D4 的实际保留时间来调整 drugx 的预期保留时间，请执行下列事项：
    - a. 选择 **Adjust Using**（调整使用）复选框。  
Adjusting Using 列表被激活。
    - b. 在 Adjust Using 列表中选择 **D4**。  
在步骤 4，第 18 页中选择 D4 作为保留时间参考组分。
  13. 使 Window（窗口）框内的数字保留为 30 sec。
  14. 若要接受 drugx 的峰识别设置，单击 **OK**（请参阅图 16）。

在色谱图区域中，根据 4.9 的预期保留时间值和 2.00 的查看宽度值，Processing Setup 显示 3.9–5.9 分钟时间段的色谱图。Processing Setup 自动将峰积分部分显示为灰色阴影，并在峰积分的起点和终点显示蓝色积分标记。连接积分标记的蓝线表示基线。



图 16. drugx 的峰识别设置



## 输入峰积分和检测参数

利用 Processing Setup（处理设置）的 Quan（定量）视图的 Detection（检测）页面输入峰检测和积分参数。

若要输入峰积分和检测参数，请依次执行这些程序。

1. 输入峰积分参数
2. 输入峰检测参数

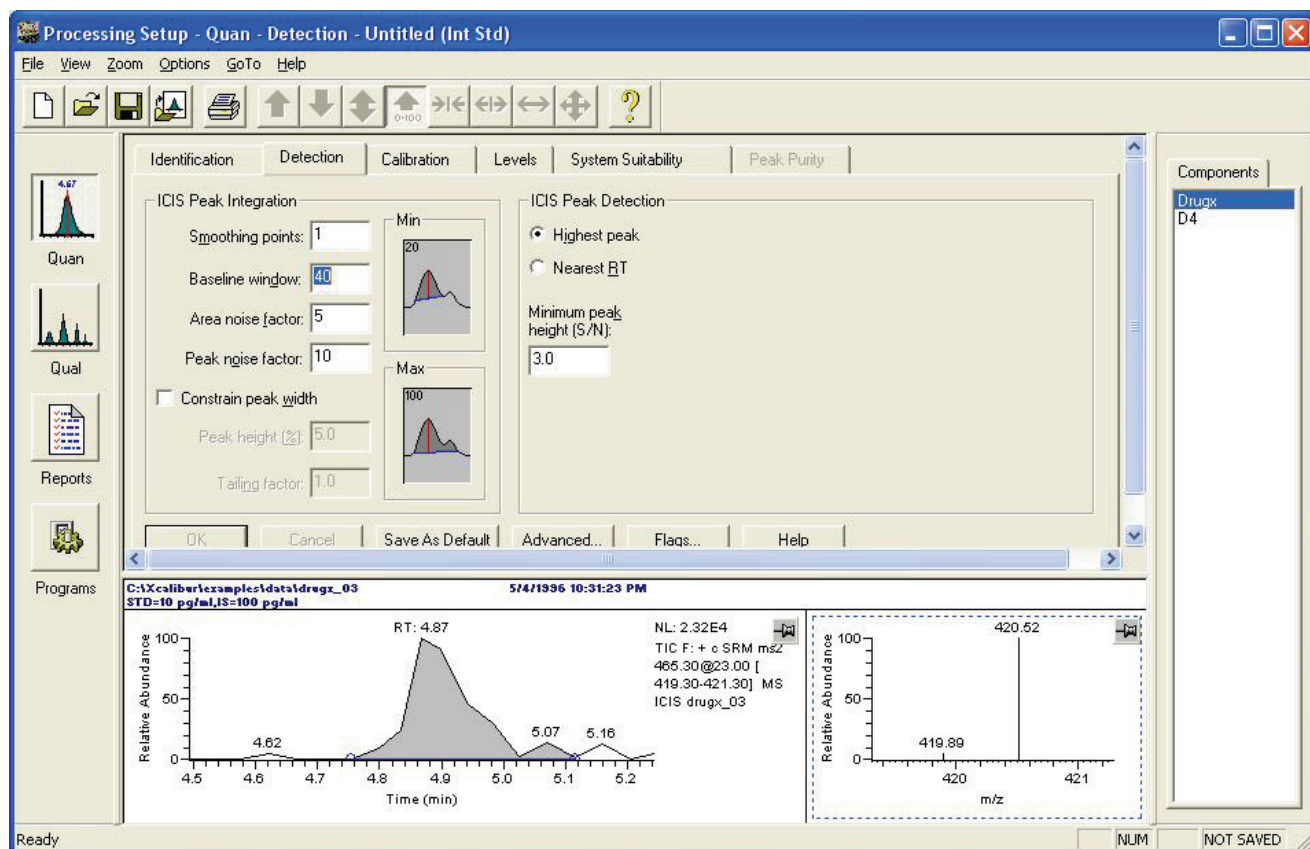
## 输入峰积分参数

输入峰积分参数，说明数据系统如何确定色谱图中每个峰的面积。Processing Setup 在 Detection 页面的 Peak Integration（峰积分）区域中提供峰积分参数选项。

### ❖ 若要输入内标物和目标化合物的 ICIS 峰积分参数

1. 单击 **Detection** 选项卡（图 17）。Quan 视图的 Detection 页面打开。

图 17. Quan 视图的 Detection 页面



2. 若要在 Components（组分）列表中选择 D4 内标物，请选择 **D4**。
3. 在 ICIS Peak Integration 区域的 Smoothing Points（平滑点）框中输入 5。  
请根据峰视图，在 Smoothing Points 框内输入用于平滑数据的平滑点数目。有效范围为 1（无平滑）至 15（最大平滑）。
4. 若要将应用程序检查局部最小值的最大扫描数设置为 40，请在 Baseline Window（基线窗口）框内输入 **40**。有效范围为 1 至 500。
5. 若要将面积噪音因子指定为 5，请在 Area Noise Factor 框内输入 **5**。面积噪音因子是一个噪音水平乘数，用于在定位峰位后确定峰缘位置。有效范围为 1 至 500。
6. 在 Peak Noise Factor（峰噪音因子）内输入 **10**。峰噪音因子是用于确定潜在峰的信号阈值的噪音水平乘数。有效范围为 1 至 1000。

7. 选择 **Constrain Peak Width**（限制峰宽）复选框。

通过指定峰高阈值和拖尾因子，利用限制峰宽选项控制峰积分范围。选择 **Constrain Peak Width** 复选框将其激活。Peak Width 阈值的有效范围是 0.0 至 100.0%。Tailing Factor 的有效范围为 0.5 至 9.0。

若要保存峰积分参数，请单击 **OK**（确定）。

8. 若要选择目标化合物，请在 Components（组分）列表中单击 **drugx**。为目标化合物重复步骤 2-7。

## 输入峰检测参数

峰检测参数指定 Xcalibur 数据系统如何在某个组分的指定保留时间窗口内选择一个峰。

### ❖ 若要输入内标物和目标化合物的峰检测参数

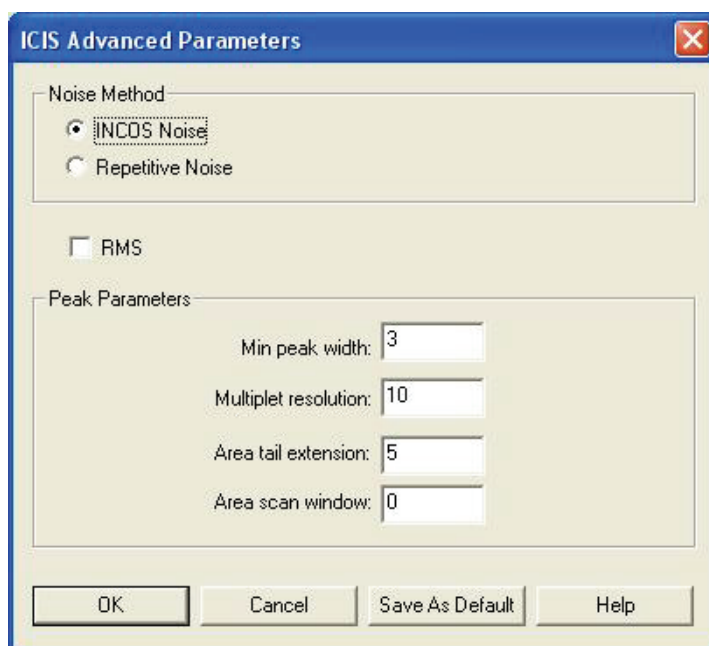
1. 若要选择 D4 作为内标物，请在 Components 列表中单击 **D4**。
2. 若要将 D4 和色谱图中的最高峰联系起来，请选择 ICIS Peak Detection（ICIS 峰检测）区域的 **Highest Peak**（最高峰）选项（请参阅图 19，第 24 页）。
3. 若要使数据系统忽略所有信噪比小于 3 的峰，请在 Minimum Peak Height (S/N)（最小峰高，信噪比）中输入 3。有效范围为 0.0（所有峰）至 999.0。
4. 确认高级峰检测参数被设置为默认值。

- a. 单击 **Advanced...**。ICIS Advanced Parameters（ICIS 高级参数）对话框打开。

利用 ICIS AdvancedParameters 对话框指定高级组分检测标准。如果常规检测标准无法提供预期结果，则可以使用这些额外标准。请参阅 Acquisition and Processing User Guide（采集和处理用户指南），获取有关 ICIS Advanced Parameters 对话框内的参数信息。

- b. 检查 ICIS Advanced Parameters 对话框。确保与图 18 中的设置相同。

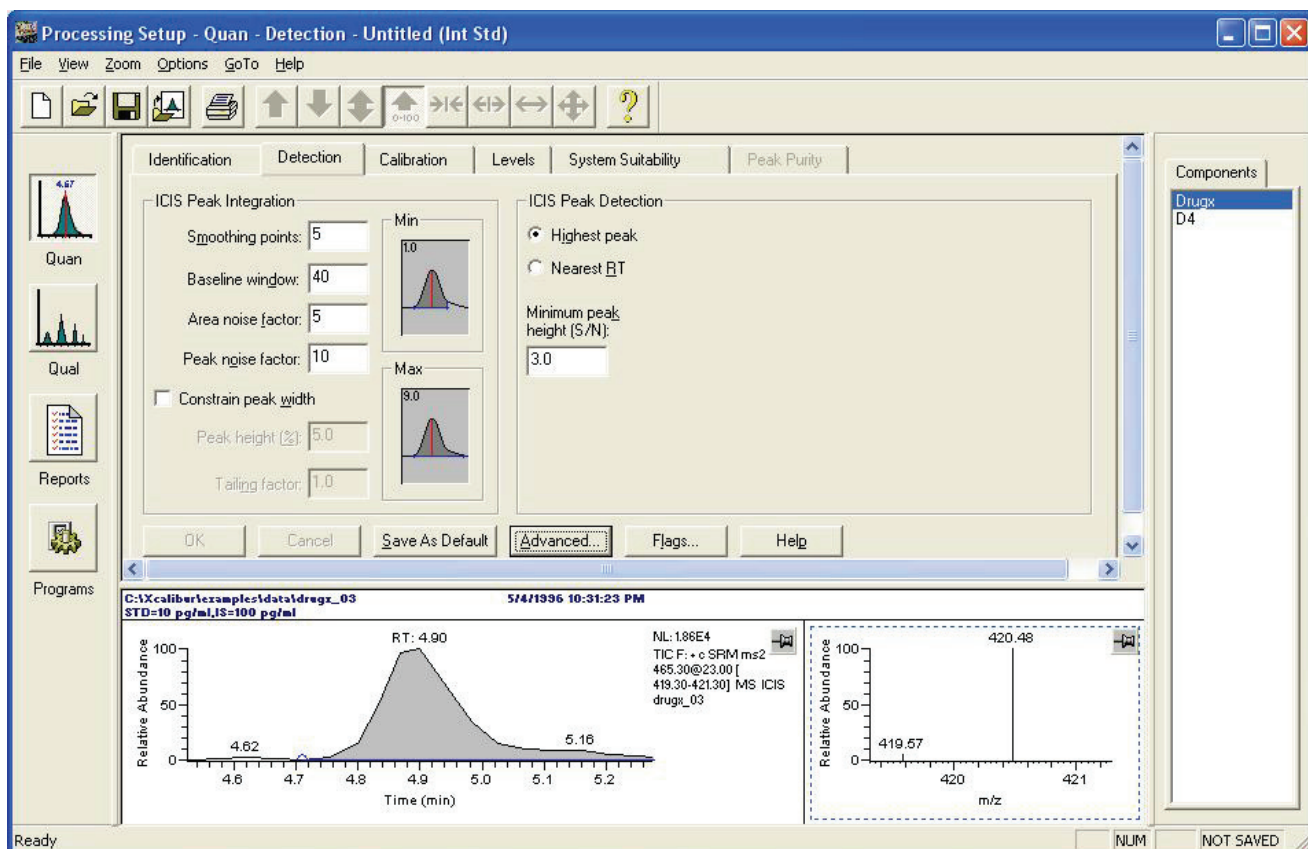
图 18. ICIS Advanced Parameters 对话框，显示默认设置



- c. 单击 **OK**（确定），关闭对话框。
5. 若要保存峰积分参数，请单击 **OK**。
6. 若要选择目标化合物，请在 Components 列表中单击 **drugx**。为目标化合物重复步骤 2-5。

当前 Detection（检测）页面应该如图 19 所示。

图 19. Detection 页面，显示 drugx 和 D4 的设置



## 选择校正设置

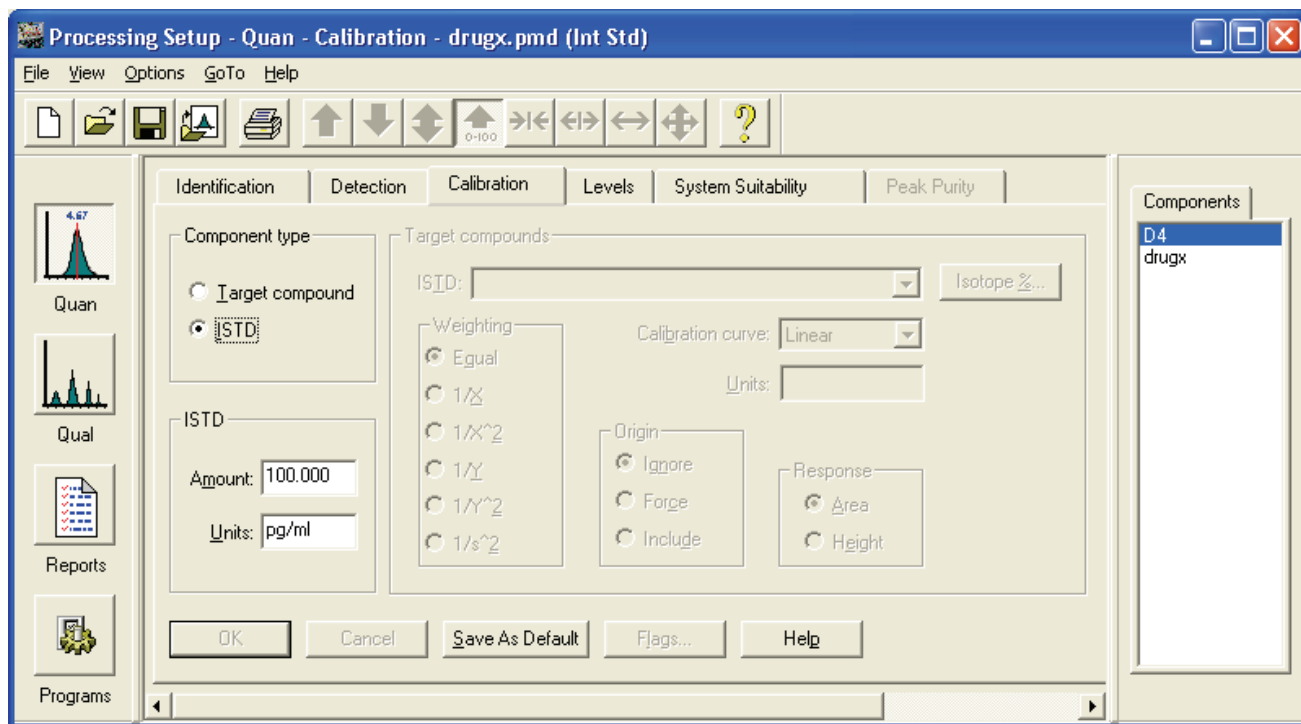
在 Processing Setup（处理设置）中利用 Quan（定量）视图的 Calibration（校正）页面指定校正曲线类型。当使用内标校正技术时，利用该页将内标物与目标化合物关联起来，并指定校正标样和未知样中加入的内标量。

### ❖ 若要选择校正设置

1. 单击 **Calibration** 选项卡 Quan 视图的 Calibration 页面打开。
2. 若要输入 D4 内标物的校正设置，请在 Components（组分）列表中单击 **D4**。
3. 若要将 D4 选作内标物，请在 Component Type（组分类型）区域中选择 **ISTD** 选项。
4. 若要指定内标量为 100 pg/mL，请在 ISTD（内标）区域的 Amount（量）框中输入 100。
5. 若要指定浓度单位为 pg/mL，请在 Units（单位）框中输入 **pg/mL**。

6. 若要保存 D4 的设置，请单击 **OK**（确定）。Calibration 页面应该如图 20 所示。本部分不讨论 System Suitability（系统适应性）或 Peak Purity（峰纯度）页面的设置参数。更多有关设置参数的信息，请参阅 *Acquisition and Processing User Guide*（采集和处理用户指南）。

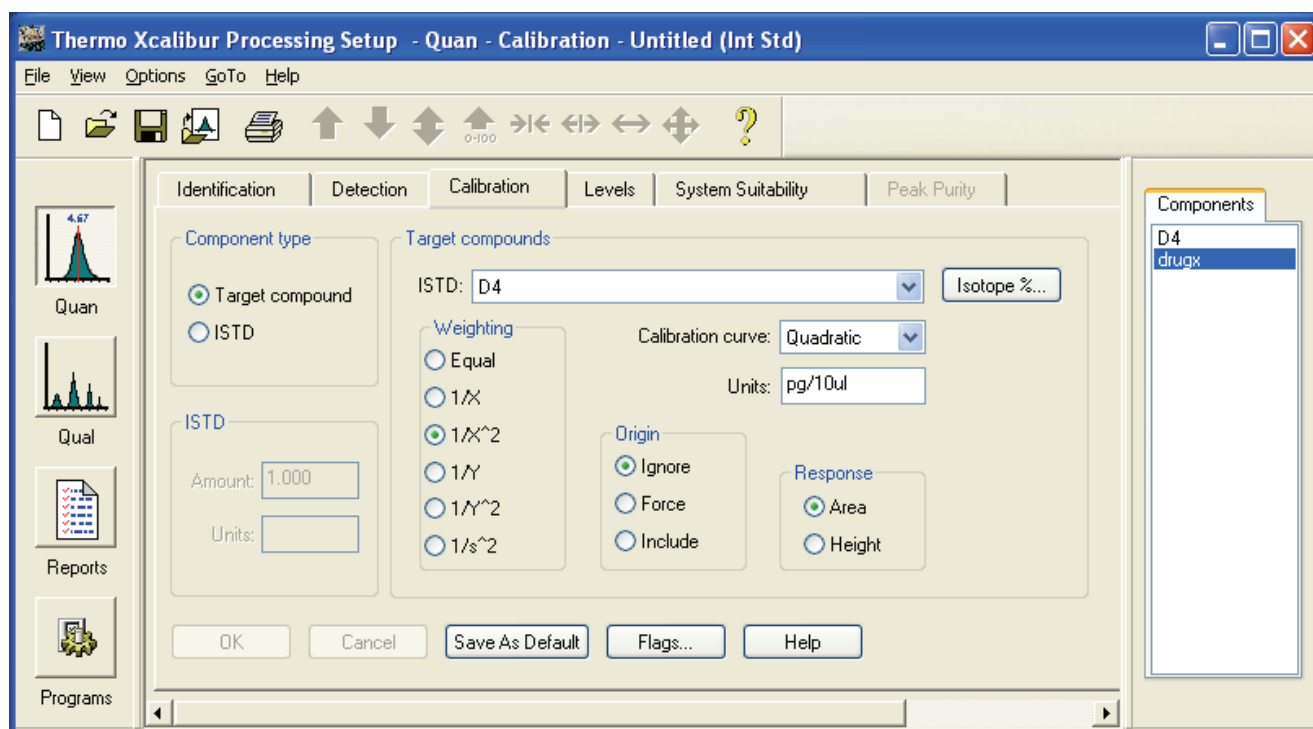
图 20. Calibration 页面，显示 D4 内标物的设置



❖ 若要输入 drugx 目标化合物的校正设置

1. 在 Components 列表中选择 **drugx**。
2. 若要将 drugx 指定为目标化合物，请在 Component Type 区域中选择 **Target Compound**（目标化合物）选项。
3. 在 Target Compound 区域的 ISTD 列表中选择 **D4** 作为内标物。
4. 若要指定二次方拟合校正曲线，请在 Calibration Curve（校正曲线）列表中选择 **Quadratic**（二次方）。
5. 若要指定浓度单位，请在 Units 框中输入 **pg/10μl**。
6. 若要指定加权为  $1/X^2$ ，请在 Weighting（加权）区域中选择  $1/X^2$ 。
7. 若要在拟合校正曲线时排除原点作为数据点，请在 Origin（原点）区域选择 **Ignore**（忽略）。
8. 若要利用峰面积确定响应值，请在 Response（响应）区域选择 **Area**（峰面积）。
9. 若要保存设置，请单击 **OK**（确定）。Calibration 页面应该如图 21 所示。

图 21. drugx 目标化合物的设置



## 指定校正和 QC 浓度水平

在 Processing Setup（处理设置）中，利用 Quan（定量）视图的 Levels（浓度水平）页面指定每个校正水平中目标化合物（待测物）的量。Xcalibur 数据系统在处理序列的同时，可利用校正水平信息生成校正曲线。同时指定 QC 检查标样中目标化合物的量。在序列运行过程中，应用程序利用 QC 标样检查 LC/MS 仪器的稳定性。

本部分包含下列内容：

- 指定目标化合物的校正水平
- 指定 QC 浓度水平



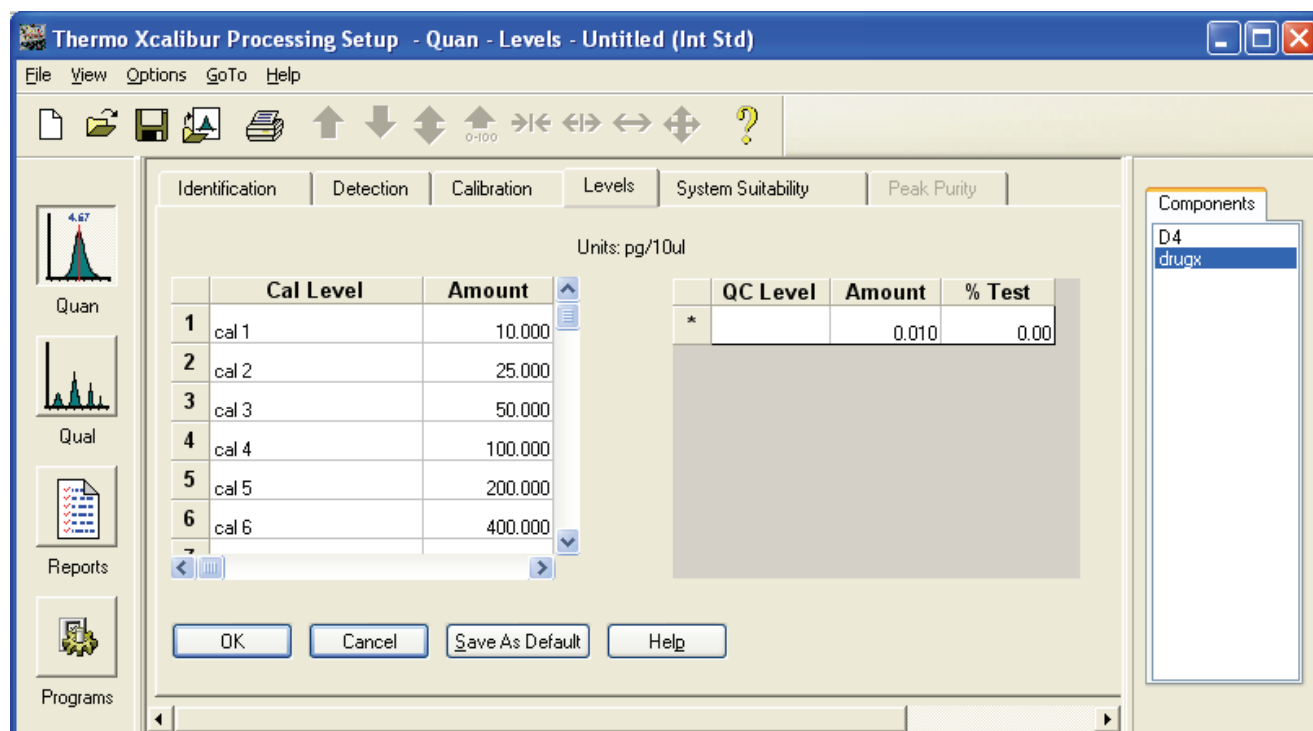
## 指定目标化合物的校正水平

### ❖ 若要指定目标化合物的浓度水平

1. 在 Processing Setup 窗口的 Quan 视图中从 Components（组分）列表中选择 **drugx**。
2. 选择 **Levels** 选项卡。Quan 视图的 Levels 页面打开（请参阅图 22）。

**注释** 如果选择 D4 后想要打开 Levels 页面，则出现一个警告框。Levels 页面不适用于 ISTD 组分。

图 22. Quan 视图的 Levels 页面



3. 输入目标化合物的校正水平信息：
  - a. 若要指定第一个校正水平的名称，请在第一个 Cal Level（校正水平）框内输入 **Cal 1**。
  - b. 按下 TAB 键使光标进入第一个 Amount（量）框。
  - c. 若要指定进样量为 10 pg，请在框内输入 **10**。
  - d. 若要创建一个新列并使光标移动到第二个 Cal Level 框内，请按 TAB 键两次。
  - e. 重复这个步骤直到填充了 9 个校正水平，如表 1 所示。这个表格显示了 10  $\mu$ L 校正溶液中包括的 drugx 皮克值。

表 1. 校正水平表格

| Cal Level<br>(校正水平) | Amount (量) |
|---------------------|------------|
| cal 1               | 10         |
| cal 2               | 25         |
| cal 3               | 50         |
| cal 4               | 100        |
| cal 5               | 200        |
| cal 6               | 400        |
| cal 7               | 600        |
| cal 8               | 800        |
| cal 9               | 1000       |

指定 QC 浓度水平

- ❖ 若要指定 QC 浓度水平
- 1. 若要指定第一个 QC 水平的名称，请在第一个 QC Level （QC 水平）框内输入 QC 1。
  - 2. 若要使光标进入第一个 Amount 框，请按 TAB 键。
  - 3. 若要指定进样量为 10 pg，请在框内输入 10。
  - 4. 按下 TAB 键使光标进入第一个 %Test （测试百分比）框。
  - 5. 若要指定 20% 的允许波动范围，请在框内输入 20。

**注释** 本例 QC 的 %Test 值都显示在表 2 中。数据系统使用本例中的标准确定是否通过 QC。使用适用于某个特定应用的 %Test 参数。

- 6. 若要创建一个新列并使光标移动到第二个 QC Level 框内，请按 TAB 键两次。
- 7. 重复这个步骤直到填充了 3 个 QC 水平，如表 2 所示。

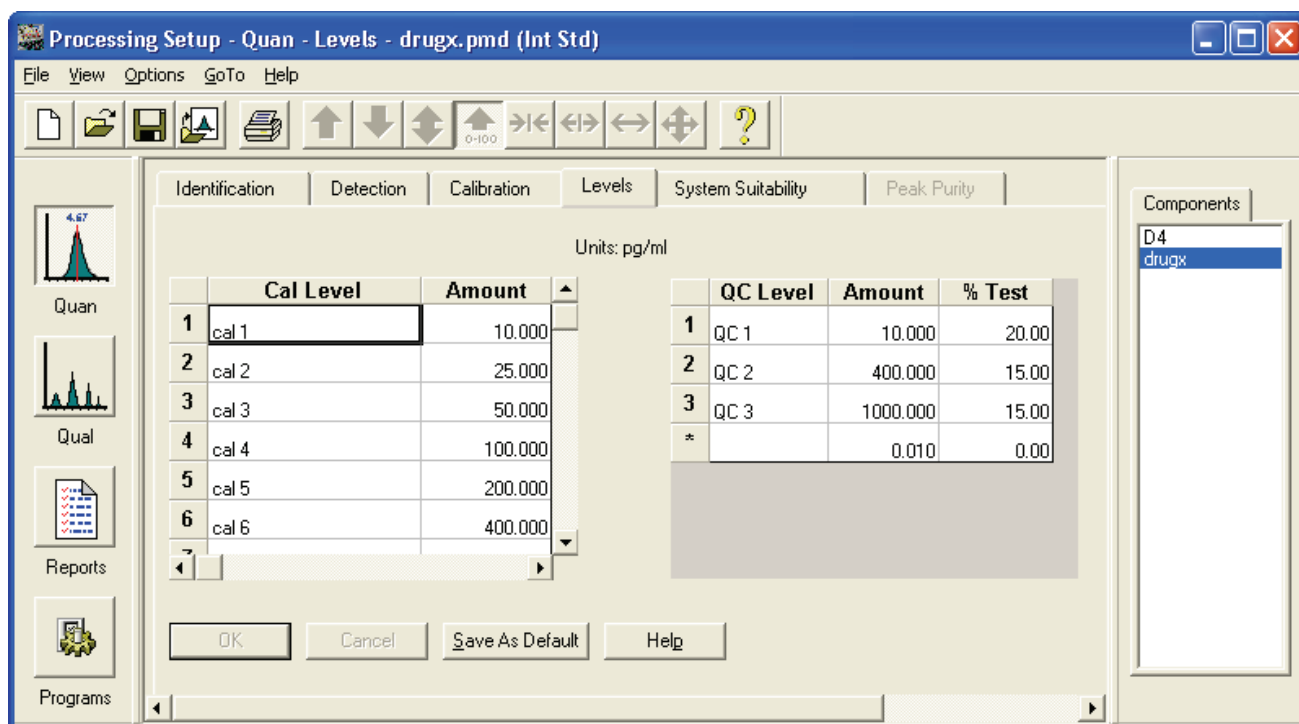
表 2. QC Level 表格，显示 drugx 的 QC 浓度水平、含量（单位：pg/ 进样量）以及 % Test

| QC Level (QC 水平) | Amount (量) | % Test (% 测试) |
|------------------|------------|---------------|
| QC 1             | 10         | 20            |
| QC 2             | 400        | 15            |
| QC 3             | 1000       | 15            |

- 8. 若要保存校正和 QC 水平设置，请单击 OK （确定）。
- Levels 页面应该如图 23 所示。



图 23. Levels 页面，显示完整的校正水平和 QC 浓度水平表格



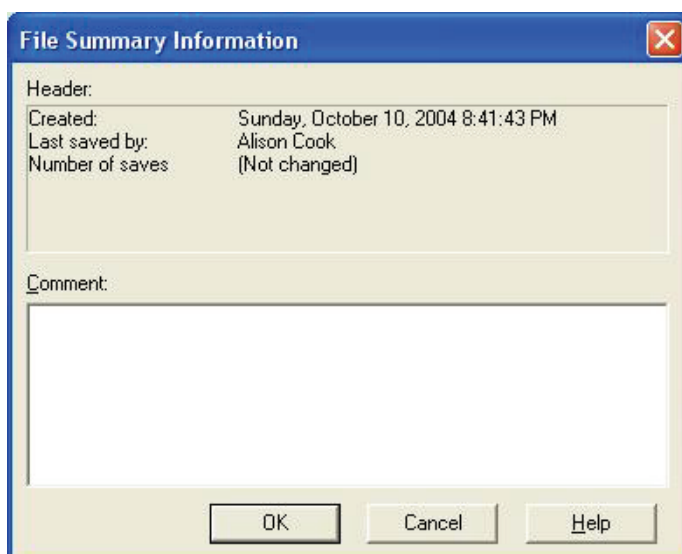
## 保存处理方法

在退出 Processing Setup（处理设置）窗口之前要保存处理方法。

### ❖ 若要保存处理方法

1. 选择 **File（文件）> Save As（另存为）**。File Summary Information（文件总结信息）对话框打开。
2. 在 **Comment（注释）** 框内输入 **Processing method for drugx example（drugx 例子的处理方法）**（请参阅图 24）。

图 24. File Summary Information 对话框



## 2 创建一个处理方法

### 保存处理方法

3. 单击 **OK（确定）**。Save As（另存为）对话框显示。
4. 浏览至 C:\Xcalibur\examples\methods 文件夹或保存数据系统例子的目录。
5. 在 File Name（文件名）框内输入 **drugx\_example.pmd**。
6. 若要保存处理方法并关闭对话框，请单击 **Save（保存）**。

## 批次处理数据文件

创建一个处理方法后，请将其添加到用于采集 drugx 数据组的序列中。在 Xcalibur 数据系统批次处理包含处理方法的序列后，软件将为每个原始文件创建一个结果文件。

无论是处理或重新处理数据，结果均相同。无论操作是处理或重新处理，该指南指已处理的数据。

该教程描述了如何将处理方法添加到序列中，以及如何利用 drugx 原始数据文件批次处理序列。

### 目录

- 将处理方法添加到序列中
- 批次处理序列生成结果文件

## 将处理方法添加到序列中

一个序列就是一个包含样品采集和处理信息的列表。Xcalibur 数据系统中的序列文件扩展名为 .sld。应用程序中的序列利用两类方法：仪器方法和处理方法。利用仪器方法采集数据文件，然后利用处理方法处理数据文件中的信息。

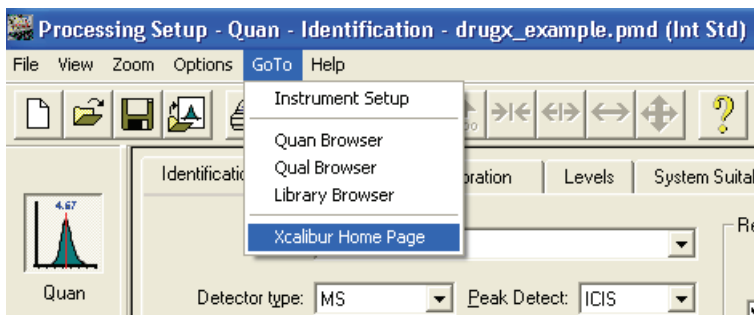
若要定量分析示例数据文件中的 drugx 目标化合物，将 drugx\_example.pmd 处理方法添加到已有的 drugx.sld 序列中。

**注释** 更多有关设置定量分析序列的信息，请转至 the *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）。

### ❖ 为序列添加处理方法。

1. 如果在 Processing Setup（处理设置）中工作，请选择 **GoTo（转至）> Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）**。Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）窗口打开（请参阅图 25）。

图 25. Processing Setup（处理设置）中的 GoTo 菜单



2. 若要打开 Sequence Setup（序列设置）视图，请单击 .
3. 选择 **File（文件）> Open（打开）**。
4. 浏览位于 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx.sld 的序列文件。
5. 选择 **drugx.sld**，然后点击 **Open**。

Sequence Setup（序列设置）窗口中显示 drugx.sld 序列（请参阅图 26）。

图 26. Sequence Setup 视图，显示保存在 C:\ drive 的序列 drugx.sld。

drugx.sld [Open] - Sequence Setup - Home Page

File Edit Change Actions View GoTo Help

|    | Sample Type | File Name | Sample | Path                      | Inst Meth                          | Proc Meth                          | Position | Inj Vol | Level |
|----|-------------|-----------|--------|---------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------|---------|-------|
| 1  | Std Bracket | drugx_01  | 01     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 102      | 50.00   | cal 1 |
| 2  | Std Bracket | drugx_02  | 02     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 103      | 50.00   | cal 1 |
| 3  | Std Bracket | drugx_03  | 03     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 104      | 50.00   | cal 1 |
| 4  | Std Bracket | drugx_04  | 04     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 105      | 50.00   | cal 2 |
| 5  | Std Bracket | drugx_05  | 05     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 108      | 50.00   | cal 3 |
| 6  | Std Bracket | drugx_06  | 06     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 109      | 50.00   | cal 4 |
| 7  | Std Bracket | drugx_07  | 07     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 110      | 50.00   | cal 5 |
| 8  | Std Bracket | drugx_08  | 08     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 111      | 50.00   | cal 6 |
| 9  | Std Bracket | drugx_09  | 09     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 112      | 50.00   | cal 7 |
| 10 | Std Bracket | drugx_10  | 10     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 113      | 50.00   | cal 8 |
| 11 | Std Bracket | drugx_11  | 11     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 114      | 50.00   | cal 9 |
| 12 | Std Bracket | drugx_12  | 12     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 115      | 50.00   | cal 9 |
| 13 | Std Bracket | drugx_13  | 13     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 116      | 50.00   | cal 9 |
| 14 | QC          | drugx_14  | 14     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 121      | 50.00   | QC 1  |
| 15 | QC          | drugx_15  | 15     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 122      | 50.00   | QC 1  |
| 16 | QC          | drugx_16  | 16     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 123      | 50.00   | QC 1  |
| 17 | QC          | drugx_17  | 17     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 124      | 50.00   | QC 1  |
| 18 | QC          | drugx_18  | 18     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 125      | 50.00   | QC 1  |
| 19 | QC          | drugx_19  | 19     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 126      | 50.00   | QC 1  |
| 20 | QC          | drugx_20  | 20     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 133      | 50.00   | QC 2  |
| 21 | QC          | drugx_21  | 21     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 134      | 50.00   | QC 2  |
| 22 | QC          | drugx_22  | 22     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 135      | 50.00   | QC 2  |
| 23 | QC          | drugx_23  | 23     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 136      | 50.00   | QC 2  |
| 24 | QC          | drugx_24  | 24     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 137      | 50.00   | QC 2  |
| 25 | QC          | drugx_25  | 25     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 138      | 50.00   | QC 2  |
| 26 | QC          | drugx_26  | 26     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 139      | 50.00   | QC 3  |
| 27 | QC          | drugx_27  | 27     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 140      | 50.00   | QC 3  |
| 28 | QC          | drugx_28  | 28     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 141      | 50.00   | QC 3  |
| 29 | QC          | drugx_29  | 29     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 142      | 50.00   | QC 3  |
| 30 | QC          | drugx_30  | 30     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 143      | 50.00   | QC 3  |
| 31 | QC          | drugx_31  | 31     | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | 144      | 50.00   | QC 3  |
| *  |             |           |        |                           |                                    |                                    |          | 0.00    |       |

For Help, press F1

NUM 10/10/2004 11:23 PM

6. 若要将序列中的处理方法更改为

C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.pmd:

- 双击 Proc Meth（处理方法）列中最上方的单元格（第 1 个单元格）。Select Processing Method（选择处理方法）对话框打开。
- 浏览位于 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.pmd 下的处理方法。
- 选择 drugx\_example.pmd，然后单击 Open（打开）进入序列所有行中的处理方法 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.pmd。

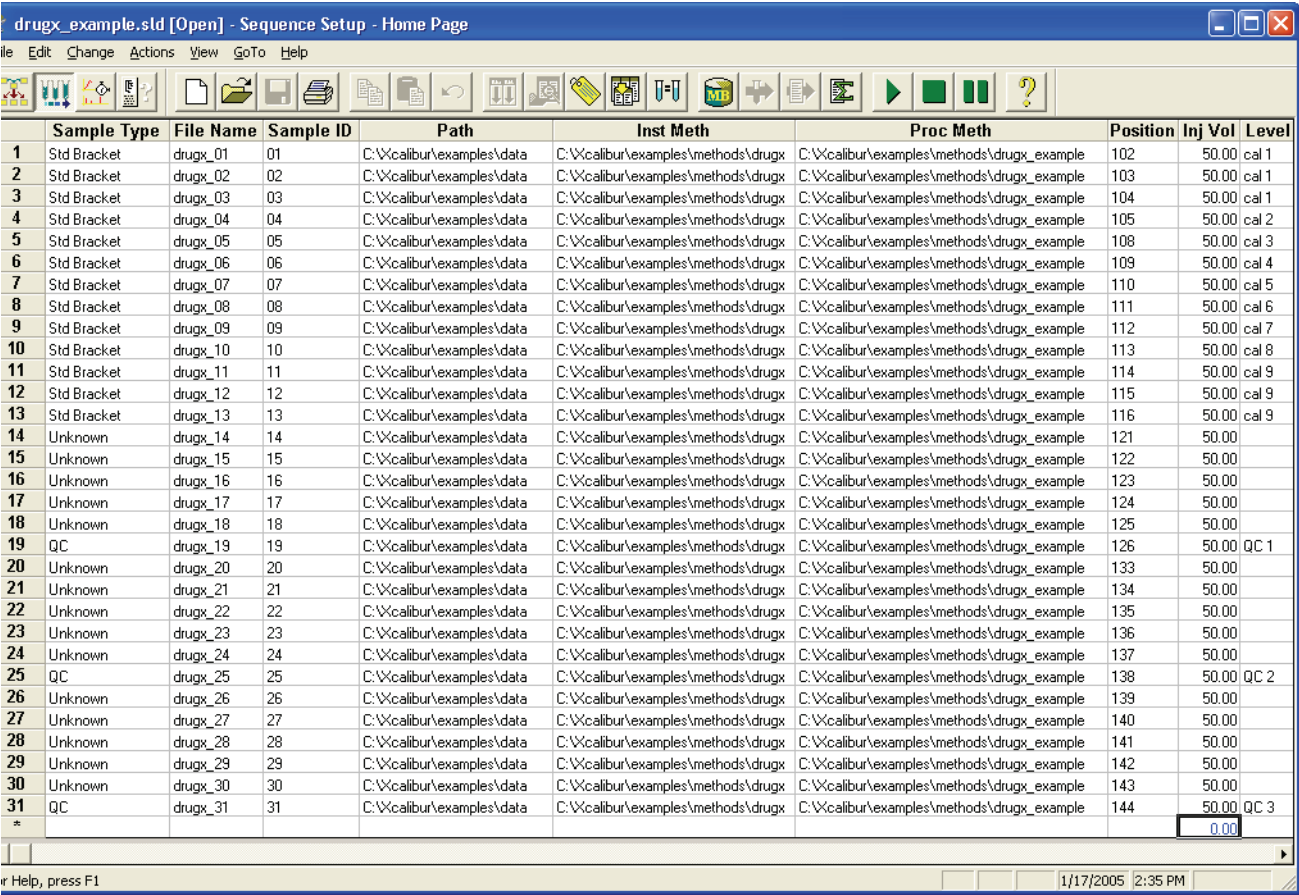
3 批次处理数据文件

将处理方法添加到序列中

7. 若要将某些 QC 样品类型更改为未知样，单击 Sample Type（样品类型）列的第 14 行，在列表中选择样品类型 Unknown（未知样）。在列 15-18、20-24 以及 26-30 中重复该步骤选择 Unknown（未知样）样品类型。

当前序列视图应该如图 27 所示。

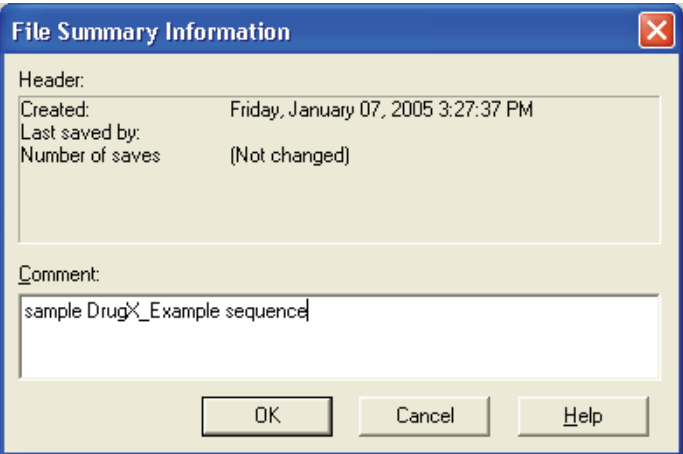
图 27. Drugx 序列，drugx\_example.pmd 被选作处理方法



| Sample Type    | File Name | Sample ID | Path                      | Inst Meth                          | Proc Meth                                  | Position | Inj Vol | Level |
|----------------|-----------|-----------|---------------------------|------------------------------------|--------------------------------------------|----------|---------|-------|
| 1 Std Bracket  | drugx_01  | 01        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 102      | 50.00   | cal 1 |
| 2 Std Bracket  | drugx_02  | 02        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 103      | 50.00   | cal 1 |
| 3 Std Bracket  | drugx_03  | 03        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 104      | 50.00   | cal 1 |
| 4 Std Bracket  | drugx_04  | 04        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 105      | 50.00   | cal 2 |
| 5 Std Bracket  | drugx_05  | 05        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 108      | 50.00   | cal 3 |
| 6 Std Bracket  | drugx_06  | 06        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 109      | 50.00   | cal 4 |
| 7 Std Bracket  | drugx_07  | 07        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 110      | 50.00   | cal 5 |
| 8 Std Bracket  | drugx_08  | 08        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 111      | 50.00   | cal 6 |
| 9 Std Bracket  | drugx_09  | 09        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 112      | 50.00   | cal 7 |
| 10 Std Bracket | drugx_10  | 10        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 113      | 50.00   | cal 8 |
| 11 Std Bracket | drugx_11  | 11        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 114      | 50.00   | cal 9 |
| 12 Std Bracket | drugx_12  | 12        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 115      | 50.00   | cal 9 |
| 13 Std Bracket | drugx_13  | 13        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 116      | 50.00   | cal 9 |
| 14 Unknown     | drugx_14  | 14        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 121      | 50.00   |       |
| 15 Unknown     | drugx_15  | 15        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 122      | 50.00   |       |
| 16 Unknown     | drugx_16  | 16        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 123      | 50.00   |       |
| 17 Unknown     | drugx_17  | 17        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 124      | 50.00   |       |
| 18 Unknown     | drugx_18  | 18        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 125      | 50.00   |       |
| 19 QC          | drugx_19  | 19        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 126      | 50.00   | QC 1  |
| 20 Unknown     | drugx_20  | 20        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 133      | 50.00   |       |
| 21 Unknown     | drugx_21  | 21        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 134      | 50.00   |       |
| 22 Unknown     | drugx_22  | 22        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 135      | 50.00   |       |
| 23 Unknown     | drugx_23  | 23        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 136      | 50.00   |       |
| 24 Unknown     | drugx_24  | 24        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 137      | 50.00   |       |
| 25 QC          | drugx_25  | 25        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 138      | 50.00   | QC 2  |
| 26 Unknown     | drugx_26  | 26        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 139      | 50.00   |       |
| 27 Unknown     | drugx_27  | 27        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 140      | 50.00   |       |
| 28 Unknown     | drugx_28  | 28        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 141      | 50.00   |       |
| 29 Unknown     | drugx_29  | 29        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 142      | 50.00   |       |
| 30 Unknown     | drugx_30  | 30        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 143      | 50.00   |       |
| 31 QC          | drugx_31  | 31        | C:\Xcalibur\examples\data | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_example | 144      | 50.00   | QC 3  |
| *              |           |           |                           |                                    |                                            |          | 0.00    |       |

8. 若要保存序列，选择 File（文件）> Save As（另存为）。在 Comment（注释）框内输入 sample Drugx\_Example sequence（请参阅图 28）。

图 28. File Summary Information（文件总结信息）对话框



**File Summary Information**

Header:

Created: Friday, January 07, 2005 3:27:37 PM

Last saved by:

Number of saves (Not changed)

Comment:

sample Drugx\_Example sequence

OK Cancel Help



9. 单击 **OK**（确定）。Save As（另存为）对话框显示。
10. 在 File Name（文件名）框内输入 **drugx\_example**，然后单击 **Save**（保存）。序列保存路径为 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.sld。

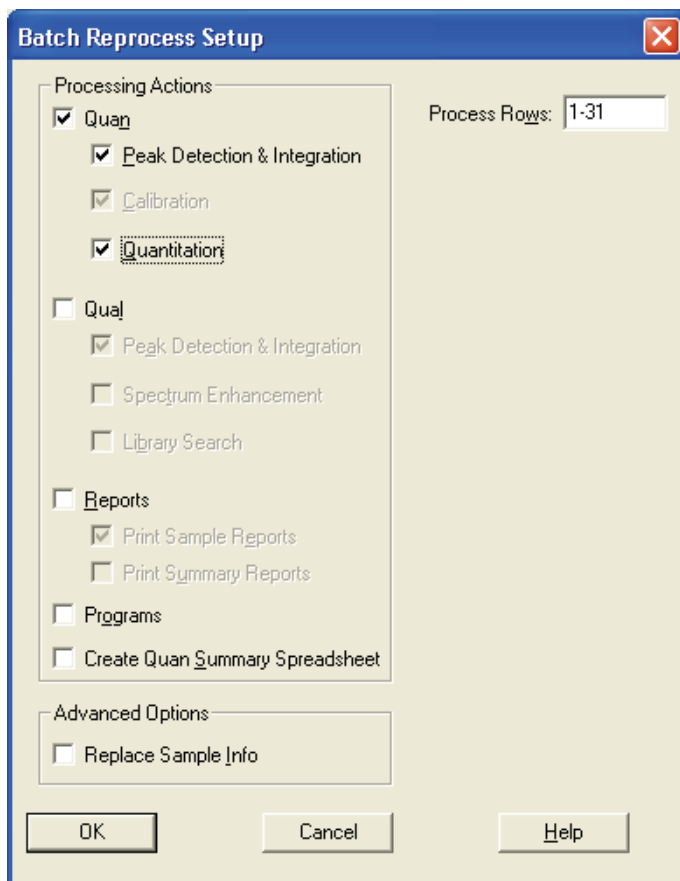
## 批次处理序列生成结果文件

在将处理方法添加到序列中后，可以在 Quan Browser（定量浏览器）中查看批次处理数据文件。

### ❖ 若要批次处理序列并对原始数据文件执行定量分析

1. 单击  或选择 **Actions**（操作）> **Batch Reprocess**（批次重新处理）。Batch Reprocess Setup（批次重新处理设置）对话框显示。

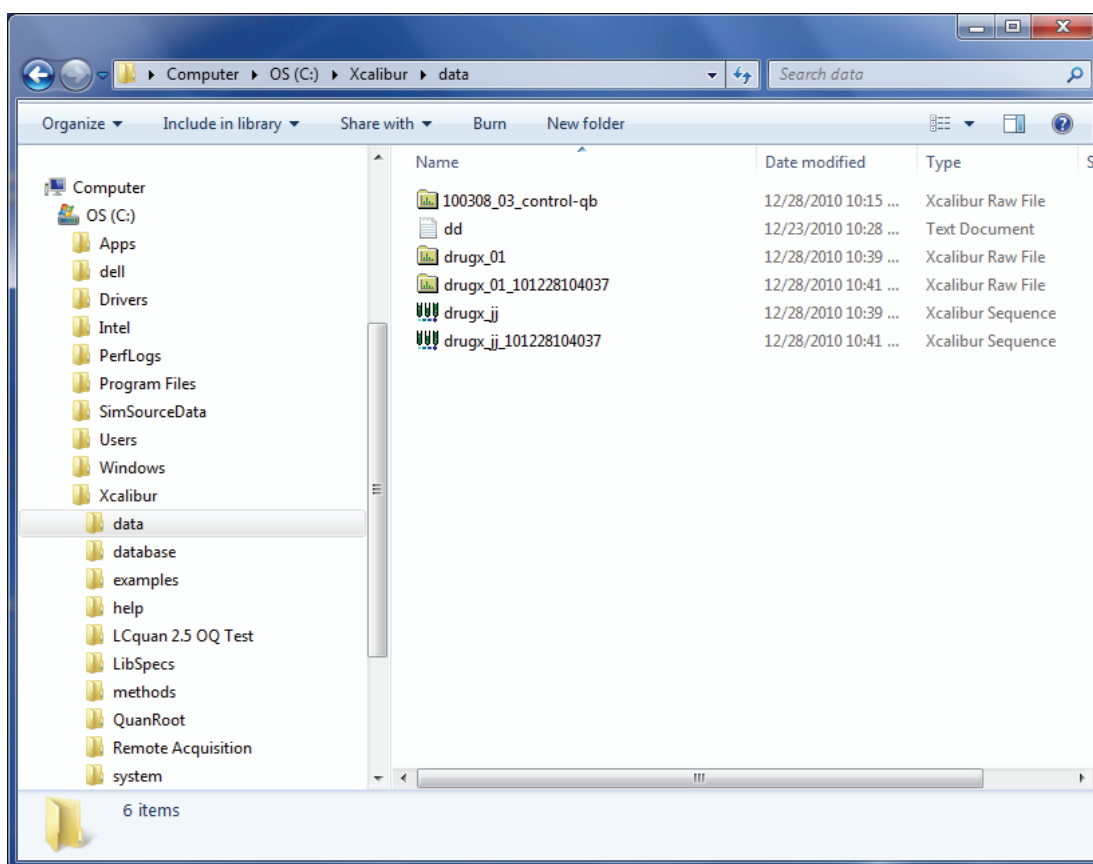
图 29. Batch Reprocess Setup 对话框



2. 若要设置批次处理选项，如图 29 所示，选择 **Quan**（定量）、**Peak Detection & Integration**（峰检测和积分）和 **Quantitation**（定量分析）复选框。
3. 在 Process Rows（处理行）框内输入 1-31。
4. 若要开始批次处理，请单击 **OK**（确定）。

数据系统为每个原始数据文件创建一个结果数据文件，其保存路径为 C:\Xcalibur\examples\data\folder（请参阅 图 30）。

图 30. Explore 路径，显示原始数据文件 [.raw] 和结果数据文件 [.rst] 的位置。



**注释** Xcalibur 应用程序将结果数据文件输出至原始文件所在的文件夹。在本例中，结果数据文件和原始数据文件位于 C:\Xcalibur\examples\data\。



## 在 Quan Browser 中处理结果文件

在为序列添加处理方法之后批处理序列，在 Quan Browser（定量浏览器）窗口中查看 drugx 目标组分的结果文件和校正曲线。另外，可以修改处理方法的识别、检测、积分和部分校正参数。

该教程描述了在 Quan Browser 中如何查看定量数据和修改处理方法。

### 目录

- [在 Quan Browser 中查看序列文件](#)
- [在 Quan Browser 中修改处理方法](#)

## 在 Quan Browser 中查看序列文件

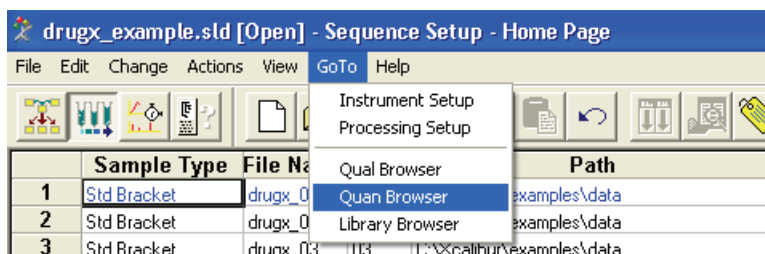
从 Quan Browser（定量浏览器）窗口查看已处理的 drugx 样品组的定量分析结果。

**注释** 有关使用 Quan Browser 的其他信息，请浏览 the *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）。

### ❖ 若要在批处理序列后查看结果

1. 若要在 Quan Browser 窗口中打开序列，选择其中一个选项：
  - 如果处于 Xcalibur Home Page（Xcalibur 主页）视图，请单击 **Quan Browser**。
  - 如果处于 Sequence Setup View（序列设置视图），请选择 **GoTo > Quan Browser**（请参阅图 31）。

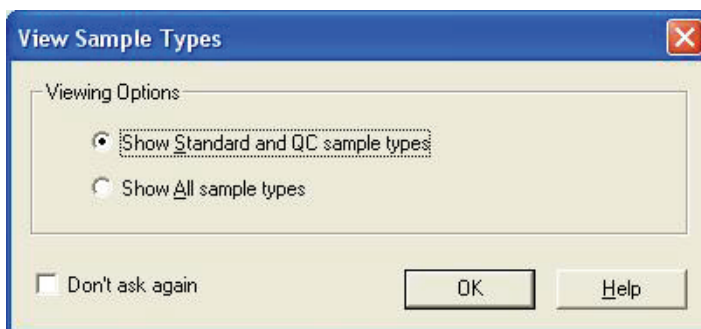
图 31. Sequence Setup 中的 GoTo 菜单



序列列表文件 (\*.sld) 的 Open（打开）对话框打开。

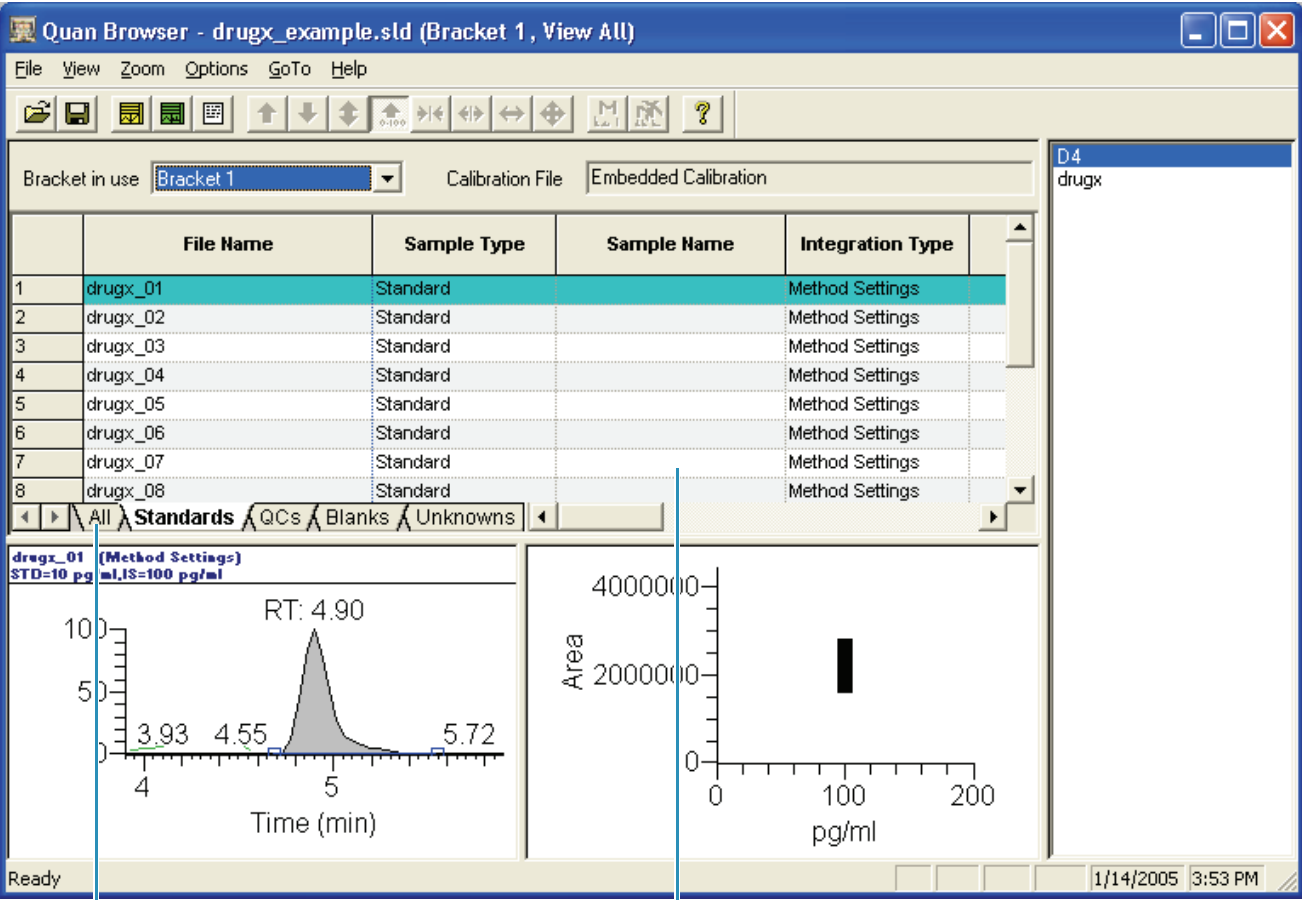
2. 浏览目录找到 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.sld sequence。
3. 选择 **drugx\_example.sld**，然后单击 **Open**。View Sample Types（查看样品类型）对话框打开。（请参阅图 32）。

图 32. View Sample Types 对话框



4. 选择 **Show Standard and QC Sample Types**（显示标准和 QC 样品类型）选项，然后单击 **OK**（确定）。drugx\_example.sld 序列在 Quan Browser 窗口中打开（请参阅图 33）。

图 33. Quan Browser 窗口，选择内标物 D4，显示 All（全部）选项卡。



All 选项卡

结果网格视图

- 5. 若要显示所有数据文件，请单击结果网格视图底部的 All 选项卡（如图 33 所示）。
- 6. 若要选择第一个数据文件，请单击结果网格视图的第一行。
- 7. 检查所选结果网格行的每个部分的输入，防止峰检测和积分问题。确保所选数据文件对应正确的浓度水平和样品类型。如有必要，请修改处理方法中的峰识别、检测或积分参数。

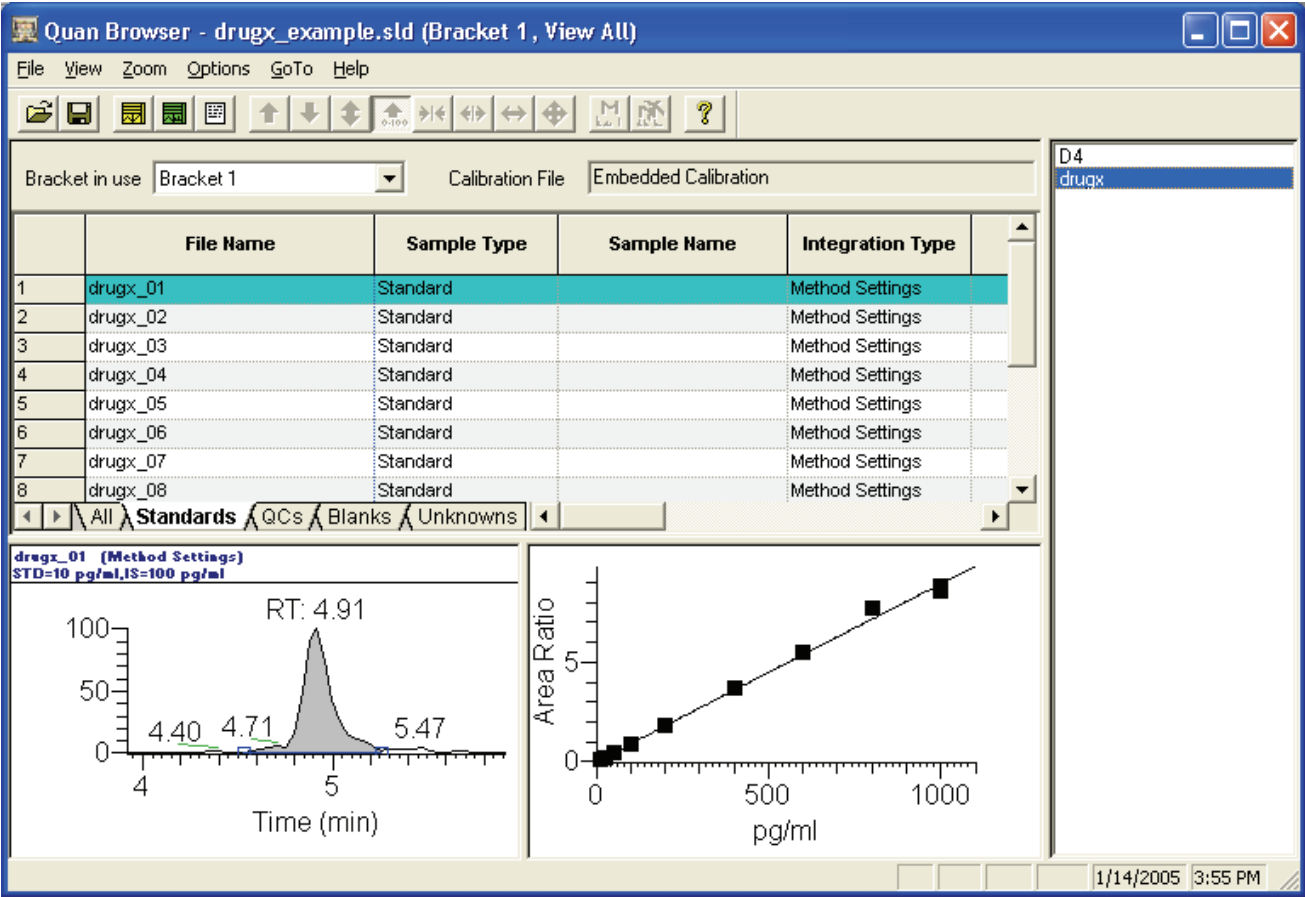
**注释** 修改 Quan Browser（定量浏览器）或者 Processing Setup（处理设置）中的处理方法。在 Quan Browser 中修改 Calibration Settings（校正设置）对话框中处理方法的校正曲线和浓度水平设置。若要打开 Calibration Settings 对话框，右键单击 Calibration Curve（校正曲线）视图并从快捷菜单选择 Calibration Settings。若要保存修改的处理方法，在 Quan Browser 窗口中选择 File（文件）> Export Method（导出方法）。有关处理方法的详细信息，请参阅第 2 章，“创建一个处理方法。”。

- 8. 检查 Chromatogram Plot（色谱图）中的成分峰。确认 Xcalibur 数据系统找到峰。应用程序使峰呈灰色阴影，并用方形积分记号标记出起点和终点。确保应用程序正确处理峰积分，且阴影部分准确地代表了色谱图中某个成分的贡献。如有必要，请修改处理方法中的峰检测或积分参数。
- 9. 请单击结果网格视图的下一行选择下一个数据文件。对每个数据文件执行步骤 7 和 8。

4 在 Quan Browser 中处理结果文件  
在 Quan Browser 中修改处理方法

- 10. 在成分列表中选择 drugx 显示目标化合物的结果。对每个数据文件的目标化合物执行步骤 7 和 8。
- 11. 检查 Calibration Curve Plot（校正曲线图）中的校正曲线。根据当地实验室使用的标准评估校正曲线。如有必要，请修改处理方法的校正曲线参数。（请参阅图 34）。有关修改处理方法的详细信息，请参阅第 2 章，“创建一个处理方法。”。

图 34. Quan Browser 窗口，选择了目标化合物 drugx



在 Quan Browser 中修改处理方法

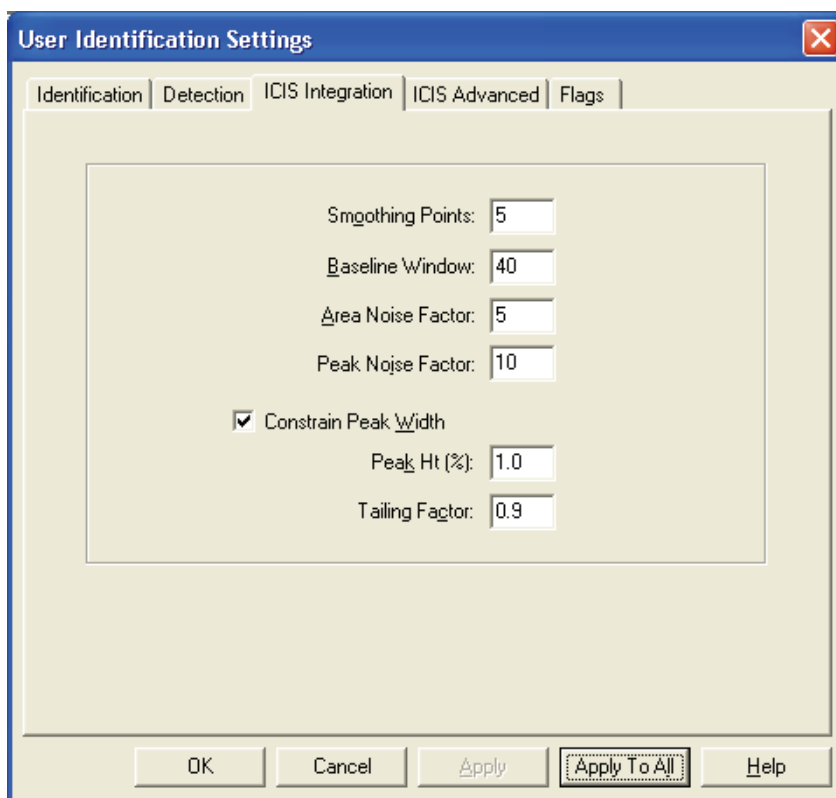
可以在 Quan Browser（定量浏览器）中修改处理方法处理方法的某些部分，包括成分列表中峰识别、检测和积分参数，或者某些校正曲线参数。您无法修改校正浓度水平量，但是可以从校正曲线中排除某些点。

❖ 若要修改处理方法

- 1. 从 Quan Browser 窗口右侧的成分列表中选择 drugx。
- 2. 若要修改识别、检测或积分参数，例如 Constrain Peak Width（限制峰宽），右键单击 Chromatogram Plot（色谱图）打开快捷菜单并选择 User Peak Detection Settings（用户峰检测设置）。

User Identification Settings（用户识别设置）对话框打开（请参阅图 35）。

图 35. User Identification Settings 对话框



- a. 单击 **ICIS Integration**（ICIS 积分）选项卡。ICIS Integration 页面显示。
- b. 选择 **Constrain Peak Width** 复选框。
- c. 在 **Peak Ht[%]**（峰高）框内输入 1。
- d. 在 **Tailing Factor**（拖尾因子）框内输入 0.9。
- e. 单击 **Apply To All**（应用至全部）更新序列中结果文件的积分。

Processing（处理中）对话框打开并在打开的序列中处理结果文件。查看 Chromatogram Plot 视图中新设置的结果。

**注释** 这个新积分设置是暂时的，除非通过导出方法将其保存到处理方法中。

3. 若要修改校正曲线，请执行下列操作：
  - a. 右键单击 Calibration Curve Plot（校正曲线图）视图打开快捷菜单。
  - b. 选择 **Calibration Settings**（校正设置）。Calibration Options（校正选项）对话框打开。
  - c. 单击 **Curve**（曲线）选项卡。Curve 页面打开。
  - d. 从 Calibration Curve Type（校正曲线类型）列表中选择 **Linear**（线性）。
  - e. 若要显示 Calibration Curve Plot 视图中的新曲线拟合，单击 **Apply**（应用）。
  - f. 单击 **OK**（确定）关闭对话框。

4. 若要将修改保存为一个新处理方法，请执行下列操作：
  - a. 选择 **File**（文件）> **Export Method**（导出方法）。  
Save As（另存为）对话框显示。
  - b. 在 File Name（文件名）框内输入 **drugx\_example\_2**。
  - c. 在目录框内浏览至 C:\Xcalibur\examples\methods 文件夹。
  - d. 单击 **OK**。

## 预览、指定和打印报告

若要在批处理序列时打印报告，请在处理方法中指定一个或多个报告模板。

该教程描述如何预览、指定和打印报告。

### 目录

- [在 XReport 中预览报告](#)
- [指定处理方法中的报告模板](#)
- [打印报告](#)

## 在 XReport 中预览报告

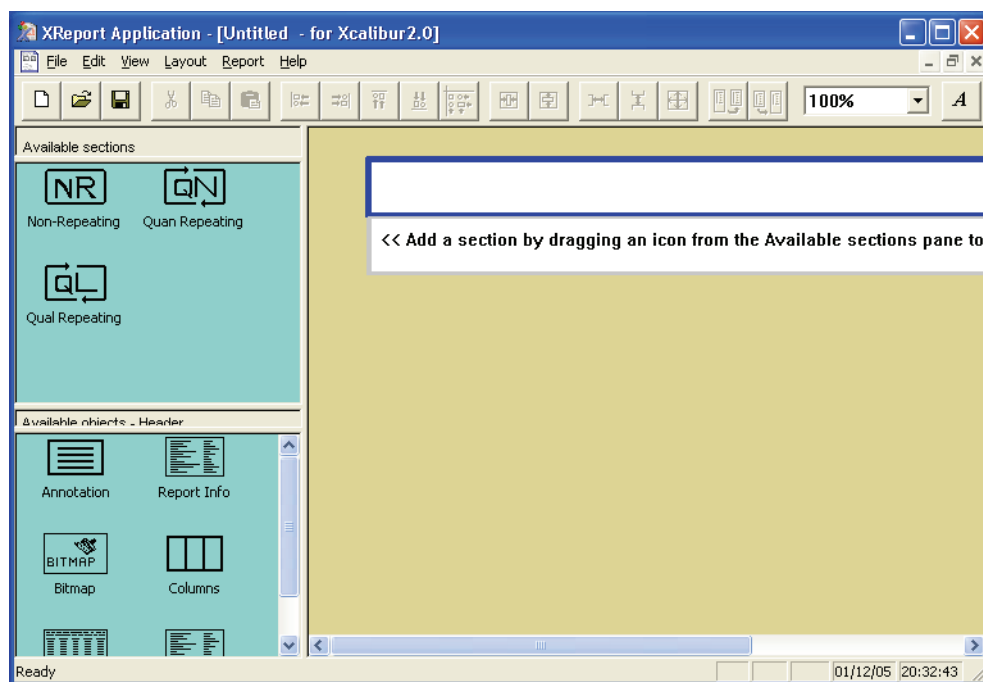
在为处理方法添加报告模板，或在使用处理方法打印报告之前，在 XReport 中预览代表性数据在所选模板中的结果。预览报告有助于以合适的信息和有效的格式打印报告。

### ❖ 若要预览报告模板的典型界面

1. 若要启动 XReport 应用程序，双击桌面的 ，或从计算机任务栏选择 **Start**（启动）> **Programs**（程序）> **Thermo Xcalibur** > **XReport**。

XReport 打开并创建一个新模板（请参阅图 36）。

图 36. XReport Application（XReport 应用程序）窗口显示一个新的空白报告模板



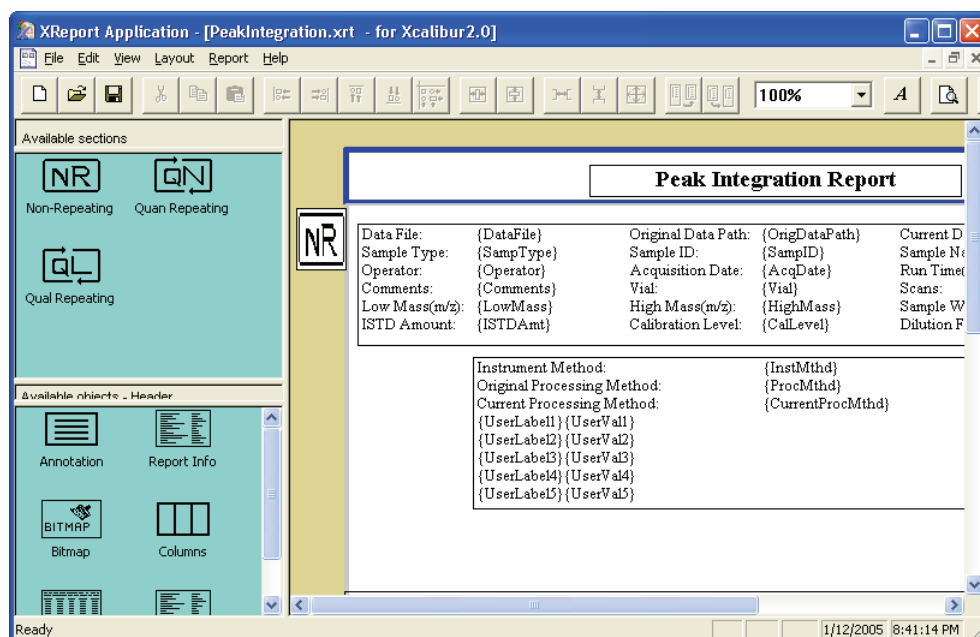
2. 选择 **File**（文件）> **Open**（打开）。XReport 模板对话框打开。



3. 选择 **PeakIntegration.xrt**，然后单击 **Open**。

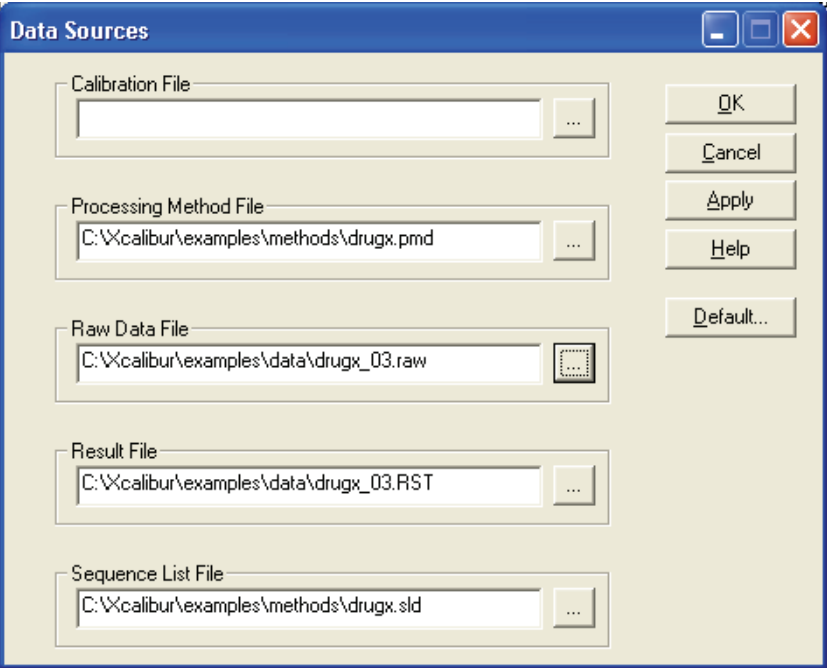
XReport 打开 **PeakIntegration.xrt** 报告模板（请参阅图 37）。

图 37. PeakIntegration.xrt 报告模板



4. 若要选择一个代表性数据文件测试峰积分，请选择 **Report（报告）> Data Sources（数据源）**。Data Sources 对话框显示。输入源信息。
  - a. 单击 Raw Data File（原始数据文件）区域的 。Select Raw File（选择原始文件）对话框显示。
  - b. 选择 **drugx\_03.raw**，然后单击 **Open**。
  - c. 单击 Result File（结果文件）区域的 。
  - d. 选择 **drugx\_03.RST**，然后单击 **Open**。对话框内的所有选项应该如图 38 所示。
  - e. 单击 **OK**。

图 38. Data Sources 对话框

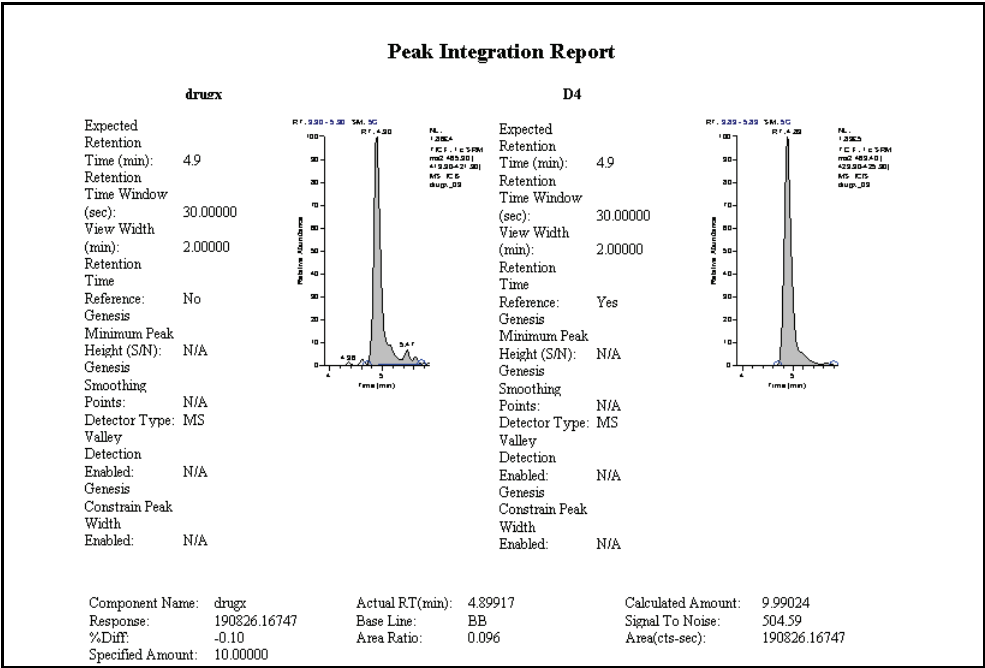


5. 从 XReport 主窗口选择 **Report (报告) > Resolve Report (解析报告)**。  
峰积分报告打开并显示 drugx.rst 文件的数据 (请参阅图 39 和图 40)。

图 39. Peak Integration Report (峰积分报告)，第一页

| Peak Integration Report     |                     |                                           |                      |                    |                     |
|-----------------------------|---------------------|-------------------------------------------|----------------------|--------------------|---------------------|
| Data File:                  | drugx_03            | Original Data Path:                       | C:\LCQ\Data\mrw_27   | Current Data Path: | C:\Xcalibur\example |
| Sample Type:                | Std Update          | Sample ID:                                | 417Sat_0504_WD1      | Sample Name:       | s\data              |
| Operator:                   | linda               | Acquisition Date:                         | 05/04/96 10:31:23 PM | Run Time(min):     | 6.98                |
| Comments:                   | STD=10 pg/ml,IS=100 | Vial:                                     | 104                  | Scans:             | 314                 |
| Low Mass(m/z):              | 419.30              | High Mass(m/z):                           | 425.30               | Sample Weight:     | 0.00                |
| ISTD Amount:                | 0.000               | Calibration Level:                        |                      | Dilution Factor:   | 1.00                |
| Instrument Method:          |                     | C:\LCQ\Methods\                           |                      |                    |                     |
| Original Processing Method: |                     |                                           |                      |                    |                     |
| Current Processing Method:  |                     | C:\Xcalibur\examples\methods\drugx_exampl |                      |                    |                     |
| Study                       |                     | e                                         |                      |                    |                     |
| Client                      |                     |                                           |                      |                    |                     |
| Laboratory                  |                     |                                           |                      |                    |                     |
| Company                     |                     |                                           |                      |                    |                     |
| Phone                       |                     |                                           |                      |                    |                     |

图 40. Peak Integration Report, 第二页



6. 关闭报告。
7. 选择 **File > Open**。XReport 模板对话框打开。
8. 选择 **CompCalReport\_ICIS.xrt**，然后单击 **Open**。  
XReport 打开 CompCalReport\_ICIS.xrt 报告模板。
9. 若要选择代表性的序列文件测试成分校正报告：
  - a. 选择 **Report > Data Sources**。Data Sources 对话框打开（请参阅图 38，第 46 页）。
  - b. 单击 Sequence List File（序列列表文件）区域的 。  
Select Sequence File（选择序列文件）对话框显示。
  - c. 选择 drugx\_example.sld 文件，然后单击 **Open**。
  - d. 单击 OK 关闭 Data Sources 对话框。

10. 选择 **Report > Resolve Report**。

Xcalibur 应用程序将数据与报告模板结合，打开 component calibration report（成分校正报告），显示 drugx\_example.sld 序列文件的数据。drugx\_example.sld 序列文件的 component calibration report 共六页。第 5 页包括 drugx 的校正曲线，如图 41 所示。  
第 6 页显示 drugx 的计算量，如图 49 页图 42 所示。

图 41. Component Calibration Report, 显示 drugx 目标化合物的校正曲线

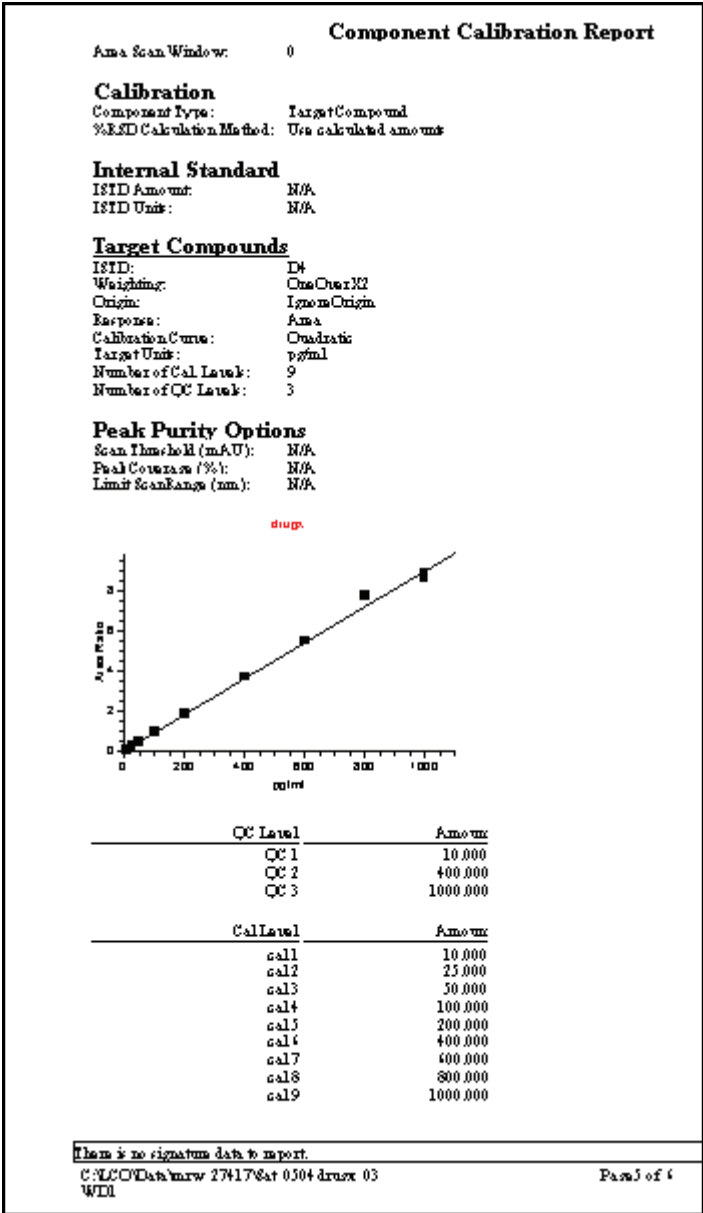


图 42. Component Calibration Report, 显示 drugx 目标化合物的校正曲线

| Component Calibration Report |              |            |             |                  |                   |        |       |
|------------------------------|--------------|------------|-------------|------------------|-------------------|--------|-------|
| Sample ID                    | Area         | Area Ratio | ISTD Area   | Specified Amount | Calculated Amount | % Diff | % RSD |
| 01                           | 188710.251   | 0.091      | 2078851.260 | 10.00000pg/ml    | 9.47181pg/ml      | -5.28  | 9.960 |
| 02                           | 211511.636   | 0.107      | 1982388.747 | 10.00000pg/ml    | 11.23365pg/ml     | 12.34  | 9.960 |
| 03                           | 180306.351   | 0.091      | 1976747.831 | 10.00000pg/ml    | 9.52022pg/ml      | -4.80  | 9.960 |
| 04                           | 451037.533   | 0.222      | 2031139.035 | 25.00000pg/ml    | 24.00399pg/ml     | -3.98  | 0.000 |
| 05                           | 885012.506   | 0.434      | 2038543.922 | 50.00000pg/ml    | 47.49013pg/ml     | -5.02  | 0.000 |
| 06                           | 1863855.738  | 0.922      | 2021162.567 | 100.00000pg/ml   | 101.58703pg/ml    | 1.59   | 0.000 |
| 07                           | 3971164.797  | 1.835      | 2163988.136 | 200.00000pg/ml   | 202.97623pg/ml    | 1.49   | 0.000 |
| 08                           | 8383333.830  | 3.697      | 2267325.391 | 400.00000pg/ml   | 410.58494pg/ml    | 2.65   | 0.000 |
| 09                           | 12075236.424 | 5.487      | 2200807.986 | 600.00000pg/ml   | 611.04911pg/ml    | 1.84   | 0.000 |
| 10                           | 17476372.702 | 7.709      | 2267013.730 | 800.00000pg/ml   | 861.41090pg/ml    | 7.68   | 0.000 |
| 11                           | 21056082.091 | 8.604      | 2447194.337 | 1000.00000pg/ml  | 962.70426pg/ml    | -3.73  | 1.570 |
| 12                           | 21901731.830 | 8.608      | 2544250.852 | 1000.00000pg/ml  | 963.17444pg/ml    | -3.68  | 1.570 |
| 13                           | 22971424.038 | 8.839      | 2598948.309 | 1000.00000pg/ml  | 989.28833pg/ml    | -1.07  | 1.570 |
| 14                           | 311190.520   | 0.138      | 2259271.484 | N/A              | 14.66965pg/ml     | N/A    | N/A   |
| 15                           | 225704.696   | 0.115      | 1962050.435 | N/A              | 12.15669pg/ml     | N/A    | N/A   |
| 16                           | 227047.300   | 0.109      | 2090424.803 | N/A              | 11.44590pg/ml     | N/A    | N/A   |
| 17                           | 217023.171   | 0.107      | 2026948.538 | N/A              | 11.27500pg/ml     | N/A    | N/A   |
| 18                           | 213032.790   | 0.102      | 2080418.832 | N/A              | 10.75815pg/ml     | N/A    | N/A   |
| 19                           | 206836.121   | 0.118      | 1749375.294 | 10.00000pg/ml    | 12.51077pg/ml     | 25.11  | 0.000 |
| 20                           | 7961931.521  | 3.821      | 2083738.522 | N/A              | 424.39301pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 21                           | 7930753.486  | 3.871      | 2048563.176 | N/A              | 430.02691pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 22                           | 8884407.016  | 3.997      | 2222893.049 | N/A              | 444.05120pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 23                           | 8677072.992  | 3.641      | 2383086.126 | N/A              | 404.28797pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 24                           | 7716769.166  | 3.553      | 2171640.815 | N/A              | 394.49148pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 25                           | 9381228.456  | 3.640      | 2576958.562 | 400.00000pg/ml   | 404.21187pg/ml    | 1.05   | 0.000 |
| 26                           | 23285379.393 | 9.252      | 2516922.507 | N/A              | 1036.11383pg/ml   | N/A    | N/A   |
| 27                           | 22265730.639 | 8.916      | 2497326.380 | N/A              | 998.02890pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 28                           | 19445064.013 | 8.191      | 2374075.563 | N/A              | 915.87370pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 29                           | 22924140.919 | 8.654      | 2648831.276 | N/A              | 968.39931pg/ml    | N/A    | N/A   |
| 30                           | 20196941.490 | 8.934      | 2260567.165 | N/A              | 1000.14155pg/ml   | N/A    | N/A   |
| 31                           | 22277135.870 | 9.103      | 2447197.670 | 1000.00000pg/ml  | 1019.27271pg/ml   | 1.93   | 0.000 |

There is no signature data to report.

C:\LCQ\Data\unrw 27417\Sat 0504 drugx 03

WD1

Page 6 of 6

## 指定处理方法中的报告模板

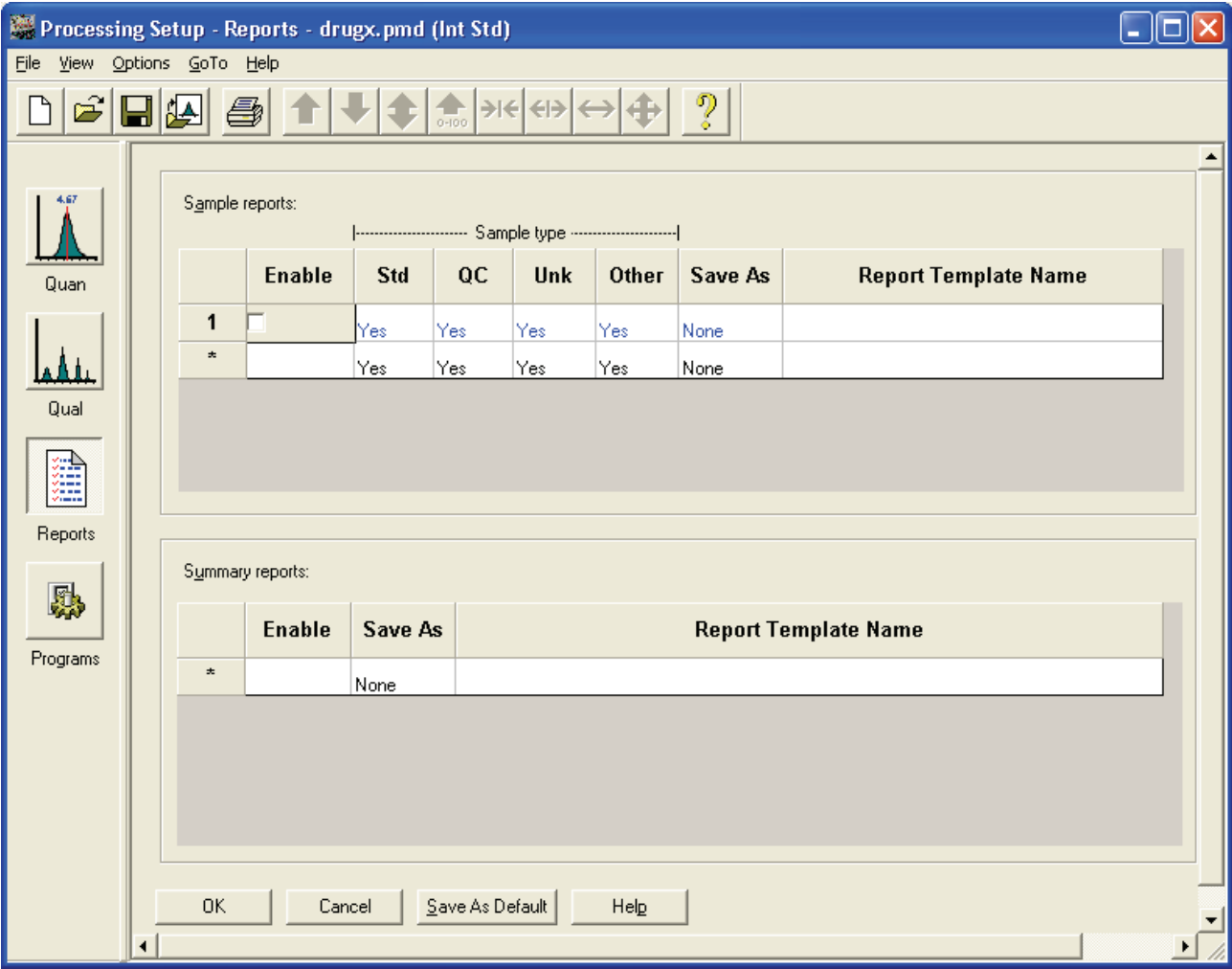
Xcalibur 数据系统包括一系列提供报告结果格式的报告模板。若要改变报告版式或者创建一个新模板，请使用 XReport 应用程序创建个人自定义的报告模板。更多有关创建自定义报告的说明，请参阅 *XReport User Guide* (*XReport 用户手册*)。

指定 Processing Setup （处理设置）的 Reports （报告）视图所用的报告模板。

将一个样品数据组与报告模板结合之后，预览结果，并执行下列程序：

- 1. 单击左窗格视图栏内的 。Reports 视图打开（请参阅图 43）。

图 43. Processing Setup 窗口的 Reports 视图



2. 在 Sample Reports（样品报告）表格中，单击 Enable（启用）列下的第一行。选择 **Enable** 复选框。
3. 双击 Save As（另存为）列下的第一行。Save As 对话框显示。若要将报告另存为一个 .doc 文件，选择 **Doc**。

数据系统将同一目录内的处理方法生成的报告另存为源数据文件和名称文件，其文件格式为 *data file name\_template name.xxx*，其中 data file name 为数据文件的名称，template name 为用于生成报告的模板名称，而且 .xxx 为指定文件类型的后缀（例如 .doc 或 .pdf）。如果从同一数据文件和模板生成了多个报告，XReports 会在后缀之前添加一个日期戳。

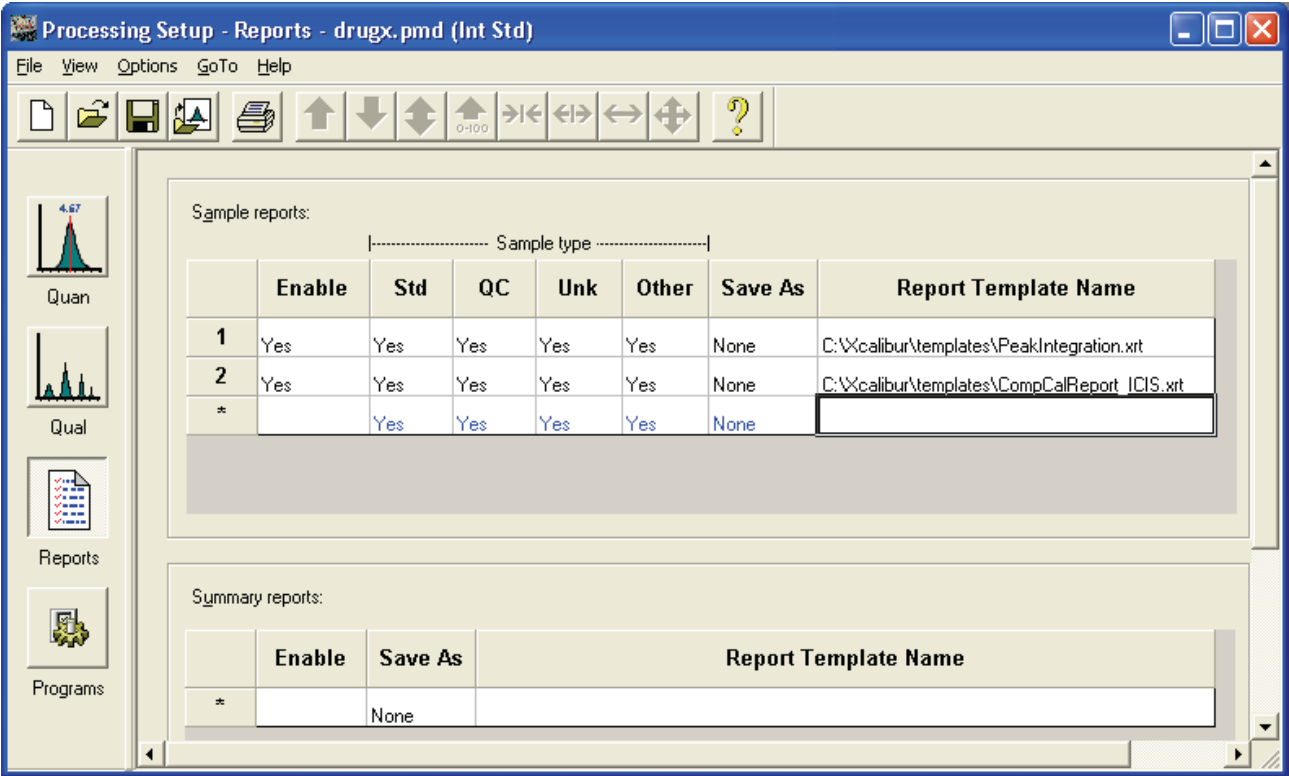
4. 在 Sample Reports（样品报告）表格中，双击 Report Template Name（报告模板名称）列下的第一行。

Browse for Sample Report Template（浏览样品报告模板）对话框显示。

5. 若要选择样品峰积分报告模板，请选择 **PeakIntegration.xrt**，然后单击 **Open**（打开）。
6. 在 Sample Reports 表格内，单击 Enable 列的第二行显示 Enable 复选框。选择 **Enable** 复选框。
7. 单击 Save As 列的第二行。Save As 对话框显示。若要将报告另存为一个 .doc 文件，选择 **Doc**。
8. 双击 Report Template Name 列的第二行。  
Browser for Sample Report Template 对话框显示。
9. 若要选择样品组分校正报告模板，请选择 **CompCalReport\_ICIS.xrt**，然后单击 **Open**（打开）。
10. 单击 **OK**（确定）保存设置。

报告视图请参阅图 44。

图 44. 选择峰积分报告和组分校正报告模板



## 打印报告

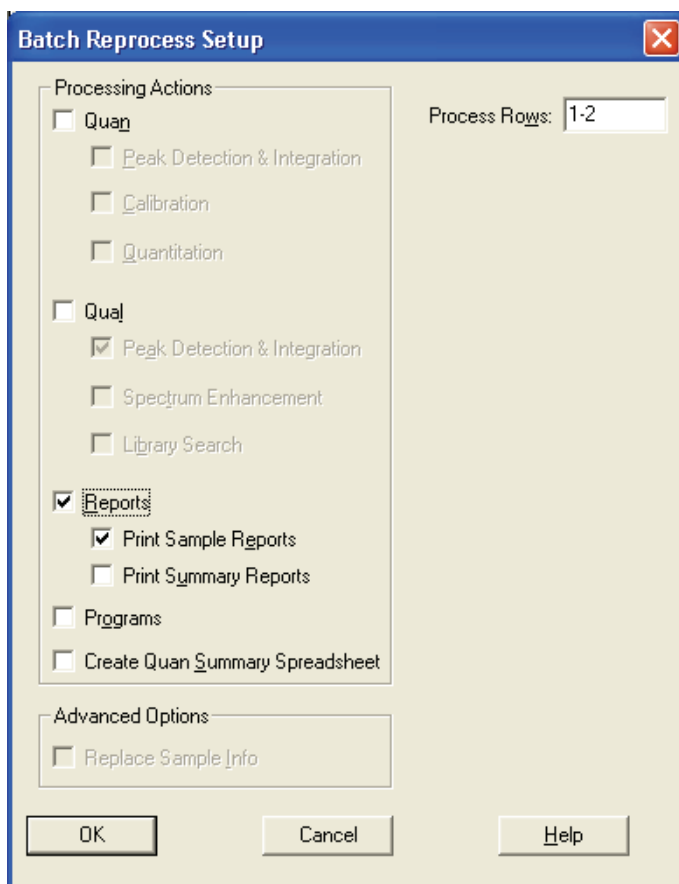
在批处理序列的同时，Sequence Setup（序列设置）利用在 Processing Setup（处理设置）的 Reports（报告）视图中指定的报告模板打印报告。

❖ 若要打印报告

1. 单击 Xcalibur 主页的 。Sequence Setup 视图显示。
2. 若要打开 drugx\_example.sld 序列（如果尚未打开），单击工具栏上的 （或选择 File（文件）> Open（打开））。Open 对话框显示。
3. 浏览目录找到 C:\Xcalibur\examples\methods\drugx\_example.sld。
4. 选择 drugx\_example.sld，然后单击 Open。drug\_example.sld 序列打开。
5. 选择 Actions（操作）> Batch Reprocess（批次重新处理）。Batch Reprocess Setup（批次重新处理设置）对话框打开（请参阅图 45）。



图 45. Batch Reprocess Setup 对话框显示打印报告的选项



6. 选择 **Reports**（报告）复选框（请参阅图 45）。选择 **Print Sample Reports**（打印样品报告）复选框。
7. 在 **Process Rows**（处理行）框内输入 1-2。
8. 单击 **OK**（确定）开始批处理和生成报告。数据系统打印序列中头两个数据文件的报告。

有关执行定量分析的更多信息，请参阅 the *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）。

有关 XReport 的更多信息，请浏览 the *XReport User Guide*（XReport 用户手册）。



## 系统配置和管理



## 配置和设置 Xcalibur 系统组分

若要配置和设置 Xcalibur 系统组分，请参阅下列内容。

### 目录

- [配置 Xcalibur 软件](#)
- [转换文件格式](#)
- [确认 Finnigan 安全服务器的属性](#)

## 配置 Xcalibur 软件

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框配置 Xcalibur 应用程序。利用对话框中的页面定义数据系统的数据位置、方法和报告模板；编辑客户信息；选择所需字体；选择错误处理选项。

若要配置 Xcalibur 软件，请执行下列程序：

1. [打开 Xcalibur Configuration 对话框](#)
2. [选择默认文件夹](#)
3. [更新客户信息](#)
4. [配置字体](#)
5. [选择默认峰检测算法](#)
6. [选择默认质量数选项](#)
7. [选择默认标记和比例选项](#)
8. [选择错误处理选项](#)
9. [定义数据组列表](#)

## 打开 Xcalibur Configuration 对话框

❖ 若要打开 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框

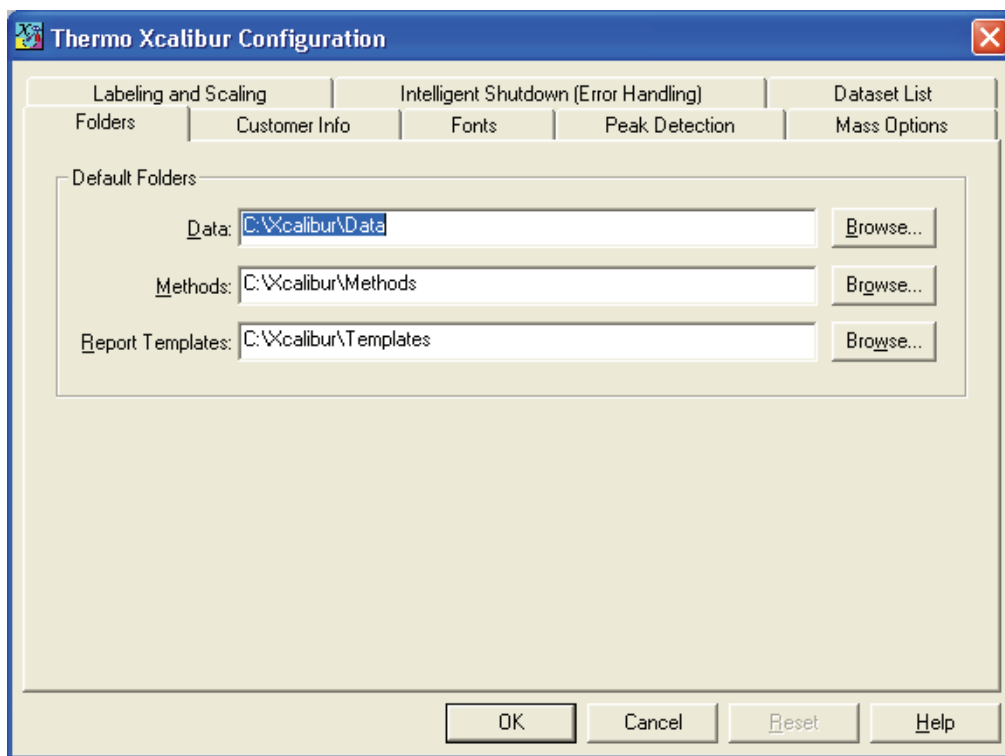
1. 从 Windows™ 桌面选择 **Start (开始) > Programs (程序) > Thermo Xcalibur > Xcalibur**。Xcalibur Home Page (Xcalibur 主页) 窗口打开。
2. 从 Home Page 窗口的 Roadmap (导航) 视图选择 **Tools (工具) > Configuration (配置)**。Xcalibur Configuration 对话框显示。

## 选择默认文件夹

❖ 若要选择 Xcalibur 默认文件夹

1. 单击 **Folders**（文件夹）选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Folders 页面显示（请参阅图 46）。

图 46. Folders 页面



2. 若要指定 Data（数据）的默认文件夹，单击 **Browse**（浏览）并选择文件夹。
3. 若要指定 Methods（方法）的默认文件夹，单击 **Browse**（浏览）并选择文件夹。
4. 若要指定 Report Templates（报告模板）的默认文件夹，单击 **Browse**（浏览）并选择文件夹。
5. 若要保存设置，单击 **OK**（确定）。

## 更新客户信息

Xcalibur Configuration（Xcalibur 配置）对话框的 Customer Info（客户信息）页面显示 Xcalibur MS 检测器的当前信息。如果尚未输入或者需要修改这些信息，请更新当前输入。

❖ 若要更新客户信息

1. 单击 **Customer Info** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Customer Info 页面显示（请参阅图 47）。

图 47. Customer Info 页面。

The image shows a screenshot of the 'Thermo Xcalibur Configuration' dialog box, specifically the 'Customer Info' tab. The dialog box has a blue title bar with the text 'Thermo Xcalibur Configuration' and a red close button. Below the title bar is a tabbed interface with the following tabs: 'Labeling and Scaling', 'Intelligent Shutdown (Error Handling)', 'Dataset List', 'Folders', 'Customer Info' (selected), 'Fonts', 'Peak Detection', and 'Mass Options'. The 'Customer Info' tab contains several text input fields: 'User Name:' with the value 'Thermo Fisher Scientific', 'Organization:' with the value 'Thermo Fisher Scientific', 'Address:' (empty), 'Voice Phone:' (empty), 'Fax:' (empty), and 'Email:' (empty). There is a 'Print User Info...' button below the 'Email' field. At the bottom of the dialog box are four buttons: 'OK', 'Cancel', 'Reset', and 'Help'.

2. 如果 Customer Info 页面的信息不完整或不正确，请输入新信息。
3. 若保存设置，单击 **OK**（确定）。

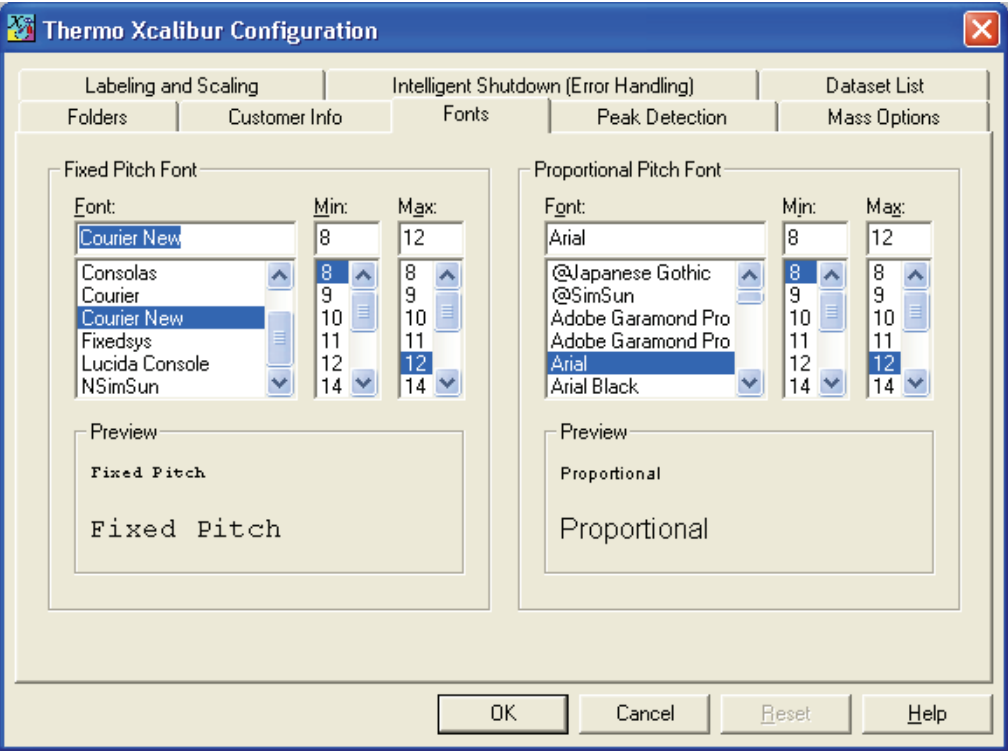
## 配置字体

Xcalibur 数据系统的网格图表使用固定间距的字体和比例字体。应用默认固定间距字体为 7-12 号的 Courier New。Xcalibur 默认比例字体为 7-12 号的 Arial。若要使用其他字体，字体风格或字体大小，请改变字体设置。

❖ 若要配置 Xcalibur 字体

1. 单击 **Fonts**（字体）选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Fonts 页面显示（请参阅图 48）。

图 48. Fonts 页面



2. [ 可选 ] 若要选择固定间距字体，请在 Fixed Pitch Font（固定间距字体）列表中选择一种字体。所选字体名称显示在列表顶部。
  - a. 在 Min（最小）列表中输入所选字体的最小尺寸。
  - b. 在 Max（最大）列表中输入所选字体的最大尺寸。
  - c. 在 Fixed Pitch Font 的 Preview（预览）区查看字体样本、最小字体（顶部）和最大字体（底部）。
3. [ 可选 ] 若要选择比例字体，请在 Proportional Pitch Font（比例间距字体）列表中选择一种字体。所选字体名称显示在列表顶部。
  - a. 在 Min（最小）列表中输入所选字体的最小尺寸。
  - b. 在 Max（最大）列表中输入所选字体的最大尺寸。



- c. 在 Proportional Pitch Font 的 Preview（预览）区查看字体样本、最小字体（顶部）和最大字体（底部）。

**注释** 在 Spectrum（谱图）列表视图中，若 Xcalibur 应用程序显示淡灰色的元素组成值，则关闭 Qual Browser（定性浏览器）并选择 **Xcalibur Roadmap**（Xcalibur 导航图）> **Tools**（工具）> **Configuration**（配置）显示 Configuration 页面。选择 Fonts 选项卡，将所有字体大小设置为最小 10 号。

4. 若要保存设置，单击 **OK**（确定）。

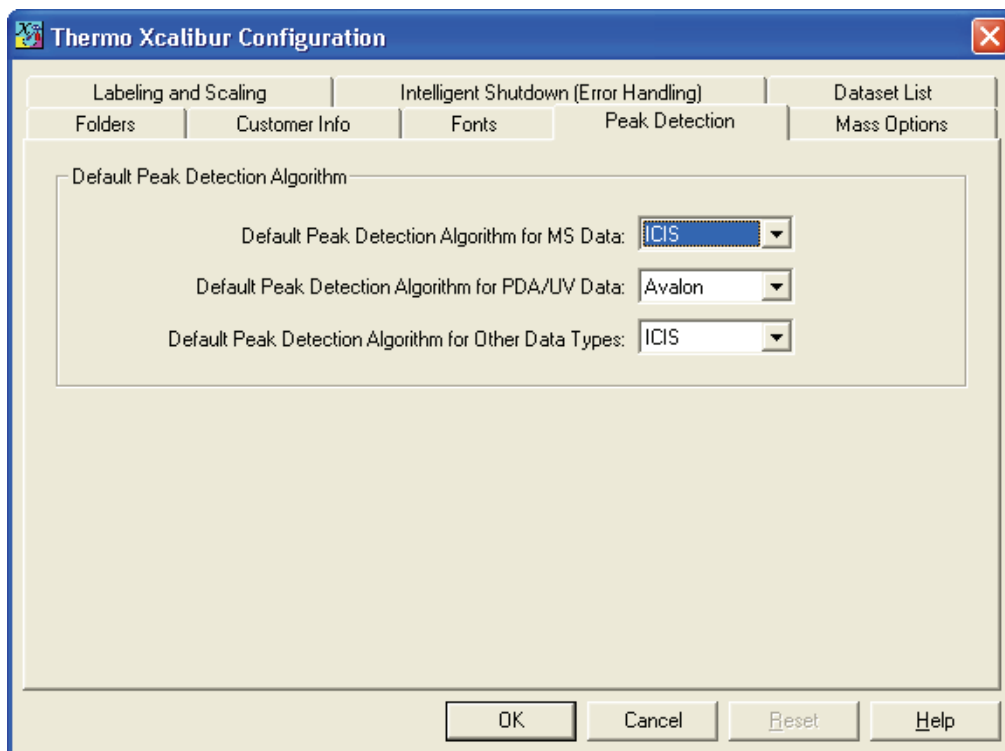
## 选择默认峰检测算法

利用 Xcalibur Configuration（Xcalibur 配置）对话框的 Peak Detection（峰检测）页面查看或改变所有数据类型的默认峰检测算法。

### ❖ 若要指定峰检测参数

1. 单击 **Peak Detection** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Peak Detection 页面显示（请参阅图 49）。

图 49. Peak Detection 页面



2. 若要选择 MS 数据的默认峰检测算法，从相应列表中单击一个算法名称。
3. 若要选择 PDA/UV 数据的默认峰检测算法，从相应列表中单击一个算法名称。
4. 若要选择其他数据类型的默认峰检测算法，从相应列表中单击一个算法名称。
5. 若要保存设置，单击 **OK**（确定）。

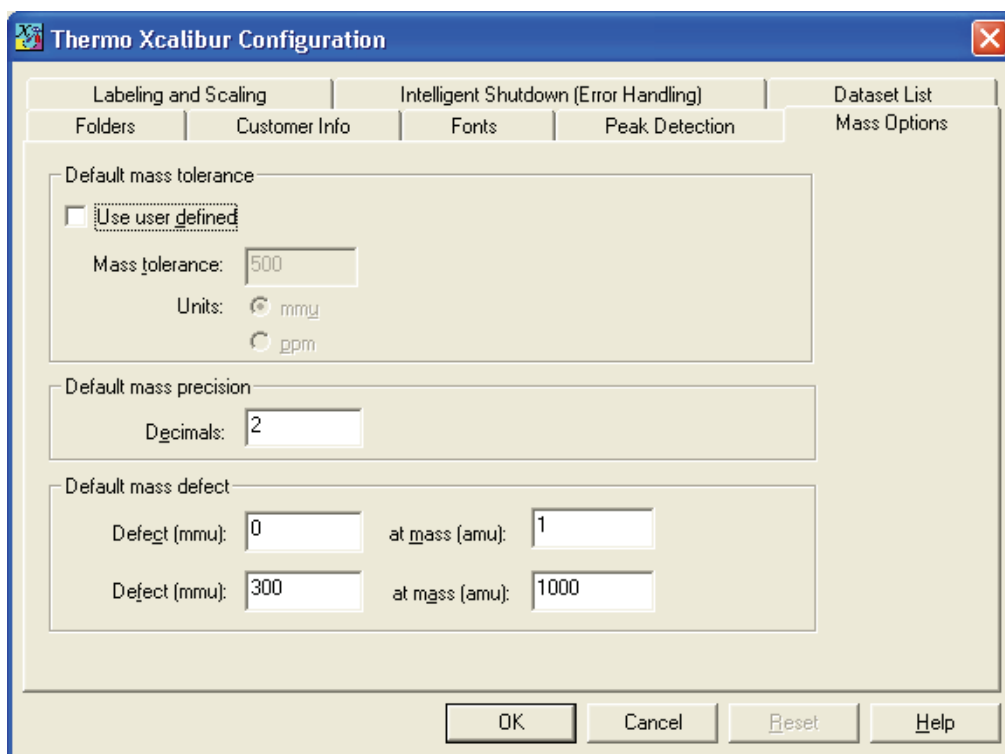
## 选择默认质量数选项

使用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Mass Options (质量数选项) 页面查看或指定影响质量数计算和库检索的默认参数值。

### ❖ 若要指定质量数选项

1. 单击 **Mass Options** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Mass Options 页面显示 (请参阅图 50)。

图 50. Mass Options 页面



2. 指定质量数容许偏差的默认值:
  - a. 选择 Default Mass Tolerance (默认的质量数容许偏差) 中的 **Use User Defined** (使用用户定义值) 复选框。这样可以激活 Mass Tolerance 框。
  - b. 在 Mass Tolerance 框内输入 0.1 至 50000 的数值。
  - c. 从 Units (单位) 选项中选择 **mmu** (毫原子质量单位) 或者 **ppm**。
3. 若要指定默认质量数精度值, 在 Decimals (小数点) 框内输入 0 至 5 的数值。
4. 若要指定质量数低端值的默认质量亏损, 在第一个 Defect (亏损) 框内输入 -2500 至 2500 的数值。在第一个 At Mass (位于质量数) 框内输入 0 至 10000 的数值。

例如, 在 Defect 框和 At Mass 框内分别输入 50 和 200。
5. 若要指定质量数高端值的默认质量亏损, 在第二个 Defect (亏损) 框内输入 -2500 至 2500 的数值。然后在第二个 At Mass (位于质量数) 框内输入 0 至 10000 的数值。

例如, 在 Defect 框和 At Mass 框内分别输入 1000 和 5000。
6. 若要保存设置, 单击 **OK** (确定)。

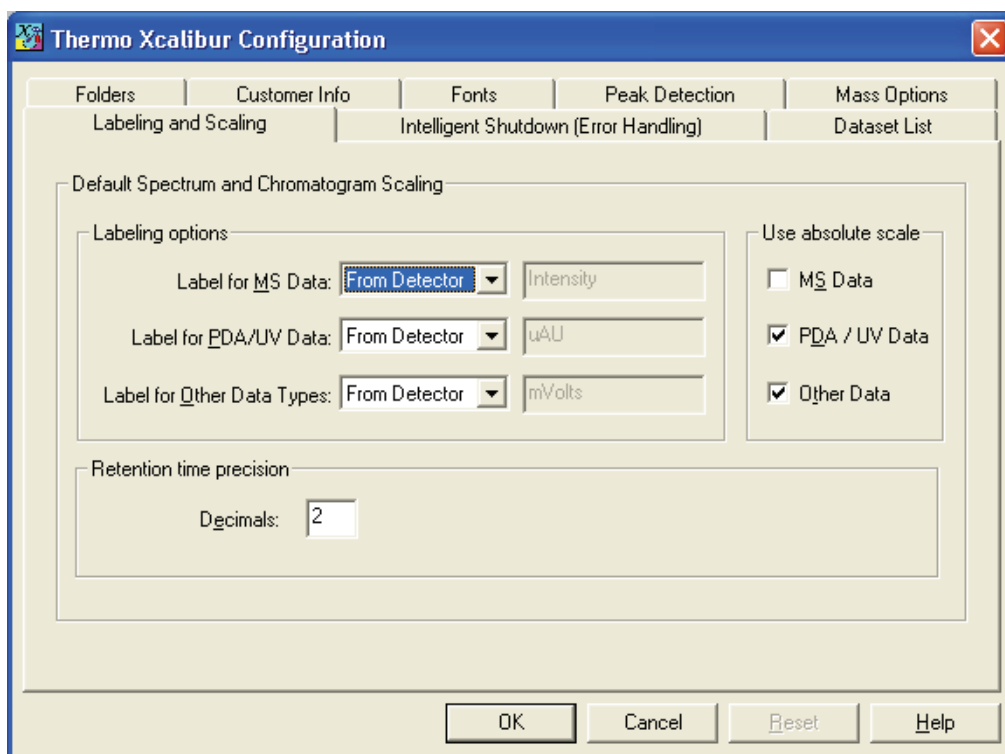
## 选择默认标记和比例选项

使用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Labeling and Scaling (标记和比例) 页面查看或更改质谱和色谱图的 Y 轴标记和比例的默认参数值。

### ❖ 若要指定 labeling and scaling 参数

1. 单击 **Labeling and Scaling** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 **Labeling and Scaling** 页面显示 (请参阅图 51)。

图 51. Labeling and Scaling 页面



2. 在 Labeling Options 区域, 若要指定 Label for MS Data (MS 数据的标记), 从相应列表选择 **From Detector** (来自检测器) 或者 **Custom** (自定义)。  
如果选择 **Custom**, 在邻近框内输入一个标记。
3. 若要指定 Label for PDA/UV Data (PDA/UV 数据的标记), 从相应列表选择 **From Detector** 或者 **Custom**。  
如果选择 **Custom**, 在邻近框内输入一个标记。
4. 若要指定 Label for Other Data Types (其他数据类型的标记) (除了 MS 和 PDA/UV), 从相应列表选择 **From Detector** 或者 **Custom**。  
如果选择 **Custom**, 在邻近框内输入一个标记。
5. 在 Use Absolute Scale (使用绝对比例) 区域选择 Y 轴上显示的数据类型。
6. 在 Retention Time Precision (保留时间精度) 区域, 输入报告保留时间时的小数点位数。
7. 若要保存设置, 单击 **OK** (确定)。

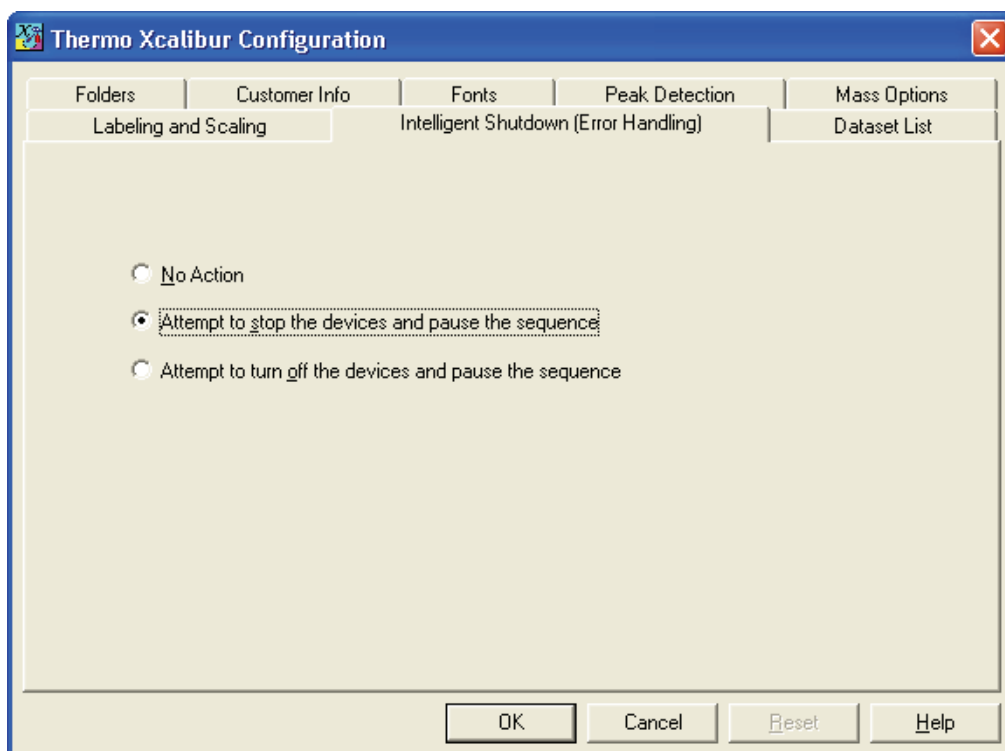
## 选择错误处理选项

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Intelligent Shutdown (Error Handling) (智能关闭 (错误处理)) 定义当数据采集过程中发生错误时, 数据系统如何响应。

### ❖ 若要更改错误处理选项

1. 单击 **Intelligent Shutdown** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Intelligent Shutdown (Error Handling) 页面显示 (请参阅图 52)。

图 52. Intelligent Shutdown (Error Handling 页面)



2. 选择 error handling 选项 **Attempt to Stop the Devices and Pause the Sequence** (尝试停止设备并暂停序列)。
3. 若要保存设置, 单击 **OK** (确定)。

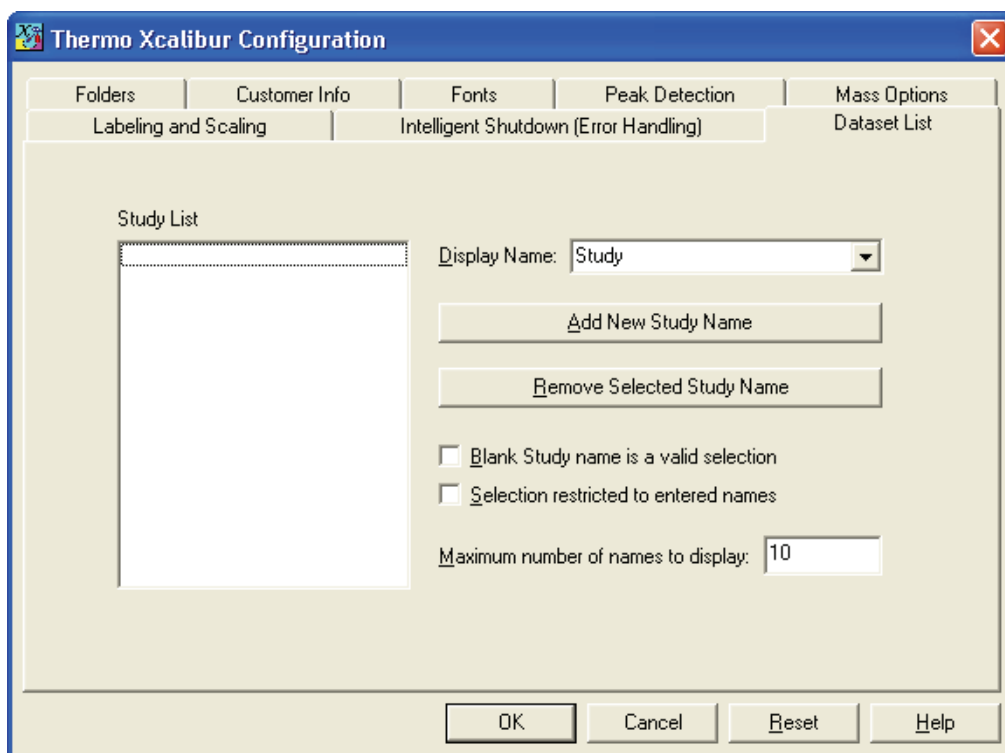
## 定义数据组列表

作为管理员, 利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Dataset List (数据组列表) 页面定义或编辑数据组名称列表, 当用户选择数据组时可以从这个列表中作出选择。

### ❖ 若要定义数据组名称列表

1. 单击 **Dataset List** 选项卡。Xcalibur Configuration 对话框的 Dataset List 页面显示 (请参阅图 53)。

图 53. Dataset List 页面



2. 若要指定数据组所用数据系统的名称，可从 Display Name（显示名称）列表选择一个名称，或者执行下列操作为列表添加新名称：
  - a. 单击 **Add New Study Name**（添加新研究名称）。Create New Dataset Name（创建新数据组名称）对话框打开。
  - b. 在框内键入新名称，然后单击 **OK**（确定）。新名称将显示在左侧的 Study List（研究列表）中。

**注释** 如果将显示名称更改为 Dataset 以外的名称，数据系统会重新命名该页面的参数，以便反映出该更改。

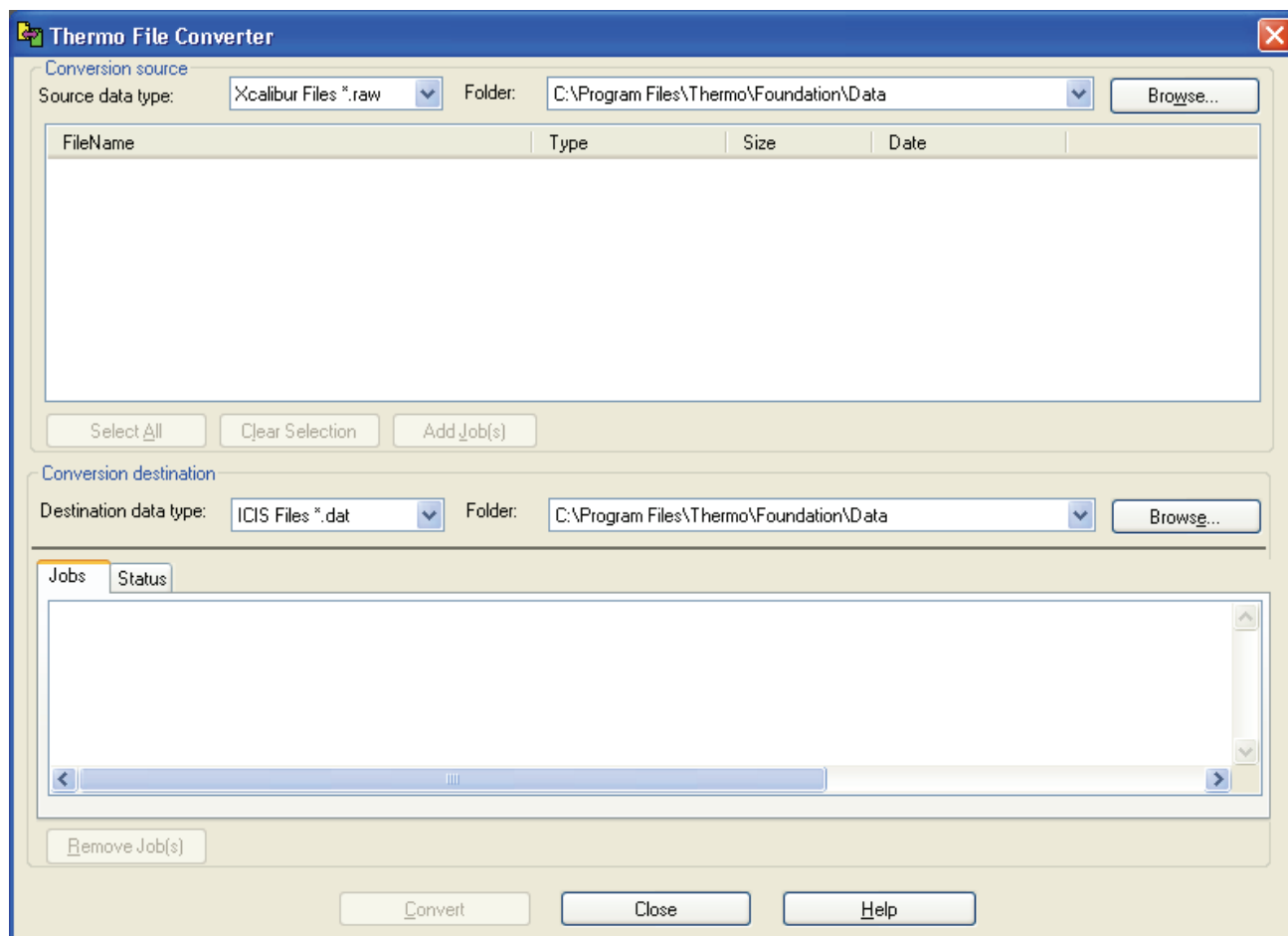
3. 如有必要，重复步骤 a 和 b 为列表添加更多名称。
4. 若要删除列表中的名称，请在 Study List 中选择名称并单击 **Remove Selected Study Name**（删除所选研究名称）。
5. 若要指定一个空白研究名称是否是有效选择：
  - 选择 **Blank Dataset Name is a Valid Selection**（空白数据组名称是有效选择）复选框，当系统要求用户在 Dataset Name Selector（数据组名称选择器）对话框中选择一个数据组时，允许用户选择空白名称。
  - 清除复选框则要求用户选择一个有效的数据组。
6. 若要指定选择是否被限制于输入的名称：
  - 选择 **Selection Restricted to Entered Names**（被限制于输入名称的选择）复选框，指定只有 Study List 内的名称出现在 Dataset Name Selector 对话框内。
  - 清除这个复选框则指定 Study List 内的名称以及来自数据库的名称均出现在 Dataset Name Selector 对话框内。

7. 若要指定显示在 Dataset Name Selector 对话框内的最大名称数量，请在 Maximum Number of Names to Display（显示名称的最大数量）框内输入一个数值。
8. 若要保存设置，单击 **OK**（确定）。

## 转换文件格式

- ❖ 若要利用 Thermo File Converter（Thermo 文件转换器）对话框转换某个文件的格式
  1. 从 Home Page（主页）窗口的 Roadmap（导航）视图选择 **Tools**（工具）> **File Converter**（文件转换器）。Thermo File Converter 对话框显示（请参阅图 54）。

图 54. Thermo File Converter 对话框



2. 若要指定待转换的源文件类型，请从 Conversion Source（转换源）区域的 Source data type（源数据类型）列表中选择。

每次仅可批处理一种源数据类型和一种目标数据类型的文件。可以在不同批次中执行其他数据类型的转换。

3. 若要选择待转换的文件，单击 **Browse**（浏览）并选择包括文件的文件夹。

文件显示在 Conversion Source 列表内。Xcalibur 应用程序显示 File Name（文件名）、Type（类型）、Size（大小）和 Date（日期）。

4. 利用下列选项之一创建待转换的文件列表：

- 若要转换 Conversion Source 列表内的所有文件，单击 **Select All**（选择全部），然后单击 **Add Job(s)**（添加任务），所有文件出现在底部 Conversion Destination（转换目标）区域的 Jobs（任务）页面上。
- 若要转换 Conversion Source 列表内的一个文件，选择该文件并单击 **Add Job(s)**（添加任务）。
- 若要删除 Conversion Source 列表内的一个文件，选择该文件并单击 **Clear Selection**（清除选择）。

5. 若要指定待转换的目标文件类型，请从 Conversion Destination（转换目标）区域的 Destination data type（目标数据类型）列表中选择。

6. 若要选择一个目标文件夹，请单击 **Browse** 搜索一个用来存放转换文件的文件夹。  
源文件仍然位于其原始目录内。

7. 若要使用 Jobs 页面的文件批处理功能开始转换，请单击 **Convert**（转换）。

可以单击 Conversion Destination 区域的 Status（状态）选项卡监测进程。

Xcalibur 应用程序继续文件转换过程，直到完成所有文件的转换，并将这些文件保存在指定的目标文件夹内。

- 若要将源文件转换为其他格式，请转向步骤 8。
- 如果正在转换文件，请转向步骤 9。

8. 若要转换另一种源文件数据类型，单击 **Clear Selection** 清除 Conversion Source 列表内显示的所有文件。

重复步骤 2-7 转换另一种源数据类型。

9. 若要关闭 File Converter 对话框，则单击 **Close**（关闭）。

## 确认 Finnigan 安全服务器的属性

某个应用程序（例如安装在 Thermo Foundation 应用程序上的 Xcalibur 数据系统）的授权和审查功能取决于两个系统服务：Finnigan Security Server（Finnigan 安全服务器）和 Thermo Foundation DatabaseService（Thermo Foundation 数据库服务）。当安装应用程序时，这些服务也已经完成了安装。无论用户何时重启工作站，这些服务也会自动开始。

跟随 Xcalibur 软件一起安装的 Finnigan Security Server 的主要功能称作用户验证。如果某些事件需要验证，Finnigan Security Server 会验证输入的用户名和密码。

**注释** 更多有关 Thermo Foundation DatabaseService 的信息，请参阅 *Thermo Foundation Administrator Guide*（Thermo Foundation 管理员手册）。

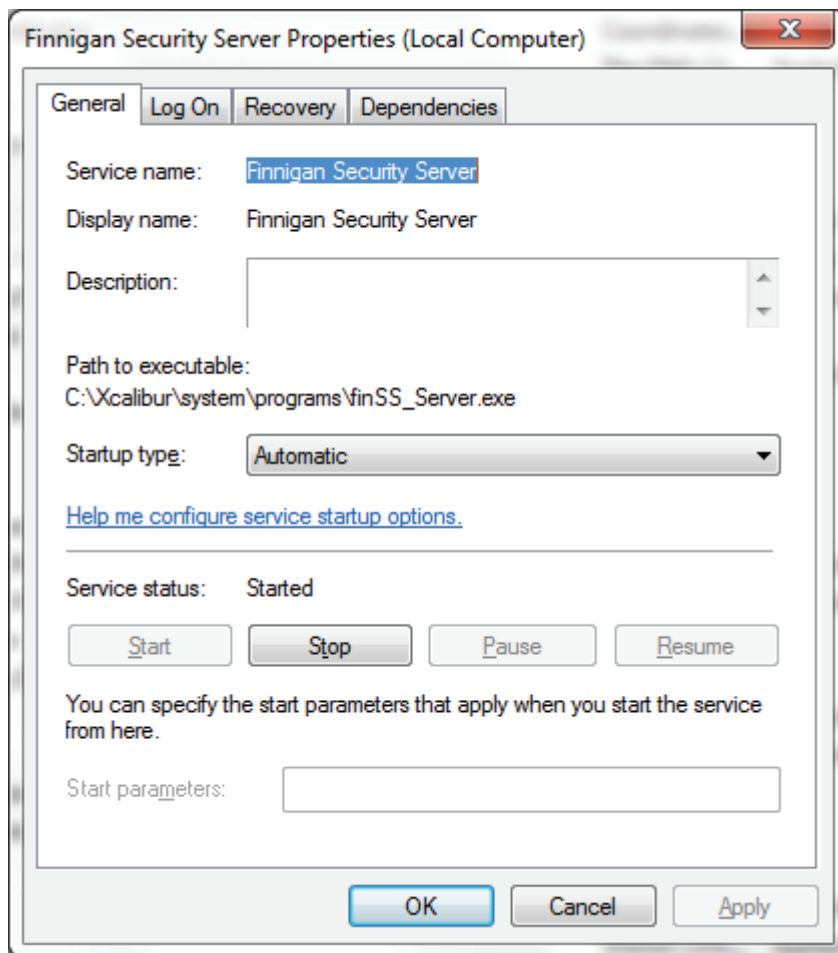
❖ 若要确认 Finnigan Security Server 的属性设置正确

1. 若要打开 Services 窗口，请从计算机的任务栏选择 **Start**（开始）> **Control Panel**（控制面板），双击 **Administrative Tools**（管理工具），然后双击 **Services**（服务）。

2. 确认 Finnigan Security Server 的性质：

- a. 右击 Finnigan Security Server，然后从快捷菜单中选择 Properties（属性）。Finnigan Security Server Properties 对话框显示（请参阅图 55）。

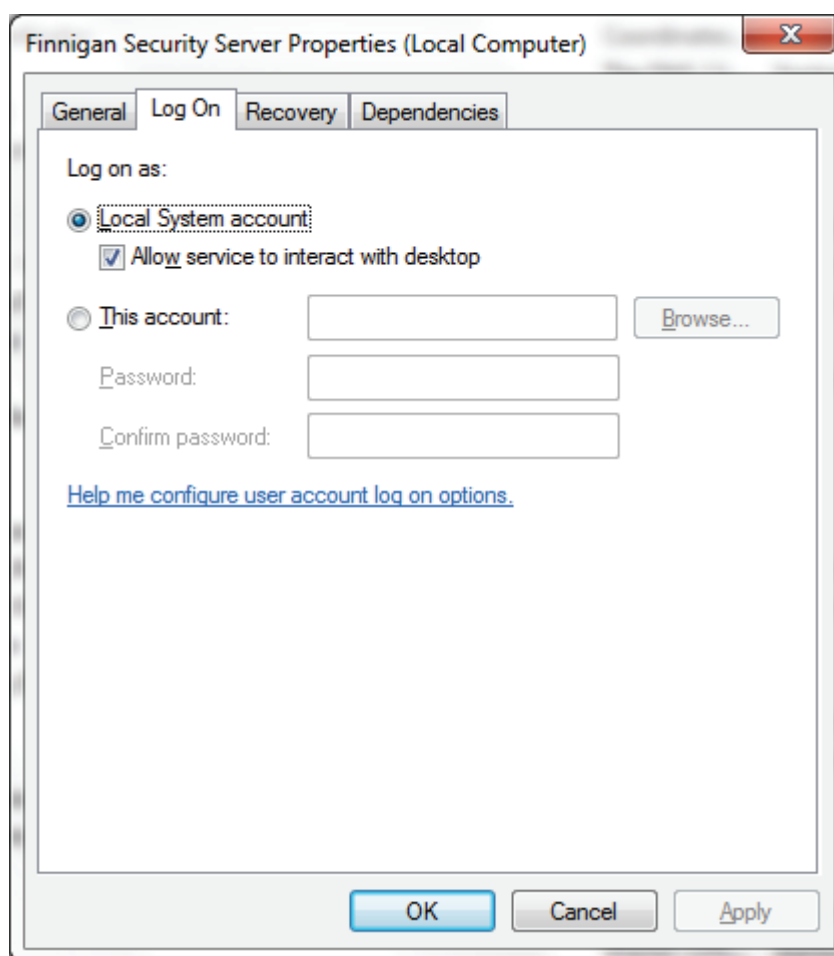
图 55. General（常规）页面



- b. 在 General 页面上的 Startup Type（启动类型）列表内选择 Automatic（自动）。
- c. 确认 Service Status（服务状态）为 Started（已启动）。
- d. 单击 Log On（登录）选项卡显示 Log On 页面（请参阅图 56）。



图 56. Log On 页面



- e. 在 Log On As（登录为）下面选择 Local System Account（本地系统账户）选项。
- f. 选择 Allow Service to Interact with Desktop（允许服务与桌面互动）复选框。
- g. 单击 OK（确定）关闭对话框。



## Xcalibur 系统管理参考

该附录提供配置和管理 Xcalibur 数据系统的参考信息。

### 目录

- [配置 Xcalibur 数据系统](#)
- [配置系统](#)
- [配置仪器](#)
- [Instrument Setup](#)

## 配置 Xcalibur 数据系统

在 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框页面上，输入 Xcalibur 数据系统的配置信息。

## Xcalibur Configuration 对话框

Xcalibur Configuration 对话框具有下列页面：

- [Customer Info 页面](#)
- [Dataset List 页面](#)
- [Folders 页面](#)
- [Fonts 页面](#)
- [Intelligent Shutdown \(Error Handling\) 页面](#)
- [Labeling and Scaling 页面](#)
- [Mass Options 页面](#)
- [Peak Detection 页面](#)

Customer Info 页面

使用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Customer Information (客户信息) 页面确认和更新下列 Xcalibur 软件许可信息。

表 3. Xcalibur 软件许可参数

| 参数                       | 说明                                            |
|--------------------------|-----------------------------------------------|
| User Name (用户名)          | 查看或更改 Xcalibur 许可协议的名称。若要改变用户名, 请以管理员身份登录计算机。 |
| Organization (单位)        | 查看或更改 Xcalibur 许可协议的单位。若要更改单位, 请以管理员身份登录计算机。  |
| Address (地址)             | 查看 Xcalibur 许可协议的单位。逗号分隔地址各个部分, 例如: 城市、省份和国家。 |
| Voice Phone (语音电话)       | 查看 Xcalibur 许可协议的语音电话号码。                      |
| Fax (传真)                 | 查看 Xcalibur 许可协议的传真号码。                        |
| Email (电邮)               | 查看 Xcalibur 许可协议的电邮地址。                        |
| Print User Info (打印用户信息) | 打印列出当前用户名、单位、地址 1、地址 2、语音电话号码和传真号码的报告。        |

Dataset List 页面

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Dataset List (数据组列表) 页面定义或编辑数据组名称列表, 当用户选择数据组时可以从这个列表中作出选择。只有管理员可以进入这个功能。

**注释** 当选择一个新的 Display Name (显示名称) 时, 该页面上的多个参数名会发生变化 (如下)。默认 Display Name 是 Dataset。当更改 Display Name 时, 下列四个参数会被重新命名: Dataset List (数据组列表)、Add New Dataset Name (添加新数据组名称)、Remove Selected Dataset Name (删除所选数据组名称) 和 Blank Dataset Name Is A Valid Selection (空白数据组名称是一个有效选择)。例如, 如果将 Display Name 从 Dataset 更改为 Study, 则参数 Dataset List 将变为 Study List。

表 4. Dataset List 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

| 参数                   | 说明                                                                                                                                                                                                    |
|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Dataset List         | 查看或更改已经输入的数据组名称。名称都保存在注册表中。若要为列表添加一个新的数据组名称, 单击 <b>Add New Dataset Name</b> 。                                                                                                                         |
| Display Name         | 查看或更改数据系统用于数据组的名称。可以输入新名称, 或者从列表中选择一个新名称。选项为 Dataset、Study 和 Job。<br><br>当更改 Display Name 时, 系统将重新命名本页以及其他地方的参数, 以反映出所做的修改。例如, 如果将 Display Name 从 Dataset 更改为 Study, 则参数 Dataset List 将变为 Study List。 |
| Add New Dataset Name | 输入一个新数据组名称。新数据组名称被添加到 Dataset List 中并保存在注册表内。                                                                                                                                                         |

表 4. Dataset List 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

| 参数                                      | 说明                                                                                                                                                        |
|-----------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Remove Selected Dataset Name            | 从 Dataset List 和注册表中删除当前所选名称。如果已经使用了这个名称, 这个操作不会从数据库中删除该名称。                                                                                               |
| Blank Dataset Name is a Valid Selection | 当要求用户选择一个数据组时, 设置允许用户选择一个空白名称。<br>清除复选框则要求用户选择一个有效的数据组。                                                                                                   |
| Selection Restricted to Entered Names   | 选择只在 Dataset Name Selector (数据组名称选择器) 对话框的 Dataset List 中列出的名称。<br>清除这个复选框则指定 Dataset List 内的名称以及来自数据库的名称均出现在 Dataset Name Selector 对话框内。                 |
| Maximum Number of Names to Display      | 查看或更改显示在 Dataset Name Selector 对话框内的数据组名称的最大数量。<br>在 Dataset Name Selector 对话框内, 首先显示 Dataset List 中的数据组名称。然后, 如允许, 最近保存在数据库内的数据组名称将用于填充列表, 直到显示了最大数量的条目。 |

## Folders 页面

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Folders (文件夹) 页面指定 Xcalibur 数据、方法和报告模板的默认位置。

表 5. Folders 页面参数

| 参数                             | 说明                                                                                                               |
|--------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Default Folders (默认文件夹)</b> |                                                                                                                  |
| Data                           | 查看或更改包括 Xcalibur 数据的文件夹的当前默认路径。若要更改路径, 则单击 Browse (浏览) 并选择保存数据的文件夹。当单击 OK (确定) 时, 数据系统将 Data 框内的默认路径改为新路径。       |
| Methods                        | 查看或更改包括 Xcalibur 方法的文件夹的当前默认路径。若要更改路径, 则单击 Browse 并选择保存数据的文件夹。当单击 OK 时, 数据系统将 Methods 框内的默认路径改为新路径。              |
| Report Templates               | 查看或更改包括 Xcalibur 报告模板的文件夹的当前默认路径。若要更改路径, 则单击 Browse 并选择保存报告模板的文件夹。当单击 OK 时, 数据系统将 Report Templates 框内的默认路径改为新路径。 |

## Fonts 页面

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Fonts (字体) 页面改变 Xcalibur 应用程序中的字体。

**注释** 如果数据系统以淡灰色显示元素成分值, 关闭 Qual Browser (定性浏览器) 并选择 Xcalibur Roadmap (Xcalibur 导航图) > Tools (工具) > Configuration (配置) 显示 Configuration 页面。选择 Fonts 选项卡, 将所有字体大小设置为最小 10 号。

表 6. Fonts 页面参数

| 参数                                              | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Fixed Pitch Font (固定间距字体)</b>                |                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Font                                            | 查看或更改 Xcalibur 数据系统当前使用的固定间距 (非比例) 字体; 该名称出现在最上方的 Font 框内。默认固定间距字体为 Courier New。Fixed Pitch Font 列表显示了数据系统中当前可用的所有固定间距字体。Fixed Pitch Fonts 为宽度固定的字符。若要改变字体, 可在 Font 列表中选择一种字体。数据系统在最上方的框内显示所选字体, 并在相关的 Preview (预览) 区域内显示预览字体。当单击 OK (确定), Xcalibur 数据系统在所有使用 Fixed Pitch Font 的地方改变为新字体。 |
| Min                                             | 查看或更改数据系统当前使用固定间距字体的最小字号; 该数值出现在最上方的 Min 框内。默认最小字号为 7 号。若要改变该数值, 可在列表中选择另一个字体大小。应用程序在最上方框内显示所选字号, 并在相关 Preview 区域的最上一行显示当前字体和所选字号。                                                                                                                                                        |
| Max                                             | 查看或更改数据系统当前使用固定间距字体的最大字号; 该数值出现在最上方的 Max 框内。默认最大字号为 12 号。若要改变该数值, 可在列表中选择另一个字体大小。应用程序在最上方框内显示所选字号, 并在相关 Preview 区域的最低一行显示当前字体和所选字号。                                                                                                                                                       |
| <b>Fixed Pitch Font Preview (固定间距字体预览)</b>      |                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Preview                                         | 查看下列例子: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 比例字体最小字号的示例文本。</li> <li>• 固定间距字体最大字号的示例文本。</li> </ul>                                                                                                                                                                                    |
| <b>Proportional Pitch Font (比例字体)</b>           |                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Font                                            | 查看或更改数据系统当前使用的比例字体; 该名称出现在最上方的 Font 框内。Xcalibur 应用程序的默认比例字体是 Arial。Proportional Pitch Font 列表显示了数据系统中当前可用的所有比例字体。Proportional Pitch Font 为宽度不固定的字符。例如, 最宽字符为 W。若要改变字体, 可在 Font 列表中选择一种字体。应用程序在最上方的框内显示所选字体, 并在相关的 Preview 区域内显示预览字体。当单击 OK, 数据系统在所有使用 Proportional Pitch Font 的地方改变为新字体。  |
| Min                                             | 查看或更改数据系统当前使用比例字体的最小字号; 该数值出现在最上方的 Min 框内。默认最小字号为 7 号。若要改变该数值, 可在列表中选择另一个字体大小。应用程序在最上方框内显示所选字号, 并在相关 Preview 区域的最上一行显示当前字体和所选字号。                                                                                                                                                          |
| Max                                             | 查看或更改数据系统当前使用比例字体的最大字号; 该数值出现在最上方的 Max 框内。默认最小字号为 12 号。若要改变该数值, 可在列表中选择另一个字体大小。应用程序在最上方框内显示所选字号, 并在相关 Preview 区域的最低一行显示当前字体和所选字号。                                                                                                                                                         |
| <b>Proportional Pitch Font Preview (比例字体预览)</b> |                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Preview                                         | 查看下列例子: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 比例字体最小字号的示例文本。</li> <li>• 固定间距字体最大字号的示例文本。</li> </ul>                                                                                                                                                                                    |

## Intelligent Shutdown (Error Handling) 页面

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Intelligent Shutdown (智能关闭) 页面指定当数据采集过程中发生错误时, Xcalibur 数据系统如何响应。

表 7. Intelligent Shutdown 页面参数

| 参数                                                                      | 说明                                                      |
|-------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| No Action<br>(无操作)                                                      | 当数据采集过程中发生错误时, 设置数据系统不采取行动并尝试继续分析下一个样品。                 |
| Attempt to Stop the Devices and Pause the Sequence<br>(尝试停止设备并暂停序列)     | 当数据采集过程中发生错误时, 设置数据系统在下次进样之前, 发送一个停止命令至所有设备, 并暂停采集序列。   |
| Attempt to Turn Off the Devices and Pause the Sequence<br>(尝试关闭设备并关闭序列) | 当数据采集过程中发生错误时, 设置数据系统在下次进样之前, 发送一个关闭设备命令至所有设备, 并停止采集序列。 |

## Labeling and Scaling 页面

使用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Labeling and Scaling (标记和比例) 页面输入质谱和色谱图中用于显示数据的标记和比例的默认值。

表 8. Labeling and Scaling 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

| 参数                                                                                                                                                                                                          | 说明                                                |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| Default Spectrum and Chromatogram Scaling (默认质谱和色谱图比例)                                                                                                                                                      |                                                   |
| Labeling Options (标记选项)                                                                                                                                                                                     |                                                   |
| 选择质谱和色谱数据显示的标记和比例默认值。如果当前打开方法或原始文件中没有其他可用数值时, 指定的默认值将被应用到整个 Xcalibur 数据系统。                                                                                                                                  |                                                   |
| 在 Processing Setup (处理设置) 和 Quan Browser (定量浏览器) 中, 例如, 当改变 Detector Type (检测器类型) 的值时, 数据系统使用标记和比例的默认值。在 Qual Browser (定性浏览器) 中, 当显示一个新质谱图、色谱图或者绘图, 或者当 Qual Browser 内布局文件 (.lyt) 不可用时, Xcalibur 应用程序使用默认值。 |                                                   |
| Label for MS Data                                                                                                                                                                                           | 指定 MS 数据 Y 轴标记的默认源。指定自定义 (用户定义) 标记或者来自检测器的标记。     |
|                                                                                                                                                                                                             | 如果选择自定义标记, 使用邻近框指定标记; 例如指定强度作为标记。                 |
| Label for PDA/UV Data                                                                                                                                                                                       | 指定 PDA/UV 数据 Y 轴标记的默认源。指定自定义 (用户定义) 标记或者来自检测器的标记。 |
|                                                                                                                                                                                                             | 如果选择自定义标记, 使用邻近框指定标记。例如, 指定 uAU 作为标记。             |

表 8. Labeling and Scaling 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

| 参数                                                                        | 说明                                                                                                            |
|---------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Label for Other Data Types                                                | 指定除了 MS 和 PDA/UV 的其他数据类型 Y 轴标记的默认源。指定自定义 (用户定义) 标记或者来自检测器的标记。<br><br>如果选择自定义标记, 使用邻近框指定标记。例如, 指定 mVolts 作为标记。 |
| <b>Use Absolute Scale (使用绝对比例)</b>                                        |                                                                                                               |
| 指定绝对比例作为质谱和色谱数据显示的默认值。如果当前打开方法或原始文件中没有其他可用数值时, 选择的值将被应用到整个 Xcalibur 数据系统。 |                                                                                                               |
| MS Data                                                                   | 指定默认 (总体) 设置对 MS 数据采用绝对比例。                                                                                    |
| PDA/UV Data                                                               | 指定默认 (总体) 设置对 PDA/UV 数据采用绝对比例。                                                                                |
| Other Data                                                                | 指定除了 MS 和 PDA/UV 的其他数据类型的默认 (总体) 设置。                                                                          |
| <b>Retention Time Precision (保留时间精度)</b>                                  |                                                                                                               |
| Decimals                                                                  | 指定报告保留时间时包括的小数点位数。该数值范围为 1-5。                                                                                 |

## Mass Options 页面

使用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Mass Options (质量数选项) 页面选择质量数容许偏差、质量数单位以及质量数精度的默认值。如果选择了 Use User Defined (使用用户定义) 复选框, 可以指定 Default Mass Tolerance (默认质量数容许偏差) 区域的参数默认值。Xcalibur 应用程序按照这些默认值采集和显示数据。如果没有选择 Use User Defined 复选框, 则应用程序使用数据系统中打开的原始文件中保存的质量数选项的值。

(利用 Processing Setup (处理设置)、Qual Browser (定性浏览器) 和 Quan Browser (定量浏览器) 的 Masses 对话框更改这些应用程序中容许偏差和精度的默认设置。)

表 9. Mass Options 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

| 参数                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                        |
|-------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Default Mass Tolerance</b> |                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Use User Defined              | 激活容许偏差和质量数单位的用户定义的默认设置。                                                                                                                                                                                                                                   |
| Mass Tolerance                | 指定质量数容许偏差的用户定义的默认设置。若要激活用户定义的设置, 可选择 <b>Use User Defined</b> 复选框。然后输入 0.1 至 50000 之间的某个值。<br><br>仅当创建新方法时, Xcalibur 应用程序会使用默认的质量数容许偏差。它不会修改任何已有方法 (例如, 处理方法或 Qual Browser 布局文件)。Qual Browser 不会使用默认的质量数容许偏差, 除非删除默认的布局文件。然后应用程序会利用这个质量数容许偏差值创建一个新的默认布局文件。 |
| Units                         | 指定处理质谱数据所用的默认单位。若要激活用户定义的设置, 可选择 <b>Use User Defined</b> 复选框。然后选择 mmu 或者 ppm 选项。                                                                                                                                                                          |



表 9. Mass Options 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

| 参数                                                                                                                                                                                         | 说明                                                                                                                                                                                                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Default Mass Tolerance (默认质量数容许偏差)</b>                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                     |
| Decimals                                                                                                                                                                                   | 指定默认的小数点位数 (小数点之后的位数), 数据系统利用这个值处理质谱数据。指定 0-5 范围内的小数点位数。小数点位数应用于整个 Xcalibur 应用程序。<br><br>仅当创建新方法时, 数据系统使用默认的质量数精度值。它不会修改任何已有方法 (例如, 处理方法或 Qual Browser 布局文件)。Qual Browser 不会使用默认的质量数精度值, 除非删除默认的布局文件。然后应用程序会利用这个质量数精度值创建一个新的默认布局文件。 |
| <b>Default Mass Defect (默认质量数亏损)</b>                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                     |
| 查看或更改库检索所用的参数, 这样可以校正某个分子内原子的实际质量数和名义整数质量数之间的差异。为较大的分子指定较大的质量数亏损值 (mmu), 因为总的来说, 大分子比小分子包含更多原子; 大分子需要更大的校正因子来估算数据系统用来计算质量数的线性函数。如果当前打开方法或原始文件中没有其他可用数值时, 指定的默认质量数亏损值将被应用到整个 Xcalibur 应用程序。 |                                                                                                                                                                                                                                     |
| Defect (mmu)                                                                                                                                                                               | 指定质量数亏损的默认值 (mmu)。在第一个框内指定较低质量数范围的较小值, 在第二个框内指定较高质量数范围的较大值。                                                                                                                                                                         |
| At Mass (amu)                                                                                                                                                                              | 指定默认质量数, 数据系统将在这个质量数下, 将指定的质量亏损值应用于质量数计算。在第一个框内指定较小质量数, 在第二个框内指定较大质量数。                                                                                                                                                              |

## Peak Detection 页面

利用 Xcalibur Configuration (Xcalibur 配置) 对话框的 Peak Detection (峰检测) 页面选择一个峰检测算法用作不同数据类型的默认算法。利用当前所选的 Xcalibur 默认峰检测算法创建所有新的处理设置方法。可以随时返回 Peak Detection 页面改变 Xcalibur 默认峰检测算法。在 Default Peak Detection Algorithm (默认峰检测算法) 区域中指定不同数据类型的默认算法。

表 10. Peak Detection 页面参数

| 参数                                                                                             | 说明                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| <b>Default Peak Detection Algorithm</b>                                                        |                                                                 |
| Default Peak Detection Algorithm for MS Data                                                   | 选择 ICIS、Genesis 或 Avalon 作为 MS 数据的默认峰检测算法。                      |
| Default Peak Detection Algorithm for PDA/UV Data                                               | 选择 ICIS、Genesis 或 Avalon 作为 PDA/UV 数据的默认峰检测算法。                  |
| Default Peak Detection Algorithm for Other Data Types<br>(Data types other than MS and PDA/UV) | 选择 ICIS、Genesis 或 Avalon 作为其他数据类型 (除了 MS、PDA 或 UV 数据) 的默认峰检测算法。 |

## 配置系统

Xcalibur 数据系统提供下列系统配置对话框：

- [Add Programs to Tool Menu 对话框](#)
- [Add Tool 对话框](#)
- [Comment 对话框](#)
- [Customize Toolbar 对话框](#)
- [Dataset Name Selector 对话框](#)
- [Thermo File Converter 对话框](#)
- [File Save - Audit Trail 对话框](#)
- [File Summary Information 对话框](#)
- [Password 对话框](#)
- [Print Selection 对话框](#)
- [Select Directory/Select Data Directory 对话框](#)
- [Supervisor Permission 对话框](#)
- [View Audit Trail 对话框](#)
- [Spectrum Ranges 对话框](#)

### Add Programs to Tool Menu 对话框

利用 Add Programs to Tool Menu（为工具菜单添加程序）对话框从工具菜单中添加或删除应用程序，并调整菜单顺序。

表 11. Add Programs to Tool Menu 对话框参数（第 1 页，共 2 页）

| 参数                          | 说明                                                                                                                           |
|-----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Menu Contents<br>（菜单内容）     | 查看已经添加到工具菜单中的当前工具（程序）列表名称。当选择 Tools 菜单时会出现这些名称。可以使用 Add Programs to Tool Menu 对话框内的 Add、Remove、Move Up、Move Down 按钮编辑当前程序列表。 |
| Menu Text（菜单文本）             | 查看或更改 Menu Contents 框内所选的工具（程序）名称。若要改变名称，请在 Menu Text 框内输入新名称。                                                               |
| Program（程序）                 | 输入想要添加到 Tools 菜单中的工具（程序）路径和文件名，或者单击 Browse（浏览）选择路径和文件名。                                                                      |
| Arguments（自变量）              | 添加命令行自变量                                                                                                                     |
| Initial Directory<br>（初始目录） | 查看或更改数据系统用来找到 Menu Contents 框内所选工具（程序）的路径。若要改变路径，请在 Initial Directory 框内输入新路径。                                               |
| Close（关闭）                   | 保存所有更改并关闭当前页或对话框。                                                                                                            |
| Add（添加）                     | 为 Tools 菜单添加一个工具（程序）。                                                                                                        |
| Remove（删除）                  | 从工具列表中删除 Menu Contents 框内所选的工具（程序）名称。                                                                                        |

表 11. Add Programs to Tool Menu 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

| 参数             | 说明                                                                   |
|----------------|----------------------------------------------------------------------|
| Move Up (上移)   | 选择一个工具, 使其在 Menu Contents 框内的当前工具 (程序) 序列中向上移。这是当选择 Tools 菜单时显示的序列。  |
| Move Down (下移) | 选择一个工具, 使其在 Menu Contents 框内的当前工具 (程序) 序列中向下移。这在选择 Tools 菜单时当前显示的序列。 |

## Add Tool 对话框

使用 Add Tool 对话框指定想要添加到 Tools 菜单中的程序路径。

表 12. Add Tool 对话框参数

| 参数      | 说明                                                           |
|---------|--------------------------------------------------------------|
| Program | 输入想要添加到 Tools 菜单中的工具 (程序) 路径和文件名, 或者单击 Browse (浏览) 选择路径和文件名。 |
| Browse  | 找到一个已有的文件。                                                   |

## Comment 对话框

当尝试执行或者进入某个要求注释才能继续的操作或者功能时, Comment (注释) 对话框打开。

表 13. Comment 对话框参数

| 参数           | 说明                                  |
|--------------|-------------------------------------|
| Your Comment | 在此框内输入注释。注释将显示在 Audit Log (检查日志) 中。 |

## Customize Toolbar 对话框

使用 Customize Toolbar (自定义工具栏) 对话框修改工具栏。可以添加或移除许多菜单命令的按钮, 或者改变按钮的顺序。

**注释** 仅在 Sequence Setup (序列设置)、Qual Browser (定性浏览器) 以及 Quan Browser (定量浏览器) 中可以使用该功能。在 Qual Browser 中无法自定义 Amplify (放大) 工具栏。

表 14. Customize Toolbar 对话框参数

| 参数              | 说明                                             |
|-----------------|------------------------------------------------|
| Categories (类别) | 查看工具栏中可用的菜单类别。选择一种菜单列表查看该类别的命令列表和按钮 (如果工具栏上有)。 |
| Commands (命令)   | 查看每个菜单类别相关的命令, 以及工具栏上相关的按钮 (如果可用)。             |
| Buttons (按钮)    |                                                |
| Close (关闭)      | 保存所有更改并关闭当前页或对话框。                              |
| Reset (重置)      | 将当前选项的设置重置为选择设置时所显示的值。Reset 命令按钮仅在框内有效。        |

Dataset Name Selector 对话框

利用 Dataset Name Selector（数据组名称选择器）对话框从预定义的名称列表中选择一个数据组。所有数据库的条目被集合到这个数据组中。每个应用程序在标题栏内显示数据组名称。显示格式为：**Dataset:Name**，Dataset 是管理员定义的名称，Name 是所选的名称。例如，Dataset:Pharmco 或者 Study:Pharmco。

如果管理员为数据组选择了另一个名称，则该对话框的标题可能不同。例如，此标题可能为 Study Name Selector 或者 Job Name Selector。

表 15. Dataset Name Selector 对话框参数

| 参数                             | 说明                                                                                                                                                                                                                    |
|--------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Dataset Name List<br>(数据组名称列表) | 显示预定义数据组名称列表。当对话框打开时，预定义的数据组名称列表显示顺序为：<br><br>1. 最近使用的数据组名称显示在列表顶部。<br><br>2. 显示来自 Configuragtion 对话框的 Dataset List 页面的数据组名称。<br><br>3. 如果系统设置允许，最近保存在数据库中的数据组名称将填充列表，直到达到了最大条目数。<br><br>4. 如果允许空白名称，[Blank] 将出现在列表中。 |
| Button（按钮）                     |                                                                                                                                                                                                                       |
| New（新建）                        | 输入一个新的数据组名称并将其保存在数据库中备用。新数据组名称将出现在 Dataset Name List 中。                                                                                                                                                               |

Thermo File Converter 对话框

利用 Thermo File Converter（Thermo 文件转换器）对话框将一种数据文件类型转换为另一种数据文件类型。

注释

- Xcalibur 数据系统目前不支持所有的互换组合。当出现不支持的转换请求时，系统会发布一个信息。
- 并非所有格式都具有相同的数据字段。数据系统仅转换匹配的数据字段，一般不会转换仪器方法信息。
- 还可以从下列两个位置运行 XConvert.exe 从而转换文件：从 Home Page 窗口的 Sequence Setup 视图 Run Sequence（运行序列）对话框的 Pre Acquisition 或者 Post Acquisition 运行命令行，或者从 Processing Setup 窗口的 Programs 视图中的 Run Sequence 对话框的 Program 或 Macro Name 运行命令行。

Xcalibur 数据系统为下列文件类型提供相互转换：

表 16. 数据文件类型的文件相互转换 （第 1 页，共 2 页）

| 文件类型     | 文件扩展名 |
|----------|-------|
| Xcalibur | *.raw |
| ICIS     | *.dat |

表 16. 数据文件类型的文件相互转换 （第 2 页，共 2 页）

| 文件类型     | 文件扩展名 |
|----------|-------|
| GCQ      | *.ms  |
| Magnum   | *.ms  |
| ANDI     | *.cdf |
| AutoMass | *.spa |
| MassLab2 | *.raw |
| LaserMAT | *.*   |

## ❖ 若要转换一个文件

1. 在 **Thermo File Converter** 对话框内选择源目录和目标目录，以及转换类型。
2. 单击 Convert（转换）。数据系统自动执行文件转换并创建一个新文件。Status（状态）页面显示每个任务的转换状态。

表 17. Thermo File Converter 对话框参数 （第 1 页，共 3 页）

| 参数                             | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|--------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Conversion Source（转换源）</b>  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Source Data Type<br>（源文件类型）    | <p>查看待转换文件的数据类型。Conversion Source 区域内的 Folder（文件夹）列表中的所有文件显示在 Conversion Source table（转换源表格）中。可以从 Source Data Type（源数据类型）列表中选择下列数据类型，并将其转换为其他数据类型：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Xcalibur 文件 (*.raw)</li> <li>• ICIS 文件 (*.dat)</li> <li>• GCQ 文件 (*.ms)</li> <li>• Magnum 文件 (*.ms)</li> <li>• ANDI 文件 (*.cdf)</li> <li>• Automass 文件 (*.spa)</li> <li>• Mass Lab 2 文件 (*.raw)</li> <li>• Lasermat 文件 (*.*)</li> </ul> <p>从 Destination Data Type（目标数据类型）列表中选择源数据类型。</p> |
| Folder（文件夹）                    | 查看或更改待转换源文件的路径。列表包括最近选择的所有路径。单击 Conversion Source 区域的 Browse（浏览）选择其他路径的源文件。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| Conversion Source table（转换源表格） | 查看 Folder 列表内指定目录中的文件名称、类型、大小和日期，以及 Source Data Type 列表中指定的类型。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Browse（浏览）                     | <p>选择包括待转换文件的文件夹，并点击 OK（确定）。数据系统显示 Folder 列表中文件夹的路径，而且之前的路径也保留在 Folder 列表中。</p> <p>如果所选文件夹不包括 Source Data Type 列表中指定类型的文件，则在 Conversion Source table 中不会显示任何条目。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Select All（全选）                 | 选择显示在 Conversion Source table 中的所有文件。数据系统突出显示所有文件。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |

表 17. Thermo File Converter 对话框参数 （第 2 页，共 3 页）

| 参数                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Clear Selection<br>(清除选择)     | 清除当前所选的文件。<br><br>仅当在 Conversion Source table 中选择一个或多个文件时，该按钮才会被激活。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Add Job(s)<br>(添加任务)          | 将指定的转换任务添加到 Conversion Destination（转换目标）区域的 Jobs（任务）页面中。每个文件转换被视作一个独立的任务。<br><br>下面是一个 Jobs 页面显示的任务举例，要将 .raw 格式的 Xcalibur 文件类型转换为 .cdf 格式的 ANDI 文件类型：<br><br>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.raw<br><br>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.cdf<br><br>仅当在 Jobs 页面中选择了—个或多个文件时，Add Job(s) 按钮才会被激活。如果已经在 Destination Data Type 列表中选择了一个有效的数据类型，并在 Conversion Destination 区域的 Folder 列表中选择了一个有效的目标时，才能添加一个任务。 |
| Conversion Destination（转换目标）  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Destination Data Type（目标数据类型） | 查看源数据文件转换后的数据类型。可从 Destination Data Type 列表中选择下列数据类型： <ul style="list-style-type: none"><li>• ICIS 文件 (*.dat)</li><li>• ANDI 文件 (*.cdf)</li><li>• 文本文件 (*.txt)</li></ul><br>软件在 Source Data Type 列表中选择源数据类型文件的数据类型。                                                                                                                                                                                            |
| Folder（文件夹）                   | 查看保存已转换文件的目标文件夹的路径。列表包括最近选择的所有路径。若要选择另一个文件夹保存已转换的文件，单击 Conversion Destination 区域中的 Browse。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Browse（浏览）                    | 选择保存已转换文件的文件夹并单击 OK。数据系统显示文件夹的路径，而且之前的路径也保留在 Folder 列表中。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Jobs（任务）页面                    | 该页面位于 Conversion Destination 区域，显示已经选择的转换任务。该任务显示格式如下：<br><br>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.raw<br><br>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.cdf<br><br>若要在运行转换之前删除某个任务，请选择该任务并单击 Remove Job(s)。                                                                                                                                                                                                             |
| Remove Job(s)<br>(删除任务)       | 删除那些从 Jobs 页面上选中的任务。必须在转换之前删除这个任务。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |



表 17. Thermo File Converter 对话框参数 (第 3 页, 共 3 页)

| 参数             | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|----------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Status (状态) 页面 | <p>该页面位于 Conversion Destination 区域, 显示已经完成了转换的任务状态。格式如下:</p> <p>成功将 C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.raw 转换为<br/>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.cdf</p> <p>该页面还显示未成功转换的任务状态。</p>                                                                                                   |
| <b>其他按钮</b>    |                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Convert (转换)   | <p>开始转换 Conversion Destination 区域的 Jobs 页面上显示的所有任务。该数据系统将已转换的文件保存在已显示的文件夹内。所有已经转换的文件状态显示在 Status 页面上。该页面位于 Conversion Destination 区域, 显示已经完成了转换的任务状态。格式如下:</p> <p>成功将 C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.raw 转换为<br/>C:\Xcalibur\examples\data\drugx_06.cdf</p> <p>该页面还显示未成功转换的任务状态。</p> |

**File Save - Audit Trail 对话框**

File Save - Audit Trail (文件保存 - 审查跟踪) 对话框要求在保存文件之前输入有关当前文件更改的信息。

表 18. File Save - Audit Trail 对话框参数

| 参数                  | 说明                                                            |
|---------------------|---------------------------------------------------------------|
| User (用户)           | 输入最多由 24 个字母组成的字符串, 用于识别操作人员。若要包括可识别操作员的参考文本, 请在 User 框内输入文本。 |
| Comment (注释)        | 查看并输入有关当前文件的有用信息。                                             |
| What Changed (更改信息) | 查看 Xcalibur 生成的有关当前文件更改的信息。该信息是 Xcalibur 审查系统的一部分。            |

当已经输入了以上审查信息时, 单击 Continue (继续) 保存文件。

如果尚未输入审查跟踪信息, 一个带有下列信息的对话框打开:

\*\*\*Please enter your user name and a description into the audit log.\*\*\*

必须在保存文件之前输入该信息。

File Summary Information 对话框

利用 File Summary Information（文件总结信息）对话框获得信息，并提供当前文件的参考信息。

表 19. File Summary Information 对话框参数

| 参数          | 说明                                                     |
|-------------|--------------------------------------------------------|
| Header（标题）  | 标题信息包括创建文件的日期和时间、其最近修改的日期和时间（如果有）、最近保存文件的用户名以及文件的保存次数。 |
| Comment（注释） | 查看或更改当前文件的说明以及已输入的任何注释。可以直接在框内编辑文本。                    |

Password 对话框

当尝试执行或进入某个管理员要求输入用户名和密码的操作或功能时，Password（密码）对话框会打开。

表 20. Password 对话框参数

| 参数                   | 说明                                                                              |
|----------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Name（名称）             | 在此框内输入用户名。                                                                      |
| Enter Password（输入密码） | 在此框内输入密码。                                                                       |
| Your Comment（注释）     | 在此框内输入注释。注释将显示在 Audit Log（检查日志）中。<br><br>仅当管理员要求输入注释来执行操作时，Your Comment 区域才会出现。 |

Print Selection 对话框

表 21. Print Selection 对话框参数

| 参数                                 | 说明                                                                        |
|------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| Select the Printing Output（选择打印输出） |                                                                           |
| Vial Position List（样品瓶位置列表）        | 按照数字顺序打印当前序列的样品瓶位置列表。样品瓶位置列表总结了每个样品瓶的序列设置。当正在设置自动进样器托盘样品瓶顺序时，样品瓶位置列表特别有用。 |
| All Columns（所有列）                   | 按顺序打印选中行。                                                                 |
| Displayed Columns Only（仅显示列）       | 打印当前序列目前显示的列。<br><br>若要更改序列中显示的列，请选择 Change（更改）> Column Arrangement（列布置）。 |



## Select Directory/Select Data Directory 对话框

利用 Select Directory（选择目录）或 Select Data Directory（选择数据目录）对话框来选择 Xcalibur 计算机硬盘上的一个目录。如果已经通过网络连接到另一台计算机，也可以在已连接的另一台计算机上选择一个目录。Xcalibur 数据系统在 Directory Selected（所选目录）文本下方显示当前路径。Xcalibur 方法目录的一个例子为 c:\Xcalibur\methods。

对话框标题栏上的标题文本会根据激活对话框时正在进行的操作而变化。

**表 22.** Select Directory 对话框参数

| 参数                              | 说明                                       |
|---------------------------------|------------------------------------------|
| Directory Selected（所选目录）        | 查看子目录和文件夹的文件名称组。选择包含想要打开的文件的目录。          |
| Drives（驱动器）                     | 查看计算机当前连接的所有硬盘驱动器的指定字母。可以通过连接网络进入额外的驱动器。 |
| Disk Space/No Chart（硬盘空间 / 无图表） | 查看默认路径硬盘驱动器上可用的空间量。                      |
| Network（网络）                     | 将计算机连接至已进入网络的任何驱动器上。                     |

## Supervisor Permission 对话框

当尝试执行或进入某个管理员要求输入用户名和密码的操作或功能时，Supervisor Permission（主管权限）对话框会打开。

**表 23.** Supervisor Permission 对话框参数

| 参数                   | 说明                                                                              |
|----------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Name（名称）             | 在此框内输入主管用户名。                                                                    |
| Enter Password（输入密码） | 在此框内输入主管的密码。                                                                    |
| Your Comment（注释）     | 在此框内输入注释。注释将显示在 Audit Log（检查日志）上。<br><br>仅当管理员要求输入注释来执行操作时，Your Comment 区域才会出现。 |

## View Audit Trail 对话框

**表 24.** View Audit Trail 对话框参数（第 1 页，共 2 页）

| 参数                 | 说明                                          |
|--------------------|---------------------------------------------|
| Date/Time（日期 / 时间） | 查看更改当前文件时的月 / 日 / 年和时间。该信息用于 Xcalibur 审查系统。 |
| User ID（用户身份号）     | 查看当前用户的用户身份号。该信息是 Xcalibur 审查系统的一部分。        |
| Logon ID（登录身份）     | 查看当前用户的登录身份。该信息是 Xcalibur 审查系统的一部分。         |

表 24. View Audit Trail 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

| 参数                     | 说明                                                 |
|------------------------|----------------------------------------------------|
| What Changed<br>(更改信息) | 查看 Xcalibur 生成的有关当前文件更改的信息。该信息是 Xcalibur 审查系统的一部分。 |
| User Comment<br>(用户注释) | 查看用户描述当前文件修改的注释。该信息是 Xcalibur 审查系统的一部分。            |

## Spectrum Ranges 对话框

利用 Spectrum Ranges (质谱范围) 对话框查看和编辑质谱图的质量数范围、时间和其他性质:

- 在 Qual Browser (定性浏览器) 中适用于当前质谱视图的所有图。
- 在 Home Page (主页) 上适用于 Real Time Plot (实时图表) 模式的当前质谱图。

还可以应用自动处理选项, 例如平滑和扣背景。该对话框包括两个页面:

- Ranges 页面、Spectrum Ranges 对话框
- Automatic Processing 页面, Spectrum Ranges 对话框

## 配置仪器

利用这些对话框配置仪器。

- [Instrument Configuration](#) 对话框
- [Out of Date Instrument Drivers Detected](#) 对话框

### Instrument Configuration 对话框

使用 Instrument Configuration（仪器配置）对话框查看所有可用设备，并利用下列控制参数配置想要安装的设备。

表 25. Instrument Configuration 对话框参数（第 1 页，共 2 页）

| 参数                                                                                               | 说明                                                                                                                                   |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Device Types（设备类型）</b>                                                                        |                                                                                                                                      |
| 查看或更改 Available Devices（可用设备）区域目前显示的设备类别。默认选项是 All（全部）。其他选项允许选择所有设备的子列表，如下所示：                    |                                                                                                                                      |
| All：显示所有可配置的 Xcalibur 设备。                                                                        |                                                                                                                                      |
| AS：显示所有可配置的自动进样器设备。                                                                              |                                                                                                                                      |
| Detector：显示所有可配置的检测器设备。                                                                          |                                                                                                                                      |
| GC：显示所有可配置的 Xcalibur 气相色谱设备。                                                                     |                                                                                                                                      |
| LC：显示所有可配置的 Xcalibur 液相色谱设备。                                                                     |                                                                                                                                      |
| MS：显示所有可配置的 Xcalibur 质谱设备。                                                                       |                                                                                                                                      |
| Other：显示其他所有可配置的 Xcalibur 设备。                                                                    |                                                                                                                                      |
| <b>Available Devices（可用设备）</b>                                                                   |                                                                                                                                      |
| 该区域显示在 Device Types（设备类型）列表中选择的所有可用设备类型的按钮。例如，如果 Device Types 列表中显示了 All，该区域显示所有 Xcalibur 可配置设备。 |                                                                                                                                      |
| Available Device（可用设备）                                                                           | 查看可用设备。Available Devices 区域中显示的每个按钮代表一种可以配置为 Xcalibur 设备的仪器。显示的按钮取决于 Device Types 列表中的选择。若要选择用于配置的 Xcalibur 设备，单击待配置设备所对应的按钮并单击 Add。 |
| Add（添加）                                                                                          | 将在 Available Devices 区域中选择设备添加到 Configured Devices（已配置设备）区域中。<br><br>某个设备必须出现在 Configured Devices 区域中，这样才能开始配置设备的过程。                 |
| <b>Configured Devices（配置设备）</b>                                                                  |                                                                                                                                      |
| 查看从 Available Devices 分组框所列设备中添加的所有设备。                                                           |                                                                                                                                      |
| 必须有某个设备出现在 Configured Devices 区域中，这样才能开始配置设备的过程。                                                 |                                                                                                                                      |

表 25. Instrument Configuration 对话框参数 （第 2 页，共 2 页）

| 参数                    | 说明                                                                                                                                                                                |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Remove （移除）           | 移除从 Configured Devices 区域中选择的设备。<br><br>Configured Devices 区域中显示的每个按钮代表一种即将配置为 Xcalibur 设备的仪器，但是配置完成与否不确定。若要配置 Configured Devices 区域列出的设备，单击该设备的按钮，然后单击 Configure （配置）打开相应的配置对话框。 |
| Configure （配置）        | 打开在 Configured Devices 区域所选设备对应的配置对话框。例如，若要配置一个 LCQ MS 检测器，请单击 Configured Devices 区域中的 LCQ，然后单击 Configure。LCQ Configuration 对话框打开。                                                |
| Other Controls （其他控制） |                                                                                                                                                                                   |
| Done （完成）             | 在配置 Xcalibur 设备之后关闭仪器配置对话框。                                                                                                                                                       |

Out of Date Instrument Drivers Detected 对话框

只有当选择 **Start > Programs > Thermo Foundation 2.0 > Instrument Configuration** 时，该对话框才会打开。Instrument Configuration 视图打开。如果 Xcalibur 软件不适用，XCalibur 会显示下列信息：

下列仪器的设备驱动程序与所安装的 Xcalibur 版本不兼容。必须在使用这些仪器之前安装当前的驱动程序。

如果该信息出现，请安装所列仪器的最新软件。该软件可能在 Xcalibur CD-ROM 上。运行适当的安装文件载入新软件。运行 CD-ROM 上相应仪器目录的 Setup.exe。

**注释** Xcalibur 数据系统和 inlets 文件会随附 XCalibur 软件的一个 CD-ROM 装运，XCalibur 软件用于 MS 检测器和质谱仪。当发布 Xcalibur 新版本之后，通常必须更新数据系统和 inlets 软件，以及所有配置仪器的 MS 检测器和质谱仪的软件。

表 26. Out of Date Instrument Drivers Detected 对话框参数

| 参数              | 说明                                                                                                              |
|-----------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Instrument （仪器） | 查看包含过时软件的已安装仪器。此时的安装说明列表中仪器的 Setup.exe 文件已经从 Xcalibur CD-ROM 的相应目录中运行过。                                         |
| In Use （使用中）    | 查看仪器列表中显示仪器的状态：In Use (Yes) 或者 Not In Use (blank)。使用中的设备出现在 Instrument Configuration 视图的 Configured Devices 区域。 |
| Version （版本）    | 查看显示在仪器列表同一行的仪器当前版本。确保待安装的版本比当前版本更新。                                                                            |

## Instrument Setup

在利用 Instrument Configuration（仪器配置）程序选择允许 Xcalibur 数据系统控制的仪器之后，利用 Instrument Setup（仪器设置）指定仪器设置。

- [Instrument Setup 窗口的 View Bar](#)
- [Instrument Setup 窗口的菜单](#)
- [Instrument Setup 窗口工具栏](#)

Instrument Setup 窗口显示了在 View（查看）栏上所选每个仪器所需的设置参数。这些参数可能包括已经配置过的自动进样器、色谱仪、MS 检测器、质谱仪、切换阀、注射泵、触点闭合定时序列，或者 Xcalibur 支持其他仪器。

可以创建新方法，修改已有方法，并保存方法文件。可以导入以前采集的数据文件，根据采集的数据帮助设置时间段和扫描事件。

还可以输入将显示在 Open（打开）对话框和所有方法打印品中的方法总结。所有更改由登录 ID 和用户本身审查，这样可以说明更改方法的原因。

**注释** 在使用 Instrument Setup 窗口之前，请使用 Instrument Configuration 程序选择实验仪器。

Instrument Setup 窗口显示利用 Instrument Configuration 对话框所选的所有 Xcalibur 仪器的图标。（请查看窗口左侧的 View 栏。）如果已配置的仪器数目超过了屏幕的显示容量，View 栏中将出现一个垂直的 View bar（滚动条），以便进入所有仪器。

如要进入某个特殊仪器的设置参数，请单击该仪器图标。Xcalibur 数据系统显示所选仪器的待设置参数的页面。

## Instrument Setup 窗口的 View Bar

这是位于 Instrument Setup 窗口左侧的垂直滚动条。它包括利用 Instrument Configuration 程序选择的每个仪器的图标。

## Instrument Setup 窗口的菜单

Instrument Setup 窗口包括下列菜单：

- [Instrument Setup 窗口的 File 菜单](#)
- [Instrument 菜单](#)
- [Help 菜单](#)

### File 菜单

下表列出了 File（文件）菜单命令名称及其详细说明。

## Instrument Setup 窗口的 File 菜单

表 27. File 菜单命令

| 命令                                                                                                | 说明                                                                                                                                         |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| New (新建)                                                                                          | 创建一个具有适当扩展名的新文件。                                                                                                                           |
| Open (打开)<br>    | 找到并打开已有文件。                                                                                                                                 |
| Save (保存)<br>    | 如果该文件已被保存, 打开 File Save - Audit Trail (文件保存 - 审查跟踪) 对话框, 这样可以输入当前文件的审查信息。                                                                  |
| Save AS (另存为)                                                                                     | 编辑用户和说明信息, 同时查看当前文件的标题信息。<br><br>当单击 OK 时, 数据系统打开 <a href="#">File Save - Audit Trail 对话框</a> , 输入当前文件的审查信息。当单击 Continue (继续) 时, 数据系统保存文件。 |
| Summary Information (摘要信息)                                                                        | 编辑用户和说明信息, 同时查看当前文件的标题信息。                                                                                                                  |
| Change Dataset Name (更改数据组名称)                                                                     | 从预定义名称列表选择一个数据组。<br><br>如果管理员为数据组选择了另一个名称, 则该菜单项的文本可能不同。例如, 这个菜单项可能为 Change Job Name。                                                      |
| Audit Trail (审查跟踪)                                                                                | 查看当前应用中对于数据文件所作的所有可追踪事件和更改。                                                                                                                |
| Print (打印)<br> | 打印方法。                                                                                                                                      |
| Print Preview (打印预览)                                                                              | 查看页面设置, 以便打印预览。                                                                                                                            |
| Print Setup (打印设置)                                                                                | 选择下列打印选项: 打印机、格式、定向以及单面或双面打印。                                                                                                              |
| Most Recently Used Files (最近使用文件)                                                                 | 查看最近使用的四个文件的路径和名称。这些文件位于 Exit (退出) 命令之上。可显示打开和已关闭的文件。单击一个已显示文件来加载它。如果所选文件已关闭, 则该命令打开此文件。                                                   |
| Exit (退出)                                                                                         | 关闭当前窗口。如果在从当前对话框中单击 OK 之前退出, 则数据系统会询问是否想要保存更改。                                                                                             |

## Instrument 菜单

Xcalibur 数据系统将与特定仪器控制有关的命令集中于 [Instrument] 菜单中。可以用鼠标或者键盘激活 [Instrument] 命令。

## Help 菜单

下表列出了 Help (帮助) 菜单下的命令名称及其详细说明。

表 28. Help 菜单命令

| 命令                                            | 说明                                                              |
|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| [Instrument] Help<br>(帮助)                     | 打开所选仪器的配置和设置帮助。                                                 |
| Instrument Setup Help<br>(仪器设置帮助)             | 打开 Xcalibur 帮助并显示 Instrument Setup 帮助窗口。                        |
| Help On Current Item<br>(当前项的帮助)              | 查看当前显示的 Instrument Setup 页面的帮助信息。                               |
| [Instrument] Contents<br>and Index<br>(目录和索引) | 查看所选仪器的目录、索引和寻找帮助页面。                                            |
| Xcalibur Help<br>(Xcalibur 帮助)                | 打开 Xcalibur 帮助。                                                 |
| Glossary (术语)                                 | 打开术语表。                                                          |
| How To Use Help<br>(如何使用帮助)                   | 打开说明如何使用 Help 查看器的帮助。                                           |
| About Instrument<br>Setup (关于仪器设置)            | 查看所安装 Instrument Setup 程序的版本号以及 Thermo Fisher Scientific 的版权通告。 |

## Instrument Setup 窗口工具栏

下表列出了 Instrument Setup 工具栏中的图标及其详细说明。

表 29. Instrument Setup 窗口的工具栏

| 按钮                                                                                                    | 说明                                                                                                                                                                                                                                                           |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  New (新建)          | 创建一个新的仪器方法                                                                                                                                                                                                                                                   |
|  Open              | 找到并打开一个已有的文件。                                                                                                                                                                                                                                                |
|  Save<br>(保存)      | 如果该方法已被保存，请输入当前文件的追踪信息并单击 Continue 保存文件。<br><br>如果方法尚未保存，单击 Save 打开 Save As 对话框。为仪器方法选择名称和位置。当单击 Save 时， <a href="#">File Summary Information 对话框</a> 打开。输入仪器方法的标题信息。当单击 OK 时， <a href="#">File Save - Audit Trail 对话框</a> 打开。请输入当前文件的追踪信息并单击 Continue 保存文件。 |
|  Print             | 打印仪器方法的参数。                                                                                                                                                                                                                                                   |
|  Home Page<br>(主页) | 查看 Home Page 窗口 - 导航图。                                                                                                                                                                                                                                       |
|  Help<br>(帮助)      | 查看当前显示的 Instrument Setup 页面的帮助信息。                                                                                                                                                                                                                            |





## 使用 Xcalibur 文件和样品

本教程分析 Xcalibur 数据系统提供的样品组示例，其保存路径为 C:\Xcalibur\examples\data directory。目标化合物为专利药物产品。位于圣何塞的赛默飞世尔科技应用实验室，利用 LC 和 MS/MS 技术在电喷雾电离（ESI）模式下采集数据。

该药物产品被称作 drugx。同位素标记的内标物（ISTD）用于药物定量。内标物 D4 是 drugx 的一种氘化类似物，这种化合物中具有四个氘原子，取代了 drugx 中的四个氢原子。

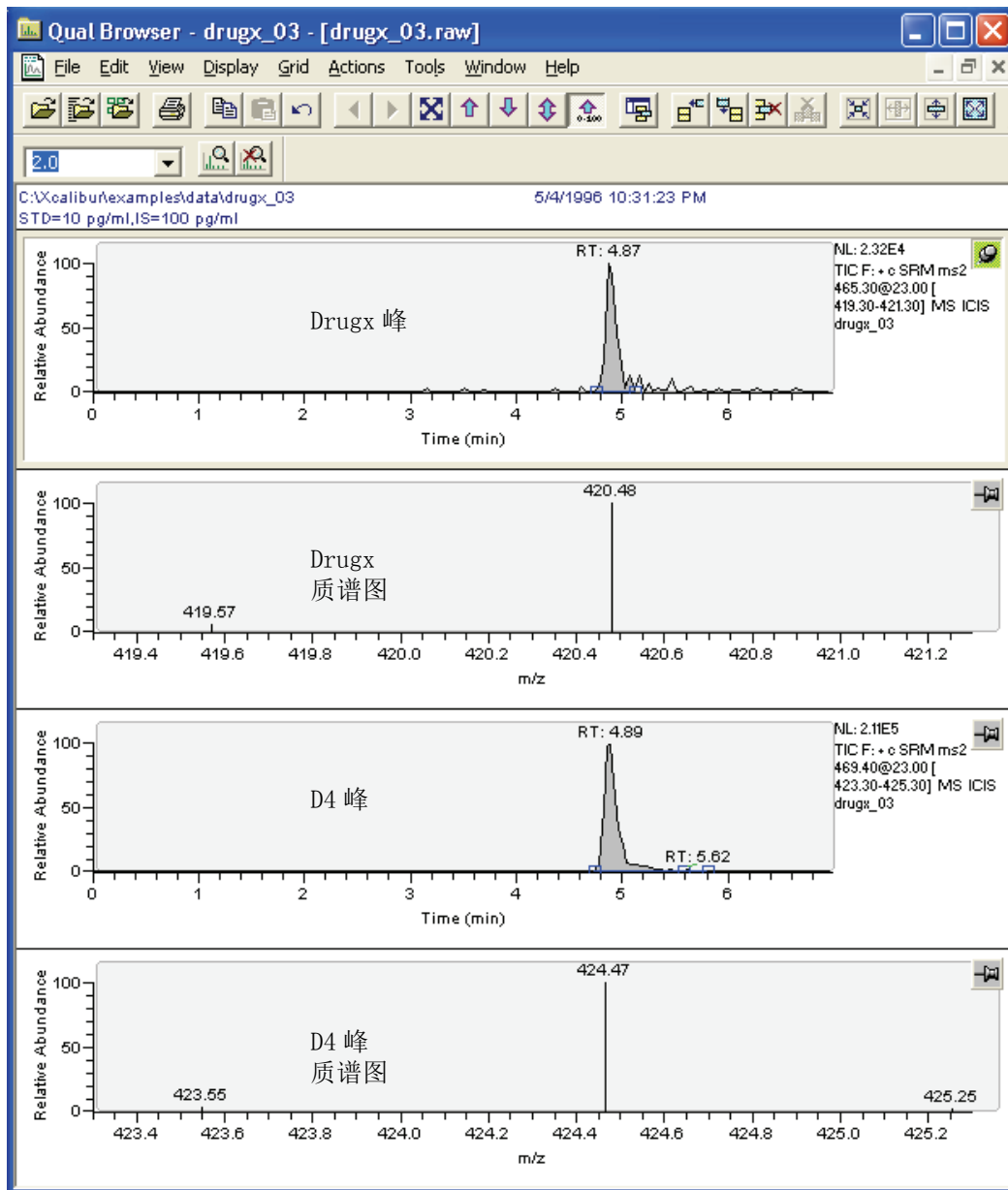
向人血浆中加入 drugx 标样制备所得九种不同浓度水平的校正标样，其浓度分别为 10、25、50、100、200、400、600、800 和 1000 pg/mL。在校正曲线的高端（1000 pg/mL）和低端（10 pg/mL）运行样品三次，而曲线中间的浓度只需运行样品一次。

向人血浆中加入 drugx 标样制备所得三种不同浓度水平的 QC 样品，其浓度分别为 10、400 和 1000 pg/mL。在每个 QC 浓度水平下运行样品 6 次。

向校正标样和 QC 标样中加标 100 pg/mL 的 D4 内标物。

图 57 显示一个 drugx.raw 数据文件的扫描过滤色谱图和质谱图。

图 57. drugx 和 D4 的色谱图和质谱图



## Home Page 参考指南

利用 Home Page（主页）窗口控制或进入所有 Xcalibur 应用程序功能和三个主要视图的功能。Xcalibur 功能的视图和控制均基于仪器各部分的当前配置。

### 目录

- [视图](#)
- [菜单](#)
- [工具栏](#)
- [Xcalibur 对话框](#)

## 视图

- [Information 视图](#)
- [导航图](#)
- [Real Time Plot 视图](#)

[Information 视图](#)具有两个选项卡，位于窗口的左侧。它可以与三个主视图中的任何一个同时显示。



[导航图](#)



[Sequence Setup](#)



[Real Time Plot](#)

可以从 Home Page 进入下列预采集程序：



[Instrument Setup](#)



[Processing Setup](#)

可以从 Home Page 进入下列采集后程序：



*Qual Browser* (定性浏览器)



*Quan Browser* (定量浏览器)



*Library Browser* (库浏览器)

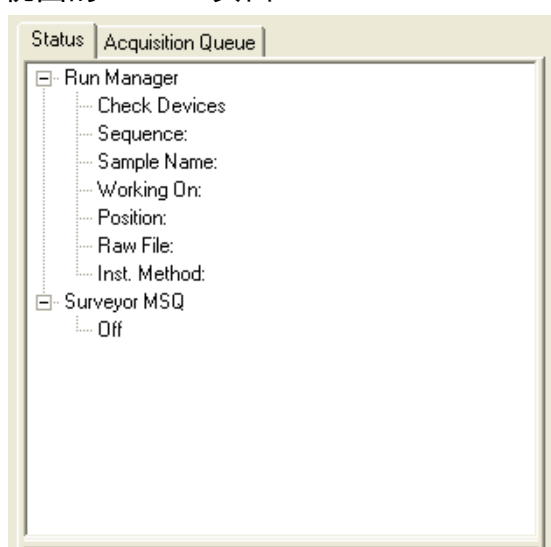
## Information 视图

Information（信息）视图包括下列两个页面：

- Information 视图的 Status 页面
- Information 视图的 Acquisition Queue 页面

**注释** Information 视图通常显示在 Home Page（主页）窗口左侧。如果没有显示该视图，则该视图已被关闭。

### Information 视图的 Status 页面



Information 视图的 Status（状态）页面提供 Xcalibur 数据系统状态的总结信息：

- Run Manager（运行管理器）
  - Check Devices（检查设备）
  - Sequence（序列）
  - Sample Name（样品名称）
  - Working On（工作位置）
  - Position（样品瓶位置）
  - Raw File（原始文件）
  - Instrument Method（仪器方法）
- Instruments（仪器）

每个 Xcalibur 配置的仪器读回状态显示在 Status 页面上。

当点击某个仪器时，Xcalibur 数据系统在 Run Manager 窗格下面的选项卡页上显示仪器的当前读数。在仪器控制软件中设置这些参数。

右击任何仪器显示一个快捷菜单，以便将仪器切换至 On（开）、Off（关）或 Standby（待机）模式。

## Information 视图的 Acquisition Queue 页面

Information 视图的 Acquisition Queue（采集队列）显示当前 Xcalibur 采集队列所需的所有序列。处理序列从最顶层序列开始，直至最底层序列结束，而在每个序列中，也从最顶层的序列行开始，直至最底层的序列行结束。Xcalibur 应用程序在处理样品的同时，将一个大写“X”符号置于每个已完成序列行的左侧。

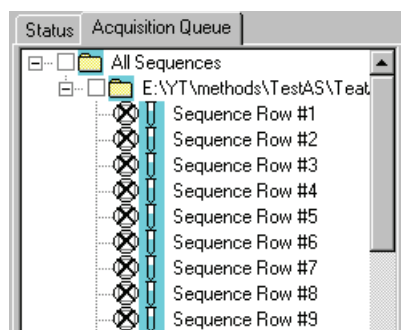
序列保存在 All Sequences（所有序列）文件夹中，序列行保存在其路径指定的 Sequence（序列）文件夹中，例如：C:\methods\Test.sld。

序列和序列行被组织为一个树形列表，显示目录为缩进式结构。点击 + 按钮扩展目录，或者点击 - 按钮收回目录。树形列表的每一行包括一个复选框，用来指示每行被选中与否。

### ❖ 若要从采集队列中移除选中的列表或序列行

1. 点击序列或序列行将其选中。Xcalibur 应用程序会将一个小写“x”符号放在序列或序列行的左侧复选框内。
2. 若要删除选中的序列或序列行，请按 DELETE 键。

下列例子显示已处理样品，每个编号序列行左侧的大写“X”符号表示已处理。



**注释** Acquisition Queue 视图通常显示在 Home Page（主页）窗口左侧。如果没有显示该视图，则该视图已被关闭。

## 导航图

利用 Home Page（主页）窗口的 Roadmap（导航图）扩展到 Xcalibur 数据系统的其他部分，从而选择其他视图。

从 Roadmap 视图中，点击工作区的任何按钮打开应用程序的窗口。然后点击菜单栏中的 Help（帮助）命令显示任何窗口的 Help: Information（信息）视图、Sequence Setup（序列设置）视图、Processing Setup（处理设置）、Qual Browser Reference（定性浏览器指南）、Quan Browser Reference（定量浏览器指南）和 Library Reference（库指南）。

还可以右击图标显示菜单。菜单包括命令，如 Go To（转至）和 Open Last Used Instrument Method（打开最近使用的仪器方法）。

### 菜单栏

File 菜单

View 菜单

GoTo 菜单

Actions 菜单

Tools 菜单

Help 菜单

## 工具栏

View Toolbar

Sequence Editor Toolbar

Roadmap Toolbar

Plot Toolbar

## Real Time Plot 视图

当仪器正在采集样品数据时，可以在 Home Page（主页）的 Real Time Plot（实时图表）视图中观察状态、质谱图和色谱图的实时更新。色谱图可显示为 UV 模拟信号离子流图、总离子流（TIC）色谱图、质量数范围色谱图，或者基峰色谱图。

Real Time Plot 视图是工作区中 Xcalibur 数据系统显示实时质谱图和色谱图的区域。可以利用菜单或工具栏命令更改原始文件的显示。利用 Plot（图表）工具栏控制信息显示在 Real Time Plot 视图中的方式。

## 菜单栏

Real Time Plot 视图菜单栏包括下列菜单：

File 菜单

View 菜单

Help 菜单

Actions 菜单

GoTo 菜单

## 工具栏

View Toolbar

Sequence Editor Toolbar

Roadmap Toolbar

Plot Toolbar

## 菜单

Xcalibur 主页具有下列菜单：单击某个项目，获得菜单上可用选项的详细说明。菜单和菜单命令会根据选择发生改变，比如是否显示 Roadmap（导航图）视图、Sequence Setup（序列设置）视图或 Real Time Plot（实时图表）视图。

- File 菜单
- Change 菜单
- View 菜单
- GoTo 菜单
- Edit 菜单
- Actions 菜单
- Tools 菜单
- Help 菜单

## File 菜单

Home Page（主页）窗口的 File（文件）菜单命令会根据显示的视图发生改变。

- [Roadmap 和 Real Time Plot](#)
- [Sequence Setup](#)

### Roadmap 和 Real Time Plot

表 30. File 菜单 - Roadmap 和 Real Time Plot 命令

| 命令                                                    | 说明    |
|-------------------------------------------------------|-------|
| Exit（退出）                                              | 关闭窗口。 |
| Home Page 窗口必须打开，以便操作 Xcalibur 数据系统并与 Xcalibur 各部分通讯。 |       |

### Sequence Setup

表 31. File 菜单 - Sequence Setup 命令（第 1 页，共 2 页）

| 命令                                                                                              | 说明                                                                                       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| New（新建）<br>  | 创建一个具有适当扩展名的新文件。                                                                         |
| Open（打开）<br> | 找到并打开一个已有的文件。                                                                            |
| Save（保存）<br> | 输入当前文件的跟踪信息，并在指定位置（驱动盘和目录）保存文件。在输入跟踪信息之后单击 <b>OK（确定）</b> 按钮。Save As 对话框显示。               |
| Save AS（另存为）                                                                                    | 命名一个新文件并输入文件总结信息，在指定位置（驱动盘和目录）保存文件。                                                      |
| Summary Information<br>（摘要信息）                                                                   | 查看、更改或删除有关当前文件的文件总结信息。                                                                   |
| Import Sequence<br>（导入序列）                                                                       | 定位（驱动盘和目录）并打开一个存储序列。                                                                     |
| Export Sequence<br>（导出序列）                                                                       | 指定当前序列的新位置（驱动盘和目录）。                                                                      |
| Change Dataset Name<br>（更改数据组名称）                                                                | 从预定义名称列表中选择一个数据组。<br>如果管理员为数据组选择了另一个名称，则该菜单项的文本可能不同。例如，这个菜单项可能为 Change Job Name（更改任务名称）。 |
| View Audit Trail<br>（查看审查跟踪）                                                                    | 查看当前应用中对于数据文件所作的的所有可追踪事件和更改。                                                             |



表 31. File 菜单 - Sequence Setup 命令 (第 2 页, 共 2 页)

| 命令                                                                                              | 说明                                                                                                   |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Print (打印)<br> | 打印当前序列中编号的样品瓶位置列表, 打印序列的选中行, 或者打印当前序列显示的列。                                                           |
| Print Preview<br>(打印预览)                                                                         | 打印预览。                                                                                                |
| Page Setup<br>(页面设置)                                                                            | 选择下列打印选项: 纸张、方向、页边空白以及打印机。                                                                           |
| Most Recently Used<br>Files<br>(最近使用文件)                                                         | 查看最近使用的四个文件的路径和名称。以上命令均位于 Exit (退出) 命令之上。Xcalibur 数据系统显示打开的和关闭的文件。单击一个已显示文件下载它。如果选中文件是关闭的, 数据系统将打开它。 |
| Exit (退出)                                                                                       | 关闭当前窗口。如果在从当前对话框中单击 <b>OK</b> 之前退出, 则数据系统会询问是否想要保存更改。                                                |

**注释** Instrument Setup (仪器设置) 和 Processing Setup (处理设置) 是具有各自菜单的独立窗口。

## Change 菜单

Change（更改）菜单只能在 Home Page（主页）窗口的 Sequence Setup（序列设置）视图图中使用。

**表 32.** Change 菜单命令

| 命令                                                                                                                  | 说明                                                                                                                                                                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| User Labels<br>(用户标签)<br>          | 改变 Sequence Setup View 上 5 个信息框的标题文字。默认标题的文字是 Study、Client、Laboratory、Company 和 Phone。                                                                                                                  |
| Tray Name<br>(托盘名称)                                                                                                 | 选择当前序列的自动进样器托盘类型。                                                                                                                                                                                       |
| Column Arrangement<br>(列排列)<br>    | 查看或隐藏特定序列的列。<br><br>❖ 若要选择显示序列的列<br><br>1. 从 Available Columns（可用列）列表中选择列。<br><br>2. 单击 <b>Add</b> （添加）。<br><br>❖ 若要移除显示序列的列<br><br>1. 从 Displayed Columns（显示列）列表中选择列。<br><br>2. 单击 <b>Remove</b> （移除）。 |
| Transfer Row Info<br>(转移行信息)<br> | 通过样品 ID 或位置匹配样品。                                                                                                                                                                                        |

**注释** Instrument Setup（仪器设置）和 Processing Setup（处理设置）是具有各自菜单的独立窗口。

## View 菜单

Home Page（主页）窗口的 View（查看）菜单命令会随着下列显示视图发生变化。

- [Real Time Plot](#)
- [Roadmap and Sequence Setup](#)

### Real Time Plot

表 33. View 菜单 - Real Time Plot 命令（第 1 页，共 3 页）

| 命令                                                                                                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Controls（控制）                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Lock Display<br>（锁定显示）                                                                                        | <p>锁定来自仪器的数据。当数据解锁时，可以使用 Home Page 窗口中工具栏或菜单命令按钮来检查之前采集的数据。当处于解锁模式时，XCalibur 数据系统会继续采集和保存所有数据。在解锁模式下，工具栏中的锁定图标会凸出，Lock Display 命令没有复选标记。</p> <p>若要重新将数据锁定在仪器中，选择 <b>Options（选项）&gt; Lock Display（锁定显示）</b>。</p> <p>当数据系统开始分析样品时，Home Page 窗口中的色谱图和质谱图为实时显示谱图，数据被锁定在仪器中。在锁定模式下，工具栏中的锁定图标会内凹，Lock Display 命令具有复选标记。</p> <p>可以在 Home Page 窗口工具栏中单击 ，从而将数据解锁或者锁定在仪器中。</p> <p>若要解锁来自仪器的数据，还可单击色谱图或质谱图。</p> |
| Reset Display<br>（重置显示）                                                                                       | <p>利用 Home Page 命令改变 Home Page 窗口显示参数之后，将显示参数重置为序列样品的 Instrument Setup Method（仪器设置方法）中定义的设置。</p> <p>样品序列的 Instrument Setup Method 包括 Home Page 窗口的色谱和质谱图显示参数。当数据系统开始分析样品时，它会根据所选的仪器设置方法重置 Home Page 窗口。当样品正在运行时，可以利用 Home Page 窗口菜单命令更改显示参数。</p>                                                                                                                                                                                                                                         |
| Ranges（范围）                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Zoom（缩放）                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Zoom In Y<br>（放大 Y 轴）<br>  | <p>若要显示更多细节，从当前基线将 Y 轴放大 2 倍。例如，可以将 Y 轴范围从 0-100 改为 0-50。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Zoom Out Y<br>（缩小 Y 轴）<br> | <p>若要显示更多数据，将 Y 轴缩小 2 倍。例如，可以将 Y 轴范围从 0-25 改为 0-50。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |

**表 33.** View 菜单 - Real Time Plot 命令 (第 2 页, 共 3 页)

| 命令                                                                                  | 说明                                                                                                        |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Normalize<br>(归一化)                                                                  | 将数据显示的强度标度归一化处理为 Y 轴上一个固定的范围, 即 0 - 25% 至 0 - 100%。                                                       |
|    |                                                                                                           |
| Zoom In X<br>(放大 X 轴)                                                               | 若要显示更多数据, 将 X 轴放大 2 倍。例如, 可以将 X 轴范围从 0-20 改为 5-15。                                                        |
|    |                                                                                                           |
| Zoom Out X<br>(缩小 X 轴)                                                              | 若要显示更多数据, 将 X 轴从中心缩小 2 倍。例如, 可以将 X 轴范围从 7.5-12.5 改为 5-15。                                                 |
|    |                                                                                                           |
| Display All<br>(显示全部)                                                               | 查看 X 轴的所有数据或者报告的所有文本。例如, 可以将 X 轴范围从 7.5-12.5 改为 0-20。                                                     |
|    |                                                                                                           |
| <b>Pan (每次扫描的质谱图)</b>                                                               |                                                                                                           |
| Next Scan<br>(下一扫描)                                                                 | 查看下一个质量扫描及其扫描编号。                                                                                          |
|  |                                                                                                           |
| Previous Scan<br>(前一扫描)                                                             | 查看前一个质量扫描及其扫描编号。                                                                                          |
|  |                                                                                                           |
| Display Options<br>(显示选项)                                                           | 为色谱图、质谱图和地图选择风格、颜色、标记 [ 仅用于色谱图和质谱图 ]、轴、归一化和平滑 [ 仅用于色谱图 ] 选项。                                              |
| Roadmap View<br>(导航图视图)                                                             | 查看或隐藏 Xcalibur 导航图。这个视图显示所有 Xcalibur 软件窗口及其相关的示意图。导航图通常显示在 Home Page 窗口右侧。当选择该命令时, 已隐藏的视图会显示, 而已显示的视图会隐藏。 |
|  |                                                                                                           |
| Sequence Setup<br>View<br>(序列设置视图)                                                  | 创建、编辑、保存或打开一个样品序列。                                                                                        |
|  |                                                                                                           |

表 33. View 菜单 - Real Time Plot 命令 (第 3 页, 共 3 页)

| 命令                                                                                                       | 说明                                                                                                                                                                                                                                |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Real Time Plot View<br> | 查看 Real Time Plot View 和 Plot Toolbar (图表工具栏)。利用 Real Time Plot View 查看当前样品的色谱和质谱数据。使用 Plot Toolbar <ul style="list-style-type: none"> <li>• 启动、暂停或继续分析</li> <li>• 缩放 X 或 Y 轴</li> <li>• 归一化, 显示下一扫描</li> <li>• 显示前一扫描</li> </ul> |
| Info View<br>(信息视图)<br> | 监测 Run Manager (运行管理器) 状态、Xcalibur 部件状态以及采集队列。                                                                                                                                                                                    |
| View Toolbar<br>(视图工具栏)                                                                                  | 可随时从 View Toolbar 中单击选择 Roadmap、Sequence、Real Time Plot 或 Information 的视图。                                                                                                                                                        |
| Roadmap Toolbar<br>(导航图工具栏)                                                                              | 打开 <a href="#">Instrument Setup</a> 窗口, 打开 Processing Setup (处理设置) 窗口, 启动或停止分析, 暂停或继续样品序列。                                                                                                                                        |
| Sequence Editor Toolbar<br>(序列编辑器工具栏)                                                                    | 利用具有 Sequence Setup (序列设置) 视图的 Sequence Editor Toolbar 执行文件维护, 管理样品序列。                                                                                                                                                            |
| Plot Toolbar<br>(图表工具栏)                                                                                  | 使用 Plot Toolbar <ul style="list-style-type: none"> <li>• 启动、暂停或继续分析</li> <li>• 缩放 X 或 Y 轴</li> <li>• 归一化, 显示下一扫描</li> <li>• 显示前一扫描</li> </ul>                                                                                     |
| Show Large Toolbar<br>(显示大号工具栏)                                                                          | 查看显示为 32-bit (高度) 大号工具栏或 24-bit (高度) 小号工具栏的 Home Page 窗口的所有工具栏。单击此命令在大号和小号工具栏之间切换。                                                                                                                                                |
| Customize Toolbar<br>(自定义工具栏)                                                                            | 在 Home Page 工具栏中添加和删除命令图标。                                                                                                                                                                                                        |

## Roadmap and Sequence Setup

**表 34.** View（查看）菜单 - Roadmap and Sequence Setup（导航图和序列设置）命令

| 命令                                                                                                                   | 说明                                                                                                                                           |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Roadmap View<br>(导航图视图)<br>         | 查看或隐藏 Xcalibur 导航图。这个视图显示所有 Xcalibur 窗口及其关系的示意图。导航图通常显示在 Home Page（主页）窗口右侧。当选择该命令时，已隐藏的视图会显示，而已显示的视图会隐藏。                                     |
| Sequence Setup View<br>(序列设置视图)<br> | 创建、编辑、保存或打开一个样品序列。                                                                                                                           |
| Real Time Plot View<br>             | 查看 Real Time Plot View 和 Plot Toolbar（图表工具栏）。利用 Real Time Plot View 查看当前样品的色谱和质谱数据。                                                          |
| Info View<br>(信息视图)<br>            | 监测 Run Manager（运行管理器）状态、Xcalibur 部件状态以及采集队列。                                                                                                 |
| View Toolbar<br>(视图工具栏)                                                                                              | 可随时从 View Toolbar 中单击选择 Roadmap、Sequence、Real Time Plot 或 Information 的视图。                                                                   |
| Roadmap Toolbar<br>(导航图工具栏)                                                                                          | 打开 <a href="#">Instrument Setup</a> 窗口，打开 Processing Setup（处理设置）窗口，启动或停止分析，暂停或继续样品序列。                                                        |
| Sequence Editor Toolbar<br>(序列编辑器工具栏)                                                                                | 执行文件维护和管理样品序列。                                                                                                                               |
| Plot Toolbar<br>(图表工具栏)                                                                                              | 使用 Plot Toolbar <ul style="list-style-type: none"> <li>• 启动、暂停或继续分析</li> <li>• 缩放 X 或 Y 轴</li> <li>• 归一化，显示下一扫描</li> <li>• 显示前一扫描</li> </ul> |
| Show Large Toolbar<br>(显示大号工具栏)                                                                                      | 查看显示为 32-bit（高度）大号工具栏或 24-bit（高度）小号工具栏的 Home Page 窗口的所有工具栏。单击此命令在大号和小号工具栏之间切换。                                                               |
| Customize Toolbar<br>(自定义工具栏)                                                                                        | 在 Home Page 工具栏中添加和删除命令图标。                                                                                                                   |

**注释** [Instrument Setup](#)（仪器设置）和 Processing Setup（处理设置）是具有各自菜单的独立窗口。

## GoTo 菜单

表 35. GoTo 菜单命令

| 命令                                                                                | 说明                                             |
|-----------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
|  | 打开 <b>Instrument Setup</b> (仪器设置) 窗口。          |
|  | 打开 <b>Processing Setup</b> (处理设置) 窗口。          |
|  | 打开 <b>Qual Browser Reference</b> (定性浏览器指南) 窗口。 |
|  | 打开 <b>Quan Browser Reference</b> (定量浏览器指南) 窗口。 |
|  | 打开 <b>Library Reference</b> (库指南) 窗口。          |

**注释** **Instrument Setup** (仪器设置) 和 **Processing Setup** (处理设置) 是具有各自菜单的独立窗口。

## Edit 菜单

Edit (编辑) 菜单只能在 Home Page (主页) 窗口的 Sequence Setup (序列设置) 视图中使用。

表 36. Edit 菜单命令 (第 1 页, 共 2 页)

| 命令                                                                                  | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Undo (撤销)                                                                           | 取消前一操作。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|  | 例如, 如果刚删除了一个条目或批注, 请单击  恢复删除的条目或批注。<br>单击  删除刚完成的某个条目或批注。<br> 只取消前一个操作。 |
| Clear (清除)                                                                          | 移除所选序列框或整个序列行中的文本。通过单击或单击拖动选择框。通过单击行号选择一个样品行 (最左列)。通过单击并向上或向下拖动样品号列选择多个邻近行。Xcalibur 数据系统高亮显示所选行。然后选择 <b>Edit (编辑) &gt; Clear (清除)</b> 。数据系统清除所选框的文本。它将当前样品类型变为: Unknown (未知)                                                                                                                                                       |
| Copy (复制)                                                                           | 将序列的选中行或列复制到剪贴板。<br>                                                                                                                                                                                                                            |
| Paste (粘贴)                                                                          | 将剪贴板中复制的序列行或列粘贴到屏幕上。<br>                                                                                                                                                                                                                        |

表 36. Edit 菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

| 命令                          | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|-----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Insert Row<br>(插入行)         | <p>在当前序列中一次插入一个新行。</p> <p>❖ 若要插入行</p> <ol style="list-style-type: none"><li>单击插入目标位置下面的行号（最左列）将其选中。Xcalibur 应用程序高亮显示所选行。</li><li>选择 <b>Edit（编辑） &gt; Insert Row（插入行）</b>。下列信息显示：<br/><br/>Insert above line X?（插入 X 行之上吗？）</li><li>单击 <b>Yes（是）</b> 或按键盘上的 INSERT 键插入一行。单击 <b>No（否）</b> 取消 Insert Row 命令。</li></ol>           |
| Delete Row<br>(删除行)         | <p>删除当前序列的一个或多个邻近行。</p> <p>❖ 若要删除行</p> <ol style="list-style-type: none"><li>通过单击行号（最左列）选择要删除的行，或者通过单击并向上或向下拖动样品号列选择要删除的多个邻近行。Xcalibur 应用程序高亮显示所选行。</li><li>选择 <b>Delete Row（删除行）</b> 命令。下列信息显示：<br/><br/>Delete Rows X to X?（删除 X 至 X 行？）</li><li>单击 <b>Yes</b> 删除行或按下键盘上的 DELETE 键。单击 <b>No</b> 取消 Delete Row 命令。</li></ol> |
| Go To Row<br>(转至行)          | <p>将当前序列中的光标移动到特定的行号上。当检查或修改一个长序列时，这个操作特别有用。</p> <p>❖ 转至当前序列中的某行</p> <ol style="list-style-type: none"><li>在 Go To Line Number（转至行号）框中输入行号。</li><li>单击 <b>OK（确定）</b>。</li></ol>                                                                                                                                               |
| Fill Down<br>(向下填充)         | <p>将某个样品行的信息复制到一系列行中，避免重复的剪切和粘贴操作。</p> <p>❖ 若要将某一行的信息复制到一系列行中</p> <p>选择想要复制的序列信息，将其复制到选中样品行下方的多个样品行中。Xcalibur 数据系统自动将所选条目填充到选中行下方的样品行中。它只填充所选行正下方的行。</p>                                                                                                                                                                      |
| Browse File Name<br>(浏览文件名) | <p>选择计算机或网络上已有的路径和文件名。Xcalibur 数据系统在当前 File Name（文件名）框内输入所选路径和文件名。当光标处于 Sequence Setup File Name（序列设置文件名）框内时，此命令才被激活。</p>                                                                                                                                                                                                     |

**注释** **Instrument Setup**（仪器设置）和 **Processing Setup**（处理设置）是具有各自菜单的独立窗口。



## Actions 菜单

Home Page（主页）窗口的 Actions（操作）菜单命令会随着下列显示视图发生变化。

- Roadmap 和 Real Time Plot
- Sequence Setup

### Roadmap 和 Real Time Plot

表 37. Actions 菜单 – Roadmap（导航图）和 Real Time Plot（实时图表）命令（第 1 页，共 2 页）

| 命令                                                                                                                | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Check Disk Space<br>（检查硬盘空间）<br> | 确定硬盘驱动器上有多少可用的硬盘空间。如果这个图标已被添加到工具栏上，可单击此图标。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Start Analysis<br>（开始分析）<br>     | 启动序列队列中的下一个运行。<br><br>该命令只适用于下列情况： <ul style="list-style-type: none"> <li>• 已配置自动进样器时</li> <li>• 已配置质谱仪检测器触点闭合接口时</li> <li>• 清除 Run This Sample（运行此样品）对话框或 Run Sequence（运行序列）对话框的 Start Options（启动选项）区域的 Start When Ready（准备就绪时开始）复选框。</li> </ul> 确保数据系统处于 Ready（准备就绪）状态。                                                                                                                                      |
| Stop Analysis<br>（停止分析）<br>    | 停止当前分析。当前样品已停止时，数据系统为已停止样品创建一个原始文件，包括 Stop Analysis 命令之前所采集的所有原始数据。然后应用程序进入 Paused（暂停）状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图的当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色信息表明暂停状态。<br><br>若要在 Stop Analysis 命令之后启动序列队列中的下一个样品，可利用 Start Analysis 命令或单击工具栏上（凹下的）Pause/Resume Analysis（暂停 / 继续分析）按钮。                                                                                                                                      |
| Pause Analysis<br>（暂停分析）<br>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Pause（暂停）</b><br/><br/>               当这个按钮呈凸出位置时，系统暂停样品列表处理。<br/><br/>               Xcalibur 数据系统使按钮外观从凸出变为凹下状态。如果样品列表已下载或样品数据采集已经开始，数据系统完成当前样品并创建样品的原始文件。然后数据系统进入暂停状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色“Paused”表明暂停状态。             </li> <li>• <b>Resume（继续）</b><br/><br/>               继续处理序列。应用程序启动序列队列中的下一个样品。             </li> </ul> |

表 37. Actions 菜单 – Roadmap（导航图）和 Real Time Plot（实时图表）命令（第 2 页，共 2 页）

| 命令                               | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|----------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Devices On<br>(设备打开)             | <p>在当前序列完成后使设备处于 On（打开）状态。在此状态下，所有功率和流量均保持在工作水平。设置 Xcalibur 数据系统位于 On 状态，即可立刻运行另一个序列。</p> <p>该选项和在 Sequence Setup（序列设置）视图的 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 On 选项效果相同。</p>                                                                                                                                                                                |
| Devices Standby<br>(设备待机)        | <p>在当前序列完成后使设备处于 Standby（待机）状态。将 Xcalibur 数据系统设为待机状态，以便在很短的延迟时间后运行另一个序列。此状态会关闭气流和液体流速，但使加热器和其它子系统保持运行，因此从待机转换为正常运行状态时无需预热时间，具体情况取决于设备型号。</p> <p>该选项和在 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 Standby 选项效果相同。</p>                                                                                                                                                |
| Devices Off<br>(设备关闭)            | <p>在当前序列完成后使设备处于 Off（关闭）状态。Off 状态表示由数据系统控制的所有仪器电源均关闭。该操作包括所有加热器和大多数子组件的电源，但有些情况下某些子组件例外。</p> <p>该选项和在 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 Off 选项效果相同。</p> <p><b>注意事项</b> Off 状态不能保证关闭所有电压，也无法确保所有加热部件已经处于室温。若要执行仪器维护，请参阅硬件维护手册。</p>                                                                                                                          |
| Automatic Devices On<br>(自动打开设备) | <p>设置使 Xcalibur 数据系统在开始数据采集之前自动打开应用程序控制的所有设备。</p> <p>如果这个命令左侧有复选标记，数据系统自动打开所有处于 Off 或 Standby 状态的设备。</p> <p>如果其左侧没有复选标记，如果有一个或多个设备处于 Standby 或 Off 状态时，数据系统会给出下列信息：</p> <p>One or more devices to be used by this sequence are not ‘On’（该序列要使用的一个或多个设备没有打开）。该序列会在所有所需设备准备就绪时启动。若要所有设备都切换到 ‘On’，可按下 ‘Yes’ 打开所有设备，或者按下 ‘No’ 使所有仪器维持原状态。如果选择 ‘No’，必须在继续序列之前从 Actions 菜单选择 Devices On 命令。</p> |
| Reinstate Warnings<br>(恢复警告)     | <p>通过选择 Don’ t Ask Again（不再询问）复选框，恢复已经关闭的信息显示。</p> <p>Xcalibur 应用程序会周期性显示包括下列内容的信息或对话框：</p> <p><input type="checkbox"/> Don’ t ask again.</p> <p>如果选择这个选项，数据系统不会再次显示该信息，直到利用 Reinstate Warnings（恢复警告）命令再次打开警告。</p> <p>若要关闭警告，请选择该复选框：</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Don’ t ask again.</p>                                                                                    |

## Sequence Setup

表 38. Actions 菜单 - Sequence Setup 命令 (第 1 页, 共 3 页)

| 命令                                                                                                                    | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Check Disk Space<br>(检查硬盘空间)<br>     | 确定硬盘驱动器上有多少可用的硬盘空间。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Run This Sample<br>(运行此样品)<br>       | 采集当前序列中选中的一个或多个连续样品数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Run Sequence<br>(运行序列)<br>           | 默认情况下, 采集当前序列中样品的数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Batch Reprocess<br>(批次重新处理)<br>     | 重新处理当前序列中选中的样品的数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Open [Method] File<br>(打开方法文件)<br> | <p>编辑从 Sequence Setup 视图中选择的仪器方法或处理方法。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• 如果在序列的 Inst Meth (仪器方法) 列中选择一个仪器方法, 然后选择该命令, 数据系统会打开 Instrument Setup (仪器设置) 视图并显示所选文件, 以便编辑参数。</li><li>• 如果在序列的 Proc Meth (处理方法) 列中选择一个处理方法, 然后选择该命令, 数据系统会打开 Processing Setup (处理设置) 视图并显示所选文件, 以便编辑参数。</li></ul> <p>仅当选择了一个仪器方法或处理方法时, 该命令有效。</p> |
| Start Analysis<br>(开始分析)<br>       | <p>启动序列队列中的下一个运行。</p> <p>该命令只适用于下列情况:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• 已配置自动进样器时</li><li>• 已配置质谱仪检测器触点闭合接口时</li><li>• 清除 Run This Sample (运行此样品) 对话框或 Run Sequence (运行序列) 对话框的 Start Options (启动选项) 区域的 Start When Ready (准备就绪时开始) 复选框。</li></ul> <p>确保 Xcalibur 应用程序处于 Ready (准备就绪) 状态。</p>                                 |

表 38. Actions 菜单 - Sequence Setup 命令 （第 2 页，共 3 页）

| 命令                                                                                                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Stop Analysis<br>（停止分析）<br>  | <p>停止当前分析。当前样品已停止时，数据系统为已停止样品创建一个原始文件，包括 Stop Analysis 命令之前所采集的所有原始数据。然后应用程序进入 Paused（暂停）状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图的当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色信息表明暂停状态。</p> <p>若要在 Stop Analysis 命令之后启动序列队列中的下一个样品，可利用 Start Analysis 命令或单击工具栏上（凹下的）Pause/Resume Analysis（暂停/继续分析）按钮。</p>                                                                                               |
| Pause Analysis<br>（暂停分析）<br> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Pause（暂停）</b><br/>               当这个按钮呈凸出位置时，系统暂停样品列表处理。<br/><br/>               Xcalibur 数据系统使按钮外观从凸出变为凹下状态。如果样品列表已下载或样品数据采集已经开始，数据系统完成当前样品并创建样品的原始文件。然后数据系统进入暂停状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色 “Paused” 表明暂停状态。</li> <li>• <b>Resume（继续）</b><br/>               继续处理序列。应用程序启动序列队列中的下一个样品。</li> </ul> |
| Devices On<br>（设备打开）                                                                                          | <p>在当前序列完成后使设备处于 On（打开）状态。在此状态下，所有功率和流量均保持在工作水平。设置 Xcalibur 数据系统位于 On 状态，即可立刻运行另一个序列。</p> <p>该选项和在 Sequence Setup（序列设置）视图的 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 On 选项效果相同。</p>                                                                                                                                                                   |
| Devices Standby<br>（设备待机）                                                                                     | <p>在当前序列完成后使设备处于 Standby（待机）状态。将 Xcalibur 数据系统设为待机状态，以便在很短的延迟时间后运行另一个序列。此状态会关闭气流和液体流速，但使加热器和其它子系统保持运行，因此从待机转换为正常运行状态时无需预热时间，具体情况取决于设备型号。</p> <p>该选项和在 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 Standby 选项效果相同。</p>                                                                                                                                   |
| Devices Off<br>（设备关闭）                                                                                         | <p>在当前序列完成后使设备处于 Off（关闭）状态。Off 状态表示由数据系统控制的所有仪器电源均关闭。该操作包括所有加热器和大多数子组件的电源，但有些情况下某些子组件例外。</p> <p>该选项和在 Run Sequence（运行序列）对话框内 After Sequence Set System（序列完成后设置系统）区域中选择 Off 选项效果相同。</p> <p><b>注意事项</b> Off 状态不能保证关闭所有电压，也无法确保所有加热部件已经处于室温。若要执行仪器维护，请参阅硬件维护手册。</p>                                                                                                             |

表 38. Actions 菜单 - Sequence Setup 命令 (第 3 页, 共 3 页)

| 命令                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Automatic Devices On (自动打开设备) | <p>设置使 Xcalibur 数据系统在开始数据采集之前自动打开应用程序控制的所有设备。</p> <p>如果这个命令左侧有复选标记, 数据系统自动打开所有处于 Off 或 Standby 状态的设备。</p> <p>如果其左侧没有复选标记, 如果有一个或多个设备处于 Standby 或 Off 状态时, 数据系统会给出下列信息:</p> <p>One or more devices to be used by this sequence are not 'On' (该序列要使用的一个或多个设备没有打开)。该序列会在所有所需设备准备就绪时启动。若要所有设备都切换到 'On', 可按下 'Yes' 打开所有设备, 或者按下 'No' 使所有仪器维持原状态。如果选择 'No', 必须在继续序列之前从 Actions 菜单选择 Devices On 命令。</p> |
| Reinstate Warnings (恢复警告)     | <p>通过选择 <b>Don' t Ask Again (不再询问)</b> 复选框, 恢复已经关闭的信息显示。</p> <p>Xcalibur 应用程序会周期性显示包括下列内容的信息或对话框:</p> <p><input type="checkbox"/> Don' t ask again.</p> <p>如果选择这个选项, 数据系统不会再次显示该信息, 直到利用 Reinstate Warnings (恢复警告) 命令再次打开警告。</p> <p>若要关闭警告, 请选择该复选框:</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Don' t ask again.</p>                                                                            |

**注释** **Instrument Setup** (仪器设置) 和 **Processing Setup** (处理设置) 是具有各自菜单的独立窗口。

## Tools 菜单

Tools (工具) 菜单只能在 Home Page (主页) 窗口的 Roadmap View (导航图视图) 中使用。

表 39. Tools 菜单命令 (第 1 页, 共 2 页)

| 命令                                                                                                         | 说明                                                   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| Configuration (配置)                                                                                         | 配置 Xcalibur 默认文件夹, 输入客户信息并改变 Xcalibur 固定间距字体和比例间距字体。 |
| Queue Manager (队列管理器)                                                                                      | 监测处理状态。                                              |
|  File Converter (文件转换器) | 转换文件类型。                                              |
|                         |                                                      |

表 39. Tools 菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

| 命令                        | 说明                                                                                                                                              |
|---------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| LCQuan                    | 在 LCQuan™ 窗口中检查定量分析结果。                                                                                                                          |
| Library Manager<br>(库管理器) | 管理使用 NIST 检索软件的 NIST 谱库，以及 ICIS/GCQ/ITS 40、MassLab、NIST 和 ANDI-MS 格式之间的谱库转换。                                                                    |
| Add Tools<br>(添加工具)       | 从 Home Page 窗口菜单栏中添加或删除程序。当从 Home Page 窗口选择 Tools 菜单时，Xcalibur 应用程序将添加程序显示为菜单命令。例如，可以将打开 Metabolite ID 和 Windows™ Explorer™ 的菜单命令添加到 Tools 菜单中。 |

**注释** [Instrument Setup](#)（仪器设置）和 [Processing Setup](#)（处理设置）是具有各自菜单的独立窗口。

Help 菜单

表 40. Help 菜单命令

| 命令                                   | 说明                                                          |
|--------------------------------------|-------------------------------------------------------------|
| Home Page Help<br>(主页帮助)             | 打开 Xcalibur 帮助并显示 Home Page 帮助窗口。                           |
| View Help (查看帮助)                     | 打开 Xcalibur 帮助并显示当前视图的帮助。                                   |
| Xcalibur Help<br>(Xcalibur 帮助)       | 打开 Xcalibur 帮助。                                             |
| Glossary (术语)                        | 打开术语表。                                                      |
| How To Use Online<br>Help (如何使用在线帮助) | 打开说明如何使用 Help 查看器的帮助。                                       |
| About Home Page<br>(有关主页)            | 打开有关主页的对话框。About Home Page 对话框显示 Home Page 程序的安装版本号和产品版权通告。 |

**注释** [Instrument Setup](#)（仪器设置）和 [Processing Setup](#)（处理设置）是具有各自菜单的独立窗口。

工具栏

Xcalibur 主页具有下列工具栏：单击某个项目，获得菜单上可用选项的详细说明。

- [View Toolbar](#)
- [Roadmap Toolbar](#)
- [Sequence Editor Toolbar](#)
- [Plot Toolbar](#)



## View Toolbar

表 41. View toolbar（查看工具栏）按钮

| 按钮                                                                                | 说明                                                                                                                                                 |
|-----------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <b>Roadmap View</b><br>(导航图视图)<br>这个视图显示所有 Xcalibur 窗口及其相关的示意图。导航图通常显示在 Home Page（主页）窗口右侧。当选择该命令时，已隐藏的视图会显示，而已显示的视图会隐藏。                            |
|  | <b>Sequence View</b><br>(序列视图)<br>创建、编辑、保存或打开一个样品序列。                                                                                               |
|  | <b>Real Time Plot View</b><br>查看当前样品的色谱和质谱数据。利用 Plot Toolbar 开始、暂停或继续分析，缩放 X 或 Y 轴；均一化，显示下一扫描或者上一扫描。                                               |
|  | <b>Information View (信息视图)</b><br>监测 Run Manager（运行管理器）状态、Xcalibur 组件状态以及采集队列。 <a href="#">Information 视图</a> 具有两个选项卡，位于窗口的左侧。它可以与三个主视图中的任何一个同时显示。 |

## Roadmap Toolbar

表 42. Roadmap toolbar（导航图工具栏）按钮（第 1 页，共 2 页）

| 按钮                                                                                  | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <b>Instrument Setup (仪器设置)</b><br>设置仪器用于 Xcalibur 应用程序。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|  | <b>Processing Setup (处理设置)</b><br>创建或修改 Xcalibur 处理过程。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|  | <b>Start Analysis (开始分析)</b><br>启动序列队列中的下一个运行。<br><br>可以使用 Home Page 的 Information 视图的 Acquisition Queue（采集队列）页面随时查看样品列表队列。<br><br>仅当自动进样器已配置，LC/MS 检测器触点闭合接口已配置，并且 Run Sequence（运行序列）对话框的 Start Options（启动选项）区域的 Start When Ready（准备就绪时开始）复选框被清除时，工具栏上的这个按钮可用。确保 Xcalibur 数据系统处于 Ready（准备就绪）状态。                                                                                                                    |
|  | <b>Stop Analysis (停止分析)</b><br>立刻停止当前样品运行。当前样品已停止时，Xcalibur 数据系统为已停止样品创建一个原始文件，包括 Stop Analysis 命令之前所采集的所有原始数据。然后数据系统进入 Paused（暂停）状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色“Paused”表明暂停状态。<br><br>若要在 Stop Analysis 命令之后启动序列队列中的下一个样品，可利用 Start Analysis 命令或单击工具栏上（凹下的） <b>Pause/Resume Analysis（暂停 / 继续分析）</b> 按钮。<br><br>可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue（采集队列）页面随时查看样品列表队列。 |

表 42. Roadmap toolbar（导航图工具栏）按钮 （第 2 页，共 2 页）

| 按钮                                                                                                                             | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  Pause/Resume Sequence Queue<br>(暂停 / 继续序列队列) | <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Pause（暂停）</b><br/>当这个按钮呈凸出位置时，系统暂停样品列表处理。<br/><br/>Xcalibur 数据系统使按钮外观从凸出变为凹下状态。如果样品列表已下载或样品数据采集已经开始，数据系统完成当前样品并创建样品的原始文件。然后应用程序进入 Paused（暂停）状态，Home Page 窗口中 Status（状态）视图当前区域的 Sequence（序列）框右侧会有闪烁的红色信息“Paused”表明暂停状态。</li><li>• <b>Resume（继续）</b><br/>继续样品列表队列中下一个样品的处理。该按钮从凹下状态变为凸出状态，表明数据系统正在继续样品列表的处理。<br/><br/>可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue（采集队列）页面随时查看样品列表队列。</li></ul> |
|  Xcalibur Help<br>(Xcalibur 帮助)               | 查看 Xcalibur Help 的目录窗口。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |



## Sequence Editor Toolbar

表 43. Sequence Editor Toolbar (序列编辑器工具栏) (第 1 页, 共 3 页)

| 按钮                                                                                  | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|    | New Sequence (新序列)<br>创建新序列。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|    | Open (打开)<br>找到并打开已有文件。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|    | Save (保存)<br>保存当前序列。如果已保存当前序列, Save As (另存为) 对话框出现。指定当前序列的新位置 and 名称。                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|    | Print (打印)<br>选择打印范围和质量。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|    | Copy (复制)<br>将序列的选中行或列复制到剪贴板。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|    | Paste (粘贴)<br>将剪贴板中复制的序列行或列粘贴到屏幕上。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|    | Undo (撤销)<br>取消前一操作。<br><br>例如, 如果刚刚删除了一个条目或批注, 请单击  恢复删除的条目或批注。<br>单击  删除刚完成的某个条目或批注。<br> 只取消前一个操作。 |
|  | Fill Down (向下填充)<br>将选中样品行的序列信息复制到一个或多个其他样品行中, 无需重复的复制和粘贴操作。<br><br><b>❖ 若要向行内填充信息</b><br>1. 选择想要复制的序列信息, 将其复制到选中样品行下方的多个样品行中。<br>2. 单击 Sequence Editor toolbar 中的 <b>Fill Down</b> 按钮。Fill Down 对话框打开。Xcalibur 数据系统自动将所选条目填充到选中行下方的样品行中。它只填充所选行正下方的行。                                                                                                       |
|  | Browse File Name (浏览文件名)<br>选择计算机或网络上已有的路径和文件名。Xcalibur 数据系统在当前 File Name (文件名) 框内输入所选路径和文件名。当光标处于 Sequence Setup File Name (序列设置文件名) 框内时, 此命令才被激活。                                                                                                                                                                                                          |
|  | User Labels (用户标签)<br>改变 Sequence Setup View 上 5 个信息框的标题文字。默认标题是文字是 Study、Client、Laboratory、Company 和 Phone。                                                                                                                                                                                                                                                 |

表 43. Sequence Editor Toolbar (序列编辑器工具栏) (第 2 页, 共 3 页)

| 按钮                                                                                                           | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  Column Arrangement (列排列)   | <p>查看或隐藏特定序列的列。</p> <p>❖ 若要添加一列</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>单击 Available Columns (可用列) 列表中的列名并单击 <b>Add</b> (添加)。Xcalibur 应用程序将列名移动到 Displayed Columns (显示列) 列表中。</li> <li>单击 <b>OK</b> (确定)。数据系统将此列添加到序列中。</li> </ol> <p>❖ 若要删除一个显示列</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>单击 Displayed Columns (显示列) 列表中的列名并单击 <b>Remove</b> (移除)。Xcalibur 数据系统将列名移动到 Available Columns (可用列) 列表中。</li> <li>单击 <b>OK</b> (确定)。数据系统从序列中移除该列。</li> </ol> |
|  Transfer Row Info (转移行信息)  | 通过样品 ID 或位置匹配样品。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|  Disk Space (硬盘空间)         | 确定硬盘驱动器上可用硬盘空间大小。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|  Run Sample (运行样品)        | 采集当前序列中选中的一个或多个连续样品数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|  Run Sequence (运行序列)      | 默认情况下, 采集当前序列中样品的数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|  Batch Reprocess (批次重新处理) | 重新处理当前序列中选中样品的数据。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|  Start Analysis (开始分析)    | <p>启动序列队列中的下一个运行。</p> <p>可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue (采集队列) 页面随时查看样品列表队列。</p> <p>仅当自动进样器已配置, LC/MS 检测器触点闭合接口已配置, 并且 Run Sequence (运行序列) 对话框的 Start Options (启动选项) 区域的 Start When Ready (准备就绪时开始) 复选框被清除时, 工具栏上的这个按钮可用。确保数据系统处于 Ready (准备就绪) 状态。</p>                                                                                                                                                                                |
|  Stop Analysis (停止分析)     | <p>停止当前分析。当前样品已停止时, 数据系统为已停止样品创建一个原始文件, 包括 Stop Analysis 命令之前所采集的所有原始数据。然后应用程序进入 Paused (暂停) 状态, Home Page 窗口中 Status (状态) 视图的当前区域的 Sequence (序列) 框右侧会有闪烁的红色信息表明暂停状态。</p> <p>若要在 Stop Analysis 命令之后启动序列队列中的下一个样品, 可利用 Start Analysis 命令或单击工具栏上 (凹下的) <b>Pause/Resume Analysis</b> (暂停 / 继续分析) 按钮。</p>                                                                                                                                                        |

表 43. Sequence Editor Toolbar (序列编辑器工具栏) (第 3 页, 共 3 页)

| 按钮                                                                                                            | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  Pause/Resume Sequence Queue | <ul style="list-style-type: none"> <li> <b>Pause (暂停)</b><br/>           当这个按钮呈凸出位置时, 系统暂停样品列表处理。<br/><br/>           Xcalibur 数据系统使按钮外观从凸出变为凹下状态。如果样品列表已下载或样品数据采集已经开始, 数据系统完成当前样品并创建样品的原始文件。然后应用程序进入 Paused (暂停) 状态, Home Page 窗口中 Status (状态) 视图当前区域的 Sequence (序列) 框右侧会有闪烁的红色信息 “Paused” 表明暂停状态。         </li> <li> <b>Resume (继续)</b><br/>           继续样品列表队列中下一个样品的处理。该按钮从凹下状态变为凸出状态, 表明数据系统正在继续样品列表的处理。<br/><br/>           可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue (采集队列) 页面随时查看样品列表队列。         </li> </ul> |
|  Help (帮助)                   | 打开 Xcalibur Help 并显示 Sequence Setup View 的目录窗口。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |

## Plot Toolbar

表 44. Plot toolbar (图表工具栏) 按钮 (第 1 页, 共 2 页)

| 按钮                                                                                                                              | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  Start Analysis<br>(开始分析)                      | <p>启动序列队列中的下一个运行。</p> <p>可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue (采集队列) 页面随时查看样品列表队列。</p> <p>仅当自动进样器已配置, LC/MS 检测器触点闭合接口已配置, 并且 Run Sequence (运行序列) 对话框的 Start Options (启动选项) 区域的 Start When Ready (准备就绪时开始) 复选框被清除时, 工具栏上的这个按钮可用。确保数据系统处于 Ready (准备就绪) 状态。</p>                                                                                                                                                                                             |
|  Stop Analysis<br>(停止分析)                       | <p>停止当前分析。当前样品已停止时, 数据系统为已停止样品创建一个原始文件, 包括 Stop Analysis 命令之前所采集的所有原始数据。然后数据系统进入暂停状态, Home Page 窗口中 Status (状态) 视图当前区域的 Sequence (序列) 框右侧会有闪烁的红色 “Paused” 表明暂停状态。</p> <p>若要在 Stop Analysis 命令之后启动序列队列中的下一个样品, 可利用 Start Analysis 命令或单击工具栏上 (凹下的) <b>Pause/Resume Analysis (暂停 / 继续分析)</b> 按钮。</p>                                                                                                                                                                         |
|  Pause/Resume<br>Analysis<br>(暂停 / 继续分<br>析) | <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Pause (暂停)</b><br/><br/>当这个按钮呈凸出位置时, 系统暂停样品列表处理。<br/><br/>Xcalibur 数据系统使按钮外观从凸出变为凹下状态。如果样品列表已下载或样品数据采集已经开始, 数据系统完成当前样品并创建样品的原始文件。然后应用程序进入 Paused (暂停) 状态, Home Page 窗口中 Status (状态) 视图当前区域的 Sequence (序列) 框右侧会有闪烁的红色信息 “Paused” 表明暂停状态。</li><li>• <b>Resume (继续)</b><br/><br/>继续样品列表队列中下一个样品的处理。该按钮从凹下状态变为凸出状态, 表明数据系统正在继续样品列表的处理。</li></ul> <p>可以使用 Home Page 的 Information View 的 Acquisition Queue (采集队列) 页面随时查看样品列表队列。</p> |
|  Zoom In Y<br>(放大 Y 轴)                       | 若要显示更多细节, 从当前基线将 Y 轴放大 2 倍。例如, 可以将 Y 轴范围从 0-100 改为 0-50。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|  Zoom Out Y<br>(缩小 Y 轴)                      | 若要显示更多数据, 将 Y 轴缩小 2 倍。例如, 可以将 Y 轴范围从 0-25 改为 0-50。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|  Normalize<br>(归一化)                          | 将数据显示的强度标度归一化处理为 Y 轴上一个固定的范围, 即 0 - 25% 至 0 - 100%。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|  Zoom In X<br>(放大 X 轴)                       | 若要显示更多数据, 将 X 轴放大 2 倍。例如, 可以将 X 轴范围从 0-20 改为 5-15。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|  Zoom Out X<br>(缩小 X 轴)                      | 若要显示更多数据, 将 X 轴从中心缩小 2 倍。例如, 可以将 X 轴范围从 7.5-12.5 改为 5-15。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

表 44. Plot toolbar (图表工具栏) 按钮 (第 2 页, 共 2 页)

| 按钮                                                                                 | 说明                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|   | <p>Display All<br/>(显示全部)</p> <p>查看 X 轴的所有数据或者报告的所有文本。例如, 可以将 X 轴范围从 7.5-12.5 改为 0-20。</p>                                                                                                                                                                                                                                                          |
|   | <p>Show Previous Scan (显示前一扫描)</p> <p>查看前一个质量扫描及其扫描数。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|   | <p>Show Next Scan (显示下一扫描)</p> <p>查看下一个质量扫描及其扫描数。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|   | <p>Lock Display (锁定显示)</p> <p>解锁仪器数据, 这样可以利用工具栏上的 Xcalibur 按钮或菜单命令检查数据。当处于解锁模式时, XCalibur 数据系统会继续采集和保存所有数据。在解锁模式下, 工具栏上的锁定图标凸出显示。</p> <p>当数据系统开始分析样品时, Home Page 窗口中的色谱图和质谱图为实时显示, 数据被锁定在仪器中。在锁定模式下, 工具栏上的锁定图标显示为凹进。</p> <p>若要重新锁定数据仪器, 单击 Plot Toolbar 上的 。</p> |
|  | <p>Help (帮助)</p> <p>打开 Xcalibur Help 并显示 Home Page 的 Roadmap 视图的目录窗口。该窗口显示程序和信息主题。</p>                                                                                                                                                                                                                                                              |

## Xcalibur 对话框

- [Chromatogram Ranges 对话框](#)
- [Spectrum Ranges 对话框](#)

### Chromatogram Ranges 对话框

利用 Chromatogram Ranges（色谱范围）对话框查看和编辑色谱图的质量数范围、时间范围和其他性质：

- 在 Qual Browser（定性浏览器）中适用于当前色谱视图的所有图表。
- 在 Home Page（主页）上适用于 Real Time Plot（实时图表）模式的当前色谱图。

还可以应用自动处理选项，例如平滑和扣背景。

有关 Chromatogram Ranges 对话框的更多信息，请参阅 the *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）。

### Spectrum Ranges 对话框

利用 Spectrum Ranges（质谱范围）对话框查看和编辑质谱图的质量数范围、时间和其他性质：

- 在 Qual Browser（定性浏览器）中适用于当前质谱视图的所有图表。
- 在 Home Page（主页）上适用于 Real Time Plot 模式的当前质谱图。

还可以应用自动处理选项，例如平滑和扣背景。

有关 Spectrum Ranges 对话框的更多信息，请参阅 the *Quantitative Analysis User Guide*（定量分析用户手册）。

## Xcalibur 参考工具

阅读本章获得适用于 Xcalibur 数据系统特定工具的信息。

### 目录

- 命令行自变量
- [ExcelExp.exe](#)
- 命令行格式
- [XConvert.exe](#)

## 命令行自变量

利用命令行自变量从脚本或命令行自动打开文件、创建新文件或者打印文件。可以从以下位置的命令行执行这些功能：

- 从 Microsoft Windows 的 Run（运行）应用程序（从 Windows 任务栏选择 **Start > Run**）。
- 从 Home Page（主页）窗口的 Sequence Setup（序列设置）视图选择 **Actions > Run This Sample** 或 **Actions > Run Sequence**。当 Run Sequence dialog box（运行序列对话框）打开时，使用 Pre Acquisition（预采集）或 Post Acquisition（后采集）命令行框。
- 从 Processing Setup（处理设置）窗口的 Programs（程序）视图使用 Program or Macro Name（程序或宏名称）列。
- 从 Microsoft Windows 的 Command Prompt（命令提示符）（从 Windows 任务栏选择 **Start > Programs > Accessories > Command Prompt**）。

下面是这些命令行的标准句法：

打开一个应用程序：

*path application*

在某个应用程序中创建新文件：

*path application path new filename*

在某个应用程序中打印文件：

*path application /p path filename*

其中：

*path* 是绝对路径名。

*new filename* 是应用于新文件的名称。

*filename* 是已有文件的名称。

*application* 是应用程序名。可能的应用程序是：

- **HomePage** - Home Page（主页）窗口和 Sequence Setup（序列设置）视图
- **InstSetup** - Instrument Setup（仪器设置）窗口
- **ProcSetup** - Processing Setup（处理设置）窗口
- **QuanBrowser** - Quan Browser（定量浏览器）窗口
- **QualBrowser** - Qual Browser（定性浏览器）窗口

例如，使用该脚本打印文件 drugx\_01.raw：

```
C:\Xcalibur\system\programs\QualBrowser /p  
C:\Xcalibur\examples\data\drugx_01.raw
```

如果正在数据系统内运行命令行，可以省略应用程序路径（*path*）。例如，打印文件 drugx\_01.raw，使用：

```
QualBrowser /p C:\Xcalibur\examples\data\drugx_01.raw
```

如果正在 Processing Setup（处理设置）窗口中运行命令行，当输入了无效的程序名或路径时，程序会发出警告。



下表列出了可能的命令行。如果已经将 Xcalibur 软件安装至默认位置，应用程序之前的路径为 C:\Xcalibur\system\programs\

表 45. 不同文件类型的命令行

| 文件类型  | 举例参数和结果                                                                                    |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| .raw  | <i>pathQuanBrowser pathfile.raw</i>                                                        |
|       | 打开 Quan Browser（定量浏览器）窗口中的文件。                                                              |
|       | <i>pathQuanBrowser /p pathfile.raw</i>                                                     |
|       | 打开 Quan Browser（定量浏览器）窗口中的文件，打印质谱和色谱图，然后关闭此窗口。                                             |
|       | <i>pathQualBrowser pathfile.raw</i>                                                        |
|       | 打开 Qual Browser（定性浏览器）窗口中的文件。                                                              |
| .sld  | <i>pathQualBrowser /p pathfile.raw</i>                                                     |
|       | 打开 Qual Browser（定性浏览器）窗口中的文件，打印质谱和色谱图，然后关闭此窗口。                                             |
|       |                                                                                            |
| .sld  | <i>pathHomePage pathfile.sld</i>                                                           |
|       | 打开 Home Page（主页）窗口中的文件 – Sequence Setup（序列设置）视图。                                           |
|       | <i>pathHomePage /p pathfile.sld</i>                                                        |
| .pmd  | 打开 Sequence Setup（序列设置）视图中的文件，然后显示 Print Selection（打印选择）对话框。在单击 <b>OK（确定）</b> 之后，序列将被交付打印。 |
|       |                                                                                            |
|       |                                                                                            |
| .pmd  | <i>pathProcSetup pathfile.pmd</i>                                                          |
|       | 打开 Processing Setup（处理设置）窗口中的文件。                                                           |
|       | <i>path\ProcSetup /p pathfile.pmd</i>                                                      |
| .meth | 打开 Processing Setup（处理设置）窗口中的文件，然后显示 Print（打印）对话框。在单击 <b>Print（打印）</b> 之后，处理方法将被交付打印。      |
|       |                                                                                            |
|       |                                                                                            |
| .meth | <i>pathInstSetup pathfile.meth</i>                                                         |
|       | 打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口中的文件。                                                           |
|       |                                                                                            |
| .rst  | <i>pathQuanBrowser pathfile.rst</i>                                                        |
|       | 打开 Quan Browser（定量浏览器）窗口中的文件。                                                              |
|       | <i>pathQualBrowser pathfile.rst</i>                                                        |
|       | 打开 Qual Browser（定性浏览器）窗口中的文件。                                                              |
|       | <i>pathQualBrowser /p pathfile.rst</i>                                                     |
|       | 打开 Qual Browser（定性浏览器）窗口中的文件，打印质谱和色谱图，然后关闭此窗口。                                             |

## ExcelExp.exe

可以使用 ExcelExp 程序 [ExcelExp.exe] 创建并输出总结报告和结果文件报告，可以在 Microsoft Excel 中直接打开这些报告。

**注释** ExcelExp.exe 没有用户界面，只能通过命令行进入。

## 命令行格式

该程序的命令行有三个区域：Export Type（输出类型）、Data Source Path Name（数据源路径名）和 Export File Type（输出文件类型）。Xcalibur 数据系统根据数据源文件名为输出文件命名，并将其置于与数据源文件相同的目录内。

ExcelExp.exe /E*export type* /data source path /T*export file type*

/E - 设置输出类型

/F - 待总结 / 输出的文件路径名

/T - 设置输出文件格式

Export Types 输出类型 (/E)：

SUMMARY（总结）（例如，/ESUMMARY）

RESULT（结果）（例如，/ERESULT）

## Path Names（路径名）(/F)

对于总结，这必须是某个序列文件（.sld）的路径名。

对于结果，这必须是某个结果文件（.rst）的路径名。

## Export File Formats（输出文件格式）(/T)

XLS（例如，/TXLS）

**注释** 对于 RESULT 输出，输出文件扩展名为 .crf。可以在 Microsoft Excel 中直接打开此文件。

TXT（例如，/TTXT）

CSV（例如，/TCSV）

尽可能使用 XLS 格式。

## 命令提示符举例

选择 **Start > Run** 打开 Run（运行）对话框，或选择 **Start > Programs > Accessories > Command Prompt** 打开 Command Prompt（命令提示符）对话框。

- 若要创建类固醇样品数据组的总结报告：

```
c:\xcalibur\system\programs\ExcelExp.exe /ESUMMARY
/Fc:\xcalibur\examples\methods\steroid.sld /TXLS
```

- 若要从 Xcalibur xcalibur\examples\data 文件夹为 steroids15 结果文件创建一个存储文件夹：

```
c:\xcalibur\system\programs\ExcelExp.exe /ERESULT
/Fc:\xcalibur\examples\data\steroids15.rst /TXLS
```

## 处理设置举例

### ❖ 若要创建一个处理设置

1. 从 Home Page（主页）窗口的 Road Map（导航图）选择 **GoTo > Processing Setup**。Processing Setup（处理设置）窗口打开。
2. 单击 View（查看）栏的 **Programs（程序）** 按钮。Programs（程序）视图显示。选择 Enable（启动）复选框激活一行。
3. 双击 **Program or Macro Name（程序或宏名称）**，浏览至 ExcelExp.exe（见下一步中的路径）
4. Parameters（参数）框内的 Type（类型）程序参数。

**注释** 如果在处理方法中使用 ExcelExp.exe 作为 Programs（程序）输入，请使用 %F 作为补位符号。当程序运行时，%F 被当前结果文件名取代。另外，请避免从 ExcelExp.exe 运行 /ESUMMARY。最好通过选择 Actions > Batch Reprocess 从 Sequence Setup（序列设置）窗口利用批次处理创建总结报告。选择 Print Summary Reports（打印总结报告）复选框打印当前序列中所有样品的总结报告。

Program or Macro Name（程序或宏名称）：

```
c:\xcalibur\system\programs\ExcelExp.exe
```

Parameters（程序）框：

```
/ERESULT /F%F /TXLS
```

## XConvert.exe

Xcalibur 应用程序将一种数据格式的源文件转换为另一种数据格式的目标文件。

表 46. 数据格式转换

| 源文件        | 扩展名      |
|------------|----------|
| Xcalibur   | (* .raw) |
| ICIS       | (* .dat) |
| GCQ        | (* .ms)  |
| Magnum     | (* .ms)  |
| ANDI       | (* .cdf) |
| Mass Lab 2 | (* .raw) |
| Lasermat   | (* .*)   |
| 目标文件       | 扩展名      |
| Xcalibur   | (* .raw) |
| ICIS       | (* .dat) |
| ANDI       | (* .cdf) |
| Text files | (* .txt) |

**注释** Xcalibur 数据系统目前不支持所有的互换组合。当出现不支持的转换请求时，系统会发布一个信息。

## 执行

从 Home Page（主页）窗口的 Road Map（导航图）视图选择 **Tools > File Converter**。打开 **Thermo File Converter** 对话框。如果双击位于 Xcalibur > System > Programs directory 的 XConvert.exe，显示同一个对话框。

还可以从下列命令行运行 XConvert.exe：

从 Home Page（主页）窗口的 Sequence Setup（序列设置）视图选择 **Actions > Run This Sample** 或 **Actions > Run Sequence**。当 Run Sequence dialog box（运行序列对话框）打开时，使用 Pre Acquisition（预采集）或 Post Acquisition（后采集）命令行框。

从 Processing Setup（处理设置）窗口的 Programs（程序）视图使用 Program or Macro Name（程序或宏名称）命令行框。

## 自动文件转换

可以利用 Xcalibur Convert.exe 应用程序并在 Action（操作）列表中选择 Run Program（运行程序），自动转换和保存创建于数据系统内的文件。

命令行格式为：

*Path\XConvert /SSource Type /DDestination Type Source  
Path/File /O Destination Directory.*

其中 /SSource Type、/DDestination Type 和 Source Path/File 是必需的。如果正在 Processing Setup（处理设置）窗口的 Programs（程序）列中使用这个命令行，可以忽略到达 XConvert 的路径。

这些是目前支持的源文件和目标文件类型：

源文件类型：Xcalibur (.raw) file [L], ICIS (.dat) file [I], ANDI (.cdf) file [A]

目标文件类型：Xcalibur (.raw) file [L], ICIS (.dat) file [I], ANDI (.cdf) file [A], Text (.txt) file [T]

实例：

- 若要将一个位于最近指定的源目录的文件（myfile.raw）从 Xcalibur (.raw) 文件格式转换为 ICIS (.dat) 文件格式，请使用下列命令行：

**C:\Xcalibur\system\programs\XConvert %R /SL /DI,**  
其中 %R 是路径中的当前原始文件。

- 若要将一个位于 C:\Xcalibur\data 的文件（myfile.raw）从 Xcalibur (.raw) 文件格式转换为 ANDI (.cdf) 文件格式，请使用下列命令行：

**C:\Xcalibur\system\programs\XConvert /DA /SL %R,**  
其中 %R 是路径中的当前原始文件。

- 若要将位于 C:\Xcalibur\data 的文件（myfile.raw）从 ICIS (.dat) 文件格式转换为 Xcalibur (.raw) 文件格式，且结果文件 .raw 被保存在 C:\temp 路径下，请使用下列命令行：

**C:\Xcalibur\system\programs\XConvert /SI /DL C:\Xcalibur\data\myfile.dat  
/O C:\temp**



# 索引

## A

Actions (操作) 菜单  
 Home Page 113  
 Add Programs to Tool Menu 对话框 78  
 Advanced Parameters 对话框  
 图 23  
 显示 23  
 注释 23

## B

Batch Reprocess Setup 对话框  
 显示 35, 52  
 百分比测试 28  
 报告  
 从 Sequence Setup 打印 52  
 指定模板 50  
 报告模板  
 描述 50  
 指定 50  
 保留时间, 确定 17

## C

Calibration Options 对话框  
 图 10  
 显示 10  
 Calibration 页面  
 图 26  
 显示 24  
 Comment 对话框 79  
 程序  
 为组分匹配扫描过滤器 15  
 处理方法  
 保存 29  
 添加到序列中 32  
 在 Quan Browser 中修改 39

## D

Detection 页面  
 图 24  
 导航图 98  
 定量  
 流程图 3

## E

Edit (编辑) 菜单, Home Page 101–102, 106–108, 114  
 ExcelExp.exe 126

## F

File 菜单 - Instrument Setup 89  
 File Summary Information (文件总结信息) 对话框  
 图 29  
 显示 29  
 File Summary Information 对话框  
 使用 34  
 Finnigan Security Server  
 功能 67  
 确认性质 67  
 Finnigan Security Server Properties 对话框 68  
 General 页面 68  
 Log On 页面 69  
 峰  
 积分参数, 输入 22  
 检测参数, 输入 23  
 设置默认识别参数 19  
 未解析 23  
 峰积分  
 输入参数 21  
 峰检测  
 输入参数 21

## H

Home Page 窗口 96

## J

ICIS Advanced Parameters 对话框  
 图 23  
 注释 23  
 Identification 页面  
 图 9, 12, 14, 16–19, 21  
 显示 8  
 积分, 峰  
 检测页面 22  
 输入参数 22  
 Information 视图, Status 页 97  
 Instrument 菜单 - Instrument Setup 90  
 检测, 峰, 输入参数 23

检测器, 选择类型 15

## L

Levels 页面

图 27, 29

显示 27

## M

命令行自变量 125

模板, 指定 50

目标化合物

指定组分识别设置 19

## O

Out of Date Instrument Drivers Detected 对话框 88

## P

Password 对话框 84

peak detection

Detection 页面 22

peak integration

Detection 页面 22

Processing Setup 窗口

图 9

显示 8, 13

## Q

QC 浓度水平

在 Quan Browser 中修改 39

指定 26

QC 水平

表格 28

Qual Browser 窗口

(图) 39

Quan Browser 窗口

查看结果 38

图 40

修改处理方法 39

## R

Real Time Plot 视图 99

Reports 视图

图 50, 52

显示 50

## S

security server

See Finnigan Security Server

Sequence Setup (序列设置) 视图

显示 32

Sequence Setup 视图

图 33-34

Supervisor Permission 对话框 85

色谱图

选择离子流图类型 16

色谱选项对话框

图 10

显示 10

## X

Xcalibur

Home Page (图) 8

Quan Browser 窗口 39

Sequence Setup (序列设置) 窗口 8

Sequence Setup 窗口 33

XConvert.exe 128

XReport, 指定模板 50

校正浓度水平

在 Quan Browser 中修改 39

指定 26

校正曲线

创建 38

在 Quan Browser 中修改 39

校正水平

表格 28

序列

创建 32

drugx (图) 34

将处理文件添加到 32

## Y

用户验证 67

原始文件

打开 11

打开原始文件对话框 11

## Z

质谱, 显示 17

组分

命名 14

识别 13

识别设置 13

组分校正

输入参数 24

校准页面 24