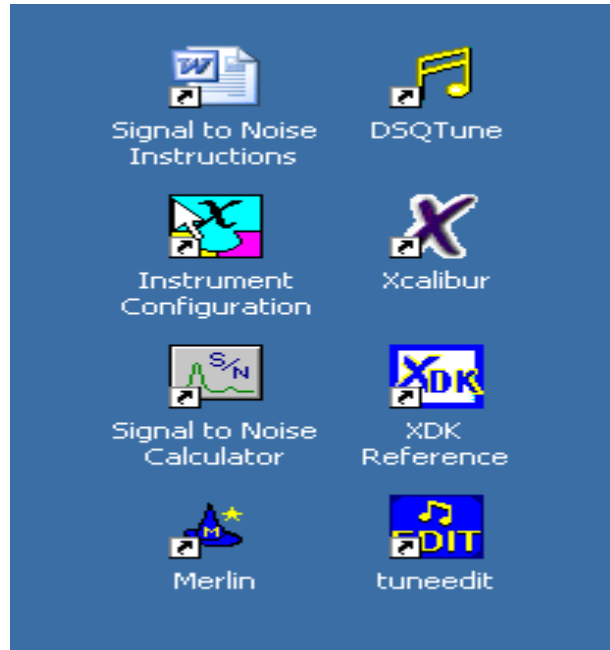

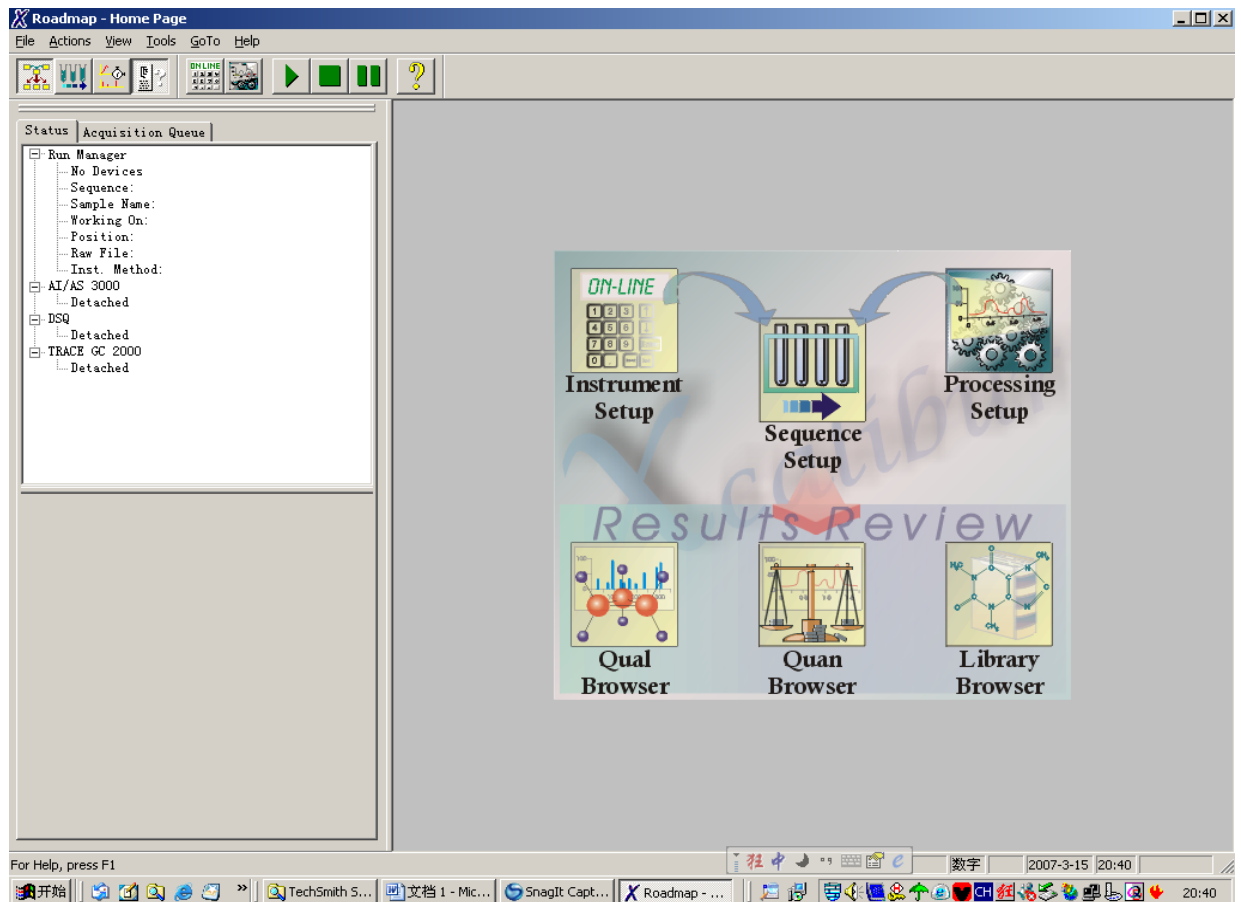



Xcalibur 定量过程

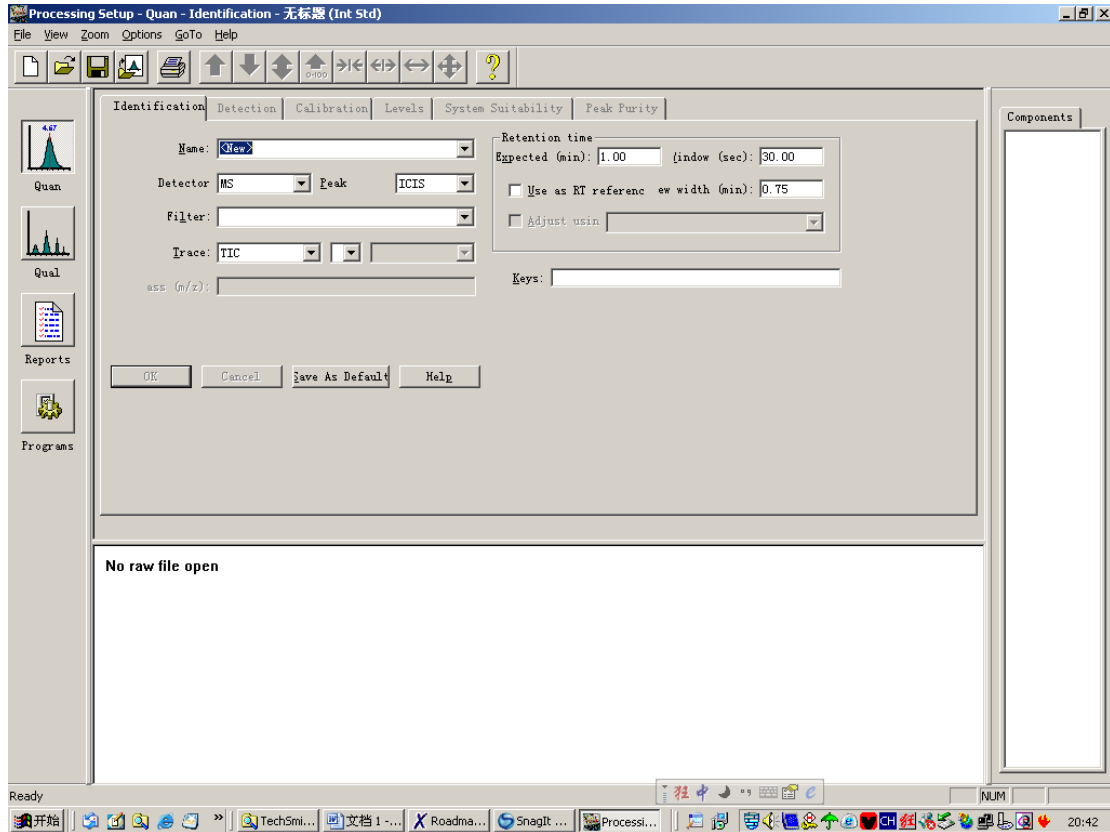



- 1、双击  图标，进入 Xcalibur 工作站。

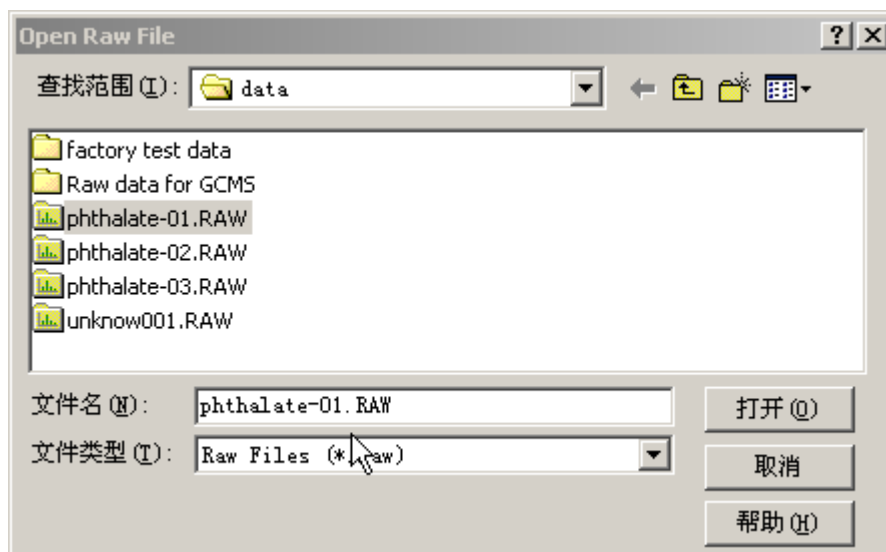




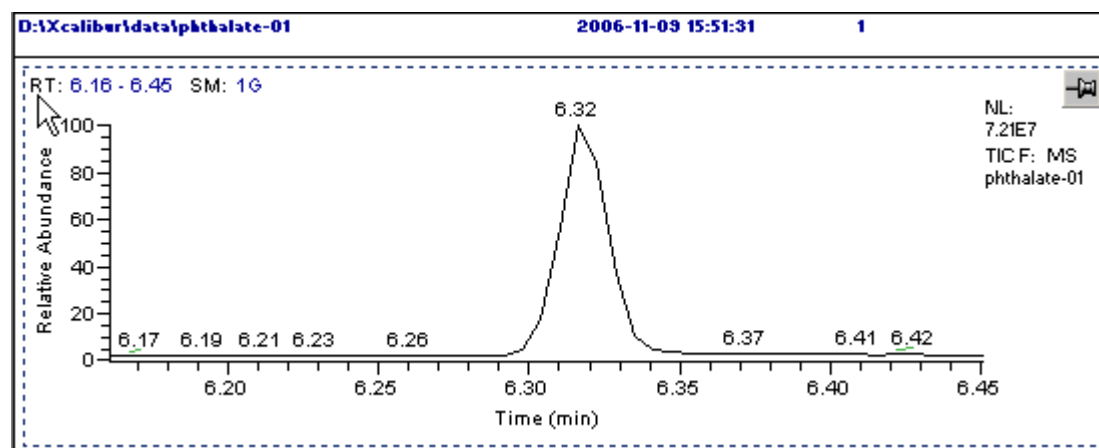
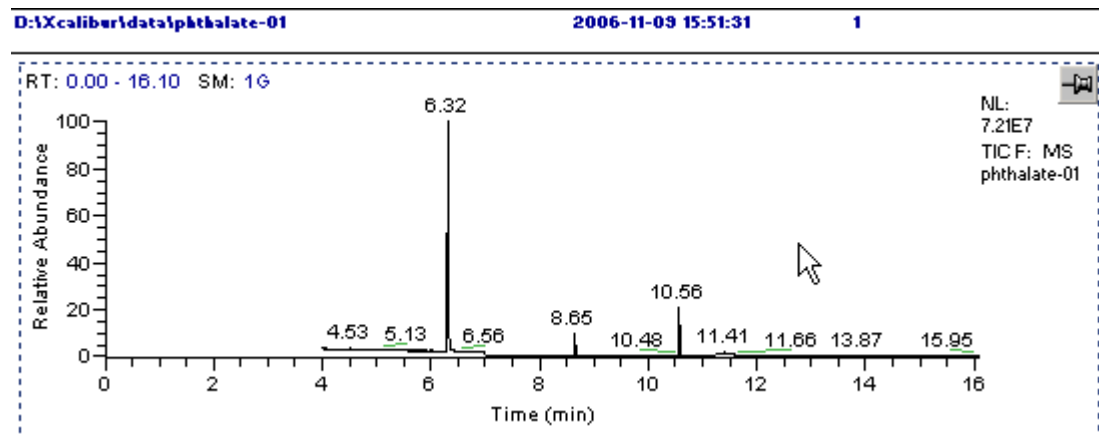
2、点击  图标，进入处理方法的界面，



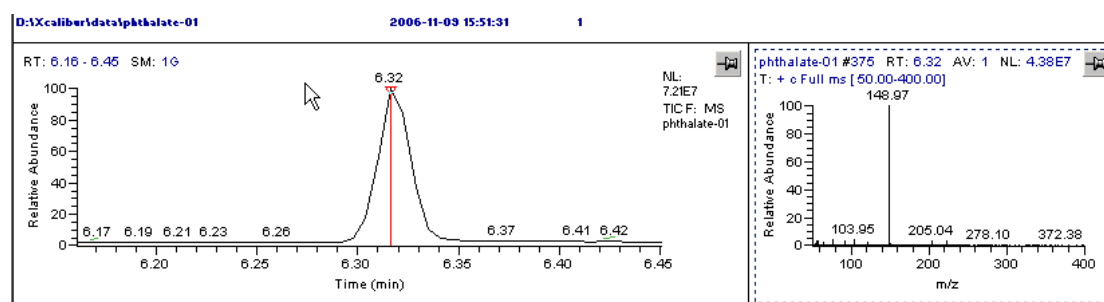
3、点击  图标，调入标准品的谱图：



4、出现标准品的谱图后，点击谱图右上角的图钉，固定谱图，然后用鼠标在选定的峰左右画一直线放大该峰。



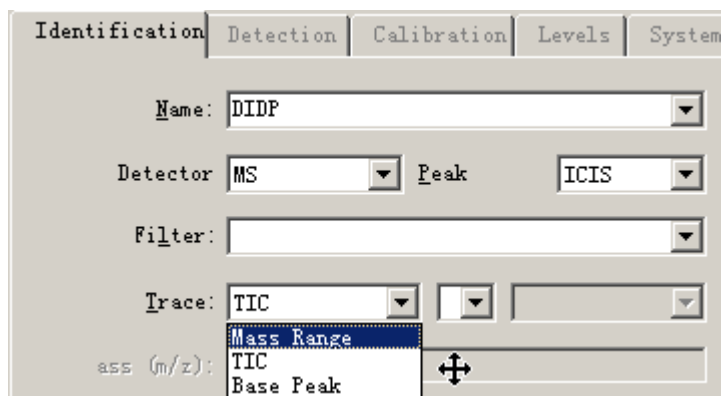
点击质谱图的右上角的图钉固定质谱图，然后用鼠标在 TIC 图中该选定的峰左右画一直线



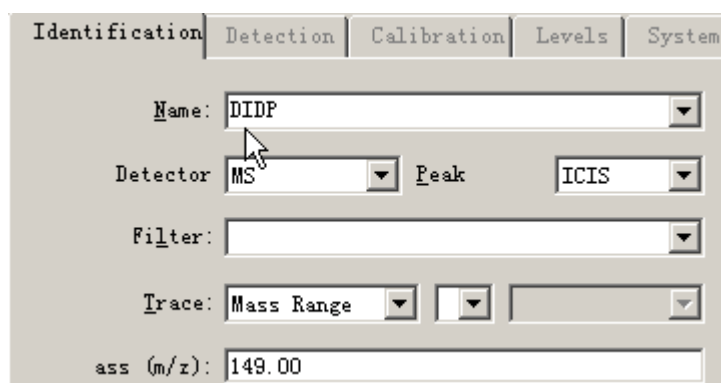
保留时间将自动填入上面的 Expected (min) 中，在 Name 中输入该组分的名称，在 Detector 中选择 MS (质谱)，Analog (气相检测器产生的信号)。

Identification	Detection	Calibration	Levels	System Suitability	Peak Purity
Name: <input type="text" value="DIDP"/>	Detector: <input type="text" value="MS"/> Peak: <input type="text" value="ICIS"/>	Retention time: Expected (min): <input type="text" value="6.32"/> (window (sec): <input type="text" value="30.00"/>		<input type="checkbox"/> Use as RT reference window width (min): <input type="text" value="0.75"/>	
Filter: <input type="text" value="MS"/>	<input type="text" value="Analog"/>	<input type="checkbox"/> Adjust using: <input type="text" value=""/>		Keys: <input type="text" value=""/>	
Trace: <input type="text" value="UV"/>	mass (m/z): <input type="text" value=""/>				

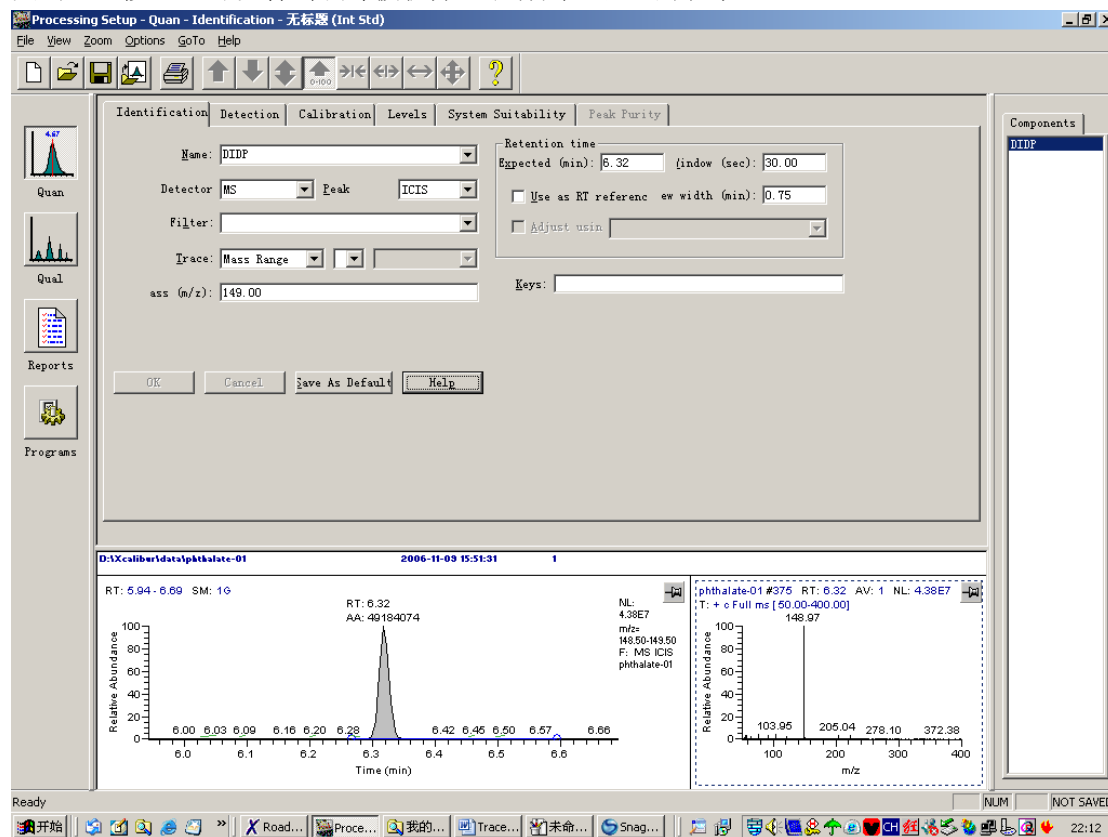
在 Trace 中选择 Mass Range (用选择离子定量), (GC 的定量没有这一步)



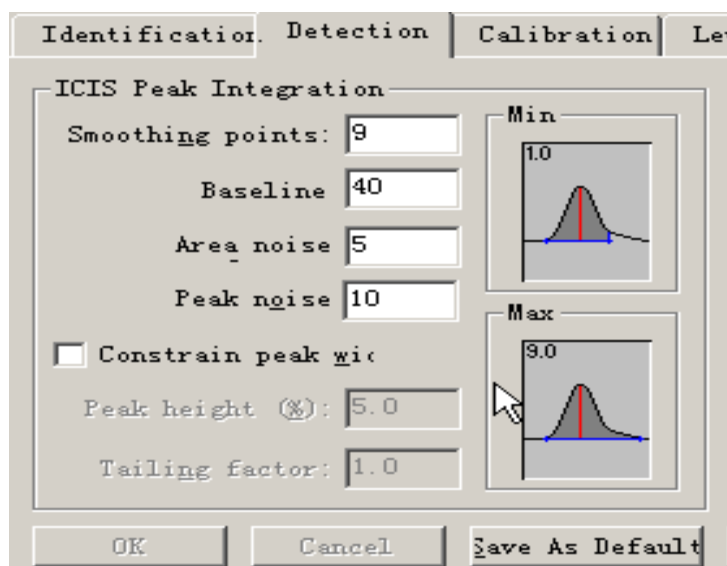
在 Mass 中输入所选择的离子数,



点击 OK 按钮, 可以看到该峰被积分, 名称列入右边的表中。

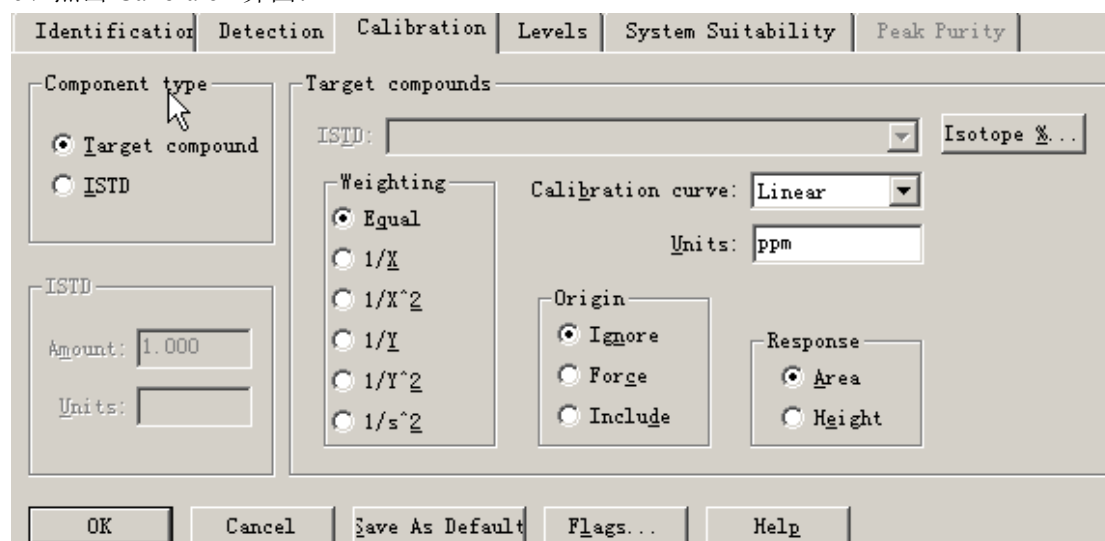


5、点击 Detection 界面:



选择合适的平滑点数、基线的宽度、面积噪音、峰噪音的值，让积分合理。最后点击 OK 按钮。

6、点击 Calibration 界面:



在 Component Type 中选择是目标化合物还是内标;

在 Weighting 中选择 Equal (权重);

在 Origin 中选择是否忽略原点、强制过原点、包含原点;

在 Calibration Curve 中选择 Linear (线性回归);

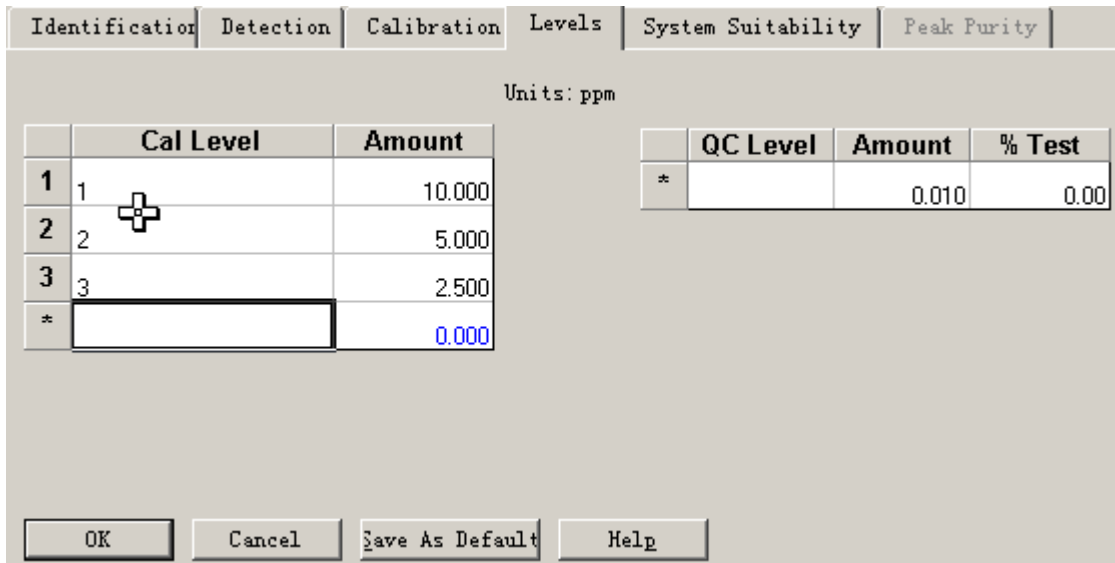
在 Units 中输入单位;

在 Response 中选择 Area (面积为计算基准)。

最后点击 OK 按钮。

7、点击 Level 界面:

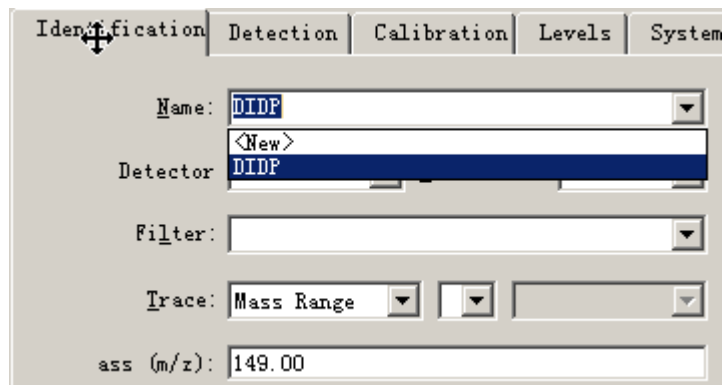
在表中输入标样中该组分的几个浓度。Cal Level 可以用不同的字母和数字表示。



点击 OK 按钮结束一个组分的输入。

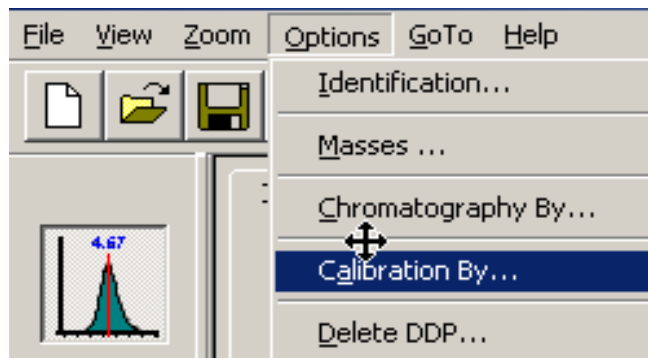
8、点击 Identification 界面：

将 Name 用下拉菜单选择 New。（非常重要的一步）

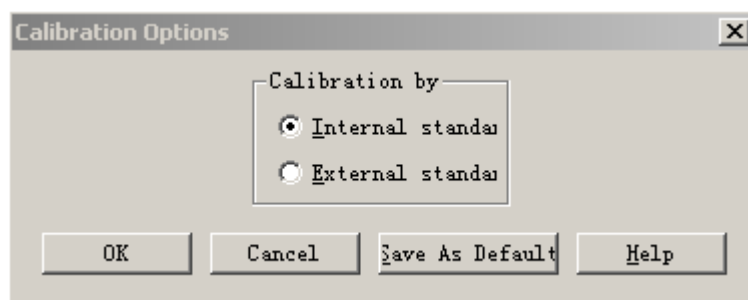


下面的 TIC 图应该恢复调入时的形状, 如果没有, 点击图标恢复。

9、重复 4-8 步进行第二、第三...组分的输入, 全部输入完毕, 在 Options 中选择 Calibration By

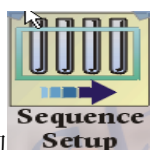


出现对话框：



选择定量方法：Internal Standard—内标定量；External Standard—外标定量，OK 确定。

10、在 File 中选择 Save as 进行保存，记住该处理方法保存的目录和名称。关闭该界面。




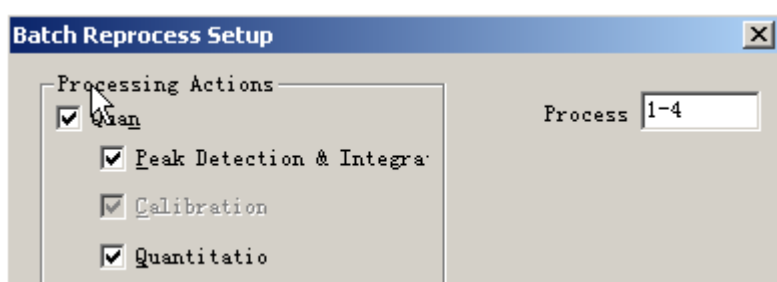
11、点击主界面的 ，进入序列表的编辑界面：

调入当初做实验时的序列表，修改其中的 Sample Type，把几个标样的 Type 从 Unknow 改成 Std Bracket，并选择对应的 Level。这个时候的 Inst Meth、Position 对处理没有影响。

	Sample Type	SampleName	File Name	Path	Inst Meth	Position	Proc Meth	Level
1	Std Bracket	Phthalate	phthalate-01	d:\xcalibur\data	D:\xcalibur\methods\test	1	D:\xcalibur\methods\test	3
2	Std Bracket	Phthalate	phthalate-02	d:\xcalibur\data	D:\xcalibur\methods\test	1	D:\xcalibur\methods\test	2
3	Std Bracket	Phthalate	phthalate-03	d:\xcalibur\data	D:\xcalibur\methods\test	1	D:\xcalibur\methods\test	1
4	Unknown	Phthalate	unknow1	d:\xcalibur\data	D:\xcalibur\methods\test	1	D:\xcalibur\methods\test	
*								

在 File 中选择 Save as 或者 Save 进行保存，记住该处理方法保存的目录和名称。

点击  进行重处理，按下图的选择进行选择，点击 OK 开始重处理，

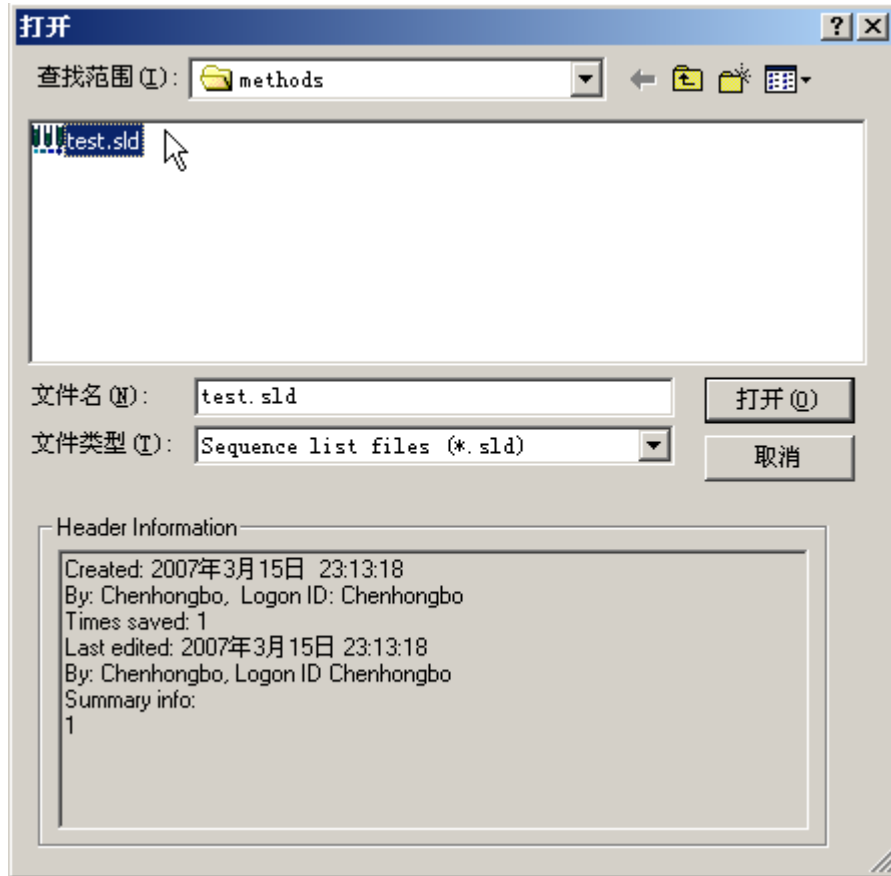


处理结束后会听到“叮咚”声音提示。

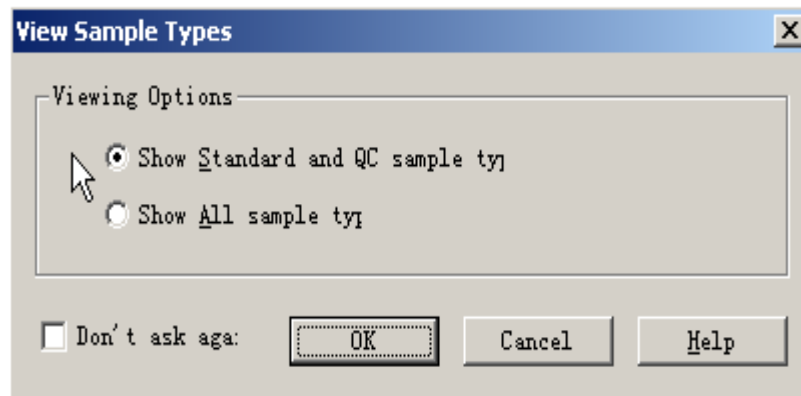


12、点击  回到主界面，点击  进入定量浏览界面：

出现一个调文件的界面，找到刚才保存的序列表的文件名，调入该文件。

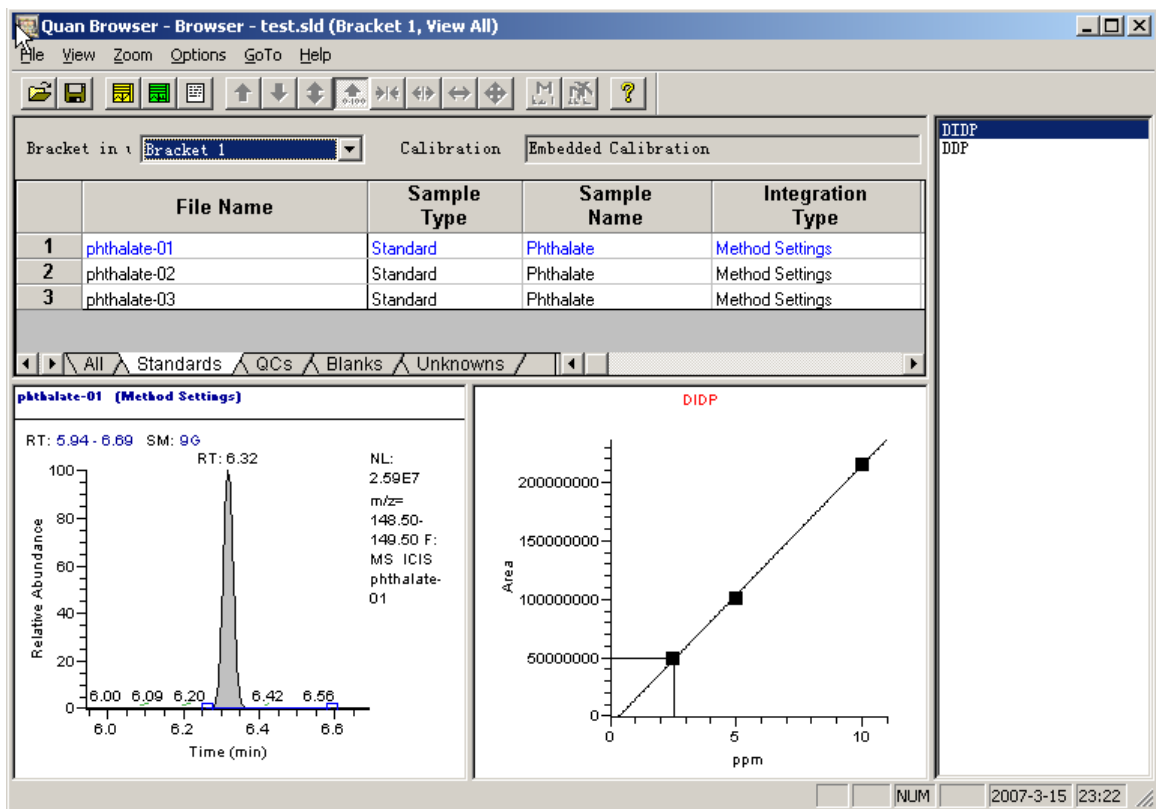


选择是否只调入标样和 QC 的结果还是调入所有样品的结果。



一般是选择 Show All Sample Type。

下图中可以看到标样和未知样中各组份的浓度、面积、偏差等参数。



如果要同时打出报告，则在第九步后作以下工作：



点击 **Reports** 图标，进入报告界面，点击下图中的 **Enable** 栏，出现白色小框后，选择它，

Sample		Sample						
	Enable	Std	QC	Unk	Other	Save As	Report Template Name	
*	<input type="checkbox"/>	Yes	Yes	Yes	Yes	None		

出现：

	Enable	Std	QC	Unk	Other	Save As	Report Template Name
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Yes	Yes	Yes	Yes	None	
*	<input type="checkbox"/>	Yes	Yes	Yes	Yes	None	

选择要打印报告的内容，一般为：

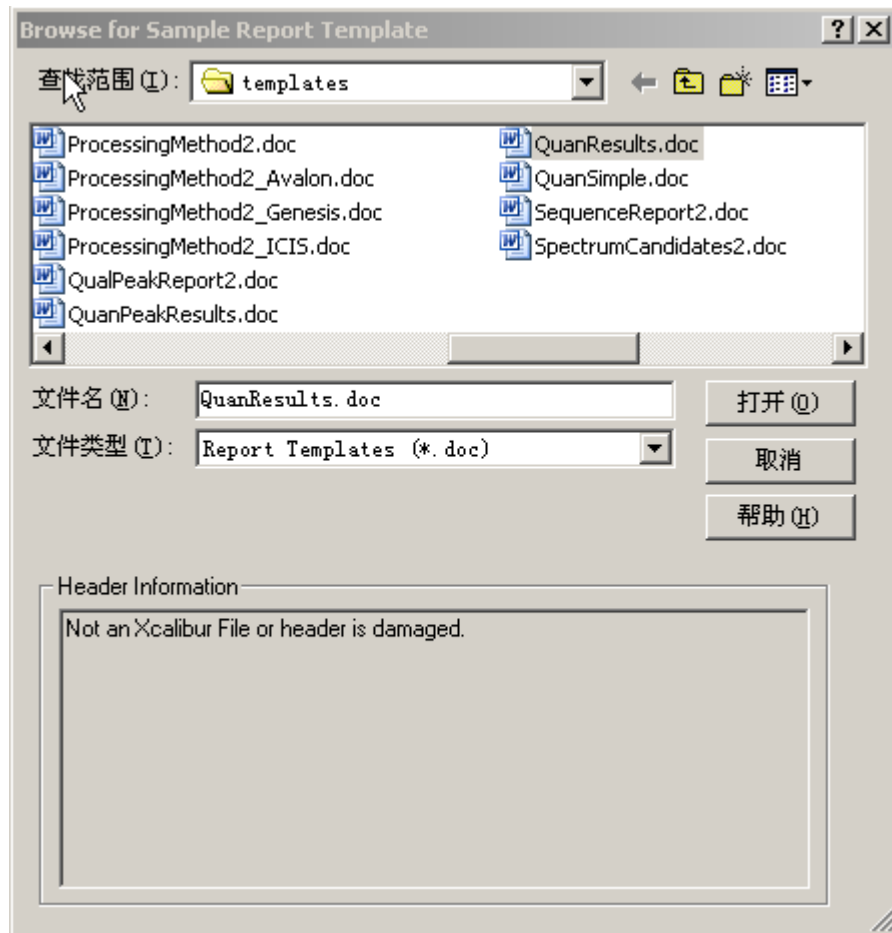
	Enable	Std	QC	Unk	Other	Save As	Report Template Name
1	Yes	Yes		Yes		None	
*		Yes	Yes	Yes	Yes	None	

然后在 Save As 中选择报告的输出格式：

	Enable	Std	QC	Unk	Other	Save As	Report Template Name
1	Yes	Yes		Yes		None	
*		Yes	Yes	Yes	Yes	None Text Doc HTML	

其中：None——输出到打印机； Text ——输出为文本文件；
Doc ——输出为 Word 文档； HTML ——输出为网页文件。

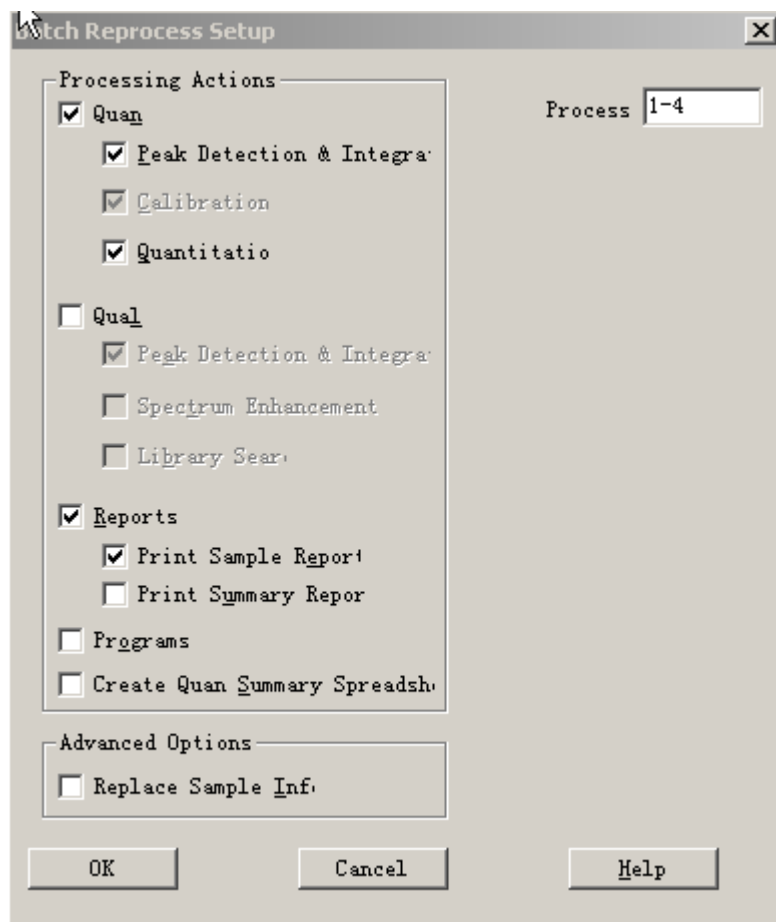
双击 Report Template Name 栏，出现报告模板的选择，选择其中已有的模板或自己编辑的模板。



	Enable	Std	QC	Unk	Other	Save As	Report Template Name
1	Yes	Yes		Yes		Doc	D:\Xcalibur\templates\QuanResults
*		Yes	Yes	Yes	Yes	None	

这样，报告的设置就全部完成，保存后退出。

在第十一步中，按了后，出现的界面要注意有改动：



重处理后，该报告文件将被存盘到原文件同一目录下，可以用 Word 打开该报告进行修改和打印。