
MultiQuant™ MD 3.0.3 软件

参考指南



本文件供已购买 SCIEX 设备的客户在操作此 SCIEX 设备时使用。本文件受版权保护，除非 SCIEX 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 SCIEX 提供以用于整合到 SCIEX 的设备中，并不意味着 SCIEX 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

SCIEX 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 SCIEX 的唯一且独有的表述、保证和义务。SCIEX 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

供体外诊断使用。

Rx only.

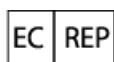
并非供与所有国家/地区。有关详细信息，请联系您的当地销售代表，或请查阅 [sciex.com/diagnostics](https://www.sciex.com/diagnostics)。

AB Sciex 采用 SCIEX 品牌开展业务。

本文件提及的商标属于 AB Sciex Pte. Ltd. 或其各自所有者的财产。

AB SCIEX™ 的使用经过许可。

© 2019 年 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.
1e Tochtweg 11,
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel
Netherlands



爱博才思有限公司 AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

IVD

CE

目录

1 软件介绍.....	7
软件帮助.....	7
文件类型.....	8
联系我们.....	8
技术支持.....	8
2 文件菜单.....	9
导入定量方法.....	10
Export Submenu (导出子菜单)	10
导出结果表.....	11
导出结果表一量度.....	13
Transfer to LIMS (传送至 LIMS)	14
3 Edit Menu (编辑菜单)	15
Modify Results Table	
Method (修改结果表方法)	17
Project Units & Calibration	
Defaults (项目单位和校准默认值)	17
Project Secure Export	
Settings (项目安全导出设置)	17
4 Process (处理) 菜单.....	19
Export Calibration (导出校准)	19
Import External Calibration (导入外部校准)	20
5 Audit Trail (审核记录) 菜单.....	21
Audit Trail Viewer (审核记录查看器)	21
在审核记录查看器中查看审核记录.....	21
进行关键词搜索.....	23
过滤已审核事件.....	23
导出审核记录查看器.....	25
打印审核记录查看器.....	25
Audit Trail Manager (审核记录管理器)	25
关于审核图.....	26
创建审核图.....	26
改动审核图.....	29
编辑审核图.....	30
查看内嵌审核配置.....	32
6 帮助菜单.....	34
7 Results Table (结果表)	35
成分与分组列表.....	36
结果表右键菜单.....	37
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All (将当前分析物的实际浓度应用到全部)	38

Column Settings (列设置)	38
样本类型过滤器	40
查看隐藏行	40
Results Table (结果表) 对话框	41
选择样本	41
Select Method (选择方法)	41
选择代表性样本	42
Define Components (定义成分)	43
定义积分	46
离群值设置	48
结果表栏	51
8 峰检查	58
手动积分	58
应用	59
关于检查峰的提示	59
峰检查右键菜单	60
峰检查选项对话框: 外观选项卡	60
峰检查选项对话框: 缩放选项卡	62
设置峰检查标题格式	64
Copy Parameters (复制参数)	65
粘贴参数	65
Set Peak to 'Not Found' (将峰设为“未找到”)	66
Use Peak (使用峰)	66
Update Quantitation Method for Component (更新成分定量方法)	66
Update Quantitation Method for Group (更新分组定量方法)	66
Apply Integration Parameters to Sample Within Group (将积分参数应用到组内样本)	67
Revert Peak to Original Method (将色谱峰还原至原方法)	67
Revert All Peaks for Component (还原成分的所有峰)	67
9 Side-by-side Sample Review (并列样本检查)	68
进行并列样本检查	68
10 “校准” 窗格	70
回归选项对话框	70
校准提示	71
校正右键菜单	71
11 统计表	73
统计表提示	74
统计表右键菜单	74
12 度量图表	75
生成度量图表	75
Save Metric Plot Settings (保存度量图表设置)	75
度量图表提示	75

度量图表右键菜单.....	76
Regression（回归）对话框.....	77
13 Quantitation Method	
Editor（定量方法编辑器）.....	78
成分选项卡.....	78
分组子菜单.....	79
内标物子菜单.....	80
积分选项卡	81
突出显示成分对话框.....	82
Update Retention Time（更新保留时间）对话框.....	82
离群值设置选项卡	83
14 定量分析工作流程教程:	85
关于校准曲线.....	85
前提条件.....	85
修改结果表中所显示的列.....	85
用 SignalFinder™ 积分算法处理数据.....	86
设置峰积分参数.....	87
创建一个结果表.....	87
检查峰.....	91
修改校准曲线.....	92
查看样本统计.....	93
用 MQ4 积分算法处理数据.....	94
设置峰积分参数.....	94
创建一个结果表.....	95
检查峰.....	99
修改校准曲线.....	100
查看样本统计.....	101
积分算法.....	102
关于 SignalFinder 积分算法.....	102
SignalFinder™ 积分算法参数.....	105
MQ4 积分算法参数.....	109
可选任务.....	111
创建度量图表.....	112
创建自定义列.....	112
关于定量方法文件和内嵌方法.....	112
A 积分算法参数.....	114
SignalFinder 积分算法参数.....	114
MQ4 积分算法参数.....	116
B 回归方程.....	119
加权系数.....	120
回归.....	120
Linear（线性回归）.....	121
过零点线性.....	121
平均响应因子.....	121
二次.....	121
乘方.....	122
瓦格纳.....	122
Hill.....	122
Calculating Final	
Concentrations（计算最终浓度）.....	123

目录

线性.....	123
过零点线性和平均响应因子.....	123
二次.....	123
电源.....	123
Wagner.....	123
Hill.....	123
C 报告.....	124
Create Report（创建报告）.....	124
创建自定义报告模板.....	125
报告模板.....	126
报告模板标签.....	127
D 相对噪声和信噪比计算.....	138
使用 SignalFinder 积分算法时请注意信噪比.....	142
E 软件图标.....	143
F MultiQuant™ MD 软件使用权限.....	149
安全设置.....	151
修订历史记录.....	154

本文介绍 MultiQuant™ MD 软件中提供的功能。

软件的访问基于为 Analyst® MD 软件内的用户分配的角色。一定要正确指定每一位用户的软件使用权限。

仅支持英文版的如下 Windows 操作系统。

- Windows 7 SP1 (32 位和 64 位)
- Windows 10

小心： 数字、货币、日期和时间格式必须设为英语（美国）。 将格式设置为其他值可能会导致数据出错。

不含审核记录和安全功能的 MultiQuant™ MD 软件需要安装完整的许可证和 Analyst® MD 软件。

从软件中输出数据的管理方式是导出 Results Tables（结果表），转移至 LIS 和报告。输出数据的其他来源不受管制，如从 Results Tables（结果表）中复制或粘贴。用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。

注释： MultiQuant™ MD 软件使用 Analyst® MD 软件屏幕锁信息。无需再对 MultiQuant™ MD 软件进行其他设定。

注释： 文件和文件夹结构必须保留，以便能够查看色谱图。如果必须移动数据，就需要移动整个项目，以保持文件结构不变。

软件帮助

软件中有工具提示和出错提示，可以提供软件功能的其他信息。

- 如果某个字段不可用，可以将光标移动到该字段上方，通过显示的工具提示了解该功能不可用的原因。其他信息包括如何启用该字段或者需要哪些安全设置来启用该字段。
- 出错提示包括关于使用该功能所需的安全设置方面的信息。

文件类型

表 1-1 软件文件类型

文件类型	描述
*.qsession	MultiQuant 软件结果表。 保留定量审核记录数据。
*.qmethod	MultiQuant 软件定量方法。
*.qmap	MultiQuant 软件审核图。
*.mqcal	外部校准文件。
*.cset	列设置文件。

联系我们

SCIEX 支持

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

客户培训

- 北美地区 NA.CustomerTraining@sciex.com
- 欧洲 Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 欧盟与北美以外地区，请访问 sciex.com/education 获取联系信息。

在线学习中心

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/sciexuniversity)

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南，请访问 sciex.com/productsecurity。

技术支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。详情请访问 SCIEX 网站 sciex.com。

表 2-1 文件菜单选项

菜单选项	描述
New Results Table (新结果表)	对一个数据集合进行定量，并创建一个 Results Table（结果表）。选择待处理的数据文件以及待应用的定量方法。 请参阅 Results Table（结果表）对话框 页码 41 。
新建定量方法	选好样本后，系统就会创建一个空白的定量方法编辑器。用户通常可以在 New Results Table（新建结果表）向导程序中创建一个方法。不过，如果用户希望创建一个方法，但不想立即应用到创建结果表的样本集合，就可以使用该方法。 <ul style="list-style-type: none">• 导航窗格中会显示选定项目的子文件夹、wiff 文件以及 Data 文件夹项下的样本。• 展开各个文件夹查看子文件夹或 wiff 文件。展开 wiff 文件显示现有样本。
Open Results Table (打开结果表)	打开之前保存的结果表。选择该命令后，就会出现一个标准 Open（打开）对话框。 请参阅 Results Table（结果表） 页码 35 。
Open Quantitation Method (打开定量方法)	打开之前保存的定量方法。选择该命令后，就会出现一个标准 Open（打开）对话框。 请参阅 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器） 页码 78 。
Save（保存）	用于将当前 Results Table（结果表）或 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）保存到文件中。如果 Results Table（结果表）或 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）从未保存过，系统就会提示用户输入文件名。否则就会将之前的版本覆盖。
另存为	用于将当前 Results Table（结果表）或 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）保存到一个新文件中。
Recent Results Table (最近的结果表)	其中包含了最近使用的每一个结果表的子菜单项。从中选择一项可打开相应的文件。
Recent Quantitation Method (最近的定量方法)	其中包含了最近使用的每一个定量方法的子菜单项。从中选择一项可打开相应的文件。

表 2-1 文件菜单选项 （续）

菜单选项	描述
Import （导入）	从文本文件创建一个新的定量方法。 通常情况下，用户可以用 New Quantitation Method（新建定量方法）命令（请参阅 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器） 页码 78 ）手动创建一个方法，或者在创建新结果表（请参阅 Results Table（结果表） 页码 35 ）的过程中创建。 如果用户希望创建或修改定量方法，可以使用该命令。 在这种情况下，需手动创建一个方法，然后用 Quantitation Method as Text（文本型式定量方法）命令。
Export （导出）	包含以 .qmethod 或 .txt 文件导出定量方法的命令。 请参阅 Export Submenu（导出子菜单） 页码 10 。 从软件中输出数据的管理方式是导出Results Tables（结果表），转移至 LIMS 和报告。 输出数据的其他来源，比如从结果表复制和粘贴未受到控制。 用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。
Transfer to LIMS（传 送至 LIMS）	需要有 LIMS 许可证文件来激活该功能。 请参阅 Transfer to LIMS（传送至 LIMS） 页码 14 。
导出并保存结果表	导出结果表是受控的数据导出方法之一。
创建报告并保存结果表	用 Reporter 文件创建一个 Microsoft Word 格式的报告。 请参阅 报告 页码 124 。 在创建自定义模板时，模板的应用确认由用户负责。 用户可以在报告模板编辑器中编辑数字格式。 如果模板中未指定数字格式，则报告中会使用 Results Table Column Setting（结果表列设置）中的格式。
Exit（退出）	退出程序。 系统会提示用户保存尚未保存的数据。

导入定量方法

1. 点击 File（文件） > Import（导入） > Quantitation Method from Text（从文本导入定量方法）。
2. 选择文本文件。
3. 选择代表性的样品。

Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）打开。

4. 以 *.qmethod 格式保存方法，使其随后可用于定量新的数据集。

Export Submenu（导出子菜单）

从软件中输出数据的管理方式是导出Results Tables（结果表），转移至 LIMS 和报告。 输出数据的其他来源不受管制，如从Results Tables（结果表）中复制或粘贴。 用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。

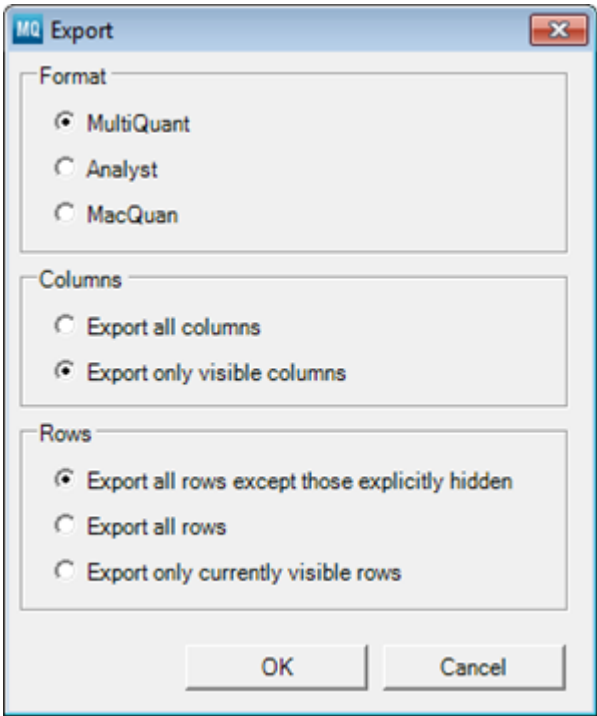
表 2-2 导出菜单选项

菜单选项	描述
Results Table-Metric (结果表一量度)	创建一份分栏的文本文件，其中包含处于活动状态的 Results Table (结果表) 的信息。 请参阅 导出结果表一量度 页码 13 。
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod (结果表的定量方法为 *.qmethod)	将定量方法导出到一个新文件中。 结果表创建完成后，用来创建结果表的定量方法的副本就被保存在表内。 如果原定量方法被删除或修改，而用户希望将原来的定量方法应用到创建结果表的新样本批次，则该命令较为适用。
Results Table's Quantitation Method as Text (结果表的定量方法为文本)	以文本格式导出该方法的副本。 结果表创建完成后，用来创建结果表的定量方法的副本就被保存在表内。
Quantitation Method as Text (定量方法为文本)	这些文件中包含一个标题行和每种成分（分析物或内标物）单列的行。成分名称、质量范围、每一种积分参数等等，均各有一列。 如果要向 MultiQuant™ MD 软件导入定量方法，不得修改标题行，也不得添加或删除列。如果指定积分参数的列的标题行被修改，或者该列本身被删除，则在 User Integration Defaults (用户积分默认值) 中为该积分参数指定的默认值将适用于所有组件。 如果任何其他列的标题行被修改或被删除，则不会导入定量方法。 用户应打开定量方法，确认在所导入的定量方法中存在所需的全部修改。 请参阅 表 2-1 。

导出结果表

注释： 数据从软件导出之后，制造商不承担包括间接或推定损失在内的任何责任或连带责任。 Results Table (结果表) 是以全精度的方式导出的，与色谱柱设置中的数字格式无关。

图 2-1 Export（导出）对话框



标签	描述
格式	
MultiQuant	选择以全精度方式导出。 在该格式中，文本文件有一个标题行，标题行使用的名称与 Results Table（结果表）中显示的名称相同。 这是导出 Results Tables（结果表）的推荐格式。
Analyst	选择以列设置中定义的精度导出。 该格式与通过 Analyst® MD软件定量 Results Tables（结果表） 导出的格式相同。该格式与前面的格式之间的差别在于，它在某些情况下使用的列题头的名称稍有不同（为了与 Analyst® MD 软件的格式匹配），而且每一种分析物另有一个描述校准的标题行。
MacQuan	此格式类似于 Analyst® MD 软件，除了列题头名称要与 MacQuan 定量软件包所使用的名称匹配。
色谱柱	
Export all columns （导出所有列）	选择导出所有可能的字段，包括结果表内那些当前隐藏的列。
Export only visible columns（仅导出可见 列）	选择只导出结果表内当前显示的列。 用户也可以用 Results Table Column Settings（结果表列设置）命令设置哪些列可见。 请参阅 结果表右键菜单 页码 37 。
行	

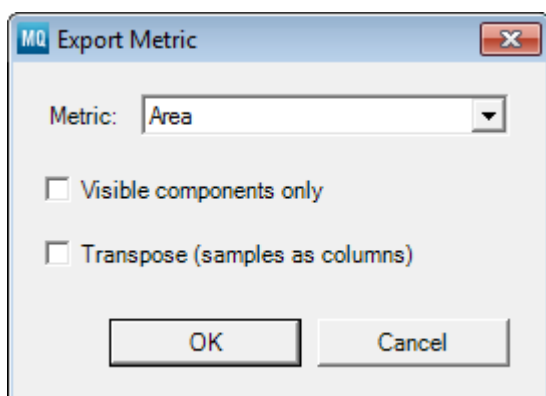
标签	描述
Export all rows except those explicitly hidden (导出除明确隐藏以外的所有行)	选择导出除了那些因为特别过滤而隐藏的所有行。 请参阅 软件图标页码 143 。 因为 Sample Type (样本类型) 过滤或 Component (成分) 过滤而被隐藏的行将被导出。
Export all rows (导出所有行)	选择导出所有行 (即所有样本的所有成分)。
Export only currently visible rows (仅导出当前可见的行)	选择只导出结果表内当前显示的行。 因为 Sample Type (样本类型) 过滤或 Component (成分) 过滤而被隐藏的行不包括在内。

导出结果表一量度

注释： 数据从软件导出之后，制造商不承担包括间接或推定损失在内的任何责任或连带责任。 Results Table (结果表) 是以全精度的方式导出的，与色谱柱设置中的数字格式无关。

用于创建一份分栏的文本文件，其中包含了处于活动状态的 Results Table (结果表) 的信息。

图 2-2 Export Metric (导出量度) 对话框



标签	描述
量度	选择待导出的字段。 请参阅 结果表栏 页码 51 。
Visible components only (仅限可见成分)	如果选择了该选项，那么只有那些当前至少有一个对应的行在结果表中出现的成分才会被导出到文件中。 如果未选择该选项，则所有成分的信息均被导出。
变换 (样本以列的形式显示)	如果选择该选项，则在结果文件中，每一种样本都显示为一列，而每一种成分 (分析物或内标物) 都显示为一行。 如果未选择该选项，则每种成分都显示为一列，每一种样本都显示为一行。

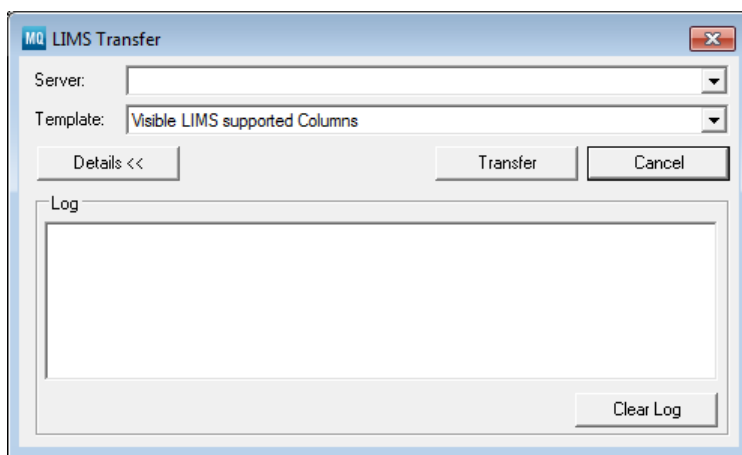
Transfer to LIMS（传送至 LIMS）

该命令只有在有结果表打开时才可用。 需要有 LIMS 许可证文件来激活该功能。

从软件中输出数据的管理方式是导出Results Tables（结果表），转移至 LIMS 和报告。 输出数据的其他来源不受管制，如从Results Tables（结果表）中复制或粘贴。 用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。

1. 单击 Help（帮助） > Install License（安装许可）来激活许可证。

图 2-3 LIMS Transfer（LIMS 传送）对话框



2. 按以下格式在 Server（服务器）字段中键入服务器名称：http:\\服务器 IP 地址；端口号。
3. 从 Template（模板）列表选择一个模板。
4. 单击 Transfer（传送）。

表 3-1 Edit Menu Options（编辑菜单选项）

菜单选项	描述
Clear（清除）	清除当前选择。当 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）中的 Components（成分）选项卡有一行或多行已经被选中时，可应用该选项。
复制	当 Results Table（结果表）处于活动状态时，该命令会将表中被选中的部分复制到粘贴板上。当 Peak Review（峰查看）或 Calibration（校准）图处于活动状态时，就会将图进行复制。
粘贴	当 Results Table（结果表）处于活动状态并带有一个可编辑的选定区时，该命令就会从粘贴板粘贴单元格或列。
Copy Entire Table（整表复制）	当 Results Table（结果表）或 Statistics Table（统计表）处于活动状态时，该命令就会将所有数据复制到粘贴板。如果是 Results Table（结果表），就只复制可见行和列。
Fill Down（向下填充）	当 Results Table（结果表）处于活动状态并带有一个可编辑的选定区时，该命令就会将选中的第一行的信息复制到后面的所有的选定行中。
Select all Rows（选择所有行）	在当前活动的 Results Table（结果表）或 Statistics Table（统计表）中选中所有行。如果用户接下来想对选中的行应用某个命令，如 Copy（复制），该命令较为适用。
Modify Results Table Method（修改结果表方法）	<p>对与当前活动中的 Results Table（结果表）相关联的定量方法进行改动。如果用户想添加或删除成分，该命令较为适用。如果只修改积分参数，可使用 Update Quantitation Method for Group（更新组的定量方法）。请参阅峰检查 页码 58。</p> <p>选中命令后，就会出现 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）对话框。数据将被重新处理，并更新 Results Table（结果表）以显示数据。请参阅 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器） 页码 78 和 Results Table（结果表）对话框 页码 41。</p> <p>重新应用 Quantitation Method（定量方法），将所有通过手动方式改动过的指定成分的峰覆盖，然后在 Results Table（结果表）中清除 Modified（已修改）复选框的勾选。</p>
Project Integration Defaults（项目积分默认值）	设置创建定量方法时所使用的默认找峰参数。如果成分较多，可根据色谱设置默认值，这样就无需对每一种成分进行逐个调整。不过，没有哪一个参数集合多余所有成分都是理想的，因此，对于某些成分而言，可能需要对某些参数逐一进行调整。请参阅 积分算法参数 页码 114 。

表 3-1 Edit Menu Options (编辑菜单选项) (续)

菜单选项	描述
Project Units & Calibration Defaults (项目单位和校准默认值)	设置创建定量方法时所使用的默认浓度单位和回归参数。用户也可以在创建方法本身时设置这些参数。不过, 如果使用相同的设置, 那么在使用该命令之后再设置默认值会更简单。请参阅 Project Units & Calibration Defaults (项目单位和校准默认值) 页码 17。
Project Secure Export Settings (项目安全导出设置)	选中该项后, 文本文件中的数据在导出过程中会被加密。设置一个用于解密的密码。请参阅 Project Secure Export Settings (项目安全导出设置) 页码 17。
Enable Project Modified Peak Warning (启用项目改峰警告)	默认为不选。如果选中该项, 当用户在 Results Table (结果表) 中对某个色谱图进行改动并保存改动时, 就会出现一条警告, 提示用户已作改动。用户可以选择继续保持, 或者返回 Results Table (结果表)。请参阅 Modify Results Table Method (修改结果表方法) 页码 17。
Cache Chromatograms for Faster Peak Review (缓存色谱图以加快色谱峰检查速度)	<p>启用该功能后, 在每次针对某个样本计算提取的离子色谱图 (XIC) 时, 只要与之相关的 Results Table (结果表) 处于打开状态, 就会将色谱图保存供今后使用。</p> <p>例如, 如果用户在该功能被启用的情况下创建一个 Results Table (结果表), 则 Peak Review (色谱峰检查) 窗格中的的色谱图就会迅速出现, 因为这些色谱图在之前创建, 因为这些色谱图在之前创建 Results Table (结果表) 的初步积分处理过程中已经保存在缓存中, 无需再用 wiff 文件中的信息重新进行计算。如果用户打开一个之前保存的 Results Table (结果表), 当各个谱图第一次出现在 Peak Review (色谱峰检查) 窗格中时, 必须经过计算。不过, 返回之前的某个色谱图的速度会更快。</p> <p>要将所有色谱图保存在缓存中, 电脑就要有足够的内存。不过, 对于分析物数量众多的庞大样本集合而言, 应当禁用该选项, 以免信息超过内存容量。</p>
Cache all Chromatograms Now (立即将所有色谱图存入缓存)	<p>启用 Cache Chromatograms for Faster Peak Review (缓存色谱图以加快色谱峰检查速度) 命令后, 该命令将被用来计算处于活动状态的 Results Table (结果表) 的所有色谱图, 然后将其存入缓存。对于较大的数据集合而言, 执行该命令可能需要一段时间。不过, 完成命令后, 所有色谱图都会存入缓存, 色谱峰检查的速度会加快。必要时可停止该命令。</p> <p>如果要查看很多色谱图, 可以采取该操作。如果一开始就启用了 Cache Chromatograms for Faster Peak Review (缓存色谱图以加快色谱峰检查速度) 选项, 在新建 Results Table (结果表) 之后便无需再进行该操作, 因为色谱图已在缓存中。打开之前保存的 Results Table (结果表) 之后, 用该命令较为适用。</p>

Modify Results Table Method (修改结果表方法)

对与当前活动中的 Results Table (结果表) 相关联的定量方法进行改动。如果用户想添加或删除成分, 该命令较为适用。如果只修改积分参数, 可使用 Update Quantitation Method for Group (更新组的积分方法) 命令。请参阅 [Update Quantitation Method for Group \(更新分组定量方法\)](#) 页码 66。

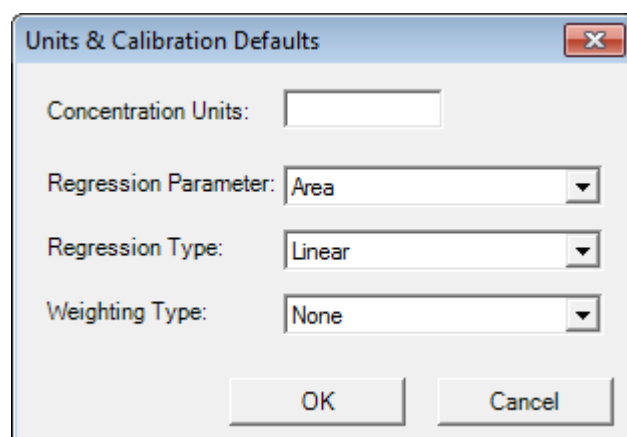
选中命令后, 就会出现 Quantitation Method Editor (定量方法编辑器) 对话框。数据将被重新处理, 并更新 Results Table (结果表) 以显示新数据。请参阅 [Quantitation Method Editor \(定量方法编辑器\)](#) 页码 78。

重新应用 Quantitation Method (定量方法), 将所有通过手动方式改动过的指定成分的峰覆盖, 然后在 Results Table (结果表) 中清除 Modified (已修改) 复选框的勾选。

Project Units & Calibration Defaults (项目单位和校准默认值)

设置 Concentration Units (浓度单位), Regression Parameter (回归参数) (面积或高度) Regression Type (回归类型) 以及 Weighting Type (加权类型)。各种回归和加权类型的介绍详见 [回归方程](#) 页码 119。

图 3-1 单位和校准默认值



Project Secure Export Settings (项目安全导出设置)

文本文件中的数据在导出过程中会被加密。设置一个用于解密的密码。请参阅图 3-2。

图 3-2 Secure Export Settings（加密导出设置）对话框

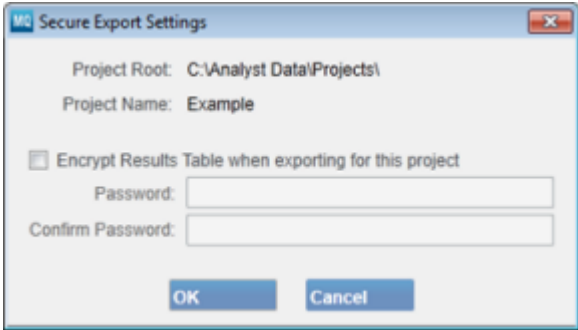


表 4-1 处理菜单选项

菜单选项	描述
Add Samples（添加样本）	向当前活动的结果表内添加一个样本。 请参阅 选择样本 页码 41 。 将新样本并入并添加到现有表内时，会出现一个进度条。 要执行该任务，用户必须启用 Add samples to Results Table（向结果表添加样本）许可。
Remove Selected Samples（删除选定样本）	从当前活动的结果表内删除选定样本。 要执行该任务，用户必须启用 Remove samples from Results Table（从结果表删除样本）许可。
Show Only Outliers（仅显示离群值）	显示含有离群值的行。 单击 Process（过程） > Show Only Outliers（仅显示离群值）。 若要显示所有行，请再次单击 Process（过程） > Show Only Outliers（仅显示离群值）。
Go to Next Outlier（跳至下一个离群值）	找到结果表中的下一个离群值。 单击 Process（过程） > Go to Next Outlier（跳至下一个离群值）。
导出校准式并保存结果表	将一份与当前结果表相关联的所有分析物的校准等式副本复制到一个外部文件 (*.mqcal)。 这样就可以将一整套标准物样本的校准式应用到不属于同一个结果表的其他样本。 请参阅 Export Calibration（导出校准） 页码 19 。
Import External Calibration（导入外部校准）	将之前导出的校准式应用到当前活动的结果表中。 另一种使用该命令的方法是从 New Results Table（新建结果表）向导程序来指定外部校准文件，如 定义积分 页码 46 所述。 请参阅 Import External Calibration（导入外部校准） 页码 20 。
Remove External Calibration（删除外部校准）	从当前活动的结果表中删除之前所应用的外部校准。

Export Calibration（导出校准）

将一份与当前结果表相关联的所有分析物的校准等式副本复制到一个外部文件 (*.mqcal)。 这样就可以将一整套标准物样本的校准式应用到不属于同一个结果表的其他样本。

典型的工作流为：

1. 创建一个仅包含 containing only the Standard（标准物）的 结果表。

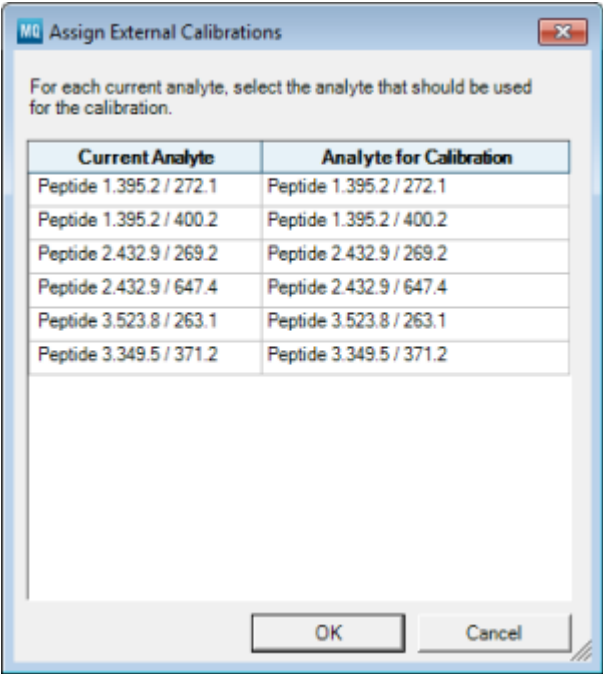
- 2. 使用 Peak Review（色谱峰检查）窗格确认积分是否正常。
- 3. 使用 Export Calibration 命令保存一份校准式副本。
- 4. 新建一个含各种未知浓度样本的 Results Table。
- 5. 用 Import External Calibration（导入外部校准）命令或通过指定校准文件将之前导出的校准式应用到新表。
- 6. 必要时，重复步骤 4 和 5。

如果原来的结果表（含标准物样本）已被改动，则之前导出的任何校准式都不会自动更新。必须重新导出结果表。

Import External Calibration（导入外部校准）

如果当前 Results Table（结果表）中使用了与导出校准中相同的分析物名称，该对话框就会自动完成，用户单击 OK（确定）即可。如果当前 Results Table（结果表）中的分析物已被分配到特定组，而导出校准中的分析物被分配到同名的组，则该对话框会自动完成。如果分析物较多，在这两种情况下都应使用相同的分析物名称，或者保持 Group（分组）名称一致。

图 4-1 Assign External Calibrations（分配外部校准）对话框



标签	描述
Current Analyte（当前分析物）	包含当前 Results Table（结果表）定量方法中每一种分析物的条目。
Analyte for Calibration（用于校准的分析物）	包含外部校准文件中所有可用分析物的名称列表。对于当前的每一种分析物，选择进行校准的相应外部分析物。

注释： 在 Results Table（结果表）首次创建的过程中，便会添加审核图。 添加后便无法改动。

表 5-1 Audit Trail（审核记录）菜单

菜单项	描述
Audit Trail Viewer（审核记录查看器）	打开 Audit Trail Viewer（审核记录查看器）。
Audit Map Manager（审核图管理器）	选择、修改和激活审核图。
View Session Audit Map（查看阶段审核图）	打开活动结果表中的当前审核图。

Audit Trail Viewer（审核记录查看器）

Audit Trail Viewer（审核历史查看器）显示的是结果表中特定样本的完整历史记录。 结果表被保存在 <驱动器>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results 文件夹中。

注释：
当执行其他操作时，不得隐藏结果表。 例如，当保存 Audit Trial（审计跟踪）时。
要最大化另一面板，比如 Peak Review（峰检查）面板，以便更好地查看数据，使用位于工具栏中的 Toggles tab mode（切换选项卡模式） 按钮。

用户可以通过 Audit Trail Viewer（审核历史查看器）来：

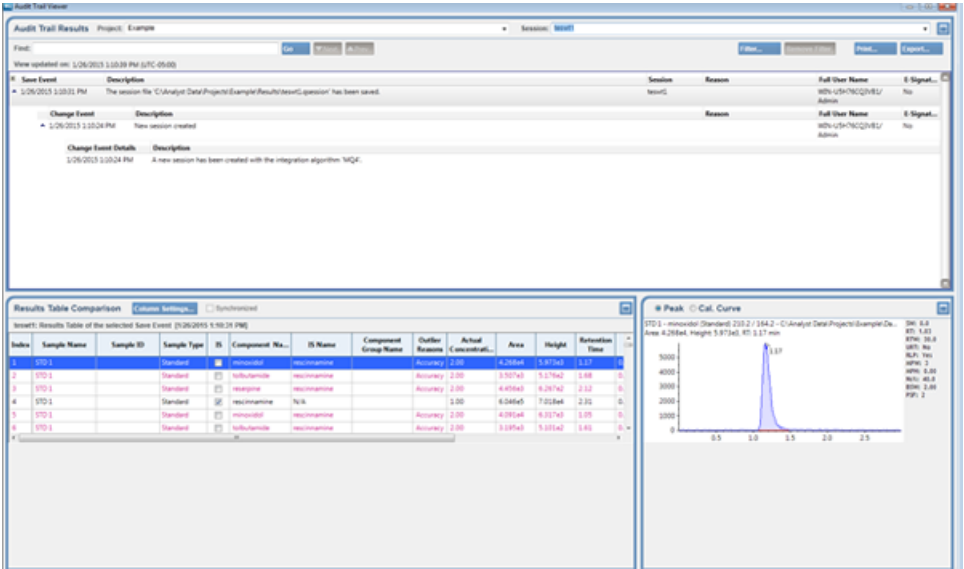
- 查看每一份结果表的审核历史记录。
- 进行关键词搜索，出现该词的每一处都会突出显示。
- 根据一套指定标准过滤软件审核记录中的已审核事件。
- 将审核历史记录导出到一个 txt 文件。导出的文件可以编辑。
- 打印一份加密的 PDF 文件。

在审核记录查看器中查看审核记录

1. 打开一个 Results Table（结果表）。

- 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Trail Viewer（审核记录查看器）。
- 若要更改项目，需单击 Projects（项目）列表，然后选择另一个项目。
- 若要查看其他阶段，需单击 Sessions（阶段）列表，然后选择另一个阶段。 用户也可以选择同时查看项目中的所有阶段。

图 5-1 Audit Trail Viewer（审核记录查看器）



标签	Description（描述）
Project（项目）	从列表中选择个项目
Session（阶段）	选择一个阶段文件。
Find（查找）	没有过滤的关键词搜索。 突出显示每种情况的文字
Go（继续）	单击开始搜索
Next（下一个）	单击移至下一个词。
Prev（上一个）	单击移至上一个词。
Filter（过滤）	单击后仅显示与选定标准匹配的事件。
Remove Filter（删除过滤器）	单击后删除过滤器。
Print（打印）	单击后打印审核记录。
Export（导出）	单击后导出审核记录。
Save Event（保存事件）	保存阶段文件后，就会创建一个保存事件。 保存事件会捕获从之前的保存事件发生的任何变动以及结果表中的每一个值。
Description（描述）	更改事件的详情。

标签	Description（描述）
Session（阶段）	显示阶段文件的名称。
Reason（原因）	显示对结果表进行改动的原因。
Full User Name（用户全名）	显示对结果表作出改动的用户的名称。
E-Signature（电子签名）	表示对结果表所作的改动是否被接受。
Column Settings（列设置）	单击后在 Results Table（结果表）中显示或隐藏列。
Synchronized（已同步）	选择后使两个结果表在水平方向同时滚动。
Previous version（之前版本）	显示选定阶段文件之前的版本。
Peak（峰）	单击后显示选定样本的峰。
Cal Curve（计算曲线）	单击后显示选定样本的计算曲线。

进行关键词搜索

用户可以进行关键词搜索，这样文中每一处出现该词的地方都会高亮显示。

1. 打开一个 Results Table（结果表）。
2. 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Trail Viewer（审核记录查看器）。
3. 在 Find（查找） 字段中键入搜索词，然后单击 Go（继续）。

如果找到匹配，Find（查找） 字段会变成绿色，并显示匹配数，搜索词则以黄色高亮显示。
如果未找到匹配，Find（查找） 字段会变成粉红色。

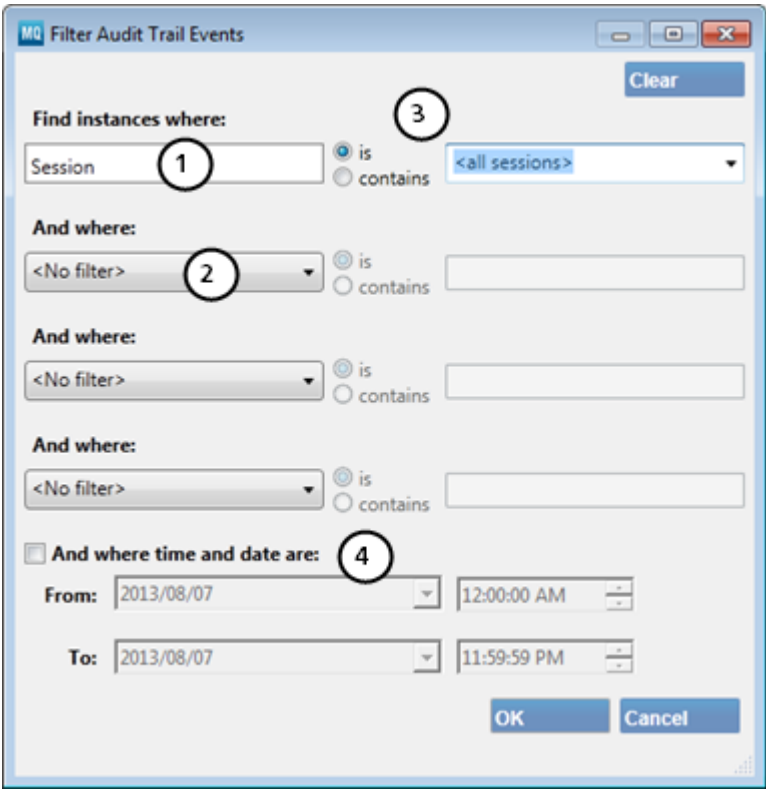
4. 用 Next（下一个） 和 Prev（上一个）按钮在匹配项之间移动。

过滤已审核事件

用户可以根据一套指定标准过滤审核记录中的已审核事件。

1. 打开一个 Results Table（结果表）。
2. 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Trail Viewer（审核记录查看器）。
3. 单击 Filter（过滤）。

图 5-2 Filter Audit Trail Events（过滤审核记录事件）对话框



项目	描述
1	Results Table（结果表）文件的名称。 可以过滤当前项目的一个Results Table（结果表） 文件或所有 Results Table（结果表）文件。
2	Description（描述）：键入部分或全部事件类型。 Sample Name（样本名称）：键入部分或全部样本名称。 Full User Name（用户全名）：键入部分或全部用户名称。 E-Signature（电子签名）：选择 Yes（是）或 No（否）。 Reason（原因）：键入部分或全部原因。
3	is（是）：用于过滤某个特定的词或短语。
4	contains（含）：用于过滤某个特定的词或短语。
5	Date（日期）：用于过滤在特定日期和时间发生的事件。

4. 在 Filter Audit Trail Events（过滤审核记录事件）对话框中，用列表选择过滤标准。

注释： Results Table（结果表）字段不能编辑。

5. 单击 Clear（清除）将过滤器重置为 No filter（无过滤器）。

6. 单击 OK (确认) 过滤事件。

提示! 若要删除过滤器, 在 Audit Trail Viewer (审核历史查看器) 中单击 Remove Filter (删除过滤器)。

导出审核记录查看器

1. 打开一个 Results Table (结果表)。
2. 单击 Export (导出), 然后键入一个文件名。

文件以分栏文本文件形式导出。

注释: 只有已保存的 Audit Trail Viewer (审核记录查看器) 事件部分才会被导出。

打印审核记录查看器

1. 打开一个 Results Table (结果表)。
2. 单击 Print (打印), 然后选择一台打印机。

用户可以用 pdfFactory 打印一份安全的 PDF 文件。

注释: 只有已保存的 Audit Trail Viewer (审核记录查看器) 事件部分才会被打印。

Audit Trail Manager (审核记录管理器)

软件会将定量审核事件归入审核记录组。审核记录是指保存已审核事件记录的文件。审核记录结合 wiff 文件、定量方法和 Results Table (结果表) 文件等, 就构成了有效的电子记录, 可用于合规用途。

Audit Trail Manager (审核记录管理器) 软件中保存了审核图中所定义的所有事件。软件可以获取电子签名和原因, 包括用户、日期以及改动详情。它还可以根据审核图记录其他信息, 如评注。

提示! 阶段文件中包含了 Results Table (结果表)、定量方法副本、创建时的审核图副本以及整个阶段的全部审核记录。

当软件创建或改动某个 qsession 或 qmethod 文件时, 就会在 Analyst MD 软件 Analyst® MD 中捕获到事件。下列事件会被捕获:

- 定量方法文件已创建。
- 定量方法文件已修改。
- 定量结果表已创建。

- 定量结果表已修改。

如果选择了 E-signature（电子签名）或 Prompt（原因提示）来创建或修改定量方法文件，由 Analyst Analyst® MD对话框就会在 MultiQuant™ MD 软件中打开。

表 5-2 Audit Trails（审核记录）

Audit Trail（审核记录）	记录事件示例
定量审核记录（根据结果表）	更改为： <ul style="list-style-type: none">• 创建和修改阶段文件。• 样本信息。• 峰积分参数。

关于审核图

MultiQuant™ MD 软件中保存了与定量结果有关的处理设置信息所有改动的历史记录。软件会按照当前项目审核图审核所有事件，并将所有电子签名和链接捕获至相应记录。

创建审核图

软件会安装若干审核图。通过查看审核图决定是否要修改其中的一个或多个图，比创建一个全新的图要更容易。创建或修改审核图是 Analyst® MD 软件项目审核记录中的已审核事件。

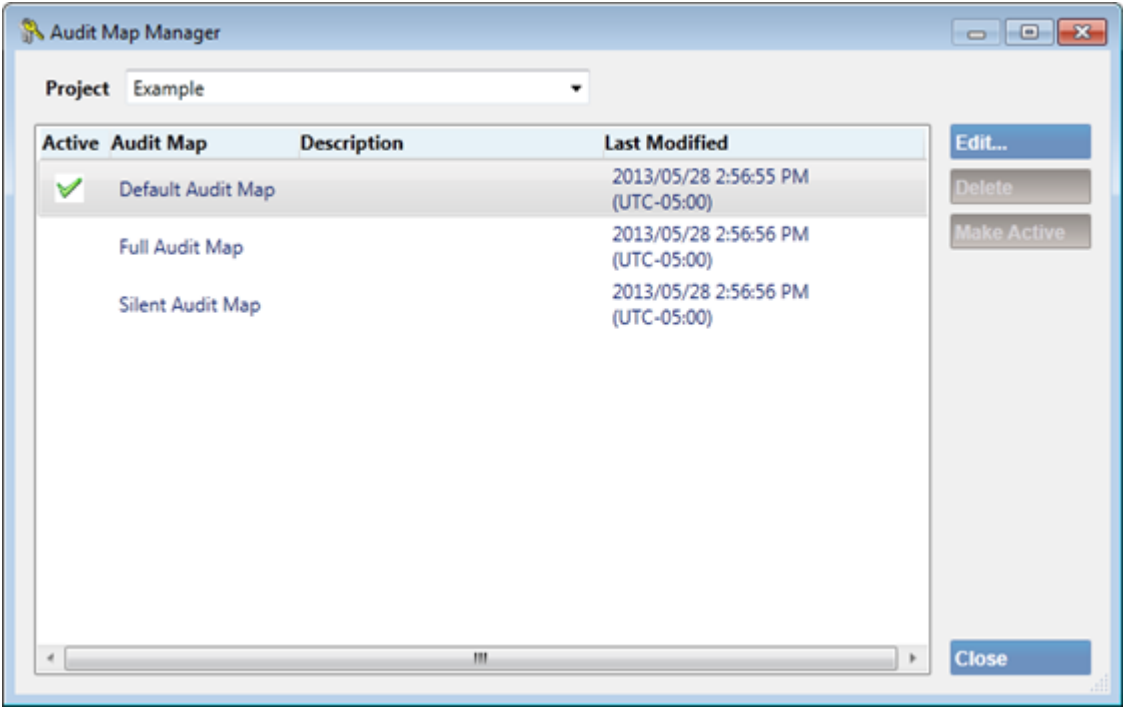
小心：如果有两个用户同时修改了相同的审核图，只有最后保存文件的用户所作的修改才会被使用。

处于活动状态的项目审核图决定了要将哪些事件保留在审核记录中供所创建的结果表使用。

注释：保存结果表之后，处于活动状态的审核图会与结果表一起保存，而且审核图不能被修改。

1. 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Map Manager（审核图管理器）。

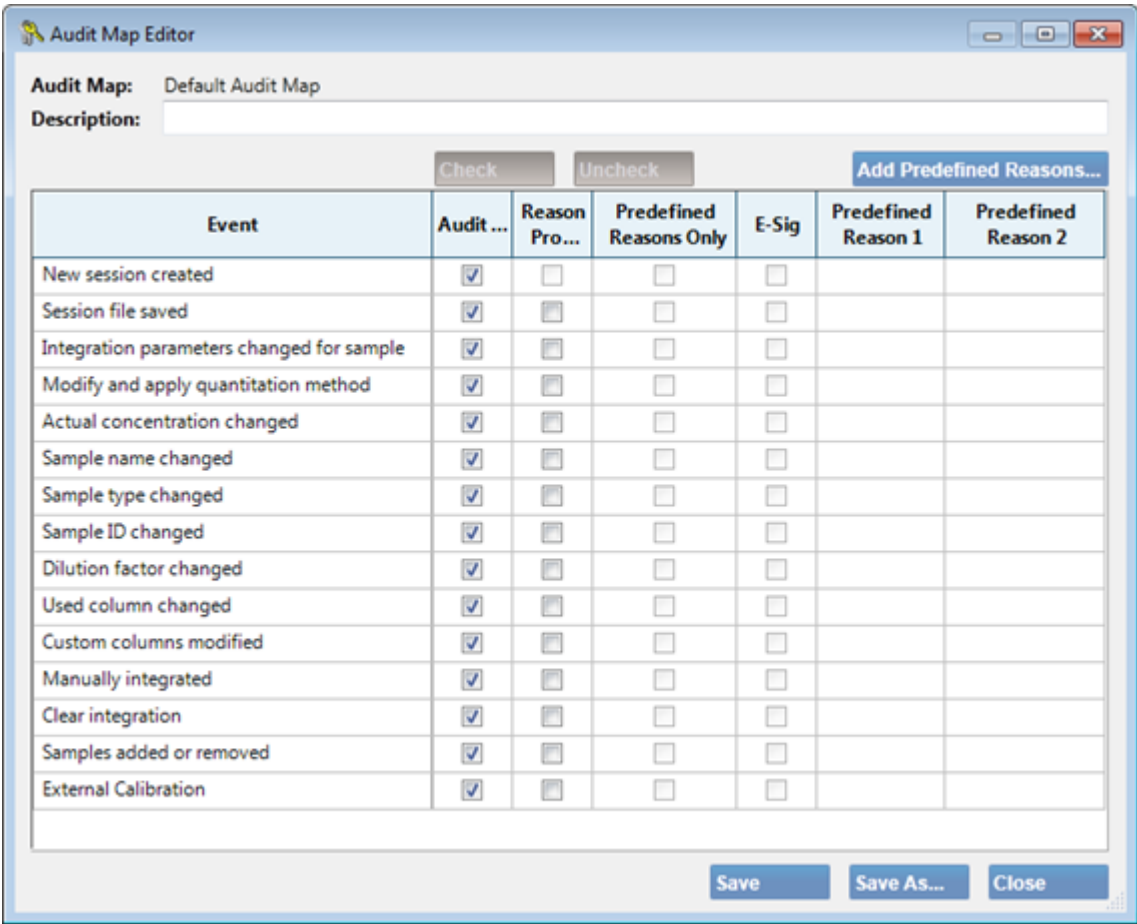
图 5-3 Audit Map Manager（审核图管理器）



标签	描述
Project（项目）	从列表中选择一个项目
Edit（编辑）	单击编辑活动的审核图。
Delete（删除）	单击删除活动的审核图。

- 2. 在 Project（项目）列表中，选择一个要创建审核图的项目。
- 3. 选择一个审核图，然后单击 Edit（编辑）。

图 5-4 Audit Map Editor（审核图编辑器）



标签	描述
描述	键入对审核图的描述。
Check（勾选）	单击勾选一个复选框。
Uncheck（取消选择）	单击清空复选框。
Add Predefined Reasons（添加预设原因）	单击向列表内添加一条预设原因。

4. 必要时，在 Description（描述）字段中键入对审核图的描述。

5. 在 Audit Map（审核图）表中，按下列方法配置每一个事件：

- 若要进行事件审核，需选择 Audited（已审核）栏中的复选框。

提示！ 若要用复选框值填入列中的后续单元格，需按下 Ctrl 或 Shift，单击单元格，然后单击 Check（勾选）。

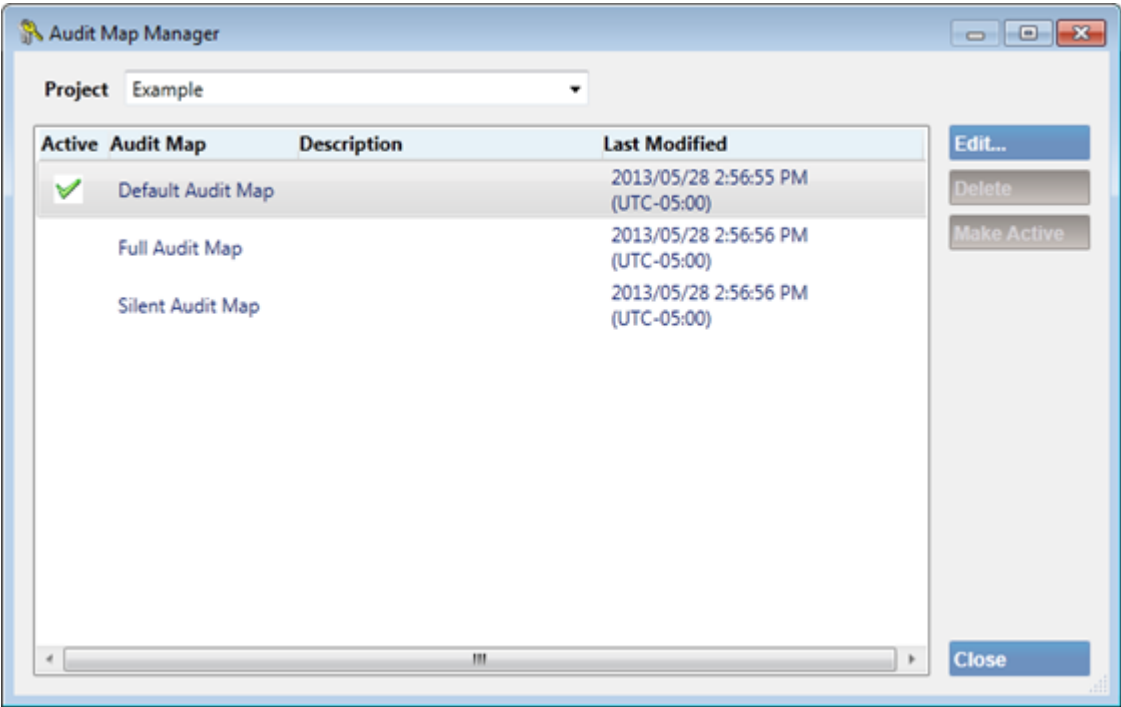
- 若要让操作人员键入自定义原因或选择一个预设定原因，需勾选 Reason Prompt（原因提示）栏中的复选框。
 - 发生事件时，若只允许操作人员选择一个预设定原因进行改动，需勾选 Reason Prompt（原因提示）和Predefined Reasons Only（仅限预设定原因）列中的复选框。 在 Predefined Reason _（预设定原因 _）列中，最多可选择 10 条原因。
-
- 提示！ 若要添加预设定原因， 单击 Add Predefined Reasons（添加预设定原因）。
-
- 若需要事件的电子签名，需选择 E-Sig（电子签名）栏中的复选框。
 6. 单击 Save As（另存为），然后在 Save Audit Map As（将审核图另存为）对话框中键入一个名称。
 7. 单击 Save（保存）。
 8. 在 Audit Map Editor（审核图编辑器）对话框中单击 Close（关闭）。
 9. 单击 Make Active（激活）。

当某个审核图被应用后，便成为处于活动状态的审核图。 处于活动状态的审核图的审核配置决定了从这一点起，哪些事件将被保存在审核记录中。

改动审核图

1. 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Map Manager（审核图管理器）。

图 5-5 Audit Map Manager（审核图管理器）



标签	描述
Project（项目）	从列表中选择个项目
Edit（编辑）	单击编辑活动的审核图。
Delete（删除）	单击删除活动的审核图。

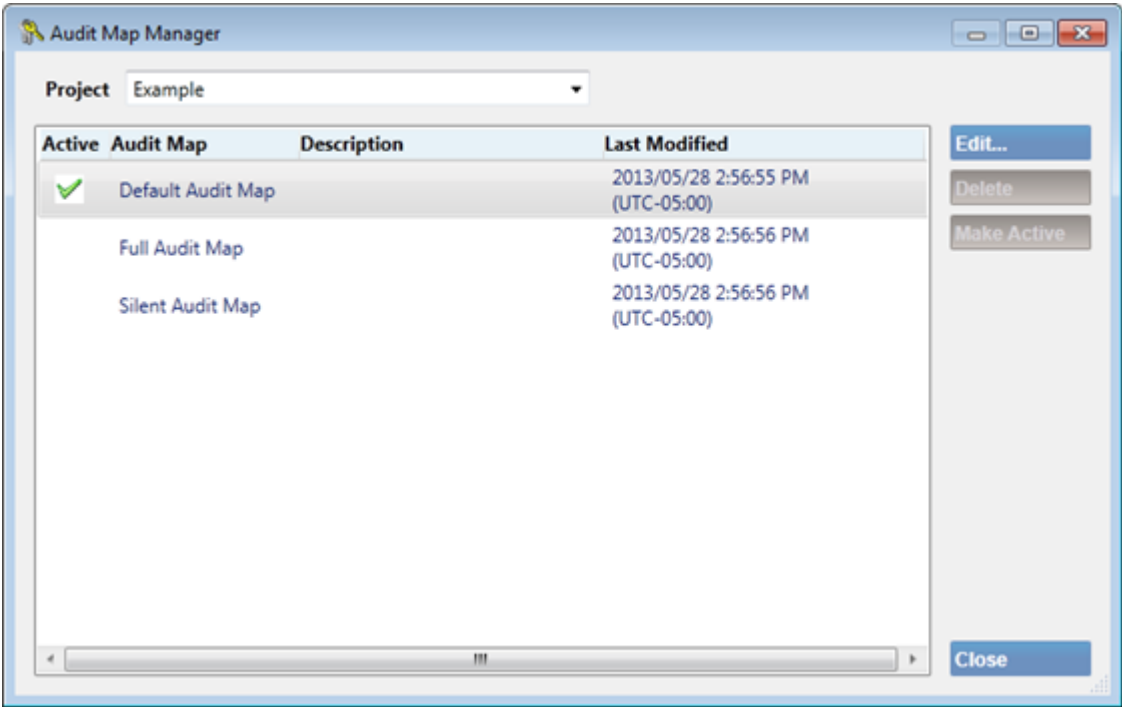
- 2. 在 Project（项目）列表中，选择一个要改动审核图的项目。
- 3. 选择另一幅图，然后单击 Make Active（激活）。
- 4. 单击 Close（关闭）。

编辑审核图

以下审核事件始终会被记录，因而在 Audit Map Editor（审核图编辑器）中不显示：Print Report（打印报告）、Export Results Table（导出结果表）、和 Transfer to LIMS（传送至 LIMS）。

- 1. 单击 Audit Trail（审核记录） > Audit Map Manager（审核图管理器）。

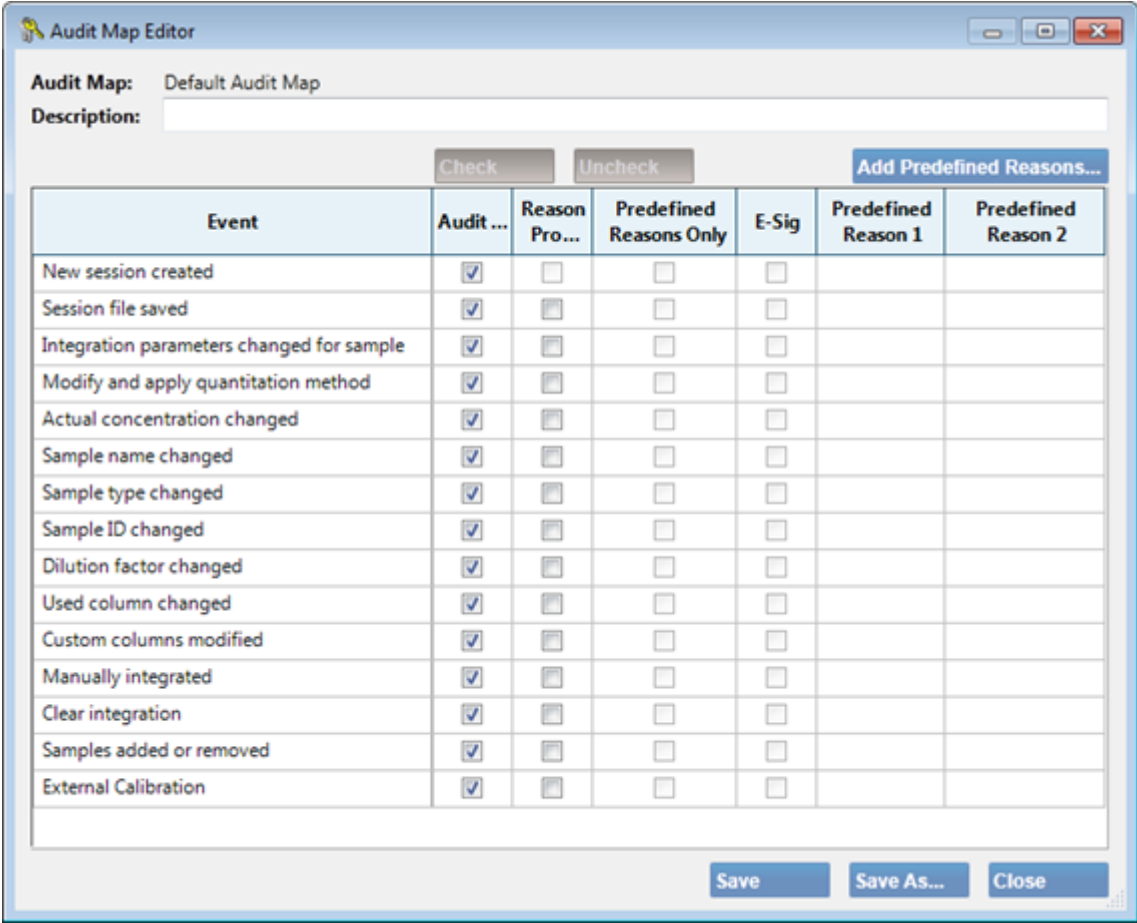
图 5-6 Audit Map Manager（审核图管理器）



标签	描述
Project（项目）	从列表选择一个项目
Edit（编辑）	单击编辑活动的审核图。
Delete（删除）	单击删除活动的审核图。

2. 选择一个审核图，然后单击 Edit（编辑）。

图 5-7 Audit Map Editor（审核图编辑器）



标签	描述
描述	键入对审核图的描述。
Check（勾选）	单击勾选一个复选框。
Uncheck（取消选择）	单击清空复选框。
Add Predefined Reasons（添加预设原因）	单击向列表内添加一条预设原因。

3. 必要时，在 Description（描述）字段中键入对审核图的描述。

4. 在 Audit Map（审核图）表中，按下列方法配置每一个事件：

- 若要进行事件审核，需选择 Audited（已审核）栏中的复选框。

提示！ 若要用复选框值填入列中的后续单元格，需按下 Ctrl 或 Shift，单击单元格，然后单击 Check（勾选）。

- 若要让操作人员键入自定义原因或选择一个预设定原因，需勾选 Reason Prompt（原因提示）栏中的复选框。
- 发生事件时，若只允许操作人员选择一个预设定原因进行改动，需勾选 Reason Prompt（原因提示）和 Predefined Reasons Only（仅限预设定原因）列中的复选框。 在 Predefined Reason _（预设定原因 _）列中，最多可选择 10 条原因。

提示！ 若要添加预设定原因， 单击 Add Predefined Reasons（添加预设定原因）。

- 若需要事件的电子签名，需选择 E-Sig（电子签名）栏中的复选框。

5. 单击 Save（保存）。

6. 单击 Make Active（激活）。

当某个审核图被应用后，便成为处于活动状态的审核图。 处于活动状态的审核图的审核配置决定了从这一点起，哪些事件将被保存在审核记录中。

查看内嵌审核配置

在创建 Results Table（结果表）时，供 Results Table（结果表）使用的审核配置内嵌在 Results Table（结果表） 文件中。 该配置不能改动。 审核图名称旁边的时间戳显示的是最近一次用审核图嵌入配置的保存时间。

1. 打开一个 Results Table（结果表）。

2. 单击 Audit Trail（审核记录） > View Session Audit Map（查看阶段审核图）。

图 5-8 阶段审核图

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

Audit Map: Default Audit Map

Last Modified: 2013/05/28 2:56:55 PM (UTC-05:00)

Description:

Event	Audited	Reason Prom ...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Close

除 About（关于）项例外，该菜单中包含了表 6-1 中所列项。这些文件将自动安装，并可以在 <驱动器>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help 文件夹中找到。

文档或文件夹（或其快捷方式）可以拷贝到该 Help 文件夹中，使之在菜单中自动出现。

表 6-1 帮助菜单

菜单项	描述
Install License （安装许可证）	单击以打开 MultiQuant™ MDActivation（MD 激活）对话框。
Verify Installation（确 认安装）	单击确认文件和安装。
Software Reference Guide （软件参考指南）	介绍软件的特色与功能。
Software Release Notes（系统版本说 明）	提供有关软件以及软件安装程序方面的信息。
About（关于）	显示程序版本、版权和其他程序信息，以及关于安装了哪些许可证功能方面的介绍。

Results Table (结果表)

7

Results Table (结果表) 是数据检查和导出的起点。用 New Results Table (新结果表) 向导程序或单击 File (文件) > New Results Table (新结果表) 创建一份结果表。请参阅 Results Table (结果表) 对话框 页码 41。

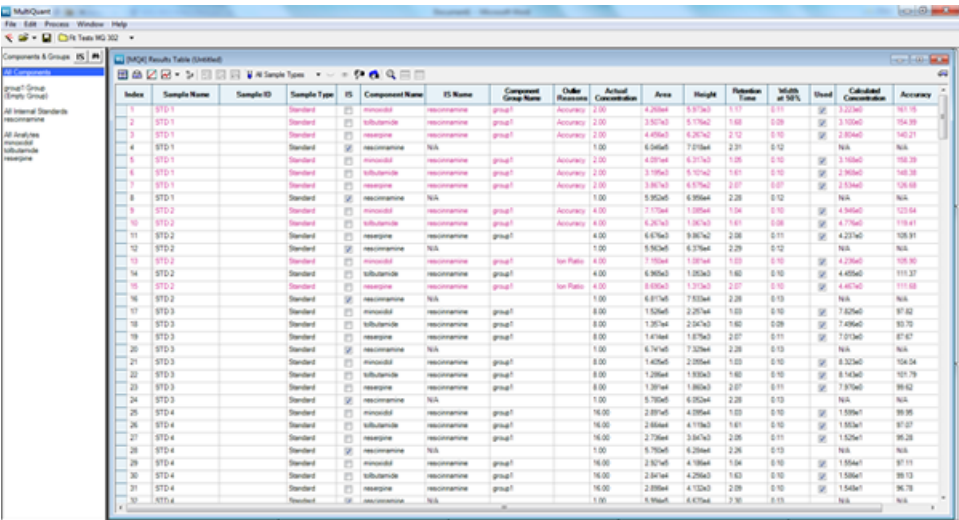
注释: Sample Name (样本名称) 和 Sample ID (样本 ID) 栏内不能含有: \ / : * ? " < > | =。

在创建 Results Table (结果表) 时, 供 Results Table (结果表) 使用的审核配置内嵌在 Results Table (结果表) 文件中。该配置不能改动。审核图名称旁边的时间戳显示的是最近一次用审核图嵌入配置的保存时间。

注释: 移动数据时, 需移动整个项目, 以保持文件结构。如果文件和文件夹结构未被保留, 就无法查看 Results Table (结果表) 或色谱图。

最初选定的每一种样本的每一种成分都单列一行。

图 7-1 结果表示例



- IS, Component Name (IS 成分名称) 和 IS Name (IS 名称) 栏内含有分析物的信息。
- 选中的复选框表示样本的内标物。
- 用 Column Settings (列设置) 对话框选择 Results Table (结果表) 内应显示哪些列。请参阅 Column Settings (列设置) 页码 38。
- 拖动两列题头的分隔线, 改变列的宽度。当用户打开之前所保存的 Results Tables (结果表) 时, 该信息就会自动保存并应用。

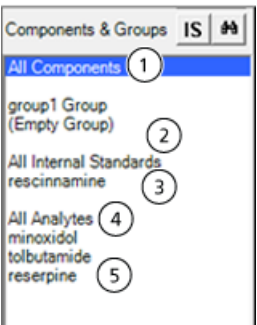
- 单击列题头，然后将其拖放至新位置，改变列的顺序。 当用户打开之前所保存的 Results Tables（结果表）时，该信息就会自动保存并应用。
- 用户可以对 Results Tables（结果表）加以限制，使之仅显示与特定分析物或内标物对应的行。 用工具栏限制显示的样本类型。 请参阅[成分与分组列表 页码 36](#) 和[样本类型过滤器 页码 40](#)。
- 某些操作，如用 Peak Review（色谱峰检查）窗格同步，适用于当前选定的行。 单击第一列左侧区域可选择列。

成分与分组列表

当 Results Table（结果表）打开时，主窗口的左侧就会出现一个当前成分和分组的列表。 用该列表可以改动哪些成分在 Results Table（结果表）以及任何关联的 Peak Review（色谱峰检查）窗格或 Calibration（校准）图中可见。

Components（成分）被定义为单个离子对或质量范围。 Group（分组）被定义为成分所属组的名称

图 7-2 成分与分组列表



项目	标签	描述
1	All Components（所有成分）	单击查看 Results Table（结果表）以及与之关联的 Peak Review（色谱峰检查）和 Calibration（校准）中所显示的所有可用分析物和内标物。
2	All Internal Standards（所有内标物）	单击查看所有内标物，并隐藏所有分析物。 如果没有定义任何内标物，则该项不存在。
3	Specific Internal Standards（特定内标物）	每一种内标物的名称都包含在该列表内。 单击其中一项查看该内标物并隐藏其他所有成分。
4	All Analytes（所有分析物）	单击查看所有分析物，并隐藏所有内标物。 如果没有定义任何内标物，则该项不包括在内。
5	Specific Analytes（特定分析物）	每一种分析物的名称都包含在该列表内。 单击其中一项查看该分析物并隐藏其他所有成分。

单击列表中的各项仅显示该项的成分。按 Shift 或 Ctrl 选择多个项。这样就可以只显示（比如）两种特定的分析物。当列表处于活动状态时，就可以用上下箭头键翻看所有项。

提示！ 将窗格右侧边缘左右拖动可以将列表拉宽或收窄。

结果表中各行的实际顺序不会受到过滤的影响。在预设值中，结果表首先按样本排序，然后再按成分，其顺序如定量方法所示。不过，表也可以按 [软件图标 页码 143](#) 中所述的特定顺序进行排列。

结果表右键菜单

在 Results Table（结果表）中单击右键，进入快捷菜单。其中包括以下命令。

表 7-1 结果表右键菜单选项

菜单选项	描述
Column Settings（列设置）	用该命令可以编辑 Results Table（结果表）列。改动只被应用到当前 Results Table（结果表）中，除非将改动作为项目默认值保存。
Add Custom Column（添加自定义列）	向表中添加一个新的可编辑列。在单元格中直接键入或者粘贴内容，向列中加入内容。可键入任何文本，如评注或自定义计算的结果。
Add Custom Column（添加自定义列）	重新命名一个现有的自定义列。在使用该命令前，请单击列题头选择自定义列。
Remove Custom Column（删除自定义列）	用于删除一个现有的自定义列。在使用该命令前，请单击列题头选择自定义列。
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All（将当前分析物的实际浓度应用到全部）	该命令为所有 Standard（标准物）类样本的分析物提供了一个设置 Actual Concentration（实际浓度）字段的快捷方式，如果分析物不止一种，而且这些样本中所有分析物的浓度均相同。请参阅 Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All（将当前分析物的实际浓度应用到全部） 页码 38 。
Apply Current IS's Actual Concentrations to All（将当前 IS 的实际浓度应用到全部）	它与 Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All（将当前分析物的实际浓度应用到全部）类似，只是将浓度应用到内标物而非分析物。

表 7-1 结果表右键菜单选项 (续)

菜单选项	描述
Set 'Used' (设置 '已用')	用该命令可以进行绝对定量，以确定是否应使用特定的 Standard (标准物) 样本来计算给定分析物的校准曲线。 前两项用来选择或清除 Results Table (结果表) 中当前选定行的 Used (已用) 字段。第三和第四项基本类似，唯一不同的是该操作适用于选定行所对应的任意样本的所有分析物。
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows (将选中行的色谱峰设为 '未找到')	用该命令可以清除当前选定行的色谱峰积分。

Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All (将当前分析物的实际浓度应用到全部)

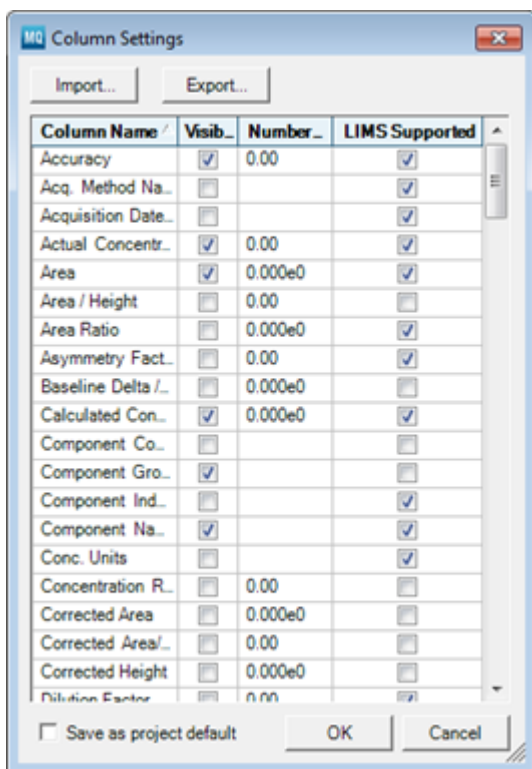
1. 用[成分与分组列表 页码 36](#)将表限制为只能显示某一种分析物。
2. 可选择使用 Sample Type Filter (样本类型过滤器) 只查看 Standard (标准物) 样本。请参阅[样本类型过滤器 页码 40](#)。
3. 指定分析物的实际浓度，可以直接在单元格中键入，也可以选择列，然后选择 Paste (粘贴) (如果有文本格式的浓度值)。
4. 单击 Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All (将当前分析物的实际浓度应用到全部)。
5. 必要时，可返回查看所有成分和所有样本类型。

Column Settings (列设置)

如果列名称被截去，可将光标移动到字段上方，在工具提示中显示列名称。

对于数值字段来说，非科学记数表示请使用 0.00 格式，而科学记数表示请使用 0.00e0 格式。改变小数点，以表示显示数字的精度。只能用小数点 (.) 作为小数分隔符。不支持数字分组。

图 7-3 Column Settings (列设置) 对话框



字段	描述
Import (导入)	单击选择一个之前用 Export (导出) 命令保存的列设置文件。对话框字段是用选定文件中的信息来更新的。
Export (导出)	单击将当前对话框设置保存到文件中。这样用户就可以在不同列设置之间切换。
Column Name (列名称)	以字母顺序显示列名称。请参阅 结果表栏 页码 51 。
Visible (可见)	选择该选项使列可见。否则，该列将被隐藏。
Number Format (数字格式)	对于数值字段来说，非科学记数表示请使用 0.00 格式，而科学记数表示请使用 0.00e0 格式。精度显示可改变小数点。
LIMS Supported (支持 LIMS)	显示 LIMS Supported (支持 LIMS) 行是由 LIMS 预先设定的，无法更改列选择。
Save as project default (保存为项目用户默认值)	选择该选项将列设置供今后的 Results Tables (结果表) 使用。

样本类型过滤器

表 7-2 样本类型过滤器描述

过滤器类型	描述
All Sample Types (所有样本类型)	显示所有样本类型。
Unknowns	仅显示未知物样本，它们是浓度未知的正常样本。使用标准物样本时，它们的浓度根据校正曲线反向计算而得，并在 Results Table 中作为浓度计算值进行报告。 请参阅 回归方程 页码 119。
Standards	仅显示浓度已知的样本。 这些样本用于创建校正曲线。
Quality Controls	仅显示质量对照品样本。这些浓度已知的样本可用于检查校正曲线的准确度，但不影响其实际构造。
Standards & QCs (标准物及质量对照品)	同时显示标准物和质量对照品样本。
Standards & QCs (未知物、标准物及质量对照品)	显示 Unknown (未知物)、Standard (标准物) 及 Quality Control (质量对照品) 样本。
Blanks	只显示空白样本。这些通常是含有内标化合物 (若使用)、但不含分析物，并且已完成正常样本制备程序的样本。这些样本在绘制校正曲线时没有用到。 若要将其包含在内，请选择标准物样本类型，然后将实际浓度设定为 0。
Double Blanks	只显示双空白样本。这些是既没有内标物也没有分析物的样本。
Solvents	只显示溶剂样本。这些是双空白样本，没有经过正常的样本制备程序。
Blanks, Double Blanks & Solvents (空白、双空白及溶剂)	显示所有空白样本类型：Blank (空白)、Double Blank (双空白) 及 Solvent (溶剂) 样本。

查看隐藏行

在 Results Table (结果表)，对任何给定成分而言，只能看到存在对应 MRM 离子对的样本行。 给定样本中没有带离子对的成分，这些未使用的行也在表中，但默认为隐藏。

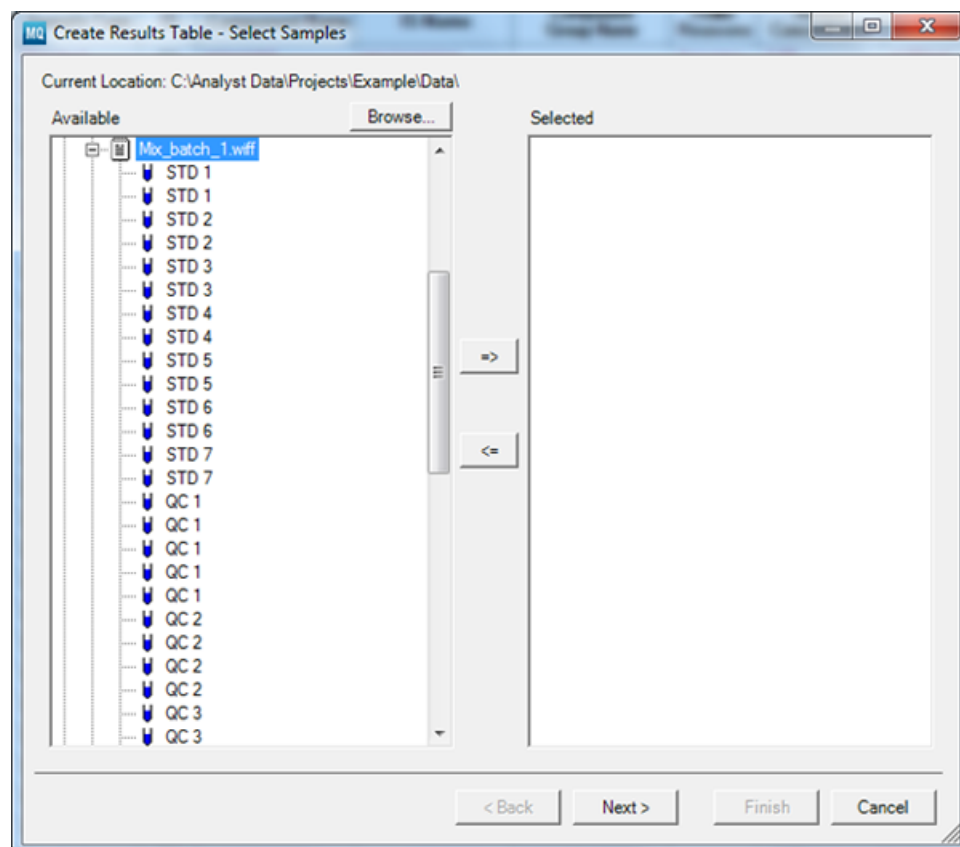
1. 如果无法看到这些行，可以显示 Results Table (结果表) 中的 Peak Comment (峰评注) 列。
2. 用该列对表进行排序。
3. 选择有 Not Present (不存在) 评注的行 (此时是相邻的)。
4. 单击 Hide selected rows(s) (隐藏选定行) 图标。 请参阅[软件图标](#) 页码 143。

Results Table（结果表）对话框

选择样本

选择来自 wiff 文件的待处理样本。

图 7-4 Create Results Table - Select Samples（创建结果表—选择样本）页面

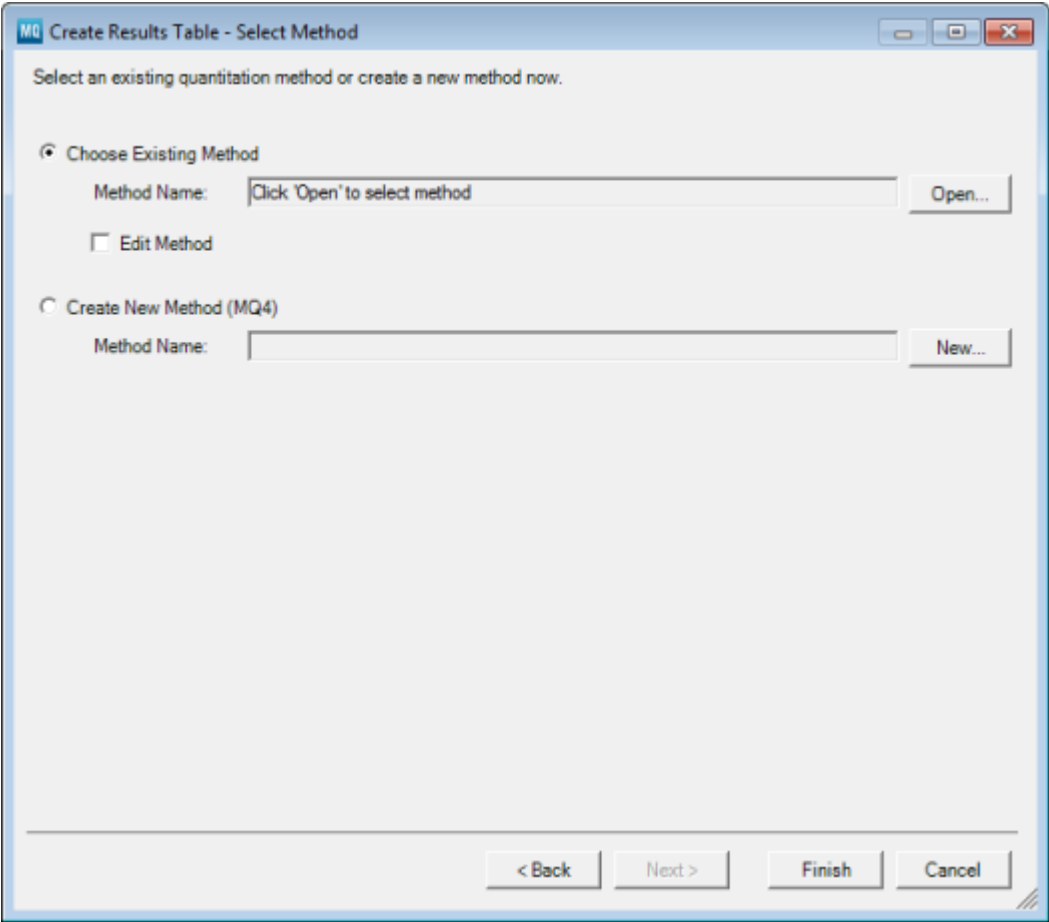


- Available（可用）窗格中会显示子文件夹、wiff 文件以及选定文件夹的 Data（数据）文件夹项下的可用样本。
- 展开各个文件夹查看子文件夹或 wiff 文件。如果 wiff 文件已展开，就会显示现有样本。
- 用箭头添加或删除样本。
- 双击各个样本进行样本选择，选择一个样本或数据文件，然后单击 => 按钮，或者将样本或数据文件从左边窗格拖入右边窗格。按 Shift 或 Ctrl 可选择多个文件或样本，然后一起移动。

Select Method（选择方法）

选择定量方法。如果现有方法已被选中但没有经过编辑，则在处理选定样本的同时会显示进度条。该过程结束时，会创建一张 Results Table（结果表）。

图 7-5 Create Results Table - Select Method（创建结果表—选择方法）页面



标签	描述
Choose Existing Method（选择现有方法）	单击 Open（打开）选择一个现有的定量方法。
Edit Method（编辑方法）	选择该命令对一个现有方法进行编辑。向导程序的后续页中会加入可根据需要进行改动的现有方法的信息。
Create New Method（新建方法）	单击 New（新建）创建一个定量方法。括号中的算法是在 Integration Defaults（积分默认）对话框中选择的算法。

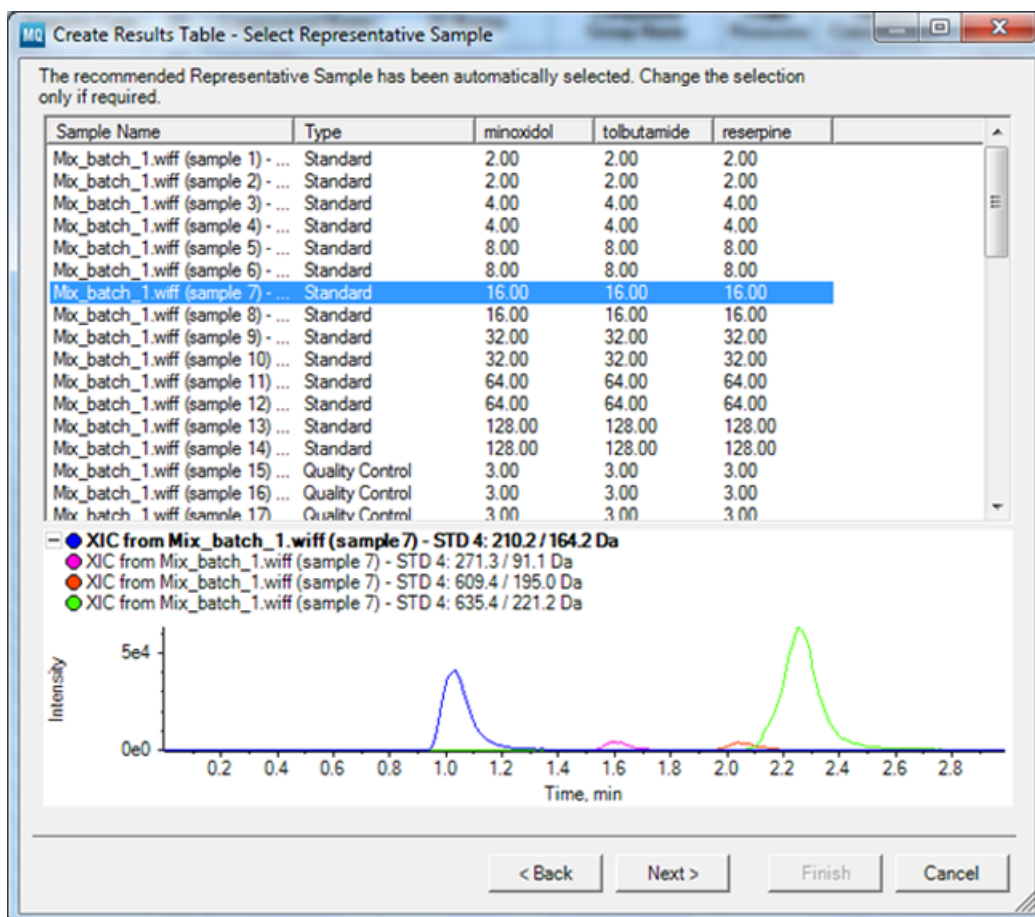
选择代表性样本

Select Representative Sample（选择代表性样本）页显示的是所选择的代表性样本，在目测设置找峰参数和积分参数时，这些样本的色谱图便会显示。 这些样本必须包含纳入定量方法中的所有化合物。

如果在采集样本前使用 Analyst® MD 软件的 Batch Editor (批次编辑器) 选择样本类型和分析物浓度, 则该信息会以附加列显示。

软件默认选择一个样本。如果选择的样本不合适, 可以选择另一个代表性样本。如果选择了 SignalFinder™ 算法, 为了避免生成不正确的积分模型, 在所有样本的 TIC 水平高于 1.0e6 的情况下, 软件不推荐任何代表性样本。在这种情况下, 用户可以手动选择一个代表性样本。

图 7-6 Create Results Table - Select Representative Sample (创建结果表—选择代表性样本) 页面



Define Components (定义成分)

Define Components (定义成分) 页中有一行列出了每一种分析物或内标物。选择所使用的分析物和内标物的名称。请参阅[定义成分右键菜单](#) 页码 45。

图 7-7 Create Results Table - Define Components (创建结果表—定义成分) 页面

MultiQuant Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

标签	描述
Experiment (实验)	从列表中选择一个要进行的实验。对于多时段或多实验数据而言，需选择每一项必须进行的实验，然后将相应实验的成分填入表内。
Row (行)	含有当前行号。
IS	表示行内所定义的成分是分析物（不选择）还是内标物（选择）。
Name (名称)	含成分名称。对于 MRM 实验来说，名称自动沿用 Q1/Q3 离子对质量。若要更加具体，可在该字段内输入一个名称。
Group (组)	含行内成分所属分组的名称。如果相同组内放入了彼此相关的分析物或内标物，就可以更方便地一起检查和处理。这对于保留时间彼此相同的物质非常有用，如相同化合物的不同 MRM 离子对。 键入组名，或自动加入。请参阅 定义成分右键菜单 页码 45。

标签	描述
IS Name (IS 名称)	含有可供行内所定义的分析物选择的内标物的名称。 该字段不适用于内标物本身。
Mass Info (质量信息)	<p>对于 MRM 实验来说, 该列以 Q1/Q3 为题头, 并含有行内所定义成分的质量对。从列表中选择显示实验中所有可用离子对所需要的离子对。 该列通常会采用可用离子对进行初始化。</p> <p>对于轮廓 (扫描) 实验来说, 该列以 Start - Stop (开始-停止) 为题头, 并含有用于计算行内所定义成分的 XIC (从色谱图中提取) 的质量范围。 键入质量范围时, 用短横线将两个质量分隔开。 比如, 200-201 或 200-1。 对后一个选项来说, 质量范围是 199.5-200.5。</p>

定义成分右键菜单

在 Define Components (定义成分) 页中单击右键, 此时会出现一个快捷菜单。 其中包括以下命令。

表 7-3 定义成分右键菜单选项

菜单选项	描述
Clear (清除)	清空选定行或列中的内容。 通过在行号前单击或画框来选择行。
复制	将选中的行或列复制到粘贴板。
粘贴	将内容粘贴到粘贴板。
按名称查找成分	<p>选择 Name (名称) 与文本信息相匹配的成分。 查找匹配项无需文本信息完全相同。 如果成分较多, 在选择具体成分时可以使用该命令。</p> <p>如果一开始在电子表格中没有选择任何行, 则从第一行开始搜索。 否则, 软件会从选中行的下一行开始搜索, 搜索一周后回到起始点。 如果 Name (名称) 栏中包含文本信息的成分不止一个, 可以使用该选项。 如果第一次搜索没有找到成分, 可以再次搜索, 使第一个成分保持被选中状态, 以便在表中找到另一个匹配项。</p>
Insert Row Above (在上方插入行)	立即在当前选中的行上方插入一个空白行。
Delete Selected Rows (删除选定行)	将当前选定的行从表中删除。
Sum Multiple Ions (多离子加总)	对多个 MRM 离子对或全扫描质量方法的色谱图求和。 选择该命令后, 其他质量栏就会被添加到 Components (成分) 表中。 指定行所选中的质量被用来构造相应分析物或内标物的 XIC 之和。 建议始终选择该功能。
Groups (分组)	请参阅 分组子菜单 页码 79 。
Internal Standards (内标)	请参阅 内标物子菜单 页码 80 。

定义积分

选择每一种成分的预计保留时间和其他找峰参数。

左侧列表显示的是在之前的向导程序页面上设定的每一种成分的条目。单击某一行可查看相应的色谱图，以及代表性样本的当前积分。用上下箭头键或滚轮翻看列表。一般情况下，建议检查所有成分，看积分计算是否正确。不过，如果成分较多，可以使用 Highlight Components with Uncertain RT（突出显示保留时间不定的成分）命令来限制检查数量。

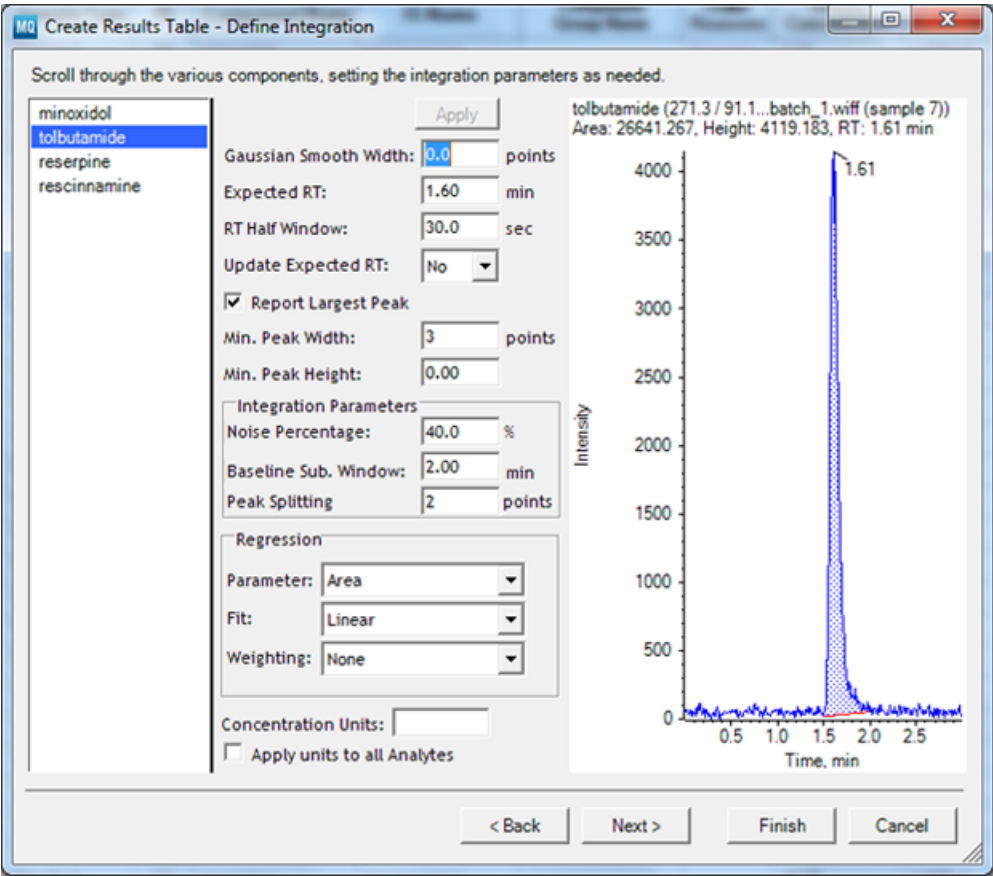
注释：如果成分较多，一定要先确认找峰参数是否被设为合理的默认值，然后再运行向导程序，以免对每一个成分逐一进行参数调整。

在页面中单击右键，查看可供使用的命令。请参阅[定义积分右键菜单](#) 页码 47。

在 Regression（回归）组中，当结果表创建完成后，对所有或选定成分的校准选项进行改动。设置默认浓度单位和回归参数，这样就不必每次调整。

提示！通过在 X 或 Y 轴的局部区域画框来放大图表。用快捷菜单返回预设视图 [Home Graph Axes（主图轴线）] 或者在轴线范围内双击。

图 7-8 “创建结果表—定义积分” 页面



标签	描述
应用	必要时可调整给定成分的找峰参数。 创建新结果表时，给定成分的指定参数会被应用到所有样本的相同成分用于数据积分。 请参阅 积分算法参数 页码 114 。
Expected RT (预计保留时间)	一开始被设为色谱图中最大强度点的保留时间。 通常这就是所要找的峰。 不过，如果存在同分异构体，则该值可能需要调整。 若要调整该值，需在 Expected RT (预计保留时间) 字段中键入一个新值，然后单击 Apply (应用)。 也可以在图表内单击，然后将所关注的峰画入框内。 注意不要不小心在图表内拖动光标，这样会改变预计保留时间。
参数	选择Area (面积) 或 Height (高度)。
符合度	各种拟合类型的介绍详见 回归方程 页码 119 。
Weighting (加权)	各种加权类型的介绍详见 加权系数 页码 120 。
Concentration Units (浓度单位)	键入分析物及任何内标物所使用的浓度单位。 如果采取相对定量，则该字段留空。 向导程序假定所有成分均使用相同的单位。 如果情况不是这样，需使用 Quantitation Method Editor (定量方法编辑器)。
Apply units to all Analytes (将单位应用到所有分析物)	用户可以键入每一种成分的浓度单位。 若要将相同的单位应用到所有分析物，可选择该复选框。 信息应当与 Concentration Units (浓度单位) 保持一致。

定义积分右键菜单

在Define Integration (定义积分) 页中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。 其中包括以下命令。

表 7-4 定义积分右键菜单选项

菜单选项	描述
按名称查找成分	与 Define Components (定义成分) 页中的命令类似，唯一的区别是它不是选择 Components (成分) 电子表格的行，而是选择成分列表中的各项。
Highlight Components with Uncertain RT (突出显示保留时间不定的成分)	用于突出显示默认预计保留时间 (每个色谱图最大强度峰的 RT) 正确的成分。 如果成分不多，可以逐个检查，无需使用该命令。 不过，如果成分较多，可使用该命令目测检查色谱图中有一个以上明显峰存在的成分。 请参阅 突出显示成分对话框 页码 82 。
Home Graph Axes (主图轴线)	从缩放的图形返回到能够看到所有数据的主视图。

表 7-4 定义积分右键菜单选项 （续）

菜单选项	描述
Overlay Other Components for Group （叠加同组其他成分）	<p>如果有各种成分被分组，而且分配到任何指定分组的成分预计有相同的保留时间，即可用该命令叠加色谱图。 例如，如果这些成分代表了实际相同的化合物的不同 MRM 离子对。</p> <p>选择该选项后，正在定义积分参数的当前成分的色谱图就会用一根蓝色的实线轨迹绘制，并会显示其积分计算的峰面积。 同组其他成分的色谱图（非积分后的峰面积）会用虚线样式叠加。</p>
Update Retention Times（更新保留时间）	<p>用于重置之前创建的定量方法的预计保留时间。 如果某个现有的定量方法已打开，并且选择了 Set New Typical Sample（设置新典型样本）选项，则显示的色谱图会对应新样本，但预计保留时间不变。</p> <p>对每一种成分而言，预计保留时间会被更新，以对应位于原预计保留时间中央指定宽度窗口内最大强度峰的保留时间。</p> <p>请参阅 Update Retention Time（更新保留时间）对话框 页码 82。</p>

离群值设置

用户可以标注 Standard（标准物）、QC（质量对照品）、Ion Ratio（离子率） 和 Calculated Concentration（计算所得浓度）的精度离群值。 其中包括以下命令。

图 7-9 离群值设置对话框

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std): %

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

Component	IS	Group	Ion Ratio Tolerance (%)	Lower Limit of Calculated Conce...	Upper Limit of Calculated Conce...
minoxidol	<input type="checkbox"/>	Group A			
tolbutamide	<input type="checkbox"/>	Group A	20		
reserpine	<input type="checkbox"/>				
rescinnamine	<input checked="" type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

标签	描述
Accuracy for Standards (标准物精度)	编辑 Standard (标准物) 样本的精度误差。
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (标准物最大精度误差 (除 LLOQ%))	编辑 Standard (标准物) 样本的精度误差, 采用与实验室 SOP 一致的数值。
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)% (标准物最大 LLOQ 精度误差 (最低标准物)%)	如果实验室 SOP 显示 Standard (标准物) 的误差不一样, 则需编辑最低浓度 Standard (标准物) 的精度误差。
Accuracy for QCs (QC 精度)	编辑 Quality Control (质量对照品) 样本的精度误差。

Results Table (结果表)

标签	描述
Max. Accuracy Tolerance for QC% (标准物最大 QC% 精度误差)	编辑 Quality Control (质量对照品) 样本的精度误差, 采用与实验室 SOP 一致的数值。
Ion Ratio (离子率)	只在成分已分配到组的情况下才可用。选择使用峰面积或峰高度的离子率。在定量分析方法创建过程中选择回归参数时, 峰面积或峰高度便已设定。
Calculated Concentration (计算所得浓度)	使用已知浓度的 Standard (标准物) 样本时, 该值为从校准曲线反向计算的浓度。回归等式所描述的是各种回归类型和加权的回归计算是怎样进行的。
Component (组件)	所有样本的分析物或内标物。
IS	被选中的内标物。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Group (组)	保留时间相同的成分 (即相同成分的不同变型) 可以分在一组。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Ion Ratio Tolerance (%) [离子率误差 (%)]	使用默认设置或按照实验室 SOP 编辑该设置项。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Lower Limit of Calculated Concentration (计算所得浓度下限)	键入可接受的浓度范围的下限。任何 Calculated Concentration (计算所得浓度) 低于该值的样本, 都被标记为浓度离群值。
Upper Limit of Calculated Concentration (计算所得浓度上限)	键入可接受的浓度范围的上限。任何 Calculated Concentration (计算所得浓度) 高于该值的样本, 都被标记为浓度离群值。

在Outlier Settings (离群值设置) 页中单击右键, 此时会出现一个快捷菜单。

表 7-5 离群值设置右键菜单选项

标签	描述
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. (将计算所得浓度下限应用到所有分析物) 浓度	将计算所得浓度下限应用到所有分析物, 如果所有分析物的标准相同。
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. (将计算所得浓度上限应用到所有分析物) 浓度	将计算所得浓度上限应用到所有分析物, 如果所有分析物的标准相同。

结果表栏

注释： 样本信息的某些关键栏，如Sample Name（样本名称）、Sample ID（样本编号）等，在用户自定义 Results Table（结果表）栏设置时不应隐藏。

对于数值字段来说，非科学记数表示请使用 0.00 格式，而科学记数表示请使用 0.00e0 格式。改变小数点，以表示显示数字的精度。 只能用小数点 (.) 作为小数分隔符。 不支持数字分组。

表 7-6 结果表栏

标签	描述
精度	当使用已知浓度的 Standard（标准物）样本作为 Standard（标准物）样本和 Quality Control（质量对照）样本时，其定义为： $100\% * (\text{计算所得浓度}) / (\text{实际浓度})$ 对其他类型样本而言，该值为 N/A（无）。
Acq. Method Name（采集方法名称）	用于采集样本的采集方法的名称。
Acquisition Date & Time（采集日期及时间）	采集 wiff 样本的日期和时间。
Actual Concentration（实际浓度）	对于 Standard（标准物）样本和 Quality Control（质量对照）样本来说，指的是已知浓度。
Area（面积）	检测到的峰面积。 如果未检测到峰，则该值为 N/A（无）。
Area / Height（面积/高度）	用检测到的峰面积除以高度。 如果未检测到峰，则该值为 N/A（无）。
Area Ratio（面积比）	对于使用内标物的分析物来说，是指Area（面积）与 IS Area（IS 面积）的比值。 对于内标物或没有内标物的分析物来说，该值为 N/A（无）。
Asymmetry Factor（不对称因子）	从峰的中心线到背坡的距离除以从中心线到前坡的距离，所有测量结果均在最大峰高的 10% 处测得。
Baseline Delta / Height（基线 Delta / 高度）	基线（在峰的起点和终点处）与实际峰高高度差的绝对值。 该值大于 0.1 表示基线积分可能不正确，并且应当对该峰重新检查。
Calculated Concentration（计算所得浓度）	使用已知浓度的 Standard（标准物）样本时，该值为从校准曲线反向计算的浓度。 请参阅 回归方程 页码 119 ，了解如何对各种回归类型和加权进行回归计算。
Component Comment（成分评注）	适用于所有样本分析物或内标物的任意评注。

表 7-6 结果表栏 (续)

标签	描述
Component Group Name (成分组名称)	与分析物或内标物相关联的组名 (如有)。
Component Index (成分索引)	分析物或内标物在原定量方法中的索引。 它可以用来根据该字段对表进行排列。
Component Name (成分名称)	分析物或内标物的名称。
Conc. Units (浓度单位)	浓度单位。
Concentration Ratio (浓度比)	对于使用内标物的分析物来说, 是指Actual Concentration (实际浓度) 与 IS Actual Concentration (IS 实际浓度) 的比值。 对于内标物或没有内标物的分析物来说, 该值为 N/A (无)。
Corrected Area (校正面积)	检测到的峰面积。 如果未检测到峰, 则该值为 N/A (无)。
Corrected Area / Height (校正面积/高度)	用检测到的峰面积除以高度。 如果未检测到峰, 则该值为 N/A (无)。
Corrected Height (校正高度)	检测到的峰高。 如果未检测到峰, 则该值为 N/A (无)。
稀释系数	样本被稀释的系数。 该系数用于计算校准曲线。 请参阅 回归方程 页码 119 。
End Time (结束时间)	检测到的色谱峰的结束保留时间, 单位为分钟。
End Time at 10% (10% 结束时间)	沿色谱峰背侧的时间 (以分钟计), 强度在峰高的 10% 处。
End Time at 5% (5% 结束时间)	沿色谱峰背侧的时间 (以分钟计), 强度在峰高的 5% 处。
Expected Ion Ratio (预计离子率)	所有样品类型的预计离子率。
Expected RT (预计保留时间)	定量方法中原来的预计保留时间, 单位为分钟。
高度	检测到的峰高。 如果未检测到峰, 则该值为 N/A (无)。
Height Ratio (高度比)	对于使用内标物的分析物来说, 是指 Height (高度) 与 IS Height (IS 高度) 的比值。 对于内标物或没有内标物的分析物来说, 该值为 N/A (无)。
索引	指原来未排列顺序的行的索引。 如果根据另一列对表进行排列, 则可以通过在该列上排列返回原有的顺序。
注射量	自动进样器加注的样本量, 单位为 mL。

表 7-6 结果表栏 (续)

标签	描述
Integration Type (积分类型)	<ul style="list-style-type: none"> Baseline (基线) 的值表示按常规方法对单独的峰进行积分。 Valley (峰谷) 值表示有两个相邻的峰, 且该信号不会回到两峰之间的基线值。 Manual (手动) 值表示该峰是通过手动方式积分的。 N/A (无) 值表示没有检测到峰。
Ion Ratios (离子率)	<ul style="list-style-type: none"> Ion Ratios (离子率) 是在一种分析物至少有两个 MRM 离子对被采集到一组的情况下确定的。 分组中的第一个组件将被用作定量离子。 分组中的其他组件将被用作定性离子。 离子率 = (定性离子的峰面积或高度) / (定量离子的峰面积或高度) 子组 <ul style="list-style-type: none"> 一组中的全部分析物构成了分析物分组。 一组中的所有内标构成了IS分组。 如果成分不在组内, 则Ion Ratio (离子率) 为 N/A (无)。 如果未发现峰, 则Ion Ratio (离子率) 为 N/A (无)。 应用到 Analyte (分析物) 和 IS 子组中的所有成分。对于 Quantifier (定量离子) 来说, Qualifier (定性离子) 就是其本身。 无论 Quantifier (定量离子) 或是 Qualifier (定性离子) 峰的积分有变动, 都要再次计算 Ion Ratio (离子率)。 无论是峰面积还是峰高都可以计算。 如果在 Results Table (结果表) 第一个成分 (成分索引为 1) 的定量/定性方法的回归部分使用了 Area (面积), 那么在计算整个Results Table (结果表) 的 Ion Ratio (离子率) 时就使用峰面积。 如果在第一个成分的回归计算中使用了 Height (高度), 那么就用峰高进行计算。
IS	复选框被勾选表示该行的成分是内标物而非分析物。
IS Actual Concentration (IS 实际浓度)	与当前分析物有关的内标物的实际浓度, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Area (IS 面积)	与当前分析物有关的内标物的面积, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Area / Height (IS 面积/高度)	与当前分析物有关的内标物的Area (面积) 与 Height (高度), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。

表 7-6 结果表栏 (续)

标签	描述
IS Baseline Delta / Height (IS 基线 Delta / 高度)	与当前分析物有关的内标物的 Baseline Delta / Height (基线 Delta / 高度), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Comment (IS 评注)	与当前分析物有关的内标物的任意评注, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Corrected Area (IS 校正面积)	与当前分析物有关的内标物的校正面积, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Corrected Area / Height (IS 校正面积/高度)	与当前分析物有关的内标物的 Corrected Area (校正面积) / Corrected Height (校正高度) 的比值, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Corrected Height (IS 校正高度)	与当前分析物有关的内标物的 Corrected Height (校正高度), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS End Time (IS 结束时间)	与当前分析物有关的内标物的 End Time (结束时间), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Expected RT (IS 预计保留时间)	与当前分析物有关的内标物的 Expected RT (预计保留时间), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Height (IS 高度)	与当前分析物有关的内标物的 Height (高度), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Integration Type (IS 积分类型)	与当前分析物有关的内标物的 Integration Type (积分类型), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Mass Info (IS 质量信息)	与当前分析物有关的内标物的 Mass Info (质量信息), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Name (IS 名称)	与当前分析物有关的内标物的 Component Name (成分名称), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Peak Comment (IS 峰评注)	与当前分析物有关的内标物的 Peak Comment (峰评注), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Quality (IS 质量)	与当前分析物有关的内标物的质量, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Region Height (IS 区高度)	与当前分析物有关的内标物的质量量度, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Retention Time (IS 保留时间)	与当前分析物有关的内标物的 Retention Time (保留时间), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Signal / Noise (IS 信噪比)	与当前分析物有关的内标物的 Signal / Noise (信噪比), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Start Time (IS 开始时间)	与当前分析物有关的内标物的 Start Time (开始时间), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。

表 7-6 结果表栏 (续)

标签	描述
IS Total Width (IS 总计宽度)	与当前分析物有关的内标物的 Total Width (总计宽度), 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
IS Width at 50% (50% 处的 IS 宽度)	与当前分析物有关的内标物的 50% 处宽度, 或者对内标物或无内标物的分析物来说为 N/A (无)。
Mass Info (质量信息)	与成分有关的质量信息。对于 MRM 实验来说就是 Q1/Q3 比, 对于轮廓 (全扫描) 实验来说就是 Start - Stop (开始-停止)。
Modified (已修改)	有勾选标记表示该找峰参数已在 Peak Review (色谱峰检查) 窗格中经过改动, 与定量方法中所示的原值不同。
Operator Name (操作人员姓名)	负责采集样本的仪器操作人员的姓名。
Original Filename (原文件名)	wiff 文件的名称。
Outlier Reasons (离群值原因)	<p>当在定量方法中设定了离群值标准时, 这一列表明发现标准处于该组件预设限值之外。</p> <p>Outlier Reasons (离群值原因) 列只与定量方法中的 Outlier Settings (离群值设置) 有关联, 而且是 Results Table (结果表) 中的一个预设列。</p> <p>离群值被标注的原因:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 精度 • 浓度 • 离子率 <p>如果定量离子有峰而定性离子没有峰, 则将为这两个组件标记离子率。如果定性离子有峰而定量离子没有峰, 则将为这两个组件标记离子率。如果都没有峰, 则任一组件均没有标记。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 无法计算预计离子率。
Peak Comment (峰评注)	对该行的任意评注。
Plate Number (孔板号)	自动进样器的孔板号, 按 Batch Editor (批次编辑器) 的初始指定, 用于采集数据。
Points Across Baseline (基线点数)	从峰开始到停止的扫描次数。
Points Across Half Height (半高点数)	约 50% 峰高处的色谱峰扫描次数。

表 7-6 结果表栏 (续)

标签	描述
Quality (质量)	该量度旨在表示积分峰的质量。 <ul style="list-style-type: none"> 数值接近零表示峰的积分效果不佳 (或者实际不存在峰)。 数值接近 1.0 表示峰的积分效果较好, 无需检查。
Rack Number (支架号)	自动进样器的支架号, 按 Batch Editor (批次编辑器) 的初始指定, 用于采集数据。
Region Height (区高度)	实际检测到的色谱图附近的最大峰的高度。它与 Quality (质量) 字段结合使用效果较好。质量较低、而 Region Height (区高度) 较合理的峰需要经过检查。如果 Region Height (区高度) 较小, 则没有明显的峰存在。
Relative RT (相对保留时间)	对于使用内标物的分析物来说, 是指 Retention Time (保留时间) 与 IS Retention Time (IS 保留时间) 的比值。对于内标物或没有内标物的分析物来说, 该值为 N/A (无)。
保留时间	检测到的色谱峰的实际保留时间, 单位为分钟。
Sample Comment (样本评注)	对样本的任意评注。
Sample ID (样品 ID)	对样本的任意标识。它的初始值按 Batch Editor (批次编辑器) 中的初始指定, 用于采集数据。
Sample Index (样本索引)	当前样本的索引。
样品名称	对样本的任意命名。它的初始值按 Batch Editor (批次编辑器) 中的初始指定, 用于采集数据。
Sample Type (样品类型)	样本的类型。请参阅 样本类型过滤器 页码 40。
Signal / Noise (信噪比)	检测到的峰的高度与色谱图中的噪声之比的估计值。 使用 SignalFinder 积分算法时, 采用计算所得的相对噪声和峰顶处的基线来估算噪声。MQ4 积分算法与之相似, 除了基线是用整个色谱图来估算的。 请参阅 相对噪声和信噪比计算 页码 138。
Slope of Baseline (基线斜率)	表示基线的漂移。
Start Time (开始时间)	检测到的色谱峰的开始保留时间, 单位为分钟。
Start Time at 10% (10% 开始时间)	沿色谱峰前侧的时间 (以分钟计), 强度在峰高的 10% 处。

表 7-6 结果表栏 (续)

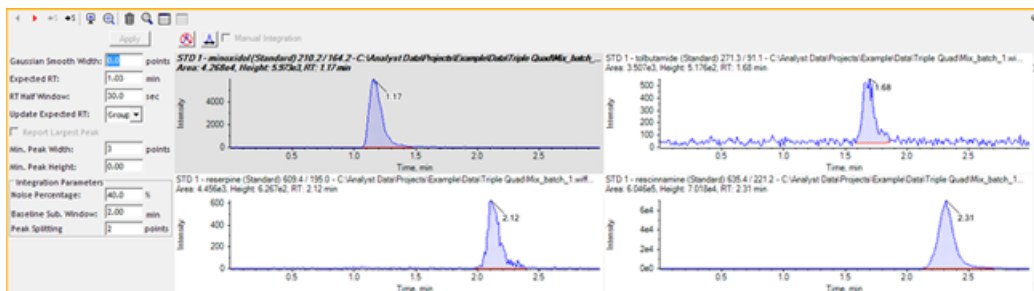
标签	描述
Start Time at 5% (5% 开始时间)	沿色谱峰前侧的时间 (以分钟计), 强度在峰高的 5% 处。
Tailing Factor (轨迹系数)	从峰的前坡到背坡的距离除以从峰的中心线到前坡距离的 2 倍, 所有测量结果均在最大峰高的 5% 处测得。
Total Width (总计宽度)	色谱图在基线处的峰宽度, 单位为分钟。
Used (已用)	对于 Standard (标准物) 样本而言, 勾选表示对应的分析物目前正被用于构造校准曲线。对于 Quality Control (质量对照) 样本而言, 勾选表示该分析物被用于 QC 统计计算。对于其他类型的样本来说, 该字段仅供说明之用。
Vial Number (进样瓶号)	自动进样器的进样瓶号, 按Batch Editor (批次编辑器) 的初始指定, 用于采集数据。
Width at 10% (10% 处宽度)	在 10% 峰高处测得的峰宽度。
Width at 5% (5% 处宽度)	在 5% 峰高处测得的峰宽度。
Width at 50% (50% 处宽度)	在最大强度一半处测得的色谱峰的宽度, 单位为分钟。

用 Peak Review（色谱峰检查）窗格目测检查原始色谱图，这样就可以确定找峰程序的质量。在 Results Table（结果表）处于活动状态时，在结果表工具栏中单击 Show Peak Review（显示色谱峰检查）图标，打开 Peak Review（色谱峰检查）窗格。检查人员应当按照峰积分标准以及本方的标准操作规程（SOP）检查中的数据接受度检查定量数据。

不支持数字分组。用户不得在任何文本框（如积分参数）和表格（如结果表）中对数字进行分组。

增强型 Peak Review（色谱峰检查）可以在叠加色谱图上显示 Ion Ratio（离子率）接受度。用户还可以将单张色谱图放大。

图 8-1 峰检查窗格



用 Peak Review（色谱峰检查）窗格更正积分不当的色谱图，既可以采用调整找峰参数的办法，也可以通过手动方式选择积分的起点和终点。色谱图积分完成后，Results Table（结果表）会用新的峰面积及其他参数自动更新。

定量方法包含了对被选择积分的峰进行定量的标准。检查人员应当按照峰积分标准以及本方的标准操作规程（SOP）检查中的数据接受度检查定量数据。

手动积分

对某个色谱图完成手动积分之后，选择该复选框表示该图采用了手动积分。在这种状态下，如果用户清空复选框，峰的手动积分就会被取消，软件会自动使用方法参数重新计算积分。

该复选框与 Enable Manual Integration Mode（启用手动积分模式）按钮的差别在于，该复选框反映的是当前峰的状态，而后者指的是在色谱图中画框时的动作。

注释： 启用手动积分模式后，它会对所有窗格单元保持启用状态，直至其被清空。

应用

如果用户调整了任何找峰参数，Apply（应用）按钮即被启用。单击该按钮将修改后的找峰参数应用到处于活动状态的色谱图。

处于手动积分模式时除外，此时在色谱图中将某个峰画入框内等同于调整 Expected RT（预计保留时间）参数，然后再单击 Apply（应用）。

注释：如果用户修改了找峰参数，然后激活了另一个色谱图而没有单击 Apply（应用），参数就没有被应用，所作改动便会丢失。

关于检查峰的提示

- 在特定列上对 Results Table（结果表）进行排序，并且只检查排在最上面或最下面的色谱图。
- Peak Review（色谱峰检查）窗格始终与Results Table（结果表）同步，并按 Results Table（结果表）中的相同顺序显示相同峰的色谱图。对 Results Table（结果表）所作的任何改动（如行排列、筛选样本类型或者选择任何成分）都会在Peak Review（色谱峰检查）窗格中自动反映出来。
- 选择一次性查看的色谱图数。
- 用窗格右侧的滚动条翻看现有色谱图。当 Peak Review（色谱峰检查）窗格处于活动状态时，用键盘上的上下箭头键或滚轮移动色谱图。
- 任何时点都有一个色谱图处于活动状态，并以黑体字标题来表示。单击某个色谱图范围内的任意位置，使之处于活动状态。
- 色谱图处于活动状态后，窗格左侧所显示的积分参数便会更新，以反映新的活动色谱图的情况。如果用户调整了色谱峰的积分参数，然后单击 Apply（应用），就会对当前处于活动状态的色谱图产生影响。
- 单击第一列左侧的灰色区，在 Results Table（结果表）内选择一行，在 Peak Review（色谱峰检查）窗格内显示相应的峰。如果用户滚动到 Peak Review（色谱峰检查）窗格内的某个色谱图，Results Table（结果表）就会突出显示相应的行，然后将其滚动到视图中。
- 如果用户在色谱图中的某个峰周围画框，则 Expected RT（预计保留时间）积分参数就会随峰的实际保留时间一起更新。新的保留时间就会自动应用，而且该峰会再次进行积分，对 Results Table（结果表）进行更新。
- 如果用户用手动积分模式检查峰，在峰周围画框就会以手动方式对选中的峰进行积分。
- 将之前计算过的色谱图存入缓存，可以加快色谱峰的检查过程。请参阅 [Edit Menu（编辑菜单）](#) 页码 15。

峰检查右键菜单

这些功能用于控制显示在色谱图左侧的积分参数的外观。 在Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。 其中包括以下命令。

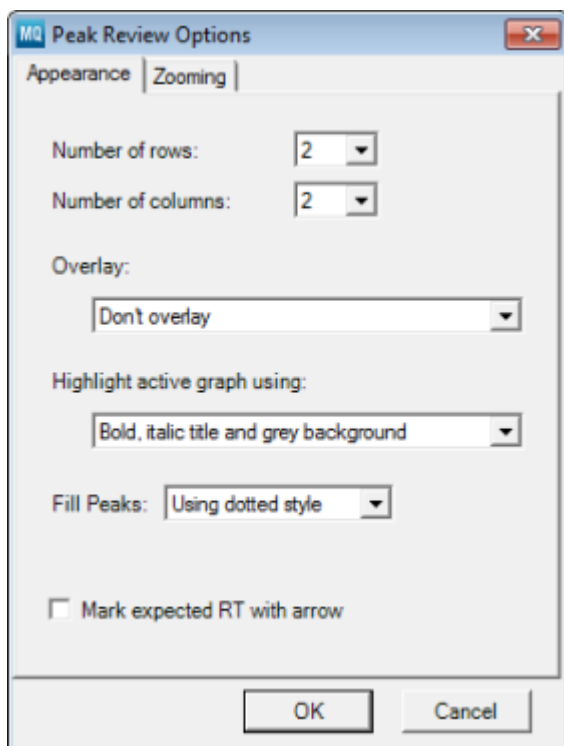
表 8-1 色谱峰检查

任务	命令
改变 Peak Review（色谱峰检查）窗格的外观。	峰检查选项对话框：外观选项卡 页码 60 或 峰检查选项对话框：缩放选项卡 页码 62 。
设置峰检查标题格式。	设置峰检查标题格式 页码 64 。
用各个参数的描述性名称显示参数	在默认情况下， Show Parameters-Normal Width（显示参数—正常宽度）始终是设定的。
复制参数。	Copy Parameters（复制参数） 页码 65 。
粘贴参数。	粘贴参数 页码 65 。
将峰设为‘未找到’。	Set Peak to 'Not Found'（将峰设为“未找到”） 页码 66 。
使用峰。	Use Peak（使用峰） 页码 66 。
更新成分的定量方法。	Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法） 页码 66 。
更新组的定量方法。	Update Quantitation Method for Group（更新分组定量方法） 页码 66 。
将积分参数应用到组内的样本。	Apply Integration Parameters to Sample Within Group（将积分参数应用到组内样本） 页码 67 。
将峰还原至原来的方法。	Revert Peak to Original Method（将色谱峰还原至原方法） 页码 67 。
还原成分的所有峰。	Revert All Peaks for Component（还原成分的所有峰） 页码 67 。

峰检查选项对话框：外观选项卡

在 Peak Review（峰检查）窗格中单击右键，选择调节影响 Peak Review（峰检查）窗格外观的选项。 建议设置最好不要超过 4 行 4 列。

图 8-2 峰检查选项对话框：外观选项卡

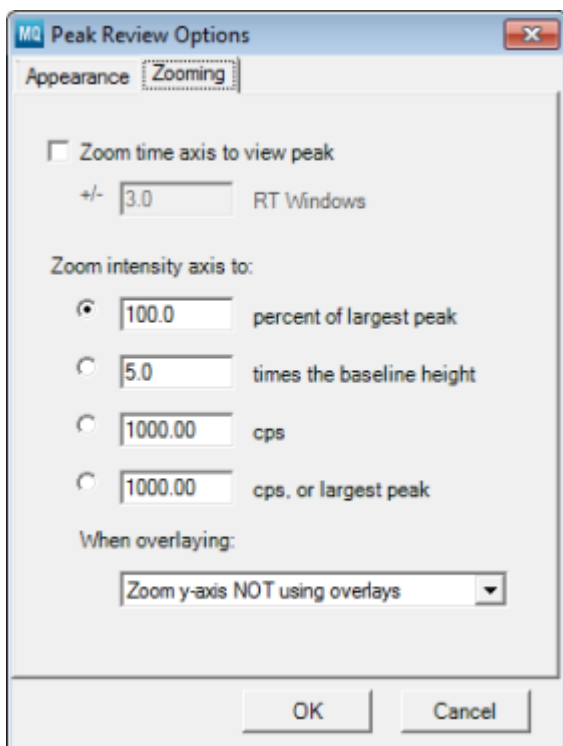


标签	描述
Number of rows and Number of columns (行数和列数)	控制同时可见的色谱图的数量。除非色谱图已经存入缓存, 否则在显示较多色谱图的情况下翻页的时间会更长。请参阅 Edit Menu (编辑菜单) 页码 15。
Overlay (叠加)	决定是否应在每一个子窗格中的主色谱图上叠加其他色谱图。 <ul style="list-style-type: none"> Don't Overlay (不叠加): 防止叠加其他色谱图。 All components for group (组中所有成分): 将同组成分的所有色谱图作为 (当前样本的) 主成分叠加。 Analytes and IS' s separately for group (分别叠加组内的分析物和内标物): 与前一个选项类似, 唯一的差别在于不是叠加同组的所有成分, 而是将分析物和内标物分开叠加。 Internal Standard with Analyte (带分析物的内标物): 对于分析物而言, 叠加分析物所使用的内标物 (内标物色谱图没有其他叠加)。 Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines (带离子率线的定性离子和定量离子): 显示离子率线。选择该选项可在 Results Table (结果表) 中显示离子率接受度。在定量方法中有定义组的情况下, 用户可以查看离子率接受度。不过, Ion Ratio Lines (离子率线) 只是接受度的一种表征, 而非最终结果。这些线在色谱图中以峰高的型式显示, 但它们是根据峰面积或高度 (取决于定量方法中的设置) 计算出来的。如果高度和面积之间有差异, 用户必须确认 Results Table (结果表) 中的 Ion Ratio (离子率) 离群值。
Highlight active graph using (突出显示活动图表):	表示当前活动的色谱图应当怎样显示。设置为使用黑体, 斜体标题和灰色背景
Fill peaks (填充峰)	表示峰的积分面积怎样显示。选择包括: <ul style="list-style-type: none"> 采用本文件中屏幕截图所使用的虚线样式。 采用实线样式。 采用不填充方式。在所有情况下, 峰的基线都是要画的 (红色)。 采用第三个选项时, 只画出基线, 峰不加填充。
Mark expected RT with arrow (用箭头标记预计保留时间)	用蓝色的箭头在时间轴下方画线, 表示 Expected Retention Time (预计保留时间)。它可以用来确定积分峰是否靠近预计保留时间。

峰检查选项对话框: 缩放选项卡

在 Peak Review (峰检查) 窗格中单击右键, 选择调节影响 Peak Review (峰检查) 窗格外观的选项。Zoom intensity axis to (将强度轴缩放至) 功能用来自动调节色谱图的 Y 轴。

图 8-3 峰检查选项对话框：缩放选项卡



标签	描述
Zoom time axis to view peak (缩放时间轴查看峰)	选择该选项后，色谱图的 X 轴就会自动调整，整个图只有一部分可见。这对于较长的 LC 运行较为适用，这样就可以更清楚地观察所关注的区域。窗口的宽度以保留时间窗积分参数的倍数来表示。缩放区的总宽度是 RT Window (保留时间窗) 指定倍数的 2 倍。
Zoom intensity axis to percent of largest peak (将强度轴缩放至最大峰百分比)	用于自动调节色谱图的 Y 轴。将 Y 轴的刻度调节至色谱图可见 X 轴范围内的最大峰的指定百分比。如果使用 Zoom (缩放) 时间轴来查看峰的特性，其范围要比 LC 总运行长度要小。
Zoom intensity axis to times the baseline height (将强度轴缩放至基线高度计时)	用于自动调节色谱图的 Y 轴。用于重点观察基线区本身。
Zoom intensity axis to cps (将强度轴缩放至 cps)	将 Y 轴的刻度直接调节至指定值。

标签	描述
Zoom intensity axis to cps, or largest peak（将强度轴缩放至 cps 或最大峰）	将 Y 轴的刻度调节至指定值或最大峰二者中较小的一个。
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays（叠加时缩放 Y 轴且不使用叠加）	保持“将强度轴缩放至”部分的设置，只使用主数据集合。如果叠加色谱图的强度大于主数据集合，该设置可能会造成叠加色谱图只能局部可见。
When overlaying Zoom y-axis using overlays（叠加时缩放 Y 轴且使用叠加）	使用主数据集合以及所有叠加色谱图，并使用所有 Y 值中最大的一个。该功能可以保证叠加色谱图始终可见。
When overlaying Use a percentage y-axis（叠加时使用百分比 Y 轴）	用百分比刻度分别调节主数据集合和叠加色谱图。这样就会让每一个轨迹都使用所有可用最大高度。不过，相对峰高度无法直接通过目测比较。

提示！ 在 Y 轴范围内双击，按整个数据集合内的最强峰调节轴上的刻度。

选择该选项后，当前被检查的峰的色谱图就会用一根蓝色的实线轨迹绘制，并会显示其积分计算的峰面积。（相同样本中）其他成分的色谱图（非积分后的峰面积）会用虚线绘制在同一张色谱图上。

当图表以这种方式显示叠加色谱图时，在标题区双击可切换显示所有色谱图的标题，或者只显示处于活动状态的色谱图。

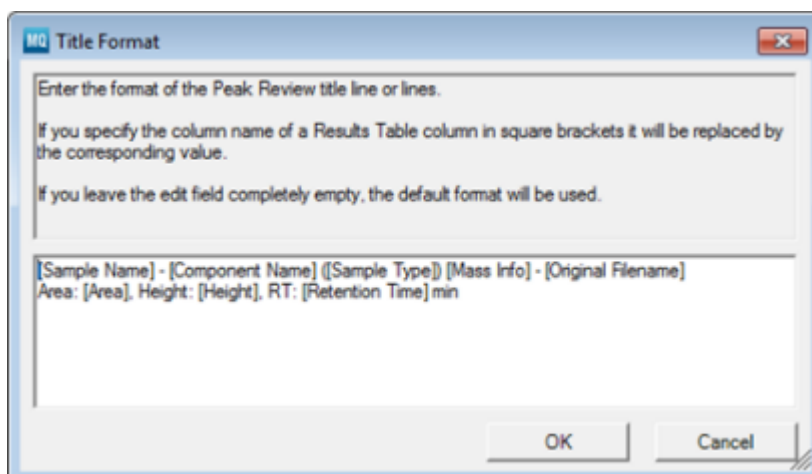
提示！ 在 X 轴范围内双击返回图表的主视图，所有数据在主视图中均可见。在轴范围内选择一个时间范围即可放大视图。

设置峰检查标题格式

用对话框自定义每一张色谱图的图表标题中所显示的信息。如果用户在结果表中将键入的列名称放在方括号中，则该名称就会被当前样本和成分的字段值代替。用户也可以键入任何如实保留的其他文本。建议在峰检查标题中加入样本名称 [样本名称]。

- 在 Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键，然后单击 Set Peak Review Title Format（设置峰检查标题格式）

图 8-4 标题格式对话框



Copy Parameters（复制参数）

在Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键，进入该命令。将该命令与 Paste Parameters（粘贴参数）结合使用，可将一个色谱图的找峰参数复制到另一个色谱图。如果需要对若干个色谱图进行相同的参数调整，就可以使用该命令。

1. 在一个有色谱图打开的图表中单击右键，然后单击 Copy Parameters（复制参数）。
2. 用 Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法）命令将所作改动应用到该成分的所有色谱图。

粘贴参数

1. 在一个有色谱图打开的图表中单击右键，然后单击 Copy Parameters（复制参数）。
2. 在另一个色谱图上单击右键，然后单击 Paste Parameters（粘贴参数）。

之前复制的参数将被应用到新的色谱图上。

Set Peak to 'Not Found'（将峰设为“未找到”）

- 在一个有活动色谱图打开的图表中单击右键，然后单击 Set Peak to 'Not Found'（将峰设为“未找到”）从选中的色谱图中删除积分。

Use Peak（使用峰）

- 在一个有活动谱图打开的图表中单击右键，然后单击 Use Peak（使用峰）将处于活动状态的峰加入校准曲线，或者从校准曲线中将其排除。

Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法）

在对某个色谱图的找峰参数进行调整后，可选择该功能调整用结果表保存的定量方法的备份，将这些参数用于相关成分。

- 调整找峰参数，单击右键，然后单击 Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法）。

所有包含该成分的样本都将自动使用新的参数进行积分计算，并更新 Peak Review（色谱峰检查）窗格和 Results Table（结果表）。如果以手动方式对某个峰进行积分计算，系统就会询问用户是否应当将重新计算的积分应用到所有峰，还是仅应用到那些未采用手动积分的峰。

Update Quantitation Method for Group（更新分组定量方法）

它与 Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法）命令类似，唯一差别是积分适用于与当前活动色谱图的成分同组的所有成分。如果用户指定了各个分组的各种成分，并且估计已经分配至指定分组的成分有相同的保留时间，就可以使用该功能，这样用户就

可以一次性重新设置分组中所有成分的参数，包括预计保留时间。如果组内的成分保留时间不同，则该功能不适用。

- 调整找峰参数，单击右键，然后单击 Update Quantitation Method for Group（更新分组定量方法）。

Apply Integration Parameters to Sample Within Group（将积分参数应用到组内样本）

特定色谱图的找峰参数调整完毕后，可使用该功能将用 Results Table（结果表）保存的定量方法备份中的原始参数应用到色谱图。

- 特定色谱图的找峰参数调整完毕后，单击右键，然后单击 Apply Integration Parameters to Sample Within Group（将积分参数应用到组内样本）。

Revert Peak to Original Method（将色谱峰还原至原方法）

特定色谱图的找峰参数调整完毕后，可使用该功能将用 Results Table（结果表）保存的定量方法备份中的原始参数应用到色谱图。

- 单击右键，然后单击 Revert Peak to Original Method（将色谱峰还原至原方法）。

Revert All Peaks for Component（还原成分的所有峰）

当某些色谱图的找峰参数调整完毕后，可使用该功能将用 Results Table（结果表）保存的定量方法备份中的原始参数应用到与当前处于活动状态的色谱图成分相同的所有色谱图。如果以手动方式对某个峰进行积分计算，系统就会询问用户是否应当将重新计算的积分应用到所有峰，还是仅应用到那些未采用手动积分的峰。

- 单击右键，然后单击 Revert All Peaks for Component（还原成分的所有峰）。

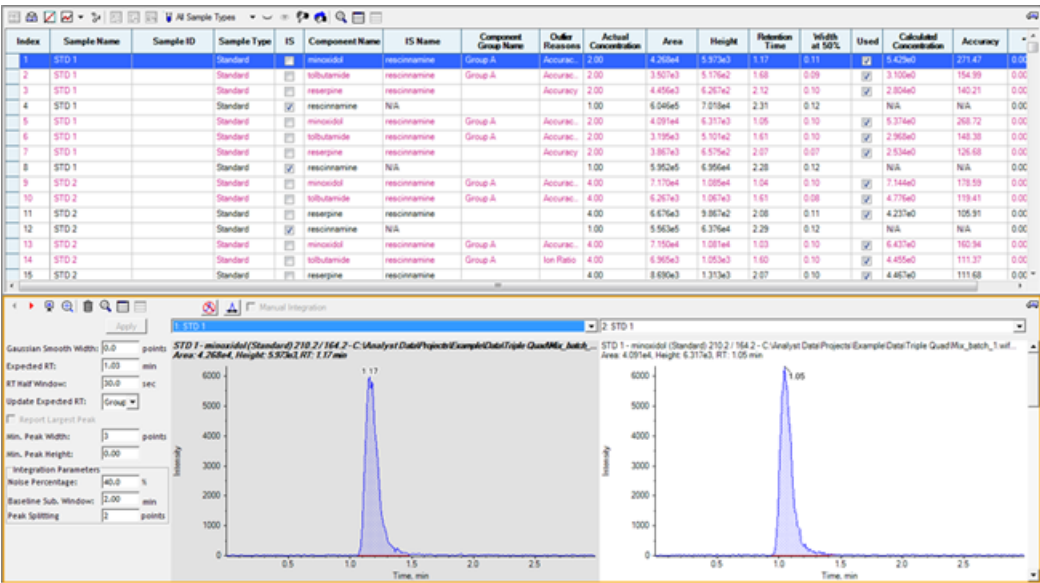
Side-by-side Sample Review（并列样本检查）

9

用 Side-by-side Sample Review（并列样本检查）功能筛选特定的目标化合物。 用户最多可以选择 6 个样本来比较样本之间的峰响应。 检查人员应当按照峰积分标准以及本方的标准操作规程（SOP）检查中的数据接受度检查定量数据。

在 Results Table（结果表）处于活动状态时，在Results Table（结果表）工具栏中单击 Side-by-side Sample Review（并列样本检查）图标，打开 Side-by-side Sample Review（并列样本检查）窗格。

图 9-1 并列样本检查窗格



定量方法包含了对被选择积分的峰进行定量的标准。 检查人员应当按照峰积分标准以及本方的标准操作规程（SOP）检查中的数据接受度检查定量数据。

进行并列样本检查

1. 打开一个 Results Table（结果表）。
2. 单击 Side by Side Sample Review（并列样本检查）图标。
3. 在 Side by Side Sample Review（并列样本检查）窗格中选择一个样本。

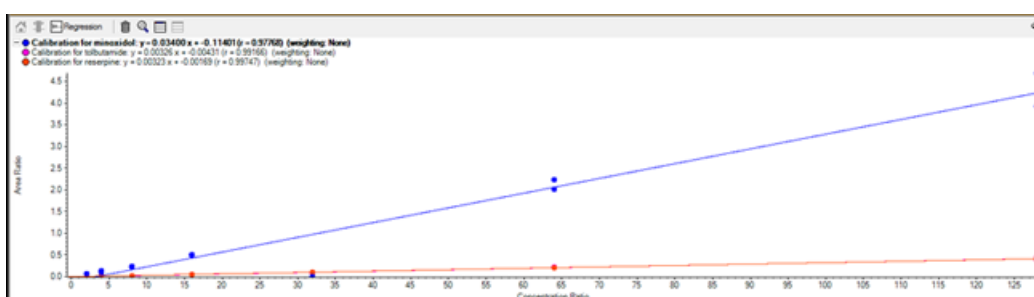
此时会显示积分参数。

提示！ 在 Side by Side Sample Review（并列样本检查）窗格中单击右键，然后选择 Options（选项）改动并列检查中的行号或列号。

4. 从其他列表中选择另一个样本。

用 Calibration（校准）窗格目测检查每一种分析物的回归（如果所使用的 Standard（标准物）样本的浓度已知）。如果用户进行的是相对定量操作，而且没有 Standard（标准物）样本，则该窗格不适用。当 Results Table（结果表）处于活动状态时，在工具栏中单击 Show Calibration（显示校准）。

图 10-1 “校准”窗格

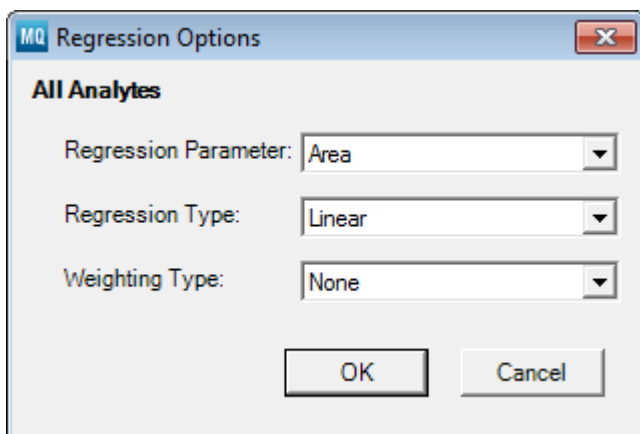


除了检查回归之外，用户还可以排除 Standard（标准物）样本，使之在回归计算中不再使用。调整完成后，系统会自动进行新的回归计算，并对所有样本分析物的 Calculated Concentration（计算所得浓度）和 Accuracy（精度）等参数重新进行计算。请参阅[回归方程](#) 页码 119。

回归选项对话框

如果分析物较多，用 Regression Options（回归选项）对话框就要比逐个修改回归参数更方便。

图 10-2 回归选项对话框



校准提示

- 对于没有关联内标物的分析物来说，y 轴是在定量方法中选择的 Area（面积）或 Height（高度）。对于有内标物的分析物来说，y 轴是（分析物与内标物的）Area（面积）或 Height（高度）比。
- 对于没有关联内标物的分析物来说，x 轴是 Actual Concentration（实际浓度）。否则，就是（分析物与内标物的）Actual Concentration（实际浓度）比。
- 如果在 Components & Groups List（成分与分组列表）中选择的分析物不止一种，就会叠加所有分析物的校准结果。反之，则会显示选定分析物的校准结果。
- 标题部分始终显示的是处于活动状态的分析物名称以及与之关联的回归等式（含相关性系数）。如果无法进行回归计算，比如没有 Standard（标准物）样本，标题便会指出这种情况。如果多种分析物的校准结果被叠加在一起，可以切换不同标题，以显示所有分析物的信息，或者在标题区内任何位置双击，从而只显示处于活动状态的分析物。如果叠加的分析物很多，则可能无法显示全部信息。在这种情况下，可以通过在标题中画框来滚动显示标题。
- 使用中的 Standard（标准物）样本数据点的绘图方式始终与使用这些点的校准等式是一样的。用户可以选择显示被排除的 Standard（标准物）样本和 Quality Control（质量对照）样本的数据点。
- 如果用户单击了某个数据点，则结果表中相应的行就会被自动选中，并滚动到视图中，只要该行目前在表中的某处可见，并且未被隐藏。

校正右键菜单

在 Calibration（校准）窗格中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。其中包括以下命令。

表 10-1 校正窗格右键菜单选项

菜单选项	描述
Exclude (Include) 【排除（计入）】	如果用户直接在未被排除的标准物的数据点上单击右键，则该选项将被用来从回归计算中排除样本（数据点被单击的样本和分析物）。如果样本已被排除，则菜单项中的文本将显示为 Include（计入），然后选择该菜单项计入该点。选择完成后，软件将进行回归计算，并更新 Results Table（结果表）。该功能等同于在结果表中清空或选择相应行的 Used（已用）复选框。
Exclude - All Analytes (or Include - All Analytes) 【排 除—所有分析物（或计 入—所有分析物）】	排除或计入所有分析物，而不仅仅是与某一个已选择的数据点相对应的分析物。

表 10-1 校正窗格右键菜单选项（续）

菜单选项	描述
Show Excluded Standards（显示被排除的标准物）	选择该选项后，被排除的标准物的数据点以未闭合的圆画出。清除该选项后，被排除的标准物就不再显示。
Show QCs（显示质量对照品）	选择该选项后，Quality Control（质量对照品，QC）样本以未闭合的菱形画出。清除该选项后，QC 样本就不再显示。
Show Legend（显示图例）	<p>选择该选项后，图表右侧就会出现一个图例，用于显示各种样本类型的点符号（闭合圆形表示标准物，未闭合圆形表示被排除的标准物，未闭合的菱形表示质量对照品）。</p> <p>注释： 如果用户没有看到某些样本类型，比如未选择 Show QCs（显示 QC）选项，那么这些样本类型的条目就不会出现。如果 QC 样本和被排除的标准物均未显示，则该选项不可用，并且不会出现任何图例。</p>
Use Percent Y-Axis（使用百分比刻度 Y 轴）	<p>如果没有选择，图表的 Y 轴就以峰的绝对 面积或高度（或者在使用内标物的情况下为峰的面积或高度比）为单位。选择该项后，Y 轴就以每一种分析物最大的 Y 值的数据点的百分比独立表示。</p> <p>如果叠加的分析物不止一种，且它们的绝对响应有明显差异（因为允许用刻度标出每一条轨迹以便使用整个可用的垂直区域），则百分比刻度轴较为适用。 否则，响应较弱的分析物会很靠近 X 轴，而且需要对图表进行缩放才能看仔细。</p>
Log-Log Plot（对数—对数图表）	用于在面积 vs. 浓度以及 Log（面积） vs. Log（浓度）图表视图之间切换。

使用 Statistics Table（统计表）可以查看分析的可复制性方面的信息。表中的每一行都综合了相同分析物相关峰分组的均值和标准差之类的信息，在理想情况下，它们应当具有相同的响应。

图 11-1 统计窗格

标签	描述
Row（行）	行号。单击其他列题头中某一个就可以对表进行排序。单击题头使表返回原来的视图。
Component Name（成分名称）	分析物的名称。
Actual Concentration (or Sample Name)（实际浓度（或样本名称））	如果按实际浓度分组，该列便显示浓度。如果按样本名称分组，则列标题就会变动，并显示样本名称。
Num. Values（Num. 数值）	显示 n 中有 m 个，其中 n 是相同实际浓度（或相同样本名称）的样本总数，而 m 是这些样本中用于校准的样本数。如果相应的峰不能进行积分计算，或者 Used（已用）字段被手动清空，样本就不会被使用。
Mean（均值）	已用样本的平均值。
Standard Deviation（标准差）	已用样本的标准差。
Percent CV（百分比差异 CV）	以百分百表示的差异系数： $100 * \text{标准差} / \text{均值}$ 。

标签	描述
Accuracy (精度)	平均值除以实际浓度，以百分比表示： $100 * \text{均值} / \text{实际浓度}$ 。只有在按实际浓度分组时才会显示该字段，按样本名称分组时不显示。
Values (Num. 数值)	在附加列中出现的样本的个别值。如果相应的样本不能进行积分计算，则该值为 N/A (无)。如果 Used (已用) 字段被手动清除，则该值以删除线显示。

统计表提示

- Statistics Table (统计表) 与 Components & Groups List (成分与分组列表) 相关联，可显示与选定分析物对应的行。如果选择了 All Components (所有成分) 或 All Analytes (所有分析物) 选项，则所有分析物的条目都会出现。如果选择了一种分析物，就仅出现该分析物的条目。如果从列表中选择了一种内标物，则 Statistics Table (统计表) 为空。请参阅[成分与分组列表 页码 36](#)。
- 如果用户单击了某个 Value (数值) 单元格，则 Results Table (结果表) 中该分析物和样本的对应行就会被选中，只要该行当前在 Statistics Table (结果表) 中可见。只有 Unknown (未知) 样本才会在 Results Table (结果表) 内显示。如果 Statistics Table (统计表) 中含有 Standard (标准物) 样本的信息，则对应的行在 Results Table (结果表) 中不可见。如果 Peak Review (色谱峰检查) 窗格可见，就会与 Results Table (结果表) 关联，单击单元格时便会更新。
- 单击某一个列标题可以对 Statistics Table (统计表) 进行排序。
- 用户可以复制整个 Statistics Table (统计表)，也可以只复制所关注的行。
 - 若要复制整个表，可单击 Edit (编辑) > Copy (复制)。
 - 若要仅复制所关注的行，可手动选择这些行，然后单击 Edit (编辑) > Copy (复制)。
- 如果列宽度已调整，这些宽度会在下次显示 Statistics Table (统计表) 时恢复。
- 格式和精度与 Results Table (结果表) 中相同。
- Group by Concentration for Standards and QCs (按浓度对标准物和 QC 分组) 是以 Displayed Actual Concentration (实际显示浓度) 为依据的，而不是 Results Table (结果表) 中所保存的 Actual Concentration (实际浓度)。如果 Std 1 浓度为 0.001，Std 2 浓度为 0.005，则显示格式为 0，这样 Std 1 和 Std 2 便会同组，因为这两个值都被作为 0 对待。若要将它们单独分组，需在 Column Settings (列设置) 对话框中将 Analyte Concentration (分析物浓度) 的精度设为 0.000。如果 Std 1 为 0.500 而 Std 2 为 0.499，将精度设为 0.00 就可以把它们分在同一组。

统计表右键菜单

在 Statistics Table (统计表) 中单击右键，选择 Use Peak (使用峰) 命令。用该命令可以设置与某个 Value (数值) 列中的选定单元格相对应的样本和分析物的 Used (已用) 字段。单击右键弹出菜单之前，先要在某个 Value (数值) 列中单击并选中相应的单元格。

用 Metric Plots（度量图表）对照行号或另一列，按 Results Table（结果表）列中的数值绘图。这些图表能够为目测数据检查提供极大帮助，尤其是在用户不想用 Peak Review（色谱峰检查）窗格手动检查每一个色谱图的情况下。

生成度量图表

1. 在 Results Table（结果表）中选择一列或两列。
2. 单击 Show Metric Plot（显示度量图表）。

如果选择了一列，生成的图表会作为表内行号的方程，显示列内的数值。如果选择了两列，则列内的数值便会相互对照绘制。两列中待选择的第一列含 x 值，而第二列则含 y 值。

Save Metric Plot Settings（保存度量图表设置）

1. 选择一列，然后单击 Show Metric Plot（显示度量图表），便可打开一个度量图表。
2. 在图表中单击右键，然后单击 Save Settings（保存设置）。

这样用户就可以迅速生成经常使用的度量图表，而无需每次都去选择相应的数据列。

度量图表提示

- 如果用户左键单击某个数据点，Results Table 中的相应行便会被自动选中，并滚动显示。如果 Peak Review 窗格打开，则该窗格也会更新，并显示对应的色谱图。这为对色谱峰执行离群值检查提供了一种便捷方法。
- 如果在成分和分组列表中选中一种以上的成分，那么所有成分的轨迹都会被叠加在一起。反之，则会显示一种选定成分的轨迹。
- 标题区始终显示活动轨迹的名称。如果多种成分的轨迹被叠加在一起，可以切换不同标题，以显示所有轨迹的信息，或者在标题区内任何位置双击，从而只显示当前活动轨迹。单击标题左侧的彩色点便可激活与之对应的轨迹。
- 保存度量图表的设置，以供再次使用。在度量图表中单击右键，然后单击 Save Settings As。

度量图表右键菜单

在 Metric Plot（度量图表）中单击右键，进入快捷菜单。 其中包括以下命令。

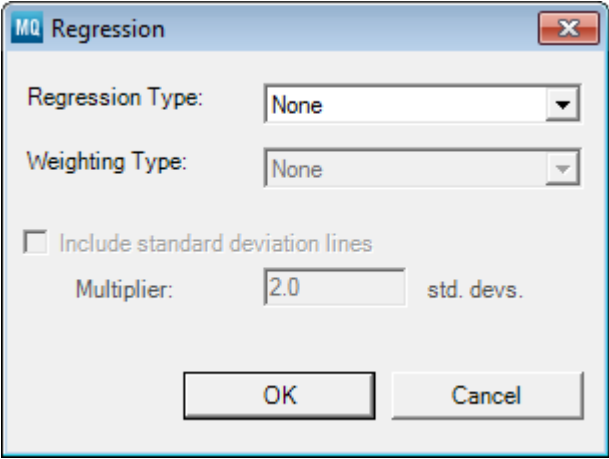
表 12-1 度量图表右键菜单选项

菜单选项	描述
Regression	在度量图表上显示回归线。 <ul style="list-style-type: none">Regression Type（回归类型）Weighting Type（加权类型）Include standard deviation lines and Multiplier（包含标准差线和乘数） 请参阅 Regression（回归）对话框 页码 77 。
Display 'N/A' as 0.0	选中该选项后，非数字性的图表值就会用 Y 值 0 来表示。 否则，这些点就会从图表上并忽略。 例如，对于无法积分的峰来说，Retention Time 会被报告为 N/A（不适用）。 在该功能下，这类峰以点的形式存在，这样用户就可以看到这些可能存在问题的样本，然后通过单击这些点将它们与 Peak Review 窗格关联。
Show Legend（显示图例）	更改用于各类样本的点符号的注解图例。
标记活动系列（使用样本名称）	对是否用来自 Results Table 的 Sample Name 字段的文本来标记数据进行改动。 如果叠加轨迹不止一个，就只标记当前活动的轨迹。
Use Percent Y-Axis（使用百分比刻度 Y 轴）	对 Y 轴采用绝对值还是最大 Y 值百分比为单位进行改动。 使用百分比刻度时，百分比是针对每一条叠加轨迹独立计算的。 该功能可用来绘制多种成分的叠加轨迹，而且分析成分在该量度上的响应差别显著。
Start Y-Axis at Zero（Y 轴从 0 开始）	对 Y 轴从 y=0 或是需要绘制的最小 Y 值开始进行改动。
Connect Points With Lines（用线连接各个点）	对是否用线连接各个数据点进行改动。
Save Setting（保存设置）	如果图表目前正在与某个设置关联，则该功能保存的是当前设置。 否则，该功能的作用与 Save Setting As 功能是一样的。
Save Setting As（将设置保存为）	如果经常用相同的列绘图，用户就可以将绘图选项作为一个设置来保存。 这样用户就可以迅速生成一个图表，即便需要的栏当前没有出现在 Results Table 中。 除了数据列之外，各绘图选项也被保存。 设置保存后，其名称会出现在 Metric Plot 菜单上。
Delete Setting（删除设置）	如果当前图表与某个设置关联，便可以用该功能删除设置。

Regression（回归）对话框

单击在度量图表上显示回归线。

图 12-1 Regression（回归）对话框



标签	描述
Regression Type（回归类型）	含各种回归类型（线性、二次等等）。 Mean（均值）回归类型所产生的是位于所有数据点平均 Y 值位置的一根水平线，而 Median（中位数）回归类型则会在数据点的 Y 值中位数位置形成一根水平线。此外，还有一个 None（无）功能可以删除之前的回归计算。
Weighting Type（加权类型）	各种加权类型的介绍详见 加权系数 页码 120 。
Include standard deviation lines and Multiplier（包含标准差线和乘数）	这些选项在选择了 Mean（均值）或 Median（中位数）回归类型的情况下均可使用。 选择该选项后，图表上就会显示以虚线绘制的水平线，以表示指定数目的标准差是高于还是低于主线。 用该选项可以查看那些偏离平均值（比如）有两倍或三倍标准差的数据点。

用 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）创建一个定量方法，或编辑一个现有的方法。

典型的工作流程是用 New Results Table（新建结果表）向导程序来创建定量方法。不过，用户可以使用 Quantitation Method Editor（定量方法编辑器）来创建一个在必要时使用的定量方法。

成分选项卡

在Components（成分）选项卡中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。其中包括以下命令。

表 13-1 成分右键菜单选项

菜单选项	描述
Find Component by Name（按名称查找成分）	用于选择 Name（名称）与文本信息相匹配的成分。查找匹配项无需文本信息完全相同。如果成分较多，在选择具体成分时可以使用该命令。 如果一开始在电子表格中没有选择任何行，则从第一行开始搜索。否则，软件会从选中行的下一行开始搜索，搜索一周后回到起始点。如果 Name（名称）栏中包含文本信息的成分不止一个，可以使用该选项。如果第一次搜索没有找到成分，可以再次搜索，使第一个成分保持被选中状态，以便在表中找到另一个匹配项。
Insert Row Above（在上方插入行）	立即在当前选中的行上方插入一个空白行。
Delete Selected Rows（删除选定行）	将当前选定的行从表中删除。
Sum Multiple Ions（多离子加总）	对多个 MRM 离子对或全扫描质量方法的色谱图求和。选择该命令后，其他质量栏就会被添加到 Components（成分）表中。指定行所选中的质量被用来构造相应分析物或内标物的 XIC 之和。建议始终选择该功能。
Groups（分组）	请参阅 分组子菜单 页码 79。
Internal Standards（内标）	请参阅 内标物子菜单 页码 80。

分组子菜单

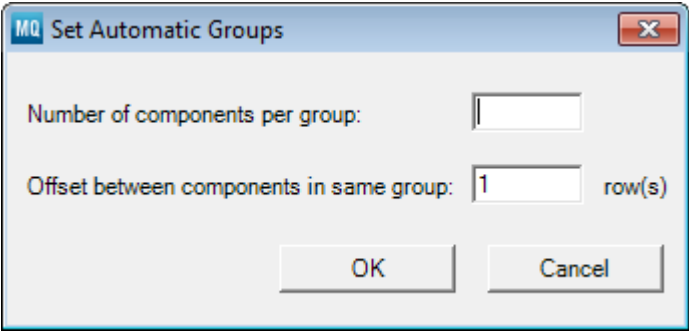
表 13-2 分组菜单选项

菜单选项	描述
Using Constant Group Size (使用常数分组大小)	打开 Set Automatic Groups (设置自动分组) 对话框, 用它在 Group (分组) 栏内自动填入每一组的第一个成分名称, 前提是每一组的成分数目相同。请参阅 设置自动分组对话框 页码 80 。
By Filling Down Existing Groups (通过往下填入现有分组)	对若干按顺序排列的成分自动完成相同组名。 若要使用该命令, 需手动指定每一组第一个成分的组名, 然后再选择命令。指定的组名被往下填入到组名为空白的后续成分中。该命令只考虑 Name (名称) 栏已被填充的行。
Using Q1 Masses (使用 Q1 质量)	仅 MRM 实验才有。该命令用于在 Group (分组) 栏中填入 Q1 质量。如果相同化合物的多种离子对形式有相同的 Q1 质量, 并且监测到不同的碎片, 则该命令较为适用。如果成分很多, 而且某些成分恰好有相同的 Q1 质量, 就可以将它们分在同一组。
Using Q3 Masses (使用 Q3 质量)	仅 MRM 实验才有。该命令用于在 Group (分组) 栏中填入 Q3 质量。如果监测到一种化合物有不同的同位素形式 (Q1 质量不同), 但监测到的 Q3 质量为常数, 则该命令较为适用。如果成分很多, 而且某些成分恰好有相同的 Q3 质量, 就可以将它们分在同一组。
Using (Q1 - Q3) Mass Differences (使用 (Q1 - Q3) 质量差)	该命令用于在 Group (分组) 栏中填入 Q1 和 Q3 质量差 (仅 MRM 实验才有)。如果监测到一种化合物有不同的同位素形式 (Q1 质量不同), 但监测到含所有变异同位素的 Q3 碎片质量一致, 则该命令较为适用。如果成分很多, 而且某些成分恰好有相同的质量差, 就可以将它们分在同一组。
Add Group to Start of Component Name (将分组添加至成分名称起始处)	将组名添加到分析物或内标物名称的起始处。如果起始名称不唯一, 则该命令较为适用。
Remove Group from Start of Component Name (从成分名称起始处删除分组)	从分析物或内标物名称的起始处将存在的组名删除。
Append Summed Ions for Groups (添加各组的汇总离子)	当 Sum Multiple Ions (汇总多种离子) 选项被启用时, 该命令可为每一个使用汇总色谱图的分组添加一个新成分。如果分组的分析物和内标物均已确定, 便会添加分析物和内标物的各种成分。新分析物的名称默认为组名, 而内标物则在组名后添加 .IS。如果需要汇总成分而非原来的单质量成分, 则后者可以删除。

设置自动分组对话框

在 Group（分组）栏中自动填入每一组的第一个成分名称，前提是每个组的成分数目相同。

图 13-1 设置自动分组对话框



标签	描述
每一组的成分数	每一组的成分总数
同一组中不同成分之间的偏移量	同一组中按序排列的成分之间的行偏移量。 该值通常为 1，但如果该组中的成分所在行不相邻，则数值会更大。

内标物子菜单

表 13-3 内标物菜单选项

菜单选项	描述
Set IS for All Analytes	设置所有分析物行的 IS Name 字段。 如果已经定义了内标物，就会使用该内标物的名称。 否则需要从打开的对话框中选择所需要的内标物。
Set IS for Selected Analytes	提供一个逐个设置每一种分析物的内标物的捷径，如果相同的内标物被不止一种分析物使用的话。请参阅 Set IS for Selected Analytes（设置选定分析物的内标物） 页码 80。
Set Last Component of Group as IS	如果有多种成分被分配到 Groups 中，就可以通过手动或使用 Set Groups 子菜单中的项目来运行该命令。 每一组最后一种成分的 IS 复选框被勾选，且该组的其他所有成分（被假定为分析物）均被设置为用最后一种成分作为内标物。
Set for All Groups as for Selected Group	用于将对应当前选定行的组内的内标物安排以对称的方式复制到其他所有分组。如果每组的内标物不止一个，则该命令较为适用。请参阅 将所有组与选定组作同样设置 页码 81。

Set IS for Selected Analytes（设置选定分析物的内标物）

1. 所要用到的内标物一定要有定义（Name（名称）和 IS复选框均已勾选）。

- 2. 选择待使用该内标物的分析物的行。
- 3. 选择菜单项。

如果定义的内标物不止一种，就会出现一个对话框，提示用户选择所需要的一种。

将所有组与选定组作同样设置

- 1. 指定组。
- 2. 通过勾选第一组第一列的复选框，手动指定哪一种成分为内标物。
- 3. 通过勾选 IS Name (IS 名称) 栏内的组合框，手动指定第一组每一种分析物的内标物。
- 4. 可选择与第一组对应的任一行。
- 5. 单击 Set for All Groups as for Selected Group (将所有组与选定组作同样设置)。

积分选项卡

在Integration (积分) 选项卡中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。 其中包括以下命令。

表 13-4 积分和回归选项卡右键菜单选项

菜单选项	描述
Find Component by Name (按名称查找成分)	与 Components (成分) 选项卡中的命令类似，唯一的区别是它不是选择 Components (成分) 表格的行，而是选择成分列表中的各项。
Highlight Components with Uncertain RT (突出显示保留时间不定的成分)	用于突出显示默认预计保留时间 (每个色谱图最大强度峰的 RT) 正确的成分。 如果成分不多，可以逐个检查，无需使用该命令。 不过，如果成分较多，可使用该命令目测检查色谱图中有一个以上明显峰存在的成分。 请参阅 突出显示成分对话框 页码 82。
Home Graph Axes (主图轴线)	从缩放的图形返回到能够看到所有数据的主视图。
Overlay Other Components for Group (叠加同组其他成分)	<p>如果有各种成分被分组，而且分配到任何指定分组的成分预计有相同的保留时间，即可用该命令叠加色谱图。 例如，如果这些成分代表了实际相同的化合物的不同 MRM 离子对。</p> <p>选择该选项后，正在定义积分参数的当前成分的色谱图就会用一根蓝色的实线轨迹绘制，并会显示其积分计算的峰面积。 同组其他成分的色谱图 (非积分后的峰面积) 会用虚线样式叠加。</p>

表 13-4 积分和回归选项卡右键菜单选项（续）

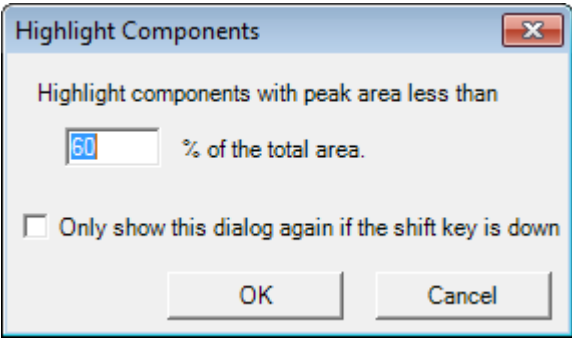
菜单选项	描述
Update Retention Times（更新保留时间）	用于重置之前创建的定量方法的预计保留时间。如果某个现有的定量方法已打开，并且选择了 Set New Typical Sample（设置新典型样本）选项，则显示的色谱图会对应新样本，但预计保留时间不变。 对每一种成分而言，预计保留时间会被更新，以对应位于原预计保留时间中央指定宽度窗口内最大强度峰的保留时间。请参阅 Update Retention Time（更新保留时间）对话框 页码 82。
Set New Typical Sample（设置新的典型样本）	用于将某个代表性样本与方法相关联。它可能会影响到 Q1/Q3 栏（用于 MRM 实验）或 Start - Stop（开始-停止）栏（用于轮廓实验）中的可用选项。它还会影响到 Integration（积分）选项卡中显示的色谱图。

突出显示成分对话框

无论何种成分，如果软件自动选择的峰不低于谱图中峰总面积的指定百分比，这些成分的名称就会用黑体字表示。比如，在图 13-2中，如果默认选择的峰占到总面积的 70% - 100%，那么它就不会被标注。只有这些峰需要检查，并将它们从成分列表中选出。

如果选中 Only show this dialog again if the shift key is down（只有按下 shift 键时才再次显示该对话框）复选框，则在下次选中该命令时对话框将不会打开，除非用户按下 Shift 键。之前指定的总面积百分比参数会被自动使用。

图 13-2 突出显示成分对话框



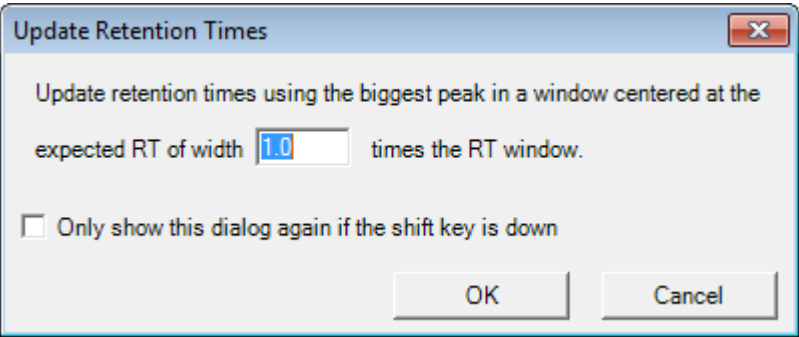
Update Retention Time（更新保留时间）对话框

用于重置之前创建的定量的预计保留时间。如果某个现有的定量方法已打开，并且选择了 Set New Typical Sample（设置新典型样本）选项，则显示的色谱图会对应新样本，但预计保留时间不变。

对每一种成分而言，预计保留时间会被更新，以对应位于原预计保留时间中央指定宽度窗口内最大强度峰的保留时间。

如果选中 Only show this dialog again if the shift key is down (只有按下 shift 键时才再次显示该对话框) 复选框，则在下一次选中该命令时对话框将不会打开，除非用户按下 Shift 键。 自动使用之前指定的保留时间。

图 13-3 突出显示成分对话框



离群值设置选项卡

在Outlier Settings (离群值设置) 选项卡中单击右键，此时会出现一个快捷菜单。 其中包括以下命令。

标签	描述
Accuracy for Standards (标准物精度)	编辑 Standard (标准物) 样本的精度误差。
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (标准物最大精度误差 (除 LLOQ%))	编辑 Standard (标准物) 样本的精度误差，采用用与实验室 SOP 一致的数值。
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)% (标准物最大 LLOQ 精度误差 (最低标准物) %)	如果实验室 SOP 显示 Standard (标准物) 的误差不一样，则需编辑最低浓度 Standard (标准物) 的精度误差。
Accuracy for QCs (QC 精度)	编辑 Quality Control (质量对照品) 样本的精度误差。
Max. Accuracy Tolerance for QC% (标准物最大 QC% 精度误差)	编辑 Quality Control (质量对照品) 样本的精度误差，采用用与实验室 SOP 一致的数值。

标签	描述
Ion Ratio (离子率)	只在成分已分配到组的情况下才可用。选择使用峰面积或峰高度的离子率。在定量分析方法创建过程中选择回归参数时, 峰面积或峰高度便已设定。
Calculated Concentration (计算所得浓度)	使用已知浓度的 Standard (标准物) 样本时, 该值为从校准曲线反向计算的浓度。回归等式所描述的是各种回归类型和加权的回归计算是怎样进行的。
Component (组件)	所有样本的分析物或内标物。
IS	被选中的内标物。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Group (组)	保留时间相同的成分(即相同成分的不同变型)可以分在一组。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Ion Ratio Tolerance (%) [离子率误差 (%)]	使用默认设置或按照实验室 SOP 编辑该设置项。只有在勾选了 Ion Ratio (离子率) 复选框的情况下才可用。
Lower Limit of Calculated Concentration (计算所得浓度下限)	键入可接受的浓度范围的下限。任何 Calculated Concentration (计算所得浓度) 低于该值的样本, 都被标记为浓度离群值。
Upper Limit of Calculated Concentration (计算所得浓度上限)	键入可接受的浓度范围的上限。任何 Calculated Concentration (计算所得浓度) 高于该值的样本, 都被标记为浓度离群值。

表 13-5 离群值设置右键菜单选项

标签	描述
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. (将计算所得浓度下限应用到所有分析物) 浓度	将计算所得浓度下限应用到所有分析物, 如果所有分析物的标准相同。
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. (将计算所得浓度上限应用到所有分析物) 浓度	将计算所得浓度上限应用到所有分析物, 如果所有分析物的标准相同。

目的：

- 学习如何使用 SignalFinder™ 算法来处理数据。
- 学习如何使用 MQ4 积分算法来处理数据。
- 学习如何使用 MQ4 和 SignalFinder™ 积分算法参数。

定量方法包含了关于对被选择积分的峰进行定量的一整套使用说明。在本教程中，定量方法是与结果表同时创建的。

此外还包括了可以用来运用 Results Table（结果表）中数据的其他任务，以及可供使用的软件图标的相关信息。

注释： Audit Trail（审核记录）和 Security（安全）版用户不能使用 Analyst Data 文件夹结构。用户只能处理 Analyst® MD 软件文件结构中的数据文件。如果未能完好保持文件和文件夹结构，用户就可能无法查看色谱图。

关于校准曲线

校准曲线（也被称为标准浓度曲线）是一种通过将 Unknown（未知）样本与一套已知浓度的 Standard（标准物）样本进行比较，来确定 Unknown（未知）样本中物质浓度的方法。校准曲线是一种仪器（的分析信号）如何响应分析物（待测量的物质）浓度变化的图表。用户可以准备一系列 Standard（标准物）样本，其浓度范围接近 Unknown（未知）样本中分析物的预计浓度。

前提条件

在 Analyst® MD 软件中，选择 Example（示例）项目。

Mix_batch_1. 未能在 Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad 文件夹中找到 Wiff 文件。

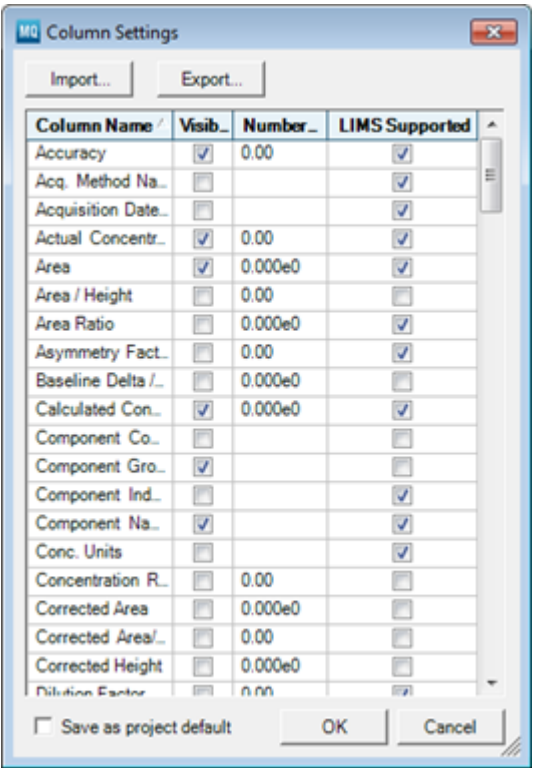
修改结果表中所显示的列

该操作可以用来显示或隐藏结果表中的列，或改变数字格式的精度。对于数值字段来说，非科学记数表示请使用 0.00 格式，而科学记数表示请使用 0.00e0 格式。改变小数点，以表示显示数字的精度。只能用小数点（.）作为小数分隔符。不支持数字分组。

注释： 样本信息的某些关键栏，如Sample Name（样本名称）、Sample ID（样本编号）等，在用户自定义 Results Table（结果表）栏设置时不应隐藏。

1. 在结果表 中单击右键，然后单击 Column Settings（列设置）。

图 14-1 Column Settings（列设置）对话框



2. 必要时，可选择或清空 Visible（可见）栏中的复选框。
3. 在 Number Format（数字格式）栏中，将格式改为整数或科学记数。 所显示的小数位数也可以更改。

提示！ 若要将列设置应用到项目中的所有结果表，可选择 Save as project default（另存为项目默认值）复选框。

4. 单击 OK（确定）。

用 SignalFinder™ 积分算法处理数据

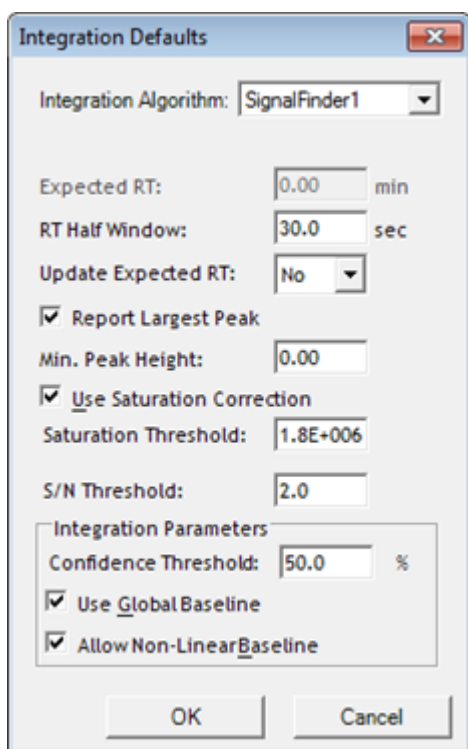
不同于 MQ4 积分算法或 Analyst® MD 软件中的算法，SignalFinder™ 可以在创建新定量方法时，用选定样本构造一个峰模型。该模型用于描述算法所使用的选定峰的形状。在进行积分计算时，SignalFinder 积分算法会将该模型应用到其他样本，对样本数据进行拉伸或倾斜。这样就使得多个样本的给定分析物或内标物的峰形状较为相似，但不完全相同。

设置峰积分参数

用下列步骤检查或设置处理数据的积分算法。请参阅[关于 SignalFinder 积分算法 页码 102](#)。

1. 在 Analyst® MD 软件 Navigation（导航）栏的 Companion Software（配套软件）项下，双击 MultiQuant 3.0.3。
2. 单击 Edit（编辑） > Project Integration Defaults（项目积分默认值）。
3. 在 Integration Defaults（积分默认值）对话框中，从 Integration Algorithm（积分算法）列表中选择 SignalFinder1。
4. 选择 Use Saturation Correction（使用饱和校正）复选框，然后再将 Saturation Threshold（饱和度阈值）设为 1.8E+006。

图 14-2 积分默认值对话框



注释： 高于 Saturation Threshold（饱和度阈值）的色谱峰被认为已饱和。该值取决于检测器。

5. 单击 OK（确定）。

创建一个结果表

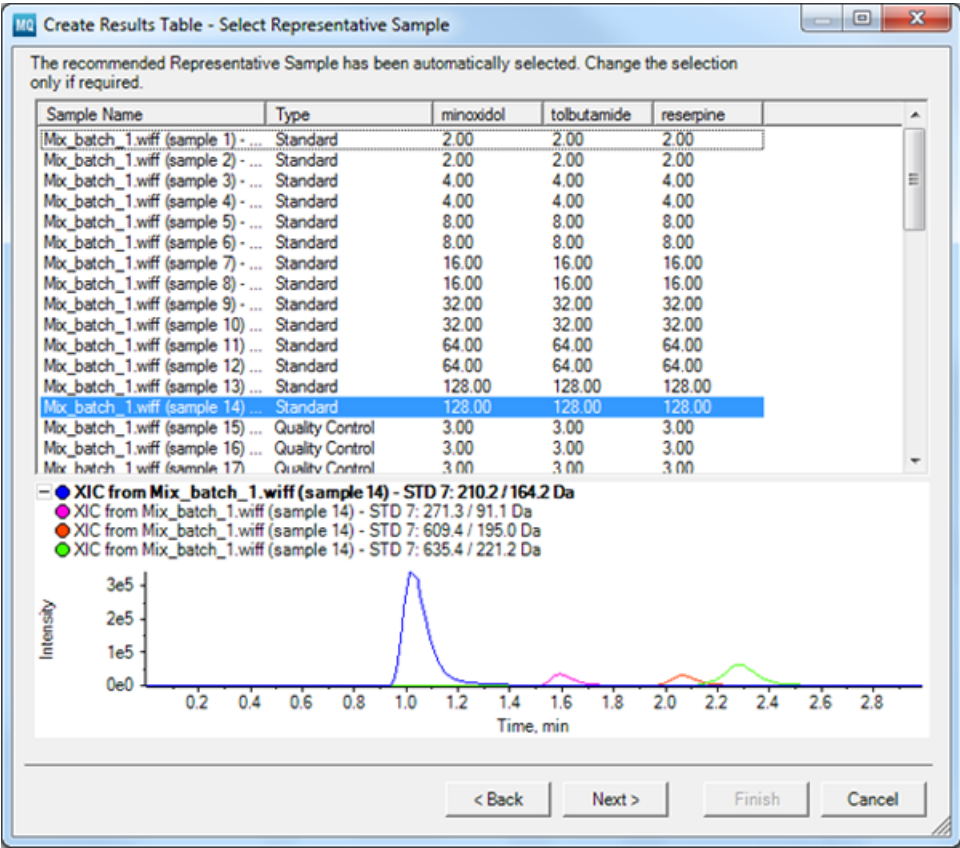
1. 单击 File（文件） > New Results Table（新建结果表）。

2. 在 Create Results Table - Select Samples（创建结果表—选择样品）页， 展开 Example Data（样品数据）文件夹，然后将 Mix_batch_1.wiff 文件拖进 Selected（选中）面板。
3. 单击 Next（下一步）。
4. 单击 Create New Method (SignalFinder1)（创建新方法（SignalFinder1））选项。
5. 单击 New（新建）。
6. 在 Save Quantitation Method As（将定量方法保存为）对话框中键入方法名称，然后单击 Save（保存）。
7. 单击 Next（下一步）。

在 Create Results Table - Select Representative Sample（创建结果表—选择代表性样本）页中，已勾选了一个代表性样本。 软件会以选出一个具备最佳机会以供选择能够适合整个批次的积分参数的色谱图为依据，来推荐一个代表性样本。 建议选择一个非饱和的高浓度标准物或 QC 样本（TIC 低于 1E+006 cps）。

提示！ 在查看峰的过程中，可以选择另一个在查看期间用以建立峰模型的样本。

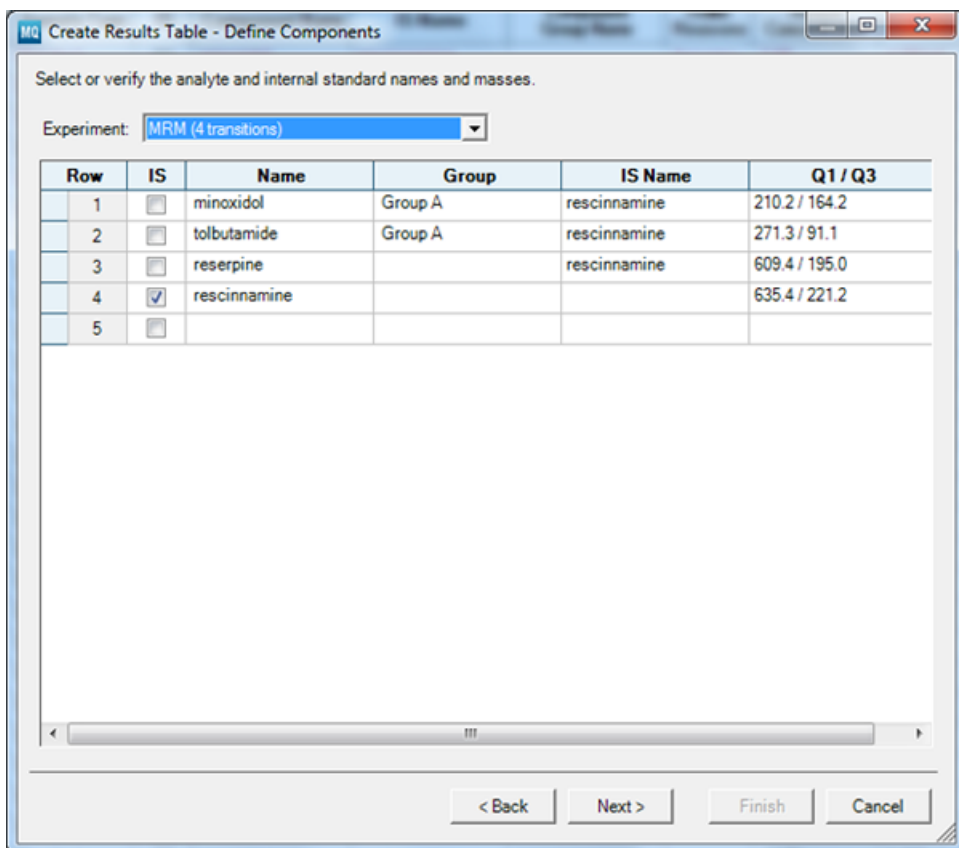
图 14-3 Create Results Table - Select Representative Sample（创建结果表—选择代表性样本）页面



8. 在 Create Results Table - Define Components（创建结果表—定义成分）页中，确认分析物及内标物。

9. 单击 Next（下一步）。

图 14-4 Create Results Table - Define Components（创建结果表一定义成分）页面



Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

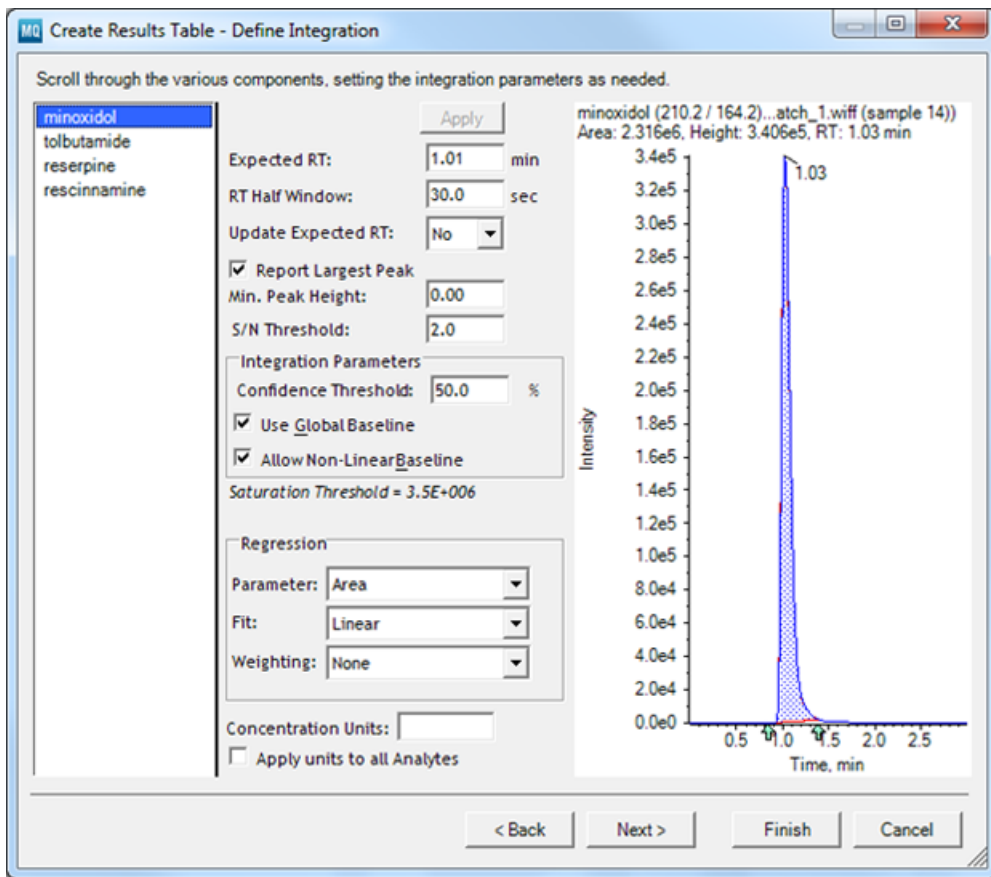
< Back Next > Finish Cancel

注释： 创建一个采集方法后，如果成分名称已在质量范围表的 ID 栏内，则该名称将被自动加入到Define Components（定义成分）页内。 如果成分名称不在内，则可以手动加入到表中。

在 Create Results Table - Define Integration（创建结果表一定义积分）页中，分析物和内标物显示在左侧。 当前积分参数已被应用到代表性样本，并会显示色谱图。

之前选定的代表性样本的成分显示在 Integration（积分）窗格中。 该代表性样本中的峰是通过 Integration Defaults（积分默认值）对话框中设定的参数来发现并进行积分的。

图 14-5 Create Results Table - Define Integration（创建结果表一定义积分）页面



如有需要，可调节找峰参数和色谱图 x 轴上绿色箭头的位置。这样用户就可以精确地设置所需要的峰积分起点和终点位置。这是一种通过目测来有效调节两个找峰参数的方法，这两个参数是用定量方法保存的，并被应用到所有待进行积分计算的峰。软件会将这些参数的极限控制在软件自身所规定的合理的色谱峰极限范围内。

如果色谱图内有一个以上的峰，并且尚未自动选定正确的峰，可以在一个峰的周围拖动来设置预计的保留时间。从峰的实际起点拖至实际终点，并且选择的区域不要过宽或过窄。其原因在于，算法假定选择范围内只有一个峰。比如，如果数据集中噪声较高，而且在只有一个峰的情况下，算法发现有两个合并的峰，就可以选择一个包含了这两个峰的区域，使算法调整内部参数，这样就只会发现一个峰。或者，如果在肯定存在两个或多个相邻峰的情况下，算法只找到一个峰，就可以选择一个只含有关注峰的区域。

- 10 在 Integration Parameters（积分参数）组内，选择 Global Baseline（全局基线）复选框，用整个色谱图作为基线。

如果未选择该选项，则软件只会考虑所关注的峰周围的一个很窄的面积。

- 11 选择 Allow Non-Linear Baseline（允许非线性基线）复选框在线性或非线性基线之间作出选择。非线性基线用来预测每一个峰之下的基线。线性基线可以在特定峰组的起点和终点之间作出一根拟合线。

- 12 在左侧窗格中单击成分名称，即可查看每一种成分的峰积分。适当调整积分参数，以便得到有代表性的积分色谱峰。
- 13 对于米诺地尔、甲苯磺丁脲和利血平组件，使用 Regression（回归）组中的参数设置以下各项，然后单击 Apply（应用）：
 - Parameter（参数）：Area（面积）
 - Fit（拟合）：线性
 - Weighting（权重）：无
- 14 将 Concentration Units（浓度单位）设为 ng/mL，然后勾选 Apply units to all Analytes（将单位应用到全部分析物）复选框。
- 15 单击 Apply（应用）。
- 16 单击 Finish（完成）。

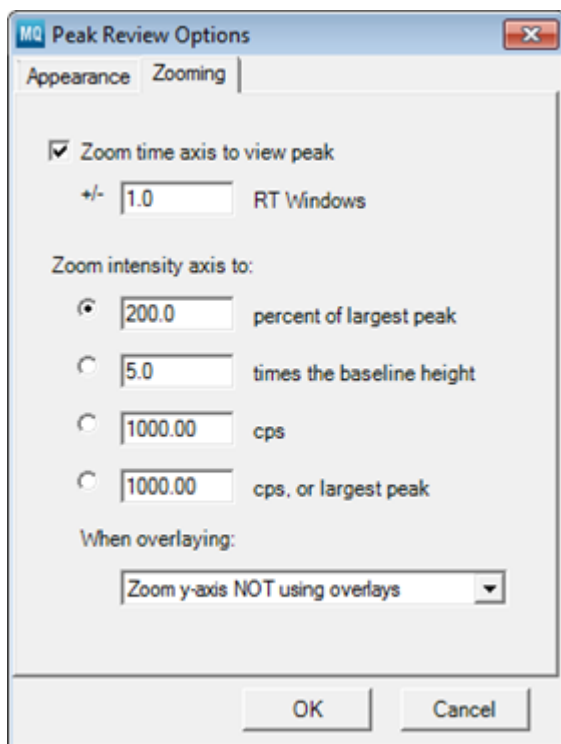
此时样本文件会自动计算积分，并生成一份 Results Table（结果表）。

请参阅[检查峰 页码 91](#)了解如何管理 Results Table（结果表）的数据。请参阅[报告 页码 124](#)了解创建报告方面的信息。

检查峰

1. 单击 Peak Review（色谱峰检查）图标。
2. 在表中单击右键，然后单击 Column Settings（列设置）。
3. 使 SF Saturated（SF 饱和）列可见。
4. 在 Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键，然后单击 Options（选项）。
5. 在 Zooming（缩放）选项卡中，将 Zoom time axis to view peak（缩放时间轴查看峰）改为 1。
6. 将 Zoom intensity axis（缩放强度轴）设为最大峰的 200%。

图 14-6 色谱峰检查选项



7. 使用红色箭头滚动查看所有峰。

如果检测器已饱和，则峰会比正常情况更平。例如，该峰周围有一个红色的轮廓，而在SF Saturated（SF 饱和）列中显示 Yes（是），因为峰强度高于 1.8^6 cps 的饱和度阈值。

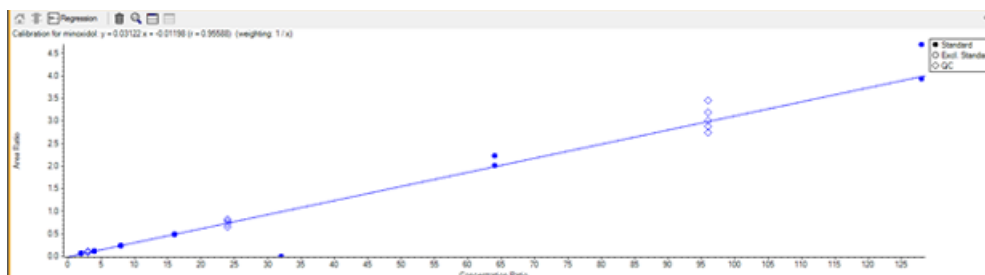
注释：代表性样本可能并不适用于所有成分。在峰检查过程中以及生成新模型时，可以选择一个新的代表性样本。

8. 若要创建一个新模型，需选择一个新的峰，然后单击 Update Peak Model（更新峰模型）图标。选择一个形状与其他峰相似并且没有饱和的峰。
9. 单击右键，然后单击 Update Quantitation Method for Component（更新成分定量方法），将改动应用到该成分的所有样本。

修改校准曲线

1. 单击 Show Calibration Curve（显示校准曲线）图标查看校准曲线。
2. 若要添加图例，在 Calibration（校准）窗格中单击右键，然后单击 Show Legend（显示图例）。

图 14-7 校准曲线



3. 若要将 QC 添加至曲线, 再次在 Calibration (校准) 窗格中单击右键, 然后单击 Show QCs (显示 QC)。

提示! 若要将某个点从曲线中排除, 右键单击曲线上的点, 然后单击 Exclude (排除)。

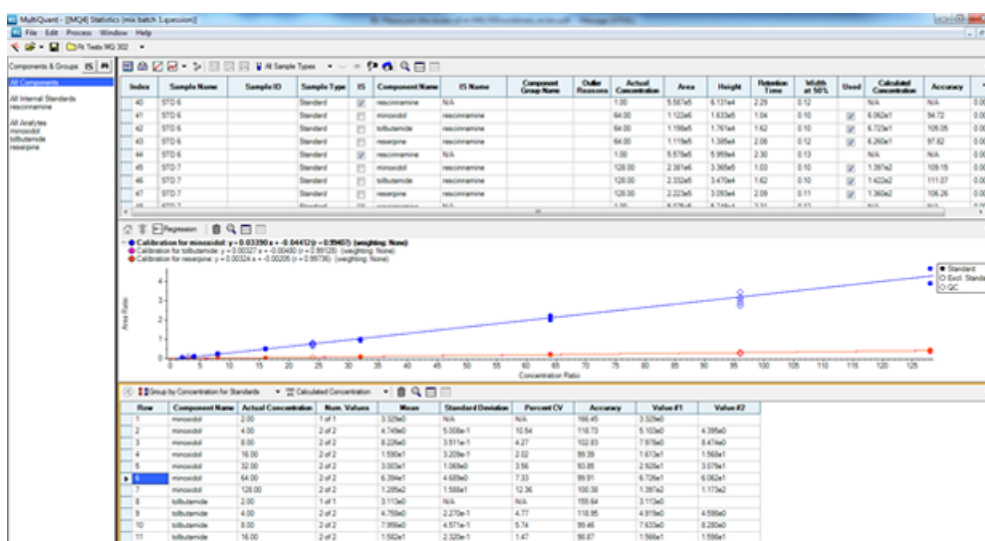
4. 若要确认或编辑某种分析物的回归参数, 在 Components and Group (成分和分组) 列表选中分析物, 然后单击工具栏上的 Regression (回归) 按钮。

查看样本统计

用户可以查看单张结果表的统计数据。查看峰积分、校准曲线和样本统计是一个重复的过程。

1. 在结果表打开时, 单击 Show Statistics Table (显示统计表) 图标。
2. 单击 Sample Grouping (样本分组) 列表中的某一项, 指定 (给定分析物的) 样本应当如何分组进行统计计算。

图 14-8 统计窗格



3. 单击 Metric (量度) 列表中的某一项, 指定用于统计计算的实际量度。

4. 检查 Value（数值）列。 被删除的点表示被排除的数据点。

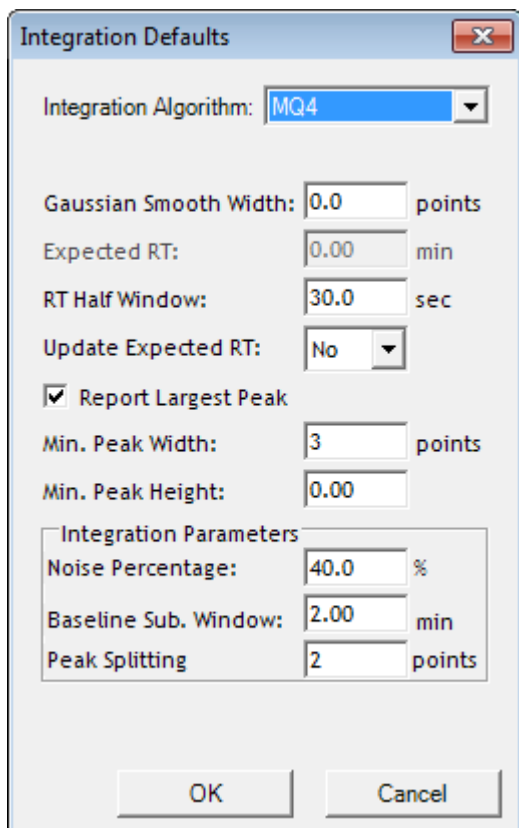
用 MQ4 积分算法处理数据

设置峰积分参数

先采用下列步骤检查或设置积分算法，然后再进行数据处理。 请参阅 [MQ4 积分算法参数 页码 109](#)。

1. 在 Analyst® MD 软件 Navigation（导航）栏的 Companion Software（配套软件）项下，双击 MultiQuant 3.0.3。
2. 单击 Edit（编辑） > Project Integration Defaults（项目积分默认值）。
3. 在 Integration Defaults（积分默认值）对话框的 Integration Algorithm（积分算法）列表中，选择 MQ4。

图 14-9 积分默认值对话框



4. 必要时，可改动项目参数，然后单击 OK（确定）。

MQ4 积分算法和参数设置被用于本 Example（示例）项目文件夹中创建的任何新方法。 这些默认设置是以项目为准的。 若要更改其他项目的默认设置，可对选定项目重复该步骤。

创建一个结果表

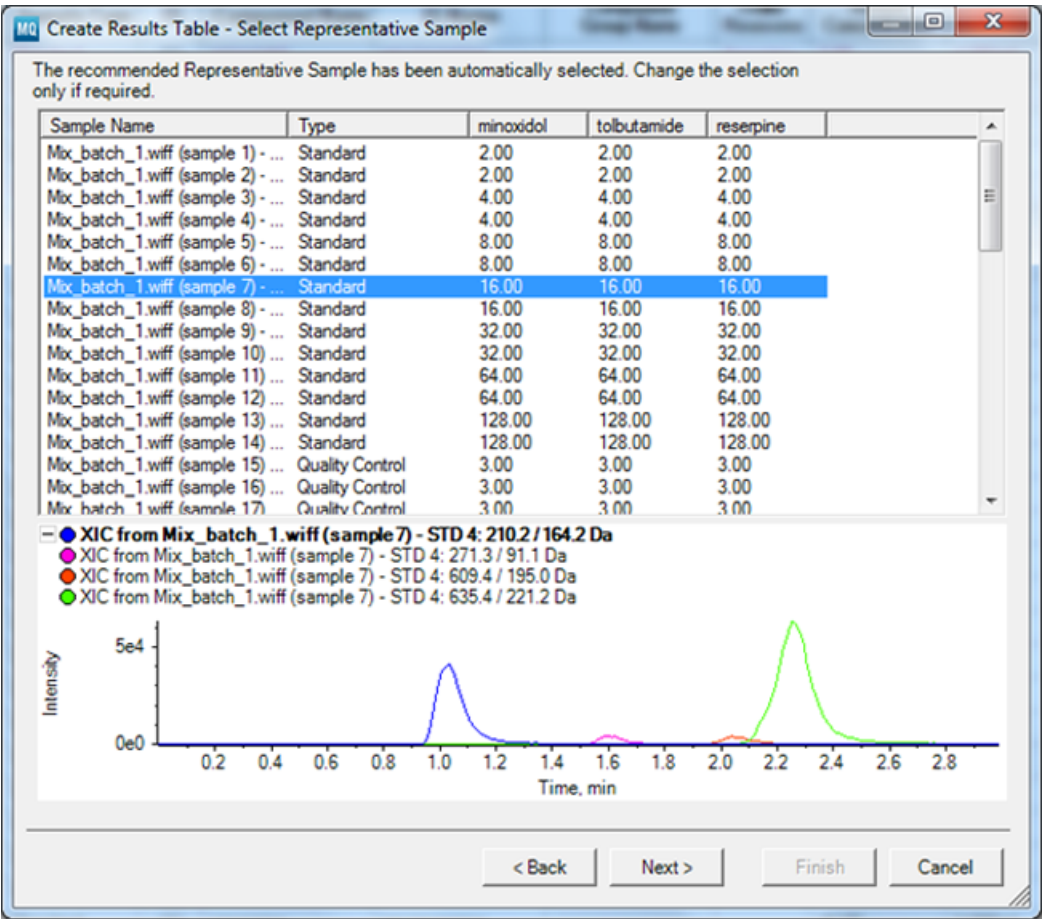
1. 单击 File（文件） > New Results Table（新建结果表）。
2. 在 Create Results Table – Select Samples（创建结果表—选择样品）页，展开 Example Data（样品数据）文件夹，然后将 Mix_batch_1.wiff 文件拖进 Selected（选中）面板。
3. 单击 Next（下一步）。
4. 单击 Create New Method (MQ4)（创建新方法（MQ4））选项。
5. 单击 New（新建）。
6. 在 Save Quantitation Method As（将定量方法保存为）对话框中键入方法名称，然后单击 Save（保存）。

该教程中创建了一个方法。通过创建方法，就可以查看和应用不同的参数，进行数据积分。

如果有现成的方法，可选择 Choose Existing Method（选择现有方法）选项，然后选择 Edit Method（编辑方法）复选框查看各种参数，并将其应用到方法中。如果未勾选 Edit Method（编辑方法）复选框，则向导程序就会用现有方法创建 Results Table（结果表）。

7. 在 Create Results Table – Select Representative Sample（创建结果表—选择代表性样本）页中会出现一个推荐的代表性样本，并且已勾选。

图 14-10 Create Results Table - Select Representative Sample（创建结果表—选择代表性样本）页面



8. 单击 Next（下一步）。

软件会以选出一个具备最佳机会以供选择能够适合整个批次的积分参数的色谱图为依据，来推荐一个代表性样本。如果 .wiff 文件中有分析物的浓度信息，建议选择第二低的浓度标准或 QC 样本用于 MQ4 积分算法。例如，如果浓度范围是 1 - 8，那么第二低的值就是 2。如果默认的代表性样本的强度不够，可在向导程序中单击 Back（回退）按钮，然后选择另一个样本。在查看峰的过程中可以选择另一个样本。请参阅[检查峰](#) 页码 99。

9. 在 Create Results Table - Define Components（创建结果表—定义成分）页中，确认分析物及内标物。

图 14-11 “创建结果表—定义成分”页面

MQ Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: **MRM (4 transitions)**

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

10 单击 Next（下一步）。

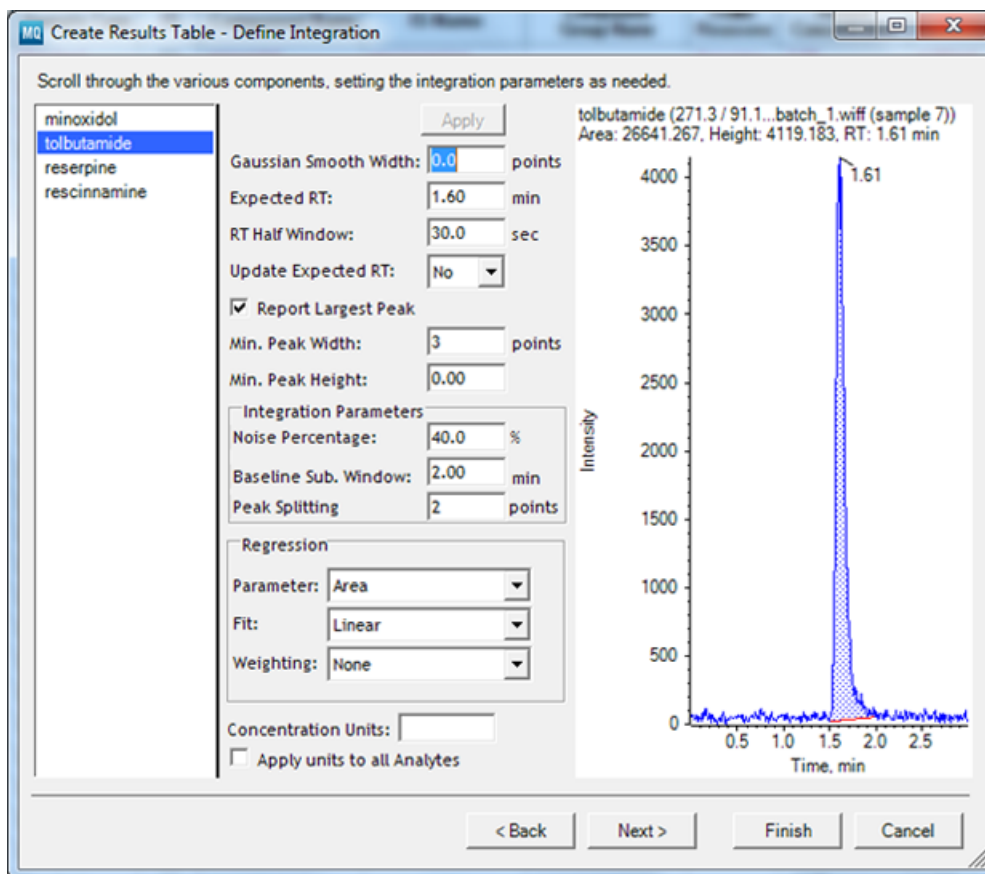
注释： 创建一个采集方法后，如果成分名称已在质量范围表的 ID 栏内，则该名称将被自动加入到 Define Components（定义成分）页内。如果成分名称不在内，则可以手动加入到表中。如果某个成分名称被附加了一个 .IS 的扩展名，则软件会将该成分识别为内标物，并将 .IS 成分指定为与之匹配的分析物的内标物。

在 Create Results Table - Define Integration（创建结果表—定义积分）页中，分析物和内标物显示在左侧。当前积分参数已被应用到代表性样本，并会显示色谱图。

之前选定的代表性样本的成分显示在 Integration（积分）窗格中。该代表性样本中的峰是通过 Integration Defaults（积分默认值）对话框中设定的参数来发现并进行积分的。

11 在左侧窗格中单击成分名称，即可查看每一种成分的峰积分。适当调整积分参数，以便得到有代表性的积分色谱峰。请参阅[设置峰积分参数](#) 页码 94。

图 14-12 “创建结果表—定义积分”页面



- 12 对于米诺地尔、甲苯磺丁脲和利血平组件，使用 Regression（回归）组中的参数设置以下各项，然后单击 Apply（应用）：
 - Parameter（参数）：Area（面积）
 - Fit（拟合）：线性
 - Weighting（权重）：无
- 13 将 Concentration Units（浓度单位） 设为 ng/mL，然后勾选 Apply units to all Analytes（将单位应用到全部分析物）复选框。
- 14 单击 Apply（应用）。
- 15 单击 Finish（完成）。

此时样本文件会自动计算积分，并生成一份Results Table（结果表）。

图 14-13 结果表

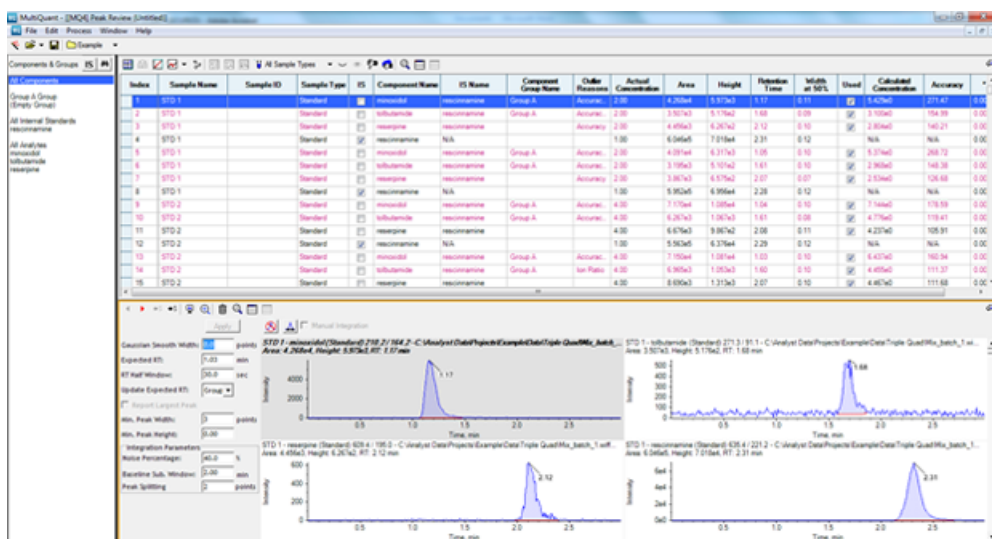
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Reason	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.57e3	1.17	0.11	☑	2.10e4	101.16	
2	STD-1		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.50e4	5.17e3	1.68	0.09	☑	3.10e4	104.99	
3	STD-1		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e3	2.12	0.10	☑	2.85e4	140.21	
4	STD-1		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.04e4	7.91e4	2.31	0.12	☑	N/A	N/A	
5	STD-1		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.57e3	1.08	0.10	☑	3.10e4	100.39	
6	STD-1		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.50e4	5.17e3	1.61	0.10	☑	2.85e4	106.38	
7	STD-1		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.80e4	6.57e3	2.07	0.07	☑	2.53e4	106.68	
8	STD-1		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.90e4	6.99e4	2.28	0.12	☑	N/A	N/A	
9	STD-2		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.04	0.10	☑	4.94e4	123.84	
10	STD-2		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	4.00	6.26e4	1.06e3	1.61	0.08	☑	4.19e4	119.41	
11	STD-2		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	4.00	6.47e4	9.86e3	2.08	0.11	☑	4.23e4	108.91	
12	STD-2		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.90e4	6.57e4	2.29	0.12	☑	N/A	N/A	
13	STD-2		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	7.10e4	1.08e4	1.03	0.10	☑	4.29e4	108.90	
14	STD-2		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	6.26e4	1.08e3	1.60	0.10	☑	4.49e4	111.37	
15	STD-2		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	6.04e4	1.31e3	2.07	0.10	☑	4.40e4	111.68	
16	STD-2		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.01e4	7.83e4	2.28	0.10	☑	N/A	N/A	
17	STD-3		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.02e4	2.20e4	1.03	0.10	☑	7.62e4	97.62	
18	STD-3		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.30e4	2.04e4	1.60	0.09	☑	7.49e4	93.70	
19	STD-3		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.40e4	1.87e3	2.07	0.11	☑	7.97e4	97.67	
20	STD-3		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.74e4	7.32e4	2.28	0.10	☑	N/A	N/A	
21	STD-3		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.40e4	2.20e4	1.03	0.10	☑	8.32e4	104.04	
22	STD-3		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.28e4	1.89e3	1.60	0.10	☑	8.14e4	101.79	
23	STD-3		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.30e4	1.86e3	2.07	0.11	☑	7.97e4	98.62	
24	STD-3		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.70e4	6.82e4	2.28	0.10	☑	N/A	N/A	
25	STD-4		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.39e4	1.03	0.10	☑	1.89e4	99.95	
26	STD-4		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.45e4	4.11e3	1.61	0.10	☑	1.95e4	97.07	
27	STD-4		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.78e4	3.84e3	2.08	0.11	☑	1.92e4	98.28	
28	STD-4		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.70e4	6.26e4	2.28	0.10	☑	N/A	N/A	
29	STD-4		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.39e4	1.04	0.10	☑	1.95e4	97.11	
30	STD-4		Standard	☑	internal	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.84e4	4.29e3	1.63	0.10	☑	1.98e4	99.13	
31	STD-4		Standard	☑	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.13e3	2.09	0.10	☑	1.94e4	96.78	
32	STD-4		Standard	☑	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.90e4	6.57e4	2.30	0.11	☑	N/A	N/A	

请参阅[检查峰 页码 91](#)了解如何管理 Results Table（结果表）的数据。 请参阅[报告 页码 124](#)了解创建报告方面的信息。

检查峰

1. 单击 Peak Review（色谱峰检查）图标。

图 14-14 Peak Review（色谱峰检查）窗格



2. 在表中单击右键，然后单击 Column Settings（列设置）。
3. 在 Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键，然后单击 Options（选项）。

4. 在 Zooming (缩放) 选项卡中, 将 Zoom time axis to view peak (缩放时间轴查看峰) 改为 3 RT Windows。
5. 如果色谱图中含有多个峰, 并且有一个不正确的峰被积分, 则应将正确的峰画入框内, 设置一个新的 Expected RT (预计保留时间)。如有必要, 可调整找峰参数和积分参数。请参阅[积分算法 页码 102](#)。
6. 若要将新参数应用到所有其他样本, 在相同成分的色谱图中单击右键, 然后单击 Update Quantitation Method for Component (更新成分定量方法)。
7. 内嵌定量方法可以在查看 Results Table (结果表) 的同时, 通过单击 Edit (编辑) > Modify Results Table Method (修改结果表方法) 进行修改。用户可以改变每一种成分的积分参数回归选项和成分信息。

如果每一种成分的积分参数回归选项和成分信息已改动, 就只修改结果表中内嵌的定量方法。用于创建结果表的实际定量方法文件没有改动。若要使用该内嵌定量方法来处理其他数据文件, 需使用 Export (导出) 功能将该内嵌方法导出到一个方法文件中。

注释: 单击 Set Peak to Not Found (将峰设为未找到) 查看原始数据, 然后再对峰进行手动积分。

8. 若要使用手动积分模式, 单击 Peak Review (色谱峰检查) 窗格内的 Enable Manual Integration Mode (启用手动积分模式) 图标。将光标从所关注的峰一侧的底部拖至另一侧。此时该峰已进行手动积分计算, 而之前所使用的积分参数不可用。

提示! 如果峰已经被改动, 需单击右键, 然后单击 Revert Peak to Original Method (将色谱峰还原至原方法), 将峰还原到原来的方法。

注释: Results Table (结果表) 中 Calculated Concentration (计算所得浓度) 字段可以反映拟合曲线与标准品点时引起的任何变化。

修改校准曲线

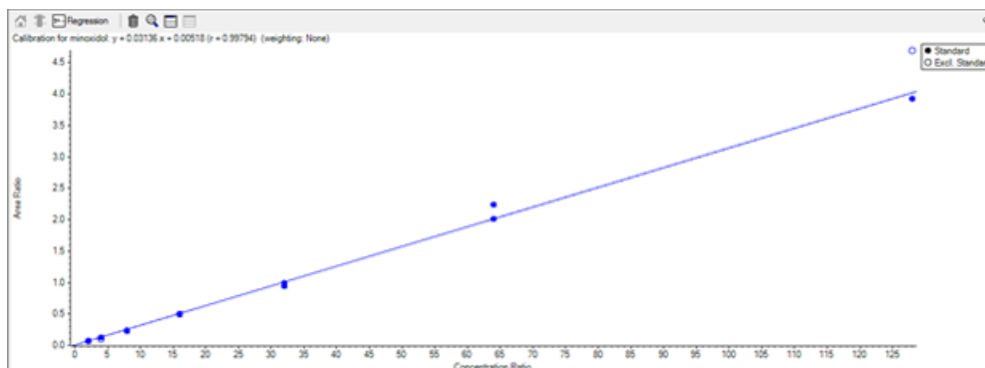
1. 单击 Show Calibration Curve (显示校准曲线) 图标查看校准曲线。
2. 若要添加图例, 在 Calibration (校准) 窗格中单击右键, 然后单击 Show Legend (显示图例)。
3. 若要将 QC 添加至曲线, 再次在 Calibration (校准) 窗格中单击右键, 然后单击 Show QCs (显示 QC)。

提示! 若要将某个点从曲线中排除, 右键单击曲线上的点, 然后单击 Exclude (排除)。

4. 若要确认或编辑某种分析物的回归参数, 在 Components and Group (成分和分组) 窗格中选中分析物, 然后单击工具栏上的 Regression (回归) 按钮。

5. 若要改善校准曲线的拟合效果，可排除第二个 STD 2 样本（浓度为 4.00 ng/mL）和第一个 STD 7 样本（浓度为 128.00 ng/mL）。为此，就要按 Actual Concentration（实际浓度）栏和 Used（已用）栏删除样本。清除 Used（已用）栏中的复选框删除曲线上的点。此时校准曲线看上去类似图 14-15 中所示。

图 14-15 排除部分样本的校准曲线



查看样本统计

用户可以查看单张结果表的统计数据。查看峰积分、校准曲线和样本统计是一个重复的过程。

1. 在结果表打开时，单击 Show Statistics Table（显示统计表）图标。

图 14-16 统计表

MultiQuant - [M04] Statistics (Untitled) [100%] [100%] [100%]

File Edit Process Window Help

🔍 📄 📊 📑 🔄

2. 单击 Sample Grouping（样本分组）列表中的某一项，指定（给定分析物的）样本应当如何分组进行统计计算。
3. 单击 Value #1（数值 1）列。

注释： Group by Concentration for Standards and QCs（按浓度对标准物和 QC 分组）实际上是以 Displayed Actual Concentration（实际显示浓度）为依据的，而不是 Results Table（结果表）中所保存的 Actual Concentration（实际浓度）。如果 Std 1 浓度为 0.001，Std 2 浓度为 0.005，则显示格式为 0，这样 Std 1 和 Std 2 便会同组，因为这两个值都被作为 0 对待。若要将它们单独分组，需在 Column Settings（列设置）对话框中将 Analyte Concentration（分析物浓度）的精度设为 0.000。如果 Std 1 为 0.500 而 Std 2 为 0.499，则将其分在同一组，将精度设为 0.00。请阅与[修改结果表中所显示的列 页码 85](#)。

4. 单击 Metric（量度）列表中的某一项，指定用于统计计算的实际量度。
5. 检查 Value（数值）列。 被删除的点表示被排除的数据点。

积分算法

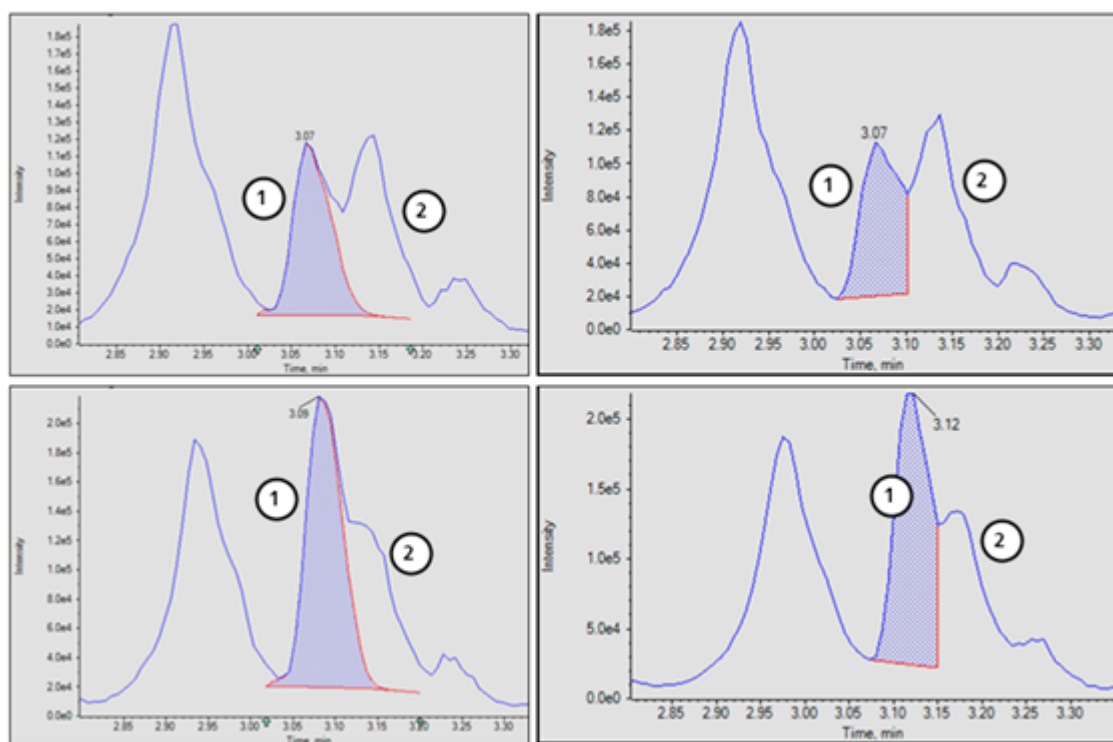
本部分主要介绍用于每一种算法的不同参数。

关于 SignalFinder 积分算法

密集洗脱峰

SignalFinder™ 对密集洗脱峰的峰面积给出了更为准确的表述。[图 14-17](#) 中给出了一个样例，显示了 MQ4（右图）和 SignalFinder（左图）积分算法是如何处理密集洗脱峰的。在该例中，背景峰（第 2 项）与关注峰（第 1 项）有干涉。因为干涉峰来自 LC 或矩阵，所以在整个批次中是相当恒定的。不过，分析物的峰强度会随着分析物浓度的升高而增强，这会导致组合峰的形状显著改变。以用户定义的峰模型为依据的 SignalFinder 积分算法在识别所有浓度水平的关注峰时都能够保持一致，而 MQ4 积分算法只能从峰谷到基线画一根垂直线。这样就只能对局部峰进行积分，从而给峰面积带来误差。

图 14-17 密集洗脱峰



项目	描述
1	关注峰
2	共洗脱背景峰

拖尾峰

对于拖尾峰而言，之前的算法在选择峰终点处的保留时间方面通常都不一致。两个看上去很相似的峰可能会报告不同的终点，具体要取决于该区域的噪声的性质。通过调整找峰参数，通常可以使积分更一致。不过，这是以花费时间和精力为代价的。有了模型方法后，当模型落在阈值之下时，积分会被截止，这样噪声的影响就会小得多。

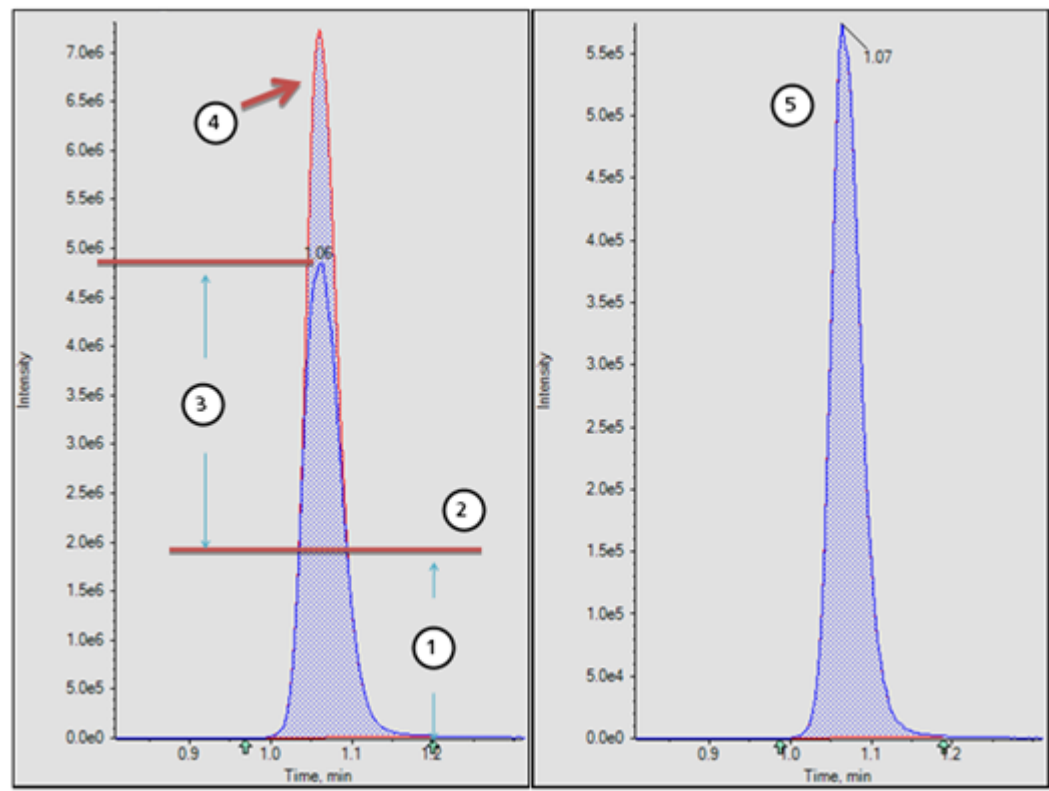
Saturated Peaks（饱和峰）

当算法检测到某个峰已饱和时，就会运用模型来预测峰的形状（如果检测器未饱和）。它会达到检测器未饱和时所能达到的响应高度附近，并显示为一个超过峰最顶端的红色轮廓。该功能仅用于校正检测器饱和的情况，不适用于离子源或色谱柱饱和。图 14-18 所显示的是一个饱和校正的范例。

在使用 SignalFinder™ 算法之前，先选择一个用来构造峰模型的未饱和样本，然后再将饱和度和阈值设置为一个适合检测器的值。在本例中，所使用的饱和度和阈值为 $1.8\text{E}+006$ cps。该算法可以将峰低于 $1.8\text{E}+006$ cps 的未饱和部分与峰模型匹配。然后，算法会根据所选择的峰模型，按红色轨迹的指示预测峰的其余部分。

注释： 饱和度阈值取决于多个因素，包括检测器的类型、检测器的使用时间以及所关注的化合物。 要想得到最理想的结果，必须对饱和度阈值进行适当调节。

图 14-18 Detector Saturation Correction (检测器饱和校正)



项目	描述
1	未饱和部分（匹配峰模型）
2	阈值 1.8e6 cps
3	饱和部分
4	已校正的峰轮廓
5	峰模型

使用注意事项

某些工作流程没有包含所有关注成分的典型样本。 比如，在药物研发工作中，用户可能会通过在母体药物的 Q1 质量上加上 +16，在 Q3 质量上加上 +0 或者 +16 来搜索氧化代谢物。 这些代谢物通常在某些样本中存在，但在被选择作为模型来创建定量方法的样本中不一定存在。 在此情况下，SignalFinder™ 算法会使用默认模型，如果对于一个给定的 MRM 离子对来说，在典型样本中不存在合理的峰。在很多情况下，这种默认模型是足够准确的。 不过，在后续的峰检查过程中，也有可能用不含关注峰的样本来新建模型。

SignalFinder™ 积分算法参数

以下参数用于识别和报告所关注的峰。 请参阅[积分算法参数](#) 页码 114中可用参数的完整列表

Use Saturation Correction (使用饱和校正)

只有在设置总体算法默认值而且不在创建定量方法或检查各个峰的时段内，该选项才可用，因为仅对某些峰使用该设置是没有用的。

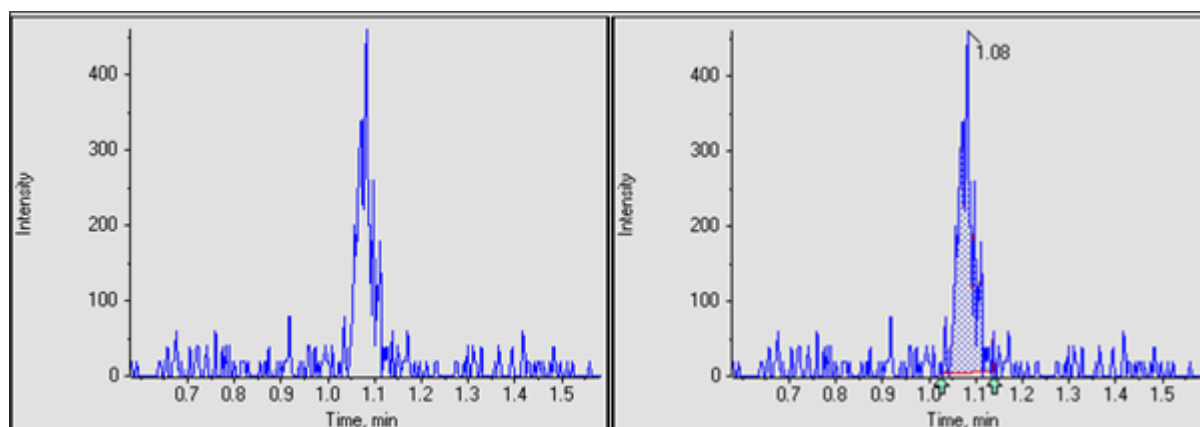
Saturation Threshold (饱和阈值)

高于该阈值的色谱峰将被认为已饱和。 该值取决于检测器。

S/N 阈值

在图 14-19 中，如果 S/N Threshold (S/N 阈值) 被设为 7 (左侧图表)，就没有色谱峰报告。 如果 S/N Threshold (S/N 阈值) 被设为 2 (左侧图表)，就会有色谱峰报告。 参数并不影响积分。

图 14-19 S/N 阈值



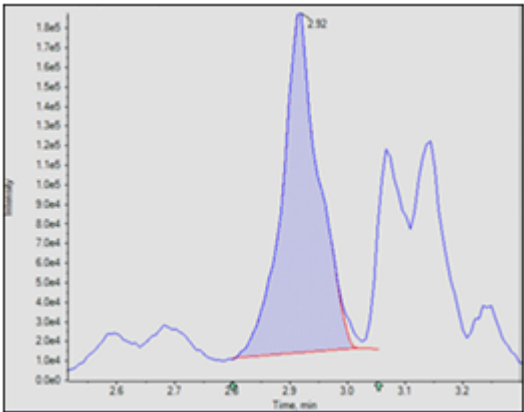
Confidence Threshold (置信度阈值)

该参数用于过滤潜在的假阳性峰。 默认值为 50%，通常情况下是适宜的。 不过，对于干扰较多的数据或者不同样本间峰宽度差异较大的数据，用户可能希望使用更大的值。

图 14-20 和图 14-21 显示 Confidence Threshold (置信度阈值) 如何影响所识别的峰数量。 当 Confidence Threshold (置信度阈值) 设为 50% 时，带有一点肩部的峰被识别为一个峰。 当 Confidence Threshold (置信度阈值) 降低至 16% 时，SignalFinder™ 算法找到了两个色谱峰。 在两个峰的区域画框，查看两个峰。

要确定一个峰当中是否可能存在其他峰，以及 Confidence Threshold (置信度阈值) 是否正确，可按住 Ctrl，然后将所关注的峰区域画入框中。 这样可以自动降低 Confidence Threshold (置信度阈值)，以反映第二个所关注的峰，这个峰在 Confidence Threshold (置信度阈值) 被设为 50% 时是不存在的。

图 14-20 50% 置信度



在 16% 的置信度下发现了两个峰。 在峰区域画框，找到两个峰

图 14-21 16% 置信度

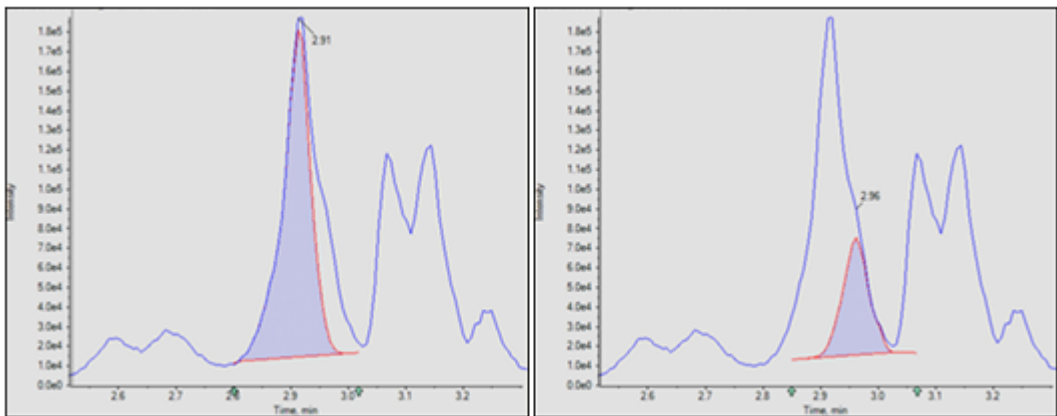
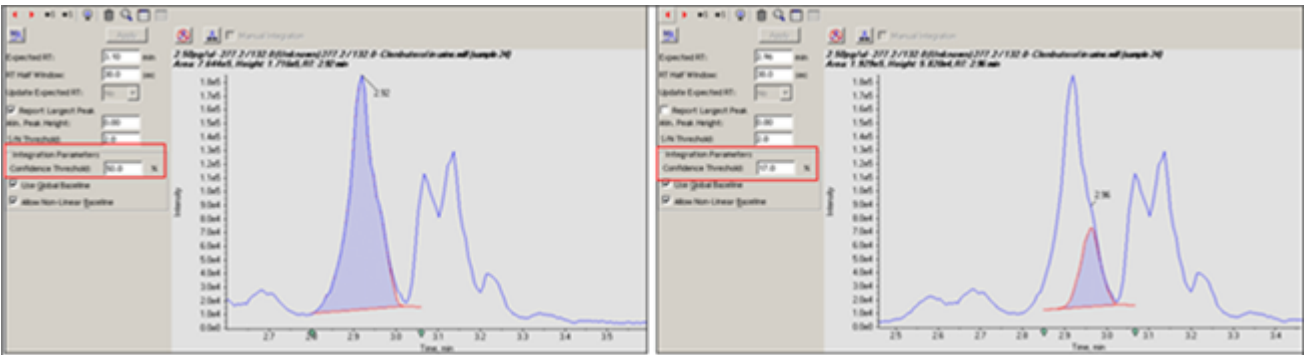


图 14-22 置信度阈值参数

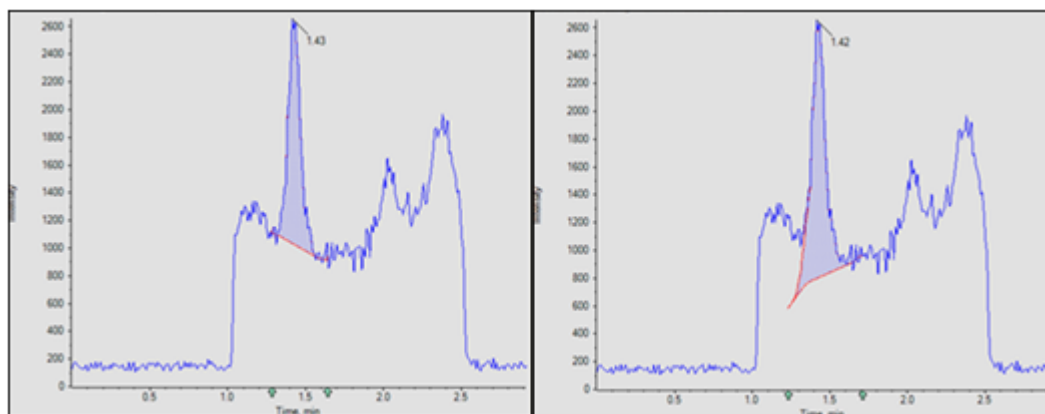


Use Global Baseline（使用全局基线）

选择该选项用整个色谱图作为基线。如果未选择该选项，定量软件就会以本地方式评估基线的变动。图 14-23 中是一个应当何时使用本地基线的例子。

左图是一个用本地基线经过恰当积分的色谱图。右图是一个用全局基线经过不恰当积分的色谱图。

图 14-23 Use Global Baseline（使用全局基线）



Allow Non-Linear Baseline（允许非线性基线）

用该选项在线性或非线性基线之间进行选择。非线性基线用来预测每一个峰之下的基线。线性选项可以在特定峰组的起点和终点之间作出一根拟合线。图 14-24 和图 14-25 显示的是共洗脱峰的线性和非线性基线的例子。第 1 项至第 4 项是回旋峰。

对多个峰建议使用非线性基线。对单个峰而言线性和非线性之间的差别并不重要。

图 14-24 线性基线示例

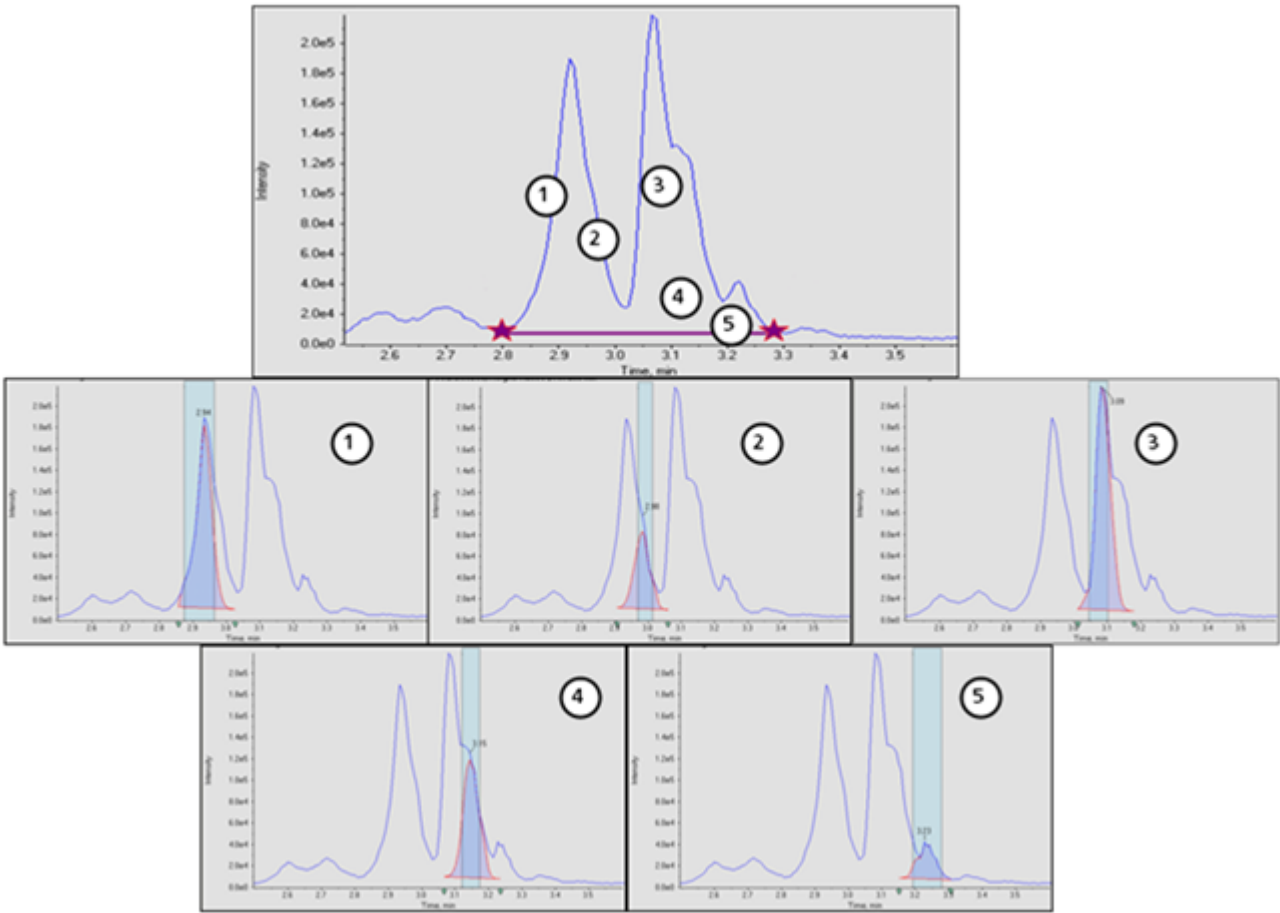
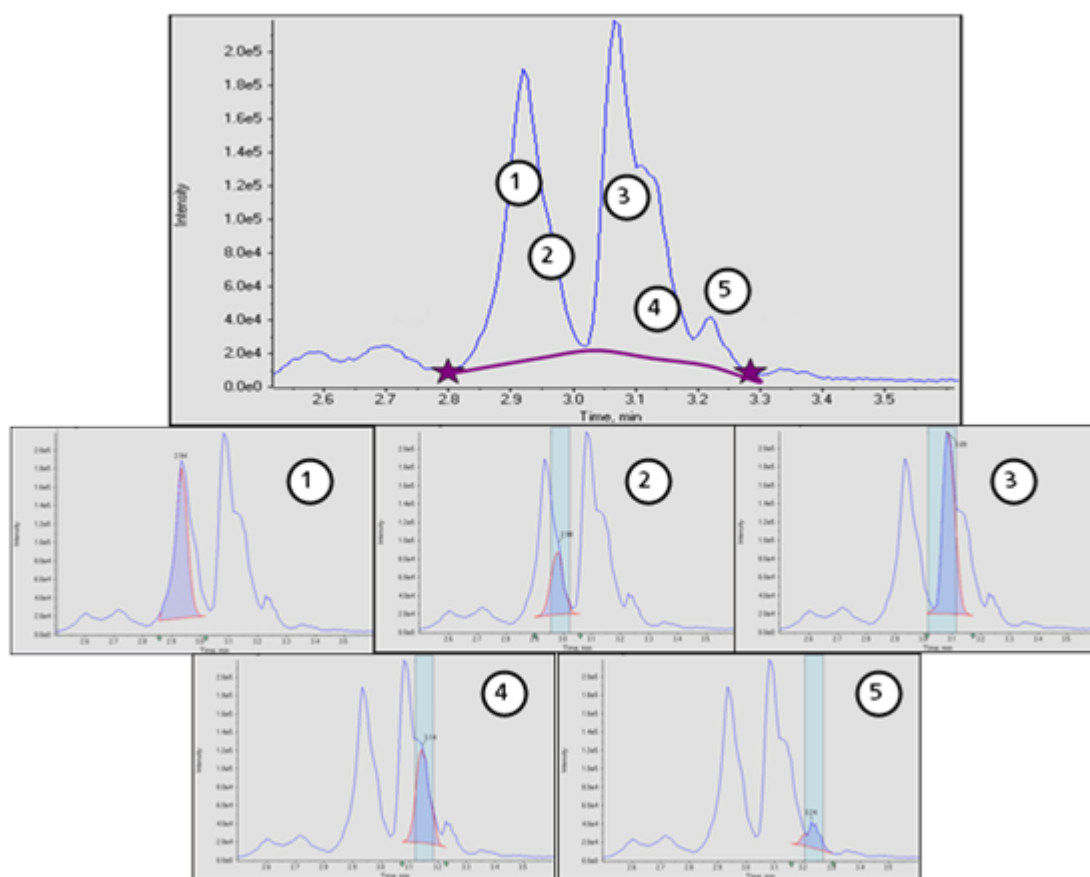


图 14-25 非线性基线示例



SignalFinder™ 积分算法

- 将两个峰合并：SignalFinder 积分算法有时候会检测到两个峰。若要将两个峰合并，可按下 Ctrl 然后将两个峰画入框内。软件会试图通过降低卷积灵敏度来合并峰，除非这两个峰相距太远。
- 改变峰的开始和结束时间：若要改变峰的开始和结束时间，可以在创建 Results Table（结果表）时，也可以在检查色谱峰期间，拖动峰的开始和结束箭头进行改动。

注释： 用户只能在合理的极限范围内改动开始和结束箭头。

MQ4 积分算法参数

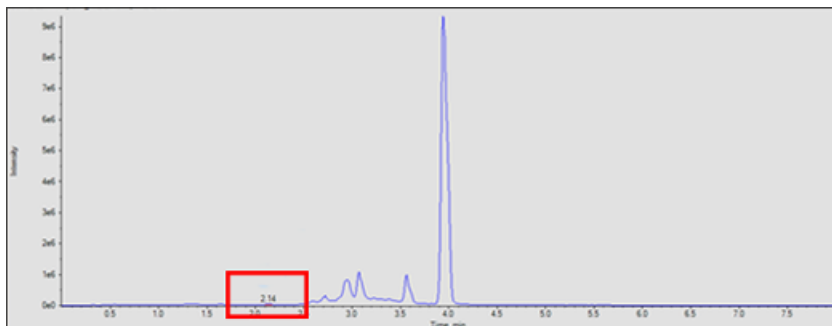
以下参数用于识别和报告所关注的峰。请参阅[积分算法参数](#) 页码 114中可用参数的完整列表

Noise Percentage（噪声百分比）

该参数用于估计色谱图中的噪声水平。强度最小的数据点的指定百分比被假定为噪声。

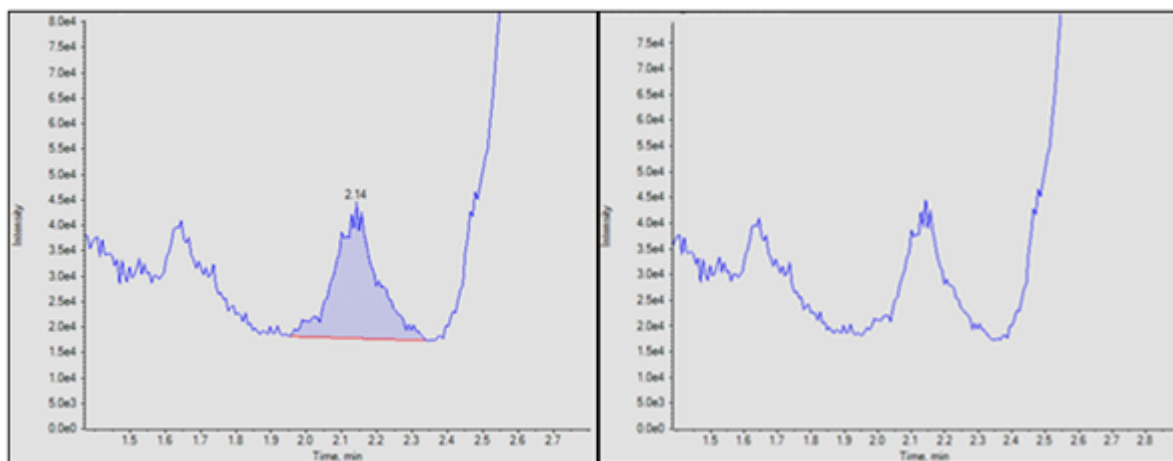
典型值的范围为 20% – 60%。如果在有较大峰存在的情况下不能发现小的峰，就应当降低噪声百分比。图 14-26 是一个有极大峰存在情况下的小峰的例子。当噪声百分比被设为 90% 时，该峰未被找到，但当噪声百分比被设为 40% 就能找到。

图 14-26 Peak of Interest (关注峰)



在图 14-27 中，左图显示噪声百分比被设为 40%。右图被设为 90%。

图 14-27 Noise Levels (噪声水平)

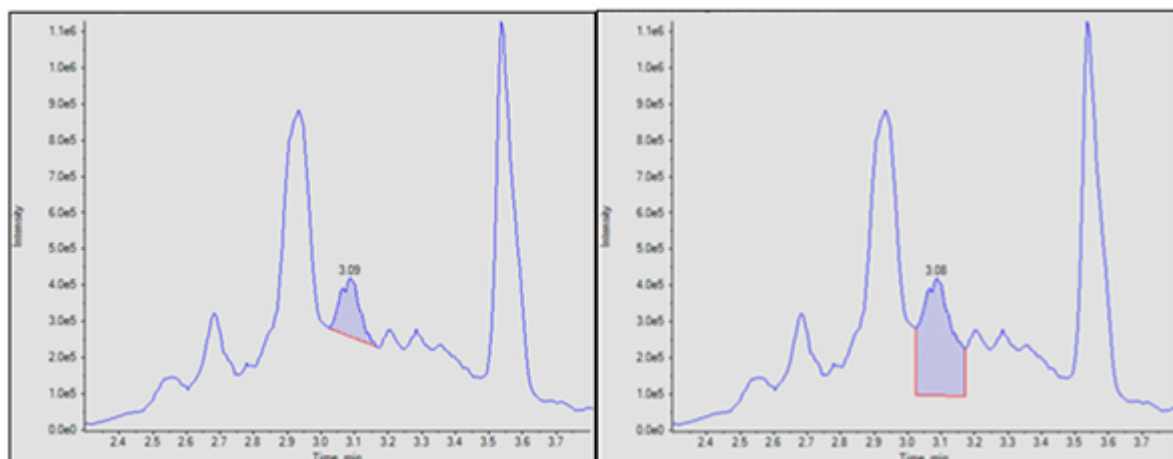


Baseline Sub. Window (基线减法窗口)

在经过平滑计算但尚未进行其他处理时，色谱图的基线会作减法计算，以消除数据中的隆起部分。对于每一个数据点来说，基线是用当前强度最小的点（在减法窗口内）的左右两侧的数据点计算出来的。

该参数值应该是多少并不重要，只要该值在设置时至少是预计峰宽度的几倍即可。

图 14-28 Baseline Subtraction Window（基线减法窗口）



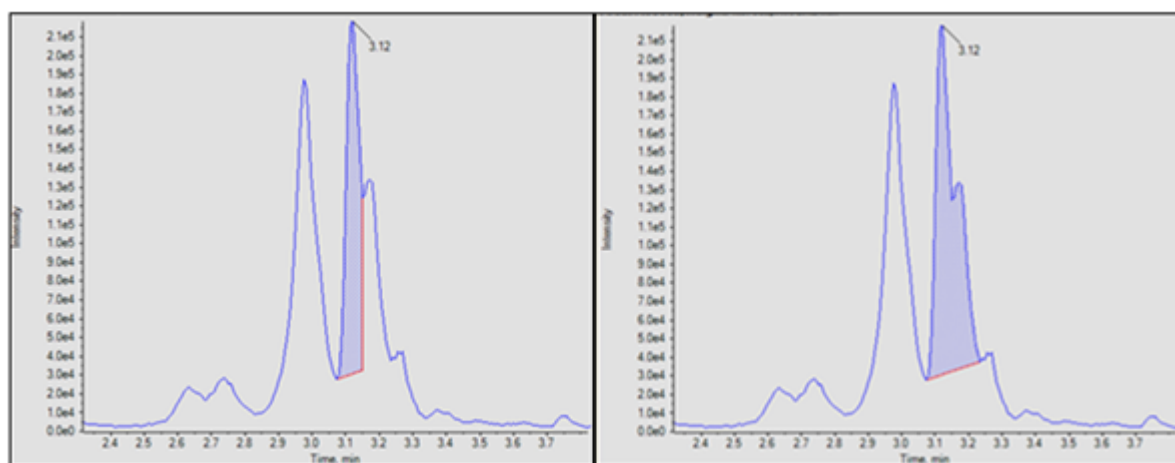
Peak Splitting（峰分离）

该参数用于控制有潜在噪声的峰是否作为一个峰或两个（或多个）单独的峰对待。如果两个潜在峰之间的空隙小于指定值，则作为一个峰对待。否则就作为两个峰对待。

将该参数设为一个较大的值可以防止有噪声的峰被分离，并被作为两个单独的峰对待。不过，如果有两个洗脱（重叠）峰靠得很近，则需要使用类似的值。

左侧的图显示的 Peak Splitting（峰分离）被设为两个点。右侧的图显示的 Peak Splitting（峰分离）被设为三个点。

图 14-29 Peak Splitting（峰分离）



可选任务

本部分包含了可以用来加强数据分析的可选任务。

创建度量图表

用 Metric Plot（度量图表）对照行号或另一列，按 Results Table（结果表）列中的数值绘图。这些图表能够为目测数据检查提供极大帮助，尤其是在不必用 Peak Review（色谱峰检查）窗格手动检查每一个色谱图的情况下。

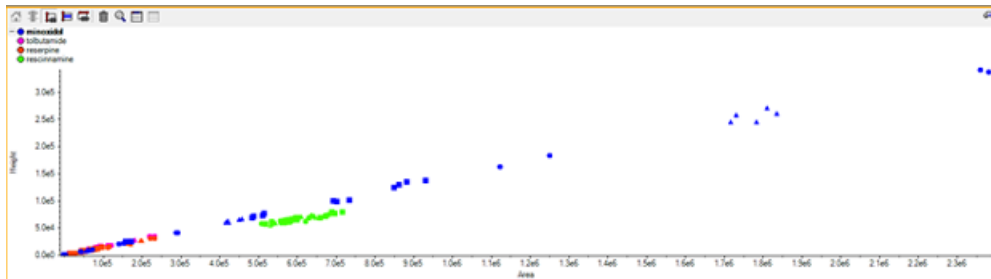
注释：度量图表使用了与校准曲线相同的回归公式。对于度量图表来说，还有另外两个公式—平均值和中位数。

1. 打开一个 Results Table（结果表）。
2. 选择一列或两列，然后单击 Metric Plot（度量图表）图标。本例中选择的是 IS Area（IS 面积）列。

如果选择了一列，生成的图表会作为表内行号的方程，显示列内的数值。如果选择了两列，则列内的数值便会相互对照绘制。两列中待选择的第一列含 x 值，而第二列则含 y 值。

3. 在图表窗格中单击右键，然后单击 Show Legend（显示图例）查看图表中所用标记的说明。

图 14-30 Metric Plot（度量图表）



创建自定义列

1. 在有结果表打开并处于活动状态的情况下，单击右键，然后单击 Add Custom Column（添加自定义列）。

表的末尾会增加一列。

2. 在 Custom Column Name（自定义列名称）对话框中键入列的名称。
3. 单击 OK（确定）。

关于定量方法文件和内嵌方法

定量方法可以用下列选项之一来创建：

- 使用定量向导程序。
- 在 Quantitation wizard（定量向导程序）中编辑一个现有的方法，此时 Edit（编辑）复选框应已勾选。

- 打开并编辑一个现有的定量方法。

定量方法保存在 Quantitation Method 文件夹中。

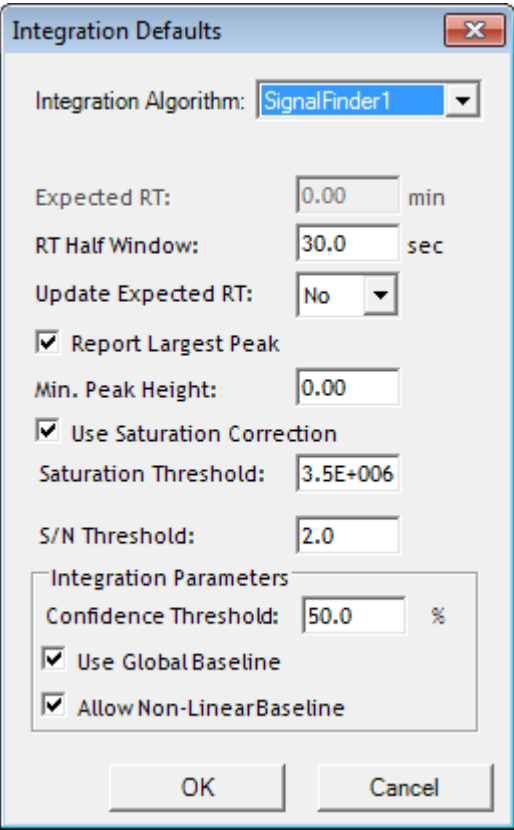
结果表创建完成后，用来创建结果表的定量方法就内嵌在结果表中。编辑内嵌定量方法，不过，对定量方法的任何改动仅适用于结果表内嵌方法，对 Quantitation Method 文件夹中的方法不适用。

提示！ 改动过的该内嵌方法可以导出，以供今后使用。

SignalFinder 积分算法参数

SignalFinder™ 积分算法参数可以在创建新定量方法时，用选定样本构造一个峰模型。 该模型用于描述试算所使用的选定峰的形状。

图 A-1 积分默认值对话框



标签	描述
Integration Algorithm（积分算法）	选定的积分算法。
Expected RT（预计保留时间）	预计保留时间，单位为分钟。它一开始被设为用来构造定量方法的代表性样本的色谱图中最大峰的保留时间。该字段不可编辑。它会根据定量方法中的化合物更新。

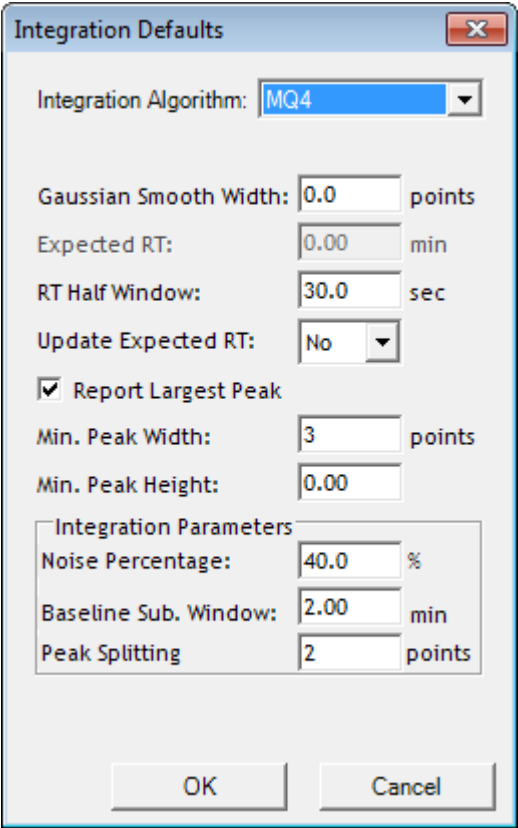
标签	描述
RT Half Window (半保留时间窗)	保留时间窗的一半，单位为秒。为了能够找到并报告峰，最高点与预计保留时间之间的差必须小于或等于该值。
Update Expected RT (更新预计保留时间)	<p>指出预计保留时间是否应使用其他分量随机调整。一定要用其他信息来补偿不同样本之间保留时间的漂移。选择包括：</p> <ul style="list-style-type: none"> No (否)：按原来的预计保留时间。 Group (组)：适用于已分配给各个组的分量，对于这些组来说，同组的所有分量均具有相同的保留时间（也就是说，相同的化合物有不同的离子对）。在保留时间窗口中，预计保留时间采用该组（对于指定组）各谱图的最大重叠位置进行更新。这一想法是将预计保留时间设置为实际关注成分（预计每张色谱图在这里都有一个峰）的可能保留时间。 <p>如果一个组定义了至少两种内标物，仅需用它们的色谱图来确定新的保留时间。否则就要用到该组的所有色谱图。其用意是只采用分量最可能处于合理水平的谱图。</p> <ul style="list-style-type: none"> IS：对于使用内部标准的分析物来说，先要确定（相应样本）内标峰的实际保留时间。分析物的预计保留时间定义为指定的预计保留时间乘以内标的实际保留时间与预计保留时间之比。该选项有时被称为相对保留时间。 <p>注释：该选项不适用于内标物，也不适用于不使用内标物的分析物。</p>
Report Largest Peak (报告最大峰)	<p>如果色谱图中发现的峰不止一个，那么在保留时间窗内以及最小宽度和高度均满足的情况下，由该参数控制报告哪一个峰。如果选中该复选框，则报告最大峰。如果该复选框被清空，则报告保留时间最接近预计时间的峰。</p> <p>建议启用该选项，除非保留时间有很多雷同。</p>
产物离子的最小 Peak Height (峰高度)	参数并不影响积分。仅用于报告。强度不及该值的峰被假定为无需关注的峰，从而不会被用到。
Use Saturation Correction (使用饱和校正)	当算法检测到某个峰已饱和时，就会运用模型来预测峰的形状（如果检测器未饱和）。这样就会使峰的轮廓超过峰的最顶端，直到检测器未饱和时所能达到的响应高度附近。它可以扩大校准曲线的线性动态范围。只有在设置总体算法默认值而且不在创建定量方法或检查各个峰的时段内，该选项才可用，因为仅对某些峰使用该设置是没有用的。
Saturation Threshold (饱和阈值)	高于该阈值的色谱峰将被认为已饱和。该值取决于检测器。
S/N Threshold (S/N 阈值)	参数并不影响积分。仅用于报告。低于阈值的峰不予报告。

积分算法参数

标签	描述
Confidence Threshold（置信度阈值）	该参数用于过滤潜在的假阳性峰。默认值为 50%，通常情况下是适宜的。不过，对于干扰较多的数据或者不同样本间峰宽度差异较大的数据，可以使用更大的值。
Use Global Baseline（使用全局基线）	选择用整个色谱图作为基线。如果未选择该复选框，软件就会以本地方式评估基线的变动。
Allow Non-Linear Baseline（允许非线性基线）	在线性或非线性基线之间进行选择。非线性基线用来预测每一个峰之下的基线。线性基线可以在特定峰组的起点和终点之间作出一根拟合线。

MQ4 积分算法参数

图 A-2 积分默认值对话框



标签	描述
Integration Algorithm (积分算法)	选定的积分算法。
Gaussian Smoothing Width (高斯平滑宽度)	采用的是一种标准的高斯平滑算法，其一半宽度等于指定值（以点数计）。对于噪声较大的色谱图来说，与（一半高度处）实际峰宽度相近的值是比较好的选择。对于噪声不大的数据，可以使用较小的值。
Expected RT (预计保留时间)	预计保留时间，单位为分钟。它一开始被设为用来构造定量方法的代表性样本的色谱图中最大峰的保留时间。
RT Half Window (半保留时间窗)	保留时间窗的一半，单位为秒。为了能够找到并报告峰，最高点与预计保留时间之间的差必须小于或等于该值。
Update Expected RT (更新预计保留时间)	<p>指出预计保留时间是否应使用其他分量随机调整。一定要用其他信息来补偿不同样本之间保留时间的漂移。选择包括：</p> <ul style="list-style-type: none"> No (否)：按原来的预计保留时间。 Group (组)：适用于已分配给各个组的分量，对于这些组来说，同组的所有分量均具有相同的保留时间（也就是说，相同的化合物有不同的离子对）。在保留时间窗口中，预计保留时间采用该组（对于指定组）各谱图的最大重叠位置进行更新。这一想法是将预计保留时间设置为实际关注成分（预计每张色谱图在这里都有一个峰）的可能保留时间。 <p>如果一个组定义了至少两种内标物，仅需用它们的色谱图来确定新的保留时间。否则就要用到该组的所有色谱图。其用意是只采用分量最可能处于合理水平的谱图。</p> <ul style="list-style-type: none"> IS：对于使用内部标准的分析物来说，先要确定（相应样本）内标峰的实际保留时间。分析物的预计保留时间定义为指定的预计保留时间乘以内标的实际保留时间与预计保留时间之比率。该选项有时被称为相对保留时间。
Report Largest Peak (报告最大峰)	<p>如果色谱图中发现的峰不止一个，那么在保留时间窗内以及最小宽度和高度均满足的情况下，由该参数控制报告哪一个峰。如果选中该复选框，则报告最大峰。如果该复选框被清空，则报告保留时间最接近预计时间的峰。</p> <p>建议启用该选项，除非保留时间有很多雷同。</p>
产物离子的最小 Peak Height (峰高度)	参数并不影响积分。仅用于报告。强度不及该值的峰被假定为无需关注的峰，从而不会被用到。
产物离子的最小 Peak Width (峰宽度)	宽度比该值窄的峰被假定为有噪声的峰，不予使用。

积分算法参数

标签	描述
Noise Percentage (噪声百分比)	<p>该参数用于估计色谱图中的噪声水平。强度最小的数据点的指定百分比被假定为噪声。</p> <p>典型值的范围为 20% - 60%。如果在有较大峰存在的情况下不能发现小的峰，就应当降低该值。</p>
Baseline Sub. Window (基线减法窗口)	<p>在经过平滑计算但尚未进行其他处理时，色谱图的基线会作减法计算，以消除数据中的隆起部分。对于每一个数据点来说，基线是用当前强度最小的点（在减法窗口内）的左右两侧的数据点计算出来的。</p> <p>该参数值应该是多少并不重要，只要该值在设置时至少是预计峰宽度的几倍即可。</p>
Peak Splitting (峰分离)	<p>该参数用于控制有潜在噪声的峰是否作为一个峰或两个（或多个）单独的峰对待。如果两个潜在峰之间的空隙小于指定值，则作为一个峰对待。否则就作为两个峰对待。</p> <p>将该参数设为一个较大的值可以防止有噪声的峰被分离，并被作为两个单独的峰对待。不过，如果有两个洗脱（重叠）峰靠得很近，则需要使用类似的值。</p>

本部分主要介绍用于计算回归曲线的方程。在下列等式中， x 代表 Standard 样本的分析物浓度，而 y 则代表相应的峰面积或高度。用于回归计算的变量取决于是否使用了内标物以及所使用的峰面积或高度是否如表 B-1 所示。

表 B-1 回归变量

是否使用了内标物？	是否使用了面积？	x	y
是	是	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
是	否	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
否	是	C_a / DF	A_a
否	否	C_a / DF	H_a

其中：

- C_a = 实际分析物浓度
- C_{is} = 内标物浓度
- DF = 稀释系数
- A_a = 分析物峰面积
- A_{is} = 内标物峰面积
- H_a = 分析物峰高度
- H_{is} = 内标物峰高度

加权系数

表 B-2显示的是七种加权类型各自的加权系数（等式中以 w 表示）是如何计算的。

表 B-2 加权系数

加权类型	权重 (w)
无	始终是 1.0。
$1 / x$	如果 $ x < 10^{-5}$ ，则 $w = 10^5$ 。 否则， $w = 1 / x $ 。
$1 / x^2$	如果 $ x < 10^{-5}$ ，则 $w = 10^{10}$ 。 否则， $w = 1 / x^2$ 。
$1 / y$	如果 $ y < 10^{-8}$ ，则 $w = 10^8$ 。 否则， $w = 1 / y $ 。
$1 / y^2$	如果 $ y < 10^{-8}$ ，则 $w = 10^{16}$ 。 否则， $w = 1 / y^2$ 。
$\ln x$	如果 $x < 0$ ，则会报错。 如果 $x < 10^{-5}$ ，则 $w = \ln 10^5$ 。 否则， $w = \ln x $ 。
$\ln y$	如果 $y < 0$ ，则会报错。 如果 $y < 10^{-8}$ ，则 $w = \ln 10^8$ 。 否则， $w = \ln y $ 。

回归

本部分提供了每一种回归类型的等式。 在下列等式中， x 、 y 和 w 的定义和前面一样。 所有求和计算都是针对全部 Standard（标准物）样本，被标注为未使用的标准物样本除外。

相关性系数的计算如下：

$$r = (\sum w \sum w y y_c - \sum w y \sum w y_c) / \sqrt{(D_y D_{y_c})}$$

其中：

$$D_y = \sum w \sum w y^2 - (\sum w y)^2$$

y_c = 用下列相应等式计算得到的 y 值

$$D_{y_c} = \sum w \sum w y_c^2 - (\sum w y_c)^2$$

Linear（线性回归）

线性校正等式为：

$$y = mx + b$$

斜率和截距的计算方式为：

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

其中：

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

过零点线性

过零点线性的校准等式是：

$$y = mx$$

斜率的计算方式是：

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

平均响应因子

平均响应因子校正等式为：

$$y = mx$$

这与过零点线性的情况用的是相同的等式。不过斜率的计算方式不同：

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

响应因子的标准差则是：

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1))} / \sum w$$

其中：

$$D = \sum w^* \sum wy^2/x^2 - (\sum wy/x)^2$$

注释： X 值为零的点不予求和。

如果在点连线上有一些直线，有一些曲线，则应使用乘方回归而非二次回归方式在这些拟合点之间的某处产生连线。

二次

二次校准等式如下所示：

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

多项式系数的计算如下：

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

其中：

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

乘方

乘方功能校正等式为：

$$y = ax^p$$

线性校正等式的用法如上所述，它被用于计算斜率 (m) 和截距 (b)，只不过这些等式中的 x 用 $\ln x$ 代替，而 y 则用 $\ln y$ 代替。这一步完成后，a 和 p 的计算方法为：

$$a = e^b$$

$$p = m$$

如果有任何 x 或 y 值为负或零，软件就会报告错误。

瓦格纳

瓦格纳校准等式为：

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

二次校准等式的用法如上所述，它被用于计算 a_0 ， a_1 ，以及 a_2 ，只不过这些等式中的 x 用 $\ln x$ 代替，而 y 则用 $\ln y$ 代替。

如果有任何 x 或 y 值为负或零，软件就会报告错误。

Hill

Hill 校准等式为：

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

不可能有分析方程能够解出 a 、 b 、 c 和 n 。这些系数是用 Levenberg-Marquardt 迭代法确定的。

Calculating Final Concentrations (计算最终浓度)

本部分主要介绍如何运用原浓度中所使用的 IS 浓度和稀释系数，通过所得到的回归等式计算最终浓度。

线性

$$x = (y - b) / m$$

过零点线性和平均响应因子

$$x = y / m$$

二次

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0.5}) / (2 \times a_2)$$

- 如果 $+$ 和 $-$ 根均在标准范围内，就会出现错误，因为没有唯一解。
- 如果两个根当中有一个在标准浓度范围内，系统便会报告该值。
- 如果两个根均低于最低浓度标准，系统便会报告 $+$ 根。
- 如果两个根均高于最高浓度标准，系统便会报告 $-$ 根。
- 如果 $-$ 根低于最低浓度标准而 $+$ 根高于最高浓度标准，而 $-$ 根与最低浓度标准之差小于 $+$ 根与最高浓度标准之差，则报告 $-$ 根。反之，则报告 $+$ 根。

电源

$$x = (y / a)^{(1 / p)}$$

Wagner

主要计算使用的是与二次式情况相同的等式，只是 x 用 $\ln x$ 代替，而 y 则用 $\ln y$ 代替。

Hill

$$x = ((a - y \times c) / (y - b))^{(1 / n)}$$

本部分主要介绍如何使用软件中的报告功能从 Results Tables（结果表）创建各种格式的报告。

Create Report（创建报告）

该软件以 Microsoft Word 文件为预定义模板。创建报告时，数值都是从最新的 Results Table（结果表）和相关文件中提取的。

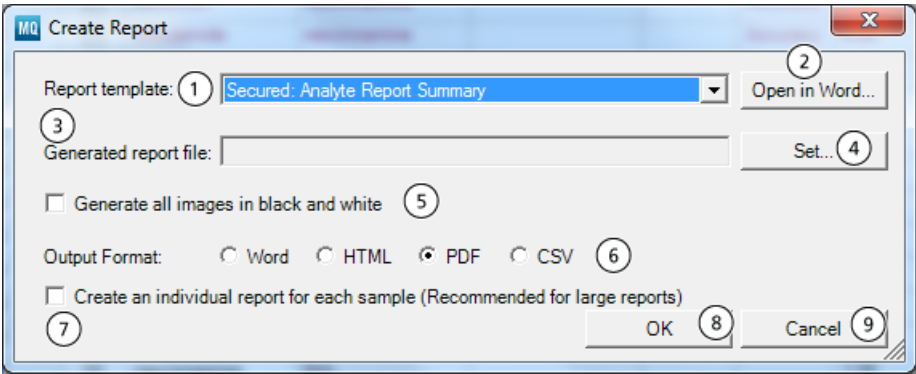
用户负责验证自定义模板。用户可以在报告模板编辑器中编辑数字格式。如果模板中未指定数字格式，则报告中会使用 Results Table Column Setting（结果表列设置）中的格式。所使用的小数位数一定要正确。

从软件中输出数据的管理方式是导出Results Tables（结果表），转移至 LIMS 和报告。输出数据的其他来源不受管制，如从Results Tables（结果表）中复制或粘贴。用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。

浏览任意文件夹以访问和存储数据。软件默认打开之前打开模板和保存报告的文件夹。

- 1. 打开一个 Results Table（结果表）。
- 2. 单击 File（文件） > Create Report and Save Results Table（创建报告并保存结果表）。

图 C-1 Create Report Dialog（创建报告）对话框



项目	描述
1	报告模板：从列表中选择模板。
2	以 Word 打开：单击直接在 Microsoft Word 中打开指定报告模板，以进行验证或编辑。
3	生成的报告模板：显示报告文件的名称。

项目	描述
4	设置：单击以指定要生成的报告的文件名。
5	生成所有黑白图片：选择复选框以黑白打印。
6	输出格式：Word、HTML、PDF 或 CSV。PDF 是最安全的输出方法，因为报告无法编辑。
7	为每一份样本各创建一份报告（大型报告推荐这么做）
8	单击 OK（确认）打印报告。
9	单击Cancel（取消）以关闭对话框而不创建报告。

3. 从 Report template（报告模板）列表选择一个模板。 报告模板存储在以下位置：

- 对于 Windows 7 和 10：C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter。

有关这些模板的说明请参阅[报告模板](#) 页码 126。

4. 单击 Set（设置）创建报告的名称和位置。

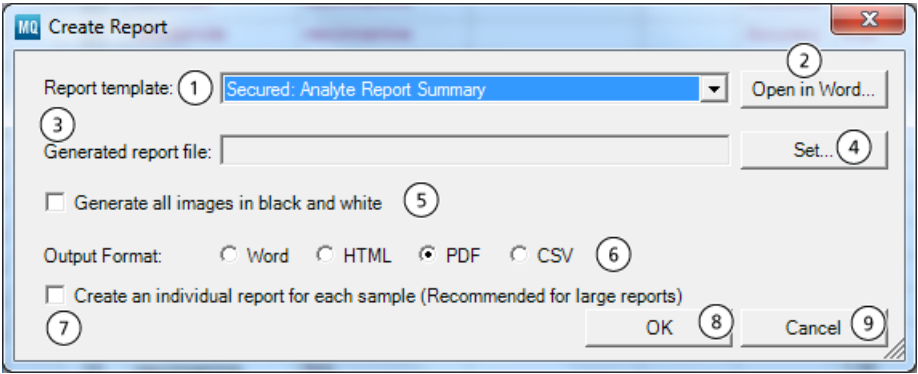
5. 单击 OK（确认）打印报告。

创建自定义报告模板

从软件中输出数据的管理方式是导出Results Tables（结果表），转移至 LIMS 和报告。 输出数据的其他来源不受管制，如从Results Tables（结果表）中复制或粘贴。 用户不得将这些非受控方法用于受管制的用途。

1. 打开或创建 Results Table（结果表）。
2. 单击 File（文件） > Create Report and Save Results Table（创建报告并保存结果表）。

图 C-2 Create Report Dialog（创建报告）对话框



项目	描述
1	报告模板：从列表中选择模板。
2	以 Word 打开：单击直接在 Microsoft Word 中打开指定报告模板，以进行验证或编辑。
3	生成的报告模板：显示报告文件的名称。
4	设置：单击以指定要生成的报告的文件名。
5	生成所有黑白图片：选择复选框以黑白打印。
6	输出格式：Word、HTML、PDF 或 CSV。PDF 是最安全的输出方法，因为报告无法编辑。
7	为每一份样本各创建一份报告（大型报告推荐这么做）
8	单击 OK（确认）打印报告。
9	单击Cancel（取消）以关闭对话框而不创建报告。

3. 从 Report template（报告模板）列表选择一个模板。

4. 单击 Open in Word（在 Word 中打开）。

此时 docx 模板打开，并在右侧显示 Reporter 模板编辑器。模板编辑器会自动加入标签信息。

5. 根据需要编辑模板。

6. 保存模板。

报告模板

下表介绍了 <驱动器>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter 文件夹中所提供的模板。

在创建自定义模板时，模板的应用确认由用户负责。用户可以在报告模板编辑器中编辑数字格式。如果模板中未指定数字格式，则报告中会使用 Results Table Column Setting（结果表列设置）对话框中的格式。自定义报告模板由用户自行验证。

一些报告模板使用查询。用户可以使用基于 Microsoft Excel 公式评估、处理和列出报告结果表中的数据创建查询。报告模板中的 Metafield 标签告诉报告应当使用的 query 文件的名称。要使用查询，必须在报告模板的 .query 标签中指定查询文件名称。查询还必须具有“.query”的扩展名，以便被识别为查询。查询必须存储在报告模板所存储的 Reporter（报告人）文件夹中。

我们建议，当使用 Reporter（报告人）模板时，特别是当在模板中使用查询时，建议用户验证所生成的结果。如果在验证后对报告模板进行了修改，则应重新验证报告模板。修改报告模板包括修改报告人标签或查询。

表 C-1 报告模板描述。

模板	描述
分析物综合报告	它是显示每一种分析物的样本综合表的加密报告。 该报告模板适合已定义分组的结果表。
校准曲线模板	该报告显示分析物的文件信息、统计表（标准物）和校准曲线，每种分析物各一页。
Metric Plot_IS Area (IS 面积度量图)	这是一份加密报告，每一种内标物为一段，其中包括文件信息和 IS 峰面积的度量图表。
Per Analyte Ion Ratio Report (各分析物离子率报告)	这是一份加密报告，每一种分析物为一段，其中包括文件信息、结果表、每一种分析物的校准曲线以及含 IS 和每一种分析物的色谱图。该模板适合已定义分组的结果表。
Per Analyte Report (各分析物报告)	这是一份加密报告，每一种分析物为一段，其中包括文件信息、结果表、每一种分析物的校准曲线以及含 IS 和每一种分析物的色谱图。该模板适合未定义分组的结果表。
Per Sample Ion Ratio Report (各样本离子率报告)	这是一份加密报告，每一种样本为一段，其中包括文件信息、分析物结果表、每一种分析物的校准曲线以及含 IS 和每一种分析物的色谱图。该模板适合已定义分组的结果表。
Per Sample Report (各样本报告)	这是一份加密报告，每一种样本为一段，其中包括文件信息、分析物结果表、每一种分析物的校准曲线以及含 IS 和每一种分析物的色谱图。该模板适合未定义分组的结果表。
Sample Report Summary (样本综合报告)	它是显示每一种样本的分析物综合表的加密报告。 该报告模板适合已定义分组的结果表。
采用 Concentration Threshold.docx 的样品报告	报告显示了各个未知样品的文件信息、样品信息和结果摘要表。 结果摘要表包括分析物特定浓度阈值。 如果浓度高于阈值，则将分析物标记为正。 这一模板参考了 Sample Report With Concentration Threshold.query (采用 Concentration Threshold.query 的样品报告) 文件。 用户可以编辑该查询文件，以指定分析物名称、分析物组（例如，化合物类）和分析物浓度阈值。

报告模板标签

表 C-2 报告模板标签

类型	字段类型	标签描述
来自 Analyst [®] MD 软件数据提供者架构的标签。		
Analyte	ForEach	在所有分析物上的环，按它们在结果表中被定义的顺序查看。

表 C-2 报告模板标签 (续)

类型	字段类型	标签描述
AnalyteGroup	ForEach	仅为各分析物组的环。 TextField 或 PictureField 标签检索定量离子的值。 如果这种类型的标签含有指定 RatioIons 属性的另一个 For_Each 标签, 那么内环仅针对属于当前组一部分的定量离子。
InternalStandard	ForEach	在所有内标上的环。
QCStatistics	ForEach	在所有质量控制统计学上的环。
RatioIons	ForEach	参阅AnalyteGroup。
Sample	ForEach	查看每个个别样品。 例如这与 TextField 标签设置一起使用, 以插入样品名称。
Statistics	ForEach	查看所有标准品统计学。
MQ_Group	ForEach	查看各个组, 包括内标组或亚组。 TextField 或 PictureField 标签检索定量离子的值。 如果这种类型的标签含有指定 RatioIons 属性的另一个 For_Each 标签, 那么内环仅针对属于当前组一部分的定量离子。
MQ_AnalyteRatioIons	ForEach	请参阅仅关于分析物定性子的 MQ_Group。
MQ_ISRatioIons	ForEach	请参阅仅关于内标定性的 MQ_Group。
AnalyteRatio	PictureField	显示分析物亚组的定量子和定性子的色谱图叠加。 显示在中间的实线, 指明预期离子比。 中线 = 定量子峰高 x 预期离子比。 显示带虚线的合格离子范围的下限和上限。 下限 = 定量子的峰高 x 预期离子比 x ((100 - 公差) / 100)。 下限 = 定量子的峰高 x 预期离子比 x ((100 - 公差) / 100)。
AnalyteRatioNoLines	PictureField	显示没有线条的分析物亚组的定量子和定性子的色谱图叠加。
Calibration	PictureField	显示分析的校准曲线。
IS_AnalyteRatio	PictureField	显示内标亚组的定量子和定性子的色谱图叠加。 显示在中间的实线, 指明预期离子比。 中线 = 定量子峰高 x 预期离子比。 显示带虚线的合格离子范围的下限和上限。 下限 = 定量子的峰高 x 预期离子比 x ((100 - 公差) / 100); 上限 = 定量子的峰高 x 预期离子比 x ((100 + 公差) / 100)

表 C-2 报告模板标签 (续)

类型	字段类型	标签描述
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	显示不带线条的内标亚组的定量子和定性子的色谱图叠加。
IS_PeakReview	PictureField	显示内标的色谱图。
Overlay_All_XIC	PictureField	显示在样品中所有分析物的色谱图叠加。
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	显示在样品中所有分析物和内标的色谱图叠加。
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	显示在样品中所有分析物和内标的色谱图叠加，没有文字说明。
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	显示在样品中所有分析物的色谱图叠加，没有文字说明。
PeakReview	PictureField	显示分析物的色谱图。
TIC	PictureField	显示样品的 TIC。
Acquisition_Date	TextField	获得样品的日期。 显示“获取日期和时间”。
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	显示获取样品数据的时间期间，以分钟为单位报告。
Acquisition_Method	TextField	用于获取样品数据的获取方法。 显示“获取 方法名称”。
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	显示“部件意见”。
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	显示回归R值。
Analyte_AnalyteRegression	TextField	显示回归方程，包括 R 值和加权。
Analyte_Concentration	TextField	分析物的实际浓度，如由用户在结果表中规定。 显示“实际浓度”。
Analyte_Expected_RT	TextField	特定分析物的预期保留时间，以分钟为单位。 显示“预期保留时间”。
Analyte_Integration_Type	TextField	用于特定分析物峰的积分类型。峰可以人工积分或可以采用可用的参数进行积分。 显示“积分类型”。

表 C-2 报告模板标签 （续）

类型	字段类型	标签描述
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	分析物峰面积与内标溶液峰面积的比。 以分析物峰面积/内标峰面积进行计算。 显示“面积比”。
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	分析物峰高（以每秒计数（cps）为单位） 与内标溶液峰高的比。 以分析物峰高/内 标峰高进行计算。 显示“高度比”。
Analyte_Mass_Ranges	TextField	用户规定的、分析物的 MRM 过渡，在所 用获取方法中规定。 显示“质量信息”。
Analyte_Peak_Area	TextField	在色谱图中分析物的峰面积。 显示“峰面积”。
Analyte_Peak_Height	TextField	分析物的峰高，以每秒计数（cps）为单 位。 显示“峰高”。
Analyte_Peak_Name	TextField	当创建结果表时，用户规定的、对特定样 品指定的名称。 显示“部件名称”。
Analyte_Peak_Width	TextField	分析物的峰宽，以分钟为单位。 显示“总峰宽”。
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	在分析物峰高 50% 处的峰宽，以分钟为 单位。 显示“在 50% 处的峰宽”。
AnalyteQuantPeak_info	TextField	显示包括算法和参数的积分信息。
Analyte_QTY	TextField	根据分析物计算浓度和重量/体积比计算 的分析物量（例如，每克样品的分析物 ng 数）。 显示“质量”。
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	是在该组中的第一个分析物。
Analyte_Processing_Algorithm	TextField	显示积分算法。
Analyte_Retention_Time	TextField	在用于生成结果表的色谱图中，分析物的 实际保留时间。 显示“保留时间”。

表 C-2 报告模板标签 (续)

类型	字段类型	标签描述
Analyte_R_Squared	TextField	显示回归的 R^2 值。
Analyte_RT_Window	TextField	分析物峰预期出现的时间范围，以秒为单位。这个范围的中心是分析物的预期保留时间。 显示积分参数的“RT 半窗口”值。
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	特定分析物峰的信噪比。 显示“信噪比”。
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	分析物的基线斜率，以 % 强度/分钟为单位表示。 显示分析物的“基线斜率”。
Analyte_Start_Scan	TextField	分析物开始扫描。
Analyte_Start_Time	TextField	分析物峰开始的时间，以分钟为单位。 显示“开始时间”。
Analyte_Stop_Scan	TextField	分析物停止扫描。
Analyte_Stop_Time	TextField	分析物峰结束的时间，以分钟为单位。 显示“结束时间”。
Analyte_Unit	TextField	用于表示分析物浓度的单位。结果表的标准单位是 ng/mL。 显示内标的“浓度 单位”。
Analyte_Use_Record	TextField	确定指定记录是否用于后续分析（如校准曲线）的选择框。 显示“已用”。
Analyte_Count	TextField	显示分析物总数。
Analyte_Index	TextField	显示在样品中分析物的顺序号，从 0 开始。
Calculated_Accuracy	TextField	分析物峰的准确度，通过比较分析物实际浓度与分析物计算浓度而得。 显示“准确度”。
Calculated_Concentration	TextField	分析物峰的计算浓度，由 Analyst [®] MD 软件以峰面积计算。 显示“计算所得浓度”。

表 C-2 报告模板标签 （续）

类型	字段类型	标签描述
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	在结果表中，分析物或内标特定记录的实际保留时间。 显示“相对保留时间”。
IS_Concentration	TextField	内标的实际浓度，如由用户在结果表中规定。 显示“内标的实际浓度”。
IS_Expected_RT	TextField	内标峰的预期保留时间，以分钟为单位。 显示“内标预期保留时间。”
IS_Integration_Type	TextField	用于特定内标峰的积分类型。峰可以人工积分或可以采用可用的参数进行积分。 显示“IS 积分类型”。
IS_Mass_Ranges	TextField	用户规定的、内标的 MRM 过渡，在所用获取方法中规定。 显示“内标质量信息”。
IS_Peak_Area	TextField	内标的峰面积。 显示“内标峰面积”。
IS_Peak_Height	TextField	内标的峰高，以每秒计数（cps）为单位。 显示“内标峰高”。
IS_Peak_Name	TextField	当创建结果表时，用户规定的、对特定内标给定的名称。 显示“内标名称”。
IS_Peak_Width	TextField	分析物的峰宽，以分钟为单位。 显示“内标总宽”。
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	在内标峰高（以每秒计数（cps）为单位）一半处的内标峰宽，以分钟为单位。 显示“在 50% 处的峰宽”。
IS_Retention_Time	TextField	内标的实际保留时间。 显示“内标保留时间”。
IS_RT_Window	TextField	内标峰预期出现的时间范围，以秒为单位。这个范围的中心是内标的预期保留时间。 显示内标积分参数的“RT 半窗口”值。
ISQuantPeak_Info	TextField	显示包括算法和参数的积分信息。

表 C-2 报告模板标签 (续)

类型	字段类型	标签描述
IS_Signal_To_Noise	TextField	内标峰的信噪比。 显示“内标信噪比”。
IS_Slope_of_Baseline	TextField	内标的基线斜率, 以 % 强度/分钟为单位表示。 显示内标的“基线斜率”。
IS_Start_Scan	TextField	内标开始扫描。
IS_Start_Time	TextField	内标峰开始的时间, 以分钟为单位。 显示“内标开始时间”。
IS_Stop_Scan	TextField	内标停止时间。
IS_Stop_Time	TextField	内标峰结束的时间, 以分钟为单位。 显示“内标结束时间”。
IS_Units	TextField	用于表示内标浓度的单位。 结果表的标准单位是 ng/mL。 显示内标的“浓度 单位”。
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	显示最大值 在定量方法离群值设置对话框中 LLOQ 的准确度公差。
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	显示最大值 在定量方法离群值设置对话框中标准品的准确度公差。
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	显示最大值 在定量方法离群值设置对话框中 QC (质控品) 的准确度公差。
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	显示分析物组名称的名称。
MQ_Created_With	TextField	显示用于生成报告的产品的名称。
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	显示“Expected Ion Ratio”(预计离子率)
MQ_Group_Index	TextField	显示在样品中分析物的顺序号, 从 1 开始。 与 ForEach MQ_Group 环一起使用。
MQ_Group_Name	TextField	显示组的名称。 与 ForEach MQ_Group 环一起使用。
MQ_Ion_Ratio	TextField	显示“Ion Ratio”(离子率)
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	显示最大值 在定量方法离群值设置对话框中分析物的离子比公差。
MQ_IS_Group_Name	TextField	显示内标组的名称。
MQ_IsRowHidden	TextField	显示在结果表中隐藏的行。

表 C-2 报告模板标签（续）

类型	字段类型	标签描述
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	显示在定量方法离群值设置对话框中计算浓度的下限值。
MQ_Outlier_Reasons	TextField	显示“离群值理由”。
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	显示“不对称因子”。
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	显示“基线 δ /峰高”。
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	显示“在 10% 处的结束时间”。
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	显示“在 5% 处的结束时间”。
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	显示“在基线附近的点”。
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	显示“在半峰高附近的点”。
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	显示“在 10% 处的开始时间”。
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	显示“在 5% 处的开始时间”。
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	显示“拖尾因子”。
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	显示“在 10% 处的峰宽”。
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	显示“在 5% 处的峰宽”。
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	显示在分析物组中定量子的“质量范围”。
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	显示在分析物组中定量子的“峰面积”。
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	显示在分析物组中定量子的“计算浓度”。
MQ_Report_Generation_Date	TextField	显示产生报告的日期，反映来自软件的培养物设置。
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	显示在定量方法离群值设置对话框中计算浓度的上限值。
Query_Name	TextField	在报告模板中引用的查询名称（如适用）。
Record_Modified	TextField	显示“已修改”。
Reporter_Template_Name	TextField	用于创建报告的报告模板的名称。
ResultTbl_CreateDate	TextField	显示创建结果表的日期。
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	显示用于处理结果表的处算法（例如 MQ4、SignalFinder1）。
ResultTbl_Name	TextField	显示结果表的文件名称。
ResultTbl_ProjName	TextField	显示结果表保存的项目名称。

表 C-2 报告模板标签 (续)

类型	字段类型	标签描述
Sample_Comment	TextField	与样品有关的意见。 显示“样品意见”。
Sample_Dilution_Factor	TextField	溶解样品的单位体积总数。 显示“稀释系数”。
Sample_File_Name	TextField	保存特定样品原始数据的数据文件的名称。 显示“原始文件名称”。
Sample_ID	TextField	对结果表中的每个样品或分析物，用户规定的、列出其特定 ID 的值。 显示“样品 ID”。
Sample_Index	TextField	显示“索引”。
Sample_Count	TextField	显示分析物总数。
Sample_InjectionVolume	TextField	如在获取方法中规定，当以原始样品进样时，在所用自动进样器中使用的进样体积。 显示“进样量”。
Sample_Instrument	TextField	显示从 wiff 文件摘录的、用于获取样品的仪器类型。
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	显示从 wiff 文件摘录的、用于获取样品的仪器序列号。
Sample_Name	TextField	当创建结果表时，用户规定的、对特定样品指定的名称。 显示“样品名称”。
Sample_Operator	TextField	在获取时登陆的用户。 显示“操作员姓名”。
Sample_Plate_Number	TextField	当获取样品时，所用自动进样器的样品平板的位置。 显示“平板编号”。
Sample_Rack_Number	TextField	当获取样品时，所用自动进样器的样品支架的位置。 显示“支架编号”。

表 C-2 报告模板标签 （续）

类型	字段类型	标签描述
Sample_Type	TextField	用户规定的、指明每次特定进样所用样品类型的值。 例如，空白、标准品等等。 显示“样品类型”。
Sample_Vial_Position	TextField	在自动进样器中，在用于确定哪些小瓶装 有样品的获取批准中规定的小瓶位置。 显示“小瓶编号”。
Sample_File_Full_Name	TextField	显示文件名称加完整路径。
Sample_Index_In_Wiff	TextField	显示在 wiff 文件中样品的顺序号，从 0 开始。
Sta_Accuracy	TextField	分析物峰的准确度，通过比较分析物实际 浓度与分析物计算浓度而确定。 显示“准确度”。
Sta_CV	TextField	显示条件方差百分率，指示计算浓度值与 平均浓度值偏离的程度（以百分率表 示）。 通过取标准差/平均值进行计算。
Sta_ExpectedConcent	TextField	分析物峰的预期浓度，由 Analyst® MD 软件以峰面积计算。 显示“实际浓度”。
Sta_Mean	TextField	显示计算浓度的均值（平均值），由 Analyst® MD 软件计算。
Sta_NumVal	TextField	显示进行统计的值数。 当计算平均值时 考虑多少样品。
Sta_QCAccuracy	TextField	如用户在样品类型栏中规定，通过比较质 控样品预期浓度与实际浓度而测定的准确 度。 显示“准确度”。
Sta_QCCV	TextField	显示条件方差百分率，指示计算浓度值与 平均浓度值偏离的程度（以百分率表 示）。 通过取标准差/平均值进行计算。 适用于质量控制样品。
Sta_QCExpectedConcent	TextField	如用户规定，质量控制样品的预期浓度。 显示质量控制样品的“实际浓度”。
Sta_QCMean	TextField	显示计算浓度的均值（平均值），由 Analyst® MD 软件为质量控制样本计算。

表 C-2 报告模板标签 （续）

类型	字段类型	标签描述
Sta_QCNumVal	TextField	显示当计算平均值时，质量控制样品浓度平均值考虑的值数。
Sta_QCStdDev	TextField	显示每个样品的浓度值的标准差。 标准差代表一个值集距离平均值的分散的量度变量。
Sta_StdDev	TextField	显示标准样品的标准差。 标准差代表一个值集距离平均值的分散的量度变量。
CUSTOM	TextField	显示结果表定制栏的值。

当执行定量质谱数据处理时，一定要确定某个峰是否重要，而“重要”通常是指“这个信号是否超过了背景噪声？”

通常峰高度要与无峰区域测量的背景噪声进行比较，这些地方的噪声通常以该范围数据点标准差的 1 倍或 3 倍进行估算。这种方法不甚理想的原因有：

- 它是主观的，因为噪声区域是手动选择的。
- 没有峰的背景区域可能不存在，或者该区域可能过窄，无法准确估计噪声。
- 峰位置处的噪声可能与选定噪声区域的噪声有很大不同。
- “1 倍或 3 倍”的系数也是主观的，而且不同权威人士给出的推荐也不同。
- 如果数据已经预先经过处理，明显的噪声可能会受到改变。比如，被平滑或被限制范围。

通过运用相对噪声 (R_n) 的概念，可以很容易找到一种简单的方法来计算任何数据点处的噪声，以便与测量得到的信号进行比较。这是一种实实在在且客观的量度，可以用来计算信噪比 S/N 以及评估和比较仪器及测定方法的性能。相对噪声的概念有很多用途，其中之一就是计算 S/N 。

基本算法如下：

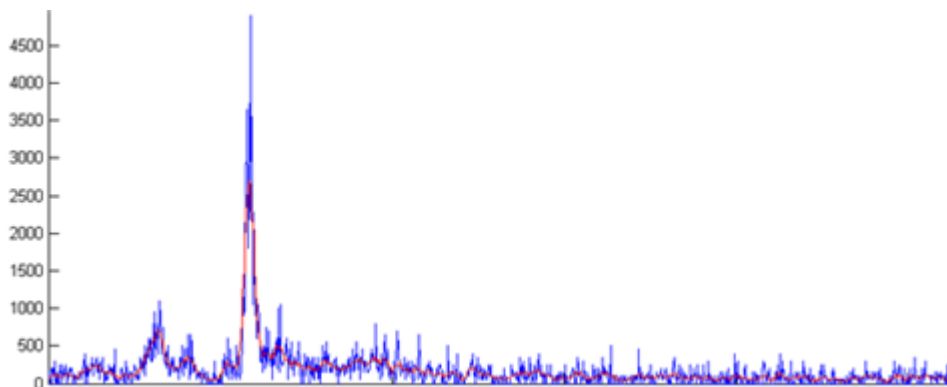
1. 设计一种噪声模型，使用户能够在数据点的基础信号水平给定的情况下，计算数据记录中任何点位置的预计噪声。

噪声模型可以从理论角度来确定，也可以通过对某个系统的实际测量来进行建模。对于脉冲计数检测器来说，信号的标准差，也就是预计噪声，是与信号的平方根成正比的，因而会随着信号变化。在其他系统中，有一个始终存在的“白色噪声”成分，它可能与某个和强度有关的成分结合在一起。

2. 要根据测量信号来估计基础信号。

它可以通过多种方式来实现，但最简单的方法是生成一个经过平滑的数据，如图 D-1 中所示。

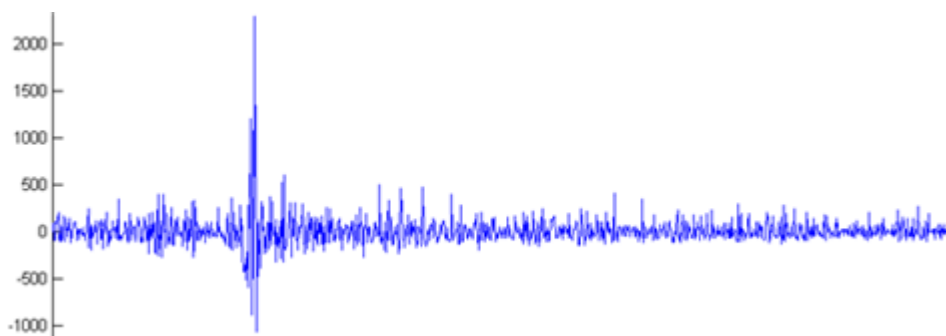
图 D-1 原始和平滑数据的叠加



3. 用所有点（峰和背景）测量数据范围内的实际噪声。

通过从每个数据点测得的信号中减去基础信号估计值，并从该点的原始信号中减去平滑信号，便可以得到结果。这就是所谓的 delta 噪声。Delta 噪声的范围基本上是恒定的，除了最大峰所在的位置，因为噪声要取决于信号，因而信号强的地方噪声也大。请参阅图 D-2。

图 D-2 每个数据点的 delta 噪声值图表



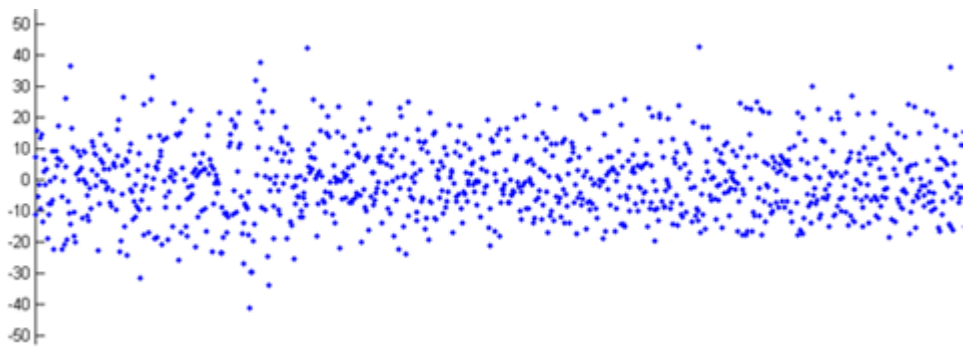
4. 在每一个数据点计算测量噪声与预计噪声的比率。

也就是说，在每一个数据点，我们都要用步骤 3 中测得的噪声值除以噪声模型的预测值（在本例中为强度的平方根）。如果噪声模型较好，就会生成一系列的值，其绝大部分都在如图 D-3 所示的极限范围内。图 D-3 还显示下图

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

注释： 它减小了 delta 噪声中的较大差异，从而产生了差异范围较小的数值集合。

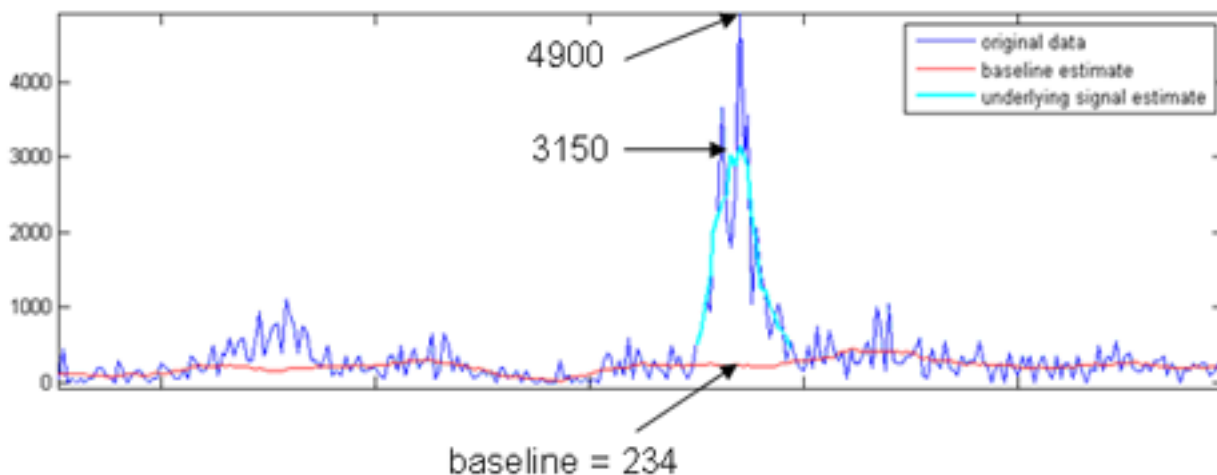
图 D-3 噪声模型



5. 计算比值的标准差。即 R_n ，是实际 δ 噪声和模型预测噪声之间最接近关系的预测值。在图 D-3 中，其结果为 9.5。

图 D-4 所示是如何用相对噪声计算 S/N 的一个例子。

图 D-4 原始数据、基础信号估计值和基线估计值的叠加



如前文所述：

$$\text{noise} = R_n \times \sqrt{(\text{baseline})}$$

在本例中：

$$\text{noise} = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

如果用峰的最高点作为信号，所得到的 S/N 为 34 (4900/145)，如果用平滑信号的高度，则 S/N 为 22 (3150/145)。

报告 S/N 时，MQ4 积分方法采用的是本文所述的程序，而且以峰的最高点为信号。因为 SignalFinder™ 积分算法是用模型来拟合峰，它所使用的是拟合轮廓的高度。这样得到的 S/N 较小。不过，这个值要更为准确，因为它受可能的噪声尖峰的影响较小。SignalFinder 积分算法还有一种更为复杂的基线估算方法，基于这两个原因，两种算法所报告的 S/N 值并不相同，尽管它们通常较为类似。

总而言之，相比以背景区域的标准差来估算噪声的常用方法，用相对噪声计算 S/N 的方法有以下优点：

- 主观性小，因为无需手动选择背景区域。
- 预测的 S/N 较为准确，即使色谱图上不存在无峰区域。
- 估算的基线及噪声靠近所关注的峰。这样会使得所报告的 S/N 值有很大差异，因为常用方法所选择的背景区可能比靠近峰的背景区噪声小。如前文所述，用相对噪声法计算得出的 S/N 比常用方法所得出的值更小。不过，它们要更加准确，而且更有用。请参阅图 D-4。

若要使 Signal / Noise（信噪比）列在 Results Table（结果表）中可见，请参阅[修改结果表中所显示的列](#) 页码 85。

使用 SignalFinder 积分算法时请注意信噪比

因为 SignalFinder™ 积分算法对信噪比的计算更精确（因此对 CV 预测也更精确），如果采用了 1-sigma 信噪比方法，就要根据实验室的经验数据适当降低标准操作规程（SOP）可接受的最小信噪比值。

每次只有一个窗格处于活动状态。活动窗格具有橙色边框，用户可以通过单击窗格内任何位置来激活一个窗格。许多菜单命令在活动窗格上运行。

在本部分中描述的工具栏图标出现在所有类型窗格的窗格特有工具栏中。其他每个窗格类型特有的图标也可以使用。

表 E-1 工具栏图标

图标	名称	描述
	New Results Table (新结果表)	打开 New Results Table wizard (新结果表向导)。
	Open (打开)	打开一个Results Table (结果表)。
	Save (保存)	保存任何打开的文件。
	Select Analyst Project (选择 Analyst 项目)	选择一个项目文件夹。
	Screen Lock (屏幕锁定)	锁定屏幕。只有当Analyst® MD软件处于混合模式以及开启了屏幕锁定功能时这个功能才能使用。
	Show Internal Standard with Analyte (显示内标和分析物)	显示 Results Table (结果表) 中当前选择的分析物以及相应内标物列 当选择了这个选项时，用户可以单击这个分析物，并查看这个分析物以及相应内标物。这与单击分析物，然后在按住 Ctrl的同时单击内标物（这样两者都可以被选中）相同。
	Find Component or Group (查找组分或组)	选择列表中与特定文本匹配的项目。
	Arranging Panes (布置窗格)	改变窗格的相对位置。单击一个窗格中的图标，然后将其拖动至第二个窗格的顶部、底部、左侧或右侧部分。根据光标释放的位置不同，第一个窗格相对于第二个窗格的位置改变。当拖动光标时，第二个窗格的一侧红色高亮，表示出第一个窗格将要放置的位置。
	Delete Pane (删除窗格)	删除窗格。如果删除了一个Results Table (结果表)，则其他相关窗格 (Peak Review (峰检查) 和 Calibration (校正)) 也会被删除，整个窗口关闭。

表 E-1 工具栏图标（续）




图标	名称	描述
	Toggles tab mode（切换选项卡模式）	使窗格最大化，充满这个窗口（反之亦然）。当窗口中有多个窗格时较为有用，可以使用户暂时集中到一个窗格上。 在缩放模式下，对于每一个窗格会有一个独立的选项卡出现在窗口顶部。通过单击恰当的选项卡来在窗格之间切换。通过第二次单击 Zoom Pane（缩放窗格）可以从缩放模式回到显示所有窗格的原始视图。单击两个状态之间的图标切换。
	Hide Pane（隐藏窗格）	隐藏窗格，从而窗口中的其他窗格可以填充可用空间。
	Show Hidden Panes（显示隐藏的窗格）	显示所有先前隐藏的窗格。

表 E-2 峰检查工具栏图标








图标	名称	描述
	显示前一页	显示前一组色谱图。该功能与按下向上或向左箭头键或者单击滚动栏中的向上箭头具有相同的作用。
	显示下一页	显示下一组色谱图。该功能与按下向下或向右箭头键或者单击滚动栏中的向下箭头具有相同的作用。
	显示前一样本	在峰检查窗格中向后滚动。这与以下操作具有相同作用：单击滚动栏中的向上箭头，直至不同于当前可见第一幅色谱图的首个样本显示。
	显示下一样本	滚动至下一样本。
	启动幻灯片式峰检查模式	启动幻灯片显示。首次使用时，Slide Show Options（幻灯片显示选项）对话框会打开。设置峰间延迟时间（秒）。要防止该对话框再次打开，请选择 Only show this dialog again if the shift key is down（只有按下 Shift 键才会再次显示该对话框）复选框。在 Peak Review（峰检查）窗格内的任何位置单击，以停止幻灯片显示。
	Peak Magnifier（峰放大器）	放大选定的峰。
	Peak Demagnifier（峰缩倍器）	将放大的峰恢复为原始大小。

表 E-2 峰检查工具栏图标（续）




图标	名称	描述
	Set Peak to 'Not Found'（将峰设为“未找到”）	<p>单击表示活动色谱图内没有峰。在有些情况下，如果实际上没有明显峰存在，则可能会对较小的噪声峰进行积分和报告。单击该图标可覆盖该行为。峰面积在 Results Table（结果表）中显示为 N/A。</p> <p>用户将峰标记为 Not Found（未找到）后，窗格左侧的找峰参数对色谱图而言不可用，因为它们未使用。再次单击该图标，以返回至自动模式。</p>
	启用手动积分模式	<p>单击进入手动积分模式。当软件处在手动积分模式时，在色谱图中拖动可指定要积分的准确区域。从首次点击光标的（时间、强度）点处开始积分，然后继续积分至光标释放点。再次单击该图标，以退出手动积分模式。</p> <p>用户对峰进行手动积分后，窗格左侧的找峰参数对色谱图而言不可用，因为它们未使用。再次单击该图标，以返回至自动模式。</p>
	Recalculate Peak Model（重新计算峰模型）	使用活动的色谱图重新计算峰模型并将其应用于此色谱图（仅限™积分算法）。

表 E-3 校准工具栏图标

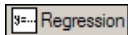
图标	名称	描述
	Edit Regression and Weighting（编辑回归和加权）	用于更改校准参数。这包括用于回归（面积或高度）以及回归类型和加权的实际参数。请参阅 回归方程 页码 119。

表 E-4 统计工具栏图标



图标	名称	描述
	从样本名称中删除拖尾索引	可以排列 Statistics Table（统计表），以便按照实际的浓度或样本名称对（给定分析物的）样本进行分组。按样本名称分组时，Remove Trailing Index from Sample Name（从样本名称中删除拖尾索引）选项可控制样本名称是否与分组顺序准确匹配，以及是否应删除短划线（-）之后的拖尾数字索引。例如，如果选择该选项，则样本 1 - 001 和样本 1 - 002 这两个样本名称将被归入一组；如果未选择该功能，则不会归为一组。
	样本分组	<p>该列表中的项目明确说明有关给定分析物的样本如何分组，以计算统计量。提供以下选项：</p> <ul style="list-style-type: none">• Group by Concentration for Standards（对标准物而言按浓度分组）：标准物样本按照实际浓度分组。• Group by Concentration for QCs（对质量对照品而言按浓度分组）：质量对照品样本按照实际浓度分组。• Group by Sample Name for Standards（对标准物而言按样本名称分组）：标准物重复样本按照 Sample Name（样本名称）字段进行分组。如前文所述，如果 Remove Trailing Index from Sample Name（从样本名称中删除拖尾索引）选项不使用，则样本名称必须准确匹配。否则，样本名称按照拖尾数字（后面带有一条短划线）进行区分。• Group by Sample Name for QCs（对质量对照品而言按样本名称分组）：与前一选项类似，但仅使用质量对照品类型的样本。• Group by Sample Name for All Samples（对所有样本而言按样本名称分组）：与前一选项相似，但所有样本都会使用。

表 E-4 统计工具栏图标（续）


图标	名称	描述
	Metric（量度）	<p>该列表中的项目可指定用于计算统计量的实际度量。提供以下选项：</p> <ul style="list-style-type: none"> Calculated Concentration（计算所得浓度）：使用 Results Table（结果表）的 Calculated Concentration（计算所得浓度）字段。 Area（面积）：使用 Results Table（结果表）的 Area（面积）字段。 Height（高度）：使用 Results Table（结果表）的 Height（高度）字段。 Calibration Y-Value：使用为分析物指定的回归参数。这是一种没有对应内标物的分析物的 Area（面积）或 Height（高度），或者一种的确使用了内标物的分析物 Area Ratio（面积比）或 Height Ratio（高度比）。

表 E-5 结果表工具栏图标









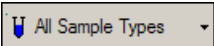






图标	工具提示	描述
	Displays the peak review（显示峰检查）	显示 Peak Review（色谱峰检查）窗格，以便检查峰值积分的质量并根据需要修改。
	Displays the side by side sample review（显示并列样本检查）	显示两个样本列表，以便用户最多可以选择 6 个样本来比较样本之间的峰响应。
	Displays the calibration curve（显示校准曲线）	显示校准曲线（只有在使用浓度已知的 Standard（标准）样本时，此方法才适用）。用户使用该窗格可检查校准并调整回归类型和加权。
	创建一个度量图表。	显示当前选定的一列或多列的度量图表。这些图表对于查找离群值非常有用。按钮最右边的菜单列出了任何已保存的图表设置。
	Displays the statistics pane（显示统计窗格）	显示统计窗格。该表显示每个浓度水平的平均浓度计算值、标准差和 CV。
	Sort selected column from smallest to largest（按从小到最大的顺序排序选择的列）	对 Results Table（结果表）进行排序，以使选定列中的数值按升序排列。该图标仅在单击列标题后可用。

表 E-5 结果表工具栏图标（续）

图标	工具提示	描述
	Sort selected column from largest to smallest（按从大到最小的顺序排序选择的列）	对 Results Table（结果表）进行排序，以使选定列中的数值按降序排列。该图标仅在单击列标题后可用。
	Removes any previous sorting（删除之前的排序）	如果表格已排序，则将 Results Table（结果表）恢复为默认顺序。
	仅显示选择的样本类型。	过滤 Results Table（结果表），从而仅显示特定类型的样本。该功能仅在存在已知浓度的 Standard（标准）样本且所有样本均非 Unknowns（未知物）的情况下才有用。
	Hide selected row(s)（隐藏选择的行）	<p>隐藏 Results Table（结果表）中选择的行。选择待隐藏的行，然后单击该图标。</p> <p>因为 Peak Review（色谱峰检查）窗格与 Results Table（结果表）同步，所以隐藏不需要检查的色谱峰行可加快检查过程。例如，用户可以根据 Quality（质量）列排序表，并且隐藏质量大于某些值（例如 0.8）的所有行。然后可以根据 Region Height（区高度）列排序表，并且隐藏具有较低值的所有行（以隐藏确定不存在色谱行的行）。结果是仅显示具有低质量但确实存在峰值的色谱峰。然后，用户可以在短时间内逐个浏览 Peak Review（色谱峰检查）窗格中的这些可见行，而不需要检查所有的色谱峰。</p>
	Show previously hidden row(s)（显示之前隐藏的行）	显示所有行。显示的行可能仍然受到 Sample Type Filter（样本类型过滤器）和 Components & Groups List（成分和组列表）选择项的约束。
	Show only outliers（仅显示离群值）	显示含有离群值的行。
	Go to next outlier（跳至下一个离群值）	找到结果表中的下一个离群值。
	锁定并保存	保存 Results Table（结果表）后将其锁定。除非文件未锁定，否则对 Results Table（结果表）所做的更改不会保存。
	检查并保存	检查 Results Table（结果表）后单击保存。如果 Results Table（结果表）为只读状态，该图标不可用。

注释： 当 MultiQuant™ MD软件被删除时，MultiQuant™ MD软件在 Analyst® MD软件中的安全项得以保留。安全许可在 Security Configuration（安全配置）对话框的 Roles（角色）选项卡中。

Preset Access（预设值使用权限）	描述
创建阶段文件	允许用户创建 Results Table（结果表）。
Create quantitation method（创建定量方法）	允许用户创建定量方法。
修改定量方法文件	允许用户修改位于 Analyst Data 文件夹项下的 Quantitation Methods 文件夹内的定量方法。
允许导出和创建未锁定的结果表报告	允许用户导出或创建未锁定的结果表报告。
保存时替换现有结果表	允许用户更新现有的 Results Tables（结果表），但不允许其用现有的 Results Table（结果表） 名称创建一个新的 Results Table（结果表）。 比如，如果已经创建了一个名为 RT1 的结果表，用户就不能用 RT1 这个名称创建一个新的结果表。 用户不能用一个现有的结果表名称给一个无标题的结果表命名。
更改默认定量方法积分算法	允许用户在 Integration Default（积分默认值）对话框中更改算法。 单击 Edit（编辑） > Project Integration Defaults（项目积分默认值）。
更改默认定量方法积分参数	允许用户在 Integration Default（积分默认值）对话框中更改算法默认参数。 Edit（编辑） > Project Integration Defaults（项目积分默认值）。
允许启用项目改峰警告	允许用户在 Edit（编辑）菜单中激活或暂停启用 Project Modified Peak Warning（项目改峰警告）选项的标记。
允许项目安全导出设置	启用该项后，文本文件中的数据在导出过程中会被加密。 设置一个用于解密的密码。
向结果表添加样本	允许用户添加样本。 单击 Process（过程） > Add Samples（添加样本）。
从结果表删除样本	允许用户删除选定样本。 单击 Process（过程） > Remove Selected Samples（删除选定样本）。

Preset Access (预设值使用权限)	描述
导出、导入或删除外部校准	<p>允许用户采用以下选择之一导出、导入或删除外部校准：</p> <ul style="list-style-type: none"> 单击 Process (过程) > ◆◆Export Calibration (导出外部校准)。 单击 Process (过程) > Import External Calibration (导入外部校准)。 单击 Process (过程) > Remove External Calibration (删除外部校准)。
Change Audit Map settings (更改审核图设置)	允许用户修改项目审核图，并修改审核图定义。单击 Audit Trail (审核记录) > Audit Map Manager (审核图管理器)。
修改样本名称	允许用户修改 Results Table (结果表) 内的样本名称。
修改样本类型	允许用户修改 Results Table (结果表) 内的样本类型 [Standard (标准物)、QC、Unknown (未知)]。
修改样本编号	允许用户修改 Results Table (结果表) 内的样本编号。
修改实际浓度	允许用户修改 Results Table (结果表) 内的 Standard (标准物) 和 QC 实际浓度。
修改稀释系数	允许用户修改 Results Table (结果表) 内的稀释系数。
修改评注字段	<p>允许用户修改评注字段：</p> <ul style="list-style-type: none"> Component Comment (成分评注) IS Comment (IS 评注) IS Peak Comment (IS 峰评注) Peak Comment (峰评注) Sample Comments (样本评注)
允许手动积分	允许用户启用 Peak Review (色谱峰检查) 窗格内的手动积分模式。如果启用许可，则必须同时启用 Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram (修改单个色谱图的结果表积分参数) 许可。如果 Modify Results Table integration parameters (修改结果表积分参数) 已启用，则可以禁用 Allow manual integration (允许手动积分) 命令。
允许将峰设置为未找到	允许用户使用 Set peak to not found (将峰设为未找到) 功能。若要执行该动作，可在 Peak Review (色谱峰检查) 窗格中单击右键。
将峰加入结果表或从结果表中排除	允许用户将色谱峰加入结果表、统计表和校准曲线，或者从中排除色谱峰。

Preset Access（预设值使用权限）	描述
修改回归设置用于拟合和加权	允许用户在使用 Modify Results Table Method（修改结果表方法）功能和使用 New Quantitation Method（新建定量方法）引导程序时修改校准曲线窗格中的回归设置。
修改单个色谱图的结果表积分参数	允许用户修改单个色谱图。
修改结果表成分的定量方法	允许用户将改动从单个色谱图应用到样本成分。 如果用户希望更新某个改动，然后将其应用到样本成分，就必须拥有该许可，并且单个色谱图的 Modify Results Table integration parameters（修改结果表积分参数）许可已启用。
在结果表中创建、使用或导出度量图表	允许用户在结果表内创建和使用度量图 [Metric Plot（度量图表）按钮已启用] 或导出度量图。单击 File（文件）> Export（导出）。
设置峰检查标题格式	允许用户在 Peak Review（色谱峰检查）中修改 Peak Review Title Format（峰检查标题格式）。若要执行该动作，可在 Peak Review（色谱峰检查）窗格中单击右键。
添加、重命名或修改自定义列	允许用户添加、重命名或修改某个自定义列。即使没有改许可，用户仍可以运行查询，这样就会自动创建自定义列。 如果该许可被禁用，那么 Remove custom column（删除自定义列）许可也必须被禁用。如果已经启用了 Add, Rename, or Modify custom column（添加、重命名或修改自定义列）许可，就可以禁用 Remove custom column（删除自定义列）。
删除自定义列	允许用户删除 Results Table（结果表）内的自定义列。
修改结果表列设置	允许用户修改结果表内的结果表列设置。
将列设置保存为项目默认值	允许用户将列设置应用到项目。
锁定并保存结果表	允许用户锁定并保存一个 Results Table（结果表）。
解锁并保存结果表	允许用户解锁并保存一个 Results Table（结果表）。
检查并保存结果表	允许用户检查并保存 Results Table（结果表）。
Edit Report Template（编辑报告模板）	允许用户编辑报告模板。
Transfer to LIMS（传送至 LIMS）	允许用户将已保存和锁定的结果表传送到 LIMS。该事件将留在审核记录中。

安全设置

表 F-1 中包含了针对用户角色的推荐安全设置。

表 F-1 以用户角色为准的安全设置

安全设置	管理员	超级用户	Analyst	检查员
创建阶段文件	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
创建定量方法	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
修改定量方法文件	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
允许导出和创建未锁定的结果表报告	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
保存时替换现有结果表	使用权限	使用权限	无使用权限	使用权限
更改默认定量方法积分算法	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
更改默认定量方法积分参数	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
允许启用项目改峰警告	使用权限	无使用权限	无使用权限	无使用权限
允许项目安全导出设置	使用权限	无使用权限	无使用权限	无使用权限
向结果表添加样本	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
从结果表删除样本	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
修改样本名称	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
修改样本类型	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
修改样本编号	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
修改实际浓度	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
修改稀释系数	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
修改评注字段	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
允许手动积分	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
允许将峰设置为未找到	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
将峰加入结果表或从结果表中排除	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
修改回归设置用于拟合和加权	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
修改单个色谱图的结果表积分参数	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限

表 F-1 以用户角色为准的安全设置（续）

安全设置	管理员	超级用户	Analyst	检查员
修改结果表成分的定量方法	使用权限	使用权限	使用权限	无使用权限
在结果表中创建、使用或导出度量图表	使用权限	使用权限	使用权限	使用权限
设置峰检查标题格式	使用权限	无使用权限	无使用权限	无使用权限
添加、重命名或修改自定义列	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
删除自定义列	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
修改结果表列设置	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
将列设置保存为项目默认值	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
锁定并保存结果表	使用权限	使用权限	使用权限	使用权限
解锁并保存结果表	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
检查并保存结果表	使用权限	使用权限	无使用权限	使用权限
修改报告模板	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
传送至 LIMS（亦控制“开始向 Watson LIMS 传送”）	使用权限	使用权限	无使用权限	使用权限
导出、导入或删除外部校准	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限
更改审核图设置	使用权限	使用权限	无使用权限	无使用权限

修订历史记录

版本	更改原因	日期
A	文件首次发布。	2013 年 9 月
B	更新 File Menu（文件菜单）部分。更新 Audit Trail Menu（审核记录菜单）部分。更新 Results Table Columns（结果表列）表格。更新 Reports（报告）部分。	2015 年 1 月
C	在封面页上将 SCIEX Diagnostics 标识更改为 SCIEX Diagnostics。更新版权页并根据需要将 AB Sciex 改为 SCIEX。将 Windows 10 添加到“软件”一章的 Introduction（介绍）一节。更新了“联系我们”部分。将专题标题 Audit Map Manager（审核图管理器）改为 About Audit Maps（关于审核图）。更新 Internal Standards Submenu（内部标准子菜单）部分中 Set Last Component of Group as IS（将组内的最后一种成分设为 IS）菜单选项的说明。将 Update Retention Time Dialog（更新保留时间对话框）部分中的“total area percentage parameter（总面积百分比参数）”更换为“retention time（保留时间）”。更新 SignalFinder Integration Algorithm Parameters（SignalFinder 积分算法参数）部分中 Expected RT（预计保留时间）的说明。将 Windows 10 添加到 Create Reports（创建报告）部分。更新 Report Template Tags（报告模板标签）部分中的内容。更改了图 7-3 中的截图。对内容应用了新模板，从而导致内容中发生一些编辑更改。删除对 Windows XP 的所有引用。	2017 年 6 月
D	在版权页上更新生产地址。	2019 年1 月