



# 解析度最佳化(Resolution Optimization)及質量校正(Calibration)

這裡介紹自動及手動質量校正,所有的校正動作都在"API Instrument "的 project 下完成.

### 手動校正及解析度最佳化(Manual Calibration and Resolution Optimization):

1 a	A	1 =1X =	
	nt conjugación d'Ana citalian alla conf el conjugación alla de ana de an	Tex Based Table Tex Based of the Based Table Based on Proceed Table Based on Proceed Table Date	

1-1. 選定"API instrument" Project. 啓動 MassSpecOnly 的硬體配置(hardware profile).

1. 在瀏覽工具列中單擊 Manual Tuning, 此時應該可以聽到 Exhaust 氣體流動的聲音並開啓一個預 設的取得方法(Acquisition Method).

2. 開 啓 相 對 應 的 取 得 方 法 (.dam) (如 Q1PosPPGxxxxx.dam, Q1NegPPGxxxxx.dam, Q3PosPPGxxxxx.dam or Q3NegPPGxxxxx.dam; xxxxx 代表日期).

3. 相對應的取得方法會出現於 Tune Method Editor 的視窗中.





1-2. 大概瀏覽一下各個參數的設定值(包含於各個標籤中,如 Gas, Compound, Resolution 及 Detector). 安裝工程師已將這些參數值設定為預設值. [請注意所參考的視窗為 API 2000]. 取得方法預設為十次加乘掃描(10 MCA Scans). 針對 API 1xx/3xx/2000/3000 的負離子掃描[Negative mode] 使用 PPG 3000 校正溶液. 對 API 1xx/3xx/2000 的正離子掃描 [Positive mode]使用 PPG Standard (or PPG 1000/2000) 校正溶液. 對 API 3000 則使用十倍稀釋的 PPG Standard (PPG 1000/2000) 校正溶液. 對 API 3000 則使用十倍稀釋的 PPG Standard (PPG 1000/2000) 校正溶液. {稀釋溶液的配法請參照原版操作手冊.}

以注射針吸取數百微升的校正溶液至於注射針幫浦(syringe pump)上, 接著編輯注射針幫浦的設定; 包括注射針的直徑及所需求的流速(正離子掃描為 5μL/min 負離子掃描為 10μL/min)並啓動幫浦 使其推動標準校正溶液至離子源. [請注意, 由於管道的長短不同以及管道中並無校正溶液,因此需 要等待數分鐘才會有訊號出現]

a Analyst		880
Die Des Ume House Dach if	figher Binder Dear 1940	
1248 B 1 2 14	State Frank B Bernster B #85708	
HHUMAND	AUARWALLET T WORA	
Line Conjunt A Inselp - A Inselp - A Inselp - A Inselp - A Inselp - A Inselp - A Ountaine Conjuntio - A Ountaine Conju	Image: International Value of the Control Value of Contro	
	No. of Contract of	Pages 1
2010 1 20 1 20 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	A general and the second of general	COR DOWN

1-3. 單擊 *Start* 以取得 10 scans MCA (注意 MCA 模式的啓動在 *Advanced MS* 標籤下). 在右下方單及 右鍵並點選 Open Files, 類似以下的視窗會被打開(此為 API2000).



單擊任一個質譜圖後單擊 Calibrate from Spectrum, 'Mass Calibration Options'的視窗會出現.

Mass Calibration Option	×
Standard: PPG's Pos.	×
Instrument 101 Resolution 1	Jnit Polarity. Positive
Peak Search Parameters: Search Range: 2.00 (amu) Threshold: 200 (cps) Peak Width Al: 50 (% max)	Reference           59.050           175.133           394.296           906.673           1254.925           1545.134           2010.469
Start	Cancel

檢查視窗中的參數是否與上述視窗相同[請注意 API2000 的掃描參數不包含 2242.637 以及所有的 校正質量參數不包含 384.296 但包含 616.464]. 選擇適當的質量參考檔案[Reference File]. 極性,解 析度以及所掃描的四極桿均會自動的設定.

Nan	ne: PPGs Po	s. Calibration Ref.		B	-
	Mass (amu)	Intensity (cps)	#Charges	Use	
188	59.050	12701500.000	1	N	<u> </u>
2	175.133	43870000.000	1	R	
3	326.254	0.000	1		
4	384.296	0.000	1		
5	600.380	0.000	1		
6	616.464	11953600.000	1	A	
7	906.673	45422300.000	1	R	
8	1196.883	0.000	1		
9	1254.925	14444900.000	1	R	
10	1545.134	4156000.000	1		
11	1778.302	0.000	1		
12	1836.344	0.000	1	A	
13	2010.469	5980000.000	1	R	
14	2242.637	3000000.000	1		
Fo	Mass Depend	dent Parameter Op	timization		
ι	ow Mass: 59	.050 (amu)	High Mass:	2010.469	(amu)

1-4. 單擊 Start 以進行質量校正,此動作繪產生兩個圖表視窗. 一為文字敘述,請注意其斜率(Slope)應該 相差不多,大約為 18 或 19 左右,可以將之關閉. 另依圖表如下圖



最上圖表示掃描結果與上次校正的質量差距. 圖中顯示此次所有 PPG 離子掃描的半高寬. 圖下則 顯示與上次校正結果強度改變的百分比.

所需的解析度[半高寬]應介於 0.6 至 0.8 間{API3000 的高分子量 2242.637 則介於 0.6 至 0.85 間}, 而質量的準確度應介於{-0.1 至+0.1}之間. 若有偏移則單擊"Replace the calibration" 或 "Update the calibration".

1-5. 有時解析度會超出範圍,此時手動調整是需要的. 關閉質量校正視窗回到 Manual Tuning 的畫面下. 點選 Resolution 的標籤,找到並單擊"Advanced" 鍵. The 解析度表{Resolution Table}呈現標準 PPG 質量以及其相對的 DC offsets. The offset 影響軸向的離子能量{axial ion energy}以及解析度. OFFSET 值越高則解析度越好而感度[sensitivity, intensity]越低,反之,OFFSET 值越低則解析度越 差而感度越好. 重複調整 OFFSET 值直到解析度落於標準以內.





# 以連續灌流的方式手動找到化合物最佳條件的方法

# (Manual Optimization for Compounds by Infusion)

此方法的最終目的在於設立一個 MRM 的取得方法.

1.1 打開 Manual Tuning.

1.4

- 以注射針吸取樣品並設定注射針幫浦. 樣品濃度大約為 1μg/mL {對 API-2000 而言}或 100ng/ml {對 API-3000 而言}. 調整 TurboIonSpray 離子源以取得最佳的感度.
- 1.3 做一次 Q1 全掃描以確定所要偵測的離子是被"看到"的. 鍵入所需的質量及時間並做一次 Q1, 10 scans MCA 掃描.

可以用 Q1POSPPG 的方法作為起始的方法.對一般的化合物而言, DP = 50; FP = 250 可以作為 起點, 而對較易碎的化合物而言可以用較低的 DP (35) 作為起始點. 單擊 Start 開始 Q1 掃描.

Note: 你也可以用"Acquire"以特定檔名儲存所掃描的圖譜. 否則,任何在 Manual Tuning 下產生的圖譜均被暫存於 API Instrument Project 下的 Tuning Cache 子目錄.

	Type Michael Libba 12 W. Using DecaMages (V) Decame (August August August August August August August August Au	
and companies inter-Conjunction of Conjunction and Conjunction and Conjunction and Conjunction and Conjunction conjunction from conjunction from conjunction conjunction from conjunction from co	Image:         Image:<	
Tennes Letters Retervited in head ( gas		



- 1.5 <u>檢查穩定度(Stability Check).</u> 若所有想觀察的離子都出現在 Q1 scan, 則設定一個 Q1 SIM (Selected Ion Monitoring) 掃描{在 Scan Type 下選擇 Q1 Multiple ions }. 鍵入適當的 m/z 並個別給予 暫留時間[dwell time] 200ms. 做一次 2.0 分鐘的掃描.
- 1.6 <u>檢查訊號是否穩定及強度是否足夠.</u>在 TIC 或 XIC 圖中, 右擊並點選 Open File 以觀察訊號的穩

Tenden 2 Tenden 2 Tenden 3 Tenden 3 Tenden 4 Tenden 4 Tenden 5 Tenden		
THE BALLET	• · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	

定與否. 一般而言, 訊號強度應在 2e5 至 1e6 之間. 訊號強度低於 15%, 則應做訊號強度的最佳化. \*對 API 2000 或 365, 最佳化的步驟為按順序 Ramping : DP, FP, DP, FP, EP, CEP, CE, and CXP.

ee man Dings war waar bank an angele maar bank an angele maar bank angele	

\*對 API 3000, 最佳化的步驟為按順序 Ramping: DP, FP, DP, FP, EP (optional), CE and CXP.

1.7 最佳化 Pre-Q2 的電壓. 最佳化包括 Ramping 在特定範圍的各個參數以觀察最佳的訊號. 單擊"

Edit Ramp". 在 Ramp Parameter Settings Ramp Parameter Settings 的視 Υ× 窗中,選擇所需要的 參數{如 DP}並給予適當的 Parameter Declustering Potential 範圍(start/stop)或增 減跳動電壓. 完成後單擊 OK Start. 0.0 Ivalid parameter 是否被勾選. 單 並 汴 意 ramp 201.0 Stop: (valts) 墼 Start 以開始 Ramping. 1.0 Step. Ivalta Cancel **DK** 



Analyst 中文操作手册

右擊 TIC 或 XIC 圖並點選 Open File 以觀察哪一個電壓值最佳並將之輸入以取代原有的值. 重複此步驟以取得所有參數的最佳值:

API 2000/365: DP, FP, DP, FP, EP, CEP API 3000: DP, FP, DP, FP, EP



#### Note: DP 及 FP 需要 Ramp 兩次因爲他們會彼此影響.

#### FP (Focusing Potential) Ramp:

	US FRACESSIT PERAL	
inen Senen Conference Reservices Conference Reservices Conference Reservices Conference Reservices Reservice	Description         Description <thdescription< th=""> <thdescription< th=""></thdescription<></thdescription<>	
nan hungsoorth dataan mar laadantorriyant famaa laada laar	The second secon	



#### **EP** (Entrance Potential) Ramp:

A locate in the second se	Internet Annual Constraint Annual Provide Person Provide Person P	
Naci Sukettyi Nati Usingkuretti Indones Reali Reali Tanak Tana	Harris Harris	
	The second secon	

**CEP** (Collision Cell Entrance Potential, API 2000) Ramp:

Antonio Al Transfer Conference Al Antonio Conference Al Antonio Conference Al Antonio Conference Al Antonio Conference Al Antonio Conference Al Antonio Conference	Name         Data         Data <thdata< th="">         Data         Data         <thd< th=""><th></th></thd<></thdata<>	
North North Constraint States North Constraint States North Constraint States Sta		

在最佳化上述的參數後,儲存取得方法.

- 1.8 **CE 及 CXP 的最佳化.** 選擇 *Product Ion Scan* (子離子掃描), 在 **Product of** 中鍵入母離子的質荷比, 設定掃描範圍由最低{30}到母離子的質荷比加上 10 至 40amu; dwell time =3 sec. 做一次 10 scans MCA.
- 1.9 要獲得好的碎片分佈, Collision Energy (CE)應該被 Ramping. 高的碰撞能量可以造成更多小的碎片,反之較小的碰撞能量則導致較大的碎片離子.

#### 1.10 重複 Product Ion Scan.

1.11 由母離子掃描圖譜中, 選出三個最強的碎片離子. 在 Tune Method Editor 視窗中, 選擇 MRM 掃描.

an yan genan jen Dagi i - D			-	
All D. All Co. M. All All Company of the second and Company of the second and Company of the second All Company of the second and Company of the second	The second secon	Anno Internet		
Tanganet Diethend k Herber obged ny fassiet Lake				<b>T.T</b>
		18.145		

在Q1 鍵入母離子的質荷比在Q3 鍵入子離子的質荷比, 暫留時間[dwell time]為200 msec.

用先前決定的參數加上 CE; CEP.

1.12 最佳化 CE 後隨之調整 Collision Cell Exit Potential (CXP).

#### **CE (Collision Energy) Ramp:**





#### 在灰色區右擊滑鼠並點選 CE,分別鍵入個別最佳的 CE 值.

Image: Section Control	and the second second second	- 3 00 3 #+9708	
Image: control of the second secon	·····································	A D A D A D A D A D A D A D A D A D A D	
	Contain and North contained (a) An according to the (b) A transfer of possible (c) A transfer of possible (c		

#### 1.13 CXP ramp.

#### **CXP** (Collision Cell Exit Potential) Ramp:



個別鍵入最佳的 CXP 值. 儲存取得方法. 重複 CE 及 CXP Ramp, 最強的子離子/母離子對即可被用來作為 LC/MS/MS 的分析用.

# 手動 MS/MS 的設定及圖譜的取得

# Manual MS/MS Setup and Data Acquisition

這個步驟描述如何以手動方式設定 MSMS 的實驗,包括子離子掃描(Product Ion Scan), 母離子掃描 (Precursor Ion Scan), 或中性丟失(Neutral Loss Scan)實驗. 可以混合大約四種帶有常見的碎片離子的化合物來做練習. (配製四種化合物(濃度各為 lng/μL) 1mL.)

## 1. Q1 Single-Stage MS 實驗:

以注射針吸取足量的樣品至於注射針幫浦上並啓動幫浦(流速 5µL/min). 選擇 Q1 scan. 以下為建議的氣 體設定值: Neb/Gas1 - 8 (API3000)或 25 (API2000), Turbo/Gas2 - off, Temp – off, ISV – 預設(5500). 輸入 包含所欲知的化合物質量的掃描範圍;掃描時間為 5sec. 在 Advanced MS 標籤下選擇 Fast Profile;Step 為 0.2 並點選 MCA. 輸入 DP=40, FP=250. 檢查離子源噴頭的位置是否妥當. 單擊 Acquire 做一個 Q1 掃描.

實驗範例 M/Z 251.2, 265.0, 279.2 and 311.2. 做一次子離子掃描來尋找已支的碎片離子.





## 2. 子離子掃描(Product Ion Scan):

在 scan type 下選擇 **Product Ion Scan**. 檢查離子源的各項條件及參數値設定是否與 Q1 掃描相同. 設定與 Q1 掃描相同的 DP, FP 值. 在 **Products Of** 中鍵入母離子的質荷比(m/z), 然後設定比母離子質量數略高的 掃描範圍(約大過母離子 10 ~ 40amu). 到 Resolution 標籤下選定 Q1 為 **Low Resolution**. 做一次 20scans 的 掃描. 調整 Collision Energy (**CE**) 以獲得較好的碎片離子分佈.







### **Ramped CE Product Ion:**

Ramp Param	neter Settings	? ×
Parameter:	Collision Energy	×
Start:	25 (volts)	
Stop:	61 (volts)	
Step:	2.0 (volts)	
	OK Cancel	





## 3. 母離子掃描(Precursor Ion Scanning):

在 *Scan Type* 下選擇 *Precursor Ion Scan*.所有離子源及氣體參數和先前的實驗相同. 輸入最佳的 CE 值 並在 Resolution 標籤下設定 Q1 的解析度為 Unit 而 Q3 的解析度為 Low. 開始掃描並儲存. 母離子掃描在 尋找中間代謝產物的實驗上非常有用.

## 4. 中性丟失(Neutral Loss Scan):

中性丟失是找尋藉由失去中性的碎片而產生的帶電碎片離子.常見的例子是失去 CO<sub>2</sub> 分子或其他不帶電的碎片.在這個實驗中 155 是不帶電的碎片.用手動的 CE 子離子掃描來獲得最強的碎片,藉以找到中性



離子.



下圖所顯示的為 156.2 的碎片 CE 為 30. 調回 Neutral Loss Scan 並輸入最佳的 CE 值, 然後設定和母離子掃描相同的解析度. 輸入 Loss Of 155.0,

Analyst  Tana Mathind Eds	No O YE Scice Den/Vroech/Exemple/Acquintue Methodr/ActTens.dow)	12
INCOME IN PROV		
25-+++6.05	CTT - STATE - I PARKAGE ALS - FILLING	
	ALDE TATT HOUSE	
Verballer Verball     Contigent     Contigent     Contigent     Contigent     Contigent     Property Template Contigentian     Theorem Template Contigentian     Contigent of Contigentian     Contigentian		Re 1920
doctore and e		* *

#### 然後開始掃描.

上圖顯示任何可以產生 155.0 中性碎片的化合物的圖譜.

antipet A Security Compression	Toolafta Torpert Standard Denne	tanlare ( manual d' herbonanter)
Angor Yanging Litra Angor Yanging Litra United Odmonton United Odmonton Sector Yangi Set Angol Ken Meter National Yangi Ken Yangi Ken Meter Angol Yangi Ken Meter Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken Yangi Ken	Detroining Parente (24) 21 2 Proving Parente (24) 21 2 Provins Parente (25) 21 2 Colours Parente (25) 21 2 Colours Decig (25) 21 2	New year         New year         New year         New year         New year           Fining         * Possion         Total (100)         100)           Fining         * Possion         100)         100)
new Saekorvanc Rean Dank Tata		



# 藉由流動注射的方式手動最佳化離子源

## **Manual Source Optimization by Flow Injection**

- 1.14 設定 HPLC 幫浦並連結 autosampler 及質譜但並不連結管柱.
- 1.15 單擊 *Manual Tuning* 以打開一個空白的取得方法. 溶劑建議的流速為 100 到 500 μL/min. 鍵入 Turbo Heater 的溫度由 325 到 450 °C. 設定起始的 Gas2 {4000 到 8000 在 API 1xx/3xx 或 35-80 在 API 2000}.
- 1.16 啓動 HPLC pumps 並設定溶劑組成在 10 到 20%. 調整 Turbo Gas 的設定值使得 Curtain Plate 尚可 觀察的到微濕的狀態並最佳化 SN 比. 確定讓系統溫機至少 20 分鐘. 手動設定自動進樣器使得每 次進樣的量約為 500 pg (總量, 100 pg for API 3000). 設定一個 40 分鐘的掃描實驗. 每次打三針以



建立再現性及系統的平衡.

- 1.17 在每個隨後的進樣間, 改變離子源的參數以決定每個最佳化的設定. 離子源的參數大大的根據 HPLC 溶劑急流速的不同而不同, 但 CAD Gas 及 Ion Spray Voltage 例外. CAD Gas 隨著化性的不 同而異. 而 IS Voltage 則是有時會因化性而異因此必須要再確定.
- 1.18 首先, 調整 Nebulizer Gas 一個單位一個單位的調直到達到最高的 SN 比(for API 2000 values of 5 psi.). 其次, 調整 Curtain Gas 一個單位一個單位的調(5 psi. for the API 2000)直到約 3~5% 強度降低 被觀察到. 如果再現性比感度更被要求的話,設定較高的 Curtain Gas 不失為一個好方法. 最後, 猶 預設值上上下下調整 IS Voltage,每次以 100 為單位直到達到最高的 SN 比.
- 1.19 再次確定 DP,因為在灌流(infusion)及 HPLC 的條件下 DP 會有些微的不同.許多離子源的參數有些相互依存性.在最後的程序中,輕微的再調整 Nebulizer Gas 也會改善 SN 比.
- 1.20 注意 API1xx / 3xx 噴頭 Spray 過熱的問題. 如果霧化電極(Nebulizer Electrode)開始過熱, 噴頭便開 始快速的噴發而造成不穩定的基線(baseline). 調整噴頭的位置使其遠離 Turbo Gas 的噴流. 不管 在任何離子源, 降低溫度都可以有效的預防這個問題.







# 取得方法與批次方法 Acquisition Method and Batch Method:

1.1 <u>設定取得(Setup for Acquire).</u> 在離子源調整好及存好取得方法後, 關閉所有於 Manual Tuning 中開啓的視窗. 將系統切換至待命狀態(Stand-by mode). 在硬體組態中(Hardware Configure), 停止 MassSpecOnly 組態的使用並啓動另一個包含自動進樣器(auto-sampler)和 HPLC 幫浦的硬體組態

後將視窗關閉.

- 1.2 在瀏覽列中單擊 得模式 (Acquire 啓先前最佳化的 及右鍵以加入所
- 1.3
   作成完整的

   complete
   LC-MS

   頂端設定同步模
   為

   LC Sync
   以確

   單 擊
   Mass



Acquire 以啓動軟體中的取 Mode). 在 File→Open 以開 取得方法. 在取得方法中單 需要的裝置.

<u>LCMS 方法(Construct a</u> <u>Method)</u>, 單擊取得方法的 式 (Synchronization Mode) 定 LC 及 MS 可以同步啓動. Spectrometerr 以檢查先前

所存的取得方法並輸入跑整個 LC 方法的總時間但並不包含 LC 的清洗及平衡的時間. 若想加入



額外的實驗區間(periods)或 循環的重複掃描實驗(looped), 只需要在 MS 或 period 上右 擊滑鼠並選擇 Add 即可.





數.

1.5 單擊 *Pump* 並輸入適當的梯度方法(gradient method). 請注意 *Total Time* 那一行所代表的時間不是整個梯度的時間而是就執行某一個溶劑混合比例的時間. 你也可以單擊 *Show Graph* 來觀察整個



梯度的方法.

1.6 檢視整個取得方法並將之存成最終的取得方法.注意所有取得方法的副檔名為\*.dam.如果設定的取得方法有錯誤,則 Analyst 將不允許會讓你儲存取得方法.錯誤訊息會是"*acquisition method error*."



2.1 建立取得批次(Build Acquisition Batch). 雙擊 Build Acquisition Batch 以打開一個空白的批次視窗. 首先,選擇先前所存的取得方法,然後單擊 Quick Quant 以進入定量(quantitation)的訊息視窗. 在分析物(Analytes)的部分,在 Q1/Q3 下單擊滑鼠以選定分析物 MRM 的母離子/子離子對. 在 Name 那一行下為每一個離子對命名. 如果是同時使用多個實驗區間的實驗,則拉下 Data Source 並選擇適當的一個. 同時,鍵入適當的 Smooths 數. 在內標準(Internal Standards)的視窗中選擇任 何內標準的 MRM 離子對(I.S. MRM pairs)並給予適當的的名字. 單擊 OK 並為快速定量方法 (Quick Quant. Method).

ata i	source: [Period 17 Expt. 1	▲ Numbe	r or smooths: 1
aw	Name	Internal Standard	Q1/Q3
	Analyte Compound A	INTERNAL_STANDARD	279.0 / 92.1
	Analyte Compound B	INTERNAL_STANDARD	265.1 / 91.9
	Analyte Compound C	INTERNAL_STANDARD	311.2/156.0
			TIC
			279.0 / 92.1
em	al Standards		265.1 / 91.9 311.2 / 156.0 251.1 / 158.0
	Name	Q1/Q3 🔺	
	INTERNAL_STANDARD	251.1 / 158.0	
		23	
		-	

- 2.2 鍵入批次任務名 set name. 這將會是整群樣品的名字. 原則上命名以獨一無二及容易辨識爲主.
- 2.3 選擇已建立的 Quick Quant. 方法.
- 2.4 單擊 Add Set 後單擊加入樣品 Samples)以打開加入樣品的視窗. (Samples)及資料檔案名(Data file 首可以在此加上. 瀏覽(Browse)的 你將索取得的資料儲存於特定的 輸入樣品的總數後單擊 OK.

dd Sample	×
Prefix:	Sample Sample number: IF Number of digits: 3
Data file Prefix:	Data Set name: 17
Sub Folder:	Browse
New samples Number:	jan
	OK. Cancel

(Add 給 樣 品 name)的字

選向允許 子目錄中. 2.5 再來進入 Location 的標籤中以輸入樣品在自動進樣器中的位置. 選擇正確的自動進樣器並右擊大片白色的區域, 然後選擇正確的樣品盤. 雙左擊白色的區域, 此時對應於樣品盤上的位置便會顯示出來. 每個圓形的區域及代表每個樣品所可以放置的位置. 你可以單擊所放置樣品的位置,白色圓形的地方便會以紅色以及數字取代, 同時你也可以藉由點選第一個樣品位置後, 按住 Shift 鍵並點選最後一個樣品位置而達到自動填滿的目的. 在 autosampler 字的下方有兩個按鍵提供不同填滿的樣式. "X"按鍵允許你刪除所設定的樣品位置. 若同一個樣品要重複進樣, 你只需要按住 Ctrl 鍵並以滑鼠左擊同一個樣品位置即可.



- 2.6 回到 Sample 標籤已確定樣品的位置都被填上.
- 2.7 進行定量(*Quantitation*)的標籤, 填滿樣品的形式及濃度. 在 *Quant Type* 使用下拉式目錄以選擇標 準品(Standard), 盲目試驗(Blank), 品管控制(QC), 雙盲試驗(Double Blank) 或未知樣品(Unknown).

and an even of the second carries of the second s			-104 165
Bill You State Jult Light	n Firsten Inda 1946		alf A
ECRAL GR	* Acquire Hode 🔳 💼 🖬 SUUF_MICC		
	H H H H H H H H H H H H H	Contraction of the second s	
int C			
Aguna Samph	ie Lonatons Gamminter Salme		
inter the			
eduar Colesten	ET)	+ Gart Hebot Sant	
of Temple Editor	Sample Same Gand Some BUILDER, S. 475	a rate   MAR rate   Mar rate	
	Sergedot Ob dars (0.00000 (0.00	000 0.00000 0.00000	
1	Langedox Stansaul 805.008008 0.305	130 0.000-30 0.000-30	
	Servicia Incident All college (12)	0.120000 (0.120000 (0.120000	
100 S	Sargiel06 Stantani 808.008008 0.540	0.540800 0.540800	
100	Sangiel00 Standard 008.008008 5.28	880 5,300800 5,308808	
	largestor iteration out concer in a	ADDD 18.000008 18.000008	
shed a	Largiel039 Standard 808.008008 438.0	miccial 444 080080 480 980880	
	Sample(1) Standard 800.008008 2080	3000000 2000 8000000 2000 8000000	
11	Derpectr Stander * 000.000000 1000	0.00000 (10000.00000) (10000.00000) (	
1.8	Cinectore .		
	MC These		
	Doi Deni		
	Codew X		
Pr Table			
1.000			
1.1.1			E to Hat



在所有樣品都給予定量型態(Quantitation Type)後,對所有的樣品塡入適當的濃度.

- 2.8 移至提示(Submit)標籤並檢查提示鍵 Submit 並無呈現灰色.若提示鍵呈現灰色, 請檢查是否有任何訊息漏填並將之填入正確位置. 單擊提示鍵 Submit 以提列樣品至提列總管(Queue Manager, View Queue).
- 2.9 批次可以在提列之前被編輯. 雙擊樣品列並拖拉至所需的位置即可改變該樣品被檢測的順序. 右 擊樣品列中的任何一行便會跳出選項的視窗, 在此可以操作向下填滿(Fill Down) 或自動增加 (Autoincrement)等功能. 若有 Office 軟體則能夠利用 Excel 的引入(Import)和輸出(Export)的功能

Contigues Security El Hachware Contiguasion Contiguasion Contiguasion Contiguasion	Easter	Loosen   Die Seren room 10 10	ritation (1.274					ļ		1
A Contraction Contraction	inut	A ranging works	ing and Data for	Cost 20208	and and statement		( Court Ball of	There Film	-	Salard Status
(§ Head Long	1	Sergentit	1	1	1	SUFICIED.	3	net 37,5mb	320	542
ACCESS 1	2	Nangaditi -	-	<u> </u>	1	DLLF METHOD		Intel Scotter	10011	Ma .
The Build Acquisition (Tethout	1	Langerlice	1	s	4	TALF METHOD	<u>ŝ</u>	and accessi	intri .	344
B.Addressiter Date:	1	Sample 805	1	9	6	SULF METHOD .	3	1007.002000	10071	MX
27 Depairs View	1	Longitudiol.	1		4.	DATE METHOD	8	wei 322980	CONTY .	has
Contract	1	Comparing the	1			DUT METHOD	č	1001202000	10071	Acc.
	-	Same	1	<u>.</u>		SLLF METHOD	5	ART 202348	10.71	NO
The party of the	10.15	Section 10	1	1	10	DATES OF STREET, STREE	5	THE COURSE	19211	Net
C Guerthale	11	[2ewell11	.jt.	91.) (J.	11	LUCE METHOD -	3	64120316	10011	MR
😰 Review Piecello Talde										

來加速樣品的編輯.

2.10 在提示批次後,應該可以看到提列的結果如下:

Acas IT F	ingSangka 🥅 at 🛛	Percel	E+E ₩	pini Tame 🚺		-	5 Gener and for	Sarah Francis	6
-	Start Time	Surgie D	Sarate Same	Rack Typ	Rack Pu	Plats Pe	Vial Pass	Status	Script
1.0	E 7.81.97 AM 1203/	90	Banped01	11.8y10	1	1.	t.	Walley B	
1	¥ 734.17 AM 1203	99	Eautoren (C.G. eautor	18 By 10	t	4	3	Walling	
1	X 7 81 57 AM 1223	90	Earnple (00)	18 By 10	1	1	1	Welling	-
· [4	2 7 10:57 AM 1203	90	3 emple 804	11 By 10	-	1	4	Wetting	-
- 1	K 71357481203	10	54400805-	18 29/10	-		-	mailing	
110-	W 210/2 AM 12/2W	PT	Sarapeon,e	10 8/10	-	1	-	materia	-
1	V 3 9247 AM 1 3224	50 ·	Carry and Co.	16.8/10	-	11-	1	Mailing .	-
~ 16m	1 1557 AM 1 2012	88	Darticle 800	18-0-10	÷	11	- i -	Walking	-
10	1 2657 AM 12073	99	TempleH10	18.0v10	1	1	10	Watting	-
11	X 7.11 97 AM 1203/	99	Sampled11	18.99/10	1	1	11	Watting	-



2.11 將系統至於待機(StandBy)狀態. 單擊平衡鍵(*Equilibrate*)使機器狀態由待機轉成溫機狀態(*Warm Up*). 選 擇 將 要 執 行 的 取 得 方 法 並 輸 入 溫 機 時 間 後 單 擊

L	<b>(p</b> ).	選	擇	將	要	執	行	的	取	得	方	法	並	輸	入	溋	機	時	瞐
	Equ	ilibrate								. 🗆 🗵									
										1									
		Acqui	sition Meti	hod S	JUF MET	HDD.dam	_		۲										
		∐ine (	Mn.J	0	1	1													
		Please comple You n	e encure fi late the ex lay widt to	hat the Eq pected ex check fr	puilbrate t puilbration re device	ine is long L I for cample	enough elion altr	to allow all withe Equi	l devices t Ibrate time	2									
				OK		Can	oel												
0	'К.—						_												

2.12 在機器完成平衡以及右下角的狀態列呈現綠色, 單擊 Start Sample 鍵以開始執行樣品批次.



# 由 Excel 引入和輸出的方法 Export to and Import from Excel

- 1 在批次編輯器(Batch Editor)中引入和輸出.
- 1.1 首先在瀏覽列中單擊 Build Acquisition Batch 以打開一個空白的樣品批次(Sample Batch). 再來, 輸入樣品的組名(Set Name), 取得方法(Acquisition Method), 以及快速定量方法(Quick Quant Method). 然後單擊 Add Set 以及 Add Samples.
- 1.2 下一步, 填入樣品位置(Vial Location)以及定量訊息(Quantitation information). 在定量標籤

the second se	a france in the second second
nigai langa langa langa langa langa langa langa langa langa r Pandan langa lang r Pandan langa lang langa la	
	IN Creat

(Quantitation tab)可以使用自動填滿(Fill Down)的功能來填入樣品形式(Sample Type).

1.3 一旦所有的訊息都被輸入完全, 選擇 *File→Export*. 將其存成文字檔(\*.txt).

1.0494	Long 14	articular   Submit						
1928	ALC: NOTE OF			line i	and the			
h Longestion				0.669,0		Garde	-	
on adjuster	Rough Lab.	r Frigor		-	ST.		40) Date 6	ant i
Templet Like	Concession in the local division of the loca	And in case of the local division of the loc		- 11		1 (11) ( 11)		
	And Designation	Banna Lat.				Augasteri		
and because of	anti-t	C annual O	47.1		SULT HOME	3400	2 Mathal	81
	- and a second							
Cont and a local days	1000					The second second		
allang	1000					See See		
				-		1		
and the second s	Sample Ass	er Barth Cantol Barth Pr	unitional Prints King	del Plate F	feation, Mat Peak	ton New Tee		
and the second se	- Carghelin	208/10.3	100	0		Desirente		
Louisville I	Tank and	10000				Contractor 1		
a view and a second second	Control of	100.15		- 6 -		- Continue		
1.0	Contradicts.	TREU 1			- 1 -	Destroyed		
1.0	September 198	16612 3	708	30.		Date angle		
and a second	lease 127	10.8c10 3	904	30.		Dateurste		
interesting and	- Inventor	768-10		0		Destinants		
1.00	and the second second	1016-10 3			-	Contractor 1	_	VITUE .
	Tentil I	106-15			111		The second second second second	
	leabil 1	108-10 1	100	3444.95	10 Cardina		지 111 대 [6 2	11
lands 144	Coupoid I	10610 1	144 3	A No Car				-
2.0	lestil i	10.8e10	744	Sa Bernard	( lighter level			
1.8	Lesson 1	18.8,10 3	744 3	State Base	Ar same			
11	Constant 1	288-10 3		- triate				
1 HT	and the second second	1000		Alternat	Diag			
1 65-	Departure	10 P-15		al Sector	end Projects			
100	lease (2)	18.8-10 8	246					
100	Seattle .	10611 3	744					
22	Sealel00	18.8,10 3	744	hare	1000		L. Law	
20	Gergani00	18.8/10 3	. 744		a break and a second			
100-	Comparison (Co	188-10 8	744	100000	and the first		21 Tana	
1.54	Contention .	20.8/30 . 3	798				the second se	

1.4 啓動 Microsoft Excel 並開啓先前所存的檔案(\*.txt). 此時會出現一個複雜的輸入視窗. 簡單地單擊

evel:								
	 				P	CROSSING.	ALC: No. of Concession	
	Desi basari Ma					NICI.		
	The Test should be	an dependent fluit pr	e meninkare	and and the	-			
	Trepost sizes from							
	C BARRIE	-Deserves and			-			
					Contract Land			
			1000	10.00	and the second second	·		
	The barrier	Contractory of the same	and all all and	CALL	in the second second	the last		
	11000	0.000	8.43 把	12 20 12	311	100		
	1.1.1.1.1.1				201	8.		
	4	and the American				1		
			Cenel		10.0	out 1		
		1 1		1				
-								

Finish 鍵即可.



- 1.5 這時,一個具有相關樣品訊息的表格便會被打開.工作表的最右邊會顯示像"peaknam#" 和"~peakcon#", "nam"意即樣品名而"con"則表示濃度.在"con"那一行中填入濃度訊息同時也可 以更正任何樣品位置的訊息.
- 1.6 將檔案儲存, 最好是覆寫原來的檔名並關閉檔案. 一樣存成文字檔, Excel 會詢問是否存成 Excel 的

The second rest of the second	 *****	40	فللانم
Control (Control (Contro) (Control (Control (Contro) (Control (Contro) (Control (Contro)	T. A. 71.51. B. C. (4) IN	20 	The second secon
	 control surger, J& Annual Law	1-	

檔案格式(\*.xls), 請選擇 NO.

Note: 要引入 Analyst 之前, 這個檔案一定要關閉.

1.7 回到 Analyst 並單擊 Build Acquisition Batch 以開啓一個空白的批次. 在 Acquisition Method 鍵右 方灰色區右擊滑鼠並選擇 *Import*.

Andrea Project Library 1982.7	KINT ING BATH	100
A set of the same later	The second	
	UNBRA-FINET	
Container States     Container States	Tereb [Lancel] (Interest   Interest   Intere	Anne Maria de Sala Anne Maria de Sala
Manual Co Ding of 12	Andre Fact lan. Witcontrol more [ Witcontlat securi ]	Parts - These - 100 - 10

- 1.8 選擇先前所存的檔案(\*.txt)並開啓.
- 1.9 完整的樣品批次被打開並可以隨時被提列.



- 2 引入及輸出結果 Importing and Exporting within Results Tables
- 2.1 打開定量處理過的結果,然後選擇 File→Export.
- 2.2 存成文字檔(\*.txt)並在 Excel 下打開此檔案.



- 2.3 當文字引入的提示視窗出現時,單擊 Finish.
- 2.4 完整的結果報告便會在 Excel 中被打開.





# 探索—資料處理 Explore—Data Processing

## 第一部分. 打開 TIC 資料檔案 Opening a TIC Data File:

- 1.1. 由層析圖(Chromatogram)建立一個質譜圖(Spectrum):
- 1. 打開資料檔案(\*.wiff) data file **GEN01.wiff** (範例在 Example Project folder 中). TIC 圖便出現 (Figure 1-1).



Figure 1-1. GEN01.wiff 的 TIC 圖.

2. 用滑鼠在 X 軸拖拉所欲放大的區域後放開滑鼠鍵即可. 同理,Y 軸也相同. 要觀察質譜圖時, 先以滑鼠 突出(highlight)所需的區域後在該區域雙擊滑鼠即可(Figure 1-2), 同時也可以選擇 *Explore→Show Spectrum*.



Figure 1-2.



## 1.2. 探索(Explore)功能下的多重視窗

在探索視窗的右上角有個工具列,如右圖所示(由上而下依序表示, 卡車 Truck, 刪除小視窗 Delete Pane, 鎖住小視窗 Lock Pane, 藏起視窗 Hide Pane, 最大化小 視窗 Maximize Pane 以及排列小視窗 Tile Pane).

1. 突出第二個 TIC 區域並打開其質譜圖. 這時圖應該類似下圖(Figure 1-3).





Figure 1-3. 雙重質譜圖.

#### "Trucking"

- 1. 選擇 🗾 Truck 然後只要將所需要的圖以滑鼠拖曳至所欲並列參考的圖面即可
- 2. 可以選擇 \_\_\_\_ 以回到原來的尺度大小.



**Figure 1-4.** Rearranging panes with the truck icon.



### 其他工具列上的按鍵功能

隱藏小視窗	選擇所欲隱藏的視窗後單擊此按鍵即可將視窗隱 藏至背景中	. 💌
最大化視窗	選擇所欲最大化的的視窗後單擊此按鍵即可將視 窗開至最大	
並列視窗	單擊此按鍵即可將所有開啓的視窗並列	. 🗵
鎖住視窗	選擇所欲鎖住的視窗後單擊此按鍵即可將視窗鎖 住,此時被鎖住的視窗將不可移動以不能被更改 其大小	. 💌
刪除視窗	選擇所欲刪除的視窗後單擊此按鍵即可將視窗刪 除	×

### 1.3. 建立一個減去背景(Background-Subtracted)的圖譜, 減去(Subtracting)和加入 (Adding) Data

- 1. 將所欲減去的 TIC 圖內的背景(Background)以滑鼠標定(Highlight). 按住 Shift 鍵並標定另一段背景, 右擊滑鼠並選擇 Set Subtract Range 後所標定的兩段背景即會被標示成綠色.
- 2. 標定所欲觀察的 TIC 圖中的峰(Peak),並雙擊滑鼠左鍵以顯出質譜圖,此時所顯出的質譜圖便是減去先 前選定兩段背景的圖譜 (Figure 1-5).
- 3. 要清除減算(Subtraction)的範圍, 只要右擊滑鼠並選擇 *Clear Subtract Range* 即可,同時先前標定的緣 色減算範圍以會消失.



Figure 1-5

4. 標定並雙擊 TIC 圖上的背景區域以產生一個包含背景的質譜圖. 另外標定一個包含所欲觀察的峰後 單擊 ➡ (*Subtract*). 然後單即已開啓且包含背景的質譜圖即可(Figure 1-6).



#### Figure 1-6 1.4 再同一個圖譜中重疊(Overlaying)減去和加入 DATA.

121

後再以滑鼠點一下至於被背

2. 切換啓動與背景的圖譜只要單擊



(Cycle Overlays)即可.

- 3. 要移除重疊圖譜請單擊
- 4. 若想加成所重疊的圖譜, 則單擊.
- (**Remove Overlays**).  此時會產生--

此時會產生一個加成後的圖譜.

5. 若想在一個圖譜中加入另一個圖譜資料,則選定要呈現的圖譜後單擊, 所欲被加入資料的另一個圖譜,這時結果便會呈現兩個圖譜的加成資

然後以滑鼠點一下 料(Figure 1-8).





Figure 1-7.

Figure 1-8.



### 1.5. 將兩個質譜圖連結(Link)

點一下 A 質譜圖後單擊 🗾 (*Link pane*), 然後點一下 B 圖即可. 此時這兩個圖的尺標(Scale)標示是同步的,也就是說,只要改變其中一個圖的尺標,另一個圖的尺標也會隨之變動. 若要取消連結則單擊 🔛

第二部分. 使用圖表訊息視窗(Graph Info Window)

a Analyst		×
Ele Edit View Jools Englore	Window Script Halp	
🗂 🔁 Example	• 🙆 📽 🖬 🖶 从月午前 🗇 🖂 + Explore Mode 🔹 🚚 民 🗊	11
●●※+→応命。 上が信頼や所定	1.元第二三章)の21年二 1.65代前の11三章市の13	
Plot Telector		
X+15.45 to 20.88 min point run +(271 to 291)	Y= 0.08 to 4.75e+007 ope Yassi = 8.51e+006 @ n= 281	



圖表訊息視窗顯示圖表中被選定小區域的資料. 它包含:

X 軸起始和中止的數值(Start & Stop)

X軸點數範圍(Point Number Ranges)

被選定範圍的 Y 軸範圍的數值

被選定範圍的最強強度數值

要獲知圖表訊息, 在圖譜中以滑鼠標定所欲顯示的區域後, 在 View→Graph Info Window 即會顯示所標定 區域的各項資料(Figure 2-2).

1144 1144 1144 1144 1144 1144 1144 114		C and find	fings and									Co-los		No. 254 oc
0044 0044 0144 0144 0144	-	ale	ale .	 40	#kc	-	-	ako	al.	ets	÷	900	-	ide -



# 第三部分.在層析圖視窗中使用滑鼠右鍵的功能.

## 指令摘要:

列出資料(List Data)	列史資料戰並合供屬析圖	
顯示質譜圖(Show Spec-	根據所標定的層析圖區域顯示出相對該區域的質譜圖.	. 🗵
trum)		Ш
抽出離子(Extract Ions)	由選定小視窗中抽離特定的離子並產生包含該特定離子的	. 🗵
	層析圖.	Χic
顯示基本峰(Show Base	產生一個包含基本峰的層析圖.	. 🗙
Peak)		뿠
顯示紫外光資料(Show	產生一個含紫外光資料的圖,當然必須要再掃描的同時有	×
ADC Data)	取得紫外光的資料.	뷨
存成文字檔(Save to Text	產生一個文字視窗.	
File)		
加入標題(Add Caption)	在標定區域加入標題.	. 🗵
		۸ <mark>۳۵</mark>
加入使用者文字敘述(Add	在滑鼠指定區域加入文字敘述.	
User Text)		
設定減去區域(Set Sub-	設定減去區域.	
tract Range)		
清除設定減去區域(Clear	清除設定减去區域.	
Subtract Range)		_
删除小視窗(Delete Pane)	删除選定的小視窗.	. 💌
		X

## 3.1 列出資料 List Data

1. 按下 📷

2. 選擇

便會顯示出該圖譜的各個峰的強度等等資料(Figure 3-1).

第二個圖表(Peak List),所有的峰值便會被表列出來(Figure 3-2).









Figure 3-2.


3. 在(Peak List Table)中, 右擊滑鼠並選擇 *TurboChrom parameters* (Figure 3-3). 改變 *Bunching factor* 以 獲得更合理的峰的積分值.





更進一步的資料處理選項可以在 View → Processing Options → TurboChrom Integration 找到(Figure 3-4).

Processing Opt	ions				? X
Centroid Smooth	Turbo	Baseline Subha SChrom Integrati	ct on	Noise Fi Miscellans	ter
		MS		ADC	
Bunching	g Factor:	1	ĺ	1	
Dynamic	Threshold	Calculation			1
Noise TP	reshold	1.00	1. T	1.00	
Ares Th	eshold:	100.00		100.00	
				More.	-
	Use D	efaults	DK		ancel

Figure 3-4.



#### 3.2 由層析圖中抽出離子 Extracting Ions from a chromatogram



1. 在 TIC 層析圖中單擊滑鼠右鍵選擇 Extract Ions 並輸入所欲抽離的離子範圍後按下 OK.(Figure 3-5).



Figure 3-5.



Figure 3-6.



### 3.3 建立一個基本峰層析圖(Base Peak Chromatogram)



1. 在 TIC 層析圖中單擊滑鼠右鍵選擇 Show Base Peak

Figure 3-7.



2. 預設的基本峰層析圖為灰色而不容易觀察,若需要更改顏色則到 *Tools→ Appearance Options* 下選定 所需的顏色後按下 *OK*.

Appearance Options		? ×
Multiple Graph Options Graph Colours & Fonts	File Information Options	Miscellaneous
Trace Colours	Title Font:	Set
	Axis Font:	Set
	Automatic Label	Font: Set
"Alternate" Colour:	Default Caption	Font: Set
Period Marker Colour:		
Subtraction Range Colour:		
	Use Defaults	DK Cancel





Figure 3-9.

- 3.4 加入標題(Adding Captions)和使用使用者文字敘述(User Text Option)
- 1. 在 TIC 層析圖中單擊滑鼠右鍵選擇 Add Caption 並鍵入所欲加入的標題或選擇 User Text 以加入文字 敘述(Figure 3-10).



Figure 3-10.





Figure 3-11.

單擊產生的文字敘述並選擇 Edit 然後 Font 可以更改文字字型及大小(Figure 3-12).

Font			? ×
Eont: Aria 또 Arial 도 가 Arial Black 가 Arial Narrow 가 Bookman Old Style 다 Comic Sans MS 다 Courier New 다 Garamond 도	Font style: Regular Italic Bold Bold Italic	Size: 13 8 9 10 11 12 14 16 ▼	OK Cancel
Effects Stri <u>k</u> eout Underline Color: Black	Sample AaBbYyz Script: Western	7z	

Figure 3-12.



# 第四部份.在層析圖視窗中使用滑鼠右鍵的功能.

# 指令摘要:

列出資料(List Data)	列出資料點並合併層析圖	×
顯示總離子層析圖(Show TIC)	產生並顯示總離子層析圖(Total Ion Chromatogram).	. ≍ 况^
抽出離子(Extract Ions)	由選定小視窗中抽離特定的離子並產生包含該特定離子的 層析圖.	
存成文字檔(Save to Text File)	產生一個文字視窗.	
加入標題(Add Caption)	在標定區域加入標題	. × Ла
加入文字敘述(Add User Text)	在滑鼠指定區域加入文字敘述	
顯示最後一次掃描(Show Last Scan)	顯示選定圖的最後一次掃描結果	
刪除小視窗(Delete Pane)	刪除選定的小視窗.	×



4.1 在 TIC 層析圖中抽離離子 Extracting ions using a spectrum pane of a TIC



Figure 4-1



# 第五部分.在層析圖視窗中使用滑鼠右鍵的功能.

# 指令摘要:

▼ →	顯示前一個或後一個樣品圖譜.
in in its sector is a sector i	作一次减除背景的動作.
<b>1</b>	複製一個新的圖譜到新的視窗中.
	潤飾(Smoothes)資料.
. <b>D</b>	在資料中減去基線(Baseline).
. <b>D</b>	作一次質量中心的動作(Centroid).
Ax	設定門檻.
24 24	完成雜訊的濾除(Noise Filter).
	顯示資料訊息(Data Information).
	在指定的峰下加入箭頭.
×	移除所有箭頭.
, E	用 X 軸的補償彌補圖譜.
abo A	強制標示質量峰.
تل <mark>الا</mark>	放大選定 X 軸的範圍.
×	取消放大選定 X 軸的範圍.
	設定選擇範圍.
	將整個圖譜畫面尺標正常化(最大化).
	顯示資料處理的歷史.



## 5.1 顯示檔案訊息(Show File Information)

1. 選擇 *Tools*→ *Setting*→*Appearance Options*→*File Information Options* 以選定所欲顯示的資料訊息 (Figure 5-1).

opearance Options			2 2
Graph Colours & Fonts	1 (	Other Graph Options	
Multiple Graph Options	File Information Option	<ul> <li>Miscella</li> </ul>	16041
R Acquisition Information			
P Sample Information			
Experiment Information			
P Resolution Tables			
Mac: Calibration Tables			
P Instrument Parameters			
	Use Defaults	OK.	Cancel



2. 開啓所需的 TIC 圖後點選

(Show File Info). 此時會有三個小視窗出現(Figure 5-2).





## 5.2 加入或移除箭頭

1. 在 TIC 圖中選定範圍並點選 示的其他質量峰的値便是與

ι	. 📼
	44
r I	

Add Arrows. 此時最強的質量峰便會被加上箭頭. 而圖譜中顯 此被標定的質量峰的質量差值(Figure 5-3).



Figure 5-3.

2. 如果再標定另一個區域並加入箭頭,圖上標示的質量峰數值便會是與最靠近這些質量峰的標示質量 峰的相對質量差值(Figure 5-4).



Figure 5-4.



3. 若要移除箭頭單擊



### 5.3 潤飾資料(Smooth)

1. 單擊

Smooth. 潤飾選項便會出現(Figure 5-5).

Smoothing Options		? ×
Previous Point Weight	0.5	OK
Flevious Foint weight.		Cancel
Current Point Weight:	1	
Next Point Weight:	0.5	

Figure 5-5.

- 2. 輸入所欲潤飾的數值並按下 OK.
- 3. 潤飾可以重複多次(Figure 5-6a, 5-6b).







## 5.4 設定門檻(Threshold)

- 1. 在門檻設定以下的訊號會被判定成"雜訊"(Noise). 門檻的位置位於 Y 軸上的一個藍色三角形.
- 2. 單 擊 **Threshold**(Figure 5-7).



Figure 5-7.

3. 要清除所設定的門檻請選擇 Edit → Undo 或直接移動 Y 軸上的藍色三角形以更動門檻值.

## 5.5 產生一個質量中心(Centroid)的圖譜

這個指令轉換一個質量峰成為一個單一資料點. 質量中心的峰其強度為轉換前質量峰的面積.

1. 要設定質量中心的設定選項請選擇 *Tools→ Settings→Processing Options→Centroid* (Figure 5-8).

Processing Option	*	? X
Smooth Centroid	TurboChrom Integration Baseline Subtract	Miscellaneous Noise Filter
Merge Distance: Minimum Width:	0.50 amu	
🔽 Use Peak Ma	simum for Masz	
	Use Defaults	OK Cancel

距離合併(Merge Distance):小於此設定值外的質量峰將會被捨去.

最小寬度(Minimum Width):在此設定値內的質量峰都會被合併.

**Use Peak max. for Mass:** 勾選此選項將設定在 此視窗中的最強質量峰作為分析主體.

#### Figure 5-8.

2. 單

擊 Centroid 並輸入所需的處理數值後按下 OK(Figure 5-9).





Figure 5-9.

- 5.6 减去基線(Baseline Subtract) 🚽 及雜訊過濾(Noise Filter)
- 1. 這個指令被用來移除一個定值或是基線補償. 要更改預設的條件請選擇 *Tool* → *Settings* → *Processing Options*→*Baseline Subtract* (Figure 5-10).

Processing Opti	ons		? ×
Smooth Centroid	TurboChrom Inte Baseline St	egration   ubtract	Miscellaneous Noise Filter
Chromatograph Spectral Windo	ic Window Width: w Width:	<mark>2.00</mark> 32.00	min.
	Use Defaults	OK	Cancel

Figure 5-10.





2. 雜訊過濾是一個寬度的過濾, 它可一移除雜訊的突出(Noise Spikes)要更改其預設設定 請選擇 *Tool* → *Settings* → *Processing Options*→*Noise Filter processing* (Figure 5-11).

P	Processing Options				
	Smooth Centroid	TurboChrom Integrati Baseline Subtra	TurboChrom Integration Baseline Subtract		
	Chromatographi	ic Minimum Peak Width:	0.20	min.	
	Spectral Minimum Peak Width:		11.00	amu	
		Use Defaults	OK	Cancel	

Figure 5-11.

3. 減去基線的圖.



Figure 5-12.



4. 選擇 *Edit→Undo* 即回復原狀(Figure 5-13).



Figure 5-13.

5.8 重新定位尺規









## 5.9 處理包含多個樣品檔案的單一檔案(\*.wiff)







Figure 5-15.



# 定量資料的處理 Quantitative Data Processing

# 1 使用定量精靈建立一個定量方法(手動模式)

1.1 點選 Quantitation Wizard 下圖視窗便出現

Create Quantitation Set - Set Select the data file and the d Available Data Files boxv Datajw.wiff FIAOpt_200004110718 gen01.wiff lowithmass.wiff posneghighlow.wiff ppg.wiff quandata.wiff testfrommonsanto.wiff	esired sample(s) to add to the Available Samples API3-012 API3-013 API3-014 API3-015 API3-016 API3-016 API3-017 API3-018 API3-019 API3-020 API3-020 API3-025 API3-025 API3-026 API3-028 API3-	e new quantitation set. Selected Samples	e All
	< <u>B</u> ack.	<u>N</u> ext > Finis	h Cancel

- 1.3 Select Settings & Query 的視窗 現. 在 Settings to Use 中選擇 擊 ▶ ► ♥ 以進行下一步

Ploane o	elect the settings is	r the new results to	ble and the de	faalt query (F or	ψl.	
	Settings to Use:	Detext		•		
r a	Doladi Query					
	∞ Nore					
	C Selection	ing				
	Quelik:			*		
	C Casto Nev	Standard Duay				
	None:			_		
			< <u>∦</u> ack.	Sect>	- F208	Eavori

此時便會出 Default 並單

Figure 1-2.



#### 1.4 Select Method 的視窗出現

Create Quantitation Set - Select Method	
Specify which method will be used for this quantity a new method spec	añan set, or sseate
C Ocean Existing Hethod Hethod	×
P: Ceate New Mathod Method Neme:	Twing
C Create "Automatic" Metho	edi(te tabulatie area ifor each smallable ice)
	<beck beet=""> 17777 Cancel</beck>

### Figure 1-3

	Filename	Sample Name	Sample Type	analyte Conc.	internal std. Co
1	QuanData Wift	API3-012	Ellank	0.0	1.0
2	QuanData Wiff	API3-013	Standard	0.1	1.0
3	QuanData Wiff	API3-014	Standard	0.2	1.0
4	QuanData Wiff	API3-015	Standard	0.5	1.0
5	QuanData Wiff	API3-016	Standard	1.0	1.0
6	QuanData Wift	API3-017	Standard	2.0	1.0
7	QuanData Wiff	API3-018	Standard	5.0	1.0
8	GuanData Wiff	API3-019	Standard	10.0	1.0
9	QuanData Wiff	API3-020	Standard	20.0	1.0
10	QuanData Wiff	API3-024	Unknown		
11	QuanData Wift	API3-025	Unknown		
12	QuanData Wiff	API3-026	Unknown		
13	GuanData Wiff	API3-027	Unknown		
14	QuanData Wiff	API3-028	Unknown		

Figure 1-4.



	子 /	子	離	子	的	皙	荷	H-		b⊓	420.0/220	0.0 (Fig	nire
	J /	J.	内正	J	ЧĴ	只	[F]	νu	,	ХЦ		(118	,ure
sate	yuaniitation	Method	- Denne	reaks							_		
-													
P168	se adjust the p	eak name:	: and mas:	ies as nec	essary for p	ienod 1, eo	cpenment.	1.					
						Default	Number	Smoother	0	-			
d and						12-104 Children	real local of	A STRUCTURE		_			
Ana	//es							04.100		1.1			
Ŀ.	Name			ino	emai stand	arci		01703		<u>_</u> =			
2										-111			
3				_						_			
4													
5										12			
6										-			
Inter	nal Standards												
	Name			ହା	/ Q3								
1	internal st	hdi.				<u> </u>							
2													
0				40	; 0.07200.0	Ľ							
				42	0.0/220.0						-		
							_	P. 14	1		1		
					Harte	Distant.	2	Purpurph.		ADC AL			

- 1.6 定義分析物(Analyte)的名字以及其母離子與子離子的質荷比對和相對的內標準. 在分析的質量峰 被積分後,分析物的濃度必須被輸入至最後結果的表格中. 如果 Quick Quant 在取得資料之前沒有 被使用,那麼分析的名字便不會出現. 如果是新的資料, 稍後在結果表格中填入濃度.
- 1.7 定義預設的潤飾值為 **0**.
- 1.8 如果有額外的 MS 實驗或者有額外的實驗段落則重複 1.6 至 1.8 然後選擇 № ↔ >

		Default No	unber of Smooths: 0
naly	tes		
	Name	Internal Standard	Q1/Q3 🔺
1	analyte	internal std.	· ·
2			
3			TIC
4			400.0 / 200.0
5			420.0 / 220.0
6			-
	al Standards		
obern			
ntern	the second	01.100	
nkern	Name	Q1/Q3 🔺	
nkern 1	Name Internal std.	Q1 / Q3 A	
ntern 1 2	Name internal std.	Q1 / Q3 A 420.0 / 220.0	

Figure 1-6.



1.9 第一個質量峰的定義積分 *Define Integration* 視窗被打開(Figure 1-7). 此時基線雜訊(**Baseline** Noise)已經被定義而且質量峰也已經被自動積分(Integrated). 定義留滯時間(Retention Time),如 30.0 sec.

Create If the	Quantita e desired p peak of int	tion Method - Define Inte eak was not found automatica erest by making a selection in t	gration ly, you should select he graph and clickin	both a backgroun githe correspondin	d range and g button.	
inter	nal std.	Ret. Time: 0.65 min	RT Window:	30.0 sec	Advanced	
	4900	0.0	\$			
	4000					
ŝ	3000 -					
ntensity, (	2000 -					
-	1000 -					
	1،	0.5	10	1	5	2.0
		0.0	Time, min		-	
			< Back	<u>N</u> ext >	Finish C	ancel

Figure 1-7.

1.10 如果所要看的質量峰沒有被自動找到,則選定背景範圍(Figure 1- 8a)並且選定所要看的質量峰 (Figure 1-8b).



Figure 1-8a.





1.11 單擊 Advanced 以獲的更多積分參數的選項(Figure 1-9). 設定 Bunching Factor 為 2 且 Number of Smooths 為 2. 確定濃度單位和標準品是一致的

Advanced		? ×
Bunching Factor:	2	
Noise Threshold:	20.03	cps
Area Threshold:	100.16	срз
Number of Smooths:	2	
🔲 Use Relative Retention Time		
Concentration Units:	ng/mL	
Calculated Concentration Units:		
OK	Cano	el

Figure 1-9.

選擇 0K 來觀察新的質量峰積分.

1.12 以滑鼠拖拉來觀察新的質量峰積分, 在垂直方向拖拉以放大基線(Figure 1-10). 如果新的積分參數 是合適的則選擇 以積分下一個質量峰.



Figure 1-10



- 1.14 定義 Fit 為線性或任何所需的, Weighting 為 1/x 回歸參數(Regression parameters)是根據面積 (Figure 1-11).
- 1.15 選擇 Finish 以完成建立定量方法.

Create Quantitation Metho	d - Specify Calibration			
Please select your desired	calibration options:			
Fit	Linear 💌			
Weighting:	12x 💌	🗖 lterate		
	Regression Parameter			
	C Heide			
	• Height			
	< Back	<u>H</u> est>	Finish	Cancel

Figure 1-11.

1.16 儲存結果表格.

## 2 用 Quick Quant 建一個新的定量方法(自動模式)

- 2.1 單擊 Quantitation Wizard 選定所需的資料檔案然後按下 Next > 1
- 2.2 在 Query and Settings 的視窗中不要更改預設値; 單擊 ▶ Select Method 的視窗出現. 點一下 Choose Existing Method 並選擇 Quick Quant. 定量方法在樣品批次被件好的同時也會被建立 (Figure 2-1). 在按下 Finish 後, 一個具有相對樣品型式及濃度訊息的 MRM 積分便會出現.

Create Quantitation Set - Select Method				×
Specify which method will be used for this quar a new method now.	ntitation set, or	create		
Choose Existing Metho Method	d S.qmt		-	
C Create New Method Method Name				
C Create "Automatic" Me	sthod (to tabula	te area for eacl	h available ion)	
C	< <u>B</u> ack	<u>Neto</u>	Finish	Cancel

Figure 2-1.



## 3 查看並處理定量結果表格

### 概括步驟:

- 1. 查看及編輯結果列表中的各行並撤銷稽核(Audit Trail).
- 2. 查看校正曲線.
- 3. 查看質量峰的積分及更新積分方法.
- 4. 查看各項統計資料.
- 5. 建立並執行一個質詢方法(Query).
- 6. 建立並執行一個結果表列的分類(Sorting).
- 7. 建立並執行一個公制的圖表(Metric Plot)
- 8. 使用公式.

## 3.1 查看及編輯結果列表中的各行列

3.1.1 打開結果列表檔(\*.rdb) (Figure 3-1).

				. Idmised as	- <u></u>	11.00	2.5
	1 11 1	43-	- X D 1	10 H			_
Carigan							
A Secula		ining oth				1	in in
Hardware Configuration		19			12.		
CT Harrist Tanzista Friter	100	ute (		Pull	area .		
dr. Lieber, Leichneit Frank		- 타및 단 표	8	ida	Contraction of the local data and the local data an		
fare vir Resolution Optimization		Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyse Poak Area (countd)	An H
A Gaantitative Optimization	T.	API3-012	-	Elank	GuarData Wiff	2 EDe+012	3.3/
Hanul Turing	2	AP(3-013		Standard	GuarData Wiff	1.25e+003	1.75
ake .	1	API3-014		Standard	Guar Data Wiff	2.49e+003	3.31
The data is a first biothy of	4	API3-015		Standard	QuarData Wiff	5.34e+003	7.15
true acqueren Partice	5	API3-015		Standard	Guar Data Wiff	1.DBe+004	1.5
Build Acqueition Batch	E	API3-017		Standard	QuaeData Wiff	2.28e+004	3.12
P Express Vern	7	API3-018		Standard	QuarData Will	5 B1e+004	7.86
pkoe	8	AP13-019		Standard	QuanData Will	1.22e+005	1.66
One Data Ele	9	AP13-020		Steedard	QuanData Will	1.21e+005	1.底
1000	10	AP13-024		Unknown	GuarData Wiff	1.97m+004	2.65
ue til de	11	AP13-025		Unknows	GuarData Wiff	1.32e+004	1.74
Georthetice Moard	12	AP13-026		Unknows	QuanData Wiff	1.62e+004	2.34
The view Plezaltz Table	11	AP(340/7		LTRIGHT.	Court Data Will	2.00e+004	2.00
	14	ACR3.000		LTATONE.	Course Date Mall	1.266+004	1.56
	19	400.000		L MARCONE.	Could Date Will	7404004	23
	10	proce		COROLANS.	CONTDAIN YHR	12.1007004	2.15
							-

Figure 3-1.



Jai I				101402		_	_
Carligue							
A Security	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	ning tills					
田 Hardware Configuration				2.41	and I	10	
C Facult Templete Editor	1.12	and and real as	10.000	Gar	. Nave		
2000 00 00 00 00 00 00 00 00 00 00 00 00		8 모임 3	(18)	- Ide	1957) 1		
-the Faculture Optimization		Full T. T.	Security ID	Sample Type	File Name	Area (courts)	Jan H
A Darollative Oppresiden		Durney +		Elaek	QuarDate Vill	2.60+4002	3.3
A Manual Tuning	2	A1004		Standard	GuarData Will	1.21+400	171
Acades	2	Add Formula Dolarey		Standard	QuanCiato Velle	2.48e+005	3.24
×	4.5	Table Settings	1.9		OuerCeta Wile	5.344+003	7.11
p salacasana mena		Dury +	Equal To Mere Late	Salarge	QuanDate Vel8	1.05++004	15
DiklAcqueter Beth	5	Bot +	for a		QuarCuta Vell	2.25x+004	3.1
27 E-paulVen	7.5	Hater Phr +	stronger and but		QuanData Will	2.81#4004	7.16
Equire		Delet Film	-		QuarCata Velt	1.22+4005	1.66
2 Deep Data Pla	257	14-0-001		Standard	GuanData VH#	1.21#4005	1.68
WILLIAM CO.	11	APID-024	-	Usioneven	QuanData VICH	1.07#+004	2.52
and the second s	11.0	AP10-025		Unnewn	QUARCUSE VIEW	1.329-004	17.
Condition Vised	14	APD-025	-	Utknewn	COUNCIES VIEW	1 bite 4004	
Tarview Parsids Table	11	APR 200		Casterio	Country and your	2.0194,04	2.0
	14	ACR.000		University	Charao Carlos Verte	1.74+-004	2.00
	-	460,000		E Manufacto	Charaf Carto Viell	21544004	3.1
		Q	14 14	10	201 	10 A	

Figure 3-2.

3.1.3 選擇 Table Settings→Audit Trail 然後按下 **E**dit (Figure 3-3).

Table Settings	? ×
Table Settings	Done <u>N</u> ew <u>E</u> dit
	<u>R</u> emove
	Duplicate
1	



3.1.4 在稽核設定(Audit Trail Settings)的視窗中(Figure 3-4)理由是可以被加入或移除的(New Reason or Remove)以更具體說明客戶的理由(允許使用者具體說明理由). 所移除的即時稽核會在每次結果表列被更動調整時出現. 不管怎麼說, 結果表列中任何的更動都會被紀錄在稽核表單中但不會紀錄任何理由. 選擇 OK 以使用新的設定.

Audit	t Trail Settings	? ×
V	Enable audit tracking for new results tables	
	Prompt user for reason	
	Default Reasons	
	Correct Automatic Integration Reject Outlier Remove New Reason	]
	☑ Allow users to specify "custom" reasons	
	Cancel OK	

Figure 3-4.

3.1.5 圖表設定(Table Settings)視窗出現. 選擇 Columns, 然後 Edit→Results Table Columns (Figure 3-5).

Course la	_			OK	
Sample	<u> </u>			Cancel	
Sample Apalute					
Internal Standard Record Formula	own	Significant Figures	Scientific Notation	Precision	ŀ
Custom	7				1
Sample ID	2				1
Sample Type	2				1
Sample Comment					
Set Number					
Acquisition Method					18
Acquisition Date					1
Rack Type					1
Rack Number					1



3.1.6 *Columns* 分成 6 類(*Sample, Analyte, Internal Standard, Record, Formula and Custom*)(Figure 3-5). 在下拉的表單中選擇 *Sample* 而在結果的視窗中移去打勾的記號然後到 *Sample ID*.



3.1.7 在下拉表單中選擇 *Analyte* 並再結果視窗中移去 *Analyte Peak Height* 的打勾記號. 調整 *Analyte Peak Area* 及 *Analyte Concentration* 的精確度為 **3** 到 **5** (Figure 3-6). 這將會使呈現的精確度為五位數字.

Andre	-			OK.	_
Anayle	-			Cance	-
Title	Shown	Significant Figures	Scientific Notation	Precision	F
Analyte Peak Name					1
Analyte Units					1
Analyte Peak Area	V	P	R	5	1
Analyte Peak Height		R	<b>P</b>	3	1
Analyte Concentration	1	P		5	1
Analyte Retention Time		9		3	1
Analyte Expected RT		9		3	1
Analyte RT Window		R		3	1
Analyte Centroid Location		R		3	1

Figure 3-6.

3.1.8 選擇 **CK** 然後 **Done** 以回到結果表列.

## 3.2 查看校正曲線

3.2.1 要查看校正曲線有兩種選擇, 一是 *Calibration – Window*(在 Results Table 上開新的校正曲線視窗) 二是 *Calibration - Pane*(在 Results Table 中另開一個小視窗以查看校正曲線)(Figure 3-7).



Figure 3-7.



3.2.2 在校正的視窗中, 個別的分析物校正曲線都能夠被檢視; 同時加諸於資料上的回歸(Regression)也可以被改變. 單擊 Begession 即可改變回歸係數(Figure 3-8).

Regression Op	otions	? ×
Fit	Quadratic	
Weighting:	None	🗖 Iterate
	OK	Cancel



3.2.3 使用新的回歸設定的校正曲線(Figure 3-9).要使用新的設定,選擇 40004



Figure 3-9.

## 3.3 檢視質量峰的積分及更新積分方法:

3.3.1 要檢視質量峰積分有兩種方法一是 Peak Review – Window 另一種是 Peak Review - Pane. 選擇 Tools→Peak Review – Pane (Figure 3-10).



Figure 3-10.

3.3.2 在 Peak Review Pane 中單擊滑鼠右鍵並選擇 *Options*. Peak Review Options 的視窗便會出現 (Figure 3-11).

Peak Review Options	? ×
Appearance	- Automatic Zooming
Num. rows:	Zoom intensity axis to:
Num. columns: 2	<ul> <li>100.00 % of largest peak</li> </ul>
🔽 Shaw asmela tura in titla	100.00 % of largest peak for all samples
J♥ Show sample type in title	O 5.00 times the baseline height
Internal Standard Review	C 1.00e5 cps
C Don't review internal standards	O 1.00e5 cps or largest peak
C Review before all analytes	
Review with each analyte	Zoom window: 2.00 min
	OK Cancel

### 3.3.3 在 Appearance 中可以設定同時瀏覽的樣品數

如:

Num. Rows:	1
Num. Columns:	2

- 3.3.4 在 Automatic Zooming 中可對 Y 軸設定自動放大(Figure 3-12).
- 3.3.5 選擇 Show or Hide Parameters 可檢視質量峰積分的設定.

Example	-	1	1 40 6 2	C 1 Quantita	te Mode .		行正 書	a 🖸 Ta
SI KE		VI 3+	# X 3		Caraconterna de la	0.4		
ende Ful Lapout Comp. Norm Ide Ide Ide Ide								
Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)	Analyte Concentration	IS Peak Area (counts)	IS Peak Height (cps)	Use Record	Record Medified
APG-012	Elank	QuanData Wiff	259968-002	00000	1.926+004	3.08e+003		
API3-013	Standard	QuanData Wiff	1.2555e+003	0.10000	2.14e+004	3.37e+003	P	E
API3-014	Standard	QuanData Wilf	2.4915e+003	0.20080	1.97e+004	3.09++003	R	17
API3-015	Standard	QuanData Wiff	6.3429e+003	0.50000	1.74e+004	2.83e+003	R	
API3-015	Etandard	QuanData Wiff	1.0825e+004	1.0000	1.87 e+004	3.03e+003	R	
API3-017	Standard	QuanData Wiff	2.2844e=004	2.0000	2:02e+004	3.23e+003	5	
API3-018	Standard	QuanData Wiff	5.8128e+004	5.0000	2.26e+004	3.59e+003	P	
APIB-019	Standard	GuanData Wiff	1.2175e+005	10.000	2.31e+004	3.65e+003	R	
AP(3-020	Standard	QuanData, Wiff	1.2091#+005	20.000	1.22e+004	1.99e+003	P	
		P. P. 1 1919	a menter	Same.	La ren commun	In the union		-
		<b>9</b> 1 - 192	1 E	endi berror				
2-analyte (filenk) 260e2 counts (higi	A Plan	GenerData.Rtt Texts	<u> </u> =	APD/010 - Interval Ana, 19294 cest	sld (Mask), sample 16 Height 3.00x3 (p	1 of 18 from QuanData c R1:0.79 mix		
2 - analyte (Micele) 2.50e2 counts (Micele) 90 1	-nample Tot Féfren to 136 fage ST: 45	QuanData.Mitt Taile	<u>)</u> ( <b>r</b>	APD-010 - Interval Area, 15245 cost 2900 3400	sld (Mask): sample sk Height 2.00+3 sp	t of the from Grandware e RT:0.70 min		
2 - avatyte (Neat) 25 de 2 counte / Heige 40 -	-nample Tot Féfren tr 236 fage ST: 45	Quanthela.Mitt Chanthela.Mitt Taria	<u>] Annal</u> ( <b>F</b> )A	APTD-013 - interval Avez 15244 cest 2900 2500 -	old (Mark) sample 19 Height 20042 m	t of HE from GranDate e RT:03D min		
2 - avatyle (Nank) 25 de 2 counter / deige 40 -	-nample Tol Féfren tr 23def que RT: 45	Quanthala.Mitt Tania	<u>] Annal</u> ( <b>F</b> )4	APTD-012 - internal Avez : 15244 cost 2900 2900 - 2000 -	sld (Mark), sample th Height 300e2 m	1 of 18 non GuanDala e RT: 0.70 min	. mm	
2 - avalyte (Nest) 25 de 2 counte (Nest) 20 - 30 -	-nample T of F6 from the 3.366 f case RT: 4.5	Quanthala.Mitt	<u>] Annal</u> ( <b>F</b> )4	APTE-012 - Internal Avez 15294 cost 2900 - 2900 - 3000 - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	dd (Mark) sample In Height 20042 m	1 of 10 from Grund Jul e RT: 0.70 min		
2 - amathin (Mask) 2 - amathin (Mask) 2 - amathin (Mask) 30 - 30 -	-nample I of F6 from the 3.366 f case RT: 4.5	Constribute. With Constribute. With Constr	<u>] Annal</u> ( <b>F</b> )4	APED 012 - Internal Avez, 15294 crest 2500 2500 500 2000 50 2000 2000 2000 2	dd (Mark) sawyle Iw Height 300e3 m	1 of 10 from GruenDate e RT:0.70 min	2.000 	
2 - amathin (Mask) 2 - amathin (	-nample Tot F6 from the 23de f case RT: 45 070	ChartData.Wiff Weise	<u>  Annel</u> – <b>F</b>	APTD 012 - Internal Avag. 15294 cost 2900 2500 9000 9000 9000 9000 9000 9000	dd (Mark), sawyle de Height 3.00e3 m	1 of 18 from GruenDate #11:070 mix	2.000 	
2 - analyte (Neat) 2 - an	-nample Tot F6 from the 2366 f ope RT: 45	ChrantData.Wiff Tenta	1.90 1.00	APTD 012 - interval Ava. 1 E244 cost 2900 2000 1000 1000 1000 1000	dd (Mark) sawyla de Height 3.00e3 w	1 of 18 from GruenDate RT:0.70 mix	Table 1 4 Milet Anno 19	
2 - analyte (Neat) 2 - an	A Plant	ChrantData.Witt Pence	1.50 1.05	APTD 12 - Internal Ava., 1.5244 cent 2900 2000 - 1000 - 1000 - 1000 - 1000 - 500 -	dd (Mark), sample In Height 3.00e3 rg	1 of 18 from GuanDuk RT:0.70 mix		
2 - analyte (Neat) 2 - an	A C A A A A A A A A A A A A A A A A A A	ConstData.Mitt Pente	1.50 1.65	APTD 012 - Internal Ava., 1.9244 cent 2900 2900 - 1000 - 1000 - 1000 - 1000 - 1000 - 1000 - 1000 -	nld (Mark), sample in Height 3.00e3 m	1 of 18 from GuanDuk RT:0.70 mix		

Figure 3-12.



3.3.6 調整 Peak Review Pane 的大小以便觀察(Figure 3-13).



Figure 3-13.

- 3.3.7 選擇 (Expand Active Graph) 以展開層析圖.
- 3.3.8 更改 Bunching Factor 以及 Num. Smooths 並選擇 . 質量峰便會以新的積分參數重新積分.
- 3.3.9 此時,若要以新的積分參數置換原始的積分參數,則按下 Accept.



3.3.10 當按下 Accept 後, Record Modified 會被記錄(勾選)(Figure 3-14). 此時, 其他的資料仍然使用原始 的積分方法. 要將新的積分方法應用於所有的樣品時, 在 Peak Review 中右擊滑鼠並選擇 Update Method.

Andret - Peak Review In	"Tuining (dk?)								. # ×
Ete Est Mens Link ho	olev Solat Bela								<u>-141 X</u>
Comple	-	9000	X 90 10 10	Ct & Quantin	te Hode 💌		9 A M 9	4116	
I R W F & W K	四4433	6 3×	a × 0	HODE					
famile El CE (El Se	181	Full. Guer Ide	anne 7 Marei				~		
Sample Home	Somple Type	File Harne	Analyte Peak Area (county)	Analyta Concernation	IS Peak Area (count)	IS Peak Heigh	Use Record	Hacard Modified	c.
2 APO 013 3 APO 013 4 PO 014	Data Shandard Shandard Price 4 and	Conference SuperCate Wit SuperCate Wit	1,2556+003 2,49156+003 4,1470-2011	0 10000 0 10000 0 20000	1409-001 3 14e-4304 1 97e-4304 1 14e-4304	1 0/1000000 3 5%+4000 3 0%+4000 3 0%+4000 1 8%+4000	P P T		in the second
Backing Faster 1 Nan. Secole: 1 Separate With 12	O La La fa	400 400 400 400 400 400 400 400 400 400	RT labolase Expected HT T Lite Relation R	(203 and (203 and (20	Sar Th				
Ers Peak Kalon (5.10) APID-813 - amatyle (Riserit) - an Amar: 1.58e2counts Akopit:	Exp. Arbustet Ro angula I of REfrom 1 4.00x1 cps. X2: 9.51	ing [4 3] Deserflate.Will min	Esp. Valley Ratio:	110 Prg	Red June				
naturit, the second tag	0.22 sh sh	- 62 - 62	699 679 1 127 128	42 () Time and	0 0	- 10 0 0	182 ú ú	1.08	न 🔨
'w Help, petc PT							۵	la l	

Figure 3-14.

3.3.11 若要手動積分,按下」以滑鼠拖曳一個包含質量峰的區域(Figure 3-15).







- 3.3.12 在右擊滑鼠所跳出的選單中可以選擇 Revert to Method 來使用原來的積分參數.
- 3.3.13 在右擊滑鼠所跳出的選單中選擇 *Slide Show Peak Review*, 可以設定以幻燈片的放映方式瀏覽所有的樣品(Figure 3-16).





- 3.3.14 要停止瀏覽,則按下♥♥;要暫停則按下♥♥;要回到第一個樣品則按下♥♥;要瀏覽上一個樣品則按
- 3.3.15 要印出所有的資料, 選擇 *File→Print→Pane*(Figure 3-17); 若要印出目前瀏覽的層析圖則選擇 *File→Print→Window*.



Figure 3-17.



## 3.4 檢視統計資料(Viewing Statistics).

Note:每個樣品的統計資料都可以在定量模式中按下 The 而顯示出來.

3.4.1 按下 流 統計視窗便出現(Figure 3-18).

Statistics for	Training rdb						
latistics Metric:	Concentration		landard T	E Appendities	data setis)		
nalyte Name:	analyte		inue By Narch	~			
Expected	on Of Values	Low	High	Mean	Standard Deviation	%CV	Accura
100000	1	0.066900	0.068900	0.068900	0.000000	0.000000	68 900000
200000	1	0.203000	0.203000	0.203000	0.000000	0.000000	101.500000
500000	1	0.558000	0.558000	0.558000	0.000000	0.000000	111.600000
0000000	1	1.090000	1.090008	1.090000	0.000000	0.000000	109.000000
000000	1	2.170000	2.170000	2.170000	0.000000	0.000000	108.500000
000000	1	5.010000	5.010000	5.010000	0.000000	0.000000	100.200000
0000000	1	10.300000	10.300000	10.300000	0.000000	0.000000	103.000000
0000000	1	19.400000	19.400000	19.400000	0.000000	0.000000	97.000000

Figure 3-18.

3.4.2 選擇 Statistics Metric Concentration . 分析物藉著選定合適的分析物名(<u>A</u>nalyte Name)而被分開檢視,而標準品和 QC 的樣品也可藉著選定合適的樣品型式(Sample Type)而被分開檢視.

## 3.5 建立及執行質詢(Building and Executing a Query).



Figure 3-19.

- 3.5.4 在質詢視窗中將 And 改成 Or. 在 Mane accuracy test 鍵入 Acurracy Test 然後按下 Save/Execute 以在結果列表 中儲存並執行質詢.


3.5.5 結果列表會被質詢, 資料的正確性會在 90 以下或是 105 以上(Figure 3-20). 選擇 Show All Samples 以查看所有的樣品.

In La yen Jok yeke jost jek   Image: Second and S	+ An	v§cot -[Tteining.cdb]									- 15 2
Image: Second     Imag	10	e Lat Yeev Looks H	(Nichow Scott Links	inter and internet						-	
Image: Second	01	Example	-	2683	100 2	C # Quantia	te Mode 🔳		(2) 其 · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	12 10	
FatLapot Generative International Second S			2112	8 P		TDE					
Sample Name         Sample Type         File Name         Analytic Acea (sausta)         IS Poak Area (countie)         IS Poak Holgin (countie)         Use Record Notifier           1         4/53015         Standard         QuarData W#         1.2555e-003         0.10000         2.14e-004         3.30e-003         FF         C           2         A/93015         Standard         QuarData W#         5.3429e-003         0.50000         1.74e+004         2.80e+003         FF         C           3         A/52305         Standard         QuarData W#         5.3429e-003         0.50000         1.74e+004         2.80e+003         FF         C           4         A/93017         Standard         QuarData W#         1.0055e=004         1.0000         1.87e+004         3.03e+003         FF         C           4         A/93017         Standard         QuarData W#         2.3844e+004         2.0001         2.02e+004         3.23e+003         FF         C	Farm		বাঁচা	Full Gue	Lapost ey acouscy test						
1         24/33/15         Standard         QuarDuta Wiff         12656+003         0.10000         2.14e+004         3.37e+003         JF         C           2         493.015         Standard         QuarDuta Wiff         5.3429e+003         0.50000         1.74e+004         2.83e+003         JF         C           3         4213.016         Standard         QuarDuta Wiff         1.0825e+004         1.0000         1.87e+004         2.83e+003         JF         C           4         493.017         Standard         QuarDuta Wiff         1.0825e+004         1.0000         1.87e+004         3.03e+003         JF         C           4         493.017         Standard         QuarDuta Wiff         2.2844e+004         2.0000         2.02e+004         3.23e+003         JF         C		Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)	Analyte Concentration	IS Peak Area (countil)	IS Peak Height	Use Record	Record Notified	Can
2         4493-015         Standard         QuarData Wiff         5 3425e-003         0.50000         1.74e+004         2.83a+003         IF         IT           3         4493-015         Standard         QuarData Wiff         1.025e+004         1.0000         1.87e+004         3.05e+003         IF         IT           4         4493-017         Standard         QuarData Wiff         2.3844e+004         2.0000         2.02e+004         3.23e+003         IF         IT	1	2533015	Statubard	QuarData Wiff	1.2555e+003	B 10000	2.14e+004	3.37++003	2	E	330.0
3         44-13-0.20 4         Standard         QuerData W/#         1.0625e-4004         1.0000         1.67e+4014         3.03e+4003         JP         IT           4         44-33-0.17         Standard         QuerData W/#         2.2844e+004         2.0000         2.02e+004         3.23e+003         JP         IT	2	API3-015	Standord	GuenDeta Wilf	5.3429e+003	0.50000	1.74e+004	2.83a+003	3		0.558
4         AFN3-017         Standard         QuarData Wilf         2.38446+004         2.0000         2.02e+004         3.23e+003         F         T	3	AP(3-016	Standard	GuarData Wiff	1.0825e+004	1.0000	1.87e+004	3.03e+003	P	E	1.00
	4	API3-017	Standard	QuanData Wilf	2.28440+004	2 0000	2.02e+004	3.23e+003	R	D	2.17
4	+										2

Figure 3-20.

## 3.6 建立和執行分類(Building and Executing a Sort).

3.5.6 在結果列表的左上角處單擊滑鼠右鍵並選擇 Sort → New 以打開分類視窗(Figure 3-21a)

Sort	? ×
<u>N</u> ame:	Save/Execute
E <u>x</u> ecute	Cancel
Sort By	
<u>G</u> roup: Off	• Ascending
Column:	C <u>D</u> escending
- Then By-	
Group: Off	• Ascending
C <u>o</u> lumn:	C D <u>e</u> scending
- Then By-	
Group: Off	Ascending
Cojumn:	C Descending
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	





3.5.7	第一次執行分類時,在 <sup>Name: Sample type, concentration</sup> 中鍵入 Sample type, concentration(Figure 3-21b).
	在Group: Sample 」中選擇 Sample, 接著在 Column: Sample Type 」中選擇 Sample
	<i>type</i> . 選擇 <sup>• <u>Descending</u></sup> 作 爲 分 類 的 方 向 . 重 複 上 步 驟 除 了 在 <u>G</u> roup 中 選 擇
	Group: Analyte
	分類方向.

Sort		? ×
<u>N</u> ame: Sam	ple type, concentration	Save/Execute
	E <u>x</u> ecute	Cancel
-Sort By-		
<u>G</u> roup:	Sample 💽	C Ascending
<u>C</u> olumn:	Sample Type	• • <u>D</u> escending
- Then By-		
Group:	Analyte	• A <u>s</u> cending
C <u>o</u> lumn:	Analyte Concentration	O D <u>e</u> scending
- Then By-		
Gro <u>u</u> p:	Off	• Ascending
Co <u>l</u> umn:		C Descending
Sort By <u>G</u> roup: <u>C</u> olumn: Then By Group: C <u>o</u> lumn: Then By- Gro <u>u</u> p: Co <u>l</u> umn:	Execute Sample Sample Type Analyte Analyte Off	Cancel Ca

## Figure 3-21b

3.5.8 按下 Save/Execute 以同時儲存並執行分類的動作, 資料將以所設定的分類參數被分類(Figure 3-22).

COLUMN COLUMN	9 H	Gue	Lapost ny Norm						
Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)	Analyte Concentration	15 Peak Area (counti)	IS Peak Height (cps)	Use Record	Record Notified	C.
APt3-024	Unknown	GuarData Wiff	1.9890e+004	N/A	1.29e+004	2.03e+003		Ð	2.9
API3-025	Unknown	GuenDeta Wilf	1,3197e+004	NA	8.54e+003	1.29+003			2.5
AP(3-026	Unknown	GuarData Wiff	1.6854#+004	N/A	1.05e+004	1.74e+003		E	3.0
AP(3-027	Unknown	QuerData Will	2.08986+004	NA	1.11e+004	1.77e+003		D	3.6
API3-028	Unknown	QuanData Wiff	1.9802+4004	PAVA.	1.10e+004	1.76++003		E	3.4
AP13-029	Unknown	GuanData Wilf	1.7421e+004	NA	9.846+003	171e+003		0	3.4
AP15-030	Unknown	QuanData Wiff	2.1595e+004	76/A	1.21#+004	210e+003		E	3.4
API3-013	Standard	GuanData Will	1 2555e+003	0.10000	2.146+004	3.37e+003	P		D.D
AP(3-014	Standard	GuarData Wiff	2.4915e+003	0.20000	1.97e+004	3.09++003	2	E	0.3
AP(3-015	Standard	GuerData Will	5.3429e+003	0.50000	1.74e+004	2.83e+003	P	E	0.5
AP13-016	Standard	GuariData Witt	10825e+004	1.0000	1.87e+004	3 03++003	P	E	1.0
API3-017	Standard	GuanData Wilf	2.2844e+004	2,0000	2.02e+004	3.23+003	P	0	21
AP13-018	Standard	GuanData Witt	58128e-4004	5 0000	2.26e+004	3 59++003	P	E	52
AP(3.019	Standard	QuerDate Will	1.2175e+005	10.000	2.31e+004	3.659+003	P	0	10
AP(3-020	Standard	QuanData Witt	1.2091e+005	20 000	1.22#+004	1.99++003	P		19
API3-012	Etank	QuanData Wilf	1.9814e+002	0.0000	1.92e+004	3.08e+003		F	Ni
	Sample Name AP(3-024 AP(3-025 AP(3-025 AP(3-025 AP(3-025 AP(3-025 AP(3-025 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015) AP(3-015 AP(3-015 AP(3-015) AP(3-015 AP(3-015) AP(3-015 AP(3-015) AP(3-015) AP(3-015 AP(3-015) AP(3-015	Sample Name         Sample Type           APG-024         Unknown           APG3025         Unknown           APG3025         Unknown           APG3025         Unknown           APG3027         Unknown           APG3028         Unknown           APG3029         Unknown           APG303         Standard           APG3013         Standard           APG3015         Standard           APG3016         Standard           APG3017         Standard           APG3018         Standard           APG3019         Standard           APG3019         Standard           APG3012         Blank	Sample Name         Sample Type         File Name           API3-024         Unknown         QuanData Wiff           API3-025         Unknown         QuanData Wiff           API3-025         Unknown         QuanData Wiff           API3-026         Unknown         QuanData Wiff           API3-028         Unknown         QuanData Wiff           API3-029         Unknown         QuanData Wiff           API3-029         Unknown         QuanData Wiff           API3-030         Unknown         QuanData Wiff           API3-031         Unknown         QuanData Wiff           API3-030         Unknown         QuanData Wiff           API3-031         Standard         QuanData Wiff           API3-015         Standard         QuanData Wiff           API3-015         Standard         QuanData Wiff           API3-016         Standard         QuanData Wiff           API3-017         Standard         QuanData Wiff           API3-018         Standard         QuanData Wiff           API3-018         Standard         QuanData Wiff           API3-018         Standard         QuanData Wiff           API3-019         Standard         QuanData Wiff	Sample Name         Sample Type         File Name         Analyte Peak Area (county)           API3-024         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9000e=004           API3-025         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9070e=004           API3-026         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9070e=004           API3-026         Unknown         QuanDuta Wiff         1.8054e=004           API3-026         Unknown         QuanDuta Wiff         1.8054e=004           API3-028         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-029         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-030         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-031         Blawdard         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-030         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-031         Blawdard         QuanDuta Wiff         1.9002e=004           API3-030         Unknown         QuanDuta Wiff         1.9555e=003           API3-0315         Blawdard         QuanDuta Wiff         2.8115e=003           API3-015         Blawdard         QuanDuta Wiff         2.8142e=004           API3-016         Standard <t< th=""><th>Sample Name         Sample Type         File Name         Assays Peak Area (counts)         Analytic Concentration (counts)           APD-024         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 6854e+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         2 08980+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-029         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-030         Unknown         QuanData Wiff         1 2855e+4003         0 10000           APD-0316         Standard         QuanData Wiff         2 4915e+4003         0 20000           APD-0315         Standard         QuanData Wiff         5 3429e+4003         0 20000           APD-0316         Standard         QuanData Wiff         2 2844e+4004         2 0000           APD-0</th><th>Sample Name         Sample Type         Hie Name         Analyte Peak Area (counti)         Concentration (counti)           API3-024         Unknown         QuanData Wiff         19800e-004         N/A         129e-004           API3-024         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         129e-004           API3-025         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         854e+003           API3-026         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         854e+003           API3-028         Unknown         QuanData Wiff         20898e+004         N/A         110e+004           API3-029         Unknown         QuanData Wiff         13955e+004         N/A         131e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         N/A         131e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         D         10000         137e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         D         10000         137e+004           API3-015         Standard         QuanData Wiff         12415e+003         D         0000         137e+004           API3-015</th><th>Sample Name         Sengle Type         File Nome         Analytic Artia (cause)         Constraint attain (countin)         IS Peak Area (countin)         <this area<br="" peak="">(countin)         IS Peak Area (</this></th><th>Sample Name         Sample Type         Hile Name         Analytic Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)           API3-024         Unknown         Quar/Data Wiff         19800e-004         N/A         1.29e+004         2.03e+003         1.29e+003           API3-025         Unknown         Quar/Data Wiff         1.8957e+004         N/A         8.54e+003         1.25e+003         1.25e+003           API3-026         Unknown         Quar/Data Wiff         1.8957e+004         N/A         8.54e+003         1.74e+003           API3-028         Unknown         Quar/Data Wiff         2.03980+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003           API3-029         Unknown         Quar/Data Wiff         1.9002+004         N/A         1.10e+004         1.75e+003           API3-029         Unknown         Quar/Data Wiff         1.7421e-004         N/A         1.31e+004         2.10e+003           API3-030         Unknown         Quar/Data Wiff         2.4556+0030         D.10000         1.37e+004         3.09e+003         JPI           API3-015         Standard         Quar/Data Wiff         2.4556+0030         D.20000         1.37e+004         3.09e+003         JPI           AP</th><th>Sample Name         Sample Type         Hile Hame         Analytic Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         Record Modified           API3-024         Unknown         QuarData Wiff         19900e-004         N/A         1.29e+003         2.03e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         1.9957e+004         N/A         8.54e+003         1.29e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         1.9957e+004         N/A         8.54e+003         1.74e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         2.9958e+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003         Г           API3-029         Unknown         QuarData Wiff         1.9052e+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003         Г           API3-030         Unknown         QuarData Wiff         1.7421e+004         N/A         1.21e+004         2.01e+003         Г           API3-030         Unknown         QuarData Wiff         2.415e+003         0.10000         1.97e+004         2.00e+003         97         Г           API3-015         Standard         <t< th=""></t<></th></t<>	Sample Name         Sample Type         File Name         Assays Peak Area (counts)         Analytic Concentration (counts)           APD-024         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 9800+4004         NA           APD-025         Unknown         QuanData Wiff         1 6854e+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         2 08980+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-028         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-029         Unknown         QuanData Wiff         1 9802e+4004         NA           APD-030         Unknown         QuanData Wiff         1 2855e+4003         0 10000           APD-0316         Standard         QuanData Wiff         2 4915e+4003         0 20000           APD-0315         Standard         QuanData Wiff         5 3429e+4003         0 20000           APD-0316         Standard         QuanData Wiff         2 2844e+4004         2 0000           APD-0	Sample Name         Sample Type         Hie Name         Analyte Peak Area (counti)         Concentration (counti)           API3-024         Unknown         QuanData Wiff         19800e-004         N/A         129e-004           API3-024         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         129e-004           API3-025         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         854e+003           API3-026         Unknown         QuanData Wiff         13987e-004         N/A         854e+003           API3-028         Unknown         QuanData Wiff         20898e+004         N/A         110e+004           API3-029         Unknown         QuanData Wiff         13955e+004         N/A         131e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         N/A         131e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         D         10000         137e+004           API3-030         Unknown         QuanData Wiff         12956e+003         D         10000         137e+004           API3-015         Standard         QuanData Wiff         12415e+003         D         0000         137e+004           API3-015	Sample Name         Sengle Type         File Nome         Analytic Artia (cause)         Constraint attain (countin)         IS Peak Area (countin)         IS Peak Area (countin) <this area<br="" peak="">(countin)         IS Peak Area (</this>	Sample Name         Sample Type         Hile Name         Analytic Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)           API3-024         Unknown         Quar/Data Wiff         19800e-004         N/A         1.29e+004         2.03e+003         1.29e+003           API3-025         Unknown         Quar/Data Wiff         1.8957e+004         N/A         8.54e+003         1.25e+003         1.25e+003           API3-026         Unknown         Quar/Data Wiff         1.8957e+004         N/A         8.54e+003         1.74e+003           API3-028         Unknown         Quar/Data Wiff         2.03980+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003           API3-029         Unknown         Quar/Data Wiff         1.9002+004         N/A         1.10e+004         1.75e+003           API3-029         Unknown         Quar/Data Wiff         1.7421e-004         N/A         1.31e+004         2.10e+003           API3-030         Unknown         Quar/Data Wiff         2.4556+0030         D.10000         1.37e+004         3.09e+003         JPI           API3-015         Standard         Quar/Data Wiff         2.4556+0030         D.20000         1.37e+004         3.09e+003         JPI           AP	Sample Name         Sample Type         Hile Hame         Analytic Peak Area (countie)         IS Peak Area (countie)         Record Modified           API3-024         Unknown         QuarData Wiff         19900e-004         N/A         1.29e+003         2.03e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         1.9957e+004         N/A         8.54e+003         1.29e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         1.9957e+004         N/A         8.54e+003         1.74e+003         Г           API3-025         Unknown         QuarData Wiff         2.9958e+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003         Г           API3-029         Unknown         QuarData Wiff         1.9052e+004         N/A         1.10e+004         1.77e+003         Г           API3-030         Unknown         QuarData Wiff         1.7421e+004         N/A         1.21e+004         2.01e+003         Г           API3-030         Unknown         QuarData Wiff         2.415e+003         0.10000         1.97e+004         2.00e+003         97         Г           API3-015         Standard <t< th=""></t<>



## 3.7 建立和執行尺度的標繪圖(Building and Executing a Metric Plot).

3.5.9 在結果列表的左上角處單擊滑鼠右鍵並選擇 *Metric Plot* → *New* 以打開尺度標繪圖視窗(Figure 3-23a).

Metric Plot	? ×
Name:	[Save/Execute]
	Cancel
<u>G</u> roup: Index	Execute
Column:	
- Y Axis	
Group: Index	
C <u>o</u> lumn:	
Show	
Regression: None Veighting:	None 💌
C None	
O Percent Deviation Percent: 50	
C Standard Deviation <u>Multiplier</u> : 2	

Figure 3-23a.

- 3.5.10 在尺度標繪圖中,在X Axis 的視窗中 Group: Index → 內選擇 Internal Standard Column. → 選擇 IS Peak Area. 在Y Axis 的視窗中 Group: Index → 選擇 Internal Standard Column. → 中選擇 IS Peak Height.
- 3.5.11 在<sup>Name:</sup> Column test 中鍵入 Column test 並在<sup>Begression</sup> □中選取 Linear 「Figure 3-23b)然後按下 Save/Execute」以同時儲存及執行尺度標繪.

Metric Plot	? ×
Name: Column test	Save/Execute
-X Axis	Cancel
Group: Internal Standard	Execute
Column: IS Peak Area	
Y Axis	
Group: Internal Standard	
C <u>o</u> lumn: IS Peak Height	
Show	
Regression: Linear Veightin	ng: None 💌
• None	
Percent Deviation Percent: 50	
C Standard Deviation Multiplier: 2	



Analyst 中文操作手册



Figure 3-24.

## 3.8 使用公式(Using a Formula Column).

- 3.5.12 在結果列表的左上角處單擊滑鼠右鍵並選擇 Add Formula column. 新的 formula #1 會出現在結果列表的最後一行.
- 3.5.13 單擊 Formula #1 然後在結果表列的左上方 Formula #1 Peak Area/IS Peak Area/IS Peak Height, 接著按下 Enter 鍵以儲存此公式. 資料中 IS Peak Area 內的資料會被自動除以 IS Peak Height 內的資料而所得的值會被直接輸入在 Formula #1 那一行內(Figure 3-25).







3.5.14 在 <sup>Formula #1</sup> 上點兩下滑鼠左鍵會出現一個 *New Title* 的視窗, 在此可以更改 <sup>Formula #1</sup> 的名字(Figure 3-26).



Figure 3-26.

