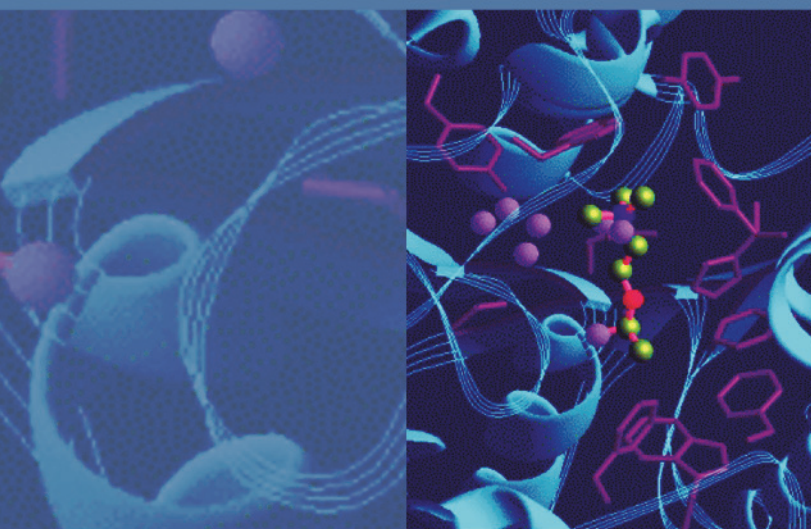




Thermo Xcalibur

XReport

版本 2.2

用户手册

XCALI-97373 修订版 B 2011 年 5 月



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

Xcalibur、Surveyor 和 Accela 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标，LCQ、BioWorks 和 LCQuan 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的商标。

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

下列是在美国和其它国家（地区）的注册商标：Agilent 是 Agilent Technologies, Inc. 的注册商标。Oracle 是 Oracle Corporation 及 / 或子公司的注册商标。Waters 是 Waters Corporation 的注册商标。

所有其它商标均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 及其子公司的财产。

Thermo Fisher Scientific Inc. 为购买产品的客户提供本文档，供其在操作产品时参考。本文档受版权保护，未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 书面许可，严禁复制本文档或本文档的任何部分。

本文档的内容可能随时更改，恕不另行通知。本文档中的所有技术信息仅供参考。本文档中的系统配置和规格将取代购买者先前获得的所有信息。

Thermo Fisher Scientific Inc. 不保证本文档的完整性和准确性，而且对于可能因使用本文档（即使是在正确遵循本文档中的说明信息的情况下）而导致的任何错误、疏忽、损害或损失，Thermo Fisher Scientific Inc. 概不负责。

本文档不是 Thermo Fisher Scientific Inc. 和购买者之间的销售合同的一部分。任何情形下，都不得使用本文档来取代或修改任何“销售条款与条件”，若两份文档信息发生冲突，则以“销售条款与条件”中的信息为准。

发行历史：2011 年 1 月修订版 A（以反映 Windows 7 的兼容性）；2011 年 5 月修订版 B

软件版本：Thermo Xcalibur 2.2

仅供研究使用。不可用于诊断。

目录

	前言	vii
	相关文档	vii
	安全和特殊注意事项	viii
	联系我们	viii
第 1 章	XReport 概述	1
	XReport 窗口	1
	报告模板概述	3
	报告模板	3
	部分	4
	报告项目	4
	数据源文件	7
	报告	7
	配置 XReport 项目	8
	配置重复部分	8
	配置表格	8
	使用色谱图向导	9
	配置组分校正曲线	9
	使用 Data Source Browser	9
	XReport 模板样本	9
	使用 XReport	9
	启用 XReport	9
	选择报告模板	11
	利用 XReport 创建和生成报告	11
	退出 XReport	13
第 2 章	创建模板	15
	添加、排序和配置部分	16
	添加、删除或重排序部分	16
	调整部分尺寸	16
	配置重复部分	16
	添加和配置报告项目	17
	添加、删除、重新定位项目和调整项目尺寸	18
	对齐项目	18
	居中项目	19
	使用报告模板网格	19
	使用列	19
	使用分页符	20
	配置项目	20
	在文本项目中添加用户文本	21

	在表格中添加公式	21
	更改字体设置	22
	更改页面布局	23
	预览和保存模板	24
第 3 章	生成报告	27
	在 XReport 中创建报告	27
	为模板选择数据源	27
	生成、保存和打印报告	29
	从 Xcalibur 数据系统创建报告	30
	样品报告和总结报告	30
	从 Sequence Setup 生成报告	30
	从 Quan Browser 生成报告	34
	创建签名报告	36
第 4 章	配置项目和部分	41
	配置重复部分	41
	配置文本项目	45
	配置文本字段	45
	添加自定义文本字段	46
	配置文本性质	48
	设置文本字体	49
	配置注解项目	50
	配置表格项目	52
	选择表格列	53
	配置自定义（用户）列	53
	指定表格排列次序	56
	设置表格字体	57
	设置其它表格属性	58
	配置位图项目	64
	配置色谱图	65
	Use Container Supplied Quan Peak 页面	67
	Use Container Supplied Qual Peak 页面	68
	Select Chromatogram Type 页面	69
	Select Demo File 页面	70
	Select the Quan Peak 页面	73
	Select the Qual Peak 页面	74
	Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面	75
	Configure How the Peak Window Will Look 页面	76
	Select Plot Details 页面	77
	Select Enhance Details 页面	79
	Select Chromatogram Style 页面	80
	Select the Peak Labeling 页面	81
	Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured 页面	84
	Configure Normalization for the Chromatogram 页面	85
	完成色谱图向导	85
	配置组分校正曲线	86
	配置质谱图	87
	配置选项	88

	配置谱图类型	88
	优化谱图	89
	配置质谱图风格	90
	配置峰标签	91
	配置坐标轴	92
	选择归一化选项	93
	指定峰	94
	配置列	95
	设置样品重复选项	96
	设置总结重复选项	97
附录 A	XReport 模板文件样本	99
附录 B	报告项目类型	101
	Text 项目	101
	Table 项目	103
	Graphic 项目	105
	Formatting 项目	105
附录 C	样品报告	107
	Peak Integration Report, Page 1 (峰积分报告, 第一页)	108
	Peak Integration Report, Page 2 (峰积分报告, 第二页)	109
	Peak Integration Report, Page 3 (峰积分报告, 第三页)	110
	Peak Integration Report, Page 4 (峰积分报告, 第四页)	111
附录 D	XReport 参考指南	113
	Reports 视图	113
	XReport 工具栏按钮	113
	XReport 菜单	115
	XReport 对话框	119
	Configure Repeating Section 对话框	119
	Chromatogram Properties 对话框和向导	121
	Spectrum Properties 对话框	132
	Table Properties 向导	137
	Edit Formula For 对话框	140
	Configure Function 对话框	141
	Spectrum List Table Properties 对话框	142
	Average Scan Filter Selection 对话框	145
	Library Search Graphics Table Properties 对话框	145
	Library Search Results Table Properties 对话框	145
	Sample Table Properties 对话框	146
	Text Object Properties 对话框	146
	Bitmap Properties 对话框	149
	Column Properties 对话框	150
	Configure Component Calibration Curve 对话框	152
	Data Sources 对话框	152
	Electronic Signature Properties 对话框	152
	Font 对话框	153
	Preferences 对话框	153

Preview 窗口	153
Save As 对话框.	154
Template Configuration 对话框	155
报告部分	155
非重复部分	155
报告页眉和页脚	157
重复部分	157
报告项目	159
Graphic 和 Formatting 项目	159
Table 项目.	160
Text 项目	177
报告模板	189
术语表	191
索引	209

前言

Thermo™ XReport 是 Thermo Xcalibur™ 质谱仪数据系统的自定义报告程序。利用 XReport 可以创建自定义报告。

目录

- [相关文档](#)
- [安全和特殊注意事项](#)
- [联系我们](#)

若想要对此文档作出评论，点击以下链接：在此先对您的帮助表示感谢。



相关文档

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

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

安全和特殊注意事项

确保您遵循本指南中发布的事先声明。在方框内出现的安全和其他特别注意事项。

安全和其他特别注意事项包括下列内容：

重要信息 强调防止软件损害、数据丢失或无效测试结果必需的信息；或可能包含获得系统最佳性能的重要信息。

注释 强调普遍关注的信息。

提示 能够帮助简化工作的信息。

联系我们

您可以通过多种方式联系 Thermo Scientific，获取所需信息。

❖ 联系技术支持中心

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
电子邮件	us.techsupport.analyze@thermofisher.com
知识库	www.thermokb.com

若要下载更新和配套软件，请访问：mssupport.thermo.com。

❖ 联系客户服务中心，获取订购信息

电话	800-532-4752
传真	561-688-8731
电子邮件	us.customer-support.analyze@thermofisher.com
网站	www.thermo.com/ms

❖ 从互联网复制手册

请转至 mssupport.thermo.com，同意相关条款和条件，然后单击窗口左侧空白处的 Customer Manuals（用户手册）。

❖ 对文档或“帮助”提出更改建议

- 登陆 <http://www.surveymonkey.com/s/PQM6P62> 填写读者调查问卷。
- 向技术出版编辑发送电子邮件，邮箱地址为 techpubs-lcms@thermofisher.com。

XReport 概述

XReport 是 Xcalibur 数据系统的自定义报告特点。利用 XReport 创建包含应用程序生成的所有结果和重要信息的自定义报告。此外，利用 XReport 可以设置报告的格式，打印报告，将报告保存为文本（.txt 文件）、Microsoft™ Word™ 文档（.doc 文件）、Microsoft Excel™ 工作簿（.xls 文件）、富文本（.rtf 文件）、便携式显示（.pdf 文件）或网页（.htm 或 .html 文件）格式。利用这些选项发送电子邮件报告或将报告显示在网络上。

创建包含以下信息的 Xcalibur 报告：

- 文本信息（如样品信息）
- 表格信息（如校正文件表格）
- 图像信息（如质谱图或色谱图）

目录

- [XReport 窗口](#)
- [报告模板概述](#)
- [配置 XReport 项目](#)
- [使用 XReport](#)

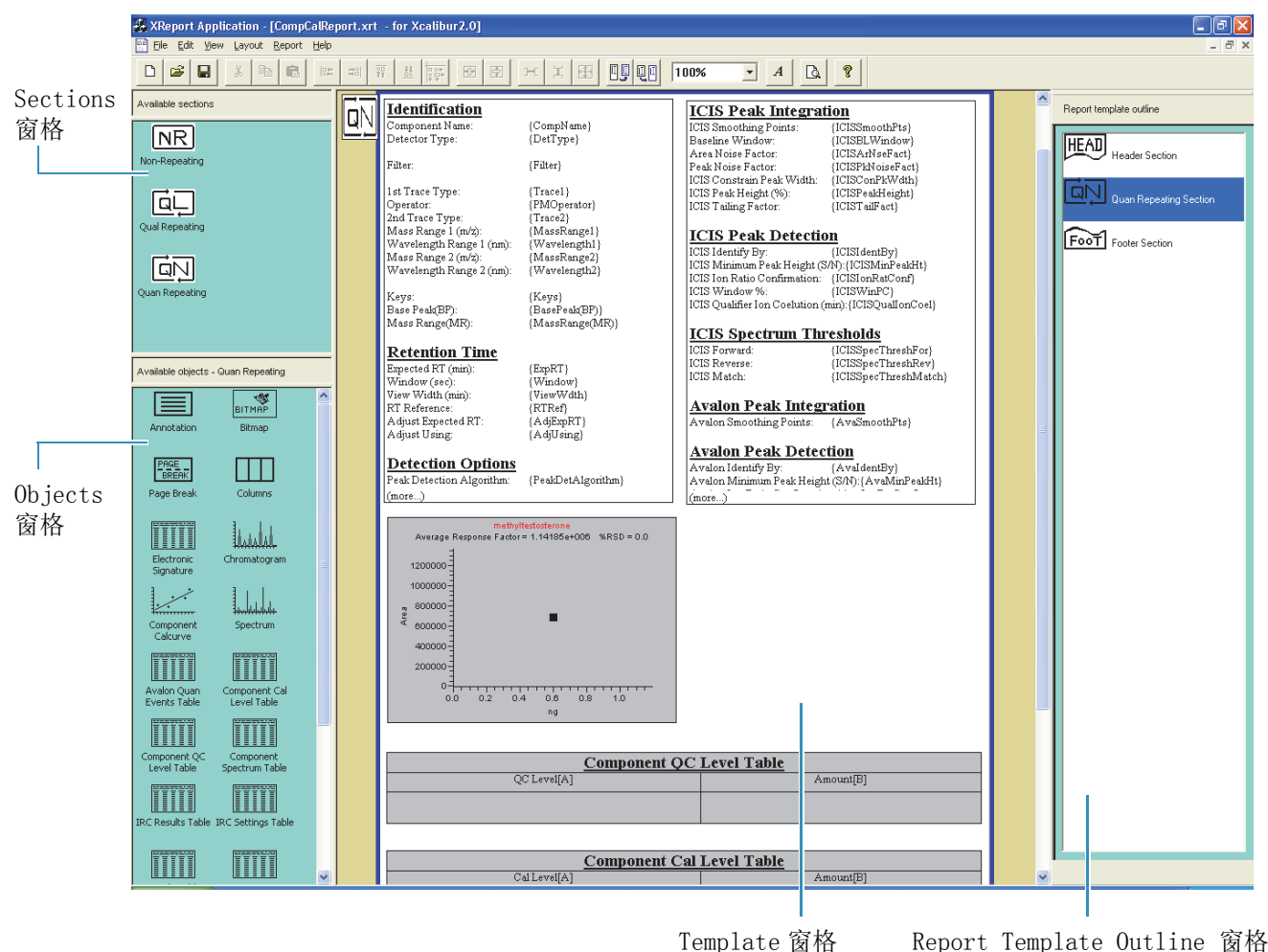
XReport 窗口

XReport 窗口被分为四个不同的窗格：

- Sections（部分）窗格
- Objects（项目）窗格
- Template（模板）窗格
- Report Template Outline（报告模板轮廓）窗格

参阅图 1 查看窗格的位置。

图 1. XReport 窗口



Sections 窗格列出了所选应用程序（如 Xcalibur）可用的报告部分。若要在报告中添加一个部分，将其从 Sections 窗格拖曳至 Template 窗格。

Objects 窗格列出了当前所选部分的可用项目。若要在报告中添加一个项目，将其从 Objects 窗格拖曳至 Template 窗格中当前所选的部分。

利用 Template 窗格，通过拖曳和排列项目来配置报告的布局。

- 若要配置报告项目，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**（属性）。
- 若要配置一个重复的部分，在 Sections 窗格上方页面的左边缘处右击 **QL**（定性）或 **QN**（定量）图标并从快捷菜单中选择 **Properties**。该窗格中页面的尺寸在横向或纵向模式下对应为 8.5 × 11 in.（21.59 × 27.94 cm.）纸张的标准尺寸。
- 通过向下拖曳某个部分的底部边框调整该部分的高度。所选部分具有蓝色边框。

Report Template Outline 窗格列出了当前报告中的每个部分。用户可以从该窗格移动或删除部分，也可以移除、重新定位或关闭它。

- 若要移除窗格，拖曳窗格上方灰色部分。
- 若要重新显示窗格，选择 **View**（查看）> **Report Template Outline**（报告模板轮廓）。

- 若要从模板中删除某个部分，在 Report Template Outline 窗格中单击并按 DELETE（删除）键。
- 若要移动某个部分，在 Report Template Outline 窗格列表中将其上下拖曳。无法移动页眉和页脚部分。
- 若要选择和滚动某个部分，可双击它。

报告模板概述

本章为 XReport 和 Xcalibur 数据系统新用户定义了贯穿该软件和手册的基本术语。本章定义以下主要术语：

- [报告模板](#)
- [部分](#)
- [报告项目](#)（欲了解更多详细信息，参阅[附录 B](#)，“[报告项目类型](#)。”）
- [数据源文件](#)（.pmd, .raw, .rst, .sld, .xcal）
- [报告](#)

报告模板

XReport 模板是定义报告的目录、布局和风格的 XReport 文档（.xrt 文件）。利用模板可以在报告模板中加入部分和报告项目（如曲线、表格、注解文本或图像）。该软件在将 Xcalibur 数据（数据源文件）和报告模板结合后生成 Xcalibur 报告。

XReport 提供多个可供使用的报告模板范本。这些模板位于 Xcalibur\Templates 文件夹下。欲了解更多关于预配置报告模板的详细信息，参阅[附录 A](#)，“[XReport 模板文件样本](#)。”

部分

将报告模板分成若干个部分以分别包含报告项目。利用 XReport 窗口中的 Sections 窗格在报告模板中添加部分。

XReport 所使用的部分的基本类型如下所示：

- 页眉或页脚部分
- 重复部分
- 非重复部分

当软件将数据和报告模板结合后，重复部分中的报告项目和非重复部分中的报告项目可以不同。欲了解更多关于重复部分内外的报告项目的作用，参阅附录 B，“报告项目类型。”

页眉或页脚部分

页眉或页脚是报告中的一个部分，通常在已解析报告的每页顶部和底部位置自动重复显示。页眉和页脚部分可以包含如公司标志、报告信息、页数和日期戳等信息。

重复部分

重复部分是报告模板中的一个部分，用于在已解析文本中对每个组分或峰进行自动重复。更改重复部分的属性以自定义其状态。

XReport 模板可以采用两种类型的重复部分：

定性重复部分	利用定性重复部分以数据形式显示与单个定性峰相关的细节信息。该部分可对所有找到的定性峰重复显示。
定量重复部分	利用定量、或组分、重复部分以数据形式显示与单个定量峰或在处理方法中配置的组分相关的细节信息。利用该部分可对所有找到的定量峰重复显示。

非重复部分

非重复部分通常显示与系统使用一次或总体使用的数据或方法相关的静态信息（如处理方法设置、仪器方法设置、文件名、确认离子信息等等）。

报告项目

报告项目通常是自定义表格、图像或文本，用于表明在报告中显示何种数据。当 Xcalibur 数据系统将数据和报告模板结合时，以数据取代报告模板中的报告项目来生成报告。参阅“报告项目”第 158 页获得更多信息。

报告项目包括下列内容：

- Text（文本）项目
- Table（表格）项目

- [Graphic（图像）项目](#)
- [Formatting（格式）项目](#)

参阅附录 B，“[报告项目类型](#)”，查阅 XReport 项目的描述列表。

Text（文本）项目

Text 项目包含静态文本标签和相关的自定义数据字段。若要自定义显示的特定域，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。Configuration（配置）对话框打开。当软件将数据和模板结合以生成报告时，将以文本信息（静态文本）取代文本项目字段。参阅“[Text 项目](#)”第 176 页获得更多信息。

以下 Xcalibur 文本项目会出现在 XReport 中：

- Annotation（注解）
- Component Ident/Detect/Cal Settings（组分识别 / 检测 / 校正设置）
- Component ISTD Settings Summary（组分内标设置总结）
- Component Settings Summary（组分设置总结）
- Component Sys Suit/Flags Settings（组分系统适用性 / 标记设置）
- Instrument Method（仪器方法）
- Processing Method - General（处理方法 — 一般）
- Processing Method - Qual（处理方法 — 定性）
- Quan ISTD Peak Summary（定量内标峰总结）
- Quan Peak Summary（定量峰总结）
- Report Info（报告信息）
- Sample Header（样品标题）

Table（表格）项目

当 Xcalibur 数据系统将数据和模板结合时，将以表格信息取代表格项目（创建信息丰富的数据表格）。配置或更改表格项目的属性以自定义其输出。XReport 提供以下表格项目：

• Avalon Qual Events Table （Avalon 定性事件表） • Avalon Quan Events Table （Avalon 定量事件表） • Calibration File Table （校正文件表） • Component Cal Level Table （组分校正水平表） • Component QC Level Table （组分质控水平表） • Component Spectrum Table （组分质谱图表） • Dilution Factor Table （稀释因子表） • Electronic Signature（电子签名） • Ion Ratio Confirmation Results Table （离子比率确认结果表） • IRC Settings Table （离子比率确认设置表） • IRC Summary Table （离子比率确认总结表） • Lib.Search Graph Table （库检索图像表） • Lib.Search Results Table （库检索结果表）	• Proc.Method Programs Table （处理方法程序表） • Proc.Method Sample Reports Settings Table （处理方法样品报告设置表） • Proc.Method Summary Reports Settings Table （处理方法总结报告设置表） • Qual Peak Table（定性峰表） • Qual Summary Table（定性总结表） • Quan Peak Table（定量峰表） • Quan Summary Table（定量总结表） • Sample Table (Quan Results) （样品表， 定量结果） • Sequence Table（序列表） • Spectrum Candidate Results Table （质谱图候选结果表） • Spectrum List Table （质谱图列表表）
--	--

Graphic（图像）项目

当 XReport 将数据和报告模板结合时，将以图像信息取代图像项目。配置或更改图像项目的属性以自定义其输出。参阅“[Graphic 和 Formatting 项目](#)”第 158 页获得更多信息。以下图像项目会出现在 XReport 中：

- Bitmap（位图）
- Chromatogram（色谱图）
- Component Cal (Calibration) Curve（组分校正曲线）
- Spectrum（质谱图）

Formatting（格式）项目

这些项目仅用于定义报告的格式，可用于 XReport 中：

- Columns（分栏）
- Page Break（分页符）

数据源文件

数据源文件是包含采集数据的文件。例如：Xcalibur 数据源文件有以下五种类型：

- 处理方法文件（.pmd）
- 原始文件（.raw）
- 结果文件（.rst）
- 序列文件（.sld）
- 校正文件（.xcal）

报告

利用报告模板生成报告（或已解析文件）。在 Xcalibur 报告中，软件将 Xcalibur 数据和报告模板中的报告项目结合。保存并以以下任一格式显示报告：

- Microsoft Word 文档（.doc 文件）
- 文本（.txt 文件）
- Microsoft Excel 工作簿（.xls 文件）
- 富文本（.rtf 文件）
- 便携式显示（.pdf 文件）
- 网页（.htm 或 html 文件）

配置 XReport 项目

利用 XReport 窗口的 Template 窗格，通过右击项目并从快捷菜单中选择 Properties 来配置项目。在打开的配置对话框中设置参数。可以配置 XReport 中几乎所有的条目，包括以下：

- 重复部分
- 表格
- 色谱图
- 质谱图
- 组分校正曲线
- 文本项目

参阅第 4 章，“配置项目和部分”，获取更多关于每个项目的特定配置信息。

配置重复部分

利用 Repeating Section Configuration（重复部分配置）对话框指定：

- 重复部分的类型：Qual（定性）或 Quan（定量）
- 是否从定量重复部分中排除内标或目标组分
- 峰和组分重复的次序
- 报告峰的数量限值
- 在最终报告中如何对单个峰或组分分页显示

配置表格

利用 Table Configuration（表格配置）向导：

- 指定表格包含的列数
- 定义和自定义表格列
- 指定表格的次序

使用色谱图向导

利用 Chromatogram 向导：

- 选择色谱图类型和峰类型
- 使用演示文件
- 选择图表细节
- 选择平滑参数
- 使用 MS Quan（质量定量）图
- 配置色谱图的显示、风格、标签、轴和归一化方法

配置组分校正曲线

利用 Component Calibration Curve（组分校正曲线）向导指定在报告中绘制非重复性 Component Cal Curve 报告项目的组分名。

使用 Data Source Browser

利用 Data Source Browser（数据源浏览器）选择可以在 XReport 中用于生成报告的数据文件。

XReport 模板样本

XReport 模板是内嵌有 XReport 项目的 XReport 文档（.xrt 文件）。用户无需创建私人 XReport 模板。XReport 为用户提供数据可以套用的自定义报告模板。欲了解更多关于报告模板的详细信息，参阅附录 A，“XReport 模板文件样本。”

使用 XReport

阅读以下主题，使用 XReport：

- [启用 XReport](#)
- [选择报告模板](#)
- [利用 XReport 创建和生成报告](#)
- [退出 XReport](#)

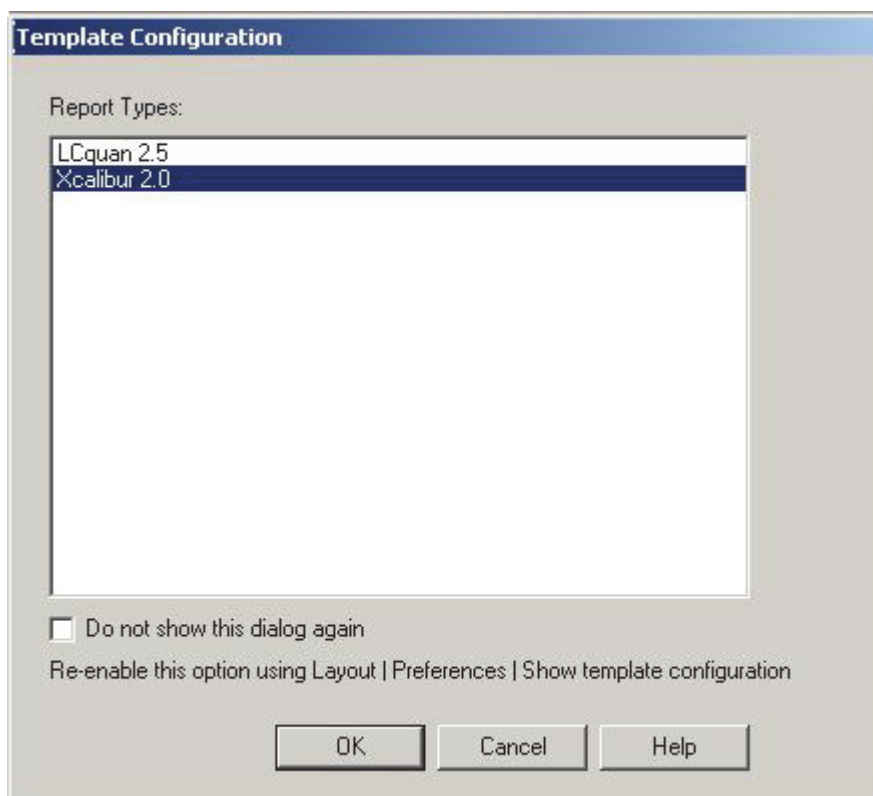
启用 XReport

❖ 若要启用 XReport

1. 双击计算机桌面上的 ，或从任务栏选择 Start（开始）> All Programs（所有程序）> Thermo Xcalibur > XReport。

当安装一个以上使用 XReport 制作报告的程序（如 Xcalibur 2.0 和 LCQuan™ 2.5）时，Template Configuration（模板配置）对话框打开（参阅图 2）。

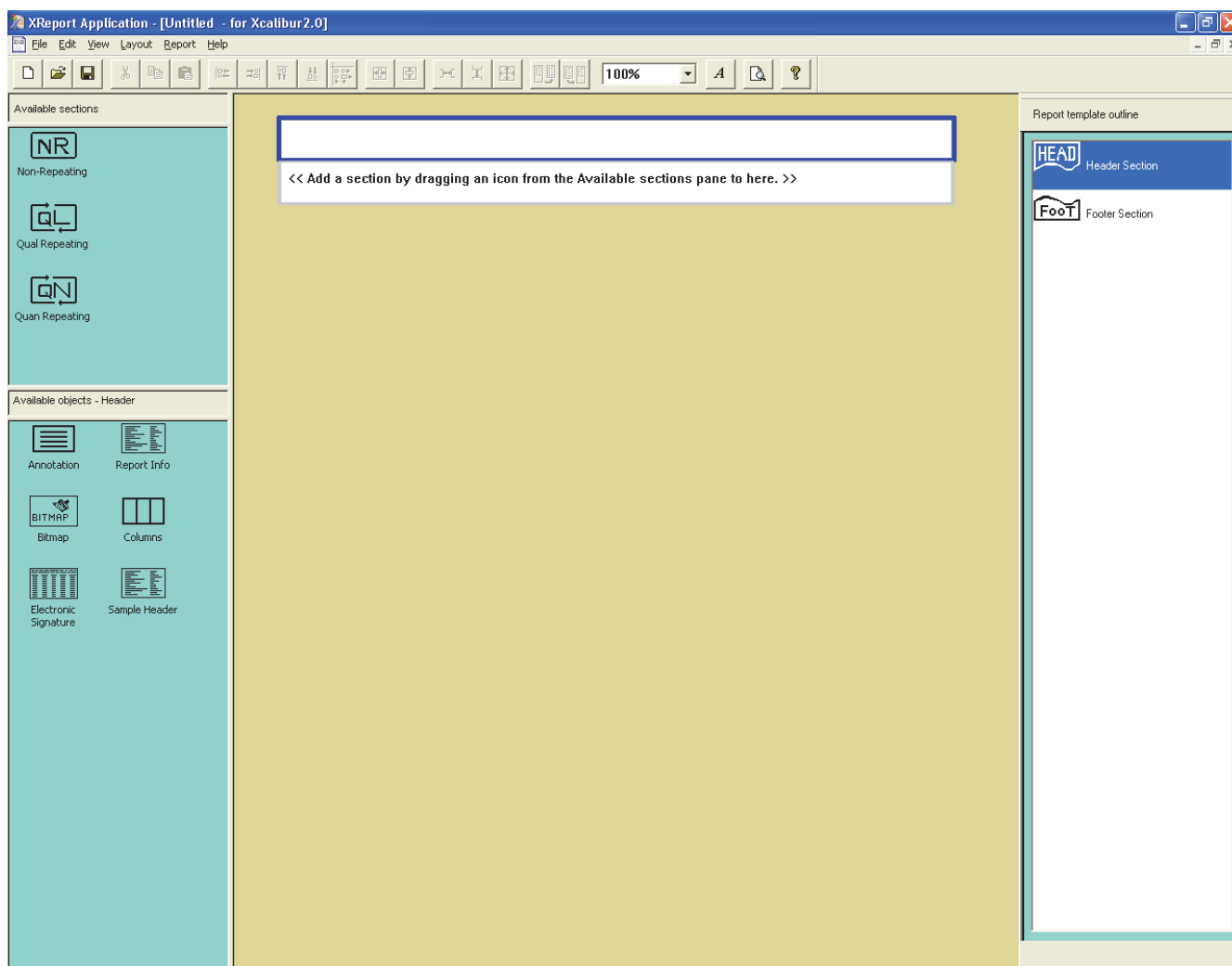
图 2. Template Configuration 对话框



2. 选择报告模板的应用程序并单击 **OK**（确定）。

XReport 打开并创建一个新模板（参阅图 3）。

图 3. XReport 窗口，显示一个新模板



选择报告模板

❖ 若要选择报告模板

1. 在 Reports（报告）视图中，选择 **File（文件） > Open（打开）**。一个浏览对话框打开。
2. 若要选择所需的报告模板，单击模板名称。如果名称没有显示，浏览至正确的文件夹。模板名称出现在 **File name（文件名）** 框中。
3. 若要查看报告模板并关闭对话框，单击 **Open**。

利用 XReport 创建和生成报告

利用 XReport 生成自定义 Xcalibur 报告的过程包含两个完全不同的阶段：

- [创建报告模板](#)
- [利用报告模板生成报告](#)

参阅这些章获得这两个阶段的更多信息：“创建模板”第 15 页和“生成报告”第 27 页。

注释 Xcalibur 数据系统提供供用户使用的 XReport 模板样本。内嵌有 XReport 项目的 .xrt 文件位于 Xcalibur\templates 文件夹下。欲了解更多关于报告模板的详细信息，参阅附录 A，“XReport 模板文件样本。”

创建报告模板

利用 XReport 创建自定义报告模板（.xrt 文件），用于定义最终报告的显示和报告中的特定信息。

❖ 若要创建报告模板

1. 单击  启用 XReport。

新 XReport 文件显示在报告窗口中（参阅图 3）。

2. 通过从 Available Sections（可用部分）和 Available Objects（可用项目）窗格中将条目拖曳至报告预览窗格中为报告模板添加报告部分和报告项目。
3. 通过在报告模板中配置部分和报告项目来调整其属性并自定义其输出。

右击项目和部分进行配置，并从快捷菜单中选择 **Properties**。在配置对话框中设置参数。利用菜单、工具栏或鼠标对项目执行对齐、调整大小和重新定位操作。

4. 保存报告模板。

欲了解更多关于如何创建和配置报告模板的详细信息，参阅第 2 章，“创建模板，”和第 4 章，“配置项目和部分。”

利用报告模板生成报告

创建报告模板完成之后，将一个或多个数据源文件（如 Xcalibur .pmd、.raw、.rst、.sld 和 .xcal 文件）和报告模板结合来生成报告。

共有三种生成报告的方法：

- 从 XReport 中打开的报告模板：检索所需数据源文件并为数据套用模板生成报告。预览、打印并将报告保存为 .txt、.doc、.xls、.rtf、.pdf 或 .htm 格式。
- 从数据处理应用程序（如 Xcalibur）：将在应用程序中生成的数据和报告模板相关联（在 Quan Browser（定量浏览器）中操作），并将数据和模板结合以生成单个报告。
- 从数据处理应用程序（如 Xcalibur）：在处理方法（如 Processing Setup（处理设置））中插入模板名称，当批处理数据（如在 Sequence Setup（序列设置）中）时自动生成报告。

注释 欲了解更多关于如何从 Xcalibur 数据系统生成报告的详细信息，参阅第 3 章。

退出 XReport

- ❖ 若保存报告模板或报告和 XReport

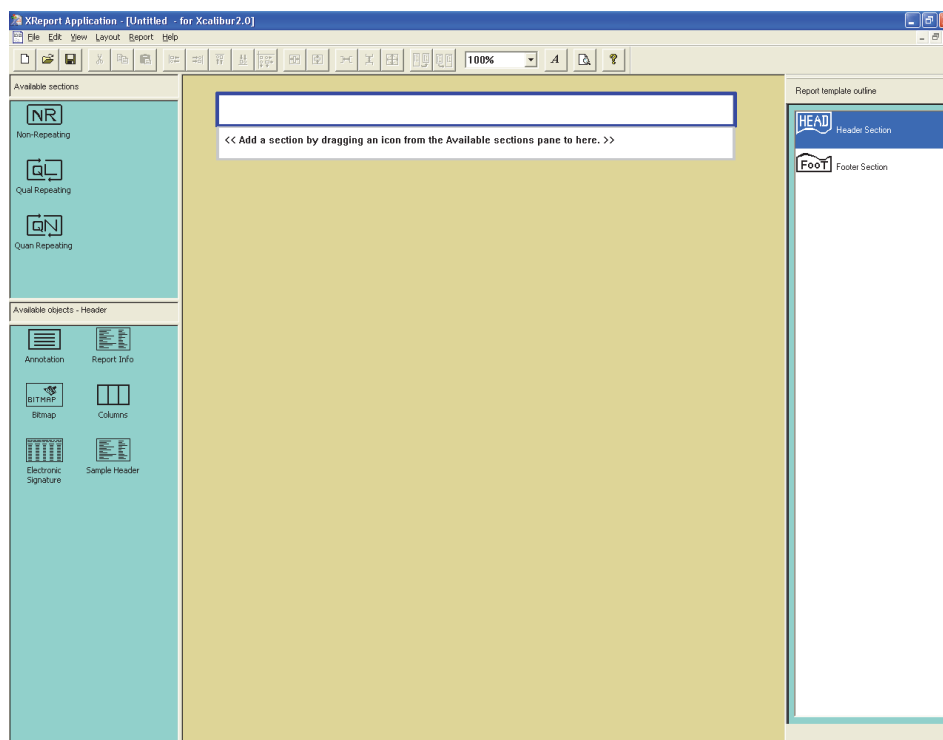
完成或取消任何当前对话框并选择 **File**（文件）> **Exit**（退出）。

创建模板

本章详细描述如何创建私人报告模板。当用户创建私人报告模板时，可以将其保存并用于生成 Xcalibur 报告。有关生成报告的详细信息，参阅第 3 章。

当用户启用 XReport 时，XReport 创建一个包含页眉和页脚部分的模板（参阅图 4）。对该新模板进行处理或选择 **File（文件）> Open（打开）** 打开已有模板或选择 XReport 模板（.xrt）文件。若要创建一个模板，依次执行章中的步骤。

图 4. XReport 窗口，显示一个新模板



目录

- 添加、排序和配置部分
- 添加和配置报告项目
- 预览和保存模板

添加、排序和配置部分

选择需包括在报告模板中的部分，开始创建模板。选择在报告模板中包含基于定量或定性的重复部分或非重复部分。有关不同部分类型的描述和重复部分的工作方式，参阅“[配置重复部分](#)”第 41 页。

本部分主题：

- [添加、删除或重排序部分](#)
- [调整部分尺寸](#)
- [配置重复部分](#)

添加、删除或重排序部分

若要在报告中添加一个部分，请将其从 Sections（部分）窗格（左上方）拖曳至 Template（模板）窗格（中间）。每次仅在模板中添加一个部分。

若要从报告中删除一个部分，请在 Report Template Outline（报告模板轮廓）窗格（右侧）中单击并按 DELETE（删除）键。系统提示确认删除。无法删除页眉和页脚部分。当 Report Template Outline 窗格不可见时，选择 **View（查看）> Report Template Outline（报告模板轮廓）** 或右击一个部分并从快捷菜单中选择 **Delete Section（删除部分）**。

若要更改模板中各部分的次序，在 Report Template Outline 窗格内进行拖曳。页眉和页脚部分必须分别保留在列表的顶部和底部。

调整部分尺寸

若要自动移除某个部分顶部和底部的多余空格，选中该部分并选择 **Layout（布局）> Shrink Wrap（收缩）**。

若要自动在某个部分底部添加半页空格，选中该部分并选择 **Layout（布局）> Expand（扩展）**。

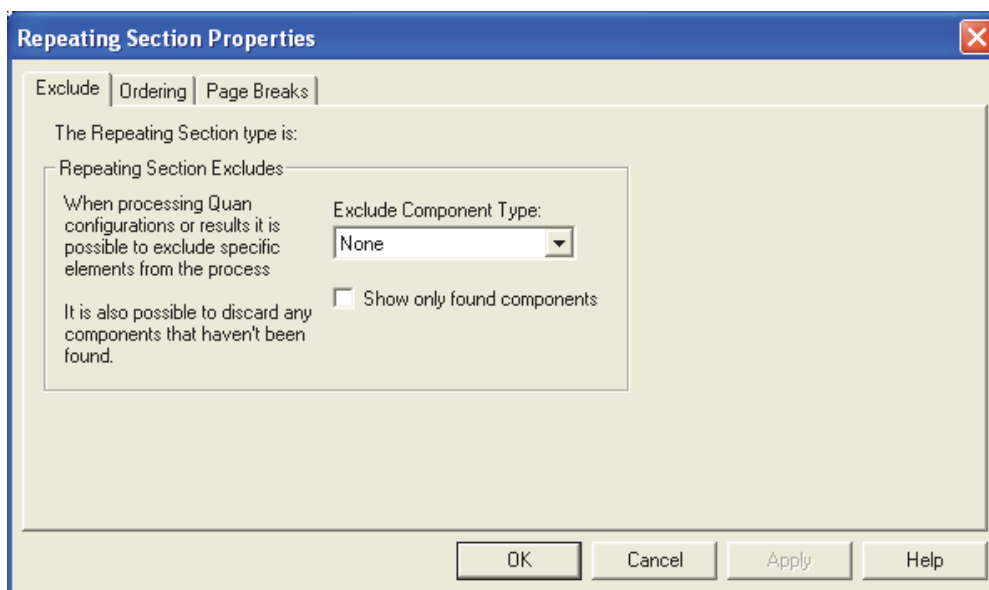
若要手动添加或移除某个部分底部的多余空格，向上或向下拖曳该部分底部的边缘。

配置重复部分

❖ 若要配置定性或定量重复部分

1. 在 Template 窗格中滚动到某个部分左上方处的 QL（定性）和 QN（定量）图标。
2. 右击图标，然后在快捷菜单中选择 **Properties（属性）**。Repeating Section Properties（重复部分属性）对话框打开（参阅图 5）。

图 5. Repeating Section Properties 对话框



3. 设置参数并单击 **OK**（确定）。

添加和配置报告项目

在添加和配置部分之后，选择期望包含在报告模板指定部分中的报告项目。从以下选项进行选择：文本项目、表格项目、图像项目和文本，取决于在[配置重复部分](#)中的选择。

XReport 在 Objects（项目）窗格（左下方）中显示当前所选部分可用的项目。该窗格内容随所选部分而变。

本部分主题：

- [添加、删除、重新定位项目和调整项目尺寸](#)
- [对齐项目](#)
- [居中项目](#)
- [使用报告模板网格](#)
- [使用列](#)
- [使用分页符](#)
- [配置项目](#)
- [在文本项目中添加用户文本](#)
- [在表格中添加公式](#)
- [更改字体设置](#)
- [更改页面布局](#)

添加、删除、重新定位项目和调整项目尺寸

❖ 若要在报告中添加项目

将 Objects 窗格（左下角）中的一个项目拖曳至 Template 窗格（中间）中当前所选的部分（蓝色）。每次仅在模板中添加一个项目。

❖ 若要从报告中删除项目

1. 在 Template 窗格（中间）中选择一个项目。项目边框和边角处的蓝色手柄可见。
2. 按下 DELETE。

❖ 若要重新定位项目

将项目拖曳至期望的位置。

❖ 若要调整项目尺寸

拖曳项目其中一个边角处的手柄（蓝色小方框），直到获得期望的尺寸。

❖ 若要使两个或两个以上项目尺寸相同

1. 选择首个需调整大小的项目。首个所选项目的尺寸决定了后续项目的尺寸。
2. 按住 SHIFT 键并选中其它需重新调整尺寸的项目。
3. 单击工具栏上与期望调整的尺寸量度相关的按钮：

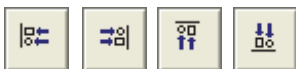
Width（宽度）、Height（高度）或者 Both（两者都）（  ）。

若要在表格项目中调整列尺寸，双击该表格。列边框内部出现手柄（蓝色小框）。拖曳手柄调整列尺寸。

对齐项目

❖ 若要对齐一个或多个项目

1. 选择首个需对齐的项目。首个所选项目的位置决定了后续项目的对齐方式。
2. 按住 SHIFT 键并选中其它需对齐的项目。
3. 单击工具栏上与对齐边缘相关的按钮：Left（左侧）、Right（右侧）、Top（顶部）、Bottom（底部）。



或者单击 Auto Align（自动对齐）使所有项目对齐到最近的网格线。



4. 选择 View（查看）> Report Template Grid（报告模板网格）查看网格线。选择 Layout（布局）> Preferences（首选），调整网格设置。Preferences 对话框打开（图 6）。

居中项目

❖ 若要居中一个或多个项目

1. 选择首个需居中的项目。按住 SHIFT 键并选中其它需居中的项目。
2. 单击工具栏上的 **Center Horizontally**（水平居中）或 **Center Vertically**（垂直居中）按钮，对页面上的项目执行居中操作。

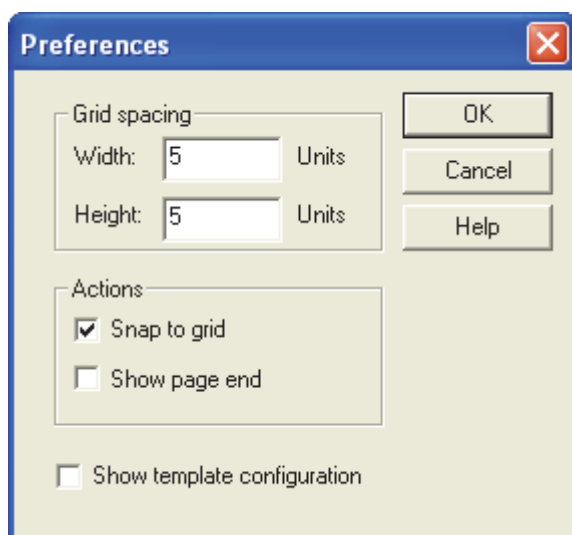


使用报告模板网格

Template 窗格具有网格结构。选择 **View > Report Template Grid** 查看网格线。

选择 **Layout > Preferences**，调整网格设置。Preferences 对话框打开（参阅 图 6）。设置网格线之间的间距及是否将项目如将其添加至 Template 窗格那样对齐至网格。

图 6. Preferences 对话框



使用列

添加列以排列其它报告项目，使其出现在列中。若要在模板中添加一列，将其从 Objects 窗格拖曳至 Template 窗格。

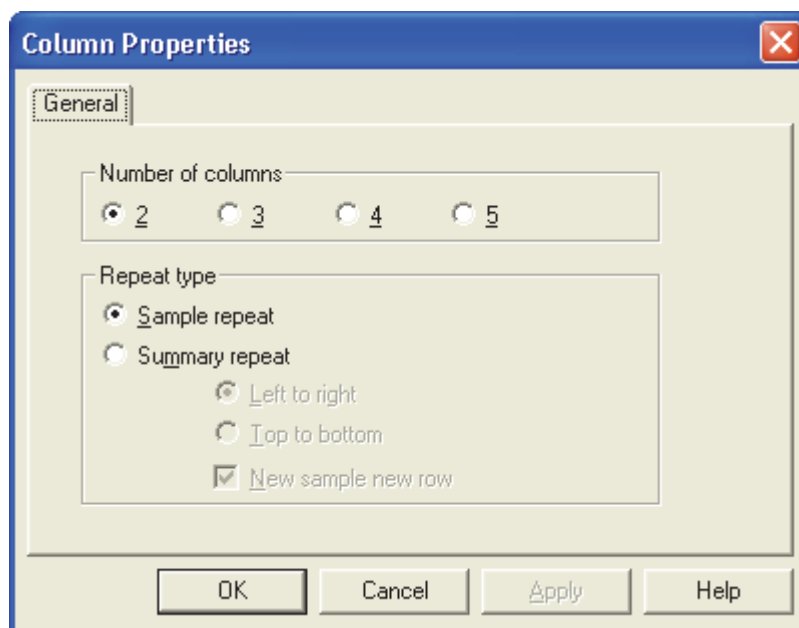
在模板中添加列项目后，可以对其调整尺寸、重新定位和配置。

❖ 若要配置列项目

1. 右击列项目。
2. 从快捷菜单中选择 **Properties**。

Column Properties（列属性）对话框打开（参阅图 7）。欲了解如何配置列及列与不同重复类型的工作方式，参阅“配置列”第 95 页。

图 7. Column Properties 对话框



可以调整整个列项目的尺寸（选中并拖曳边角手柄），但列项目内的列仍保持相同尺寸。

列配置完成后，将项目拖曳至列中。

使用分页符

如要在模板中添加分页符，从 Objects 窗格中将 Page Break（分页符）项目拖曳至 Template 窗格。添加完成后，拖曳分页符以对其重新定位。

若用户没有手动插入分页符，则当前页面没有足够空间时，项目自动移动到新页面。选择 **Layout > Preferences**，预览自动分页符的位置。Preferences 对话框打开（图 6）。选中 Show Page End（显示页面末端）复选框。

配置项目

❖ 若要配置项目

1. 右击项目。
2. 从快捷菜单中选择 **Properties**。Properties 对话框打开。

有关配置每个特定项目的信息，参阅第 4 章。有关每个项目的描述，包括每个项目可以用于哪些部分的信息，参阅附录 B，“报告项目类型。”

在文本项目中添加用户文本

利用 [Blank Line](#) 和 [User Text](#) 数据条目，在文本项目中添加额外的自定义文本标题。这些条目可用于除 [Annotation](#) 项目和 [Instrument Method](#) 项目外的所有文本项目。

❖ 若要在文本项目中添加自定义文本

1. 右击文本项目，然后在快捷菜单中选择 **Properties**。[Data](#) 页面打开。
2. 选择 Available Items（可用条目）列表中的 [User Text](#)（用户文本）。
3. 单击 **Add**（添加），在 Selected（已选）列表中添加一个文本条目。
4. 若要将 [User Text](#) 条目置于文本显示的位置，单击 **Move Up**（上移）或 **Move Down**（下移）。
5. 选择 [User Text](#) 条目。
6. 输入显示在 Selected 列表下方框中的文本，并单击 **Apply**（应用）。

Xcalibur 数据系统在 Selected 列表中显示输入的文本。

❖ 若要编辑 [User Text](#) 条目

1. 选择需要在 Selected 列表中编辑的条目。
2. 在 User（用户）框中输入文本。
3. 单击 **Apply**。

在表格中添加公式

用户可以在 XReport 中创建自定义公式，以对表格中的数据进行数学运算并将结果显示在表格列中。

❖ 若要在表格中添加公式

1. 在 XReport 模板中，右击一个表格项目并选择 **Properties**。[Select Table Fields](#) 页面打开。
2. 在 Available Columns（可用列）列表中选择其中一个 User Columns（用户列）字段：[\[User Column 1\]](#)、[\[User Column 2\]](#)、[\[User Column 3\]](#)、[\[User Column 4\]](#) 或 [\[User Column 5\]](#)。

由于可用五个 User Column 字段，因此用户可以为单个表格创建多达五个不同的公式。

3. 单击 **Next**（下一步）进入 [Configure User Column Parameters](#) 页面。
4. 在 User Column Title（用户列标题）框中，输入列标题。
5. 单击 **Edit Formula**（编辑公式）。[Edit Formula For](#) 对话框打开。
6. 在 Formula（公式）框中输入一个公式。利用以下其中一种方法输入公式：
 - 直接在框中输入公式。公式遵守以下句法规则：
 - 公式必须以等号（=）开头。

- 每个表格列都以一个字母标示符表示（A、B、C 等等），标示符显示在 Table（表格）项目的列标题的下方。
- 输入简单的数学表达式（A+B、A-B、A*B 和 A/B），也可以输入在 Functions（函数）列表中列出的任一函数。

数学公式的计算按行顺序进行。也就是说，若用户在 User Column 中输入 =A+B 作为公式，结果将按如下计算：

- 列 A 中首行的值与列 B 中首行的值相加，结果显示在 User Column 的首行中。
- 列 A 中第二行的值与列 B 中第二行的值相加，结果显示在 User Column 的第二行中。
- 当表格中的所有行的计算完成后，该过程才停止。
- 从 Functions 列表中选择一个函数，并单击 **Add Function**（添加函数）。[Configure Function 对话框](#) 打开。选择应用该函数的列。当用户配置函数并单击 OK 时，XReport 在 Formula 框中输入已配置的函数。

7. 当输入公式后，单击 **OK** 以关闭 Edit Formula For（编辑公式）对话框并返回至 Table Properties（表格属性）向导。继续执行向导中的其它页面以完成表格的配置。

更改字体设置

利用 XReport 可为文本和表格项目的字体设置进行整体或局部性的修改。当整体更改字体设置时，通过指向添加的每个项目都显示为新字体（模板中已存在的项目并没有更新）。当局部更改字体设置时，仅选中的项目会更改为新字体。

❖ 若要为单个项目更改字体设置

1. 选中项目并单击工具栏上的  打开 Font（字体）对话框，或右击项目并从快捷菜单中选择 **Properties**，打开 Properties 对话框并显示 Font 页面。这两个页面提供相同的设置。
2. 更新设置并单击 **OK**。

❖ 若要同时为一个或多个文本或表格项目更改字体设置

1. 选择首个项目。
2. 按住 SHIFT 键，同时选中其它项目。
3. 单击工具栏上的 。Font 对话框打开。
4. 更新设置并单击 **OK**。

❖ 若要整体更改所有添加到模板的新项目的字体设置

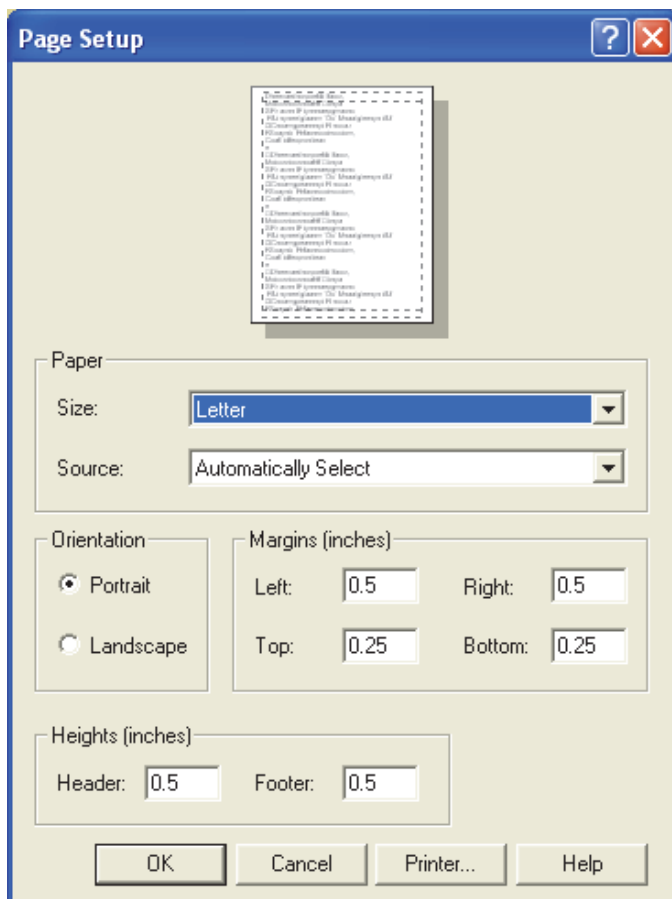
1. 单击任意部分，确认未选中项目。
2. 单击工具栏上的 。Font 对话框打开。
3. 更新设置并单击 **OK**。

更改页面布局

❖ 若要更改页面布局

1. 选择 **File (文件) > Page Setup (页面设置)**。Page Setup 对话框打开 (参阅图 8)。
2. 可以更改以下内容：页眉页脚高度、页面方向为横向或纵向、或者页边距。
3. 单击 **OK** 更改页面布局。

图 8. Page Setup 对话框

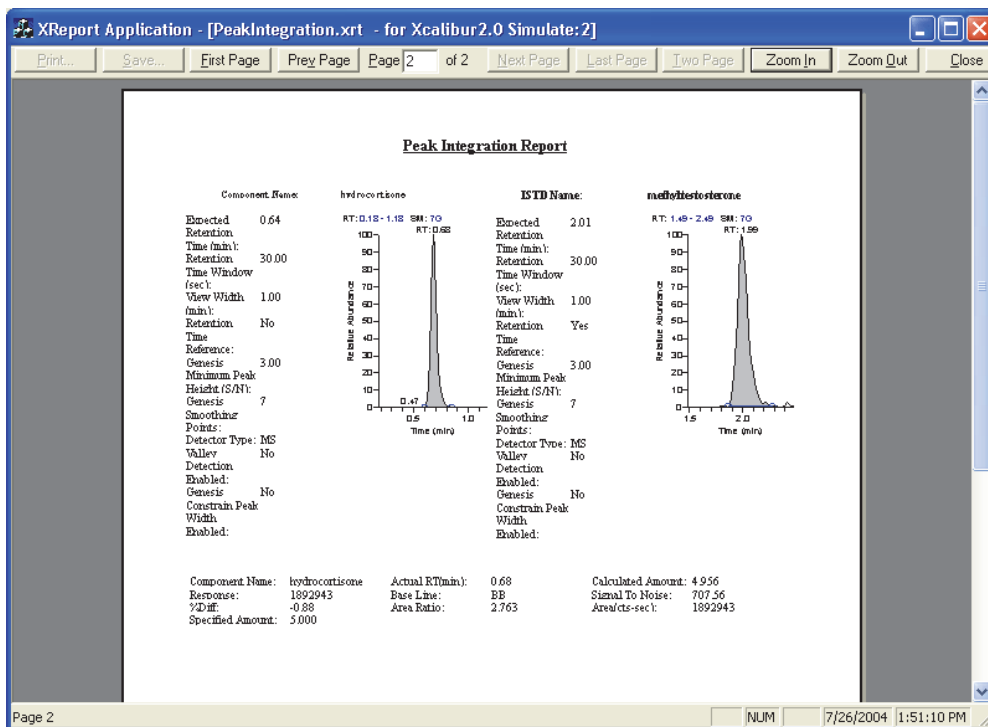


预览和保存模板

❖ 若要预览模板外观

1. 选择 **File (文件) > Simulate Report (模拟报告)**。Preview (预览) 窗口打开 (参阅 图 9)。Preview 窗口显示默认数据的报告。

图 9. Preview 窗口



2. 当报告正确时，单击 **Close (关闭)** 以关闭预览窗口。
3. 若要保存模板，选择 **File (文件) > Save As (另存为)**。若要为一个已锁定的模板保存更改内容，选择 **File > Save As** 并重命名该文件。

XReport 使用类固醇示例数据，与 Xcalibur 软件一同装载作为默认数据组。它包含以下文件：

- steroid.pmd
- steroids02.raw
- steroids02.rst
- steroid.sld

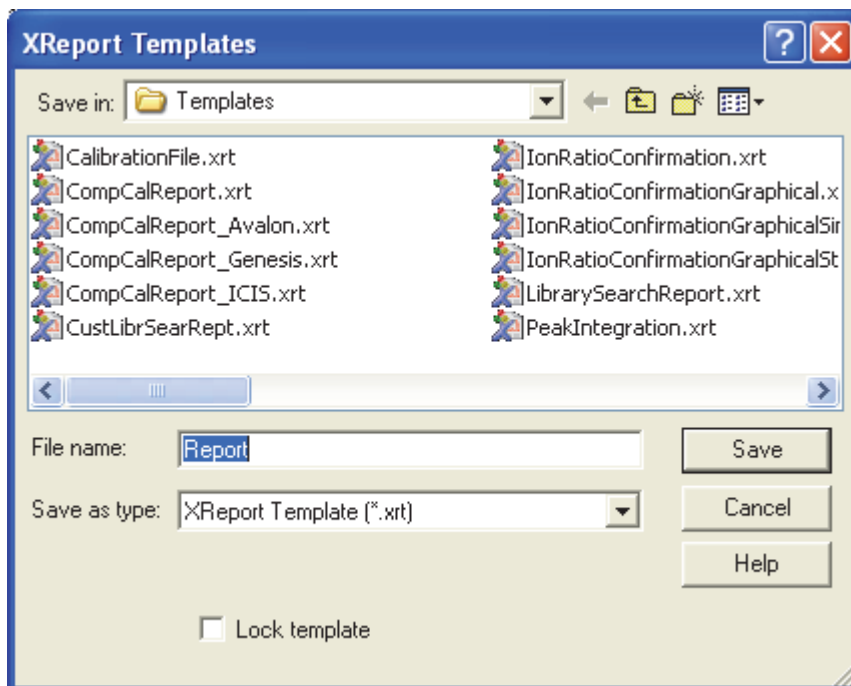
若模板是为与默认数据差别极大的数据组类型而设计，在预览模板时可能看不到期望的结果。在这种情况下，为模板选择合适的数据源并按 [“在 XReport 中创建报告”](#) 第 27 页中的描述来创建报告。

利用 XReport 来锁定模板，使其永远无法被修改后保存为相同的文件名。若要修改已锁定的模板，请将其保存为其它文件名。选择 **File > Open**，打开一个已锁定的模板，与打开其它模板的方法一致。

❖ 若要锁定模板

1. 选择 **File > Save As**。Save As 对话框打开（参阅图 10）。

图 10. Save As 对话框，显示 XReport 模板



2. 为报告模板正确命名并将其和 Xcalibur 软件一同装运的模板一起保存在 Xcalibur\templates 文件夹下。
3. 选择 **Lock Template**（锁定模板）复选框并单击 **Save**（保存）。

生成报告

将一个或多个 Xcalibur 数据源文件（.pmd、.raw、.rst、.sld 和 .xcal 文件）和报告模板结合，生成 Xcalibur 报告。

共有两种生成报告的方法：

- 利用 XReport Data Source Browser（数据源浏览器）自动检索所需数据源文件并为数据套用模板生成报告。该方法生成单个报告。
- 将 Xcalibur 数据系统中生成的数据与报告模板关联，并将数据和模板套用生成报告。该方法从数据系统生成多个报告。

目录

- [在 XReport 中创建报告](#)
- [从 Xcalibur 数据系统创建报告](#)

在 XReport 中创建报告

采用以下步骤，在 XReport 中创建报告：

- [为模板选择数据源](#)
- [生成、保存和打印报告](#)

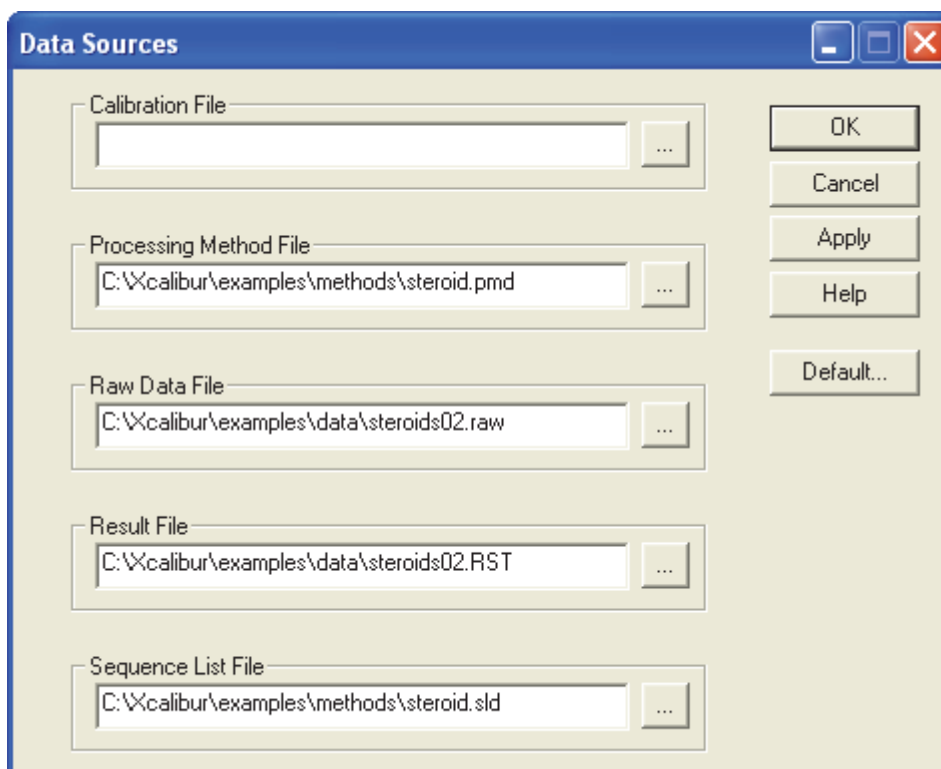
为模板选择数据源

从 XReport 模板生成报告的过程包括利用 [Data Sources 对话框](#) 检索所需数据源文件。生成报告所需的数据源文件取决于报告模板的内容（部分和报告项目）。欲了解每一报告项目需何种数据文件，参阅[附录 B](#)，“[报告项目类型](#)。”

❖ 若要以数据解析模板

1. 在 XReport 中选择 **File**（文件）> **Open**（打开），打开模板（.xrt 文件）。
2. 选择模板，然后单击 **Open**。
3. 选择 **Report**（报告）> **Data Sources**（数据源）。Data Sources 对话框打开（参阅[图 11](#)）。

图 11. Data Sources 对话框



4. 在每个框中输入或检索某个数据文件。

注释 若指定某个 .rst 文件参考某个 .raw 文件，但 .raw 文件不存在或位于错误的文件夹下，XReport 将发送一个错误信息。确保 .raw 文件处于正确的文件夹下。

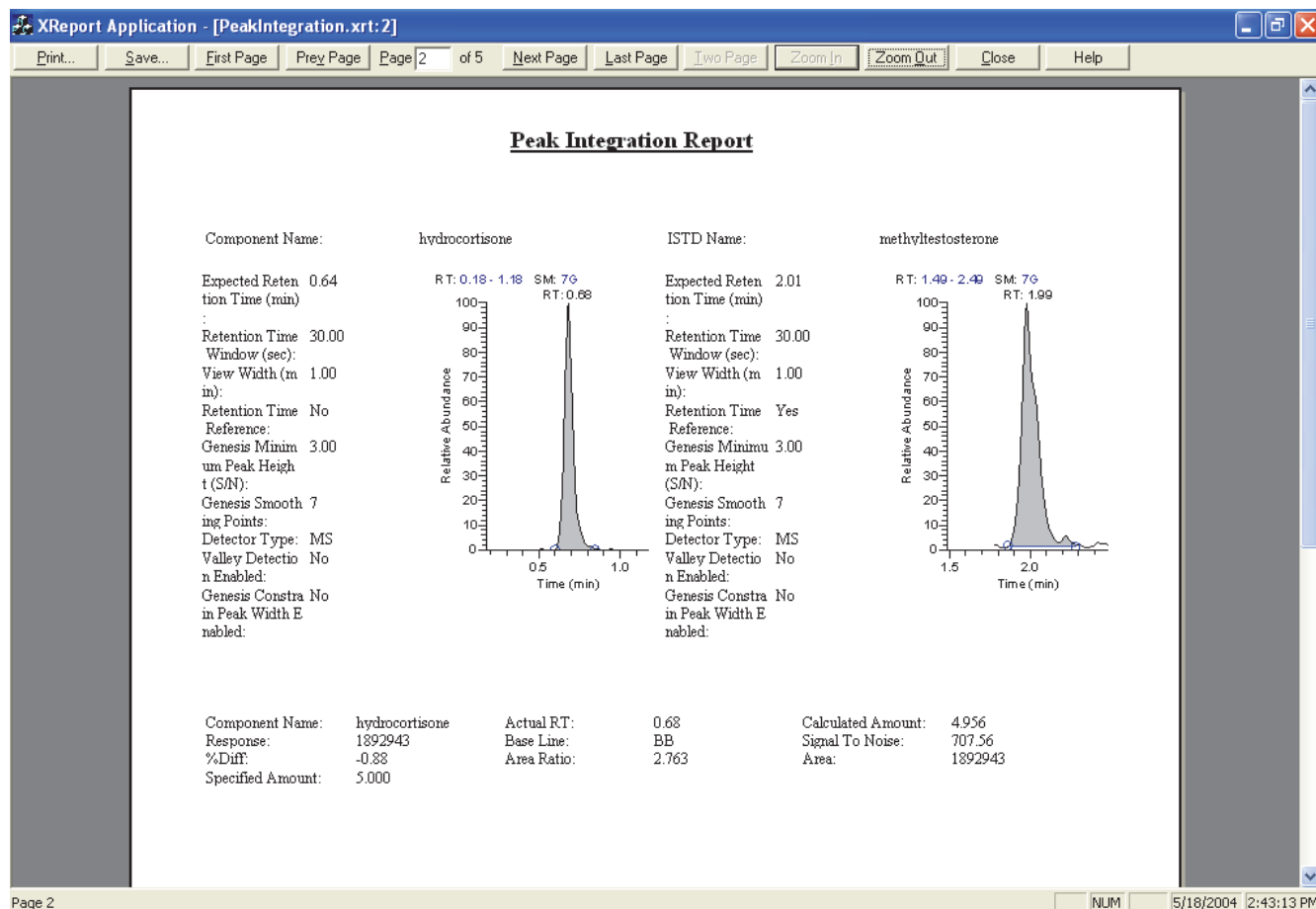
5. 单击 **OK**（确定）。

生成、保存和打印报告

❖ 若要利用所选数据源创建报告

1. 在 XReport 中选择 **Report (报告) > Resolve Report (解析报告)**。Preview (预览) 窗口打开 (参阅 图 12)。Preview 窗口显示与所选数据源文件结合的报告。

图 12. Preview 窗口



2. 单击 **Save (保存)** 以将报告保存为以下格式: Microsoft Word 文档 (.doc)、Microsoft Excel 工作簿 (.xls)、网页 (.htm 或 .html)、富文本 (.rtf)、便携式显示 (.pdf) 或文本 (.txt)。
3. 若要打印报告, 单击 **Print (打印)**。
4. 单击 **Close (关闭)**, 返回至 XReport 窗口。

从 Xcalibur 数据系统创建报告

当生成报告时，Xcalibur 应用程序将在数据系统中生成的数据和报告模板结合。可以从数据系统生成多个报告。

注释 用户必须对 Xcalibur 数据系统具有基本了解才能继续后续步骤。参阅 *Xcalibur Getting Started (Xcalibur 入门手册)*，获取更多信息。

从应用程序的以下区域生成报告：

- 当运行样品或序列和批处理时，参阅[从 Sequence Setup 生成报告](#)。
- 当使用 Reports（报告）对话框时，参阅[从 Quan Browser 生成报告](#)。

此外，当从 Xcalibur 数据系统生成报告时，创建包含电子签名信息的报告。

注释 在 Xcalibur 数据系统中利用报告模板生成报告时，总是先在 XReport 中将其保存并关闭。

样品报告和总结报告

若要在 Processing Setup（处理设置）或 Quan Browser（定量浏览器）中建立数据系统中的报告选项，可选择两种报告类型：

- 样品报告是给出单个样品信息的报告。
- 总结报告是给出整个样品序列或样品组总结信息的报告。

XReport 所包括的示例模板文件显示了使用特定模板生成样品报告或总结报告。有关样品文件的描述，参阅“[XReport 模板文件样本](#)”第 99 页。

从 Sequence Setup 生成报告

若要从 Sequence Setup（序列设置）窗口生成报告，在方法的 Reports 页面创建一个包含所需报告选项的处理方法。

当运行一个样品或序列，或批处理一个序列时，利用 Sequence Setup 窗口生成报告。

有关详细信息，参阅本主题：

- [在 Processing Setup 中设置报告选项](#)
- [当运行一个样品或序列时生成报告](#)
- [当批处理序列时生成报告](#)

在 Processing Setup 中设置报告选项

❖ 在 Processing Setup 窗口中建立报告设置

1. 打开 Processing Setup 窗口并建立一个处理方法。更多信息，参阅 *Acquisition and Processing User Guide (采集和处理用户手册)*。
2. 选择 **View (查看) > Reports (报告)**。Reports 视图打开。

3. 若要在样品或总结报告表格中添加一个或多个报告：

样品表格列出了序列中为已处理样品生成的报告。总结表格列出了为序列或标曲更新生成的报告。

- a. 单击 **Enable**（启用）列，显示复选框并将其选中以启用报告。
- b. 选择 **Std**（标样）、**QC**（质控样）、**Unk**（未知样）和 **Other**（其他）复选框，创建样品表格。
- c. 在 **Save As**（另存为）列中选择报告的输出格式。从 **None**（无）（仅打印报告，不保存）、或 **.txt**、**.doc**、**.html**、**.pdf**、**.rtf** 或 **.xls** 中选择（选择以上选项之一，将报告保存为所选格式）。

Xcalibur 数据系统将由处理方法创建的报告保存在源数据文件的同一目录下，并为其命名。报告采用以下格式：

data file name template name.xxx

其中：

data file name（数据文件名）是生成报告所需的数据文件的名称

template name（模板名称）是生成报告的模板名

xxx 是后缀名（如 **.doc** 或 **.pdf**），代表文件类型

当从同一数据文件和模板生成多个报告时，XReport 会在后缀之前添加一个日期戳。

- d. 双击 **Report Name**（报告名称）列，选择该报告使用的 XReport 模板（.xrt 文件）。

4. 保存处理方法。

当运行一个样品或序列时生成报告

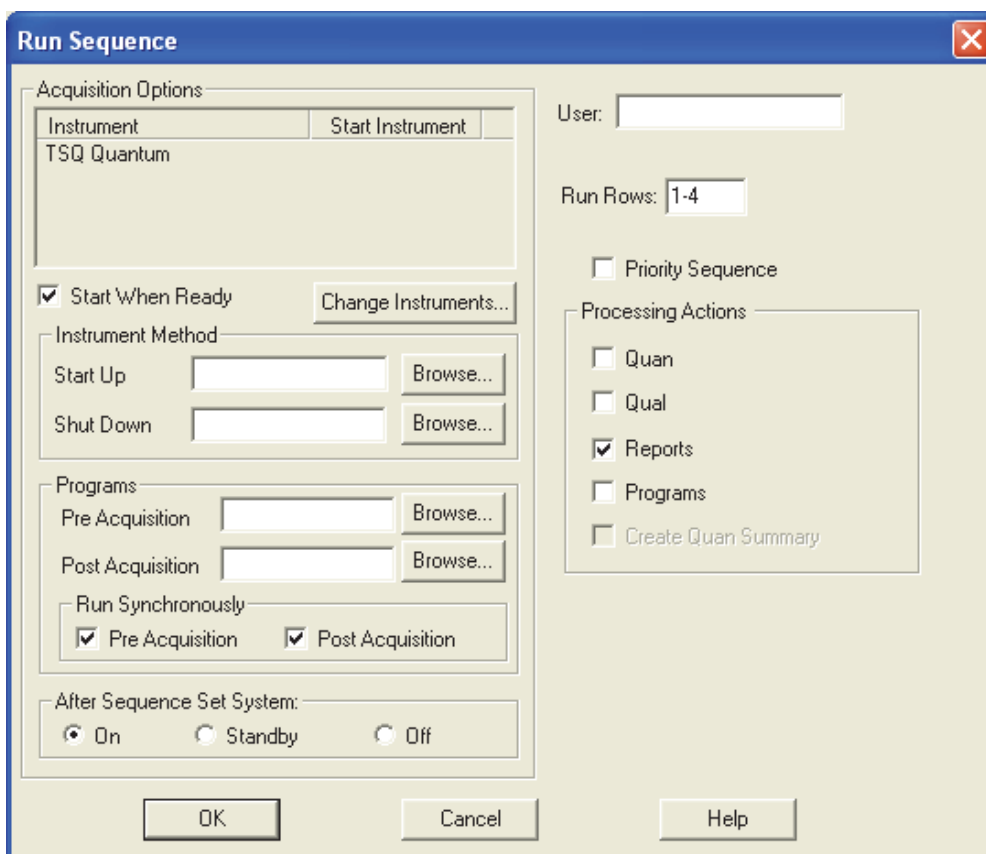
❖ 若要在运行一个样品或序列时生成报告

1. 按在 **Processing Setup** 中设置报告选项中的描述生成处理方法中的报告选项。
2. 在 Xcalibur 的 **Sequence Setup** 窗口中打开序列。
3. 指定包含 **Proc Meth**（处理方法）列中所有报告选项的处理方法。
4. 当运行一个序列时，拖曳最左边的列以从当前序列指定要处理的行。Xcalibur 应用程序高亮显示选中的行。

当运行一个样品时，选择样品行的最左边列。

5. 选择 **Actions**（操作）> **Run This Sequence**（运行此序列）或 **Actions**（操作）> **Run This Sample**（运行此样品）。Run Sequence（运行序列）（参阅图 13）或 Run Sample（运行样品）对话框打开。

图 13. Run Sequence 对话框



应用程序在 Run Rows（运行行）框中显示步骤 4 所选的序列行或样品。

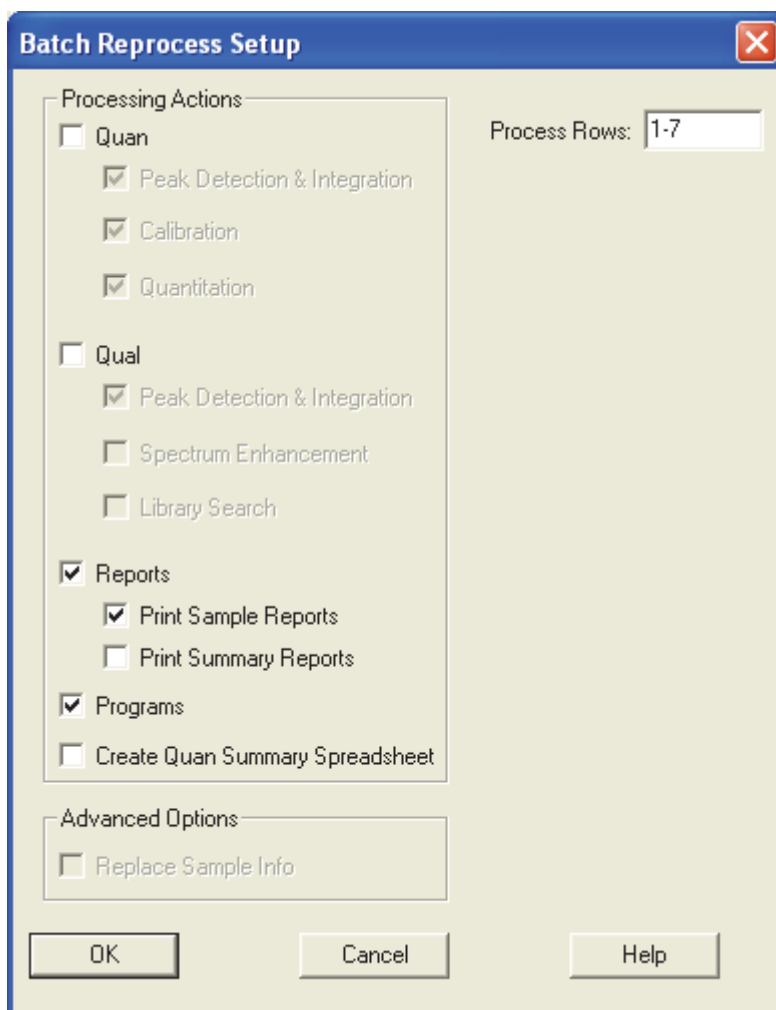
6. 选中 Processing Actions（处理操作）区的 **Reports** 复选框。
7. 设置所有其他参数。
8. 单击 **OK**。Xcalibur 应用程序开始处理所选样品或样品组。

当批处理序列时生成报告

❖ 若要在批处理序列时生成报告

1. 按 “[在 Processing Setup 中设置报告选项](#)” 第 30 页中的描述设置处理方法中的报告参数。
2. 在 Xcalibur 的 Sequence Setup 窗口中打开序列。
3. 输入包含 Proc Meth 列中所有报告选项的处理方法。
4. 通过拖曳最左边列，从当前序列指定需处理的行。Xcalibur 应用程序高亮显示所选行。
5. 选择 **Actions（操作）> Batch Reprocess（批次重新处理）**。Batch Reprocess Setup（批次重新处理设置）对话框打开（参阅图 14）。

图 14. Batch Reprocess Setup 对话框



Xcalibur 数据系统在 Process Rows（处理行）框中显示步骤 4 所选的序列行。

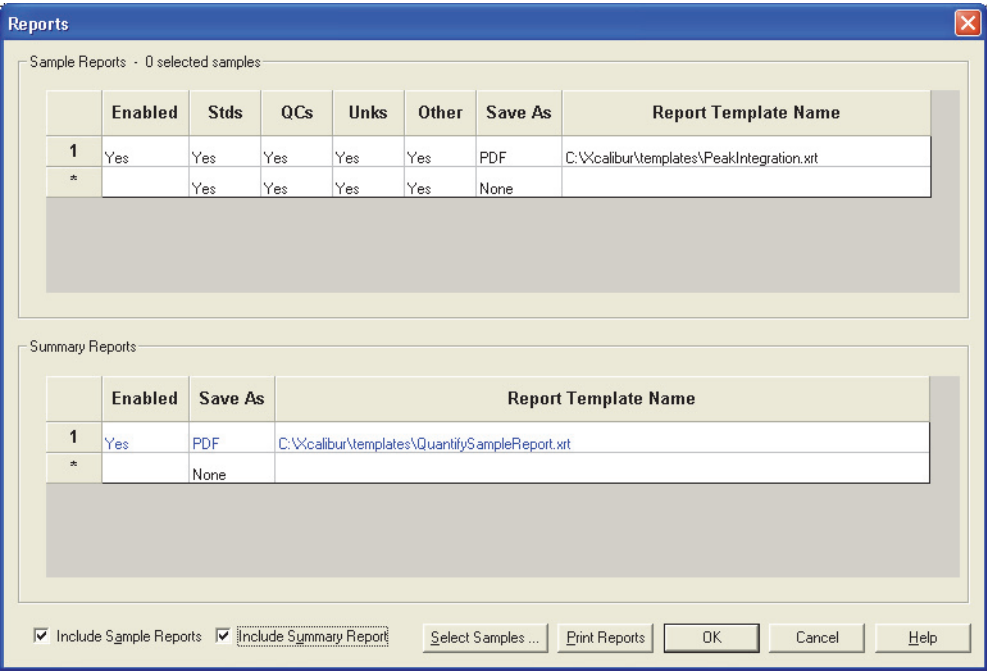
6. 如有必要，通过在 Process Rows 框中输入需处理的首行和末行更改需处理的行。格式为某个样品的 *nRow*（行号）或多个样品的 *First Row# - Last Row#*（首行号 - 末行号）。
7. 选择 **Quan**（定量）或 **Qual**（定性）处理操作，并从当前选项选择。
8. 从以下 XReport 处理选项选择：
 - 若要在批处理时创建报告，选中 **Reports** 复选框。
 - 若要打印显示在 Process Rows 框中样品的报告，选择 **Print Sample Reports**（打印样品报告）选项。在 Processing Setup 窗口的 Reports 视图中定义样品报告参数。
 - 选择 **Print Summary Reports**（打印总结报告）选项打印显示在 Process Rows 框中的样品的报告。在 Processing Setup 窗口的 Reports 视图中定义总结报告参数。
 - 选择程序、数据表和其它高级选项。
9. 单击 **OK**。Xcalibur 应用程序开始批次处理所选样品。

从 Quan Browser 生成报告

❖ 若要从 Quan Browser 窗口生成报告

1. 打开 Quan Browser 窗口。Xcalibur 应用程序显示 Open 对话框。
2. 通过选择包含报告使用的样品的 .sld 文件，选择一个序列。
3. 单击 **Open**。
4. 选择 **View (查看) > Reports Dialog (报告对话框)**。Reports 对话框打开 (参阅图 15)。

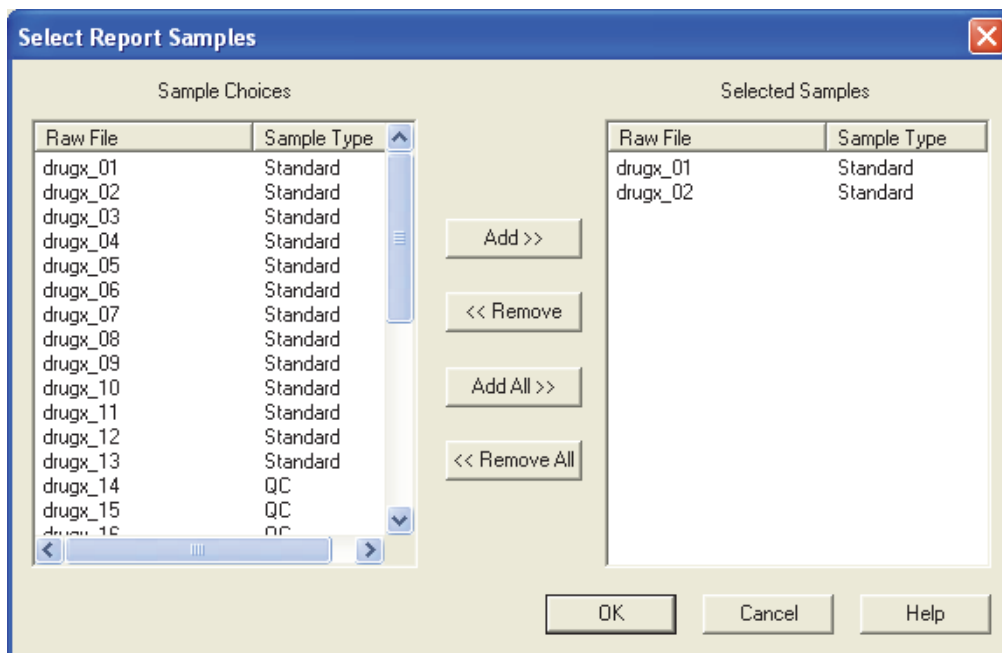
图 15. Quan Browser 窗口中的 Reports 对话框



5. 若要使样品报告中的某行激活，单击首行中的 **Enable** 框，并再次单击 **Enable** 框。框中出现一个复选框。
6. 单击该复选框。再次单击该复选框时，应用程序在 **Enable** 框中会显示单词 **Yes** (是)，表明已选择整行选项。
7. 若要选择打印的样品报告类型，请点击下列框之一：**Std**s (标样)、**QC**s (质控样)、**Unk**s (未知样) 或 **Other** (其他)。出现复选框控件。
8. 单击该复选框。当再次单击复选框时，Xcalibur 应用程序在 **Enable** 框中显示单词 **Yes**，这表明要打印这种样品类型的所有已选样品的报告。
9. 重复步骤 6 和 7，打印所需样品类型的报告。
10. 双击 **Report Template Name** (报告模板名称) 框，显示 **Open Report Template** (打开报告模板) 对话框。选择先前已准备的报告模板文件，并单击 **Open**。Xcalibur 应用程序在 **Report Template Name** 框内显示报告模板 .xrt 文档的完整路径和名称。
11. 若要打印每个报告模板文档的报告，对下一行重复步骤 5 至 10。

12. 若要打印已经选择的所有样品报告，单击 Reports 对话框底部的 **Include Sample Reports**（包括样品报告）复选框。单击 **Include Summary Report**（包含总结报告）复选框，使总结报告可用。
13. 单击 **Select Samples**（选择样品），打开 Select Report Samples（选择报告样品）对话框。从步骤 2 中打开的 .sld 文件中的可用样品出现在 Sample Choices（样品选择）框内（参阅图 16）。

图 16. Select Report Samples 对话框



14. 选择样品：
 - 若要选择一组连续样品，可点击序列的第一个样品，然后按住 SHIFT 键，滚动至序列的最后一个样品并点击该样品。数据系统高亮显示所选序列。
 - 若要选择一组非连续的样品，当单击每个样品进行选择或清除时，按住 CTRL 键。数据系统高亮显示所选样品。
15. 单击 **Add**（添加）将所选样品复制到 Selected Samples（所选样品）区域内。
16. 若要返回至 Reports 对话框，请单击 **OK**。
17. 单击 **Print Reports**（打印报告），打印报告。在打印报告之前，Xcalibur 应用程序
 - 在 Quan Browser 窗口底部显示 Printer Activity（打印机活动）图标。
 - 将样品文件的数据与所选的报告模板文档结合。
 - 将报告打印任务添加到处理队列中，然后显示 Printing（正在打印）信息框。

打印报告后，应用程序使用户返回至 Quan Browser 窗口。

Xcalibur 数据系统将由处理方法创建的报告保存在源数据文件的同一目录下，并为其命名。报告采用以下格式：

data file name template name.xxx

其中：

data file name 是生成报告所需的数据文件的名称，

template name 是用于生成报告的模板名称，且

xxx 是后缀名（如 .doc 或 .pdf），代表文件类型。

当从同一数据文件和模板生成多个报告时，XReport 会在后缀之前添加一个日期戳。

创建签名报告

当从 Quan Browser 中或通过在 Sequence Setup 中批处理来生成报告时，可以创建包含电子签名的签名报告。

❖ 若要创建签名报告

1. 创建包含 Electronic Signature（电子签名）表格项目的报告模板或选择其中一个 XReport 附带的预配置模板。所有预配置模板在页脚处均包含 Electronic Signature 表格项目。
2. 确认 Xcalibur 的 Authorization Manager（授权管理器）设置在报告生成步骤设置为需要电子签名。参阅[为签名报告配置 Authorization Manager 设置](#)获取该步骤的相关信息。
3. 生成报告。

为签名报告配置 Authorization Manager 设置

为了生成含电子签名的签名报告，将 Xcalibur 的 Authorization Manager 配置为需要签名。Xcalibur 数据系统管理员必须在 Quan Browser 或 Sequence Setup 中设置权限之前执行该配置。

❖ 若要为从 Sequence Setup 生成的签名报告设置权限

1. 选择 Start（开始）> All Programs（所有程序）> Thermo Foundation 1.0 > Authorization Manager（授权管理器）。Authorization Manager 窗口打开（参阅图 17）。
2. 扩展 Home Page（主页）条目。在目录树中，扩展权限级别窗格中的 Sequence Operations（序列操作）条目。
3. 从 Sequence Operations 下方的操作列表中选择 Batch Reprocess（批次重新处理）。
4. 选择 Permission Level（权限级别）区域的 Signature List（签名列表）。

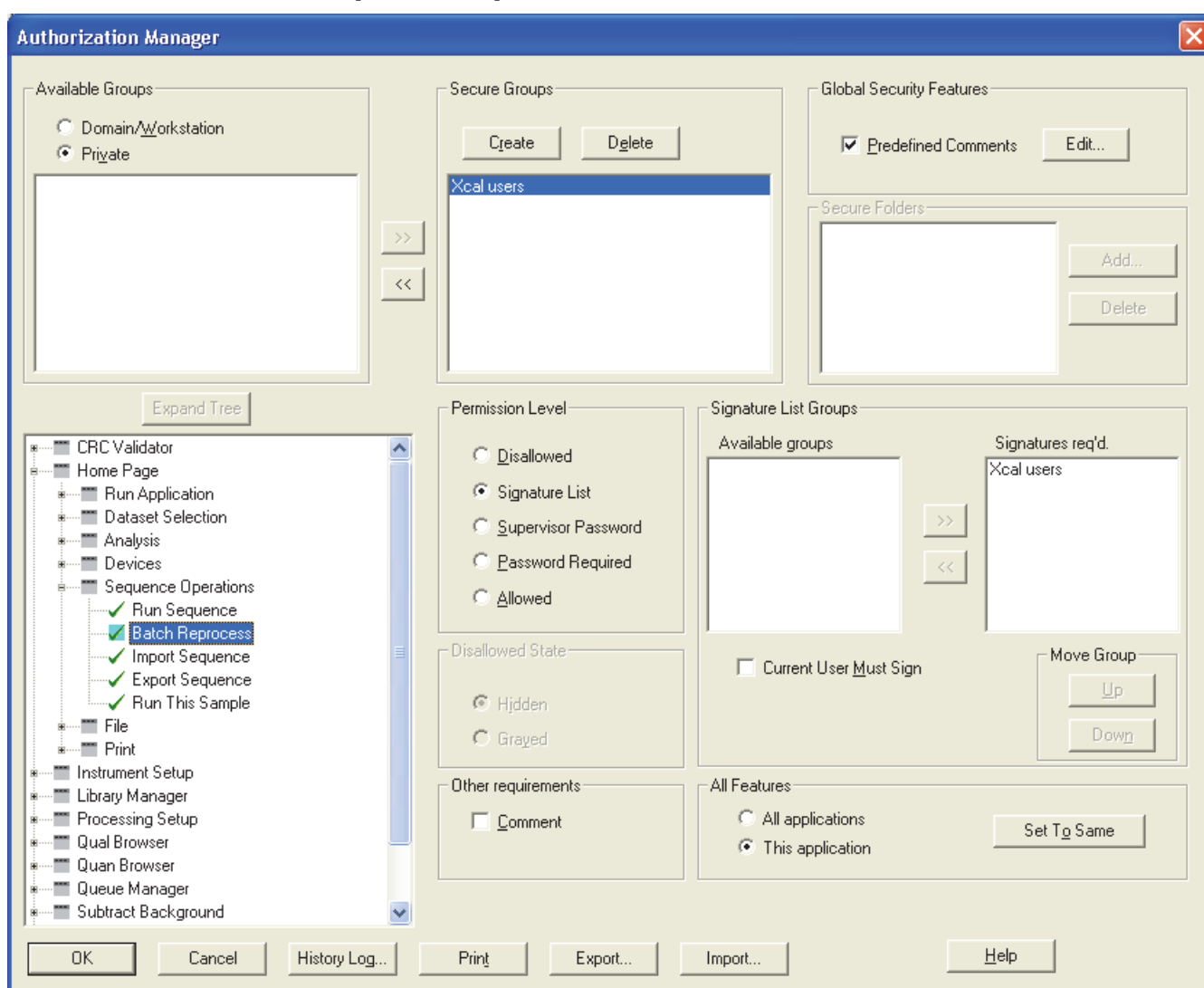
- 在 Signature List Groups (签名列表组) 区域, 从 Available groups (可用组) 列表选择一个组并点击 >> 将其移动到 Signatures req'd (需要签名) 列表。该组成员必须输入他们的登录名和密码, 以便在生成报告时对其进行电子签名。

注释 若没有可用组或组中没有包含正确的成员, 参阅 *Xcalibur Administrator's Guide* (Xcalibur 管理员手册), 获取关于如何创建和修改组的相关信息。

- 若需要其它组的签名, 重复步骤 5 将其添加至 Signatures req'd 列表。
- 若生成报告时需要当前用户的签名, 选中 Current User Must Sign (当前用户必须签名) 复选框。

此时, 设置应该与图 17 中的设置相似。

图 17. 生成签名报告的 Sequence Setup 设置



❖ 若要为从 Quan Browser 生成的签名报告设置权限

- 选择 Start > All Programs > Thermo Foundation 1.0 > Authorization Manager。Authorization Manager 窗口打开 (参阅图 18)。
- 在目录树中, 扩展 Quan Browser 条目, 随后扩展 Print (打印) 条目。

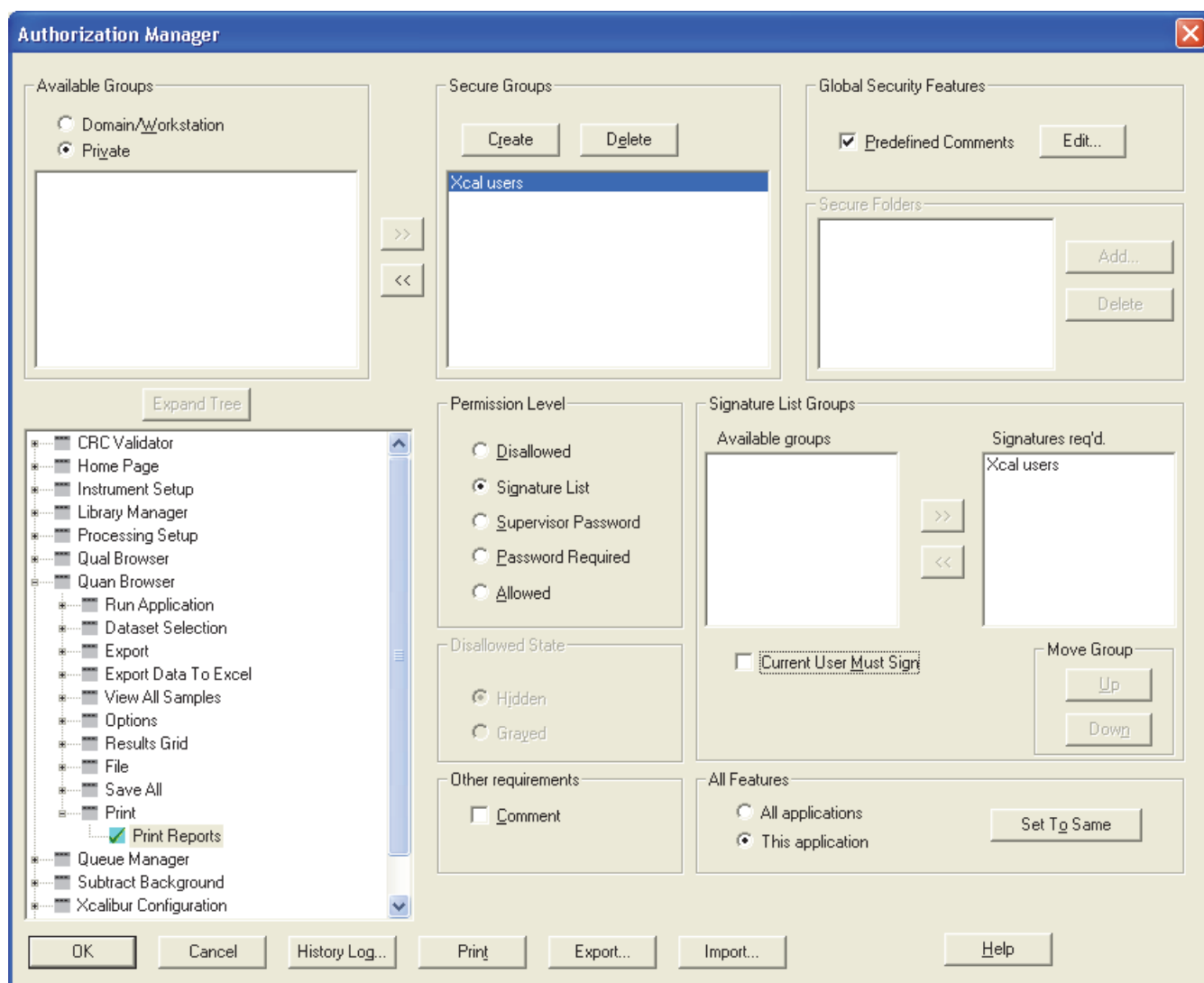
3. 选择 **Print Reports**。
4. 在 **Permission Level** 区域选择 **Signature List**。
5. 在 **Signature List Groups** 区域，从 **Available groups** 列表中选择一组并点击 **>>** 将其移动到 **Signatures req'd** 列表。该组成员需要输入他们的登录名和密码，以便在生成报告时对其进行电子签名。

注释 若没有可用组或组中没有包含正确的成员，参阅 *Xcalibur System and 21 CFR Part 11 Compliance Administrator Guide (Xcalibur 系统和遵守 21 CFR Part 11 管理员手册)*，获取关于如何创建和修改组的相关信息。

6. 若要获取其它组的签名，重复步骤 5 将其添加至 **Signatures Req'd** 列表。
7. 若生成报告时需要当前用户的签名，选中 **Current User Must Sign** 复选框。

此时，设置应该与图 18 中的设置相似。

图 18. 生成签名报告的 Quan Browser 设置

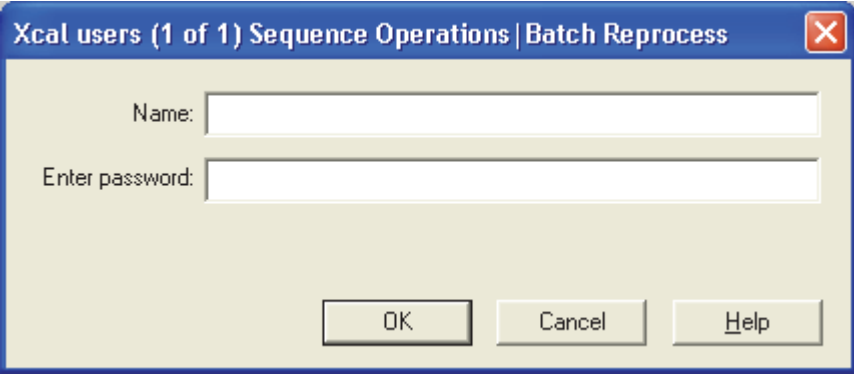


8. 单击 **OK**，保存设置并关闭 Authorization Manager 对话框。

生成签名报告

一旦用户有包含 Electronic Signatures（电子签名）项目的模板，即可按照“[当批处理序列时生成报告](#)”第 32 页或在“[从 Quan Browser 生成报告](#)”第 34 页中的描述生成报告。Xcalibur 数据系统提示用户在生成报告时输入签名信息。所需签名对应的用户必须输入登录名和密码以便对报告签名。图 19 显示签名对话框示例

图 19. 签名对话框示例



The image shows a Windows-style dialog box titled "Xcal users (1 of 1) Sequence Operations | Batch Reprocess". It has a standard Windows title bar with a close button (red X) in the top right corner. The dialog box has a light beige background. It contains two text input fields: the first is labeled "Name:" and the second is labeled "Enter password:". Below these fields are three buttons: "OK", "Cancel", and "Help".

配置项目和部分

可以在 XReport 中配置以下项目和部分。当用户在配置项目时，可以仅更改或编辑指定项目的单个属性。当在报告中添加另一个相同类型的项目时，XReport 以默认设置将其插入。

目录

- [配置重复部分](#)
- [配置文本项目](#)
- [配置注解项目](#)
- [配置表格项目](#)
- [配置位图项目](#)
- [配置色谱图](#)
- [配置组分校正曲线](#)
- [配置质谱图](#)
- [配置列](#)

配置重复部分

在 XReport 中有两种不同类型的重复部分：

Qual（定性）重复部分	以数据形式显示某个 Qual 峰的详细信息。为所有找到的 Qual 峰重复这个部分。
Quan（定量）重复部分	以数据形式显示与单个 Quan 峰或在处理方法中配置的组分相关的详细信息。为所有 Quan 峰或组分重复这个部分。

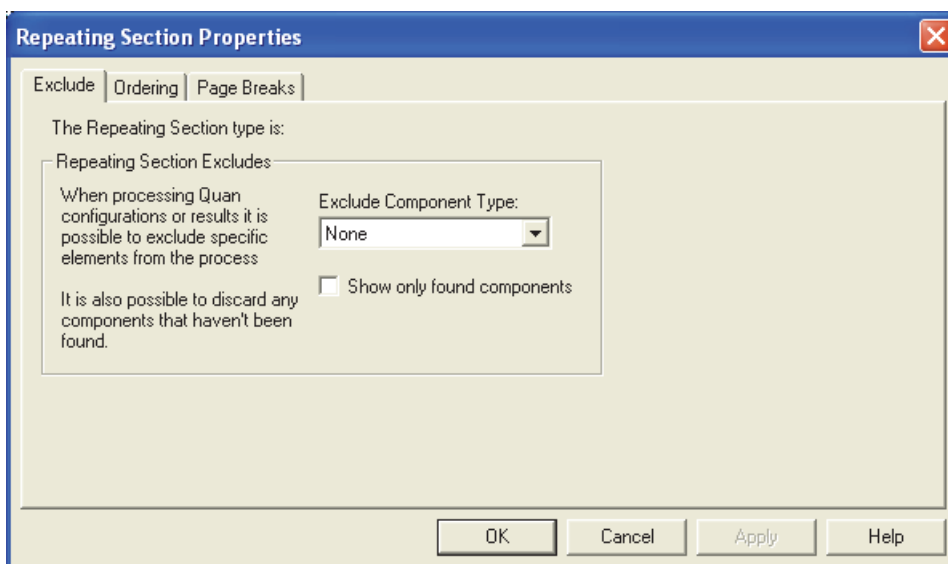
在 Repeating Section Properties（重复部分属性）对话框中，指定这些参数：

- 是否从 Quan 重复部分中排除内标或目标组分
- 峰和组分的重复次序
- 报告峰的数量限值
- 在最终报告中如何对单个峰或组分分页显示

❖ 若要配置 Qual 或 Quan 重复部分

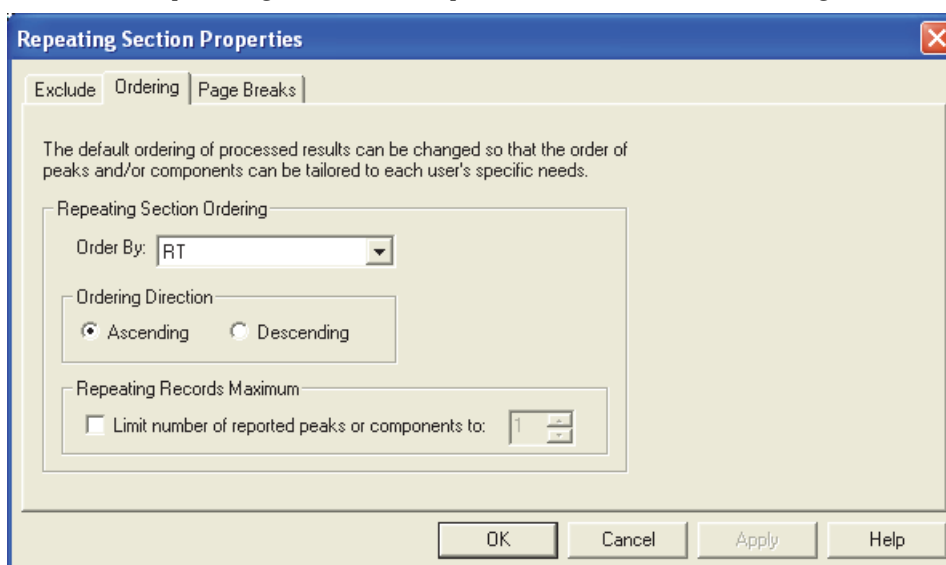
1. 滚动至 Template（模板）窗格左上方处的 QL（定性）和 QN（定量）图标并右击图标。
2. 从快捷菜单中选择 **Properties（属性）**。Repeating Section Properties 对话框打开（参阅图 20）。该对话框包含三个页面：Exclude（排除，仅对 Quan 重复部分可用）、Ordering（排序）和 Page Breaks（分页符）。

图 20. Repeating Section Properties 对话框中的 Exclude 页面



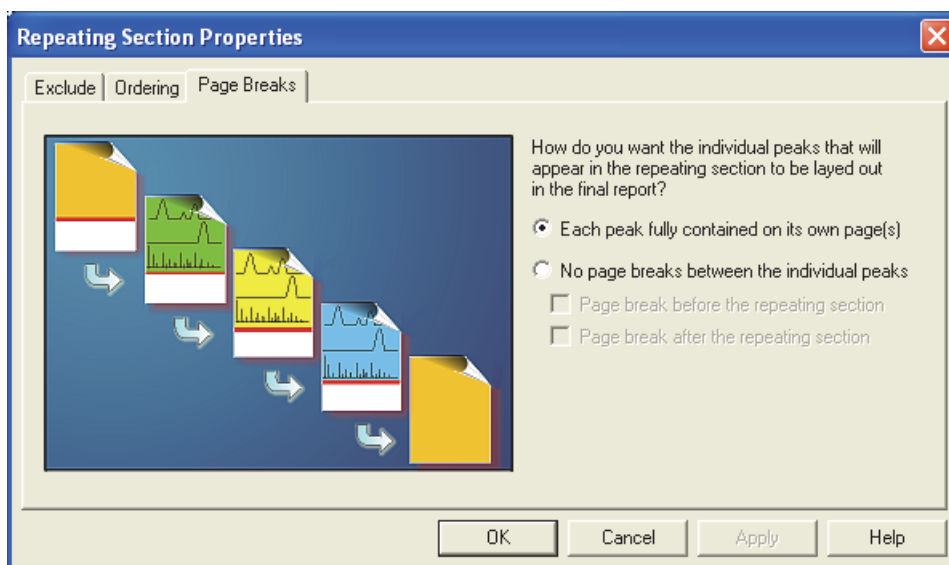
3. 当配置 Quan 重复部分时，利用 Exclude 页面可以在处理中排除某些特定的元素，剔除那些未被找到的组分。
 - a. 从 Exclude Component Type（排除组分类型）列表中，通过选择以下选项之一为 Quan 重复部分执行排除操作：
 - None (no exclusions)（无，不排除）— 默认
 - Internal Standards（内标化合物）
 - Target Compounds（目标化合物）
 - b. 若要排除那些未被找到的组分，选中 **Show Only Found Components（仅显示找到组分）** 复选框。
4. 单击 **Ordering** 标签显示 Ordering 页面。利用该页面可以更改已处理结果的默认排序，定义 Qual 或 Quan 重复部分中的峰和组分的次序（参阅图 21）。

图 21. Repeating Section Properties 对话框中的 Ordering 页面



- a. 若要在 Repeating Section Ordering（重复部分排序）区域中指定重复部分的次序，从 Order By（排序方式）列表中选择其中一个选项：
 - RT (Retention Time)（保留时间）— 默认
 - Component Name (Quan only)（组分名称，仅 Quan）
 - Peak Height Intensity（峰高强度）
 - Peak Area Intensity（峰面积强度）
 - Peak Response Intensity (Quan only)（峰响应强度，仅 Quan）
 - Component Concentration (Quan only)（组分浓度，仅 Quan）
 - b. 若要在 Ordering Direction（排序方向）区域指定排序方向，从以下选项选择其一：
 - Ascending（升序）：按升序对数据进行排序
 - Descending（降序）：按降序对数据进行排序
 - c. 若要在 Limit Repeating Records maximum（重复记录最大限值）区域设置需排序的峰或组分的最大值（最多达 999），选中 **Limit number of reported peaks or components**（报告峰或组分限值）复选框并从激活框中选择一个值。
5. 单击 **Page Breaks** 标签显示 Page Breaks 页面。利用该页面定义在最终报告的 Qual 或 Quan 重复部分中出现的单个峰的布局（参阅图 22）。

图 22. Repeating Section Properties 对话框中的 Page Breaks 页面



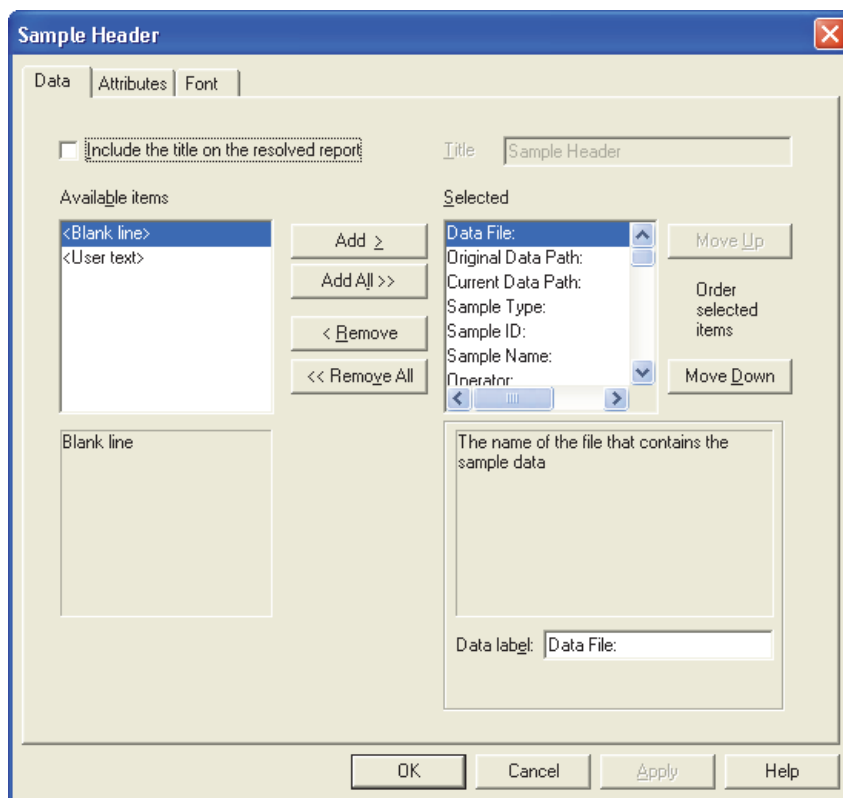
选择该选项将每个峰打印在各自页面上，或者用于避免单个峰之间的分页。

6. 当在 Repeating Section Properties 对话框中完成选择后，单击 **OK**（确定）。
7. 选择 **File**（文件）> **Save**（保存），保存更改。

配置文本项目

若要配置一个文本项目，单击该项目并选择 **Properties**（属性）。对话框打开（参阅图 23），以所选的项目类型命名。有关每个文本项目的描述，包括项目可以使用到哪些部分的信息，参阅附录 B，“报告项目类型。”

图 23. Sample Header（样品标题）对话框中的 Data（数据）页面



利用该对话框配置报告中的文本项目。

利用 Text Object Properties（文本项目属性）对话框，完成以下任务：

- 配置文本字段
- 添加自定义文本字段
- 配置文本性质
- 设置文本字体

配置文本字段

❖ 若要配置文本项目

1. 若要使项目包含一个自定义标题，选中 **Text Object Properties** 对话框的 Data 页面上的 **Include the title on the resolved report**（在已解析报告上包含标题）。
2. 单击 **Include**（包含）并在激活 **Title**（标题）框中输入一个名称。

3. 从 Available Items（可用条目）列表中选择需包含的条目。
 - 选择一个条目并单击 **Add**（添加）。
 - 双击一个条目。
 - 若要移动所有可用字段，单击 **Add All**（添加所有）。已选字段出现在所选列表中。
4. 在 Selected（已选）列表选中不希望包含的字段，然后单击 **Remove**（移除）。
5. 若要更改 Selected 列表框中所选条目的次序，选择一个条目并单击 **Move Up**（上移）或 **Move Down**（下移）。
6. 若要编辑一个数据标签，从 Selected 列表中将其选中并在 Data label（数据标签）框中编辑文本。无法编辑标题。利用 User Text（用户文本）条目对文本项目添加自定义标题。请参阅[添加自定义文本字段](#)。
7. 单击 **OK** 保存更改并关闭对话框。

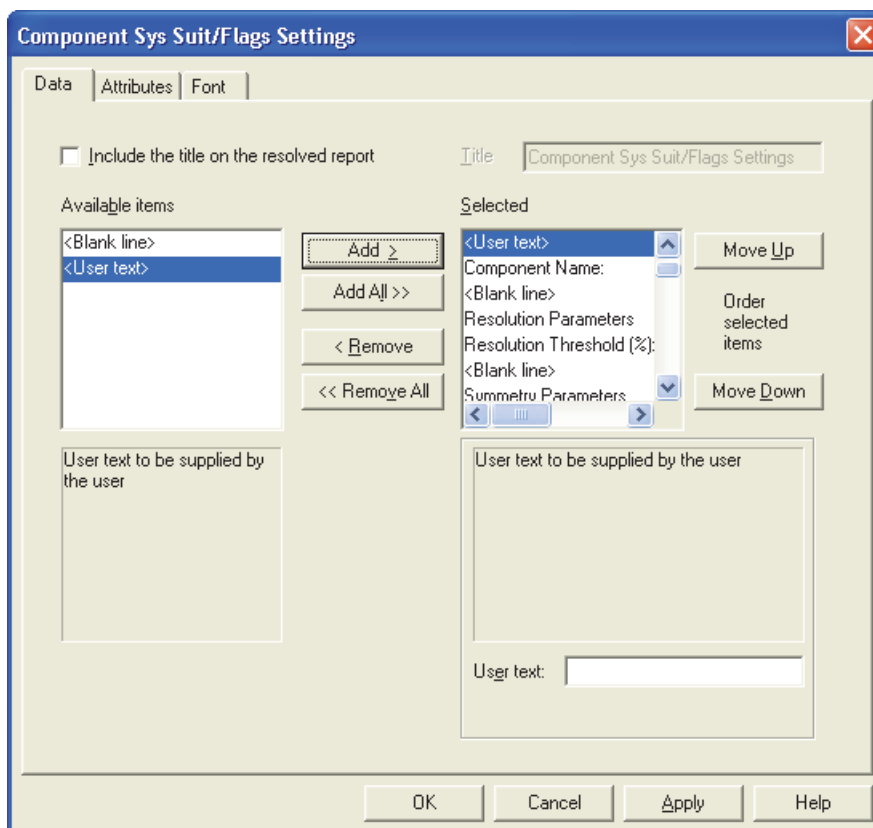
添加自定义文本字段

对文本项目添加自定义文本字段作为标题或注解。

❖ 若要添加自定义文本字段

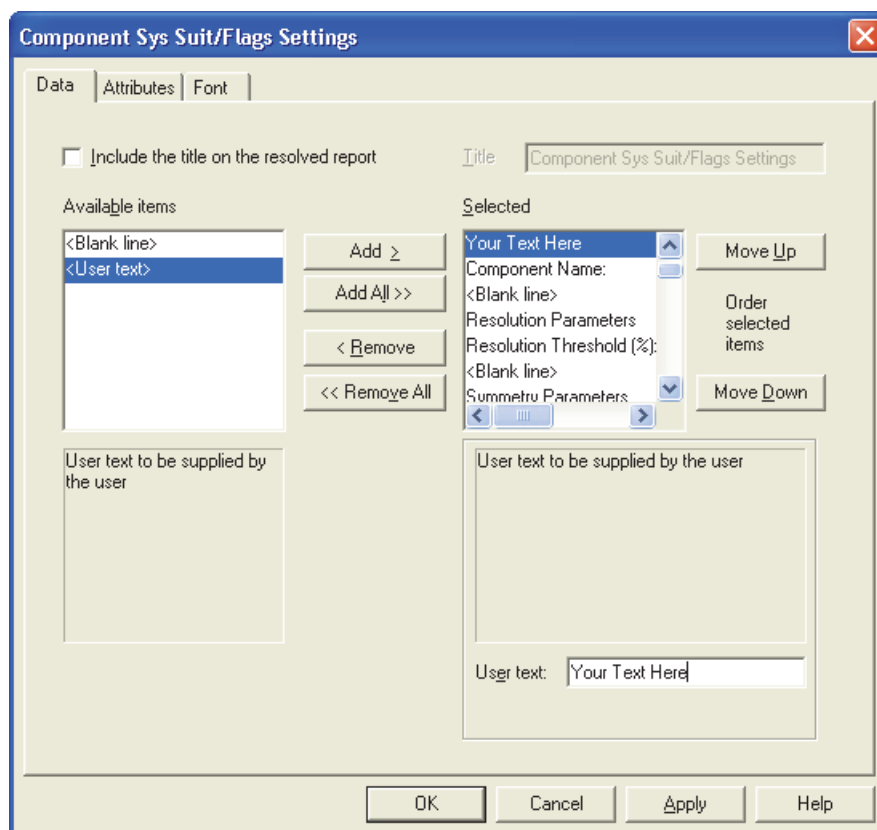
1. 在 Data 页面上，选中 Available Items 列表中的 **<User Text>**（用户文本），然后单击 **Add**（参阅图 24）。

图 24. 添加自定义文本字段



2. 选择 Selected 列表中的 <User Text> 。
3. 在文本区域输入文本，并按 ENTER（回车）键（参阅图 25）。

图 25. 自定义文本字段

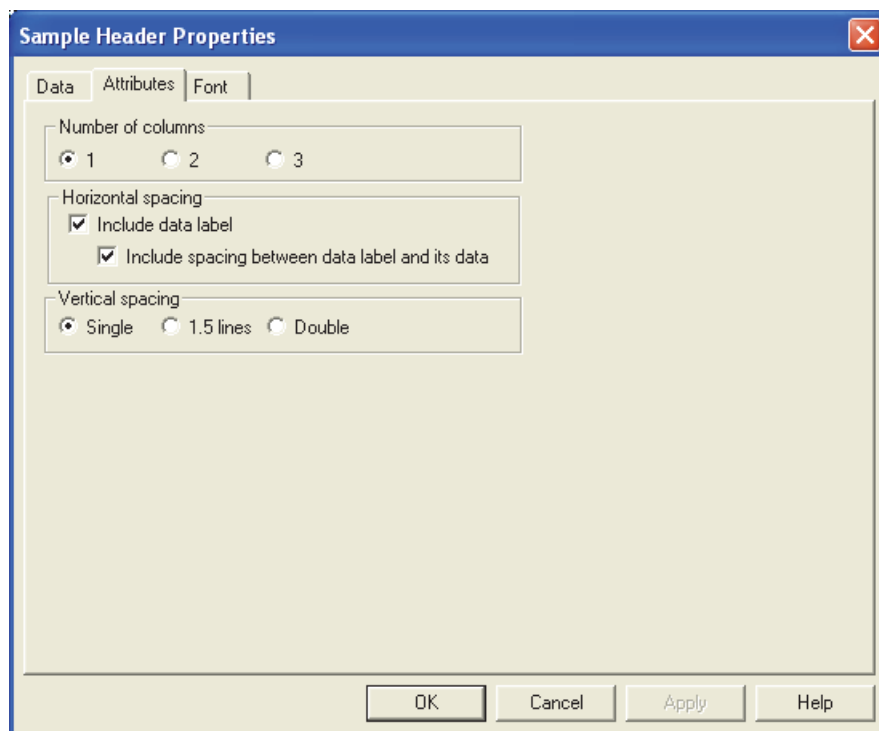


4. 点击 **OK** 保存修改。

配置文本性质

若要配置文本性质，右击模板中的一个文本项目并从快捷菜单选择 **Properties**。一个对话框打开。单击 **Attributes**（性质）选项卡（参阅图 26）。

图 26. Sample Header Properties（样品标题属性）对话框中的 Attributes 页面



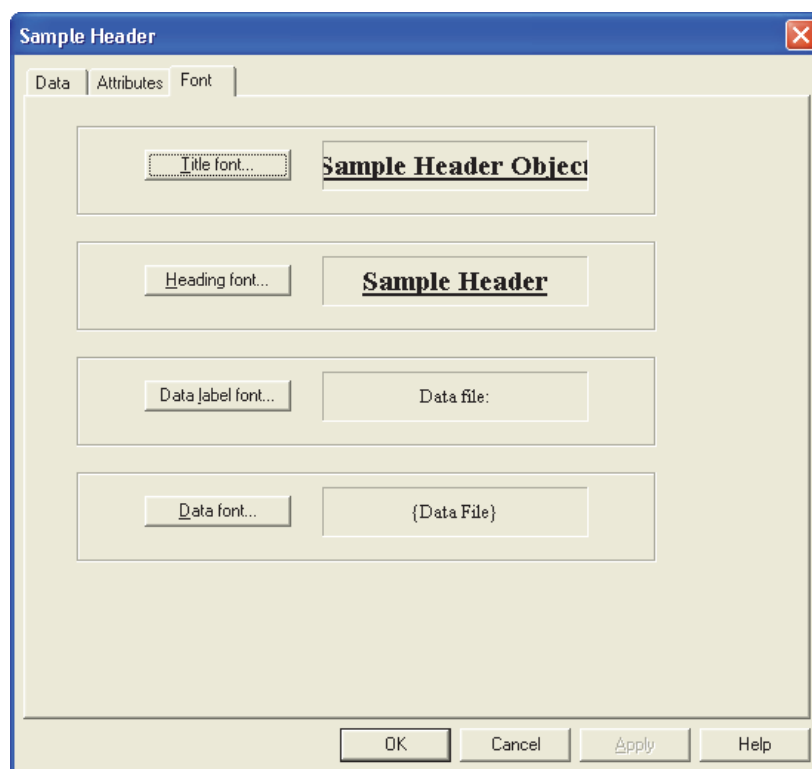
❖ 若要配置性质

1. 若要对列中的文本编排格式，在 Number Of Columns（列数）区域选择列数。
2. 若要在 Horizontal Spacing（水平间距）区域中将数据标签包含在项目内，选中 **Include data label**（包含数据标签）复选框。
3. 若要增加数据标签和数据之间的间距，选中 **Include spacing between a label and its data**（在数据和其标签之间包含间距）复选框。
4. 在 Vertical Spacing（垂直间距）区域选择直线间距选项。
5. 点击 **OK** 保存修改。

设置文本字体

若要设置文本字体，右击该文本项目并从快捷菜单选择 **Properties**。一个对话框打开，用户可以选择项目标题、小标题、数据标签和数据的字体类型。选择 **Font**（字体）选项卡（参阅图 27）。

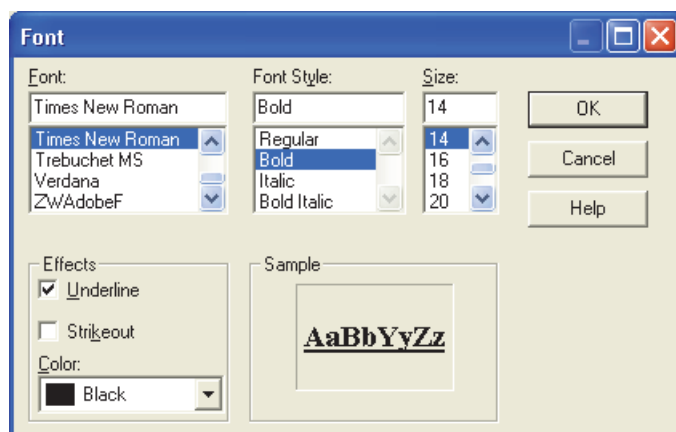
图 27. 设置字体



❖ 若要为页面上每个按钮设置指定文本类型的字体

1. 单击文本类型按钮。Font 对话框打开（参阅图 28）。

图 28. Font 对话框



2. 选择字体并单击 **OK**。

注释 Heading Font（标题字体）也可用于 User Text。参阅第 46 页“添加自定义文本字段”。

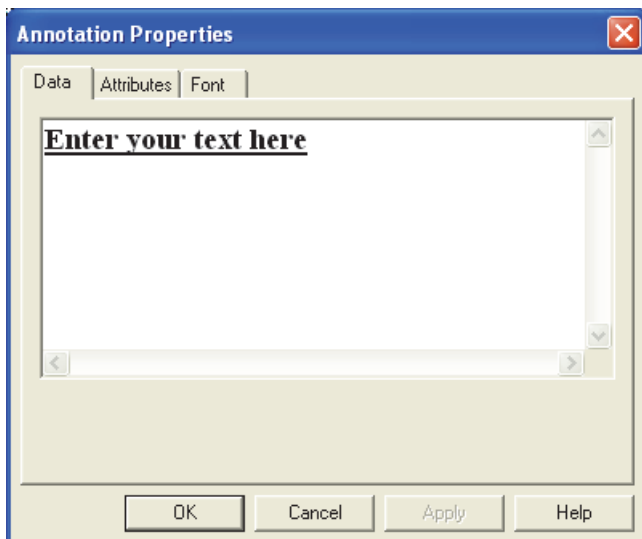
配置注解项目

用户可以在任意部分中添加注解项目。

❖ 若要配置注解项目

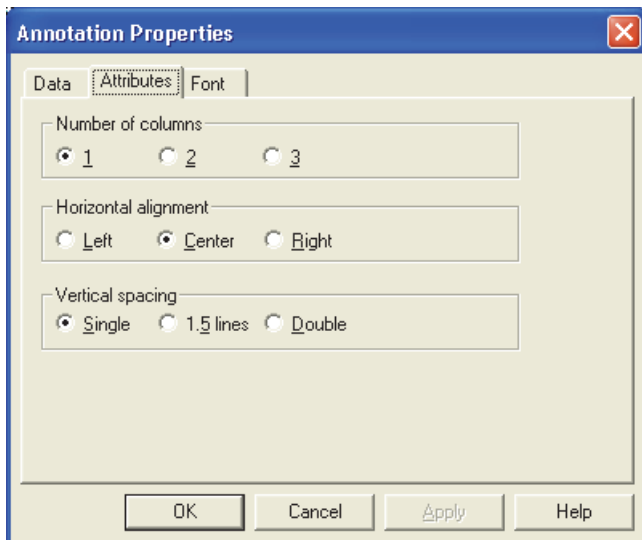
1. 右击模板中的注解项目，然后在快捷菜单中选择 **Properties**。Annotation Properties（注解属性）对话框打开（参阅图 29）。

图 29. Annotation Properties 对话框中的 Data 页面



2. 在 Data 页面上，单击 Annotation Properties 对话框中的框以获取光标。删除文字 *Enter your text here*，输入注解文本。
3. 在 Attributes 页面上的 Number of columns 区域中选择需要显示注解文本的列数（参阅图 30）。

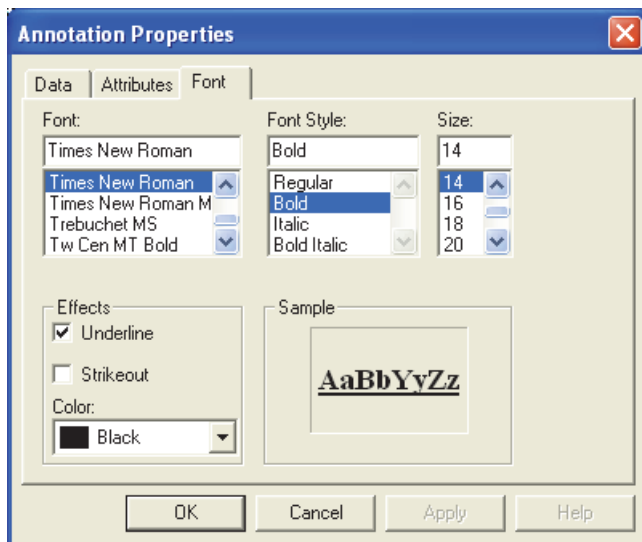
图 30. Annotation Properties 对话框中的 Attributes 页面



4. 在 Horizontal alignment（水平对齐）区域，选择注解文本的对齐选项：**Left**（左对齐）、**Center**（居中对齐）或 **Right**（右对齐）。

5. 在 Vertical spacing 区域，选择注解文本直线的间距选项：Single（单倍）、1.5 lines（1.5 倍）或 Double（双倍）。
6. 在 Font 页面，通过设置字体参数配置字体（参阅图 31）。

图 31. Annotation Properties 对话框中的 Font 页面



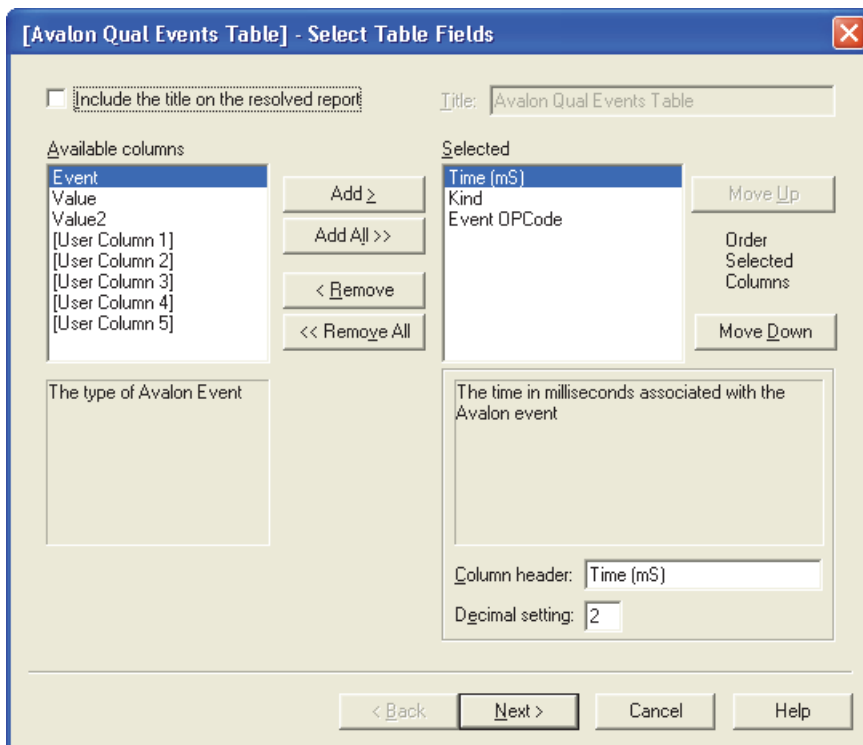
7. 点击 OK 保存修改。

配置表格项目

❖ 若要配置表格项目

1. 右击表格项目。
2. 从快捷菜单中选择 **Properties**。Table Properties（表格属性）向导打开（参阅图 32），命名为所选表格的类型。关于每个表格的描述，包括可以显示表格的部分，参阅附录 B，“报告项目类型。”

图 32. Select Table Fields（选择表格字段）页面



利用 Table Properties 向导，通过更改属性来配置报告模板中的表格项目。利用向导完成以下：

- 选择表格列
- 配置自定义（用户）列
- 指定表格排列次序
- 设置表格字体
- 设置其它表格属性

选择表格列

若要选择包含在表格中的列（参阅图 32），使用 Table（表格）向导中的 Select Table Fields 页面。表格的可用列以字母次序显示，但可以以任意次序增加到报告模板中。待选的列选项取决于正在配置的表格项目的类型。

❖ 若要选择 Table 向导中 Select Table Fields 页面的选项

1. 若要使表格包含自定义标题，在 Title 框中输入标题并选中 **Include the title on the resolved report** 复选框。
2. 若要从 Available Columns（可用列）列表中选择包含在表格的列，选择以下其中一种方法。
 - 选择一个条目并单击 **Add**（添加）。
 - 双击条目。
 - 若要移动所有可用字段，单击 **Add All**（添加所有）。

已选字段出现在所选列表中。

注释 所有表格项目都含有所选的可用列。利用用户列定义计算表格数据的方程及在表格中显示结果。有关用户列的详细信息，参阅[配置自定义（用户）列](#)。

3. 在 Column Header（列标题）框中输入列标题文本。
4. 若要在 Selected Columns（所选列）列表中排列所选列的次序，单击 **Move Up**（上移）或 **Move Down**（下移）。
5. 单击 **Next**（下一步），转入向导的下一页。

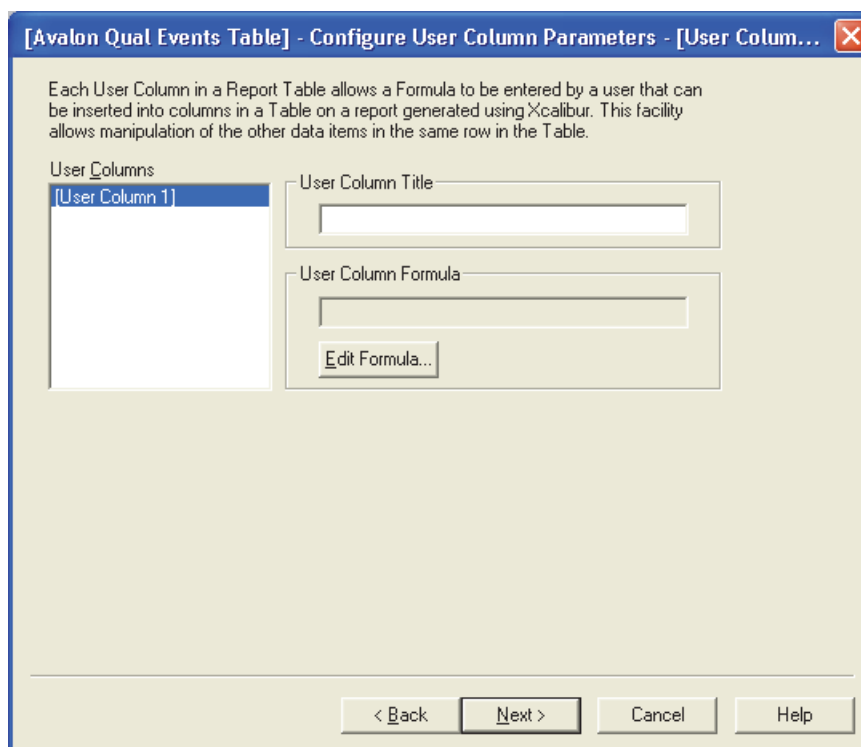
配置自定义（用户）列

仅当用户选择在表格中含自定义 User Columns（用户列）时，Table 向导中的 Configure User Column Parameters（配置用户列参数）页面才显示。利用该页面定义表格中每个 User Column 的参数（参阅图 33）。

用户可以利用 User Columns 来定义计算表格数据的数学公式。公式遵守以下句法规则：

- 公式必须以等号（=）开头。
- 每个表格列都以一个字母标示符表示（A、B、C 等等），标示符显示在 Table 项目的列标题的下方。
- 数学表达式尽可能简单，如输入 A+B、A-B、A*B 或者 A/B。这个规则对 Edit Formula（编辑公式）对话框的 Functions（函数）列表中列出的其它函数也同样适用。公式的计算按行顺序进行。也就是说，若用户在 User Column 中输入 =A+B 作为公式，结果将按如下计算：
 - a. Xcalibur 数据系统将列 A 中首行的值与列 B 中首行的值相加，结果显示在 User Column 的首行中。
 - b. Xcalibur 数据系统将列 A 中第二行的值与列 B 中第二行的值相加，结果显示在 User Column 的第二行中。
 - c. 直到表格中所有行的计算已完成，数据系统才停止该过程。

图 33. Configure User Column Parameters 页面

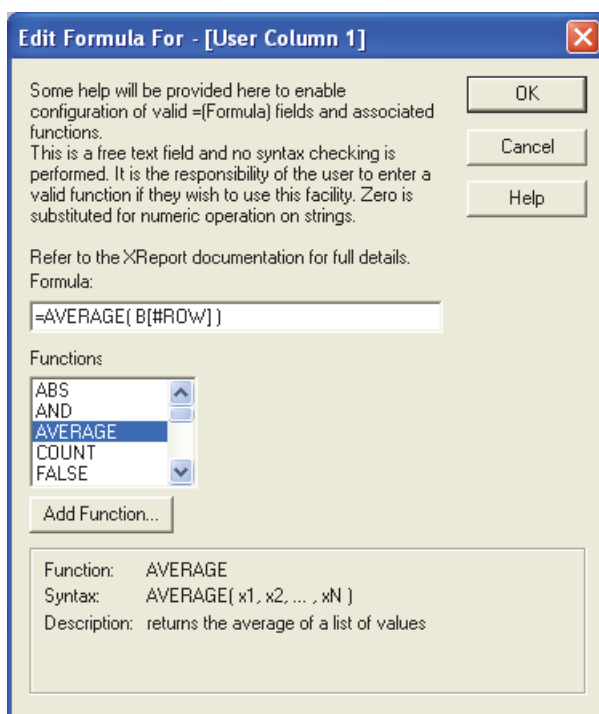


Xcalibur 应用程序显示在 User Columns 列表中为表格所选的 User Columns。

❖ 若要定义每个用户列

1. 在 User Columns 列表选择一个用户列。
2. 在 User Column Title （用户列标题）区域输入用户列标题。
3. 单击 User Column Formula （用户列公式）区域的 **Edit Formula**。Edit Formula 对话框打开（参阅图 34）。

图 34. Edit Formula For 对话框



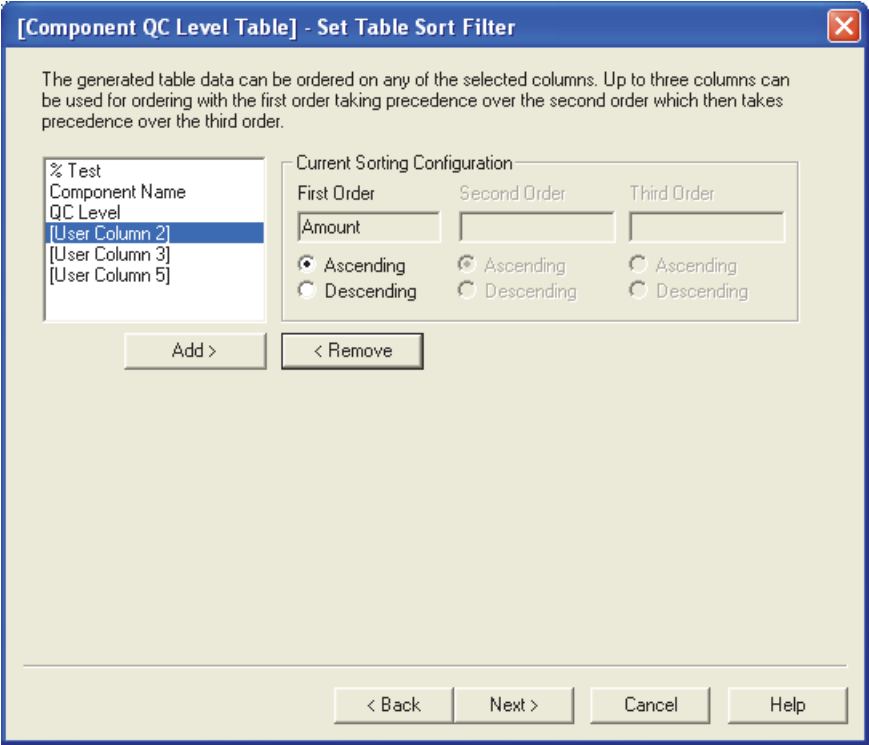
对所选列，为用户列编辑公式并配置有效字段和相关函数。函数列表下方，即对话框底部，对每个公式做了简要描述。

4. 若要在 Formula （公式）框中输入一个公式，从 Functions 列表选择一个函数并单击 **Add Function** （添加函数）或者在该框中之直接输入公式。
5. 当用户单击 **Add Function** 时，将打开该方程的配置对话框。例如，对于 Average （平均）函数，选择需进行平均计算的列。
6. 若要返回 Configure User Column Parameters 页面，单击 **OK**。
7. 单击 **Next**，转入向导的下一页。

指定表格排列次序

在生成报告时，利用 Table 向导的 Set Table Sort Filter（设置表格排序过滤器）页面定义表格数据排序的方法（参阅图 35）。

图 35. Set Table Sort Filter 页面



XReport 在对话框左侧的列表中显示为表格选择的列。以任意所选列设置表格的排序。利用多达三列来对表格进行排序：第一次序优先于第二次序，而第二次序优先于第三次序。

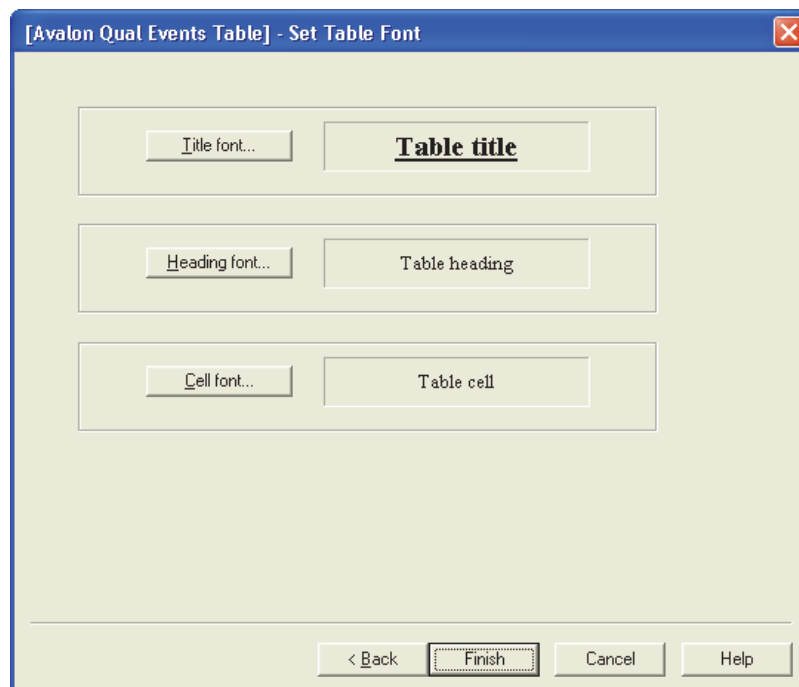
❖ 若要定义表格数据的排序方法

1. 若要选择某个变量进行表格的第一级别排序，双击列列表中的该条目将其移至 First Order（第一次序）框中。
2. 若要在 Current Sorting Configuration（当前排序配置）区域中定义排序 First Order 列数据的方法，选择以下其中一个选项：
 - Ascending：按升序对数据进行排序。
 - Descending：按降序对数据进行排序。
3. 若要定义用于排列表格列的第二和第三变量，重复前两个步骤。
4. 单击 **Next**，转至 Font 页面。

设置表格字体

利用 Table 向导的最后一页，设置表格中各部分的字体类型（参阅图 36）。

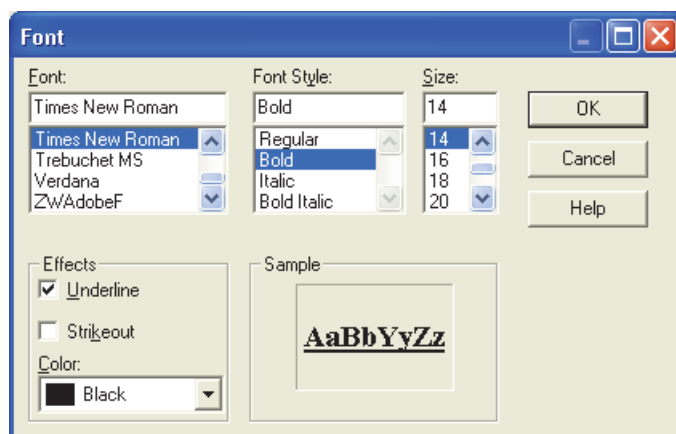
图 36. Set Table Font（设置表格字体）页面



❖ 若要定义指定元素的字体

1. 单击合适的按钮。Font 对话框打开（参阅图 37）。

图 37. Font 对话框



2. 选择字体选项并单击 **OK**。如必要，重复该步骤设置表格其他部分的字体。

设置其它表格属性

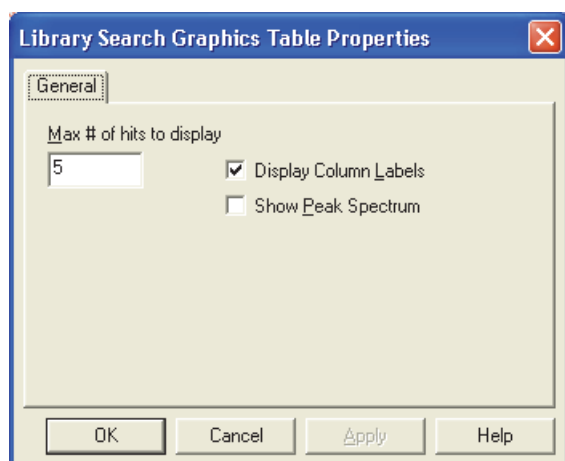
完成 Table 向导设置后，以下表格项目的 Properties 对话框出现：

- [Library Search Graphics Table Properties](#)
- [Library Search Results Table Properties](#)
- [Sample Table Properties](#)
- [Spectrum List Table Properties](#)
- [Electronic Signature](#) 表格属性

Library Search Graphics Table Properties

若要设置 Library Search Graphics Table（库检索图像表格）属性，右击表格并从快捷菜单中选择 **Properties**。Table Properties 向导打开。当完成该向导并单击 Finish（完成）之后，Library Search Graphics Table Properties（库检索图像表格属性）对话框打开（参阅图 38）。单击 **Cancel**（取消）关闭对话框。

图 38. Library Search Graphics Table Properties 对话框



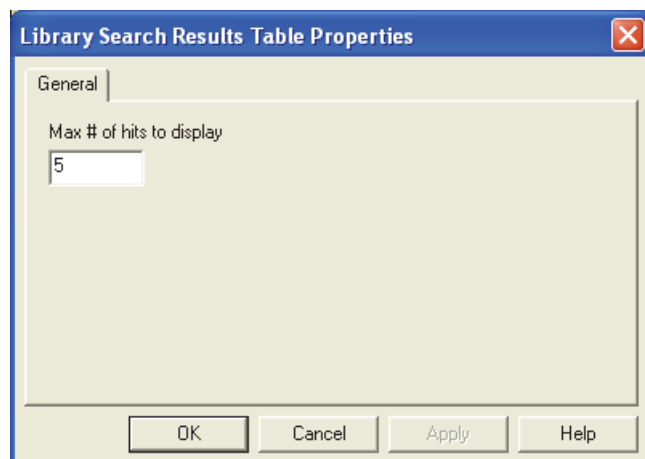
❖ 若要在该对话框中设置参数

1. 在 Max # of hits to display（需显示的最大目标数）框中输入表格中显示的检索结果总数。
2. 若要显示列标签，选中 Display Column Labels（显示列标签）复选框。
3. 若要显示峰质谱图，选中 Show Peak Spectrum（显示峰质谱图）复选框。
4. 单击 **OK**。选择 **File > Save**，保存所做修改。

Library Search Results Table Properties

若要设置 Library Search Results Table（库检索结果表格）属性，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。Table Properties 向导打开。当完成该向导后，Library Search Results Table Properties（库检索结果表格属性）对话框打开（参阅图 39）。

图 39. Library Search Results Table Properties 对话框



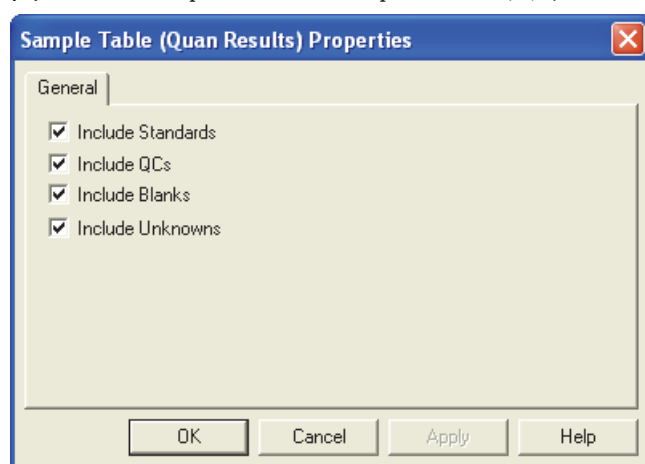
❖ 若要在该对话框中设置参数

1. 在 Max # of hits to display 框中输入表格中显示的检索结果总数。
2. 单击 OK。

Sample Table Properties

若要设置 Sample Table（样品表格）属性，右击该表格并从快捷菜单中选择 **Properties**。Table Properties 向导打开。当完成该向导后，Sample Table Properties（样品表格属性）对话框打开（参阅图 40）。

图 40. Sample Table Properties 对话框



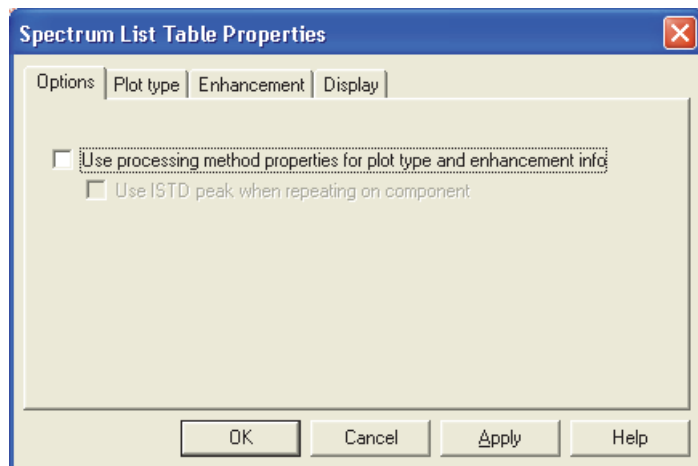
❖ 若要在该对话框中设置参数

1. 若要在样品表格中包含标样、质控样、空白样或未知样，选中相应复选框。
2. 单击 OK。

Spectrum List Table Properties

若要设置 Spectrum List Table（质谱图列表表格）属性右击该表格并从快捷菜单中选择 **Properties**。Table Properties 向导打开。当完成该向导后，Spectrum List Table Properties（质谱图列表表格属性）对话框打开（参阅图 41）。

图 41. Spectrum List Table Properties 对话框中的 Options（选项）页面



该对话框包含四个页面：

- Options 页面
- Plot Type 页面
- Enhancement 页面
- Display 页面

Options 页面

❖ 在 Options 页面上设置参数

1. 选中或清除 **Use processing method properties ...**（使用处理方法属性...）复选框（参阅图 41）。

当选中该复选框时，应用程序将在 Plot Type（谱图类型）和 Enhancement（优化）页面上隐藏参数。

2. 若要在对某个组分进行重复时使用 ISTD（内标化合物）峰，选中相应复选框。用户必须选中 **Use processing method properties for plot type...**（利用处理方法属性设定谱图类型...）复选框以激活 ISTD 峰选项。（仅当该项目用于 Quan 重复部分时，才采用该选项。当 Spectrum List Table 用于 Qual 重复部分时，这个选项不可用。）
3. 单击 **OK**。

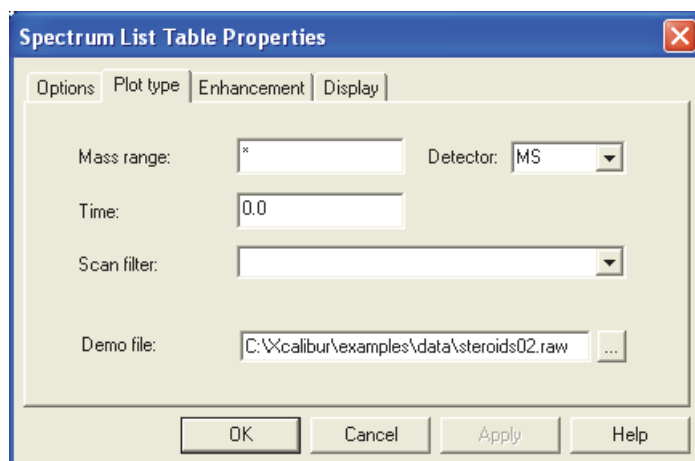
Plot Type 页面

在查看 Plot Type（谱图类型）页面和选择参数之前，清除 Options 页面上的 **Use processing method properties...** 复选框并单击 **Plot Type** 选项卡。

❖ 若要在 Plot Type 页面上设置参数

1. 在 Mass range（质量数范围）框内输入显示的质量数范围。数值之间以短线分隔：*lowmass-highmass*（低质量数 - 高质量数）。输入 * 以显示整个范围（参阅图 42）。

图 42. Spectrum List Table Properties 对话框中的 Plot Type 页面



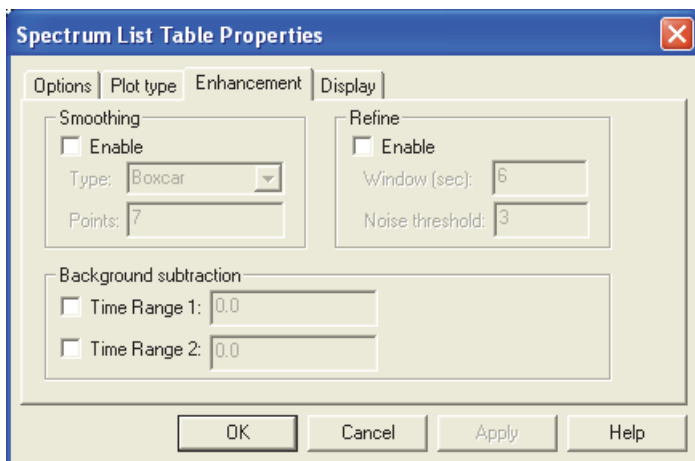
2. 从 Detector（检测器）列表中选择正在使用的检测器类型：**MS**（质谱）或 **PDA**（光电二极管阵列）。
3. 在 Time（时间）框内输入以分钟为单位的时间范围。输入数值，以短线分隔：*firsttime-secondtime*（第一个时间 - 第二个时间）。输入 * 以显示整个范围。
4. 在 Scan Filter（扫描过滤器）列表中输入使用的扫描过滤器。
5. 输入或在 Demo File（演示文件）框中检索作为该模板设置的演示文件的文件名。
6. 单击 **OK**。

Enhancement 页面

❖ 若要在 Enhancement（优化）页面上设置参数

1. 若要对数据进行平滑，选中 Smoothing（平滑）区域中的 **Enable**（启用）复选框（参阅图 43）。

图 43. Spectrum List Table Properties 对话框中的 Enhancement 页面



2. 若要选择平滑类型，选择 Type（类型）列表中的 **Boxcar** 或 **Gaussian**。
3. 在 Points（点数）框中选择采用的平滑点数（3 至 15 之间的奇数）。
4. 若要优化数据，在 Refine（精简）区域内选择 **Enable** 复选框。
5. 若要定义绘制峰的区域，输入指定点两侧的秒数。该窗口合理的起始数值是以秒为单位的峰宽。
6. 在 Noise Threshold（噪声阈值）框内输入峰的截止点。若要显示该质谱图中的所有峰，输入 0。返回该框以消除更多噪声。缓慢增加这一数值直到噪声峰被消除。利用该设置消除由基线噪声生成的峰。
7. 若要打开用于评估背景扣除的首个基线区域，选中一个或两个 **Time Range**（时间范围）复选框。在框中输入使用的时间范围。

若质谱图采用背景扣除，则 Background Subtraction（背景扣除）区域显示背景扣除的详细信息。通过平均一个或两个基线区域来确定背景贡献。

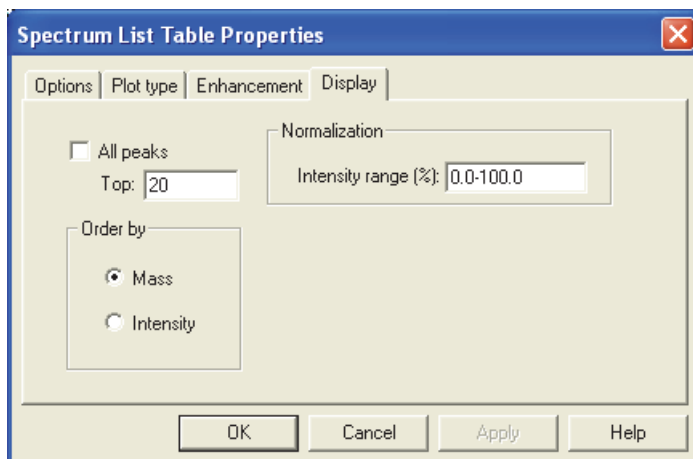
8. 单击 **OK**。

Display 页面

❖ 若要在 Display（显示）页面上设置参数

1. 若要显示质谱图中的所有峰，选中 **All Peaks（所有峰）** 复选框，或仅显示那些最强峰，则在 **Top（最多）** 框中输入一个值（参阅图 44）。

图 44. Spectrum List Table Properties 对话框中的 Display 页面



2. 若要按质量数或强度对数据排序，在 **Order By** 区域选中合适选项。
3. 在 **Normalization（归一化）** 区域输入代表表格中包含的质量峰的相对丰度范围的值。
4. 单击 **OK**。

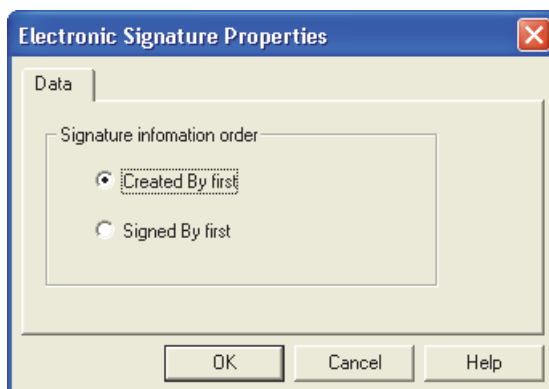
Electronic Signature 表格属性

利用 **Electronic Signature（电子签名）** 表格项目指定 **Created By（创建人员）** 签名信息组显示在 **Signed By（签名人员）** 签名信息组之前或之后。

❖ 若要配置 Electronic Signature 表格项目

1. 右击 **Electronic Signature** 表格项目，然后在快捷菜单中选择 **Properties**。
Electronic Signature Properties（电子签名属性） 对话框打开（参阅图 45）。

图 45. Electronic Signature Properties 对话框



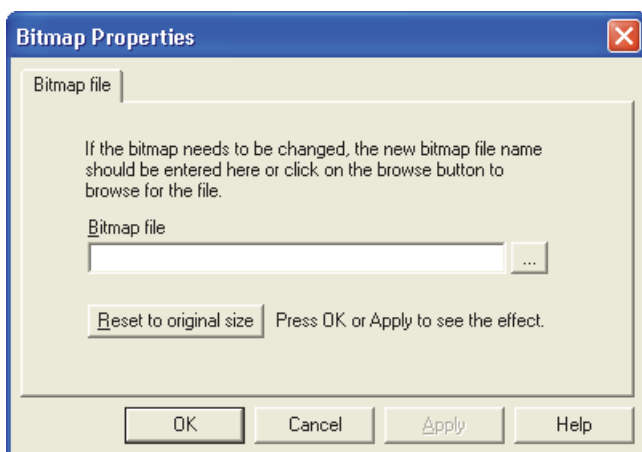
2. 若要将 Created By 签名信息组显示在 Signed By 签名信息组之前，则在 Signature Information Order（签名信息顺序）区域选择 **Created by first**（创建人员在前）选项，或者若要将 Signed By 签名信息组显示在 Created By 签名之前，选择 Signed by first（签名人员在前）选项。
3. 单击 **OK**。

配置位图项目

❖ 若要配置位图项目

1. 右击位图项目，然后在快捷菜单中选择 **Properties**。Bitmap Properties（位图属性）对话框打开（参阅图 46）。

图 46. Bitmap Properties 对话框



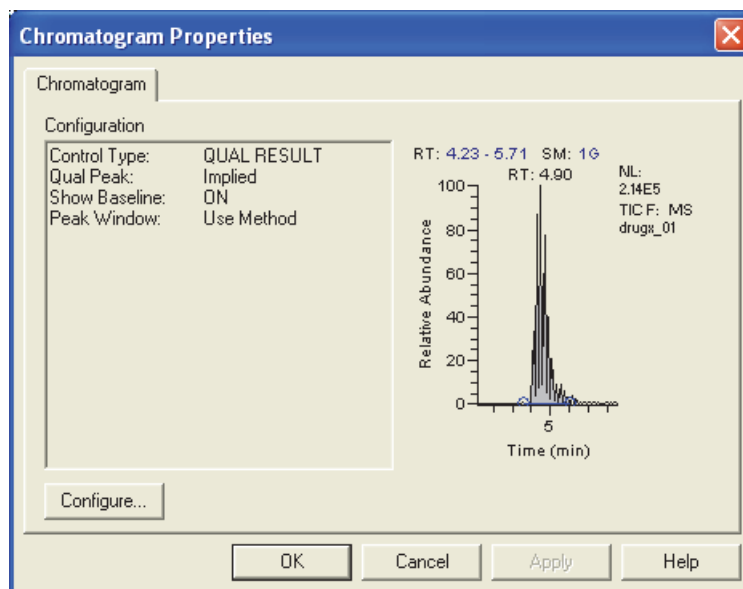
2. 输入图像文件的名称。选择一种下列文件格式：.bmp、.dib、.gif、.jpg 或 .ico。
3. 若要将位图图像尺寸设置为原始文件的尺寸，单击 **Reset to original size**（重设为原始尺寸）。
4. 单击 **OK**。

配置色谱图

❖ 若要配置色谱图报告项目

1. 右击该项目，然后在快捷菜单中选择 **Properties**。Chromatogram Properties（色谱图属性）对话框打开（参阅图 47）。

图 47. Chromatogram Properties 对话框



2. 单击 **Configure**（配置）。Chromatogram Properties 向导打开。

色谱图向导引导用户对报告模板中包含的色谱图报告项目的属性进行修改。

XReport 色谱图向导根据包含色谱图的部分类型、Chromatogram Type（色谱图类型）和 Peak Type（峰类型）属性选择的不同，显示不同的页面及包含不同的选项。

表 1 列出了向导页面及其次序。下面的主题描述了每个向导页面。参阅合适主题掌握如何完成每一向导页面。

表 1. 可能的色谱图向导页面，给出部分类型，按外观次序排列

XReport 色谱图向导中的页面	非重复部分			重复部分	
	Raw (原始)	Quan (定量)	Qual (定性)	Quan (定量)	Qual (定性)
Use Container Supplied Quan Peak (使用储存器提供的定量峰)				•	
Use Container Supplied Qual Peak (使用储存器提供的定性峰)					•
Select Chromatogram Type (选择色谱图类型)	•	•	•	•*	•
Select Demo File (选择演示文件)	•	•	•	•	•
Select the Quan Peak (选择定量峰)		•		•**	
Select Component (选择组分)				•	
Select the Qual Peak (选择定性峰)			•		•
Select Mass Spectrum Quan Traces to Display (选择需显示的质谱定量谱图)		•		•	
Configure How the Peak Window Will Look (配置峰窗口外观)		•	•	•	•
Select Plot Details (选择谱图细节)	•				
Select Enhance Details (选择优化细节)	•				
Select Chromatogram Style (选择色谱图风格)	•	•	•	•	•
Select the Peak Labeling (选择峰标签)	•	•	•	•	•
Select How the Chromatogram Axis Will Be Configured (选择色谱图坐标轴的配置方法)	•	•	•	•	•
Configure Normalization for the Chromatogram (配置色谱图归一化方法)	•	•	•	•	•

* 若在 Use Container Supplied Quan 或 Qual Peak 页面上选中 Explicitly Specify the Chromatogram's Behavior (明确指定色谱图操作) 时，该页面不显示。

**仅当在 Use Container Supplied Quan 或 Qual Peak 页面上选中 Explicitly Specify the Chromatogram's Behavior，该页面才显示。

注释 当用户为 Qual Result Based Chromatogram (基于定性结果的色谱图) 单击 All Qual Peaks (所有定性峰) 选项时，向导页面次序与不包含 Select the Qual Peak 页面的 Qual Result Based Chromatogram Type (基于定性结果的色谱图类型) 中的一致。

当需配置的色谱图报告项目包含在 Quan 或 Qual 重复部分中时，默认 Chromatogram Type 是基于不含详细峰类型设置的 Quan 或 Qual 结果。向导下一页 Use Container Supplied Quan Peak, 或 Qual) 请求用户确认这一点。

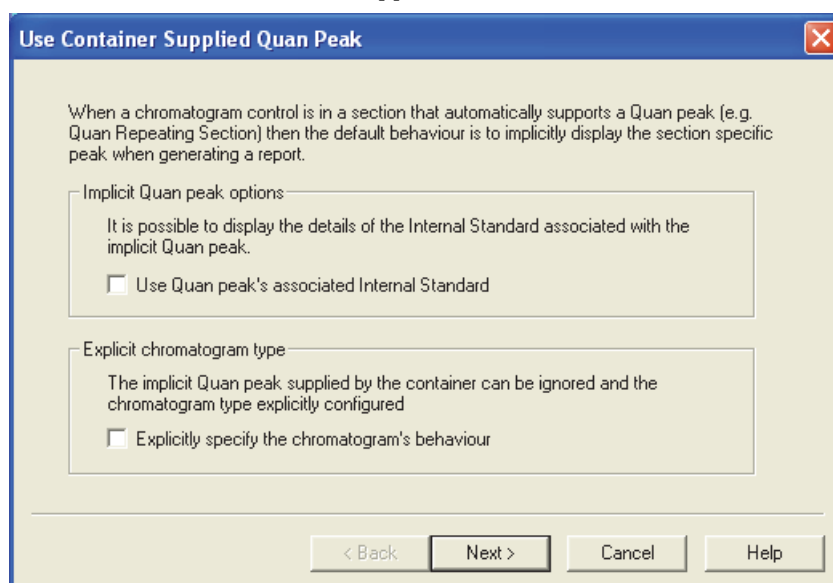
Use Container Supplied Quan Peak 页面

利用 Use Container Supplied Quan Peak 页面显示与默认 Quan 峰相关的内标物的详细信息，或忽略默认 Quan 峰并明确配置色谱图类型。

❖ 若要明确配置基于定量的色谱图类型

1. 若要显示与默认 Quan 峰相关的内标物的详细信息，选中 Implicit Quan peak options（默认定量峰选项）区域的 **Use Quan peak's associated Internal Standard**（使用与定量峰相关的内标物）复选框（参阅图 48）。

图 48. Use Container Supplied Quan Peak 页面



2. 若要忽略储存器提供的默认 Quan 峰并明确配置色谱图类型，选中 Explicit chromatogram type（明确指定色谱图类型）区域的 **Explicitly specify the chromatogram's behaviour**（明确指定色谱图操作）复选框。
3. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

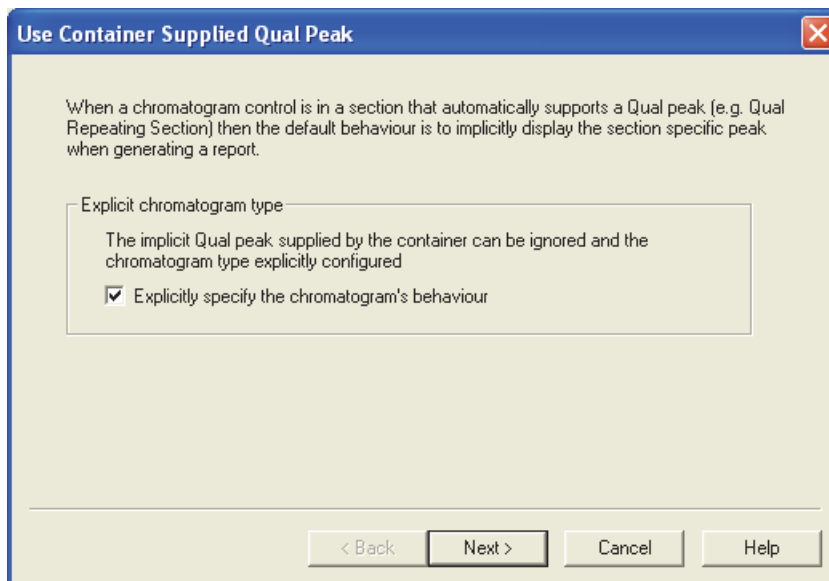
Use Container Supplied Qual Peak 页面

利用 Use Container Supplied Qual Peak 页面忽略默认 Qual 峰并明确配置色谱图类型。

❖ 若要明确配置基于定性的色谱图类型

1. 若要忽略储存器提供的 Qual 峰并明确配置色谱图类型，选中 Explicit chromatogram type 区域的 Explicitly specify the chromatogram's behaviour 复选框（参阅图 49）。

图 49. Use Container Supplied Qual Peak 页面



2. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

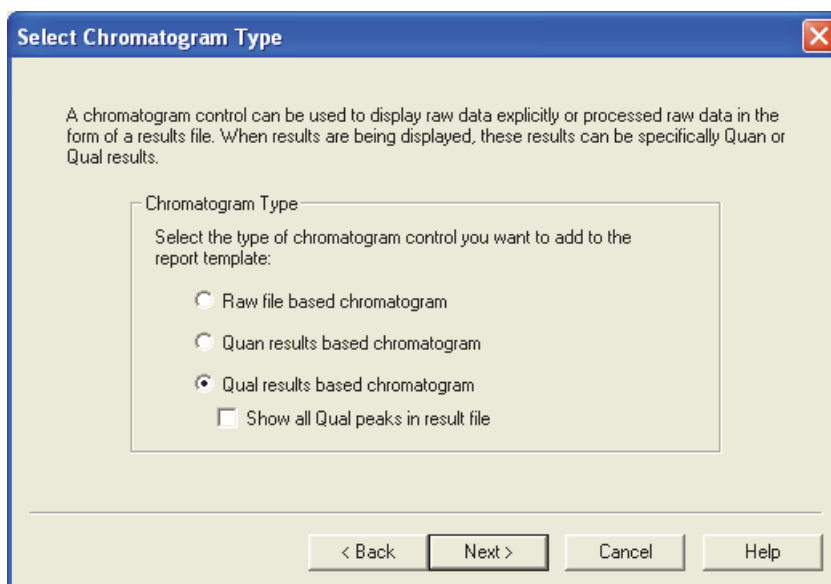
Select Chromatogram Type 页面

利用 Select Chromatogram Type 页面设置报告模板中正在配置的色谱图报告项目的色谱图类型。

❖ 若要选择色谱图类型

1. 通过选择以下一种选项，在 Chromatogram Type（色谱图类型）区域定义色谱图类型（参阅图 50）：
 - Raw file based chromatogram（基于原始文件的色谱图）
 - Quan results based chromatogram（基于定量结果的色谱图）
 - Qual results based chromatogram（基于定性结果的色谱图）

图 50. Select Chromatogram Type 页面



2. 若在步骤 1 中选择基于 Qual 结果的色谱图，则选中 **Show all Qual peaks in result file**（显示结果文件中的所有定性峰）复选框以在已解析 Xcalibur 报告中显示所有 Qual 峰。这是一种 Peak Type 设置。
3. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

Select Demo File 页面

利用 Select Demo File 页面将演示文件（.raw 或 .rst 文件）和色谱图报告项目相关联。演示文件显示色谱图报告项目在报告模板中的显示方式，当演示文件应用到实际 Xcalibur 数据时，在向导页面预览当前设置。

Select Demo File 页面的外观取决于在向导的 Chromatogram Type 页面所选择的色谱图类型和峰类型设置。

- 基于原始文件的色谱图
- 基于定量结果的色谱图
- 基于定性结果的色谱图 – 明确峰
- 基于定性结果的色谱图 – 所有可用峰

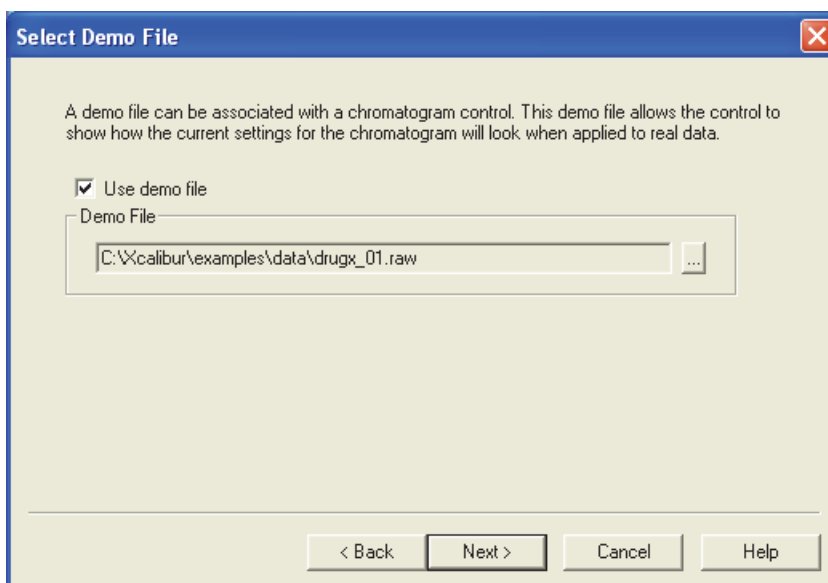
基于原始文件的色谱图

当配置基于原始文件的色谱图报告项目时，利用该步骤选择文件。

❖ 若要选择基于原始文件的色谱图的演示文件

1. 若要将演示文件和色谱图报告项目相关，选中 **Use demo file**（使用演示文件）复选框（参阅图 51）。

图 51. 选择一个基于原始文件的色谱图



2. 若要检索所需演示文件（.raw 文件），单击 Demo File 区域的浏览按钮。Select Raw Data File（选择原始数据文件）对话框显示。
3. 选择一个演示文件并单击 **Open**（打开）。单击 **Next** 转入向导的下一页。

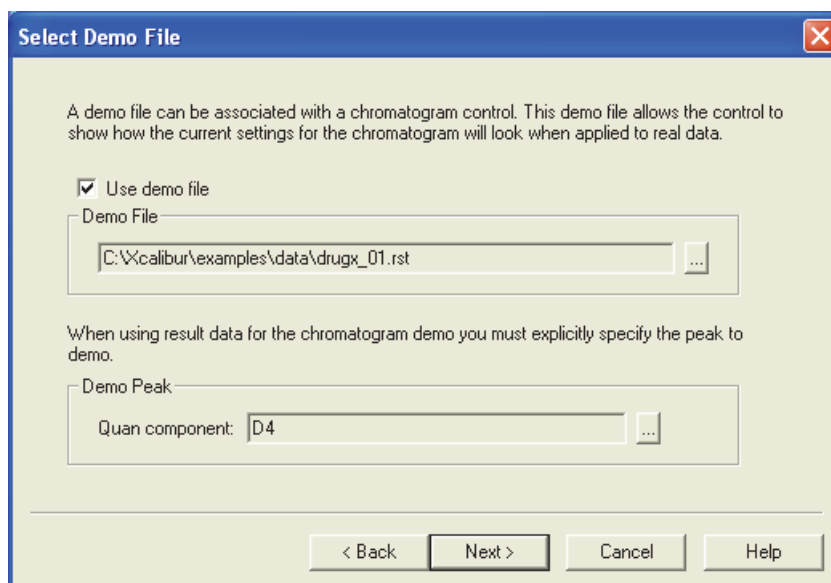
基于定量结果的色谱图

当配置基于 Quan 结果的色谱图报告项目时，利用该步骤选择文件。

❖ 选择基于定量结果的色谱图的演示文件

1. 若要将演示文件和色谱图报告项目相关，选中 **Use demo file**（使用演示文件）复选框（参阅图 52）。

图 52. 选择一个基于 Quan 结果的色谱图



2. 若要检索所需演示文件（.raw 文件），单击 Demo File 区域的浏览按钮。Select Raw Data File 对话框显示。
3. 选择一个演示文件并单击 **Open**。
4. 若要指定某个需演示的峰，单击 Demo Peak（演示峰）区域的浏览按钮。Select a Peak（选择一个峰）对话框显示。
5. 从位于结果文件的列表选择一个峰。
6. 单击 **OK** 应用该选择并返回至向导。
7. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

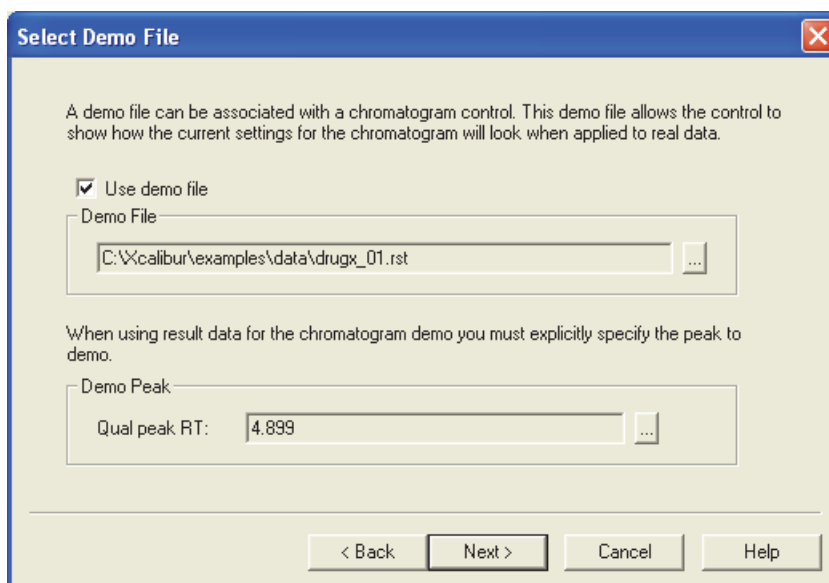
基于定性结果的色谱图 – 明确峰

当配置基于含所需明确 Peak Type 的 Qual Results（定性结果）的色谱图报告项目时，利用该步骤选择文件。

❖ 若要选择基于定性结果的色谱图的演示文件

1. 选中 **Use demo file** 复选框将演示文件与色谱图报告项目相关（第 69 页图 50）。

图 53. 在一个基于 Qual 结果的色谱图中选择 一个确定峰



2. 若要检索所需演示文件（.raw 文件），单击 Demo File 区域的浏览按钮。Select Raw Data File 对话框显示。
3. 选择一个演示文件并单击 **Open**。
4. 若要指定某个峰需演示，单击 Demo Peak 区域的浏览按钮。Select a Peak 对话框显示。
5. 从位于结果文件的列表选择一个峰。
6. 单击 **OK** 应用该选择并返回至向导。
7. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

基于定性结果的色谱图 – 所有可用峰

当配置 Show all Qual peaks（显示所有定性峰）（峰类型设置）设置下的 Qual 结果的色谱图报告项目时，利用该步骤选择文件。

❖ 若要为所有可用峰选择演示文件

1. 若要将演示文件和色谱图报告项目相关（参阅图 51），选择 **Use demo file** 复选框。
2. 若要检索所需演示文件（.raw 文件），单击 Demo File 区域的浏览按钮。Select Raw Data File 对话框显示。
3. 选择一个演示文件并单击 **Open**。单击 **Next** 转入向导的下一页。

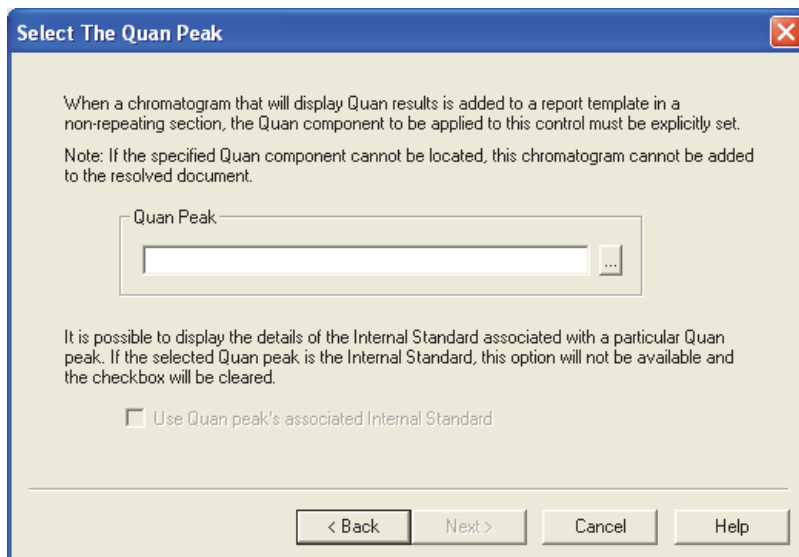
Select the Quan Peak 页面

利用 Select the Quan Peak 页面为基于 Quan 结果的色谱图报告项目明确指定 Quan 峰（组分）。

❖ 若要指定 Quan 峰

1. 若要指定 Quan 峰，在 Quan Peak（定量峰）区域中输入组分的文本名（参阅图 54）。

图 54. Select the Quan Peak 页面



2. 若要检索所需处理方法文件（.pmd），单击浏览按钮。Select Component 对话框显示。
 - a. 选择一个处理方法文件。
 - b. 在 Use the Select Component（使用选择组分）对话框中选择一个组分。单击 **OK** 返回至向导。仅当输入一个组分后，Next 按钮才激活。
3. 选中 Quan 峰的 **Use Quan peak's associated Internal Standard** 复选框，以使用所选的与 Quan 峰关联的内标物，而不是 Quan 峰。

注释 为 XReport 选择一个有效峰，以正确解析报告。若用于解析报告的文件不包含指定峰，则 Xcalibur 数据系统将色谱图从已解析报告上移除。

4. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

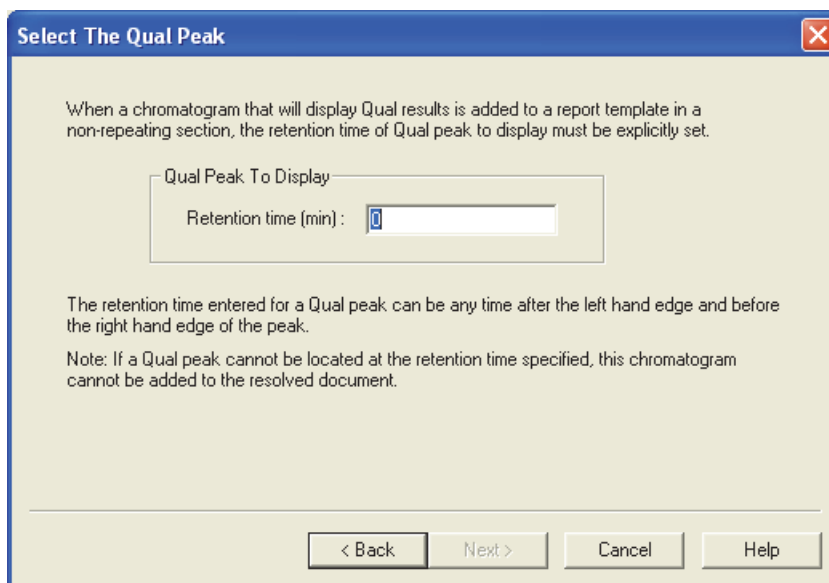
Select the Qual Peak 页面

利用 Select the Qual Peak 页面为基于 Qual 结果的色谱图报告项目明确指定 Qual 峰。

❖ 若要指定 Qual 峰

1. 若要在 Qual Peak to Display（要显示的定性峰）区域指定 Qual 峰，请在 Retention time 框内输入合适的保留时间（参阅图 55）。

图 55. Select the Qual Peak 页面



仅当在 Retention time 框内选择保留时间后，Next 按钮才激活。将保留时间设置为峰起始和结束范围内的任意时间。

注释 为 XReport 选择一个有效保留时间，以正确解析报告。若用于解析报告的文件不包含指定保留时间，则 Xcalibur 数据系统将色谱图从已解析报告上移除。

2. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面

利用 Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面来配置质谱数据的 Quan Traces（定量谱图）属性。（该页仅对质谱数据可用，在其它检测器类型下不激活。）

当色谱图报告项目显示 Quan 组分时，可能存在六个与该组分相关的图，如下所示：

- Quan Mass (QM) Trace (定量质量数，QM 谱图) – 实际组分峰
- 多达五个 Confirmation Ions (确认离子)

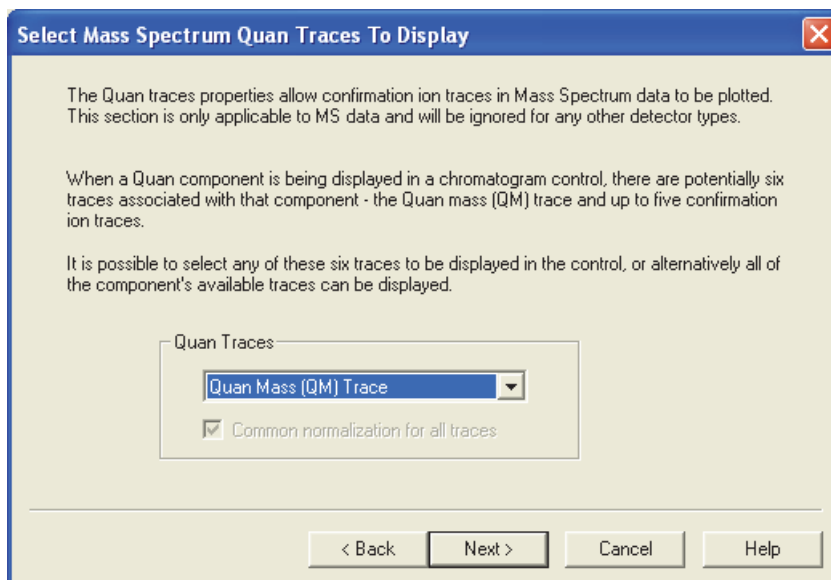
注释 该页上的 Ion Ratio Confirmation settings (离子比率确认设置) 仅应用于 GC-MS 数据。

选择显示在色谱图上的六种可能谱图或显示某个组分的所有可用谱图。

❖ 若要指定 Quan 谱图

1. 从 Quan Traces 列表选择 Quan Traces 区域中的 **Quan (定量)** 谱图（参阅图 56）。

图 56. Select Mass Spectrum Quan Traces To Display 页面



2. 从列表中选择 **All Quan Traces**（所有定量谱图）。
3. 若要以相同方法归一化所有谱图，选中 **Common normalization for all traces**（所有谱图归一化处理相同）复选框。
4. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

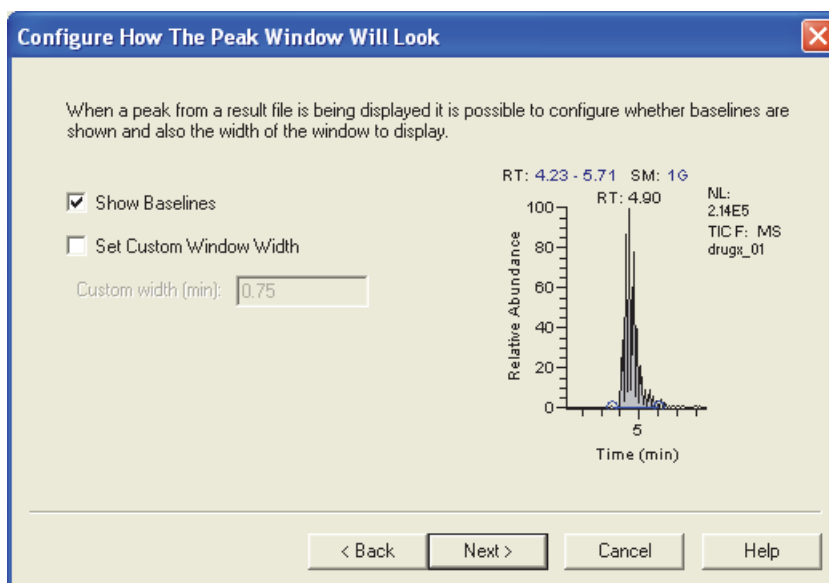
Configure How the Peak Window Will Look 页面

当在色谱图中设置显示结果文件中某个峰时，利用 Configure How the Peak Window Will Look 页面控制基线（Quan 峰和 Qual 峰）的显示和峰窗口宽度（在某些情况下对 Qual 峰和 Quan 峰激活）。

❖ 若要配置峰窗口

1. 选中 **Show Baselines**（显示基线）复选框显示色谱峰的基线（Quan 或 Qual）（参阅图 57）。当清除该选项时，XReport 不显示基线、峰跟踪或完整的峰注解。

图 57. Configure How the Peak Window Will Look 页面



2. 若要手动覆盖峰窗口宽度的默认值（默认峰宽度为 +1 min），选中 **Set Custom Window Width**（设置自定义窗口宽度）复选框。利用 Custom width（自定义宽度）编辑框输入峰窗口宽度值（min）。该字段默认值为 0.75 min。
3. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

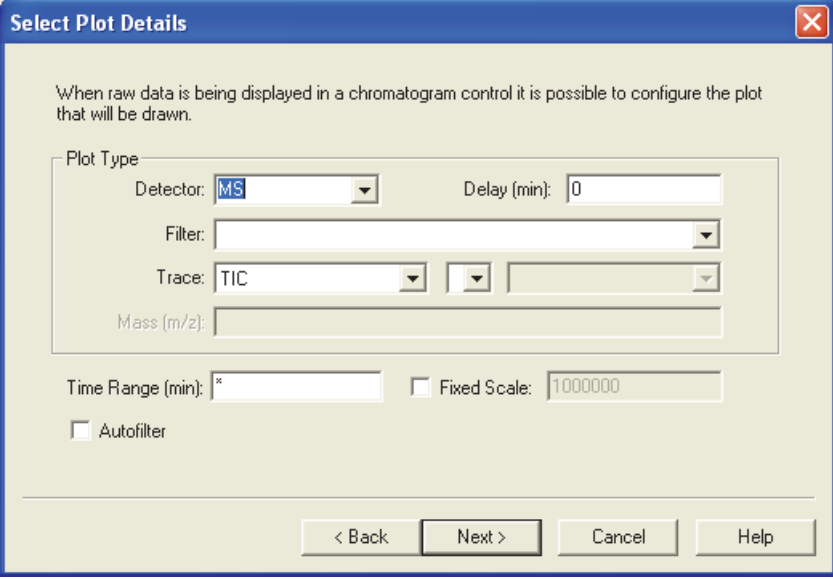
Select Plot Details 页面

当原始数据显示在色谱图报告项目中时，利用 Select Plot Details 页面配置绘制图表的方法。

❖ 若要配置基于原始文件的色谱图的图表

1. 从 Plot Type 区域的 Detector（检测器）列表中选择用于生成原始文件的检测器类型（参阅图 58）。检测器类型决定了可用谱图。

图 58. Select Plot Details 页面

The image shows a software dialog box titled "Select Plot Details". It contains several input fields and checkboxes. The "Detector" dropdown is set to "MS". The "Delay (min)" field is set to "0". The "Filter" dropdown is empty. The "Trace" dropdown is set to "TIC". The "Mass (m/z)" field is empty. The "Time Range (min)" field is set to "*". The "Fixed Scale" checkbox is unchecked, and the "Autofilter" checkbox is also unchecked. At the bottom, there are four buttons: "< Back", "Next >", "Cancel", and "Help".

When raw data is being displayed in a chromatogram control it is possible to configure the plot that will be drawn.

Plot Type

Detector: MS Delay (min): 0

Filter:

Trace: TIC

Mass (m/z):

Time Range (min): * Fixed Scale: 1000000

☐ Autofilter

< Back Next > Cancel Help

2. 在 Delay（延迟）框中输入色谱图起点的偏移值。仅当用户选择非质谱检测器类型如 UV（紫外）或 PDA（光电二极管阵列）时，该框才可用。
3. 从 Filter（过滤器）列表中选择应用于 .raw 文件中扫描组的处理过滤器。
仅当用户选择质谱检测器时该选项才可用。该列表显示保存在所选演示 .raw 文件中的扫描过滤器选项。若未选中演示文件，则输入有效过滤器字符串。
4. 从 Trace（谱图）列表中选择以下：
 - a. 从首个列表中，选择一个基本色谱图类型，如 TIC（总离子流图）。
 - b. 从第二个列表中，选择一个逻辑运算符：+ 或者 -。选中一个运算符使第三列表激活。

- c. 从第三个列表中，选择在首个色谱图上添加或扣除的第二个色谱图类型（如 **Mass Range 质量数范围**）。该列表包含有效谱图类型。

有效谱图列表取决于用于生成数据的检测器，如下：

检测	有效色谱图
MS（质谱）	Mass Range、TIC 或 Base Peak（基峰）。
Analog（模拟）	模拟 1-4
A/D card (A/D 卡)	A/D 卡 Ch 1-4
PDA（光电二极管 阵列）	Wavelength Range（波长范围）、Total Scan（全扫描）、 Spectrum Maximum（质谱图最大值）
UV（紫外）	通道 A-D

5. 根据所选色谱图类型，执行下列其中一项操作：
- 若用户选择 MS 检测器类型，则按如下步骤在 Mass（质量数）列表中选择 Mass Range 或 Base Peak 谱图的质量数或质量数范围：

如果用户在上述步骤 4 中选择 Base Peak ± Mass Range（基峰 ± 质量数范围）或 Mass Range ± Mass Range（质量数范围 ± 质量数范围）谱图组合，则识别页面显示每个色谱图类型的 Mass（ m/z ）（质量数， m/z ）字段。
 - 若用户选择其他检测器类型，使用该字段指定色谱图的波长或波长范围。若用户采用诸如 Wavelength Range + Wavelength Range（波长范围 + 波长范围）之类的谱图组合，将显示另一个 Wavelength (nm)（波长，nm）框，可以在其中指定第二个波长范围。

有效范围取决于配置的检测器。格式为
Low Mass/Wavelength - High Mass/Wavelength（低质量数 / 波长 - 高质量数 / 波长）。以短线间隔，无空格。例如，对于 123 到 456 的质荷比范围，输入：123-456。
6. 在 Time Range（时间范围）框中指定谱图的时间上限值和下限值（以分钟为单位，小数位 1 位）。以短线间隔，无空格。

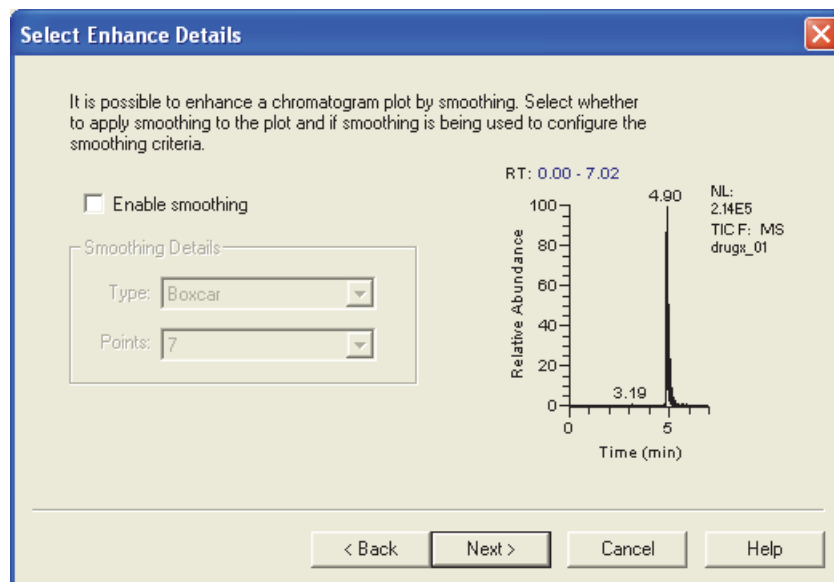
输入 *（默认设置）显示谱图的完整时间范围。
7. 选中 **Fixed Scale（固定刻度）** 复选框设置将 y 轴最大值设定为某个特定值。

选中 Fixed Scale 复选框激活向导最后一页上的 Normalize To（归一化为）区域和当期页面上用于输入 y 轴最大值的框。
8. 选中 **Autofilter（自动过滤器）** 复选框按如下方法更新色谱图视图：
- 显示未使用任何过滤器的色谱图的谱图
 - 在色谱图上应用每个扫描过滤器的谱图
9. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

Select Enhance Details 页面

利用 Select Enhance Details 页面通过应用平滑来优化色谱图（参阅图 59）。

图 59. Select Enhance Details 页面



❖ 若要优化色谱图

1. 若要对色谱图应用平滑，选中 **Enable Smoothing**（启用平滑）复选框。
2. 若要选择平滑类型，在 Smoothing Details（平滑细节）区域的 Type（类型）列表中选择 **Boxcar** 或 **Gaussian**。
3. 在 Points（点数）列表中选择采用的平滑点数（3 至 15 之间的奇数）。
4. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

Select Chromatogram Style 页面

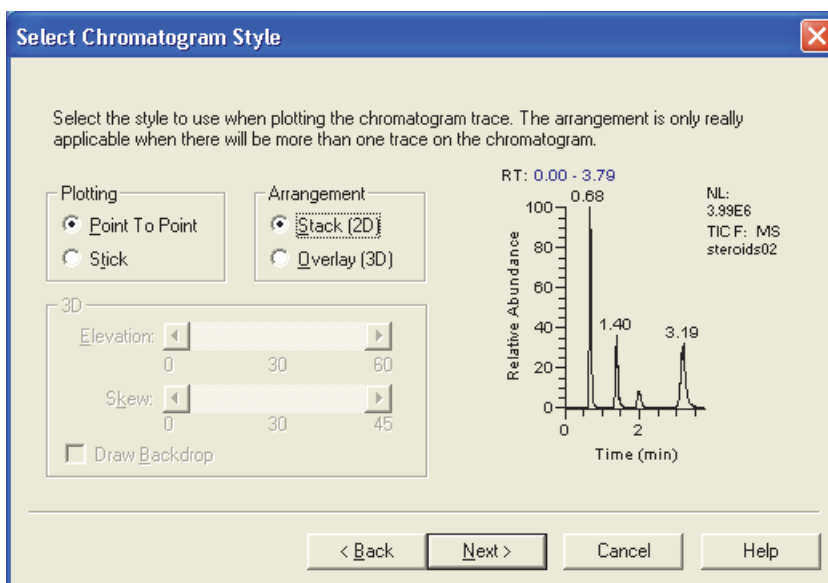
利用 Select Chromatogram Style 页面确定色谱图的外观。

❖ 若要定义色谱图风格

1. 若要定义谱图风格，在 Plotting（绘图）区域选择以下选项之一（参阅图 60）：

- Point To Point（点对点）：显示点对点峰轮廓图。
- Stick（棒状）：显示棒状色谱图。

图 60. Select Chromatogram Style 页面



2. 若要定义谱图排列，在 Arrangement（排列）区域选择以下选项之一：

- Stack（2D）（二维堆叠）：垂直堆叠谱图（ x 轴相同），但不重叠（ y 轴不同）。
- Overlay（3D）（三维叠加）：垂直叠加谱图（ x 轴相同）。当在向导的 Select Mass Spectrum Quan Traces（选择质谱定量谱图）页面上选择 Multiple Quan Traces（多定量谱图）时，采用三维排列方式。

3. 当用户选择 Overlay（3D）排列方式时，在激活三维区域设置以下：

- 若要设置三维谱图风格的仰角（从 0–60 度），调节 Elevation（仰角）滑动条。拖动 Elevation 滑动条，或在 Elevation 滑动条中单击左箭头或右箭头直到达到目标角度。
- 若要设置三维谱图风格的倾斜角，调节 Skew（倾斜角）滑动条。拖动 Skew 滑动条，或在 Skew 滑动条中单击左箭头或右箭头直到达到目标角度。
- 若要对三维谱图添加背景，选中 Draw Backdrop（绘制背景）复选框。

4. 单击 Next 转入向导的下一页。

Select the Peak Labeling 页面

利用 Select The Peak Labeling 页面选择峰标签的类型和风格。从该页面单击 **Advanced** (高级) 打开对话框, 以设置高级标签选项。

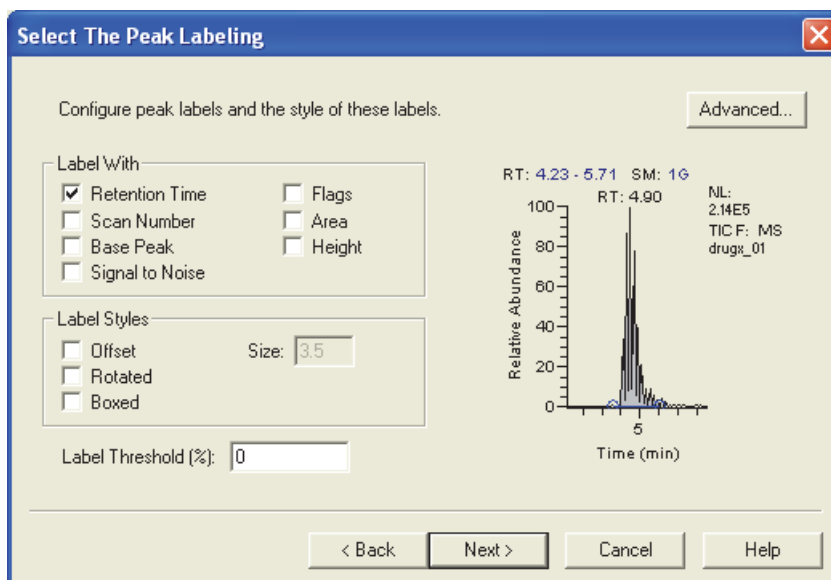
- 基本选项
- Advanced 选项 (Quan)
- Advanced 选项 (Qual)

基本选项

❖ 若要设置峰标签选项

1. 若要在色谱图中以时间 (单位是分钟) 标记峰, 选中 Label With (标签为) 区域的 Retention Time 复选框 (参阅图 61)。数据系统在标签前显示 RT。

图 61. Select the Peak Labeling 页面



2. 若要在峰顶点上方以质量数扫描数标记峰, 选中 **Scan Number** (扫描数) 复选框。数据系统在标签前显示 **S#**。
3. 若要标记色谱峰质谱图中的基峰, 选中 **Base Peak** 复选框。数据系统在标签前显示 **BP**。
4. 若要在峰顶点以信噪比标记峰, 请选中 **Signal-to-Noise** (信噪比) 复选框。数据系统在标签前显示 **SN**。
5. 若要以提供峰数据补充信息的标签来标记峰, 选中 **Flags** (标记) 复选框。如果一个峰为饱和峰, 则数据系统在该峰上方显示 **S**。
6. 若要在以积分面积标记峰, 选中 **Area** (峰面积) 复选框。当进行自动检测时, 数据系统在标签之前显示 **AA**, 当进行手动检测时, 则显示 **MA**。
7. 若要以峰高标记峰, 选中 **Height** (峰高) 复选框。当进行自动检测时, 数据系统在标签之前显示 **AH**, 当进行手动检测时, 则显示 **MH**。
8. 若要将标签从其正常位置移动以避免和其它标签相互冲突, 选中 Label Styles (标签风格) 区域的 **Offset** (偏移) 复选框。在 Size (大小) 框内输入偏移量 (字符数)。

9. 若要使用垂直标签，而不是水平标签，选中 **Rotated（旋转）** 复选框。
10. 若要为每个峰标签添加矩形边框，选中 **Boxed（加框）** 复选框。
11. 若要将标记峰限制为那些超过基峰指定百分比的峰，在 Label threshold（标签阈值）框中设置处于 0 至 100 之间的百分比。
12. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

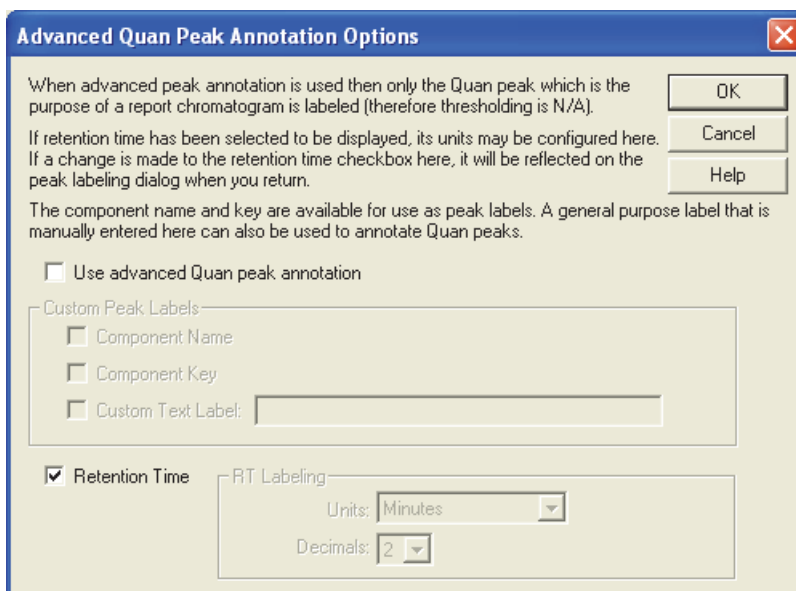
Advanced 选项（Quan）

单击 Select The Peak Labeling 页面上的 **Advanced**。Advanced Quan Peak Annotation Options（高级定量峰注解选项）对话框打开。当设置 Advanced Labeling（高级标签）选项时，数据系统仅标记 Quan 峰。

❖ 若要设置高级 Quan 峰注解选项

1. 若要激活高级 Quan 峰选项，选中 **Use advanced Quan peak annotation（使用高级定量峰注解）** 复选框（参阅图 62）。

图 62. Advanced Quan Peak Annotation Options 对话框



2. 若要以组分名标记 Quan 峰，在 Custom Peak Labels（自定义峰标签）区域选中 **Component Name** 复选框。
3. 若要以组分关键字标记 Quan 峰，选择 **Component Key**（组分关键字）复选框。
4. 若要指定自定义标签，选中 **Custom Text Label**（自定义文本标签）复选框。在激活框内输入 Quan 峰的自定义标签。
5. 若要以保留时间标记 Quan 峰，选中 **Retention Time** 复选框。当选中该复选框返回至 Labels（标签）页面时，该页面将显示所做修改。
6. 在 RT Labeling（保留时间标签）区域，从 Units（单位）列表选中保留时间的单位类型。
7. 从 Decimals（小数）列表中选择保留时间标签中显示的小数位。
8. 单击 **OK**，保存所做修改并关闭对话框。

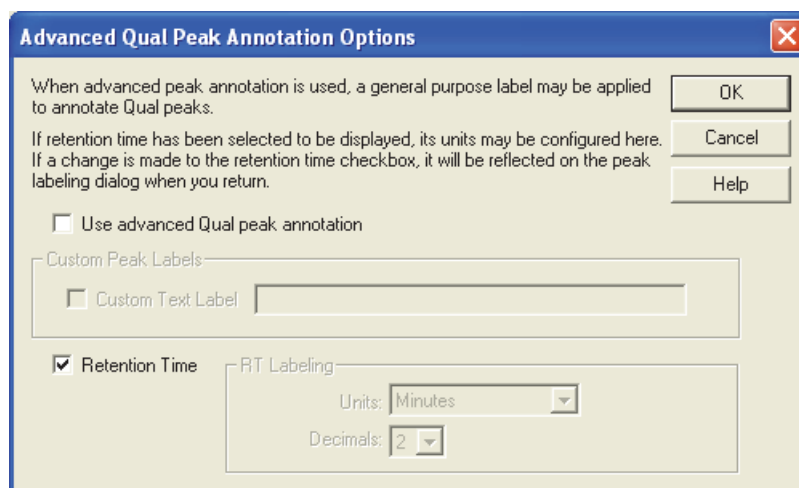
Advanced 选项 (Qual)

单击 Select the Peak Labeling 页面上的 **Advanced**。Advanced Qual Peak Annotation Options (高级定性峰注解选项) 对话框打开。当设置 Advanced Labeling 选项时, Xcalibur 数据系统仅对 Qual 峰加标签。

❖ 若要设置高级 Qual 峰注解选项

1. 若要激活高级 Qual 峰选项, 选中 **Use advanced Qual peak annotation** (使用高级定性峰注解) 复选框 (参阅图 63)。

图 63. Advanced Qual Peak Annotation Options 对话框



2. 若要指定自定义标签, 在激活 Custom Peak Labels 区域选中 **Custom Text Label** 复选框。在该框内输入 Qual 峰的自定义标签。
3. 若要以保留时间标记 Qual 峰, 选中 **Retention Time** 复选框。当选中该复选框返回至 Labels 页面时, 该页面将显示所做修改。
4. 在 RT Labeling 区域, 从 Units 列表选中保留时间的单位类型。
5. 从 Decimals 列表中选择保留时间显示的小数位。
6. 单击 **OK**, 保存所做修改并关闭 Advanced Qual Peak Annotation Options 对话框。

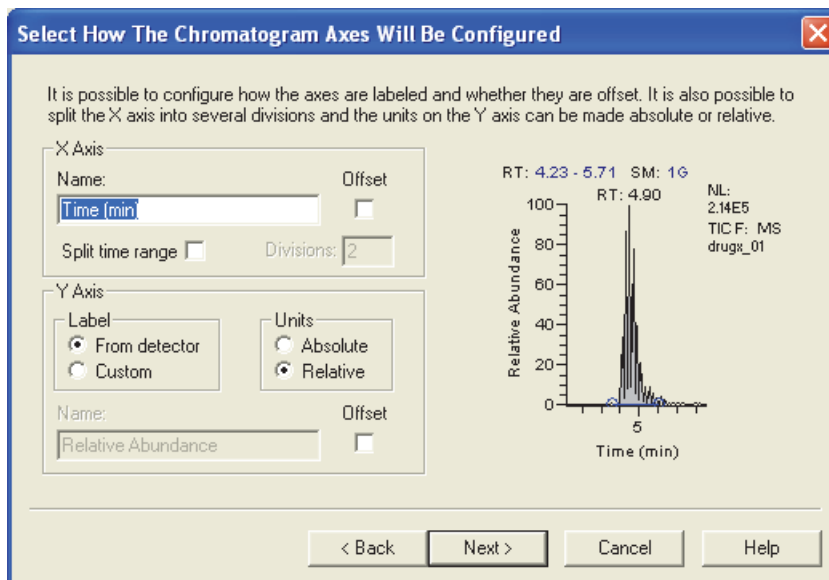
Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured 页面

利用 Axes （坐标轴）页面设置色谱图坐标轴标签和显示选项。

❖ 若要指定色谱图坐标轴外观

1. 若要设置 X Axis （X 轴）区域的 x 轴名称，在 Name （名称）框内输入（参阅图 64）。

图 64. Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured 页面



2. 若要从色谱图上移动坐标轴标签，选中 **Offset** 复选框。
3. 若要将色谱图分成时间范围相等的两个或更多的单个谱图，选中 **Split Time Range**（分割时间范围）复选框。
4. 在 Divisions （分割数）框内输入每个色谱图显示的分割时间范围的谱图数。仅当选 中 **Split Time Range**（分割时间范围）复选框时，该框激活。
5. 在 Y Axis （Y 轴）区域，在 Label （标签）区域选择 **From Detector**（从检测器）选项以对 y 轴使用指定检测器的标签（保存在 .raw 文件中）或选择 **Custom**（自定义）选项以使用自定义标签。
6. 若要指定 y 轴单位的设置，在 Units 区域选择 **Absolute**（绝对）或 **Relative**（相对）选项。
7. 若用户已选择对 y 轴使用自定义标签，则在 Name 框内输入 y 轴名称。
8. 若要在色谱图上移动坐标轴标签，选中 **Offset** 复选框。
9. 单击 **Next** 转入向导的下一页。

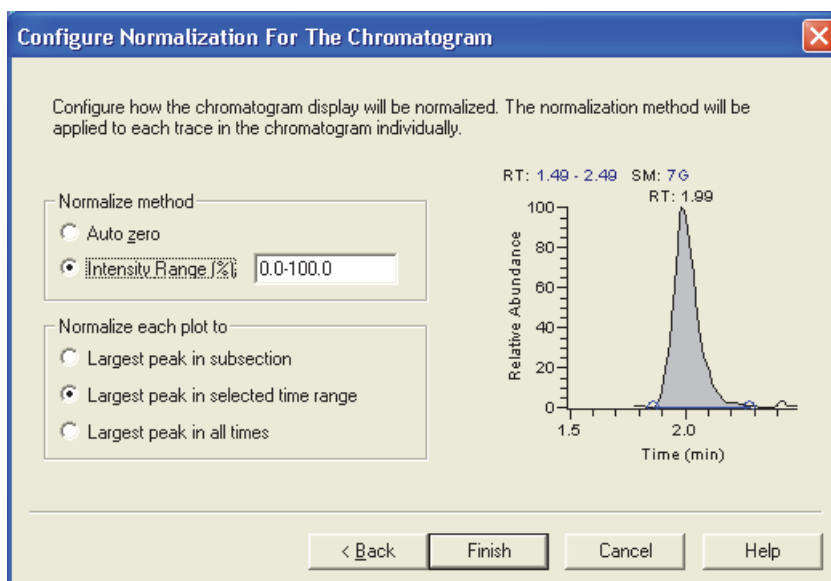
Configure Normalization for the Chromatogram 页面

利用 Normalization（归一化）页面选择用于色谱图的归一化（ y 轴刻度）方法。

❖ 若要指定归一化选项

1. 通过选择以下一种选项，在 Normalize method（归一化方法）区域定义归一化方法（参阅图 65）：
 - **Auto zero（自动调零）**：自动为每个色谱图优化 y 轴。
 - **Intensity range (%)（强度范围，%）**：手动设置范围。输入 y 轴所需的最小和最大强度值。有效范围为 -200.00 至 +200.00%。

图 65. Configure Normalization for the Chromatogram 页面



2. 通过选择以下一种选项，在 Normalize each plot to（归一化每个谱图）区域定义用于归一化的峰：
 - **Largest peak in subsection（分段内的最高峰）**：将每个分割时间范围归一化为分段内的最高峰。
 - **Largest peak in selected time range（选定时间范围内的最高峰）**：将质谱图归一化为显示时间范围内的最高峰。
 - **Largest peak in all times（所有时间内的最高峰）**：将质谱图归一化为整个色谱图内的最高峰。

当用户选择一个基于 .raw 原始文件的色谱图且已选中 Plot Type 页面上的 Fixed Scale 复选框（参阅第 61 页“Plot Type 页面”）时，Normalize each plot 区域激活。

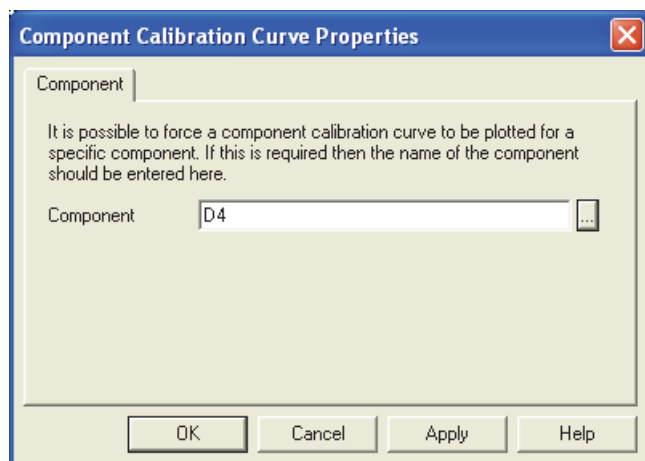
完成色谱图向导

若要在 Chromatogram（色谱图）向导中更改选择，单击 **Back（返回）** 返回至先前的页面。当页面设置完成后，单击 **Finish**。

配置组分校正曲线

若要配置 Component Calibration Curve（组分校正曲线）项目，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。Component Calibration Curve Properties（组分校正曲线属性）对话框打开（参阅图 66）。

图 66. Component Calibration Curve Properties 对话框

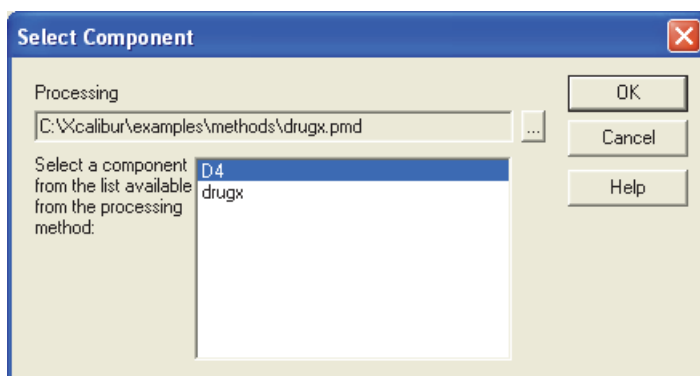


若用户报告含有非重复性 Component Cal Curve（组分校正曲线）报告项目，利用 Component Calibration Curve 向导指定组分名。

❖ 若要指定组分名

1. 若要检索所需处理方法文件（.pmd），单击浏览按钮。对话框打开。默认情况下，向导在 Xcalibur\methods 文件夹下进行检索。
2. 选中文件并单击 **Open** 将其打开。Select Component 对话框打开（参阅图 67）。

图 67. Select Component 对话框

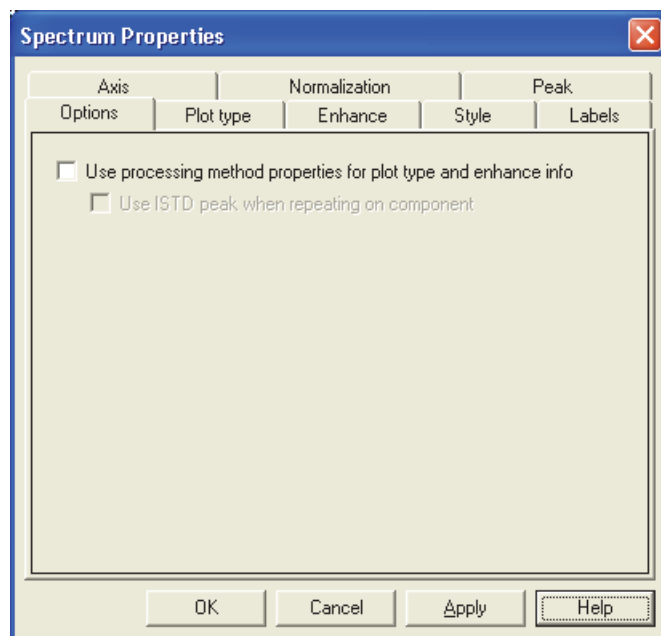


3. 从可用列表中为所选处理方法选择所需组分并单击 **OK**。Component Name 页面打开，在框中显示组分的指定名。
4. 单击 **OK**。

配置质谱图

若要配置 Spectrum（质谱图）报告项目，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。
Spectrum Properties 对话框打开至 Options 页面（参阅图 68）。

图 68. Options 页面



利用 XReport Spectrum Properties（质谱图属性）页面执行以下操作：

- 配置选项
- 配置谱图类型
- 优化谱图
- 配置质谱图风格
- 配置峰标签
- 配置坐标轴
- 选择归一化选项
- 指定峰

若要配置 Spectrum 报告项目，基于这些相应步骤在每个页面上作出选择。

配置选项

利用 [Options 页面](#) 配置 Spectrum 选项。

❖ 若要配置质谱图选项

1. 若要使用处理方法属性设置 Plot type 和 Enhance（优化）信息，选中 **Use processing method properties for plot type and enhance info**（使用处理方法属性设置谱图类型和优化信息）复选框（参阅第 87 页图 68）。

当选中复选框时，Plot type 和 Enhance 页面的选项不可用。

2. 若要在重复某一组分时采用内标峰，选中 **Use ISTD peak when repeating on component**（当重复组分时使用内标峰）复选框。仅当用户选中 Use processing method properties for plot type and enhance info 复选框时，该选项才可用。

配置谱图类型

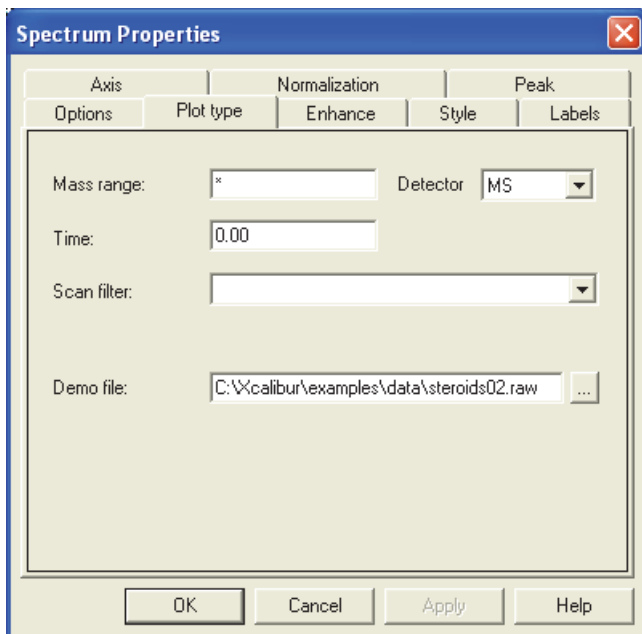
当原始数据显示在 Spectrum 报告项目中时，利用 [Plot Type 页面](#) 配置谱图绘制方式。

若用户选中 Options 页面上的 Use processing method properties for plot type and enhance info 复选框，该页面为空。

❖ 若要配置谱图类型

1. 在 Mass Range 框中为质谱检测器指定质量数或质量数范围（参阅图 69）。

图 69. Plot Type 页面



对于 PDA 检测器类型，利用该参数指定波长或波长范围（nm）。输入谱图的上限值和下限值。以短线间隔（无空格）。若使用整个质量数 / 波长范围，输入星号：*。

2. 从 Detector 列表选择用于生成原始文件的检测器类型。有效类型为 **MS** 和 **PDA**。检测器类型决定了可用谱图类型。
3. 在 Time 框中选择色谱图质量数扫描的时间。按需要输入一个新值或新范围。

4. 从 Scan Filter 列表中，选择一个过滤器或在该框中以扫描过滤器格式输入一个新过滤器。
5. 单击 Demo File 框中的浏览按钮并选择文件。该框显示用于生成所选谱图的演示文件（.raw）的路径和文件名。

优化谱图

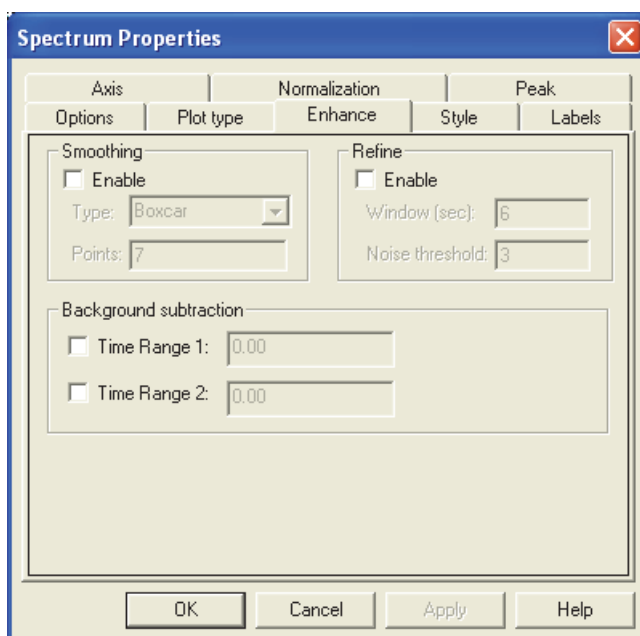
利用 [Enhance 页面](#) 对质谱图应用平滑（优化算法）和设置背景扣除时间范围。

若用户选中 Options 页面上的 Use processing method properties for plot type and enhance info 复选框，该页面为空。

❖ 若要定义质谱图优化选项

1. 若要对质谱图进行平滑，选中 Smoothing 区域中的 **Enable** 复选框（参阅图 70）。

图 70. Enhance 页面



2. 若要选择平滑类型，选择 Type 列表中的 **Boxcar** 或 **Gaussian**。
3. 在 Points 列表中输入质谱图平滑的点数。输入从 3（最小平滑）至 15（最大平滑）范围内的一个奇数。
4. 若要打开或关闭 Refine 质谱图优化，选中 Refine 区域的 **Enable** 复选框。
5. 若应用优化算法和指定质量色谱图的时间范围，在 Window（窗口）框内输入一个值来标示指定点任一侧的秒数。合理的起始数值是以秒为单位的峰宽值。
6. 若要避免由基线噪声生成的峰，在 Noise threshold 框内输入 0（显示质谱图中所有峰）。当关闭该框显示结果时，用户可以再次打开该框增加该值直到噪声峰已被排除。
7. 若要指定用于评估背景的首个基线区域，在 Background Subtraction 区域选中 **Time Range 1** 复选框。在该框中输入时间范围。

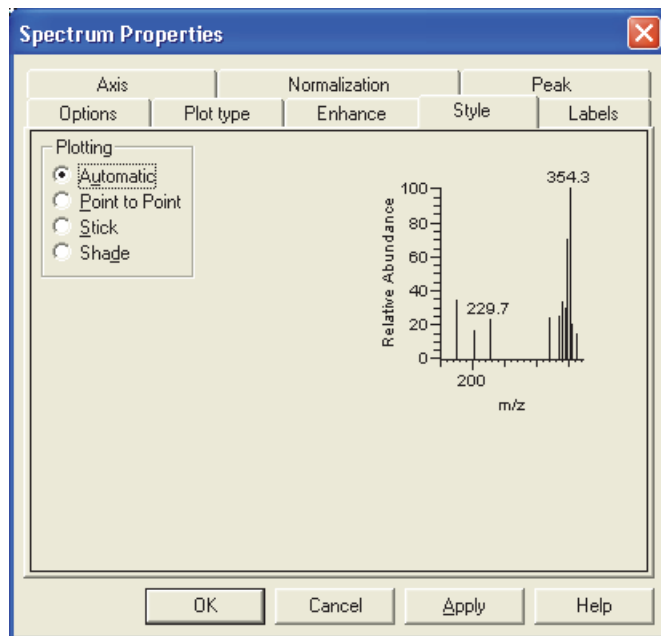
当质谱图应用该值时，Background Subtraction 区域显示背景扣除的详细信息。通过平均一个或两个基线区域的扫描来确定背景贡献。

- 若要指定用于评估背景的第二个基线区域，在 Background Subtraction 区域选中 Time Range 2 复选框。在该框中输入时间范围。

配置质谱图风格

使用 [Style 页面](#)（参阅图 71），设置决定质谱图外观的参数。

图 71. Style 页面



❖ 若要设置绘图选项

在 Plotting 区域选择以下操作之一来定义绘图风格：

- **Automatic（自动）**：基于用于激活质谱图的数据采集方法，选择图形风格。
- **Point To Point（点对点）**：显示点对点峰轮廓图。
- **Stick（棒状）**：以垂线显示质谱图质量数峰。
- **Shade（阴影）**：为激活质谱图显示以阴影代表每条 amu 带强度的质谱图。

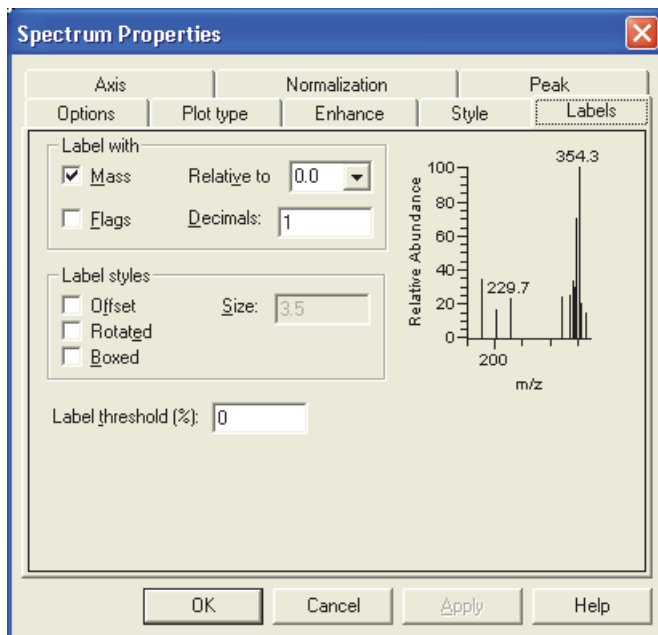
配置峰标签

利用 [Labels 页面](#) 选择峰标签的类型和风格。

❖ 若要配置峰标签

1. 选中 Label With 区域的 **Mass** 复选框以 m/z 值标记质谱峰（参阅图 72）。

图 72. Labels 页面



2. 选中 **Flags** 复选框，以标记对质谱峰加标签。标记提供了关于峰数据的补充信息。例如，如果一个峰为饱和峰，则 Xcalibur 数据系统在该峰上方显示 **S**。
3. 若要指定另一质谱峰标记为与该值相关，在 Relative to（相关于）框内输入一个值。
4. 从 Decimals 框中选择标签使用的小数位。
5. 若要将标签从其正常位置移动以避免和其它标签相互冲突，选中 Label Styles 区域中的 **Offset** 复选框。在 Size 框内选择偏移量（字符数）。
6. 若要使用垂直而不是水平标签，选中 **Rotated**（旋转）复选框。
7. 若要为每个峰标签添加直角边框，选中 **Boxed**（加框）复选框。该选项不应用于标记。
8. 若要将标记峰限制为那些超过指定基峰百分比的峰，则在 Label Threshold% 框中设置某一百分比。

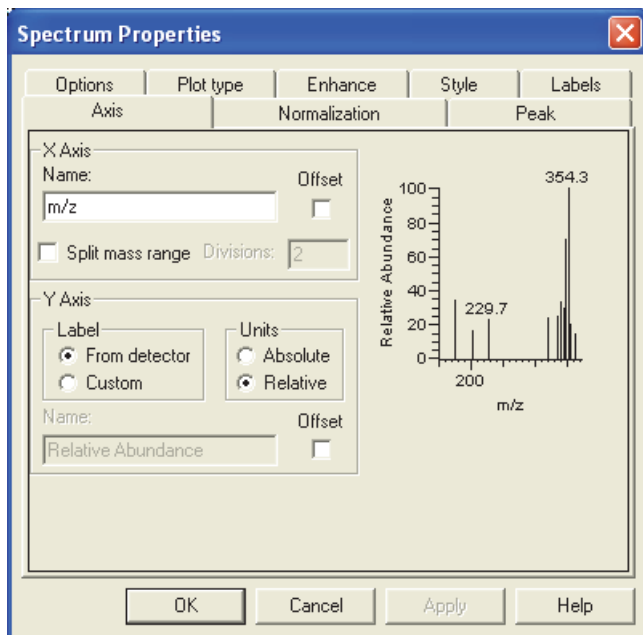
配置坐标轴

使用 [Axis 页面](#) 设置质谱图坐标轴标签和显示选项。

❖ 若要配置坐标轴选项

1. 在 X Axis 区域的 Name 框内输入 x 轴名称（参阅图 73）。

图 73. Axis 页面



2. 若要从质谱图上移动坐标轴标签，选中 **Offset** 复选框。
3. 若要将质谱图分成范围相等的两个或更多的单个谱图，选中 **Split mass range**（分割质量数范围）复选框。在 Divisions 框内输入每个质谱图显示的分割范围谱图数。
4. 在 Y Axis 区域的 Label 下方选择以下其中一个选项：
 - **From detector**: 为 y 轴使用特定检测器标签（保存在 .raw 文件中）。
 - **Custom**: 使用自定义标签。
5. 若要指定 y 轴单位的设置，选择 **Absolute** 或 **Relative** 选项。
6. 在 Name 框中输入 y 轴名称。
7. 若要从质谱图上移动坐标轴标签，选中 **Offset** 复选框。

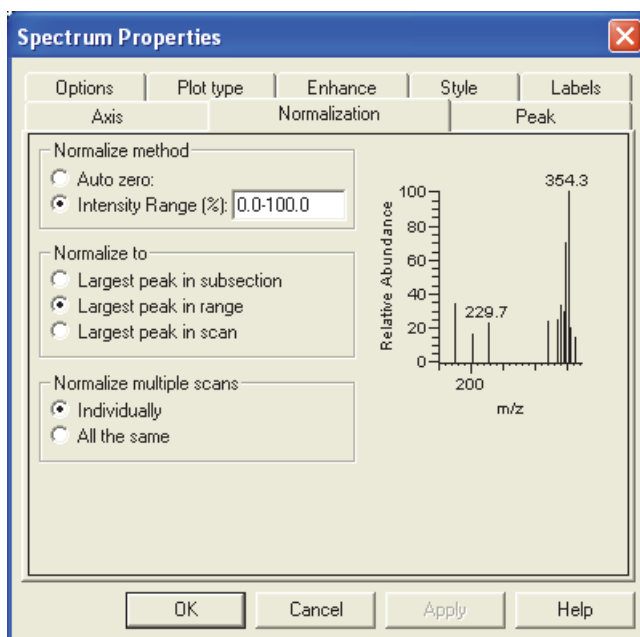
选择归一化选项

使用 [Normalization](#) 页面选择质谱图的归一化选项。

❖ 若要选择归一化选项

- 若要定义归一化风格，在 Normalize method 区域选择以下选项之一（参阅图 74）。
 - Auto zero:** 自动优化 y 轴。
 - Intensity Range%:** 设置 y 轴范围。利用该框输入强度最小值和最大值。有效范围为 -200.00 至 +200.00%。

图 74. Normalization 页面



- 若要定义质谱图归一化峰，在 Normalize to 区域选择以下一种选项：
 - Largest peak in subsection**（分段内的最高峰）：将每一分割质量数范围归一化为分段内的最高峰。
 - Largest peak in mass range**（质量数范围内的最高峰）：将质谱图归一化为显示质量数范围内的最高峰。
 - Largest peak in scan**（扫描范围内的最高峰）：将质谱图归一化为整个质谱图内的最高峰。
- 若要定义多次扫描归一化的方式，在 Normalize multiple scans（归一化多次扫描）区域选择以下一种选项：
 - Individually**（分别）：分别归一化每个质谱图。
 - All the same**（一致）：同等归一化所有质谱图。

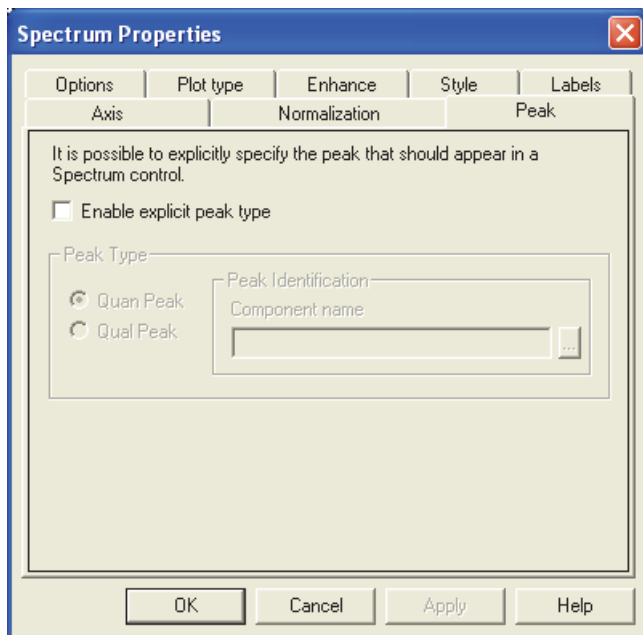
指定峰

利用 [Peak 页面](#) 明确指定 Spectrum 报告项目中显示的峰。

❖ 若要指定峰

1. 若要指定质谱图中出现的某个特定类型的峰，选择 **Enable explicit peak type**（启用明确峰类型）复选框（参阅 [图 75](#)）。

图 75. Peak 页面



2. 若要指定在质谱图中出现的峰类型，选择 **Quan Peak**（定量峰）选项指定一个定量峰或选择 **Qual Peak**（定性峰）选项指定一个定性峰。
3. 对于一个 Quan 峰，在 Peak Identification（峰识别）区域中输入组分名。对于一个 Qual 峰，输入保留时间（峰起始时间和结束时间之间的任一时间）或单击浏览按钮。Select a Peak 对话框显示。选择一个峰，然后单击 **OK** 关闭对话框。

配置列

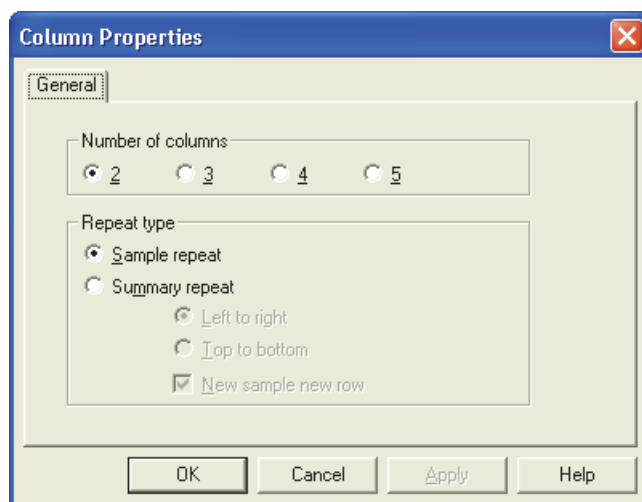
若要配置列报告项目，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。[Column Properties 对话框](#) 打开。

列项目配置完成后，将项目拖曳至列中。

❖ 若要配置列项目

1. 在 Number of columns 区域中选择需要使用的列数（参阅图 76）。

图 76. Column Properties（列属性）对话框



2. 若列项目位于非重复部分内，则配置 Repeat type（重复类型）。Repeat type 选项在 Quan 或 Qual 重复部分内不可用。在 Repeat type 区域中，通过单击合适选项选择 **Sample repeat**（样品重复）或 **Summary repeat**（总结重复）。关于使用这两种重复的示例，可参阅[设置样品重复选项](#)和[设置总结重复选项](#)。
3. 若用户选择 Summary repeat，通过单击合适选项选择希望 **Left to right**（从左至右）或 **Top to bottom**（从上至下）进行重复。
4. 选中 **New sample new row**（新样品新行）复选框，使每一样品显示在新行上。

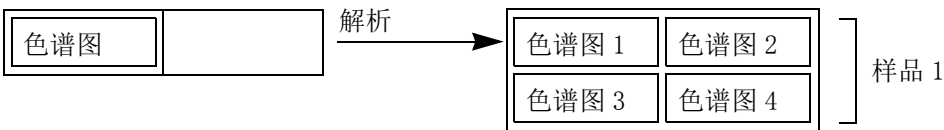
设置样品重复选项

利用 Sample repeat 选项显示单个样品原始文件相关的信息和在处理它过程中生成的结果。利用重复类型作为一个布局工具，指定项目在已解析报告页面上显示的位置。

注释 Sample repeat 和 Summary repeat 选项仅对非重复性报告部分可用。这些选项对其他报告部分类型不可用。

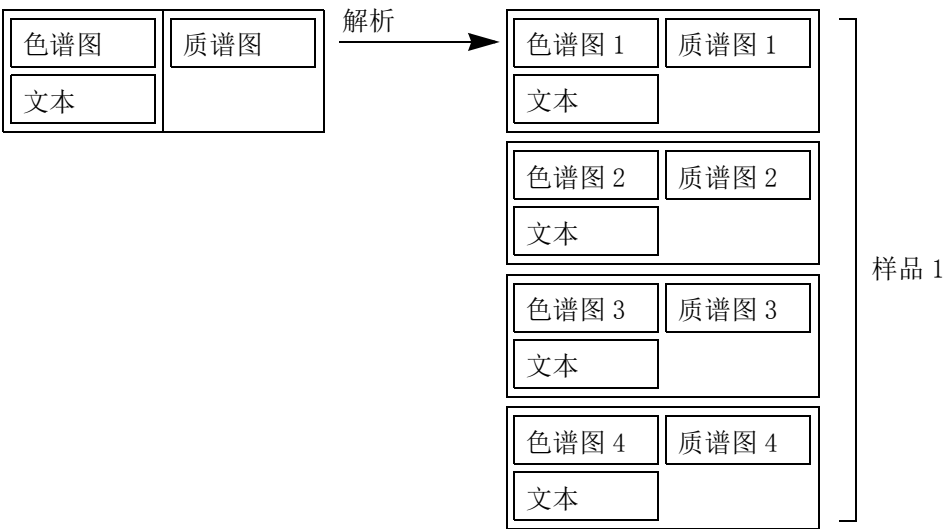
例如，当用户在非重复部分中设置 2- 列项目时，在左列中添加基于定量的色谱图，然后将 1 个含 4 个组分的样品的数据组合或解析模板，报告将如图 77 中所示。

图 77. 在一个含色谱图项目的非重复部分中的 2- 列项目



在另外一个例子中，将 2- 列项目置于一个非重复部分中，并在左列添加色谱图和文本项目，在右列中添加质谱图。利用含 4 个组分的 1 个样品数据组合（解析）模板列中的所有项目对单个样品进行重复，报告显示为图 78。

图 78. 在一个含色谱图和质谱图项目的非重复部分中的 2- 列项目



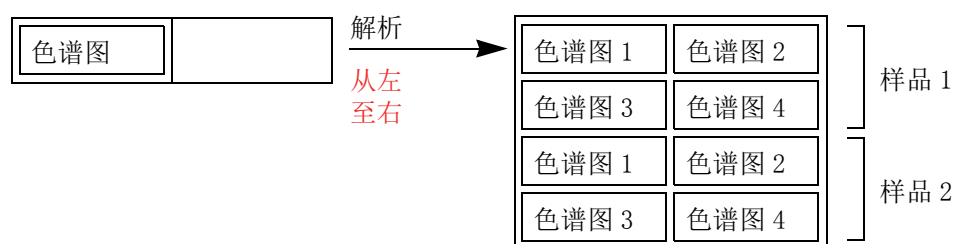
设置总结重复选项

利用 Summary repeat 选项显示与一个 Xcalibur 序列中所有样品相关的信息和在处理它们过程中生成的结果。

注释 Sample repeat 和 Summary repeat 选项仅对非重复性报告部分可用。这些选项对其他报告部分类型不可用。

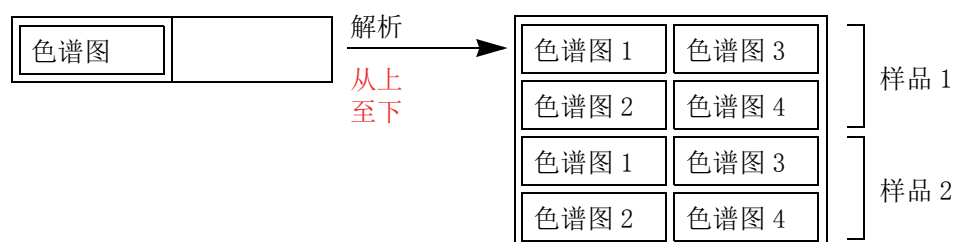
例如，当用户在非重复部分中设置 2- 列项目时，添加色谱图（任意列），然后利用 2 个分别含 4 个组分的样品的数据组合（解析）模板，报告将如图 79 中所示。

图 79. 在一个含色谱图项目的非重复部分中的 2- 列项目，Left to right 选项



若用户选择的是 Top To Bottom，则报告将显示为图 80。

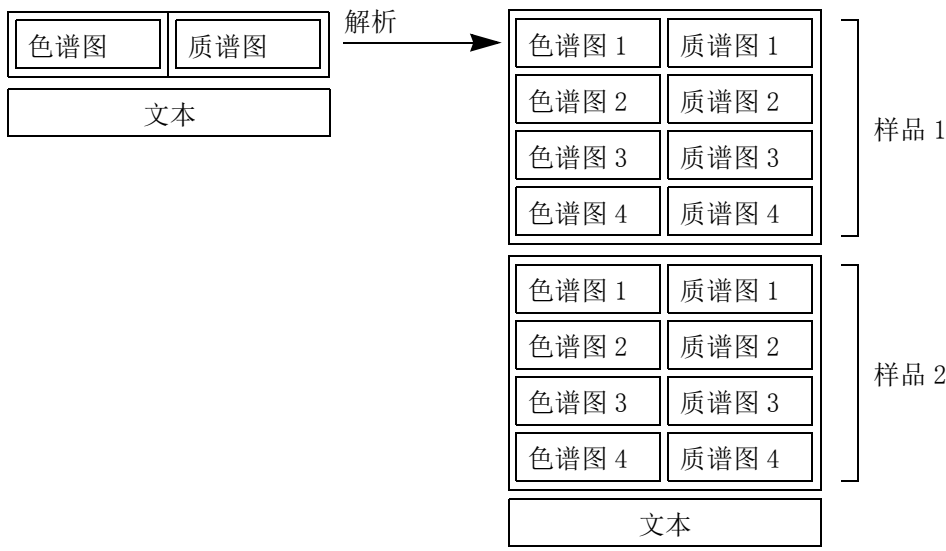
图 80. 在一个含色谱图项目的非重复部分中的 2- 列项目，Top to bottom 选项



若用户在右列中放置一个项目而左列为空，XReport 将会组合数据，就像在左列中放置项目一样，如上所述。

若用户在每列中放置一个项目，则 Xcalibur 数据系统将忽略 Top to bottom 及 Left to right 选项。报告显示为图 81。

图 81. 在一个含色谱图和质谱图项目的非重复部分中的 2- 列项目



XReport 模板文件样本

Xcalibur 数据系统提供创建报告时使用的若干 XReport 模板样本。该附录提供了保存在以下位置的报告模板的详细信息：

Xcalibur\templates

表 2. XReport 模板文件样本（第 1 页，共 2 页）

报告模板文件名	数据源文件	描述 / 使用
CalibrationFile.xrt	.raw, .xcal	利用校正数据生成样品报告。
CompCalReport.xrt	.rst, .raw, .pmd, .sld	生成显示处理方法详细信息、校正曲线和样品表格（定量结果）的总结报告。可以从 Xcalibur 数据系统中的 Batch Processing（批处理）和 Quan Browser（定量浏览器）使用。
CompCalReport_Avalon.xrt		
CompCalReport_Genesis.xrt		
CompCalReport_ICIS.xrt		
CustLibrSearRept.xrt	.rst, .raw	生成显示定性峰和库检索详细信息的定性样品报告。可以从 Xcalibur 数据系统的 Batch Processing 使用。
LibrarySearchReport.xrt		
IonRatioConfirmation.xrt	.rst, .raw, .pmd	生成包含非图形离子比确认结果的定量样品报告。
IonRatioConfirmationGraphical.xrt	.rst, .raw, .pmd	生成包含图形离子比确认结果的定量样品报告。在使用 XReport Chromatogram（XReport 色谱图）向导时，这些报告模板借助确认离子设置的优势。
IonRatioConfirmationGraphical Simple.xrt		
IonRatioConfirmationGraphical Stacked.xrt		
PeakIntegration.xrt	.rst, .raw, .pmd	生成包含由 Genesis 计算所得的峰积分数据的定量样品报告。
ProcessingMethod.xrt	.pmd	生成处理方法样品报告。可以从 Xcalibur 数据系统的 Processing Method Setup（处理方法设置）使用。
ProcessingMethod_Avalon.xrt		
ProcessingMethod_Genesis.xrt		
ProcessingMethod_ICIS.xrt		
QualPeakReport.xrt	.rst, .raw	生成一个简单的定性样品报告。用于 Xcalibur 数据系统的 Batch Processing 中的数据。

表 2. XReport 模板文件样本（第 2 页，共 2 页）

报告模板文件名	数据源文件	描述 / 使用
QuanPeakResults_ESTD.xrt	.rst, .raw, .pmd	生成定量样品报告。可以从 Xcalibur 数据系统中的 Batch Processing 或 Quan Browser 使用。
QuanPeakResults_ISTD.xrt		
QuanResults.xrt		
QuanSimple.xrt		
QuantifySampleReport.xrt	.sld, .pmd, .rst, .raw	生成包含色谱图和一个定量总结表格的定量总结报告。
SequenceReport.xrt	.sld	生成显示已处理序列的总结报告。可以从 Xcalibur 数据系统的 Batch Processing 使用。参阅 <i>Acquisition and Processing User Guide</i> （采集和处理用户手册）第五章的 Processing a Batch of Samples（处理批次样品）。
SpectrumCandidates.xrt	.rst, .raw	生成定量总结报告（仅适用于 GC/MS）。可以从 Xcalibur 数据系统中的 Batch Processing 或 Quan Browser 使用。

报告项目类型

以下表格列出了用户可以在报告模板中使用的报告项目：text（文本）项目、table（表格）项目、graphic（图像）项目和 formatting（格式）项目。本表对每个项目进行了简要描述，并指明哪些部分中可以使用该项目。

目录

- [Text 项目](#)
- [Table 项目](#)
- [Graphic 项目](#)
- [Formatting 项目](#)

Text 项目

下表列出文本项目。

表 3. Text 项目（第 1 页，共 2 页）

Text 项目	数据源文件	描述	所属部分
Annotation（注解）	无	显示静态文本。利用该项目添加标题或注解。	任意
Component Ident/Detect/Cal Settings （组分识别 / 检测 / 校正设置）	.pmd	显示单个组分的峰检测、校正和积分参数。	定量重复性
Component ISTD Settings Summary （组分内标设置总结）	.pmd	在处理方法的定量部分中显示每个组分的内标配置详细信息的总结。	定量重复性
Component Settings Summary （组分设置总结）	.pmd	显示指定组分的峰检测和积分参数的短列表。	定量重复性
Component Sys Suit/Flags Settings （组分系统适用性 / 标记设置）	.pmd	显示校正、定量和检测标记和系统适用性参数，以指定目标峰定性通过 / 未通过的自动色谱检查。	定量重复性
Instrument Method （仪器方法）	.raw	显示一般仪器方法参数。该文本项目不具备可编辑性。	非重复性

表 3. Text 项目（第 2 页，共 2 页）

Text 项目	数据源文件	描述	所属部分
Processing Method – General (处理方法 — 一般)	.pmd	显示一般处理方法参数，包括数据创建、数据修改、基线定义、色谱图类型（LC/GC）。	非重复性
Processing Method – Qual (处理方法 — 定性)	.pmd	显示定性处理方法参数，包含以下： • Identification（识别） • Spectrum Enhancement（质谱图优化） • Detection Options（检测选项） • Advanced Detection Options（高级检测选项） • Library Search Constraints（库检索限定） • Library Search Options（库检索选项）	非重复性
Quan ISTD Peak Summary (定量内标峰总结)	.rst, .pmd	显示与定量组分相关的内标峰的总结参数。例如： • ISTD NameBase Line（内标名和基线） • Actual RTSIGNAL To Noise（实际保留时间和信噪比） • Response Expected RT（响应值和预期保留时间）	定量重复性
Quan Peak Summary (定量峰总结)	.rst, .pmd	显示组分峰总结参数，如： • Actual RT% Diff（实际保留时间百分比偏差） • Calculated AmountArea Ratio（计算量和峰面积比） • Response Area ISTD（响应峰面积和内标） • Base Line Specified Amount（基线和指定量） • Signal To Noise（信噪比）	定量重复性， 页眉或页脚
Report Info（报告信息）	无	显示报告本身的常规信息。	页眉或页脚
Sample Header（样品标题）	.raw, .sld	显示关于样品的常规信息，如： • Sample Name（样品名称） • Operator（操作人员） • Sample Type（样品类型） • Run Time（运行时间） • Acquisition Date（采集日期）	非重复性， 页眉或页脚

Table 项目

下表列出表格项目。

表 4. Table 项目 (第 1 页, 共 2 页)

Table 项目	数据源文件	描述	所属部分
Avalon Qual Events Table (Avalon 定性事件表)	.pmd	显示在处理方法的定性部分中配置的 Avalon 峰检测算法事件的详细信息。	非重复性
Avalon Quan Events Table (Avalon 定量事件表)	.pmd	显示在处理方法的定量部分中为组分配置的 Avalon 峰检测算法事件的详细信息。	非重复性
Calibration File Table (校正文件表)	.xcal, .sld, .raw	显示标样的组分名称、响应因子和百分比偏差。	非重复性
Component Cal Level Table (组分校正水平表)	.pmd	显示为指定组分定义的校正水平、量和允许测试值。	非重复性
Component QC Level Table (组分质控水平表)	.pmd	显示为指定组分定义的质控水平、量和百分比测试值。	非重复性
Component Spectrum Table (组分质谱图表)	.pmd	输入多达 50 个质谱峰的 m/z 和强度数据。当在处理方法中指定 Spectrum Peak Identification Method (质谱峰识别方法) 时, Xcalibur 应用程序利用该数据鉴定组分。该项目仅适用于 GC 色谱图。	非重复性
Dilution Factor Table (稀释因子表)	.rst	显示非内标组分的校正水平和稀释因子的名称。	非重复性
Electronic Signature (电子签名)	无	在表格格式中显示多达 5 个电子签名。该项目在 XReport 中不具备可编辑性。	任意
Ion Ratio Confirmation Results Table (离子比率确认结果表)	.rst	基于处理方法中指定的检索标准, 显示关于每个定性离子的下列数据: • Mass (质量数) • Coelution test pass/fail (共洗脱测试通过 / 未通过) • Ion Ratio Test Target % (离子比测试目标百分比) • Ion Ratio Test Window % (离子比测试窗口百分比)	非重复性
IRC Settings Table (离子比率确认设置表)	.pmd	最多显示 5 个处于容许限值内的辅助定性离子, 以确认目标分析物的检测。离子已在处理方法中指定。	非重复性
IRC Summary Table (离子比率确认总结表)	.rst	显示每个组分的确认离子的所有信息。当 Name (名称) 列为首列时最有用。	非重复性

表 4. Table 项目 (第 2 页, 共 2 页)

Table 项目	数据源文件	描述	所属部分
Lib. Search Graph Table (库检索图像表)	.rst, .raw	显示定性峰的库检索图表结果 (例如目标质谱图、差值和化合物结构)。	非重复性
Lib. Search Results Table (库检索结果表)	.rst, .raw	显示定性峰库检索结果 (如名称、 概率、逆检索相似度、正检索相似 度、CAS 号、峰面积)。	非重复性
Proc. Method Programs Table (处理方法程序表)	.pmd	显示在样品分析和数据处理后 Xcalibur 数据系统运行的程序列 表。数据系统按照列出的次序运行 程序。	非重复性
Proc. Method Sample Reports Table (处理方法样品报告表)	.pmd	显示序列中每个样品的样品报告信 息, 包括模板名和报告文件名。指 定处理方法中的 Sample Type。	非重复性
Proc. Method Summary Reports Table (处理方法总结报告表)	.pmd	显示在标曲更新或非标曲更新序列 样品处理后发布的总结报告。	非重复性
Qual Peak Table (定性峰表)	.rst	显示单个样品定性分析检测的色谱 峰的信息。	非重复性
Qual Summary Table (定性总结表)	.sld, .rst	显示序列中所有样品定性分析检测 的色谱峰的信息。	非重复性
Quan Peak Table (定量峰表)	.rst, .pmd	显示单个样品定量分析检测的组分 峰的信息。	非重复性
Quan Summary Table (定量总结表)	.sld, .rst, .pmd	显示序列中所有样品定量分析检测 的组分峰的信息。	非重复性
Sample Table (Quan Results) (样品表, 定量结果)	.sld	显示样品中每个组分的系统适用性 和标记处理结果, 为序列中的每个 样品重复该信息。	非重复性
Sequence Table (序列表)	.sld	显示序列文件的内容。	非重复性
Spectrum Candidate Results Table (质谱图候选结果表)	.rst	基于每个组分, 显示 GC/MS 数据处 理所得的质谱图候选结果。包含以 下参数: • Forward fitStart RT (正向拟 合和起始保留时间) • Reverse fitEnd RT (逆向拟 合和结束保留时间) • MatchArea (匹配面积) • Found RTHeight (找到保留时 间和峰高)	非重复性
Spectrum List Table (质谱图列表)	.rst, .raw	显示质谱图图像项目的文本。 Spectrum List Table 包含一个标 题, 并列出了质荷比、强度和相对 强度值。	非重复性

Graphic 项目

下表列出图像项目。

表 5. Graphic 项目

Graphic 项目	数据源文件	描述	所属部分
Bitmap (位图)	.bmp, .dib, .gif, .jpg, 或 .ico	显示图像, 如公司标志。	任意
Chromatogram (色谱图)	.raw, .rst	显示色谱图, 为 Xcalibur 应用程序支持的任何采集设备 (MS、Analog、A/D Card、PDA、UV) 显示原始数据或已处理数据。	定性或定量重复性, 以及非重复性部分
Component Cal Curve (组分校正曲线)	.rst, .pmd	显示用于定量某一指定组分的校正曲线。该曲线在处理方法中指定, 显示为响应值 vs. 标样量。	定量重复性 — 按组分峰重复 非重复性 — 使用已指定的组分。
Spectrum (质谱图)	.raw, .rst	显示质谱图, 为 Xcalibur 应用程序支持的任何采集设备 (MS、PDA) 显示原始数据或已处理数据。	定性或定量重复性, 以及非重复性部分

Formatting 项目

下表列出了格式项目。

表 6. Formatting 项目

Graphic 项目	数据源文件	描述	所属部分
Columns (分栏)	无	指定图像和文本项目的布局和重复属性。	任意
Page Break (分页符)	无	在报告中插入手动分页符。	定性或定量重复性, 以及非重复性部分

样品报告

本附录包含一个 Xcalibur 报告样本，由用户采用 PeakIntegration.xrt（位于 Xcalibur\templates 文件夹下）生成一个定量样品报告时生成，这个定量样品报告包含峰积分数据。样品报告采用 Xcalibur\examples\data 文件夹下的 steroids02.rst 数据文件。

目录

- [Peak Integration Report, Page 1](#)（峰积分报告，第一页）
- [Peak Integration Report, Page 2](#)（峰积分报告，第二页）
- [Peak Integration Report, Page 3](#)（峰积分报告，第三页）
- [Peak Integration Report, Page 4](#)（峰积分报告，第四页）

Peak Integration Report, Page 1 (峰积分报告, 第一页)

Peak Integration Report

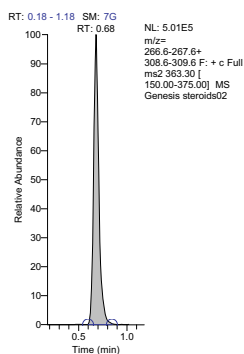
Data File:	steroids02	Original Data Path:	C:\pitcon\trial2	Current Data Path:	C:\Xcalibur\examples\data
Sample Type:	Std Bracket Start	Sample ID:	Sample02	Sample Name:	
Operator:	jackc	Acquisition Date:	02/28/96 11:20:31 AM	Run Time(min):	3.79
Comments:		Vial:	1	Scans:	336
Low Mass(m/z):	100.00	High Mass(m/z):	375.00	Sample Weight:	0.00
ISTD Amount:	0.000	Calibration Level:	3	Dilution Factor:	1.00
Instrument Method:		C:\pitcon\trial2\steroidMSMSis			
Original Processing Method:		C:\pitcon\trial2\steroidmsmsIS			
Current Processing Method:		C:\Xcalibur\examples\methods\steroid			

Peak Integration Report, Page 2 (峰积分报告, 第二页)

Peak Integration Report

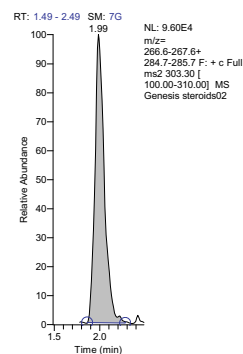
hydrocortisone

Expected
Retention
Time (min): 0.6
Retention
Time Window
(sec): 30.00000
View Width
(min): 1.00000
Retention
Time
Reference: No
Genesis
Minimum Peak
Height (S/N): 3.00
Genesis
Smoothing
Points: 7
Detector Type: MS
Valley
Detection
Enabled: No
Genesis
Constrain Peak
Width Enabled: No



methyltestosterone

Expected
Retention
Time (min): 2.0
Retention
Time Window
(sec): 30.00000
View Width
(min): 1.00000
Retention
Time
Reference: Yes
Genesis
Minimum Peak
Height (S/N): 3.00
Genesis
Smoothing
Points: 7
Detector Type: MS
Valley
Detection
Enabled: No
Genesis
Constrain Peak
Width Enabled: No



Component Name: hydrocortisone

Actual RT(min): 0.67783

Calculated Amount: 4.95592

Response: 1892942.72621

Base Line: BB

Signal To Noise: 707.56

%Diff: -0.88

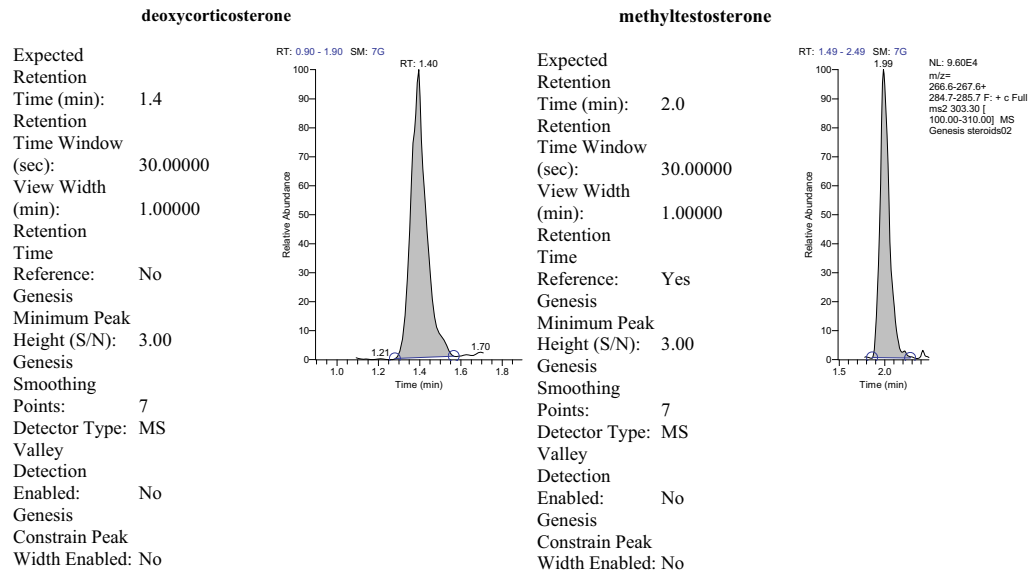
Area Ratio: 2.763

Area(cts-sec): 1892942.72621

Specified Amount: 5.00000

Peak Integration Report, Page 3 (峰积分报告, 第三页)

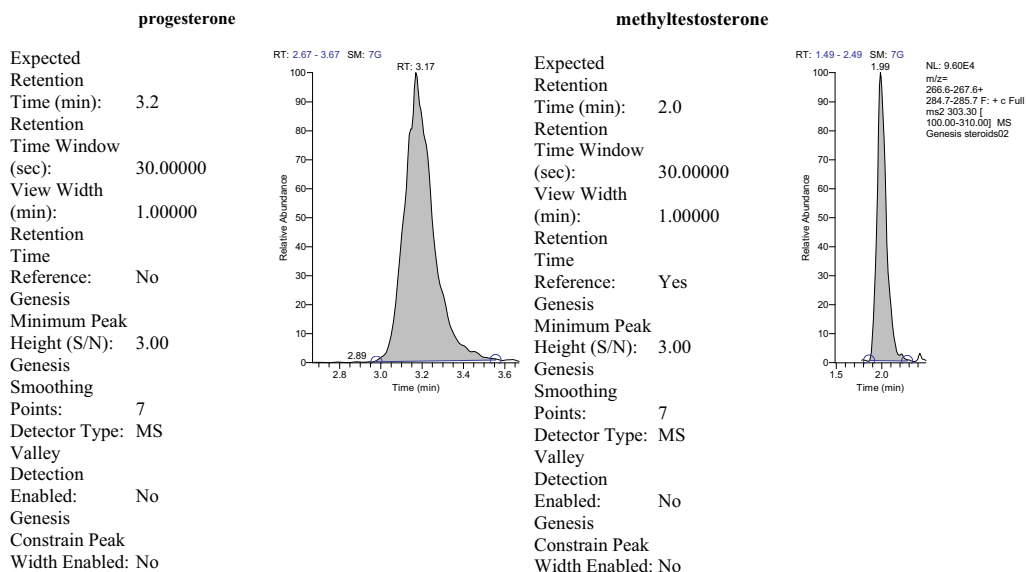
Peak Integration Report



Component Name:	deoxycorticosterone	Actual RT(min):	1.39533	Calculated Amount:	5.10841
Response:	1040530.60245	Base Line:	BB	Signal To Noise:	148.23
%Diff:	2.17	Area Ratio:	1.519	Area(cts-sec):	1040530.60245
Specified Amount:	5.00000				

Peak Integration Report, Page 4 (峰积分报告, 第四页)

Peak Integration Report



Component Name: progesterone

Actual RT(min): 3.16867

Calculated Amount: 4.94898

Response: 2995893.97127

Base Line: BB

Signal To Noise: 344.16

%Diff: -1.02

Area Ratio: 4.373

Area(cts-sec): 2995893.97127

Specified Amount: 5.00000

XReport 参考指南

本附录提供了关于 XReport 的参考指南，包括 Xreport 窗口和对话框。

目录

- Reports 视图
- XReport 对话框
- 报告部分
- 报告项目
- 报告模板

Reports 视图

利用 Processing Setup（处理设置）窗口的 XReport 或 Reports（报告）视图指定 Xcalibur 数据系统如何生成样品和序列报告。数据系统提供若干个标准报告格式。用户能够以几种文件格式导出结果，包括 .xls 和 .html。

有关 Reports view of the Processing Setup（处理设置的报告视图）窗口的详细信息，可转至 *Acquisition and Processing User Guide*（采集和处理用户手册）。

XReport 工具栏按钮

表 7. 工具栏按钮（第 1 页，共 3 页）

按钮	描述
	New（新建） 为所选程序选择新报告模板。
	Open（打开） 找到并打开 .xrt 文件。
	Save（保存） 将当前模板保存为 .xrt 文件。当用户使用锁定模板时，该选项不可用。在这种情况下，选择 File（文件）> Save As（另存为），将模板保存为另一个名称。
	Cut（剪切） 移除当前所选项目并将其放入剪贴板。
	Copy（复制） 将当前所选项目复制至剪贴板。

表 7. 工具栏按钮（第 2 页，共 3 页）

按钮	描述
	Paste（粘贴） 在当前所选部分中插入剪贴板中的内容。
	Align Left （左对齐） 将当前所选项目的左边缘与首个所选项目的左边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
	Align Right （右对齐） 将当前所选项目的右边缘与首个所选项目的右边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
	Align Top （置顶对齐） 将当前所选项目的上边缘与首个所选项目的上边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
	Align Bottom （置底对齐） 将当前所选项目的下边缘与首个所选项目的下边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
	Auto Align （自动对齐） 将当前部分中的所有项目（选中或未选中）对齐至最近的右上方网格线。
	Center Horizontally （水平居中） 居中当前项目，使其到页面左侧与右侧的距离一致。
	Center Vertically （垂直居中） 居中当前项目，使其到页面上方与下方的距离一致。
	Make Same Height （同高） 放大所有所选项目（除首个），使其与首个所选项目高度一致。
	Make Same Width （同宽） 放大所有所选项目（除首个），使其与首个所选项目宽度一致。
	Make Same Height and Width （同高同宽） 放大所有所选项目（除首个），使其与首个所选项目高度和宽度一致。
	Shrink Wrap （收缩） 收缩模板工作区，移除部分底部所有未使用的工作区。
	Expand（扩展） 将模板工作区放大为该部分尺寸的全高。
	增加或降低模板显示的放大倍率。
Zoom（缩放）	
	Font（字体） 更改当前所选项目使用的字体，若无项目选中，更改总体字体设置。

表 7. 工具栏按钮（第 3 页，共 3 页）

按钮	描述
	Resolve Report (解析报告) 将报告模板与数据结合并查看、保存和打印报告。
	Help (帮助) 打开 Xcalibur Help (Xcalibur 帮助)。

XReport 菜单

XReport 窗口包含以下菜单：

- [File 菜单](#)
- [Edit 菜单](#)
- [View 菜单](#)
- [Layout 菜单](#)
- [Report 菜单](#)
- [Help 菜单](#)

File 菜单

表 8. File (文件) 菜单命令

命令	描述
New (新建)	创建新模板。
Open (打开)	打开先前保存的模板。
Save (保存)	保存当前模板。 注释 当用户使用锁定模板时，该选项不可用。在这种情况下，选择 File > Save As ，将模板保存为另一个名称。
Save As (另存为)	以新文件名保存当前模板。
Page Setup (页面设置)	定义页面布局和页边距设置。
<i>Recently Used Files</i> (最近使用的文件)	查看最近打开的模板文件。选中列表中的某一文件名，打开模板。
Close (关闭)	关闭当前模板。
Exit (退出)	关闭 XReport。

Edit 菜单

表 9. Edit（编辑）菜单命令

命令	描述
Cut（剪切）	移除当前所选项目并将其放入剪贴板。
Copy（复制）	将当前所选项目复制至剪贴板。
Paste（粘贴）	在当前所选部分中插入剪贴板中的内容。
Clear（清除）	删除当前所选项目。
Select All（全选）	选中当前所选部分中的所有项目。
Edit Object （编辑项目）	修改当前项目。例如，在表格项目中重设列尺寸。
Properties（属性）	配置当前项目。例如，对于位图项目可选择源文件。
Delete Section （删除部分）	删除当前所选部分。当项目未选中时，该选项不可用。

View 菜单

表 10. View（查看）菜单命令

命令	描述
Report Template Grid （报告模板网格）	查看或隐藏当前部分中的网格。选择 Layout（布局）> Preferences（首选） ，调整网格设置。
Report Template Outline （报告模板轮廓）	查看或隐藏 Report Template Outline 窗格。该窗格显示报告模板中所有部分和项目的概况，并在 XReport 窗口右侧打开。
Toolbars（工具栏）	查看或隐藏工具栏。
Status Bar （状态栏）	查看或隐藏 XReport 窗口底部的状态栏。

Layout 菜单

表 11. Layout（布局）菜单命令（第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Align（对齐）> Left（左侧）	将当前所选项目的左边缘与首个所选项目的左边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
Align（对齐）> Right（右侧）	将当前所选项目的右边缘与首个所选项目的右边缘对齐。 若要选中多个项目，单击并拖曳项目的选中框，或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。

表 11. Layout (布局) 菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
Align (对齐) > Top (置顶)	将当前所选项目的上边缘与首个所选项目的上边缘对齐。 若要选中多个项目, 单击并拖曳项目的选中框, 或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
Align (对齐) > Bottom (置底)	将当前所选项目的下边缘与首个所选项目的下边缘对齐。 若要选中多个项目, 单击并拖曳项目的选中框, 或按住 SHIFT 键然后单击另一个项目。
Align (对齐) > Auto (自动)	将当前部分中的所有项目 (选中或未选中) 对齐至最近的右上方网格线。
Make Same Size (同尺寸) > Width (宽度)	放大所有所选项目 (除首个), 使其与首个所选项目宽度一致。
Make Same Size (同尺寸) > Height (高度)	放大所有所选项目 (除首个), 使其与首个所选项目高度一致。
Make Same Size (同尺寸) > Both (同高同宽)	放大所有所选项目 (除首个), 使其与首个所选项目高度和宽度一致。
Center In Page (页内居中) > Vertical (垂直)	居中当前项目, 使其到页面左侧与右侧的距离一致。
Center In Page (页内居中) > Horizontal (水平)	居中当前项目, 使其到页面上方与下方的距离一致。
Shrink Wrap (收缩)	收缩当前部分, 使其正好匹配所包含的所有项目。
Expand (扩展)	放大当前部分, 以添加其它项目。
Preferences (首选)	更改网格设置, 实现操作, 并查看或隐藏模板配置对话框。

Report 菜单

表 12. Report (报告) 菜单命令 (第 1 页, 共 2 页)

命令	描述
Data Sources (数据源)	指定报告的数据文件。
Simulate Report (模拟报告)	在添加实际数据前查看报告。

表 12. Report（报告）菜单命令（第 2 页，共 2 页）

命令	描述
Resolve Report (解析报告)	以 Data Sources 对话框中所选文件的数据显示报告。
Print Report (打印报告)	打印当前报告。

Help 菜单

表 13. Help（帮助）菜单命令

命令	描述
Xcalibur Help (Xcalibur 帮助)	查看 Xcalibur 帮助。
Glossary（术语表）	查看术语表。
How To Use Help (如何使用帮助)	查看 How To Use Help。
About XReport (关于 XReport)	打开 About XReport 对话框。 About XReport 对话框显示了 XReport 的版本号及版权信息。

XReport 对话框

- [Configure Repeating Section 对话框](#)
- [Chromatogram Properties 对话框和向导](#)
- [Spectrum Properties 对话框](#)
- [Table Properties 向导](#)
- [Edit Formula For 对话框](#)
- [Configure Function 对话框](#)
- [Spectrum List Table Properties 对话框](#)
- [Average Scan Filter Selection 对话框](#)
- [Library Search Graphics Table Properties 对话框](#)
- [Library Search Results Table Properties 对话框](#)
- [Sample Table Properties 对话框](#)
- [Text Object Properties 对话框](#)
- [Bitmap Properties 对话框](#)
- [Column Properties 对话框](#)
- [Configure Component Calibration Curve 对话框](#)
- [Data Sources 对话框](#)
- [Electronic Signature Properties 对话框](#)
- [Font 对话框](#)
- [Preferences 对话框](#)
- [Preview 窗口](#)
- [Save As 对话框](#)
- [Template Configuration 对话框](#)

Configure Repeating Section 对话框

利用 Configure Repeating Section（配置重复部分）对话框自定义重复部分的以下设置：

- 从 Quan（定量）重复部分中包含或排除内标或目标组分
- 指定峰和组分重复的次序
- 定义报告峰的数量限值
- 指定最终报告的分页符

Configure Repeating Section 对话框包含以下页面：

- [Exclude 页面](#)
- [Ordering 页面](#)
- [Page Breaks 页面](#)

Exclude 页面

利用 Exclude（排除）页面标示需从 Quan 重复部分中排除的组分，及是否剔除未找到的组分。

表 14. Exclude 页面参数

参数	描述
Repeating Section Excludes（重复部分排除）	
Exclude Component Type（排除组分类型）	从 Quan 配置中排除特定组分： • None（无） • Internal Standards（内标化合物） • Target Compound（目标化合物）
Show Only Found Components（仅显示找到组分）	剔除未找到的组分。

Ordering 页面

在 Ordering（排序）页面上设置参数以指定重复部分中峰或组分的次序。

表 15. Ordering 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Repeating Section Ordering（重复部分排序）	
Order by（排序方式）	选择一个值，以确定部分中峰或组分的次序： • RT（保留时间） • Component Name（组分名称） • Peak Height Intensity（峰高强度） • Peak Area Intensity（峰面积强度） • Peak Response Intensity（峰响应强度） • Component Concentration（组分浓度）
Ordering Direction（排序方向）	
Ascending or Descending（升序或降序）	以 Order By 列表中的内容从低到高（升序）或从高到低（降序）排列部分中峰或组分的次序。

表 15. Ordering 页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Repeating Records Maximum（重复记录最大值）	
Limit number of reported peaks or components to（将报告峰或组分数限制为）	限制重复部分中包含的峰或组分数总数。

Page Breaks 页面

在 Page Breaks（分页符）页面上设置参数以标示是否在报告中应用分页符。

表 16. Page Breaks 页面参数

参数	描述
Each peak contained on its own page(s)（每个峰包含在各自页面上）	在重复部分的每个峰之前或之后插入分页符。
No page breaks between the individual peaks（单个峰之间没有分页符）	在重复部分的每个峰之间移除分页符。
Page break before the repeating section（分页符在重复部分之前）	在重复部分之前插入分页符。
Page break after the repeating section（分页符在重复部分之后）	在重复部分之后插入分页符。

Chromatogram Properties 对话框和向导

Chromatogram Properties（色谱图属性）对话框显示当前色谱图设置的预览。点击 **Configure（配置）** 以更改这些设置。Chromatogram Properties 向导打开。利用该向导为报告模板中包含的 Chromatogram（色谱图）报告项目配置这些设置：

- 色谱图和峰类型
- 演示文件的使用
- 谱图细节
- 平滑参数
- MS 定量图的使用
- 色谱图的显示、风格、标签、坐标轴和归一化方法

该向导根据包含色谱图报告项目的部分类型、色谱图类型和峰类型属性选择的不同，显示不同的页面及包含不同的选项。该向导包含下列页面：

- [Advanced Qual Peak Annotation Options](#)
- [Advanced Quan Peak Annotation Options](#)
- [Configure the Look of the Peak Window](#)
- [Configure Normalization For The Chromatogram](#)

- [Select A Peak 对话框](#)
- [Select Chromatogram Style](#)
- [Select Chromatogram Type](#)
- [Select Component](#)
- [Select Demo File](#)
- [Select Enhance Details](#)
- [Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured](#)
- [Select Mass Spectrum Quan Traces to Display](#)
- [Select Plot Details](#)
- [Select the Peak Labeling](#)
- [Select the Qual Peak](#)
- [Select the Quan Peak](#)
- [Use Container Supplied Qual Peak](#)
- [Use Container Supplied Quan Peak](#)

Advanced Qual Peak Annotation Options

在 Advanced Qual Peak Annotation Options（高级定性峰注解选项）页面上设置高级定性峰注解参数。当用户设置高级标签选项时，仅 Qual（定性）峰被标记。

注释 若为 Quan 或非重复部分，则选择一个基于定性结果的色谱图。

表 17. Advanced Qual Peak Annotation Options 页面参数

参数	描述
Use Advanced Qual Peak Annotation (使用高级定性峰注解)	打开高级 Qual 峰选项。
Custom Peak Labels（自定义峰标签）	
Custom Text Label (自定义文本标签)	以自定义标签标记 Qual 峰。
Retention Time（保留时间）	
Retention Time（保留时间）	以保留时间标记 Qual 峰。
RT Labeling（保留时间标签）	
Units（单位）	定义保留时间的单位。
Decimals（小数）	指定显示在保留时间标签中的小数点位数。

Advanced Quan Peak Annotation Options

在 Advanced Quan Peak Annotation Options（高级定量峰注解选项）页面上设置高级定量峰注解参数。当用户设置高级标签选项时，仅 Quan 峰被标记。

注释 若为 Qual 或非重复部分，则选择一个基于定量结果的色谱图。

表 18. Advanced Quan Peak Annotation Options 页面参数

参数	描述
Use Advanced Quan Peak Annotation (使用高级定量峰注解)	打开高级定量峰选项。
Custom Peak Labels（自定义峰标签）	
Component Name (组分名称)	以组分名标记 Quan 峰。
Component Key (组分关键字)	以组分关键字标记 Quan 峰。
Custom Text Label (自定义文本标签)	以自定义文本标签标记 Quan 峰。
RT Labeling（保留时间标签）	
Retention Time (保留时间)	以保留时间标记 Quan 峰。
Units（单位）	
Units（单位）	指定保留时间的单位。
Decimals（小数）	定义显示在保留时间标签中的小数点位数。
Overlaid QI Identifier（重叠 QI 标识符）	
Show QI Peak Label (显示 QI 峰标签)	标记重叠定性离子峰，以识别定性离子。该选项仅当 - 在 Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面上选择 All Quan Traces（所有定量谱图）选项时可用。 Select Chromatogram Style 页面上的 Overlay (3D)（三维叠加）选项。

Configure the Look of the Peak Window

当在色谱图中设置显示结果文件中某个峰时，在 Configure How The Peak Window Will Look（配置峰窗口的外观）页面上设置参数以控制基线（Quan 峰和 Qual 峰）的显示和峰窗口宽度（Qual 峰和某些情况下的 Quan 峰）。

表 19. Configure How the Peak Window Will Look 页面参数

参数	描述
Show Baselines (显示基线)	查看色谱峰的基线（Quan 或 Qual 峰）。若未选中该选项，则 Xcalibur 数据系统隐藏基线、峰跟踪和完整的峰注解。
Set Custom Window Width (设置自定义窗口宽度)	手动覆盖峰窗口宽度默认值（默认峰宽 +1 min）。该选项总对 Qual 峰可用，某些情况下对 Quan 峰也可用。
Custom Width (min) (自定义宽度, min)	定义自定义窗口宽度。默认值为 0.75 min。

Configure Normalization For The Chromatogram

在 Configure Normalization For The Chromatogram（为色谱图配置归一化）页面上设置参数以选择用于色谱图的归一化（y 轴刻度）方法。

表 20. Configure Normalization for the Chromatogram 页面参数

参数	描述
Normalize Method（归一化方法）	
Auto Zero（自动调零）	自动为每个色谱图优化 y 轴。
Intensity Range（强度范围）	手动设置范围。输入 y 轴所需的最小和最大强度值。该数值处于 -200.0% 和 +200.0% 之间。
Normalize Each Plot To（归一化每个谱图为）	
Largest Peak In Subsection (分段内的最高峰)	将每一分割时间范围归一化为分段内的最高峰。
Largest Peak In Selected Time Range（选定时间范围内的最高峰）	将色谱图归一化为显示时间范围内的最高峰。
Largest Peak In All Times (所有时间内的最高峰)	将色谱图归一化为整个色谱图内的最高峰。

Select A Peak 对话框

利用 Select A Peak（选择一个峰）对话框在报告预览中打开的演示文件中选择一个峰。

表 21. Select A Peak 对话框参数

参数	描述
Result File (结果文件)	选择成为演示文件的结果文件的名称。
Peak Type (峰类型)	定义结果文件中的峰类型 (Quan 或 Qual)。
Peak List (峰列表)	查看结果文件中的峰列表。

Select Chromatogram Style

利用 Select Chromatogram Style（选择色谱图风格）页面确定色谱图的外观。

表 22. Select Chromatogram Style 页面参数

参数	描述
Plotting (绘图)	
Point-to-Point (点对点) (见图 60)	显示点对点峰轮廓图。
Stick (棒状)	显示垂线色谱图。
Arrangement (排列)	
Stack (2D) (二维堆叠)	垂直堆叠谱图 (x 轴相同), 不重叠 (每个谱图 y 轴不同)。
Overlay (3D) (三维叠加)	垂直移动谱图 (x 轴相同), 水平倾斜角可选 (y 轴时间偏移)。当选中时, 3D (三维) 显示选项打开。若在 Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面上选中 Multiple Quan Traces (多定量谱图) 时, 采用 3D 排列方式。
3D (三维)	
Elevation (仰角)	为 3D 谱图风格设置仰角 (叠加量), 仰角范围为 0-60 度。
Skew (倾斜角)	为 3D 谱图风格设置倾斜角 (时间偏移量), 倾斜角范围为 0-45 度。
Draw Backdrop (绘制背景)	为 3D 谱图绘制透视背景。

Select Chromatogram Type

在 Select Chromatogram Type（选择色谱图类型）页面上设置报告模板中配置的色谱图报告项目的色谱图类型。

表 23. Select Chromatogram Type 页面参数

参数	描述
Chromatogram Type（色谱图类型）	
Raw File Based Chromatogram （基于原始文件的色谱图）	表示该色谱图基于一个原始文件。
Quan Results Based Chromatogram （基于定量结果的色谱图）	表示该色谱图基于一个 Quan 结果。
Qual Results Based Chromatogram （基于定性结果的色谱图）	表示该色谱图基于一个 Qual 结果。
Show All Qual Peaks In Result File （显示结果文件中的所有定性峰）	在完成报告中显示所有 Qual 峰。

Select Component

在 Select Component（选择组分）页面上设置参数以选择配置色谱图时显示的组分。

表 24. Select Component 页面参数

参数	描述
Processing（处理）	查看当前选中处理方法（.pmd）文件的名称。
Component List （组分列表）	查看在处理方法文件中找到的组分列表。

Select Demo File

在 Select Demo File（选择演示文件）页面上设置参数以将演示文件（.raw 或 .rst 文件）和色谱图报告项目相关。利用演示文件查看色谱图报告项目在应用到实际数据时当前设置的显示情况。

Select Demo File 页面的外观取决于在 Chromatogram Type 页面所选择的色谱图类型和峰类型设置。

表 25. Select Demo File 页面参数

参数	描述
Use Demo File（使用演示文件）	
Use Demo File （使用演示文件）	将演示文件与色谱图报告项目相关。
Demo File （演示文件）	指定演示文件的路径。
Demo Peak（演示峰）	
Quan Component （定量组分）	指定演示文件中使用的 Quan 峰。单击 Browse（浏览）按钮。 Select A Peak 对话框 打开。 仅当配置基于 Quan 结果的色谱图时，该框显示。
Qual Peak RT （定性峰保留时间）	指定演示文件中使用的 Qual 峰。单击 Browse 按钮。 Select A Peak 对话框 打开。 仅当配置基于 Qual 结果的色谱图且不显示所有 Qual 峰时，该框显示。在 Select Chromatogram Type 页面上选择这些选项。

Select Enhance Details

在 Select Enhance Details（选择优化细节）页面上设置参数以通过应用平滑来优化色谱图。

表 26. Select Enhance Details 页面参数

参数	描述
Enable Smoothing （启用平滑）	对色谱图应用平滑。
Smoothing Details（平滑细节）	
Type（类型）	定义应用到色谱图的平滑算法的类型，Boxcar 或 Gaussian。
Points（点数）	指定平滑算法使用的平滑点数。

Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured

在 Select How The Chromatogram Axes Will Be Configured（选择色谱图坐标轴的配置方法）页面上设置色谱图坐标轴标签和显示参数。

表 27. Select How the Chromatogram Axes Will Be Configured 页面参数

参数	描述
X axis (X 轴)	
Name (名称)	查看或更改 x 轴的名称。
Offset (偏移)	在色谱图上移动 x 轴标签。
Split Time Range (分割时间范围)	将色谱图分割为时间范围相等的两个或更多的单独谱图。
Divisions (分割数)	为每个色谱图定义要显示的分割时间范围谱图数。
Y axis (Y 轴)	
Label (标签)	
From Detector (从检测器)	为 y 轴使用特定检测器标签 (保存在 .raw 文件中)。
Custom (自定义)	为 y 轴使用自定义标签。
Units (单位)	
Absolute (绝对)	为 y 轴使用绝对单位。
Relative (相对)	为 y 轴使用相对单位。
Name (名称)	
	定义 y 轴自定义名称。仅当单击 Label 区域的 Custom 选项时, 该框可用。
Offset (偏移)	在色谱图上移动 y 轴标签。

Select Mass Spectrum Quan Traces to Display

在 Select Mass Spectrum Quan Traces To Display (选择需显示的质谱定量图) 页面设置参数以配置质谱数据的 Quan Traces (定量谱图) 属性。该页面上的选项仅适用于质谱数据, 对于其他检测器类型忽略这些选项。当色谱图报告项目显示一个 Quan 组分时, 潜在情况下有六个与组分相关的谱图: Quan Mass (QM) trace (定量图, QM) — 实际组分峰 — 以及多达五个定性离子。

任意选择可能的六种谱图之一, 将其显示在色谱图中或显示组分所有可用的谱图。

表 28. Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面参数

参数	描述
Quan Traces (定量谱图)	
Quan Traces (定量谱图)	指定显示的定量谱图。
Common Normalization For All Traces (所有谱图归一化处理相同)	以相同方法归一化所有谱图。 仅当在 Quan Traces 列表中选择 All Quan Traces 时, 该复选框可用。

Select Plot Details

在 Select Plot Details（选择谱图细节）页面设置参数，以在配置基于原始文件的色谱图时配置谱图的绘制方式。

❖ 若要配置谱图

1. 若进入 Qual 或 Quan 重复部分，则 Use Container Supplied Qual or Quan Peak（使用储存器提供的定量峰或定性峰）页面打开。选中 Explicitly Specify The Chromatogram's Behavior（明确指定色谱图类型）复选框并单击 **Next**（下一步）。
2. 在 Select Chromatogram Type 页面上，选择基于原始文件的色谱图并跟随向导页面逐步设置，直到 Select Plot Details 页面出现。

表 29. Select Plot Details 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Plot Type（谱图类型）	
Detector（检测器）	查看用于生成原始文件的检测器类型。
Delay (min) (延迟, min)	指定色谱图起始的延迟时间。
Filter（过滤器）	查看应用到 .raw 文件中扫描组的处理。该列表显示存储在所选演示 .raw 文件中的扫描过滤器选项。若未选中演示文件，则输入有效过滤器字符串。 仅当选中质谱检测器时该选项可用。
Trace（谱图）	首个列表标示一个基本色谱图类型，如 TIC（总离子流图）。 第二个列表标示一个逻辑运算符：+ 或 -。 第三个列表标示从第一种谱图中添加或扣除第二种谱图。例如，Mass Range（质量数范围）。 色谱图列表取决于用于生成数据的检测器，如： • Detector Type（检测器类型） • Valid Traces（有效谱图） • MS（质谱） • Mass Range、TIC、Neutral Fragment（中性碎片）和 Base Peak（基峰） • Analog（模拟） • Analog 1-4（模拟 1-4） • A/D Card（A/D 卡） • A/D Card Ch 1-4（A/D 卡通道 1-4） • PDA（光电二极管阵列） • Wavelength Range（波长范围）、Total Scan（全扫描）、Spectrum Maximum（质谱图最大值） • UV（紫外） • Channel A - D（通道 A-D）

表 29. Select Plot Details 页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Mass (m/z) (质量数, m/z)	按照如下方法为质谱检测器类型的 Mass Range 或 Base Peak 谱图定义质量数或质量数范围的显示： 若用户选择 Base Peak $\pm$ Mass Range（基峰 $\pm$ 质量数范围）或 Mass Range $\pm$ Mass Range（质量数范围 $\pm$ 质量数范围）谱图组合，则识别页面显示每个色谱图类型的 Mass (m/z) 字段。 若用户采用其他检测器类型，使用该字段指定色谱图的波长或波长范围。若用户采用如 <i>Wavelength Range + Wavelength Range</i>（波长范围 + 波长范围）的谱图组合，则另一个 Wavelength (nm)（波长, nm）框打开。 有效范围取决于配置的检测器。格式为 <i>low mass/wavelength - high mass/wavelength</i>（低质量数 / 波长 — 高质量数 / 波长）。以短线间隔（无空格）。例如，对于 123 到 456 的质荷比范围，请输入 123-456。
Time Range (min) (时间范围, min)	指定以分钟为单位的谱图的时间上限值和下限值，小数位至一位。以短横间隔，无空格。 默认设置为 “*”，代表显示整个谱图的时间范围。
Fixed Scale (固定刻度)	将 y 轴最大值设定为一个特定值。清除该复选框以激活 Configure Normalization For The Chromatogram 页面的 Normalize To（归一化为）区域。
Autofilter (自动过滤器)	将色谱图视图重设为 - 显示未使用任何扫描过滤器的色谱图 - 应用每个扫描过滤器的色谱图

Select the Peak Labeling

在 Select the Peak Labeling（选择峰标签）页面设置参数以选择峰标签的类型和风格。

表 30. Select the Peak Labeling 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Label With（标签）	
Retention Time (保留时间)	以分钟为单位的时间标记峰，前缀为 RT。
Scan Number (扫描数)	以峰顶点的质量扫描数标记峰，前缀为 S#。
Base Peak（基峰）	标记色谱峰质谱图中的基峰，前缀为 BP。
Signal To Noise (信噪比)	以峰顶点的信噪比标记峰，前缀为 SN。
Flags（标记）	以提供峰数据补充信息的标记来标记峰。例如，如果一个峰为饱和峰，则数据系统在该峰上方显示 S。
Area（峰面积）	以峰的积分面积标记峰，若自动检测则前缀为 AA，若手动检测则为 MA。

表 30. Select the Peak Labeling 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Height (峰高)	以峰顶点高度标记峰, 若自动检测则前缀为 AH , 若手动检测则为 MH 。
Label Styles (标签风格)	
Offset (偏移)	将标签从其正常位置移动以避免与另一个标签冲突。
Size (大小)	指定偏移量, 以字符数计。
Rotated (旋转)	使用垂直质量数标签, 而不是水平标签。标记总是无法旋转。
Boxed (加框)	在每个峰质量数标签四周加框。标记不被加框。
Label Threshold (标签阈值)	将标记峰限定为那些超过基峰指定百分比的峰。
Advanced (高级)	设置高级标签选项。当单击该选项时, 仅标记 Quan 或 Qual 峰。

Select the Qual Peak

在 Select the Qual Peak (选择定性峰) 页面上设置参数, 为基于 Qual 结果的色谱图报告项目明确指定 Qual 峰。

表 31. Select the Qual Peak 页面参数

参数	描述
Qual Peak To Display (要显示的定性峰)	
Retention Time (min) (保留时间, min)	Qual 峰的保留时间。保留时间可以为峰起始和结束范围内的任意时间。 用户必须选择一个有效保留时间, 以正确将模板和数据结合。若用于解析报告的文件不包含指定保留时间, 则 Xcalibur 数据系统将从报告上移除色谱图。

Select the Quan Peak

在 Select the Quan Peak (选择定量峰) 页面上设置参数, 为基于 Quan 结果的色谱图报告项目明确指定 Quan 峰。

表 32. Select the Quan Peak 页面参数

参数	描述
Quan Peak (定量峰)	
Quan Peak (定量峰)	设置 Quan 峰的名称。若要选择处理方法 (.pmd) 文件和选择某个组分, 单击 Browse 按钮。Select Component (选择组分) 对话框显示。
Use Quan Peak's Associated Internal Standard (使用与定量峰相关的内标物)	使用与 Quan 峰相关的内标物, 而不是 Quan 峰。 为 XReport 选择一个有效峰, 以正确解析报告。若用于解析报告的文件不包含指定峰, 则 Xcalibur 数据系统从已解析报告上移除色谱图。

Use Container Supplied Qual Peak

利用 Use Container Supplied Qual Peak（使用储存器提供的定性峰）页面忽略默认定性峰并明确配置色谱图类型。

参数	描述
Explicit Chromatogram Type（明确指定色谱图类型）	
Explicitly Specify The Chromatogram's Behaviour（明确指定色谱图类型）	忽略储存器提供的默认定量峰并明确配置色谱图类型。

Use Container Supplied Quan Peak

在 Use Container Supplied Quan Peak（使用储存器提供的定量峰）页面设置参数，以显示与默认 Quan 峰相关的内标物的详细信息，或忽略默认 Quan 峰并明确配置色谱图类型。

表 33. Use Container Supplied Quan Peak 页面参数

参数	描述
Implicit Quan Peak Options（默认定量峰选项）	
Use Quan Peak's Associated Internal Standard（使用与定量峰相关的内标物）	查看与默认 Quan 峰相关的内标物的详细信息。
Explicit Chromatogram Type（明确指定色谱图类型）	
Explicitly Specify The Chromatogram's Behaviour（明确指定色谱图类型）	忽略储存器提供的默认 Quan 峰并明确配置色谱图类型。

Spectrum Properties 对话框

利用 Spectrum Properties（质谱图属性）对话框配置质谱图报告项目的设置。

Spectrum Properties 对话框页面：

- [Axis 页面](#)
- [Enhance 页面](#)
- [Labels 页面](#)
- [Normalization 页面](#)
- [Options 页面](#)
- [Peak 页面](#)
- [Plot Type 页面](#)
- [Style 页面](#)

Axis 页面

在 Axis（坐标轴）页面上设置质谱图坐标轴标签及显示选项。

表 34. Axis 页面参数

参数	描述
X axis (X 轴)	
Name (名称)	查看或更改 x 轴的名称。
Offset (偏移)	在色谱图上移动轴标签。
Split Mass Range (分割质量数范围)	将质谱图分割为质量数范围相等的两个或更多的单独谱图。
Divisions (分割数)	查看每个质谱图的分割范围谱图数。
Y axis (Y 轴)	
Label (标签)	
From Detector (从检测器)	为 y 轴使用特定检测器标签（保存在 .raw 文件中）。
Custom (自定义)	为 y 轴使用自定义标签。
Name (名称)	若选择 Custom 标签，则指定 y 轴的名称。
Offset (偏移)	在色谱图上移动轴标签。
Units (单位)	
Absolute (绝对)	y 轴使用绝对单位。
Relative (相对)	y 轴使用相对单位。

Enhance 页面

在 Enhance（优化）页面上指定质谱图优化细节。

注释 清除 [Options 页面](#) 上的 Use Processing Method Properties For Plot Type And Enhance Info（使用处理方法属性设置谱图类型和优化信息）复选框以修改 Enhance 页面参数。

表 35. Enhance 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Smoothing (平滑)	
Enable (启用)	打开质谱图平滑。
Type (类型)	指定应用到质谱图的平滑算法的类型。选择 Boxcar 或 Gaussian。
Points (点数)	指定质谱图平滑所需的点数。必须为从 3（最小平滑）至 15（最大平滑）范围内的一个奇数。
Refine (精简)	
Enable (启用)	打开精简质谱图优化方式。

表 35. Enhance 页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Window（窗口）	通过输入指定点两侧的秒数定义绘制峰的区域。合理的起始数值是以秒为单位的峰宽。
Noise Threshold（噪声阈值）	指定峰截止点。输入 0 代表显示质谱图中的所有峰，缓慢增加该值直到噪声峰被消除。利用该设置消除由基线噪声生成的峰。
Background Subtraction（背景扣除）	
若质谱图采用背景扣除，则该区域显示背景扣除的详细信息。通过平均一个或两个基线区域来确定背景贡献。	
Time Range 1（时间范围 1）	添加用于评估背景的首个基线区域。当单击该选项时，Xcalibur 数据系统激活该框。在该框中输入使用的时间范围。
Time Range 2（时间范围 2）	添加用于评估背景的第二个基线区域。

Labels 页面

在 Labels（标签）页面上选择峰标签的类型和风格。

表 36. Labels 页面参数

参数	描述
Label with（标签为）	
Mass or Wavelength（质量数或波长）	以 m/z 值（若在 Plot Type 页面上选择 MS 为检测器）或波长值（若 Plot Type 页面上选择 PDA 为检测器）标记峰。
Flags（标记）	以标记对质谱峰加标签。标记提供了关于峰数据的补充信息。例如，如果一个峰为饱和峰，则数据系统在该峰上方显示 S。
Relative To（相对于）	按指定量移动峰的 m/z 标签。
Decimals（小数）	指定在质量数标签中使用的小数点位数。
Label Styles（标签风格）	
Offset（偏移）	将标签从其正常位置处移动以避免与另一个标签冲突。
Size（大小）	指定使用的偏移量（以字符数计）。
Rotated（旋转）	使用垂直质量数标签，而不是水平标签。标记总是无法旋转。
Boxed（加框）	在每个质量数标签四周加框。标记不被加框。
Label Threshold（标签阈值）	按基峰百分比指定峰高水平。XReport 标记高于该水平的峰。

Normalization 页面

在 Normalization（归一化）页面上选择质谱图的归一化选项。

表 37. Normalization 页面参数

参数	描述
Normalize Method（归一化方法）	
Auto Zero（自动调零）	自动优化 y 轴。
Intensity Range （强度范围）	设置 y 轴范围。利用该框输入强度最小值和最大值。有效范围为 -200.00 至 200.00%。
Normalize To（归一化为）	
Largest Peak In Subsection （分段内的最高峰）	将每一分割质量数范围归一化为分段内的最高峰。
Largest Peak In Range （范围内的最高峰）	将质谱图归一化为质量数范围内的最高峰。
Largest Peak In Scan （扫描范围内的最高峰）	将质谱图归一化为整个质谱图内的最高峰。
Normalize Multiple Scans（归一化多次扫描）	
Individually（分别）	分别归一化质谱图。
All The Same（一致）	同等归一化质谱图。

Options 页面

在 Options（选项）页面上设置质谱图参数。

表 38. Options 页面参数

参数	描述
Use Processing Method Properties For Plot Type and Enhance Info （使用处理方法属性设置 谱图类型和优化信息）	利用所选处理方法的属性设置质谱图类型和优化信息。
Use ISTD Peak When Repeating On Component（当重复组 分时使用内标峰）	当重复组分时使用所选 ISTD（内标化合物）峰。选择 Use Processing Method Properties For Plot Type and Enhance Info 选项修改这一参数。

Peak 页面

在 Peak（峰）页面上设置参数以明确指定显示在质谱图报告项目中的峰。

表 39. Peak 页面参数

参数	描述
可以明确指定希望显示在质谱图项目中的峰。	
Enable Explicit Peak Type (启用明确峰类型)	激活控件以指定显示在质谱图中的峰类型。
Peak Type（峰类型）	
Quan Peak（定量峰）	指定一个定量峰。
Qual Peak（定性峰）	指定一个定性峰。
Peak Identification（峰识别）	
Component Name (组分名称)	定义定量峰的名称或定性峰的保留时间。若要进入定性峰，则输入该峰起始和结束时间之间的任意时间。

Plot Type 页面

在 Plot Type 页面上配置质谱图的绘制方式。

注释 仅当清除 [Options 页面](#) 上的 Use Processing Method Properties For Plot Type And Enhance Info 复选框时，Plot Type 页面上的参数可启用。

表 40. Plot Type 页面参数

参数	描述
Mass Range or Wavelength Range (质量数范围或波长范围)	为 MS 检测器类型指定质量数或质量数范围。对于 PDA 检测器类型，利用该框指定波长或波长范围（nm）。 输入谱图上限值和下限值。以短线间隔，无空格。 若使用整个质量数或波长范围，输入星号（*）。
Detector（检测器）	查看用于生成原始文件的检测器类型。有效类型为 MS 和 PDA。 检测器类型决定了可用谱图类型。
Time（时间）	查看或更改主色谱图中的质量数扫描时间。按需要输入一个新值或新范围。
Scan Filter (扫描过滤器)	指定应用到数据的扫描过滤器。从列表中选择一个过滤器或以扫描过滤器格式输入一个新过滤器。
Demo File (演示文件)	指定用于生成所选谱图预览图的演示文件（原始文件）的路径和文件名。

Style 页面

在 Style（风格）页面上设置确定质谱图外观的参数。

表 41. Style 页面参数

参数	描述
Plotting（绘图）	
Automatic（自动）	基于用于激活质谱图的数据采集方法，选择图像风格。
Point To Point （点对点）	显示点对点峰轮廓图。
Stick（棒状）	以垂线显示质谱图质量数峰。
Shade（阴影）	为激活质谱图显示以阴影代表每条 amu 带强度的质谱图。

Table Properties 向导

利用 Table Properties（表格属性）向导自定义表格的以下设置：

- 哪些列包含在表格中
- 自定义表格列设置
- 表格排列次序

Table Properties 向导包含以下页面：

- [Configure User Column Parameters 页面](#)
- [Select Table Fields 页面](#)
- [Set Table Sort Filter 页面](#)
- [Set Table Font 页](#)

Configure User Column Parameters 页面

在 Configure User Column Parameters（配置用户列参数）页面上配置包含在表格中的任何自定义（用户）列。在该页面上为所选的每一自定义列完成参数设置。

表 42. Configure User Column Parameters 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
User Columns （用户列）	定义包含在表格中的自定义列。选择需自定义的列。
User Column Title（用户列标题）	
User Column Title （用户列标题）	为列提供一个描述性标题。

表 42. Configure User Column Parameters 页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
User Column Formula（用户列公式）	
User Column Formula（用户列公式）	查看当前列（只读框）的公式。单击 Edit Formula（编辑公式） 编辑公式。
Edit Formula（编辑公式）	修改公式。

Select Table Fields 页面

在 Select Table Fields（选择表格域）页面上选择表格的列。表格的可用列以字母次序显示，但可以任意次序增加到报告模板中。所选列选项取决于所配置的表格项目的类型。

表 43. Select Table Fields 页面参数

参数	描述
Title（标题）	查看所选项目的自定义标题。
Include The Title In The Resolved Report（在已解析报告中包含标题）	在最终报告中包含自定义标题。
Available Columns（可用列）	查看所选表格的可用列。 用户列是指用户可以在向导页面上配置显示的列。
Add（添加）	在表格中添加一列或多列。从 Available Columns 列表中选择一列或多列，然后单击 Add 将其添加到表格中。
Add All（添加所有）	在表格中添加所有可用列。
Remove（移除）	在表格中移除一列或多列。从 Selected（已选）列表中选择一列或多列，然后单击 Remove 将其从表格中删除。
Remove All（移除所有）	从已选列表中移除所有列。
Selected（已选）	查看当前选中添加到表格中的列。这些列按照在表格中显示的次序排列。
Column Header（列标题）	查看当前所选列的标题。
Decimal Setting（小数设置）	查看或更改列中显示的值的小数点后的位数。该选项仅对某些表格域可用。
Move Up（上移）	在 Selected 列表中将某个列上移。选中 Selected 列表中的某个列，然后单击 Move Up 将该列在列表中上移。该操作使列在已完成表格中左移。
Move Down（下移）	在 Selected 列表中将某个列下移。选中 Selected 列表中的某个列，然后单击 Move Down 将该列在列表中下移。该操作使列在已完成表格中右移。

Set Table Sort Filter 页面

在 Set Table Sort Filter（设置表格排序过滤器）页面上设置参数，以在报告模板中利用所选表格项目生成报告时定义表格数据的顺序。

注释 该页面对 Library Search Graphics Results（库检索图像结果）表格不可用。

表 44. Set Table Sort Filter 页面参数

参数	描述
Column List (列列表)	查看为表格当前所选的列列表。
Current Sorting Configuration（当前排序配置）	
First Order – Ascending/ Descending (第一次序 – 升序 / 降序)	选择 Xcalibur 数据系统用于排序表格的首列。选择按升序或降序排列。
Second Order – Ascending/ Descending (第二次序 – 升序 / 降序)	选择 Xcalibur 数据系统用于排序表格的第二列。例如，对在 First Order（第一次序）列中具有相同条目的列使用该选项。选择按升序或降序排列。
Third Order – Ascending/ Descending (第三次序 – 升序 / 降序)	选择 Xcalibur 数据系统用于排序表格的第三列。例如，对在 First Order（第一次序）和 Second Order（第二次序）列中具有相同条目的列使用该选项。选择按升序或降序排列。
Buttons（按钮）	
Add（添加）	将所选列添加到下一个可用排序。
Remove（移除）	移除最后所选的排序。

Set Table Font 页

在 Font 页面上配置当前所选表格项目的格式。

表 45. Set Table Font 页面参数

参数	描述
Title Font, Heading Font, Cell Font（项目标 题字体、小标题字 体、单元格字体）	设置并查看表格项目中所有标题和单元格的字体设置。单击按钮，配置字体。 Font 对话框 打开。

Edit Formula For 对话框

在 Edit Formula For（编辑公式）对话框中编辑在表格自定义列中使用的公式。有关公式语法的详细信息，参阅“在表格中添加公式”第 21 页。

表 46. Edit Formula For 对话框参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述	
Formula（公式）	查看当前公式。直接在表格中输入或从列表中添加公式。	
Functions（函数）	可用函数列表。当函数选中时，对话框底部将出现该函数的简要描述。	
Function（函数）	Syntax（语法）	Description（描述）
ABS（绝对值）	ABS(x)	返回公式数值的正值，不管其实际值为正值或负值。
AND（和）	AND(x , y)	若逻辑表达式 x 和 y 均为真，则返回数值 1；若其中一个表达式为假，则返回数值 0。
AVERAGE（平均）	AVERAGE ($x1$, $x2$, ..., xn)	返回值列表的平均值。
COUNT（计数）	COUNT(list)	返回列表中条目数的计数。
FALSE（假）	FALSE	返回 0（零）。
INT（取整）	INT(x)	返回数值或公式 x 的小数点左侧的数字。
MAX（最大值）	MAX($x1$, $x2$, ..., xn)	返回列表中的最大值。
MIN（最小值）	MIN($x1$, $x2$, ..., xn)	返回列表中的最小值。

表 46. Edit Formula For 对话框参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述	
Function（函数）	Syntax（语法）	Description（描述）
MOD（求余）	MOD(x, y)	返回 y 值除以 x 值后所得的余数。
NOT（非）	NOT(x)	若逻辑表达式 x 为真，则返回值 0（假）；若表达式 x 为假，则返回值 1（真）。
OR（或者）	OR(x, y)	若逻辑表达式 x 和 y 均为真或其中一个为真，则返回数值 1（真），若两者均为假，则返回数值 0（假）。
PRODUCT（乘积）	PRODUCT($x1, x2, \dots, xn$)	返回值列表的乘积结果。
ROUND（四舍五入）	ROUND(x, y)	按照小数位指定数值 y 返回 x 值的四舍五入值； x 可以是一个数值或某个公式的结果。
SIGN（取符号）	SIGN(x)	若 x 为正值则返回数值 1，若 x 为负值则返回数值 -1。
SUM（总和）	SUM($x1, x2, \dots, xn$)	返回数值或公式列表的总和。
TRUE（真）	TRUE	返回 1。
Add Function （添加函数）	配置当前所选函数并将其添加到当前公式。	

Configure Function 对话框

在 Configure Function（配置方程）对话框中配置公式中函数的设置，以使其应用到表格中的自定义列中。

Configure Function 对话框随用户配置的函数而变化。

FALSE 和 TRUE：无配置选项。

ABS、AVERAGE、INT、MAX、MIN、PRODUCT、ROUND、SIGN、SUM：选择一列或多列执行函数操作。所有这些表达式都有相同的选项，而 ROUND 还包括另一个选项用于选择小数点的位数。

AND、NOT 和 OR：输入需评估的一个（NOT）或两个（AND 和 OR）表达式。所有这些表达式都有相同的选项。

COUNT：输入一个列表。

MOD：选择一列或某个值作为第一和第二参数。

Spectrum List Table Properties 对话框

利用 Spectrum List Table Properties（质谱图列表表格属性）对话框配置应用到 Spectrum List（质谱图列表）表格的设置。

Spectrum List Table Properties 对话框包含以下页面：

- [Display 页面](#)
- [Enhancement 页面](#)
- [Options 页面](#)
- [Plot Type 页面](#)

Display 页面

在 Display（显示）页面上为 Spectrum List 表格配置显示参数。

表 47. Display 页面参数

参数	描述
Display（显示）	
All Peaks （所有峰）	在 Spectrum List 表格中显示所有峰。
Top（最多）	将表格中的峰数限制为一个特定值。
Order By（排序方式）	
Mass/Intensity 或 Wavelength/ Intensity （质量数 / 强度 或波长 / 强度）	在按质量数（若所选检测器为 PDA 则为波长）或强度对 Spectrum List 表格中的数据进行排序的方式之间切换。
Normalization（归一化）	
Intensity Range （强度范围）	指定表格中包含的质量数峰的相对丰度范围。有效范围为 -200.000 至 200.000%。 若要更改相对丰度范围，则在 Intensity Range 框中输入期望显示的最小和最大相对丰度值，由短线分隔。例如，若要以 50-100% 范围内的相对丰度值显示质谱图中的所有峰，输入 50.000-100.000。XReport 从表格中排除相对丰度处于 0.000 至 49.999% 的所有质谱峰。

Enhancement 页面

在 Enhancement（优化）页面为 Spectrum List 表格配置质谱图优化参数。

注释 清除 [Options 页面](#) 页面上的 Use Processing Method Properties For Plot Type and Enhancement Info（使用处理方法属性设置谱图类型和优化信息）复选框以修改 Enhancement 页面参数。

表 48. Enhancement 页面参数

参数	描述
Smoothing（平滑）	
Enable（启用）	打开质谱图平滑。
Type（类型）	指定应用到质谱图的平滑算法的类型。选择 Boxcar 或 Gaussian。
Points（点数）	指定质谱图平滑所需的点数。必须为从 3（最小平滑）至 15（最大平滑）范围内的一个奇数。
Refine（精简）	
Enable（启用）	打开精简质谱图优化方式。
Window（窗口）	通过输入指定点两侧的秒数定义绘制峰的区域。合理的起始数值是以秒为单位的峰宽。
Noise Threshold（噪声阈值）	指定峰截止点。输入 0 代表显示质谱图中的所有峰，缓慢增加该值直到噪声峰被消除。利用该设置消除由基线噪声生成的峰。
Background Subtraction（背景扣除）	
若质谱图采用背景扣除，则该区域显示了背景扣除的详细信息。通过平均一个或两个基线区域来确定背景贡献。	
Time Range 1（时间范围 1）	添加用于评估背景的首个基线区域。单击该选项激活一个框。在该框中输入使用的时间范围。
Time Range 2（时间范围 2）	添加用于评估背景的第二个基线区域。

Options 页面

在 Options（选项）页面为 Spectrum List 表格配置总体参数。

表 49. Options 页面参数

参数	描述
Use Processing Method Properties For Plot Type And Enhancement Info（使用处理方法属性设置谱图类型和优化信息）	在确定谱图类型和优化细节时使用处理方法中的信息。
Use ISTD Peak When Repeating On Component（当重复组分时使用内标峰）	在质谱图列表中包含内标峰。该参数仅适用于 Quan 非重复部分，且当该项目被用于 Qual 非重复部分中时不可用。

Plot Type 页面

在 Plot Type 页面为 Spectrum List 表格配置谱图信息。

注释 清除 [Options 页面](#) 页面上的 **Use Processing Method Properties For Plot Type And Enhancement Info** 复选框以修改 Plot Type 页面参数。

表 50. Plot Type 页面参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Mass/Wavelength （质量数 / 波长）	For Detector = MS（对质谱检测器）： 查看或更改激活质谱图的当前质量数范围。若要更改质量数范围，则在 Mass Range 框内输入首质荷比和末质荷比。格式为 <i>First Mass - Last Mass</i>（首质量数 — 末质量数）。例如若要显示质荷比范围为 100 至 200，输入 100-200。 For Detector = PDA（对光电二极管阵列检测器）： 查看或更改以 nm 为单位的当前波长范围。若要更改波长范围，则在 Wavelength Range 框内输入扫描的短波长和长波长。格式为 <i>Short Wavelength - Long Wavelength</i>（短波长 — 长波长）。例如：若要显示 195-795 nm 范围内的波长范围，输入 195 - 795。
Detector（检测器）	查看或更改当前选择的检测器数据类型： • MS（质谱） • PDA（光电二极管阵列）
Time（时间）	查看或更改激活质谱图以分钟（min）为单位的时间范围。有效范围为 0.00 至 200.00 min。若要选择时间范围，在 Time 框内输入以 min 为单位的时间上限值和下限值（无空格且以横线分隔）。例如，若要选择时间范围为 0.10 至 9.10 min，则输入：0.10-9.10。

表 50. Plot Type 页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Scan Filter (扫描过滤器)	查看或更改激活质谱图使用的扫描过滤器。从列表中选择过滤器或在 Filter 框中以扫描过滤器格式输入一个扫描过滤器。该框仅对 MS 检测器可用。
Demo File (演示文件)	查看模板中使用的演示文件的文件名。

Average Scan Filter Selection 对话框

在 Average Scan Filter Selection（平均扫描过滤器选择）对话框中配置 Spectrum List 使用的平均扫描过滤器。

显示 Plot Type 页面，然后在 Time 框中输入星号 (*)。

表 51. Average Scan Filter Selection 对话框参数

参数	描述
Scan Filter (扫描过滤器)	查看时间范围内的所有扫描过滤器列表。若所选时间范围内包含一种以上的扫描类型，则选择一种待平均的扫描类型。

Library Search Graphics Table Properties 对话框

在 Library Search Graphics Table Properties（库检索图像表格属性）对话框中配置应用到 Library Search Graphics Table（库检索图像表）的其它参数。

表 52. Library Search Graphics Table Properties 对话框参数

参数	描述
Max # Of Hits To Display (需显示的最大目标数)	指定在 Library Search Graphics Table Properties 中显示的最大库检索匹配数。
Display Column Labels (显示列标签)	在表格列上方显示标签。
Show Peak Spectrum (显示峰质谱图)	在表格中显示峰质谱图。仅当在 Table Properties 对话框中选择包含 Hit Spectrum（目标质谱图）列时，该复选框可用。

Library Search Results Table Properties 对话框

在 Library Search Results Table Properties（库检索结果表格属性）对话框中配置应用到 Library Search Results Table（库检索结果表）的其它参数。

表 53. Library Search Results Table Properties 对话框参数

参数	描述
General（一般）	
Max # Of Hits To Display（需显示的最大目标数）	指定在 Library Search Results（库检索结果）表格中显示的最大库检索匹配数。

Sample Table Properties 对话框

在 Sample Table Properties（样品表格属性）对话框中配置应用到 Sample（样品）表格中的其它设置。

表 54. Sample Table Properties 对话框参数

参数	描述
Include Standards（包含标样）	在 Sample 表格中包含标样数据。
Include QCs（包含质控样）	在 Sample 表格中包含质控样数据。
Include Blanks（包含空白样）	在 Sample 表格中包含空白样数据。
Include Unknowns（包含未知样）	在 Sample 表格中包含未知样数据。

Text Object Properties 对话框

利用 Text Object Properties（文本项目属性）对话框配置当前所选文本项目的设置。
该对话框显示下列页面：

- [Data 页面](#)
- [Attributes 页面](#)
- [Font 页面](#)

Data 页面

在 Data（数据）页面上标示文本项目中显示的文本。

Text Object Properties 对话框的 Data 页面随所选文本项目而变化。

若要创建 Annotation（注解）项目，可以输入添加到报告中的注解文本。可以直接在框中输入文本，或者通过右击框并从快捷菜单中选择 **Paste（粘贴）** 或按 CTRL+V 键粘贴复制的文本。当光标仍在框中时按下 ENTER（回车）键添加换行符。

表 55. Data 页面参数

参数	描述
Title（标题）	所选项目的自定义标题。
Include The Title On The Resolved Report （在已解析报告中包含标题）	在最终报告中包含自定义标题。
Available Items（可用条目）	
该框列出了可以添加到文本项目中的条目。若要在 Selected 列表中添加条目，将其选中以高亮显示然后单击 Add 。	
Available Items 列表随所选文本项目而变化：	
• Component ISTD Settings Summary • Component Settings Summary • Component Sys Suit/Flags Settings • Instrument Method • Processing Method – General • Processing Method – Qual • Quan ISTD Peak Summary • Quan Peak Summary • Report Info • Sample Header	
Add（添加）	将 Available Items 列表中当前高亮显示的条目添加到 Selected 列表中。
Add All（添加所有）	将 Available Items 列表中的所有条目添加到 Selected 列表中。
Remove（移除）	从 Selected 列表中移除当前高亮显示的条目。
Remove All（移除所有）	从 Selected 列表中移除所有条目。
Selected（已选）	
该框列出了已被选为在文本项目中显示的条目。	
Move Up（上移）、 Move Down（下移）	通过在 Selected 列表中上移或下移当前高亮显示的条目来重新排列列表中条目的顺序。
Data Label（数据标签）	对 Selected 列表中当前高亮显示的数据标签或标题显示数据标签或标题文本。通过在该框中输入来编辑数据标签或标题。
Decimal Setting（小数设置）	指定所选数据标签显示的值小数点后的位数。该参数仅对某些数据标签可用。

Attributes 页面

在 Attributes（性质）页面对当前所选文本项目设定格式。

表 56. Attributes 页面参数

参数	描述
Number of Columns（列数）	
1、2 或 3	显示 1、2 或 3 列中的数据。
Horizontal Spacing（水平间距）	
Include Data Label（包含数据标签）	显示或隐藏与数据相邻的数据标签。
Include Spacing Between Data Label and Its Data （数据标签和其数据之间有间距）	在数据标签和数据之间添加空格，使所有数据值对齐。
Vertical Spacing（垂直间距）	
单倍、1.5 倍或双倍。	在文本项目中的每行间设置间距值。

Font 页面

在 Font 页面对当前所选文本项目设定格式。

Font 页面上的参数取决于用户是否正在配置注解或其它文本项目。

Annotation Font（注解字体）页面上可以选择标准 Microsoft Windows 字体。在该页面上可以选择字体、字体大小、颜色、加强等等。

表 57. Font 页面参数

参数	描述
Title Font, Heading Font, Data Label Font, Data Font（项目标 题字体、小标题字 体、数据标签字体、 数据字体）	设置并查看文本项目中的所有项目标题、小标题、数据标签和数据的字体设置。 单击  ，配置字体。Font 对话框打开。

Bitmap Properties 对话框

在 Bitmap Properties（位图属性）对话框中指定当前所选位图的文件名。

表 58. Bitmap Properties 对话框参数

参数	描述
Bitmap File （位图文件）	指定当前所选位图的文件名。输入完整路径或单击 Browse 按钮浏览文件。
Reset to Original Size （重设为原始尺寸）	将模板中的图像重设为文件中的原始尺寸。

Column Properties 对话框

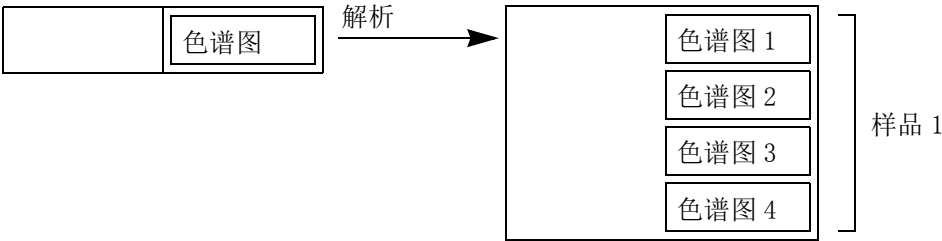
在 Column Properties（列属性）对话框中设置参数以指定列项目的列数，以及是否按照样品或总结重复。

表 59. Column Properties 对话框参数（第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Number of Columns（列数）	
2、3、4 或 5	指定列项目中的列数。
Repeat Type - Sample repeat（重复类型 — 样品重复）	

查看与样品的特定原始文件相关的信息和在处理过程中创建的结果。利用重复类型作为一个布局工具，指定项目在已解析报告页面上显示的位置。

示例 1：当用户在 Quan 重复部分中设置 2- 列项目时，在右列中添加色谱图，然后将 1 个含 4 个组分的样品的数据与模板结合并进行解析，报告将如下所示：



示例 2：在 Quan 重复部分中设置 2- 列项目，在左列中添加色谱图，在右列中添加质谱图，在列下方添加文本项目。然后，将数据与模板结合，给出 1 个含 4 个组分的样品的数据。报告部分中的所有项目对单个样品进行重复，报告显示为：

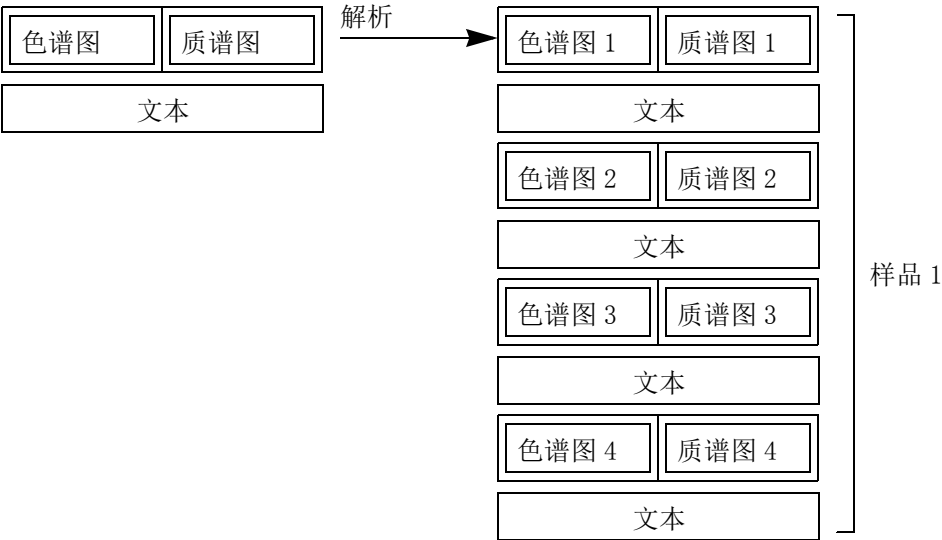


表 59. Column Properties 对话框参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述								
Repeat Type - Summary repeat（重复类型 — 总结重复）									
查看与一个 Xcalibur 序列中所有样品相关的信息和在处理它们过程中生成的结果。当列项目不位于非重复部分时，这个设置被忽略。									
示例 3: 若用户在 非重复 部分中设置 2- 列项目时，添加色谱图（在任意列中），然后将 2 个含 4 个组分的样品数据与模板结合并进行解析，报告将如下所示：									
色谱图	解析 从左至右 <table><tr><td>色谱图 1</td><td>色谱图 2</td></tr><tr><td>色谱图 3</td><td>色谱图 4</td></tr><tr><td>色谱图 1</td><td>色谱图 2</td></tr><tr><td>色谱图 3</td><td>色谱图 4</td></tr></table> 样品 1 样品 2	色谱图 1	色谱图 2	色谱图 3	色谱图 4	色谱图 1	色谱图 2	色谱图 3	色谱图 4
色谱图 1	色谱图 2								
色谱图 3	色谱图 4								
色谱图 1	色谱图 2								
色谱图 3	色谱图 4								
若用户选择的是 Top To Bottom（从上至下），则报告将显示为：									
色谱图	解析 从上至下 <table><tr><td>色谱图 1</td><td>色谱图 3</td></tr><tr><td>色谱图 2</td><td>色谱图 4</td></tr><tr><td>色谱图 1</td><td>色谱图 3</td></tr><tr><td>色谱图 2</td><td>色谱图 4</td></tr></table> 样品 1 样品 2	色谱图 1	色谱图 3	色谱图 2	色谱图 4	色谱图 1	色谱图 3	色谱图 2	色谱图 4
色谱图 1	色谱图 3								
色谱图 2	色谱图 4								
色谱图 1	色谱图 3								
色谱图 2	色谱图 4								
若用户在右列中放置项目而左列为空时，数据就会如项目被放置那样被解析。在左列中，与如上描述一致。									
若用户在每列中放置一个项目，则 Xcalibur 数据系统将忽略 Top To Bottom 及 Left To Right（从左至右）选项。报告显示为：									
色谱图 质谱图 文本	解析 <table><tr><td>色谱图 1</td><td>质谱图 1</td></tr><tr><td>色谱图 2</td><td>质谱图 2</td></tr><tr><td>色谱图 3</td><td>质谱图 3</td></tr><tr><td>色谱图 4</td><td>质谱图 4</td></tr></table> 样品 1 样品 2 文本	色谱图 1	质谱图 1	色谱图 2	质谱图 2	色谱图 3	质谱图 3	色谱图 4	质谱图 4
色谱图 1	质谱图 1								
色谱图 2	质谱图 2								
色谱图 3	质谱图 3								
色谱图 4	质谱图 4								
若单击 New Sample New Row（新样品新行）选项，新样品的数据将总是从新行开始。									

Configure Component Calibration Curve 对话框

在 Configure Component Calibration Curve（配置组分校正曲线）对话框中设置参数，以指定报告中非重复性 Component Calibration Curve（组分校正曲线）报告项目中绘制的组分名称。

表 60. Configure Component Calibration Curve 对话框参数

参数	描述
Component Name (组分名称)	指定在组分校正曲线中显示的组分名。 单击 Browser 按钮以打开对话框并选择处理方法文件。当选择处理方法文件后，XReport 提供该文件中可供选择的组分列表。当选择组分之后，XReport 返回至 Configure Component Calibration Curve 对话框 ，然后将所选组分添加至 Component Name 框中。

Data Sources 对话框

在 Data Sources 对话框中选择应用到当前报告的数据文件。

表 61. Data Sources 对话框参数

参数	描述
Calibration File (校正文件)	选择应用到当前报告的校正（.xcal）文件。
Processing Method File (处理方法文件)	选择应用到当前报告的处理方法（.pmd）文件。
Raw Data File (原始数据文件)	选择应用到当前报告的原始（.raw）文件。
Result File (结果文件)	选择应用到当前报告的结果（.rst）文件。
Sequence List File (序列列表文件)	选择应用到当前报告的序列列表（.sld）文件。

Electronic Signature Properties 对话框

在 Electronic Signature Properties（电子签名属性）对话框中配置显示在 [Electronic Signature Table](#) 中的次序信息。

表 62. Electronic Signature Properties 对话框参数

参数	描述
Signature Information Order（签名信息顺序）	
Created By First (创建人员在前)	首先显示 Created By（创建人员）签名信息组。该信息组显示了报告创建人员的电子签名信息。
Signed By First (签名人员在前)	首先显示 Signed By（签名人员）签名信息组。该信息组显示了报告签名人员的电子签名信息。

Font 对话框

利用 Font 对话框选择报告中所有项目的字体或为报告中每个所选项目自定义字体。

该对话框包含三个页面，与在配置单个项目时进入的 Font Properties（字体属性）页面一致：

- Annotation（注解）（参阅“Font 页面”第 148 页）
- Text（文本）（参阅“Font 页面”第 148 页）
- Tables（表格）（参阅“Table Properties 向导”第 137 页）

Preferences 对话框

在 Preferences 对话框中设置报告的网格和配置选项。

表 63. Preferences 对话框参数

参数	描述
Grid Spacing（网格间距）	
Width（宽度）	设置网格线之间的宽度。（1 网格线单位 = 0.1 英寸）
Height（峰高）	设置网格线之间的高度。（1 网格线单位 = 0.1 英寸）
Actions（操作）	
Snap To Grid （对齐到网格线）	将项目对齐到网格线。若要使 Snap To Grid 有效，必须显示网格线（选择 View > Report Template Grid ）。
Show Page End （显示页面末端）	显示指示分页符位置的蓝线。
Show Template Configuration （显示模板配置）	在打开 XReport 或选择 File（文件）> New（新建） 时，显示 Template Configuration 对话框 。利用 Template Configuration（模板配置）对话框选择创建的报告类型（如 Xcalibur 2.0）。仅当系统中安装两类或更多类报告模板（如 Xcalibur 和 LCQuan™）时，该选项可用。

Preview 窗口

利用 Preview（预览）窗口中的参数预览并调整报告的外观。若要打开窗口，选择 **Report（报告）> Simulate Report（模拟报告）**。XReport 显示含样品数据的模板的预览图。预览报告外观，在结合实际数据之前调整模板。选择 **Report（报告）> Resolve Report（解析报告）**，查看结合实际数据的报告的预览图。

表 64. Preview 窗口参数

参数	描述
Print (打印)	打印报告预览图。该选项仅对已解析报告可用，不可用于模拟报告。
Save (保存)	以下面格式保存报告（仅对已解析报告可用，不可用于模拟报告）： • Microsoft Word 文档 (.doc) • Microsoft Excel 工作簿 (.xls) • 网页 (.htm 或 .html 文件) • 文本 (.txt) • 富文本 (.rtf) • 便携式显示 (.pdf)
Next Page/ Prev Page (下一页 / 上一页)	滚动到报告中前一页或后一页的预览图。
First Page/Last Page (首页 / 末页)	滚动到报告中的首页或末页的预览图。
Page X of Y (第 X 页, 共 Y 页)	查看当前页面 X , Y 是报告的总页面数。输入一个新 X 值, 以滚动到该页面。
Two Page (两页)	一次查看两页的预览图。
Zoom In / Zoom Out (放大 / 缩小)	在预览窗口中增大或减小报告的尺寸。
Close (关闭)	关闭预览窗口并转至 XReport。
Help (帮助)	查看 XReport 帮助。

Save As 对话框

利用 Save As 对话框保存报告模板。

Save As 对话框是标准 Microsoft Save (保存) 对话框, 并增加了一个 Lock Template (锁定模板) 复选框。若选中该复选框, 则模板无法以相同名称再次保存。但可以打开、编辑或以数据解析这个模板。若要保存编辑的版本, 将其另存为另一个文件名。

XReport 的标题栏代表已显示的模板是否已锁定。对锁定模板, 标题栏中出现 *Locked* (锁定)。对未锁定模板, 标题栏中不显示。

当创建新模板或更改已有模板时, 无审查跟踪。

Template Configuration 对话框

在 Template Configuration 对话框中选择创建的报告类型。仅当安装一种以上报告类型（如 Xcalibur 和 LCquan）时该对话框才显示。

表 65. Template Configuration 对话框参数

参数	描述
Report Types (报告类型)	查看可用报告类型列表。选择创建报告所希望使用的程序。
Do Not Show This Dialog Again (不 再显示该对话框)	当再次打开 XReport 或选择 File > New 时隐藏该对话框。若要重新显示该对话框，选择 Layout > Preferences 并选中 Show Template Configuration 复选框。

报告部分

可以将报告模板分成几个部分，并在这些部分中添加报告项目。若要在报告模板中添加部分，从 Sections（部分）窗格中拖曳这些部分。

XReport 中所使用的部分类型如下所示：

- 非重复部分
- 报告页眉和页脚
- 定性重复部分
- 定量重复部分

重复部分和非重复部分中相同的报告项目可以具有不同显示。欲了解更多关于重复部分内或外的报告项目的作用，参阅“[报告项目](#)”第 158 页。

非重复部分

非重复部分是指报告模板中那些不归类为重复部分的报告模板。非重复部分通常显示与系统中使用一次或总体使用的数据或方法相关的静态信息。

非重复部分可以包含以下项目：

Formatting（格式）项目

- [Page Break](#)
- [Columns](#)

Graphic（图像）项目

- [Electronic Signature Table](#)
- [Bitmap](#)
- [Chromatogram](#)

- Component Cal Curve
- Spectrum

Table（表格）项目

- Avalon Qual Events Table
- Calibration File Table
- Component Cal Level Table
- Dilution Factor Table
- IRC Summary table
- Processing Method Programs Table
- Processing Method Sample Reports Settings Table
- Processing Method Summary Reports Settings Table
- Qual Peak Table
- Quan Peak Table
- Sequence Table
- Spectrum Candidate Results Table

Text（文本）项目

- Annotation
- Instrument Method
- Processing Method – General
- Processing Method – Qual
- Sample Table

报告页眉和页脚

报告页眉和页脚部分包含在报告每页顶部和底部重复显示的数据，如，报告日期、页码和公司标志等。

Report Header（报告页眉）或 Report Footer（报告页脚）部分可以包含以下项目：

Formatting 项目

- [Columns](#)

Graphic 项目

- [Bitmap](#)
- [Electronic Signature Table](#)
- [Table 项目](#)

Text 项目

- [Annotation](#)
- [Report Info](#)
- [Sample Header](#)

重复部分

重复部分是报告模板中的一个部分，为解析文档中的每个组分或峰自动重复。可以更改重复部分的属性以自定义其状态。XReport 可以包含以下两种重复部分类型：

- [定性重复部分](#)
- [定量重复部分](#)

定性重复部分

Qual Repeating（定性重复）部分以数据形式显示与单个 Qual 峰相关的细节信息。可对找到的所有 Qual 峰重复这个部分。

Qual Repeating 部分可以包含以下项目：

Formatting 项目

- [Page Break](#)
- [Columns](#)

Graphic 项目

- [Electronic Signature Table](#)
- [Bitmap](#)
- [Chromatogram](#)
- [Spectrum](#)

Table 项目

- [Library Search Graphics Table](#)
- [Library Search Results Table](#)
- [Spectrum List Table](#)

Text 项目

- [Annotation](#)

定量重复部分

Quan repeating（定量重复）部分也被称为 Component（组分）部分。其目的是以数据形式显示与单个 Quan 峰相关的详细信息，或在处理方法中配置某个组分的详细信息。可对找到的所有 Quan 峰或组分重复这个部分。

Quan repeating 部分可以包含以下项目：

Formatting 项目

- [Page Break](#)
- [Columns](#)

Graphic 项目

- [Electronic Signature Table](#)
- [Bitmap](#)
- [Chromatogram](#)
- [Component Cal Curve](#)
- [Spectrum](#)

Table 项目

- [Avalon Quan Events Table](#)
- [Component Cal Level Table](#)
- [IRC Settings Table](#)
- [Component QC Level Table](#)
- [Component Spectrum Table](#)
- [IRC Settings Table](#)
- [Spectrum List Table](#)
- [Sample Table](#)

Text 项目

- [Annotation](#)
- [Component IdentDetectCal Settings](#)

- [Component ISTD Settings Summary](#)
- [Component Settings Summary](#)
- [Component Sys Suit/Flags Settings](#)
- [Quan ISTD Peak Summary](#)
- [Quan Peak Summary](#)

报告项目

报告项目是指用户可以从 Objects（项目）窗格拖曳至 XReport 模板的预定义数据组块。当用户将报告模板与 Xcalibur 数据（数据源文件）结合时，XReport 以数据代替模板中的报告项目以生成 Xcalibur 报告。

报告项目包括下列内容：

- [Graphic 和 Formatting 项目](#)
- [Table 项目](#)
- [Text 项目](#)

Graphic 和 Formatting 项目

Graphic 项目显示图像。可以配置和自定义图像项目。当以 Xcalibur 数据解析报告模板时，图像项目将被图像代替。Formatting 项目有助于配置报告布局。

以下图像和格式项目可用于 XReport 中：

Chromatogram	Bitmap
Spectrum	Columns
Component Cal Curve	Page Break

Chromatogram

Chromatogram（色谱图）项目显示色谱图，为所有 Xcalibur 应用程序支持的采集设备（MS、Analog、A/D Card、PDA、UV）显示原始数据或已处理数据。

所需数据文件：.raw, .rst

所属部分：Qual、Quan 和非重复部分

Spectrum

Spectrum（质谱图）项目显示质谱图，为所有 Xcalibur 应用程序支持的采集设置（MS、PDA）显示原始数据或已处理数据。

所需数据文件：.raw, .rst

所属部分：Qual、Quan 和非重复部分

Component Cal Curve

Component Cal[ibration] Curve（组分校正曲线）项目显示用于定量某一特定组分的校正曲线。该曲线在处理方法中指定，显示为响应值 vs. 标样量。

所需数据文件：.pmd, .rst

所属部分：Quan 或非重复部分。对于非重复部分，在 [Configure Component Calibration Curve 对话框](#) 中指定需显示的组分。

Bitmap

Bitmap（位图）项目显示图像，如公司标志。

所需数据文件：.bmp, .dib, .gif, .jpg, 或 .ico

所属部分：可位于所有部分中。

Columns

利用 Columns（列）项目控制图像和文本项目的布局和重复属性。在 [Column Properties 对话框](#) 中设定列的格式。

所需数据文件：无

所属部分：可位于所有部分中。

Page Break

利用 Page Break（分页符）项目在报告中插入手动分页符。

所需数据文件：无

所属部分：可位于 Qual repeating、Quan repeating 和非重复部分。

Table 项目

Table（表格）项目包含表格信息。可以增加、删除或排序表格项目的列。也可以创建自定义列。当以 Xcalibur 数据解析报告模板时，表格中的列将填充数据。

这些表格项目可用于 XReport：

Avalon Qual Events Table	Library Search Results Table
Avalon Quan Events Table	Processing Method Programs Table
Calibration File Table	Processing Method Sample Reports Settings Table
Component Cal Level Table	Processing Method Summary Reports Settings Table
Component QC Level Table	Qual Peak Table
Component Spectrum Table	Quan Peak Table
Dilution Factor Table	Qual Summary Table

Electronic Signature Table	Quan Summary Table
Ion Ratio Confirmation Results Table	Sample Table
IRC Settings Table	Sequence Table
IRC Summary table	Spectrum Candidate Results Table
Library Search Graphics Table	Spectrum List Table

Avalon Qual Events Table

Avalon Qual Events table (Avalon 定性事件表) 显示在处理方法的 Qual 部分中配置的 Avalon 峰检测算法事件的详细信息。这个表格提供了每个样品的每个峰的信息。每个样品峰为单独一行，将某个样品所有峰的所在行归类到一起显示。

所需数据文件： .pmd

所属部分： 非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- Time (ms) (时间, ms)
- Kind (类型)
- Event OPCode (事件操作码)
- Event (事件)
- Value (值)
- Value 2 (值 2)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Avalon Quan Events Table

Avalon Quan Events table (Avalon 定量事件表) 显示在处理方法的 Quan 部分中为组分配置的 Avalon 峰检测算法事件的详细信息。这个表格提供了每个样品的每个峰的信息。每个样品峰为单独一行，将某个样品所有峰的所在行归类到一起显示。

所需数据文件: .pmd

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Time (时间)
- Kind (类型)
- Event OPCode (事件操作码)
- Event (事件)
- Value (值)
- Value 2 (值 2)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Calibration File Table

Calibration File table (校正文件表) 显示标样的校正水平、原始文件名和采集日期。这个表格提供每个样品的每个峰的信息。

所需数据文件: .xcal, .sld, .raw

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Level (水平)
- Response Factor (响应因子)
- Component Name (组分名称)
- Average Response Factor (平均响应因子)
- %RSD (相对标准偏差)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Component Cal Level Table

Component Cal Level table (组分校正水平表) 显示为指定组分定义的校正水平、量和允许测试值。

所需数据文件: .pmd

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Component Name (组分名称)
- Cal Level (校正水平)
- Amount (量)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Component QC Level Table

Component QC Level table (组分质控水平表) 显示为指定组分定义的质控水平、量和测试百分比。

所需数据文件: .pmd

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- QC Level (质控水平)
- Amount (量)
- Test % (测试百分比)
- Component Name (组分名称)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Component Spectrum Table

Component Spectrum table (组分质谱图表) 显示多达 50 个质谱峰的 m/z 和强度数据。当在处理方法中指定 Spectrum Peak Identification Method (质谱峰识别方法) 时, Xcalibur 数据系统利用该数据识别组分。这个表格提供每个样品的每个峰的信息。每个样品峰为单独一行, 将某个样品所有峰的所在行归类到一起显示。

注释 该方法仅适用于 GC 色谱图。

所需数据文件: .pmd

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- # (号)
- m/z (质荷比)
- Intensity (%) (强度, %)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Dilution Factor Table

Dilution Factor table（稀释因子表）显示组分的校正水平和稀释因子，除了内标化合物。

所需数据文件：.rst

所属部分：非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- Calibration Level（校正水平）
- Dilution（稀释）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Electronic Signature Table

Electronic Signature table（电子签名表）项目以表格格式显示多达六个电子签名。

所需数据文件：无

所属部分：可位于所有部分中。

注释 Xcalibur 应用程序在创建报告时生成 Electronic Signature（电子签名）信息，电子签名信息仅可被添加到由 Xcalibur Sequence Setup（序列设置）或 Quan Browser（定量浏览器）生成的报告中。由 XReport 生成的报告不显示签名信息。

Electronic Signature table 项目显示两组签名。Created By 信息组显示报告创建人员的签名。Signed By 信息组显示报告被创建时，输入电子签名信息的人员的签名。该选项按照下面各列显示电子签名数据：

- Logon Name（登录名）
- Full Name（全名）
- Date and Time（日期和时间）
- Comment（注释）

Ion Ratio Confirmation Results Table

Ion Ratio Confirmation table (离子比率确认表) 基于处理方法中指定的检索标准, 显示关于每个定性离子的数据。

所需数据文件: .rst

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Qualifier Ion # (定性离子号)
- Mass (质量数)
- Qualifier Ion Found (找到定性离子)
- Coelution Passed (共洗脱通过)
- Ion Ratio Passed (离子比率通过)
- Absolute Window % (绝对窗口百分比)
- Actual Ion Ratio % (实际离子比率百分比)
- Target % (目标百分比)
- Target Range % (目标范围百分比)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

IRC Settings Table

IRC Settings table (离子比率确认设置表) 最多显示 5 个处于容许限值内的定性离子, 以确认目标分析物的检测。在处理方法中指定这些离子。

所需数据文件: .pmd

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Qualifier Ion # (定性离子号)
- m/z (质荷比)
- Target Ratio (%) (目标比率, %)
- Window (±%) (窗口, ±%)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

IRC Summary table

IRC Summary table (离子比率确认总结表) 显示每个组分的定性离子的所有信息。当 Name 列为首列时最有用。

所需数据文件: .rst

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Component Name (组分名称)
- RT (保留时间)
- Mass (质量数)
- Response (响应值)
- Calculated Amount (计算量)
- Actual Ion Ratio % (实际离子比率百分比)
- Ion Ratio Passed (离子比率通过)
- Target Range % (目标范围百分比)
- Qualifier Ion # (定性离子号)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Library Search Graphics Table

Library Search Graphics table (库检索图像表) 显示 Qual 峰的库检索图像结果。

所需数据文件: .rst, .raw

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- Hit Spectrum (目标质谱图)
- Delta (差值)
- Compound Structure (化合物结构)

Library Search Results Table

Library Search Results table (库检索结果表) 显示 Qual 峰的库检索结果。

所需数据文件: .rst, .raw

所属部分: 非重复部分

该表格具有以下可能的字段:

- SI (正检索相似度)
- RSI (逆检索相似度)
- Compound Name (化合物名称)
- Cas # (CAS 号)
- Probability (概率)
- Area (峰面积)
- Area % (峰面积百分比)
- Library (库)
- Molecular Formula (分子式)
- Molecular Weight (分子量)
- RT (保留时间)
- Scan # (扫描数)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Processing Method Programs Table

Processing Method Programs table（处理方法程序表）显示在样品分析和数据处理后 Xcalibur 应用程序运行的程序列表。应用程序以列表顺序运行程序。

所需数据文件：.pmd

所属部分：非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- Num（号）
- Enable（启用）
- Std（标样）
- QC（质控样）
- Unk（未知样）
- Action（操作）
- Other（其他）
- Parameters（参数）
- Program or Macro Name（程序或宏名称）
- Sync（同步）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Processing Method Sample Reports Settings Table

Processing Method Sample Reports Settings table（处理方法样品报告设置表）显示序列中每个样品的样品报告信息，包括模板名和报告文件名。指定处理方法中的样品类型。

所需数据文件：.pmd

所属部分：非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- Num（号）
- Enable（启用）
- Std（标样）
- QC（质控样）
- Unk（未知样）
- Other（其他）
- Report Template Name（报告模板名）
- Save As（另存为）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Processing Method Summary Reports Settings Table

Processing Method Summary Reports Settings table（处理方法总结报告设置表）显示在标曲更新或非标曲更新序列样品处理后发布的总结报告。

所需数据文件：.pmd

所属部分：非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- Num（号）
- Enable（启用）
- Save As（另存为）
- Report Template Name（报告模板名）
- User Column 1 to 5（用户列 1 至 5）

Qual Peak Table

Qual Peak table（定性峰表）显示单个样品定性分析检测的色谱峰的信息。

注释 若要显示整个序列色谱峰的信息，使用 [Qual Summary Table](#)。

所需数据文件： .rst

所属部分： 非重复部分

该表格具有以下可能的字段：

- RT（保留时间）
- Peak Area（峰面积）
- Peak Height（峰高）
- BL（基线）
- S/N（信噪比）
- Area %（峰面积百分比）
- Peak Width（峰宽）
- Saturated（饱和）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Quan Peak Table

Quan Peak table（定量峰表）显示单个样品定量分析检测的组分峰的信息。

注释 若要显示序列中所有样品的组分峰信息，使用 [Quan Summary Table](#) 项目。

所需数据文件：.pmd, .rst

所属部分：非重复部分

Quan Peak table 具有以下可能的字段：

- Component Name（组分名称）
- RT（保留时间）
- Calculated Amount（计算量）
- Response（响应值）
- BL（基线）
- %Diff（百分比偏差）
- Area（峰面积）
- Area %（峰面积百分比）
- Area Ratio（峰面积比率）
- [Calibration Flags](#)（校正标记）
- Component Found（找到组分）
- Component Type（组分类型）
- [Data Flags](#)（数据标记）
- Expected RT（预期保留时间）
- Height（峰高）
- Height Ratio（峰高比率）
- Ion Ratio Status（离子比率状态）
- ISTD Area（内标峰面积）
- ISTD Height（内标峰高）
- ISTD Name（内标名称）
- ISTD Response（内标响应）
- Keys（提示）
- Peak Purity（峰纯度）
- Peak Status（峰状态）
- Response Ratio（响应比）
- S/N（信噪比）
- Sample Type（样品类型）
- Saturated（饱和）
- Specified Amount（指定量）
- System Suitability（系统适用性）
- Units（单位）
- Width（宽度）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Qual Summary Table

Qual Summary table（定性总结表）显示序列中所有样品定性分析检测的色谱峰的信息。

注释 若仅显示单个样品的峰信息，使用 [Qual Peak Table](#) 项目。

所需数据文件： .sld, .rst

所属部分： 非重复部分

Qual Summary table 具有以下可能的字段：

- RT（保留时间）
- Peak Area（峰面积）
- Peak Height（峰高）
- BL（基线）
- Data File Name（数据文件名）
- Sample ID（样品标识号）
- S/N（信噪比）
- Area %（峰面积百分比）
- Peak Width（峰宽）
- Saturated（饱和）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Quan Summary Table

Quan Summary table（定量总结表）显示序列中所有样品定量分析检测的组分峰的信息。

注释 若仅显示单个样品的组分峰信息，使用 [Quan Peak Table](#) 项目。

所需数据文件：.sld, .pmd, .rst

所属部分：非重复部分

Quan Summary table 具有以下可能的字段：

- Component Name（组分名称）
- RT（保留时间）
- Calculated Amount（计算量）
- Response（响应值）
- BL（基线）
- %Diff（百分比偏差）
- Area（峰面积）
- Area %（峰面积百分比）
- Area Ratio（峰面积比率）
- [Calibration Flags](#)（校正标记）
- Component Found（找到组分）
- Component Type（组分类型）
- Data File Name（数据文件名）
- [Data Flags](#)（数据标记）
- Expected RT（预期保留时间）
- Height（峰高）
- Height Ratio（峰高比率）
- Ion Ratio Status（离子比率状态）
- ISTD Area（内标峰面积）
- ISTD Height（内标峰高）
- ISTD Name（内标名称）
- ISTD Response（内标响应）
- Keys（提示）
- Peak Purity（峰纯度）
- Peak Status（峰状态）
- Response Ratio（响应比）
- S/N（信噪比）
- Sample ID（样品标识号）
- Sample Type（样品类型）
- Saturated（饱和）
- Specified Amount（指定量）
- System Suitability（系统适用性）
- Units（单位）
- Width（宽度）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Sample Table

Sample table（样品表）显示样品中每个组分的系统适用性和标记处理结果，为序列中的每个样品重复该信息。这个表格提供了每个样品的每个峰的信息。每个样品峰为单独一行，将某个样品所有峰的所在行归类到一起显示。

所需数据文件：.sld

所属部分：非重复部分

Sample table 具有以下可能的字段：

- Sample ID（样品标识号）
- Data File Name（数据文件名）
- Area（峰面积）
- Area Ratio（峰面积比率）
- ISTD Area（内标峰面积）
- Specified Amount（指定量）
- %Diff（百分比偏差）
- %RSD（相对标准偏差）
- Actual RT（实际保留时间）
- Calculated Amount（计算量）
- Calibration Flags（校正标记）
- Data Flags（数据标记）
- Excluded（已排除）
- Height（峰高）
- ISTD Height（内标峰高）
- Height Ratio（峰高比率）
- QC Failed（质控不通过）
- System Suitability（系统适用性）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Sequence Table

Sequence table（序列表）显示序列文件的目录。这个表格提供了每个样品的每个峰的信息。

所需数据文件：.sld

所属部分：非重复部分

Sequence table 具有以下可能的字段：

- Sample Type（样品类型）
- File Name（文件名）
- Sample ID（样品标识号）
- Path（路径）
- Inst Method（仪器方法）
- Cal File（校正文件）
- Dil Factor（稀释因子）
- Inj Vol（进样体积）
- ISTD Corr Amt（内标校正量）
- Level（水平）
- Proc Method（处理方法）
- Sample Vol（样品体积）
- Sample Wt（样品质量）
- Position（位置）
- User Labels 1 to 5（用户标签 1 至 5）
- User Columns 1 to 5（用户列 1 至 5）

Spectrum Candidate Results Table

Spectrum Candidate Results table (质谱图候选结果表) 基于每个组分, 显示 GC/MS 数据处理所得的质谱图候选结果。

所需数据文件: .rst

所属部分: 非重复部分

Spectrum Candidate Results table 具有以下可能的字段:

- Component Name (组分名称)
- Cand. # (候选号)
- Forward Fit (正向拟合)
- Reverse Fit (逆向拟合)
- Match (匹配)
- Area (峰面积)
- End RT (结束保留时间)
- Found RT (找到保留时间)
- Height (峰高)
- Start RT (起始保留时间)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Spectrum List Table

Spectrum List table (质谱图列表表格) 显示质谱图图像项目的文本。

所需数据文件: .rst, .raw

所属部分: 非重复部分

Spectrum List table 具有以下可能的字段:

- m/z (质荷比)
- Intensity (强度)
- Relative (相对)
- Wavelength (波长)
- User Columns 1 to 5 (用户列 1 至 5)

Text 项目

Text 项目包含文本标签和相关的文本字段。这些字段可以被删除、剪切 / 复制并粘贴到报告模板中的任意地方（如页眉）。当以 Xcalibur 数据解析报告模板时，文本项目字段将被文本信息代替。

以下文本项目可用于 XReport:

Annotation	Processing Method - General
Component IdentDetectCal Settings	Processing Method - Qual
Component ISTD Settings Summary	Quan ISTD Peak Summary
Component Settings Summary	Quan Peak Summary
Component Sys Suit/Flags Settings	Report Info
Instrument Method	Sample Header

Annotation

利用 Annotation 项目在报告中插入静态文本。若要输入文本，右击该项目并从快捷菜单中选择 **Properties**。Annotation Properties（注解属性）对话框打开。在框中输入文本。

所需数据文件：无

所属部分：可位于所有部分中。

Component IdentDetectCal Settings

Component IdentDetectCal Settings（组分的识别检测校正设置）项目显示单个组分的峰检测、校正和积分参数。

所需数据文件：.pmd

所属部分：Quan 重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 66。

Component ISTD Settings Summary

Component ISTD Settings（组分内标设置）项目显示在处理方法的定量部分中每个组分的内标配置详细信息的总结。

所需数据文件：.pmd

所属部分：Quan 重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段，可参阅表 66。

表 66. Component ISTD Settings 项目字段

• Component Name (组分名称) • Detector Type (检测器类型) • Filter (过滤器) • Trace (谱图) • Mass Range (质量数范围) • Wavelength Range 1 (波长范围 1) • Wavelength Range 2 (波长范围 2)	• Expected Retention Time (预期保留时间) • Retention Time Window (保留时间窗口) • View Width (视图宽度) • Retention Time Reference (保留时间参考) • Component Type (组分类型) • ISTD Name (内标名称) • Peak Detection Algorithm (峰检测算法)	Genesis Peak Integration/Detection (Genesis 峰积分 / 检测) • Genesis Smoothing Points (Genesis 平滑点) • Valley Detection Enabled (启用谷值检测) • Genesis Constrain Peak Width (Genesis 限定峰宽) • Genesis Identify By (Genesis 识别方法) • Genesis Minimum Peak Height (Genesis 最小峰高)	ICIS Peak Integration/Detection (ICIS 峰积分 / 检测) • ICIS Smoothing Points (ICIS 平滑点) • ICIS Constrain Peak Width (ICIS 限定峰宽) • ICIS Identify By (ICIS 识别方法) • ICIS Minimum Peak Height (ICIS 最小峰高) Avalon Peak Integration/Detection (Avalon 峰积分 / 识别) • Avalon Smoothing Points (Avalon 平滑点) Other (其他) • <Blank Line > 和 <User Text> 数据条目
--	---	--	--

Component Settings Summary

Component Settings Summary（组分设置总结）项目显示指定组分的峰检测和积分参数的短列表。

所需数据文件：.pmd

所属部分：Quan 重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 67。

表 67. Component Settings Summary 项目字段 / 标题

• Component Name (组分名称) • Detector Type (检测器类型) • Filter (过滤器) • Trace (谱图) • Mass Range (质量数范围) • Wavelength Range 1 (波长范围 1) • Wavelength Range 2 (波长范围 2)	• Expected Retention Time (预期保留时间) • Retention Time Window (保留时间窗口) • View Width (视图宽度) • Retention Time Reference (保留时间参考) • Component Type (组分类型) • ISTD (内标化合物) • Standard Dilution – Base Amount (标样稀释 — 基本量) • Peak Detection Algorithm (峰检测算法)	Genesis Peak Integration/Detection (Genesis 峰积分 / 检测) • Genesis Smoothing Points (Genesis 平滑点) • Valley Detection Enabled (启用谷值检测) • Genesis Constrain Peak Width (Genesis 限定峰宽) • Genesis Identify By (Genesis 识别方法) • Genesis Minimum Peak Height (Genesis 最小峰高)	ICIS Peak Integration/Detection (ICIS 峰积分 / 检测) • ICIS Smoothing Points (ICIS 平滑点) • ICIS Constrain Peak Width (ICIS 限定峰宽) • ICIS Identify By (ICIS 识别方法) • ICIS Minimum Peak Height (ICIS 最小峰高) Avalon Peak Integration/Detection (Avalon 峰积分 / 检测) • Avalon Smoothing Points (Avalon 平滑点) Other (其他) • <Blank Line> 和 <User Text> 数据条目
--	---	--	--

Component Sys Suit/Flags Settings

Component Sys Suit/Flags Settings（组分系统适用性 / 标记设置）项目显示校正、定量和检测标记，以及系统适用性参数，用于自动检查目标峰是否通过定性检测。

所需数据文件：.pmd

所属部分：Quan 非重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 68。

表 68. Component Sys Suit/Flags Settings 项目字段 / 标题

System Suitability (系统适用性) - Component Name (组分名称) Resolution Parameters (分辨率参数) - Resolution Threshold (分辨率阈值) Symmetry Parameters (对称性参数) - Symmetry Peak Height (对称峰高) - Symmetry Threshold (对称性阈值) Peak Classification Parameters (峰分类参数)	Detect Tailing (检测拖尾) - Tail Peak Height (拖尾峰高) - Tail Failure Threshold (拖尾未通过阈值) Detect Column Overload (检测色谱柱过载) - Over Peak Height (过载峰高) - Over Failure Threshold (过载未通过阈值)	Detect Baseline Clipping (检测基线裁剪) - Num. of Peak Width for Noise Detection (用于噪声检测的峰宽数) Detect Minimum Signal-To-Noise Ratio (检测最小信噪比) - Signal-To-Noise Ratio (信噪比) Calibration and Quantitation Flags (校正和定量标记)	Quantitation Flags (定量标记) - Detection Limit (检测限) - Quantitation Limit (定量限) - Linearity Limit (线性上限) - Carry Over Limit (残留限) Detection Flags (检测标记) - Area Threshold (峰面积阈值) - Height Threshold (峰高阈值) Other (其他) <Blank Line > 和 <User Text> 数据条目
Detect Peak Width (检测峰宽) - Width Peak Height (宽度峰高) - Min. Peak Width (最小峰宽) - Max. Peak Width (最大峰宽)		Calibration Flag (校正标记) R-Squared (决定系数)	

Instrument Method

Instrument Method（仪器方法）项目显示一般仪器方法参数。

所需数据文件：.raw

所属部分：非重复部分

该项目显示与 .raw 文件相关的所有仪器的方法信息。该选项利用 Qual Browser（定性浏览器）的默认数据、属性和字体设置，不能进行配置。

Processing Method – General

Processing Method – General（处理方法 —— 一般）项目显示一般仪器方法参数。

所需数据文件：.pmd

所属部分：非重复部分

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 69。

表 69. Processing Method – General 项目字段 / 标题

Identification（识别）	Baseline（基线）	Options（选项）	Other（其他）
• Created By（创建人员） • When Created（创建时间） • Last Modification（上次修改） • Modified By（修改人员） • Summary（总结） • Void Tme（死时间）	• Baseline and Noise Window（基线和噪声窗口） • Baseline Noise Tolerance（基线噪声容许偏差） • Min. Number of Scans in Baseline（基线中的最小扫描数）	• Chromatography By（色谱模式） • Calibration By（校正方式）	• <Blank Line> 和 <User Text> 数据条目

Processing Method – Qual

Processing Method – Qual（处理方法 —— 定性）项目显示定性处理方法参数。

所需数据文件：.pmd

所属部分：非重复部分

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 70。

表 70. Processing Method - Qual 项目字段 / 标题 (第 1 页, 共 2 页)

Identification (识别) • Detector Type (检测器类型) • Detector Delay (检测器延迟) • Filter (过滤器) • 1st Trace Type (第 1 个谱图类型) • Operator (运算符) • 2nd Trace Type (第 2 个谱图类型) • Mass Range 1 (质量数范围 1) • Wavelength Range 1 (波长范围 1) • Time Range 2 (时间范围 2) • Wavelength Range 2 (波长范围 2) • Range (范围) Detection Options (检测选项) • Peak Detection Algorithm (峰检测算法) Genesis Peak Integration (Genesis 峰积分) • Genesis Smoothing Points (Genesis 平滑点) • S/N Threshold (信噪比阈值) • Valley Detection (谷值检测) • Expected Peak Width (预期峰宽) • Genesis Constrain Peak Width (Genesis 限定峰宽) • Genesis Peak Height (Genesis 峰高) • Genesis Tailing Factor (Genesis 拖尾因子)	Avalon Peak Integration (Avalon 峰积分) • Avalon Smoothing Points (Avalon 平滑点) Limit Peaks (限制峰) • Select Top Peaks (选择最高峰) • Select By (选择方法) • Number to Select (选择数) • Relative Peak Height Threshold (相对峰高阈值) • Percent of Highest Peak (最高峰的百分比) Advanced Detection Options (高级检测选项) Genesis Peak Detection (Genesis 峰检测) • Genesis Identify By (Genesis 识别方法) • Minimum Masses Required (所需最小质量数) • Minimum Percent of Masses Found (所得的最小质量数百分比) • Minimum Peak Height (最小峰高) Genesis Peak Edge Detection (Genesis 峰边缘检测) • Peak S/N Cutoff (峰信噪比临界值) • Report Noise As (将噪声报告为)	ICIS Advanced Parameters (ICIS 高级参数) • Noise Method (噪声方法) • Minimum Peak Width (最小峰宽) • Multiplet Resolution (多重分辨率) • Area Tail Extension (峰面积尾扩展) • Area Scan Window (峰面积扫描窗口) Spectrum Enhancement (质谱图优化) • Spectrum Enhancement Usage (质谱图优化用途) Refine (精简) • Window Size (窗口尺寸) • Noise Threshold (噪声阈值) Combine (组合) Background Subtraction Left Region (扣除左侧区域背景) • Left Region Width (左区域宽度) • Region End (区域终点) Peak Top Region (峰顶区域) • Width (宽度)	Options (选项) • Maximum Number of Hits (最大目标数) • Reverse Search (逆检索) • Search with MW (检索特定分子量) Append to User Library (添加到用户库) • Availability (可用性) • User Library (用户库) • Match Factor (匹配因子) • Reverse Match Factor (逆向匹配因子) • Probability (概率) • Search Libraries (检测库) Library Search Constraints (库检索限定) • Molecular Weight Range (分子量范围) • Other Databases (其它数据库) • Name Fragment (名称片段) • Element Constraints Enabled (启用元素限定) • Elements in Compound (化合物中的多元素) • Element Infiltration (元素渗透) • Mass Spectral Peak Constraints Enabled (启用质谱峰限定) • Mass Spectral Peak Measurement (质谱峰测量)
---	---	--	--

表 70. Processing Method - Qual 项目字段 / 标题 (第 2 页, 共 2 页)

ICIS Peak Integration (ICIS 峰积分) • ICIS Smoothing Points (ICIS 平滑点) • Baseline Window (基线窗口) • Area Noise Factor (峰面积噪声因子) • Peak Noise Factor (峰噪声因子) • ICIS Constrain Peak Width (ICIS 限定峰宽) • ICIS Peak Height (ICIS 峰高) • ICIS Tailing Factor (ICIS 拖尾因子)	Genesis Apex Detection (Genesis 峰顶检测) • Window Size (窗口尺寸) • Filter Width (过滤器宽度) Genesis Valley Detection (Genesis 峰谷检测) • Rise % (上升百分比) • Valley S/N (谷值信噪比) Genesis Background Subtraction (Genesis 背景扣除) • Recomputation Interval (重新计算间隔) • Number of Scans in Background (背景中的扫描数)	Background Subtraction Right Region (扣除右侧区域背景) • Right Region Width (右区域宽度) • Region Start (区域起点) Threshold (阈值) • Cutoff Threshold (截止阈值) Library Search Options (库检索选项) Search Type (检索类型) • Identity (一致性) • Similarity (相似性)	Peak Purity Options (峰纯度选项) • Scan Threshold (扫描阈值) • Peak Coverage (峰覆盖率) • Limit Scan Wavelength Range (限制扫描波长范围) Other (其他) • <Blank Line> 和 <User Text> 数据条目
---	--	--	---

Quan ISTD Peak Summary

Quan ISTD Peak Summary（定量内标峰总结）项目显示与定量组分相关的内标峰的总结参数。

所需数据文件：.pmd, .rst

所属部分：Quan 非重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 71。

表 71. Quan ISTD Peak Summary 项目字段

- Component Name (组分名称) - ISTD Name (内标名称) - Actual RT (实际保留时间) - Response (响应值)	- Height (峰高) - Width (峰宽) - Baseline Flags (基线标记) - Area (峰面积)	- Signal-to-Noise (信噪比) - Saturated (饱和) - Expected RT (预期保留时间) - Peak Status (峰状态)	- System Suitability (系统适用性) - Data Flags (数据标记) <Blank Line > 和 <User Text> 数据条目
---	--	--	---

Quan Peak Summary

Quan Peak Summary（定量峰总结）项目显示组分峰总结参数。

所需数据文件：.pmd, .rst

所属部分：Quan 非重复部分，按组分峰重复

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 72。

表 72. Quan Peak Summary 项目字段

- Component Name (组分名称) - Actual RT (实际保留时间) - Specified Amount (指定量) - Calculated Amount (计算量) %Diff (百分比偏差) - Response (响应值) - Response Ratio (响应比)	- Area (峰面积) - Area Ratio (峰面积比率) - Height (峰高) - Height Ratio (峰高比率) - Width (峰宽) - Ion Ratio Status (离子比率状态)	- Peak Purity (峰纯度) - Baseline Flags (基线标记) - Signal-to-Noise (信噪比) - Saturated (饱和) - Expected RT (预期保留时间) - Sample Type (样品类型)	- Component Type (组分类型) - Peak Status (峰状态) - System Suitability (系统适用性) - Data Flags (数据标记) - Calibration Flags (校正标记) <Blank Line > 和 <User Text> 数据条目
---	---	---	---

Report Info

Report Info（报告信息）项目显示报告本身的常规信息。

所需数据文件：无

所属部分：报告页眉和页脚

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 73。

表 73. Report Info 项目字段

• Page [a] of [b] （第 a 页，共 b 页） • Date and Time（日期和时间） • Template File（模板文件） • Layered App Name （分层应用程序名称）	• Layered App Version （分层应用程序版本） • Blank Line 和 User Text 数据条目
---	---

Sample Header

Sample Header（样品标题）项目显示关于样品的常规信息。

所需数据文件：.raw, .sld

所属部分：报告页眉或页脚或非重复部分。

有关该项目可能包含的字段和标题，可参阅表 74。

表 74. Sample Header 项目字段

• Data File （数据文件） • Original Data Path （原始数据路径） • Current Data Path （当前数据路径） • Sample Type （样品类型） • Sample ID （样品标识号） • Sample Name （样品名称） • Operator （操作人员） • Acquisition Date （采集日期）	• Run Time （运行时间） • Comments（注解） • Vial（样品瓶） • Injection Volume （进样体积） • Scans（扫描） • Low Mass （低质量数） • High Mass （高质量数） • Sample Volume （样品体积）	• Sample Weight （样品质量） • ISTD Amount （内标量） • Calibration Level （校正水平） • Dilution Factor （稀释因子） • Instrument Method （仪器方法） • Processing Method （处理方法） • Current Processing Method （当前处理方法） • Calibration File （校正文件）	• Revision（修订） • Barcode（条形码） • Barcode Status （条形码状态） • User Labels 1 to 5 （用户标签 1 至 5） • Blank Line 和 User Text 数据条目
--	---	--	--

System Suitability Flags (系统适用性标记)

Quan Summary Table、Quan ISTD Peak Summary、Sample Table 和 Quan Peak Table 项目包含一个可用 System Suitability 字段，这一字段显示对某一特定峰执行任何系统适用性测试的结果。每一测试由一个标记字母代表。XReport 按峰通过、未通过或未测试显示分类标记。

以下为 System Suitability 标记。

表 75. System Suitability 标记

标记	描述
S	Symmetry (对称性): 若某个峰的对称性计算值高于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的对称性阈值, 则该峰通过测试。
R	Resolution (分辨率): 若某个峰的分辨率计算值高于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的分辨率阈值, 则该峰通过测试。
W	Peak Width (峰宽): 若某个峰的峰宽处于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的最小值和最大值之间, 则该峰通过测试。
T	Tailing (拖尾): 若某个峰的拖尾计算值低于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的阈值, 则该峰通过测试。
O	Column Overload (色谱柱过载): 若某个峰的过载计算值低于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的阈值, 则该峰通过测试。
B	Baseline Clipping (基线裁剪): 若未检测到基线裁剪, 则该峰通过测试。
N	Signal to Noise Ratio (信噪比): 若某个峰的信噪比高于在 Processing Setup 的 Quan 视图的 System Suitability 页面上指定的阈值, 则该峰通过测试。
C	Concave (凹形抑制): 若某个峰为显现出由噪声引起的凹形抑制, 则该峰通过测试。
D	Saturation (饱和): 若在数据采集过程中检测器不饱和, 则该峰通过测试。

<Blank Line > 和 <User Text> 数据条目

除 Annotation 和 Instrument Method 项目外的所有文本项目都有两个特殊的数据条目：<Blank Line>（空白行）和 <Text>（文本）。这些数据条目显示在 [Data](#) 页面的 Available Items 列表中。

当用户在 Selected 列表中插入数据条目 <Blank Line> 时，XReport 在该处插入一个空白行。利用该条目可控制文本项目中条目之间的间距。与常规数据条目不同的是，<Blank Line> 可以多次出现在 Selected 列表中。

利用 <User Text> 条目可以在文本项目中插入其它自定义文本。<User Text> 条目可以多次添加到 Selected 列表中，且每次都可以配置为显示不同的自定义文本。以 Headings（标题）的字体设置显示自定义文本。

Baseline Flags（基线标记）

[Quan Peak Summary](#)、[Quan ISTD Peak Summary](#)、[Quan Peak Table](#)、[Qual Peak Table](#)、[Qual Summary Table](#) 和 [Quan Summary Table](#) 项目具有一个可用 Baseline 标记字段，用于显示数据系统如何检测当前峰的左缘和右缘。标记以成对形式显示，其中首字母代表左峰缘的检测方法，第二个字母代表右峰缘的检测方法。

以下为 Baseline 标记。

表 76. Baseline 标记

标记	描述
B	Baseline（基线）：峰缘处于基线水平。
V	Valley（峰谷）：峰缘处于峰谷。
M	Manual（手动）：峰缘已经过手动调整。
S	Stripe（条纹标记）：峰缘达到方法中指定的 Constrain Peak Height Percent（限定峰高百分比）。
T	Tail（拖尾）：峰缘在达到 Height Percent（峰高百分比）之前先达到 Constrain Peak Height Tailing Factor（限定峰高拖尾因子）限值。
-	Tilt（倾斜）：在确定峰缘之前发生了错误。
?	Unknown（未知）：发生未知的错误。

Data Flags（数据标记）

XReport 能够在 [Quan Summary Table](#)、[Quan ISTD Peak Summary](#)、[Quan Peak Table](#) 和 [Quan Summary Table](#) 项目中显示 Data Flag（数据标记）字母，以指示峰何时超过在 Quan Browser 中指定的峰面积或峰高阈值。以下为可以显示的数据标记。

表 77. Data 标记

标记	描述
A	代表峰面积超出指定容许偏差。
H	代表峰高超出指定容许偏差。

Calibration Flags（校正标记）

XReport 能够在 [Quan Peak Summary](#)、[Quan Summary Table](#) 和 [Quan Peak Table](#) 项目中显示 Calibration Flag 字母，以指示何时某个峰特征超过在 Quan Browser 中指定的值。以下为可以显示的校正标记。

表 78. Calibration 标记

标记	描述
E	Detection Limit（检测限）：代表已定量峰的浓度检测阈值超过指定容许偏差。
L	Carry Over Limit（残留限）：代表已定量峰的浓度残留阈值超过指定容许偏差。
Q	R-Squared（决定系数）：代表决定系数超出指定容许偏差。
U	Quantitation Limit（定量限）：代表已定量峰的浓度定量阈值超过指定容许偏差。
Y	Linearity Limit（线性上限）：代表已定量峰的浓度线性阈值超过指定容许偏差。

报告模板

XReport 模板是定义 Xcalibur 报告的目录、布局和风格的 XReport 文档（.xrt 文件）。可以在报告模板中加入部分和报告项目。在以 Xcalibur 数据（数据源文件）解析（组合）数据模板时生成 Xcalibur 报告。

XReport 提供多个可供使用的 Xcalibur 2.0 报告模板范本。这些模板位于 Xcalibur\Templates 文件夹内，如下所述。

表 79. XReport 模板（第 1 页，共 2 页）

报告名称	描述	所需文件
CalibrationFile (校正文件)	用于报告校正数据。	.raw, .xcal
CompCalReport (组分校正报告): _Avalon, _Genesis, _ICIS	生成显示处理方法详细信息、校正曲线和样品表格 (Quan 结果) 的总结报告。该报告与来自 Xcalibur 批处理和 Quan Browser 的结果一同使用。	.rst, .raw, .pmd, .sld
CustLibrSearRept (自定义库检索报告) LibrarySearchReport (库检索报告)	生成显示 Qual 峰和库检索详细信息的 Qual 样品报告。该报告与来自 Xcalibur 批处理的结果一同使用。	.rst, .raw
IonRatio Confirmation (离子比率确认)	生成包含非图形离子比率确认结果的 Quan 样品报告。	.rst, .raw, .pmd
IonRatio Confirmation (离子比率确认): Graphical (图像)、 GraphicalSimple (简单图像)、 GraphicalStacked (堆叠图像)	生成包含图形离子比率确认结果的 Quan 样品报告。在使用 Chromatogram Properties 对话框和向导时，这些报告模板充分利用确认定性离子设置。	.rst, .raw, .pmd
Peak Integration (峰积分)	生成包含由 Genesis 峰积分算法计算所得的峰积分数据的 Quan 样品报告。	.rst, .raw, .pmd
ProcessingMethod (处理方法): _Avalon, _Genesis, _ICIS	生成处理方法报告。该报告与来自 Xcalibur Processing Method Setup (处理方法设置) 的结果一同使用。	.pmd
QualPeak Report (定性峰报告)	生成一个简单的 Qual 样品报告。该报告与来自 Xcalibur 批处理的结果一同使用。	.rst, .raw
QuanPeakResults (定量峰结果): _ISTD, _ESTD QuanResults (定量结果) QuanSimple (简单定量)	生成 Quan 样品报告。该报告与来自 Xcalibur 批处理或 Quan Browser 的结果一同使用。	.rst, .raw, .pmd
QuantifySampleReport (定量样品报告)	生成包含色谱图和一个 Quan 总结表格的 Quan 样品报告。	.sld, .pmd, .rst, .raw

表 79. XReport 模板（第 2 页，共 2 页）

报告名称	描述	所需文件
Sequence Report（序列报告）	生成显示已处理序列的总结报告。该报告与来自 Xcalibur 批处理的结果一同使用。	.sld
Spectrum Candidates（候选质谱图）	生成 Quan 样品报告（仅适用于 GC/MS）。该报告与来自 Xcalibur 批处理或 Quan Browser 的结果一同使用。	.rst, .raw

术语表

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

Numerics

1st Trace Type 第一个谱图类型

2nd Trace Type 第二个谱图类型

3D 三维

Symbols

号

%Diff 百分比偏差

%RSD 相对标准偏差

A

A/D Card A/D 卡

A/D Card Ch 1-4 A/D 卡通道 1-4

ABS 绝对值

Absolute 绝对

Absolute Window % 绝对窗口百分比

Acquisition and Processing User Guide 采集
和处理用户手册

Acquisition Date 采集日期

Action(s) 操作

Actual Ion Ratio % 实际离子比率百分比

Actual RT 实际保留时间

Actual RT% Diff 实际保留时间和百分比偏差

Actual RTSignal To Noise 实际保留时间和信
噪比

Add 添加

Add All 添加所有

Add Function 添加函数

Advanced 高级

Advanced Detection Options 高级检测选项

Advanced Labeling 高级标签

Advanced Qual Peak Annotation Options 高级
定性峰注解选项

Advanced Quan Peak Annotation Options 高级
定量峰注解选项

Align 对齐

Align Bottom 置底对齐

Align Left 左对齐

Align Right 右对齐

Align Top 置顶对齐

All Peaks 所有峰

All Programs 所有程序

All Qual Peaks 所有定性峰

All Quan Traces 所有定量谱图

All the Same 一致

Amount 量

Analog 模拟

Analog 1-4 模拟 1-4

AND 和

Annotation 注解

Annotation Font 注解字体

Annotation Properties 注解属性

Append to User Library 添加到用户库

Apply 应用

Area 峰面积

Area Noise Factor 峰面积噪声因子

Area Ratio 峰面积比率

Area Scan Window 峰面积扫描窗口

Area Tail Extension 峰面积尾扩展

Area Threshold 峰面积阈值

Area% 峰面积百分比

Arrangement 排列

Ascending 升序

Attributes 性质

Authorization Manager 授权管理器

Auto 自动

Auto Align 自动对齐

Auto Zero 自动调零

Autofilter 自动过滤器

Automatic 自动

Availability 可用性

Available Columns 可用列

Available Groups 可用组

Available Items 可用条目

Available Objects 可用项目

Available Sections 可用部分

Avalon Peak Integration/Detection Avalon
峰积分 / 检测

Avalon Qual Events table Avalon 定性事件表

Avalon Quan Events table Avalon 定量事件表

Avalon Smoothing Points Avalon 平滑点

Average 平均

Average Response Factor 平均响应因子

Average Scan Filter Selection 平均扫描过滤器选择

Axes 坐标轴

Axis 坐标轴

B

Back 返回

Background Subtraction 背景扣除

Background Subtraction Left Region 扣除左侧区域背景

Background Subtraction Right Region 扣除右侧区域背景

Barcode 条形码

Barcode Status 条形码状态

Base Line Specified Amount 基线和指定量

Base Peak 基峰

Base Peak $\pm$ Mass Range 基峰 $\pm$ 质量数范围

Baseline 基线

Baseline and Noise Window 基线和噪声窗口

Baseline Clipping 基线裁剪

Baseline flags 基线标记

Baseline Noise Tolerance 基线噪声容许偏差

Baseline Window 基线窗口

Batch Processing 批次处理

Batch Reprocess 批次重新处理**Batch Reprocess Setup** 批次重新处理设置**Bitmap** 位图**Bitmap File** 位图文件**Bitmap Properties** 位图属性**BL** 基线**Blank Line** 空白行**Both** 两者都 / 同高同宽**Bottom** 底部 / 置底**Boxed** 加框**Browse** 浏览**Buttons** 按钮**C****Cal File** 校正文件**Cal Level** 校正水平**Cal Settings** 校正设置**Calculated Amount** 计算量**Calculated AmountArea Ratio** 计算量和峰面积比**Calibration and Quantitation Flags** 校正和定量标记**Calibration By** 校正方式**Calibration File** 校正文件**Calibration File Table** 校正文件表**Calibration Flag** 校正标记**Calibration Level** 校正水平**CalibrationFile** 校正文件**Cancel** 取消**Cand. #** 候选号**Carry Over Limit** 残留限**Cas #** CAS 号**Center** 居中**Center Horizontally** 水平居中**Center In Page** 页内居中**Center Vertically** 垂直居中**Channel A - D** 通道 A-D**Chromatogram** 色谱图**Chromatogram Properties** 色谱图属性**Chromatogram Type** 色谱图类型**Chromatography By** 色谱模式**Clear** 清除**Close** 关闭**Coelution Passed** 共洗脱通过**Coelution test pass/fail** 共洗脱测试通过 / 未通过**Column Header** 列标题**Column List** 列列表**Column Overload** 色谱柱过载**Column Properties** 色谱柱属性**Columns** 列 / 分栏**Combine** 组合**Comment(s)** 注释**Common Normalization For All Traces** 所有谱图归一化处理相同**CompCalReport** 组分校正报告**Component** 组分**Component Cal (Calibration) Curve** 组分校正曲线**Component Cal Curve** 组分校正曲线**Component Cal Level Table** 组分校正水平表**Component Cal[ibration] Curve** 组分校正曲线

Component Calibration Curve 组分校正曲线

Component Calibration Curve Properties 组分校正曲线属性

Component Concentration 组分浓度

Component Detect 组分检测

Component Found 找到组分

Component Ident 组分识别

Component IdentDetectCal Settings 组分的识别检测校正设置

Component ISTD Settings 组分内标设置

Component ISTD Settings Summary 组分内标设置总结

Component Key 组分关键字

Component List 组分列表

Component Name 组分名称

Component QC Level Table 组分质控水平表

Component Settings Summary 组分设置总结

Component Spectrum Table 组分质谱图表

Component Sys Suit 组分系统适用性

Component Sys Suit/Flags Settings 组分系统适用性 / 标记设置

Component Type 组分类型

Compound Name 化合物名称

Compound Structure 化合物结构

Concave 凹形抑制

Configuration 配置

Configure 配置

Configure Component Calibration Curve 配置组分校正曲线

Configure Function 配置功能

Configure How The Peak Window Will Look 配置峰窗口外观

Configure Normalization for the Chromatogram 配置色谱图归一化方法

Configure Repeating Section 配置重复部分

Configure User Column Parameters 配置用户列参数

Confirmation Ions 确认离子

Constrain Peak Height Tailing Factor 限定峰高拖尾因子

Copy 复制

COUNT 计数

Created By 创建人员

Created By First 创建人员在前

Creating and Searching Libraries User Guide 创建和检索库用户手册

Current Data Path 当前数据路径

Current Processing Method 当前处理方法

Current Sorting Configuration 当前排序配置

Current User Must Sign 当前用户必须签名

CustLibrSearRept 自定义库检索报告

Custom 自定义

Custom Peak Labels 自定义峰标签

Custom Text Label 自定义文本标签

Custom Width 自定义宽度

Cut 剪切

Cutoff Threshold 截止阈值

D

Data 数据

Data Flag 数据标记

Data File 数据文件

Data File Name 数据文件名

Data Label 数据标签

Data Source Browser 数据源浏览器**Data Sources** 数据源**Date and Time** 数据和时间**Decimal Setting** 小数设置**Decimals** 小数**Delay** 延迟**DELETE** 删除**Delete Section** 删除部分**Delta** 差值**Demo File** 演示文件**Demo Peak** 演示峰**Descending** 降序**Description** 描述**Detect** 检测**Detect Baseline Clipping** 检测基线裁剪**Detect Column Overload** 检测色谱柱过载**Detect Minimum Signal-To-Noise Ratio** 检测
最小信噪比**Detect Peak Width** 检测峰宽**Detect Tailing** 检测拖尾**Detection Flags** 检测标记**Detection Limit** 检测限**Detection Options** 检测选项**Detector** 检测器**Detector Delay** 检测器延迟**Detector Type** 检测器类型**Dil Factor** 稀释因子**Dilution** 稀释**Dilution Factor** 稀释因子**Dilution Factor table** 稀释因子表**Display** 显示**Display Column Labels** 显示列标签**Divisions** 分割数**Do Not Show This Dialog Again** 不再显示该对话框**Draw Backdrop** 绘制背景

E

Each peak contained on its own page(s) 每个峰包含在各自页面上**Edit** 编辑**Edit Formula** 编辑公式**Edit Formula For** 编辑公式**Edit Object** 编辑项目**Electronic Signature Properties** 电子签名属性**Electronic Signature table** 电子签名表**Electronic Signature(s)** 电子签名**Element Constraints Enabled** 启用元素限定**Element Infiltration** 元素渗透**Elements in Compound** 化合物中的元素**Elevation** 仰角**Enable** 启用**Enable Explicit Peak Type** 启用明确峰类型**Enable Smoothing** 启用平滑**End RT** 结束保留时间**Enhance** 优化**Enhancement** 优化**ENTER** 回车**Event** 事件**Event OPCode** 事件操作码

Exclude 排除

Exclude Component Type 排除组分类型

Excluded 已排除

Exit 退出

Expand 扩展

Expected Peak Width 预期峰宽

Expected Retention Time 预期保留时间

Expected RT 预期保留时间

Explicit Chromatogram Type 明确指定色谱图类型

Explicitly Specify the Chromatogram's Behavior 明确指定色谱图操作

F

FALSE 假

File 文件

File Name 文件名

Filter 过滤器

Filter Width 过滤器宽度

Finish 完成

First Mass - Last Mass 首质量数 - 末质量数

First Order 第一次序

First Order - Ascending/Descending 第一次序 - 升序 / 降序

First Page/Last Page 首页 / 末页

First Row# - Last Row# 首行号 - 末行号

firsttime-secondtime 第一个时间 - 第二个时间

Fixed Scale 固定刻度

Flags 标记

Flags Settings 标记设置

Font 字体

Font Properties 字体属性

For Detector = MS 对质谱检测器

Formatting 格式

Formula 公式

Forward Fit 正向拟合

Forward fitStart RT 正向拟合和起始保留时间

Found RT 找到保留时间

Found RTHeight 找到保留时间和峰高

From Detector 从检测器

Full Name 全名

Function(s) 函数

G

General 一般

Genesis Apex Detection Genesis 峰顶检测

Genesis Background Subtraction Genesis 背景扣除

Genesis Constrain Peak Width Genesis 限定峰宽

Genesis Identify By Genesis 识别方法

Genesis Minimum Peak Height Genesis 最小峰高

Genesis Peak Detection Genesis 峰检测

Genesis Peak Edge Detection Genesis 峰边缘检测

Genesis Peak Height Genesis 峰高

Genesis Peak Integration/Detection Genesis 峰积分 / 检测

Genesis Smoothing Points Genesis 平滑点

Genesis Tailing Factor Genesis 拖尾因子

Genesis Valley Detection Genesis 峰谷检测

Graphic 图像

Graphical 图像

GraphicalSimple 简单图像

GraphicalStacked 堆叠图像

Grid Spacing 网格间距

H

Heading Font 标题字体

Headings 标题

Height 峰高

Height Percent 峰高百分比

Height Ratio 峰高比率

Height Threshold 峰高阈值

Help 帮助

High Mass 高质量数

Hit Spectrum 目标质谱图

Home Page 主页

Horizontal 水平

Horizontal alignment 水平对齐

Horizontal Spacing 水平间距

I

ICIS Advanced Parameters ICIS 高级参数

ICIS Constrain Peak Width ICIS 限定峰宽

ICIS Identify By ICIS 识别方法

ICIS Minimum Peak Height ICIS 最小峰高

ICIS Peak Height ICIS 峰高

ICIS Peak Integration/Detection ICIS 峰积分 / 检测

ICIS Smoothing Points ICIS 平滑点

ICIS Tailing Factor ICIS 拖尾因子

Identification 识别

Identity 一致性

Implicit Quan Peak Options 默认定量峰选项

Include 包含

Include Blanks 包含空白样

Include Data Label 包含数据标签

Include QCs 包含质控样

Include Sample Reports 包含样品报告

Include spacing between a label and its data 在数据和其标签之间包含间距

Include Spacing Between Data Label and Its Data 数据标签和其数据之间有间距

Include Standards 包含标样

Include Summary Report 包含总结报告

Include The Title In The Resolved Report

在已解析报告中包含标题

Include the title on the resolved report

在已解析报告上包含标题

Include Unknowns 包含未知样

Individually 分别

Inj Vol 进样体积

Injection Volume 进样体积

Inst Method 仪器方法

Instrument Method 仪器方法

INT 取整

Intensity 强度

Intensity Range 强度范围

Internal Standards 内标化合物

Ion Ratio Confirmation Results Table 离子比率确认结果表

Ion Ratio Confirmation settings 离子比率确认设置

Ion Ratio Confirmation table 离子比率确认表

Ion Ratio Passed 离子比率通过

Ion Ratio Status 离子比率状态

Ion Ratio Test Target % 离子比率测试目标百分比

Ion Ratio Test Window % 离子比率测试窗口百分比

IonRatio Confirmation 离子比率确认

IRC Settings Table 离子比率确认设置表

IRC Summary Table 离子比率确认总结表

ISTD 内标化合物

ISTD Amount 内标量

ISTD Area 内标峰面积

ISTD Corr Amt 内标校正量

ISTD Height 内标峰高

ISTD Name 内标名称

ISTD NameBase Line 内标名和基线

ISTD Response 内标响应

K

Keys 提示

Kind 类型

L

Label Styles 标签风格

Label Threshold 标签阈值

Label With 标签为

Label(s) 标签

Largest Peak In All Times 所有时间内的最高峰

Largest peak in mass range 质量数范围内的最高峰

Largest Peak In Range 范围内的最高峰

Largest Peak In Scan 扫描范围内的最高峰

Largest Peak In Selected Time Range 选定时间范围内的最高峰

Largest Peak In Subsection 分段内的最高峰

Last Modification 上次修改

Layered App Name 分层应用程序名称

Layered App Version 分层应用程序版本

Layout 布局

Left 左侧 / 左对齐

Left Region Width 左区域宽度

Left To Right 从左至右

Level 水平

Lib. Search Graph Table 库检索图像表

Lib. Search Results Table 库检索结果表

Library 库

Library Search Constraints 库检索限定

Library Search Graphics 库检索图像

Library Search Graphics Results 库检索图像结果

Library Search Graphics Table 库检索图像表

Library Search Graphics Table Properties

库检索图像表格属性

Library Search Options 库检索选项

Library Search Results 库检索结果

Library Search Results Table 库检索结果表

Library Search Results Table Properties 库检索结果表格属性

LibrarySearchReport 库检索报告

Limit number of reported peaks or components 报告峰或组分限值

Limit number of reported peaks or components to 将报告峰或组分数限制为

Limit Peaks 限制峰

Limit Repeating Records maximum 重复记录最大限值

Limit Scan Wavelength Range 限制扫描波长范围

Linearity Limit 线性上限

Lock Template 锁定模板

Locked 已锁定

Logon Name 登录名

Low Mass 低质量数

low mass/wavelength - high mass/wavelength

低质量数 / 波长 - 高质量数 / 波长

lowmass-highmass 低质量数 - 高质量数

M

m/z 质荷比

Make Same Height 同高

Make Same Height and Width 同高同宽

Make Same Size 同尺寸

Make Same Width 同宽

Manual 手动

Mass 质量数

Mass Range 质量数范围

Mass Range ± Mass Range 质量数范围 ± 质量数范围

Mass Spectral Peak Constraints Enabled 启用质谱峰限定

Mass Spectral Peak Measurement 质谱峰测量

Mass/Intensity 质量数 / 强度

Mass/Wavelength 质量数 / 波长

Match 匹配

Match Factor 匹配因子

MatchArea 匹配面积

MAX 最大值

Max # Of Hits To Display 需显示的最大目标数

Max. Peak Width 最大峰宽

Maximum Number of Hits 最大目标数

MIN 最小值

Min. Number of Scans in Baseline 基线中的最小扫描数

Min. Peak Width 最小峰宽

Minimum Masses Required 所需最小质量数

Minimum Peak Height 最小峰高

Minimum Peak Width 最小峰宽

Minimum Percent of Masses Found 所得的最小质量数百分比

MOD 求余

Molecular Formula 分子式

Molecular Weight 分子量

Molecular Weight Range 分子量范围

Move Down 下移

Move Up 上移

MS 质谱

MS Quan 质谱定量

Multiple Quan Traces 多定量谱图

Multiplet Resolution 多重分辨率

N

Name 名称

Name Fragment 名称片段

Neutral Fragment 中性碎片

New 新建

New Sample New Row 新样品新行

Next 下一步

Next Page/Prev Page 下一页 / 上一页

No page breaks between the individual peaks 单个峰之间没有分页符

Noise Method 噪声方法

Noise Threshold 噪声阈值

None 无

Normalization 归一化

Normalize Each Plot To 归一化每个谱图为

Normalize Method 归一化方法

Normalize Multiple Scans 归一化多次扫描

Normalize To 归一化为

NOT 非

nRow 行号

Num 号

Num. of Peak Width for Noise Detection 用于噪声检测的峰宽数

Number Of Columns 列数

Number of Scans in Background 背景中的扫描数

Number to Select 选择数

O

Objects 项目

Offset 偏移

OK 确定

Open 打开

Open Report Template 打开报告模板

Operator 运算符 / 操作人员

Options 选项

OR 或

Order By 排序方式

Ordering 排序

Ordering Direction 排序方向

Original Data Path 原始数据路径

Other 其他

Other Databases 其他数据库

Over Failure Threshold 过载未通过阈值

Over Peak Height 过载峰高

Overlaid QI Identifier 重叠 QI 标识符

Overlay (3D) 三维叠加

low Mass/Wavelength - High Mass/Wavelength 低质量数 / 波长 - 高质量数 / 波长

P

Page [a] of [b] 第 a 页，共 b 页

Page Break 分页符

Page break after the repeating section 分页符在重复部分之后

Page break before the repeating section 分页符在重复部分之前

Page Breaks 分页符

Page Setup 页面设置

Page X of Y 第 X 页，共 Y 页

Parameters 参数

Paste 粘贴

Path 路径

PDA 光电二极管阵列

Peak 峰

Peak Area	峰面积	Point To Point	点对点
Peak Area Intensity	峰面积强度	Points	点数
Peak Classification Parameters	峰分类参数	Point-to-Point	点对点
Peak Coverage	峰覆盖率	Position	位置
Peak Detection Algorithm	峰检测算法	Preferences	首选
Peak Height	峰高	Preview	预览
Peak Height Intensity	峰高强度	Print	打印
Peak Identification	峰识别	Print Report(s)	打印报告
Peak Integration	峰积分	Print Sample Reports	打印样品报告
Peak Integration Report, Page 1	峰积分报告, 第一页	Print Summary Reports	打印总结报告
Peak Integration Report, Page 2	峰积分报告, 第二页	Printer Activity	打印机活动
Peak Integration Report, Page 3	峰积分报告, 第三页	Printing	正在打印
Peak Integration Report, Page 4	峰积分报告, 第四页	Probability	概率
Peak List	峰列表	Proc Meth	处理方法
Peak Noise Factor	峰噪声因子	Proc Method	处理方法
Peak Purity	峰纯度	Proc. Method Programs Table	处理方法程序表
Peak Purity Options	峰纯度选项	Proc. Method Sample Reports Settings Table	处理方法样品报告设置表
Peak Response Intensity	峰响应强度	Proc. Method Sample Reports Table	处理方法样品报告表
Peak S/N Cutoff	峰信噪比截止值	Proc. Method Summary Reports Settings Table	处理方法总结报告设置表
Peak Status	峰状态	Proc. Method Summary Reports Table	处理方法总结报告表
Peak Top Region	峰顶区域	Process Rows	处理行
Peak Type	峰类型	Processing	处理
Peak Width	峰宽	Processing Actions	处理操作
Percent of Highest Peak	最高峰的百分比	Processing Method	处理方法
Plot Type	谱图类型	Processing Method - General	处理方法 - 一般
Plot Type and Enhancement	谱图类型和优化	Processing Method - Qual	处理方法 - 定性
Plotting	绘图	Processing Method File	处理方法文件

Processing Method Programs table 处理方法程序表

Processing Method Sample Reports Settings table 处理方法样品报告设置表

Processing Method Setup 处理方法设置

Processing Method Summary Reports Settings table 处理方法总结报告设置表

Processing Setup 处理设置

ProcessingMethod 处理方法

PRODUCT 乘积

Program or Macro Name 程序或宏名称

Properties 属性

Q

QC 质控样

QC Failed 质控未通过

QC Level 质控水平

QCs 质控样

QL 定性

QN 定量

Qual 定性

Qual Browser 定性浏览器

Qual Peak 定性峰

Qual Peak RT 定性峰保留时间

Qual Peak Table 定性峰表

Qual Peak to Display 要显示的定性峰

Qual Repeating 定性重复

Qual Result Based Chromatogram 基于定性结果的色谱图

Qual Result Based Chromatogram Type 基于定性结果的色谱图类型

Qual Results 定性结果

Qual Results Based Chromatogram 基于定性结果的色谱图

Qual Summary Table 定性总结表

Qualifier Ion # 定性离子号

Qualifier Ion Found 找到定性离子

Qualifier Ion Peak 定性离子峰

Qualitative Analysis User Guide 定性分析用户手册

QualPeak Report 定性峰报告

Quan 定量

Quan Browser 定量浏览器

Quan Component 定量组分

Quan ISTD Peak Summary 定量内标峰总结

Quan Mass 定量质量数

Quan Mass (QM) trace 定量质量数谱图

Quan Peak 定量峰

Quan Peak Summary 定量峰总结

Quan Peak Table 定量峰表

Quan repeating 定量重复

Quan Results Based Chromatogram 基于定量重复的色谱图

Quan Summary Table 定量总结表

Quan Traces 定量谱图

QuanPeakResults 定量峰结果

QuanResults 定量结果

QuanSimple 简单定量

QuantifySampleReport 定量样品报告

Quantitation Flags 定量标记

Quantitation Limit 定量限

Quantitative Analysis User Guide 定量分析用户手册

R	
Range	范围
Raw	原始
Raw Data File	原始数据文件
Raw File Based Chromatogram	基于原始文件的色谱图
Recently Used Files	最近使用的文件
Recomputation Interval	重新计算间隔
Refine	精简
Region End	区域终点
Region Start	区域起点
Relative	相对
Relative Peak Height Threshold	相对峰高阈值
Relative To	相对于 / 相关于
Remove	移除
Remove All	移除所有
Repeat type	重复类型
Repeat Type – Sample repeat	重复类型 – 样品重复
Repeat Type – Summary repeat	重复类型 – 总结重复
Repeating Records Maximum	重复记录最大值
Repeating Section Configuration	重复部分配置
Repeating Section Excludes	重复部分排除
Repeating Section Ordering	重复部分排序
Repeating Section Properties	重复部分属性
Report	报告
Report Footer	页脚
Report Header	页眉
Report Info	报告信息
Report Name	报告名称
Report Noise As	将噪声报告为
Report Template Grid	报告模板网格
Report Template Name	报告模板名
Report Template Outline	报告模板轮廓
Report Types	报告类型
Reports	报告
Reports Dialog	报告对话框
Reports view of the Processing Setup	处理设置的报告视图
Reset to Original Size	重设为原始尺寸
Resolution	分辨率
Resolution Parameters	分辨率参数
Resolution Threshold	分辨率阈值
Resolve Report	解析报告
Response	响应值
Response Area ISTD	响应峰面积和内标
Response Expected RT	响应值和预期保留时间
Response Factor	响应因子
Response Ratio	响应比
Result File	结果文件
Retention Time	保留时间
Retention Time Reference	保留时间参考
Retention Time Window	保留时间窗口
Reverse Fit	逆向拟合
Reverse fitEnd RT	逆向拟合和结束保留时间
Reverse Match Factor	逆向匹配因子
Reverse Search	逆检索
Revision	修订

Right 右侧 / 右对齐

Right Region Width 右区域宽度

Rise % 上升百分比

Rotated 旋转

ROUND 四舍五入

RSI 逆检索相似度

R-Squared 决定系数

RT 保留时间

RT Labeling 保留时间标签

Run Rows 运行行

Run Sample 运行样品

Run Sequence 运行序列

Run This Sample 运行此样品

Run This Sequence 运行此序列

Run Time 运行时间

S

S/N 信噪比

S/N Threshold 信噪比阈值

Sample 样品

Sample Choices 样品选择

Sample Header 样品标题

Sample Header Properties 样品标题属性

Sample ID 样品识别号

Sample Name 样品名称

Sample repeat 样品重复

Sample table 样品表

Sample Table (Quan Results) 样品表 (定量结果)

Sample Table properties 样品表属性

Sample Type 样品类型

Sample Vol 样品体积

Sample Volume 样品体积

Sample Weight 样品质量

Sample Wt 样品质量

Saturated 饱和

Saturation 饱和

Save 保存

Save As 另存为

Scan # 扫描数

Scan Filter 扫描过滤器

Scan Number 扫描数

Scan Threshold 扫描阈值

Scans 扫描

Search Libraries 检索库

Search Type 检索类型

Search with MW 检索特定分子量

Second Order 第二次序

Second Order - Ascending/Descending 第二次序 - 升序 / 降序

Sections 部分

Select A Peak 选择一个峰

Select All 全选

Select By 选择方法

Select Chromatogram Style 选择色谱图风格

Select Chromatogram Type 选择色谱图类型

Select Component 选择组分

Select Demo File 选择演示文件

Select Enhance Details 选择优化细节

Select How The Chromatogram Axes Will Be Configured 选择色谱图坐标轴的配置方法

Select How the Chromatogram Axis Will Be Configured 选择色谱图坐标轴的配置方法

Select Mass Spectrum Quan Traces 选择质谱定量谱图

Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 选择需显示的质谱定量谱图

Select Plot Details 选择谱图细节

Select Qual Peak 选择定性峰

Select Raw Data File 选择原始数据文件

Select Report Samples 选择报告样品

Select Samples 选择样品

Select Table Fields 选择表格域

Select the Peak Labeling 选择峰标签

Select the Qual Peak 选择定性峰

Select the Quan Peak 选择定量峰

Select Top Peaks 选择最高峰

Selected 已选

Selected Columns 所选列

Selected Samples 所选样品

Sequence List File 序列列表文件

Sequence Operations 序列操作

Sequence Report 序列报告

Sequence Setup 序列设置

Sequence Table 序列表

Set Custom Window Width 设置自定义窗口宽度

Set Table Font 设置表格字体

Set Table Sort Filter 设置表格排序过滤器

Shade 阴影

Short Wavelength - Long Wavelength 短波长 - 长波长

Show all Qual peaks 显示所有定性峰

Show All Qual Peaks In Result File 显示结果文件中的所有定性峰

Show Baselines 显示基线

Show Only Found Components 仅显示找到组分

Show Page End 显示页面末端

Show Peak Spectrum 显示峰质谱图

Show QI Peak Label 显示 QI 峰标签

Show Template Configuration 显示模板配置

Shrink Wrap 收缩

SI 正检索相似度

SIGN 符号

Signal To Noise 信噪比

Signal to Noise Ratio 信噪比

Signal-to-Noise 信噪比

Signal-To-Noise Ratio 信噪比

Signature Information Order 签名信息顺序

Signature List 签名列表

Signature List Groups 签名列表组

Signatures req' d 需要签名

Signed By 签名人员

Signed By First 签名人员在前

Similarity 相似性

Simulate Report 模拟报告

Size 大小

Skew 倾斜角

Smoothing 平滑

Smoothing Details 平滑细节

Snap To Grid 对齐到网格线

Specified Amount 指定量

Spectrum 质谱图

Spectrum Candidate Results table 质谱图候选结果表

Spectrum Candidates 候选质谱图

Spectrum Enhancement 质谱图优化

Spectrum Enhancement Usage 质谱图优化用途

Spectrum List 质谱图列表

Spectrum List Table 质谱图列表表格

Spectrum List Table properties 质谱图列表表格属性

Spectrum Maximum 质谱图最高点

Spectrum Peak Identification Method 质谱峰识别方法

Spectrum Properties 质谱图属性

Split mass range 分割质量数范围

Split Time Range 分割时间范围

Stack (2D) 二维堆叠

Standard Dilution - Base Amount 标样稀释 - 基本量

Start 开始

Start RT 起始保留时间

Status Bar 状态栏

Std 标样

Stds 标样

Stick 棒状

Stripe 条纹标记

Style 风格

SUM 总和

Summary 总结

Summary repeat 总结重复

Symmetry 对称性

Symmetry Parameters 对称性参数

Symmetry Peak Height 对称峰高

Symmetry Threshold 对称性阈值

Sync 同步

Syntax 语法

System Suitability 系统适用性

System Suitability Flags 系统适用性标记

T

Table Configuration 表格配置

Table Properties 表格属性

Table(s) 表格

Tail 拖尾

Tail Failure Threshold 拖尾未通过阈值

Tail Peak Height 拖尾峰高

Tailing 拖尾

Target Compound 目标化合物

Target Compounds 目标化合物

Target Range % 目标范围百分比

Target Ratio 目标比率

Target % 目标百分比

Template 模板

Template Configuration 模板配置

Template File 模板文件

template name 模板名称

Test % 测试百分比

Text 文本

Text Object Properties 文本项目属性

Third Order – Ascending/Descending 第三次序 – 升序 / 降序

Threshold 阈值

TIC 总离子流图

Tilt 倾斜

Time 时间

Time Range 时间范围

Time Range 1 时间范围 1

Time Range 2 时间范围 2

Title 标题

Title Font, Heading Font, Cell Font 标题字体, 小标题字体, 单元格字体

Toolbars 工具栏

Top 置顶 / 最多

Top To Bottom 从上至下

Total Scan 全扫描

Trace 谱图

TRUE 真

Two Page 两页

Type 类型

U

Units 单位

Unk 未知样

Unknown 未知

Unks 未知样

Use advanced Qual peak annotation 使用高级定性峰注解

Use Advanced Quan Peak Annotation 使用高级定量峰注解

Use Container Supplied Qual or Quan Peak
使用储存器提供的定性峰或定量峰

Use Container Supplied Qual Peak 使用储存器提供的定性峰

Use Container Supplied Quan Peak 使用储存器提供的定量峰

Use Demo File 使用演示文件

Use ISTD Peak When Repeating On Component
当重复组分时使用内标峰

Use Processing Method Properties For Plot Type And Enhancement Info 使用处理方法属性设置谱图类型和优化信息

Use processing method properties for plot type... 利用处理方法属性设定谱图类型 ...

Use processing method properties... 使用处理方法属性 ...

Use Quan peak's associated Internal Standard 使用与定量峰相关的内标物

Use the Select Component 使用选择组分

User 用户

User Column Formula 用户列公式

User Column Title 用户列标题

User Columns 用户列

User Columns 1 to 5 用户列 1 至 5

User Labels 1 to 5 用户标签 1 至 5

User Library 用户库

User Text 用户文本

UV 紫外

V

Valid Traces 有效谱图

Valley 峰谷

Valley Detection 峰谷检测

Valley Detection Enabled 启用峰谷检测

Valley S/N 峰谷信噪比

Value 值

Value 2 值 2

Vertical 垂直

Vertical Spacing 垂直间距

Vial 样品瓶

View 查看

View Width 视图宽度

Void Time 死时间

W

Wavelength 波长

Wavelength Range 波长范围

Wavelength Range 1 波长范围 1

Wavelength Range 2 波长范围 2

Wavelength Range + Wavelength Range 波长范围 + 波长范围

Wavelength/Intensity 波长 / 强度

When Created 创建时间

Width 宽度

Width Peak Height 宽度峰高

Window 窗口

Window Size 窗口尺寸

X

X Axis X 轴

Xcalibur Administrator' s Guide Xcalibur 管理员手册

Xcalibur Getting Started (Quantitative Analysis) Xcalibur 入门手册（定量分析）

Xcalibur Help Xcalibur 帮助

Xcalibur System and 21 CFR Part 11 Compliance Administrator Guide Xcalibur 系统和 21 CFR Part 11 遵守性管理员手册

XReport Chromatogram XReport 色谱图

XReport Data Source Browser XReport 数据源浏览器

XReport User Guide XReport 用户手册

Y

Y Axis Y 轴

Z

Zoom 缩放

Zoom In / Zoom Out 放大 / 缩小

索引

Numerics

- 2- 列项目
 - Left to right 选项 97
 - Top to bottom 选项 97
 - 在含色谱图的非重复部分中 96
 - 在一个含色谱图和质谱图的非重复部分中 96
 - 在一个含色谱图和质谱图项目的非重复部分中 98

A

- Advanced Qual Peak Annotation Options
 - 参数 122
- Advanced Qual Peak Annotation Options 对话框
 - 设置 83
- Advanced Quan Peak Annotation Options 123
- Annotation Properties 对话框
 - Attributes 页面 50
 - 参数 148
 - Font 页面 51
 - 配置一个项目 50
- annotation 项目 177
- Avalon Qual Events table 161
- Avalon Quan Events table 161
- Average Scan Filter Selection 对话框 145

B

- Batch Reprocess Setup 对话框 33
- Bitmap Properties 对话框 149
- 保存模板 24
- 报告
 - 从 Quan Browser 生成 34
 - 从 Sequence Setup 生成 30
 - 从 Xcalibur 创建 30
 - 当批处理序列时生成 32
 - 当运行一个样品或序列时运行 31
 - 生成 12
 - 已解析（已结合）文件 7
 - 在 XReport 中创建 27
- 报告模板 189
- 报告模板网格 19
- 报告选项，在 Processing Setup 中 30
- 表格列，选择 53
- 表格排列次序，指定 56
- 表格配置向导 8

- 表格属性
 - 库检索结果 59
 - 库检索图表 58
 - 样品表格 59
 - 质谱图列表 60
- 表格属性，设置 58
- 表格项目 6

部分

- 报告 155
- 调整尺寸 16
- 非重复性 4, 155
- Qual repeating 157
- Quan repeating 158
- 删除 16
- 添加 16
- 页脚 4
- 页眉 4
- 重复 4
 - 配置 16
- 重复性
 - 配置 41
- 重排序 16

C

- Calibration File table 162
- Chromatogram Properties 对话框 65
- Chromatogram Properties 向导
 - Configure How the Peak Window Will Look 页面 124
 - Configure Normalization For The Chromatogram 页面 124
 - 参考 121
 - Select Chromatogram Style 页面 125
 - Select Chromatogram Type 页面 126
 - Select Component 页面 126
 - Select Demo File 页面 127
 - Select Enhance Details 页面 127
 - Select How The Chromatogram Axes Will Be Configured 页面 127
 - Select Mass Spectrum Quan Traces to Display 页面 128
 - Select Peak Labeling 页面 130
 - Select Plot Details 页面 129
 - Select the Qual Peak 页面 131
 - Select the Quan Peak 页面 131
 - Use Container Supplied Qual Peak 页面 132
 - Use Container Supplied Quan Peak 页面 132

Column Properties 对话框
 参数 150
 添加列 20

Component Cal Curve 项目 160

Component Cal Level table 162

Component IdentDetect Cal Settings (组分的识别 / 检测 / 校正设置) 177

Component Ion Ratio table 165

Component ISTD Settings Summary (组分内标设置总结) 177

Component QC Level table 163

Component Settings Summary (组分设置总结) 179

Component Spectrum table 163

Component Sys Suit/Flags Settings (组分系统适用性 / 标记设置) 180

Configure Component Calibration Curve 对话框 152

Configure Function 对话框 141

Configure Repeating Section 对话框
 参考 119
 Exclude 页面 120
 Ordering 页面 120
 Page Breaks 页面 121

创建
 模板 12

从 Quan Browser, 生成报告 34

从 Sequence Setup, 生成报告 30

从 Xcalibur
 创建报告 30

D

Data Sources 对话框
 参考 152
 选择数据源 28

Dilution Factor table 164

当批处理时, 生成报告 32

电子签名, 创建一个报告 36

调整部分尺寸 16

调整项目尺寸 18

对表格进行排序 56

对齐项目 18

E

Edit Formula For 对话框
 参数 140
 配置自定义列 55

Electronic Signature 164

F

Font 对话框 49, 57

非重复部分 4, 155

分页符 20, 160

G

格式项目 7

J

instrument method (仪器方法) 181

Ion Ratio Confirmation Results table 165

IRC Settings table 165

IRC Summary table 166

居中项目 19

L

Layout 菜单 116

Library Search Graphic Table Properties 对话框
 参数 145
 设置属性 59

Library Search Graphics table 166

Library Search Results table 167

Library Search Results Table Properties 对话框
 参数 145
 设置属性 59

列
 介绍 160
 配置 95
 使用 19
 在表格中调整尺寸 18
 重复行为 96
 总结重复 96-97

M

模板
 保存 24
 创建 12, 15
 定义 3
 概述 3
 锁定 24
 选择数据源 27
 预建 9
 预览 24

默认数据组 24

P

Page Setup 对话框 23

Preferences 对话框, 参考 153

Preview 窗口 24, 29, 153

processing method
 Programs table 168
 Qual 181

Sample Reports Settings table 169

sample table 169

Summary reports settings table 169

summary table 169

字段 181

总体 181
 配置
 表格项目 52
 色谱图 65
 位图项目 64
 文本性质 48
 XReport 项目 8
 质谱图 87
 重复部分 16
 注解项目 50
 组分校正曲线 86

Q

Qual Peak table 170
 Qual repeating 部分 157
 Qual Summary table 172
 Quan Browser 窗口 - Reports 对话框 34
 Quan ISTD Peak Summary (定量内标峰总结) 184
 Quan Peak Summary (定量峰总结) 184
 Quan Peak table 171
 Quan repeating 部分 158
 Quan Summary table 173
 启用 XReport 9
 签名, 电子 36

R

Repeating Section Configuration 对话框 8
 Repeating Section Properties 对话框
 Exclude 页面 42
 Ordering 页面 43
 Page Breaks 页面 44
 配置重复部分 17
 report info (报告信息) 185
 Report Template Outline 窗格 2
 report 项目 177
 Reports 视图 113
 Run Sequence 对话框 32

S

sample header (样品标题) 项目 185
 Sample table
 字段 174
 Sample Table Properties 对话框 59
 Save As 对话框 25, 154
 sections
 部分类型 4
 Select A Peak 对话框 125
 Select Component 对话框 86
 Select Report Samples 对话框 35
 Sequence table 175
 Spectrum Candidate Results table 176

Spectrum Configuration 对话框

 Axis 页面 133
 Enhance 页面 133
 Labels 页面 134
 Normalization 页面 135
 Options 页面 135
 Peak 页面 136
 Plot Type 页面 136
 Style 页面 137

Spectrum List Table Properties 对话框

 参考 142
 Display 页面 63, 142
 Enhancement 页面 143
 Options 页面 60, 144
 Plot Type 页面 177

Spectrum Properties 对话框

 Enhance 页面 89
 Labels 页面 91
 Normalization 页面 93
 Options 页面 87
 Plot type 页面 88
 Style 页面 90

色谱图, 配置 65

色谱图项目 159

删除

 部分 16

 项目 18

设置表格属性 58

设置表格字体 57

生成报告

 当运行一个样品或序列时 31

 利用报告模板 12

数据源浏览器 9

数据源文件 7

锁定模板 24

T

Table Properties 对话框

 Configure User Column Parameters 页面 54
 Set Table Sort Filter 页面 56

Table Properties 向导

 Configure User Column Parameters 页面 137
 参考 137
 Font 页面 139
 Select Table Fields 页面 138
 配置表格项目 52
 Set Table Sort Filter 页面 139

Template Configuration 对话框 155

Text Object Properties 对话框

 Attributes 页面 148
 参考 146
 Data 页面 45, 147
 Font 页面 49, 148
 添加自定义文本字段 46

- 添加
 - 部分 16
 - 项目 18
 - 自定义文本字段 46
- 图像项目 6
- 退出 XReport 13

W

- 网格，报告模板 19
- 位图项目
 - 配置 64
 - 细节 160
- 文本项目 5
- 文本性质，配置 48
- 文本字段
 - 配置 45
 - 添加自定义 46

X

- XReport 窗口
 - 功能 1
 - Report Template Outline 窗格 2
 - 新模板 11
- XReport 控制属性 132, 152
- 项目
 - 表格 6, 52, 103
 - 参考 177
 - 调整尺寸 18
 - 对齐 18
 - 格式 7
 - 居中 19
 - 配置 20
 - 配置位图 64
 - 删除 18
 - 添加 18
 - 图像 6
 - 文本 5, 101
 - 项目类型 4
 - 重新定位 18
 - 注解 50
- 选择表格列 53
- 选择数据源 27

Y

- 样品报告 30
- 样品表格
 - 属性 59
- 页脚部分 4
- 页眉部分 4
- 页面布局 23
- 已结合（已解析）文件 7
- 用户列，配置 53
- 预览模板 24

Z

- 在列中重复项目 96
- 在 Processing Setup 中，设置报告选项 30
- 在 XReport 中
 - 创建报告 27
- 指定表格排列次序 56
- 质谱图，配置 87
- 质谱图项目 159
- 重复部分 4
- 重排序部分 16
- 重新定位项目 18
- 自定义列，配置 53
- 自定义文本字段
 - 编辑 47
 - 添加 46
- 字体
 - 表格 57
 - 设置 22, 49
- 总结报告 30
- 组分校正曲线，配置 86
- 组分校正曲线配置向导 9