

- adjust_sample.csv
- generate_neg_csv_and_tmp_peak_boundaries_csv.py
- neg_ion_list_20210111(1).csv
- neg_is.csv
- pre_process.bat
- 备注.txt

固有文件

Q01_C
Q01_JSBLK
Q01_N
Q01_NC10
Q01_NC20
Q01_NC30
Q01_NC40
Q01_NC50
Q01_NC75
Q01_QC_1
Q01_QC_10
Q01_QC_11
Q01_QC_2
Q01_QC_3
Q01_QC_4

1. 进样表 adjust_sample.csv

ID	Q1	Q3	RT	Start	End
X001	173.12	127.113	1.33	1.29	1.38
X002	193.09	79.96	1.37	1.27	1.53
X004	239.09	151.11	1.65	1.58	1.75
X006	263.1	145.06	0.62	0.24	0.86

2. 离子对列表 neg_ion_list_xxx.csv

NB01
NB02
NB03
NB04
NB05
NB06
NB07
NB08
NB09
NB10
SP01
SP02
SP03
SP04
SP05

3. 内标表 neg_is.csv

original文件夹下准备输入文件

program文件夹下

固有程序

wiff文件夹

neg_02_20210112.wiff
neg_02_20210112.wiff.scan

Skyline积分

- data
- final
- ion
- original
- peak_boundaries
- program
- result
- skyline
- wiff
- 备用
- crc4500.sky
- run.bat
- run_main.py
- SkylineCommands.bat

执行完成 生成文件

模板 执行run.bat

- original
- program
- wiff
- 备用
- crc4500.sky
- run.bat
- run_main.py