

Agilent MassHunter Workstation 软件

定性分析

GC/MS 入门指南

Agilent Technologies

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2014

按照美国和国际版权法的规定，未经 Agilent Technologies, Inc. 事先同意和书面许可，不得以任何形式或采取任何手段（包括电子存储和检索或翻译成其他语言）复制本手册中的任何内容。

手册部件号

G3336-97024

版本

修订版 A， 2014 年 9 月

USA 印刷

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051 USA

Microsoft®、 Windows 7® 和 Excel® 在美国和 / 或其他国家（或地区）的注册商标。

软件修订版

本指南在被替换前适用于 Agilent MassHunter Workstation 软件 - 定性分析程序的 B.07.00 及更高版本。

担保

本文档包含的内容均按 “原版” 提供，在将来的版本中若有更改，恕不另行通知。而且，在适用法律允许的最大范围内， Agilent 不对本手册及其所包含的信息做出任何明示或暗示的担保，其中包括但不限于对适销性和对具体用途适用性的暗示的担保。Agilent 不对因提供、使用或执行本文档或其中所包含的信息而造成的任何错误或任何意外或附带的损失承担责任。如果 Agilent 与用户签有单独的书面协议，且协议中涉及本文档所含材料的担保条款与上述条款发生冲突，则该书面协议中的担保条款具有优先法律效力。

技术许可

本文档中所述的硬件和 / 或软件是依据许可提供的，且只能根据此类许可的条款进行使用或复制。

受限权利说明

美国政府受限权利。授予联邦政府的软件和技术数据权利仅包括通常提供给最终用户的那些权利。 Agilent 根据 FAR 12.211 （技术数据）和 12.212 （计算机软件）和（对于国防部）DFARS 252.227-7015 （技术数据 — 商品）以及 DFARS 227.7202-3 （商业计算机软件或计算机软件文档中的权利）来提供软件和技术数据方面的此常规商业许可。

安全声明

小心

小心提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。除非您已完全理解并满足所指出的条件，否则请不要忽视**小心**提示而继续进行操作。

警告

“警告” 提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会导致人身伤害或死亡。除非您已完全理解并满足所指出的条件，否则请不要忽视 “警告” 提示而继续进行操作。

本指南内容提要

本指南包含有关学习如何使用 Agilent MassHunter Workstation 软件 - 定性分析 GC/MS 数据的信息。

开始练习之前，请阅读第 5 页上的 “开始这些练习之前 ...”中的说明。

练习 1　了解定性分析的基本知识

在本练习中，您将探究定性分析程序的多种强大功能。无论您使用的数据类型是什么，这些任务都至关重要。

练习 2　查找和识别

在这些任务中，您可以在 GC/MS 数据文件中查找和识别化合物。

练习 3　使用工作流程、导出和打印

在这些任务中，您将学习如何设置和运行定性分析方法。然后将在打开数据文件时使用自动化方法执行操作。这些任务中的每一种都使用不同的工作流进行操作。

参考

在本章中，您将学习有关定性分析程序的基本知识。

新增功能

在 B.07.00 中

- 支持 Agile 2 积分器。
- 质谱库支持每个化合物有多个离子种类。 PCDL 中的种类信息在 “通过碎片确认按分子式查找”算法、“按 MFE 查找化合物”算法、“按自动 MS/MS 查找”算法以及 “按目标 MS/MS 查找”算法中使用。
- 改进了 EI 数据上的 MFG 碎片标注。
- 碎片确认支持 GC/Q-TOF EI 数据。
- “按分子特征查找化合物”算法现在支持所有离子 MS/MS 数据。
- 可使用 “碎片确认”算法创建包含定性离子的已整理的高能量质谱图。
- 在碎片确认的按分子式查找中，碎片离子来源的选项现在要么是仅限质谱库，要么是平均碎片质谱图，或者是其他质谱库。
- 在分子离子不存在的情况下可以进行碎片确认。
- 化合物表中提供**分数 （碎片）**列。
- 化合物表中提供**源**列。
- 谱库检索用户界面大大地简化了，可针对 LC 或 GC 特定的工作流程进行自定义。
- 单位质量和精确质量谱库支持链式谱库检索。
- 您可以根据单位质量和精确质量谱库来检索精确质量数据。
- 谱库检索算法增加了用于计算反向分数的规则 （避免只能计算一次）。
- 您可以打开 IM-MS 浏览器数据文件。

- 可以从 IM-MS 浏览器导入质谱图和色谱图。
- 可轻松地将 MS/MS 质谱图或碎片质谱图 (GC EI) 从定性分析发送到质谱库。
- 现在可以显示来自以下设备的色谱图：Compact LC 1220 DAD、 High Dynamic Range DAD、 Compact LC VWD 和 Compact LC 1220 VWD。
- 您可以自动启动 MassHunter 定量分析并从定性分析创建定量方法。

在 B.06.00 Service Pack 1 中

- 支持 Excel 2013 和 Excel 2010。
- 包括谱库 PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb。
- 包括新的所有离子 MS/MS 数据文件 (AIM_3CE(0-20-40).d)。还包括新的示例方法。

开始这些练习之前 ...

- 安装软件。有关说明，请参见 《安装指南》。
- 将安装磁盘上名为 **Data** 的未压缩格式文件夹复制到您硬盘上任意位置。

  此文件夹包含这些练习中需要使用的所有数据文件。您可能需要首先从其 .zip 格式文件中提取数据文件。

注意

不要重复使用系统中已存在的示例数据文件，除非您确信这些文件是从磁盘上的原始文件复制而来的，并且只有您使用过这些文件。如果系统中已存在的示例数据文件与磁盘上的原始文件不能完全匹配，则这些练习中所得到的结果可能与本指南中所显示的结果不匹配。

目录

练习 1 了解定性分析的基本知识 9

任务 1. 打开 “定性分析” 程序 10
任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面 12
任务 3. 放大和缩小色谱图 15
任务 4. 锚定色谱图 17
任务 5. 更改窗口布局 18
任务 6. 提取色谱图 20
任务 7. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分 22
任务 8. 计算系统适用性值 26
任务 9. 从色谱图中提取质谱图 29
任务 10. 添加注释 38
任务 11. 添加质量卡尺 42

练习 2 查找和识别 45

任务 12. 按色谱图解卷积查找化合物 45
任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物 49
任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM） 52
任务 15. 按积分查找化合物 55
任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物 58
任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库 66
任务 18. 保存结果 72

练习 3 使用工作流程、导出和打印 75

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法 76
任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程设置和运行方法 81
任务 21. 导出 CEF 文件 84
任务 22. 打印分析报告 85
任务 23. 打印化合物报告 88

参考 91

浏览器视图和化合物详细信息视图 92
使用窗口 93
处理 “数据浏览器”中的结果数据 96
对色谱图执行操作 97
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作 98
处理色谱图直观数据 99
使用质谱图直观数据 101
工作流程 102
自定义报告模板 106

练习 1
了解定性分析的基本知识

任务 1. 打开 “定性分析”程序 10
任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面 12
任务 3. 放大和缩小色谱图 15
任务 4. 锚定色谱图 17
任务 5. 更改窗口布局 18
任务 6. 提取色谱图 20
任务 7. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分 22
任务 8. 计算系统适用性值 26
任务 9. 从色谱图中提取质谱图 29
任务 10. 添加注释 38
任务 11. 添加质量卡尺 42

在本练习中，您将了解 “定性分析”程序的某些强大功能，该程序可用于处理 GC/Q-TOF 和 GC/QQQ 数据。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

任务 1. 打开 “定性分析” 程序

在此任务中，您可以使用当前方法来打开多个数据文件。

任务 1. 打开包含多个数据文件的 “定性分析” 程序

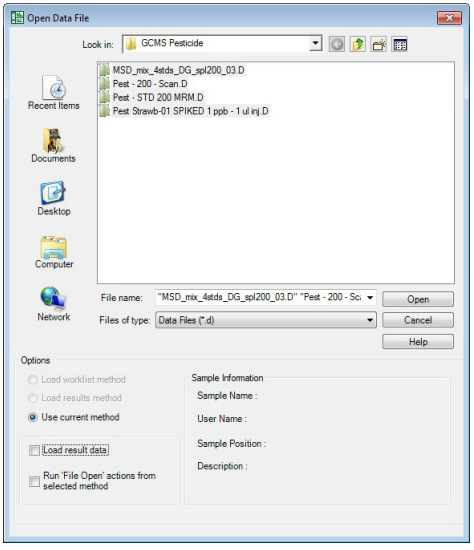
步骤	详细说明	注释
1 打开 “定性分析” 程序。 • 打开数据文件 **Pest - 200 - Scan.d**、 **Pest - STD 200 MRM.d**、 **Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d** 和 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d**，这些文件位于文件夹 **\\MassHunter\Data** 中，或在复制这些文件的文件夹中。	**a** 双击 **Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.07.00** 图标  。 系统将显示 “打开数据文件” 对话框。 **b** 转到文件夹 **\\MassHunter\Data\GCMS Pesticide** 或示例文件所在的文件夹。	• Pest - 200 - Scan.d 文件包含 MS 数据， Pest - STD 200 MRM.d 和 Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 文件包含 MS 和 MS/MS 数据 （所有 GC/QQQ）。MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 包含 GC/Q-TOF 数据。 • 当窗口处于活动状态时，通过按 F1 键可以获取大多数窗口、对话框和选项卡的帮助。 • 如果文件在其他文件夹，请单击 **文件 > 打开数据文件**。
• 确保选中**使用当前方法**按钮。 • 确保**调用结果数据**复选框已清除或显示为灰色。如果**调用结果数据**复选框不可用，则没有在数据文件中保存任何结果。可在第 72 页上的 “任务 18. 保存结果” 中了解如何保存结果。 • 确保**从所选的方法中运行 “文件打开” 操作**复选框处于未选中状态。		

图 1 打开软件时打开数据文件

任务 1. 打开包含多个数据文件的 “定性分析” 程序 （续）

步骤	详细说明	注释
	c 按住 **Shift** 键的同时单击 **Pest - 200 - Scan.d**、 **Pest - STD 200 MRM.d**、 **Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d** 和 **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d**。 **d** 单击**打开**。 “数据浏览器” 窗口中将显示所有的四个数据文件，“色谱图结果” 窗口中将显示 1 到 3 个色谱图。 **e** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的**列表模式**图标 。	• 如果按住 **Ctrl** 键，则可以选取列表中多个彼此不相邻的文件。 • 此时在主窗口中看到的内容取决于打开这些文件之前所使用的方法、布局、显示和图谱设置。 • 单击 “列表模式” 图标时，图标的背景将变为橙色。

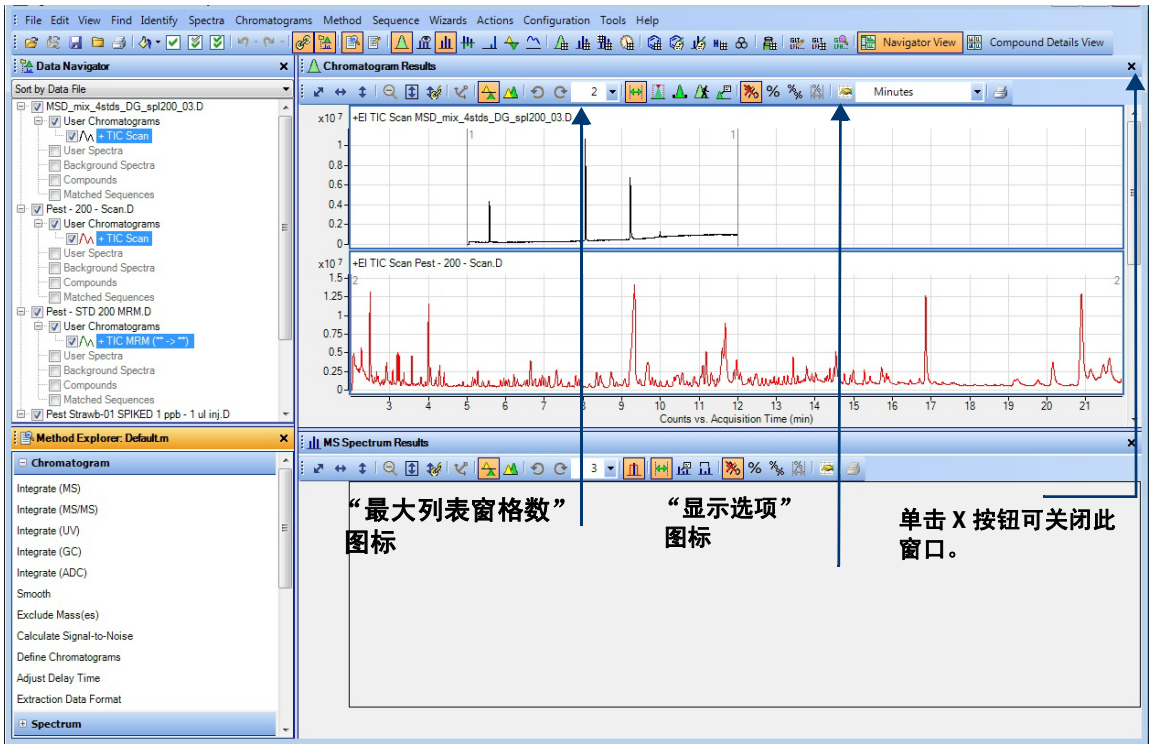


图 2 调用了常规工作流程的 “定性分析” 主窗口。

任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面

在此任务中，您将切换到“常规”工作流程（适用于 GC/QQQ 客户）或“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程 （适用于 GC/Q-TOF 客户）。这两个工作流程是仅支持对 GC/MS 数据进行分析的工作流程。然后，打开**用户界面配置**对话框，并选中 GC/QQQ 系统或 GC/Q-TOF 系统对应的复选框。

任务 2. 配置适用于 GC 的用户界面

步骤	详细说明	注释
1 如有必要，打开 “定性分析” 程序。	**a** 双击 **Agilent MassHunter 定性分析**图标  。 系统将显示 “打开数据文件” 对话框。 **b** 单击 “打开数据文件” 对话框中的**取消**。	• 当窗口处于活动状态时，通过按 F1 键可以获取有关任何窗口、对话框或选项卡的帮助。
2 切换到 “常规” 工作流程或 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程。	**a** 如果您有 GC/QQQ 仪器，请单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。如果您具备 GC/Q-TOF 仪器，请单击**配置 > 配置工作流程 > GC/Q-TOF 化合物筛查**命令。 **b** 单击**调用工作流程的缺省方法**按钮和**调用工作流程的缺省布局**按钮。 **c** 单击**确定**。 **d** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的**列表模式**图标  。	• 如果在同一计算机上安装了适用于 GC/QQQ 或 GC/Q-TOF 的 “数据采集” 程序，则软件将自动配置用户界面。“方法管理器” 中可能已有 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 部分。 • 缺省情况下，色谱图会重叠起来。对于这些示例，将以**列表模式**显示色谱图。

任务 2. 配置适用于 GC 的用户界面

步骤	详细说明	注释
3 如果您具备 GC/QQQ，请配置用户界面以仅显示 GC/QQQ 功能。	**a** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **b** 在“分离”类型下方，仅选中 **GC** 复选框。 **c** 如果您具备 GC/QQQ 仪器，则在“电离”类型下，选中 **EI 或其他“硬”电离技术**复选框，然后清除 **CI、APCI、ESI、MADLDI 或其他“软”电离技术**复选框。 **d** 在“质量精确度”下方，清除**精确质量（TOF、Q-TOF）**复选框。选中**单位质量 (Q, QQQ)** 复选框。 **e** 在“可选软件功能”下，清除**肽序列编辑器**复选框和 **BioConfirm 软件**复选框。 **f** 在“非 MS 检测器”下方，清除 **UV** 和 **ADC** 复选框。 **g** 选中**显示高级参数**复选框。 **h** 单击**确定**。	• 您可以更改**用户界面配置**对话框中可用的命令。 • 在“用户界面配置”对话框中清除某个复选框后，如果该复选框对应的功能不可见，则它可能被隐藏。

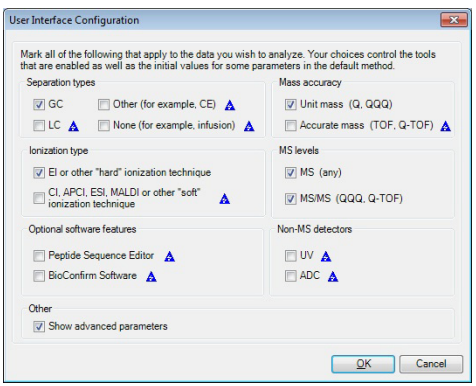


图 3 配置用户界面以使用 GC/QQQ 数据

任务 2. 配置适用于 GC 的用户界面

步骤	详细说明	注释
4 如果您具备 GC/Q-TOF 仪器，请配置用户界面以仅显示 GC/Q-TOF 功能。	**a** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **b** 在“分离”类型下方，仅选中 **GC** 复选框。 **c** 在“电离”类型下，选中这两个复选框。 **d** 在 MS 级别下，选中这两个复选框。 **e** 在“质量精确度”下，选中**精确质量（TOF、Q-TOF）**复选框。清除**单位质量 (Q, QQQ)** 复选框。 **f** 在“可选软件功能”下，清除**肽序列编辑器**复选框和 **BioConfirm 软件**复选框。 **g** 在“非 MS 检测器”下方，清除 **UV** 和 **ADC** 复选框。 **h** 选中**显示高级参数**复选框。 **i** 单击**确定**。	• 您可以更改**用户界面配置**对话框中可用的命令。 • 在“用户界面配置”对话框中清除某个复选框后，如果该复选框对应的功能不可见，则它可能被隐藏。

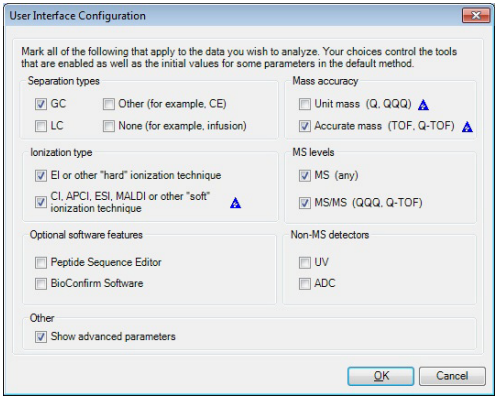


图 4 配置适用于 GC/Q-TOF 的用户界面

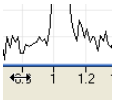
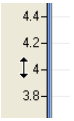
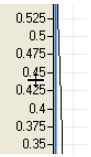
任务 3. 放大和缩小色谱图

在此任务中，您将熟悉 “定性分析”程序的放大和缩小功能。

任务 3. 放大和缩小色谱图

步骤	详细说明	注释
1 在练习中，将仅放大和缩小三个色谱图中的一个 （X 轴和 Y 轴）。 • 隐藏其他色谱图。 • 将最后一个峰放大两倍。 • 通过对 Y 轴自动调整再放大一倍。 • 缩小一倍，回到以前的缩放位置。 • 完全缩小到原始色谱图。	**a** 在 “数据浏览器”窗口中，将要隐藏的色谱图对应的复选框清除。 **b** 单击鼠标右键并拖动到最后一个峰的某个区域之上。 确保没有针对此步骤选择**在缩放期间对 Y 轴自动调整图标**  。 **c** 重复步骤 b。 **d** 单击工具栏中的**在缩放期间对 Y 轴自动调整**图标  。 **e** 再次单击鼠标右键并第三次拖动到最后一个峰的某个区域之上。 “定性分析”程序会将 Y 轴自动调整到该范围的最大点。 **f** 单击**取消缩放**图标  以撤消上次执行的缩放操作。 可撤消最后十五个缩放操作。 **g** 单击**对 X 轴和 Y 轴自动调整**图标 以完全缩小。	• 如果没有在 “数据浏览器”窗口中选中某条线，则 “定性分析”程序的任何其他窗口中都不会显示该信息。您只需在 “数据浏览器”窗口中标记该信息的复选框，其他窗口中将再次显示该信息。 • 您还可以对 “质谱图预览”窗口、“MS 质谱图结果”窗口以及 “质谱图对比结果”窗口中的质谱图使用这些缩放功能。 • 所选图标的背景颜色为橙色。

任务 3. 放大和缩小色谱图 （续）

步骤	详细说明	注释
2 练习分别对每个轴进行放大和缩小。 • 仅沿 X 轴放大。 提示：右键单击 X 轴值，并从左向右移动光标。 • 部分缩小 X 轴。 提示：沿相反方向移动光标。 • 完全缩小 X 轴。 • 对 Y 轴重复前面的步骤。	**a** 要放大 X 轴，请将光标移到 X 轴值，直到出现水平双箭头。 **b** 单击鼠标右键并在 X 轴值中将新的光标从左侧拖动到右侧。 **c** 要缩小 X 轴，请单击鼠标右键并在 X 轴值中从右侧拖动到左侧。 **d** 单击**对 X 轴自动调整**图标 完全缩小 X 轴。 **a** 要放大 Y 轴，请将光标移到 Y 轴值，直到出现垂直双箭头。 **b** 单击鼠标右键并在 Y 轴值中将新的光标从底部拖动到顶部。 **c** 要缩小 Y 轴，请单击鼠标右键并在 Y 轴值中从顶部拖动到底部。 **d** 单击**对 Y 轴自动调整**图标 完全缩小 Y 轴。	 **水平双箭头**  **右键单击 X 轴值时，将出现新的光标。**  **垂直双箭头**  **右键单击 Y 轴值时，将出现新的光标。**

任务 4. 锚定色谱图

在此任务中，您可以锚定色谱图。如果锚定了一个色谱图，则在滚动浏览其他色谱图来显示这些色谱图时，锚定的色谱图将永久位于显示屏中。

任务 4. 锚定色谱图

步骤	详细说明	注释

• 锚定色谱图。
  ◦ 显示所有色谱图。
  ◦ 确保将色谱图查看列表设置为 1。
  ◦ 在“色谱图结果”窗口中，选择第二个 TIC。
  ◦ 锚定此 TIC。
  ◦ 滚动浏览色谱图。
  ◦ 清除锚。
	a 在“数据浏览器”中，标记与在以前的任务中隐藏的色谱图对应的复选框。
	b 确保在“色谱图结果”窗口中将窗格的最大数目设置为 1。
	c 在“色谱图结果”窗口中，选择第二个 TIC。
	d 在该色谱图中单击鼠标右键，然后单击**设置锚**。
	e 使用“色谱图结果”窗口中的滚动条滚动浏览色谱图列表。第二个 TIC 始终作为第一个色谱图处于可见状态。
	f 单击**色谱图 > 清除锚**。
		• 为色谱图设置锚定属性时，一个锚定图标将出现在“数据浏览器”窗口中的锚定色谱图名称的旁边。
		• 在锚定一个色谱图之后，即使查看列表显示 1，两个色谱图也会显示在“色谱图结果”窗口中。目前这表示您除了可查看一个色谱图外，还可查看锚定色谱图。
		• 此外，您还可以右键单击该色谱图，然后单击快捷菜单中的**清除锚**。

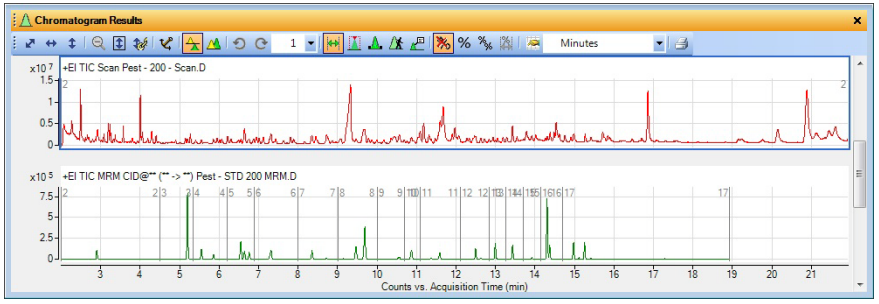


图 5 “色谱图结果”窗口中锚定的 TIC

任务 5. 更改窗口布局

在此任务中，您可以在主视图中移动窗口并创建多个窗口布局。

任务 5. 更改窗口布局

步骤	详细说明	注释
1 更改窗口布局： • 更改窗口大小。 • 保存窗口布局。 • 解除布局锁定。 • 将“色谱图结果”窗口更改为浮动状态。 • 移动 “色谱图结果”窗口。 • 显示用于重新定位窗口的工具。	• 要更改窗口的大小，请在窗口之间拖动边界。 • 要保存窗口布局，请单击**配置 > 窗口布局 > 保存布局**。 • 要解除布局锁定，请单击**配置 > 窗口布局 > 锁定布局**。 • 为了使窗口浮动，请右键单击窗口的标题栏，然后单击快捷菜单中的**浮动**。 • 要移动窗口，请单击窗口的标题栏并将该窗口拖动到所需的位置。 • 要显示重新定位工具，请将该窗口拖动到某个其他窗口之上。当一个窗口与另一个窗口重叠时，该程序将显示多个布局工具，如图 6 所示。	• 如果解除布局锁定，则系统不会在“锁定布局”菜单旁边显示选中标记。 • 您只能在解除布局锁定时使用重新定位工具。 • 此外，通过双击窗口的标题栏，也可以使窗口浮动。 • 该软件创建了许多不同的布局。您还可以尝试调用不同的布局。 • 该软件具有多个不同的工作流程。每个工作流程调用的布局都不同。此外，切换到不同的工作流程时，布局也将随之更改。

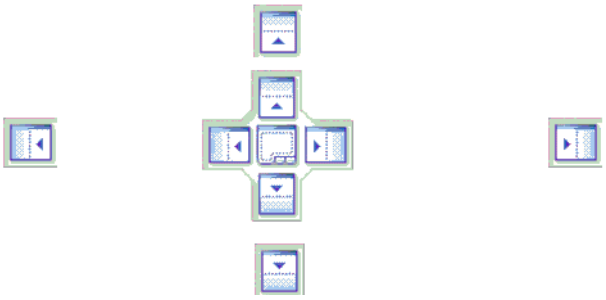


图 6 窗口重新定位工具

任务 5. 更改窗口布局 （续）

步骤	详细说明	注释
2 重新定位“色谱图结果”窗口。 • 移动该窗口，使其依次位于其他窗口的顶部、左侧、右侧和底部。 • 同时移动两个窗口，使其中某个窗口位于另一个窗口的顶部，且只能通过底部的选项卡来使用。 • 恢复缺省布局。	• 如果将光标拖动到某个较小的图标之上，则您正在拖动的窗口将被置于所有其他窗口的上方、右侧、下方或左侧。 • 将光标拖动到较大的图标上方。通过将光标拖动到较大图标的边缘上方，还可以将该窗口置于另一个窗口的上方、右侧、下方或左侧。 • 要将两个窗口一同显示在选项卡中，请将光标拖动到较大图标的中心上方。这两个窗口将一同显示在选项卡上，您将看到它们的副本。停止拖动鼠标。这两个窗口将一同显示在选项卡中。 • 单击**配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局**。	• 光标必须位于框中某个箭头上方才能执行重新定位。 • 单击**恢复缺省布局**命令，可以恢复“常规”工作流程和“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程中使用的布局。如果使用的是其他工作流程，则需要调用在该工作流程中使用的布局。

任务 6. 提取色谱图

在此任务中，您可以从原始 TIC 提取并合并色谱图。

任务 6. 提取色谱图

步骤	详细说明	注释
1 提取并合并从 **Pest - 200 - Scan.d** 数据文件两个质量数中得到的提取离子色谱图 (EIC)。 • m/z 值为 129.0 和 414.2。 • 请勿将各个质量中的峰合并到一个色谱图中。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，清除 **Pest - 200 - Scan.d** 以外的数据文件对应的复选框。 **b** 使用下列选项或右侧的选项之一，打开“提取色谱图”对话框： • 单击**色谱图 > 提取色谱图**。 **c** 在**已打开的数据文件列表**中，单击 **Pest - 200 - Scan.d**。 **d** 在**类型**列表框中，选择 **EIC**。 **e** 在 **m/z 值**框中，键入 `129.0, 414.2`。 **f** 如果有必要，清除**将多个质量合并到一个色谱图中**复选框以合并这些 EIC。 **g** 单击**确定**。 **h** 将“色谱图结果”工具栏中的**最大列表窗格数**设置为 3。	• 您还可以采用下列方法之一来提取色谱图： ◦ 在色谱图中单击鼠标右键，然后单击**提取色谱图**。 ◦ 在“数据浏览器”中，选中与 **Pest - 200 - Scan.d** 对应的 **TIC 扫描**，然后右键单击 **TIC 扫描**并单击**提取色谱图**。 • 您可以对**全部**或 **MS** 使用 MS 级别。 • 请注意，您还可以选择在提取后对提取的色谱图自动进行积分。 • 也可以从质谱图中提取色谱图。

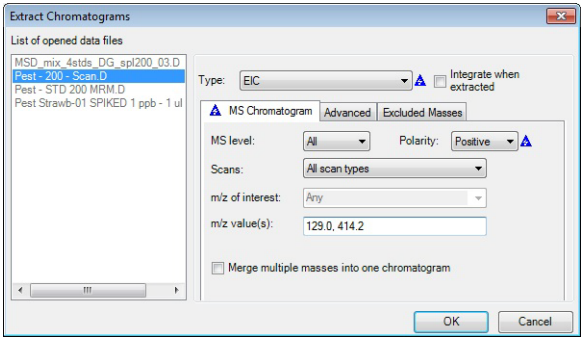
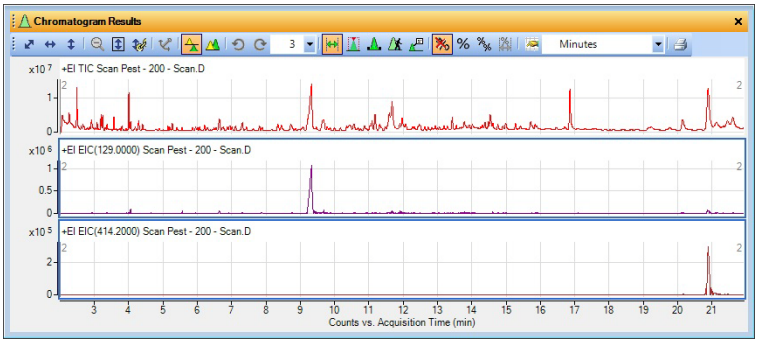


图 7 “提取色谱图”对话框

任务 6. 提取色谱图 （续）

步骤	详细说明	注释
	 **图 8** 合并后的提取离子色谱图 (EIC) （与原始 TIC 比较）	

任务 7. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分

在此任务中，您将学会用于对色谱图进行积分、更改积分参数以修改结果，以及为 MS/MS 数据的积分峰计算信噪比的多种不同方法。

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任一选项，对 Pest - 200 - Scan.d 数据文件的**“TIC 扫描”色谱图**进行积分。	**a** 选中 “数据浏览器”窗口中的 Pest - 200 - Scan.D 数据文件。 **b** 选中 TIC 扫描色谱图，然后使用下列命令之一： • 在菜单栏中，单击**色谱图 > 积分色谱图**。 • 在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击**积分色谱图**。 • 在 “数据浏览器”窗口中，选择 **Pest - 200 - Scan.D > 用户色谱图 > TIC 扫描**，右键单击 **TIC 扫描**，然后单击**积分色谱图**。	• 请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。 • 您可以选择 “方法编辑器”窗口中对 MS 数据、 MS/MS 数据和 GC 数据使用的积分器。 • 该色谱图是 MS 色谱图，因此在对此色谱图积分时，将使用在 “方法编辑器”的 “积分 (MS)” 部分中设置的值。
2 同一时间仅显示两个色谱图。	• 在 “色谱图结果”工具栏的**最大列表窗格数**框中，选择 **2**。	

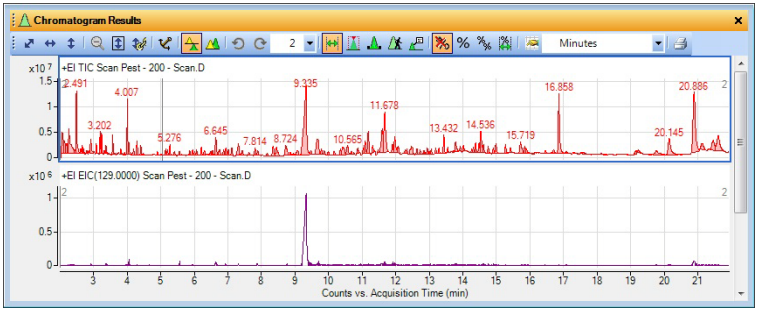


图 9 包含多个小峰的已积分 TIC 扫描色谱图

对多个小峰积分。

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS) （续）

步骤	详细说明	注释
3 更改阈值，减少要进行积分的峰的数量。 • 更改阈值以便仅保留这三个最大的峰。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**色谱图 > 积分 (MS)** 以显示“积分 (MS)”选项卡。 **b** 选择 **Agile 2** 积分器。 **c** 单击**峰过滤器**选项卡。 **d** 在“最大峰数量”下，选中**限制为最大值 (按峰高)** 并键入 3。	• 请注意，当前方法的设置发生更改时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

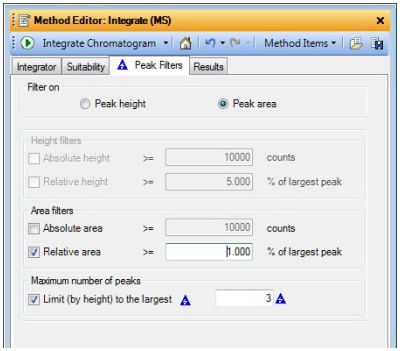


图 10 选中了**上限 （按峰高）**的 “峰过滤器”选项卡

4 对色谱图重新积分	**e** 单击“方法编辑器”工具栏中的 按钮，以便使用新设置进行积分。	• 请注意，现在仅对具有最大峰高的三个峰进行积分。

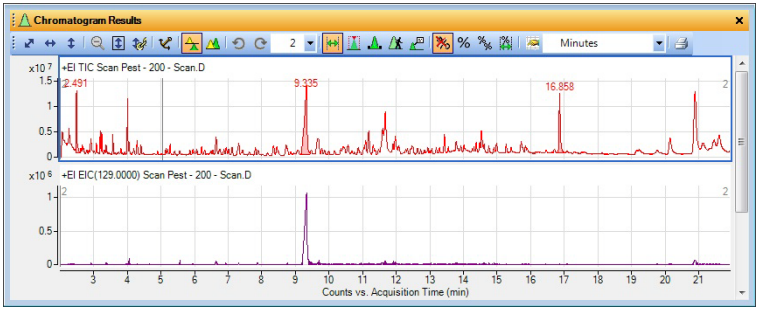


图 11 限制了峰数量的已积分 TIC 扫描色谱图

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS) （续）

步骤	详细说明	注释
5 对 Pest - STD 200 MRM.D 数据文件的 **TIC MRM 色谱图**进行积分。	**a** 在 “数据浏览器” 窗口中，对 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件选择 **TIC MRM**。 **b** 使用下列命令之一积分色谱图。 • 在菜单栏中，单击**色谱图 > 积分色谱图**。 • 在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击**积分色谱图**。 • 在 “数据浏览器” 窗口中，右键单击高亮显示的色谱图，然后单击**积分色谱图**。 **c** 在 5.8 至 8.5 分钟范围内放大。 **d** 将**最大列表窗格数**设置为 2。	• 按住 **Ctrl** 键以在 “数据浏览器” 窗口中选中多个色谱图。 • 请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。 • 这些色谱图是 MS/MS 色谱图，因此在对这些色谱图积分时，将使用在 “方法编辑器” 窗口的 “积分 （MS/MS）” 部分中设置的值。您可以选择使用一个积分器对 MS 色谱图积分，使用其他积分器对 MS/MS 色谱图积分。

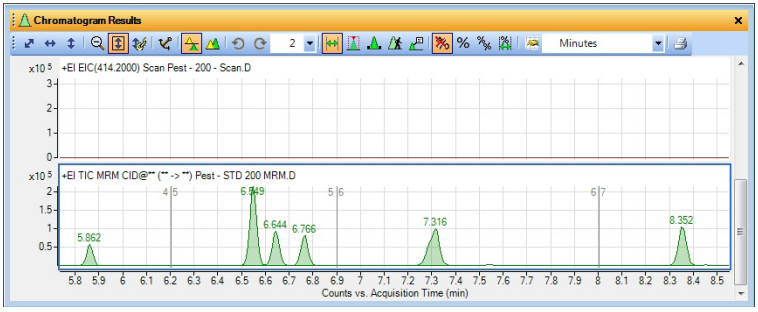
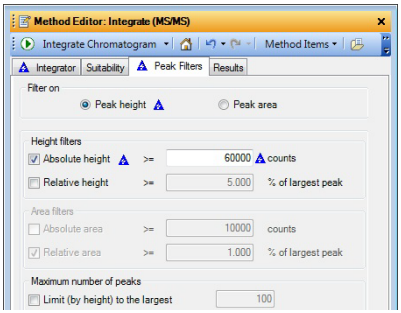
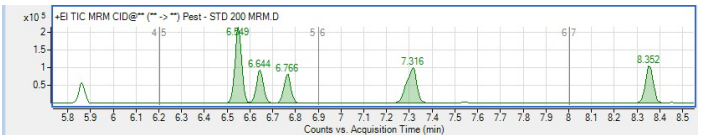


图 12 已积分的 MRM 色谱图

6 选择 **MS/MS (GC)** 积分器。将过滤器更改为仅接受绝对峰高大于或等于 20,000 的峰。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，选择**色谱图 > 积分 (MS/MS)**。 **b** 选择 **MS/MS (GC)** 作为**积分器**。 **c** 单击**峰过滤器**选项卡。 **d** 在**过滤依据**下，单击**峰高**。 **e** 在 “峰高过滤器” 下，选中**绝对峰高**复选框。 **f** 键入 60000 作为**绝对峰高**。	• 请注意，当前方法的设置发生更改时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS) （续）

步骤	详细说明	注释
		
	图 13 选中了**绝对峰高**的 “峰过滤器” 选项卡	
7 对色谱图重新积分	**g** 单击方法编辑器工具栏中的 按钮。	• 请注意，现在仅对这些最大的峰进行积分。
		5.8 分钟处更小的峰不再包含在积分结果中，因为此峰的绝对高度低于 60000 counts。
	图 14 使用较高的阈值设置对 TIC 和 EIC MS/MS 色谱图进行积分	
8 恢复为当前方法保存的设置并关闭 “方法编辑器”。	**a** 在 “方法管理器” 中，选择 “色谱图” > “积分 (MS/MS)” 部分。 **b** 单击方法编辑器中的 图标。 **c** 在 “方法管理器” 中，选择 “色谱图” > “积分 (MS)” 部分。 **d** 单击方法编辑器中的 图标。 **e** 关闭**方法编辑器**窗口。	• 要取消所做更改并恢复调用方法中的值，请单击 “方法编辑器” 工具栏中的**恢复到上次在文件中保存的值**图标 。
9 删除原始色谱图以外的所有色谱图。删除原始色谱图中的积分结果。	**a** 在 “数据浏览器” 窗口的 “用户色谱图” 下方，选中除原始色谱图以外的所有色谱图。 **b** 右键单击选中的色谱图，然后单击**删除**。 **c** 选择所有 TIC 色谱图。 **d** 单击**色谱图 > 清除结果**。	• 使用**清除结果**命令时，不会删除色谱图，而会删除连接到色谱图的结果。在这种情况下，将清除积分值。

任务 8. 计算系统适用性值

在此任务中，您将学习用于对色谱图进行交互式积分、更改积分参数从而修改结果，以及查看每个峰的信噪比的不同方法。还可以学习如何启用系统适应性计算。

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 (MS)

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任意选项对 **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** 和 **Pest - 200 - Scan.d** 色谱图进行积分。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 数据文件旁边的复选框。 **b** 在“数据浏览器”窗口中，选中 Pest - 200 - Scan.d 数据文件旁边的复选框。 **c** 高亮显示这两个 TIC。 **d** 使用以下任意选项对这两个文件的 **TIC 扫描**进行积分。 • 在主菜单中，单击**色谱图 > 积分色谱图**。 • 选中该色谱图。然后，右键单击该色谱图，并单击**积分色谱图**。 • 在“数据浏览器”中，高亮显示这些数据文件的 **TIC 扫描**。然后，右键单击任一色谱图，并单击**积分色谱图**。	• 对于“常规”工作流程和 GC/Q-TOF 工作流程，积分将使用 **Agile 2** 积分器，因为这是在该工作流程的缺省方法中选定的积分器。 • 您可以在“色谱图”>“积分 (MS)”>“积分器”选项卡中更改此值。 • 请注意，带有缺省参数的积分检测的是非常小的峰。

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 (MS) （续）

步骤	详细说明	注释

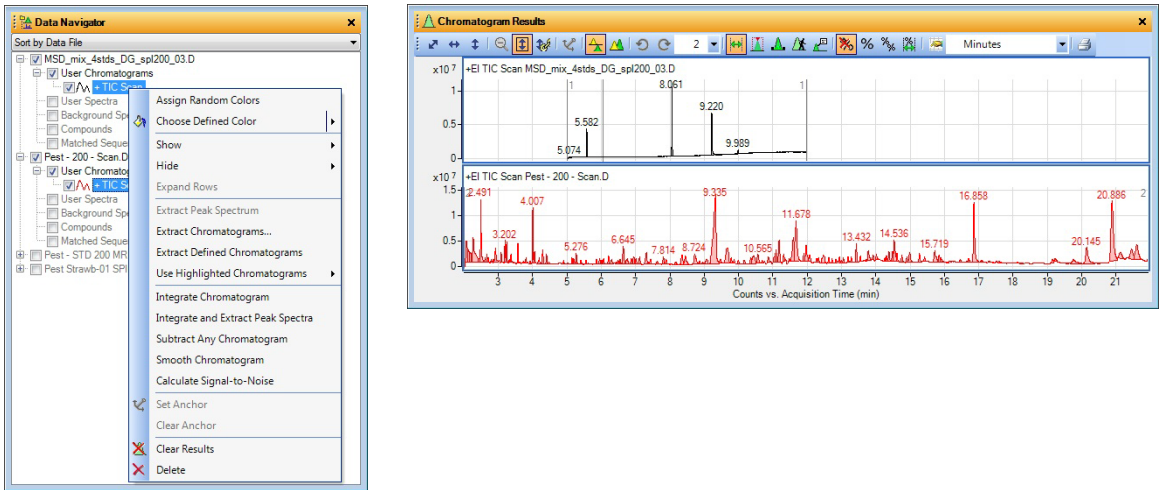
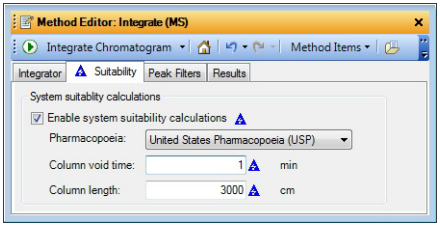


图 15 “数据浏览器”中的快捷菜单之一和已积分的色谱图

2 对 MS 色谱图启用系统适应性计算。

a 在“方法管理器”中，选择**色谱图 > 积分 (MS)** 以显示“积分器”选项卡。
b 单击**适应性**选项卡。
c 选中**启用系统适应性计算**。
d 选择**美国药典 (USP)**。
e 在**色谱柱死时间**框中，键入 1。
f 在**色谱柱长度**框中，键入 3000。

- 请注意，当前方法的值发生更改时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。
- 用于设置积分峰列表中的多个列的算法因选择的药典的不同而异。有关详细信息，请参见联机帮助。



这些数据文件的实际色谱柱死时间和色谱柱长度与这些值不同。这些值仅用于此示例。

图 16 “色谱图” > “积分 (MS)” > “适应性”选项卡

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 (MS) （续）

步骤	详细说明	注释
3 对色谱图重新积分。	• 单击方法编辑器工具栏中的**积分色谱图**图标，以便使用新设置进行积分。	
4 查看系统适应性计算。 • 打开 “积分峰列表”窗口。 • 查看噪音区域对应的值，并计算积分峰的信噪比。	**a** 单击**视图 > 积分峰列表**。 **b** 右键单击 “峰”窗口的标题，并单击**浮动**。 **c** 右键单击任何不想查看的列的列标题，然后单击**删除列**。 **d** 右键单击任何列标题，然后单击**添加 / 删除列**，以更改可见的列。	• “积分峰列表”表中包括系统适应性计算。 • 这些值包括 “k’ ” 、“拖尾因子”、“塔板数”、“塔板数 / 米”和 “对称因子”。 • 还可以对 MS、 MS/MS 和 GC 色谱图启用系统适应性计算。

Peaks: +TIC Scan

Peak	RT	Area	Height	Width	FWHM	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.074	1039700.77	126775.42	0.31	0.244	0.07	4.1	1438	47.9	19	7.5
2	5.582	3852463.81	4145026.61	0.064	0.014	1	4.6	965321	32177.4	1.8	1
3	8.061	9689994.54	10233941.28	0.077	0.014	0.8	7.1	1910057	63668.6	107.7	1.1
4	9.22	8044493.21	6233260.26	0.101	0.017	0.5	8.2	1686157	56205.2	44.8	2
5	9.989	536162.3	521023.47	0.063	0.014	0.8	9	3177938	105931.3	30.3	1.4

图 17 具有系统适应性值的积分峰表

5 恢复缺省方法的设置，并关闭 “方法编辑器”窗口和 “积分峰列表”窗口。	**a** 要取消所做更改并恢复缺省方法中的值，请单击方法编辑器工具栏中的**恢复到上次在文件中保存的值**图标。 **b** 关闭**方法编辑器**窗口。 **c** 右键单击 “积分峰列表”窗口的标题，并单击**浮动**。 **d** 单击**视图 > 积分峰列表**。	• 第二次单击快捷菜单中的 “浮动”命令时，“积分峰列表”窗口将固定在其原始位置。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

在此任务中，您可以从色谱图中指定的确切位置提取质谱图（或光谱图）。“定性分析”程序可以从特定数据点提取质谱图或从多个数据点或范围的平均值中提取平均质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
1 浏览色谱图，以查看 **Pest - STD 200 MRM.d** 的最后几个峰的前级离子和产物离子。 • 放大 13 与 16 分钟之间的区域。 • 使用 “实时色谱图”图标。 • 查看从大约 13 分钟处开始的质谱图，并向右侧移动箭头。	**a** 选中 “数据浏览器”窗口中的 **Pest - STD 200 - MRM.D** 行。 **b** 关闭 “方法编辑器”窗口。 **c** 关闭 “MS 质谱图结果”窗口。 **d** 单击 “数据浏览器”窗口中的 **TIC MRM** 色谱图。 **e** 单击 “色谱图结果”工具栏中的**在缩放期间对 Y 轴自动调整**图标  。 **f** 选择 **1** 最大列表窗格数。 **g** 要放大一些峰，请在 13 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖到 16 分钟处，然后松开鼠标。 **h** 单击 “色谱图结果”工具栏中的**实时色谱图**图标  。 **i** 将 “实时色谱图”光标移动到 X 轴上方大约 13 分钟处，然后单击。 **j** 要在质谱图之间导航，请使用键盘上的左右箭头键。	• “实时色谱图”工具对 MS/MS 数据特别有用，因为可用来识别前级离子和产物离子。 • 在 “色谱图结果”窗口中单击的每个点的质谱图都会自动显示在 “质谱图预览”窗口（该窗口会自动打开）中。 • 有时，会有两个质谱图显示在 “质谱图预览”窗口中。例如，对于在 13.431 分钟处的峰附近单击的每个点，“质谱图预览”窗口中都会显示两个质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释

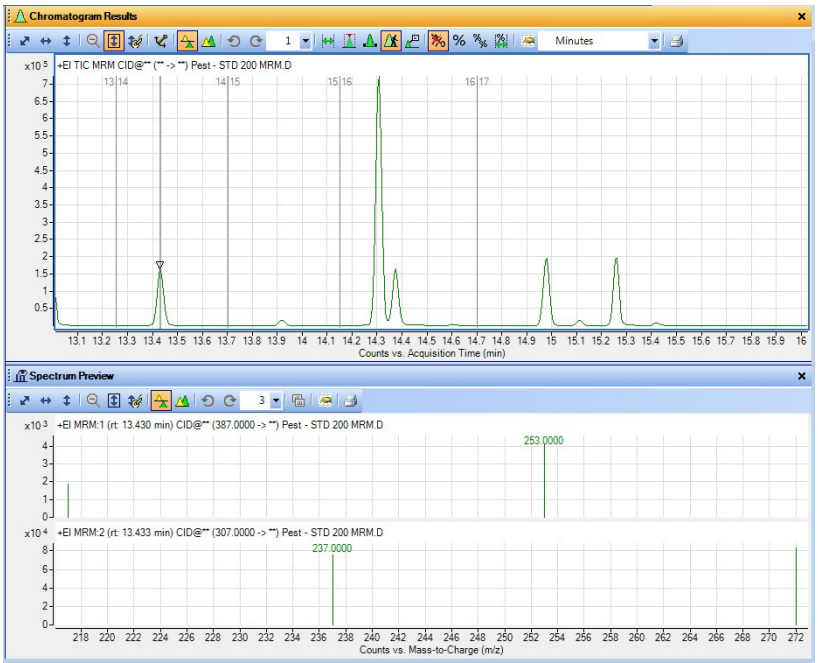


图 18 浏览色谱图以查看 13.43 分钟处的峰的两个 MRM 质谱图

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释

2 在 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件中的 5.2 分钟处和 14.3 分钟处的峰的特定数据点上提取的质谱图。
• 使用“注释”下方描述的选项之一从 5.2 分钟处或附近的峰提取一个质谱图，然后从其中提取一个峰谷质谱图。
• 从 14.3 分钟处或附近的峰提取一个质谱图。（尚未提取峰谷质谱图）
• 更改显示，使得至少显示三个质谱图。
	a 单击“色谱图结果”工具栏中的**范围选择**图标 。
	b 关闭“质谱图预览”窗口。
	c 单击“色谱图结果”工具栏中的**缩小**图标 。
	d 要放大到 5.2 分钟处的峰，请在 4.0 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 6.0 分钟处，然后松开鼠标。
	e 在接近 5.2 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取一个质谱图。
	f 在接近 5.1 分钟处的峰谷上，提取质谱图。
	g 单击“色谱图结果”工具栏中的**缩小**图标 。
	h 放大介于 14 与 15 分钟之间的区域。
	i 在接近 14.3 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取一个质谱图。（请不要提取峰谷质谱图。）
	j 如有必要，在“MS 质谱图结果”工具栏中选择**最大列表窗格数**图标中的“4”。
		• 进行缩放时，请确保“在缩放期间对 Y 轴自动调整”图标  处于“打开”状态。该图标处于打开状态时，背景为橙色。
		• 您可以采用下列任一方式来提取质谱图：
		  • 双击该色谱图中的数据点。
		  • 单击该色谱图中的数据点，然后在该色谱图中的任意位置单击鼠标右键。单击**提取 MS 质谱图**。此时将显示“提取质谱图”对话框。确保选择了 **Pest - STD 200 MRM.d** 文件，然后在“提取质谱图”对话框中单击**提取**。
		• 请注意，在第一次提取质谱图时，将出现包含该质谱图的“MS 质谱图结果”窗口，并且该质谱图的类型和保留时间将出现在“用户质谱图”下。所有后续提取的质谱图也都将出现在两个位置。
		• 在 14.3 分钟附近的峰中提取 MS 质谱图时，将提取两个质谱图，因为此峰上会发生两次转换。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释

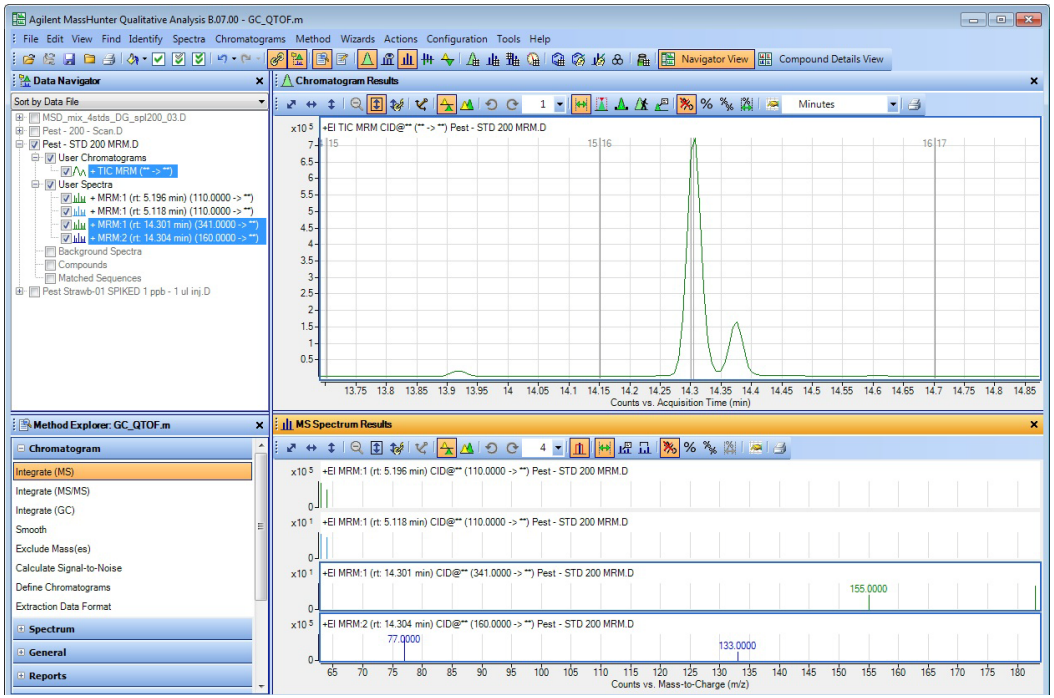


图 19 包含从 5.2 分钟处的峰提取的两个 MRM 质谱图以及从 14.3 分钟处的峰提取的两个 MRM 质谱图的主窗口

3 从 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件中的 14.35 分钟处提取峰谷 MS 质谱图。

- 打开 “质谱图预览”。
- 从 RT 14.3 分钟处的峰谷中提取一个质谱图。
- 将此质谱图复制到“用户质谱图”文件夹。
- 更改显示以显示 6 个质谱图。
- 关闭 “质谱图预览”窗口。

a 单击**质谱图预览**图标 。

b 在接近 14.3 分钟处的峰谷上，提取一个质谱图。

c 右键单击 “质谱图预览”窗口中的质谱图，然后单击**复制到用户质谱图**。质谱图将复制到“数据浏览器”中的 “用户质谱图”部分中，并显示在 “MS 质谱图结果”窗口中。

d 单击质谱图窗格列表旁边的向下箭头，然后选择 **6**。

e 关闭 “质谱图预览”窗口。

- 启用 “质谱图预览”时，系统将在 “质谱图预览”窗口（而不是 “数据浏览器”的 “用户质谱图”部分）中显示所有手动选择的质谱图。
- 当 “质谱图预览”处于打开状态时，“定性分析”程序会在您提取新的质谱图时覆盖以前的质谱图。
- 如果要快速查看色谱图中的质谱图并且仅保存若干质谱图，则 “质谱图预览”模式将非常有用。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释



图 20 “色谱图结果”和 “MS 质谱图结果”窗口

4 提取一个质谱图，并使用该质谱图对 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件的 14.3 分钟处的峰的某个指定范围内的所有点求平均值：

- 缩小。
- 使用 “色谱图”工具栏上的 “范围选择”图标。
- 设置跨越整个峰的范围。
- 使用列出的任一选项提取该质谱图 （或光谱图）。

a 单击 “色谱图”工具栏上的**范围选择**图标 。

b 单击 14.3 分钟处的峰的基线左侧，并拖动到右侧的峰的基线处。

c 使用右侧的某个选项提取平均质谱图。

d 在 “MS 质谱图结果”窗口中，选择 “最大列表窗格数”中的 **2**。

- 您可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图。
- 或者，在色谱图中的任意位置单击鼠标右键，然后单击快捷菜单中的**提取 MS 质谱图**。
- 请注意，会显示两个平均 MRM 质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释

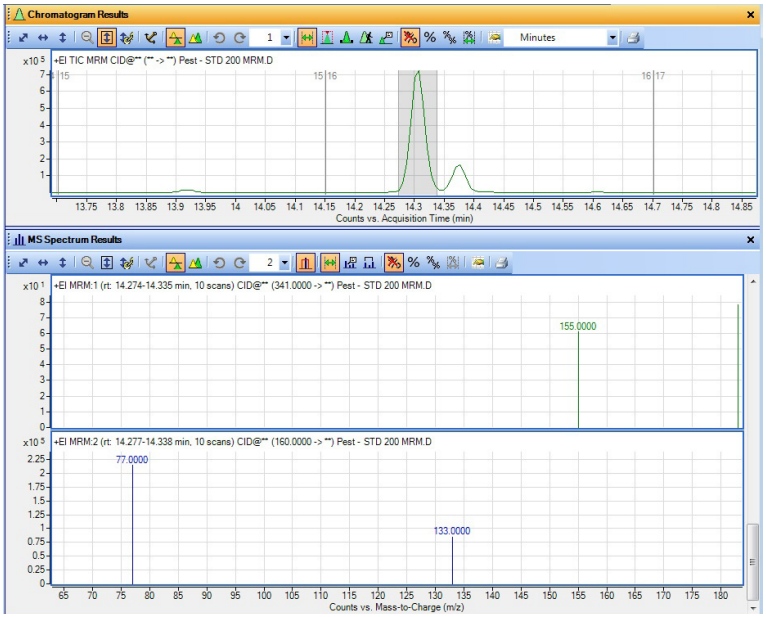


图 21 显示两个平均质谱图的 “色谱图结果” 和 “MS 质谱图结果” 窗口

5 提取同时对 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件的 5.2 分钟和 14.3 分钟处的峰范围求平均值的质谱图。

- 提示：使用 “范围选择” 图标和 **Ctrl** 键可以选择从某点获取的峰 1 范围。
- 使用右侧的任一选项提取该质谱图。

a 单击 “色谱图结果” 工具栏中的**缩小**图标 。

b 按 **Ctrl** 键。

c 在 5.2 分钟处的峰左侧单击并拖动到该峰的右侧，然后释放鼠标。

d 松开 **Ctrl** 键。

e 使用此选项或右侧的选项提取平均质谱图。

- 在每个峰的选定范围内双击。

- 请记住，第二个峰已具有从步骤 4 中选定的范围。
- 要提取质谱图，还可以在色谱图中的任意位置单击鼠标右键并单击**提取 MS 质谱图**。此时将显示 “提取质谱图” 对话框。单击**提取**。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

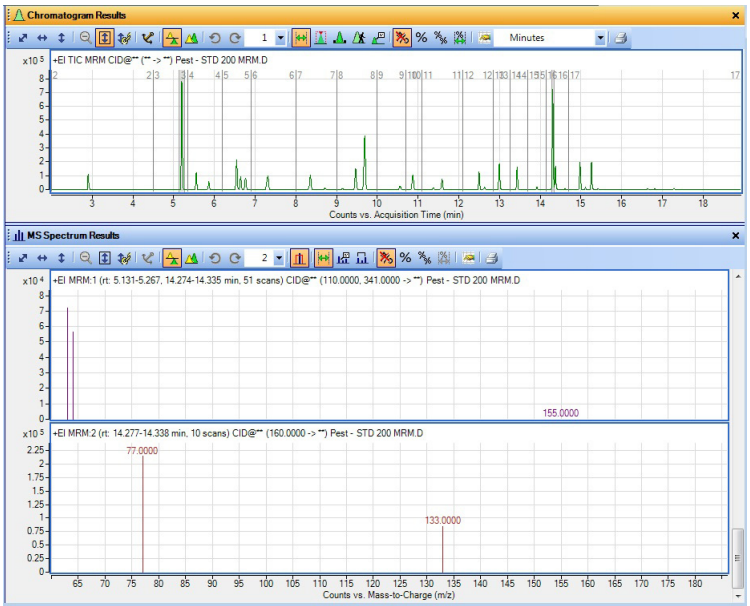
步骤	详细说明	注释
		**第一个质谱图会从这两个时间范围中进行转换。第二个质谱图仅具有一个时间范围，因为 5.2 分钟处的峰上不会出现 160.00 ->** 转换。**

图 22 从色谱图中的两个不同范围提取的两个平均质谱图

6 每次在 **Pest - STD 200 MRM.d** 中提取峰质谱图时都扣除背景质谱图。

- 删除“数据浏览器”中“用户质谱图”下的所有扫描类型。
- 提取背景质谱图，该质谱图作为峰开始处的质谱图与峰结束处的质谱图的平均质谱图。
- 从积分峰中提取峰质谱图。

a 单击“数据浏览器”中的“用户质谱图”行。右键单击“用户质谱图”行，然后单击**删除**。

b 单击**是**。

c 在“方法管理器”中，选择**质谱图 > 提取 (MS/MS))**。

d 单击**峰质谱图提取 (MS/MS)** 选项卡（如果不可见）。

e 在**峰质谱图背景 MS/MS** 框中，选择**在峰开始和结束处的质谱图的平均值**。

f 在“色谱图结果”工具栏中，单击**峰选择**图标 。

g 单击**色谱图 > 积分**命令。

h 选择 5.206 分钟处的峰。

i 单击鼠标右键，然后单击快捷菜单中的**提取峰质谱图**。

- 请注意，在此过程结束时，所有提取的峰质谱图都会自动扣除指定的背景质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释

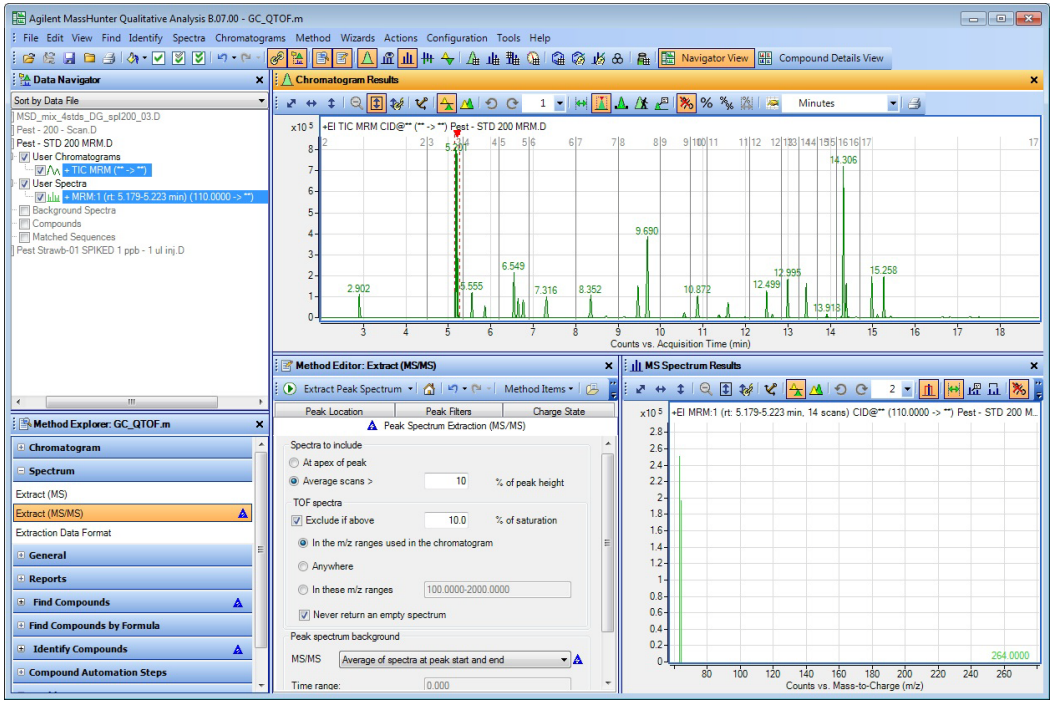


图 23 已扣除了背景峰质谱图的峰质谱图

任务 9. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
7 从 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件积分并提取峰质谱图。	**a** 单击“数据浏览器”窗口中的“TIC MRM”色谱图。 **b** 单击**色谱图 > 积分并提取峰质谱图**。	• 您在上一步中手动提取的峰质谱图已被自动删除，因为缺省情况下，已在“色谱图”>“积分 (MS/MS)”>“结果”选项卡中选中**清除以前的峰质谱图**。

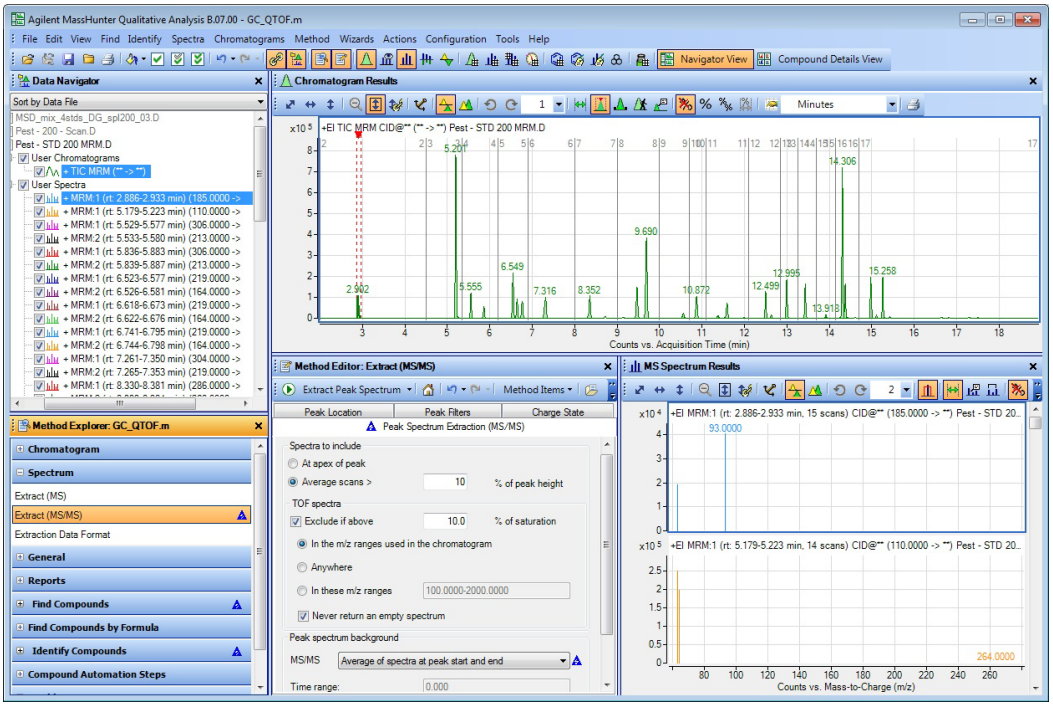


图 24 积分并提取峰质谱图

8 删除积分结果和峰质谱图。	**a** 选择 Pest - Std 200 MRM.d 数据文件。 **b** 单击**色谱图 > 清除结果 > 包含峰质谱图**。	• 如果您不想删除峰质谱图，也可以单击**色谱图 > 清除结果 > 仅色谱图**。

任务 10. 添加注释

您可以将图像注释或文本注释添加到下列图形窗口：

- “色谱图结果”窗口
- “MS 质谱图结果”窗口

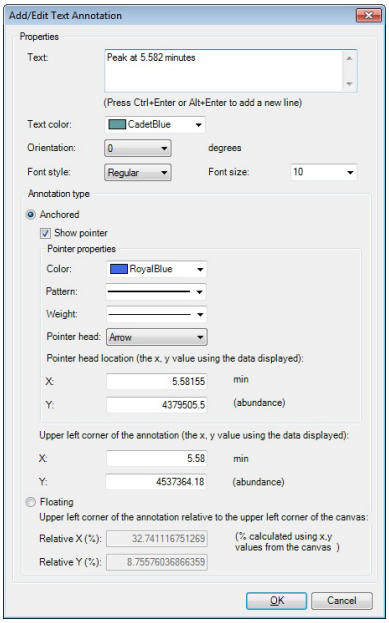
如果您保存数据文件的结果，也会保存注释。

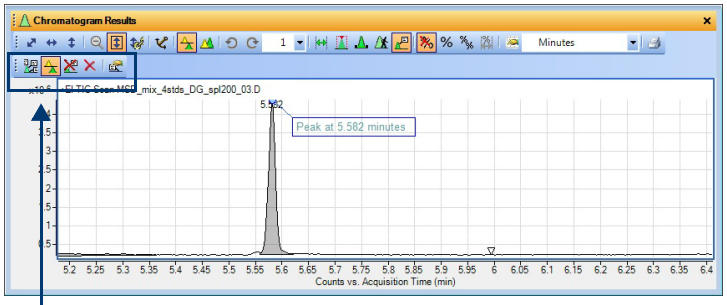
任务 10. 添加注释

步骤	详细说明	注释
1 选择 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。隐藏其他色谱图。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 旁边的复选框。 **b** 单击**编辑 > 显示 > 仅显示高亮显示的项目**。	• 将自动隐藏其他数据文件的色谱图。
2 在色谱图中选择要添加文本注释的位置。	**a** 在“色谱图结果”窗口中，单击工具栏中的**注释**工具 ()。 **b** 将光标移到色谱图窗格中要添加注释的位置。 **c** 单击鼠标右键，然后单击**添加文本注释**。	• 光标将变为十字线光标。可使用此光标选择要添加注释的确切位置。 • 可在“色谱图结果”窗口中找到“注释”工具栏。 • 您也可以将注释添加到“MS 质谱图结果”窗口中。
3 在“添加 / 编辑文本注释”对话框中添加有关文本注释的信息。	**a** 键入注释的**文本**。 **b** 选择**文本颜色**。 **c** 选择**方向**。 **d** 选择**字体格式**和**字体大小**。 **e** 单击**已锚定**或**浮动**。如果单击**已锚定**，请选择指向文本注释的指针对应的选项。如果单击**浮动**，则可以更改相对位置。在图形窗口中可以更轻松地以交互方式更改位置。 **f** 单击**确定**。	• 可将多个注释添加到色谱图或质谱图。 • 可以使用注释工具栏中的图标选择所有注释、删除注释及编辑注释。

任务 10. 添加注释 （续）

步骤	详细说明	注释





仅在选择了 “注释” 工具时，注释工具栏才可用。

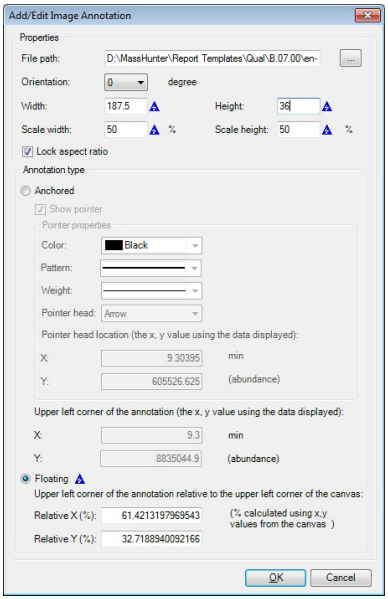
单击并拖动注释可将其移到新位置。

图 25 “添加 / 编辑文本注释” 对话框和 “色谱图结果” 窗口

4 在色谱图中选择要添加图像注释的位置。	**a** 将光标移到色谱图窗格中要添加注释的位置。 **b** 单击鼠标右键，然后单击**添加图像注释**。	• 您可以添加 JPG 或 MOL 图像文件。
5 在 “添加 / 编辑文本注释” 对话框中添加有关文本注释的信息。	**a** 选择图像注释。 **b** 对于 “调整宽度”，键入 50。 **c** 选中**锁定高宽比**复选框。 **d** 单击**浮动**。您可以更改相对位置。在图形窗口中可以更轻松地以交互方式更改位置。 **e** 单击**确定**。 **f** 将图像移动到色谱图的右上角。	• Agilent_Logo.tif 文件包含在 \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.07.00\en-US\Letter 文件夹中。您需要将其转换为 JPG 文件。 • 可将多个注释添加到色谱图或质谱图。

任务 10. 添加注释 （续）

步骤	详细说明	注释



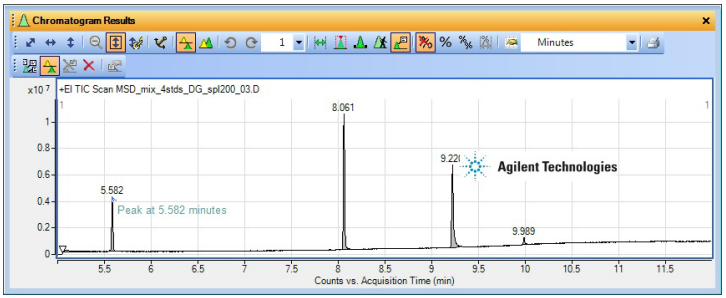
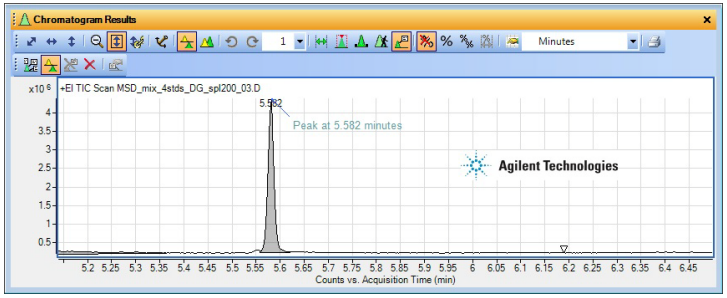


图 26 “添加 / 编辑图像注释”对话框和 “色谱图结果”窗口

6 放大至第一个峰。

- 放大至 5.5 分钟处第一个峰周围的区域



如果锚定注释，则它会一直显示在它所锚定的位置。如果放大到不同的峰，锚定的注释可能不可见。如果注释处于浮动状态，则注释总是显示在相对于窗口左上角的同一位置。

图 27 “添加 / 编辑图像注释”对话框和 “色谱图结果”窗口

任务 10. 添加注释 （续）

步骤	详细说明	注释
7 切换回 “色谱图结果”窗口中的 “范围选择”工具。首先删除注释。	**a** 单击  图标以删除所有注释。 **b** 单击 “色谱图结果”工具栏中的  （范围选择）图标。	• 如果您要将注释与数据文件结果一同保存，请参见第 72 页上的 “任务 18. 保存结果”。 • 您可以在 “色谱图结果”工具栏中的 5 个不同工具之间切换。有关详细信息，请参考联机帮助。这 5 个工具是： ◦ 范围选择 ◦ 峰选择 ◦ 手动积分 ◦ 实时色谱图 ◦ 注释鼠标

任务 11. 添加质量卡尺

卡尺显示质谱图中两个点之间的差。可以将卡尺添加到 “MS 质谱图结果” 窗口中。

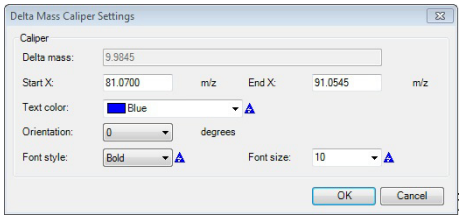
如果您保存数据文件的结果，也会保存卡尺。

任务 11. 添加质量卡尺

步骤	详细说明	注释
1 从 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 积分并提取峰质谱图。	**a** 在 “数据浏览器” 窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 旁边的复选框。 **b** 单击**编辑 > 显示 > 仅显示高亮显示的项目**。 **c** 单击**色谱图 > 积分并提取峰质谱图**。 **d** 关闭 “方法编辑器” 窗口。	
2 将卡尺添加到在前面的任务中创建的峰质谱图。	**a** 在 “MS 质谱图结果” 窗口中，单击工具栏中的**质量增量卡尺**工具 ( )。 **b** （可选）在 “卡尺” 工具栏中，为卡尺类型选择**轮廓图点到点**。 **c** 从 79 放大到 99 *m/z*。 **d** 将光标移到质谱图窗格中要添加卡尺的位置。 **e** 将光标拖到质谱图中卡尺的终点。在拖动光标时，质量增量的值将改变。松开鼠标按钮时，将添加卡尺。	• 光标将变为箭头。您可以使用此光标选择卡尺的起点和终点。 • 如果质谱图为棒状图，则无法选择卡尺类型，因为**轮廓图点到点**对棒状图数据没有任何影响。 • “三角形” 光标设置到所选峰的顶部。
3 修改卡尺以使用其他颜色。	**a** 单击在上一步中创建的卡尺。 **b** 单击 “MS 质谱图结果卡尺” 工具栏中的 “卡尺属性” 按钮 ( )。 **c** （可选）键入**开始 X** 和**开始 Y** 值。 **d** 选择**文本颜色**。 **e** 选择**字体格式**和**字体大小**。 **f** 单击**确定**。	• 可以将多个卡尺添加到质谱图。 • 可以使用卡尺工具栏中的图标选择所有卡尺、删除卡尺及编辑卡尺。

任务 11. 添加质量卡尺 （续）

步骤	详细说明	注释



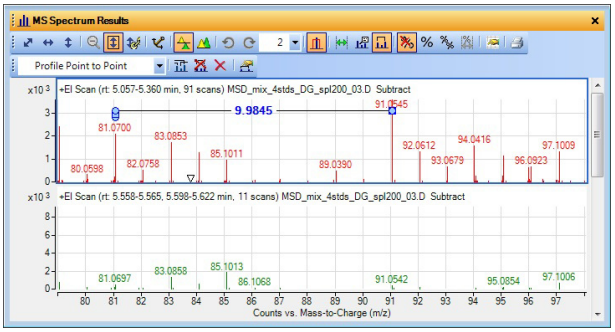


图 28 “质量增量卡尺设置”对话框和 “MS 质谱图结果”窗口

4 删除积分结果和质谱图。	**a** 单击**色谱图 > 清除结果 > 包含峰质谱图**。 **b** 单击 “MS 质谱图结果”窗口中的**范围选择**工具。	• 如果您要将卡尺与数据文件结果一同保存，请参见第 72 页上的 “任务 18. 保存结果”。

练习 2
查找和识别

任务 12. 按色谱图解卷积查找化合物 45
任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物 49
任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM） 52
任务 15. 按积分查找化合物 55
任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物 58
任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库 66
任务 18. 保存结果 72

在这些任务中，您可以在 GC/MS 数据文件中查找和识别化合物。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

任务 12. 按色谱图解卷积查找化合物

此查找化合物算法可以在 GC/MS 数据中识别化合物，并为每个化合物创建已清理的 MS 质谱图。此功能是用于从复杂数据中 “挖掘” 信息的一种简便方式。只能对 “全扫描”、“产物离子” 扫描或 “中性丢失” 扫描模式下采集的 GC/MS 样品数据使用 “按色谱图解卷积查找化合物” 算法。

此任务展示了使用精确质量数据按色谱图解卷积查找化合物。您也可以在首次更改提取窗口之后，使用单位质量数据按色谱图解卷积查找化合物。

任务 12. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
1 打开 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• “按色谱图解卷积查找化合物”算法可使用 GC/QQQ 和 GC/Q-TOF 数据文件。

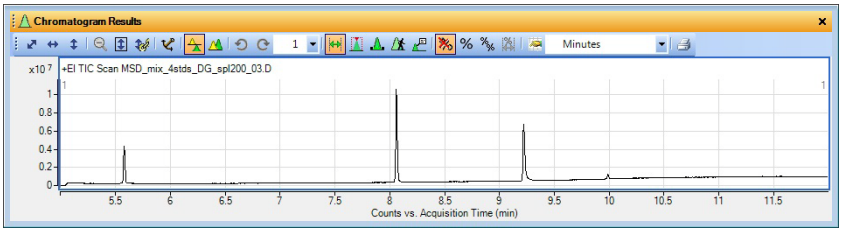
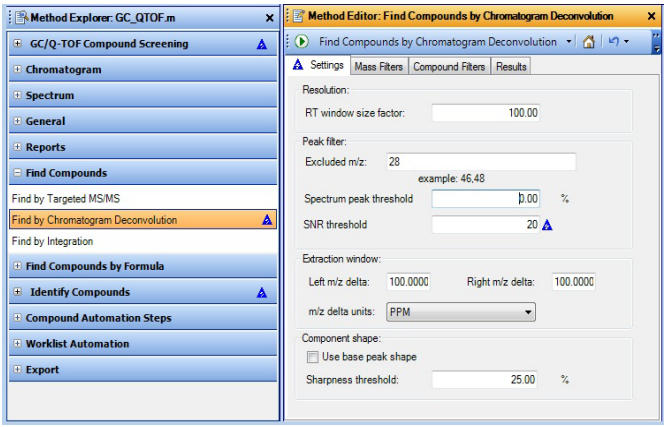


图 29 Pest - 200 - Scan.d 的 TIC 色谱图

2 配置用户界面以处理 GC 数据。	• 按照第 12 页上的 “任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面”中提供的说明进行操作。	• 对于这些示例，请调用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程。

任务 12. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
3 使用色谱图解卷积算法查找化合物。 • 选择 Agile 积分器。 • 输入 20 作为 SNR 阈值。 • 为**左侧 m/z 变化量**和**右侧 m/z 变化量**值输入 100 ppm。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，选择**查找化合物 > 按色谱图解卷积查找**。 **b** 在峰过滤器的 “设置” 选项卡上，键入 20 作为**信噪比阈值** **c** 为 **m/z 增量单位**选择 **PPM**。 **d** 为**左侧 m/z 变化量**输入 100，为**右侧 m/z 变化量**输入 100。	• 也可以在 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 部分中找到 “按色谱图解卷积查找” 部分。 • 如果有单位质量数据，则可以为**左侧 m/z 变化量**值输入 0.3 AMU，为**右侧 m/z 变化量**值输入 0.7 AMU • 如果某个化合物高亮显示，则可通过使用**化合物 > 提取完整结果集**菜单项找到该化合物，然后提取该化合物的完整结果集。
		
	图 30 “按色谱图解卷积查找” 部分中的 “设置” 选项卡	
• 选择提取 EIC、 MS 质谱图和 MS/MS 质谱图。	**e** 单击**结果**选项卡。 **f** 选中**提取 EIC、提取 ECC、提取已清理的质谱图**和**提取原始质谱图**复选框。 **g** 单击 ▶ 以便对数据文件运行**按色谱图解卷积查找化合物**算法。 **h** 如有必要，请单击**视图 > 化合物列表**命令。	• “定性分析” 程序在这些条件下找到了 4 种化合物。 • 如果未对数据文件建立索引，则在运行此算法时，可能需要花费很长的时间。

任务 12. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
4 检查化合物。请参见第 48 页上的图 31。	**a** 在 “MS 质谱图结果”工具栏中，选择**最大列表窗格数**框中的 **2**。 **b** 单击“化合物列表”窗口中的**隐藏空列**图标。 **c** 单击“数据浏览器”窗口中的第一个化合物。 **d** 在选择 “数据浏览器”窗口后，可使用箭头键切换化合物。	• 显示两个质谱图是一种用于显示单一化合物的所有信息的便捷方式。 • 请注意，将会显示已清理的质谱图和原始质谱图。

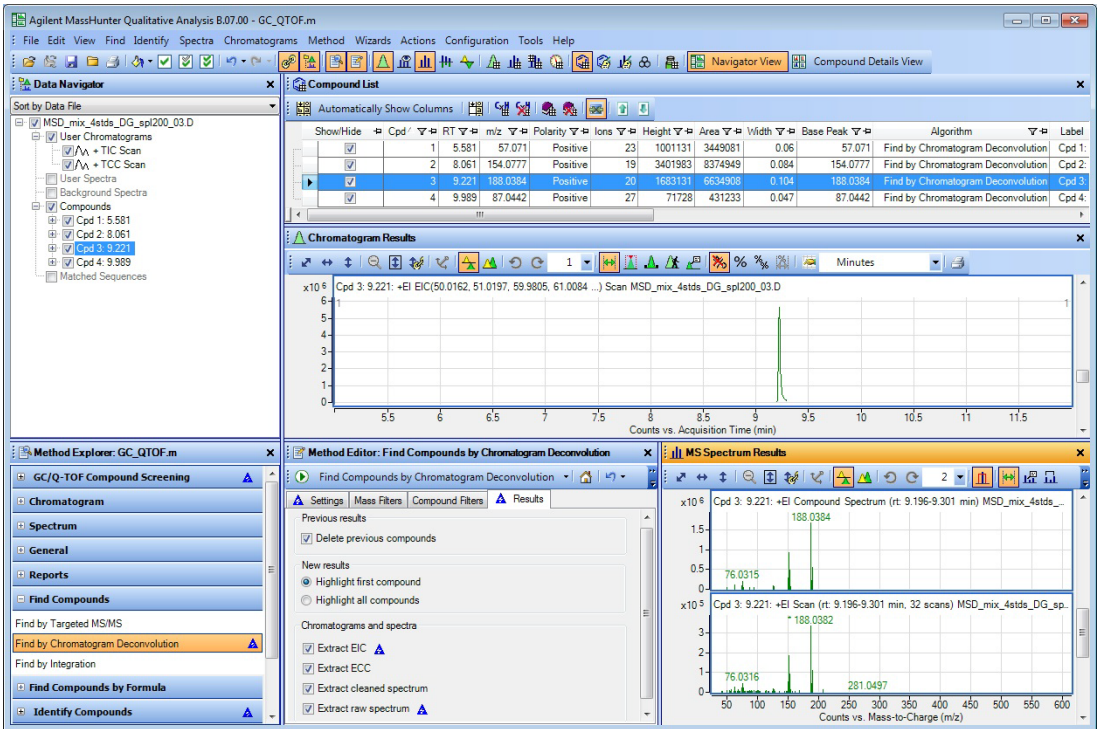


图 31 按色谱图解卷积结果查找化合物

任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物

在此任务中，您可以识别在第 45 页上的“任务 12. 按色谱图解卷积查找化合物”中找到的化合物并为之生成分子式。如果您购买了 *NIST11.l* 谱库（或更高版本）或使用 *demo.l* 谱库，则可执行此任务。如果有两个谱库，则可以同时选择这两个谱库。

任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
1 对 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件中的所有化合物进行谱库检索。	**a** 在“数据浏览器”窗口中高亮显示 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 数据文件中的化合物。 **b** 在“方法管理器”窗口中，单击**识别化合物 > 检索谱库**。 **c** 在“设置”选项卡中，单击**添加谱库**按钮。请选择 **demo.l** 谱库并单击**确定**按钮。 **d** （可选）在“设置”选项卡中，单击**添加谱库**按钮。选择 **NIST11.l** 谱库并单击**确定**按钮。 **e** （可选）选择**在第一个谱库匹配处停止**作为**多谱库检索类型**。 **f** 单击主菜单中的**识别 > 检索谱库以查找化合物**。您也可以单击**检索谱库以查找化合物**图标 来运行该算法。 **g** 单击**视图 > 质谱图对比结果**。 **h** 单击**“视图” > “结构查看器”**。 **i** 如有必要，单击**视图 > 化合物识别结果**以显示此窗口。 **j** 如有必要，单击**化合物识别结果**窗口的选项卡。此窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。	• 也可以在“方法管理器”中单击“GC/Q-TOF 化合物筛查” > “按谱库检索识别” 。此时会显示“方法管理器”中的相同部分。 • Demo.l 和 Nist11 应该安装在 \MassHunter\Library 文件夹中。 • 请注意，在检索 *NIST11.l* 谱库后将识别许多化合物。 • 如果没有 *NIST11.l* 谱库，则可以选择第二个谱库 （如果有）。 • 如果选择了两个或更多谱库，并选择了**在第一个谱库匹配处停止**，谱库检索算法将检索列表中的第一个谱库。如果识别出化合物，则该算法将停止。如果未识别出化合物，则它将检索下一个谱库，直到识别出化合物或检索到最后一个谱库为止。 • 您可以使用“谱库编辑器”程序修改用于检索谱库算法的 **.L** 谱库。此程序与 Agilent MassHunter “定量分析”程序一同安装。单击 图标可启动此程序。

任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
2 在 “化合物列表” 窗口和 “化合物识别结果” 窗口中显示 “质谱库结果” 列。	**a** 单击 “化合物列表” 工具栏和 “化合物识别结果” 工具栏中的 “显示谱库检索列” 按钮 ( )。 **b** 单击 “化合物列表” 工具栏和 “化合物识别结果” 窗口中的 “隐藏空列” 按钮 ( )。	

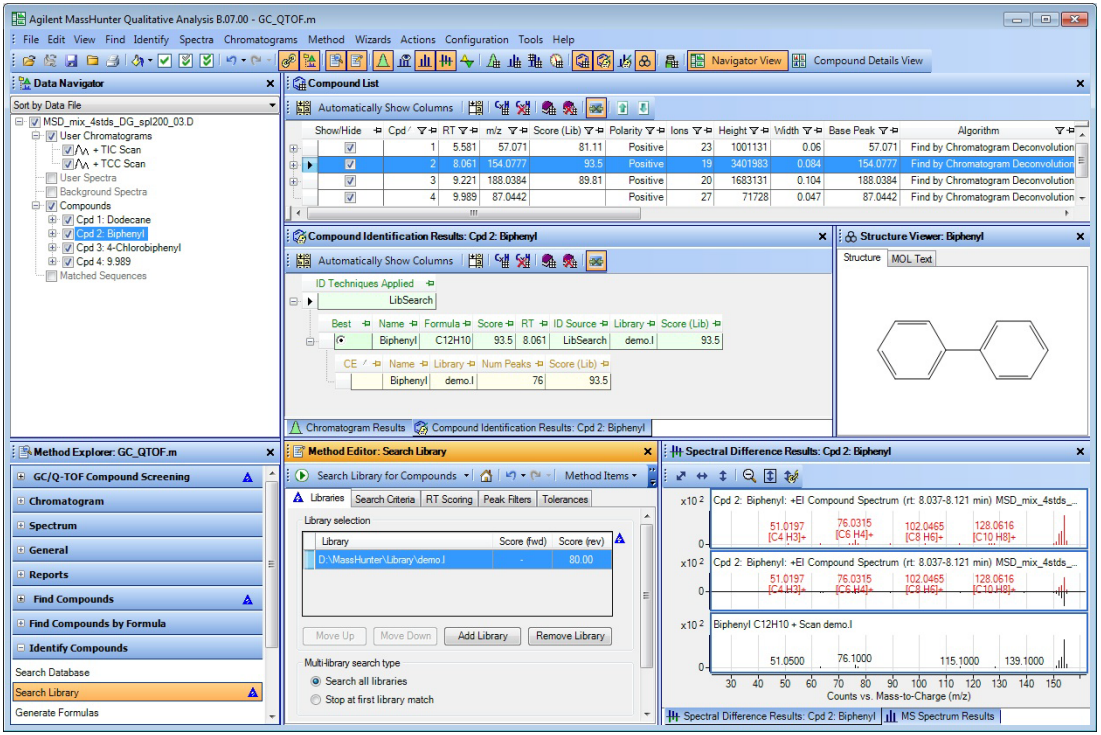


图 32 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 数据文件和谱库检索结果中的化合物

3 切换到 “化合物详细信息” 视图以查看化合物。	**a** 单击主工具栏中的 Compound Details View 。 **b** 关闭**化合物碎片质谱图结果**窗口。	• 只有在将碎片确认与 “按分子式查找” 算法一起使用时，“化合物碎片质谱图结果” 窗口中才有结果。

任务 13. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
4 查看 “化合物详细信息”视图中的结果。	**a** 单击 “化合物色谱图结果”窗口中的 “叠加”图标。 **b** 展开 “化合物识别结果”窗口中的结果。	• 您可以在联机帮助中找到有关 “化合物详细信息”视图的更多信息。在使用以所有离子模式采集的数据文件查看按分子式查找算法的结果时，“化合物详细信息”视图很有用。

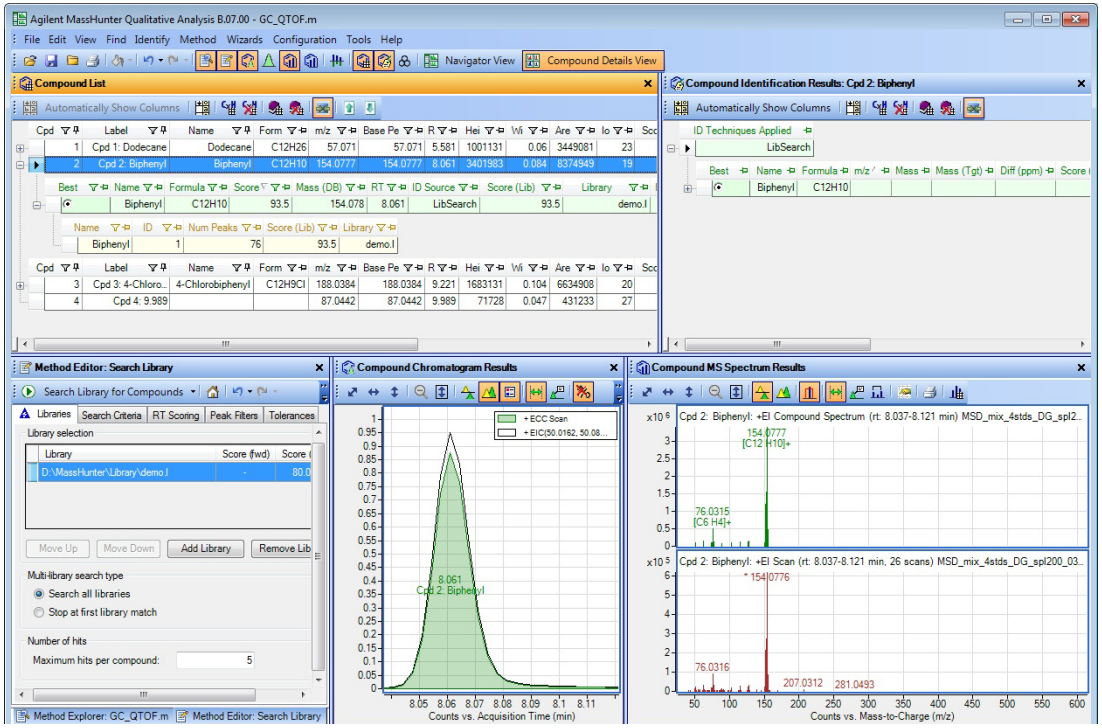


图 33 “化合物详细信息”视图显示 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 数据文件中的化合物

5 切换回 “浏览器视图”。	• 单击主工具栏中的 Navigator View 按钮。	
6 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 系统提示您是否要保存结果时，请单击**否**。	• 如果要保存这些结果，请参见第 72 页上的“任务 18. 保存结果”。

任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM）

“按 MRM 查找化合物”算法可识别来自三重四极杆的 MRM 数据中的化合物。该算法使用 MRM 转换检索化合物。将提取采集方法中的所有化合物并显示在 “化合物列表”中。根据色谱图积分结果，不会排除化合物。只能对使用 MRM 转换采集的数据使用“按 MRM 查找化合物”算法。如果数据文件是 MRM 数据文件，则 MRM 算法使用在数据文件中找到的信息。

任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
1 打开 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 单击 **GC 杀虫剂**示例数据文件文件夹中的 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• 在处理 GC/QQQ 数据时，可以使用 “常规”工作流程。在处理 GC/Q-TOF 数据时，可以使用“常规”工作流程或“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程。
2 配置用户界面以处理 GC QQQ 数据。	• 按照第 12 页上的 “任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面”中提供的说明进行操作。	

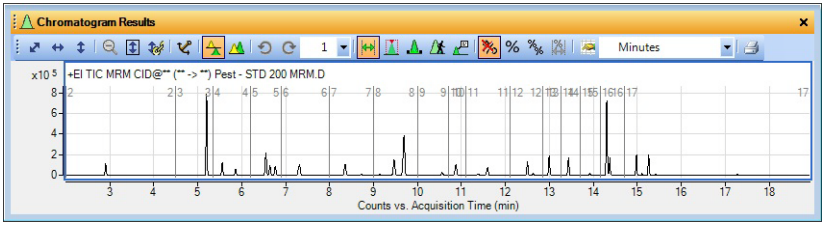


图 34 Pest - STD 200 MRM.d 中的 TIC 色谱图

任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
3 使用 MRM 算法查找化合物。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，选择**查找化合物 > 按 MRM 查找**。 **b** 单击**按化合物名称对离子对分组**按钮。 **c** 单击**积分器**选项卡。 **d** 选择 **Agile 2** 积分器。	• 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。 • 如果某个化合物高亮显示，则可通过使用**化合物 > 提取完整结果集**菜单项找到该化合物，然后提取该化合物的完整结果集。

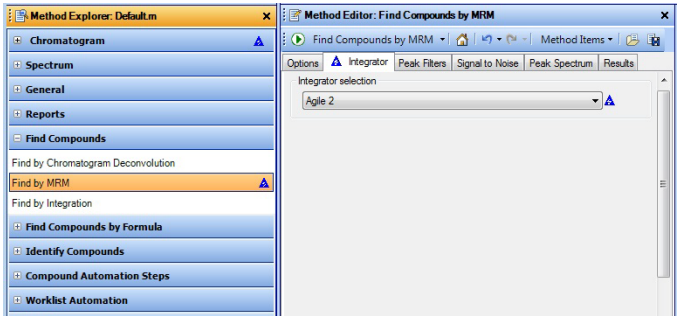


图 35 “方法编辑器” 的 “按 MRM 查找” 部分中的 “积分器” 选项卡

	e 单击 对数据文件运行**按 MRM 查找化合物**算法。 **f** 如有必要，请单击**视图 > 化合物列表**命令。 **g** （如有必要）请单击**视图 > 化合物识别结果**。	• “定性分析” 程序在这些条件下找到了 28 种化合物。
4 检查化合物。请参见第 54 页上的图 36。	**a** 在 “MS 质谱图结果” 工具栏中，选择**最大列表窗格数**框中的 **2**。 **b** 单击 “化合物列表” 窗口和 “化合物识别结果” 窗口中的**自动显示列**图标。 **c** 单击 “数据浏览器” 窗口中的第一个化合物。 **d** 在选择 “数据浏览器” 窗口后，可使用箭头键切换化合物。	• 在 “化合物识别结果” 窗口中，前级离子显示在 “前级离子（采集方法）” 列中，产物离子显示在 “产物离子（采集方法）” 列中。

任务 14. 使用 MRM 查找化合物 （仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释

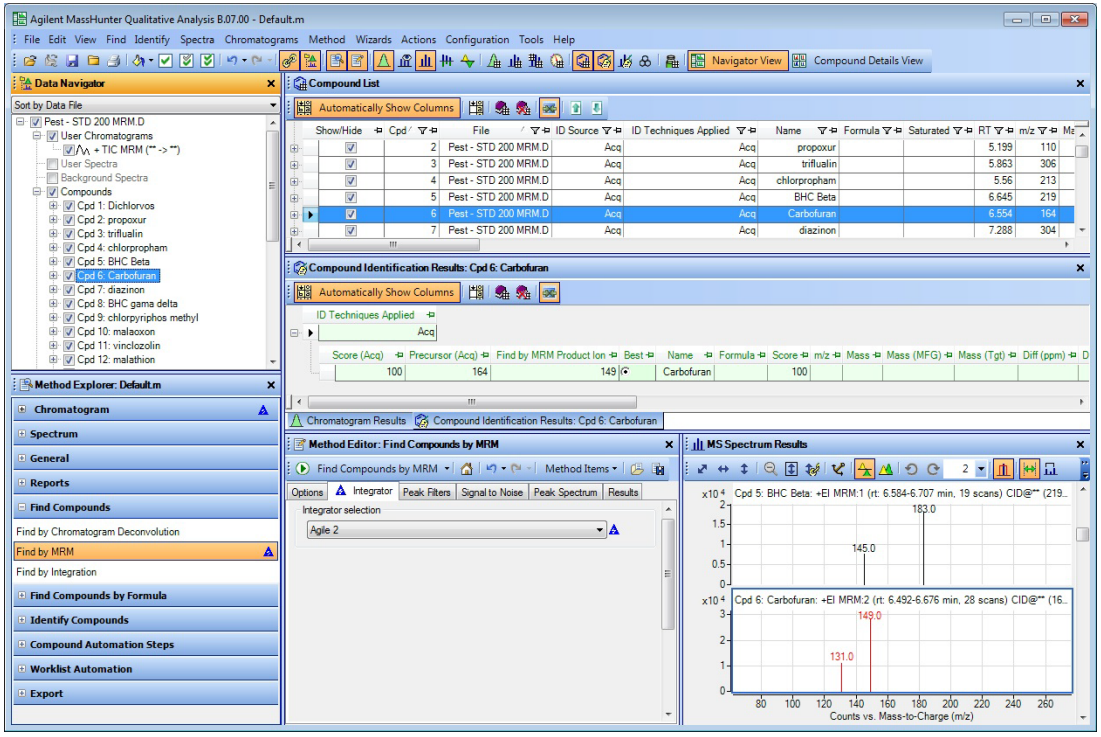


图 36 按 MRM 查找结果

5 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 单击**关闭**。	• 如果要保存这些结果，请参见第 72 页上的“任务 18. 保存结果”。

任务 15. 按积分查找化合物

按积分查找化合物算法根据积分结果识别化合物。将为积分器识别出的每个峰创建化合物。

任务 15. 使用积分查找化合物

步骤	详细说明	注释
1 打开 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• 在处理 GC/QQQ 数据时，可以使用“常规”工作流程。在处理 GC/Q-TOF 数据时，可以使用“常规”工作流程或“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程。

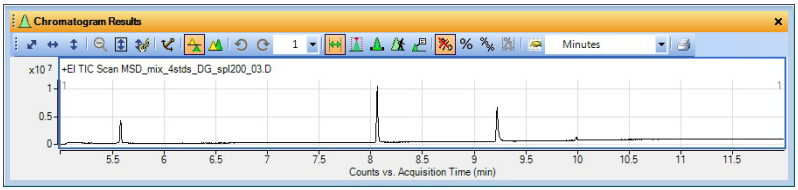


图 37 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 中的 TIC 色谱图

2 配置用户界面以处理 GC 数据。	• 按照第 12 页上的“任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面”中提供的说明进行操作。	
3 使用按积分查找算法查找化合物。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**查找化合物 > 按积分查找**。 **b** 选择 **MS/MS (GC)** 积分器。	• 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。 • 如果某个化合物高亮显示，则可通过使用**化合物 > 提取完整结果集**命令找到该化合物，然后提取该化合物的完整结果集。

任务 15. 使用积分查找化合物

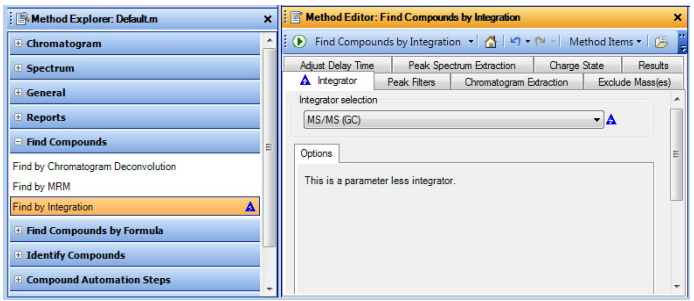
步骤	详细说明	注释
		
	c 单击 对数据文件运行**按积分查找化合物**算法。 **d** 如有必要，请单击**视图 > 化合物列表**命令。	• “定性分析”程序在这些条件下找到了 6 种化合物。
4 检查化合物。请参见第 54 页上的图 36。	**a** 在 “MS 质谱图结果”工具栏中，选择**最大列表窗格数**框中的 **2**。 **b** 单击“化合物列表”窗口中的**自动显示列**图标。 **c** 单击“化合物列表”窗口中的**隐藏当前的任何空列**图标。 **d** 单击“数据浏览器”窗口中的第一个化合物。 **e** 在选择“数据浏览器”窗口后，可使用箭头键切换化合物。	

图 38 “方法编辑器”的“按积分查找”部分中的“积分器”选项卡

任务 15. 使用积分查找化合物

步骤	详细说明	注释

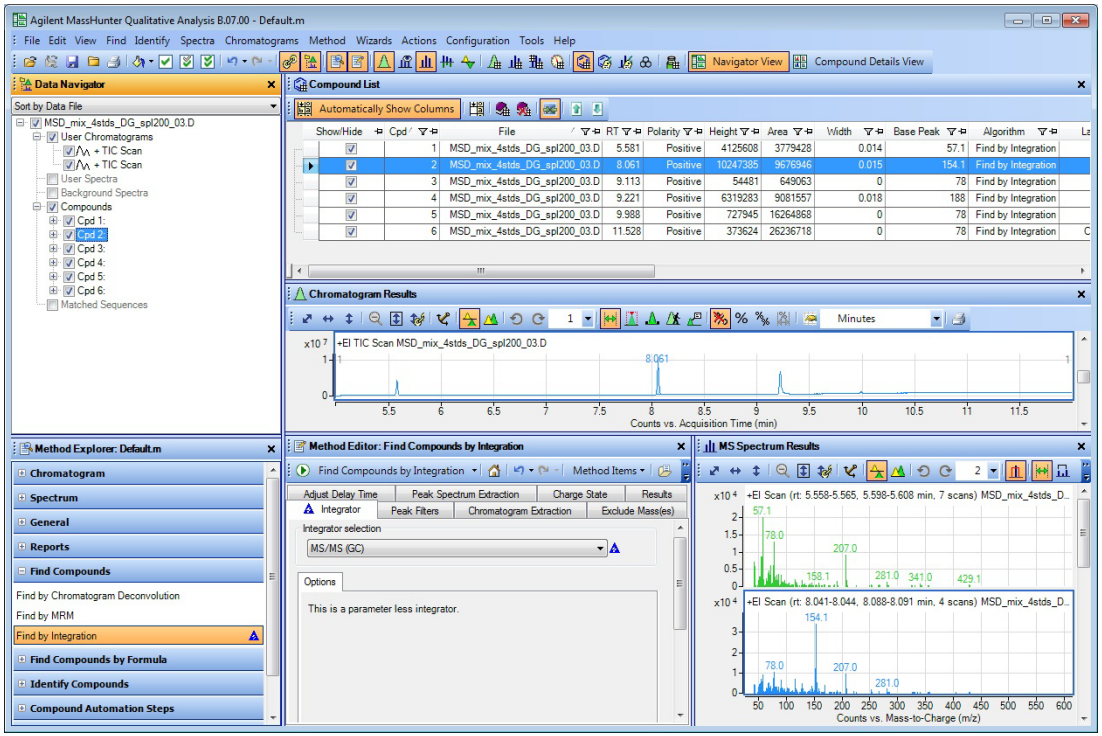


图 39 按积分查找结果

5 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 提示是否保存结果时，单击**否**。 **c** 单击**关闭**。	• 如果要保存这些结果，请参见第 72 页上的“任务 18. 保存结果”。

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

可在“所有离子 MS/MS”模式中获取的 LC/MS 数据文件上执行目标化合物的碎片确认。在 LC/Q-TOF 仪器中，这是通过在 2 至 4 个不同碰撞能量之间交替进行采集实现的。建议使用的碰撞能量是 0 V、20 V 和 40 V。0 V 质谱图被认为是“低能量通道”，它主要显示洗脱化合物的前级离子，而 20 V 和 40 V 质谱图被认为是“高能量通道”，它们显示在该时间洗脱的所有化合物的碎片离子。因此，称为“所有离子 MS/MS”。可在 LC/TOF 仪器上进行类似的实验，即在 2 至 4 裂解电压之间交替进行采集（例如， 125 V、 200V 和 275 V）。对于“低能量通道”，将设置裂解电压以避免在大多数目标化合物中发生离子源内裂解，而“高能量通道”质谱图显示洗脱化合物的碎片离子。使用多个高能量通道可提供不同化合物稳定性的碎片。

对于 GC/Q-TOF EI 数据，也可以进行碎片确认，此操作本来就可以在每个质谱图中显示大多数碎片离子。在这里，只有高能量通道，大多数时候，在质谱图中不显示分子离子。因此，需要选中**分子离子可选**复选框。算法首先根据丰度和 *m/z* 值从 EI-MS 质谱库中选择“n”个碎片离子（优先选择 *m/z* 较高的碎片离子，因为它们包含更多结构信息）。然后，算法在谱库中的目标保留时间周围的时间窗口中提取这些离子的离子色谱图，并创建目标色谱峰列表。然后，它尝试查找按 RT 组合在一起的峰组，选择参考离子和确认碎片离子。参考离子可以是分子离子（如果存在），但不一定就是分子离子。算法随后将计算所选色谱峰共流出的程度。如果用户可设置的最小离子数的共流出得分超过了设定的阈值，则对目标化合物定性。

如果“低能量通道”中化合物的前级离子由于饱和而显示分裂峰，也可以对 LC/MS 数据使用**分子离子可选**模式。在这种情况下，不会将分子离子用作参考离子；而是从高能量通道中选择参考离子和确认碎片离子。

在所有情况下将生成 “已清理的高能量扫描”，它只显示参考离子和确认碎片离子，并可选择使用其子分子式进行标注。

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
1 打开 **Tomato_spiked.D** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 单击 **GCMS 杀虫剂**示例数据文件文件夹中的 **Tomato_spiked.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• 在处理 GC/QQQ 数据时，可以使用 “常规” 工作流程。 • 在处理 GC/Q-TOF 数据时，可以使用 “常规” 工作流程或 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程。
2 配置用户界面以处理 GC 数据。	• 按照第 12 页上的 “任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面” 中提供的说明进行操作。	
3 调用 GCQTOF_Pesticide_Example.m 方法文件。	**a** 单击**方法 > 打开**。 **b** 选择 **GCQTOF_Pesticide_Example.m** 方法并单击**打开**。	• 此方法安装在 \\MassHunter\methods\B.07.00 文件夹中。 • 如果在调用此方法时看到任何蓝色三角形，则可暂时忽略它。
4 将方法保存为 *iii*_GCQTOF_Pesticide_Example.m，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。	**a** 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m**。 **c** 单击**保存**按钮。	• 请注意，保存方法时，会导致在打开的方法中所有表示值发生更改的蓝色三角形消失。

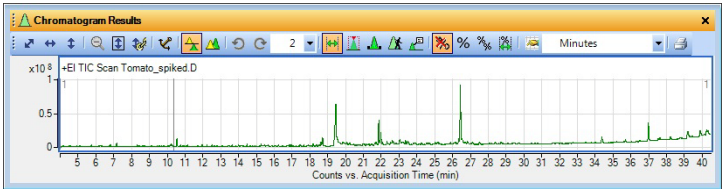


图 40 Tomato_spiked.d 中的 TIC 色谱图

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
5 确认按分子式查找化合物的参数。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 选项**。 **b** 单击**分子式来源**选项卡。 **c** 单击 **Database/Library**。 **d** 选择 PCDL 文件夹中的 **Pesticide_Example.cdb** 谱库。 **e** 单击**分子式匹配**选项卡。 **f** 对**可能的 m/z** 选择**对称 (ppm)**，并检查值。 **g** 选中**限制 EIC 提取范围**复选框，选择**对称**，键入 `1.0` 作为**预期保留时间**。	• 可在 GC/Q-TOF EI 数据文件上运行“按分子式查找”(FbF) 算法。也可以对在“所有离子 MS/MS”模式中采集的 LC/MS 数据文件使用此算法。 • 这些值已在此示例方法中设定。 • 为**可能的 m/z** 选定的值可能取决于您是在高分离度模式还是双增益模式中运行采集方法。

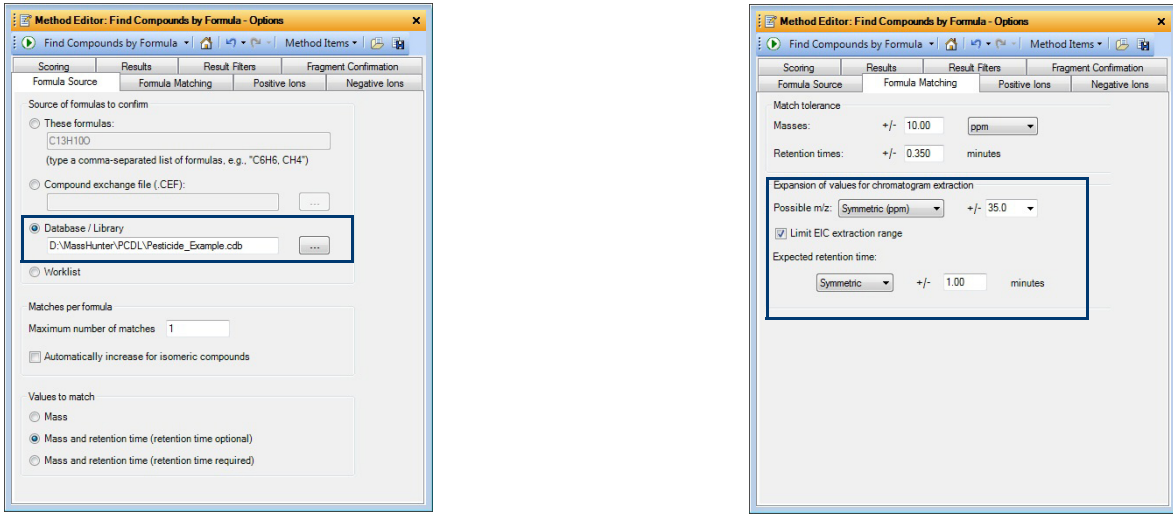
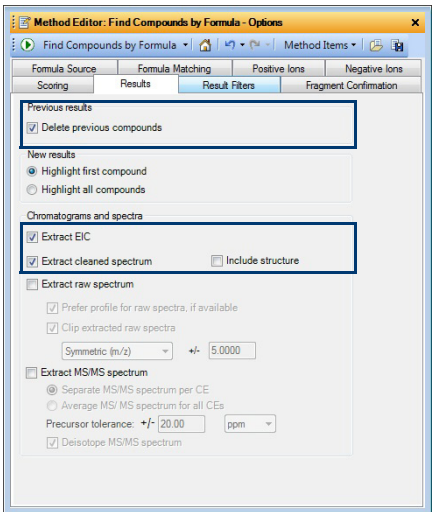


图 41 “按分子式查找 - 选项”部分中的**分子式源**选项卡和**分子式匹配**选项卡

	h 单击**结果**选项卡。 **i** 选中**删除以前的化合物**。 **j** 选中**提取 EIC** 和**提取已清理的质谱图**。 **k** 单击**结果过滤器**选项卡。 **l** 选中**仅为匹配的分子式生成化合物**复选框。	• 如果清除**仅为匹配的分子式生成化合物**，则在结果中还会显示未找到的化合物。

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释



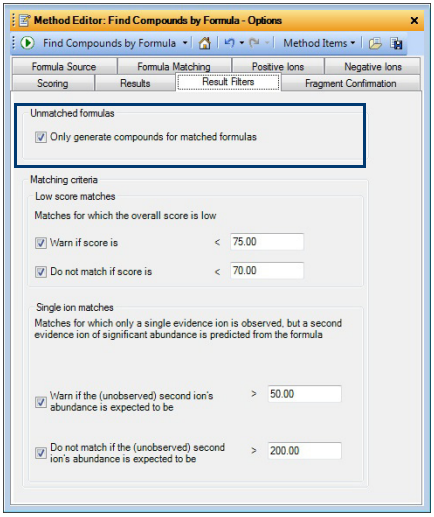


图 42 “按分子式查找 - 选项”部分中的**结果**选项卡和**结果过滤器**选项卡

m 单击**碎片确认**选项卡。

n 选中**碎片离子确认**。

o 选中**分子离子可选**。

p 单击**仅使用质谱库**，对**质谱库中最特定离子的数量**键入 7。

q 对于**保留时间差**，键入 0.2。

- 对于 GC/Q-TOF 数据，选中**分子离子可选**复选框。
- 离子数量越多，在结果中产生的特定性和置信度就越高；但是，较大的离子数量会导致程序运行时间变长。
- 建议的**保留时间差**的范围是 0.1 至 0.2。该值是允许参考离子的保留时间漂移的差。“定性分析”程序将自动选择参考离子。

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
	r 清除**信噪比**复选框 s 键入 70 作为**共流出得分**。 t 单击**定性碎片离子的最小数量**并键入 1。	• 如果选中**信噪比**复选框，则生成假阴性的可能性较高（如果比率太低）。 • 建议的起始值为 1 至 3。设置为 1 需要两个定性碎片：参考离子和定性离子。

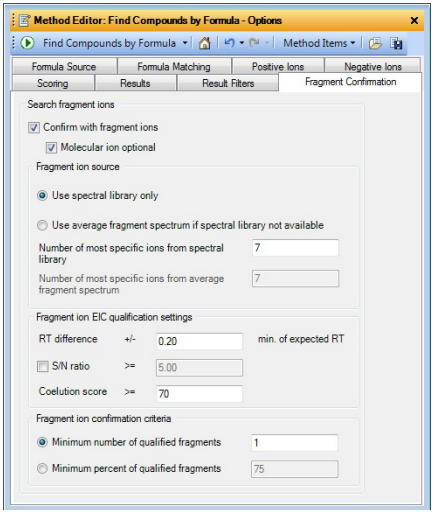


图 43 “按分子式查找 - 选项”部分中的**碎片确认**选项卡

6 运行按分子式查找化合物算法。	• 单击 以便对数据文件运行**按分子式查找化合物**算法。 • 单击**查找 > 按分子式查找化合物**。	• “定性分析”程序在这些参数值下找到了 5 种化合物。 • 保留其他选项卡中的值不变。
7 保存此方法。	• 按照以下三种方式中的一种来保存方法： ◦ 单击方法编辑器中的**保存方法**图标 。 ◦ 右键单击方法编辑器，然后单击**保存方法**。 ◦ 从顶层菜单中，单击**方法 > 保存**。	

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
8 检查化合物。请参见第 54 页上的图 36。	**a** 单击主工具栏中的 Compound Details View 。 **b** 如果可见，请关闭**方法编辑器**和**方法管理器**窗口。 **c** 在“化合物列表”窗口中，右键单击要删除的任何列的标题，然后单击“删除列”。 **d** 将“化合物列表”窗口中的**标记（目标化合物）**列移到**标签**旁边。	• 选择“化合物列表”窗口中的化合物后，将在此视图中的其他窗口中显示结果。 • 有关详细信息，请参见联机帮助。 • 显示两个窗口的详细信息。

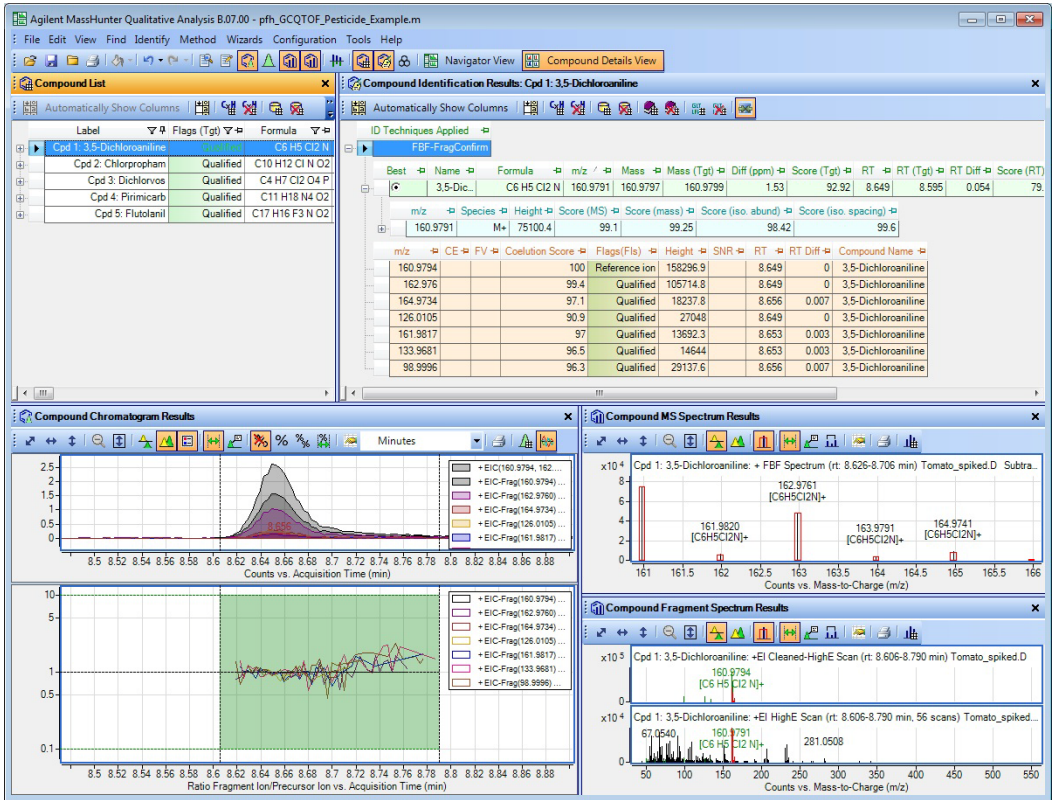


图 44 包括碎片确认结果的按分子式查找结果

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
	e 单击或使用箭头键更改“化合物列表”中的化合物，可一次检查一个化合物。 **f** 检查“化合物识别结果”窗口中的信息。 **g** 单击 + 图标展开表的一个级别。展开表的级别后，图标将变为 - 图标。	• 此表的第一级显示您运行的所有识别算法的摘要信息。 • 第二级（蓝色）显示用于创建算法总分的各个分数。只有在找到分子离子并反映按分子式查找结果时才显示该行。 • 底部的表显示碎片离子及其共流出得分。还显示是否已对碎片离子定性。

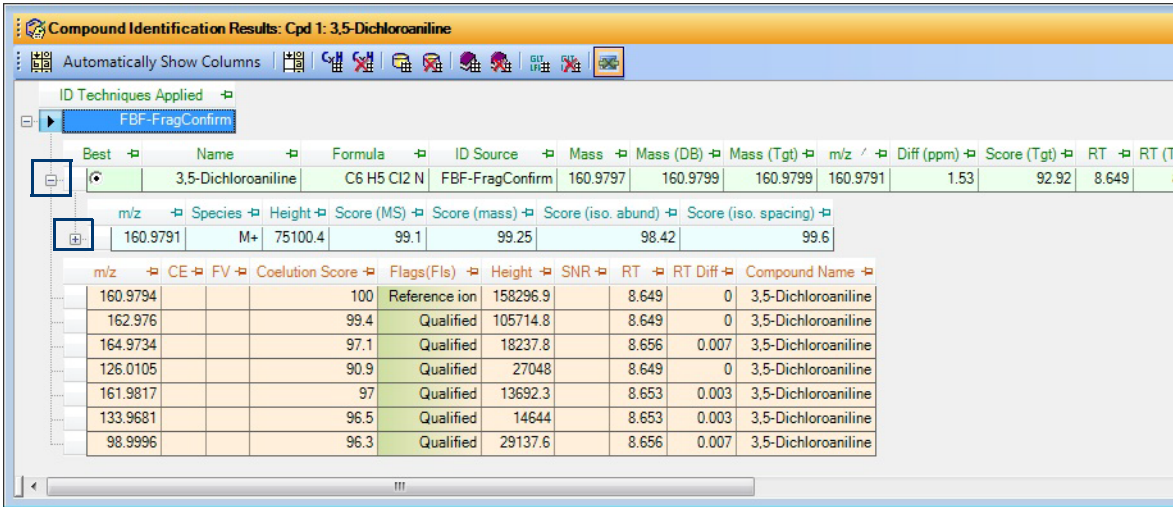


图 45 “化合物识别结果”窗口

任务 16. 通过碎片确认按分子式查找化合物

步骤	详细说明	注释
	h 在“化合物色谱图结果”窗口中查看结果。 **i** 确认“共流出图谱”窗格可见。 **j** 确认色谱图已叠加。工具栏中的离子的设置如下所示： 	• “化合物色谱图结果”窗口显示每个碎片离子的单个离子跟踪。 • 还显示共流出图谱，它显示碎片离子与化合物共流出的接近程度。为了便于参考，将显示一条 y 值为 1 的黑线。值为 1 表示定性离子完全与参考离子色谱图共流出。随着比率接近 1，表明定性离子更紧密地与参考离子共流出。

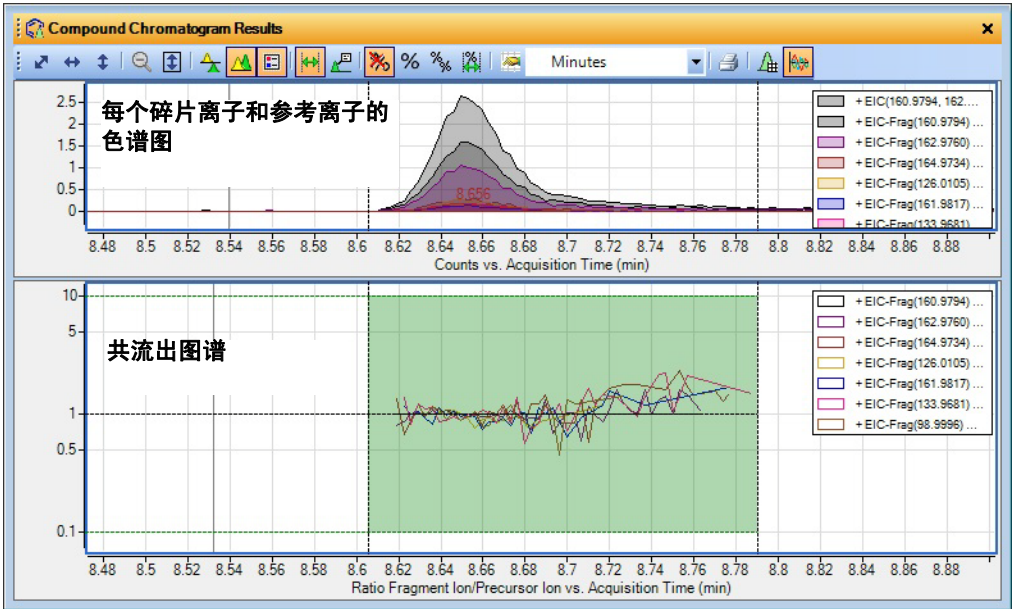


图 46 “化合物识别结果”窗口

9 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 提示是否保存结果时，单击**否**。	• 如果要保存这些结果，请参见第 72 页上的“任务 18. 保存结果”。

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

在此任务中，首先从 GC/Q-TOF 数据文件对峰质谱图进行积分和提取。然后，为每个峰质谱图生成可能的分子式。

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释
1 打开 **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• 如果**调用结果数据**复选框不可用，则没有在数据文件中保存任何结果。有关如何保存结果的说明，请参见第 72 页上的 “任务 18. 保存结果”。 • 将调用 “常规” 工作流程。
2 积分和提取峰质谱图。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击“色谱图” > “积分 (MS)” 部分。 **b** 单击**峰过滤器**选项卡。 **c** 单击**峰高**按钮。 **d** 选中**相对峰高**复选框。 **e** 选中**上限（按峰高）**复选框，并键入 4。 **f** 单击**色谱图 > 积分并提取峰质谱图**。	

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释
3 为每个峰质谱图生成分子式。 • 查看 “质谱图识别结果” 列表。 • 关闭 “MS 质谱图结果” 窗口。 提示：要获取与图 48 相同的结果，请确保您已选择**常见有机分子**作为同位素模型。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，单击**识别化合物 > 生成分子式**。 **b** 在 “方法编辑器” 窗口中，单击**电荷态**选项卡，并选择**常见有机分子**作为**同位素模型**。 **c** 在 “数据浏览器” 窗口的**用户质谱图**部分中，高亮显示所有质谱图。 **d** 单击**识别 > 从质谱图峰生成分子式**命令或**从质谱图峰生成分子式**按钮 以运行该算法。 **e** 如有必要，单击 “质谱图识别结果” 图标 ，或单击**视图 > 质谱图识别结果**命令。 **f** 在 “质谱图识别结果” 窗口中，单击工具栏上的**自动显示列**按钮。 **g** 单击 “质谱图识别结果” 窗口中的 “隐藏空列” 图标 ()。 **h** 在 “数据浏览器” 窗口中，选择接近 5.558 分钟的质谱图。 **i** 选择 **C6 H7** 作为**最佳**结果。 **j** 展开表以查看该行。 **k** 关闭 “方法编辑器” 窗口。 **l** 查看 “MS 质谱图结果” 窗口中显示在许多峰上方的 “分子式和离子种类” 。所有分子式和离子种类的颜色与质谱图相同。	• 按适当的 m/z 放大时，您可以在质谱图图谱上看到预测的同位素丰度比。有关详细信息，请参见联机帮助。 • 有时，可以使用方法编辑器工具栏中的 “运行” 图标 从一组可能的操作中选择一项操作。例如，单击此部分中的 “运行” 图标时，可能会执行两项不同的操作。如果单击箭头，系统会显示可能操作的列表，您可以从中选择要执行的操作。如果从列表中选择其他操作，则会更改缺省操作。如果只单击 “运行” 按钮，则系统将执行缺省操作。 • 可以通过拖动用于分隔相邻列的行来更改列宽。 • 可以通过拖动列标题来移动列。 • 可以通过单击表中快捷菜单中的**删除列**来删除表中的列。

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释

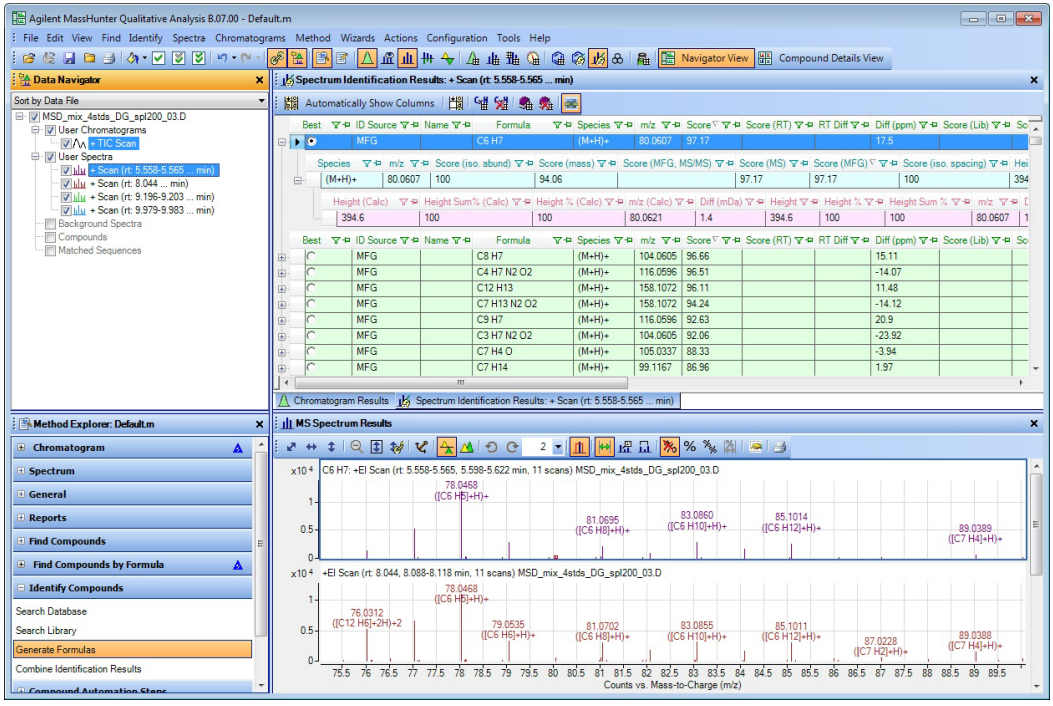


图 47 对峰 1 到 4 生成分子式结果

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释
4 对峰质谱图 1 到 4 执行谱库检索。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，单击**用户质谱图**。 **b** 在“方法管理器”窗口中，单击**识别化合物 > 检索谱库**。 **c** 添加有效谱库。选择 GCQTOF_pesticide_matrix_RT.cdb 谱库。 **d** 键入 50 作为**分数 （反向）**。 **e** 清除“检索标准”选项卡中的**仪器类型**和**碰撞能量**复选框。 **f** 清除“峰过滤器”选项卡中的**绝对峰高**和**相对峰高**复选框。 **g** 单击主菜单中的**识别 > 检索谱库以查找质谱图**。 **h** 关闭 “方法编辑器”窗口。	• 单击 “方法管理器”中的某个部分时将自动打开“方法编辑器”。
5 修改可见的列。	**a** 右键单击 “质谱图识别结果”窗口，然后单击**添加 / 删除列**。在“（增强的）添加 / 删除列”对话框中，选中要显示的列。单击**确定**。 **b** 关闭 “方法编辑器”窗口 **c** 单击 “质谱图识别结果”窗口中的“隐藏空列”图标 ()。 **d** 查看 “MS 质谱图结果”窗口中显示在每个峰上方的“分子式和离子种类”。	• 如果使用**删除列**命令并删除包含数据的列，并且 “自动显示列”功能处于打开状态，软件将自动重新显示该列。 • LibSearch 算法在此方法的“合并识别结果”部分中占有很多的权重。您可以手动选择最佳 MFG 结果，或更改识别结果的合并方式。

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释

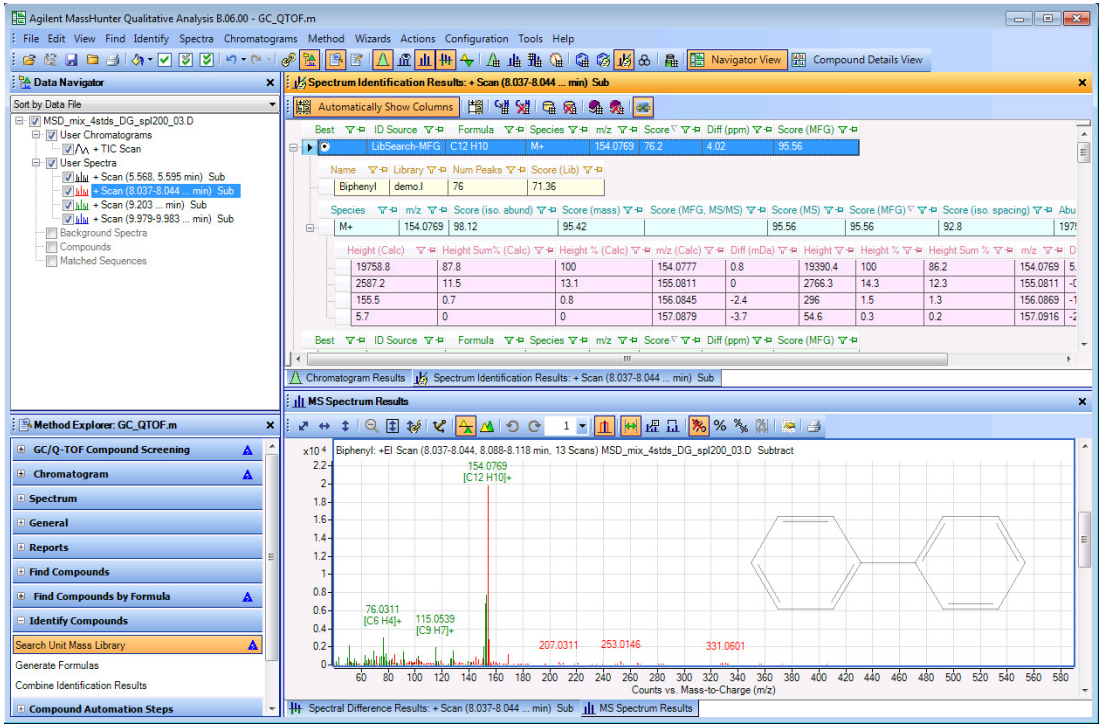


图 48 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

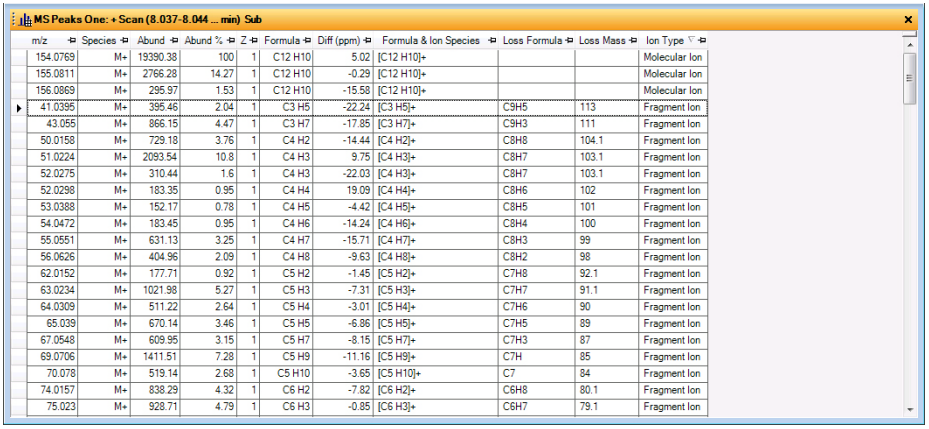
6 在 “MS 峰 1” 窗口中查看每个质谱图的结果。

a 单击**视图 > MS 质谱图峰列表 1**。
b 右键单击并单击 “添加 / 删除列”。
c 验证显示在图 49 中的列在**显示以下列**列表中。
d 按**离子类型**列排序。
e 如果离子类型是碎片离子，则在 “MS 质谱图结果” 窗口中，“分子式和离子种类” 以绿色显示在每个峰上。

- 碎片离子以绿色显示在 “MS 质谱图结果” 窗口中。
- **离子类型**可以是分子离子、碎片离子或空白。如果是碎片离子，则 “丢失分子式” 和 “丢失质量” 列将显示从分子离子转变为该离子的分子式和质量。分子式和离子种类显示该离子的分子式和离子种类。

任务 17. 为峰质谱图生成分子式和检索谱库

步骤	详细说明	注释



MS Peaks One: + Scan (8.037-8.044 ... min) Sub

m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion
155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion
156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion
62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

图 49 MS 峰 1 表，包含**离子类型**、**丢失分子式**、**丢失质量**和**分子式和离子种类**列

7 （可选）关闭数据文件。

- 您可以继续进行下一任务以了解如何保存结果。

a 单击**文件 > 关闭数据文件**。

b 单击**关闭**。

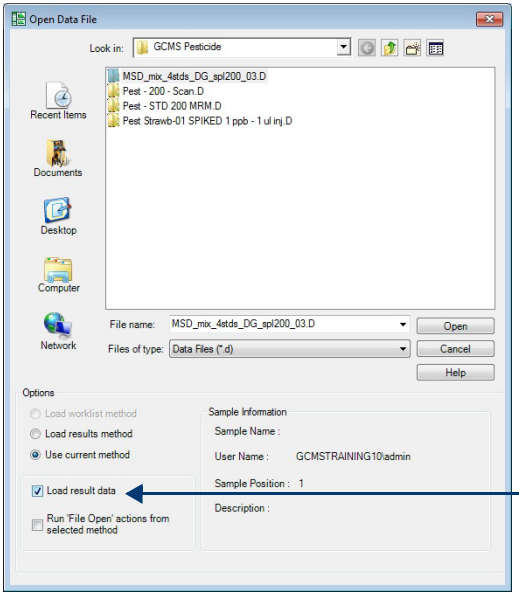
- 如果要保存这些结果，请参见第 72 页上的“任务 18. 保存结果”。

任务 18. 保存结果

在此任务中，您可以保存当前数据文件的结果。

任务 18. 保存结果

步骤	详细说明	注释
1 保存当前数据文件的结果，然后关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 保存结果**。 **b** 单击**文件 > 关闭数据文件**。	• 您只能随数据文件一起保存一组结果。如果您已随当前数据文件一起保存了结果，则在单击**文件 > 保存结果**时会覆盖这些结果。
2 打开数据文件并调用结果。	**a** 单击**文件 > 打开数据文件**。此时会打开 “打开数据文件” 对话框。 **b** 选择一个数据文件。对于此示例，请选择 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。 **c** 选中**调用结果数据**复选框。 **d** 单击**打开**按钮。	



将选中 “调用结果数据” 复选框。

图 50 “打开数据文件” 对话框

任务 18. 保存结果

步骤	详细说明	注释
3 检查结果。	**a** 单击**质谱图识别结果**窗口。 **b** 检查结果。	

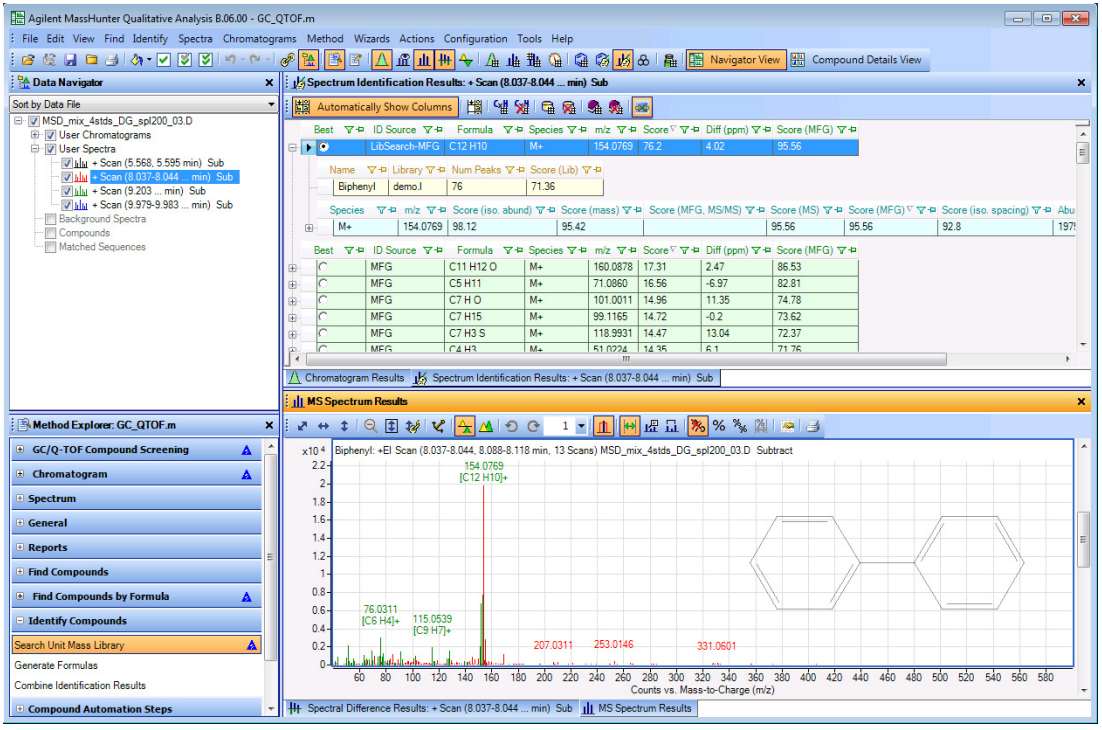


图 51 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

4 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 提示是否保存结果时，单击**否**。	

任务 18. 保存结果

步骤	详细说明	注释
5 再次打开数据文件，不调用结果。	**a** 单击**文件 > 打开**。此时会打开**打开数据文件**对话框。 **b** 选择一个数据文件。对于此示例，请选择 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框。 **d** 单击**打开**按钮。	• 如果您没有调用结果，则缺省情况下，在打开数据文件时会打开 TIC。如果您选中“从选定的方法运行‘文件打开’操作”复选框，则还会运行“文件打开”操作。有关详细信息，请参见联机帮助。

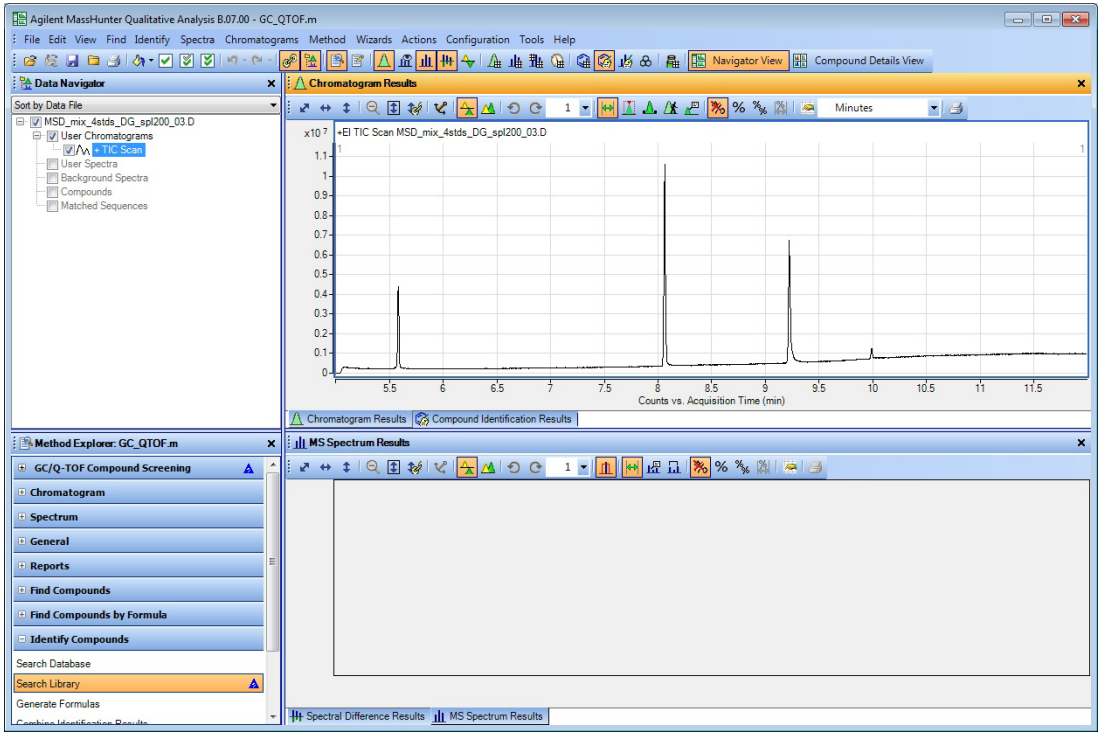


图 52 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

6 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 单击**否**。	

练习 3
使用工作流程、导出和打印

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法 76
任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法 81
任务 21. 导出 CEF 文件 84
任务 22. 打印分析报告 85
任务 23. 打印化合物报告 88

在这些任务中，您将学习如何设置和运行定性分析方法。然后将在打开数据文件时使用自动化方法执行操作。

对于这些示例，可以使用两种不同的工作流程。有关详细信息，请参阅第 102 页上的 “工作流程”。

“常规”工作流程支持 GC/QQQ、GC/Q-TOF 和 LC/MS 数据。“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程支持 GC/Q-TOF 数据。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

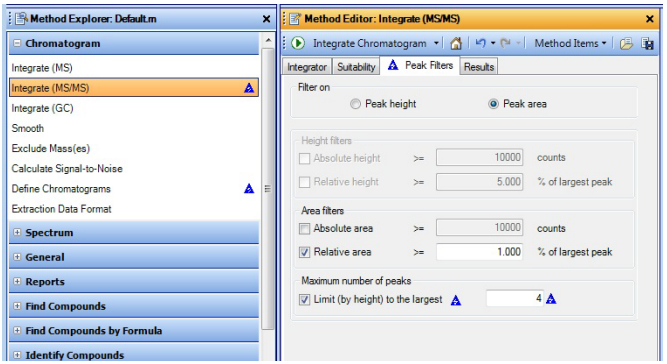
首次开始使用 Qualitative Analysis 程序时，将调用 default.m 方法。您可以对已打开的方法执行更改，并进行保存，或打开新的方法，执行更改，然后保存方法。不能覆盖 default.m 方法。

您也可以设置为使用打开数据文件时的方法运行特定操作。打开数据文件时，也可以调用那些用于创建与数据文件一起进行存储的结果的方法。每当您将结果与数据文件一起保存时，此方法都将自动进行保存。“常规”工作流程可用于 GC/MS 或 LC/MS 数据文件。

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
1 打开 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 单击 **GCMS 杀虫剂**示例数据文件文件夹中的 **Pest - STD 200 MRM.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	• 在处理 GC/MS 数据时，可以使用“常规”工作流程或“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程。
2 配置用户界面以处理 GC 数据。	• 按照第 12 页上的 “任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面”中提供的说明进行操作。	• 对于此示例，请选择“常规”工作流程。
3 设置方法以提取 TIC 色谱图。 • 针对 MS/MS 数据定义一个 TIC 色谱图。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**色谱图 > 定义色谱图**。 **b** 从**定义的色谱图**列表中删除 **BPC** 色谱图。 **c** 选择 **TIC** 作为**类型**。 **d** 确保 MS 级别为 **MS/MS**。 **e** 单击**添加**。	

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
4 编辑方法以积分数据。 • 将积分限制为四个最高峰。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**色谱图 > 积分 (MS/MS)**。 **b** 单击**峰过滤器**选项卡。 **c** 在“最大峰数”部分，选中**上限（按峰高）**复选框。 **d** 键入 4。	• 更新“色谱图 > 积分 (MS)”部分“峰过滤器”选项卡中的值时，会同时更新方法查看器其他部分中的值。将出现蓝色三角形以显示这些“其他部分”。
		**您可以单击“保存方法”图标以保存当前方法。**
图 53 “色谱图” > “积分 (MS/MS)” > “峰过滤器”选项卡		
5 对积分进行测试，以确保仅显示 4 个积分峰。	• 单击**积分色谱图**图标 ，以对此数据文件进行积分。	
6 将方法保存为 *iii*_GCexercise1，其中“*iii*”是您的姓名首字母缩写。	**a** 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iii_GCexercise1**。 **c** 单击**保存**按钮。	• 请注意，保存方法时，会导致在打开的方法中所有表示值发生更改的蓝色三角形消失。
7 更改峰质谱图背景，以在峰的开始处使用质谱图。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**质谱图 > 提取 (MS/MS)**。 **b** 单击**峰质谱图提取 (MS/MS)**。 **c** 对于峰质谱图背景，选择**峰开始处的质谱图 （或光谱图）**。	• 如果在保存方法后进行了任何其他更改，则会添加蓝色三角形。

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释

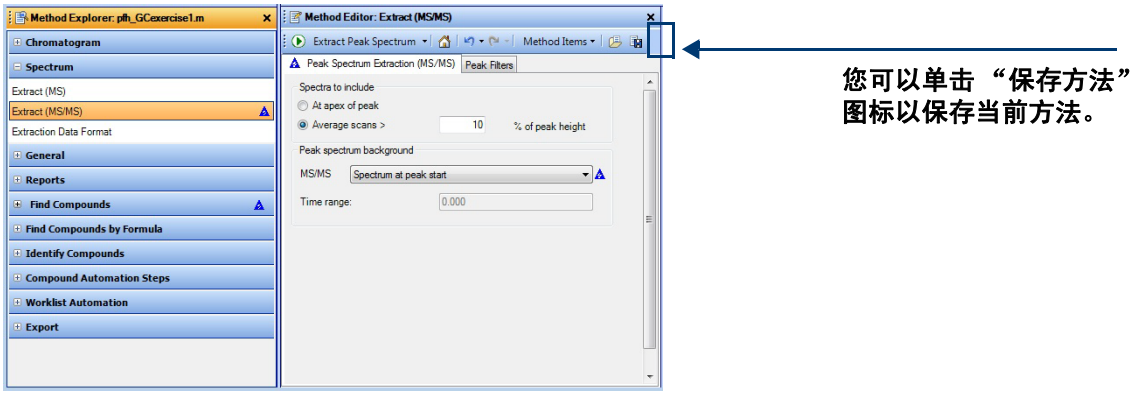
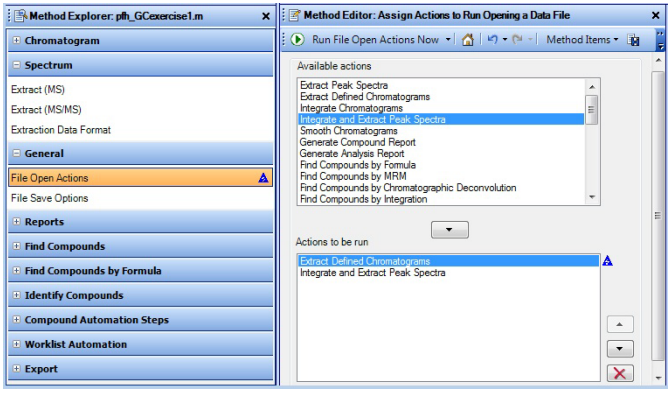


图 54 “质谱图” > “提取 (MS/MS)” > “峰质谱图提取 (MS/MS)” 选项卡

8 对 MS 质谱图提取进行测试，以确保扣除背景质谱图。	• 单击**提取峰质谱图** 图标，针对数据文件中选定的峰执行操作。	
9 保存此方法。	• 按照以下三种方式中的一种来保存方法： ◦ 单击方法编辑器中的**保存方法**图标 。 ◦ 右键单击方法编辑器，然后单击**保存方法**。 ◦ 从顶层菜单中，单击**方法 > 保存**。	• “保存方法” 图标如第 78 页上的图 54 所示
10 打开数据文件时，设置方法以自动化刚刚更改其参数的操作。 ◦ 列出在打开此数据文件或其他数据文件时将要执行的操作。 提示：请查看方法管理器中的 “常规” 部分。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，选择**常规 > 文件打开操作** .。 **b** 从**可用操作**列表中，选择**积分并提取峰质谱图**。 **c** 单击**添加**按钮 ，将所选操作移动到**要运行的操作**列表上。 您也可以在所选操作上双击，从而将其移动到其他列表。	• 缺省情况下，操作 “提取定义的色谱图” 在 “要运行的操作列表” 中。“提取定义的色谱图” 操作必须是列表中的第一个操作，因为您首先需要提取色谱图，然后再积分和提取峰质谱图。

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
11 测试文件打开操作。	• 单击**立即运行文件打开操作**图标，以运行数据文件上的操作。	• 不会覆盖色谱图和质谱图。将添加新的色谱图和质谱图。



两种不同的操作是要运行的操作列表中的一部分。第一个操作是提取所定义的色谱图。然后，对该色谱图进行积分并提取峰。

图 55 方法编辑器中的 “常规 > 文件打开操作” 部分

12 保存此方法。	• 单击 “方法编辑器” 窗口中的**保存方法** 图标。	
13 设置方法以自动化在工作单期间运行方法时的操作。 • 列出在打开此数据文件或其他数据文件时将要执行的操作。 提示：查看 “方法管理器” 窗口中的 “工作单自动处理” 部分	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，选择**工作单自动处理 > 工作单操作**。 **b** 从**要运行的操作**列表中删除**生成分析报告**。	
14 测试工作单操作。	• 单击**立即运行工作单操作**图标，以在数据文件上执行操作。	• 不会覆盖色谱图和质谱图。将添加新的色谱图和质谱图。

任务 19. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

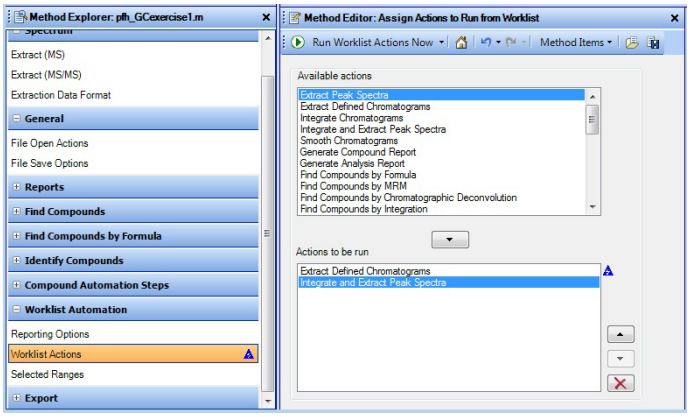
步骤	详细说明	注释
		**方法中包括两个不同的操作列表。当数据文件处于打开状态时，第一个操作列表（文件打开操作）可以运行。第二个操作列表（工作单操作）可在方法运行时运行。**

图 56 “方法编辑器”中的“工作单自动处理”>“工作单操作”部分

15 保存方法，并关闭数据文件，同时不保存结果。	**a** 单击方法编辑器中的**保存方法**图标。 **b** 单击**文件 > 关闭数据文件**，并在要求您保存结果时单击**否**。	

任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法

在此任务中，您将设置一个定性分析方法，其中包含要按特定顺序运行的分析操作的列表。包括提取和积分色谱图、提取质谱图、在谱库中检索峰质谱图、为质谱图生成分子式并打印分析报告。

任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
1 打开 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件的 TIC。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。	
2 配置用户界面以处理 GC 数据。	• 按照第 12 页上的 “任务 2. 配置适用于 GC/MS 数据的用户界面”中提供的说明进行操作。	• 对于此示例，请选择 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程。
3 确保提取了 TIC。	**a** 在 “方法管理器”窗口中，选择**色谱图**。 **b** 单击**定义色谱图**选项卡。 **c** 在 “方法编辑器”窗口中，确认**定义的色谱图**部分中的色谱图是一个 TIC。如果不是，则选择 **TIC** 作为**类型**。单击**更改**按钮。	

任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
4 查看“按色谱图解卷积查找”算法的参数。	**a** 在 “方法管理器”窗口中单击 **GC/Q-TOF 化合物筛查 > 按色谱图解卷积查找**部分。 **b** 单击**质量过滤器**选项卡。 **c** 将**绝对峰高** 值设置为 13000。 **d** 单击**结果**选项卡。 **e** 单击**高亮显示所有化合物**按钮。 **f** 检查每个选项卡中的结果。	• 查看“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程的各个部分。 • 请注意此工作流程中的六个部分。所有这些部分都是重复部分，已是方法管理器的组成部分。 • 请注意，方法管理器的其他部分将显示蓝色三角形。这表示相同的参数值同样也在其他位置发生了更改。
5 查看 “按谱库检索识别”算法的参数。	**a** 在 “方法管理器”窗口中，单击 **GC/Q-TOF 化合物筛查 > 按谱库检索识别**部分。 **b** 单击**添加谱库**按钮。选择谱库并单击**打开**。 **c** （可选）如果不想使用谱库，可单击**删除谱库**按钮来删除它。 **d** 检查每个选项卡中的参数。	• demo.l 谱库安装在 \MassHunter\Library 文件夹中。 • NIST11.l （或 NIST 谱库的其他版本）也可安装在此文件夹中。
6 将方法保存为 *iii*_GCexercise2，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。	**a** 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iii_GCexercise2**。 **c** 单击**保存**按钮。	
7 设置方法，以在打开数据文件时自动执行这些操作。 • 列出在打开此数据文件或其他数据文件时将要执行的操作。 提示：请查看“方法管理器”窗口中的 “常规”部分	**a** 在 “方法管理器”窗口中，选择**常规 > 文件打开操作**。 **b** 从**要运行的操作**列表中删除所有操作。 **c** 添加**提取定义的色谱图**。 **d** 添加**按色谱图解卷积查找化合物**。 **e** 添加**检索谱库以查找化合物**。	
8 测试文件打开操作。	• 单击**立即运行文件打开操作**图标 ，以运行数据文件上的操作。	• 不会覆盖色谱图和质谱图。将添加新的色谱图和质谱图。

任务 20. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释

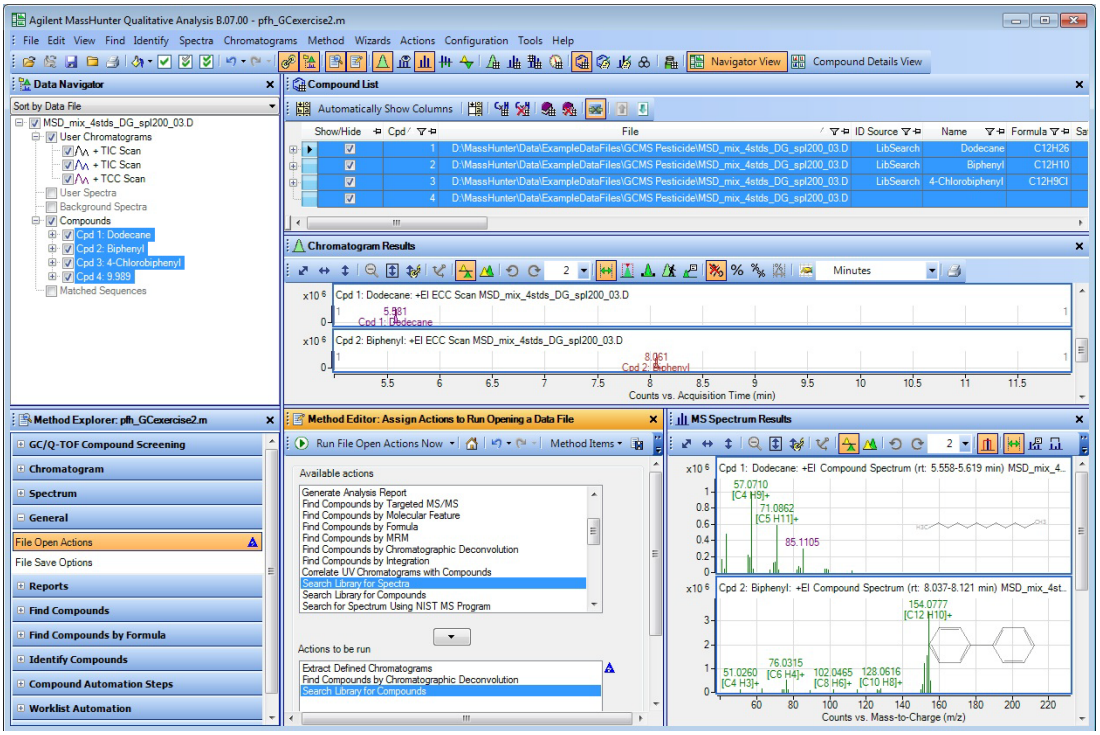


图 57 GC/Q-TOF 数据运行工作单操作的结果

9 将方法保存为 *iii*_GCexercise2，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。	• 按照以下三种方式中的一种来保存方法： ◦单击方法编辑器中的**保存方法**图标 。 ◦右键单击方法编辑器，然后单击**保存方法**。 • 从顶层菜单中，单击**方法 > 保存**。	• 如果在数据采集工作单期间运行此方法，则会按给定的顺序执行此选项卡上的 “工作单操作”。
10 关闭数据文件，同时不保存结果。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 要求保存结果时，单击**否**。	

任务 21. 导出 CEF 文件

您可以导出包含化合物信息的 CEF 文件。可以将此 CEF 文件导入到其他程序，如 MassHunter 定量分析和 Mass Profiler Professional。您也可以导入以 CEF 文件导出的化合物。

任务 21. 导出 CEF 文件

步骤	详细说明	注释
1 打开 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件，然后对在第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”中创建的 iii_GCexercise2.m 方法运行“文件打开”操作。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框。 **d** 选中**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **e** 单击**使用当前方法**按钮，然后单击**打开**。	• 如果您完成了第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”，则当前方法为 iii_GCexercise2.m。可以将此方法设置为运行“按色谱图解卷积查找化合物”算法，然后对每个化合物运行“检索谱库”算法。
2 导出 CEF 文件。	**a** 要交互式导出文件，请单击**文件 > 导出 > 以 CEF 格式**。 **b** 单击**所有结果**按钮。 **c** 选择导出文件的位置。 **d** 单击**确定**。	• 将使用 CEF 文件导出化合物。

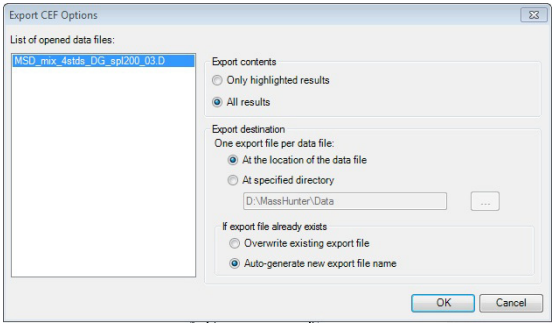


图 58 “导出 CEF 选项”对话框

任务 22. 打印分析报告

在本练习或下一个练习中执行任何任务之后，如果要打印分析报告，应使用下列说明。

分析报告可以包含提取和积分色谱图、提取质谱图、查找化合物、检索数据库中的峰质谱图或从峰质谱图生成分子式的结果。

任务 22. 打印分析报告

步骤	详细说明	注释
1 如果未调用 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件，则打开此数据文件，对在第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”中创建的 iii_GCexercise2.m 方法运行“文件打开”操作。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框。 **d** 选中**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **e** 单击**使用当前方法**按钮，然后单击**打开**。	• 如果您完成了第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”，则当前方法为 iii_GCexercise2.m。可以将此方法设置为运行“按色谱图解卷积查找化合物”算法，然后对每个化合物运行“检索谱库”算法。
2 更改方法中的分析报告选择： • 选中要打印的色谱图、质谱图或表格对应的复选框。 • 清除不希望打印的色谱图、质谱图或表格对应的复选框。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**报告 > 分析报告**。 **b** 选中要打印的任何额外选择对应的复选框。 **c** 清除不希望打印的项目对应的任何复选框。	• 分析报告仅包含在此部分中标记的信息。 • 如果某些结果不可用，则不会包括在内，即使这些结果已在此部分中进行标记。例如，如果您尚未对色谱图进行积分，则峰列表不会包含在内。

任务 22. 打印分析报告 （续）

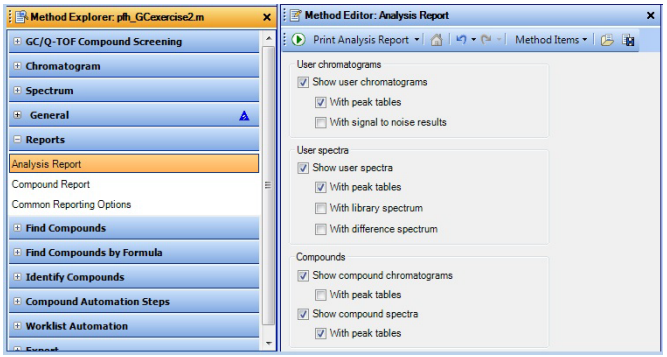
步骤	详细说明	注释
		**缺省情况下，“方法编辑器”窗口处于浮动状态。与“定性分析”程序的其他窗口不同，它显示为单独的窗口。要锚定该窗口，请右键单击窗口的标题栏，然后单击“浮动”。还可以双击标题栏以锚定窗口。**

图 59 “方法管理器”和“方法编辑器”窗口中的“分析报告”部分

3 打印该报告。

a 您可以采用下列多种方式交互性地打印该报告：
- 在主菜单中，单击**文件 > 打印 > 分析报告**。
- 在主工具栏中，单击“打印机”图标。
- “分析报告”部分处于选中状态时，单击方法编辑器工具栏中的**打印分析报告** 图标 。
- 右键单击方法编辑器中的“分析报告”部分，然后单击**打印分析报告**。
- 在“数据浏览器”中的数据文件快捷菜单中，单击**分析报告**。

b 单击**报告内容**下方的选项之一。

c （可选）选中**每个数据文件一个报告**复选框。

d 选中**打印报告**复选框并选择打印机。

e 选中**打印预览**复选框。

f 单击**确定**按钮。

- 有时，可以使用方法编辑器工具栏中的“运行”图标 从一组可能的操作中选择一项操作。例如，如果切换到“方法编辑器”窗口的“报告”>“常规报告选项”部分，则单击“运行”图标时可能会执行四项不同的操作。如果单击箭头，系统会显示可能操作的列表，您可以从中选择要执行的操作。如果从列表中选择其他操作，则会更改缺省操作。如果只单击“运行”按钮，则系统将执行当前缺省操作。

任务 22. 打印分析报告 （续）

步骤	详细说明	注释

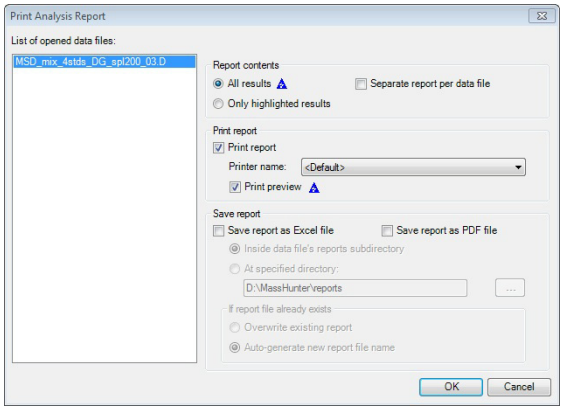


图 60 “打印分析报告”对话框

g 检查该报告。
h 单击工具栏中的**关闭打印预览**图标。

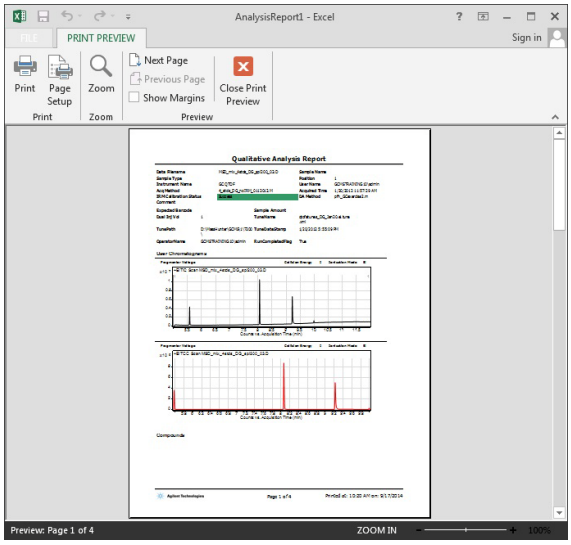


图 61 打印预览分析报告窗口

任务 23. 打印化合物报告

不论您何时打印化合物报告，请使用这些说明。

任务 23. 打印化合物报告

步骤	详细说明	注释
1 如果未调用 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件，则打开此数据文件，对在第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”中创建的 iii_GCexercise2.m 方法运行“文件打开”操作。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。否则，单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 在 **GC** 示例数据文件夹中单击 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** 数据文件。 **c** 清除**调用结果数据**复选框。 **d** 选中**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **e** 单击**使用当前方法**按钮，然后单击**打开**。	• 如果您完成了第 81 页上的“任务 20. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法”，则当前方法为 iii_GCexercise2.m。可以将此方法设置为运行“按色谱图解卷积查找化合物”算法，然后对每个化合物运行“检索谱库”算法。
2 更改化合物报告的方法中的某些选择： • 关闭查看在特定峰上放大的 MS 质谱图的功能。 • 关闭报告中的 MS/MS 选项。	**a** 在“方法管理器”中，单击**报告 > 化合物报告**。 **b** （可选）清除**显示 MS 质谱图**复选框。 **c** （可选）清除**显示 MS/MS 质谱图**复选框。 **d** （可选）清除**显示 MS/MS 峰表**复选框。	• 您可以在这些复选框中指定要在报告中包括的信息（如果可用）。如果该信息不可用，则将自动跳过该部分。例如，当数据文件仅含有 MS 数据时，永远不会包括 MS/MS 结果。

任务 23. 打印化合物报告

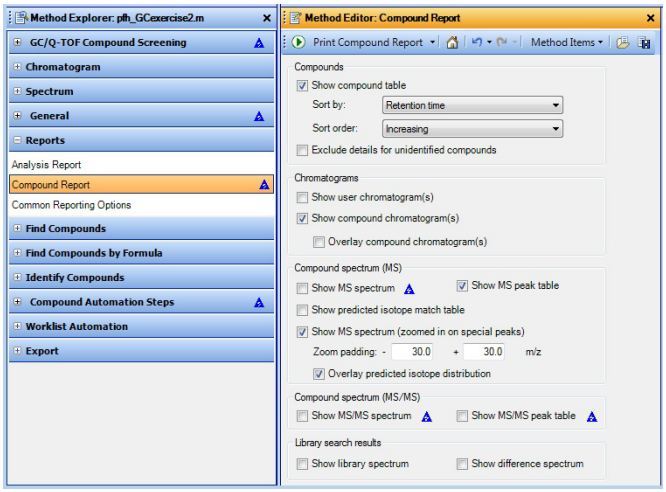
步骤	详细说明	注释
		对于 GC/Q-TOF 数据，必须清除“叠加化合物色谱图”复选框。

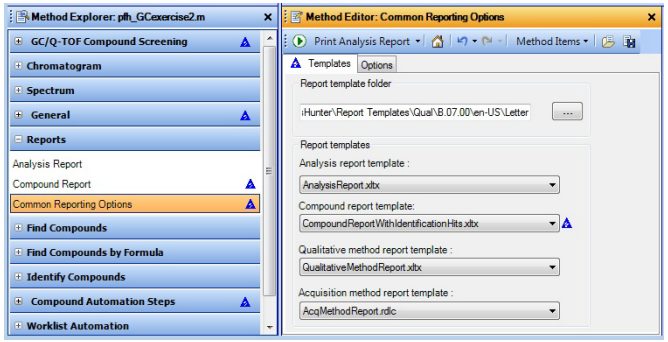
图 62 “方法编辑器”中的“化合物报告”部分

3 （可选）选择其他化合物报告模板。

a 在“方法管理器”窗口中，单击**报告 > 常规报告选项**。

b 选择**化合物报告 WithIdentificationHits.xltx** 为**化合物报告模板**。

- 软件附带有多种不同的报告模板。
- 您可以使用 Excel 和报告设计器加载项自定义报告模板。



可以使用 Excel 和报告设计器加载项自定义具有扩展名为 XLTX 的任何模板。不能自定义采集方法报告。

图 63 “方法编辑器”中的“常规报告选项”部分

任务 23. 打印化合物报告

步骤	详细说明	注释
4 打印该报告。	**a** 单击**文件 > 打印 > 化合物报告**或单击**打印分析报告**图标 中的箭头，然后单击**打印化合物报告**以打印化合物报告。 **b** 选中**打印预览**复选框。 **c** 单击**确定**。检查报告。 **d** 单击**关闭打印预览**图标。	• 在“打印化合物报告”对话框中，您可以选择其他打印机，选择将报告保存到 PDF 或 Excel 文件，选择是打印所有结果还是仅打印选中的结果，以及选择是否将不同的数据文件组合到一个报告中。 • 有关其他信息，请参见联机帮助或报告设计器培训 DVD。

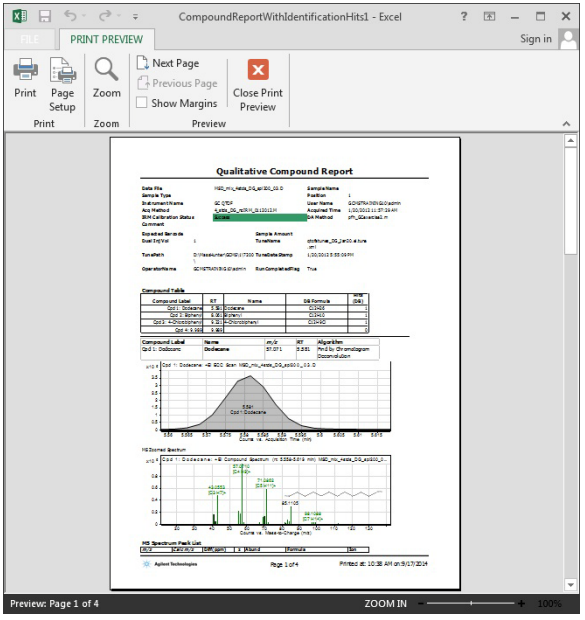


图 64 化合物报告的“打印预览”窗口

5 关闭数据文件，同时不保存结果。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 系统提示您是否要保存结果时，请单击**否**。	

参考

浏览器视图和化合物详细信息视图 92
使用窗口 93
处理 “数据浏览器”中的结果数据 96
对色谱图执行操作 97
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作 98
处理色谱图直观数据 99
使用质谱图直观数据 101
工作流程 102
自定义报告模板 106

浏览器视图和化合物详细信息视图

定性分析软件有两个不同的视图。每个视图都有不同的窗口。可以在主工具栏中选择要使用的视图。这两个视图中提供以下窗口：

- 方法管理器
- 方法编辑器
- 质谱图对比结果
- 化合物列表
- 化合物识别结果
- MS/MS 分子式详细信息
- 结构查看器

浏览器视图

“浏览器视图”是缺省视图。在此视图中，可以使用 “数据浏览器”窗口选择不同的化合物、质谱图和色谱图。

如果您要查看多个数据文件或质谱图，则需要使用此视图。如果您要查看化合物，则可以使用此视图或 “化合物详细信息视图”。

化合物详细信息视图

此视图提供一个数据文件的化合物中心视图。您可以在不同窗口中查看单个化合物的相关信息。可以在 “化合物列表”窗口中更改所选化合物。

如果您要检查通过 “按分子式查找”算法找到的化合物，则需要使用此视图，尤其是在检查通过碎片确认找到的化合物时。如果您要检查其他类型的化合物，也可以使用此视图。

使用窗口

首次打开 Qualitative Analysis 程序时，您会看到缺省布局中有四个窗口：数据浏览器、方法管理器、色谱图结果和 MS 质谱图结果。您可以在“浏览器视图”和“化合物详细信息视图”之间切换。

您可以使用 “浏览器视图”中的 “视图”菜单打开其他 17 个窗口：

- 方法编辑器 - 用于编辑不同选项卡的方法参数
- 质谱图预览 - 用于快速扫描数据文件中的质谱图
- MS 质谱图结果 - 显示 MS 和 MS/MS 质谱图
- 质谱图对比结果 - 在谱库检索后显示质谱图对比结果
- 解卷积结果 - 显示解卷积的质谱图
- 解卷积镜像图 - 在镜像图中显示两个解卷积的质谱图
- UV 光谱图结果 - 显示 UV 光谱图 - 仅可用于 LC/MS 数据
- 积分峰列表 - 在表中显示积分结果
- MS 质谱图峰列表 1 - 显示选定的第一个质谱图的峰列表
- MS 质谱图峰列表 2 - 显示选定的第二个质谱图的峰列表
- MS 实际值 - 显示选中的质谱图的采集信息
- 化合物列表 - 显示使用其中一种查找化合物算法找到的化合物
- 化合物识别结果 - 显示选定化合物的识别信息
- 质谱图识别结果 - 显示选定质谱图的识别信息
- MS/MS 分子式详细信息 - 显示一个表格，其中包含为 MS/MS 质谱图中的碎片计算得到的可能的分子式

- 结构查看器 - 显示与当前化合物或质谱图关联的结构
- 样品信息 - 显示有关高亮显示的数据文件的信息
- 序列编辑器 - 用于编辑方法序列

此外，您还可以显示在开始使用关联工具时显示的三个工具窗口：

- 分子式计算器
- 质量计算器
- 再校正

主工具栏上的窗口图标

您可以使用主工具栏上的这些图标打开和关闭窗口。其他图标在安装 MassHunter BioConfirm 软件时提供。还可以使用 “视图”菜单中的命令打开这些窗口。

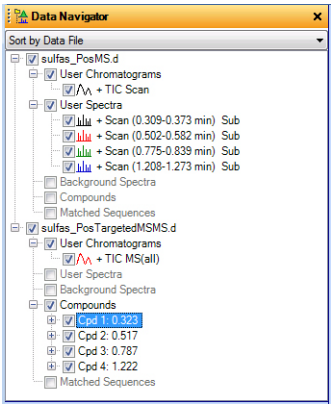
工具栏图标	窗口
	“数据浏览器”窗口 “方法管理器”窗口 “方法编辑器”窗口
	“色谱图结果”窗口 “质谱图预览”窗口 “MS 质谱图结果”窗口 “质谱图对比结果”窗口 “解卷积结果”窗口 “解卷积镜像图”窗口 “UV 光谱图结果”窗口
	“积分峰列表”窗口 “MS 质谱峰列表 1”窗口 “MS 质谱峰列表 2”窗口 “MS 实际值”窗口

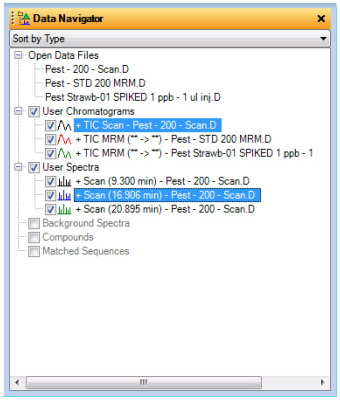
工具栏图标	窗口
	“化合物列表”窗口 “化合物识别结果”窗口 “质谱图识别结果”窗口 “MS/MS 分子式详细信息”窗口 “结构查看器”窗口 “样品信息”窗口 “序列编辑器”窗口

处理 “数据浏览器”中的结果数据

“数据浏览器”窗口和工具

“数据浏览器”按数据文件或数据类型对所有提取结果以及质谱图选择结果进行组织。此窗口仅在 “浏览器视图”中可用。







“链接导航”图标

激活时 （缺省），高亮显示 “数据浏览器”中色谱图的同时还高亮显示对应的质谱图。此外，还会高亮显示对应的色谱图和质谱图图形结果。只有在使用 “色谱图”菜单中的 “积分和提取峰质谱图”菜单项或运行任何 “化合物”算法时，“链接导航”才起作用。



选中标记工具

单选标记 – 选中所有高亮显示数据的复选框。

复选标记，其中一个显示为灰色 – 选中高亮显示数据的复选框并清除其他复选框。

复选标记 – 选中所有复选框。

如果选中了色谱图和质谱图的复选框，则将显示对应的色谱图和质谱图。

对色谱图执行操作

您可以使用相应的菜单项对整个色谱图或色谱图的选定范围执行下列操作：

操作	菜单项
更改色谱图中的峰标签	色谱图 > 色谱图显示选项
提取色谱图	色谱图 > 提取色谱图
提取定义的色谱图	色谱图 > 提取定义的色谱图
积分色谱图	色谱图 > 积分色谱图
积分并提取峰质谱图	色谱图 > 积分和提取峰质谱图
积分和解卷积峰质谱图	色谱图 > 积分和解卷积峰质谱图
平滑色谱图	色谱图 > 平滑色谱图
扣除任何色谱图	色谱图 > 扣除任何色谱图
计算信噪比	色谱图 > 计算信噪比
使用按自动 MS/MS 数据查找化合物	查找 > 按自动 MS/MS 查找化合物
使用目标 MS/MS 数据查找化合物	查找 > 按目标 MS/MS 查找化合物
针对 MS(1) 数据查找化合物	查找 > 按分子特征查找化合物
针对 GC/MS 数据查找化合物	查找 > 按色谱图解卷积查找化合物
针对 MRM 数据查找化合物	查找 > 按 MRM 查找化合物
按积分结果查找化合物	查找 > 按积分查找化合物
查找与特定分子式匹配的化合物	查找 > 按分子式查找化合物

从快捷菜单中选择范围操作

选择色谱图范围后，除上述操作以及没有提到的其他操作以外，您还可以提取质谱图并将质谱图提取到背景中。

1 要访问这些操作，请单击 “色谱图结果”工具栏中的 “范围选择”工具 ()。
2 在要开始范围的起点处单击，并将光标拖动到某个范围上，然后松开鼠标按钮。
3 在色谱图中的任何位置单击鼠标右键，并单击快捷菜单中的操作。

将结果保存到数据文件中

- 单击**保存**图标 ()，或单击**文件 > 保存结果**。

  退出程序时，该程序还会询问您是否要将结果保存到数据文件中，除非您已关闭了此功能 （可在 “消息框选项”对话框中关闭此功能）。

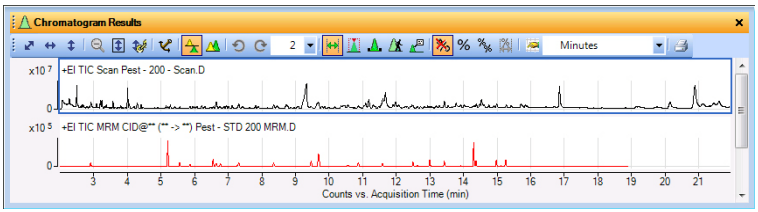
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作

您可以使用相应的菜单项对 MS 或 MS/MS 质谱图或 MS 或 MS/MS 质谱图的选定范围执行下列操作：

操作	菜单项
查看有关质谱图中的峰的 m/z、丰度、电荷态和其他信息	视图 > MS 质谱图峰列表 1
更改质谱峰标签	配置 > MS 和 MS/MS 质谱图显示选项
扣除背景质谱图	质谱图 > 扣除背景质谱图
扣除任何质谱图	质谱图 > 扣除任何质谱图 （然后单击其他质谱图）
一同添加两个质谱图	质谱图 > 添加任何质谱图 （然后单击其他质谱图）
检索数据库以查找与质谱图中的特定质量匹配的条目	质谱图 > 检索数据库以查找质谱图峰
为质谱图中所选范围内的质量生成分子式	质谱图 > 从质谱图峰生成分子式（在 MS 质谱图中选择某个范围时）
检索谱库	识别 > 检索谱库以查找质谱图或 质谱图 > 检索谱库以查找质谱图

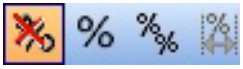
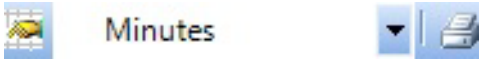
处理色谱图直观数据

“色谱图结果”窗口



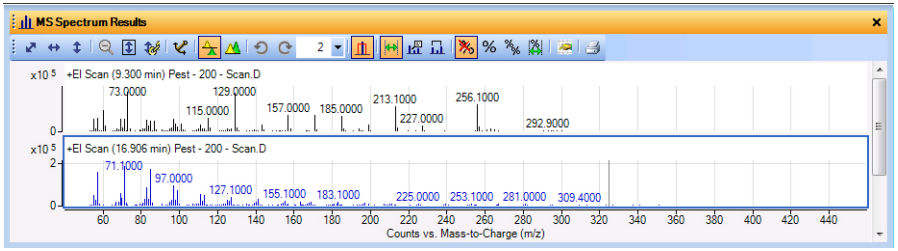
色谱图结果工具

工具栏图标	操作
缩放工具 	• 对 X 轴和 Y 轴自动调整 • 对 X 轴自动调整 • 对 Y 轴自动调整 • 取消缩放 • 在缩放期间对 Y 轴自动调整 • 链接的 Y 轴模式
	• **锚定色谱图** – 当前色谱图保持可见状态，直到单击**清除锚**命令为止。 • **列表模式** – 每个绘制的色谱图中都有单独的 Y 轴。 • **叠加模式** – 绘制的色谱图都有相同的 X 轴和 Y 轴。 • **切换到上一个图谱**。该按钮只能在“叠加模式”中使用。 • **切换到下一个图谱**。该按钮只能在“叠加模式”中使用。 • 在添加滚动条之前，要同时显示的**质谱图的数量**。

工具栏图标	操作
按顺序选择工具  必须始终选择其中一个工具。在此图像中，“范围选择”工具为选中状态。所选工具的背景颜色为橙色。	• **范围选择** – 设置为 “打开” 状态时，您可以为对其执行操作的色谱图绘制范围。 • **峰选择** – 设置为 “打开” 状态时，可以选择位于顶点处的积分峰的质谱图。 • **手动积分** – 设置为 “打开” 状态时，可以执行交互式积分。 • **实时色谱图** – 设置为 “打开” 状态时，可以在单击每个点或使用键盘上的左右箭头时查看各个质谱图。 • **注释** – 设置为 “打开” 状态时，可以将图像和文本注释添加到色谱图。
归一化工具 	• 停止归一化色谱图 • 将所有色谱图归一化为任何色谱图中的最大峰 • 将所有色谱图归一化为自身的最大峰 • 将每个色谱图归一化为选定范围内的最高峰
其他工具 	• 打开**色谱图显示选项**对话框 • 设置用于显示色谱图的单位 • 打印所显示的色谱图

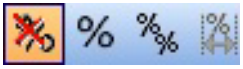
使用质谱图直观数据

“MS 质谱图结果”窗口



MS 质谱图结果工具

工具栏图标	操作
缩放工具 	• 对 X 轴和 Y 轴自动调整 • 对 X 轴自动调整 • 对 Y 轴自动调整 • 取消缩放 • 在缩放期间对 Y 轴自动调整 • 链接的 Y 轴模式
	• **锚定质谱图** – 当前质谱图保持可见状态，直到单击 “清除锚” 命令为止 • **列表模式** – 每个绘制的质谱图中都有单独的 Y 轴。 • **叠加模式** – 绘制的质谱图都有相同的 X 轴和 Y 轴。 • **切换到上一个图谱**。该按钮只能在 “叠加模式” 中使用。 • **切换到下一个图谱**。该按钮只能在 “叠加模式” 中使用。 • 在添加滚动条之前，要同时显示的**质谱图的数量**。

工具栏图标	操作
按顺序选择工具  必须始终选择其中一个工具。在此图像中，“范围选择”工具为选中状态。所选工具的背景颜色为橙色。	• **范围选择** – 设置为**打开**状态时，您可以为对其执行操作的质谱图绘制范围。 • **注释** – 设置为**打开**状态时，可以将图像和文本注释添加到质谱图。 • **卡尺** – 设置为**打开**状态时，您可以将“质量增量”卡尺添加到选定的质谱图。在“解卷积结果”窗口中，还可以添加“氨基酸”卡尺或“修饰”卡尺。有关详细信息，请参见联机帮助。
归一化工具 	• 停止归一化质谱图 • 将所有质谱图归一化为任何质谱图中的最大峰 • 将所有质谱图归一化为自身的最大峰 • 将每个质谱图归一化为选定范围内的最高峰
其他工具 	• 打开 **MS 和 MS/MS 质谱图显示选项**对话框 • 打印所显示的质谱图

工作流程

工作流程可帮助您自定义用于应用程序的用户界面。每个工作流程可调用包含适用于该工作流程的参数的不同方法。此外，每个工作流程都可调用不同的布局；使用这些布局可自定义显示在每个表中的列。最后，其中的四个布局还可以添加特殊的方法编辑器部分，该部分包含方法编辑器中对该工作流程非常重要的部分的副本。将特定工作流程中使用的功能组织在一起可便于您对方法进行自定义。

定性分析程序中有多种不同的工作流程。它们是：

- 概要

- **BioConfirm** - 只有在安装 BioConfirm 软件并在**用户界面配置**对话框中选中“BioConfirm”复选框时，才可以使用这些工作流程。BioConfirm 包含多个可能的工作流程，具体取决于您要执行的分析的类型。可将 BioConfirm 与 LC/MS 数据文件一起使用。
- **色谱峰调查**
- **分子式确认和样品纯度**
- **MS 目标化合物筛选**
- **GC/Q-TOF 化合物筛选**

如果您正在处理 GC/MS 数据，则可以选择**常规**工作流程或 **GC/Q-TOF 化合物筛选**工作流程。如果您正在处理 LC/MS 数据，则可以选择任何工作流程，但 **GC/Q-TOF 化合物筛选**工作流程除外。

特定方法

每个工作流程都可调用特定的缺省方法，它包含适用于该工作流程的设置。例如，如果切换到其中一个 BioConfirm 工作流程，则“按分子特征查找化合物”算法的**目标数据类型**将被设置为**大分子（蛋白质、寡核苷酸）**。该设置适用于 BioConfirm 工作流程，但缺省情况下不适用于其他工作流程。

特定布局

此外，每个工作流程都可调用特定的布局。布局包含下列内容：

- 每个窗口的位置和尺寸
- 哪个窗口是选项卡式窗口
- 哪个窗口处于浮动状态
- 哪个选项卡式窗口在顶部
- 缺省情况下显示哪个窗口
- 状态栏是否可见

对于每个图谱窗口 （“色谱图结果”窗口、“质谱图预览”窗口、“MS 质谱图结果”窗口、“解卷积”窗口、“UV 结果”窗口、“化合物色谱图结果”窗口、“总体色谱图结果”窗口、“化合物 MS 质谱图结果”窗口和 “化合物碎片质谱图结果”窗口），将保存下列信息：

- 是否叠加图形
- 是否在打开 “缩放模式”时自动调整 Y 轴坐标
- 是否打开 “链接的 Y 轴”模式

对于每个表窗口，将保存下列信息

- 哪些列可见
- 列的顺序
- 每列的宽度
- 添加到表中的任何过滤器 （仅适用于 “化合物列表”表、“化合物识别结果”表和 “质谱图识别结果”窗口）。

“方法管理器”和 “方法编辑器”中的特定部分

将 “方法编辑器”用于 “常规”工作流程时，可以更改方法中的几乎所有参数。

其他工作流程中的每一个工作流程都可向 “方法管理器”添加一个部分。每个新部分仅包含 “方法编辑器”选项卡以及在该工作流程中有用的部分。更改工作流程部分中的参数也会更改常规 “方法编辑器”部分中相应部分中的参数。

在常规 “方法编辑器”部分中有两个选项卡不是重复的。**色谱峰识别工作流程 > 质谱图峰识别**部分和**色谱峰识别工作流程 > 色谱图提取 > 色谱图**选项卡仅包括在“色谱峰识别”工作流程中。这些部分仅影响色谱峰调查算法。此算法仅用于此工作流程、**不生成报告的色谱峰识别**操作和**生成分析报告的色谱峰识别**操作中。

工作流程方法和布局

为每个工作流程提供了其他缺省方法和布局。

工作流程	方法	布局	“方法编辑器”部分
概要	default.m	Default.xml	无
色谱峰调查	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	色谱峰识别工作流程
分子式确认和样品纯度	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	分子式确认和样品纯度工作流程
MS 目标化合物筛选	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS 目标化合物筛选工作流程
GC Q-TOF 化合物筛选	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	GC/Q-TOF 化合物筛选

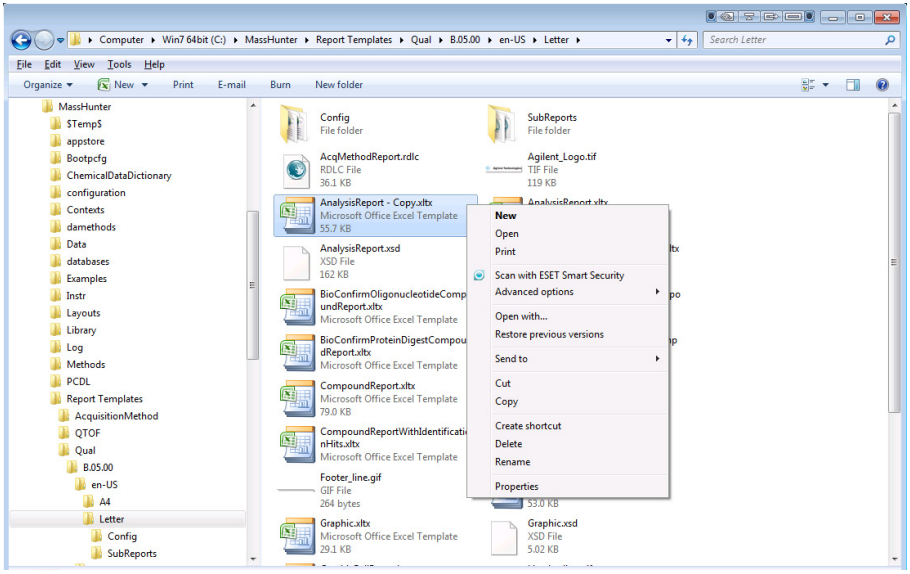
自定义报告模板

有关如何修改报告模板的详细信息，请参考 MassHunter 报告设计器加载项的联机帮助、《报告设计器入门指南》或报告培训 DVD。通过执行下列步骤，您可以快速了解自定义模板的意义。

1 转到包含报告模板的文件夹。缺省情况下，此文件夹为 **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.07.00\en-US\Letter**。您可以在方法管理器中的“常规”“常规报告选项”>“模板”选项卡中选择其他文件夹。

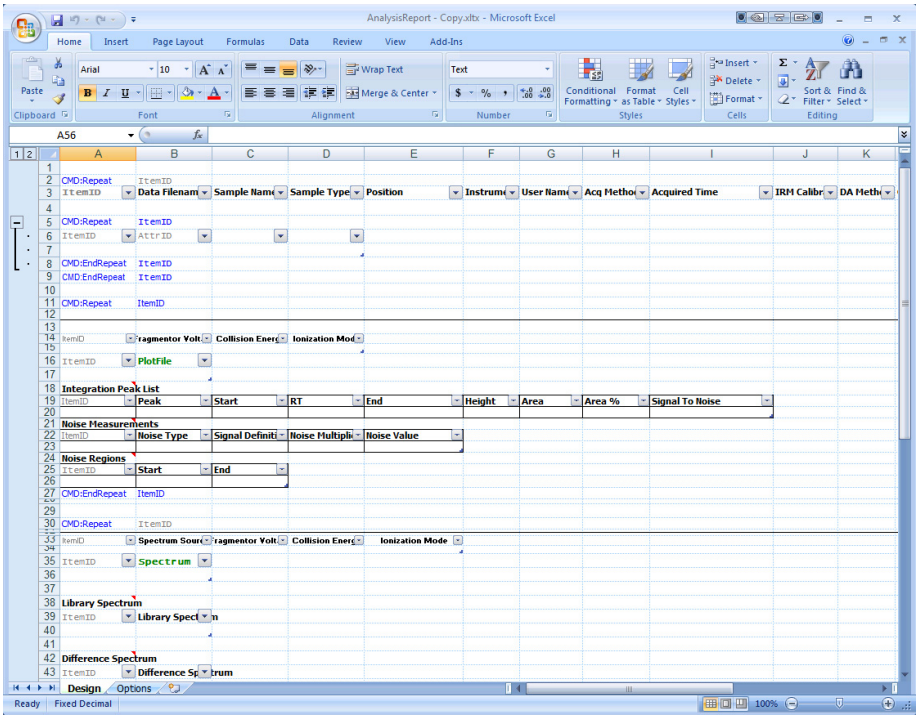
2 创建要修改的模板的副本。

3 右键单击该副本，然后单击**属性**。如有必要，清除**只读**复选框。然后，右键单击该副本，然后单击快捷菜单中的**打开**。



打开此模板后，可以修改页眉和页脚。还可以添加、删除或移动参数列。有关详细信息，可参考联机帮助。

许多模板是随 “定性分析”程序一同安装的。



4 执行所需的更改。

有关如何修改模板的详细信息，请参见 MassHunter 报告设计器加载项的联机帮助或 *Agilent MassHunter 报告 - 培训 DVD*。

5 要保存新的模板，请单击 Microsoft Office 按钮中的**保存**或单击**另存为 > 其他格式**。

6 键入一个识别名称，然后单击**保存**。



4

自定义报告模板

www.agilent.com

在本书中

本指南包含有关学习如何使用 Agilent MassHunter Workstation 软件 - 定性分析 GC/MS 数据的信息。

© Agilent Technologies, Inc. 2014

修订版 A， 2014 年 9 月

G3336-97024

Agilent Technologies