

Agilent MassHunter Workstation 软件

定性分析

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

G3336-97023

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 LC/MS 数据的信息。

开始练习之前，请阅读第 6 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　查找和识别化合物

在前两组任务中，您将在复杂基质中查找并识别低浓度磺胺药，并为 TOF 和 Q-TOF 数据生成其分子式。您还可以使用 TOF 和 Q-TOF 数据对蛋白质消解物执行分子特征提取。此外，还可以对三重四极杆质谱仪数据执行这些任务。

练习 3　使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

在这些任务中，您将学习如何设置和运行定性分析方法。还将学习如何对方法进行编辑，以自动进行分析和 / 或化合物识别。然后将在打开数据文件时使用自动化方法执行操作。此外，还将学习如何创建一个方法，以使用工作单执行自动化操作。这些任务中的每一种都使用不同的工作流进行操作。

练习 4　定性分析向导

“定性分析”程序包括多个向导。这些向导可引导您完成执行某些任务所需的步骤。

识别色谱峰向导 - 此向导显示在运行不包含分析报告的色谱峰识别操作之前可修改的不同方法编辑器部分和选项卡。

查找目标化合物依据：MFE+ 数据库检索 + MFG 向导 - 此向导显示在运行按分子特征查找算法和数据库检索算法之前可修改的不同方法编辑器部分和选项卡。

练习 5　分析以所有离子 MS/MS 模式采集的数据文件

如果数据文件是在所有离子 MS/MS 模式中采集的，在运行按分子式查找化合物算法时，程序可以对碎片离子进行定性。

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 11

适用于所有数据的基本任务 13

任务 1. 打开 “定性分析”程序 13

任务 2. 放大和缩小色谱图 16

任务 3. 锚定色谱图 18

任务 4. 更改窗口布局 19

任务 5. 打印分析报告 21

任务 6. 添加注释 23

适用于仅 MS 数据 （TOF、 Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 26

任务 7. 提取色谱图 （仅 MS） 26

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS） 28

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS） 31

任务 10. 添加卡尺 38

适用于 LC/MS/MS 数据 （Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务 40

任务 11. 提取色谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS） 40

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS） 42

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS） 47

适用于 MS 和 UV 数据的任务 58

任务 14. 提取色谱图 （MS 和 UV） 58

任务 15. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值 （MS 和 UV） 60

任务 16. 从色谱图中提取光谱图 (UV) 63

练习 2 查找和识别化合物 69

适用于仅 MS 数据 （LC/MS - TOF、 Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 70

任务 1. 按分子特征查找化合物 （仅 LC/MS - MS） 70
任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS） 74
任务 3. 打印化合物报告 （仅 LC/MS - MS） 79
任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度 （仅 LC/MS - MS） 81
任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （仅 LC/MS - MS） 86

适用于 MS/MS 数据 （LC/MS - Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 89
任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS） 89
任务 2. 识别化合物并生成分子式 （LC/MS - MS 和 MS/MS） 92
任务 3. 打印化合物报告 (LC/MS - MS/MS) 95
任务 4. 查找化合物并检索谱库 (LC/MS - MS/MS) 97
任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （LC/MS - MS 和 MS/MS） 100

练习 3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法 103
任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法 104
任务 2. 设置并运行可使用色谱峰识别工作流程进行自动分析的方法 110
任务 3. 设置并运行可使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动识别化合物的方法 116
任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法 121

练习 4 定性分析向导 125
任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导 126
任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”向导 133

练习 5 分析以所有离子 MS/MS 模式采集的数据文件 137
任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找 138
任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找 144
任务 3. 在 “化合物详细信息视图”中查看结果 149

参考 155
浏览器视图和化合物详细信息视图 156
使用窗口 157

处理 “数据浏览器”中的结果数据 160
对色谱图执行操作 161
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作 162
处理色谱图直观数据 163
使用质谱图直观数据 165
工作流程 166
自定义报告模板 171

目录

练习 1
了解定性分析的基本知识

适用于所有数据的基本任务 13
- 任务 1. 打开 “定性分析” 程序 13
- 任务 2. 放大和缩小色谱图 16
- 任务 3. 锚定色谱图 18
- 任务 4. 更改窗口布局 19
- 任务 5. 打印分析报告 21
- 任务 6. 添加注释 23

适用于仅 MS 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 26
- 任务 7. 提取色谱图 （仅 MS） 26
- 任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS） 28
- 任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS） 31
- 任务 10. 添加卡尺 38

适用于 LC/MS/MS 数据 （Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务 40
- 任务 11. 提取色谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS） 40
- 任务 12. 对色谱图进行交互式积分（LC/MS 和 LC/MS/MS） 42
- 任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS） 47

适用于 MS 和 UV 数据的任务 58
- 任务 14. 提取色谱图 （MS 和 UV） 58
- 任务 15. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值（MS 和 UV） 60
- 任务 16. 从色谱图中提取光谱图 (UV) 63

在这些练习中，您将了解 “定性分析” 程序的多种强大功能中的一部分，该程序可用于处理 TOF、 Q-TOF 和三重四极杆质谱仪数据。

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：

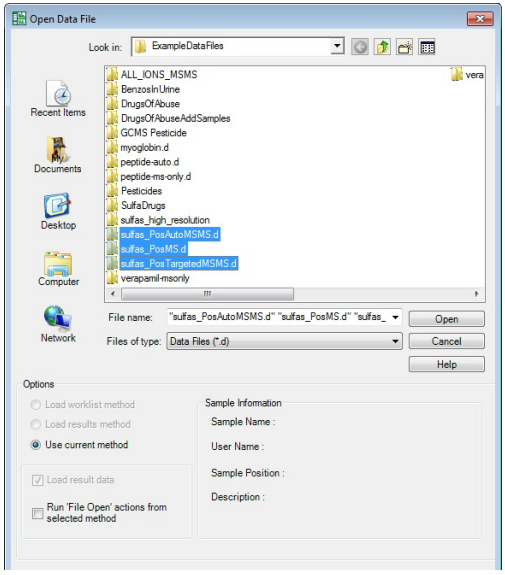
- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

适用于所有数据的基本任务

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 **sulfas_PosAutoMSMS**.d、**sulfas_PosMS.d** 和 **sulfas_PosTargetedMSMS.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 定性分析 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** 或示例文件所在的文件夹。	• sulfas_PosMS.d 文件包含 MS（TOF 或 Q-TOF）数据，而 sulfas_PosAutoMSMS.d 和 sulfas_PosTargetedMSMS.d 文件包含 MS 和 MS/MS (Q-TOF) 数据。 • 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。
• 确保选中**使用当前方法**按钮。 • 确保**调用结果数据**复选框处于未选中状态。 • 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 **sulfas_PosAutoMSMS.d**、**sulfas_PosMS.d** 和 **sulfas_PosTargetedMSMS.d**。 **d** 单击**打开**。 “数据浏览器” 窗口中将显示所有的三个数据文件，“色谱图结果” 窗口中将显示 1 至 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。

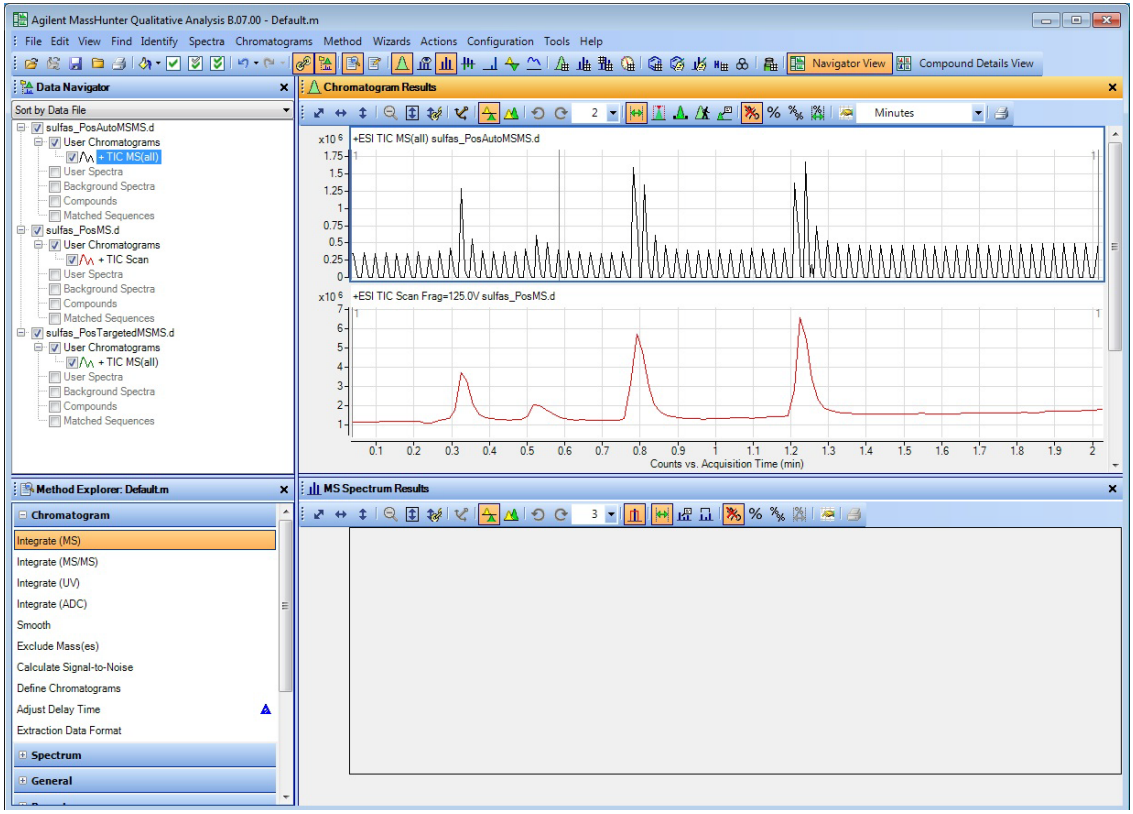


图 2 “定性分析” 主窗口

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
2 使主窗口返回到缺省的 “常规”。系统将调用缺省方法和布局。 • 确保您可看到所有三个色谱图。	**a** 如有必要，请单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**。 **b** 在 “工作流程配置” 对话框中，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。清除**保存当前方法**复选框。然后，单击**确定**按钮。 **c** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 “最大列表窗格数” 图标旁边的向下箭头，并选择 **3**。	• 显示和图谱设置总是相同的，即使切换到 “常规” 工作流程后也是如此。这些设置是在 “显示选项” 对话框中针对每种类型的数据设置的。单击图形窗口中的 按钮可更改显示选项。 • 单击**配置 > 窗口布局 > 调用布局**时，可以更改布局。

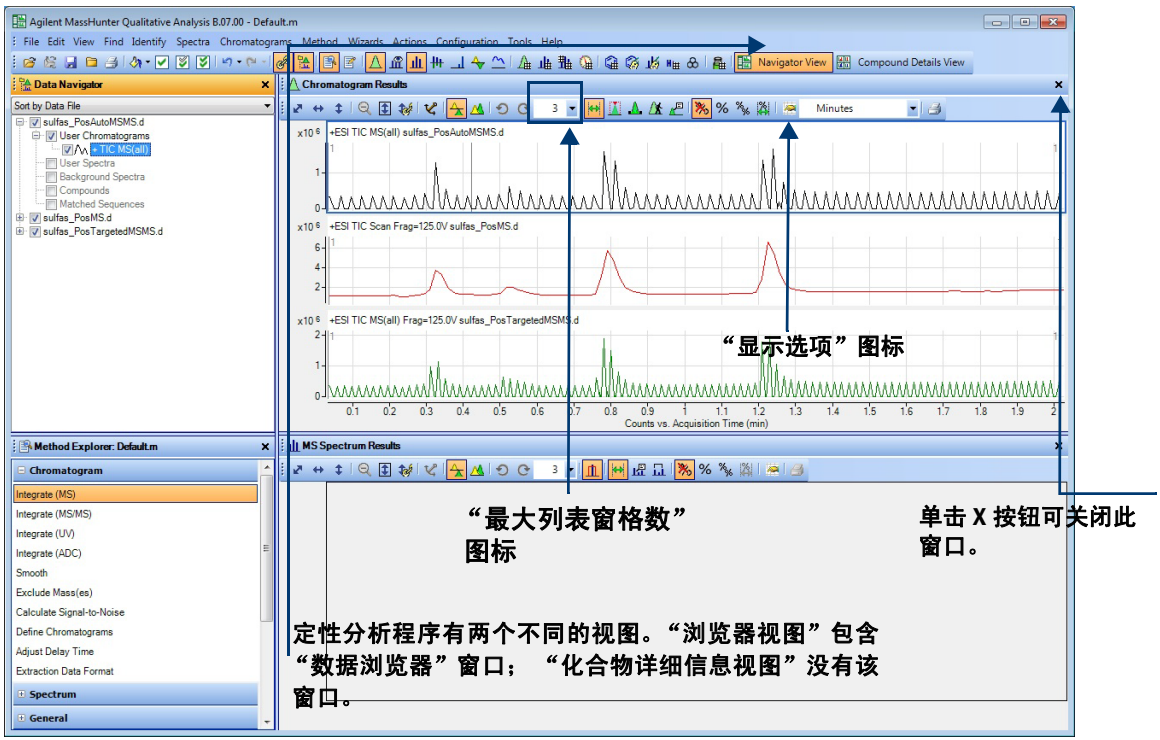


图 3 选定了 “常规工作流程” 的 “数据浏览器” 视图中的 “定性分析” 主窗口。

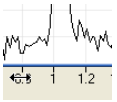
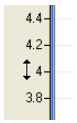
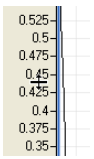
任务 2. 放大和缩小色谱图

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 2. 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、“解卷积结果”窗口、“UV 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 2. 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 3. 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 3. 锚定色谱图

步骤	详细说明	注释

• 锚定色谱图。
  ◦ 显示所有三个色谱图。
  ◦ 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，选中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**。

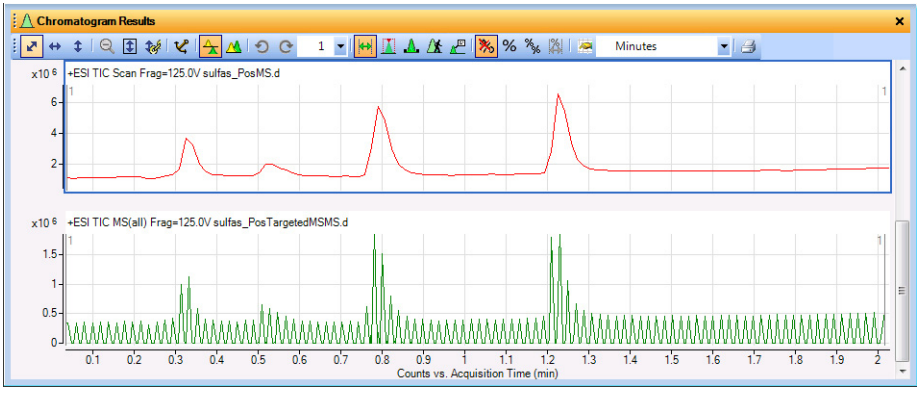


图 4 “色谱图结果”窗口中锚定的 TIC

任务 4. 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 4. 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 5 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。 • 如果安装了 BioConfirm 程序，则该程序具有多个不同的工作流程和布局。

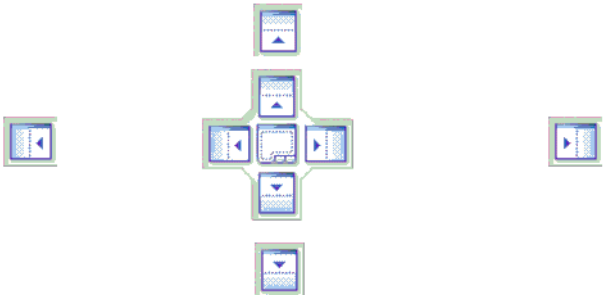


图 5 窗口重新定位工具

任务 4. 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。

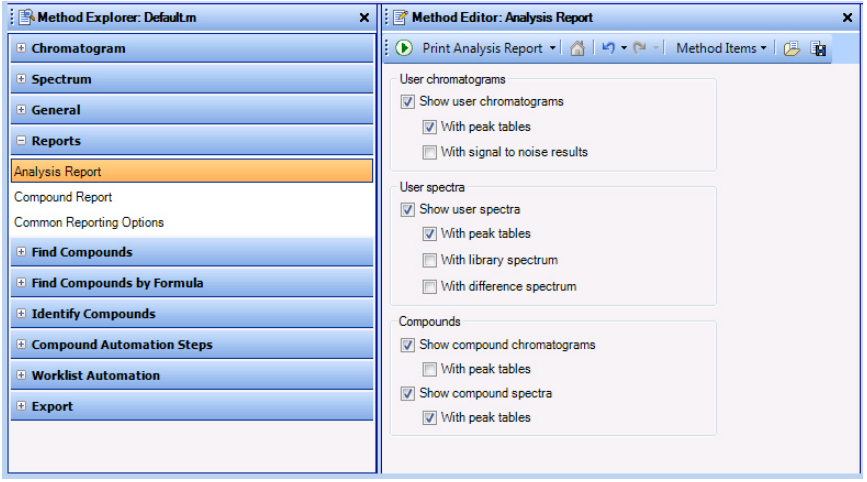
任务 5. 打印分析报告

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 5. 打印分析报告

步骤	详细说明	注释
1 要更改分析报告选择，请执行下列操作： • 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** 清除不希望打印的任何色谱图和质谱图选项。	• 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。



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或浮动窗口。

图 6 “方法管理器”和“方法编辑器”窗口中的“分析报告”部分

任务 5. 打印分析报告 （续）

步骤	详细说明	注释
2 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**。 **c** 选中**打印报告**复选框并选择打印机。 **d** 选中**打印预览**复选框。 **e** 单击**确定**按钮。 **f** 检查该报告。 **g** 单击工具栏中的**关闭打印预览**图标。	• 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。

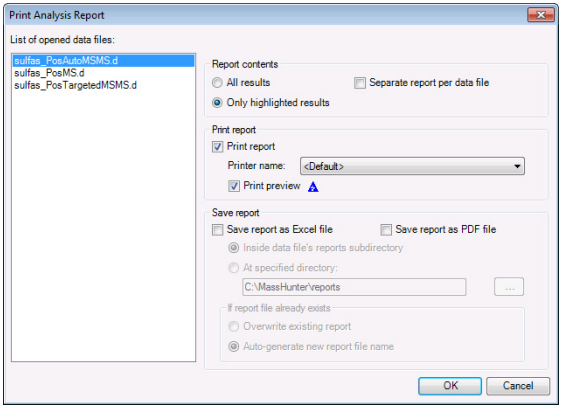


图 7 “打印分析报告” 对话框

任务 6. 添加注释

您可以在 “浏览器视图” 中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
- “质谱图对比结果” 窗口
- “解卷积结果” 窗口
- “UV 光谱图结果” 窗口

仅在化合物详细信息视图中

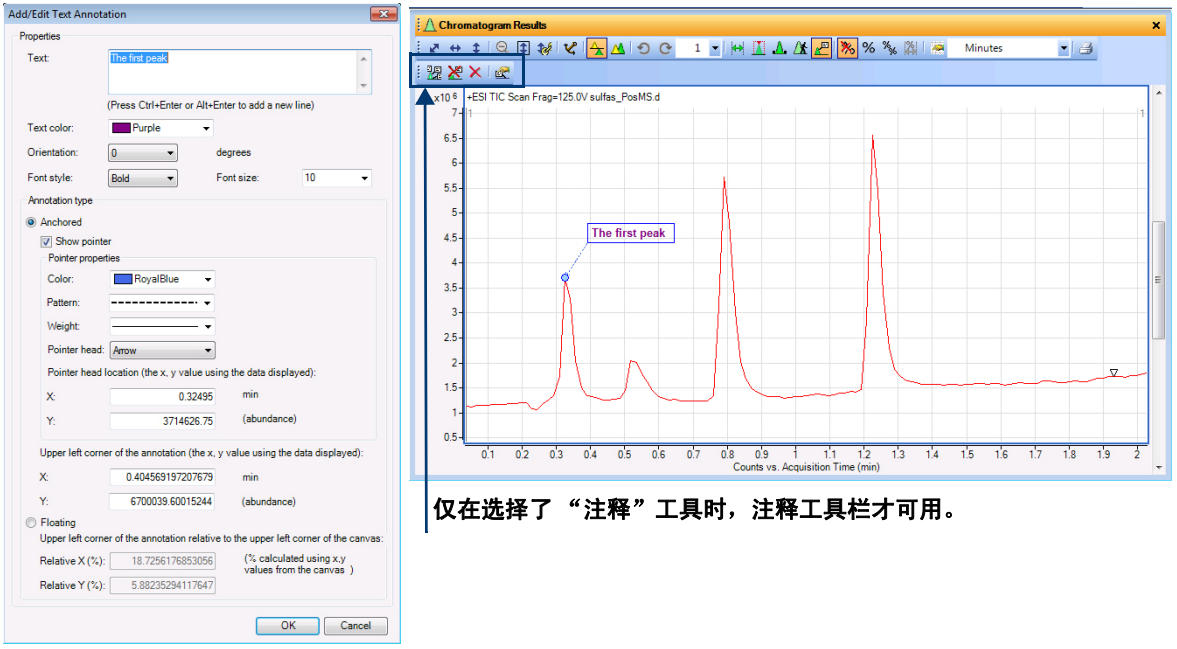
- “化合物色谱图结果” 窗口
- “总体色谱图结果” 窗口
- “化合物 MS 质谱图结果” 窗口
- 化合物碎片质谱图结果

任务 6. 添加注释

步骤	详细说明	注释
1 选择色谱图中的位置。	**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。

任务 6. 添加注释 （续）

步骤	详细说明	注释
2 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。



仅在选择了“注释”工具时，注释工具栏才可用。

图 8 “添加 / 编辑文本注释”对话框和“色谱图结果”窗口

任务 6. 添加注释 （续）

步骤	详细说明	注释
3 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。	• 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

适用于仅 MS 数据 （TOF、 Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

使用来自 TOF 仪器的 MS 数据以及来自 Q-TOF 或三重四极杆仪器的仅 MS 数据执行下列任务。

任务 7. 提取色谱图 （仅 MS）

在此任务中，您可以从原始 TIC 提取并合并色谱图。可以提取 EIC （提取离子色谱图）并将多个 *m/z* 值合并到一个色谱图中。

任务 7. 提取色谱图 （仅 MS）

步骤	详细说明	注释
1 从 **sulfas_PosMS.d** 数据文件中的两个质量数中提取并合并所提取的离子色谱图 (EIC)。 • m/z 值为 279.09102 和 311.08085。 • 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，清除与 **sulfas_PosMS.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 **sulfas_PosMS.d**。 **d** 在**类型**列表框中，选择 **EIC**。 **e** 在 **m/z 值**框中，键入 279.09102, 311.08085 **f** 选中**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** 确保将“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 **sulfas_PosMS.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。

任务 7. 提取色谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释

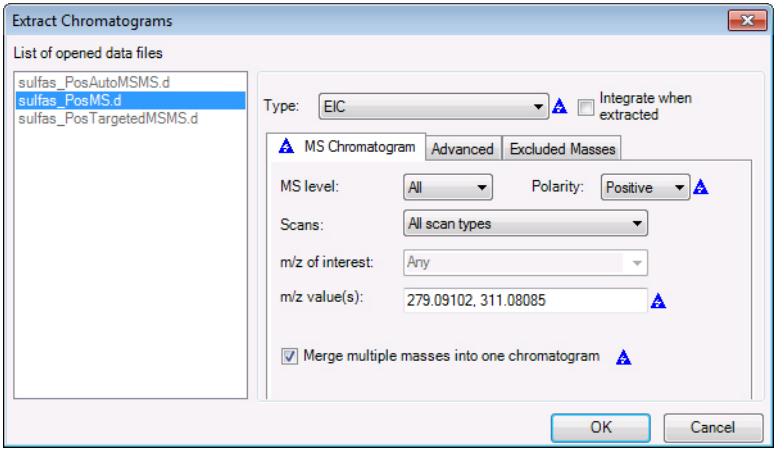


图 9 “提取色谱图”对话框

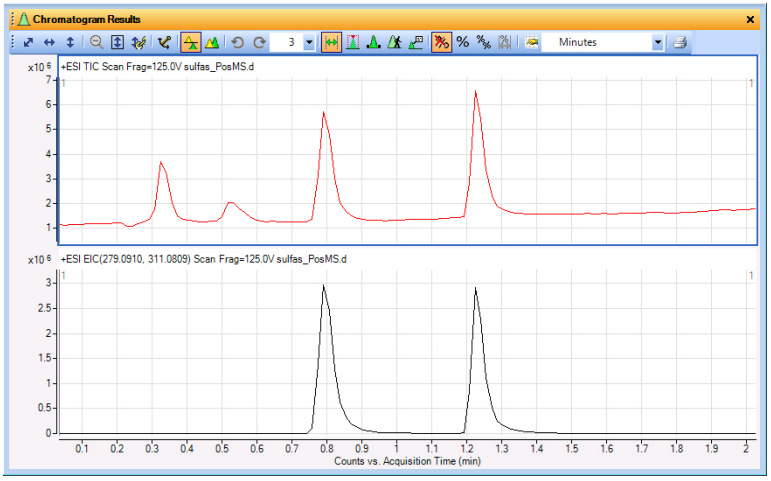


图 10 合并后的提取离子色谱图 (EIC) （与原始 TIC 比较）

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS）

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。

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS）

步骤	详细说明	注释

1 对 **sulfas_PosMS.d** TIC 色谱图积分。	• 使用下列任一选项，对 **sulfas_PosMS.d** 色谱图进行积分。
	  ◦ 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 **sulfas_PosMS.d > 用户色谱图**部分中的 **TIC 扫描**。然后，右键单击“TIC 扫描”，并单击**积分色谱图**。
		• 积分将使用 **Agile 2** 积分器，因为这是在方法 default.m 中选定的积分器。您可以在“方法编辑器”窗口的“色谱图”>“积分(MS)”>“积分器”选项卡中更改此值。
		• 不同的积分器将检测不同的峰。**Agile 2** 积分器仅能识别四个最大的峰。
		• 单击“方法编辑器”窗口中的**积分色谱图**按钮可进行积分。

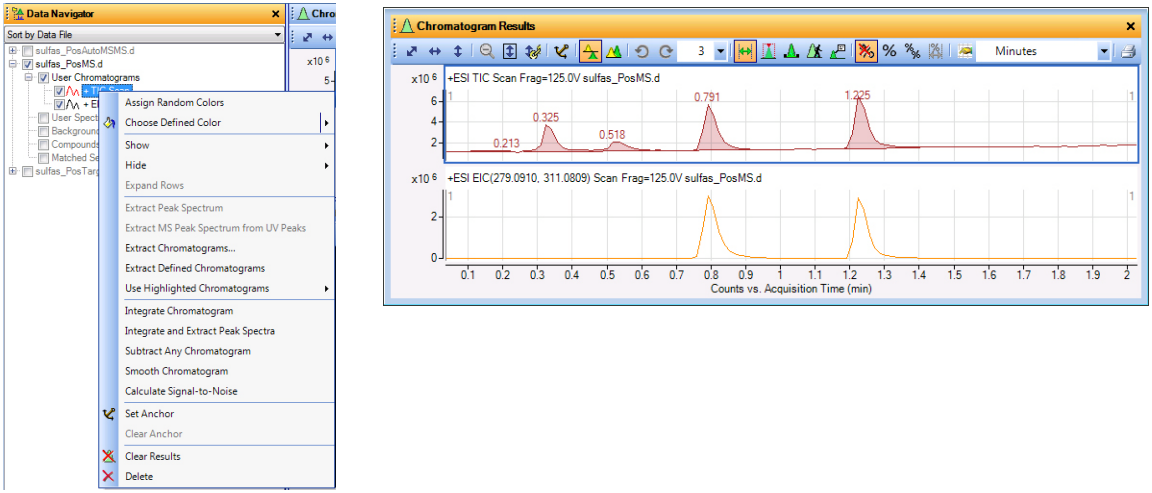


图 11 “数据浏览器”中的快捷菜单以及积分的 sulfas_PosMS.d TIC 色谱图

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 对任务 1 中的提取离子色谱图 (EIC) 进行积分。	• 在 EIC 窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击**积分色谱图**。	• 在设置提取时，可以选中“提取色谱图”对话框中的**提取时积分**复选框。
3 更改积分 TIC 的过滤器参数。 • 为 MS 数据显示方法管理器中的“积分方法编辑器”窗口。 • 更改阈值以便仅保留两个最大的峰。	**a** 在“方法管理器”中，单击**色谱图 > 积分 (MS)** 以显示“积分器”选项卡。 **b** 单击**峰过滤器**选项卡。 **c** 在“最大峰数量”下，选中**限制为最大值 (按峰高)** 复选框并键入 2。	• 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。

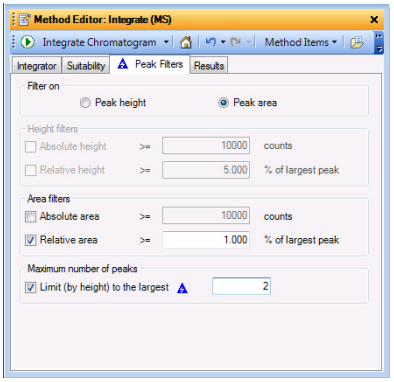


图 12 选中了**上限 （按峰高）**的“峰过滤器”选项卡

4 对色谱图重新积分。	**a** 单击“数据浏览器”窗口中的 **TIC 扫描**。 **b** 单击**积分色谱图**图标 。	• 请注意，现在仅对两个最大的峰进行积分。

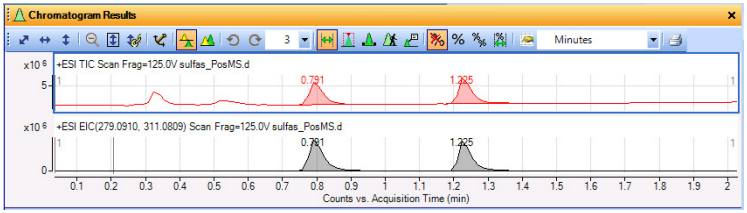
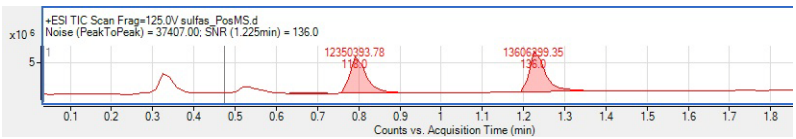


图 13 包含峰数量有限的积分结果

任务 8. 对色谱图进行交互式积分 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
5 计算信噪比。 • 选择 **sulfas_PosMS.d** TIC。 • 将色谱峰的第一个峰标签设置为**面积**，将第二个峰标签设置为**信噪比**。 • 打开 “方法编辑器”。 • 使用 0.63 – 0.73 表示噪音区域，并计算积分峰的信噪比。	**a** 单击**配置 > 色谱图显示选项**。 **b** 单击**色谱图**选项卡。 **c** 将第一组**峰标签**设置为**面积**，将第二组**峰标签**设置为**信噪比**。 **d** 单击**确定**。 **e** 在 “方法管理器”中，单击**色谱图 > 计算信噪比**。 **f** 单击**特定噪音区域**按钮。 **g** 为**噪音区域**键入 0.63 - 0.73，并单击**计算信噪比**图标 。	• 还可以单击 “色谱图结果”窗口中的 图标以显示**色谱图显示选项**对话框。 • 按 **F1** 键可在大多数窗口和对话框中获得帮助。 • 确保在计算信噪比之前选中 TIC。 • 指定为噪音区域的面积在 “色谱图结果”窗口中以粗体形式绘制。
		
	图 14 具有 “面积”和 “信噪比”标签的积分 TIC	
6 恢复缺省方法的设置，并关闭 “方法编辑器”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**按钮 。 **b** 关闭**方法编辑器**窗口。	• 联机帮助描述了每种信噪比算法。
7 使峰标签返回 “保留时间”。	**a** 单击**配置 > 色谱图显示选项**。 **b** 单击**色谱图**选项卡。 **c** 将第一个峰标签设置为**保留时间**，将第二个峰标签设置为**化合物标签**。 **d** 单击**确定**。	• **缺省**按钮将恢复此对话框中的缺省值。这些值可能与首次打开此对话框时选定的值不同。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）

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）。您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。此外，此任务还可向您显示如何更改质谱图显示选项并扣除背景质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）

步骤	详细说明	注释
1 在位于 0.79 分钟处的峰上和 **sulfas_PosMS.d** 数据文件的最后一个峰的特定数据点上提取质谱图。 • 放大 0.7 与 1.0 分钟之间的区域后，请使用“注释”下介绍的任一选项从处于或接近 0.79 分钟处的峰中提取质谱图。 • 打开 “质谱图预览”。 • 放大 1.1 与 1.4 分钟之间的区域后，请从处于或接近 1.22 分钟的峰中提取质谱图。 • 将此质谱图复制到“用户质谱图”部分。 • 更改显示，使得至少显示两个质谱图。	**a** 要放大到 0.79 分钟处的峰，请在 0.70 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 1.0 分钟处的曲线下方，然后松开鼠标。 **b** 在接近 0.79 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取质谱图。 **c** 单击“色谱图结果”工具栏中的**缩小**图标 。 **d** 单击 “MS 质谱图结果”工具栏上的**范围选择**图标 。 **e** 要打开 “质谱图预览”，请单击**质谱图预览**按钮 。 **f** 放大到介于 1.1 与 1.4 分钟之间的区域。 **g** 在接近 1.22 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取质谱图。该质谱图将显示在“质谱图预览”窗口中。 **h** 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**。 此时不会关闭 “质谱图预览”窗口。 **i** 如有必要，请单击 “MS 质谱图结果”工具栏中的**最大列表窗格数**图标，然后选择 **2**。 **j** 关闭**方法编辑器**窗口。	• 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**提取色谱图分析**对话框。确保已选择 **sulfas_PosMS.d** 文件，然后单击**提取**。 • 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，在“数据浏览器”窗口中，该质谱图的类型和保留时间将出现在**用户质谱图**下。 • 当 “质谱图预览”窗口打开时，系统将在 “质谱图预览”窗口中显示任何手动选择的质谱图，但不会在 “用户质谱图”部分中保留质谱图。 • 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。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释

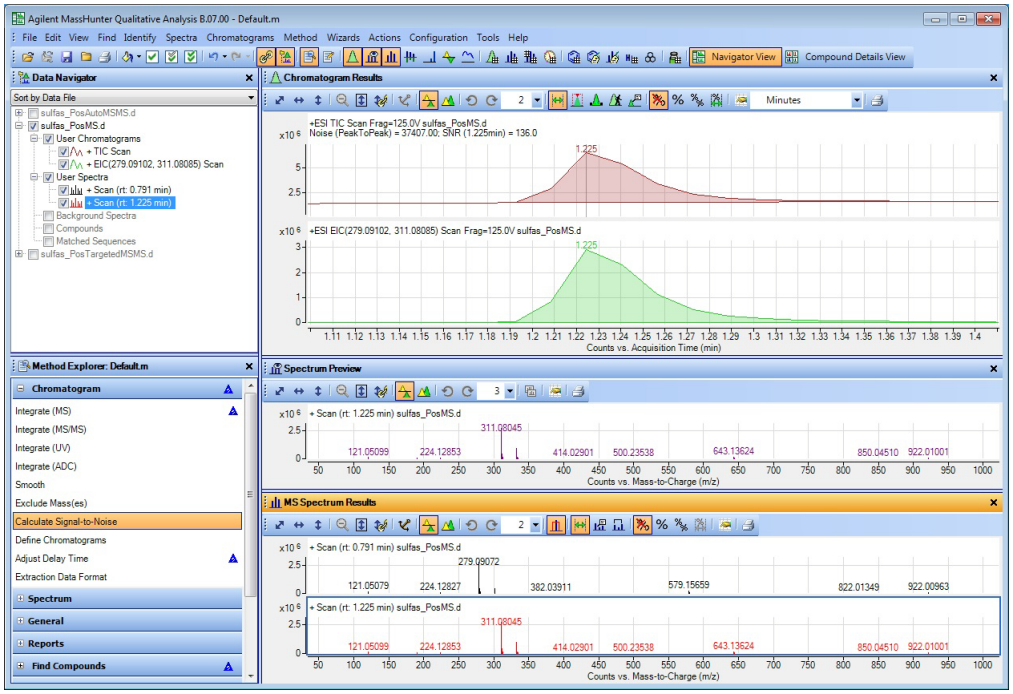


图 15 包含从 sulfas_PosMS.d 文件中的两个积分峰中提取的质谱图的主窗口

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 提取一个质谱图，并使用该质谱图对 **sulfas_PosMS.d** 数据文件的最后一个积分峰的某个指定范围内的所有点求平均值： • 删除所有现有的用户质谱图。 • 缩小该色谱图。 • 关闭 “质谱图预览” 窗口。 • 使用 “色谱图” 工具栏上的 “范围选择” 图标。 • 设置从峰左侧的某点到峰右侧的同一个点之间的范围。 • 使用列出的任一选项提取该质谱图 （或光谱图）。	**a** 选中要删除的用户质谱图 （按 **Ctrl** 可选中多个质谱图）。 **b** 右键单击选定的用户质谱图（或光谱图），然后单击**删除**。 **c** 单击 “删除” 对话框 （如果已显示）中的**是**。 **d** 单击 “色谱图结果” 窗口中的 以完全缩小。 **e** 关闭 **“质谱图预览”** 窗口。 **f** 单击 “色谱图” 工具栏上的**范围选择**图标 。 **g** 在最后一个积分峰左侧的某点处单击，并拖动到右侧的某点上方。 **h** 使用下方或右侧的选项提取平均质谱图。 • 在峰范围的任意位置单击鼠标右键，并单击快捷菜单中的**提取 MS 质谱图**。 • 单击 “提取质谱图” 对话框中的**提取**。	• 如果右键单击 “数据浏览器” 窗口中的 “用户质谱图” 行，然后单击**删除**，还可以删除所有用户质谱图。 • 此外，还可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图（或光谱图）。 • 您可以使用 “消息框选项” 对话框更改每次删除色谱图或质谱图时是否要求您进行确认。单击**配置 > 消息框选项**命令时可显示此对话框。 • 只有在调用多个数据文件时，才会显示 “提取质谱图” 对话框。



图 16 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图 （或光谱图）

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
3 提取一个质谱图，并使用该质谱图对 **sulfas_PosMS.d** 数据文件中的积分峰 1 和 2 的范围一同求平均值。 • 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**窗口标题栏。“色谱图结果”窗口将成为活动窗口，且选定的面积不会丢失。 **b** 按住 **Ctrl** 键。 **c** 在第一个积分峰左侧的某点处单击，并拖动到右侧的某点上方。 **d** 松开鼠标。 **e** 松开 **Ctrl** 键。 **f** 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 2 中选定的范围。 • 您也可以在色谱图中的任意位置上单击鼠标右键，然后单击**提取 MS 质谱图**，以提取质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。单击**提取**。

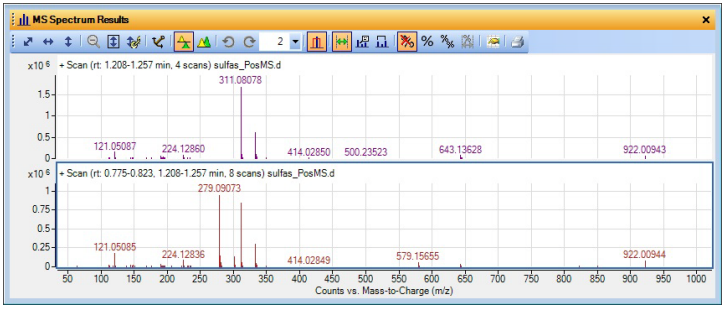
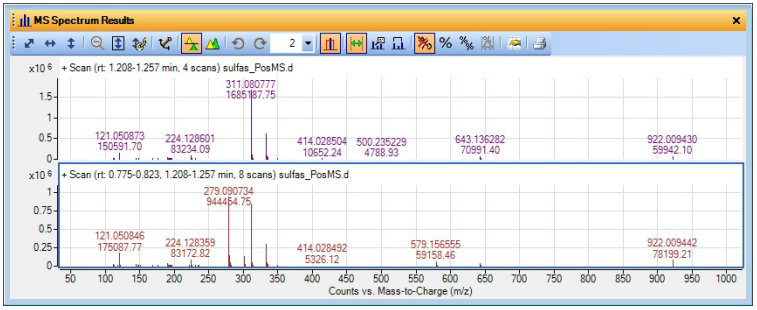


图 17 从多个范围创建的平均质谱图。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4 更改 **sulfas_PosMS.d** 的质谱图显示选项。 • 将小数点后面的数字更改为大于当前设置的值。 • 更改回原始位数。	**a** 单击**配置 > MS 和 MS/MS 质谱图显示选项**。 **b** 单击 **MS 和 MS/MS 质谱图**选项卡。 **c** 将**小数点后的位数**设置为大于 m/z 值的当前设置的值。 **d** 单击**质谱图峰标签选项**选项卡。 **e** 选择**丰度**作为第二个 **MS 峰标签**。 **f** 单击**确定**。  **g** 重复步骤 a 和 b，然后将**小数点后的位数**设置为小于当前设置的值。 **h** 单击**质谱图峰标签选项**选项卡。 **i** 选择**分子式和离子种类**作为第二个 **MS 峰标签**。 **j** 单击**确定**。	• 还可以单击“MS 质谱图结果”窗口中的 “显示选项”图标 。 • 请注意，该标签现在显示的 *m/z* 多一位数字。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
5 每次提取 MS 峰质谱图时扣除背景质谱图。 • 删除“数据浏览器”中“用户质谱图”下的所有扫描类型。 • 在 0.0 到 0.25 分钟的区域内提取一个背景质谱图，并使其出现在 “数据浏览器”的 “背景质谱图”文件夹中。 • 使用当前的背景 MS 质谱图进行扣除。 • 对色谱图进行积分，将积分峰数目限制为 4 个。 • 从第三个积分峰中提取峰质谱图 （或光谱图）。	**a** 在“数据浏览器”中的**用户质谱图**下，选中要删除的用户质谱图（按 **Ctrl** 键）。 **b** 右键单击该质谱图，然后单击**删除**。单击**是**。 **c** 将光标拖到 0.0 和 0.25 分钟之间。 **d** 在该范围内单击鼠标右键，然后单击**将 MS 质谱图提取到背景**。 **e** 如果显示一个对话框，请选择 Sulfas_PosMS.d 数据文件，然后单击**提取**。 **f** 在 “方法管理器”中，单击**质谱图 > 提取 MS**。 **g** 单击**峰质谱图提取 (MS)** 选项卡。 **h** 在**峰质谱图背景**下，选择 MS 质谱图的**当前背景质谱图**。 **i** 在 “方法管理器”中，单击**色谱图 > 积分 (MS)**。 **j** 单击**峰过滤器**选项卡。 **k** 选中**上限 （按峰高）**复选框，并键入 4。 **l** 在主菜单中，单击**色谱图 > 积分色谱图 > 整个色谱图**。 **m** 单击 “色谱图结果”工具栏中的**峰选择**图标 。 **n** 选择第三个积分峰，并使用下列选项之一提取峰质谱图。 • 双击该峰。 • 右键单击该峰，然后单击**提取峰质谱图**。 • 单击**色谱图 > 提取峰质谱图**。 • 在 “数据浏览器”窗口中右键单击色谱图，然后单击**提取峰质谱图**。	• 要在手动提取质谱图时设置要扣除的质谱图，请选择“手动提取”选项卡中的**手动质谱图背景**。该选项卡不会影响所提取的峰质谱图。 • 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。 • 以下步骤可用作将背景质谱图移动到“背景质谱图”文件夹中的替代方式： • 双击选定范围以提取平均的质谱图。 • 在质谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击**移动到背景质谱图**。

任务 9. 从色谱图中提取质谱图 （仅 MS）（续）

步骤	详细说明	注释

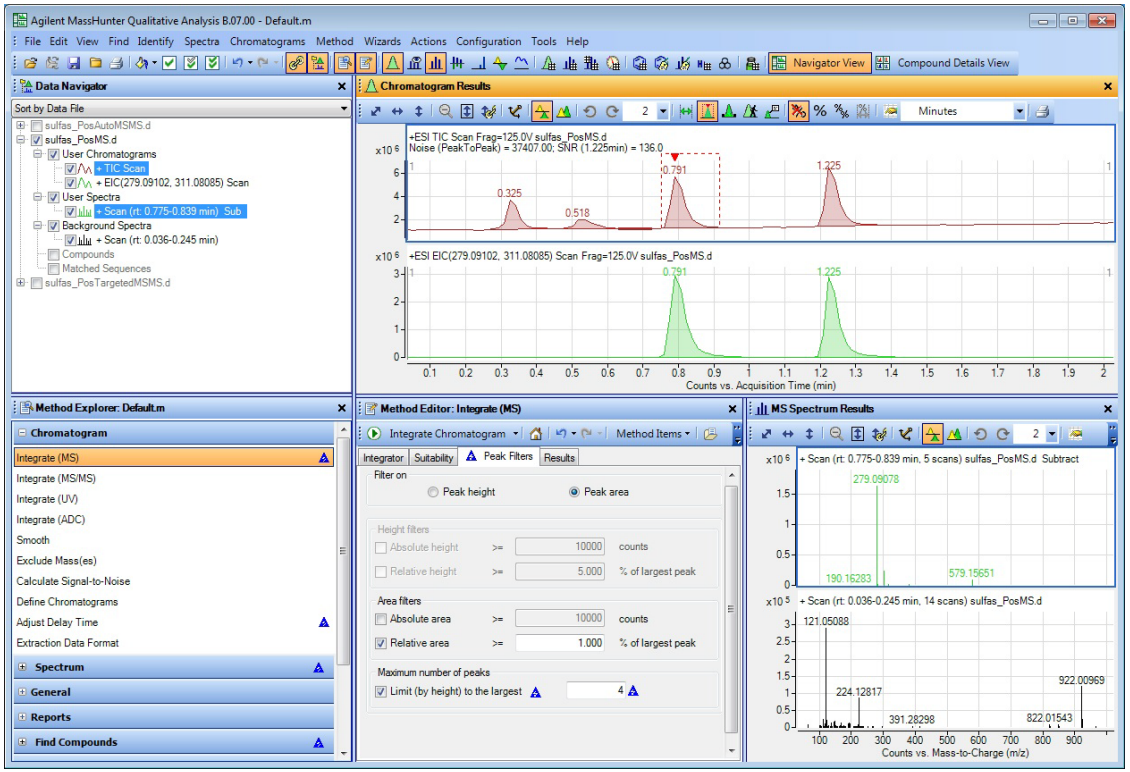


图 18 扣除背景的质谱图

任务 10. 添加卡尺

卡尺显示质谱图中两个点之间的差。您可以将卡尺添加到下列图形窗口：

- “MS 质谱图结果”窗口
- “解卷积结果”窗口

还可以在 “化合物详细信息视图”的两个窗口中添加卡尺。有关此视图的详细信息，请参见第 149 页上的 “任务 3. 在 “化合物详细信息视图”中查看结果”。

还可以将**修饰**卡尺或**氨基酸**卡尺添加到显示在 “解卷积结果”窗口中的解卷积的质谱图。如果质量由于修饰或氨基酸而改变，则卡尺的标签也会变为 “修饰”或 “氨基酸”。否则，将报告质量中的变化 （质量增量）。

任务 10. 添加卡尺

步骤	详细说明	注释
1 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**卡尺**工具 ( )。 **b** 在 “卡尺”工具栏中，为卡尺类型选择**轮廓图点到点**。 **c** 将光标移到质谱图窗格中要添加卡尺的位置。 **d** 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。	• 请参见第 31 页上的 “任务 9. 从色谱图中提取质谱图（仅 MS）”以提取 MS 质谱图。 • 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。

任务 10. 添加卡尺 （续）

步骤	详细说明	注释
2 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 ( )。将显示**质量增量卡尺设置**对话框。 **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**。 **g** （可选）删除卡尺。 单击 MS 质谱图结果卡尺工具栏中的 按钮。 **h** 切换到范围选择工具。单击 MS 质谱图结果工具栏中的 工具。	• 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。

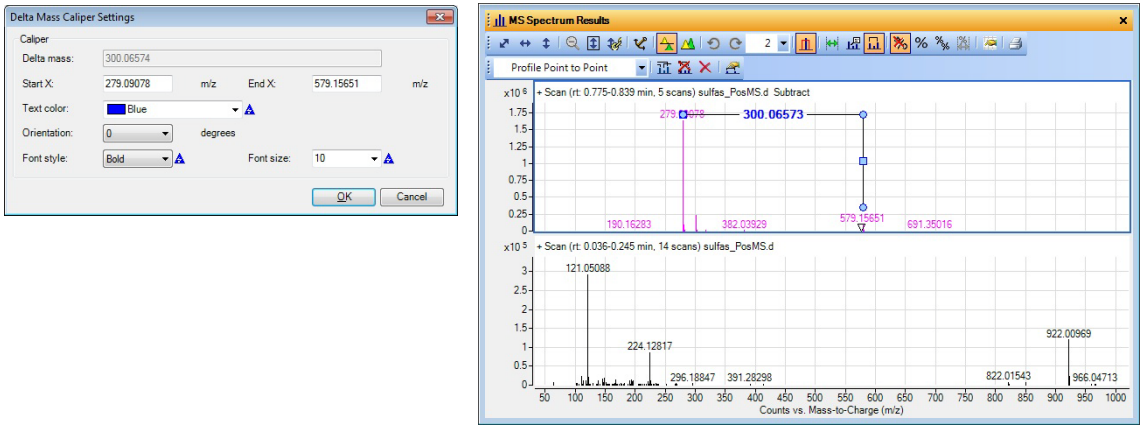


图 19 “质量增量卡尺设置”对话框和 “MS 质谱图结果”窗口

适用于 LC/MS/MS 数据 （Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务

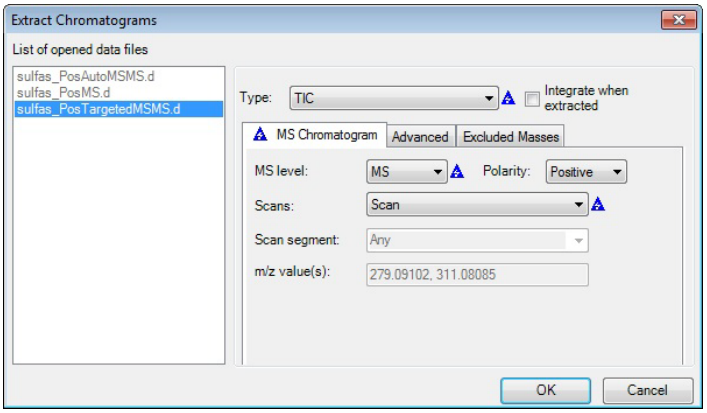
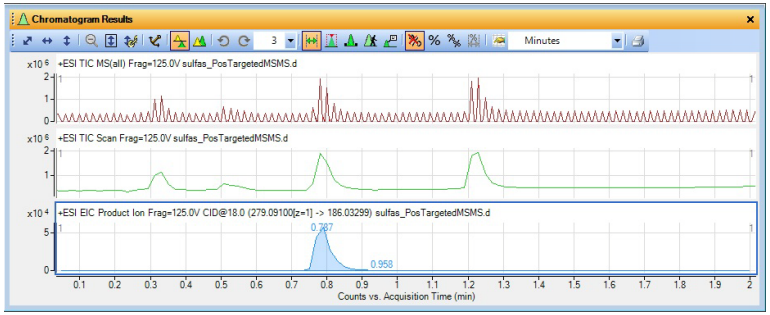
任务 11. 提取色谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）

在此任务中，您可以为 MS 数据提取一个色谱图，并为 MS/MS 数据提取一个色谱图，以便对峰进行积分。您不能对原始色谱图的 TIC 进行积分，因为它同时包含 MS 和 MS/MS 数据。

任务 11. 提取色谱图 （MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 在 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 数据文件中提取 MS 数据的 TIC。	**a** 在 “数据浏览器” 窗口中，选中 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 的复选框，并清除其他数据文件的复选框。 **b** 使用下列选项或右侧的选项之一，显示 “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 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** （如有必要）。 **d** 确保**类型**为 **TIC**。 **e** 在 “MS 级别” 列表中，单击 **MS**。 **f** 单击**确定**。	• 您还可以采用下列方法之一来提取色谱图： ◦ 右键单击色谱图，然后单击**提取色谱图**。 ◦ 在 “数据浏览器” 中，单击**用户色谱图 > TIC MS （全部）**，然后右键单击 **TIC MS （全部）**，并单击**提取色谱图**。 • 也可以从质谱图开始提取色谱图。

任务 11. 提取色谱图 （MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
		
	图 20 提取 MS 色谱图	
2 提取另一个色谱图，但要根据 MS/MS 数据的产物离子进行提取。 • 这次，请选择对提取的色谱图进行积分。 • 提取与 279.091 -> 186.03299 对应的产物离子 EIC。	**a** 重复步骤 1 的步骤 b 和步骤 c。 **b** 单击 **EIC** 作为 “类型”。 **c** 在 **MS 级别**列表中，单击 **MS/MS**。 **d** 在**扫描类型**列表中，单击**产物离子**。 **e** 在**前级离子 m/z** 中，选择 “279.09100”。 **f** 在 m/z 值文本框中，键入 `186.03299`。 **g** 选中**提取时积分**复选框。 **h** 单击**确定**。	• 首次选择 EIC 时，将在 m/z 值框旁边显示一个错误图标。在步骤 e 和步骤 f 中指定 **m/z 值**。 • 在 m/z 值文本框中，您还可以键入范围 （例如 `100 - 300`）。
		
图 21 MS 的 TIC 和 MS/MS 数据的 EIC （与原始 TIC 比较）		

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）

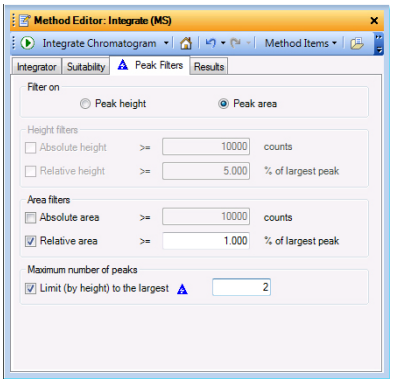
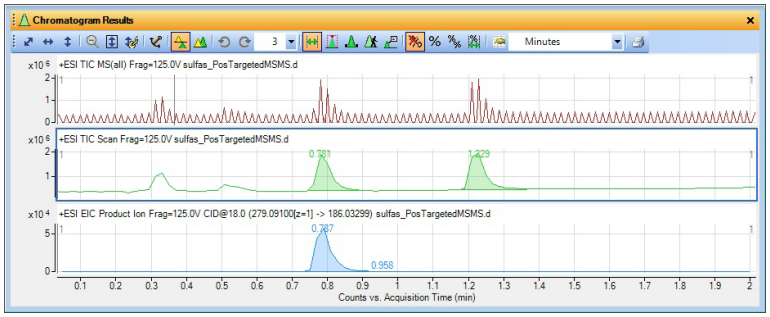
在此任务中，您将学会用于对色谱图进行积分、更改积分参数以修改结果，以及为 MS/MS 数据的积分峰计算信噪比的多种不同方法。

您不能对原始 Q-TOF TIC 色谱图进行积分，因为它同时包含 MS 和 MS/MS 数据（可能没有按特定顺序排列）。

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任一选项，对 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的 **“TIC 扫描”色谱图**进行积分。	**a** 选中 “TIC 扫描”色谱图，并从下列任一命令中进行选择以便对色谱图进行积分。 • 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 **sulfas_PosTargetedMSMS.d > 用户色谱图 > TIC 扫描**，然后右键单击 **TIC 扫描**并单击**积分色谱图**。	• 请注意，该程序已对色谱图中的 4 个峰进行了积分。 • 您可以选择要对 “方法编辑器”窗口中的 MS 数据、 MS/MS 数据、 UV 数据以及 ADC 数据使用的积分器。 • 不能对 **TIC MS (全部)** 色谱图进行积分。不能对同时包含 MS 和 MS/MS 数据的色谱图进行积分。
2 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两个最大的峰。	**a** 在 “方法管理器”窗口中，单击**色谱图 > 积分 (MS)** 以显示 “积分器”选项卡。 **b** 检查 “积分器”选项卡中的参数。 **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)** 复选框 （如果需要）并键入 2。	• 按 **F1** 键可查看联机帮助，以获得有关积分器的更多信息。 • 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 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
		
	图 22 选中了**上限 （按峰高）**复选框的 “峰过滤器” 选项卡	
3 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，现在仅对两个最大的峰进行积分。
		
	图 23 使用数量有限的积分峰对 TIC MS 和 MS/MS 色谱图进行积分	

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4 使用右侧列出的任一选项，对 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的**“EIC 产物离子”色谱图**进行积分。	**a** 选中 “EIC 产物离子”色谱图，并从下列任一命令中进行选择以便对色谱图进行积分。 • 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 **sulfas_PosTargetedMSMS.d > 用户色谱图 > EIC 产物离子**，然后右键单击 **EIC 产物离子**并单击**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。 • 您可以在 “积分器”选项卡中选择要对 “方法编辑器”窗口中的 MS 数据、 MS/MS 数据、 UV 数据、 GC 数据以及 ADC 数据使用的积分器。可以为 MS 数据、MS/MS 数据、UV 数据和 GC 数据以及 ADC 数据选择不同的积分器。
5 将过滤器更改为按峰高过滤并设置绝对峰高限值。	**a** 在 “方法管理器”中，单击**色谱图 > 积分 (MS/MS)** 以显示 “积分器”选项卡。 **b** 单击**峰过滤器**选项卡。 **c** 在**过滤依据**下，单击**峰高**。 **d** 在 “峰高过滤器”下，选中**绝对峰高**复选框。	• 缺省情况下，对 MS/MS 数据选定了 MS/MS 积分器。 • 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。
6 对色谱图重新积分	**e** 单击“方法编辑器”工具栏中的  图标，以便使用新设置进行积分。	• 请注意，现在仅对最大的峰进行积分。

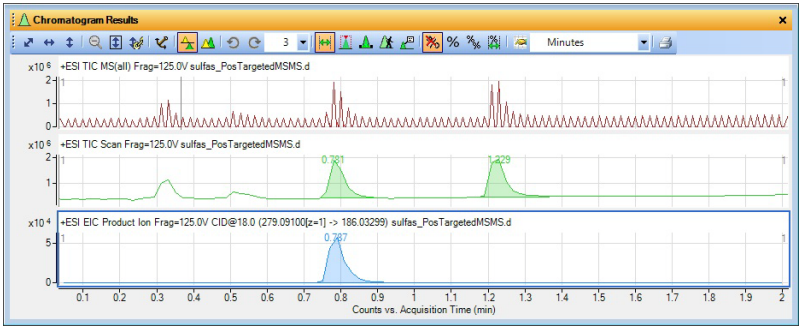


图 24 积分的 MS 和 MS/MS 色谱图

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
7 计算产物离子 EIC 的信噪比。 • 将色谱峰的第一个峰标签设置为**面积**，将第二个峰标签设置为**信噪比**。 • 打开 “方法编辑器”。 • 使用 0.0 - 0.76 表示噪声区域，并计算积分峰的信噪比。	**a** 单击**配置 > 色谱图显示选项**，并将第一个峰标签设置为**面积**，将第二个峰标签设置为**信噪比**。单击**确定**。 **b** 在 “方法管理器” 中的 “色谱图” 部分中，选择**计算信噪比**。 **c** 单击**特定噪音区域**按钮。为**噪音区域**键入 0.0 - 0.76，并单击**计算信噪比**图标 。	• 确保在计算信噪比之前选中 EIC。 • 缺省**噪音定义**算法是峰到峰。有关每种**噪音定义**的信息，请参见联机帮助。 • 指定为噪音区域的面积在 “色谱图结果” 窗口中以粗体形式绘制。

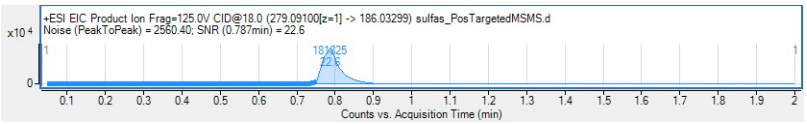


图 25 MS/MS 产物离子的信噪比结果

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” 中单击 **“色谱图” > “计算信噪比”** 部分。 **b** 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 。 **c** 在 “方法管理器” 中单击**色谱图 > 积分 (MS/MS)** 部分。 **d** 单击 图标。 **e** 在 “方法管理器” 中单击**色谱图 > 积分 (MS)** 部分。 **f** 单击 图标。 **g** 关闭**方法编辑器**。	• 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 使色谱图的峰标签返回 “保留时间”。	**a** 单击**配置 > 色谱图显示选项**。 **b** 对第一个峰标签选择**保留时间**，对第二个峰标签选择**无**。 **c** 单击**确定**。	• 还可以单击 “色谱图结果” 窗口中的 “显示选项” 图标 以打开 “色谱图显示选项” 对话框。

任务 12. 对色谱图进行交互式积分 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
10 删除原始色谱图以外的所有色谱图。	**a** 如果选择 “数据浏览器” 窗口中的 “按类型排序”，则在 “用户色谱图” 下方选中除原始色谱图以外的所有色谱图。右键单击选中的色谱图，然后单击**删除**。 **b** 如果选择 “数据浏览器” 窗口中的 “按数据文件排序”，则在 “用户色谱图” 中的 Sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件部分下方，选中除原始色谱图以外的所有色谱图。右键单击选中的色谱图，然后单击**删除**。 **c** 如果显示**删除**消息框，则单击**是**。	

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）

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。

此外，此任务还可向您显示如何浏览色谱图、更改质谱图显示选项，以及如何扣除背景质谱图。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 浏览色谱图，以查看 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 的最后一个峰的前级离子和产物离子。 • 放大 1.15 与 1.35 分钟之间的区域。 • 使用 “实时色谱图”图标。 • 查看从大约 1.15 分钟处开始的质谱图，并向右侧移动箭头。	**a** 单击 “数据浏览器”窗口中与 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件对应的 **TIC MS (全部)** 色谱图。 **b** 要放大到最后一个峰，请在 1.15 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 1.35 分钟处，然后松开鼠标。 **c** 关闭 “方法编辑器”窗口。 **d** 单击 “色谱图结果”工具栏中的**实时色谱图**图标 。 **e** 将 “实时色谱图”光标移动到 X 轴上方大约 1.15 分钟处，然后单击。与该时间对应的质谱图将自动显示在 “质谱图预览”窗口中。 **f** 要在质谱图之间导航，请按键盘上的向左向右箭头键。	• “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。 • 单击 “实时色谱图”图标时将自动打开 “质谱图预览”窗口。 • 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”窗口中。 • 如果单击 按钮 （在缩放期间对 Y 轴自动调整），当缩放到包括所选 X 轴范围内的所有点时，软件会自动设置 Y 轴。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释

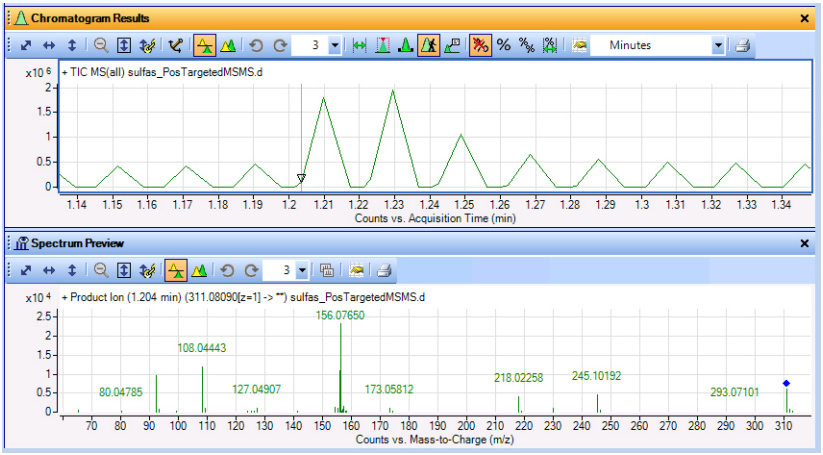


图 26 浏览色谱图以查看 1.204 分钟处的 MS/MS 产物离子

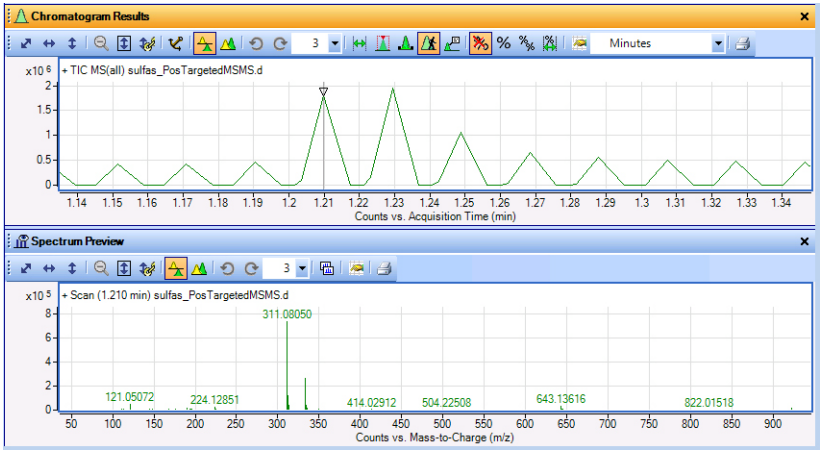


图 27 浏览色谱图以查看 1.210 分钟处的峰所对应的 MS 扫描

如果要在色谱图标题和质谱图标题中包括裂解电压，则可在“色谱图显示选项”对话框和“MS 和 MS/MS 质谱图显示选项”对话框中选中“扩展参数”复选框。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 在 0.33 分钟处的峰和 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 数据文件的最后一个峰的特定数据点上提取质谱图。 • 放大 0.3 与 0.4 分钟之间的区域后，请从位于或接近 0.33 分钟处的某个峰 (MS) 中提取一个质谱图，然后使用 “注释”下介绍的任一选项提取一个峰谷 (MS/MS)。 • 放大 1.15 与 1.25 分钟之间的区域后，请从位于或接近 1.23 分钟处的某个峰 （而不是峰谷）中提取一个质谱图。 • 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** 要放大到第一个峰，请在 0.3 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 0.4 分钟处，然后松开鼠标。 **e** 在接近 0.33 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 0.34 分钟处的峰谷上，提取一个质谱图。 **g** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的**缩小**图标 。 **h** 放大到介于 1.15 与 1.25 分钟之间的区域。 **i** 在接近 1.23 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，请单击 “MS 质谱图结果” 工具栏中的**最大列表窗格数**图标，然后选择 **3**。	• 如果 “在缩放期间对 Y 轴自动调整” 图标 的背景为橙色，则表示该图标为 “打开” 状态。 • 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。确保选中 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 文件，然后单击 “提取质谱图” 对话框中的**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 “数据浏览器” 中的**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。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释

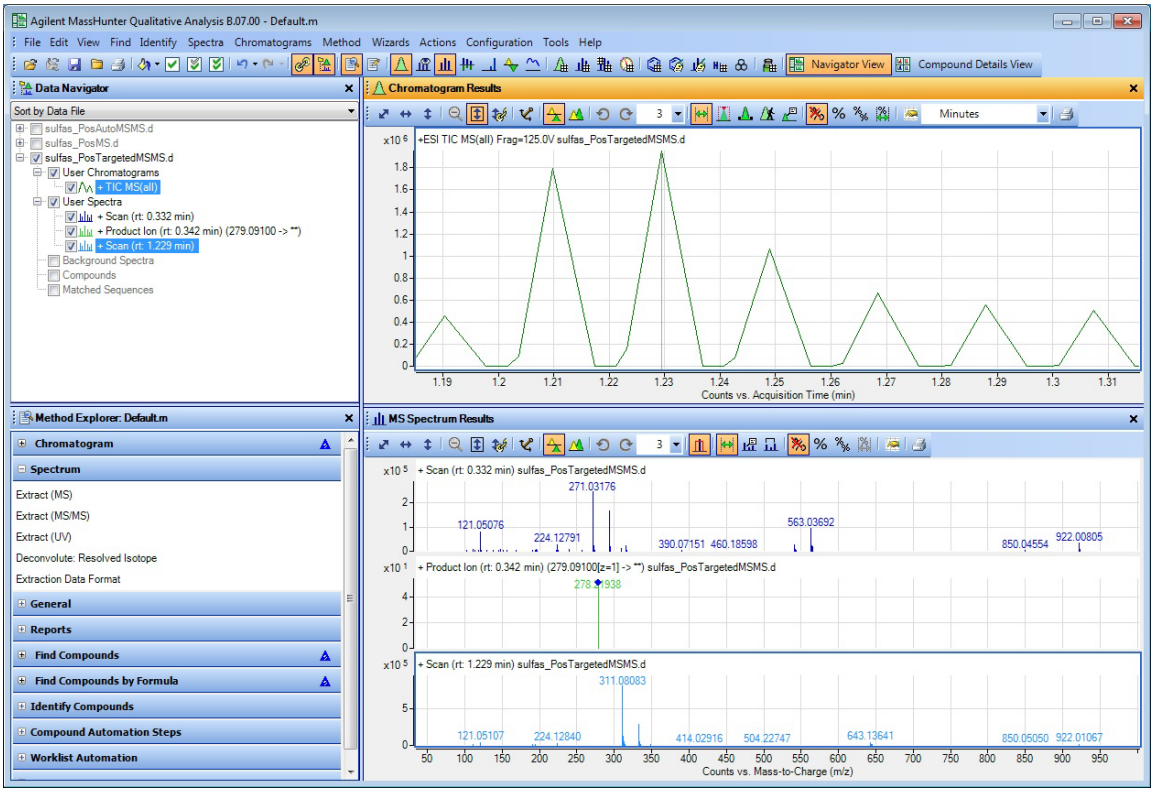


图 28 包含第一个峰的 “MS 扫描”和产物离子质谱图以及最后一个峰的 “MS 扫描”质谱图的 “定性分析”程序

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
3 为 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 数据文件的最后一个峰提取一个产物离子质谱图。 • 查看 “质谱图预览”窗口。 • 从 RT 1.237 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 4 个质谱图。 • 关闭 “质谱图预览”窗口。	**a** 单击主工具栏中的**质谱图预览**图标 。 **b** 在接近 1.23 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**。 **d** 在 “MS 质谱图结果”窗口中，对**最大列表窗格数**选择 4。 **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”窗口处于打开状态时，“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。

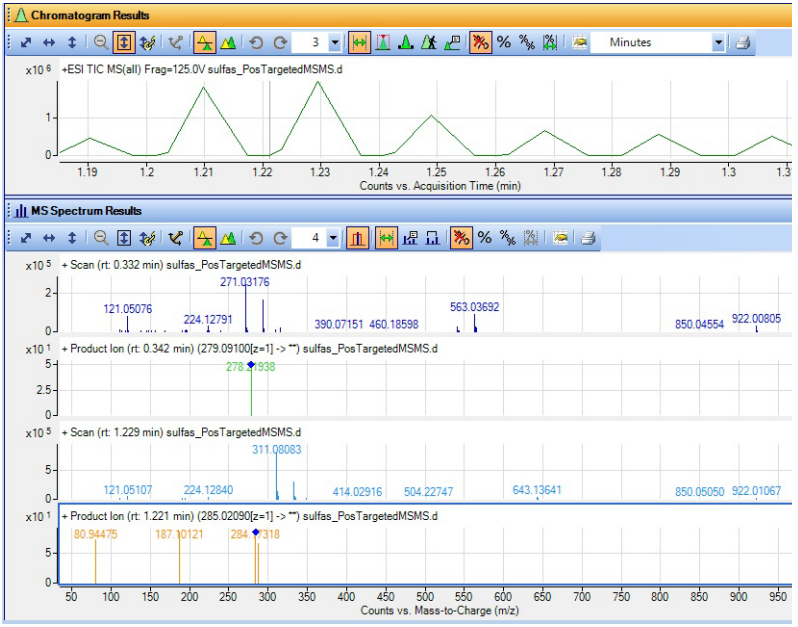


图 29 包含色谱图中最后一个峰的产物离子质谱图的 “色谱图结果”和 “MS 质谱图结果”窗口

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4 提取一个质谱图，并使用该质谱图对 **sulfas_PosTargeted.d** 数据文件的最后一个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 “色谱图结果”工具栏中的**对 X 轴和 Y 轴自动调整**图标 以完全缩小。 **b** 单击 “色谱图”工具栏上的**范围选择**图标 。 **c** 在最后一个峰的大约 1.21 分钟处单击并拖动到右侧大约 1.229 分钟处。 **d** 使用右侧的某个选项提取平均质谱图。 **e** 单击工具栏中的 “最大列表窗格数”图标旁边的向下箭头，并选择 **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**。然后，单击**提取**。 • 请注意，平均 MS 质谱图和平均 MS/MS 质谱图将同时出现。

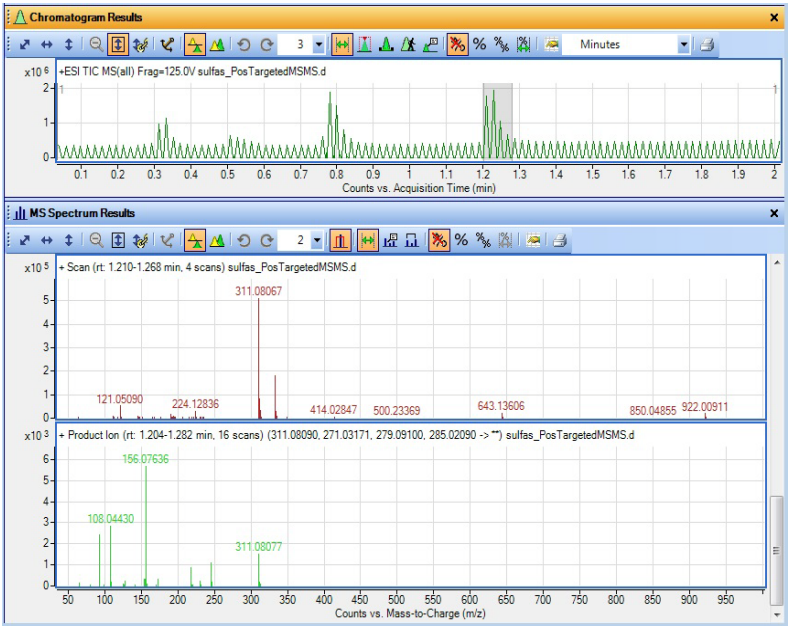


图 30 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
5 提取质谱图，并使用该质谱图对 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 数据文件中的峰 1 和 4 的范围一同求平均值。 • 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** 按住 **Ctrl** 键。 **b** 在第一个峰左侧大约 0.3 分钟处单击，并拖动到右侧大约 0.33 分钟处，然后松开鼠标。 **c** 松开 **Ctrl** 键。 **d** 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**。 • 所选择的范围显示为蓝色。在使用此范围时，实际使用的范围显示为灰色，蓝色范围将被删除。

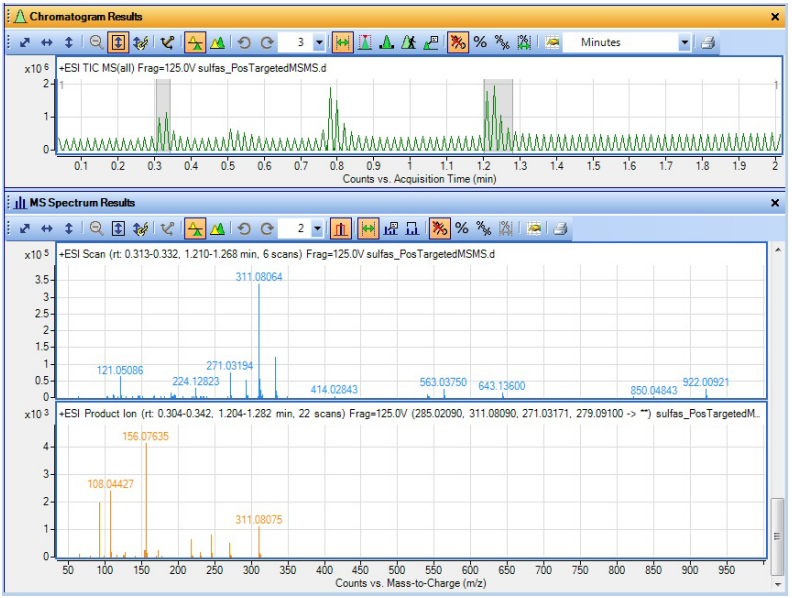
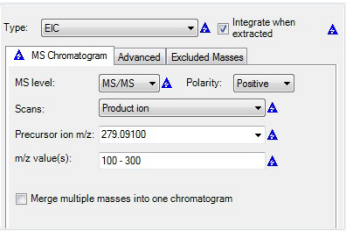


图 31 根据多个范围创建的平均 MS 和 MS/MS 质谱图。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
6 每次为从 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 中提取的 MS/MS EIC 提取峰质谱图时，都会扣除背景质谱图。 • 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** 在 “数据浏览器”中的**用户质谱图**下方，右键单击相应质谱图，然后单击**删除**。 **b** 单击 “删除”消息框中的**是**。 **c** 提取 m/z 范围为 100-300 的离子 279.09100 的积分 MS/MS EIC（请参见第 40 页上的 “任务 11. 提取色谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）”） **d** 在 “方法管理器”中，选择**质谱图 > 提取 (MS/MS)**。 **e** 单击**峰质谱图提取 (MS/MS)** 选项卡 （如果不可见）。 **f** 在**峰质谱图背景**下方，单击**在峰开始和结束处的质谱图的平均值**。 **g** 在 “色谱图结果”工具栏中，单击**峰选择**图标。 **h** 选择接近 0.8 分钟附近的峰。 **i** 单击鼠标右键，然后单击**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。 • 对**提取色谱图**对话框进行以下更改。  • 您将要提取具有前级离子 279.09100 以及范围在 100 和 300 之间的产物离子的任何离子对。

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释

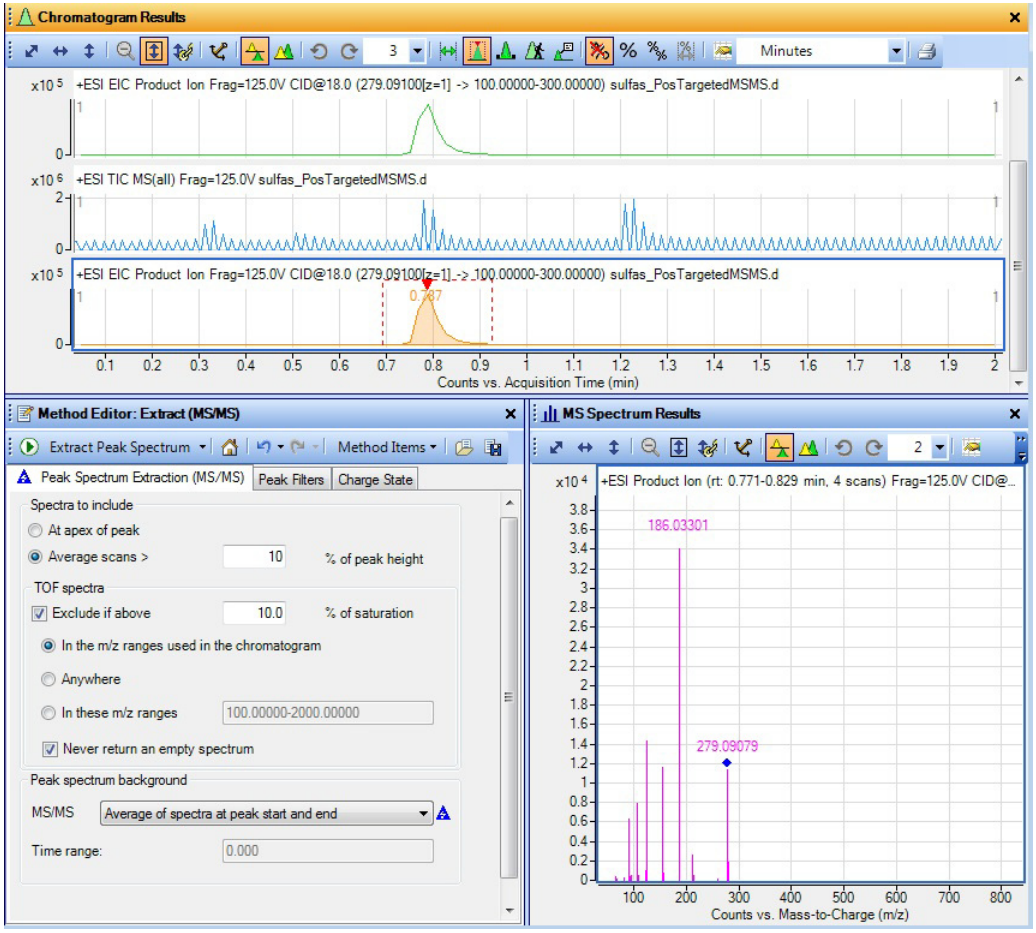


图 32 已扣除背景的产物离子 (MS/MS) 质谱图

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
7 提取指定产物离子 186.03396 和 156.07760 的 MS/MS EIC 产物离子色谱图。 • 在提取色谱图时不要积分。	**a** 右键单击 “产物离子” 质谱图。 **b** 单击**提取色谱图**。 **c** 在**类型**列表中，选择 **EIC**。 **d** 清除**提取时积分**复选框。 **e** 在 **MS 级别**列表中，选择 **MS/MS**。 **f** 对**前级离子 m/z** 选择**任何**。 **g** 在 m/z 值框中，键入 `186.03396` 和 `156.07760`。 **h** 选中**将多个质量合并到一个色谱图中**复选框。 **i** 单击**确定**。	• 可使用逗号分隔多个 m/z 值。 • 如果键入单个 m/z 值，则将使用在 “高级” 选项卡中输入的**此色谱图的单一 m/z 扩展范围**参数将该值自动更改为某个范围。 • 您将要提取具有任何前级离子但只有 186.03396 或 156.07760 的产物离子的色谱图。

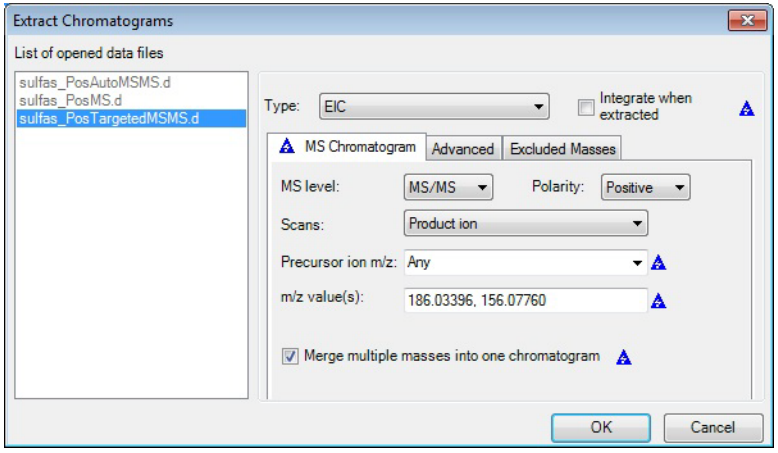


图 33 基于产物离子 EIC 的**提取色谱图**对话框

任务 13. 从色谱图中提取质谱图 （LC/MS 和 LC/MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释

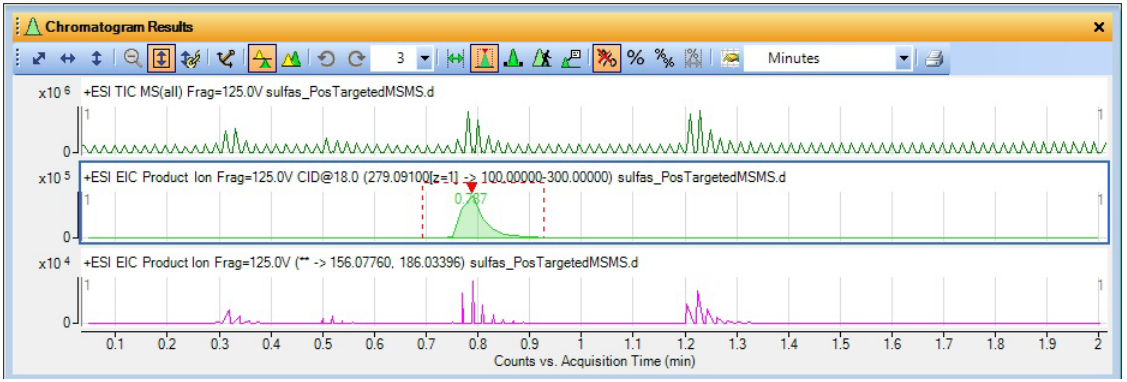
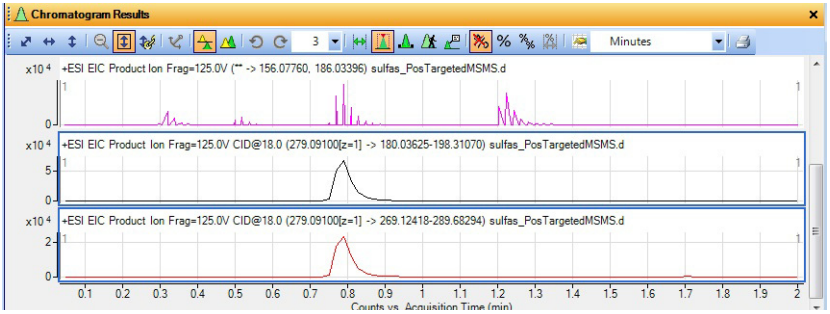


图 34 产物离子 EIC

8 使用步骤 6 中的产物离子质谱图 279.091-> ** 提取 MS/MS EIC。

a 在 “MS 质谱图结果”窗口中，选择 279.09079 峰周围的范围。
b 按住 **Ctrl** 键。
c 选择 186.03301 峰周围的范围。
d 右键单击质谱图，然后单击**提取 EIC > 在选定的范围内**。

- 将为质谱图中的每个范围分别提取一个色谱图。
- 前级离子范围设置为在 “MS 质谱图结果”窗口中选定的范围（或多个范围）。



在 “色谱图显示选项”对话框中启用了展开的标题。展开的标题包括电离、裂解电压和碰撞能量电压。

图 35 直接从产物离子质谱图创建的产物离子 EIC

适用于 MS 和 UV 数据的任务

任务 14. 提取色谱图 （MS 和 UV）

在此任务中，您可以从数据文件中提取 MS 和 UV 色谱图。

任务 14. 提取色谱图 （MS 和 UV）

步骤	详细说明	注释
1 从 **sulfas_PosMS.d** 数据文件中提取 UV 色谱图（DAD1 和 ADC1）。 • 隐藏 sulfas_PosMS.d 以外的所有数据文件 • 删除 TIC 扫描以外的所有色谱图。 • 提取 DAD1 色谱图。 • 提取 ADC1 色谱图。 • 将可见窗格的数目更改为 3。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，清除与 **sulfas_PosMS.d** 以外的数据文件对应的复选框。 **b** 选中与 sulfas_PosMS.d 数据文件对应的复选框。 **c** 删除 **TIC 扫描**以外的所有色谱图。 **d** 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**。 **e** 在**已打开的数据文件列表**中，单击 **sulfas_PosMS.d**。 **f** 在**类型**列表中，单击**其他色谱图**。 **g** 在**检测器**组合框中，选择 DAD1。 **h** 单击**确定**。 **i** 打开 “提取色谱图”对话框。 **j** 在**已打开的数据文件列表**中，单击 **sulfas_PosMS.d**。 **k** 在**类型**列表中，选择**其他色谱图**。 **l** 在**检测器**组合框中，选择 ADC1。 **m** 单击**确定**。 **n** 确保将“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： • 右键单击色谱图，然后单击**提取色谱图**。 • 在“数据浏览器”窗口中，对 **sulfas_PosMS.d** 高亮显示 **TIC 扫描**。然后，右键单击 **TIC 扫描**，并单击**提取色谱图**。 • 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。

任务 14. 提取色谱图 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释

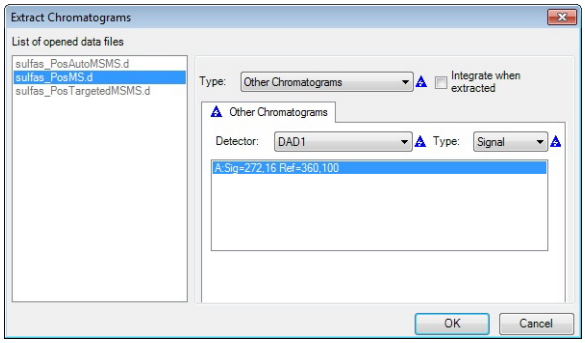


图 36 “提取色谱图”对话框**类型**为 “其他色谱图”。

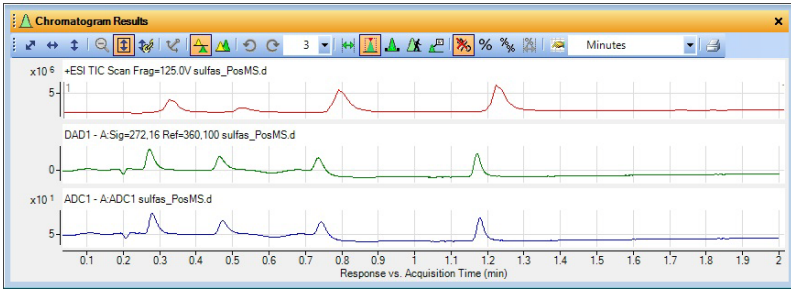


图 37 具有原始 TIC、 DAD1 和 ADC1 的 “色谱图结果”窗口

任务 15. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值（MS 和 UV）

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 15. 对色谱图进行交互式积分 （MS 和 UV）

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任意选项对 **sulfas_PosMS.d** UV 色谱图进行积分。 • 选中 DAD1 和 ADC1 色谱图。 • 对这些色谱图进行积分。	**a** 选中 DAD1 和 ADC1 色谱图。 **b** 在“方法管理器”窗口中，选择**色谱图 > 积分 (UV)**。 **c** 选择**常规**积分器。 **d** 使用下列任一选项，对 **sulfas_PosMS.d** UV 色谱图进行积分。 • 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 **sulfas_PosMS.d > 用户色谱图**部分中的 **DAD1** 和 **ADC1**。然后，右键单击任一色谱图，并单击**积分色谱图**。 **e** 如有必要，选中 MS 色谱图并积分。	• 积分将使用常规积分器，而不是在方法 default.m 中选定的 Agile 2 积分器。 • 如果“色谱图 > 积分 (UV)”部分不可用，则您需要在“用户界面配置”对话框中选中“UV”复选框。 • 请注意，使用带有缺省参数的常规积分器检测的是非常小的峰。
2 可调整延迟时间，使色谱峰排成一行。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**色谱图 > 调整延迟时间**。 **b** 选中 **MS1** 复选框。 **c** 输入 0.325 作为**保留时间**。 **d** 选中 “DAD1” 复选框。 **e** 输入 0.272 作为 “保留时间”。 **f** 单击**从保留时间计算延迟**。 **g** 单击方法编辑器工具栏中的**调整数据中的延迟时间**。	• 在此练习中，MS 数据的保留时间将调整为与 UV 跟踪中的保留时间一致，因此与指南的其他部分中未调整的时间不一致。

任务 15. 对色谱图进行交互式积分 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释

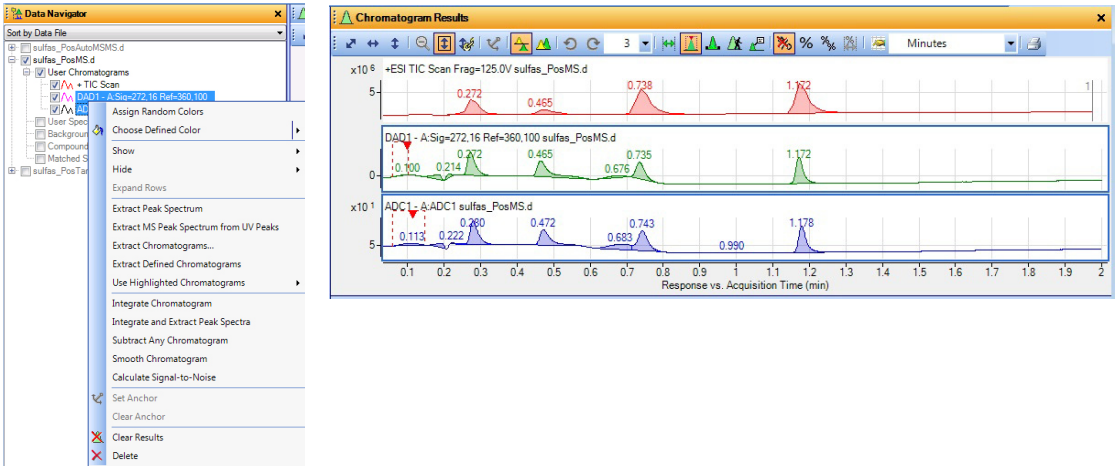


图 38 “数据浏览器”中的快捷菜单之一和已积分的 sulfas_PosMS.d 色谱图

3 对 UV 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 (UV)** 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 0.15。
f 在“色谱柱长度”框中，键入 5。

- 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。

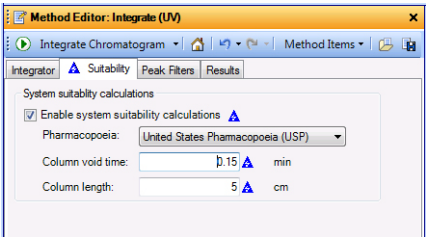


图 39 “色谱图” > “积分 (UV)” > “适应性”选项卡

任务 15. 对色谱图进行交互式积分 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释
4 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。	
5 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 “积分峰列表”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、 ADC 和 GC 色谱图启用系统适应性计算。

Peaks: DAD1 - A:Sig=272,16 Ref=360,100

Peak	RT	Area	Height	Type	Width	FWHM	SNR	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	0.1	0.1	0.01		0.042			23.5	-0.3	1602	32040	-20	0.5
2	0.185	1.03	0.61		0.057			3.14	0.2	266	5320	4.8	0.7
3	0.214	0.45	0.46		0.028			1	0.4	1325	26500	0.8	1
4	0.272	4.39	2.91		0.089			0.45	0.8	815	16300	1.9	1.7
5	0.465	4.88	2.02		0.169			0.18	2.1	1692	33840	4.6	3.4
6	0.676	0.81	0.25		0.095			1.77	3.5	334	6680	2.2	0.8
7	0.735	3.5	2.11		0.08			0.62	3.9	4688	93760	0.6	1.3
8	1.172	4.72	3.37		0.085			0.58	6.8	19207	384140	11.4	1.5

图 40 具有系统适应性值的积分峰表

6 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。 • 再次单击**视图 > 积分峰列表**时，该窗口将不再显示。

任务 16. 从色谱图中提取光谱图 (UV)

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 UV 光谱图、从多个数据点或范围的平均值中提取平均 UV 光谱图，或提取峰光谱图。

任务 16. 从色谱图中提取谱图 （MS 和 UV）

步骤	详细说明	注释
1 在位于 0.27 分钟处的峰上和 **sulfas_PosMS.d** 数据文件的最后一个峰 (1.22) 的特定数据点上提取质谱图 (或光谱图)。 • 删除 ADC1 色谱图。 • 放大 0.17 与 0.31 分钟之间的区域后，请使用“注释”下介绍的任一选项从处于或接近 0.27 分钟处的峰中提取质谱图。 • 打开 “质谱图预览”。 • 放大 1.1 与 1.3 分钟之间的区域后，请从处于或接近 1.17 分钟的峰中提取质谱图。 • 将此质谱图复制到“用户质谱图”部分。 • 更改显示，使得至少显示两个质谱图。	**a** 删除 ADC1 色谱图。 **b** 单击“色谱图结果”工具栏中的**对 X 轴和 Y 轴自动调整**图标 以完全缩小。 **c** 单击“色谱图结果”工具栏上的**范围选择**图标 。 **d** 选中 DAD1 色谱图。 **e** 要放大到 0.272 分钟处的峰，请在 0.2 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 0.31 分钟处的曲线下方，然后松开鼠标。 **f** 在接近 0.27 分钟的峰上，采用“注释”列中的某种方法提取一个 UV 光谱图。 **g** 单击“色谱图结果”工具栏中的**缩小**图标 。 **h** 要打开 “质谱图预览”，请单击**质谱图预览**图标。 **i** 放大到介于 1.1 与 1.3 分钟之间的区域。 **j** 在接近 1.17 分钟的峰上，提取一个 UV 光谱图。该质谱图将显示在“质谱图预览”窗口中。 **k** 右键单击该质谱图，然后单击**复制到用户质谱图**。“质谱图预览”窗口将随 “UV 光谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。 **l** 如有必要，请单击 “UV 光谱图结果”工具栏中的**最大列表窗格数**图标，然后选择 **2**。 **m** 关闭 “MS 质谱图结果”窗口。	• 您无法从 ADC 色谱图中提取质谱图。 • 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。选中**提取 UV 光谱图**。此时将显示“提取质谱图”对话框。确保已选择 **sulfas_PosMS.d** 文件，然后单击**提取**。 • 请注意，在第一次提取光谱图时，将出现包含该光谱图的“UV 光谱图结果”窗口，并且该光谱图的类型和保留时间将出现在“数据浏览器”中的 “用户质谱图”下。 • 启用 “质谱图预览”时，系统将显示所有手动选择的质谱图（光谱图），但不会将其保留在 “用户质谱图”部分中。 • 当 “质谱图预览”窗口处于打开状态时，“定性分析”程序会在您提取新的光谱图时覆盖“质谱图预览”窗口中以前的质谱图（光谱图）。

任务 16. 从色谱图中提取谱图 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释

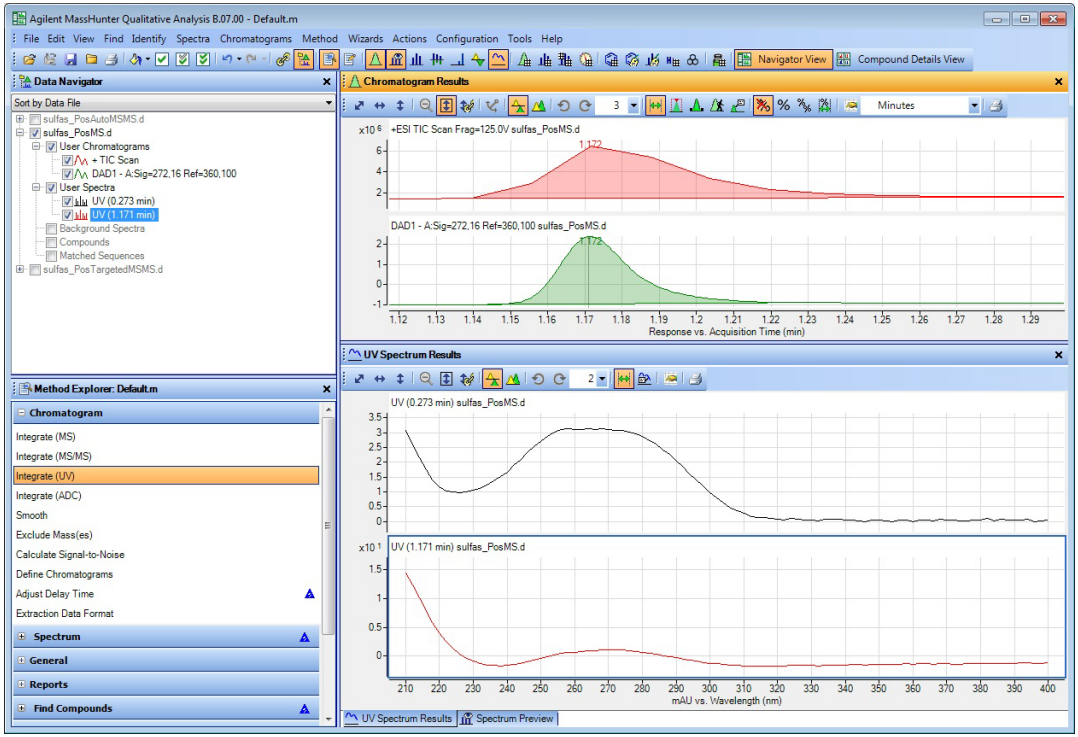


图 41 包含从 sulfas_PosMS.d 文件中的两个积分峰中提取的 UV 光谱图的主窗口

任务 16. 从色谱图中提取谱图 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释
2 提取一个光谱图，并使用该光谱图对 **sulfas_PosMS.d** 数据文件的最后一个积分 UV 峰的某个指定范围内的所有 UV 点求平均值： • 删除所有现有的用户质谱图。 • 缩小该色谱图。 • 关闭 “质谱图预览”窗口。 • 使用 “色谱图”工具栏上的 “范围选择”图标。 • 设置从峰左侧的某点到峰右侧的同一个点之间的范围。 • 使用列出的任一选项提取该质谱图 （或光谱图）。	**a** 选中要删除的用户光谱图 （使用 **Ctrl**）。 **b** 右键单击选定的用户质谱图（或光谱图），然后单击**删除**。 **c** 单击 “删除”对话框 （如果已显示）中的**是**。 **d** 单击**对 X 轴和 Y 轴自动调整**图标 以完全缩小。 **e** 单击**质谱图预览**窗口，然后关闭该窗口。 **f** 单击 “色谱图”工具栏上的**范围选择**图标 。 **g** 在 DAD1 色谱图中的最后一个积分峰左侧的某点处单击，并拖动到右侧的某点。 **h** 使用下方或右侧的选项提取平均光谱图。 • 在峰范围的任意位置单击鼠标右键，并单击快捷菜单中的**提取 UV 光谱图**。 • 单击 “提取质谱图”对话框中的**提取**。	• 此外，还可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图（或光谱图）。 • 您可以使用 “消息框选项”对话框更改每次删除色谱图或质谱图时是否要求您进行确认。可通过运行**工具 > 消息框选项**命令来显示此对话框。 • 只有在调用多个数据文件时，才会显示 “提取质谱图”对话框。

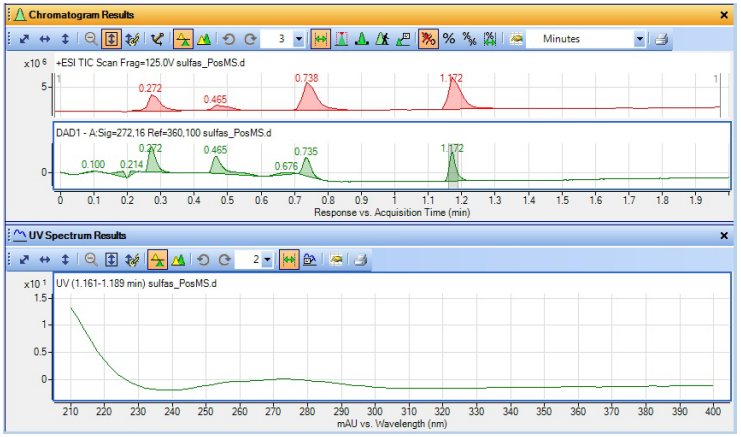


图 42 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图 （或光谱图）

任务 16. 从色谱图中提取谱图 （MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释
3 提取 **sulfas_PosMS.d** 中的某个 UV 峰光谱图。 • 删除 “数据浏览器” 中 “用户质谱图” 下的所有扫描类型。 • 对 DAD1 色谱图进行积分。 • 从第三个积分峰中提取峰质谱图 （或光谱图）。	**a** 在 “数据浏览器” 中的**用户质谱图**下，选中要删除的用户质谱图（或光谱图）。 **b** 右键单击该质谱图，然后单击**删除**。 **c** 单击**是**。 **d** 选中 DAD1 色谱图。 **e** 单击**色谱图 > 积分色谱图**。 **f** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的**峰选择**图标。 **g** 单击 DAD1 色谱图中在 0.272 分钟处的积分峰。 **h** 右键单击该峰，然后单击**提取峰质谱图**。	• 提取的峰质谱图始终放在 “UV 光谱图结果” 窗口或 “MS 质谱图结果” 窗口中，即使在 “质谱图预览” 窗口打开时也是如此。 • 如果从 UV 色谱图提取峰光谱图，峰将放在 “UV 光谱图结果” 窗口中。 • 如果在色谱图中选定了某个区域，则可以在**整个色谱图**范围内或**在选定的范围内**进行积分。

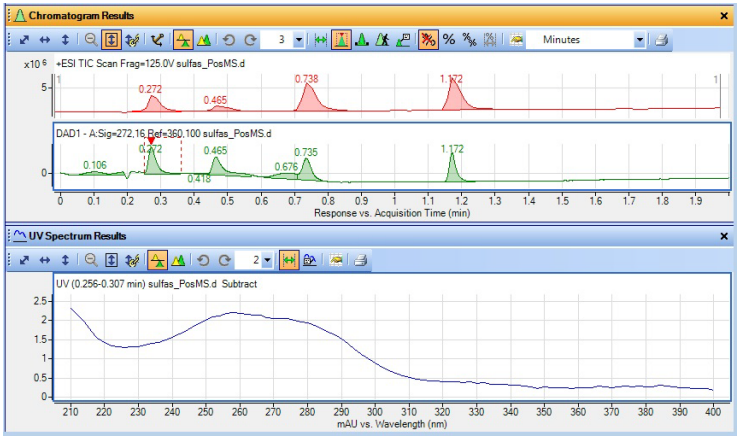


图 43 积分 DAD1 色谱图和 UV 峰光谱图

4 关闭所有三个数据文件。	**a** 单击**文件 > 全部关闭**。 **b** 在要求保存结果时，单击**否**。	

练习 2
查找和识别化合物

适用于仅 MS 数据 （LC/MS - TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 70
任务 1. 按分子特征查找化合物 （仅 LC/MS - MS） 70
任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS） 74
任务 3. 打印化合物报告 （仅 LC/MS - MS） 79
任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅 LC/MS - MS） 81
任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取（仅 LC/MS - MS） 86
适用于 MS/MS 数据 （LC/MS - Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 89
任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS） 89
任务 2. 识别化合物并生成分子式（LC/MS - MS 和 MS/MS） 92
任务 3. 打印化合物报告 (LC/MS - MS/MS) 95
任务 4. 查找化合物并检索谱库 (LC/MS - MS/MS) 97
任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （LC/MS - MS 和 MS/MS） 100

在前两组任务中，您将在复杂基质中查找并识别低浓度磺胺药，并为 TOF 和 Q-TOF 数据生成其分子式。您还可以使用 TOF 和 Q-TOF 数据对蛋白质消解物执行分子特征提取。此外，还可以对三重四极杆质谱仪数据执行这些任务。

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。

适用于仅 MS 数据（LC/MS - TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

任务 1. 按分子特征查找化合物 （仅 LC/MS - MS）

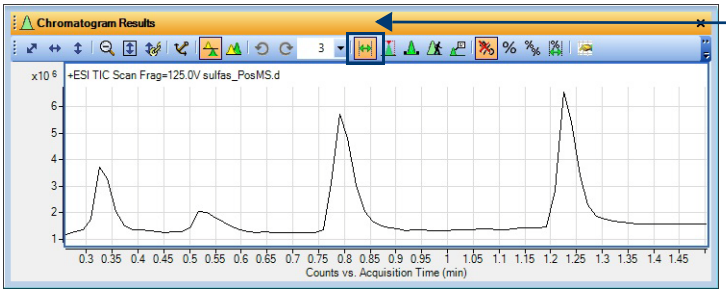
查找化合物算法可以在数据中查找化合物，并为每个化合物创建平均 MS 质谱图。此功能是用于从复杂数据中 “挖掘” 信息的一种简便方式。此算法仅用于处理包含 MS 扫描数据的数据。对于具有单位质量分离度的数据 （例如，三重四极杆质谱仪数据）不起作用。

任务 1. 查找化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosMS.d** 色谱图。 • 使用 “常规” 工作流程 • 选择 0.24 到 1.5 分钟之间的范围。	**a** 双击 **MassHunter 定性分析图标**。 **b** 选择示例数据文件目录中的 **sulfa_PosMS.d** 数据文件。清除**调用结果数据**复选框并单击**打开**。 **c** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**。“工作流程配置” 对话框将打开。 **d** 如果不希望保存对方法所做的更改，则清除**保存当前方法**复选框。 **e** 单击**调用工作流程的缺省方法**按钮。 **f** 单击**调用工作流程的缺省布局**按钮。 **g** 单击**确定**。 **h** 单击**范围选择**工具，并选择介于 0.24 和 1.5 分钟之间的区域。	• 系统将自动调用方法 Default.m。要以交互方式调用此方法，请单击**方法 > 打开**。选择 Default.m 并单击**打开**。 • 当该窗口处于活动状态时，通过使用 F1 键可以获取任何窗口、对话框或选项卡的帮助。 • 在工作流程之间切换时，“工作流程配置” 对话框将打开。 • 如果选中**保存当前方法**复选框，则方法将自动保存为当前方法名称。如果方法是 default.m，则 “保存方法” 对话框将打开。（您不能覆盖缺省方法。）

任务 1. 查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释



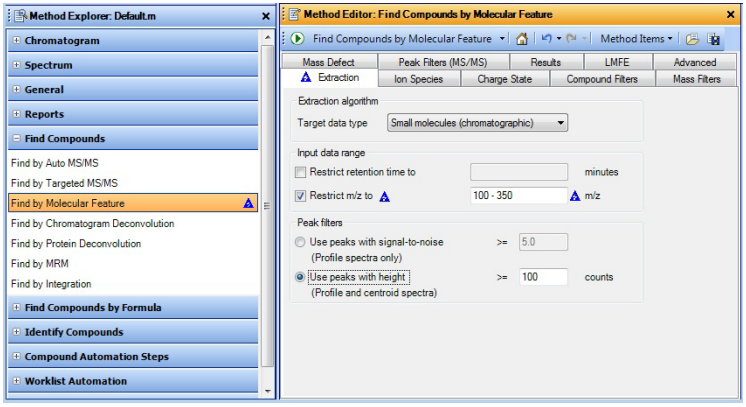
范围选择工具

图 44 在 TIC 色谱图中选择一个时间范围

2 查找色谱图中的化合物。
- 将 m/z 限制为 100-350。
- 确保您可以查看所有化合物的色谱图和质谱图。

a 在 “方法管理器”窗口中，单击 **查找化合物 > 按分子特征查找化合物**。
b 选择**小分子 （色谱）**作为**目标数据类型**。
c 选中**限制 m/z 到**复选框。
d 键入 `100 - 350`。

- 在联机帮助中了解有关**目标数据类型**的详细信息。
- 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。请参见图 44。
- 红色圆圈显示在**限制 m/z 到**框旁边，直到输入值为止。然后，它将变为蓝色三角形。在保存方法时，蓝色三角形将被删除。



只有在 “用户界面配置”对话框中选中了 “高级”复选框后，才能使用 “LMFE”和 “高级”选项卡。

只有在安装了 MassHunter BioConfirm 软件时才能使用 “LMFE”选项卡。

图 45 限制按分子特征查找化合物的质量范围

任务 1. 查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释
	e 单击**结果**选项卡。 **f** 选中**提取 MFE 质谱图**和**提取 ECC** 复选框。 **g** 选中**仅显示最大值**复选框并键入 4 作为化合物的数目。	• 如果一个或多个化合物选中，则可通过使用**查找 > 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。还可以选择“数据浏览器”窗口中的一个或多个化合物，然后单击快捷菜单中的**提取完整的结果集**命令。

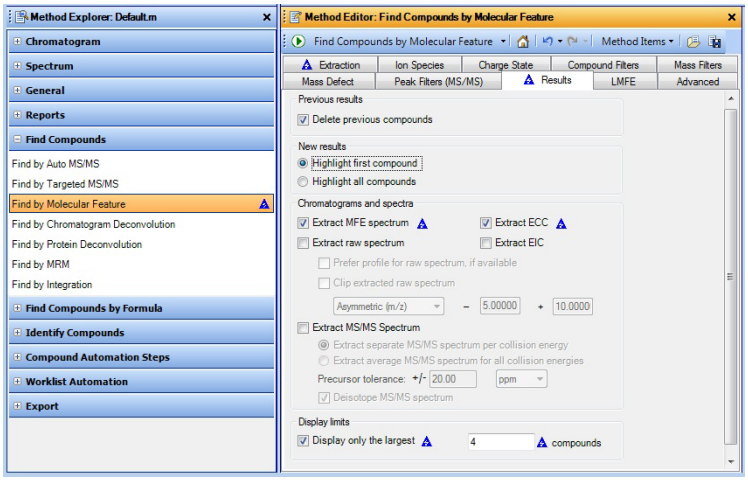


图 46 更改 “按分子特征查找” > “结果”选项卡中的值

任务 1. 查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释
	h 单击 以便对数据文件运行**按分子特征查找化合物**算法。 **i** 在 “MS 质谱图结果”窗口中，选择**最大列表窗格数**中的 **4**。 **j** 单击 “MS 质谱图结果”工具栏中的**在缩放期间对 Y 轴自动调整**图标 。 **k** 在 270 至 350 的 m/z 范围中放大。 **l** 单击色谱图结果工具栏中的 按钮。	• 在选定范围内找到 4 种主要化合物。 • 单击 “方法编辑器”工具栏中的 时，系统会使用选定范围。在**查找 > 按分子特征查找**命令中，可以单击**整个色谱图**或**在选定的范围内**。 • 单击**配置 > 色谱图显示选项**命令以更改**仅为顶部图谱加上标签**。 • 化合物列表将更改为显示不同的列。

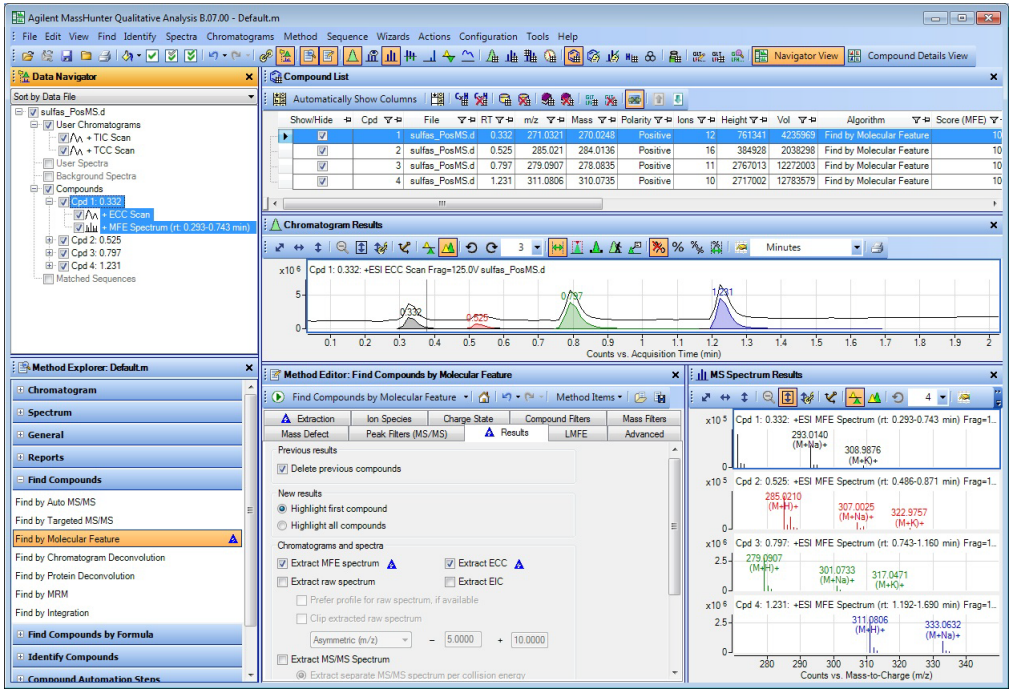


图 47 在磺胺药混合物中查找所有四种化合物

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

在此任务中，您可以生成可能的分子式并检索在“任务 1”中找到的每种化合物。

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
1 生成化合物 1-4 的分子式。 • 查看每种化合物的 MS 分子式结果。 • 查看 “化合物列表”。 • 关闭 “MS 质谱图结果” 窗口。 提示：要获取与图 49 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” 窗口中，单击**化合物**以选中所有化合物。 **d** 单击**识别 > 从化合物生成分子式**命令或 **从化合物生成分子式**图标。 **e** 如有必要，单击 “化合物识别结果” 图标，或单击**视图 > 化合物识别结果**命令。 **f** 如有必要，请单击**视图 > 化合物列表**。 **g** 在 “化合物列表” 窗口中，单击工具栏上的**自动显示列**按钮。 **h** 在 “化合物识别结果” 窗口中，单击工具栏上的**自动显示列**按钮。 **i** 单击 “化合物列表” 和 “化合物识别结果” 窗口中的 “隐藏空列” 图标。 **j** 关闭 “方法编辑器” 窗口和 “MS 质谱图结果” 窗口。	• 缺省情况下，“MS 分子式结果” 窗口随 “色谱图结果” 窗口一同显示在选项卡中。单击该窗口底部的选项卡，可在窗口之间切换。 • 按适当的 m/z 放大时，您会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。 • 可以通过单击快捷菜单中的**删除列**来删除列。

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释

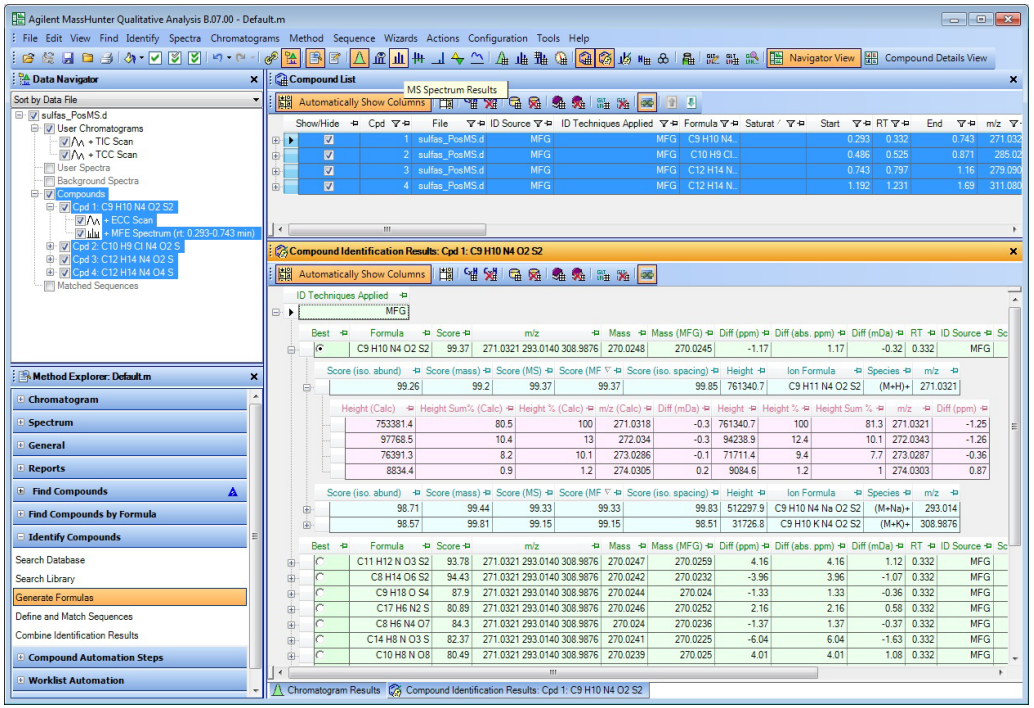


图 48 为 sulfas_PosMS.d 中的化合物 1 至 4 生成分子式结果

2 根据有关化合物 1 至 4 的分子式，执行数据库检索。

- 根据分子式执行检索。

a 在“数据浏览器”窗口中，单击**化合物**。

b 在“方法管理器”窗口中，单击**识别化合物 > 检索数据库**。

c 在**要匹配的值**下，单击**分子式**。

d 单击主菜单中的**识别 > 检索数据库以查找化合物**。

e 关闭“方法编辑器”窗口和“MS 质谱图结果”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”。
- 请注意，是否已识别出“化合物列表”中的所有四种磺胺药（请参见图 49）。
- 化合物的所有识别结果都显示在“化合物识别结果”窗口中。
- 某些识别结果也会显示在“化合物列表”窗口中。

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
3 修改可见的列。	**a** 右键单击“化合物列表”窗口，然后单击**添加 / 删除列**。 **b** 选中 CAS 值旁边的复选框，然后单击**确定**。 CAS 列是空的；软件将自动显示包含信息的任何列。 **c** 单击“化合物列表”中的“隐藏空列”图标 。	• 如果使用“删除列”命令并删除包含数据的列，并且关闭“自动显示列”功能然后又将其打开，软件将自动重新显示该列。

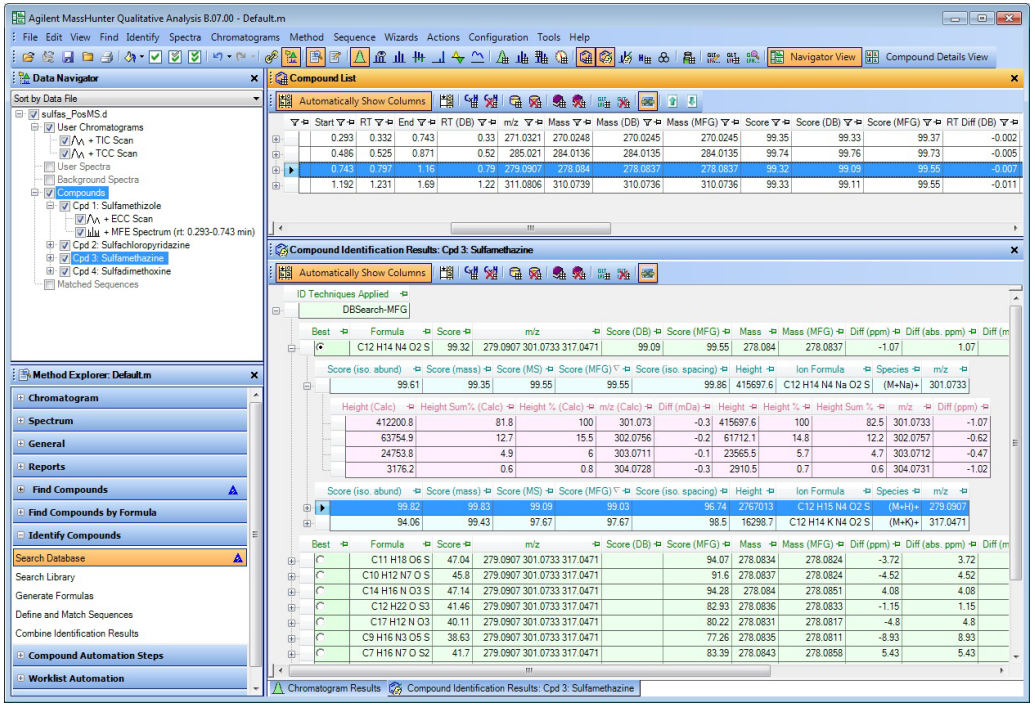


图 49 数据库检索结果和为 sulfas_PosMS.d 中的化合物 1 至 4 生成分子式结果

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
4 检查“化合物详细信息视图”中的结果。	**a** 单击主工具栏中的 Compound Details View 按钮。 **b** 关闭“化合物碎片质谱图结果”窗口。单击**视图 > 化合物碎片质谱图结果**。 **c** 关闭不包含数据的任何其他窗口。 **d** 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”**。 **e** 在“化合物列表”窗口中，在不同化合物之间切换。	• 只有分析了所有离子 MS/MS 数据后，“化合物碎片质谱图结果”窗口才包含内容。请参见第 137 页上的“分析以所有离子 MS/MS 模式采集的数据文件”。 • 在“化合物列表”窗口中的化合物之间切换时，其他窗口的内容将自动更新，以显示有关所选化合物的信息。 • 有关详细信息，请参见联机帮助。

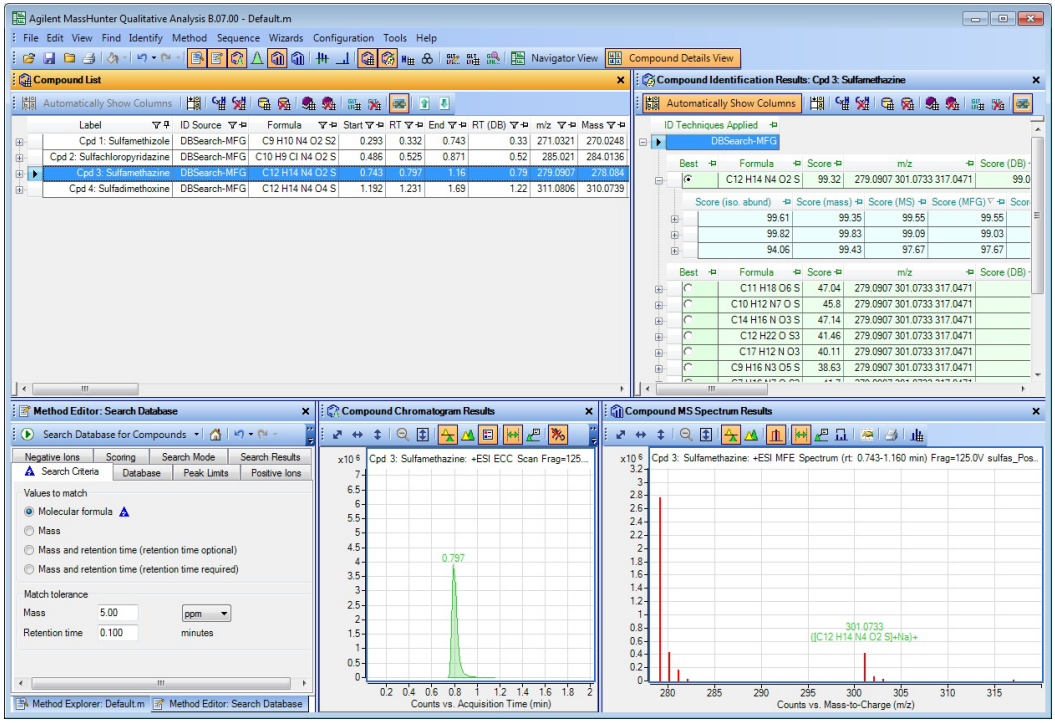
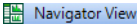


图 50 在 “化合物详细信息视图”中检查 sulfas_PosMS.d 中的化合物 1 至 4。

任务 2. 生成分子式并识别化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
5 切换回 “浏览器视图”。	• 单击主工具栏中的  按钮。	• 您可以随时在“化合物详细信息视图”和“浏览器视图”之间切换。如果同时打开了多个数据文件，可使用 “浏览器视图”。如果只打开了一个数据文件，则可使用任一视图。

任务 3. 打印化合物报告 （仅 LC/MS - MS）

您可以为在第 70 页上的 “任务 1. 按分子特征查找化合物 （仅 LC/MS - MS）”中找到且在第 74 页上的 “任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅 LC/MS - MS）”中识别的每种化合物生成一份报告。

任务 3. 打印化合物报告 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
1 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** 清除**显示 MS 质谱图**复选框。 **c** 清除**显示 MS/MS 质谱图**复选框。 **d** 清除**显示 MS/MS 峰列表**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。

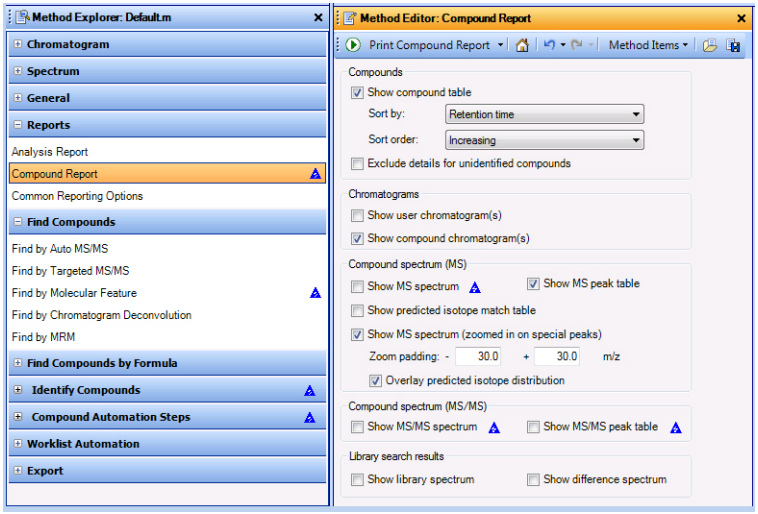
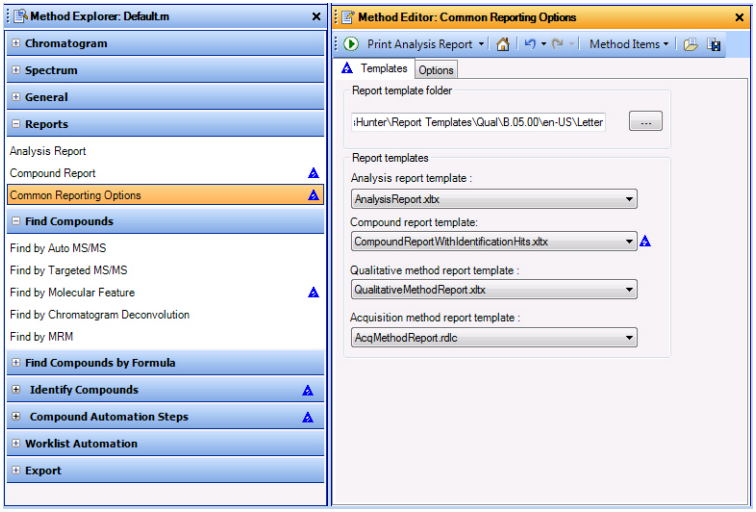


图 51 “方法编辑器” 中的 “化合物报告” 部分

任务 3. 打印化合物报告 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
2 （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.xlsx** 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。请参阅第 171 页上的 “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 52 “方法编辑器”中的 “常规报告选项”部分

3 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。
4 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**。	

任务 4.按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅 LC/MS - MS）

“查找化合物”算法可以在数据中查找化合物，并为每个化合物创建平均 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。您还可以计算样品纯度。在计算样品纯度之前，应使不同色谱图对齐。

任务 4. 按分子式查找化合物 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosMS.d** 色谱图。 • 使用 “常规”工作流程。 • 选择 0.2 到 1.5 分钟之间的范围。	**a** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 选择 **sulfas_PosMS.d** 并单击**确定**。 **c** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**。有关详细信息，请参阅第 70 页上的“打开 sulfas_PosMS.d 色谱图。”。 **d** 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 。 **e** 单击**范围选择**工具，并选择介于 0.2 和 1.5 分钟之间的区域。	• 如果切换到 “分子式确认”和 “样品纯度”工作流程，则 “化合物列表”表将自动显示样品纯度列。 • “按分子式查找”部分包括在**分子式确认和样品纯度工作流程**部分中。
2 设置参数，以在色谱图上指定的范围内运行“按分子式查找”算法。 • 启用样品纯度计算。 • 计算 TIC %、 ADC % 和 UV A% 纯度值。 • 使用最大值作为纯度值。 • 指定 0.045 分钟的延迟时间。 • 添加**相对峰高**过滤器。	**a** 在 “方法管理器”窗口中，单击**按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 选项**部分。 **b** 单击**数据库 / 谱库**作为**要确认的分子式的来源**，然后选择 default.csv。 **c** 在 “方法管理器”窗口中，单击**按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 样品纯度**部分。 **d** 选中**计算样品纯度**复选框。 **e** 选中 **TIC %**、 **ADC %** 和 **UV A%** 复选框。 **f** 单击**所有选定算法的最大值**。 **g** 在**最小可接受的纯度**框中，键入 20。	• 双击标题栏可锚定浮动的窗口。缺省情况下，在 “常规”工作流程中，“方法编辑器”窗口处于浮动状态。还可以右键单击窗口的标题，然后选择**浮动**。 • 根据以当前方法保存的值更改设置时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。 • 此数据文件包含多种磺胺药，这就是预期纯度为 20% 的原因。

任务 4. 按分子式查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释
• 按 0.045 分钟调整 MS 信号的延迟时间。	**h** 单击“方法管理器”窗口中的**按分子式查找 - 样品纯度 > 延迟时间**部分。 **i** 选中**使用延迟**复选框。 **j** 在**时间延迟 (min)** 参数中键入 `0.045`。	• 使用多个信号计算样品纯度时，软件将对来自不同信号的峰进行匹配，因此在运行算法之前，最好将信号排成一行。
• 向色谱图添加相对峰高过滤器。	**k** 单击“方法管理器”窗口中的**按分子式查找 - 色谱图 > EIC 峰过滤器**部分。 **l** 选中**相对峰高**复选框。 **m** 在**最大峰百分比**参数中键入 `5`。在缺省方法中，这是缺省值。	• 您可以限制从积分算法返回的峰。

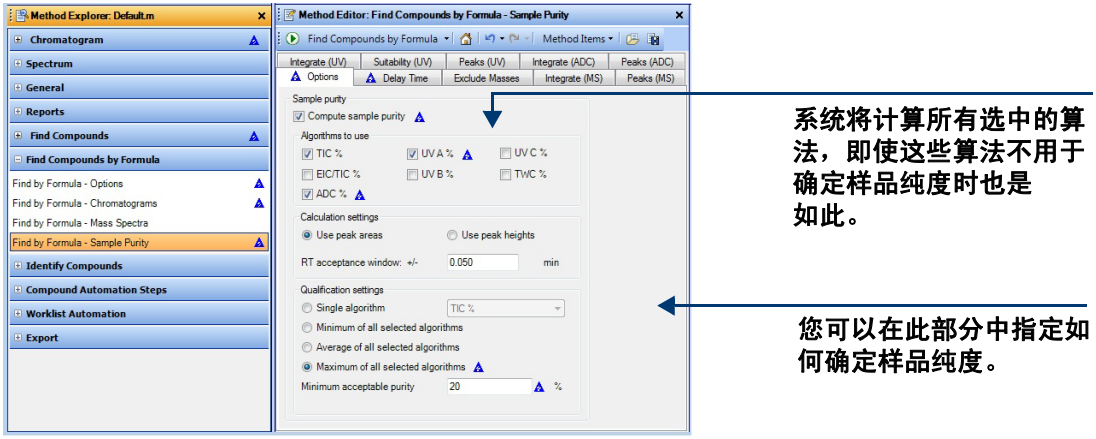


图 53 为 “按分子式查找化合物”算法设置样品纯度选项

任务 4. 按分子式查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释
3 在指定范围内运行按分子式查找算法，并检查结果。	**a** 单击**按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 选项**选项卡。 **b** 单击 以便对数据文件运行**按分子式查找化合物**算法。 **c** 在 “MS 质谱图结果” 窗口中，将 “最大列表窗格数” 更改为 “3”。 **d** 单击**视图 > 化合物列表**以打开 “化合物列表” 窗口。 **e** 在 “化合物列表” 窗口中，如果工具栏中的**自动显示列**图标未打开，则单击该图标。 **f** 单击 “化合物列表” 窗口中的 “隐藏空列” ( ) 按钮。 **g** 在 “化合物列表” 窗口中，单击 “自动显示列” 图标。 **h** 从表中删除不希望包括的列。	• “定性分析” 程序可在选定范围内找到 4 种化合物。 • 单击 “类别” 列时，将显示具有相同算法的列。它们在每个部分中按字母顺序显示。 • “化合物列表” 固定在 “定性分析” 窗口的顶部，这样可以看到更多的列。有关移动窗口的详细信息，请参见第 19 页上的 “任务 4. 更改窗口布局”。
4 显示 “样品纯度” 列。 • 如果 “自动显示列” 图标未打开，则可以手动显示 “纯度” 列。	**a** 右键单击某列，然后单击**添加 / 删除列**以打开 “化合物列” 对话框。 **b** 单击**类别**列标题，以便对可能的列进行排序。 **c** 选中**纯度值**列、**纯度结果**列、 **ADC 面积百分比**列、**TIC 面积百分比**列、**UVA 面积百分比**列，以及 **UVB 面积百分比**列。 **d** 单击**确定**按钮。	

任务 4. 按分子式查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释

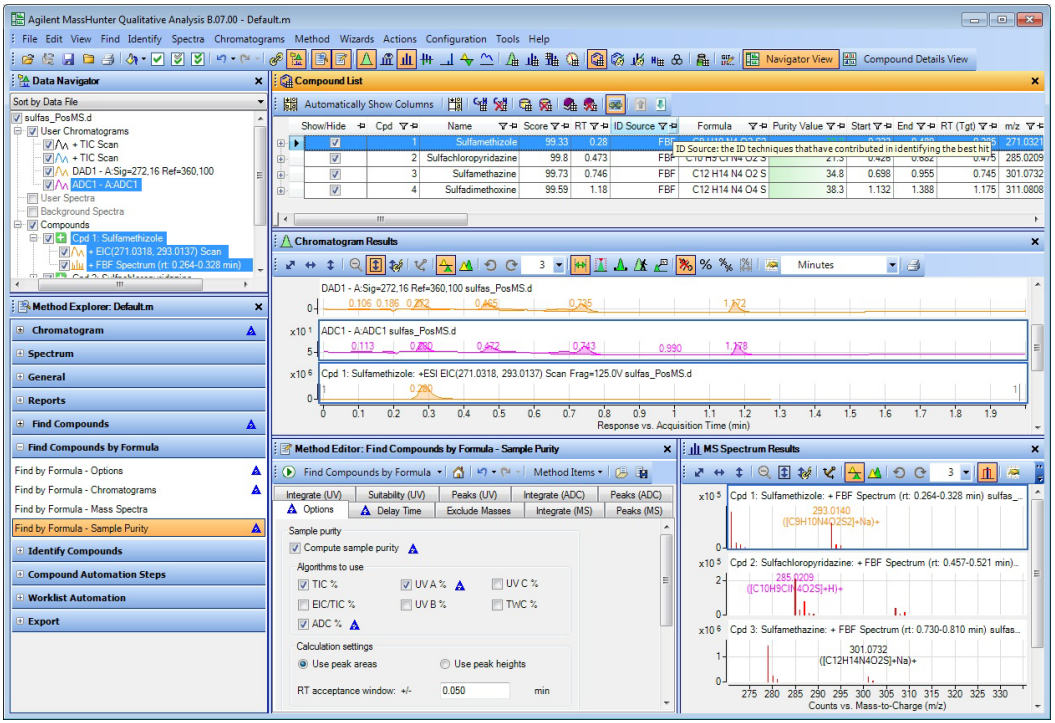


图 54 在磺胺药混合物中查找所有四种化合物

- 与 “数据浏览器” 中的 “化合物” 对应的图标指示化合物是否已通过样品纯度测试。

- “纯度值” 列采用下列颜色编码：
  - 绿色 - 通过
  - 黄色 - 未通过
  - 红色 - 无法测量

5 检查 “化合物详细信息视图” 中的结果。

a 单击主工具栏中的 Compound Details View 按钮。

b 关闭不包含数据的任何其他窗口。

c 在 “化合物列表” 窗口中，在不同化合物之间切换。

- 只有分析了所有离子 MS/MS 数据后，“化合物碎片质谱图结果” 窗口才包含内容。请参见第 137 页上的 “分析以所有离子 MS/MS 模式采集的数据文件”。

任务 4. 按分子式查找化合物 （仅 LC/MS - MS）（续）

步骤	详细说明	注释

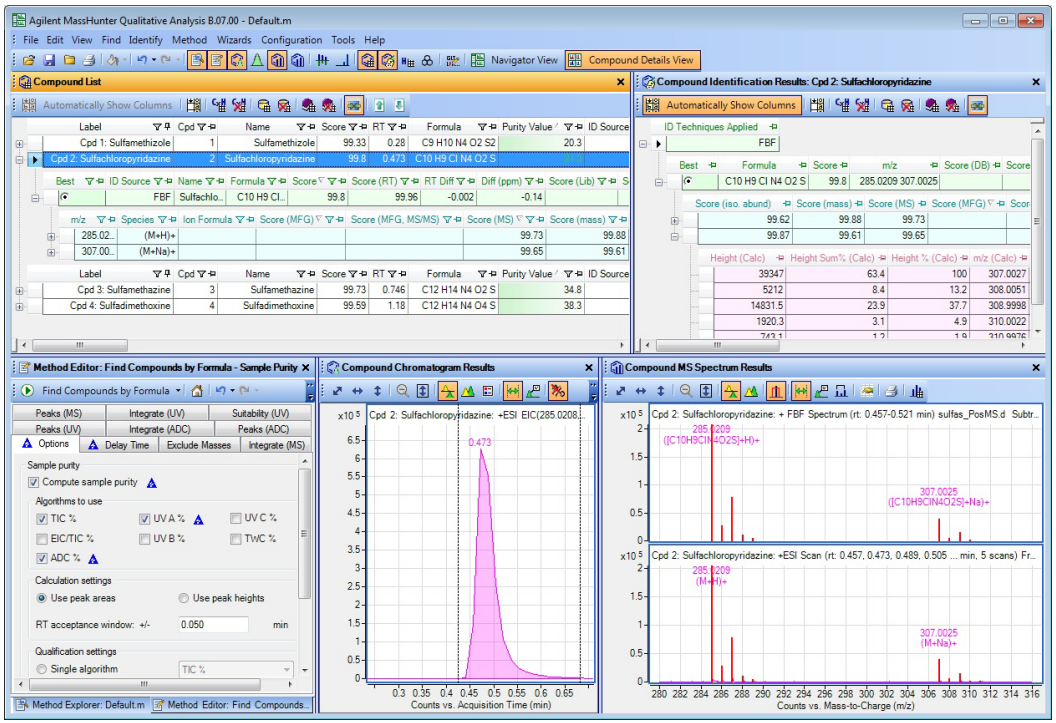


图 55 在磺胺药混合物中查找所有四种化合物

6 返回“浏览器视图”，并关闭数据文件，同时不保存结果。

a 单击主工具栏中的 Navigator View 按钮。

b 单击**文件 > 关闭数据文件**。

c 系统提示您是否要保存结果时，请单击**否**。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （仅 LC/MS - MS）

在此任务中，您可以仅使用 MS 数据对蛋白质消解物执行分子特征提取。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
1 启用肽序列编辑器功能。	**a** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**。 **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**按钮。 **d** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **e** 选中**肽序列编辑器**复选框。 **f** 单击**确定**。	• 只有在选中了**肽序列编辑器**或 **BioConfirm** 复选框后，“电荷态”选项卡中的 “肽”选项才可用。 • 您可以切换到 “常规”工作流程，将布局和可见的 “化合物”列改回缺省设置。
2 使用下列参数对数据文件 **peptide-ms-only.d** 执行分子特征提取： • 时间范围为 2.5 到 4 分钟。 • 指定同位素模型是肽。 • 过滤，以便仅显示丰度最大的 20 种化合物。 • 更改窗口布局，以便与图 56 的布局 （下一页）匹配。	**a** 打开 **peptide-ms-only.d** 数据文件。 **b** 在 “方法管理器”窗口中，单击**查找化合物 > 按分子特征查找**以在 “方法管理器”窗口中显示参数。 **c** 在**提取**选项卡中，选中**限制保留时间到**复选框。 **d** 键入 `2.5 - 4`。 **e** 清除**限制 m/z 到**复选框 （如有必要）。 **f** 在**电荷态**选项卡上，选择**同位素模型**框中的**肽**列表。 **g** 在**化合物过滤器**选项卡上，选中**数量上限**复选框并为化合物的数目键入 `20`。 **h** 在**结果**选项卡上，选中**提取 MFE 质谱图**和**提取 ECC** 复选框。 **i** 单击  以便对数据文件运行**按分子特征查找化合物**算法。	• **数量上限**过滤器不会限制提取的特征数，而只是限制在 “定性分析”中显示的化合物数目。 • 您可以使用 “定性分析分子特征”算法来提取特征。然后，可以使用 Agilent Mass Profiler Professional 软件比较多组不同的化合物。 • 可以使用**文件 > 导出 > 导出 CEF 选项**命令将化合物导出到 CEF 文件。 • 如果您要使用 “匹配序列”算法，也可以选中**提取 MS/MS** 复选框。如果未选中，则列不会显示在 “化合物列表”窗口和 “化合物识别结果”窗口中。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
3 查找 *m/z* 570.7362 离子的化合物质谱图，并确定电荷态、质量和离子种类。	**a** 在 “MS 质谱图结果”窗口中，滚动查找包含 *m/z* 570.7362 离子的质谱图。 **b** 查找电荷态。 **c** 查找离子种类。 **d** 在 “化合物列表”窗口中查找此化合物。 **e** 查找质量。	• 化合物 3 具有包含此离子且电荷态为 +2 的质谱图。 • 质量为 1139.4578。离子种类为 (M+2H)+2。您可以在 “MS 质谱图结果”窗口以及 “质谱图峰列表”窗口中标有**离子种类**的列中看到离子种类。

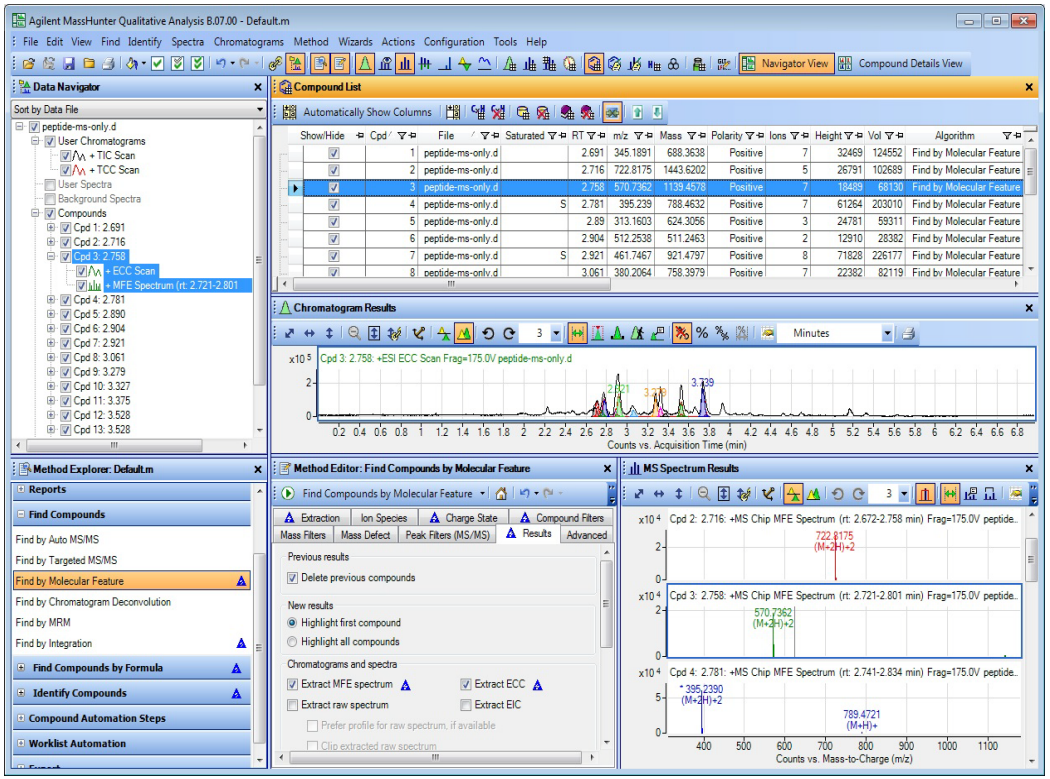
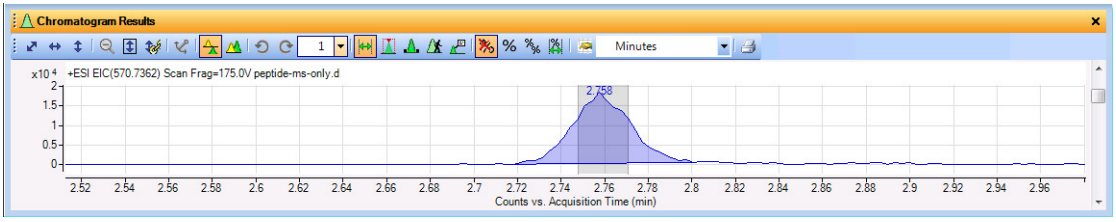
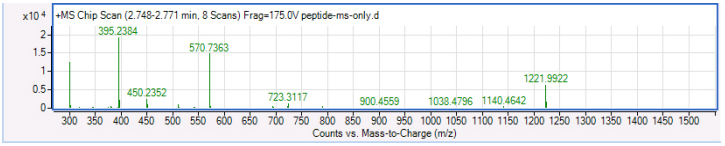


图 56 通过定性分析按分子特征查找化合物

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （仅 LC/MS - MS）

步骤	详细说明	注释
4 提取此肽的积分 EIC。 • 将 570.7362 用作 m/z 值。	**a** 右键单击数据文件的 TIC，然后单击**提取色谱图**。 **b** 在**类型**列表中，选择 **EIC**。 **c** 选中**提取时积分**复选框。 **d** 键入 570.7362 作为 *m/z* 值。 **e** 单击**高级选**项卡。 **f** 选择**对称 (ppm)**，然后单击**确定**。	应为数据文件设置适当的单一 m/z 扩展值，这点很重要。对于此 Q-TOF 数据文件，提取范围为 +/- 100 ppm 比较合适。
5 为 EIC 中的第一个积分峰提取平均质谱图。 • 放大为与第一个积分峰对应的内容。 • 选择一个从中途点到最高峰的范围。	**a** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 “列表模式” 图标。 **b** 右键单击 EIC，并拖动光标以放大 2.76 分钟处的峰周围的区域。 **c** 确保已选择**范围选择**工具，并选择一个跨越中点处的峰的范围。	
		
	d 在峰的着色区域内双击，以提取平均质谱图。	
		
6 关闭数据文件。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 要求保存结果时，单击**否**。	

适用于 MS/MS 数据（LC/MS - Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

查找化合物算法可以在 MS/MS 数据中识别化合物，并为每个化合物创建平均 MS 和 MS/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。

任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosAutoMSMS.d** 数据文件的 TIC，并选择介于 0.2 和 1.3 分钟之间的范围。 • 使用 “常规” 工作流程。 • 选中介于 0.2 和 1.3 分钟之间的范围。	**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** 单击示例数据文件目录中的 **sulfas_PosAutoMSMS.d** 数据文件，然后单击**打开**。 **c** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。 **d** 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。 **e** 单击**确定**按钮。 **f** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **g** 清除 **GC** 复选框。 **h** 单击**确定**。 **i** 如有必要，单击 “色谱图结果” 工具栏中的**范围选择**工具。 **j** 如有必要，单击 “色谱图结果” 工具栏中的**在缩放期间对 Y 轴自动调整**工具。 **k** 单击并拖动以选择 0.2 到 1.3 分钟的范围。	• 系统将自动打开方法 default.m。要打开其他方法，请单击**方法 > 打开**，选择该方法，并单击**打开**。 • 打开此数据文件时，方法管理器的 “调整延迟时间” 选项卡中会自动显示一个蓝色三角形。此数据文件还包含 DAD 和 ADC 数据。如果您不想输入延迟时间，则可以忽略这些蓝色三角形。 • 某些查找化合物算法仅适用于 GC/MS 数据文件。如果清除 “GC” 复选框，则不会显示这些算法。

任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释

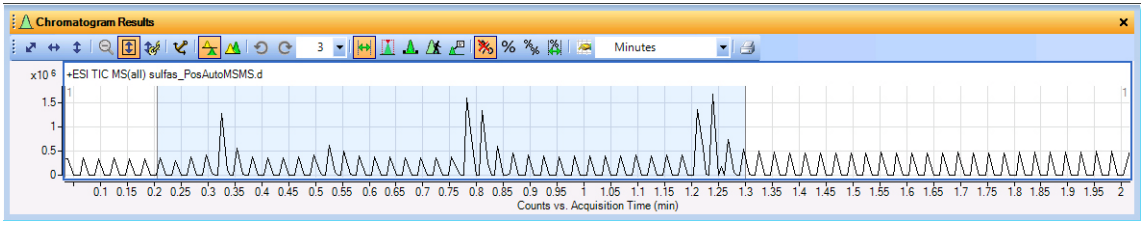


图 57 sulfas_PosAutoMSMS.d 数据文件的 TIC 色谱图的缩放范围

2 查找色谱图中介于 0.2 到 1.3 分钟范围内的化合物。

- 输入正 MS/MS TIC 阈值 100000。
- 排除质量 121.0504 和 922.0097。

a 在方法管理器中，单击**查找化合物 > 按自动 MS/MS 查找**。

b 在 “正在处理”选项卡中的**正 MS/MS TIC 阈值**中，键入 100000。

c 单击**排除的质量**选项卡。

d 单击**从所有新色谱图中排除质量（或 m/z 范围）**。

e 键入 121.0504、 922.0097

f 选择**对称 (ppm)**。

g 选择 **20**。

- 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。请参见图 57。
- 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。

注意：更改 “排除质量”选项卡时，方法管理器中的 “色谱图”、“按分子式查找化合物”和 “化合物自动处理步骤”部分中也会显示蓝色三角形。在方法的其他部分中也使用这些相同的值。

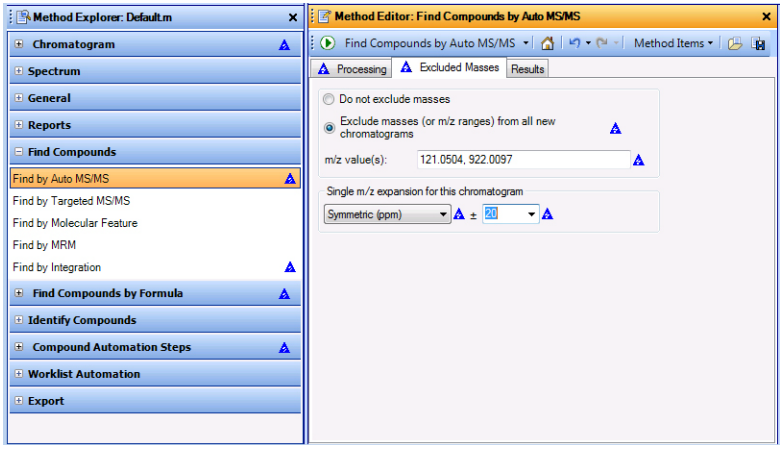


图 58 “按自动 MS/MS 查找化合物”的 “排除的质量”选项卡

任务 1. 查找化合物 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
• 选择提取 EIC、 MS 质谱图和 MS/MS 质谱图。	**h** 单击**结果**选项卡。 **i** 选中**提取 EIC**、**提取 MS** 和**提取 MS/MS** 复选框。 **j** 清除**提取 ECC** 复选框。 **k** 单击  以便对数据文件运行**按自动 MS/MS 查找化合物**算法。	• 您也可以单击**查找 > 按自动 MS/MS 查找化合物 > 在选定的范围内**。 • 在下列条件下，“定性分析”程序会在选定范围内找到 4 种化合物。 • 在下一个任务中，您可以识别哪些化合物为磺胺药。
3 仅显示化合物 4 的两个质谱图。请参见图 59。	**a** 仅选中 “化合物 4”。 **b** 单击主工具栏中的**仅显示选中的项目**工具。 **c** 展开 “化合物 4”，以查看色谱图和两个质谱图。单击 “数据浏览器”窗口中化合物旁边的加号可查看色谱图和质谱图的标签。	• 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，系统会为每种化合物提取前级离子和产物质谱图。菱形表示前级离子。您可以在 “MS 和 MS/MS 质谱图显示选项”对话框中更改用于 MS/MS 前级离子符号的颜色。

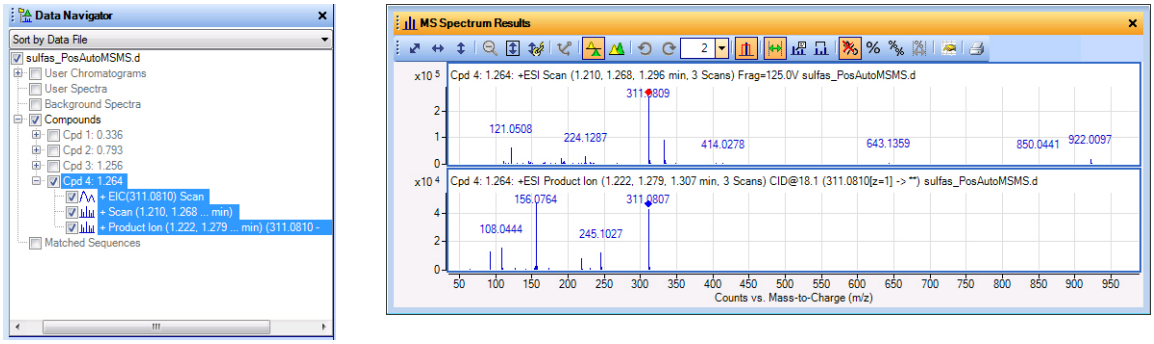


图 59 显示化合物 4 的 MS 和 MS/MS 质谱图的 “数据浏览器”窗口和 “MS 质谱图结果”窗口

任务 2. 识别化合物并生成分子式 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

在此任务中，您可以识别在 “任务 1”中找到的化合物并为之生成分子式。

任务 2. 识别化合物并生成分子式 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 检索数据库，根据质量找到化合物 1 至 4。请参见第 93 页上的图 60。	**a** 在 “数据浏览器”窗口中选中所有化合物。 **b** 在方法管理器中，单击**识别化合物 > 检索数据库**。 **c** 在 “方法编辑器”窗口的 “检索标准”选项卡中，单击**质量**。 **d** 单击**数据库**选项卡。 **e** 验证**数据库路径**是 **default.csv**。 **f** 单击主菜单中的**识别 > 检索数据库以查找化合物**。相反，您可以单击**检索数据库以查找化合物**图标 以运行该算法。 **g** 如果没有显示化合物列表，请单击**视图 > 化合物列表**。 **h** 如果没有显示 “化合物识别结果”窗口，请单击**视图 > 化合物识别结果**。 **i** 选中化合物列表中化合物 1 至 3 的**显示 / 隐藏**复选框。化合物 1 至 3 已在最后一个峰中隐藏。也可以单击主工具栏中的**显示所有高亮显示的项目**工具。	• 请注意，“化合物列表”中已识别出三种磺胺药 （请参见第 94 页上的图 61）。 • 请注意，未在运行数据库检索算法之后找到与化合物 3 对应的化合物名称。

任务 2. 识别化合物并生成分子式 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释

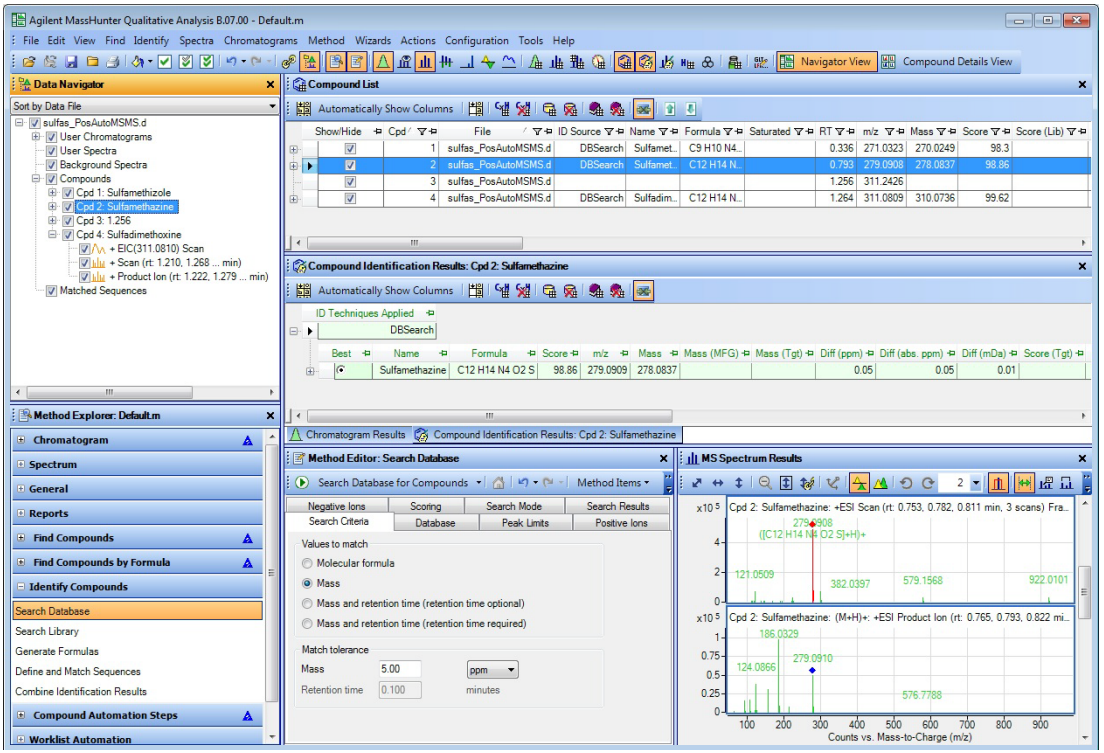
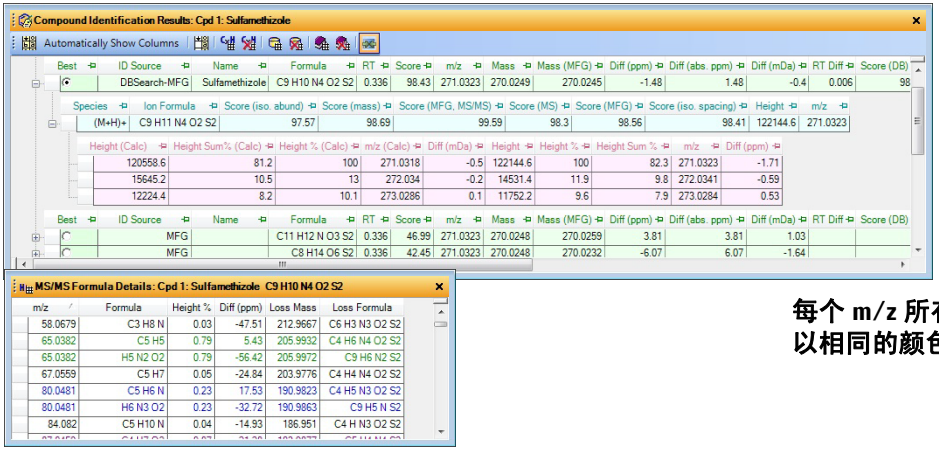


图 60 通过检索数据库识别的 sulfas_PosAutoMSMS.d 数据文件中的化合物

任务 2. 识别化合物并生成分子式 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
2 生成化合物 1 至 4 的分子式。 • 查看 “化合物列表”。 • 查看 “化合物识别结果” 列表。 • 关闭 “MS 质谱图结果” 窗口。 提示：要获取与图 61 相同的结果，请确保您已为同位素模型选择了**常见有机分子**。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，单击**识别化合物 > 生成分子式**。 **b** 单击**电荷态**选项卡，并选择**常见有机分子**。 **c** 选中所有四种化合物。 **d** 单击**从化合物生成分子式**工具( ) 以运行算法或单击**识别 > 从化合物生成分子式**命令。 **e** 在 “数据浏览器” 窗口中，选中您要查看的化合物。 **f** 使用 “化合物识别结果” 窗口中的滚动条查看 “生成分子式” 结果 (MFG)。表的第二级显示多个分数列。“ID 源” 列显示已通过 “数据库检索” (DB) 算法和 “生成分子式” 算法 (MFG) 找到了结果。	• 缺省情况下，“化合物识别结果” 窗口随 “色谱图结果” 窗口一同显示在选项卡中。单击该窗口底部的选项卡，可在窗口之间切换。 • 按适当的 m/z 放大时，您会在质谱图图谱上看到预测的同位素丰度比。 • 请注意，已针对所有化合物找到了一个或多个分子式。 • 单击 “隐藏空列” 图标可自动隐藏空列。还可以使用 “删除列” 快捷命令。 • 请注意，检索数据库后得到的分子式与 “生成分子式” 算法确定的分子式相同。 • 单击**配置 > 化合物标签配置**，可以更改化合物标签。



每个 m/z 所有可能的分子式将以相同的颜色显示。

图 61 化合物 1 的 “化合物识别结果” 窗口和 “MS/MS 详细信息” 窗口

任务 3. 打印化合物报告 (LC/MS - MS/MS)

在此任务中，您可以为在 “任务 1” 中找到且在 “任务 2” 中识别的每种化合物生成一个报告。

任务 3. 打印化合物报告 (LC/MS - MS/MS)

步骤	详细说明	注释
1 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 （如有必要）。 • 打开报告中的 MS/MS 选项。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，单击**报告 > 化合物报告**。 **b** 清除**显示 MS 质谱图 （在特定峰上放大）**复选框 （如有必要）。 **c** 选中**显示 MS/MS 质谱图**复选框和**显示 MS/MS 峰表**复选框。	• 报告中仅包括在此选项卡中选中的部分。 • 要更改用于打印报告的模板，请单击 “方法管理器” 窗口中的**报告 > 化合物报告选项**行。选择其他可用于报告的模板。

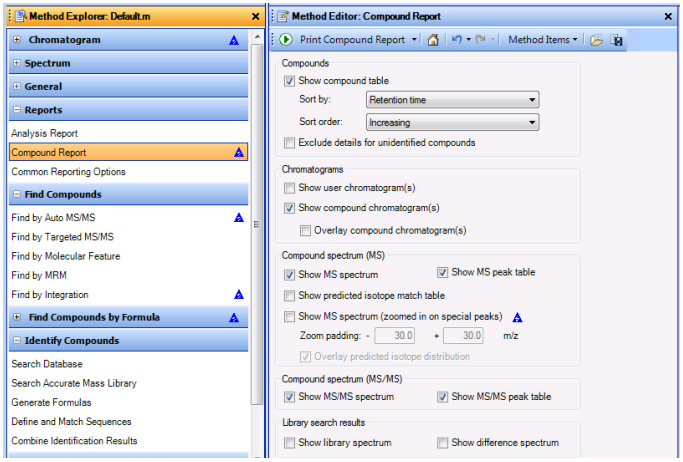
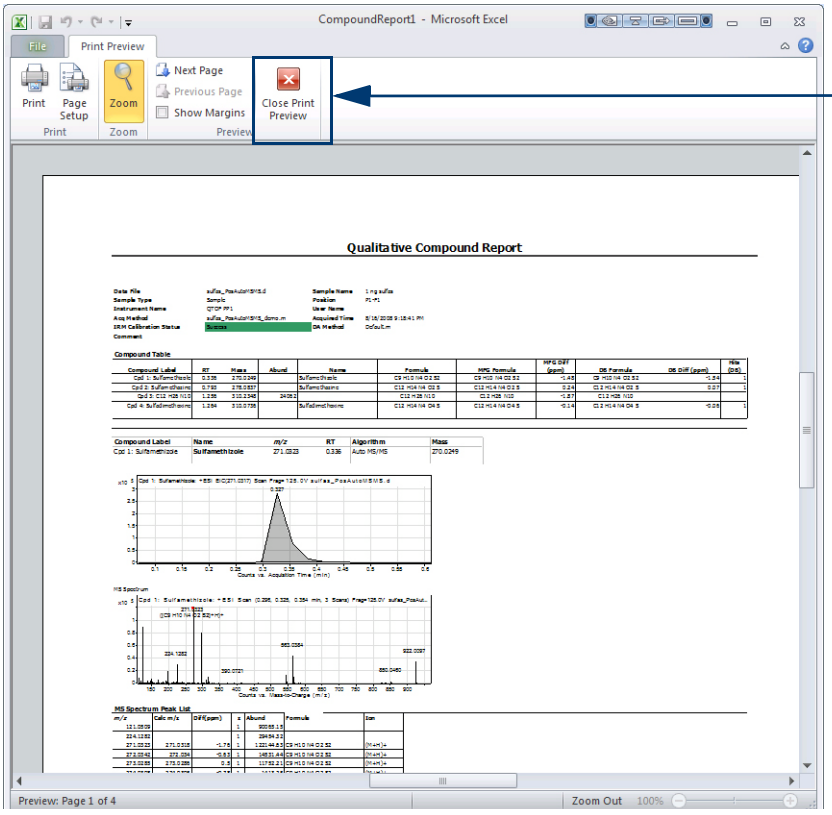


图 62 “方法编辑器” 中的 “化合物报告” 窗口

2 打印该报告。 • 预览该报告。	**a** 单击**打印化合物报告**图标 以打印该报告。 **b** 在 “打印化合物报告” 对话框中，单击**所有结果**按钮。 **c** 选中**打印报告**。 **d** 选择打印机。 **e** 选中**打印预览**。 **f** 单击**确定**。	• 可以在选中**将报告另存为 PDF 文件**复选框时创建 PDF 文件。只有在安装 Excel 后安装了 Microsoft Excel PDF 加载项的情况下，此选项才起作用。

任务 3. 打印化合物报告 (LC/MS - MS/MS)

步骤	详细说明	注释



此按钮将关闭“打印预览”窗口，同时不会向打印机发送报告。

图 63 化合物报告的打印预览

3 关闭“打印预览”窗口。

a 单击工具栏中的**关闭打印预览**。

- 如果要打印报告，请单击“打印”按钮。该报告将在步骤 2 中在“打印化合物报告”对话框中选定的打印机上进行打印。

4 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**。

任务 4. 查找化合物并检索谱库 (LC/MS - MS/MS)

“按目标 MS/MS 查找化合物”算法可识别 MS/MS 数据中的化合物，并且可为每种化合物提取 MS 和 MS/MS 质谱图。如果使用来自多个碰撞能量的 MS/MS 质谱图，则您可以提取所有碰撞能量的平均 MS/MS 质谱图，也可以提取每个碰撞能量的单独 MS/MS 质谱图。

“检索精确质量谱库”算法可检索 “产物离子”质谱图的谱库文件 (CDB)。只能检索棒状质谱图，因此，任何轮廓图都需要首先转换为棒状质谱图。

任务 4. 查找化合物并检索精确质量谱库 (LC/MS - MS/MS)

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** 数据文件的 TIC。 • 使用 “常规”工作流程。	**a** 如果没有打开程序，请双击 **MassHunter 定性分析**图标。单击“打开数据文件”对话框中的**取消**。 **b** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。 **c** 单击**确定**。 **d** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **e** 单击 **sulfas_PosTargetedMSMS.d**，然后单击**打开**。 **f** 如有必要，单击“色谱图结果”工具栏中的**范围选择**图标。 **g** 如有必要，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。	• 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。 • 要打开其他方法，请单击**方法 > 打开**，选择该方法，并单击**打开**。 • 方法管理器的 “调整延迟时间”选项卡中会自动显示一个蓝色三角形。此数据文件还包含 DAD 和 ADC 数据。如果您不想输入延迟时间，则可以忽略这些蓝色三角形。

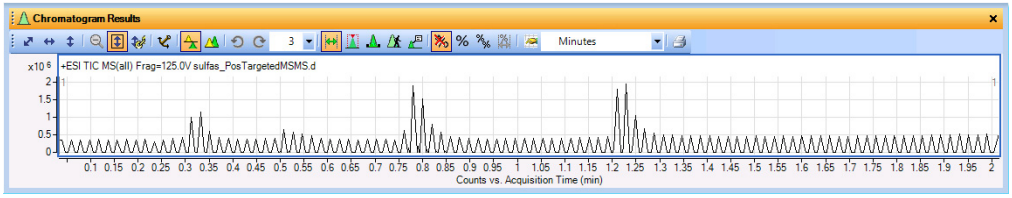


图 64 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的 TIC 色谱图

任务 4. 查找化合物并检索精确质量谱库 (LC/MS - MS/MS)

步骤	详细说明	注释
2 使用“目标 MS/MS”算法查找化合物。 • 选择提取 MS/MS 色谱图和 MS/MS 质谱图。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**查找化合物 > 按目标 MS/MS 查找**。 **b** 单击**结果**选项卡。 **c** 选中**提取 MS/MS 色谱图**和**提取 MS/MS 质谱图**复选框。 **d** 单击**查找 > 按目标 MS/MS 查找化合物**。	• 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。 • “定性分析”程序在这些条件下将找到 4 种化合物。
3 使用“检索精确质量谱库”算法检索每种化合物。 • 选择 Sulfas_AM_PCDL.cdb 谱库。 • 如果此谱库不可用，则安装“个人化合物数据库和谱库” (PCDL) 程序。 • 将最小匹配分数降低到 50。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击**识别化合物 > 检索谱库**。 **b** 单击**添加谱库**按钮。 **c** 选择 **Sulfas_AM_PCDL.cdb**。 **d** 单击**打开**按钮。 **e** 键入 20 作为**分数 （正向）**。 **f** 检查该选项卡中的其他参数。 **g** 检查 “检索标准”选项卡上的参数。 **h** 在“数据浏览器”窗口中选中所有化合物。 **i** 单击**识别 > 检索谱库以查找化合物**。 **j** 如果未显示，请单击**视图 > 化合物列表**。 **k** 如果未显示，请单击**视图 > 化合物识别结果**。	• 如果选定的谱库具有 *CDB* 扩展名，则“检索精确质量谱库”算法会在您检索谱库时运行。如果选定的谱库具有 *L* 扩展名，则“检索单位质量谱库”算法会在您检索谱库时运行。 • 您也可以右键单击 “数据浏览器”窗口中的“化合物”行，然后单击**检索谱库以查找化合物**。 • 您可以使用“检索标准”选项卡过滤按**电离模式**、**仪器类型**和**碰撞能量**检索的谱库条目。 • 如果可用，这些结构将自动显示在 “MS 质谱图结果”窗口中。

任务 4. 查找化合物并检索精确质量谱库 (LC/MS - MS/MS)

步骤	详细说明	注释

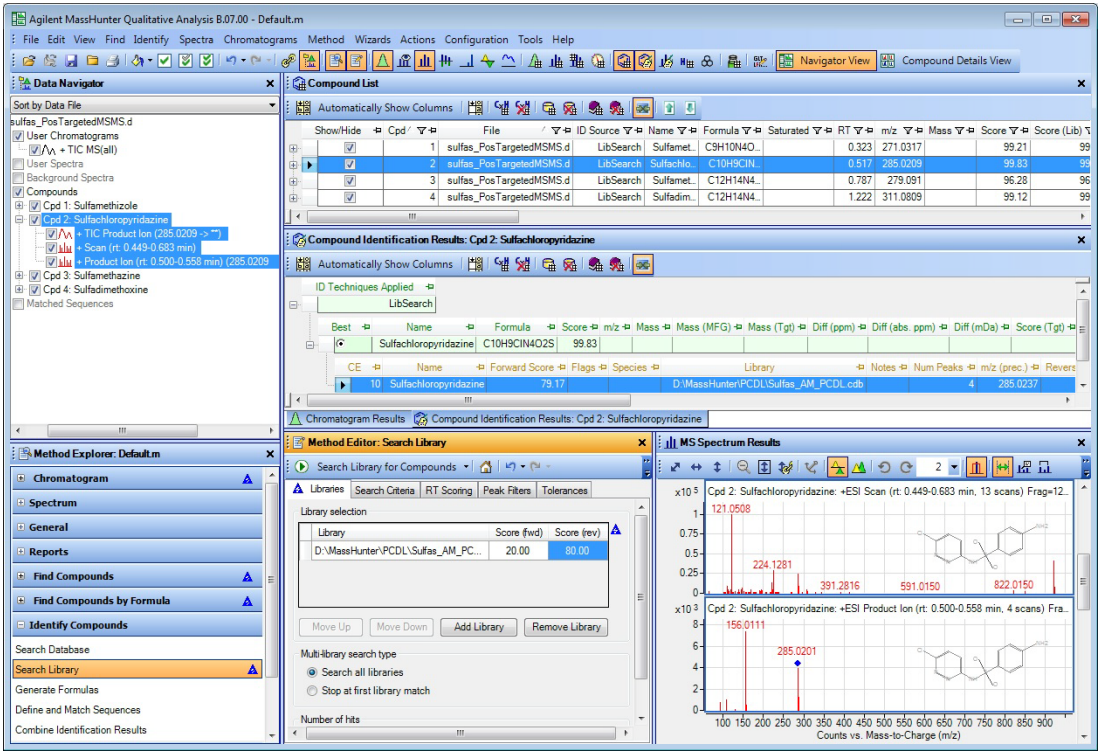


图 65 运行 “检索精确质量谱库”算法之后得到的结果。

4 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**。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

在此任务中，您可以对在 “自动 MS/MS” 模式下在 Q-TOF 上获得的蛋白质消解物数据执行分子特征提取。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 使用下列参数在数据文件 **peptide-auto.d** 中执行分子特征提取： • 确保布局返回到 “缺省布局”。 • 时间范围为 2.5 到 4 分钟。 • 将同位素模型设置为肽。 • 过滤，以便仅显示丰度最大的 20 种化合物。 • 更改窗口布局，以便与图 66 的布局 （下一页）匹配。	**a** 打开 **peptide-auto.d** 数据文件。 **b** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。 **c** 单击**确定**。 **d** 单击方法管理器中的**查找化合物 > 按分子特征查找**，以便在 “方法编辑器” 窗口中显示相应的参数。 **e** 在**提取**选项卡中，选择**小分子 （色谱）**作为 “目标数据类型”。 **f** 选中**限制保留时间到**复选框。然后键入 2.5 - 4。 **g** 在**电荷态**选项卡上，选择**肽**作为**同位素模型**。 **h** 在**化合物过滤器**选项卡上，选中**数量上限**复选框并为化合物的数目键入 20。 **i** 在 “结果” 选项卡上，选中**提取 MFE 质谱图**和**提取 ECC** 复选框。 **j** 单击  以便对数据文件运行**按分子特征查找化合物**算法。 **k** 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 “列表模式” 工具。 **l** 如有必要，请选择 “色谱图结果” 工具栏的**最大列表窗格数**中的 **1**。	• 要使布局返回缺省布局，请单击**配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局**。 • **数量上限**过滤器不会限制提取的特征数，而只是限制在 “定性分析” 中显示的化合物数目。 • 如果 “肽” 不是**同位素模型**的选项之一，则可通过选中 “用户界面配置” 对话框中的**肽序列编辑器**复选框启用此功能。单击**配置 > 用户界面配置**以显示此对话框。要显示 “按分子特征查找” 部分的 “高级” 选项卡，请选中**高级**复选框。要显示 “LMFE” 选项卡，请选中 **BioConfirm** 复选框。 • 您可以使用 “分子特征” 算法来提取特征。然后，您可以使用 Agilent MassHunter Profiler 软件或 GeneSpring MS 软件对通过不同的提取操作获得的数据集进行比较。
2 查找 *m/z* 625.31585 离子的化合物质谱图，并确定电荷态。	**a** 在 “MS 质谱图结果” 窗口中，滚动查找包含 *m/z* 625.3166 离子的质谱图。 **b** 查找电荷态。	• 化合物 7 具有包含此离子且电荷态为 +1 的质谱图。

任务 5. 对蛋白质消解物执行分子特征提取 （LC/MS - MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释

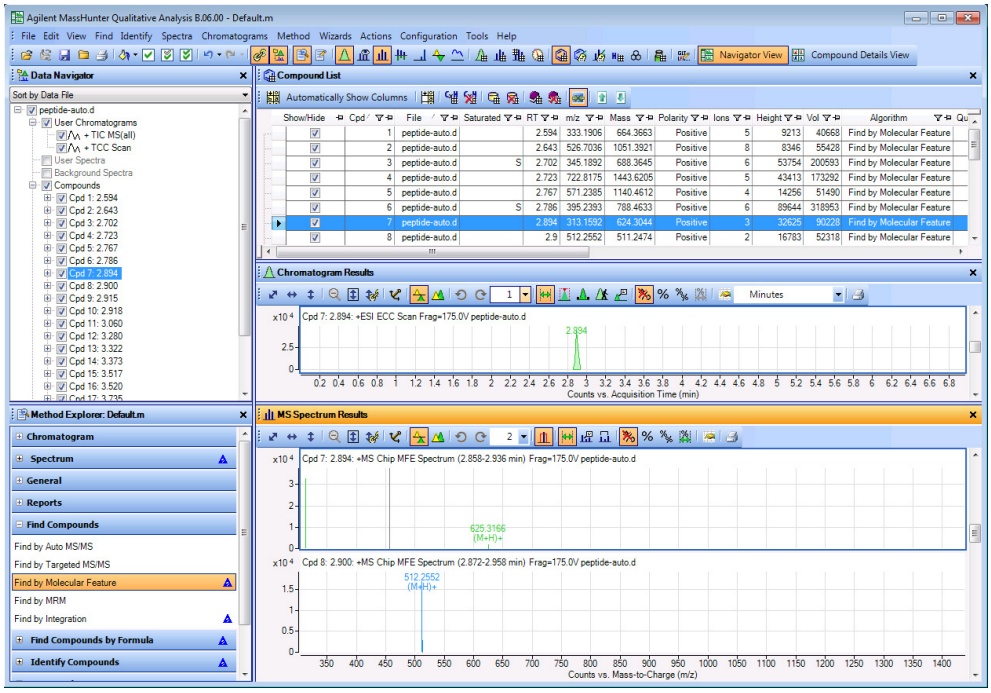


图 66 使用自动 MS/MS 数据按分子特征查找蛋白质消解物中的化合物

3 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** 在要求保存结果时，单击**否**。	

练习 3
使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法 104
任务 2. 设置并运行可使用色谱峰识别工作流程进行自动分析的方法 110
任务 3. 设置并运行可使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动识别化合物的方法 116
任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法 121

在这些任务中，您将学习如何设置和运行定性分析方法。还将学习如何对方法进行编辑，以自动进行分析和 / 或化合物识别。然后将在打开数据文件时使用自动化方法执行操作。此外，还将学习如何创建一个方法，以使用工作单执行自动化操作。

您将学习如何仅使用定性分析参数或同时使用采集和定性分析参数来创建工作单方法。

所有的这些任务都适用于来自 Q-TOF 或三重四极杆质谱仪的 MS/MS 数据，但演示中仅使用了 MS 数据文件 (Q-TOF)。

对于这些示例，可以使用不同的工作流程。您可以先浏览这些不同的工作流程，然后再确定最适合您的任务的那一种。有关详细信息，请参阅第 166 页上的“工作流程”。

“常规”工作流程支持 GC/MS 和 LC/MS 数据。“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程支持 GC/Q-TOF 数据。其他工作流程仅支持 LC/MS 数据。

BioConfirm 工作流程在联机帮助和《BioConfirm 快速入门指南》和《BioConfirm 入门指南》中进行了介绍。

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. 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 1. 设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosMS.d** 数据文件。 • 确保打开数据文件时程序不会运行任何文件操作。 • 确保方法为 Default.m。 • 确保窗口布局为缺省布局。	**a** 在桌面上双击**定性分析**图标。 **b** 在“打开数据文件”对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**， **c** 如有必要，清除**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **d** 如有必要，清除**调用结果数据**复选框。 **e** 单击**打开**。 **f** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。 **g** 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。 **h** 单击**确定**。 **i** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **j** 选中所有复选框，使所有选项可用。 **k** 单击**确定**按钮。	• 将自动调用常规工作流程的缺省布局。如果要恢复为此缺省布局，请单击**视图 > 窗口布局 > 恢复缺省布局**。此命令将始终恢复与常规工作流程一起使用的布局。 • 要调用方法，请执行下列操作： ◦ 单击**方法 > 打开**。 ◦ 选择方法 ◦ 单击**打开**。 • 您可以在上一个练习中发现，在每次对方法执行更改之后，都将在更改的旁边以及已更改部分旁边的方法管理器中显示一个蓝色的三角形。
2 设置方法以提取 TIC 色谱图。 • 针对 MS 数据定义一个 TIC 色谱图。 • 关闭周期循环加和，因为这是一个仅 MS 数据文件。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**色谱图 > 定义色谱图**。 **b** 删除 **BPC** 色谱图。 **c** 选择 **TIC** 作为**类型**。 **d** 确保 MS 级别为 **MS**。 **e** 清除**循环加和**复选框。 **f** 单击**添加**。	
3 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)**。 **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”。

任务 1. 设置和运行定性分析方法

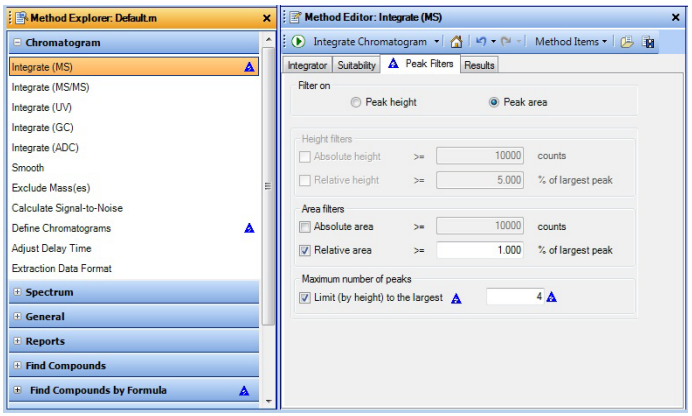
步骤	详细说明	注释
		**您可以单击 “保存方法” 图标以保存当前方法。**

图 67 “色谱图” > “积分 (MS)” > “峰过滤器”选项卡

4 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。	
5 将方法保存为 *iii*exercise1，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 **iiiexercise1**。 **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。
6 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)**。 **b** 单击**峰质谱图提取 (MS)** 选项卡。 **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更改，则会添加一个蓝色三角形，表示当前方法与计算机上保存的方法不同。

任务 1. 设置和运行定性分析方法

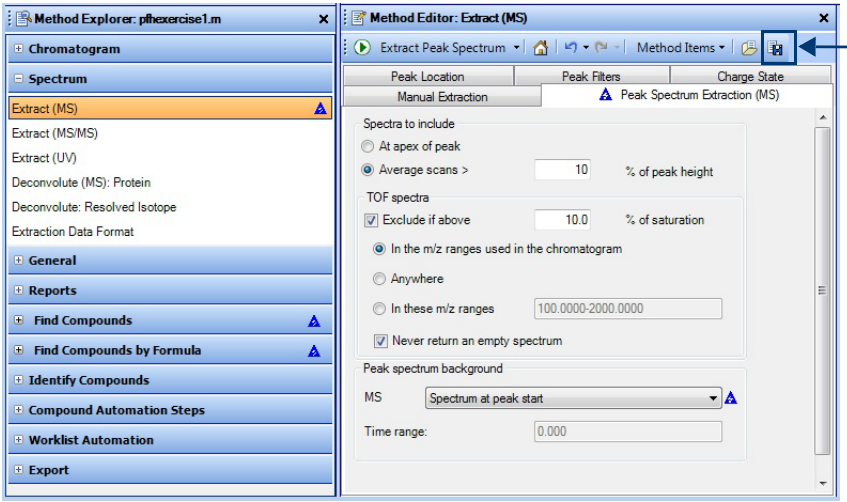
步骤	详细说明	注释
		**您可以单击 “保存方法” 图标以保存当前方法。**

图 68 “质谱图” > “提取 (MS)” > “峰质谱图提取 (MS)” 选项卡

7 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。	• 质谱图的标签包含 “Sub” 以表示这是一个从其中扣除了一些背景的质谱图。
8 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 107 页上的图 68 所示

任务 1. 设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
9 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。	• “要运行的操作”列表中的操作将按照其在列表中的顺序执行。首先，您需要提取定义的色谱图，因此**提取定义的色谱图**是列表中的第一个操作。然后，积分和提取峰质谱图，因此**积分并提取峰质谱图**是列表中的第二个操作。
10 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。

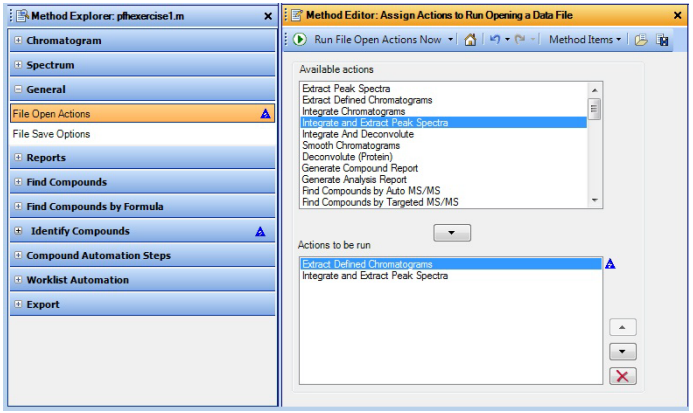


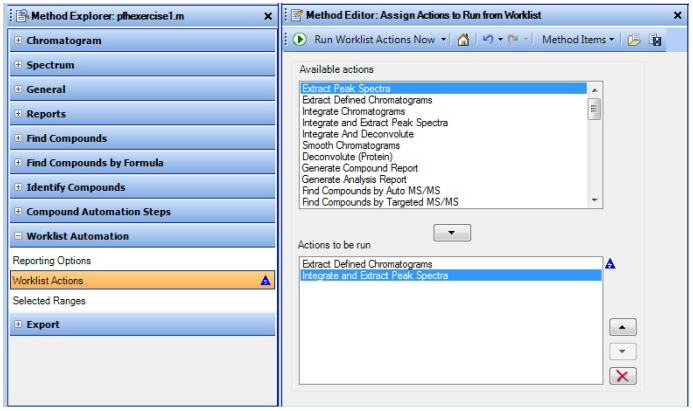
图 69 方法编辑器中的 “常规 > 文件打开操作”部分

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。

11 保存此方法。	• 单击方法编辑器中的**保存方法**图标。	

任务 1. 设置和运行定性分析方法

步骤	详细说明	注释
12 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**。	• 在工作单处理期间运行方法时，通常会生成报告或导出结果。在此示例中将删除该选项。
13 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。



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）可在方法作为工作单的一部分运行时运行。

图 70 “方法编辑器”中的“工作单自动处理”>“工作单操作”部分

14 在“工作单操作”部分中撤消方法更改。	**a** 单击方法编辑器中的  图标。	• 在此选项卡中撤消更改时，蓝色三角形将被删除。
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 2. 设置并运行可使用色谱峰识别工作流程进行自动分析的方法

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、检索数据库峰质谱图、为质谱图生成分子式并打印分析报告。

设置此方法时，您将切换到色谱峰识别工作流程。您也可以设置为使用打开数据文件时的方法来运行此自动分析。

“色谱峰识别”工作流程只能用于 LC/MS 数据文件。

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释
1 再次打开 **sulfas_PosMS**.d。 • 确保打开文件时该方法不会针对数据文件执行任何操作。 • 确保该方法为 *iii*exercise1.m。	**a** 单击**配置 > 配置工作流程 > 色谱峰识别**命令。 **b** 单击**调用当前方法**按钮和**调用工作流程的缺省布局**按钮。 **c** 单击**确定**。 **d** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **e** 选中所有复选框，使所有选项可用。 **f** 单击**确定**按钮。 **g** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **h** 在“打开数据文件”对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**。 **i** 清除**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **j** 单击**打开**。 **k** 单击**方法 > 打开**，选择 iiiexercise1.m 方法，然后单击**打开**。	• 确保**调用结果数据**复选框已清除或显示为灰色。 • 切换到其他工作流程时，可调用新的方法和新的窗口布局，并且方法管理器中将添加一个新的部分。 • 如果提示您保存对方法进行的更改，您可以决定是否要保存所做的更改。 • 调用的方法可能会带有红色的感叹号。如果 MassHunter 文件夹不在 D: 驱动器上，则会导致这些错误。通过更改为数据库和谱库指定的文件夹，可以更正这些错误。

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释
2 查看色谱峰识别算法部分。	• 在“方法管理器”窗口中，单击**色谱峰识别工作流程**。	• 请注意此工作流程中的十一个部分。这些部分中的大多数都是“常规”工作流程中的部分的重复。 • 工作流程设计为帮助您查看每个饿部分。
3 确保新的结果将覆盖以前的结果。	**a** 在“方法管理器”窗口中，选择**以前的结果**。 **b** 选中**删除所有以前的结果**复选框。	• 请注意，进行更改时，蓝色三角形可能会出现在“方法管理器”窗口的其他部分中。这表示相同的参数值同样也在其他位置发生了更改。
4 确保可以提取 TIC，并且将对四个最大的峰进行积分。	**a** 选择**色谱图提取**。 **b** 单击**色谱图**选项卡。 **c** 确保已将 **TIC** 选作要执行查找质谱图的色谱图。 **d** 在其他色谱图上选中**信号 A** 进行提取。 **e** 从**从以下位置获取信号 A** 列表中选择 **DAD**。 **f** 在“方法管理器”中选择**色谱图积分**部分。 **g** 单击**峰 (MS)** 选项卡，然后选中**限制为最大值（按峰高）**并键入 4。	• 请注意，**色谱图提取**部分是独一无二的。您不能在“方法管理器”的任何其他位置输入此信息。只有在选定了此工作流程时才能输入。
5 设置提取 MS 质谱图，并在峰的前后扣除质谱图平均值的峰质谱图背景。	**a** 选择**质谱图提取**。 **b** 单击**峰质谱图**选项卡。 **c** 对于**峰质谱图背景**，选择**在峰开始和结束处的质谱图（或光谱图）的平均值**。	
6 选择检索数据库，并针对所有质谱图峰生成分子式。 • 不要更改“分子式生成”或“数据库检索”参数值。	**a** 在“方法管理器”中选择**质谱图峰识别**。 **b** 选中**检索数据库以查找每个峰**复选框。 **c** 选中**为每个峰生成分子式**复选框。 **d** 单击**所有峰**按钮。	• 请注意，**质谱图峰识别**部分是独一无二的。您不能在“方法管理器”的任何其他位置输入此信息。

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释
7 此时，请对自动分析流程进行测试。	• 在“质谱图峰识别”部分单击**运行色谱峰识别**图标 。	• 单击“分子式生成”部分的  图标时，首先单击箭头，然后从可能的操作列表中选择**运行色谱峰识别**。缺省情况下，在本部分中运行的操作为**从质谱图峰生成分子式**。其他几个部分中也包含不同的缺省操作。
8 打开“质谱图识别结果”窗口以进行查看： • 此窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中，如图 71 所示	**a** 如有必要，单击**视图 > 质谱图识别结果**。 **b** 查看每个 MS 扫描的结果，确保色谱峰识别算法中的所有操作均已执行。	• 请参阅第 19 页上的“任务 4. 更改窗口布局”，以了解如何在主屏幕上移动窗口。 • “质谱图识别结果”窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。如果未显示“质谱图识别结果”窗口，则可以单击该选项卡。 • 您也可以使用主工具栏中的图标来显示这些窗口。

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释

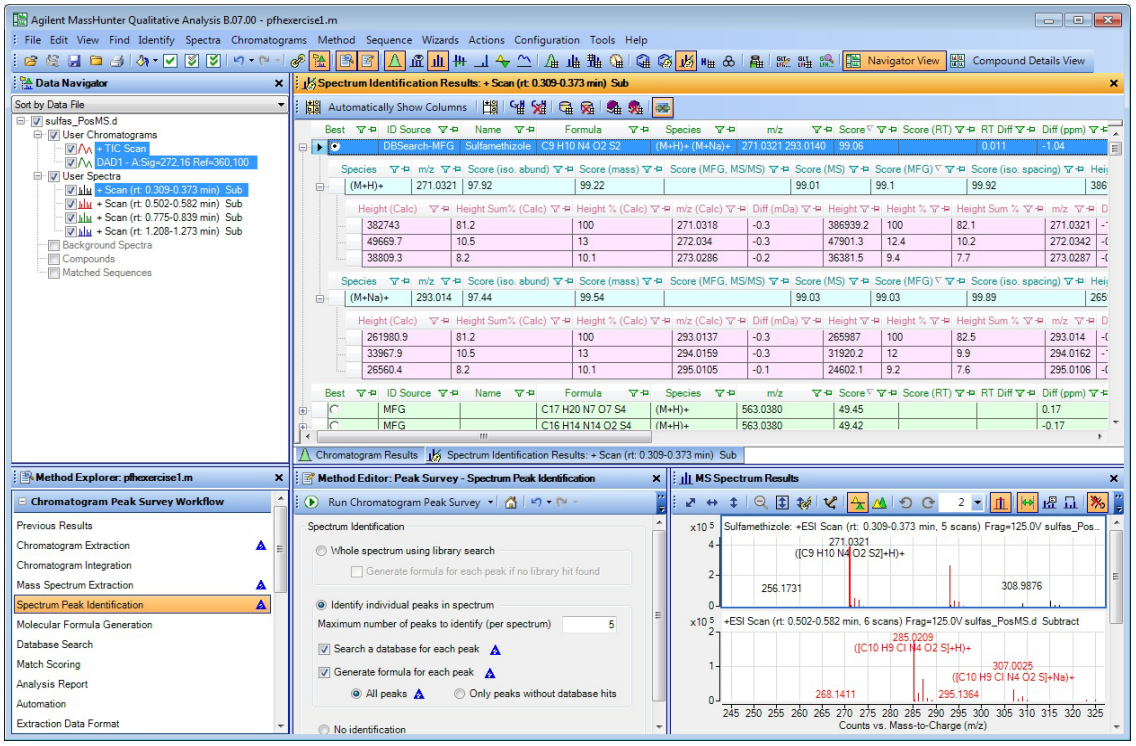


图 71 运行自动分析步骤后显示在选项卡中的结果

9 将方法保存为 *iii*exercise2，其中“*iii*”是您的姓名首字母缩写。	**a** 从菜单中单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iiiexercise2**。 **c** 单击**保存**。	• 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。
10 设置分析报告并指出要为此练习打印的部分。 • 保存此方法。	**a** 在“方法管理器”中，选择**分析报告**。 **b** 单击**内容**选项卡。 **c** 根据需要进行更改。 **d** 单击**打印分析报告**图标。 **e** 如有必要，单击方法编辑器中的**保存方法**图标。	• 选择是否在选择要运行的操作时打印报告。 • 单击“打印分析报告”图标时，**打印分析报告**对话框将打开。

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释
11 设置方法，以在打开数据文件时运行自动分析。 • 保存此方法。	**a** 在 “方法管理器” 中选择**自动化**。 **b** 单击**文件打开操作**选项卡。 **c** 在**要运行的操作**列表中，选择每一个项目，并单击**删除**图标 ✕。 **d** 在**可用操作**列表中选择**不生成分析报告的色谱峰识别**，并单击**添加**按钮 ▾。 **e** 单击方法编辑器中的**保存方法**图标。	• 如有必要，您也可以对这些操作进行测试。 • **不生成分析报告的色谱峰识别**和**生成分析报告的色谱峰识别**都可在无需单独提取色谱图的情况下工作。其他大部分操作需要您首先提取色谱图。
12 关闭 “方法编辑器”、“方法管理器” 和 “数据浏览器” 窗口。 • 移动窗口，使得它们的外观类似于图 72 中的布局。 • 关闭数据文件，同时不保存结果。	**a** 单击 “方法编辑器”、“方法管理器” 和 “数据浏览器” 窗口的**关闭**按钮。 **b** 移动窗口，使得它们的外观类似于图 72。 **c** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **d** 要求保存结果时，单击**否**。	• 请注意，您在打开新的数据文件时所显示的窗口布局与上次所使用的窗口布局相同。
13 再次打开 **sulfas_PosMS.d** 数据文件，以运行自动分析。 • 结果应与图 72 中所显示的结果类似。	**a** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 选择 sulfas_PosMS.d **c** 选中**从所选的方法中运行 “文件打开” 操作**复选框。 **d** 单击**打开**。 **e** 通过单击 “质谱图识别结果” 窗口的行中的单选按钮来选中**最佳**结果。	

任务 2. 设置并运行可进行自动分析的方法

步骤	详细说明	注释

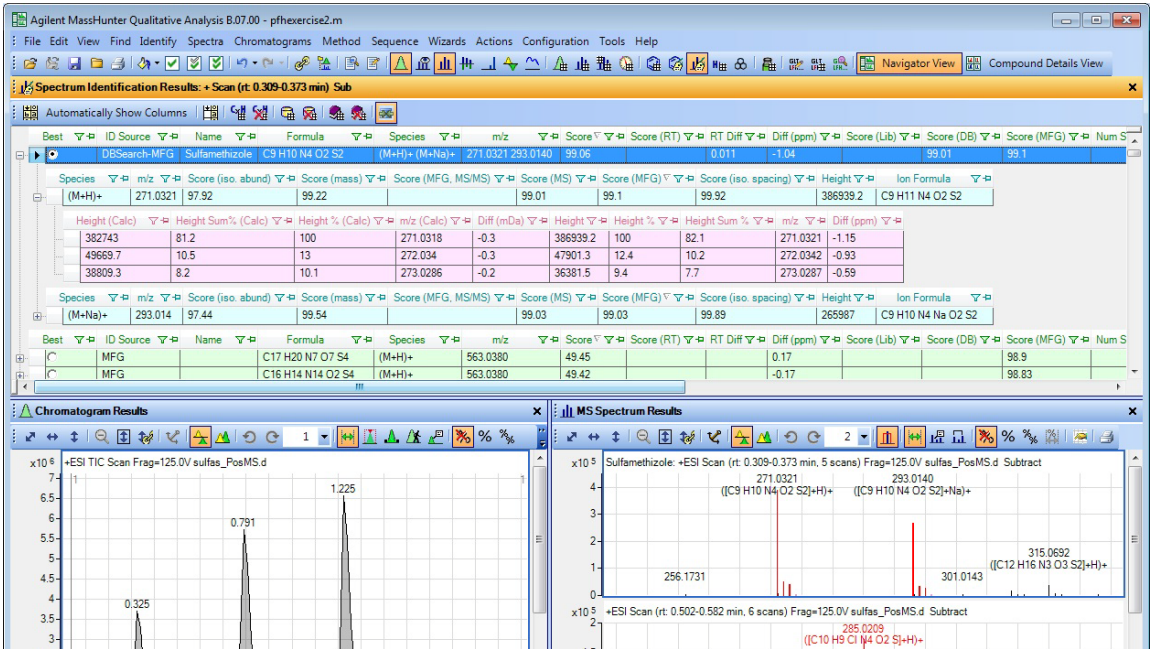


图 72 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件时色谱峰识别操作的结果

14 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 3. 设置并运行可使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动识别化合物的方法

在本任务中，您将设置一个定性分析方法，它包含有关查找和识别化合物的操作的列表。这些操作包括根据所选算法查找化合物、在数据库中检索化合物、为特定化合物生成分子式以及打印化合物报告等。

若要设置此方法，您需要切换到 MS 目标化合物筛选工作流程。也可以使用 “化合物自动处理步骤” 部分来设置此方法。您也可以设置为使用打开数据文件时的方法来运行此化合物自动处理。

“MS 目标化合物筛选” 工作流程只能用于 LC/MS 数据文件。

任务 3. 设置并运行可进行自动化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释
1 再次打开 **sulfas_PosMS**.d。 • 确保打开文件时该方法不会针对数据文件执行任何操作。 • 确保该方法为 *iii*exercise2.m。 • 启动 “MS 目标化合物筛选” 工作流程。	**a** 单击**配置 > 配置工作流程 > MS 目标化合物筛选**。 **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**按钮。 **d** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **e** 选中所有复选框，使所有选项可用。 **f** 单击**确定**按钮。 **g** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **h** 在 “打开数据文件” 对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**。 **i** 清除**从所选的方法中运行 “文件打开” 操作**和**调用结果数据**复选框，然后单击**打开**。 **j** 单击**方法 > 打开**。选择 *iii*exercise2.m 方法。 **k** 单击**打开**。 **l** 单击**否**以保存方法更改。	• 确保**调用结果数据**复选框已清除或显示为灰色。 • 切换到 MS 目标化合物筛选工作流程时，将调用 Screening-Default.m 方法。 • 如果 MassHunter 文件夹不在 D: 驱动器上的缺省位置中，则在切换到此工作流程时方法会出错。您可以将数据库的文件夹更改到适当的位置。

任务 3. 设置并运行可进行自动化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释
2 查看可查找和识别化合物的自动化步骤。 • 将“方法编辑器”窗口作为选项卡放置在合适的位置。	**a** 在“方法管理器”窗口中，单击 **MS 目标化合物筛选工作流程 > 自动处理**。 **b** （可选）将“方法管理器”窗口作为选项卡放置在“数据浏览器”窗口上。 **c** 关闭**化合物列表**窗口。	• 在此工作流程中，“方法编辑器”是一个浮动窗口。您可以将其保留为浮动窗口，也可以将其设置为另一窗口的选项卡，例如“数据浏览器”窗口。
3 选择检索数据库，并针对所有化合物生成分子式。 • 确保当前是根据分子特征查找化合物。	**a** 单击**分析选项**选项卡。 **b** 选择**按分子特征查找**。 **c** 选中**检索数据库以查找每个化合物**复选框。 **d** 选中**为每个化合物生成分子式**复选框。 **e** 单击**所有化合物**。 **f** 选中**仅显示已识别的化合物**复选框。	• 化合物可以通过“检索数据库”算法、“生成分子式”算法、“检索谱库”算法或“按分子式查找”算法（如果已找到化合物的话）进行识别。如果已安装 MassHunter BioConfirm 软件，则也可以通过匹配序列算法来识别化合物。
4 确保新的结果将覆盖以前的结果。	**a** 单击**结果**选项卡。 **b** 选中**删除所有以前的结果**复选框。	
5 此时，请对自动化流程进行测试。	• 在“MS 目标化合物筛选工作流 > 自动化”部分，单击**运行化合物自动处理步骤**图标 。	
6 可打开这些窗口查看下列各项： • 化合物列表 • 化合物识别结果 • 确保窗口如图 73 中所示 • 查看每个化合物的每个列表（化合物 1 和 2 除外）。	**a** （如有必要）请单击**视图 > 化合物列表**。 **b** （如有必要）请单击**视图 > 化合物识别结果**。 **c** 清除数据浏览器中的“化合物 1”和“化合物 2”复选框。或者，您可以清除“化合物列表”窗口**显示 / 隐藏**列中“化合物 1”和“化合物 2”的复选框。 **d** 查看每个已识别化合物的每个表，以确保化合物自动处理步骤中的所有操作均已执行。	• 请参阅第 19 页上的“任务 4. 更改窗口布局”，以了解如何在主屏幕上移动窗口。 • “化合物识别结果”窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中，如图 73 所示。

任务 3. 设置并运行可进行自动化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释
7 将方法保存为 *iii*exercise3，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 **iiiexercise3**。 **c** 单击**保存**。	• 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。

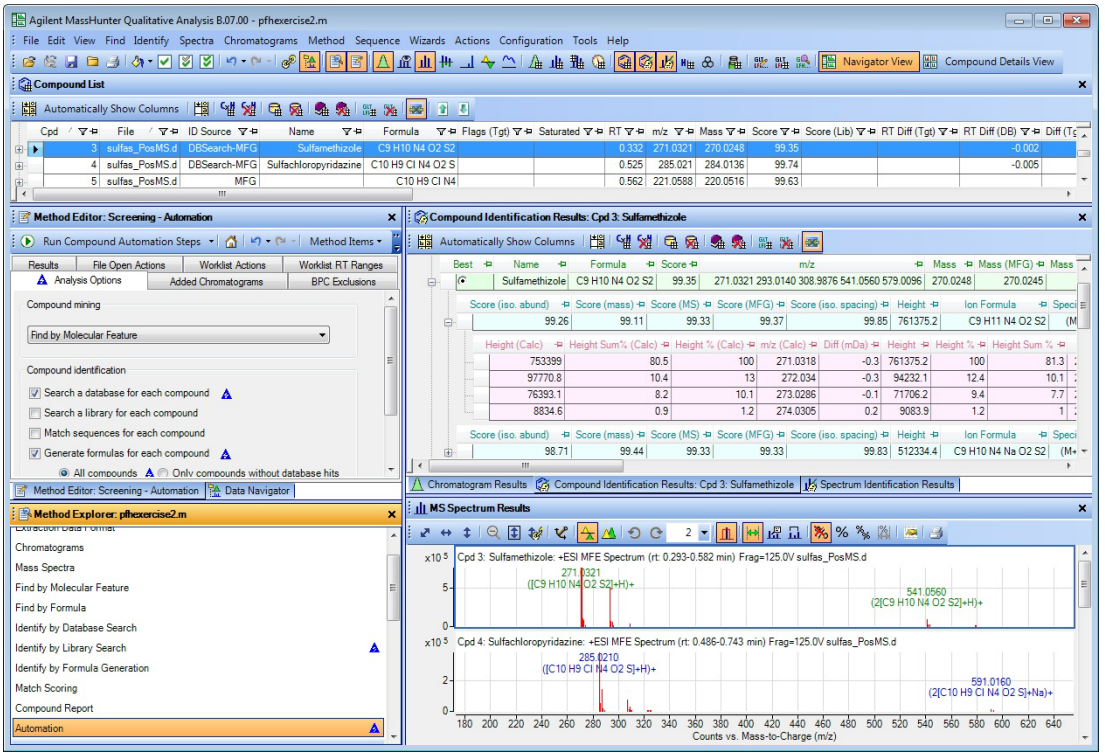


图 73 运行化合物自动识别步骤后显示在选项卡中的结果

8 为此练习设置化合物报告。 • 如有必要，保存方法。	**a** 选择**化合物报告**。 **b** 根据需要进行更改。 **c** 单击**模板**选项卡。 **d** （可选）选择 *TargetCompoundScreeningReport.xltx* 作为**化合物报告模板**。 **e** 如有必要，单击方法编辑器中的**保存方法**图标。	• 用于此工作流程的缺省化合物报告模板是“TargetCompoundScreeningReport.xltx”。对于“常规”工作流程，您调用的 *iiiExercise2.m* 方法可从缺省方法启动。您可以选择任一报告模板。

任务 3. 设置并运行可进行自动化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释
9 设置方法，以在打开数据文件时运行自动化合物识别。 • 保存此方法。	**a** 选择 **MS 目标化合物筛选工作流 > 自动化 > 文件打开操作**。 **b** 在**要运行的操作**列表中，选择所有操作，并单击**删除**图标 ✕。 **c** 在**可用操作**列表中选择**不生成报告的化合物自动化**，并单击**添加**按钮 ▾。 **d** 单击方法编辑器中的**保存方法**图标。	• 如有必要，您也可以对这些操作进行测试。
10 关闭方法编辑器、方法管理器和数据浏览器。 • 移动窗口，使得它们的外观类似于图 74 中的布局。 • 关闭数据文件，同时不保存结果。	**a** 单击方法编辑器、方法管理器和数据浏览器的**关闭**按钮。 **b** 移动窗口，使得它们的外观类似于图 74。 **c** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **d** 要求保存结果时，单击**否**。	• 有关如何移动窗口的信息，请参见练习 1 任务 4。
11 再次打开 **sulfas_PosMS.d** 数据文件，以运行自动化合物识别。 • 结果应与图 74 中所显示的结果类似。 • 隐藏化合物列表中的化合物 1 和 2。	**a** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 选择 sulfas_PosMS.d 数据文件。 **c** 选中**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **d** 单击**打开**。 **e** 清除化合物列表中化合物 1 和 2 的**显示 / 隐藏**复选框。	• 化合物 1、2、5、6 和 8 不是由数据库检索算法发现的，但它们的分子式是由分子式生成算法生成的。

任务 3. 设置并运行可进行自动化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释

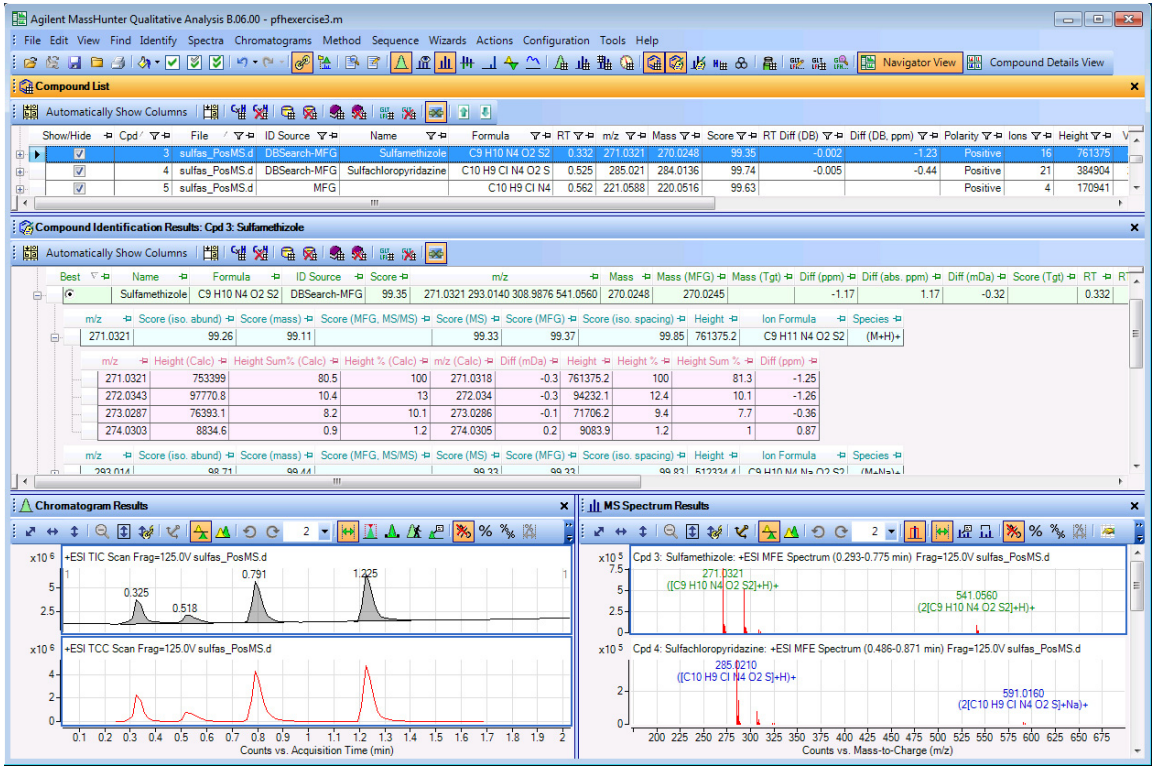


图 74 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件时自动化合物识别的结果

12 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 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

在本任务中，您将设置一个定性分析方法，它包含在运行工作单时要执行的操作的列表。您将学习如何保存包含采集和定性分析参数的方法，尽管您在此任务中实际上可能不会执行该操作。

从数据采集软件的修订版 B.05.00 开始，在运行数据采集方法时，可以使用数据采集软件从现有的数据采集方法自动运行定性方法。有关详细信息，请参见数据采集的联机帮助。

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

步骤	详细说明	注释
1 调用 sulfas_PosMS.d 数据文件。 • 打开在任务 2 中保存的方法。 • 确保在打开文件时不会运行这些操作。 • 恢复缺省的窗口布局。	**a** 要恢复缺省的工作流程，可单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**。 **b** 单击**确定**以继续。 **c** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **d** 在“打开数据文件”对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**。 **e** 清除**从所选的方法中运行“文件打开”操作**复选框。 **f** 清除**调用结果数据**复选框。 **g** 单击**打开**。 **h** 调用方法 ***iii*Exercise2.m**。	• 在此任务中，您将创建仅包含定性分析参数的方法。 • 要根据此方法创建工作单方法，必须在采集程序中将采集参数添加到此方法。 • 如果在“打开数据文件”对话框中选择**调用工作单方法**（假设其可用），则程序将使用生成数据文件的工作单中采集方法的定性分析部分打开数据文件。 • 您可以通过将定性分析参数保存到现有采集方法，从而可以同时使用采集参数和定性分析参数来创建工作单方法。 • 您也可以将方法设置为使用分析自动化步骤进行完整分析。随后删除这些操作，并添加到分析自动化操作中。 • 您可以对化合物自动化执行同样的操作。

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

步骤	详细说明	注释
2 设置一个方法，使其在完成工作单中的每一个运行时都会自动执行。 设置可执行下列任务的方法： • 提取所定义的色谱图 • 积分并提取峰质谱图 • 生成分析报告 提示：请查看方法管理器中的“工作单自动处理”部分。	**a** 在“方法管理器”中，选择**工作单自动处理 > 工作单操作**以显示**指定要从工作单运行的操作**部分。 **b** 确保下列操作按照此顺序显示在**要运行的操作**列表中。 • 提取定义的色谱图 • 积分并提取峰质谱图 • 生成分析报告 **c** 如有必要，请从**可用操作**列表中选择每一个操作，并单击**添加**按钮 ，以将选定的操作移动到**要运行的操作**列表中。您也可以双击所选操作，以将其复制到其他列表。 **d** 如有必要，可从**要运行的操作**列表中选择任意不在所述操作列表中的操作，并单击**删除**图标 。	

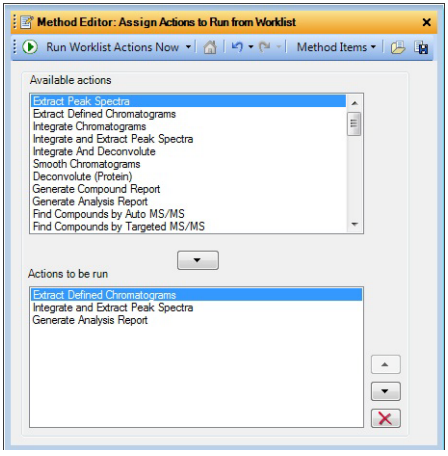


图 75 显示“工作单操作”部分的方法编辑器

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

步骤	详细说明	注释
3 将方法保存为 ***iii*exercise 2worklist.m**，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。 • 关闭程序，同时不保存结果。	**a** 要保存结果，请单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 ***iii*exercise2worklist.m**。 **c** 单击**保存**。 **d** 单击**文件 > 退出**。 **e** 系统提示您是否要保存结果时，请单击**否**。	• 将采集参数添加到采集程序的此方法中之后，即可用相同的名称或不同的名称将其保存。 • 从工作单运行时，此方法（包含所添加的采集参数）将自动按照顺序采集并分析数据。“工作单操作”部分中的**要运行的操作**列表中的操作将自动运行。

练习 4
定性分析向导

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导 126
任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”向导 133

“定性分析”程序包括多个向导。这些向导可引导您完成执行某些任务所需的步骤。

- **识别色谱峰向导** - 此向导显示在运行**不包含分析报告的色谱峰识别**操作之前可修改的不同方法编辑器部分和选项卡。
- **查找目标化合物依据：MFE+ 数据库检索 + MFG 向导** - 此向导显示在运行**按分子特征查找算法**和**数据库检索算法**之前可修改的不同方法编辑器部分和选项卡。

您还可以在 “方法编辑器”窗口中更新这些方法编辑器部分。

如果安装了 BioConfirm，则可以使用其他多个向导。这些其他向导在《BioConfirm 入门指南》中加以介绍。

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. 运行 “识别色谱峰”向导

运行此向导时，程序将显示所有方法编辑器部分和影响**不包含分析报告的色谱峰识别**操作的其他页面。单击**完成**按钮时，将保存对方法所做的更改，并执行**不包含分析报告的色谱峰识别**操作。

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释
1 打开 **sulfas_PosMS.d** 数据文件。 • 确保打开数据文件时程序不会运行任何文件操作。 • 确保方法为 Default.m。 • 确保窗口布局为缺省布局。	**a** 在桌面上双击**定性分析**图标。 **b** 在 “打开数据文件”对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**， **c** 如有必要，清除**从所选的方法中运行 “文件打开” 操作**复选框。 **d** 如有必要，清除**调用结果数据**复选框。 **e** 单击**打开**。 **f** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**命令。 **g** 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。 **h** 单击**确定**按钮。 **i** 单击**配置 > 用户界面配置**。 **j** 选中所有复选框，使所有选项可用。 **k** 单击**确定**按钮。	• 将自动调用常规工作流程的缺省布局。如果要恢复为此缺省布局，请单击**配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局**。此命令将始终恢复与常规工作流程一起使用的布局。 • 您可以在前面的任务中发现，在每次对方法执行更改之后，都将在更改的旁边以及已更改部分旁边的方法管理器中显示一个蓝色的三角形。
2 启动 “识别色谱峰”向导。更改参数以删除以前的结果。	**a** 单击**向导 > 识别色谱峰**命令。 **b** 在 “以前的结果”页面中，选中**删除所有以前的结果**复选框。 **c** 单击**下一步**。	• 向导将引导您完成一系列页面。您可以在这些页面上设置任务的参数。其中许多页面是 “方法编辑器”窗口中的部分和选项卡的重复。 • 色谱图、质谱图和化合物将被删除。

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释
3 编辑 “色谱图提取”页面。更改参数以提取 BPC 和信号 A 色谱图。	**a** 在 “色谱图提取”页面中的 “要提取的其他色谱图”下，选中 **BPC** 复选框和**信号 A** 复选框。 **b** 从**从以下位置获取信号 A** 列表中选择 “DAD1”。 **c** 单击**下一步**。	• 单击**完成**时当前方法将改变。在 “方法编辑器”中，如果更改与方法一起保存的值，则会显示一个蓝色三角形。然而，向导中的蓝色三角形表示您更改了向导中的值，使之不同于方法中的当前值。

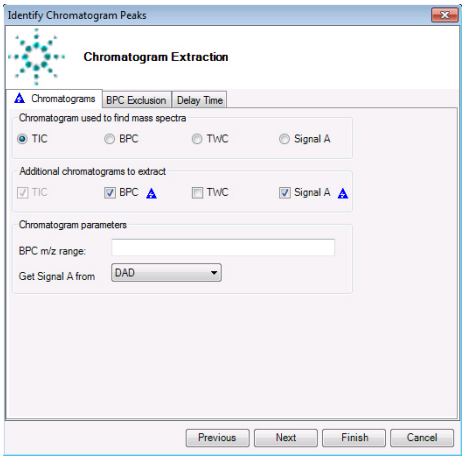


图 76 “识别色谱峰”向导中的 “色谱图提取”页面

4 编辑 “色谱图积分”页面。将参数更改为仅对四个最大的 MS 峰积分。	**a** 在 “色谱图积分”页面中，单击**峰 (MS)** 选项卡。 **b** 选中**上限（按峰高）**复选框，并输入 4。 **c** 单击**下一步**。	• 您可以单击向导中任何页面上的**完成**按钮。当向导运行时，将使用方法中的当前值。

任务 1. 运行 “识别色谱峰” 向导

步骤	详细说明	注释

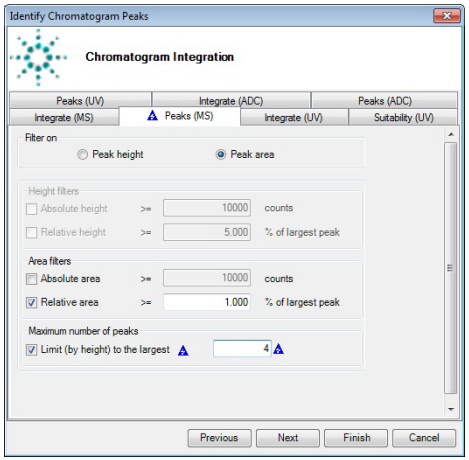


图 77 “识别色谱峰” 向导中的 “色谱图积分” 页面

5 检查 “提取数据格式” 页面中的参数。	**a** 在 “提取数据格式” 页面中，检查参数。 **b** 单击**下一步**。	• 在向导的最后一页，**下一步**按钮显示为灰色。您可以完成向导，也可以返回上一页。

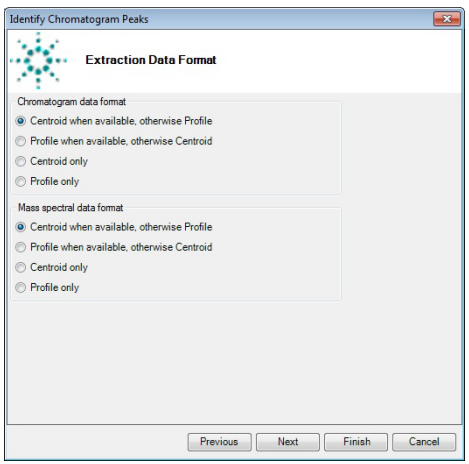


图 78 “识别色谱峰” 向导中的 “提取数据格式” 页面

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释
6 编辑 “质谱图提取”页面，将要从每个峰扣除的质谱图更改为峰开始处的质谱图。	**a** 在 “质谱图提取”页面中，选择**峰开始处的质谱图**作为 MS 峰质谱图背景。 **b** 单击**下一步**。	

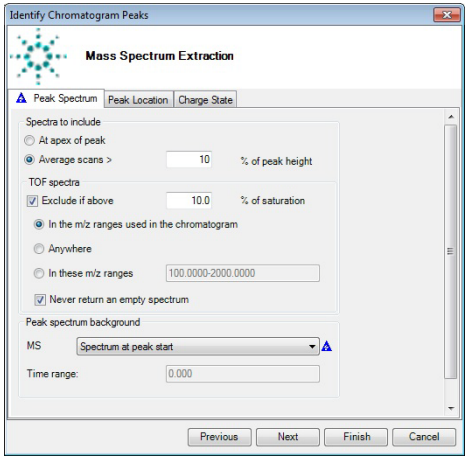


图 79 “识别色谱峰”向导中的 “质谱图提取”页面

7 编辑 “质谱图峰识别”页面。更改参数以检索数据库并为所有峰生成分子式。	**a** 在 “质谱图峰识别”页面中，单击**质谱中识别各个峰**。 **b** 选中**检索数据库以查找每个峰**复选框。 **c** 选中**为每个峰生成分子式**复选框。 **d** 单击**所有峰**按钮。 **e** 单击**下一步**。	

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释

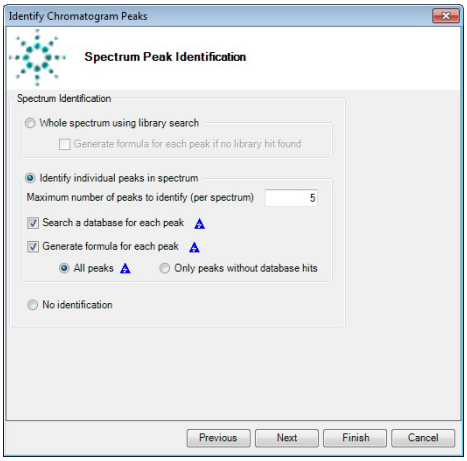


图 80 “识别色谱峰”向导中的 “质谱图峰识别”页面

8 检查 “数据库检索”页面中的参数。	**a** 在 “数据库检索”页面中，检查参数。 **b** 单击**下一步**按钮。	

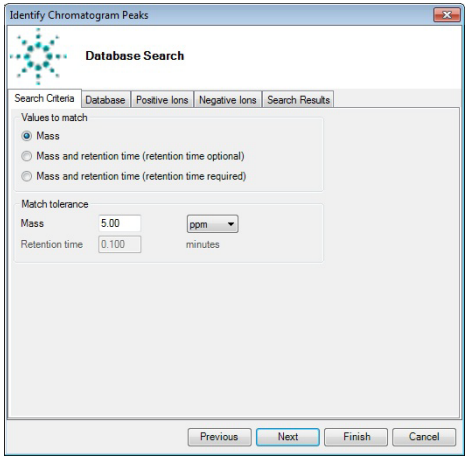


图 81 “识别色谱峰”向导中的 “数据库检索”页面

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释
9 编辑 “分子式生成”页面。将最小总分数更改为 25。	**a** 在 “分子式生成”页面中，单击**限值**选项卡。 **b** 选中**最小总分数**复选框。 **c** 输入 **25** 作为最小总分数。 **d** 单击**下一步**按钮。	

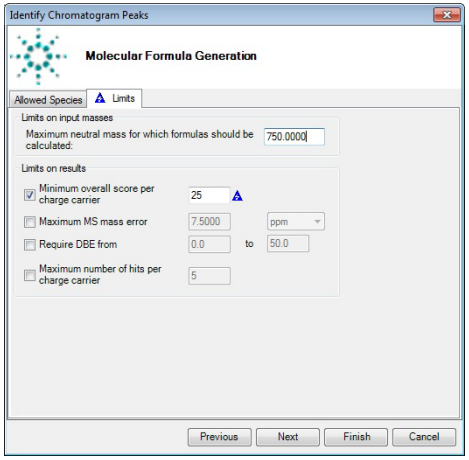
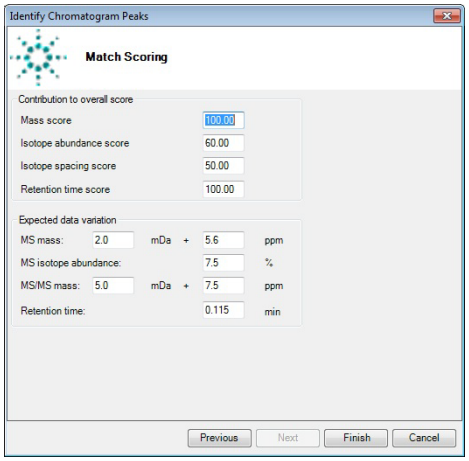


图 82 “识别色谱峰”向导中的 “分子式生成”页面

10 检查 “匹配分数”页面中的参数。	**a** 在“匹配分数”页面中，检查参数。 **b** 单击**完成**按钮。	

任务 1. 运行 “识别色谱峰”向导

步骤	详细说明	注释
		
图 83 “识别色谱峰”向导中的 “匹配分数”页面		
11 检查结果。	• 首先，对方法所做的更改会应用于当前方法。这些更改不会自动保存到磁盘上的方法。 • 随后，色谱峰识别操作即完成。	• 请注意，单击**完成**时，如果在向导中所做的更改不同于磁盘上的更改，则会在 “方法管理器”窗口部分和 “方法编辑器”窗口中添加一个蓝色三角形。
12 将方法保存为 *iii*exercise4（其中 “*iii*”是您的姓名首字母缩写），然后关闭数据文件而不保存结果。	**a** 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iiiexercise4.m**。 **c** 单击**保存**按钮。 **d** 单击**文件 > 关闭数据文件**，并在要求您保存结果时单击**否**。	• 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。

任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG” 向导

此向导显示在运行**按分子特征查找算法**和**数据库检索算法**之前可修改的不同方法编辑器部分和选项卡。

任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”

步骤	详细说明	注释
1 再次打开 **sulfas_PosMS**.d。 • 确保打开文件时该方法不会针对数据文件执行任何操作。 • 确保该方法为 *iii*exercise1.m。	**a** 单击**配置 > 配置工作流程 > 常规**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**配置 > 用户界面配置**。 **e** 选中所有复选框，使所有选项可用。 **f** 单击**确定**按钮。 **g** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **h** 在 “打开数据文件” 对话框中，选择 **sulfas_PosMS.d**。 **i** 清除**从所选的方法中运行 “文件打开” 操作**复选框。 **j** 单击**打开**。 **k** 单击**方法 > 打开**，选择 iiiexercise1.m 方法，然后单击**打开**。	• 确保**调用结果数据**复选框已清除或显示为灰色。 • 切换到其他工作流时，将调用新的方法、新的窗口布局，并且方法管理器中将添加一个新的部分。 • 如果系统提示您保存针对方法的更改，请单击**否**。 • 该向导也可在调用其他工作流的情况下运行。
2 启动 **MFE + 数据库检索 + MFG** 向导。将参数更改为使用小色谱分子算法。	**a** 单击**向导 > MFE + 数据库检索 + MFG**。 **b** 在 “按分子特征查找” 页面中，选择**小分子 （色谱）**作为**目标数据类型**。 **c** 单击**下一步**按钮。	• MFE 算法将根据所选择的**目标数据类型**进行修改。

任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”

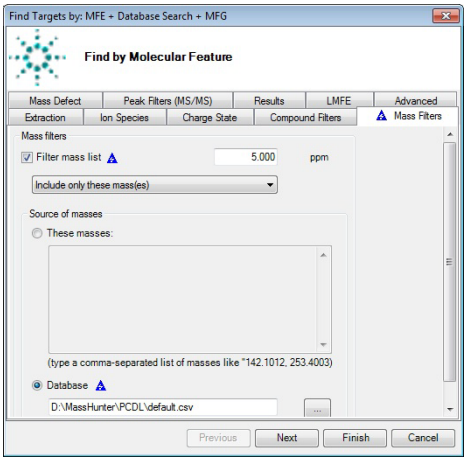
步骤	详细说明	注释
		
3 编辑“按质量列表过滤”页面。将最小总分数更改为 25。	**a** 在“按质量列表过滤”页面中，选中**过滤器质量列表**复选框。 **b** 选择**仅包括下列质量**。 **c** 单击**数据库**按钮。 **d** 选择 *default.csv* 文件。 **e** 单击**下一步**按钮。	• 向导的此页面包含向导上一页中的单个选项卡。在此任务中，必须过滤质量列表，这非常重要。 • 您可以改为选择示例数据库 *default.csv*。

图 84 “MFE + 数据库检索 + MFG”向导的 “按分子特征查找”页面

任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”

步骤	详细说明	注释

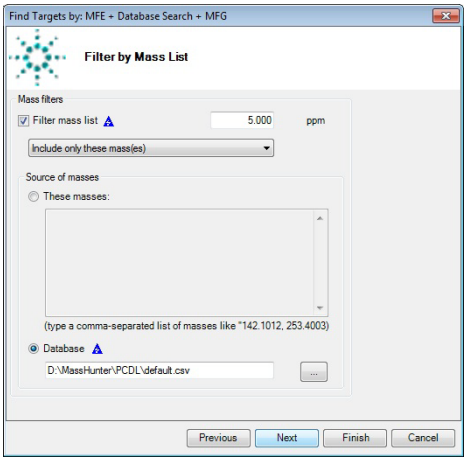


图 85 “MFE + 数据库检索 + MFG”向导的 “按质量列表过滤”页面

4	检查 “检索数据库”页面中的参数。	**a** 检查参数。 **b** 单击**下一步**按钮。

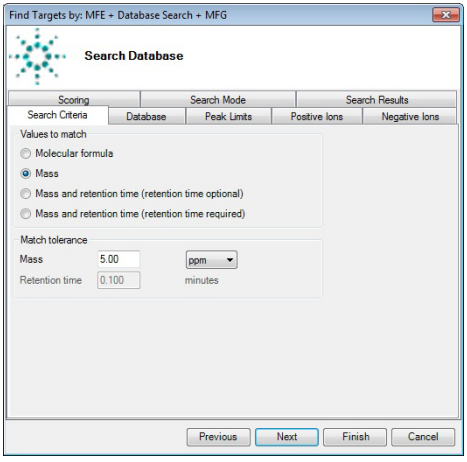


图 86 “MFE + 数据库检索 + MFG”向导的 “检索数据库”页面

任务 2. 运行 “MFE + 数据库检索 + MFG”

步骤	详细说明	注释
5 编辑 “生成分子式” 页面。将最小总分数更改为 25。	**a** 单击**限值**选项卡。 **b** 键入 25 作为**最小总分数**。 **c** 单击**完成**按钮。	

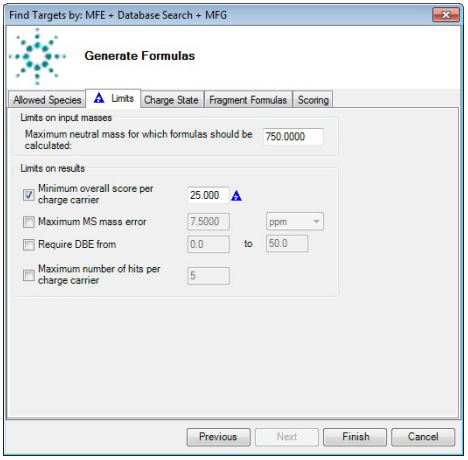


图 87 “MFE + 数据库检索 + MFG” 向导的 “生成分子式” 页面

6 在 “定性分析” 程序中查看结果。	• 不会生成报告。 • 您可以在 “化合物列表” 窗口和 “化合物识别结果” 窗口中查看结果。	
7 将方法保存为 *iii*exercise5，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。	**a** 从菜单中单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iiiexercise5.m**。 **c** 单击**保存**。	• 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。
8 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**。	

练习 5
分析以所有离子 MS/MS 模式采集的数据文件

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找 138
任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找 144
任务 3. 在 “化合物详细信息视图”中查看结果 149

如果数据文件是在所有离子 MS/MS 模式中采集的，在运行按分子式查找化合物算法时，程序可以对碎片离子进行定性。

任务 1 介绍在具有结构同分异构体时如何生成结果。区分结构同分异构体的一种方法是使用保留时间。

任务 2 介绍如何利用在所有离子 MS/MS 模式中采集的数据文件生成结果。使用较低的裂解电压或碰撞能量电压采集数据，然后使用一个或多个较高的裂解电压或碰撞能量电压采集数据。 MS 信息与按分子式查找算法一起使用。使用此 MS/MS 信息对碎片离子定性。

任务 3 介绍在启用碎片信息的情况下运行按分子式查找算法之后，如何使用 “化合物详细信息视图”查看结果。其中一个新功能是共流出曲线，它是 “化合物色谱图结果”窗口的一部分。

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. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
1 打开 **AIM_3CE(0-20-40).d** 数据文件。 • 使用 “常规”工作流程。	**a** 单击**文件 > 打开数据文件**。 **b** 选择 **AIM_3CE(0-20-40).d** 并单击**确定**。 **c** 单击**视图 > 配置工作流程 > 常规**。 **d** 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  。 **e** 单击**范围选择**工具。	• “按分子式查找”部分包括在**分子式确认和样品纯度工作流程**部分中。 • 碎片确认仅适用于在 “所有离子 MS/MS”模式中获取的数据文件。 • **AIM_3CE(0-20-40).d** 是所有离子 MS/MS 数据文件。

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
2 查看 “按分子式查找 - 选项” 部分。 • 对于此数据文件，选择 PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb 谱库。	**a** 在 “方法管理器” 窗口中，单击**按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 选项**部分。 **b** 单击**分子式来源**选项卡。 **c** 单击**数据库**作为**要确认的分子式的来源**，然后选择 PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb。 **d** 选中**对同分异构化合物自动增加**复选框。 **e** 单击**正离子**选项卡。 **f** 选中 **+H** 和 **+Na** 复选框。 **g** 单击**结果**选项卡。 **h** 选中**提取 EIC** 复选框。 **i** 选中**提取已清理的质谱图**复选框。 **j** 选中**包含结构**复选框。 **k** 单击**结果过滤器**选项卡。 **l** 清除**仅为匹配的分子式生成化合物**复选框。 **m** 单击**碎片确认**选项卡。 **n** 清除**碎片离子确认**复选框。	• 您可以在前面的任务中发现，在每次对方法执行更改之后，都将在更改的旁边以及已更改部分旁边的方法管理器中显示一个蓝色的三角形。 • 如果未选中 “对同分异构化合物自动增加” 复选框，则 “化合物列表” 表不包含有关表中每个化合物的所有同分异构体的信息。 • 如果是第一次使用按分子式查找化合物算法，则不要确认碎片离子。
3 运行按分子式查找化合物算法。	**a** 单击**查找 > 按分子式查找化合物**命令。 **b** 关闭 “方法管理器” 和 “方法编辑器” 窗口。 **c** 关闭 “色谱图结果” 窗口。	• 两个分子式无法确认。每个分子式的名称显示在尖括号中。“化合物 10：< Chloropropham (Chlorpropham)>” 和 “化合物 11：< Monolinuron (phenylurea)>” 未使用当前参数确认。

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
4 查看**化合物 10：<Chloropropham>**。 • 未找到此化合物。 • **化合物 11：< Monolinuron (phenylurea)>** 也未找到。	**a** 单击**化合物 10：<Chloropropham> (Chlorpropham)**。 **b** 展开“化合物列表”表，以展开表的两个级别以显示**化合物 10**。 **c** 单击**化合物 11：<Monolinuron (phenylurea)>**。 **d** 展开“化合物列表”表，以展开表的三个级别以显示**化合物 11**。	• 对于化合物 11，**分数（质量）**很好（超过 95%），但**分数（同位素丰度）**和**分数（同位素差）**都是零。因此，**分数 (MS)** 低于在“结果过滤器”选项卡中设置的限值。因此，化合物未定性。 • 此化合物没有与之相关的任何质谱图，因此 **MS 质谱图结果**窗口仍显示以前选定的化合物的结果。

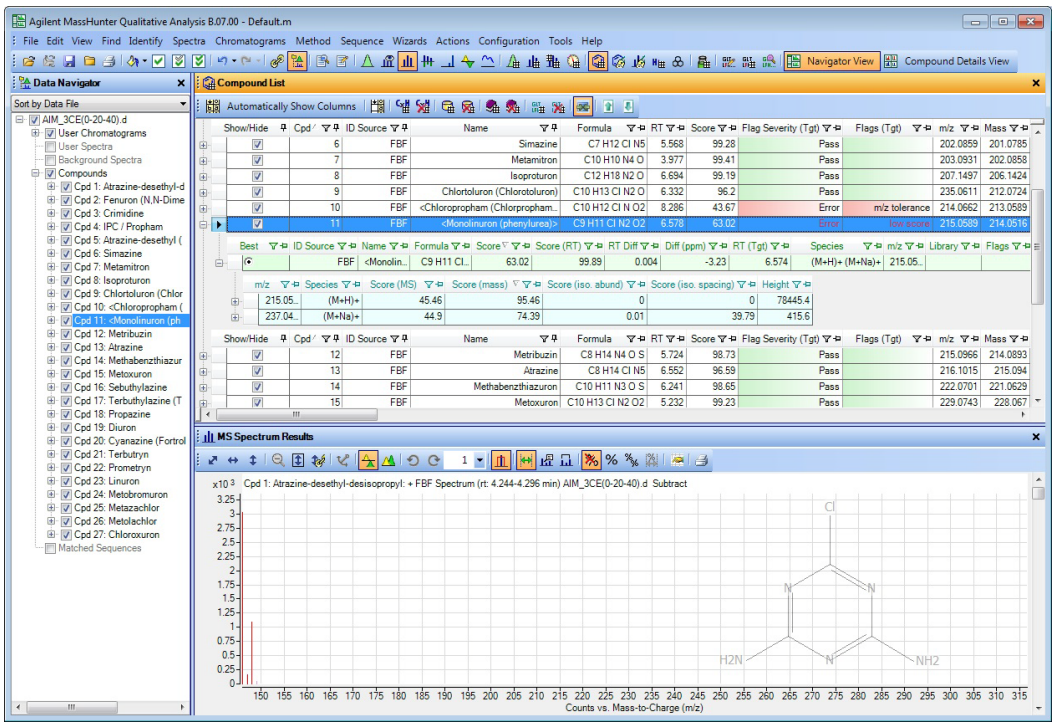


图 88 未找到化合物时查看结果

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
5 查看**化合物 7：Metamitron** 的结果。 • 找到此化合物。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，单击**化合物 7：Metamitron** 的结果。 **b** 展开“化合物列表”窗口中的结果，以显示“化合物列表”表中的前四层。 **c** 查看**分数（目标化合物）**值。	• 可使用快捷菜单更改所显示的列。 • 总**分数（目标化合物）**值由**分数 (MS)** 和**分数 (RT)** 组成。 • **分数 (MS)** 由**分数（质量）**、**分数（同位素，丰度）**和**分数（同位素差）**值组成。

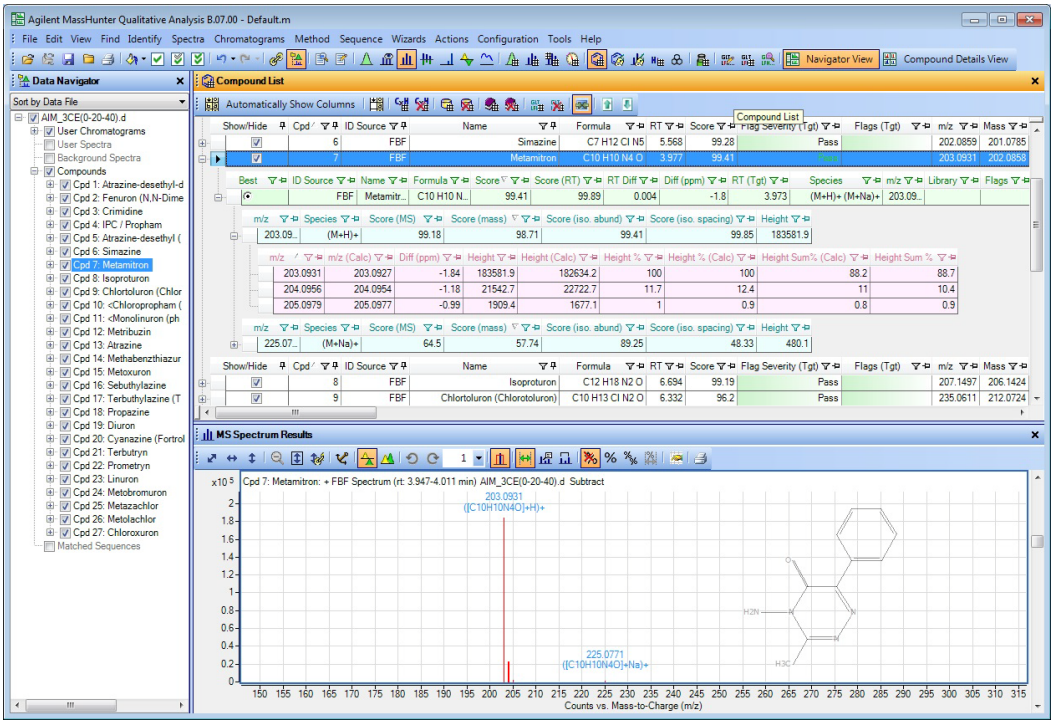


图 89 “数据浏览器”、“化合物列表”和 “MS 质谱图结果”窗口中的按分子式查找结果。

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
6 查看**化合物 18：Propazine** 的结果。 • Propazine 的分子式与**化合物 16：Sebuthylazine** 和**化合物 19：Diuron** 的分子式相同，因此它们是结构同分异构体。 • 您可以手动选择其他同分异构体。	**a** 在“数据浏览器”窗口中，单击**化合物 18：Propazine** 的结果。 **b** 展开“化合物列表”窗口中的结果，以显示“化合物列表”表中的前两层。 **c** 单击**视图 > 色谱图结果**。 **d** 查看此化合物的**分数**和**分数 (RT)** 值。 **e** 查看**标记（目标化合物）**值。对于结构同分异构体，它设置为“**多个 ID**”。**标记严重性（目标化合物）**值设置为**信息**。	• 如果质量和保留时间在数据库中可用并在按分子式查找算法中使用，则该算法可以区分结构同分异构体。 • MS/MS 信息也有助于区分结构同分异构体。 • 化合物 Propazine 的**分数 (RT)** 值明显较高，因此，这是选择 Propazine 作为**最佳**匹配项的原因。

任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释

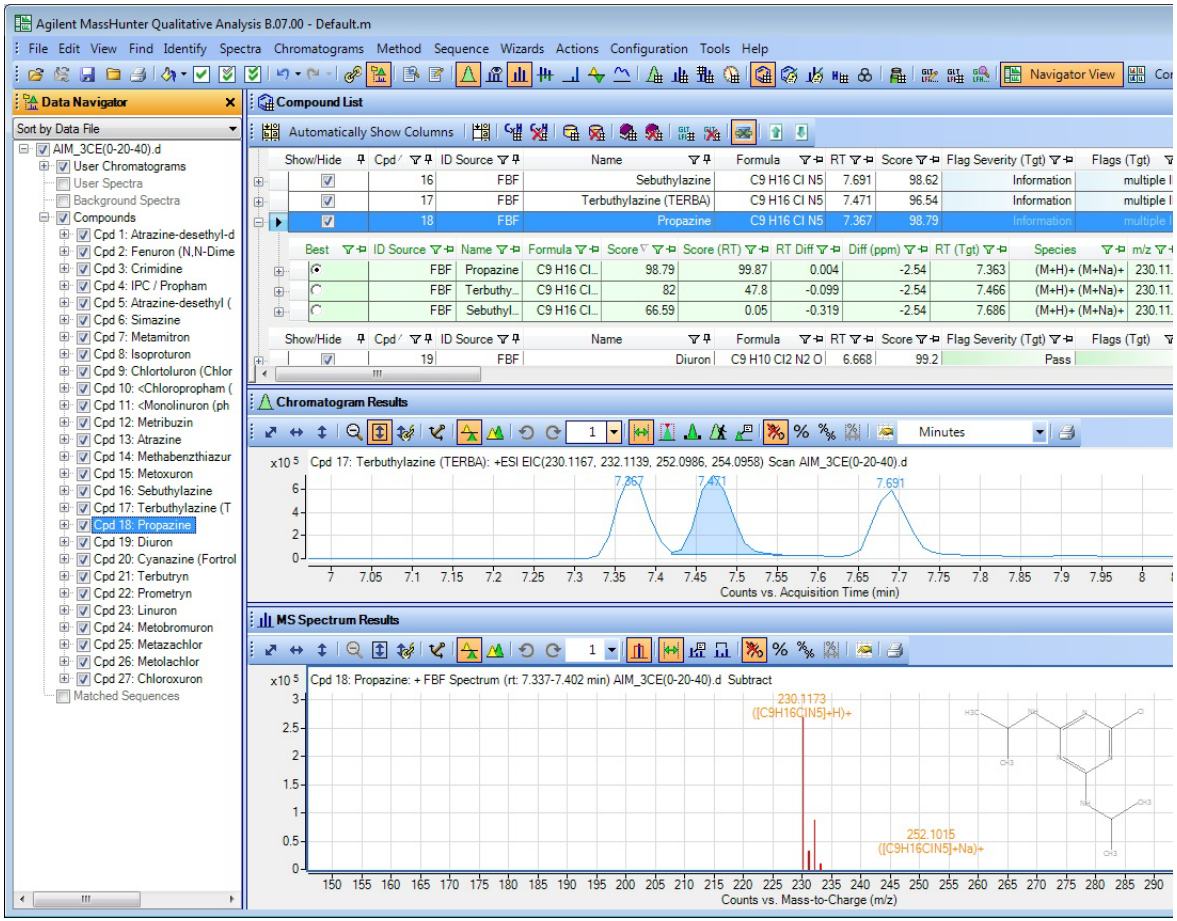


图 90 查看结构同分异构体 （如化合物 18：Propazine）的结果。

7 将方法保存为 *iii*All_Ions1 （其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写），然后关闭数据文件而不保存结果。

a 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。
b 键入 **iiiAll_Ions1.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。

任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找

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 0V、20V 和 40V。0V 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 20V 和 40V 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，125V、200V 和 275V）。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，需要打开“分子离子可选”模式。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 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
1 运行按分子式查找化合物算法以及碎片确认。 • 碎片确认使用来自高能量 (High-E) 通道的信息	**a** 完成第 138 页上的“任务 1. 在包含结构同分异构体的数据文件中运行按分子式查找”中的步骤。 **b** 单击“方法管理器”的“按分子式查找 - 选项”部分中的**碎片确认**选项卡。 **c** 选中**碎片离子确认**复选框。 **d** 单击**如果质谱库不可用，则使用平均碎片质谱图**按钮。 **e** 查看**碎片离子 EIC 定性设置**的参数。输入 90 作为**共流出得分**。 **f** 查看**碎片离子确认标准**的参数。单击**定性碎片离子的最小数量**并输入 1。	• 碎片离子来源可以是 PCDL 谱库中的 MS/MS 质谱图，也可以是来自数据文件中高能量通道的碎片质谱图。 • 如果是碎片质谱图，则是前级离子的流出轮廓图中的平均碎片质谱图。 • 假设**信噪比**至少为 5。 • 如果单击**定性碎片离子的最小百分比**按钮并且**质谱库中最大丰度离子的数量**是 5，如果最小百分比是 75%，则需要对其中的 4 个离子定性。（4/5 是 80%，大于 75%）

任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找

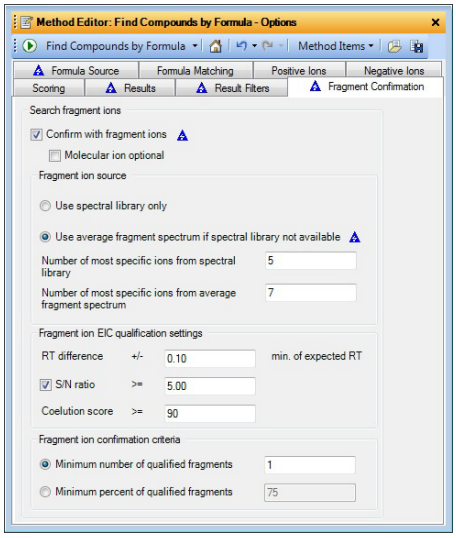
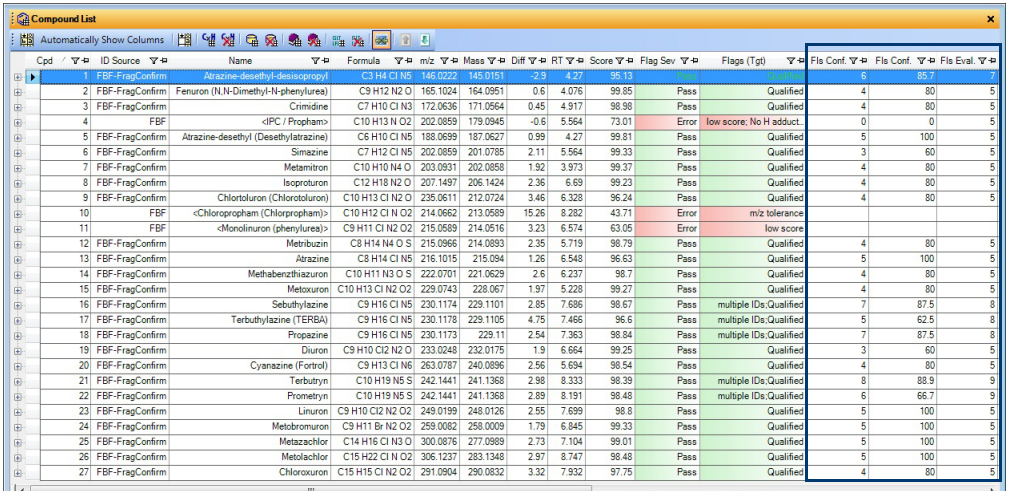
步骤	详细说明	注释
		

图 91 “按分子式查找化合物” > “碎片确认”选项卡

2 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**。 • 单击“方法编辑器”窗口中的 按钮。 • 右键单击“方法编辑器”窗口，然后单击**按分子式查找化合物**。	• 碎片确认将查找总保留时间、信噪比和共流出得分。

任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
3 查看“化合物列表”窗口中的结果。	**a** 右键单击“化合物列表”窗口的标题，并单击**浮动**。 **b** 使用快捷菜单在表中添加和删除列。 **c** 查看**碎片离子评估**列。 **d** 查看**碎片离子确认**列。 **e** 查看**碎片离子确认百分比**列。 **f** 查看**标记（目标化合物）**列中的值。	• **FI** 表示碎片离子。 • 第一个化合物没有 PCDL 质谱图，因此它使用数据文件中的平均碎片质谱图。评估的碎片离子的数量是 7。 • 结构同分异构体的评估的碎片离子数量也大于 5。 • **标记（目标化合物）**列显示来自低能量通道的信息以及来自高能量通道的 MS/MS 信息的组合结果。



Cpd	ID Source	Name	Formula	m/z	Mass	Diff	RT	Score	Flag Sev	Flags (Tgt)	FIs Conf.	FIs Conf.	FIs Eval.
1	FBF-FragConfirm	Atrazine-desethyl-desisopropyl	C3 H4 Cl N5	146.0222	145.0151	-2.9	4.27	95.13	Pass	Qualified	6	85.7	7
2	FBF-FragConfirm	Fenuron (N,N-Dimethyl-N-phenylurea)	C9 H12 N2 O	165.1024	164.0951	0.6	4.076	99.85	Pass	Qualified	4	80	5
3	FBF-FragConfirm	Crimidine	C7 H10 Cl N3	172.0636	171.0564	0.45	4.917	98.98	Pass	Qualified	4	80	5
4	FBF	<IPC / Propham>	C10 H13 N O2	202.0859	179.0945	-0.6	5.564	73.01	Error	low score; No H adduct..	0	0	5
5	FBF-FragConfirm	Atrazine-desethyl (Desethylatrazine)	C6 H10 Cl N5	188.0699	187.0627	0.99	4.27	99.81	Pass	Qualified	5	100	5
6	FBF-FragConfirm	Simazine	C7 H12 Cl N5	202.0859	201.0785	2.11	5.564	99.33	Pass	Qualified	3	60	5
7	FBF-FragConfirm	Metamitron	C10 H10 N4 O	203.0931	202.0858	1.92	3.973	99.37	Pass	Qualified	4	80	5
8	FBF-FragConfirm	Isoproturon	C12 H18 N2 O	207.1497	206.1424	2.36	6.69	99.23	Pass	Qualified	4	80	5
9	FBF-FragConfirm	Chlortoluron (Chlorotoluron)	C10 H13 Cl N2 O	235.0611	212.0724	3.46	6.328	96.24	Pass	Qualified	4	80	5
10	FBF	<Chloropropham (Chlorpropham)>	C10 H12 Cl N O2	214.0662	213.0589	15.26	8.282	43.71	Error	m/z tolerance			
11	FBF	<Monolinuron (phenylurea)>	C9 H11 Cl N2 O2	215.0589	214.0516	3.23	6.574	63.05	Error	low score			
12	FBF-FragConfirm	Metribuzin	C8 H14 N4 O S	215.0966	214.0893	2.35	5.719	98.79	Pass	Qualified	4	80	5
13	FBF-FragConfirm	Atrazine	C8 H14 Cl N5	216.1015	215.094	1.26	6.548	96.63	Pass	Qualified	5	100	5
14	FBF-FragConfirm	Methabenzthiazuron	C10 H11 N3 O S	222.0701	221.0629	2.6	6.237	98.7	Pass	Qualified	4	80	5
15	FBF-FragConfirm	Metoxuron	C10 H13 Cl N2 O2	229.0743	228.067	1.97	5.228	99.27	Pass	Qualified	4	80	5
16	FBF-FragConfirm	Sebuthylazine	C9 H16 Cl N5	230.1174	229.1101	2.85	7.686	98.67	Pass	multiple IDs;Qualified	7	87.5	8
17	FBF-FragConfirm	Terbuthylazine (TERBA)	C9 H16 Cl N5	230.1178	229.1105	4.75	7.466	96.6	Pass	multiple IDs;Qualified	5	62.5	8
18	FBF-FragConfirm	Propazine	C9 H16 Cl N5	230.1173	229.11	2.54	7.363	98.84	Pass	multiple IDs;Qualified	7	87.5	8
19	FBF-FragConfirm	Diuron	C9 H10 Cl2 N2 O	233.0248	232.0175	1.9	6.664	99.25	Pass	Qualified	3	60	5
20	FBF-FragConfirm	Cyanazine (Fortrol)	C9 H13 Cl N6	263.0787	240.0896	2.56	5.694	98.54	Pass	Qualified	4	80	5
21	FBF-FragConfirm	Terbutryn	C10 H19 N5 S	242.1441	241.1368	2.98	8.333	98.39	Pass	multiple IDs;Qualified	8	88.9	9
22	FBF-FragConfirm	Prometryn	C10 H19 N5 S	242.1441	241.1368	2.89	8.191	98.48	Pass	multiple IDs;Qualified	6	66.7	9
23	FBF-FragConfirm	Linuron	C9 H10 Cl2 N2 O2	249.0199	248.0126	2.55	7.699	98.8	Pass	Qualified	5	100	5
24	FBF-FragConfirm	Metobromuron	C9 H11 Br N2 O2	259.0082	258.0009	1.79	6.845	99.33	Pass	Qualified	5	100	5
25	FBF-FragConfirm	Metazachlor	C14 H16 Cl N3 O	300.0876	277.0989	2.73	7.104	99.01	Pass	Qualified	5	100	5
26	FBF-FragConfirm	Metolachlor	C15 H22 Cl N O2	306.1237	283.1348	2.97	8.747	98.48	Pass	Qualified	5	100	5
27	FBF-FragConfirm	Chloroxuron	C15 H15 Cl N2 O2	291.0904	290.0832	3.32	7.932	97.75	Pass	Qualified	4	80	5

图 92 “化合物列表”窗口，包含碎片离子的三个新列

任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找

步骤	详细说明	注释
4 查看“化合物列表”表中的其他级别。	• 展开“化合物列表”表以查看化合物 19。	• 三个碎片离子已定性。**标记（碎片离子）**列显示碎片离子是否已定性。如果碎片离子未定性，**标记 （碎片离子）**列将显示碎片离子未定性的原因。

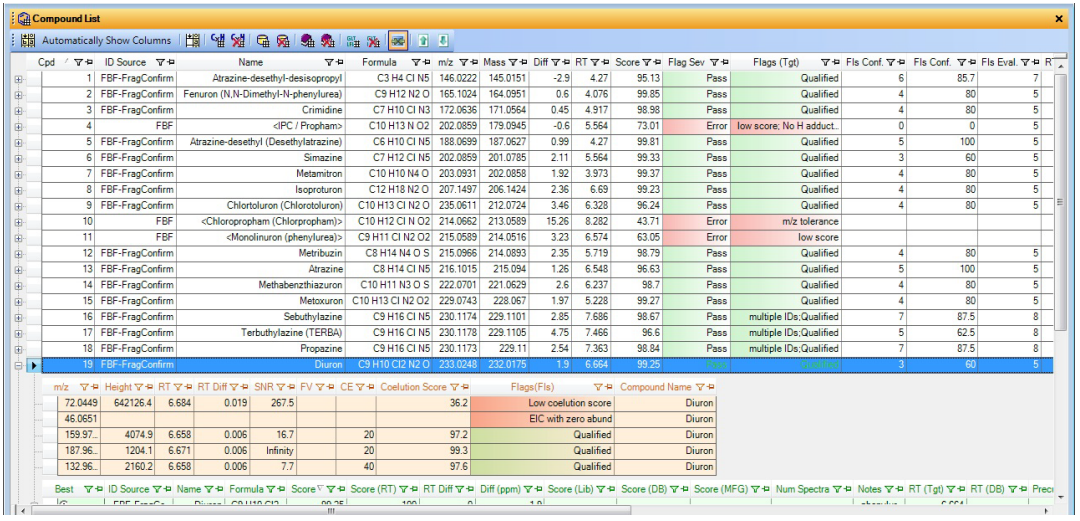


图 93 包含碎片离子表的“化合物列表”表

5 将方法保存为 *iii*All_Ions2，其中“*iii*”是您的姓名首字母缩写。	**a** 从菜单中单击**方法 > 另存为**。 **b** 键入 **iiiAll_Ions2.m**。 **c** 单击**保存**。

任务 3. 在 “化合物详细信息视图” 中查看结果

使用 “化合物详细信息视图” 可以只查看一个数据文件，并查看该数据文件中的各个化合物。在 “化合物详细信息视图” 中，可以在共流出图谱中直观地了解碎片离子如何共流出。

任务 2. 在 “化合物详细信息视图” 中查看碎片确认结果

步骤	详细说明	注释
1 切换到**化合物详细信息视图**。	**a** 完成第 144 页上的 “任务 2. 对以所有离子 MS/MS 模式采集的数据运行按分子式查找” 中的步骤。 **b** 单击主工具栏中的 Compound Details View 按钮。 **c** 切换到 “化合物列表” 窗口中的不同化合物。您可以单击 “化合物列表” 工具栏中的箭头按钮，单击 “化合物列表” 窗口中的每行，或按键盘上的箭头键。	• “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以及共流出曲线。 • “化合物 MS 质谱图结果” 显示来自低能量通道的质谱图。 • “化合物碎片质谱图结果” 窗口显示所有高能量通道的平均质谱图。

任务 2. 在 “化合物详细信息视图”中查看碎片确认结果

步骤	详细说明	注释

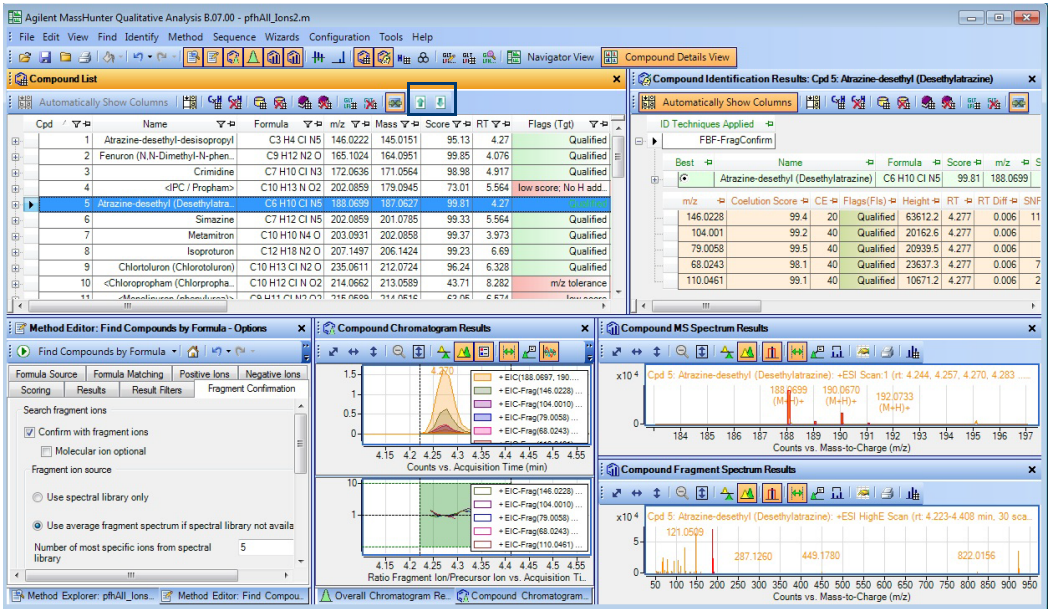


图 94 “化合物详细信息视图”

任务 2. 在 “化合物详细信息视图” 中查看碎片确认结果

步骤	详细说明	注释
2 查看**化合物 3：Crimidine**。	**a** 单击 “化合物列表” 窗口中的**化合物 3：Crimidine**。 **b** 检查 “化合物识别结果” 窗口中的**共流出得分**、**CE**、**标记（碎片离子）**和**信噪比**列。 **c** 在 “化合物 MS 质谱图结果” 窗口中查看 MS 质谱图。	• 对此化合物定性了五个碎片离子中的四个。 • 五个碎片离子中四个碎片离子的信噪比 (SNR) 值大于 5。 • 碎片离子的碰撞能量都不相同。 • “化合物 MS 质谱图结果” 窗口包含已清理的按分子式查找质谱图（使用分子式和加合物离子进行标注）以及原始质谱图。

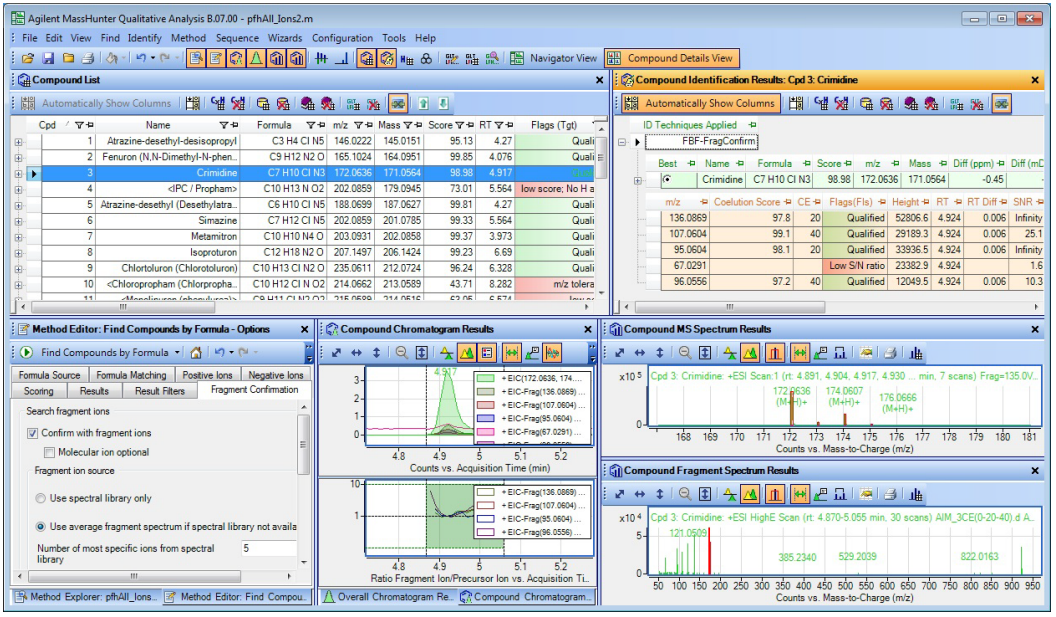


图 95 化合物 3 有一个碎片离子的信噪比较低

任务 2. 在 “化合物详细信息视图” 中查看碎片确认结果

步骤	详细说明	注释
3 在 “化合物识别结果” 窗口中查看其他级别。	**a** 右键单击 “化合物识别结果” 窗口的标题，并单击**浮动**。 **b** 展开 “化合物识别结果” 窗口以查看化合物 2。 **c** 查看**分数 (MS)** 的结果。 **d** 检查两个已定性的碎片离子的**共流出得分**值，这些值超过了 99%。**共流出得分**不会直接影响**分数（目标化合物）**值。	• **分数 (MS)** 由**分数（质量）**、**分数（同位素丰度）**和**分数（同位素差）**值确定。 • **分数（目标化合物）**是 99.85，由**分数 (RT)** 和**分数 (MS)** 确定。 • 此化合物已定性，可在定性分析程序中设置为在 TOF 或 Q-TOF 系统中使用碎片离子确认进行目标分析。

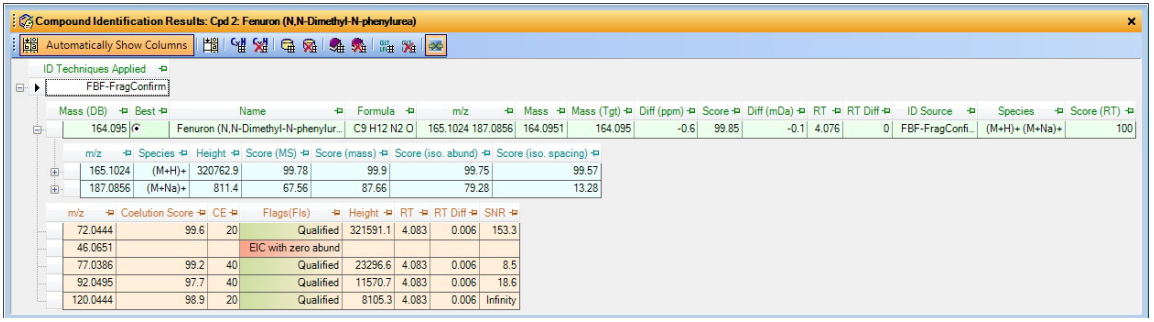


图 96 包含碎片离子表的 “化合物列表” 表

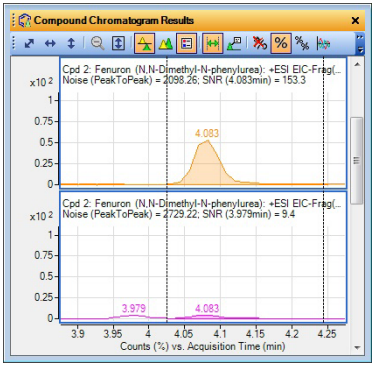
4 在 “化合物碎片质谱图结果” 窗口中查看结果。	**a** 单击 “化合物碎片质谱图结果” 窗口中的 按钮。 **b** 在 30 至 190 的 *m/z* 范围中放大。 **c** 观察定性碎片离子标记为绿色。	• 某些碎片离子未标记，因为它们接近其他已标记的峰。 • 该质谱图是平均质谱图，由两个 CE 值组成：20 和 40 伏特。



图 97 “化合物碎片质谱图结果” 窗口

任务 2. 在 “化合物详细信息视图” 中查看碎片确认结果

步骤	详细说明	注释
5 在 “化合物色谱图结果” 窗口中查看结果。	**a** 单击化合物色谱图结果工具栏中的 按钮。 **b** 单击 按钮。 **c** 滚动浏览每个碎片离子的 EIC 以及前级离子的 EIC。 **d** 单击化合物色谱图结果工具栏中的 按钮以显示 “共流出曲线” 窗格。 **e** 单击 按钮可叠加色谱图。 **f** 单击 % 按钮可调整色谱图。 **g** 在图例中，找到在 “共流出曲线” 窗格中识别每个碎片离子和前级离子的 EIC 的颜色。	• EIC 碎片包括在每个碎片离子色谱图的标题中，这些 EIC 是从最佳碰撞能量电压通道提取的。 • 在叠加的色谱图图形中，您可以直观地看到色谱图是共流出的，高共流出得分也反映了这一点。 • 共流出得分将比较碎片离子和前级离子的保留时间，以及峰宽和峰对称因子。 • 如果碎片是共流出的，则大多数色谱峰的离子比应接近 1。 • 在共流出曲线的开头和结尾处，可以看到一些较大的值，因为某些噪音被放大了。



在共流出曲线中，在 1 处绘制的黑线显示完全共流出峰的值。其他五条线显示归一化的碎片离子与前级离子的时间范围内的前级离子的丰度比。绿色区域显示置信区域。

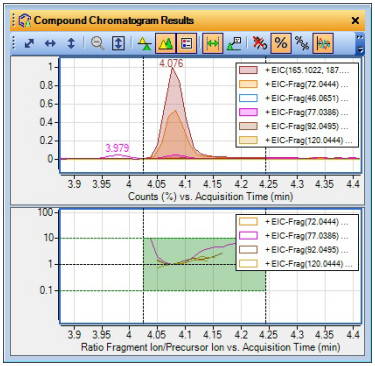


图 98 “化合物色谱图结果” 窗口

6 关闭数据文件，返回到 “浏览器视图”。	**a** 单击**文件 > 关闭数据文件**。 **b** 单击主工具栏中的 Navigator View 按钮。	



参考

浏览器视图和化合物详细信息视图 156
使用窗口 157
处理 “数据浏览器”中的结果数据 160
对色谱图执行操作 161
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作 162
处理色谱图直观数据 163
使用质谱图直观数据 165
工作流程 166
自定义报告模板 171

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。

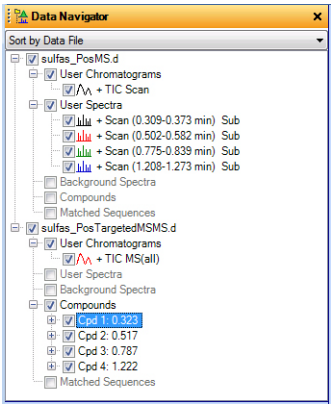
工具栏图标	窗口
	“数据浏览器”窗口 “方法管理器”窗口 “方法编辑器”窗口
	“色谱图结果”窗口 “质谱图预览”窗口 “MS 质谱图结果”窗口 “质谱图对比结果”窗口 “解卷积结果”窗口 “解卷积镜像图”窗口 “UV 光谱图结果”窗口
	“积分峰列表”窗口 “MS 质谱峰列表 1”窗口 “MS 质谱峰列表 2”窗口 “MS 实际值”窗口

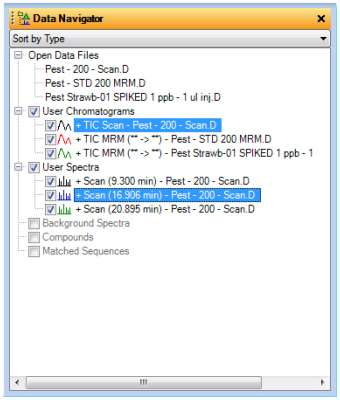
工具栏图标	窗口
	“化合物列表”窗口 “化合物识别结果”窗口 “质谱图识别结果”窗口 “MS/MS 分子式详细信息”窗口 “结构查看器”窗口 “样品信息”窗口 “序列编辑器”窗口

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）。

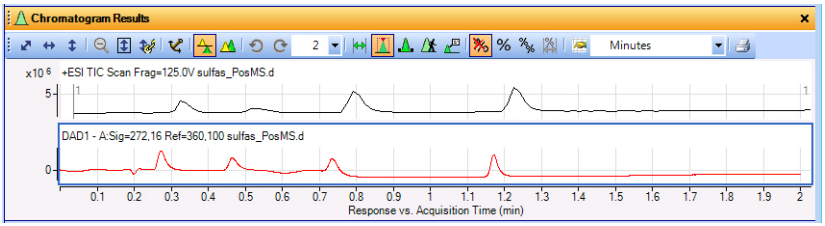
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作

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）
使用去卷积 （溶解同位素）法	质谱 > 去卷积 （溶解同位素）
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

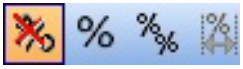
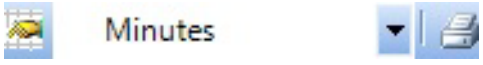
处理色谱图直观数据

“色谱图结果”窗口



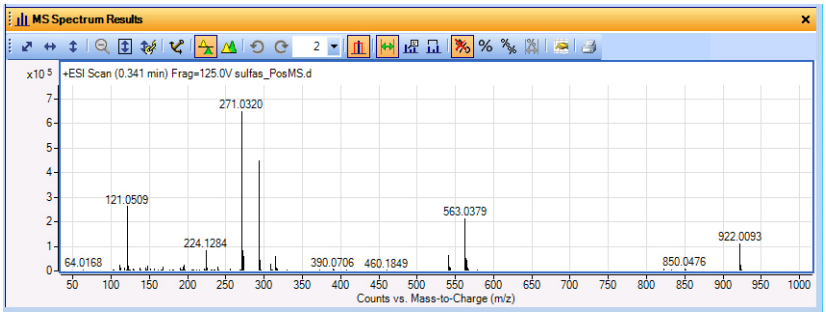
色谱图结果工具

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

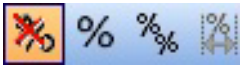
使用质谱图直观数据

“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
BioConfirm 完整蛋白质	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm 工作流程
BioConfirm 高质量完整蛋白质	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm 工作流程
BioConfirm 小寡核苷酸	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm 工作流程
BioConfirm 大寡核苷酸	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm 工作流程
BioConfirm 蛋白质消解物	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm 工作流程
BioConfirm 合成肽	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm 工作流程
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

工作流程	方法	布局	“方法编辑器”部分
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

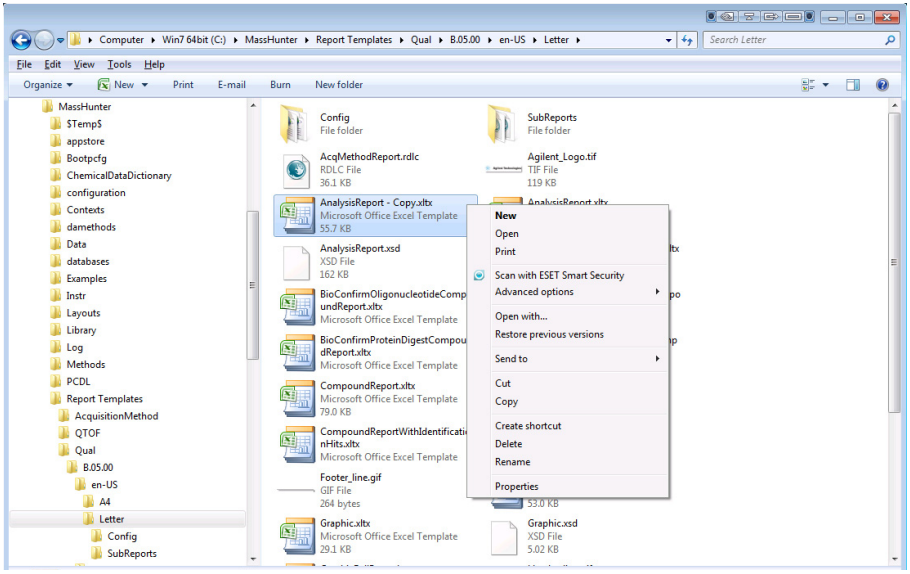
自定义报告模板

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。

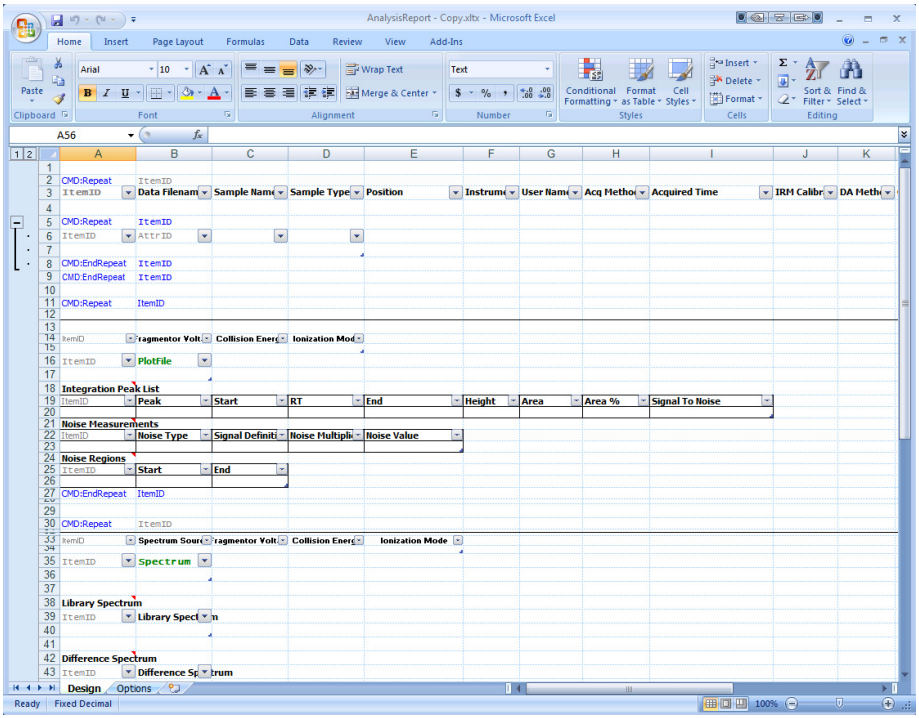
2 创建要修改的模板的副本。

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**。



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 LC/MS 数据的信息。

© Agilent Technologies, Inc. 2014

修订版 A， 2014 年 9 月

G3336-97023

Agilent Technologies