

Agilent MassHunter Workstation 软件 定性分析

GC/MS 入门指南



Agilent Technologies

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2017

根据美国和国际版权法，未经 Agilent Technologies, Inc. 事先同意和书面许可，不得以任何形式、任何方式（包括存储为电子版、修改或翻译成外文）复制本手册的任何部分。

手册部件号

G3335-97197

版本

修订版 A，2017 年 1 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

本指南在被取代前适用于 Agilent MassHunter Workstation 软件 - 定性分析软件的 B.08.00 及更高版本。

担保说明

本文档内容按“原样”提供，在将来的版本中如有更改，恕不另行通知。此外，在适用法律允许的最大范围内，Agilent 对本手册以及此处包含的任何信息不作任何明示或暗示担保，包括但不限于适销性和针对某一特殊用途的适用性的暗示担保。对于因提供、使用或执行本手册或此处包含的任何信息而产生的错误，或造成的偶然或必然的损失，Agilent 不承担任何责任。如果 Agilent 与用户签订了单独的书面协议，其中涉及本文档内容的担保条款与这些条款冲突，则以协议中的担保条款为准。

技术许可

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

权力限制说明

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 FAR12.211（技术数据）和 12.212（计算机软件）和（对于国防部）DFARS252.227-7015（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。不要忽视小心提示，直到完全理解和符合所指出的条件。

警告

“警告”声明表示存在危险。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。除非已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视“警告”声明而继续进行操作。

本指南内容提要

本指南包含有关学习如何使用 **Agilent MassHunter Workstation** 软件 - 定性分析 GC/MS 数据的信息。定性分析软件包含两个主要程序。

- 定性分析导航器 - 您可以使用此程序检查色谱图和质谱图并在质谱图中识别离子。它特别适合对数据进行手动临时检查。
- 定性分析工作流程 - 您可以使用此程序的化合物挖掘算法在数据中查找化合物的证据。您也可以根据该证据使用其识别算法来识别未知的化合物。

每个程序都有不同的窗口。这两个视图中提供以下窗口：

- 方法编辑器
- 对比结果
- 结构查看器
- 分子式计算器
- 质量计算器

“定性分析导航器”程序

在此程序中，您可以使用“数据浏览器”窗口以交互方式选择不同的质谱图和色谱图。可为这些质谱图生成分子式或在谱库 / 数据库中检索它们。

如果您查看的是手动提取或通过**积分并提取峰质谱图**算法提取的质谱图，则您要使用此程序。

“定性分析工作流程”程序

此程序提供一个或多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。可在“样品表”中的不同数据文件之间切换。

如果您要使用任何化合物挖掘算法，应使用此程序。

如果您正在使用其中任一程序并决定也需要使用另一个程序中提供的工具，可使用“启动”菜单启动该程序。您也可以指定当前打开的哪个数据文件应在启动的程序中打开。

开始练习之前，请阅读第 7 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，您将了解“定性分析导航器”程序多种强大功能中的一部分。无论您使用的数据类型是什么，这些任务都至关重要。

练习 2 查找和识别

在这些任务中，您将在 GC/MS 数据文件中查找和识别化合物。可使用“定性分析工作流程”程序来执行化合物挖掘。也可在此程序中识别这些化合物。

练习 3 使用工作流程、导出和打印

在这些任务中，您将了解如何设置和运行工作流程。这些任务中的每一种都使用不同的工作流进行操作。

参考

在本章中，您将学习有关定性分析程序的基本知识。

新增功能

B.08.00

以下功能同时适用于“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序。

- 支持 Windows 10 和 Windows 7。
- 支持 Microsoft Excel 2016。
- 菜单和窗口已简化。
- “方法管理器”窗口和“方法编辑器”窗口已组合成一个窗口。
- 所有工具栏都已简化。
- 用户界面配置将根据调用的一个或多个文件而自动设置。
- 根据所调用数据文件的类型，仅提供相关的菜单和窗口。
- 数据库检索和谱库检索组合在一起，作为单项操作运行。本软件将根据您的数据以及选定的数据库 / 谱库自动运行正确的操作。
- 可以为方法自动处理选择以下四个工作流程之一：**目标物 / 可疑物筛选、样品纯度、化合物探索和自定义**。在“定性分析导航器”程序中，您只能运行自定义工作流程。在“定性分析工作流程”程序中，您可以运行所有这些工作流程。
- 运行工作流程时，可以提取附加色谱图。
- 可从“方法”菜单运行工作流程。
- 图谱中不再显示用于指明上次单击位置的灰线。一条灰色的垂直线指明当前在图谱中的位置，但是当光标不在该窗口中时，将不显示此线。
- 定性分析软件使用与 MassHunter 定量分析程序共享的最新版算法。

- 定性分析方法和结果可以向后兼容。
- 在定性分析程序中删除了 **BioConfirm** 功能。

以下功能适用于 “定性分析导航器” 程序。

- “峰选择” 工具是 “色谱图结果” 窗口的缺省工具。
- “峰选择” 工具的行为方式与 “范围选择” 工具的相似之处在于，如果色谱图未积分，您可以使用任一工具选择任意范围。但是，如果色谱图已积分且您绘制的范围覆盖一个或多个峰，则 “峰选择” 工具将选择这些峰的 **RT** 范围。
- “谱图预览” 窗口将自动关闭。
- 如果安装了 **BioConfirm**，您可以从 “定性分析导航器” 程序启动 **BioConfirm**。

“定性分析工作流程” 程序具有以下功能。

- 与查找化合物相关的所有功能都在 “定性分析工作流程” 软件中。
- 可为目标物 / 可疑物筛选工作流程和化合物探索工作流程选择 “自动选择化合物挖掘”。
- 化合物探索工作流程自动运行化合物识别工作流程。
- 对 **GC/TOF** 或 **GC/Q-TOF** 数据运行按碎片查找算法。
- 可为每个工作流程指定不同的报告模板。
- “化合物列表” 窗口中有 “分数 (碎片比例)” 列。
- **GC/Q-TOF** 全离子工作流程支持 **CI**。
- 对 **GC/Q-TOF EI** 数据运行碎片确认时，您可以创建 **CEF** 文件。

- 可在样品色谱图上叠加选定化合物的色谱图。
- “样品色谱图结果”窗口中提供了“提取色谱图”按钮。
- 在化合物 MS 或 MS/MS 质谱图中双击时，您可以提取 EIC。
- 在样品色谱图中双击时，会提取化合物并将其添加到“化合物列表”窗口，该挖掘算法是质谱图提取。
- “化合物色谱图结果”窗口具有相对缩放功能。
- “样品表”窗口显示样品信息细节和结果摘要。可编辑样品准备参数。
- “化合物列表”窗口的标题栏显示摘要细节。
- 化合物列表按列的类别对列分组。
- 化合物列表只有一个级别。
- 按分子特征查找算法支持查找 GC/MSD 和 GC/Q-TOF 数据的特征。
- 创建包含 MFE 化合物的 CEF 文件时，会包括 Q- 分数。
- Agilent Walkup 程序中提供了新的定性分析列。
- Agilent Data Acquisition for TOF/Q-TOF 程序中提供了新的定性分析列。

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
任务 1. 打开“定性分析导航器”程序	12
任务 2. 放大和缩小色谱图	15
任务 3. 锚定色谱图	17
任务 4. 更改窗口布局	18
任务 5. 提取色谱图	20
任务 6. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分	23
任务 7. 计算系统适用性值	28
任务 8. 从色谱图中提取质谱图	32
任务 9. 添加注释	42
任务 10. 添加质量卡尺	46
练习 2 查找和识别	49
任务 11. 按色谱图解卷积查找化合物	50
任务 12. 使用检索谱库 / 数据库算法识别化合物	54
任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）	57
任务 14. 按积分查找化合物	61
任务 15. 按碎片查找	64
任务 16. 在谱库中检索质谱图	71
任务 17. 保存结果	75
练习 3 使用工作流程、导出和打印	79
任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程	79
任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法	83
任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法	87
任务 21. 导出 CEF 文件	90

任务 22. 打印分析报告	93
任务 23. 打印化合物报告	97

参考 101

“定性分析导航器”程序	102
主要功能区	102
窗口 - “定性分析导航器”程序	106
“定性分析工作流程”程序	116
主要功能区	116
窗口 - 定性分析工作流程	118
“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序	130
布局	130
自定义报告模板	132



练习 1

了解定性分析的基本知识

- 任务 1. 打开“定性分析导航器”程序 12
- 任务 2. 放大和缩小色谱图 15
- 任务 3. 锚定色谱图 17
- 任务 4. 更改窗口布局 18
- 任务 5. 提取色谱图 20
- 任务 6. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分 23
- 任务 7. 计算系统适用性值 28
- 任务 8. 从色谱图中提取质谱图 32
- 任务 9. 添加注释 42
- 任务 10. 添加质量卡尺 46

在本练习中，您将了解用于处理 GC/Q-TOF 和 GC/QQQ 数据的“定性分析导航器”程序多种强大功能中的一部分。可在“定性分析工作流程”程序中执行许多这样的基本任务，但实际步骤可能不同。

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。



1 了解定性分析的基本知识

任务 1. 打开 “定性分析导航器” 程序

任务 1. 打开 “定性分析导航器” 程序

在此任务中，您将使用当前方法在“定性分析导航器”程序中打开多个数据文件。

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。 <ul style="list-style-type: none">打开数据文件 Pest - 200 - Scan.d、Pest - STD 200 MRM.d、Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 和 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d，这些文件在文件夹 \\MassHunter\Data 中或您将其复制到的文件夹中。	<p>a 双击 Agilent MassHunter 定性分析导航器 B.08.00 图标 。</p> <p>系统将显示 “打开数据文件” 对话框。</p> <p>b 转到文件夹 \\MassHunter\Data\GCMS Pesticide 或示例文件所在的文件夹。</p>	<ul style="list-style-type: none">Pest - 200 - Scan.d 文件包含 MS 数据，Pest - STD 200 MRM.d 和 Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 文件包含 MS 和 MS/MS 数据（所有 GC/QQQ）。MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 包含 GC/Q-TOF 数据。当窗口处于活动状态时，通过按 F1 键可以获取大多数窗口、对话框和选项卡的帮助。如果文件在其他文件夹，请单击 文件 > 打开数据文件。

- 确保选中**使用当前方法**按钮。
- 确保**调用结果数据**复选框已清除或显示为灰色。如果**调用结果数据**复选框不可用，则没有在数据文件中保存任何结果。可在第 75 页上的“**任务 17. 保存结果**”中了解如何保存结果。

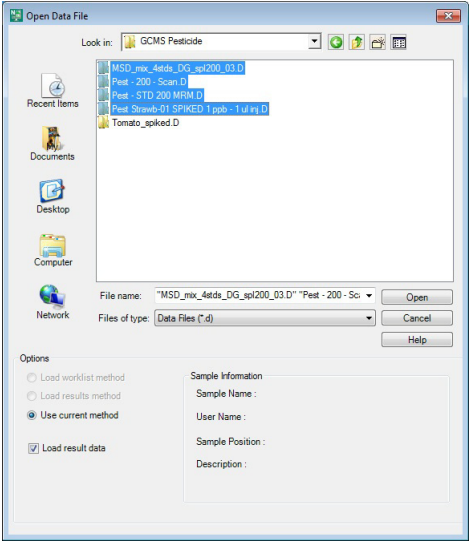



图 1 打开软件时打开数据文件

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	在按住 Shift 键的同时单击 MSD_mix_4stds_DB_spi200_03.d , 然后单击 Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d .	<ul style="list-style-type: none"> 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。
d	单击 打开 。“数据浏览器”窗口中将显示所有的四个数据文件,“色谱图结果”窗口中将显示 1 到 4 个色谱图。	<ul style="list-style-type: none"> 单击“列表模式”图标时, 图标的背景将变为橙色。
e	在“色谱图结果”工具栏中, 单击 列表模式图标 ().	

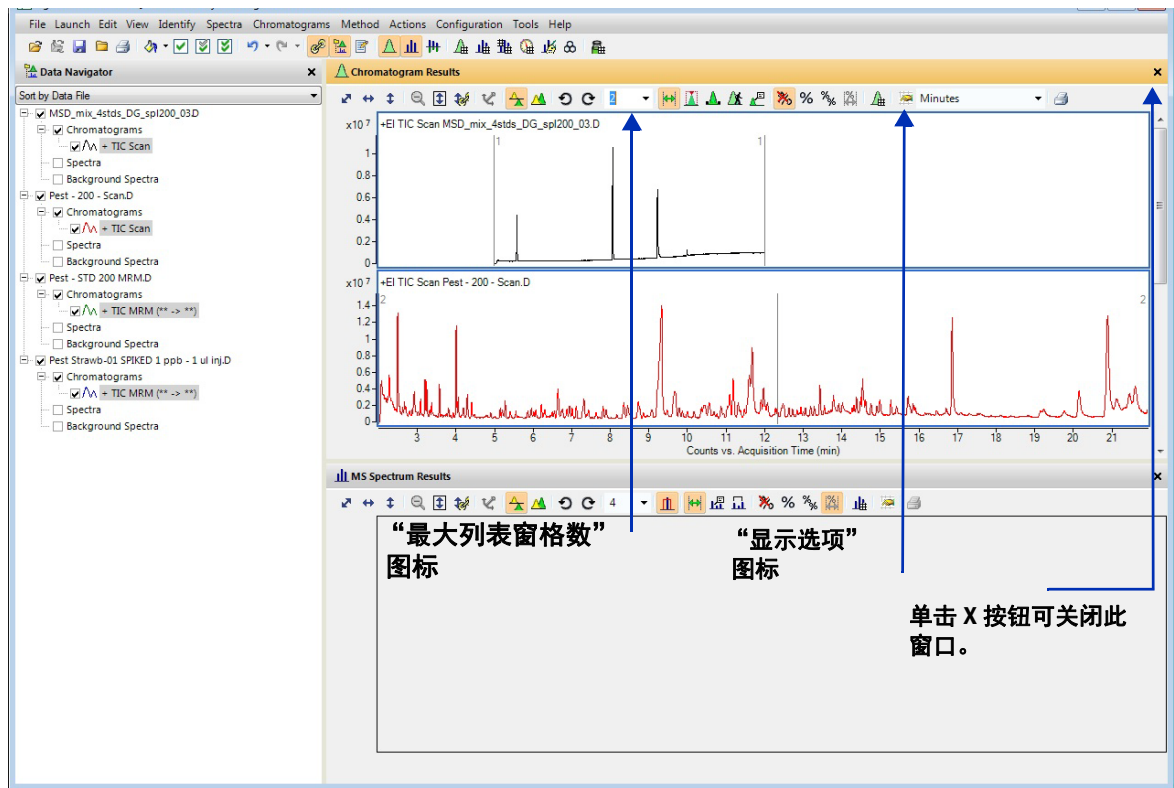


图 2 “定性分析” 主窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 1. 打开 “定性分析导航器” 程序





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 将主窗口恢复到缺省布局和方法。 <ul style="list-style-type: none">确保您可看到全部四个色谱图。	<ul style="list-style-type: none">a 如有必要，单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。b 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，然后选择 4。c 单击方法 > 打开。d 选择 <i>default-GCMS.m</i>。e 单击打开。f 系统可能会询问您是否对当前方法保存方法更改。单击是或否。	<ul style="list-style-type: none">• “定性分析导航器” 程序具有自适应用户界面，可根据您打开的数据文件类型自动进行配置。

任务 2. 放大和缩小色谱图

在此任务中，您将熟悉“定性分析导航器”程序的放大和缩小功能。您也可以使用“定性分析工作流程”程序中的缩放功能。




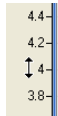
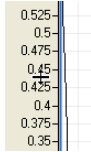

任务 2. 放大和缩小色谱图

步骤	详细说明	注释
1 仅练习放大和缩小四个色谱图中的一个（X 轴和 Y 轴）。 <ul style="list-style-type: none">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。	<p>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。</p> <p>b 确保没有针对下一步选择在缩放期间自动调整 Y 轴图标 。</p> <p>c 单击鼠标右键并拖动到最后一个峰的某个区域之上。</p> <p>d 重复步骤 c。</p> <p>e 单击工具栏中的在缩放期间对 Y 轴自动调整图标 。</p> <p>f 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。“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序会自动将 Y 轴调整到该范围内的最大点。</p> <p>g 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。</p> <p>h 单击对 X 轴和 Y 轴自动调整图标  以完全缩小。</p>	<ul style="list-style-type: none">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。所选图标的背景颜色为橙色。在“定性分析导航器”程序中，您也可以在其他图谱窗口中的质谱图上使用这些缩放功能。在“定性分析工作流程”程序中，您可以在“样品色谱图结果”窗口、“化合物色谱图结果”窗口、“化合物 MS 质谱图结果”窗口和“质谱对比结果”窗口中使用这些功能。

1 了解定性分析的基本知识

任务 2. 放大和缩小色谱图

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。 <ul style="list-style-type: none">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。	<p>a 要放大 X 轴，请将光标移到 X 轴值，直到出现水平双箭头。</p>	 <p>水平双箭头</p>
	<p>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。</p>	
	<p>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。</p>	 <p>右键单击 X 轴值时，将出现新的光标。</p>
	<p>d 单击对 X 轴自动调整图标  完全缩小 X 轴。</p>	
	<p>a 要放大 Y 轴，请将光标移到 Y 轴值，直到出现垂直双箭头。</p>	 <p>垂直双箭头</p>
	<p>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。</p>	
	<p>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。</p>	 <p>右键单击 Y 轴值时，将出现新的光标。</p>
	<p>d 单击对 Y 轴自动调整图标  完全缩小 Y 轴。</p>	

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
<div><div>• 锚定色谱图。<ul style="list-style-type: none">• 显示所有色谱图。• 确保将色谱图查看列表设置为 1。• 在“色谱图结果”窗口中，选择第二个 TIC。• 锚定此 TIC。• 滚动浏览色谱图。• 清除锚。</div></div>	<div><div><div>a 在“数据浏览器”中，标记与在以前的任务中隐藏的色谱图对应的复选框。</div><div>b 在“色谱图结果”窗口中将最大窗格数设置为 1。</div><div>c 在“色谱图结果”窗口中，根据需要滚动并选择第二个 TIC。</div><div>d 在该色谱图中单击鼠标右键，然后单击设置锚。</div><div>e 使用“色谱图结果”窗口中的滚动条滚动浏览色谱图列表。第二个 TIC 始终作为第一个色谱图处于可见状态。</div><div>f 单击色谱图 > 清除锚。</div></div></div>	<div><div>• 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。</div><div>• 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。</div><div>• 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。</div><div>• 不能在“定性分析工作流程”程序中锚定色谱图或质谱图。</div></div>

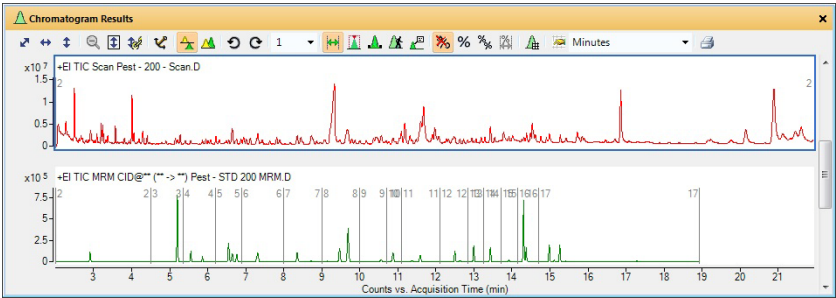


图 3 “色谱图结果”窗口中锚定的 TIC

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。可在“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序中保存布局。

任务 4. 更改窗口布局

步骤	详细说明	注释
1 更改窗口布局： <ul style="list-style-type: none">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。	<ul style="list-style-type: none">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。您也可以双击窗口的标题栏以使窗口浮动。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 4 所示。	<ul style="list-style-type: none">如果解除布局锁定，则系统不会在“锁定布局”菜单旁边显示选中标记。您只能在解除布局锁定时使用重新定位工具。此外，通过双击窗口的标题栏，也可以使窗口浮动。该软件创建了许多不同的布局。您还可以尝试调用不同的布局。该软件具有多个不同的工作流程。每个工作流程调用的布局都不同。此外，切换到不同的工作流程时，布局也将随之更改。

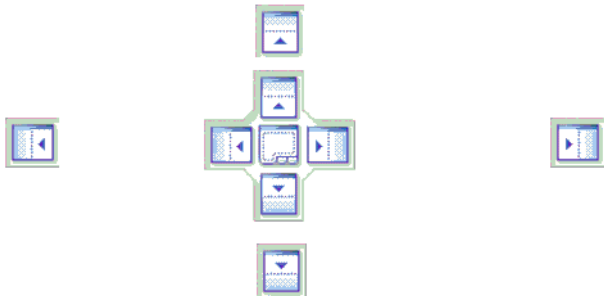


图 4 窗口重新定位工具

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。 <ul style="list-style-type: none">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。	<ul style="list-style-type: none">通过标题栏拖动窗口时，如果将光标拖动到某个较小的图标之上，则会将正在拖动的窗口置于其他所有窗口的上方、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。要将浮动窗口恢复到其最近停靠的位置，您可以双击其标题栏或右键单击窗口的标题栏并单击浮动。单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。	<ul style="list-style-type: none">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恢复缺省布局。如果调用了其他布局，则需要改为调用该布局。要调用布局，请单击配置 > 窗口布局 > 调用布局。

任务 5. 提取色谱图

在此任务中，您将使用“定性分析导航器”程序从原始 TIC 提取并合并色谱图。在“定性分析工作流程”程序中，使用“样品色谱图结果”窗口的工具栏上的“提取色谱图”工具时，您可以提取附加色谱图。

任务 5. 提取色谱图

步骤	详细说明	注释
1 从 Pest - 200 - Scan.d 数据文件中的两个质量提取提取离子色谱图 (EIC)。 <ul style="list-style-type: none">• m/z 值为 129.0 和 414.2。• 请勿将各个质量中的峰合并到一个色谱图中。	<ul style="list-style-type: none">a 在“数据浏览器”窗口中，清除 Pest - 200 - Scan.d 以外的数据文件对应的复选框。b 使用下列选项或右侧的选项之一，打开“提取色谱图”对话框：<ul style="list-style-type: none">• 单击色谱图 > 提取色谱图。c 在已打开的数据文件列表中，单击 Pest - 200 - Scan.d。d 在类型列表框中，选择 EIC。e 在 m/z 值框中，键入 129.0, 414.2。f 如果有必要，清除将多个质量合并到一个色谱图中复选框以合并这些 EIC。g 如有必要，清除提取时积分复选框。h 单击确定。i 在“色谱图结果”工具栏中将最大列表窗格数设置为 4 或更多。	<ul style="list-style-type: none">• 您还可以采用下列方法之一来提取色谱图：<ul style="list-style-type: none">• 在色谱图中单击鼠标右键，然后单击提取色谱图。• 在“数据浏览器”中，选中与 Pest - 200 - Scan.d 对应的 TIC 扫描，然后右键单击 TIC 扫描 并单击提取色谱图。• 您可以对全部或 MS 使用 MS 级别。• 请注意，您还可以选择在提取后对提取的色谱图自动进行积分。• 也可以从质谱图中提取色谱图。• 只有三个色谱图显示在“色谱图结果”窗口中，因为只有三个色谱图可用。

任务 5. 提取色谱图（续）

步骤	详细说明	注释
	<div>The 'Extract Chromatograms' dialog box is shown. It has a 'List of opened data files' on the left containing: MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D, Pest - 200 - Scan.D, Pest - STD 200 MRM.D, and Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul. The 'Type' is set to 'EIC'. There are tabs for 'MS Chromatogram', 'Advanced', and 'Excluded Masses'. Under 'MS Chromatogram', 'MS level' is 'All', 'Polarity' is 'Positive', 'Scans' is 'All scan types', 'm/z of interest' is 'Any', and 'm/z value(s)' is '129.0, 414.2'. There is a checkbox for 'Merge multiple masses into one chromatogram' which is unchecked. 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom right.</div>	
	<div>The 'Chromatogram Results' window displays three stacked chromatograms. The top plot is '+TIC Scan Pest - 200 - Scan.D' (x10^7). The middle plot is '+EI EIC(129.0000) Scan Pest - 200 - Scan.D' (x10^6). The bottom plot is '+EI EIC(414.2000) Scan Pest - 200 - Scan.D' (x10^5). All three plots share a common x-axis labeled 'Counts vs. Acquisition Time (min)' ranging from 3 to 21. The y-axis for each plot represents signal intensity. The bottom plot shows a single sharp peak at approximately 20.5 minutes.</div>	
	<div>图 5“提取色谱图”对话框</div>	
	<div>图 6合并后的提取离子色谱图 (EIC)（与原始 TIC 比较）</div>	
2	<div>从 Pest - 200 - Scan.d 数据文件中的两个质量提取提取离子色谱图 (EIC)。<ul style="list-style-type: none">• m/z 值为 129.0 和 414.2。• 将各个质量的峰合并到一个色谱图中。</div>	<div><div>a 打开“提取色谱图”对话框。单击色谱图 > 提取色谱图。</div><div>b 在已打开的数据文件列表中，单击Pest - 200 - Scan.d。</div><div>c 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。</div><div>d 单击确定。</div><div><ul style="list-style-type: none">• 四个色谱图自动显示在“色谱图结果”窗口中。• 第四个色谱图的标题为“+EI EIC(129.0000, 414.2000) Scan Pest - 200 - Scan.D”。这两个离子在此色谱图中已合并。</div></div>

1 了解定性分析的基本知识

任务 5. 提取色谱图

任务 5. 提取色谱图（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----

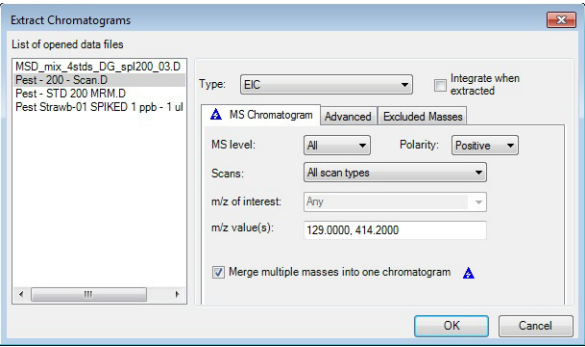


图 7 选中了将多个质量合并到一个色谱图中的“提取色谱图”对话框。

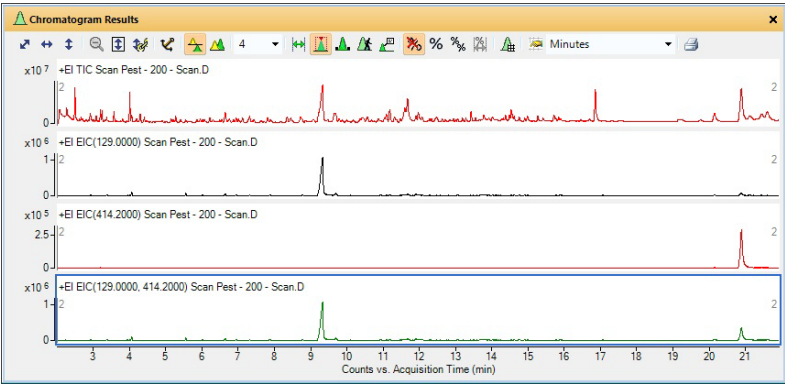


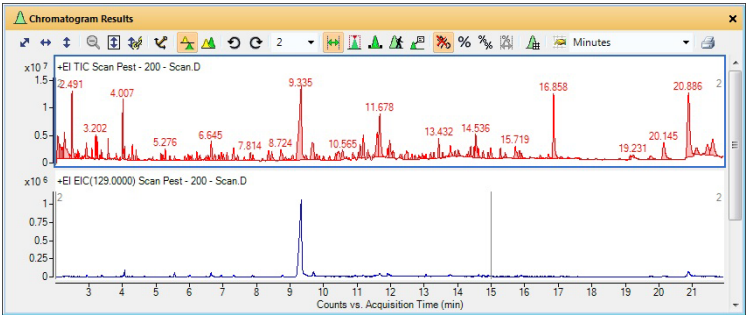
图 8 一个合并的提取离子色谱图 (EIC) 与原始 TIC 和两个提取离子色谱图进行比较。

任务 6. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分

在此任务中，您将了解使用“定性分析导航器”程序对色谱图进行积分、更改积分参数以修改结果，以及为 MS/MS 数据的积分峰计算信噪比的多种不同方法。

任务 6. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任一选项，对 Pest - 200 - Scan.d 数据文件的“TIC 扫描”色谱图进行积分。	<div><div>a 选中“数据浏览器”窗口中的 Pest - 200 - Scan.D 数据文件。</div><div>b 选中 TIC 扫描色谱图，然后使用下列命令之一：<ul style="list-style-type: none">在菜单栏中，单击色谱图 > 积分色谱图。在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击积分色谱图。在“数据浏览器”窗口中，选择 Pest - 200 - Scan.D > 色谱图 > TIC 扫描，右键单击 TIC 扫描，然后单击积分色谱图。</div></div>	<div><div>• 请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。</div><div>• 您可以选择“方法编辑器”窗口中对 MS 数据、MS/MS 数据和 GC 数据使用的积分器。</div><div>• 该色谱图是 MS 色谱图，因此在此色谱图积分时，将使用在“方法编辑器”的“积分 (MS)”部分中设置的值。</div></div>
2 同一时间仅显示两个色谱图。	<div><div>• 在“色谱图结果”工具栏的最大列表窗格数框中，选择 2。</div></div>	



对多个小峰积分。

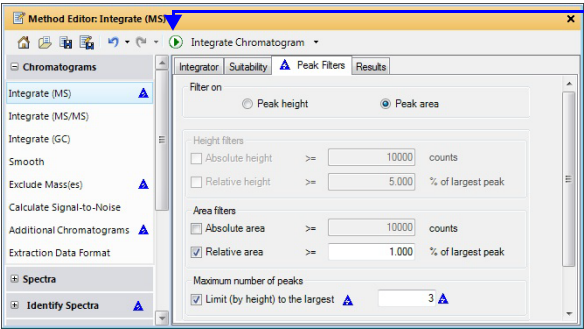
图 9 包含多个小峰的已积分 TIC 扫描色谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 6. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分

任务 6. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)（续）


步骤	详细说明	注释
3 更改阈值，减少要进行积分的峰的数量。 <ul style="list-style-type: none">更改阈值以便仅保留这三个最大的峰。	<p>a 单击视图 > 方法编辑器。</p> <p>b 在“方法编辑器”窗口中，单击 色谱图 > 积分 (MS)。</p> <p>c 单击“积分器”选项卡。</p> <p>d 检查参数。</p> <p>e 单击峰过滤器选项卡。</p> <p>f 在“最大峰数量”下，选中限制为最大值（按峰高）并键入 3。</p>	<ul style="list-style-type: none">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。



“运行”按钮标有“积分色谱图”。该标签将根据“方法编辑器”中可见的选项卡以及选择的操作而发生变化。

图 10 选中了上限（按峰高）的“峰过滤器”选项卡

4 对色谱图重新积分

- g 单击“方法编辑器”工具栏上的 ，以便使用新设置进行积分。
- 请注意，现在仅对峰高最大的三个峰进行积分。

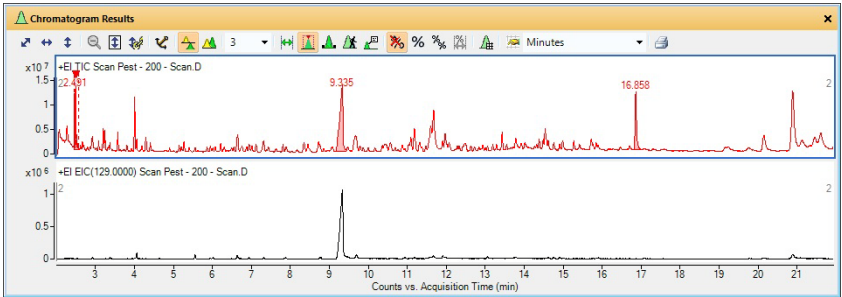



图 11 限制了峰数量的已积分 TIC 扫描色谱图

任务 6. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)（续）

步骤	详细说明	注释
5 对 Pest - STD 200 MRM.D 数据文件的 TIC MRM 色谱图进行积分。	<p>a 在“数据浏览器”窗口中，选中 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件。</p> <p>b 在“数据浏览器”窗口中，对 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件选择 TIC MRM。</p> <p>c 使用下列命令之一积分色谱图。</p> <ul style="list-style-type: none">在菜单栏中，单击色谱图 > 积分色谱图。在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击积分色谱图。在“数据浏览器”窗口中，右键单击高亮显示的色谱图，然后单击积分色谱图。 <p>d 单击“色谱图结果”工具栏中的在缩放期间自动调整 Y 轴图标 .</p> <p>e 在 5.8 至 8.5 分钟范围内放大。</p> <p>f 将最大列表窗格数设置为 2。</p>	<ul style="list-style-type: none">请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。这些色谱图是 MS/MS 色谱图，因此在对这些色谱图积分时，将使用在“方法编辑器”窗口的“积分 (MS/MS)”部分中设置的值。您可以选择使用一个积分器对 MS 色谱图积分，使用其他积分器对 MS/MS 色谱图积分。

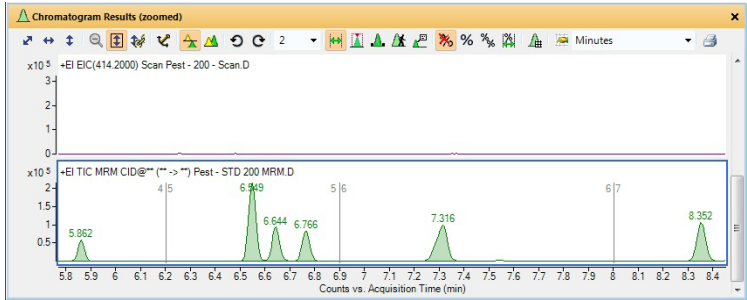


图 12 已积分的 MRM 色谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 6. 对 GC/MS 色谱图进行交互式积分

任务 6. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)（续）

步骤	详细说明	注释
6 选择 MS/MS (GC) 积分器。将过滤器更改为仅接受绝对峰高大于或等于 60,000 的峰。	<p>a 在“方法编辑器”窗口中，选择 色谱图 > 积分 (MS/MS)。</p> <p>b 单击峰过滤器选项卡。</p> <p>c 在过滤依据下，单击峰高。</p> <p>d 在“峰高过滤器”下，选中绝对峰高复选框。</p> <p>e 键入 60000 作为绝对峰高。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 请注意，当前方法的设置发生更改时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

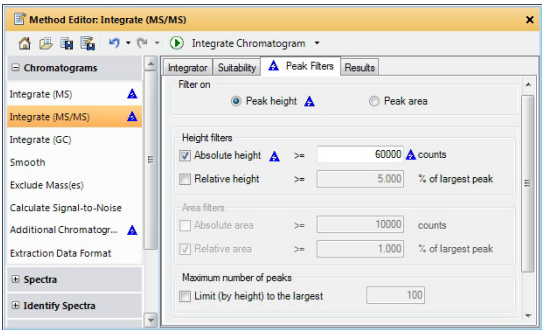

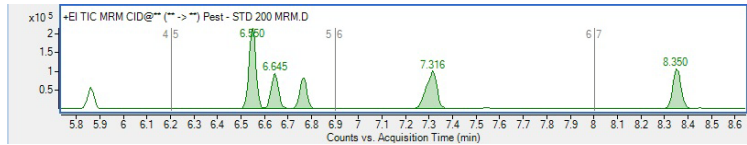


图 13 选中了绝对峰高的“峰过滤器”选项卡

7 对色谱图重新积分

f 单击方法编辑器工具栏中的  按钮。




• 请注意，现在仅对这些最大的峰进行积分。



5.8 分钟处更小的峰不再包含在积分结果中，因为此峰的绝对高度低于 60000 counts。

图 14 设置了较高阈值的已积分 TIC 色谱图


任务 6. 对色谱图进行交互式积分 (GC/MS)（续）

步骤	详细说明	注释
8 恢复为当前方法保存的设置并关闭“方法编辑器”。	<div><div>a 在“方法编辑器”中，选择“色谱图”>“积分 (MS/MS)”部分。</div><div>b 单击方法编辑器中的  图标。</div><div>c 选择“色谱图”>“积分 (MS)”部分。</div><div>d 单击方法编辑器中的  图标。</div><div>e 关闭方法编辑器窗口。</div></div>	<div><div>• 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 。</div></div>
9 删除原始色谱图以外的所有色谱图。删除原始色谱图中的积分结果。	<div><div>a 在“数据浏览器”窗口中的“色谱图”下，高亮显示除原始色谱图以外的所有色谱图。</div><div>b 右键单击选中的色谱图，然后单击删除。</div><div>c 选择所有 TIC 色谱图。</div><div>d 单击色谱图 > 清除结果。</div></div>	<div><div>• 使用清除结果命令时，不会删除色谱图，而会删除连接到色谱图的结果。在这种情况下，将清除积分值。</div><div>• 按住 Ctrl 键以在“数据浏览器”窗口中选多个色谱图。</div></div>

任务 7. 计算系统适用性值

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

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (MS)

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任意选项对 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 和 Pest - 200 - Scan.d 色谱图进行积分。	<p>a 在“数据浏览器”窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 数据文件旁边的复选框。</p> <p>b 在“数据浏览器”窗口中，选中 Pest - 200 - Scan.d 数据文件旁边的复选框。</p> <p>c 高亮显示这两个 TIC。</p> <p>d 在“色谱图结果”窗口中缩小。在“色谱图结果”中单击  图标。</p> <p>e 使用以下任意选项对这两个文件的 TIC 扫描 进行积分。</p> <ul style="list-style-type: none">在主菜单中，单击 色谱图 > 积分色谱图。高亮显示这些色谱图。然后，右键单击该色谱图，并单击 积分色谱图。在“数据浏览器”中，高亮显示这些数据文件的 TIC 扫描。然后，右键单击任一色谱图，并单击 积分色谱图。	<ul style="list-style-type: none">可在“色谱图” > “积分 (MS)” > “积分器”选项卡中更改积分器。请注意，带有缺省参数的积分检测的是非常小的峰。

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (MS) (续)

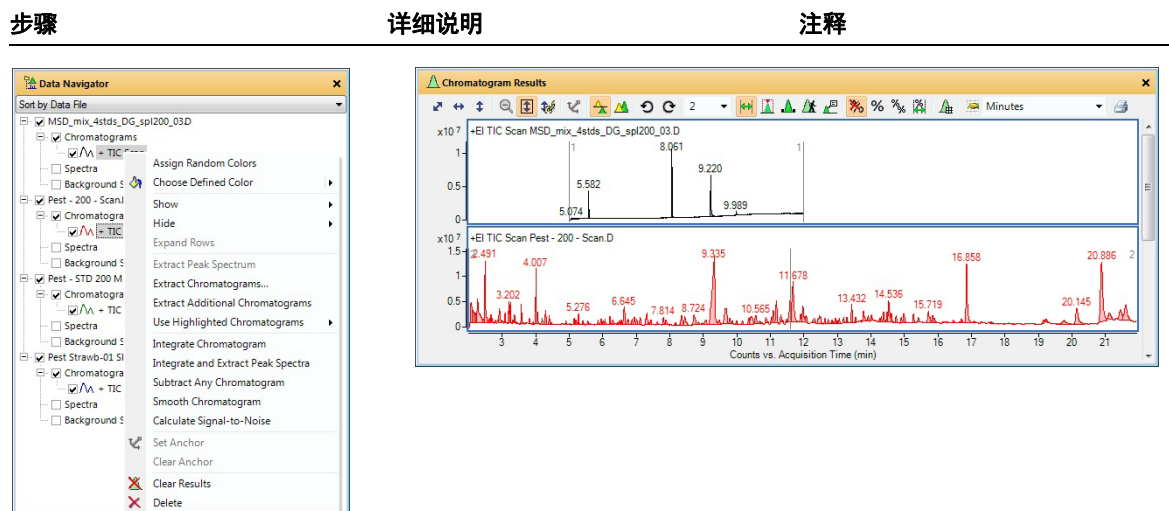


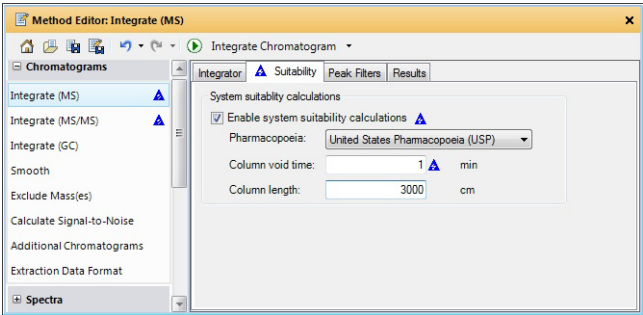
图 15 “数据浏览器”中的快捷菜单之一和已积分的色谱图

- 2 对 MS 色谱图启用系统适应性计算。
 - a 在“方法编辑器”中，选择**色谱图 > 积分 (MS)** 以显示“积分器”选项卡。
 - b 单击**适应性**选项卡。
 - c 选中**启用系统适应性计算**。
 - d 选择**美国药典 (USP)**。
 - e 在**色谱柱死时间**框中，键入 1。
 - f 在**色谱柱长度**框中，键入 3000。
- 请注意，当前方法的值发生更改时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。
 - 用于设置积分峰列表中的多个列的算法因选择的药典的不同而异。有关详细信息，请参见联机帮助。

1 了解定性分析的基本知识
任务 7. 计算系统适用性值

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (MS) (续)


步骤	详细说明	注释
----	------	----



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

图 16 “色谱图” > “积分 (MS)” > “适应性” 选项卡

- 3 对色谱图重新积分。

 - 单击方法编辑器工具栏中的**积分色谱图**图标 ，以便使用新设置进行积分。
- 4 查看系统适应性计算。

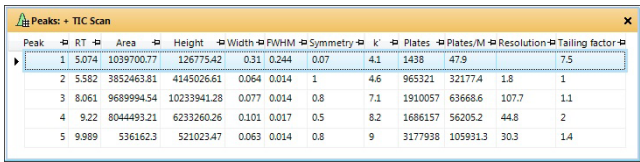
 - 打开“积分峰列表”窗口。
 - 查看系统适应性的值。
- a 单击**视图 > 积分峰列表**。

b 右键单击“峰”窗口的标题，并单击**浮动**。

c 右键单击任何不想查看的列的列标题，然后单击**删除列**。

d 右键单击任何列标题，然后单击**添加 / 删除列**，以更改可见的列。


 - “积分峰列表”表中包括系统适应性计算。
 - 这些值包括“k'”、“拖尾因子”、“塔板数”、“塔板数 / 米”和“对称因子”。
 - 还可以对 MS、MS/MS 和 GC 色谱图启用系统适应性计算。



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

图 17 具有系统适应性值的积分峰表

任务 7. 对色谱图进行交互式积分 (MS)（续）

步骤	详细说明	注释
5 恢复缺省方法的设置，并关闭“方法编辑器”窗口和“积分峰列表”窗口。	<div><div>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。</div><div>b 关闭方法编辑器窗口。</div><div>c 右键单击“积分峰列表”窗口的标题，并单击浮动。</div><div>d 单击视图 > 积分峰列表。</div></div>	<div><ul style="list-style-type: none">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。</div>

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

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

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
1 浏览色谱图，以查看 Pest - STD 200 MRM.d 的最后几个峰的前级离子和产物离子。 <ul style="list-style-type: none">放大 13 与 16 分钟之间的区域。使用“实时色谱图”图标。查看从大约 13 分钟处开始的质谱图，并向右侧移动箭头。	<ul style="list-style-type: none">a 选中“数据浏览器”窗口中的 Pest - STD 200 - MRM.D 行。b 关闭“方法编辑器”窗口。c 单击“数据浏览器”窗口中的 TIC MRM 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 选择 1 最大列表窗格数。f 要放大一些峰，请在 13 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖到 16 分钟处，然后松开鼠标。g 单击“色谱图结果”工具栏中的实时色谱图图标 .h 将“实时色谱图”光标移动到 X 轴上方大约 13 分钟处，然后单击。	<ul style="list-style-type: none">• 仅当单击“实时色谱图”图标 () 时，才会打开“谱图预览”窗口。• “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。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
	<div>i 要在质谱图之间导航，请单击色谱图或按键盘上的向左和向右箭头键。您也可以按住其中某个箭头键以快速扫描保留时间范围。</div>	<div><ul style="list-style-type: none">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“谱图预览”窗口（该窗口会自动打开）中。有时，会有多个质谱图显示在“谱图预览”窗口中。例如，对于在 13.431 分钟处的峰附近单击的每个点，“谱图预览”窗口中都会显示两个质谱图。</div>

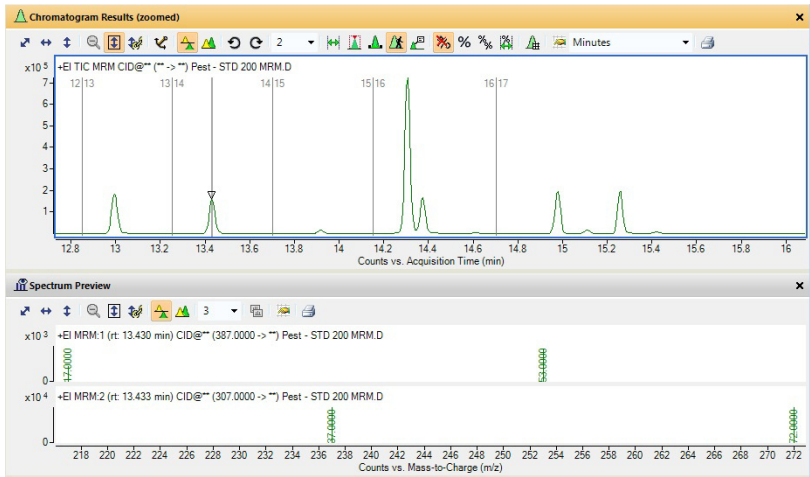






图 18 浏览色谱图以查看 13.43 分钟处的峰的两个 MRM 质谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
2 在 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件中的 5.2 分钟处和 14.3 分钟处的峰的特定数据点上提取的质谱图	<p>a 单击“色谱图结果”工具栏中的范围选择图标 .</p> <p>b 单击“色谱图结果”工具栏中的缩小图标 .</p> <p>c 要放大到 5.2 分钟处的峰，请在 4.0 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 6.0 分钟处，然后松开鼠标。</p> <p>d 在接近 5.2 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取一个质谱图。</p> <p>e 在接近 5.1 分钟处的峰谷上，提取质谱图。</p> <p>f 单击“色谱图结果”工具栏中的缩小图标 .</p> <p>g 放大介于 14 与 15 分钟之间的区域。</p> <p>h 在接近 14.3 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取一个质谱图。（请不要提取峰谷质谱图。）</p>	<ul style="list-style-type: none">缩放时，确保“在缩放期间自动调整 Y 轴”图标  带有橙色背景。您可以采用下列任一方式来提取质谱图：<ul style="list-style-type: none">双击该色谱图中的数据点。单击该色谱图中的数据点，然后在该色谱图中的任意位置单击鼠标右键。单击提取 MS 质谱图。此时将显示提取质谱图对话框。确保选择了 Pest - STD 200 MRM.d 文件，然后在“提取质谱图”对话框中单击提取。请注意，在第一次提取质谱图时，将出现包含该质谱图的“MS 质谱图结果”窗口，并且该质谱图的类型和保留时间将出现在“质谱图”下。所有后续提取的质谱图也都将出现在两个位置。在 14.3 分钟附近的峰中提取 MS 质谱图时，将提取两个质谱图，因为此峰上会发生两次转换。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
<ul style="list-style-type: none"> 更改显示以至少显示四个质谱图。 	<ul style="list-style-type: none"> 如有必要，在“MS 质谱图结果”工具栏中选择最大列表窗格数图标中的“4”。 	<ul style="list-style-type: none"> 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“质谱图”下。所有后续提取的质谱图也都将出现在两个位置。 在 14.3 分钟附近的峰中提取 MS 质谱图时，将提取两个质谱图，因为此峰上会发生两次转换。

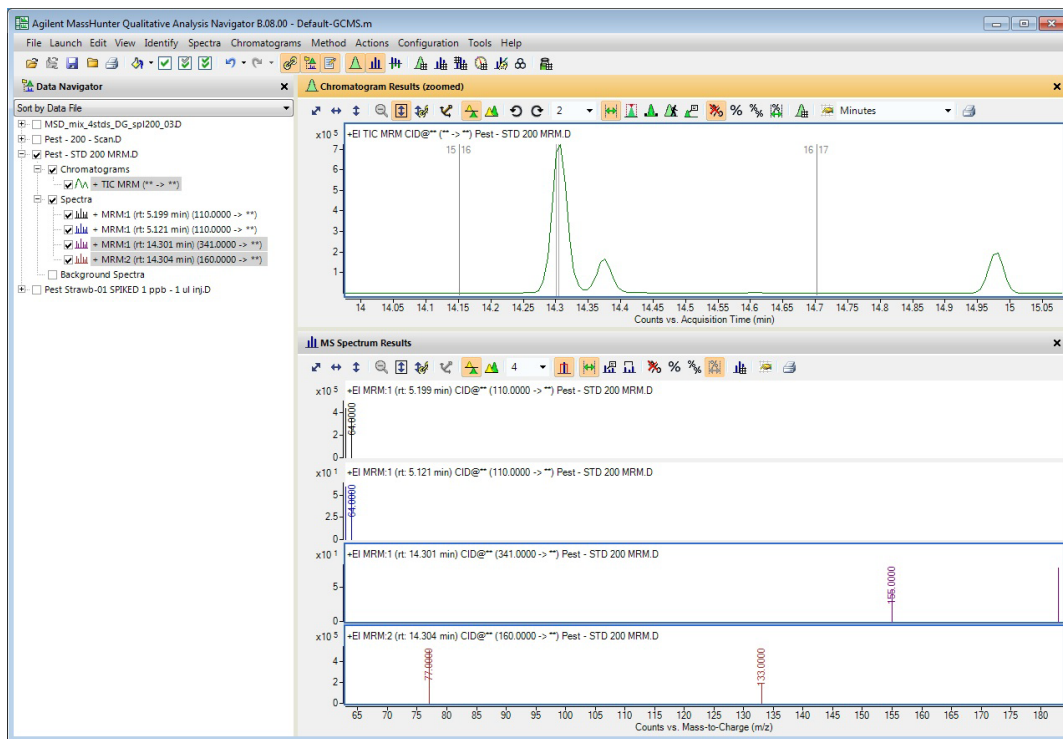


图 19 包含从 5.2 分钟处的峰提取的两个 MRM 质谱图以及从 14.3 分钟处的峰提取的两个 MRM 质谱图的主窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
3	<p>从 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件中的 14.35 分钟处提取峰谷 MS 质谱图。</p> <ul style="list-style-type: none">打开“谱图预览”。从 RT 14.3 分钟处的峰谷中提取一个质谱图。将此质谱图复制到“用户质谱图”文件夹。更改显示以显示 6 个质谱图。关闭“谱图预览”窗口。	<ul style="list-style-type: none">选择“实时色谱图”后，系统将在“谱图预览”窗口（而不是“数据浏览器”的“质谱图”部分）中显示所有手动选择的质谱图。当“实时色谱图”处于打开状态时，“定性分析导航器”程序会在您提取新的质谱图时覆盖以前的质谱图。当您要快速查看色谱图中的质谱图并且仅保存少数几个质谱图时，“实时色谱图”模式很有用。

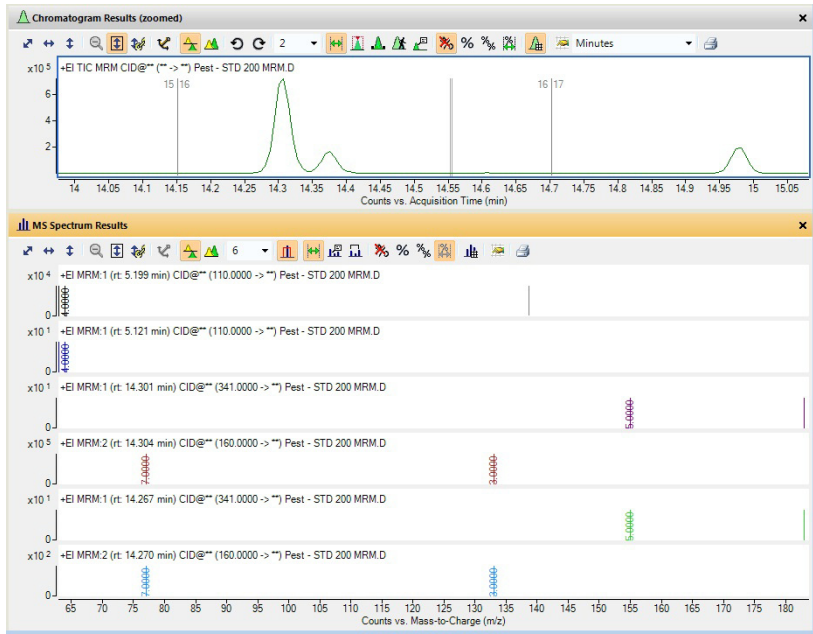


图 20 “色谱图结果”和“MS 质谱图结果”窗口

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
4	<div>提取一个质谱图，并使用该质谱图对 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件的 14.3 分钟处的峰的某个指定范围内的所有点求平均值：</div> <div><div><div>缩小。</div><div>使用“色谱图”工具栏上的“范围选择”图标。</div><div>设置跨越整个峰的范围。</div><div>使用列出的任一选项提取该质谱图（或光谱图）。</div></div><div><div>a 单击 14.3 分钟处的峰的基线左侧，并拖动到右侧的峰的基线处。</div><div>b 在“MS 质谱图结果”窗口中，选择“最大列表窗格数”中的 2。</div><div>c 使用右侧的某个选项提取平均质谱图。</div></div></div>	<div><div>您可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图。</div><div>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。</div><div>请注意，会显示两个平均 MRM 质谱图。</div></div>

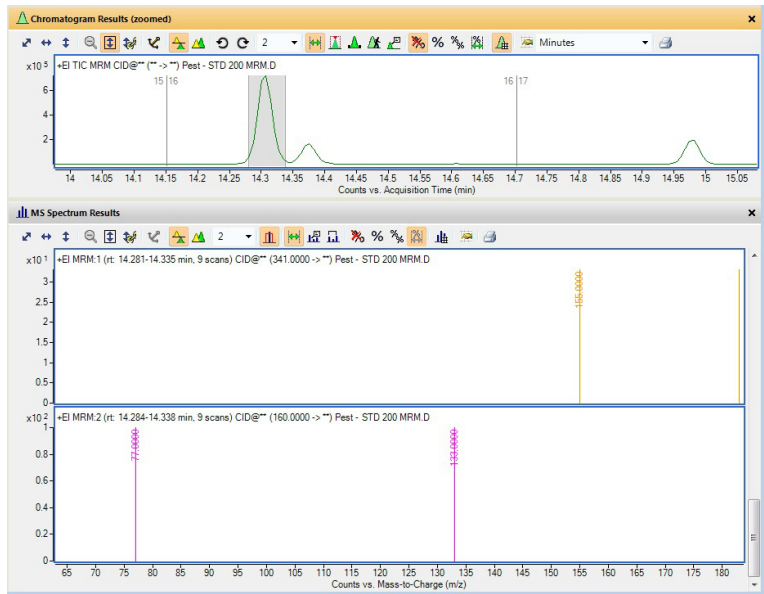


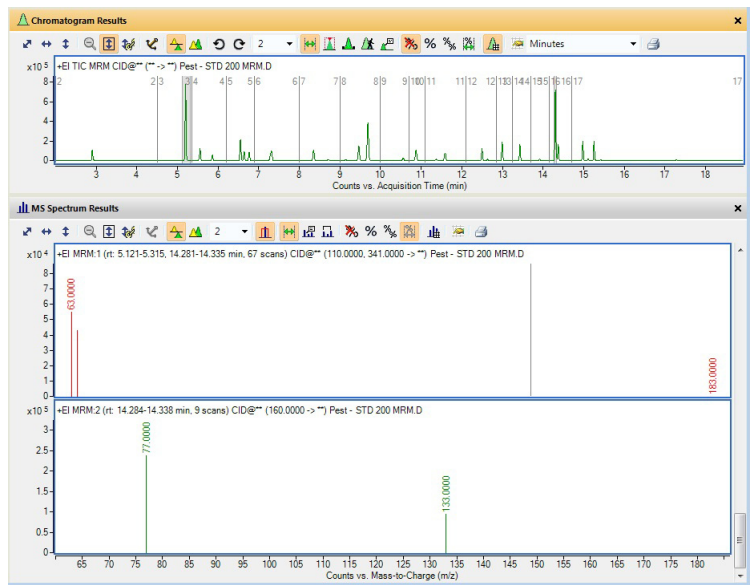
图 21 显示两个平均质谱图的“色谱图结果”和“MS 质谱图结果”窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图


步骤	详细说明	注释
5 提取同时对 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件的 5.2 分钟和 14.3 分钟处的峰范围求平均值的质谱图。	<p>a 单击“色谱图结果”工具栏中的 缩小 图标。</p> <p>b 按 Ctrl 键。</p> <p>c 在 5.2 分钟处的峰左侧单击并拖动到该峰的右侧，然后释放鼠标。</p> <p>d 松开 Ctrl 键。</p> <p>e 使用此选项或右侧的选项提取平均质谱图。</p> <p>• 在每个峰的选定范围内双击。</p>	<ul style="list-style-type: none">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，您也可以在色谱图中的任意位置单击鼠标右键，然后单击提取 MS 质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。单击提取。



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

图 22 从色谱图中的两个不同范围提取的两个平均质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
<p>6 每次在 Pest - STD 200 MRM.d 中提取峰质谱图时都扣除背景质谱图。</p> <ul style="list-style-type: none"> 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。 	<p>a 在“数据浏览器”中单击“质谱图”行。右键单击“质谱图”行，然后单击删除。</p> <p>b 单击是。</p> <p>c 在“方法编辑器”中，选择质谱图 > 提取 (MS/MS)。</p> <p>d 单击峰质谱图提取 (MS/MS) 选项卡（如果不可见）。</p> <p>e 在峰质谱图背景 MS/MS 框中，选择在峰开始和结束处的质谱图的平均值。</p> <p>f 在“色谱图结果”工具栏中，单击峰选择图标 。</p> <p>g 单击色谱图 > 积分命令。</p> <p>h 选择接近 5.2 分钟的峰。</p> <p>i 单击鼠标右键，然后单击快捷菜单中的提取峰质谱图。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 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。

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

步骤	详细说明	注释
		<ul style="list-style-type: none">如果提取没有点的峰质谱图，可能需要更改提取数据格式。在“方法编辑器”窗口中，单击质谱图 > 提取数据格式。对于质谱图数据格式，单击可提取任一格式的选项。对于这些示例，单击如果可用，则为轮廓图，否则为棒状图。

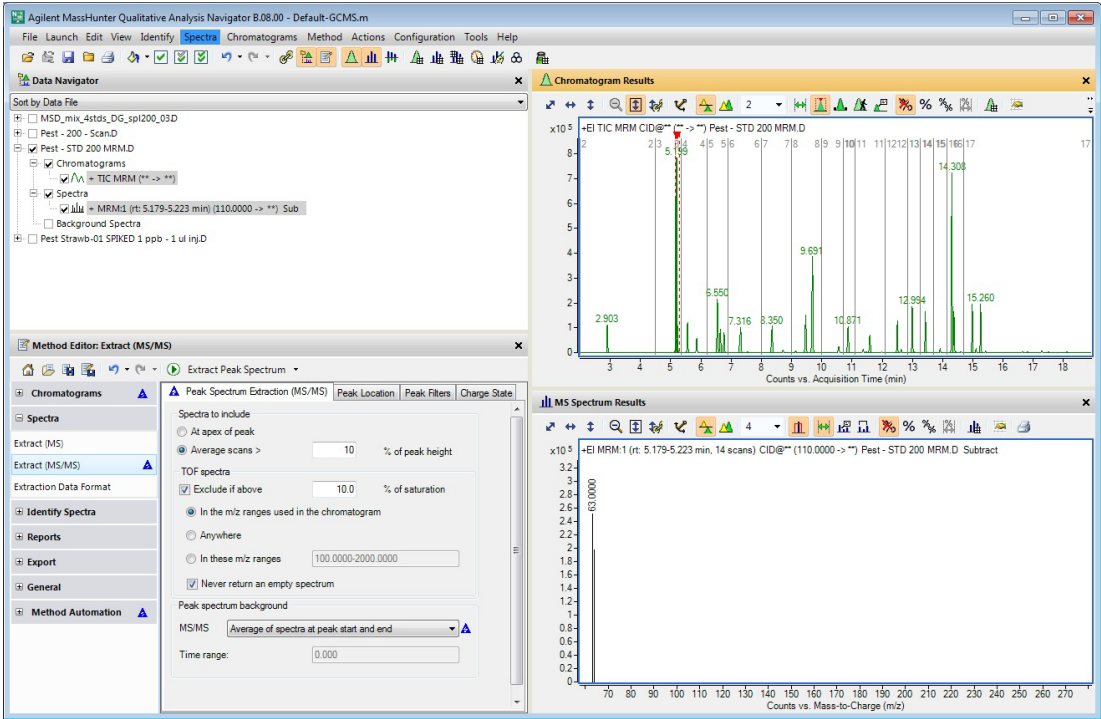


图 23 已扣除了背景峰质谱图的峰质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图

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

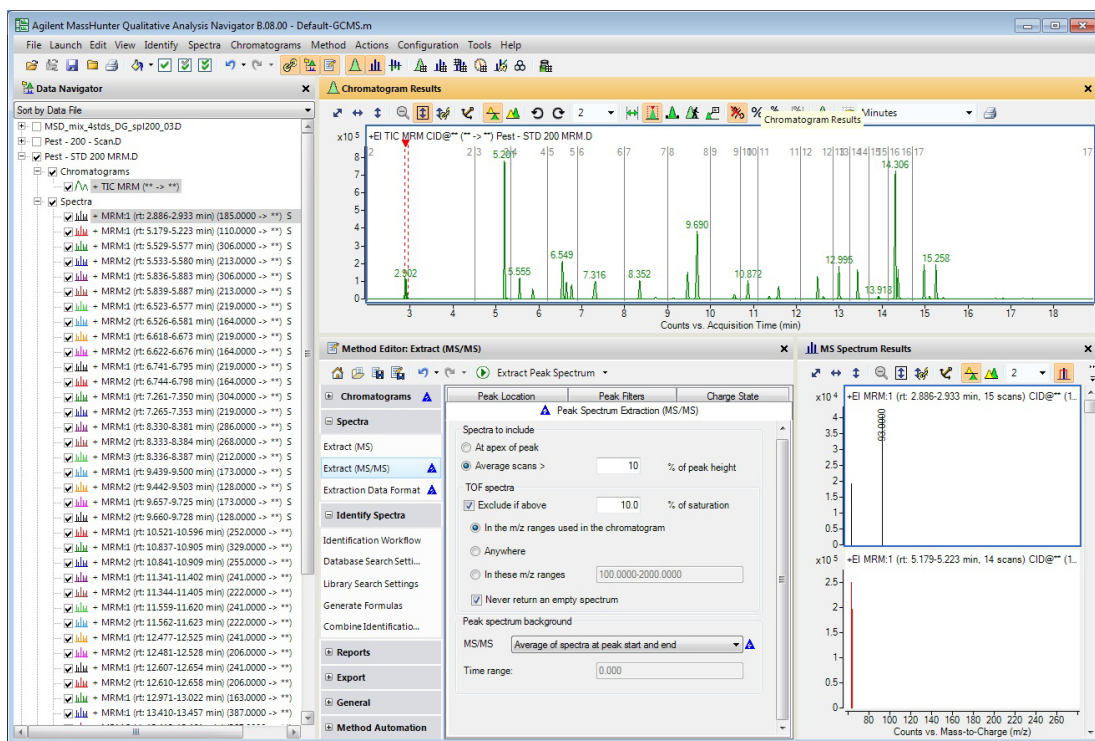


图 24 积分并提取峰质谱图

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


任务 9. 添加注释

可在“定性分析导航器”窗口中向以下图形窗口添加图像注释或文本注释：

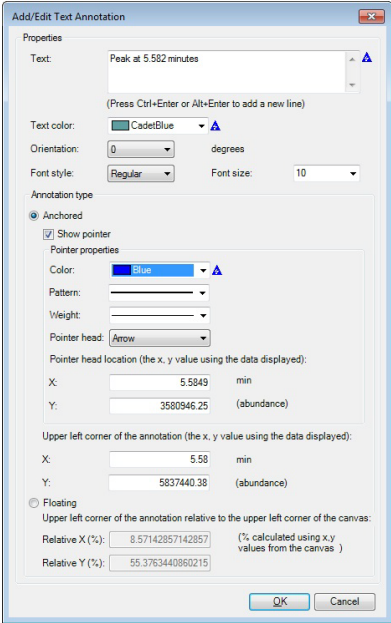
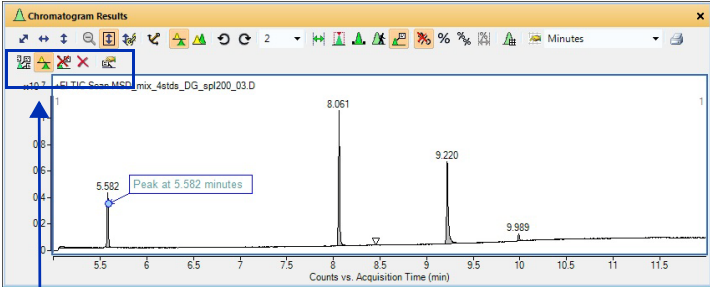
- “色谱图结果”窗口
- “MS 质谱图结果”窗口
- “UV 光谱图结果”窗口

可在“定性分析工作流程”程序中向窗口添加注释。如果您保存数据文件的结果，也会保存注释。

任务 9. 添加注释

步骤	详细说明	注释
1 选择 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。隐藏其他色谱图。	<p>a 在“数据浏览器”窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 旁边的复选框。</p> <p>b 单击编辑 > 显示 > 仅显示高亮显示的项目。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 将自动隐藏其他数据文件的色谱图。
2 在色谱图中选择要添加文本注释的位置。	<p>a 在“色谱图结果”窗口中，单击工具栏中的注释工具 ()。</p> <p>b 将光标移到色谱图窗格中要添加注释的位置。</p> <p>c 单击鼠标右键，然后单击添加文本注释。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 光标将变为十字线光标。可使用此光标选择要添加注释的位置。• 可在“色谱图结果”窗口中找到“注释”工具栏。• 也可向“MS 质谱图结果”窗口和“UV 光谱图结果”窗口添加注释。
3 在“添加 / 编辑文本注释”对话框中添加有关文本注释的信息。	<p>a 键入注释的文本。</p> <p>b 选择文本颜色。</p> <p>c 选择方向。</p> <p>d 选择字体格式和字体大小。</p> <p>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。</p> <p>f 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 可将多个注释添加到色谱图或质谱图。• 可以使用注释工具栏中的图标选择所有注释、删除注释及编辑注释。

任务 9. 添加注释（续）

步骤	详细说明	注释
		

仅在选择了“注释”工具时，注释工具栏才可用。

单击并拖动注释可将其移到新位置。

图 25 “添加 / 编辑文本注释”对话框和“色谱图结果”窗口

- 4 在色谱图中选择要添加图像注释的位置。
- a 将光标移到色谱图窗格中要添加注释的位置。

b 单击鼠标右键，然后单击添加图像注释。
- 您可以添加 JPG 或 MOL 图像文件。

1 了解定性分析的基本知识

任务 9. 添加注释

任务 9. 添加注释（续）

步骤	详细说明	注释
5 在“添加 / 编辑文本注释”对话框中添加有关文本注释的信息。	<p>a 选择图像注释。</p> <p>b 对于“调整宽度”，键入 50。</p> <p>c 选中锁定高宽比复选框。</p> <p>d 单击浮动。您可以更改相对位置。在图形窗口中可以更轻松地对交互方式更改位置。</p> <p>e 单击确定。</p> <p>f 将图像移动到色谱图的右上角。</p>	<ul style="list-style-type: none">Agilent_Logo.tif 文件包含在 \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.08.00\en-US\Letter 文件夹中。您需要将其转换为 JPG 文件。可将多个注释添加到色谱图或质谱图。

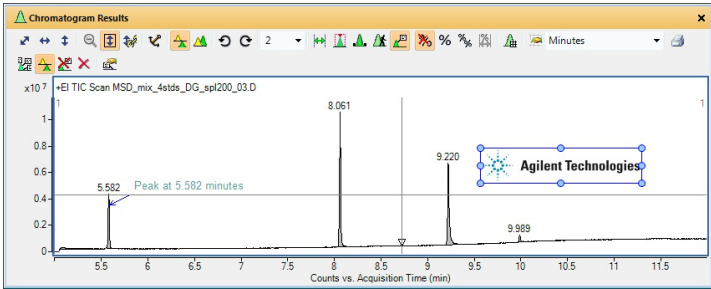
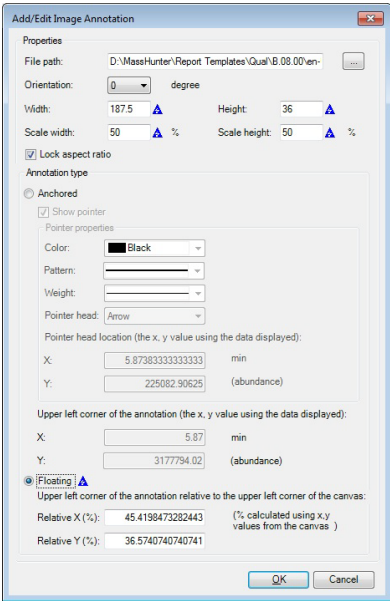
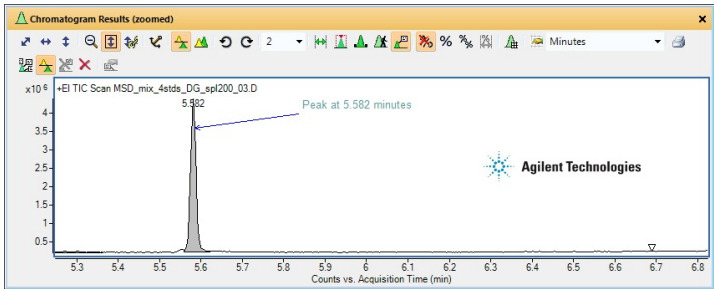


图 26 “添加 / 编辑图像注释”对话框和“色谱图结果”窗口



任务 9. 添加注释（续）

步骤	详细说明	注释
6 放大至第一个峰。	<ul style="list-style-type: none">放大至 5.5 分钟处第一个峰周围的区域	



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

图 27 “色谱图结果”窗口中的锚定注释和浮动注释




7 切换回“色谱图结果”窗口中的“范围选择”工具。首先删除注释。	<div><div>a 单击  图标以删除所有注释。</div><div>b 单击“色谱图结果”工具栏中的  （范围选择）图标。</div></div>	<ul style="list-style-type: none">如果您要将注释与数据文件结果一同保存，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。您可以在“色谱图结果”工具栏中的 5 个不同工具之间切换。有关详细信息，请参考联机帮助。这 5 个工具是：<ul style="list-style-type: none">范围选择峰选择手动积分实时色谱图注释鼠标
----------------------------------	--	--

任务 10. 添加质量卡尺

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

如果您保存数据文件的结果，也会保存卡尺。

任务 10. 添加质量卡尺

步骤	详细说明	注释
1 从 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 积分并提取峰质谱图。	<p>a 在“数据浏览器”窗口中，选中 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 旁边的复选框。</p> <p>b 单击编辑 > 显示 > 仅显示高亮显示的项目。</p> <p>c 单击色谱图 > 积分并提取峰质谱图。</p>	<ul style="list-style-type: none">也可以单击主工具栏中的“仅显示高亮显示的项目” () 按钮。
2 将卡尺添加到在前面的任务中创建的峰质谱图。	<p>a 在“MS 质谱图结果”窗口中，单击工具栏中的质量增量卡尺工具 ()。</p> <p>b (可选) 在“卡尺”工具栏中，为卡尺类型选择轮廓图点到点。</p> <p>c 从 79 放大到 99 m/z。</p> <p>d 将光标移到质谱图窗格中要添加卡尺的位置。</p> <p>e 将光标拖到质谱图中卡尺的终点。在拖动光标时，质量增量的值将改变。松开鼠标按钮时，将添加卡尺。</p>	<ul style="list-style-type: none">光标将变为箭头。您可以使用此光标选择卡尺的起点和终点。如果质谱图为棒状图，则无法选择卡尺类型，因为轮廓图点到点对棒状图数据没有任何影响。“三角形”光标设定到选择的点，如果使用的是轮廓图峰到峰，则设定到峰的顶部。
3 修改卡尺以使用其他颜色。	<p>a 单击在上一步中创建的卡尺。</p> <p>b 单击“MS 质谱图结果卡尺”工具栏中的“卡尺属性”按钮 ()。</p> <p>c (可选) 键入开始 X 和开始 Y 值。</p> <p>d 选择文本颜色。</p> <p>e 选择字体格式和字体大小。</p> <p>f 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">可以将多个卡尺添加到质谱图。可以使用卡尺工具栏中的图标选择所有卡尺、删除卡尺及编辑卡尺。

任务 10. 添加质量卡尺（续）

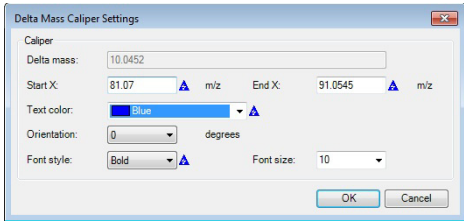
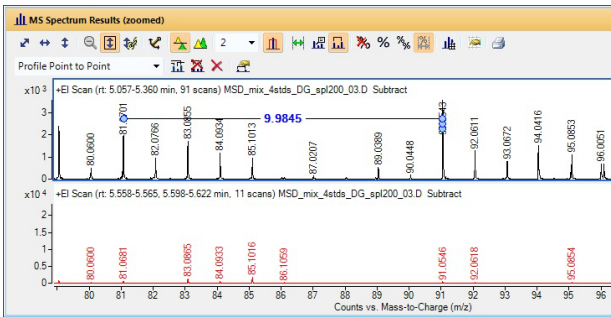
步骤	详细说明	注释
		

图 28 “质量增量卡尺设置” 对话框和 “MS 质谱图结果” 窗口

4 删除积分结果和质谱图。

a 单击**色谱图 > 清除结果 > 包含峰质谱图**。

b 单击 “MS 质谱图结果” 窗口中的**范围选择工具**。

• 如果您要将卡尺与数据文件结果一同保存，请参见第 75 页上的**“任务 17. 保存结果”**。

1 了解定性分析的基本知识

任务 10. 添加质量卡尺



练习 2

查找和识别

- 任务 11. 按色谱图解卷积查找化合物 50
- 任务 12. 使用检索谱库 / 数据库算法识别化合物 54
- 任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM） 57
- 任务 14. 按积分查找化合物 61
- 任务 15. 按碎片查找 64
- 任务 16. 在谱库中检索质谱图 71
- 任务 17. 保存结果 75

在这些任务中，您将在 GC/MS 数据文件中查找和识别化合物。可使用“定性分析工作流程”程序来执行化合物挖掘。也可在此程序中识别这些化合物。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

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



任务 11. 按色谱图解卷积查找化合物

此化合物挖掘算法可以在 GC/MS 数据中识别化合物，并为每种化合物创建已清理的 MS 质谱图。此功能是为了从复杂数据中“挖掘”信息的一种简便方式。您只能对在扫描、产物离子扫描或中性丢失扫描模式下采集的 GC/MS 样品数据使用“按色谱图解卷积查找”算法。

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

任务 11. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件的 TIC。	<p>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程 图标 。</p> <p>否则，单击 文件 > 打开数据文件。</p> <p>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。</p> <p>c 清除 调用结果数据 复选框并单击 打开。</p>	<ul style="list-style-type: none">“按色谱图解卷积查找化合物”算法可使用 GC/QQQ 和 GC/Q-TOF 数据文件。用户界面将根据所调用数据文件的类型而自动更新。

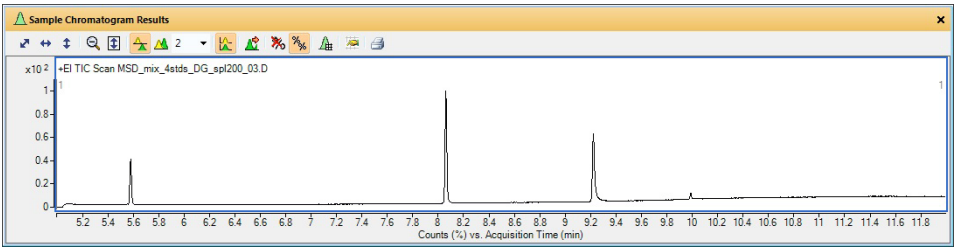


图 29 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 中的 TIC 色谱图

任务 11. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
2 配置用户界面。	<p>a 单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。</p> <p>b 单击方法 > 打开。</p> <p>c 选择 Default-GCMS.m。</p> <p>d 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。
3 使用色谱图解卷积算法查找化合物。	<p>a 在“方法编辑器”窗口中，选择化合物探索 > 按色谱图解卷积查找。</p> <p>b 在峰过滤器的“设置”选项卡上，键入 20 作为信噪比阈值。</p> <p>c 查看 m/z 变化量单位、左侧 m/z 变化量和右侧 m/z 变化量的参数。</p>	<ul style="list-style-type: none">如果有单位质量数据，则可以为左侧 m/z 变化量值输入 0.3 AMU，为右侧 m/z 变化量值输入 0.7 AMU。

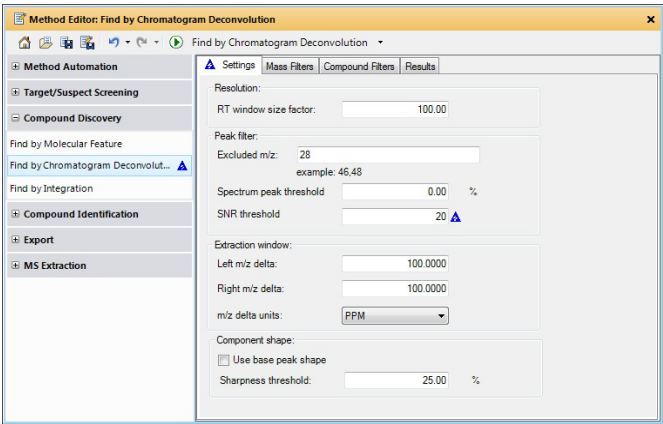



图 30 “按色谱图解卷积查找” 部分中的 “设置” 选项卡

2 查找和识别

任务 11. 按色谱图解卷积查找化合物

任务 11. 使用色谱图解卷积查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
<ul style="list-style-type: none">选择提取 EIC、MS 质谱图和 MS/MS 质谱图。	<p>d 单击  以便对数据文件运行按色谱图解卷积查找化合物算法。</p> <p>e 如有必要，请单击视图 > 化合物列表命令。</p> <p>f 关闭“方法编辑器”窗口和“结构查看器”窗口。</p>	<ul style="list-style-type: none">“定性分析工作流程”程序在这些条件下找到了 5 种化合物。也可以单击查找 > 按色谱图解卷积查找。如果未对数据文件建立索引，则在运行此算法时，可能需要花费很长的时间。

任务 11. 使用色谱图解卷积分查找化合物 (GC/MS)

步骤	详细说明	注释
4 检查化合物。请参见图 31。	<p>a 单击“化合物列表”窗口中的隐藏空列图标。</p> <p>b 单击“化合物列表”窗口中的第一个化合物。</p> <p>c 选择“化合物列表”窗口后，可使用箭头键切换化合物。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 显示两个质谱图是一种用于显示单一化合物的所有信息的便捷方式。 请注意，将会显示已清理的质谱图和原始质谱图。

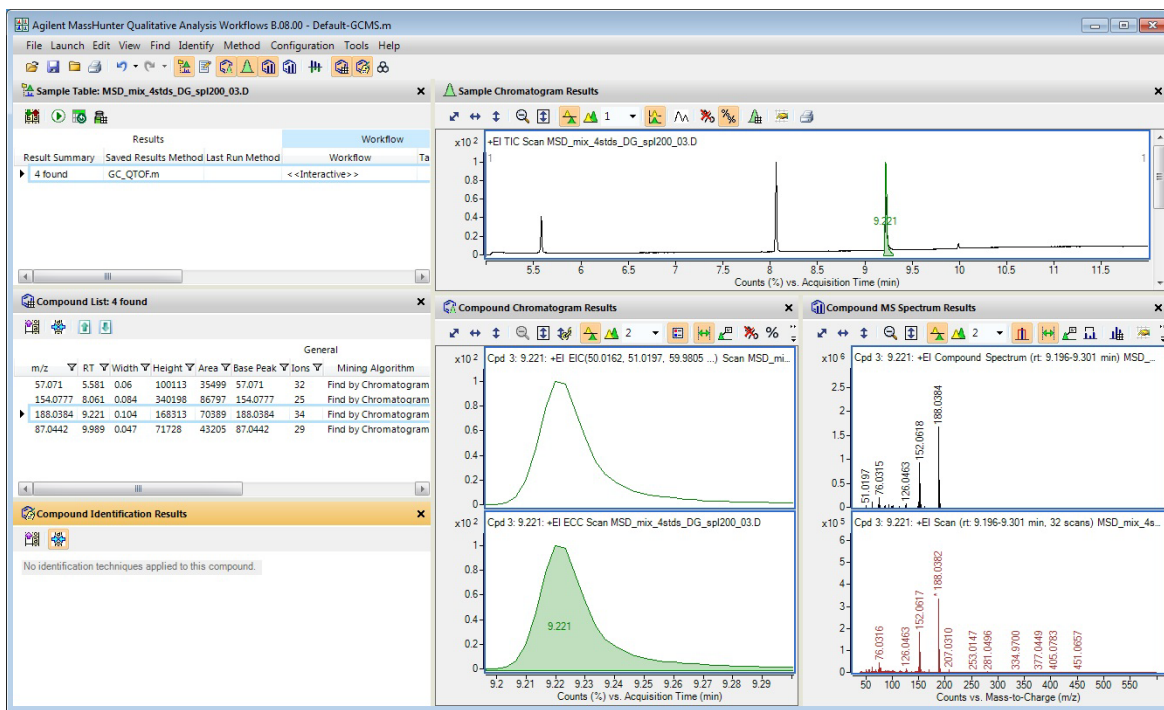




图 31 按色谱图解卷积分查找化合物


任务 12. 使用检索谱库 / 数据库算法识别化合物

在此任务中，您可以识别在第 50 页上的“任务 11. 按色谱图解卷积查找化合物”中找到的化合物并为之生成分子式。如果您购买了 *NIST11.L* 谱库（或更高版本）或使用 *demo.l* 谱库，则可执行此任务。如果有两个谱库，则可以同时选择这两个谱库。

任务 12. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
1 对 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件中的所有化合物执行谱库 / 数据库检索。	<p>a 单击视图 > 方法编辑器。</p> <p>b 在“方法编辑器”窗口中，单击化合物识别 > 识别工作流程。</p> <p>c 请注意，按谱库 / 数据库检索识别复选框处于选中状态。</p> <p>d （可选）单击添加按钮。选择 NIST11.L 谱库并单击确定按钮。</p> <p>e （可选）针对多谱库检索类型单击当谱库出现第一个匹配项时停止。</p> <p>f 在主菜单中单击识别 > 识别所有化合物。也可以单击识别所有化合物图标  以运行该算法。</p>	<ul style="list-style-type: none">• Demo.l 和 Nist11 应该安装在 \MassHunter\Library 文件夹中。• 请注意，在检索 <i>NIST11.L</i> 谱库后将识别许多化合物。• 如果没有 <i>NIST11.L</i> 谱库，则可以选择第二个谱库（如果有）。• 如果选择了两个或更多谱库，并选择了在第一个谱库匹配处停止，谱库检索算法将检索列表中的第一个谱库。如果识别出化合物，则该算法将停止。如果未识别出化合物，则它将检索下一个谱库，直到识别出化合物或检索到最后一个谱库为止。• 您可以使用“谱库编辑器”程序修改用于检索谱库算法的 .L 谱库。此程序与 Agilent MassHunter “定量分析”程序一同安装。单击  图标可启动此程序。

任务 12. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
2 更改显示的窗口。	<p>a 单击视图 > 对比结果。</p> <p>b 单击视图 > 结构查看器。</p> <p>c 如有必要，单击化合物识别结果窗口的选项卡，以显示此窗口。</p> <p>d 选中“化合物列表”中已识别的某一行。</p> <p>e 单击“化合物列表”工具栏和“化合物识别结果”窗口中的“隐藏空列”按钮.</p> <p>f 单击每种化合物以查看结果。</p>	<p>• 如果识别了某种化合物，则“分子式”列中会有一个值。</p>

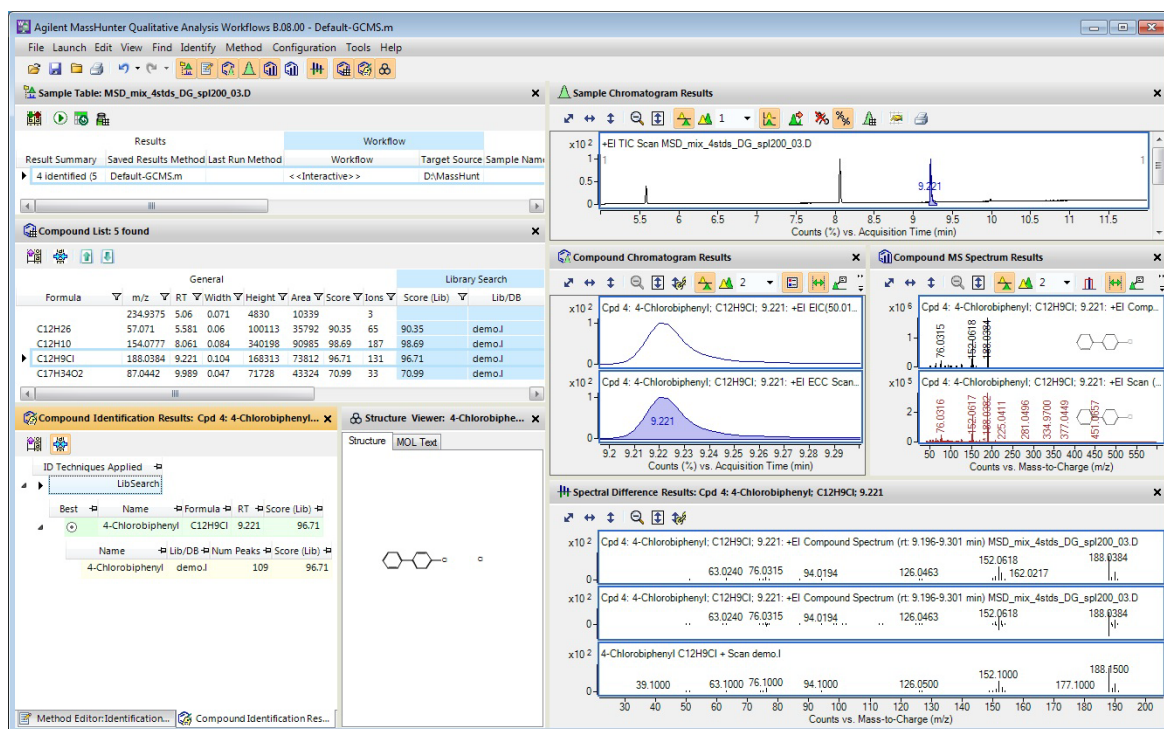


图 32 化合物和谱库 / 数据库检索结果

2 查找和识别

任务 12. 使用检索谱库 / 数据库算法识别化合物

任务 12. 使用检索谱库算法识别化合物

步骤	详细说明	注释
3 关闭数据文件。	<p>a 单击文件 > 关闭数据文件。</p> <p>b 系统提示您是否要保存结果时，请单击否。</p>	<ul style="list-style-type: none">如果要保存这些结果，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

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

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
1 打开 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件的 TIC。	<div>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程图 标。否则，单击文件 > 打开数据文件。</div> <div>b 单击 GC 杀虫剂 示例数据文件文件夹中的 Pest - STD 200 MRM.d 数据文件。</div> <div>c 清除调用结果数据复选框并单击打开。</div>	<div>• 用户界面将自动更新，以显示适合您打开的数据文件的功能。</div>

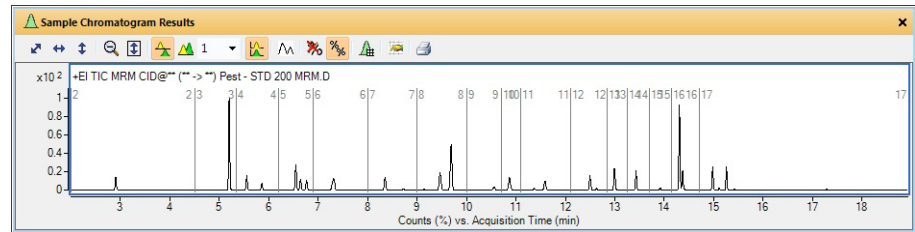


图 33 Pest - STD 200 MRM.d 中的 TIC 色谱图

2 配置用户界面。	<div>a 单击 配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。</div> <div>b 单击 方法 > 打开。</div> <div>c 选择 Default-GCMS.m。</div> <div>d 单击 确定。</div>	<div>• 对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。</div>
-----------	---	--

2 查找和识别

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
3 使用 MRM 算法查找化合物。	<p>a 在“方法编辑器”窗口中，选择目标物 / 可疑物筛选 > 按 MRM 查找。</p> <p>b 检查参数。</p>	

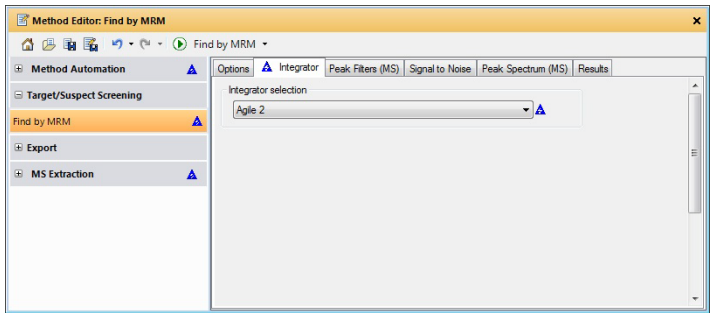





图 34 “方法编辑器”的“按 MRM 查找”部分中的“积分器”选项卡

	<p>c 单击  以便对数据文件运行按 MRM 查找算法。</p> <p>d 如有必要，请单击视图 > 化合物列表命令。</p> <p>e 如有必要，单击化合物识别结果窗口的选项卡，以使其可见。它随“方法编辑器”窗口一同显示在选项卡中。</p>	<ul style="list-style-type: none">“定性分析工作流程”程序在这些条件下找到 28 种化合物。
4 检查化合物。请参见第 59 页上的图 35。	<p>a 在“化合物 MS 质谱图结果”工具栏的最大列表窗格数框中，选择 2。</p> <p>b 单击“化合物列表”工具栏中的“隐藏空白列”按钮 ()。</p> <p>c 单击“化合物列表”窗口中的第一个化合物。</p> <p>d 选择“化合物列表”窗口后，可使用箭头键切换化合物。</p>	<ul style="list-style-type: none">“隐藏当前任何空白列”算法将对表的第一级别运行。

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
5 在“化合物识别结果”窗口中更改可见的列。	<p>a 右键单击表中的某一行，然后单击添加 / 删除列。</p> <p>b 单击全选，然后单击“确定”。</p> <p>c 单击“化合物列表”工具栏中的“隐藏空白列”按钮.</p> <p>d 单击要删除的某一列。右键单击该列，然后单击删除列以删除该列。</p> <p>e 关闭一些窗口。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 如果先显示所有列再隐藏空白列，则会看到包含值的所有列。 在“化合物识别结果”窗口中，前级离子显示在前级离子（采集）列中，产物离子显示在按 MRM 产物离子查找列中。 化合物数量显示在“样品表”窗口的“结果摘要”列中。

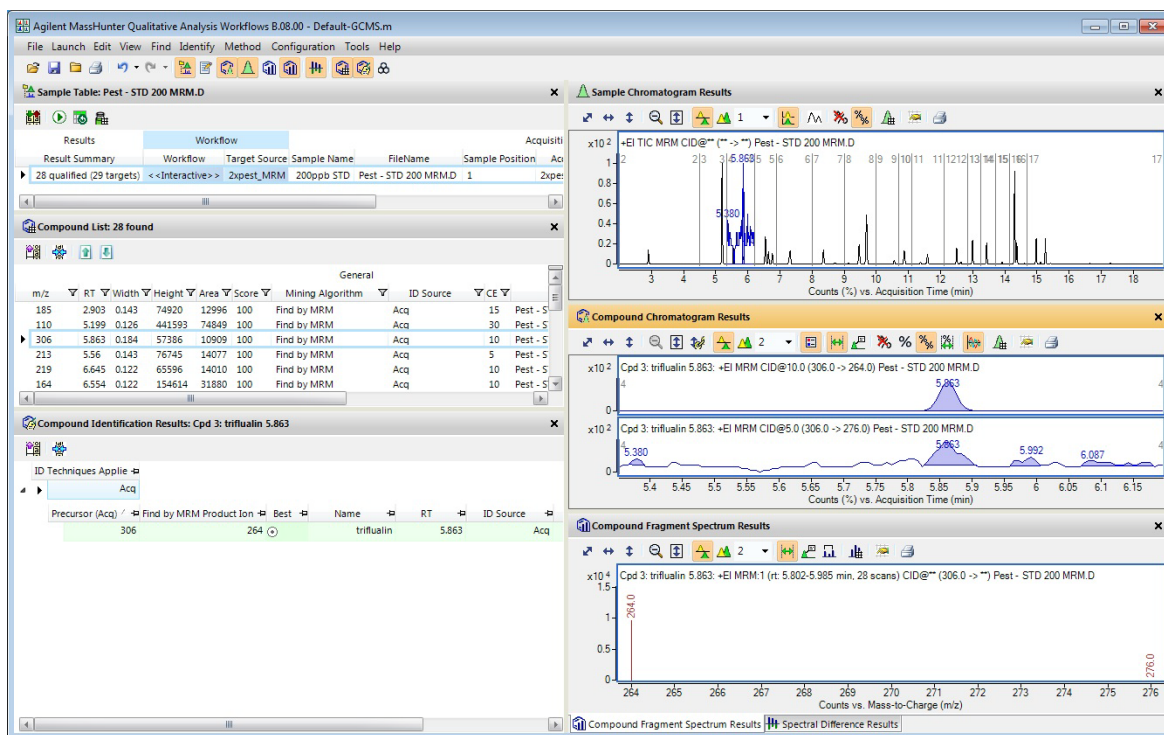


图 35 按 MRM 查找结果

2 查找和识别

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

任务 13. 使用 MRM 查找化合物（仅限于 MRM）

步骤	详细说明	注释
6 关闭数据文件。	<p>a 单击文件 > 关闭数据文件。</p> <p>b 单击关闭。</p>	<ul style="list-style-type: none">如果要保存这些结果，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。

任务 14. 按积分查找化合物

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

任务 14. 使用积分查找化合物

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 数据文件的 TIC。	<div>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程图标。否则，单击文件 > 打开数据文件。</div> <div>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。</div> <div>c 清除调用结果数据复选框并单击打开。</div>	

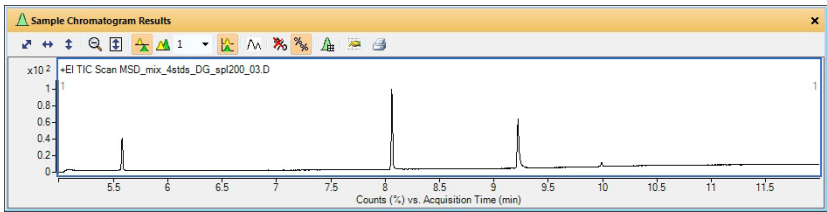


图 36 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 中的 TIC 色谱图

2 配置用户界面。	<div>a 单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。</div> <div>b 单击方法 > 打开。</div> <div>c 选择 Default-GCMS.m。</div> <div>d 单击确定。</div>	<div>• 对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。</div>
-----------	--	--

2 查找和识别

任务 14. 按积分查找化合物

任务 14. 使用积分查找化合物

步骤	详细说明	注释
3 使用按积分查找算法查找化合物。	<p>a 在“方法编辑器”窗口中，选择 化合物探索 > 按积分查找。</p> <p>b 检查参数。</p>	<ul style="list-style-type: none">您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。

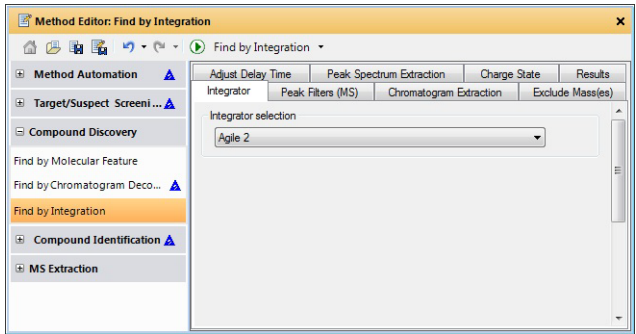



图 37 “方法编辑器”的“按积分查找”部分中的“积分器”选项卡

	<p>c 单击  对数据文件运行按积分查找化合物算法。</p> <p>d 如有必要，请单击视图 > 化合物列表命令。</p>	<ul style="list-style-type: none">“定性分析工作流程”程序在这些条件下找到了 10 种化合物。
4 检查化合物。请参见第 63 页上的图 38。	<p>a 单击“化合物列表”窗口中的隐藏当前的任何空列图标。</p> <p>b 单击“化合物列表”窗口中的第一个化合物。</p>	

任务 14. 使用积分查找化合物

步骤	详细说明	注释
	c 选择“化合物列表”窗口后，可按箭头键切换化合物。	

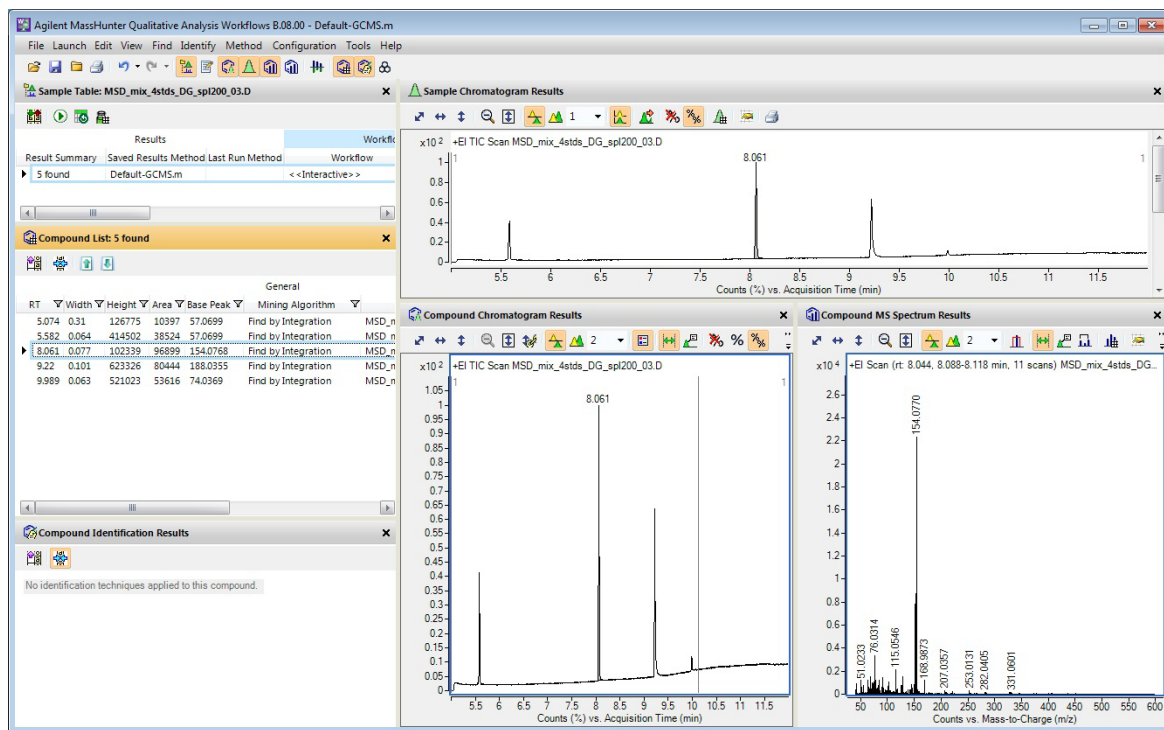


图 38 按积分查找结果

5 关闭数据文件。

a 单击文件 > 关闭数据文件。

b 提示是否保存结果时，单击否。

c 单击关闭。

• 如果要保存这些结果，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。

任务 15. 按碎片查找

对于在全离子 MS/MS 模式下在 TOF 或 Q-TOF 仪器上采集的 LC/MS 数据，按分子式查找算法支持一个可选的碎片确认步骤。在该步骤中，该算法通过在高能量质谱图中查找与分子离子共流出且由该化合物的谱库质谱图中的碎片表明的碎片离子来尝试确认化合物的身份。

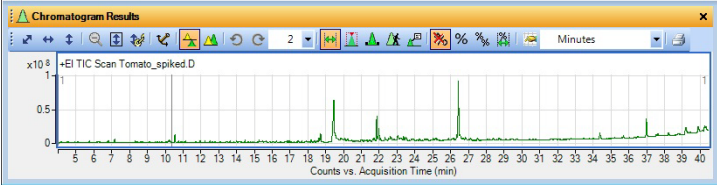
按碎片查找是一种类似的算法，它针对 GC/Q-TOF EI 数据的特征量身定制，这些数据只有高能量质谱图，其中主要呈现碎片离子，通常没有任何数量可观的分子离子。算法首先根据丰度和 m/z 值从 EI-MS 质谱库中选择 “n” 个碎片离子（优先选择 m/z 较高的碎片离子，因为它们包含更多结构信息）。然后，算法在谱库中的目标保留时间周围的时间窗口中提取这些离子的离子色谱图，并创建目标色谱峰列表。然后，它尝试查找按 RT 组合在一起的峰组，选择参考离子和确认碎片离子。参考离子可以是分子离子（如果存在），但不一定就是分子离子。算法随后将计算所选色谱峰共流出的程度。如果用户可设置的最小离子数的共流出得分超过了设定的阈值，则对目标化合物定性。

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 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
1 打开 Tomato_spiked.D 数据文件的 TIC。	<p>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程 图标。否则，单击文件 > 打开数据文件。</p> <p>b 单击 GCMS 杀虫剂 示例数据文件夹中的 Tomato_spiked.d 数据文件。</p> <p>c 清除调用结果数据复选框并单击打开。</p>	<ul style="list-style-type: none">在处理 GC/QQQ 数据时，可以使用 “常规” 工作流程。在处理 GC/Q-TOF 数据时，可以使用 “常规” 工作流程或 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程。

任务 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
<div></div> <div>图 39 Tomato_spiked.d 中的 TIC 色谱图</div>		
2 配置用户界面。	<ul style="list-style-type: none">单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。	<ul style="list-style-type: none">对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。
3 调用 GCQTOF_Pesticide_Example.m 方法文件。	<ul style="list-style-type: none">a 单击方法 > 打开。b 选择 GCQTOF_Pesticide_Example.m 方法并单击打开。c 单击位于程序左下角的方法编辑器选项卡。d 如果“目标物 / 可疑物筛选” > “按碎片查找”中的目标源存在错误，请更正路径。	<ul style="list-style-type: none">此方法安装在 \\MassHunter\methods\B.08.00 文件夹中。如果在调用此方法时看到任何蓝色三角形，则可暂时忽略它。如果您看到任何红色错误，请解决相应的问题。
4 将方法保存为 iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m, 其中“iii”是您的姓名首字母缩写。	<ul style="list-style-type: none">a 从顶层菜单中，单击方法 > 另存为。b 键入 iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m。c 单击保存按钮。	<ul style="list-style-type: none">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。
5 验证按碎片查找的参数。	<ul style="list-style-type: none">a 在“方法编辑器”窗口中，选择目标物 / 可疑物筛选 > 按碎片查找。b 单击目标源选项卡。c 选择 PCDL 文件夹中的 Pesticide_Example.cdb 谱库。d 单击匹配容差选项卡。e 对可能的 m/z 选择对称 (ppm)，并检查值。f 选中限制 EIC 提取范围复选框，选择对称，键入 1.0 作为预期保留时间。	<ul style="list-style-type: none">这些值已在此示例方法中设定。为可能的 m/z 选定的值可能取决于您是在高分离度模式还是双增益模式中运行采集方法。

2 查找和识别
任务 15. 按碎片查找

任务 15. 按碎片查找

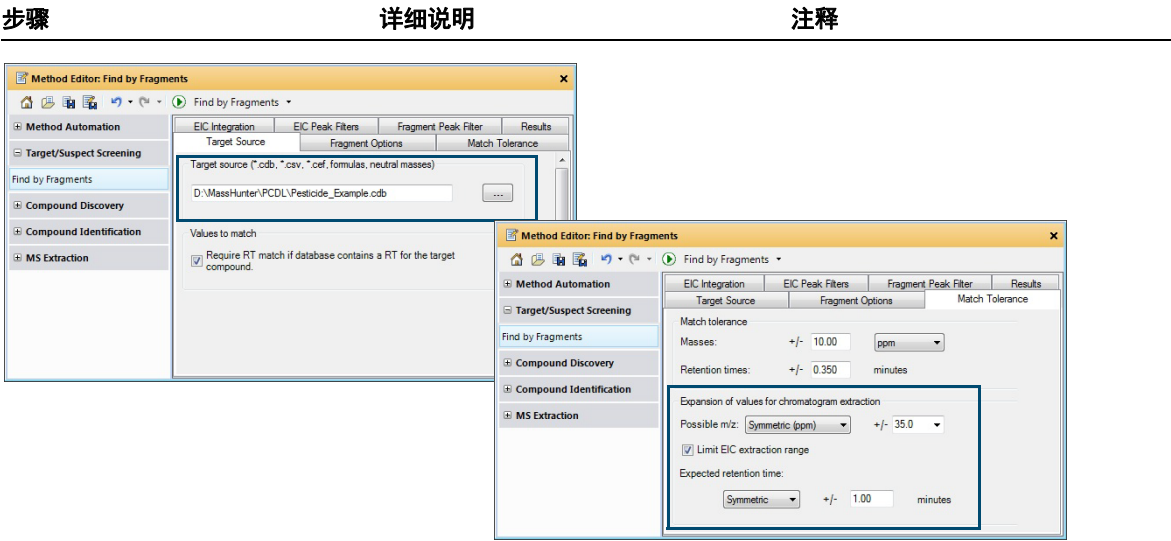


图 40 “按碎片查找”部分中的目标源选项卡和匹配容差选项卡

- g 单击碎片选项选项卡。
 - h 单击仅使用质谱库，对质谱库中最特定离子的数量键入 7。
 - i 对于保留时间差，键入 0.2。
- 离子数量越多，在结果中产生的特定性和置信度就越高；但是，较大的离子数量会导致程序运行时间变长。
 - 建议的保留时间差的范围是 0.1 至 0.2。该值是允许参考离子的保留时间漂移的差。参比离子由“定性分析工作流程”程序自动选择。

任务 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
	<p>j 清除信噪比复选框</p> <p>k 键入 70 作为共流出得分。</p> <p>l 单击定性碎片离子的最小数量并键入 1。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 如果选中信噪比复选框，则生成假阴性的可能性较高（如果比率太低）。• 建议的起始值为 1 至 3。设置为 1 需要两个定性离子：一个参比离子和一个定性离子。• 保留其他选项卡中的值不变。

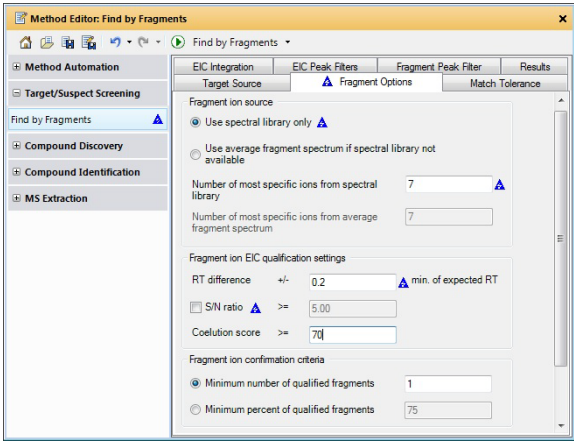


图 41 “按碎片查找”部分中的碎片选项选项卡

6 运行按碎片查找算法。	<ul style="list-style-type: none">• 单击  以便对数据文件运行按碎片查找算法。• 单击查找 > 按碎片查找。	<ul style="list-style-type: none">• “定性分析工作流程”程序利用这些参数值找到了 5 种化合物。
7 保存此方法。	<ul style="list-style-type: none">• 按照以下三种方式中的一种来保存方法：<div> 单击方法编辑器中的保存方法图标。</div>• 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。	

2 查找和识别

任务 15. 按碎片查找

任务 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
8 检查化合物。请参见图 42。	<p>a 单击化合物识别结果选项卡（如果不可见）。</p> <p>b 关闭“结构查看器”窗口。</p> <p>c 单击视图 > 化合物碎片质谱图结果。</p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none">在“化合物列表”窗口中选择某个化合物时，将在其他窗口中显示结果。

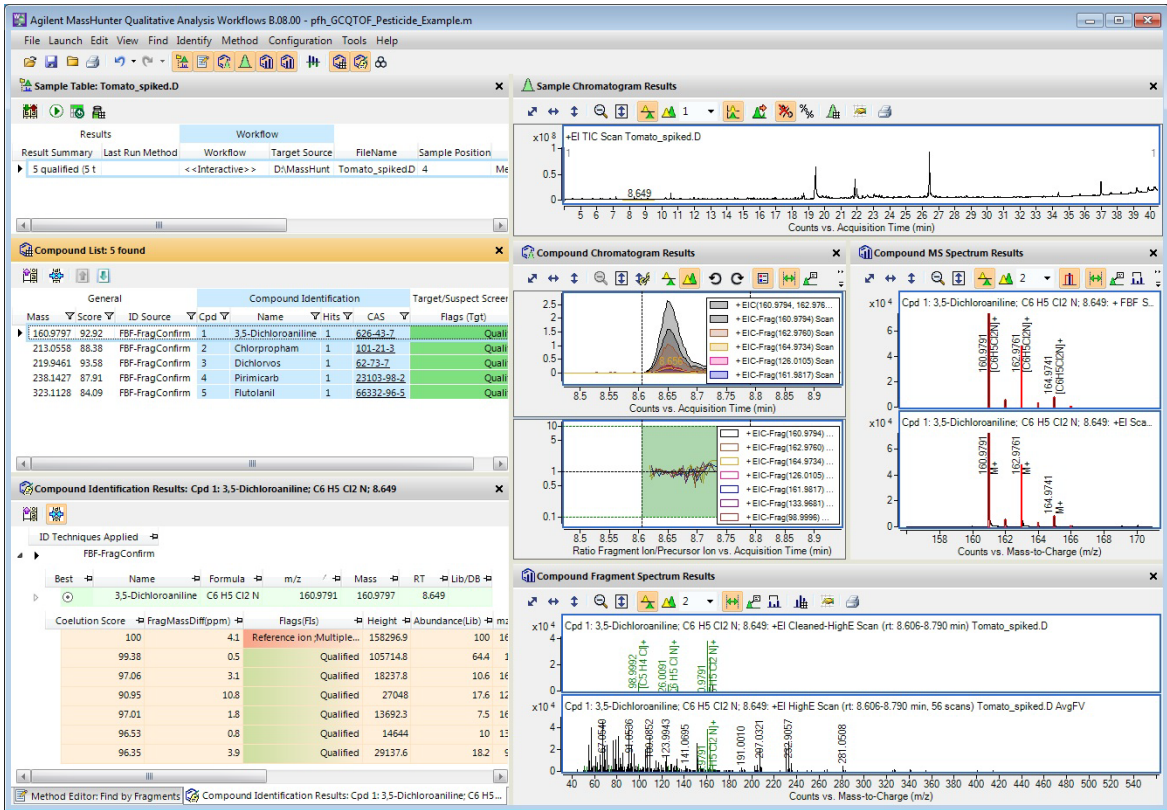



图 42 按碎片查找结果

任务 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
e	单击或按箭头键来更改“化合物列表”中的化合物，以一次查看一种化合物。	<ul style="list-style-type: none">此表的第一级显示您运行的所有识别算法的摘要信息。第二级（蓝色）显示用于创建算法总分的各个分数。仅当找到了一个分子离子时才会显示此行，它反映该分子离子与目标化合物的预期质量、RT 和同位素分布的匹配程度。底部的表显示碎片离子及其共流出得分。还显示是否已对碎片离子定性。
f	检查“化合物识别结果”窗口中的信息。	
g	单击行开头的箭头图标以展开表的级别。展开表的级别后，该图标将变为  - 图标。	

Compound Identification Results: Cpd 1: 3,5-Dichloroaniline; C6 H5 Cl2 N; 8.649

ID Techniques A

- FBF-FragCo...



Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT
	3,5-Dichloroaniline	C6 H5 Cl2 N	160.9791	160.9797	160.9799	1.56	92.92	8.649
Coelution Sc	FragMassDiff(ppm)	Flags(FIs)	Height	Abundance(Lib)	mz(Lib)	m/z	ObsPkHeight(MS)	Compound
100	4.1	Reference ion ;...	158296.9	100	160.9794	160.98	19070.9	3,5-Dichlor...
99.38	0.5	Qualified	105714.8	64.4	162.976	162.9761	25291.8	3,5-Dichlor...
97.06	3.1	Qualified	18237.8	10.6	164.9734	164.9739	4460.7	3,5-Dichlor...
90.95	10.8	Qualified	27048	17.6	126.0105	126.0091	4817.5	3,5-Dichlor...
97.01	1.8	Qualified	13692.3	7.5	161.9817	161.982	2825	3,5-Dichlor...
96.53	0.8	Qualified	14644	10	133.9681	133.968	3383.4	3,5-Dichlor...
96.35	3.9	Qualified	29137.6	18.2	98.9996	98.9992	6066.9	3,5-Dichlor...

图 43 “化合物识别结果” 窗口

2 查找和识别
任务 15. 按碎片查找

任务 15. 按碎片查找

步骤	详细说明	注释
	<p>h 在“化合物色谱图结果”窗口中查看结果。</p> <p>i 确认“共流出图谱”窗格可见。</p> <p>j 确认色谱图已叠加。工具栏中的离子的设置如下所示：</p> 	<ul style="list-style-type: none">“化合物色谱图结果”窗口显示每个碎片离子的单个离子跟踪。还显示共流出图谱，它显示碎片离子与化合物共流出的接近程度。为了便于参考，将显示一条 y 值为 1 的黑线。值为 1 表示定性离子完全与参考离子色谱图共流出。随着比率接近 1，表明定性离子更紧密地与参考离子共流出。

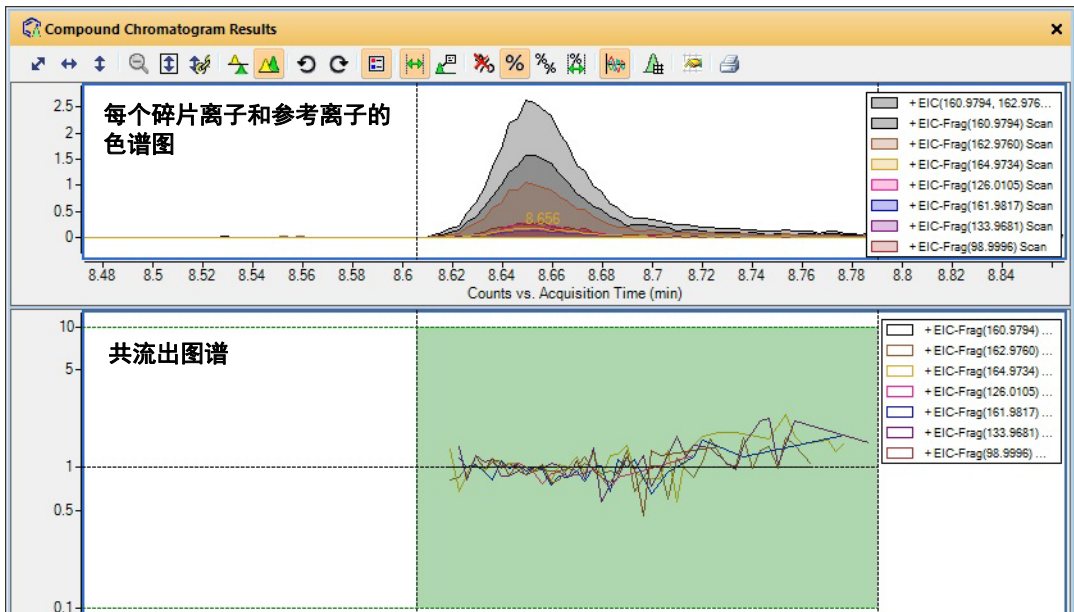


图 44 “化合物识别结果”窗口

- 9 关闭数据文件。
- a 单击文件 > 关闭数据文件。
 - b 提示是否保存结果时，单击否。
- 如果要保存这些结果，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。

任务 16. 在谱库中检索质谱图

在此任务中，首先从 GC/Q-TOF 数据文件对峰质谱图进行积分和提取。您将使用 MassHunter 定性分析导航器程序。然后，为每个峰质谱图生成可能的分子式。


任务 16. 在谱库中检索质谱图

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 数据文件的 TIC。	<div>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析导航器图标。 否则，单击文件 > 打开数据文件。</div> <div>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 数 据文件。</div> <div>c 清除调用结果数据复选框并单击 打开。</div>	<div>• 如果调用结果数据复选框不可 用，则没有在数据文件中保存 任何结果。有关如何保存结果 的说明，请参见第 75 页上的 “任务 17. 保存结果”。</div> <div>• 将调用 “常规” 工作流程。</div>
2 配置用户界面。	<div>a 单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省 布局。</div> <div>b 单击方法 > 打开。</div> <div>c 选择 Default-GCMS.m。</div> <div>d 单击确定。</div>	<div>• 对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。</div>
3 积分和提取峰质谱图。	<div>a 单击 “视图” > “方法编辑器”。</div> <div>b 在 “方法编辑器” 窗口中，单击 “色谱图” > “积分 (MS)” 部分。</div> <div>c 单击峰过滤器选项卡。</div> <div>d 单击峰高按钮。</div> <div>e 选中相对峰高复选框。</div> <div>f 单击色谱图 > 积分并提取峰质 谱图。</div>	

2 查找和识别

任务 16. 在谱库中检索质谱图

任务 16. 在谱库中检索质谱图

步骤	详细说明	注释
4 对峰质谱图 1 到 4 执行谱库检索。	<p>a 在“数据浏览器”窗口中，单击质谱图。</p> <p>b 在“方法编辑器”窗口中，单击识别质谱图 > 识别工作流程。</p> <p>c 选中按谱库 / 数据库检索识别复选框。</p> <p>d 为 demo.l 的分数（反向）键入 50。</p> <p>e 选择识别质谱图 > 谱库检索设置部分。</p> <p>f 单击峰过滤器选项卡。</p> <p>g 清除“峰过滤器”选项卡中的绝对峰高复选框。</p> <p>h 在“方法编辑器”中，单击“识别质谱图” > “生成分子式”。</p> <p>i 单击“碎片分子式”选项卡。</p> <p>j 选中使用分子式标注碎片质谱峰复选框。</p> <p>k 在主菜单中单击识别 > 在谱库 / 数据库中检索质谱图。</p> <p>l 关闭“方法编辑器”窗口。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 识别工作流程中可以有多谱库和数据库。• 如果单击“检索所有谱库 / 数据库”，则该算法将返回所有谱库中的匹配项。• 如果选中“识别质谱图” > “生成分子式”部分的“碎片分子式”选项卡中的用分子式标注碎片质谱图峰复选框，则单击识别 > 在谱库 / 数据库中检索质谱图时，会向“MS 质谱图结果”窗口中的质谱图添加峰注释。• 分数（正向）是正向检索分数的最小值。分数（反向）是反向检索分数的最小值。
5 修改可见的列。	<p>a 右键单击“质谱图识别结果”窗口，然后单击添加 / 删除列。在添加 / 删除列对话框中，选中要显示的列。单击确定。</p> <p>b 单击“质谱图识别结果”窗口中的“隐藏当前任何空白列”图标 。</p>	

任务 16. 在谱库中检索质谱图

步骤	详细说明	注释
6 检查结果。	<ul style="list-style-type: none"> 查看“MS 质谱图结果”窗口中显示在峰上方的“分子式和离子种类”。 	<ul style="list-style-type: none"> 聚焦在“数据浏览器”上时，您可以按向上和向下箭头键以在质谱图之间移动。 请注意，仅当启用了碎片注释时，才会看到标注的碎片离子（绿色）和“其他”离子（在本例中为红色）的双色显示。如果只看到绿色，您可以更改质谱图颜色（单击编辑 > 选择定义的颜色），以便看到两种颜色。

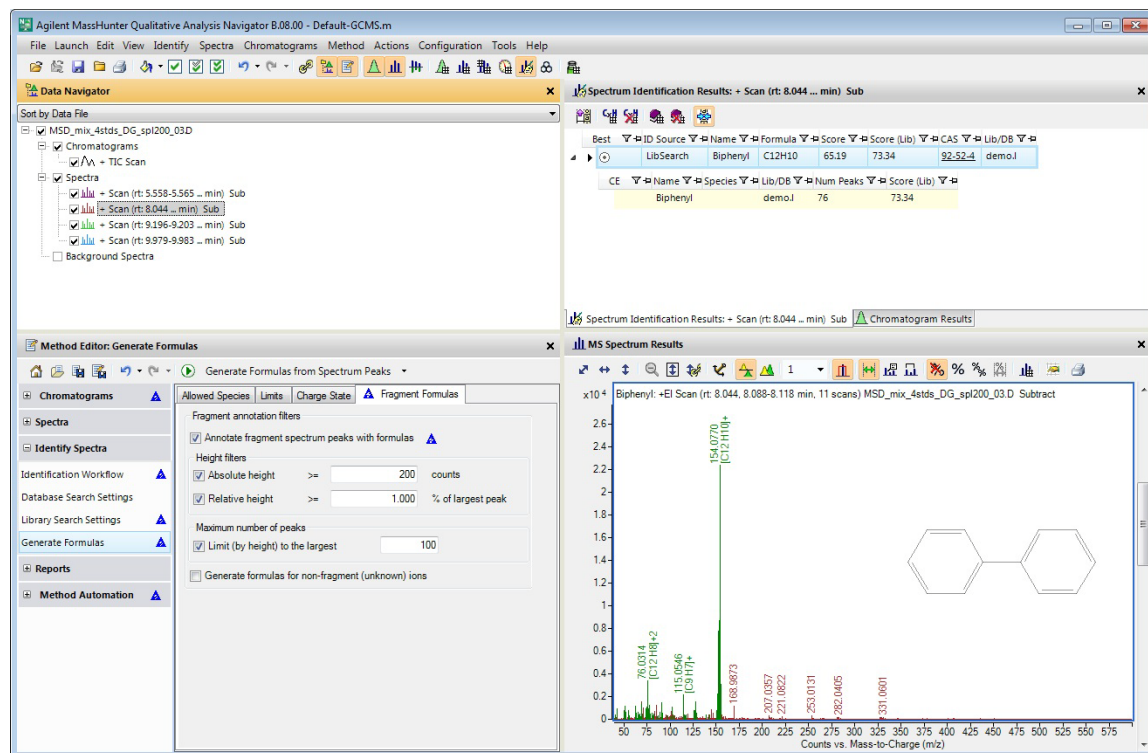


图 45 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

2 查找和识别

任务 16. 在谱库中检索质谱图

任务 16. 在谱库中检索质谱图

步骤	详细说明	注释
7 在“MS 峰 1”窗口中查看每个质谱图的结果。	<p>a 单击视图 > MS 质谱图峰列表 1。</p> <p>b 右键单击，然后单击添加 / 删除列。</p> <p>c 验证显示在图 46 中的列在显示以下列表中。</p> <p>d 按离子类型列排序。</p> <p>e 如果离子类型是碎片离子，则在“MS 质谱图结果”窗口中，“分子式和离子种类”以绿色显示在每个峰上。</p>	<ul style="list-style-type: none">离子类型可以是分子离子、碎片离子或空白。如果是碎片离子，则“丢失分子式”和“丢失质量”列将显示从分子离子转变为该离子的分子式和质量。分子式和离子种类显示该离子的分子式和离子种类。

MS Peaks One: + Scan (rt: 8.044 ... min) Sub													
m/z	Species	Abund	Formula	Ion Species	Diff (ppm)	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type	Area	End	Start		
77.0383	M+2	911.4	2	[C12 H10]+2	3.71			Molecular Ion	18	77.0791	77.0185		
154.077	M+	22388.05	1	[C12 H10]+	4.28			Molecular Ion	669	154.1769	153.9911		
155.0808	M+	3071.64	1	[C12 H10]+	1.64			Molecular Ion	98	155.1362	155.0143		
41.0405	M+	395.33	1	[C3 H5]+	-46.69	C9H5	113	Fragment Ion	5	41.0629	41.0297		
43.0548	M+	958.84	1	[C3 H7]+	-12.17	C9H3	111	Fragment Ion	15	43.0979	43.0375		
50.0157	M+	794.64	1	[C4 H2]+	-12.68	C8H8	104.1	Fragment Ion	11	50.0588	50.0018		
51.0233	M+	1233.15	1	[C4 H3]+	-6.79	C8H7	103.1	Fragment Ion	21	51.0781	50.9917		
52.0299	M+	627.86	1	[C4 H4]+	17.02	C8H6	102	Fragment Ion	12	52.062	52.0163		
55.0553	M+	832.37	1	[C4 H7]+	-19.56	C8H3	99	Fragment Ion	15	55.0913	55.0229		
56.0599	M+	332.43	1	[C4 H8]+	37.83	C8H2	98	Fragment Ion	5	56.0956	56.0353		
63.0231	M+2	1192.42	2	[C10 H6]+2	-3.04	C2H4	28	Fragment Ion	20	63.0735	63.0004		
63.5252	M+2	124.88	2	[C10 H6]+2	-9.52	C2H4	28	Fragment Ion	2	63.5407	63.504		
64.0316	M+	536.52	1	[C5 H4]+	-13.2	C7H6	90	Fragment Ion	10	64.0741	64.0188		
65.0385	M+	646.84	1	[C5 H5]+	0.98	C7H5	89	Fragment Ion	13	65.0826	65.0129		
66.0461	M+	391.73	1	[C5 H6]+	5.3	C7H4	88	Fragment Ion	8	66.0943	66.0287		
67.0542	M+	448.98	1	[C5 H7]+	0.52	C7H3	87	Fragment Ion	6	67.0807	67.043		
68.0586	M+	226.76	1	[C5 H8]+	50.16	C7H2	86	Fragment Ion	6	68.084	68.027		

图 46 包含离子类型、丢失分子式、丢失质量以及分子式和离子种类列的“MS 峰 1”表

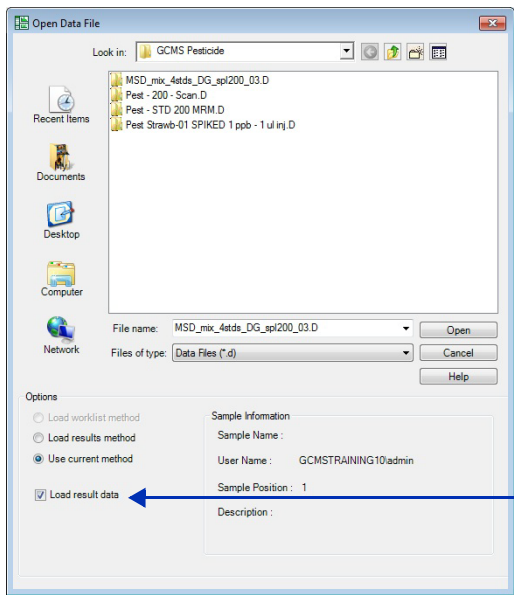
8 (可选) 关闭数据文件。	<p>a 单击文件 > 关闭数据文件。</p> <p>b 单击关闭。</p>	<ul style="list-style-type: none">如果要保存这些结果，请参见第 75 页上的“任务 17. 保存结果”。
----------------	---	---

任务 17. 保存结果

在此任务中，您可以保存当前数据文件的结果。

任务 17. 保存结果

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



将选中“调用结果数据”复选框。

图 47 “打开数据文件”对话框

2 查找和识别
任务 17. 保存结果

任务 17. 保存结果

步骤	详细说明	注释
3 检查结果。	<p>a 单击质谱图识别结果窗口。</p> <p>b 检查结果。</p>	

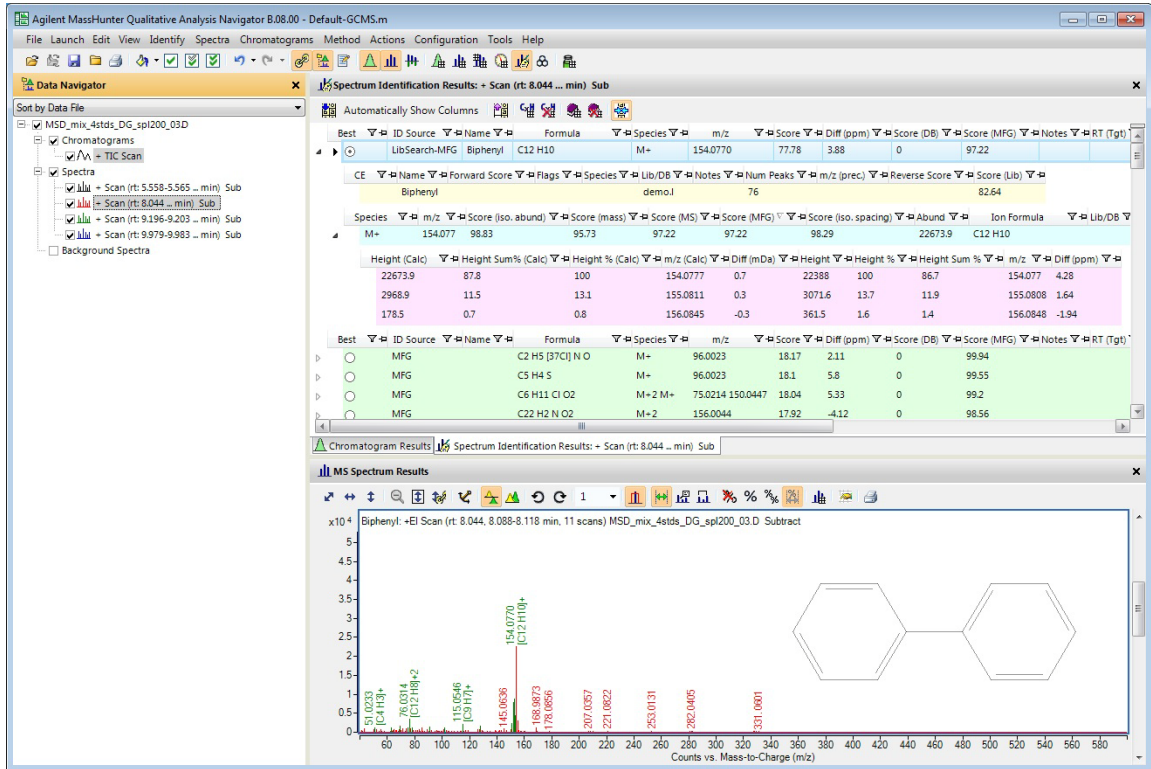


图 48 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

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

任务 17. 保存结果

步骤	详细说明	注释
5 再次打开数据文件，不调用结果。	<div>a 单击文件 > 打开。此时会打开打开数据文件对话框。</div> <div>b 选择一个数据文件。对于此示例，请选择 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。</div> <div>c 清除调用结果数据复选框。</div> <div>d 单击打开按钮。</div>	<div>• 如果您没有调用结果，则缺省情况下，在打开数据文件时会打开 TIC。</div>

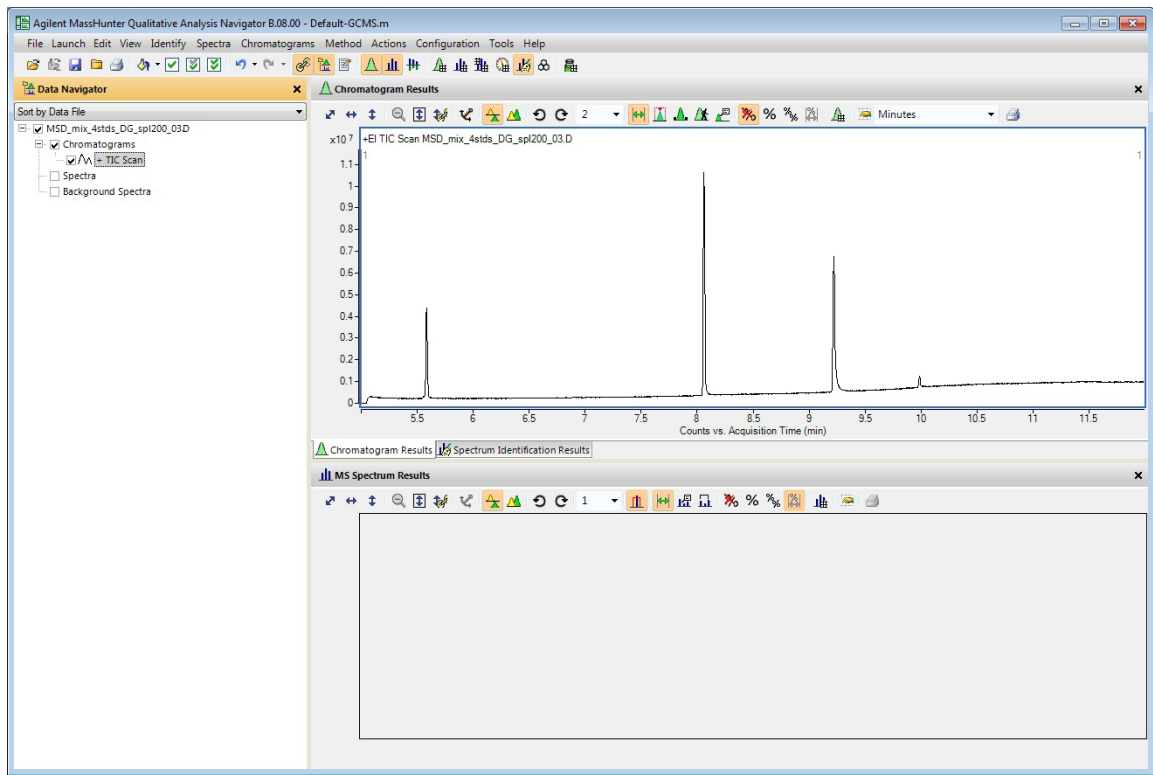
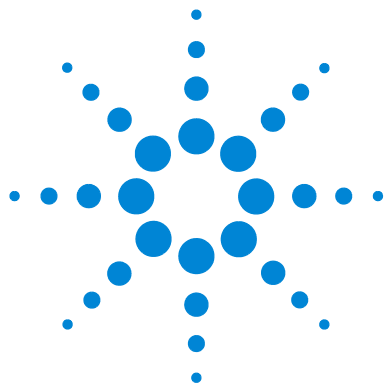


图 49 谱库检索结果和为第一个峰质谱图生成分子式

6 关闭数据文件。	<div>a 单击文件 > 关闭数据文件。</div> <div>b 单击否。</div>
-----------	--

2 查找和识别

任务 17. 保存结果



练习 3

使用工作流程、导出和打印

任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程	79
任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法	83
任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法	87
任务 21. 导出 CEF 文件	90
任务 22. 打印分析报告	93
任务 23. 打印化合物报告	97

在这些任务中，您将了解如何设置和运行工作流程。

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 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

首次开始使用“定性分析工作流程”程序时，将调用 `default.m` 方法。对于 GC/MS，从 `Default-GCMS.m` 方法入手比较好。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。您不能覆盖 `Default.m` 或 `Default-GCMS.m` 方法。



3 使用工作流程、导出和打印

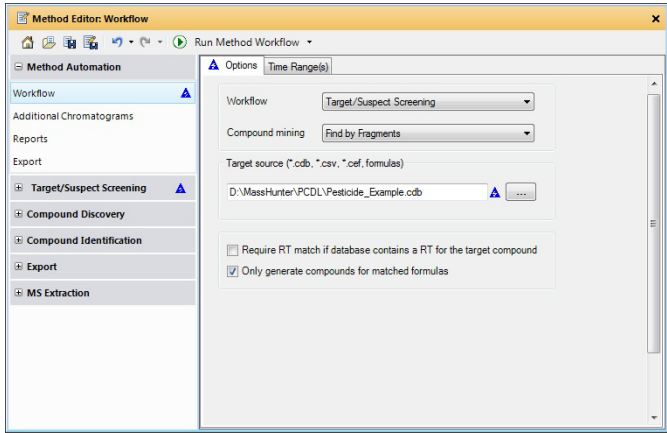

任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

在“定性分析导航器”程序中，您只能运行自定义工作流程。在“定性分析工作流程”程序中，您可以运行任何工作流程，但是无法执行自定义工作流程中的某些操作。您只能在“定性分析工作流程”程序中编辑化合物挖掘的参数。您将在此任务中使用“定性分析工作流程”程序。

任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

步骤	详细说明	注释
1 打开 Tomato_spiked.d 数据文件的 TIC。	<p>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程 图标。否则，单击 文件 > 打开数据文件。</p> <p>b 单击 GCMS 杀虫剂 示例数据文件夹中的 Tomato_spiked.d 数据文件。</p> <p>c 清除 调用结果数据 复选框，然后单击 打开。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 对于 GC/MRM 数据文件，您可以使用 目标物 / 可疑物筛选 或 自定义 工作流程。• 对于 GC/TOF 和 GC/Q-TOF 文件，您可以使用 目标物 / 可疑物筛选、化合物探索 或 自定义 工作流程。• 如果选择 自定义，则在“定性分析工作流程”程序中无法执行某些操作。
2 配置用户界面。	<p>a 单击 配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。</p> <p>b 单击 方法 > 打开。</p> <p>c 选择 Default-GCMS.m。</p> <p>d 单击 确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。
3 设置方法以运行目标物 / 可疑物筛选工作流程。 <ul style="list-style-type: none">• 选择 default_GC.csv 作为目标。	<p>a 在“方法编辑器”窗口中，选择 方法自动处理 > 工作流程。</p> <p>b 选择 目标物 / 可疑物筛选 作为工作流程。</p> <p>c 如有必要，选择 化合物挖掘 算法。在本例中，按碎片查找 是唯一的选项。</p> <p>d 选择 Pesticide_Example.cdb 作为 目标源。</p> <p>e 选中 仅报告已定性的化合物 复选框。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 当只有 GC/Q-TOF 或 GC/TOF 数据文件打开时，对于 目标物 / 可疑物筛选 工作流程来说，按碎片查找 是化合物挖掘算法的唯一选项。• 当只有 MRM 数据文件打开时，对于 目标物 / 可疑物筛选 工作流程来说，“按 MRM 查找”是化合物挖掘算法的唯一选项。• 更新 方法自动处理 > 工作流程 部分中的 目标源 时，目标物 / 可疑物筛选 > 按碎片查找 > 目标源 选项卡中的 目标源 也会更新。


任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

步骤	详细说明	注释
		<p>可修改“目标物 / 可疑物筛选”部分中的参数。</p> <p>您可以单击“保存方法”图标以保存当前方法。</p>
图 50 “方法自动处理” > “工作流程” 部分		
4 测试工作流程以确保找到五种化合物且它们已定性。	<ul style="list-style-type: none">单击运行方法工作流程图标。也可以单击“方法” > “运行方法工作流程”。	<ul style="list-style-type: none">如果单击方法 > 运行方法自动处理 (工作流程 + 报告)，则会先运行方法工作流程，然后再生成报告。
5 将方法保存为 <i>iii_GCexercise1</i> ，其中“ <i>iii</i> ”是您的姓名首字母缩写。	<ul style="list-style-type: none">a 从顶层菜单中，单击方法 > 另存为。b 键入 <i>iii_GCexercise1.m</i>。c 单击保存按钮。	<ul style="list-style-type: none">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。您可以单击“保存方法”图标以保存当前方法。

3 使用工作流程、导出和打印

任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

任务 18. 设置和运行目标物 / 可疑物筛选工作流程

步骤	详细说明	注释
6 检查结果。	<p>a 关闭“结构查看器”窗口。</p> <p>b 单击视图 > 化合物碎片质谱图结果。</p> <p>c 如有必要，单击“化合物色谱图结果”工具栏中的“叠加”图标 。</p> <p>d 单击“化合物列表”窗口中的第二个化合物。</p> <p>e 查看其他化合物以探究结果。</p> <p>f 关闭数据文件。</p>	<ul style="list-style-type: none">化合物叠加模式处于打开状态。“样品色谱图结果”窗口中的红色色谱图是第二个化合物的化合物色谱图。

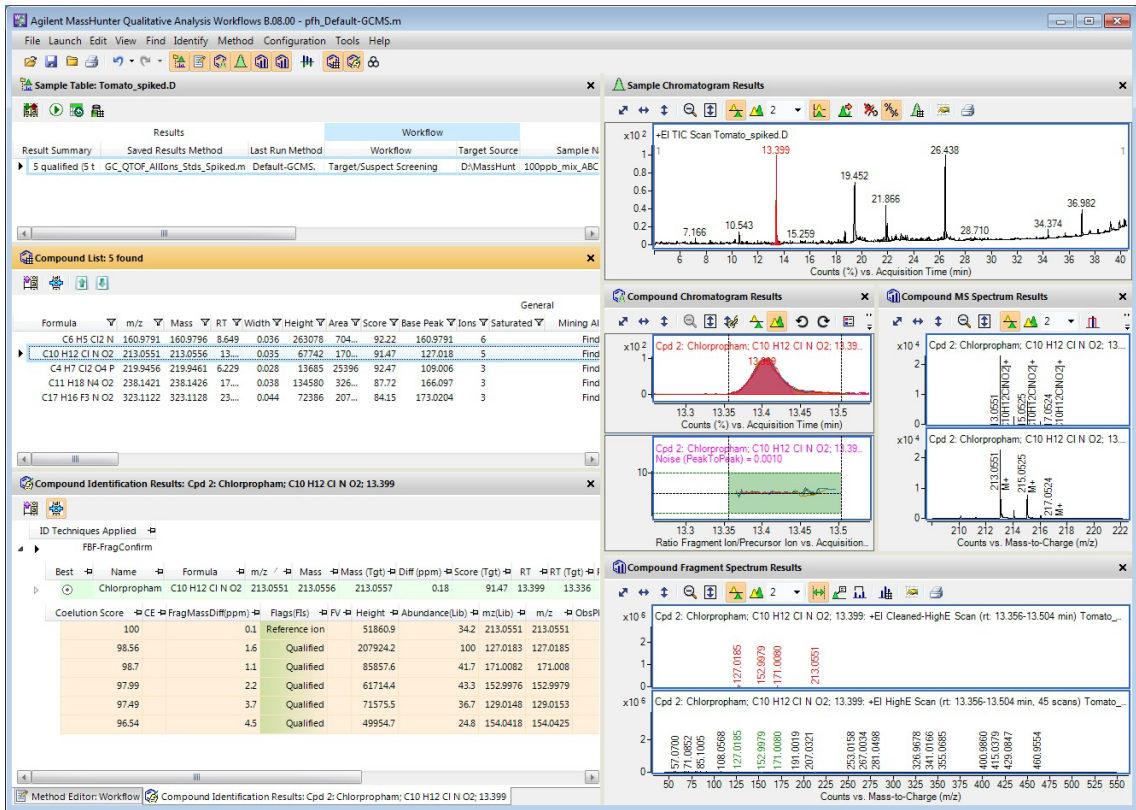


图 51 运行目标物 / 可疑物筛选工作流程后

任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法

在此任务中，您将设置一种运行化合物探索工作流程的定性分析方法。该工作流程运行选定的化合物挖掘算法以及您选中的识别算法。

在“定性分析导航器”程序中，您只能运行自定义工作流程。在“定性分析工作流程”程序中，您可以运行任何工作流程，但是无法执行自定义工作流程中的某些操作。您只能在“定性分析工作流程”程序中编辑化合物挖掘的参数。您将在此任务中使用“定性分析工作流程”程序。

任务 19. 使用“GC/Q-TOF 化合物筛查”工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件的 TIC。	<p>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。</p> <p>b 单击 GCMS Pesticide 示例数据文件 文件夹中的 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d。</p> <p>c 清除调用结果数据复选框并单击 打开。</p>	
2 配置用户界面。	<p>a 单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省 布局。</p> <p>b 单击方法 > 打开。</p> <p>c 选择 Default-GCMS.m。</p> <p>d 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。

3 使用工作流程、导出和打印

任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法

任务 19. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
3 设置方法以运行化合物探索工作流程。	<p>a 在 “方法编辑器” 窗口中，单击 方法自动处理 > 工作流程。</p> <p>b 选择化合物探索作为工作流程。 缺省情况下，化合物挖掘算法为自动选择化合物挖掘，并且按谱库 / 数据库检索识别处于选中状态。缺省情况下，按分子式生成识别处于清除状态。</p>	<ul style="list-style-type: none">• “自动选择化合物挖掘” 将根据正在分析的数据文件的类型选择可用的最佳化合物挖掘算法。• 在此方法中，表中列出了两个谱库 / 数据库文件。

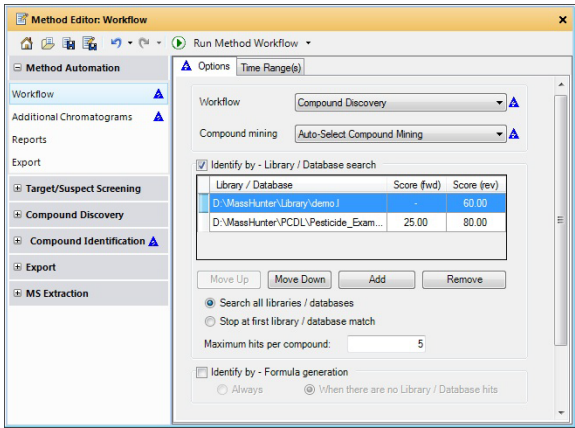



图 52 工作流程为化合物探索时的 “方法自动处理” > “工作流程” 部分

- 4 将方法保存为 *iii_GCexercise2*，其中 “*iii*” 是您的姓名首字母缩写。
- a 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。
- b 键入 *iii_GCexercise2*。
- c 单击**保存**按钮。

任务 19. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
5 测试工作流程。	<p>a 单击运行方法工作流程图标  以运行工作流程。也可以单击方法 > 运行方法工作流程或单击方法 > 运行方法自动处理（工作流程 + 报告）。</p> <p>b 检查结果。找到了 26 种化合物，并识别了 4 种丰度最高的化合物。该信息将在“样品表”的结果摘要列中提供。</p>	<ul style="list-style-type: none">在采集工作流程中运行方法时，将运行工作流程并生成报告。设置方法后，只需单击“运行”按钮。系统将运行化合物挖掘算法，并通过将精确质量数据库检索和质谱库匹配结合使用来尝试识别所有化合物。

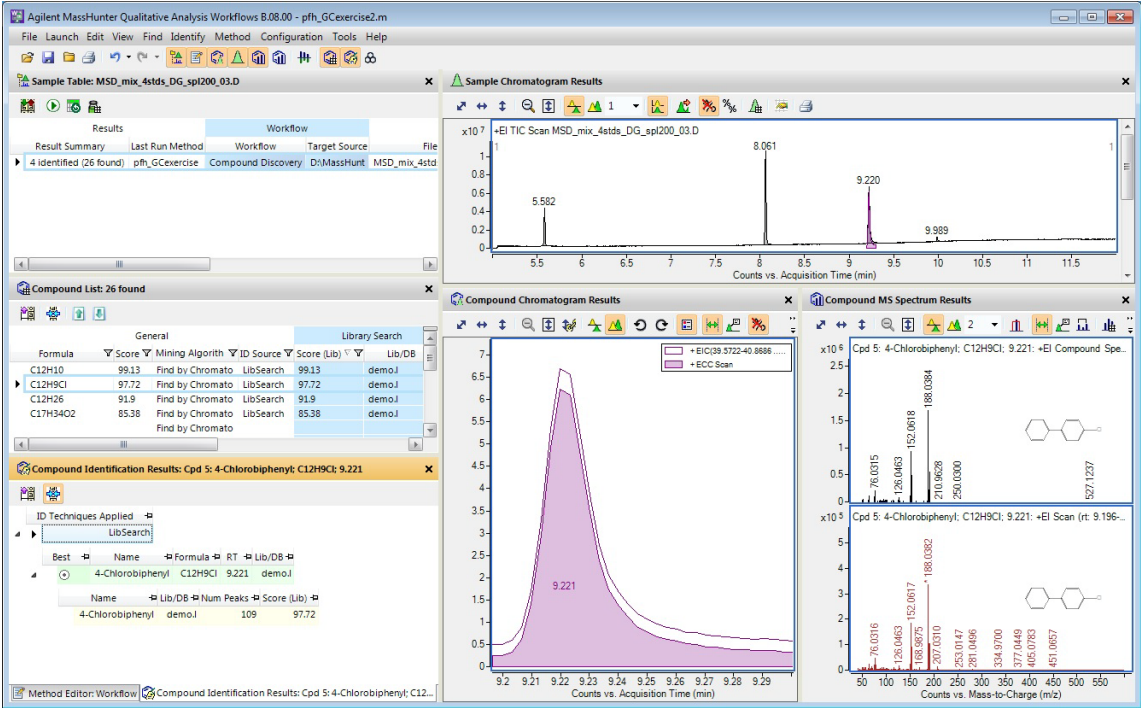


图 53 运行化合物筛选工作流程所得到的结果

3 使用工作流程、导出和打印
任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法

任务 19. 使用 “GC/Q-TOF 化合物筛查” 工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
6 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 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法

在此任务中，您将设置一个定性分析方法，其中包含要按特定顺序运行的分析操作的列表。“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序中的操作列表有所不同。

在“定性分析导航器”程序中，您只能运行自定义工作流程。在“定性分析工作流程”程序中，您可以运行任何工作流程，但是无法执行自定义工作流程中的某些操作。您只能在“定性分析工作流程”程序中编辑化合物挖掘的参数。您将在此任务中使用“定性分析导航器”程序。

任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件的 TIC。	<p>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析导航器 图标。否则，单击 文件 > 打开数据文件。</p> <p>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。</p> <p>c 清除 调用结果数据 复选框并单击 打开。</p>	
2 配置用户界面。	<p>a 单击 配置 > 窗口布局 > 恢复缺省布局。</p> <p>b 单击 方法 > 打开。</p> <p>c 选择 Default-GCMS.m。</p> <p>d 单击 确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。
3 向自定义工作流程添加操作。	<p>a 如有必要，单击 视图 > 方法编辑器。</p> <p>b 在“方法编辑器”窗口中，选择 方法自动处理 > 工作流程。</p> <p>c 针对 工作流程 选择 自定义。 缺省情况下，自定义工作流程将提取附加色谱图、积分和提取峰质谱图，并识别选定的质谱图。</p>	<ul style="list-style-type: none">操作将按在“要运行的操作”列表中列出的顺序运行。可使用“选项”选项卡中的箭头按钮来更改列表中项目的顺序。

3 使用工作流程、导出和打印

任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法

任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
4 查看“识别选定质谱图”操作的参数。	<p>a 单击“方法编辑器”窗口中的识别质谱图 > 识别工作流程部分。</p> <p>b 检查参数。</p> <p>c 单击数据库检索设置选项卡。</p> <p>d 检查参数。</p> <p>e 单击谱库检索设置选项卡。</p> <p>f 检查参数。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 请注意，方法管理器的其他部分将显示蓝色三角形。这表示相同的参数值同样也在其他位置发生了更改。
5 将方法保存到 <i>iii_GCexercise3</i> ，其中“ <i>iii</i> ”是您的姓名首字母缩写。	<p>a 从顶层菜单中，单击方法 > 另存为。</p> <p>b 键入 <i>iii_GCexercise3</i>。</p> <p>c 单击保存按钮。</p>	
6 测试自定义工作流程。	<p>a 单击“方法编辑器”窗口中的方法自动处理 > 工作流程部分。</p> <p>b 单击运行方法工作流程图标  以对数据文件运行工作流程。也可以单击方法 > 运行方法工作流程。</p>	

任务 20. 使用自定义工作流程设置和运行方法

步骤	详细说明	注释
7 检查结果。	<p>a 单击“质谱图识别结果”选项卡以显示“质谱图识别结果”窗口。此窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。</p> <p>b 单击 9.2 分钟处的质谱图。</p> <p>c 单击视图 > 对比结果。</p> <p>d 单击“视图” > “结构查看器”。</p> <p>e 检查结果。</p>	<ul style="list-style-type: none">运行自定义工作流程时，如果单击运行方法自动处理（工作流程 + 报告），将会生成报告。“质谱对比结果”窗口随“MS 质谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。

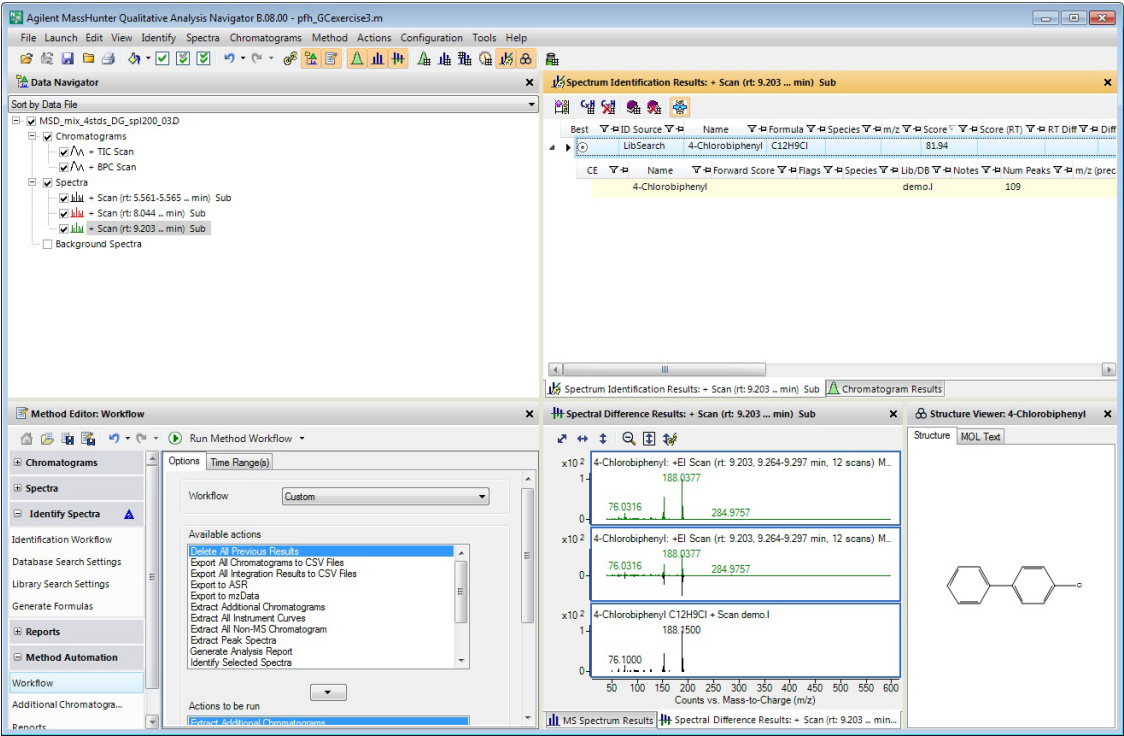


图 54 在“定性分析导航器”程序中运行自定义工作流程所得到的结果

- 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。

任务 21. 导出 CEF 文件

您可以导出包含化合物信息的 CEF 文件。可以将此 CEF 文件导入到其他程序，如 MassHunter Mass Profiler 和 Mass Profiler Professional。您只能从“MassHunter 定性分析工作流程”程序中导出 CEF 文件。

任务 21. 导出 CEF 文件

步骤	详细说明	注释
1 打开 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。	<p>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程图 标。否则，单击文件 > 打开数据 文件。</p> <p>b 单击 GCMS Pesticide 文件夹中的 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d。</p> <p>c 清除调用结果数据复选框。</p> <p>d 单击打开。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 您能以交互方式导出或在运行 方法自动处理（工作流程 + 报告）时导出 CEF 文件。
2 配置用户界面。	<p>a 单击配置 > 窗口布局 > 恢复缺省 布局。</p> <p>b 单击方法 > 打开。</p> <p>c 选择 Default-GCMS.m。</p> <p>d 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 对于这些示例，从 Default-GCMS.m 方法入手。
3 查找化合物。	<ul style="list-style-type: none">• 运行任意化合物挖掘算法。例如， 单击查找 > 按分子特征查找。	<ul style="list-style-type: none">• 将使用 CEF 文件导出化合物。

任务 21. 导出 CEF 文件（续）

步骤	详细说明	注释
4 导出 CEF 文件。	<p>a 要交互式导出文件，请单击文件 > 导出 > 以 CEF 格式。</p> <p>b 单击所有结果选项。</p> <p>c 选择导出文件的位置。</p> <p>d 单击确定。</p>	<ul style="list-style-type: none">可在 Mass Profiler Professional 软件和 MassHunter Mass Profiler 软件中导入 CEF 文件。

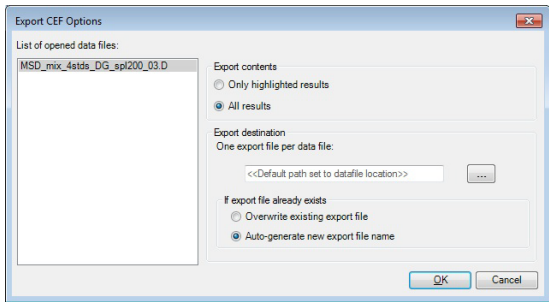


图 55 “导出 CEF 选项”对话框

5 编辑方法以导出 CEF 文件。	<p>a 单击“方法编辑器”选项卡以查看“方法编辑器”窗口。缺省情况下，该窗口随“化合物识别结果”窗口一同显示在选项卡中。</p> <p>b 单击“方法自动处理”>“导出”。</p> <p>c 选中 CEF 复选框。</p> <p>d 查看此部分中的其他参数。</p>	<ul style="list-style-type: none">可采用多种格式导出结果。可修改某些算法的导出参数。您在导出 CEF 文件时不指定附加参数。
-------------------	--	--

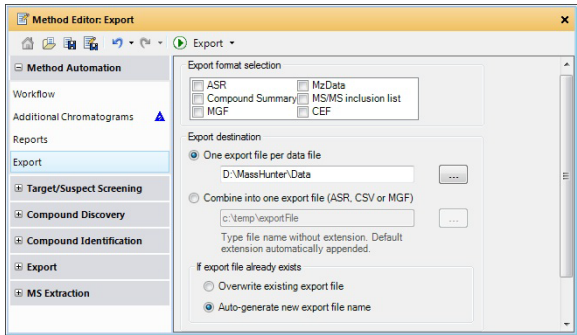



图 56 “方法编辑器”窗口中的“方法自动处理”>“导出”部分

3 使用工作流程、导出和打印

任务 21. 导出 CEF 文件

任务 21. 导出 CEF 文件（续）

步骤	详细说明	注释
6 运行“方法自动处理（工作流程 + 报告）”算法。	<p>a 单击方法自动处理 > 工作流程。</p> <p>b 单击方法 > 运行方法自动处理（工作流程 + 报告）。也可以单击运行图标  旁边的箭头以对数据文件运行工作流程。</p>	<ul style="list-style-type: none">运行“方法自动处理（工作流程 + 报告）”时，将运行以下算法：方法工作流程提取附加色谱图生成报告导出结果

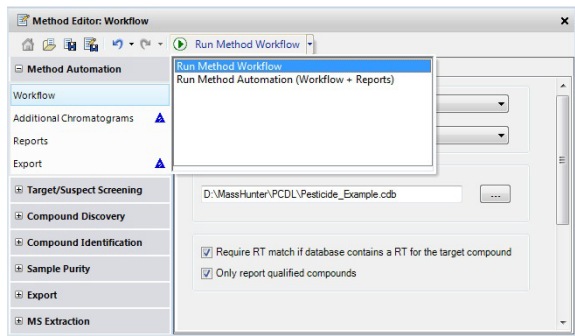


图 57 显示运行选项的“方法自动处理”>“工作流程”部分。

- 7 将方法保存到 *iii_GCexercise4*，其中“*iii*”是您的姓名首字母缩写。
- a 从顶层菜单中，单击**方法 > 另存为**。
- b 键入 *iii_GCexercise4*。
- c 单击**保存**按钮。

任务 22. 打印分析报告

无论何时要在“定性分析导航器”程序中打印分析报告，都应遵循以下说明。

分析报告可以包含提取和积分色谱图、提取质谱图、在数据库中检索峰质谱图或从峰质谱图生成分子式的结果。

任务 22. 打印分析报告

步骤	详细说明	注释
1 如果未调用 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件，则打开此数据文件， 并对在第 87 页上的“任务 20. 使用自定义工作流程设置和运 行方法”中创建的 iii_GCexercise3.m 方法运行工作 流程。	<div>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析导航器图标。 否则，单击文件 > 打开数据文件。</div> <div>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数 据文件。</div> <div>c 清除调用结果数据复选框。</div> <div>d 单击使用当前方法按钮，然后单击 打开。</div> <div>e 单击方法 > 运行方法工作流程。</div>	<div>• 如果您完成了第 87 页上的“任 务 20. 使用自定义工作流程设置 和运行方法”，则当前方法为 iii_GCexercise3.m。此方法设置为 提取附加色谱图、积分并提取 峰质谱图，并识别选定质谱图。</div> <div>• 分析报告包含积分信息和质谱 信息。如果您识别质谱图，则 此报告可以包含该信息。</div>
2 更改方法中的分析报告选择： • 选中要打印的色谱图、质谱 图或表格对应的复选框。 • 清除不希望打印的色谱图、 质谱图或表格对应的复选框。	<div>a 单击“视图” > “方法编辑器”。</div> <div>b 在“方法编辑器”窗口中，单击 报告 > 分析报告。</div> <div>c 选中要打印的任何额外选择对应的 复选框。</div> <div>d 清除不希望打印的项目对应的任何 复选框。</div>	<div>• 分析报告仅包含在此部分中标 记的信息。</div> <div>• 也可以单击“方法自动处理” > “报告”以设置报告参数。在该 位置做出的更改将反映在“报 告”部分中，反之亦然。</div> <div>• 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。</div>

3 使用工作流程、导出和打印
任务 22. 打印分析报告

任务 22. 打印分析报告（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----

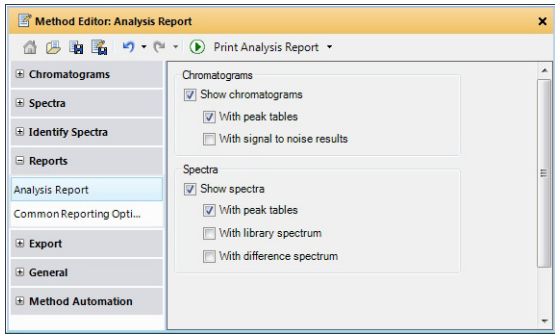


图 58 “方法编辑器”窗口中的“分析报告”部分

- 3 查看模板参数。
- a 在“方法编辑器”窗口中，单击**报告 > 常规报告选项**。
 - b （可选）选择不同的分析报告模板。
- 提供了不同的报告模板。这些模板包含不同的信息。

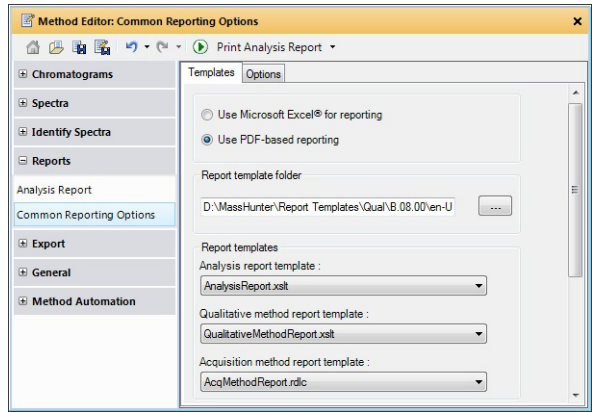




图 59 “方法编辑器”窗口中的“常规报告选项” > “模板”选项卡

可选择使用 Microsoft Excel 或 PDF 生成报告。

如果单击“使用 Microsoft Excel 生成报告”，则
将有一组不同的模板可供选择。可使用 Excel
修改选定的模板。要了解有关修改模板的更多
信息，请参见报告设计器的联机帮助。

任务 22. 打印分析报告（续）

步骤	详细说明	注释
4 打印该报告。	<div><div>a 通过以下方式之一打印报告：<ul style="list-style-type: none">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。</div><div>b 单击报告内容下方的选项之一。</div><div>c （可选）选中每个数据文件一个报告复选框。</div><div>d 选中打印报告复选框并选择打印机。</div><div>e 选中打印预览复选框。</div><div>f 单击确定按钮。</div></div>	<div><ul style="list-style-type: none">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。单击方法 > 运行方法自动处理（工作流程 + 报告）时，将运行方法工作流程。然后，将提取所有附加色谱图并打印报告。最后，如果在“方法自动处理”>“导出”部分中选中了相应的选项，则可以生成导出文件。</div>

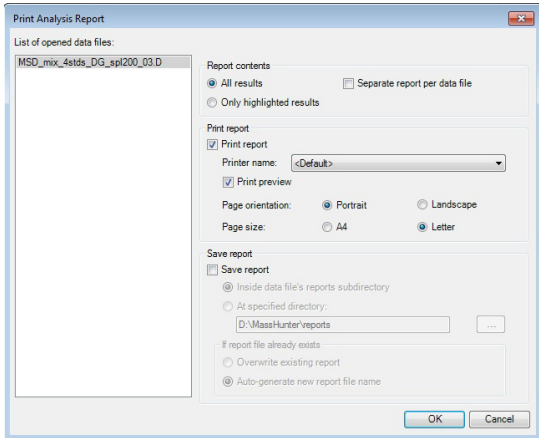


图 60 “打印分析报告”对话框

3 使用工作流程、导出和打印
任务 22. 打印分析报告

任务 22. 打印分析报告（续）

步骤	详细说明	注释
	g 检查该报告。	
	h 单击工具栏中的关闭打印预览图标。	

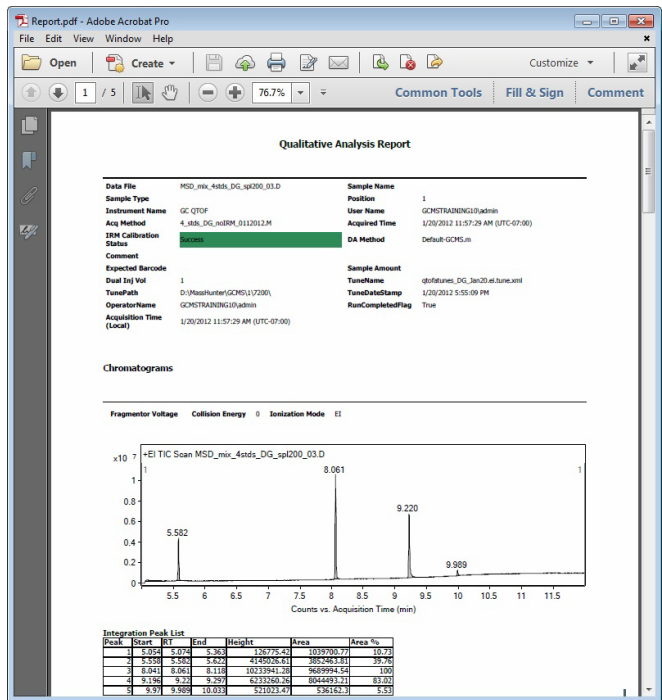


图 61 分析报告的预览

任务 23. 打印化合物报告

不论您何时打印化合物报告，请使用这些说明。您将从“定性分析工作流程”程序中打印化合物报告。

任务 23. 打印化合物报告

步骤	详细说明	注释
1 如果未调用 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件，则打开此数据文件，并对在第 83 页上的“ 任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法 ”中创建的 iii_GCexercise2.m 方法运行工作流程。	<div><div>a 如果没有打开程序，请双击 MassHunter 定性分析工作流程 图标。否则，单击文件 > 打开数据文件。</div><div>b 在 GC 示例数据文件夹中单击 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 数据文件。</div><div>c 清除调用结果数据复选框。</div><div>d 单击使用当前方法按钮，然后单击打开。</div></div>	<div><div>• 如果您完成了第 83 页上的“任务 19. 使用化合物探索工作流程设置和运行方法”，则当前方法为 iii_GCexercise2.m。此方法的工作流程是化合物探索。化合物挖掘算法是自动选择的算法，并且“按谱库 / 数据库检索识别”选项处于选中状态。</div></div>
2 运行工作流程。 <div>• 化合物报告包含化合物表。</div>	<div><div>• 单击方法 > 运行方法工作流程。</div></div>	<div><div>• 化合物挖掘算法是自动选择的算法。</div><div>• 将对化合物运行谱库 / 数据库检索算法。</div></div>
3 查看选定的模板。 <div>• 如果要选择其他模板，则需要了解选定的工作流程，以了解要修改哪些报告模板参数。</div> <div>• 如果单击使用 Microsoft Excel 生成报告，则您可以使用 Excel 和报告设计器加载项自定义扩展名为 XLTX 的任何模板。不能自定义采集方法报告。</div>	<div><div>a 在“方法编辑器”中，单击方法自动处理 > 报告。</div><div>b 单击模板选项卡。</div><div>c （可选）针对目标物筛选报告模板选择其他报告模板。</div><div>d （可选）针对化合物探索报告模板选择其他报告模板。</div><div>e （可选）针对样品纯度报告模板选择其他报告模板。</div><div>f （可选）针对化合物报告模板选择其他报告模板。</div></div>	<div><div>• 打印化合物报告时使用的报告模板取决于当前的工作流程。</div><div>• 目标物筛选报告模板与目标物 / 可疑物筛选工作流程一起使用。</div><div>• 化合物探索报告模板与化合物探索工作流程一起使用。</div><div>• 化合物报告模板与自定义工作流程一起使用。</div><div>• 当前的工作流程在方法自动处理 > 工作流程部分中进行选择。</div></div>

3 使用工作流程、导出和打印
任务 23. 打印化合物报告

任务 23. 打印化合物报告

步骤	详细说明	注释
4 更改化合物报告的方法中的某些选择：	<p>a 单击内容选项卡。</p> <p>b 清除显示 MS 质谱图（在特定峰上放大）复选框。</p> <p>c 如果可见，清除显示 MS/MS 质谱图复选框。</p> <p>d 如果可见，清除显示 MS/MS 峰表复选框。</p>	<ul style="list-style-type: none">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。当打开的数据文件仅包含 MS 数据时，化合物质谱图 (MS/MS) 部分不可见。对于 GC/MS 数据，清除叠加化合物色谱图复选框。

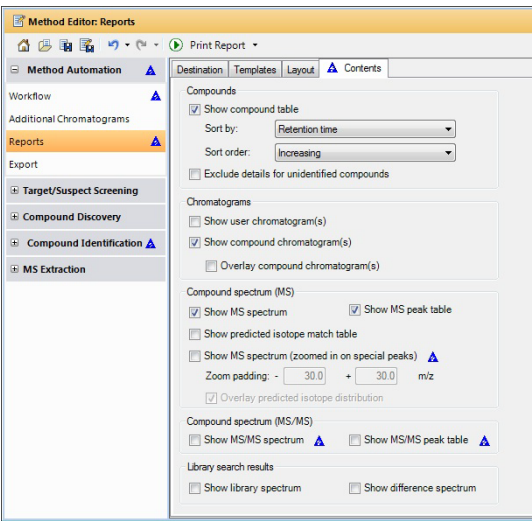
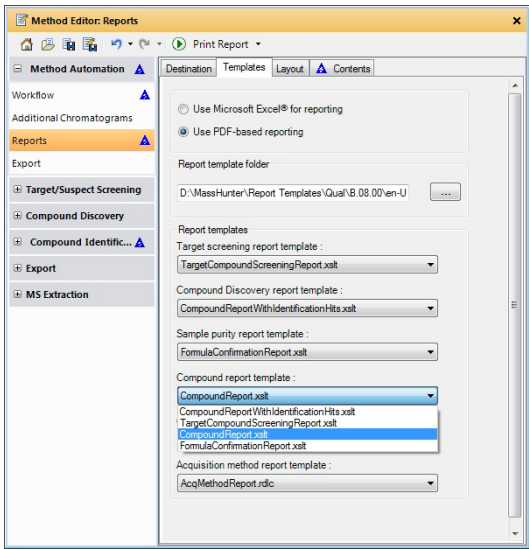



图 62 “方法编辑器”中的“化合物报告”部分

任务 23. 打印化合物报告

步骤	详细说明	注释
5 打印该报告。	<p>a 单击文件 > 打印 > 化合物报告。如果单击打印报告图标来打印化合物报告，将立即打印。</p> <p>b 选中打印预览复选框。</p> <p>c 单击确定。检查报告。</p> <p>d 单击关闭打印预览图标。</p>	<ul style="list-style-type: none">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。

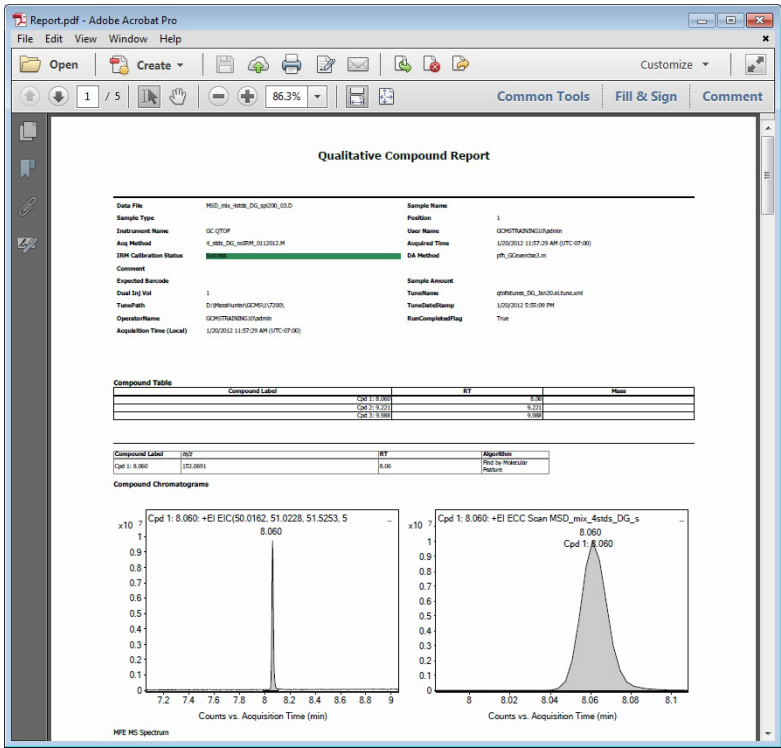


图 63 化合物报告的“打印预览”窗口

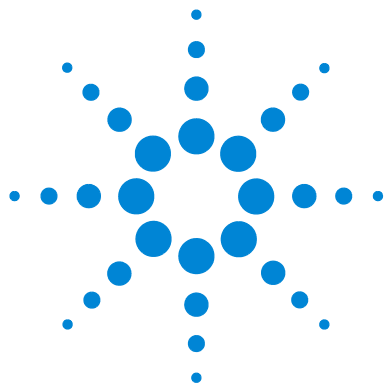
- 6 关闭数据文件，同时不保存结果。

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。

3 使用工作流程、导出和打印

任务 23. 打印化合物报告



参考

- “定性分析导航器” 程序 102
 - 主要功能区 102
 - 窗口 - “定性分析导航器” 程序 106
- “定性分析工作流程” 程序 116
 - 主要功能区 116
 - 窗口 - 定性分析工作流程 118
- “定性分析导航器” 程序和 “定性分析工作流程” 程序 130
 - 布局 130
 - 自定义报告模板 132



“定性分析导航器”程序

主要功能区

首次打开“定性分析导航器”程序时，您会看到三个部分：(1) 菜单栏，(2) 工具栏，(3) 主窗口。图 64 中显示了主功能区。



图 64 “定性分析导航器”程序概览

1. 菜单栏

菜单栏（图 65）提供了用于提取色谱图和质谱图并识别质谱图、打印和导出报告，以及启动“定性分析工作流程”程序或 BioConfirm 程序的操作。联机帮助介绍了各个菜单。

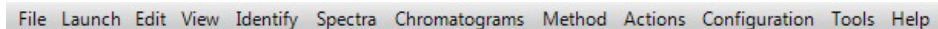


图 65 “定性分析导航器”程序的菜单栏

2. 工具栏

工具栏提供了用于打开和关闭数据文件的操作。您也可以打开和保存方法、打印化合物报告，以及切换窗口是否可见。



图 66 “定性分析导航器”程序的工具栏

工具栏图标	操作
	文件 > 打开数据文件 文件 > 刷新数据文件 文件 > 保存结果 文件 > 关闭数据文件 文件 > 打印 > 分析报告 编辑 > 选择定义的颜色
	编辑 > 显示 > 高亮显示 编辑 > 显示 > 仅限高亮显示的项目 编辑 > 显示 > 所有项目 编辑 > 撤消 编辑 > 重新执行
	视图 > 链接导航 视图 > 数据浏览器 视图 > 方法编辑器

工具栏图标	操作
	“色谱图结果” 窗口 “MS 质谱图结果” 窗口 “对比结果” 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
	“质谱图识别结果” 窗口 “结构查看器” 窗口 “样品信息” 窗口

3. 主窗口

主窗口（请参见第 102 页上的图 64）进一步分成多达 17 个窗口：

- 数据浏览器
- 方法编辑器
- 色谱图结果
- 谱图预览
- MS 质谱图结果
- 再校正
- 对比结果
- UV 光谱图结果
- 积分峰列表
- MS 质谱峰列表 1
- MS 质谱峰列表 2
- MS 实际值
- 质谱图识别结果
- 结构查看器
- 样品信息
- 分子式计算器
- 质量计算器

其中有两个窗口（“谱图预览”和“再校正”）从其他某一个窗口启动，还有两个窗口（“分子式计算器”和“质量计算器”）从“工具”菜单启动。首次打开“定性分析导航器”程序时，您会看到缺省布局中有三个窗口：“数据浏览器”、“色谱图结果”和“MS 质谱图结果”。

窗口 - “定性分析导航器” 程序

数据浏览器 “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。按数据文件排序时，提取的所有色谱图都列在每个数据文件的“色谱图”下。提取的所有质谱图都列在“质谱图”或“背景质谱图”下。

单击色谱图或质谱图时，会在图谱窗口中自动选中图谱，并且会更新包含表的窗口。激活“链接导航”（视图 > 链接导航）后，色谱图与从该色谱图提取的质谱图（反之亦然）的附加链接将处于活动状态。选中“数据浏览器”中的色谱图时，也会选中对应的质谱图。此外，还会高亮显示对应的色谱图和质谱图图形结果。只有使用了色谱图菜单中的**积分并提取峰质谱图**命令时，“链接导航”才起作用。

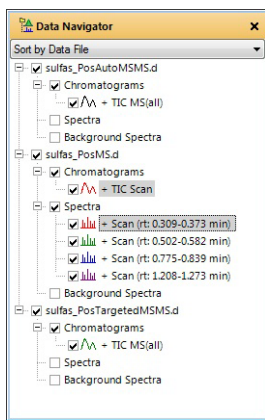


图 67 打开了三个数据文件的“数据浏览器”窗口

方法编辑器 可在此窗口中编辑方法参数。这些参数分开放在不同的选项卡中，相关的选项卡在不同的部分中归在一起。窗口的左侧显示了不同的部分。按 **F1** 键时，您可以获得有关当前部分中当前查看的选项卡的帮助。

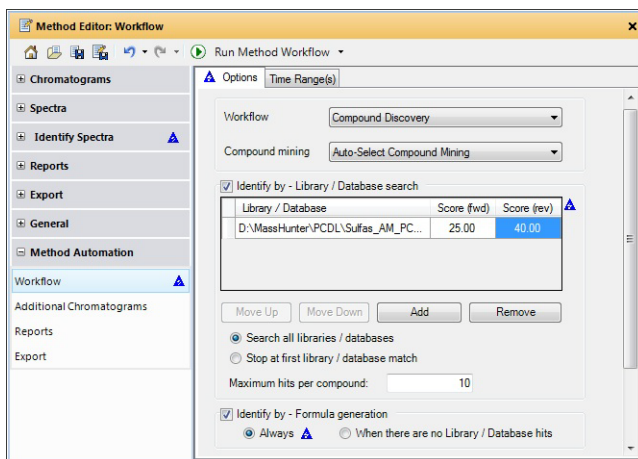


图 68 “方法编辑器” 窗口

色谱图结果 可在此窗口中查看任何色谱图。可同时查看来自不同文件的多个色谱图。可采用叠加方式或在列表模式下显示这些色谱图。图 69 在列表模式下显示了色谱图。

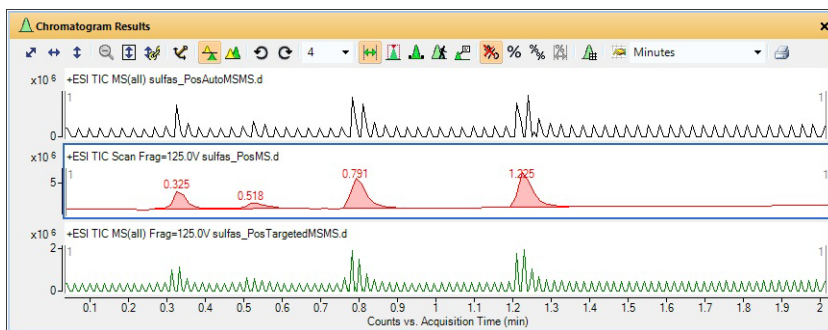


图 69 在列表模式下显示了三个色谱图的“色谱图结果”窗口

对色谱图执行操作


可对色谱图执行许多操作。

窗口 - “定性分析导航器” 程序

- 可通过 “色谱图结果” 工具栏中的图标更改窗口中图谱的外观。
- 可通过**色谱图**菜单提取附加色谱图或质谱图或者处理色谱图。
- 可通过快捷菜单启动许多操作。在 “色谱图结果” 窗口中右键单击色谱图时，您会看到快捷菜单。

有关详细信息，请参见联机帮助。下表显示了一些可能的操作。

操作	如何执行
更改色谱图中的峰标签	单击 “色谱图结果” 工具栏中的 
提取色谱图	色谱图 > 提取色谱图
提取附加色谱图	色谱图 > 提取附加色谱图
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
平滑色谱图	色谱图 > 平滑色谱图
计算信噪比	色谱图 > 计算信噪比

谱图预览 可在此窗口中快速浏览数据文件中的质谱图。当您选择 “实时色谱图” 工具 () 时，可以在 “色谱图结果” 窗口中启动此窗口。此窗口中显示的质谱图不会保留在 “数据浏览器” 窗口中，除非您将质谱图复制到 “质谱图” 部分。

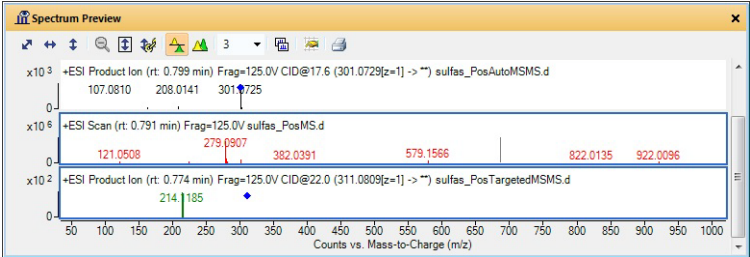


图 70 显示了 3 个数据文件中的质谱图的 “谱图预览” 窗口

MS 质谱图结果 可在此窗口中显示 MS 和 MS/MS 质谱图。可向这些质谱图添加注释和卡尺。可在 **MS** 和 **MS/MS 质谱图显示选项** 对话框中更改峰标签和字体。如果您执行了谱库检索并识别了质谱图，则也可能在该质谱图的窗格中看到一结构。您还会看到预测的同位素分布（通过分子式生成）和自定义文本或图形注释，包括用于测量质量差的“卡尺”。

可对质谱图执行许多操作。

- 可通过“**MS 质谱图结果**”工具栏中的图标更改窗口中图谱的外观。也可通过工具栏添加注释和卡尺。
- 可通过**质谱图**菜单添加或扣除质谱图、将质谱图发送到 PCDL，以及对质谱图进行再校正。
- 可通过快捷菜单启动许多操作。在“**MS 质谱图结果**”窗口中右键单击质谱图时，您会看到快捷菜单。

有关工具栏、菜单和快捷菜单的更多信息，请参见联机帮助。

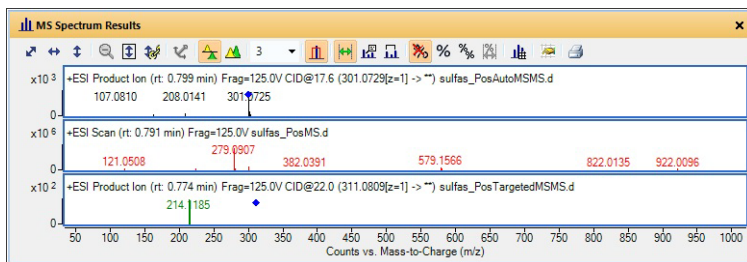


图 71 显示了三个 MS 质谱图的“MS 质谱图结果”窗口

再校正 可在此窗口中改善 TOF 或 Q-TOF 数据的质量校正。可指定参比质量列表，系统将在启动窗口所基于的质谱图中查找参比质量的匹配项。可将这些值应用到数据文件。可在“**MS 质谱图结果**”窗口中通过快捷菜单启动此窗口。

窗口 - “定性分析导航器” 程序

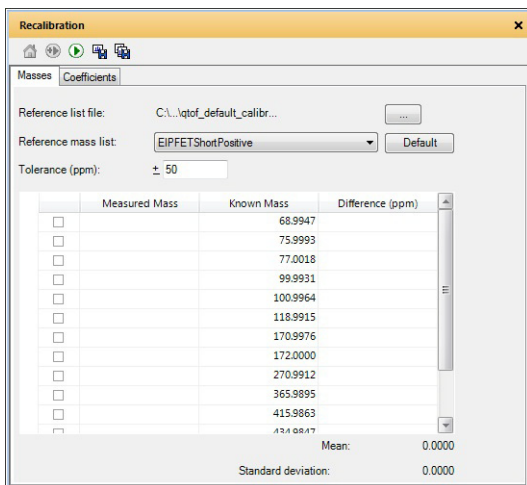


图 72 “再校正” 窗口

质谱对比结果 运行检索谱库算法并通过谱库检索识别质谱图后，此窗口会显示三个质谱图。第一个质谱图是检索的质谱图。第二个质谱图是对比质谱图。从用户质谱图中扣除来自谱库的质谱图以创建对比质谱图。第三个质谱图是来自谱库的质谱图，当前在“质谱图识别结果”窗口中选定了该质谱图。

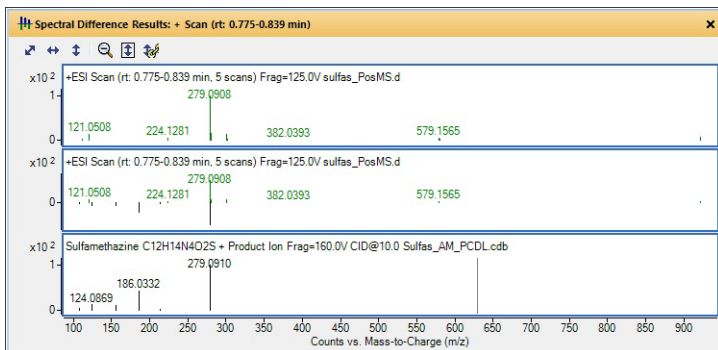


图 73 “质谱对比结果” 窗口

UV 光谱图结果 此窗口显示 UV 光谱图。可从 MS 色谱图提取 UV 光谱图，如果采集了 UV 数据，也可以从 UV 色谱图提取 UV 光谱图。可向 UV 光谱图添加注释。

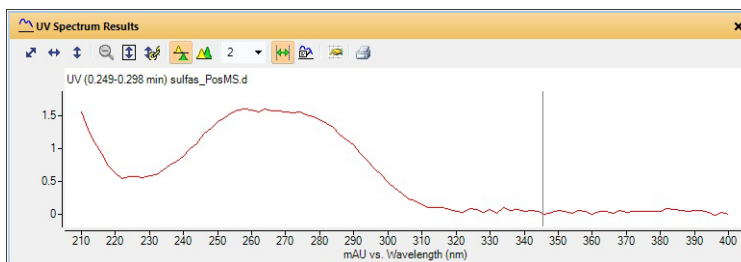


图 74 UV 光谱图结果

积分峰列表 此窗口包含选定色谱图的积分结果的表。色谱图中的每个峰分别在表中的不同行中。如果高亮显示了多个色谱图，则“数据浏览器”窗口中高亮显示的第一个色谱图会显示在“积分峰列表”表中。可使用快捷菜单中的命令对表的内容排序并更改显示的列。可将列拖动到表中的其他位置。列标题和其他单元格具有不同的快捷菜单。

Peak	RT	Area	Area %	Height	Max Y	Base Peak	Width	Symmetry	FWHM
1	0.325	6620637.37	48.22	2518629.43	3714626.75	271.0316	0.193	1.93	0.037
2	0.518	2989417.09	21.77	805897.31	2046221.12	285.0203	0.171	2.92	0.058
3	0.791	12361740.51	90.03	4415680.64	5718803.5	279.0899	0.166	2.14	0.041
4	1.225	13731361.99	100	5097321.16	6556291	311.0796	0.244	2.31	0.038

图 75 “积分峰列表” 窗口

“MS 质谱图峰列表 1” 和 “MS 质谱图峰列表 2” 此表显示作为质谱图一部分的峰。质谱图中的每个点列在表中单独的行中。如果高亮显示了多个质谱图，则第一个质谱图会显示在此表中，而其他质谱图可以在“MS 质谱图峰列表 2”窗口中看到。可使用快捷菜单中的命令对表的内容排序并更改显示的列。可将列拖动到表中的其他位置。列标题和其他单元格具有不同的快捷菜单。

窗口 - “定性分析导航器” 程序

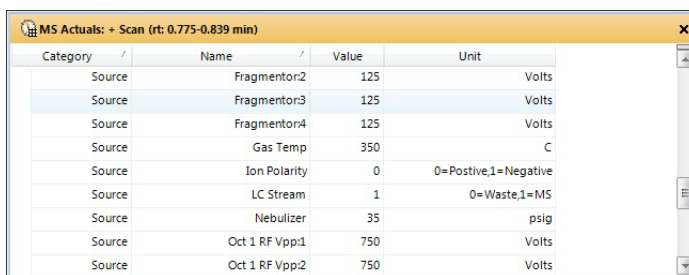
MS Peaks One: + Scan (rt: 0.775-0.839 min)							
m/z	Abund	Max Abund	Z	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
279.0908	1633490.62	1633490.62	1	(M+H)+	[[C12 H14 N4 O2 S]+H]+	Sulfamethazine	0.88
301.0732	233028.03	233028.03	1	(M+Na)+	[[C12 H14 N4 O2 S]+Na]+	Sulfamethazine	-0.67
64.0164	5103.09	5103.09					
102.127	4332.73	4332.73	1	(M+H)+	[[C6 H15 N]+H]+		7.39
103.9557	4402.08	4402.08					
111.0917	25555.48	25555.48		(M+H)+	[[C6 H10 N2]+H]+		0.07
112.0844	3044.42	3044.42					
113.1074	12734.43	12734.43	1	(M+H)+	[[C6 H12 N2]+H]+		-0.78
118.0865	10598.28	10598.28	1	(M+H)+	[[C5 H11 N O2]+H]+		-2.49

图 76 “MS 峰 1” 窗口

MS Peaks Two: + Scan (rt: 1.208-1.273 min)							
m/z	Abund	Max Abund	Z	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
311.0808	1446947.88	1446947.88	1	(M+H)+	[[C12 H14 N4 O4 S]+H]+	Sulfadimethoxine	0.19
333.0631	518946.81	518946.81	1	(M+Na)+	[[C12 H14 N4 O4 S]+Na]+	Sulfadimethoxine	-1
64.0163	7478.46	7478.46					
102.1272	4186.65	4186.65	1	(M+H)+	[[C6 H15 N]+H]+		5.59
103.9557	7038.45	7038.45					
105.9539	3094.65	3094.65					
111.0917	28786.58	28786.58	1	(M+H)+	[[C6 H10 N2]+H]+		-0.08
112.0857	2982.13	2982.13	1	(M+H)+	[[C6 H10 N2]+H]+		77.93
113.1072	15174.63	15174.63	1	(M+H)+	[[C6 H12 N2]+H]+		1.42

图 77 “MS 峰 2” 窗口

MS 实际值 此窗口显示高亮显示的质谱图的采集信息。关闭“MS 实际值”窗口可提高性能。只有以下四列可能在此表中：**类别、名称、值和单位**。



Category	Name	Value	Unit
Source	Fragmentor2	125	Volts
Source	Fragmentor3	125	Volts
Source	Fragmentor4	125	Volts
Source	Gas Temp	350	C
Source	Ion Polarity	0	0=Positive,1=Negative
Source	LC Stream	1	0=Waste,1=MS
Source	Nebulizer	35	psig
Source	Oct 1 RF Vpp1	750	Volts
Source	Oct 1 RF Vpp2	750	Volts

图 78 显示了当前光谱图仪器参数的“MS 实际值”窗口

质谱图识别结果 此窗口显示对质谱图使用识别算法所得到的结果。如果运行生成分子式 (MFG) 或检索谱库 / 数据库, 则这些结果会显示在此窗口中。此窗口中会显示一个质谱图的结果。选中其他质谱图时, 此窗口中的结果会发生变化, 以显示新质谱图的任何结果。此表最多具有三个级别。第一级别显示质谱图的总体结果。第二级别显示用于创建算法总分数的各个分数。表的第三级别显示峰高和 m/z 值 (已计算的值和实际值)。此级别可用于生成分子式算法和检索数据库算法。

Spectrum Identification Results + Scan (rt: 0.775-0.839 min)

Automatically Show Columns

Best

ID Source

Name

Formula

Species

m/z

Score

Score (DB)

Score (MFG)

DBSearch-LibSearch-MFG

Sulfamethazine

C12 H14 N4 O2 S

(M+Na)+ (M+H)+

301.0732 279.0908

85.98

99.56

99.58

Species

m/z

Score (iso. abund)

Score (mass)

Score (MFG, MS/MS)

Score (MS)

Score (MFG)

Score (iso. spacing)

Height

(M+Na)+

301.0732

99.03

99.73

99.56

99.58

99.85

233028

Height (Calc)

Height Sum % (Ca)

Height % (Calc)

m/z (Calc)

Diff (mDa)

Height

Height %

Height Sum %

m/z

Diff (pp)

231190.4

82.3

100

301.073

-0.2

233028

100

83

301.0732

-0.71

35758.1

12.7

15.5

302.0756

-0.1

34594

14.8

12.3

302.0756

-0.22

13883.7

4.9

6

303.0711

-0.1

13210.2

5.7

4.7

303.0711

-0.18

Species

m/z

Score (iso. abund)

Score (mass)

Score (MFG, MS/MS)

Score (MS)

Score (MFG)

Score (iso. spacing)

Height

(M+H)+

279.0908

99.08

99.82

99.25

99.21

98.3

1633490.6

CE

Name

Forward Score

Flags

Species

Lib/DB

Notes

Num Peaks

m/z (prec.)

Revers

10

Sulfamethazine

30.81

(M+H)+

D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDL.cdb

6

279.091

58.8

Best

ID Source

Name

Formula

Species

m/z

Score

Score (DB)

Score (MFG)

图 79 “质谱图识别结果” 窗口

窗口 - “定性分析导航器” 程序

结构查看器 运行检索谱库 / 数据库算法且数据库或谱库包含最佳匹配的结构时，可将结构附加到质谱图。在添加或编辑对质谱图的手动识别时，也可附加一个结构。“结构查看器”包含两个选项卡。“结构”选项卡显示结构的图形表示形式。“MOL 文本”选项卡包含用于描述结构的文本。

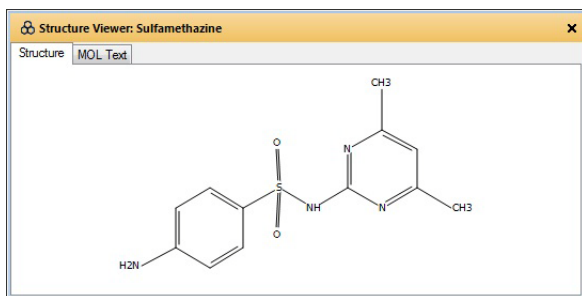


图 80 “结构查看器” 窗口

分子式计算器 此工具计算与您输入的质量或质荷比值对应的可能的经验分子式。可以交互方式查看结果，并打印或导出这些结果。

Formula (M)	Score (MFG)	Mass	Mass (MFG)	m/z (Calc)	DH
C12 H14 N4 O2 S	100	278.0837	278.0837	279.091	
C6 [13C] H18 Cl N2 O7	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C5 [13C] H12 Cl N9 O2	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C10 [13C] H19 N O3 S2	99.73	278.0837	278.084	279.0913	
C13 H20 Cl2 O2	99.64	278.0837	278.084	279.0913	
C16 [13C] H13 N2 S	99.33	278.0837	278.0833	279.0906	
C12 H22 O S3	99.26	278.0837	278.0833	279.0906	
C9 H17 Cl N5 O S	99.03	278.0837	278.0842	279.0915	
C9 [13C] H15 N O8	98.65	278.0837	278.0831	279.0904	
C8 [13C] H9 N8 O3	98.63	278.0837	278.0831	279.0904	
C20 H10 N2	98.32	278.0837	278.0844	279.0917	
C10 [13C] H11 N5 O4	98.01	278.0837	278.0845	279.0917	
C7 H15 Cl N8 S	97.46	278.0837	278.0829	279.0902	
C11 H18 Cl2 N3 O	96.16	278.0837	278.0827	279.09	
C8 [13C] H17 N4 O2 S2	95.83	278.0837	278.0826	279.0899	
C7 [13C] H14 Cl N6 O3	94.7	278.0837	278.0849	279.0922	
C11 H18 O6 S	93.92	278.0837	278.0824	279.0897	

图 81 “分子式计算器” 窗口

窗口 - “定性分析导航器” 程序

质量计算器 使用此工具可以输入基本分子式以及离子种类（正离子或负离子）列表。运行质量计算器算法时，质量计算器表包含每个离子种类的行，并计算每个离子种类的质量。

Mass Calculator

Base formula (M): C12 H14 N4 O2 S

Species to calculate:

- ☒ Positive ions
- ☐ Negative ions

Species list:

- ☐ Neutral
- ☐ Radical
- ☒ +H
- ☐ +Na
- ☐ +K

Number of charges: 1

Mass comparison:

- ☒ Comparison m/z: 279.0908

Species	Calc m/z	Ref m/z	Diff (ppm)	Defect
(M+H)+	279.091	279.0908	0.8	0.091

图 82 “质量计算器” 窗口

“定性分析工作流程” 程序

主要功能区

首次打开“定性分析工作流程”程序时，您会看到三个部分：(1) 菜单栏，(2) 工具栏，(3) 主窗口。图 83 中显示了主功能区。

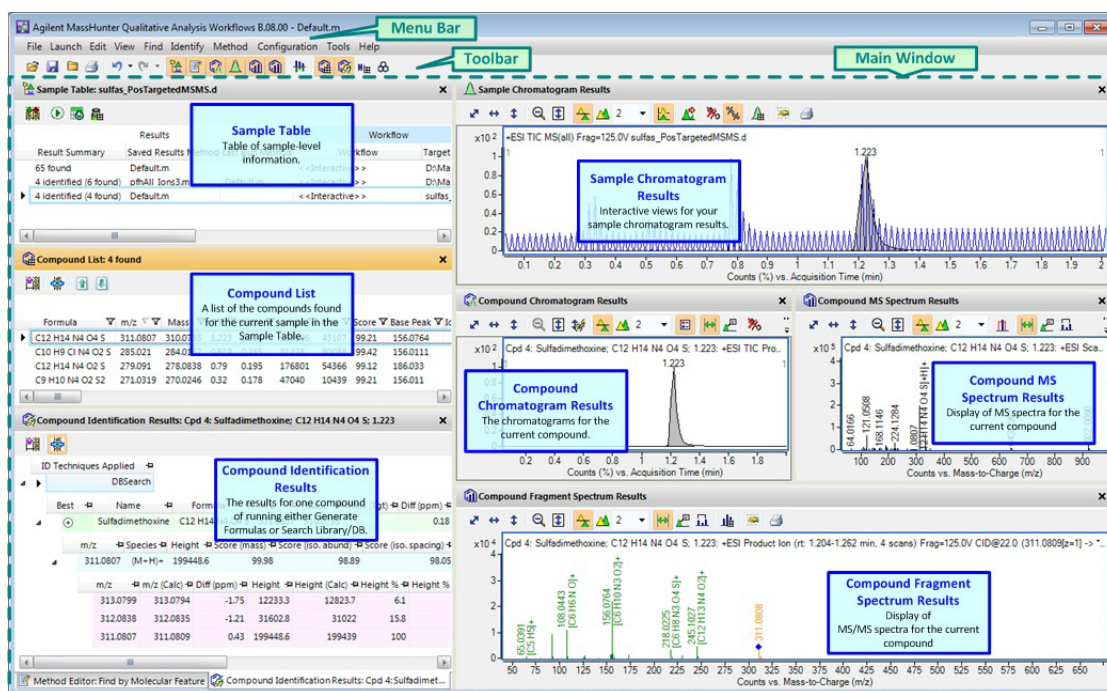


图 83 “定性分析工作流程” 程序概览

1. 菜单栏

菜单栏（图 84）提供了用于查找和识别化合物、打印和导出报告，以及启动“定性分析导航器”程序的操作。联机帮助包含有关各个菜单的详细信息。

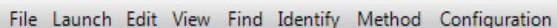


图 84 “定性分析工作流程”程序的菜单栏

2. 工具栏

工具栏提供了用于打开和关闭数据文件的操作。您也可以打开和保存方法、打印化合物报告，以及切换窗口是否可见。



图 85 “定性分析工作流程”程序的工具栏

工具栏图标	操作
	文件 > 打开数据文件 文件 > 保存结果 文件 > 关闭数据文件 文件 > 打印 > 化合物报告 编辑 > 撤消 编辑 > 重新执行
	视图 > 样品表 视图 > 方法编辑器
	视图 > 化合物色谱图结果 视图 > 样品色谱图结果 视图 > 化合物 MS 质谱图结果 视图 > 化合物碎片质谱图结果 视图 > 对比结果
	视图 > 化合物列表 视图 > 化合物识别结果 视图 > MS/MS 分子式详细信息 视图 > 结构查看器

3. 主窗口

主窗口（请参见第 116 页上的图 83）进一步分成多达 13 个窗口。首次打开“定性分析工作流程”程序时，您会看到缺省布局中有这些窗口的一部分：

- 样品表
- 化合物列表
- 化合物识别结果
- 方法编辑器
- 结构查看器
- 样品色谱图结果
- 化合物色谱图结果
- 化合物 MS 质谱图结果
- 化合物碎片质谱图结果
- 对比结果
- MS/MS 分子式详细信息
- 分子式计算器
- 质量计算器

窗口 - 定性分析工作流程

样品表 “样品表”显示打开的每个样品（数据文件）的信息。您在此窗口中选择的一个或多个样品的数据会显示在其他窗口中。可以重处理选定的样品。

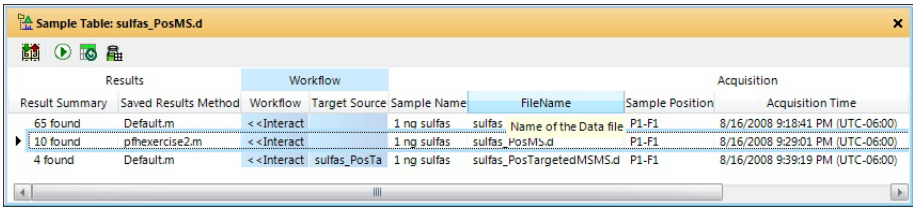


图 86 样品表

化合物列表 此窗口显示为选定的样品文件找到的所有化合物。可在此表中添加和删除列，也可以更改某个类别中列的顺序。

“化合物列表”窗口中的列分成几个类别。可更改某个类别中列的顺序。这些列也会显示在**添加 / 删除列**对话框中。类别如下：

- 概要
- 化合物识别
- 分子式生成
- 分子特征提取
- 数据库检索
- 谱库检索
- 样品纯度
- 目标物 / 可疑物筛选

化合物列表工具栏

工具栏图标	操作
	<ul style="list-style-type: none"> • 隐藏当前的任何空列
	<ul style="list-style-type: none"> • 切换是否自动调整所有列宽度。处于打开状态时，列的宽度将自动更改以显示该列中的信息。
	<ul style="list-style-type: none"> • 切换到上一个化合物。如果选择的是第一个化合物，则此图标不可用。 • 切换到下一个化合物。如果选择的是最后一个化合物，则此图标不可用。

窗口 - 定性分析工作流程

Compound List: 12 found

General					Compound Identification		Formula Generation	Molecular Feature Extraction		Database Search
Formula	m/z	RT	Score	Mining Algorith	Cpd	Name	Score (MFG)	Vol	Score (MFE)	Score (DB)
C6 H14 O4	151.0963	0.268	23.65	Find by Molecular	1		47.31	60075	98.2	0
C7 H12 N7	195.1225	0.297	23.75	Find by Molecular	2		47.5	109096	98.6	0
C9 H10 N4 O2 S2	271.0324	0.326	66.76	Find by Molecular	3	Sulfamethizole		1222686	94.1	66.76
C5 H11 Cl N5 O4 S	273.0283	0.326	23.81	Find by Molecular	4		47.62	107190	86.7	0
C9 H16 N7 O	256.1751	0.35	45.02	Find by Molecular	5		90.03	23265	93.9	0
C9 H10 N4 O2 S2	271.0321	0.416	47.29	Find by Molecular	6	Sulfamethizole		32976	98.1	47.29
C10 H9 Cl N4 O2 S	285.0204	0.525	98.67	Find by Molecular	7	Sulfachloropyrid		594994	100	98.67
C12 H14 N4 O2 S	279.0908	0.792	98.87	Find by Molecular	8	Sulfamethazine		4432850	86.4	98.87
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.231	99.09	Find by Molecular	9	Sulfadimethoxin		4220612	94.4	99.09
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.331	95.81	Find by Molecular	10	Sulfadimethoxin		142298	100	95.81
C25 H26 N3 O2	401.2105	1.732	29.56	Find by Molecular	11		59.11	21433	100	0
C24 H26 N8 O	443.2296	1.738	39.22	Find by Molecular	12		78.44	36420	99.8	0

图 87 显示了五个类别中的列的“化合物列表”窗口

方法编辑器 方法是指与您可以运行的不同算法关联的一组参数。包含这些参数的方法可以使用唯一的文件名进行保存。

可在左侧窗格中选择要显示方法的哪一部分。右侧窗格包含单个部分或多个选项卡。按 **F1** 键时，您可以获得有关“方法编辑器”中当前选定的选项卡或部分的帮助。

Method Editor: Workflow

Method Automation

Workflow

Additional Chromatograms

Reports

Export

Target/Suspect Screening

Compound Discovery

Compound Identification

Sample Purity

Export

MS Extraction

Options

Time Range(s)

Workflow

Compound mining

Identify by - Library / Database search

Library / Database	Score (fwd)	Score (rev)
D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PC...	25.00	40.00

Move Up Move Down Add Remove

Search all libraries / databases

Stop at first library / database match

Maximum hits per compound: 10

Identify by - Formula generation

Always

When there are no Library / Database hits

图 88 “方法编辑器”窗口

化合物色谱图结果 此窗口显示与在“化合物列表”窗口中选择一个或多个化合物关联的色谱图，包括提取离子色谱图 (EIC)。如果为色谱图选择叠加模式，则可以在图形的右上角显示图例。可向图形添加注释。也可以导出或打印图形。

对色谱图执行操作

可对色谱图执行许多操作。

- 可通过“化合物色谱图结果”工具栏中的图标更改窗口中图谱的外观。
- 可通过“注释”工具向色谱图添加注释。
- 可通过快捷菜单启动许多操作。在“化合物色谱图结果”窗口中右键单击色谱图时，您会看到快捷菜单。

有关详细信息，请参见联机帮助。

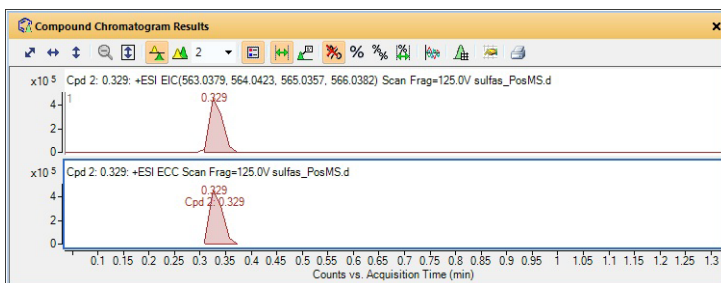



图 89 “化合物色谱图结果” 窗口

化合物色谱图结果工具

工具栏图标	操作
缩放工具 	<ul style="list-style-type: none">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
 或 	<ul style="list-style-type: none">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。在添加滚动条之前，要同时显示的色谱图数量。单击列表模式时，会显示此选项。循环到上一个图谱或循环到下一个图谱。单击叠加模式时，会显示这些选项。
	<ul style="list-style-type: none">以叠加模式显示图例 – 如果选择叠加模式，则您可以选择是否显示图例。如果显示共流出曲线，则此选项也控制该图例是否可见。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。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。
调整工具 	<ul style="list-style-type: none">停止调整色谱图将所有色谱图调整到任意色谱图中的最大峰将所有色谱图调整到自身的最大峰将每个色谱图调整到选定范围内的最高峰

工具栏图标	操作
其他工具	<ul style="list-style-type: none"> • 切换共流出曲线是否可见 • 切换积分峰列表是否可见 • 打开色谱图显示选项对话框 • 打印所显示的色谱图
	

样品色谱图结果 此窗口显示在“样品表”窗口中选择的每个样品的色谱图。此色谱图可能是总离子色谱图 (TIC) 或基峰色谱图 (BPC)。也可以叠加化合物色谱图。作为按分子式查找算法的一部分提取的 UV 色谱图也会显示在此窗口中。可导出或打印图形。

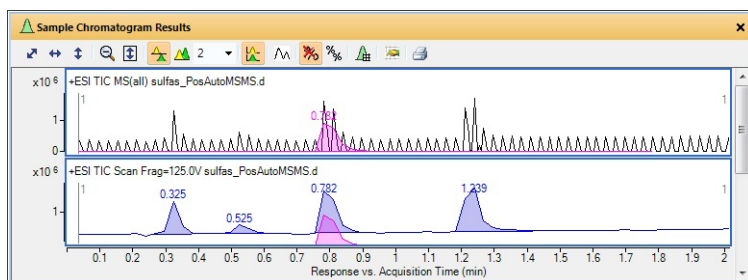
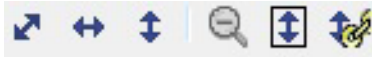


图 90 “样品色谱图结果” 窗口

样品色谱图结果工具

工具栏图标	操作
缩放工具	<ul style="list-style-type: none"> • 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
	

窗口 - 定性分析工作流程

工具栏图标	操作
<div></div> <div>或</div> <div></div>	<ul style="list-style-type: none">• 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。• 在添加滚动条之前，要同时显示的色谱图数量。单击列表模式时，会显示此选项。• 循环到上一个图谱或循环到下一个图谱。单击叠加模式时，会显示这些选项。
<div></div>	<ul style="list-style-type: none">• 化合物叠加模式 – 化合物色谱图也会显示在“样品色谱图结果”窗口中。• 提取色谱图 – 打开提取色谱图对话框。
<div>调整工具</div> <div></div>	<ul style="list-style-type: none">• 停止调整色谱图• 将所有色谱图调整到自身的最大峰
<div>其他工具</div> <div></div>	<ul style="list-style-type: none">• 显示色谱图的峰列表表• 打开色谱图显示选项对话框• 打印所显示的色谱图

化合物 MS 质谱图结果 此窗口显示与选定的化合物（如果选择了一种或两种化合物）关联的质谱图。如果选择超过两种化合物，则仅显示前两个高亮显示的化合物的质谱图。**MS/MS** 质谱图显示在“化合物碎片质谱图”窗口中。可从此窗口中的质谱图添加注释和卡尺。可显示峰列表，该列表显示在此窗口右侧的一个表中。系统会为显示每个质谱图添加一个选项卡。可将质谱图发送到 PCDL、导出和打印质谱图。

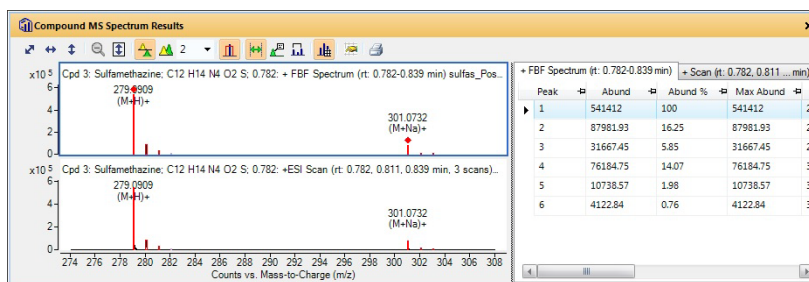


图 91 “化合物 MS 质谱图结果” 窗口

化合物 MS 质谱图结果工具

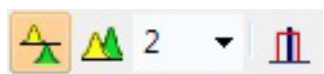
工具栏图标

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



或



- **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。
- 在添加滚动条之前，要同时显示的质谱图的数量。单击**列表模式**时，会显示此选项。
- 循环到上一个图谱或循环到下一个图谱。单击**叠加模式**时，会显示这些选项。
- **显示预测的同位素分布**

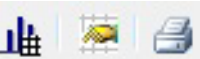
按顺序选择工具



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。有关详细信息，请参见联机帮助。

窗口 - 定性分析工作流程

工具栏图标	操作
其他工具	<ul style="list-style-type: none">显示质谱图的峰列表表打开 MS 和 MS/MS 质谱图显示选项 对话框打印所显示的质谱图
	

化合物碎片质谱图结果 此窗口显示与选定的化合物（如果选择了一种或两种化合物）关联的 MS/MS 质谱图。如果选择超过两种化合物，则仅显示前两个高亮显示的化合物的 MS/MS 质谱图。MS 质谱图显示在“化合物 MS 质谱图”窗口中。您也可以向化合物碎片质谱图添加注释和卡尺。

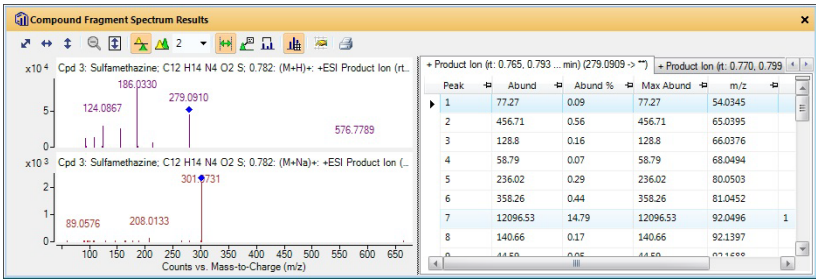



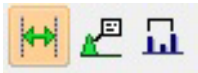



图 92 显示了相应峰列表的“化合物碎片质谱图结果”窗口

化合物碎片质谱图结果工具

工具栏图标	操作
缩放工具	<ul style="list-style-type: none">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
	

工具栏图标	操作
 <p>或</p> 	<ul style="list-style-type: none"> • 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。 • 在添加滚动条之前，要同时显示的质谱图的数量。单击列表模式时，会显示此选项。 • 循环到上一个图谱或循环到下一个图谱。单击叠加模式时，会显示这些选项。
<p>按顺序选择工具</p>  <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 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。有关详细信息，请参见联机帮助。
<p>其他工具</p> 	<ul style="list-style-type: none"> • 显示质谱图的峰列表表 • 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

对比结果 运行检索谱库算法并通过谱库检索识别化合物后，此窗口会显示三个质谱图。第一个质谱图是检索的质谱图。第二个质谱图是对比质谱图。从用户质谱图中扣除来自谱库的质谱图以创建对比质谱图。第三个质谱图是来自谱库的质谱图，当前在“质谱图识别结果”窗口中选定了该质谱图。

窗口 - 定性分析工作流程

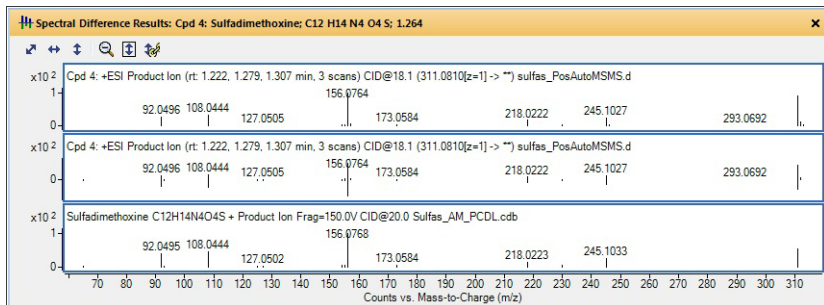


图 93 “对比结果”窗口

化合物识别结果 此窗口显示运行生成分子式或检索谱库 / 数据库等识别算法所得到的结果。

Figure 94 displays the 'Compound Identification Results' window, showing a table of search results for Sulfamethizole. The table includes columns for Best, Name, Formula, m/z, Mass, Mass (Tgt), Diff (ppm), Score (Tgt), RT, RT (Tgt), RT Diff, Score (RT), Species, Flags, and Notes. The top result is Sulfamethizole with a score of 99.99 and a mass of 271.0319.

Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT	RT (Tgt)	RT Diff	Score (RT)	Species	Flags	Notes
1	Sulfamethizole	C9 H10 N4 O2 S2	271.0319	271.0319	270.0245	-0.12	0.326					(M+H)+		
Score (iso. abund) Score (mass) Score (MFG, MS/MS) Score (MFG) Score (iso. spacing) Height Ion Formula Species Lib/DB														
30.11			99.99	99.98	73.98	49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+			D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDL		
30.11			99.98	99.98	73.98	49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+			D:\MassHunter\PCDL\default		
CE Name Forward Score Flags Species Lib/DB Notes Num Peaks m/z (prec.) Reverse Score Score (Lib)														
10	Sulfamethizole		87.84	(M+H)+				D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDLcdb		4	271.0318	99.65	99.65	

图 94 “化合物识别结果”窗口

MS/MS 分子式详细信息 此窗口包含一个表，其中显示为 MS/MS 质谱图中的碎片计算所得的可能的分子式，这些分子式与建议的分子式一致。其内容是与“化合物识别结果”表中当前选定的分子式行相关的结果。此表中的数据用于计算“化合物识别结果”表中的“分数 (MFG, MS/MS)”列。

MS/MS Formula Details: Cpd 1: Sulfamethizole; C9 H10 N4 O2 S2; 0.326 C8 H6 N4 O7

m/z	Formula	Height %	Diff (ppm)	Loss Mass	Loss Formula
64.0193	C4 H2 N	0.07	-17.85	207.0127	C4 H5 N3 O7
64.0193	C4 H4 O3	0.07	-59.71	207.0154	C7 H3 N4 O4
65.0388	C5 H5	0.47	-3.22	205.9923	C3 H2 N4 O7
69.0694		0.11			
80.0486	C5 H6 N	0.26	11.38	190.9814	C3 H N3 O7
80.0486	H6 N3 O2	0.26	-38.88	190.9855	C8 H N O5
87.0429	C2 H5 N3 O	0.22	-2.34	183.9882	C6 H2 N O6
87.0429	C4 H7 O2	0.22	13.09	183.9869	C4 N4 O5
89.0599	C2 H7 N3 O	0.19	-17.21	181.9726	C6 N O6
92.0494	C6 H6 N	7.71	0.5	178.9814	C2 H N3 O7
92.0494	C H6 N3 O2	7.71	-43.2	178.9855	C7 H N O5
107.0716		0.07			

图 95 “MS/MS 分子式详细信息” 窗口

结构查看器 运行检索谱库/数据库算法且数据库或谱库包含最佳匹配的结构时，可将结构附加到质谱图。在添加或编辑对质谱图的手动识别时，也可附加一个结构。“结构查看器”窗口包含两个选项卡。“结构”选项卡显示结构的图形表示形式。“MOL 文本”选项卡包含用于描述结构的文本。

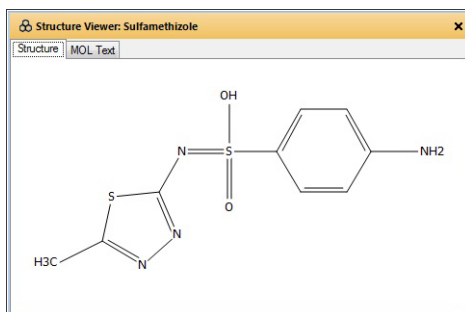


图 96 “结构查看器” 窗口

“定性分析导航器”程序和“定性分析工作流程”程序

布局

可打开并保存不同的布局。可修改以下任何属性，它们将保存在布局中。本软件附带两个缺省布局：**default.xml**（适用于“定性分析工作流程”程序）和**CDN_Default.xml**（适用于“定性分析导航器”程序）。

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（在“定性分析导航器”程序中：“色谱图结果”窗口、“谱图预览”窗口、“MS 质谱图结果”窗口、“对比结果”窗口和“UV 结果”窗口；在“定性分析工作流程”程序中：“样品色谱图结果”窗口、“化合物色谱图结果”窗口、“化合物 MS 质谱图结果”窗口、“化合物碎片质谱图结果”窗口和“对比结果”窗口），将保存以下设置：

- 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

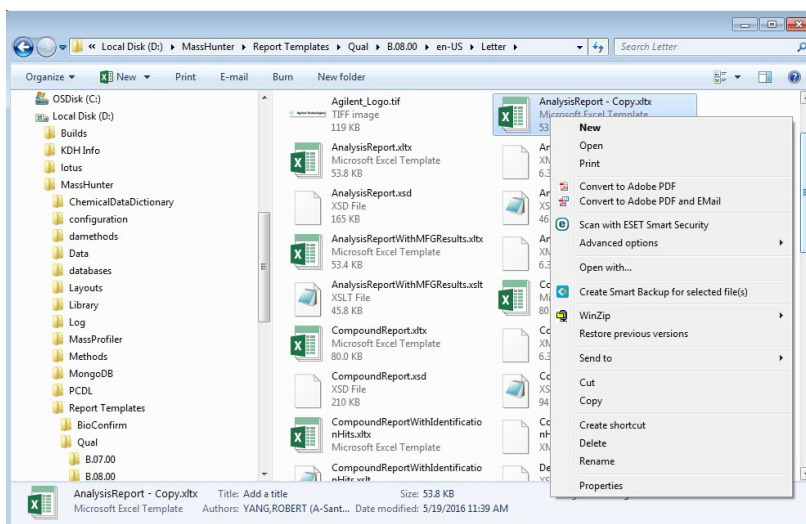
- 哪些列可见
- 列的顺序
- 每列的宽度

- 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）。

自定义报告模板

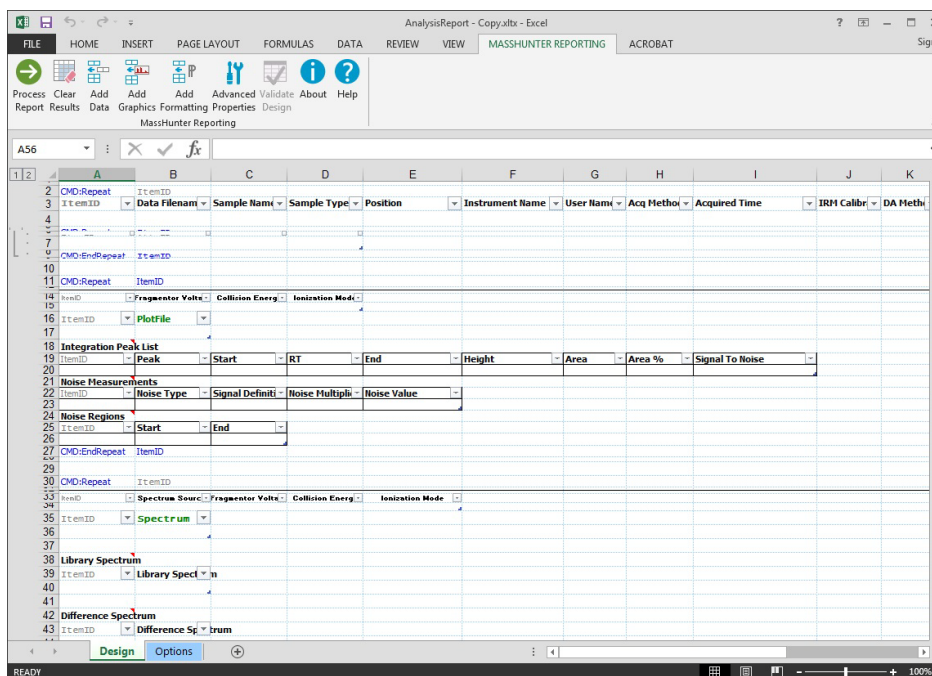
有关如何修改报告模板的详细信息，请参考 **MassHunter** 报告设计器加载项的联机帮助、《报告设计器入门指南》或报告培训 DVD。通过执行下列步骤，您可以快速了解自定义模板的意义。这些说明仅适用于 **Microsoft Excel** 报告模板。

- 1 转到包含报告模板的文件夹。缺省情况下，该文件夹是 **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.08.00\en-US\Letter**。可以在“方法编辑器”中的“方法自动处理”>“报告”>“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**。

File name:	AnalysisReport - Copy.xltx
Save as type:	Excel Template (*.xltx)

本书内容提要

本指南包含有关学习如何使用 Agilent MassHunter Workstation 软件 - 定性分析 GC/MS 数据的信息。定性分析软件包含两个主要程序。

© Agilent Technologies, Inc. 2017

修订版 A, 2017 年 1 月



G3335-97197



Agilent Technologies