Agilent

适用于 GC/MSD 的 MassHunter 定量分析

熟悉指南

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2018

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

G3335-97200

版本

第二版， 2018 年 8 月

美国印刷

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

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，包括但不仅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。

内容提要

此 《熟悉指南》提供分步练习，可帮助您了解如何使用定量分析程序。您可以使用 VoaDemoBatches 文件夹中的批处理目录完成这些练习。请参见步骤 1（第 4 页）。

1 “从采集的扫描数据设置新方法”

在本练习中，您将使用先前从单四极杆仪器生成的扫描数据设置方法。

2 “检查定量结果”

在本练习中，您将检查批处理文件中的样品和化合物数据、自定义结果布局以及将数据导出到 Microsoft Excel。

3 “化合物概览”

在本练习中，您将检查化合物概览功能，了解它如何帮助您在检查时节约时间。

4 “离群值和定量消息”

在本练习中，您将使用批处理表离群值指示器和定量消息功能检查批处理的结果。

5 “生成定量报告”

在本练习中，您将了解使用一个或多个报告模板生成报告方法，如何生成报告，然后在 Microsoft Excel 中检查这些报告。

开始进行这些练习之前

1 确保将演示文件复制到您的 PC。

要完成这些练习，需要将以下批处理文件夹复制到您 PC 上的 MassHunter 数据目录。

- VoaDemo
- VoaSampleData

这两个文件夹位于 VoaDemoBatches 文件夹中。可使用下列一种程序将该文件夹安装到您的 PC：

- MassHunter 附加磁盘安装程序
- GC/MS 软件信息和手册 (G1701-60172) 安装程序

在初次安装 MassHunter 软件时，这些文件**可能已自动复制到您的 PC**。检查 MassHunter 缺省目录 (**MassHunter/Data/QuantExamples/MS/VoaDemoBatches**)，以确认批处理文件夹是否在这里。

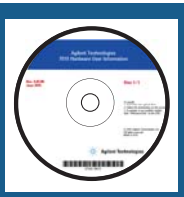
如果它们不在您的 PC 上，可使用上面列出的两个程序之一在 PC 上安装这些文件。然后将名为 **VoaDemo** 和 **VoaSampleData** 的文件夹从其安装位置复制到 MassHunter Data 目录，例如 **/MassHunter/GCMS/1/Data**。

2 检查更多信息。

您的硬件和软件附带内容全面的手册、视频、用户应用和方法开发工具。这些工具位于以下位置：

- MassHunter 软件安装磁盘
- GC/MS 软件信息 USB (G1701-60172)

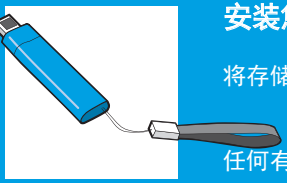
如果还没有查看，则查看这些库中包括的内容。它们包含大量有用的信息。



安装您的硬件库

将磁盘插入 DVD 驱动器并按照提示进行操作。

任何有权将信息复制到接收计算机上的人都可以进行安装。



安装您的软件库

将存储器插入 USB 端口并按照提示进行操作。

任何有权将信息复制到接收计算机上的人都可以进行安装。

选择定量分析桌面图标

定量分析 B.09.00 为经典用户界面和 Quant-My-Way 用户界面提供桌面图标。“经典”用户界面外观类似于 Quantitative Analysis B.08.00 中提供的用户界面，工具和选项均位于菜单栏中。 Quant-My-Way 用户界面具有一个全新的功能区，工具和选项位于选项卡和功能区 （而非菜单栏）中。您可以选择安装经典用户界面桌面图标或 / 和 Quant-My-Way 用户界面桌面图标。

本*熟悉指南*沿用的是经典用户界面。但是，本指南会包括 Quant-My-Way 用户界面导航中与经典用户界面有区别的步骤，并以蓝色高亮显示这些步骤。

目录

内容提要 3
开始进行这些练习之前 4

1 从采集的扫描数据设置新方法 9

任务 1. 创建一批校正样品 10
任务 2. 将校正化合物添加到方法 13
任务 3. 在方法表中设置化合物和定性离子 18
任务 4. 添加校正曲线 31
任务 5. 将新化合物添加到方法 37
任务 6. 将扫描方法转换为 SIM 方法 42
创建 SIM 方法 43
从采集的 SIM 数据 43
一次一个化合物 43
从 SIM 方法 43
从扫描方法 43

2 检查定量结果 44

任务 1. 浏览批处理表结果 45
任务 2. 更改主窗口布局 49
任务 3. 访问积分参数 56
任务 4. 配置“化合物信息”窗口中的设置 58
任务 5. 将结果导出到 Excel 64

3 化合物概览 65

任务 1. 检查化合物概览窗口 66
任务 2. 显示“化合物概览”窗口的属性 76

4 离群值和定量消息 79

任务 1. 检查离群值 80
任务 2. 检查定量消息 85
任务 3. 设置离群值 87

5 生成定量报告 90

任务 1. 开发报告方法 91
任务 2. 生成报告 96

1 从采集的扫描数据设置新方法

任务 1. 创建一批校正样品 10

任务 2. 将校正化合物添加到方法 13

任务 3. 在方法表中设置化合物和定性离子 18

任务 4. 添加校正曲线 31

任务 5. 将新化合物添加到方法 37

任务 6. 将扫描方法转换为 SIM 方法 42

创建 SIM 方法 43

在此练习中，您将使用先前采集的扫描数据创建定量方法。 MassHunter 将分析数据文件，使用您指定的检索 ID 参数以及其他缺省参数识别化合物名称、目标离子、定性离子和比率以及保留时间，使用这些信息填充定量方法的初始值。这将极大缩短方法创建所需的时间。

除此方法外，其他方法也可以从扫描数据创建定量方法，但该方法演示了方法编辑器中对熟练使用 MassHunter 提供帮助的大多数功能。本章中讨论的所有方法编辑器参数同样适用于 SIM 定量方法。实际上，这个扫描方法可以轻松转换为 SIM 方法，您将在后面的内容中看到。此练习的结束部分是创建 SIM 方法的概述。

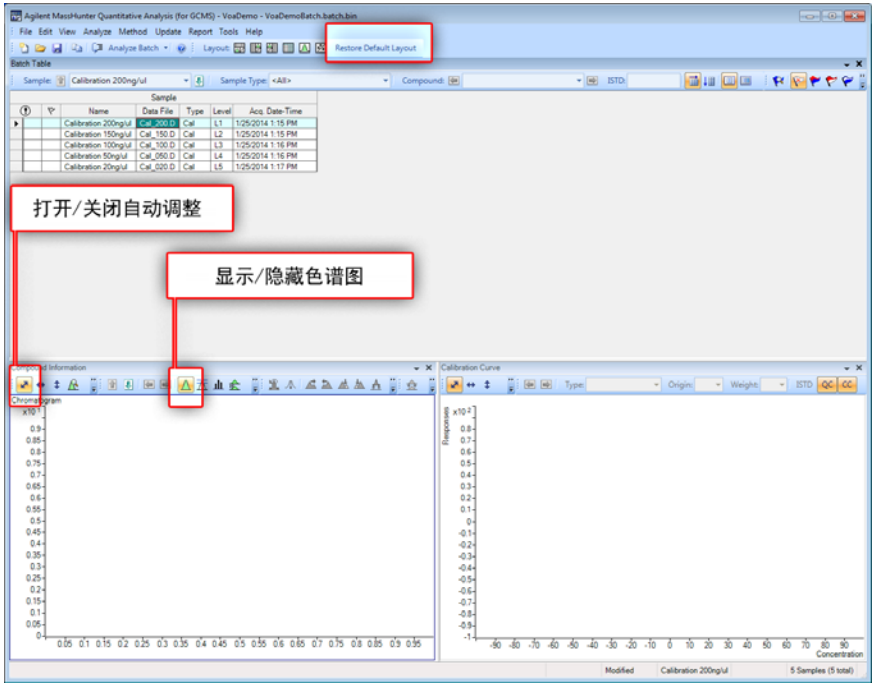
任务 1. 创建一批校正样品

完成本任务时，您将使用先前从单四极杆仪器生成的扫描数据设置方法。

1 启动定量分析。

a 使用 MS 定量分析桌面图标打开 MassHunter 定量分析。这将启动用于 MSD 单四极杆数据分析的程序。

b 单击**恢复缺省布局**，取消选中**化合物信息**工具栏中除**打开 / 关闭自动调整**和**显示 / 隐藏色谱图**图标以外的所有图标。屏幕类似于此处显示的屏幕。

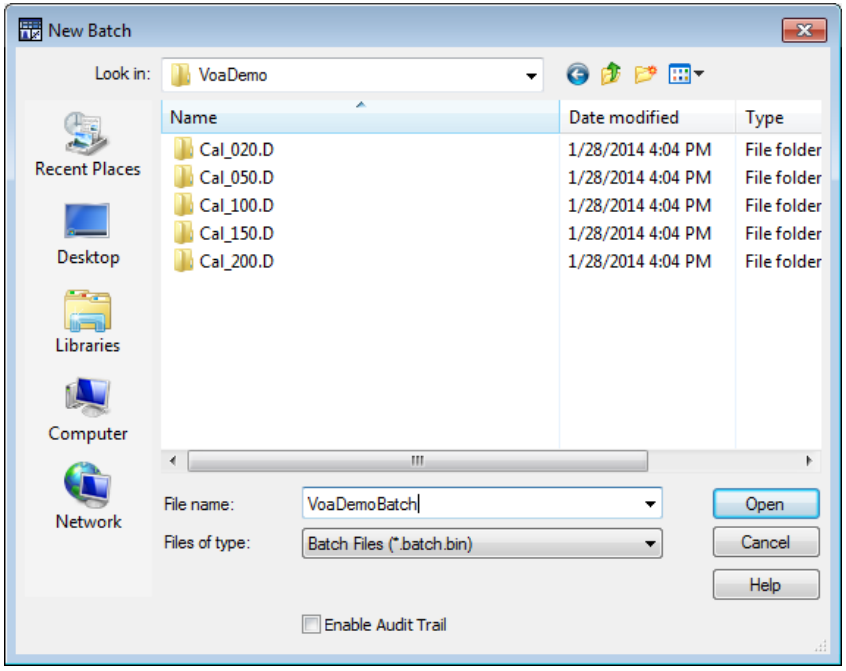


2 浏览到包含您要使用的数据文件的批处理。

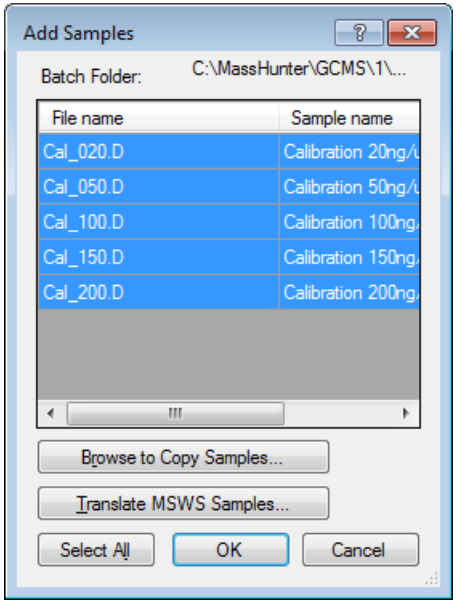
a 选择**文件 > 新建批处理**。

b 使用**浏览**下拉列表浏览到存储批处理数据文件的目录。此示例中为：**C: > MassHunter > GCMS > 1 > Data > VoaDemo**。

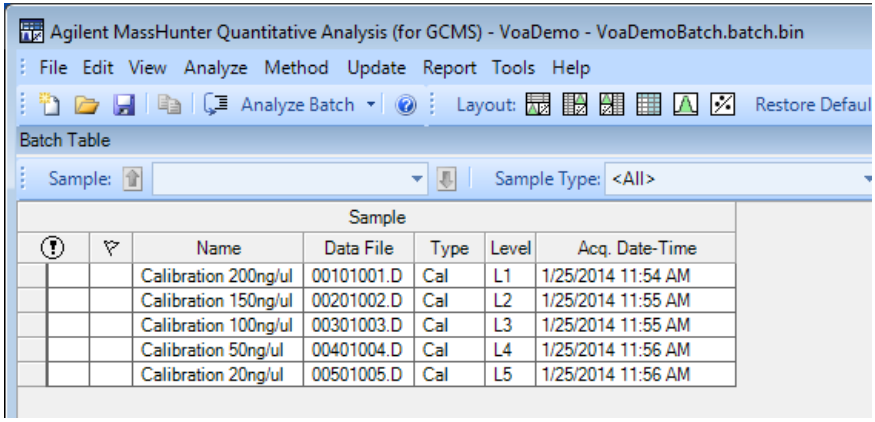
3 为此批处理输入文件名 **VoaDemoBatch**，然后单击**打开**。



4 为此批处理选择文件。您可以选择单个样品数据文件，也可以接受缺省设置并添加所有文件。对于此示例，因为将使用所有这些文件来创建校正曲线，所以请单击**确定**接受缺省设置，然后将所有选定的样品添加到此批处理。



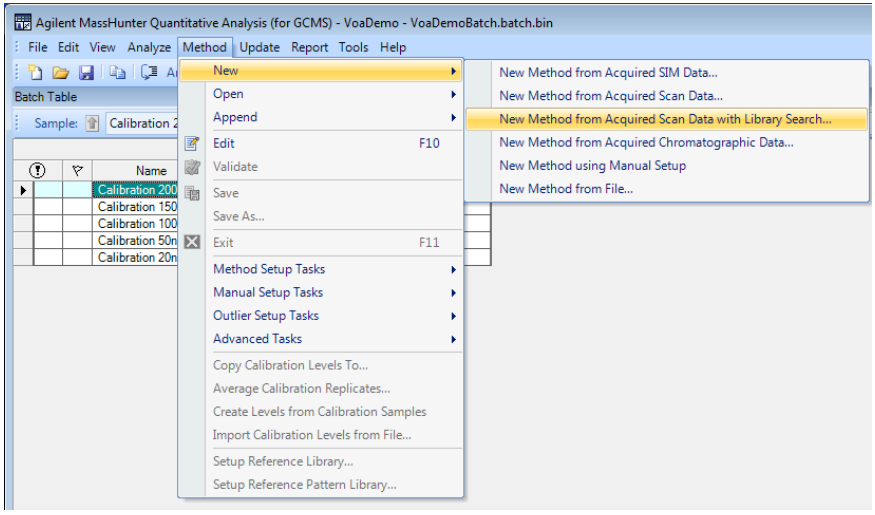
5 检查批处理表。名称、数据文件、类型、级别和采集**日期时间**将自动包括在**批处理表**中。



任务 2. 将校正化合物添加到方法

我们使用的程序需要包含校正样品中的化合物的谱库。如果您没有权限访问扩展谱库 （如 NIST 或 Wiley），那么可以使用替代过程**从采集的扫描数据新建方法**，该过程总的来说将按照此处的过程操作，但不会按名称识别化合物。

1 选择**方法 > 新建 > 从采集的带谱库检索的扫描数据新建方法**。



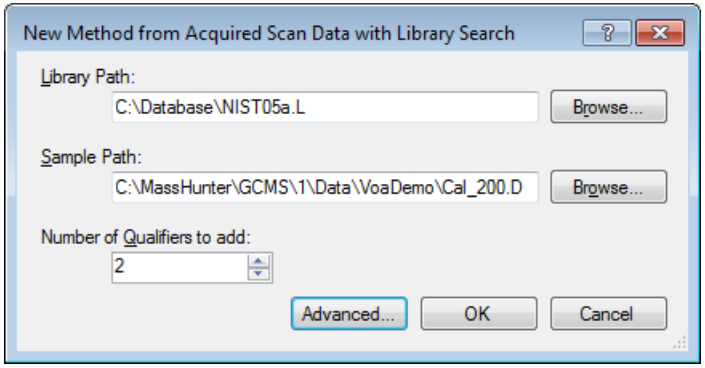
2 浏览到要使用的谱库并选择该谱库。这里我们将使用 NIST05 谱库。

3 浏览到要使用的样品数据文件，选择该文件，然后单击**打开**。这里我们将使用 CAL_200。

记住，它必须是包含高浓度的校正化合物以及相关内标的数据文件。

4 输入每个化合物要包含的最大定性离子数。这里，我们将为每个化合物指定 2 个定性离子。如果 MassHunter 找不到最大定性离子数，它将显示找到的任何定性离子。

5 单击**高级**以显示**扫描分析参数**对话框。

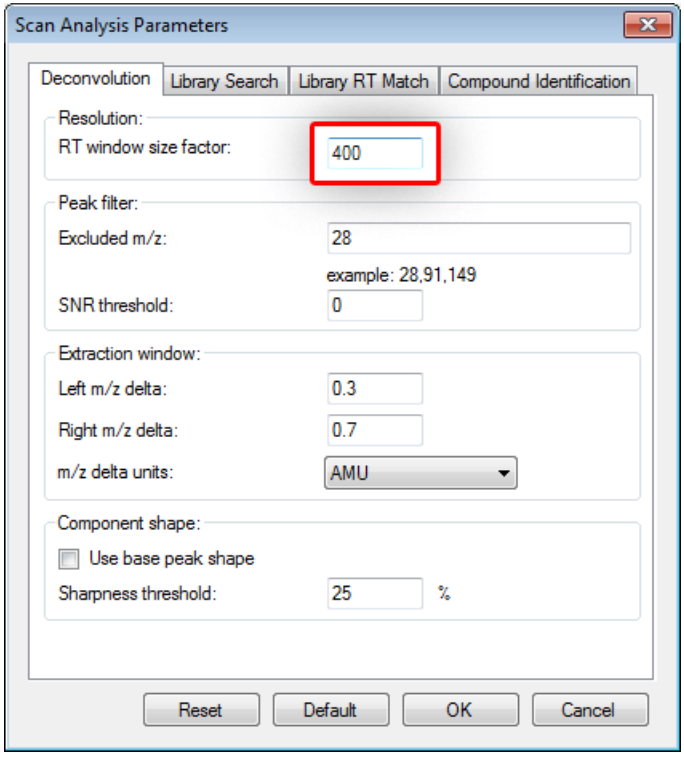


6 单击**缺省**以将所有选项卡上的参数返回到缺省值。

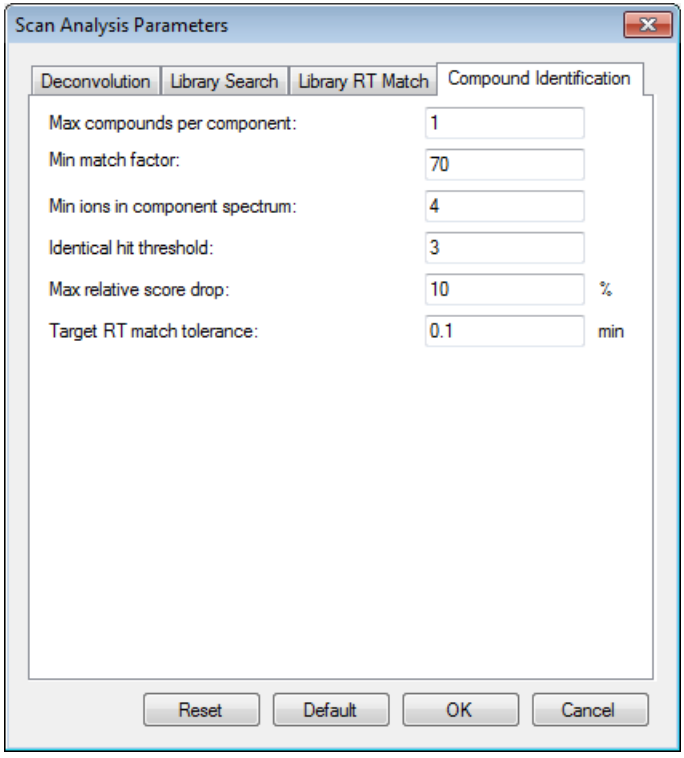
7 在**解卷积**选项卡上，将 **RT 窗口大小因子**设置为 **400**。

此数字越大，解卷积找到的化合物数量就越少。由于此数据中的峰已在色谱上进行了优化，因此我们要减少由解卷积找到的化合物的数量。

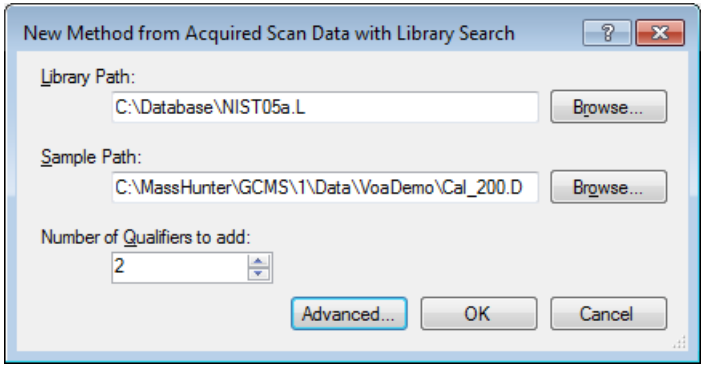
在这种情况下，缺省 RT 窗口大小因子为 100 时将识别出 74 个化合物，这对于此方法而言太多了。如果将此数字增大到 400，可识别出的化合物的数量将减少到 38，这接近样品中校正化合物的实际数量。



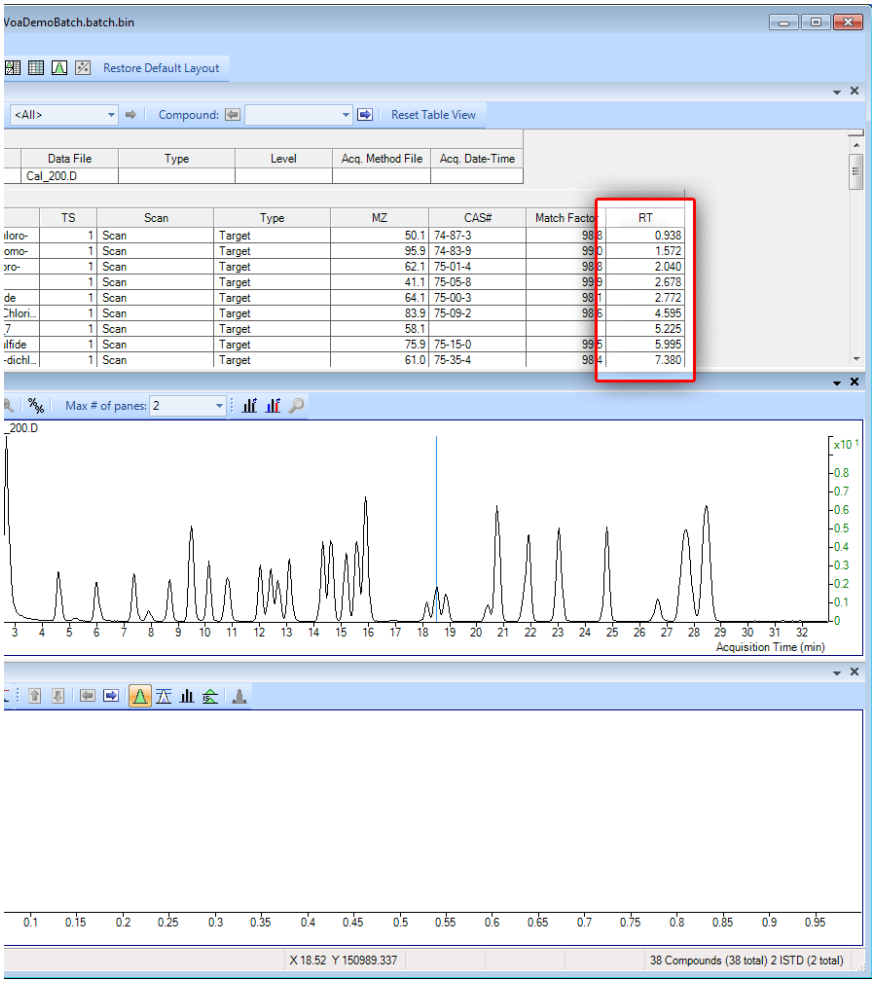
8 在**化合物识别**选项卡上，将**最小匹配因子**更改为 **70**，然后单击**确定**关闭**扫描分析参数**对话框。



9 单击**确定**关闭**从采集的带谱库检索的扫描数据新建方法**对话框，返回到**方法编辑器**。



10 检查方法表。 MassHunter 将根据您输入的扫描分析参数处理校正化合物，并在**方法表**的**方法编辑器**视图中显示校正目标化合物和 ISTD，按保留时间 (RT) 排序。



任务 3. 在方法表中设置化合物和定性离子

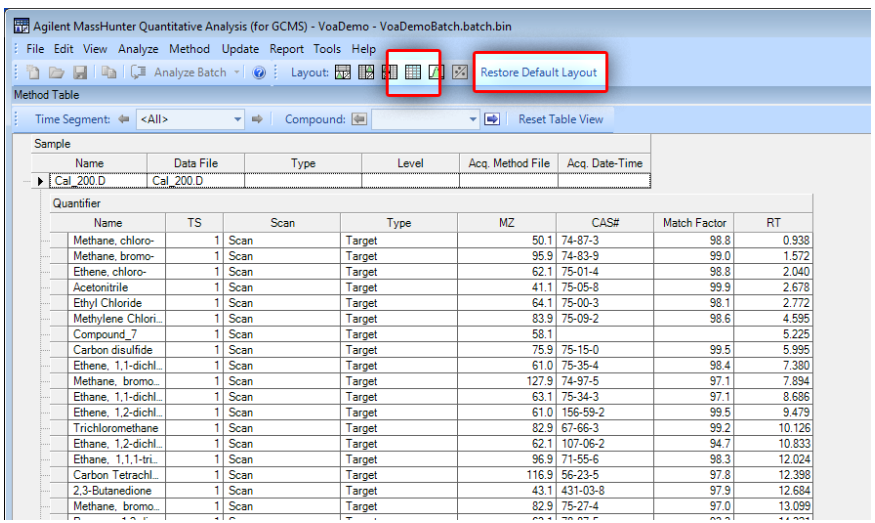
在本任务中，您将：

- 检查由 MassHunter 识别的化合物及其定性离子的列表
- 如果化合物或 ISTD 识别有误，则编辑化合物信息
- 修改定量离子和定性离子
- 检查保留时间窗口，然后为每个校正化合物指定 ISTD
- 将定量离子分配到 ISTD
- 设置浓度级别。
- 设置校正曲线。

1 通过单击**最大化表**图标 ，从显示中删除**化合物信息**窗口和**样品信息**窗口。

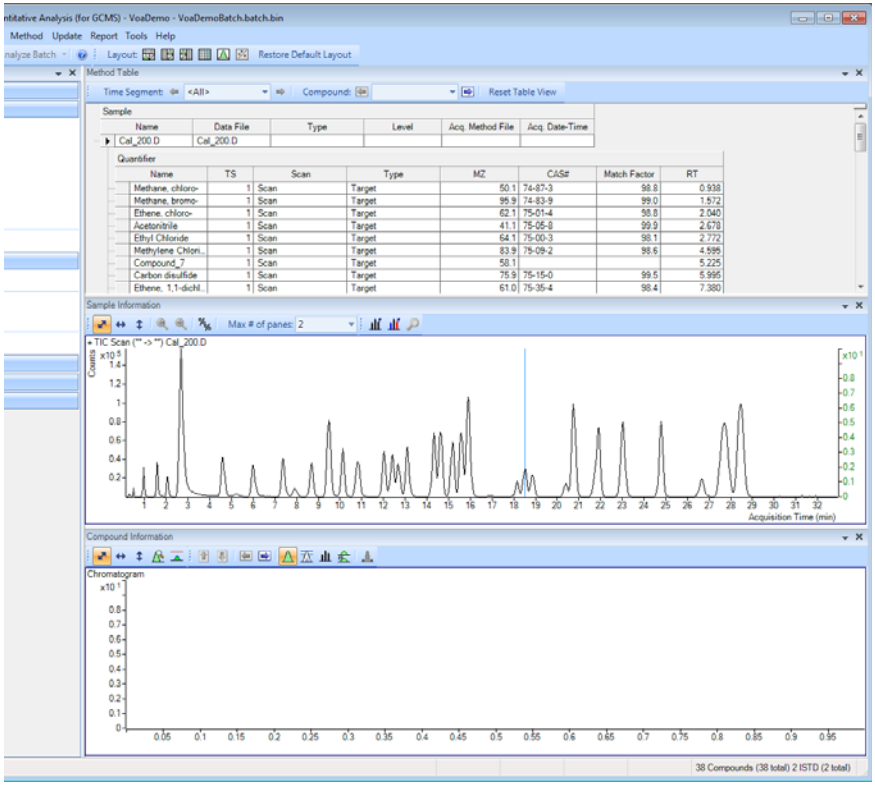
在**视图**选项卡上，选择**最大化窗格 > 最大化表**。

这将仅显示**方法表**视图。该视图允许您查看表中的所有化合物 （如果屏幕分辨率允许的话）。 NIST 谱库找到了 40 个化合物，包括一个未识别的化合物。

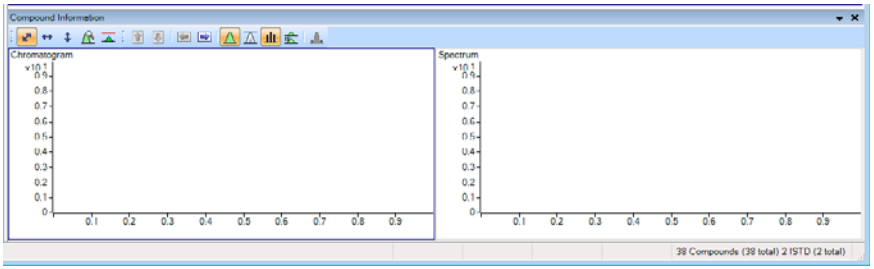


2 单击**恢复缺省布局**返回到上一个视图。

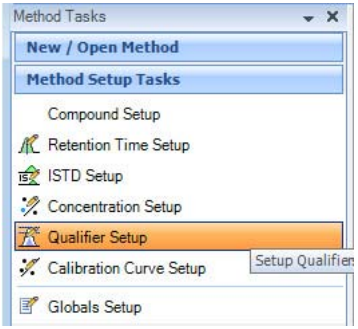
3 检查缺省布局。在这里，您将看到**方法任务**区域、**方法表**、**样品信息**窗口以及**化合物信息**窗口。



4 单击**化合物信息**工具栏中的**显示 / 隐藏质谱图**图标 ，以在**色谱图**窗格右侧显示**质谱图**窗格。现在，“方法编辑器”视图应与此处显示的视图相同。

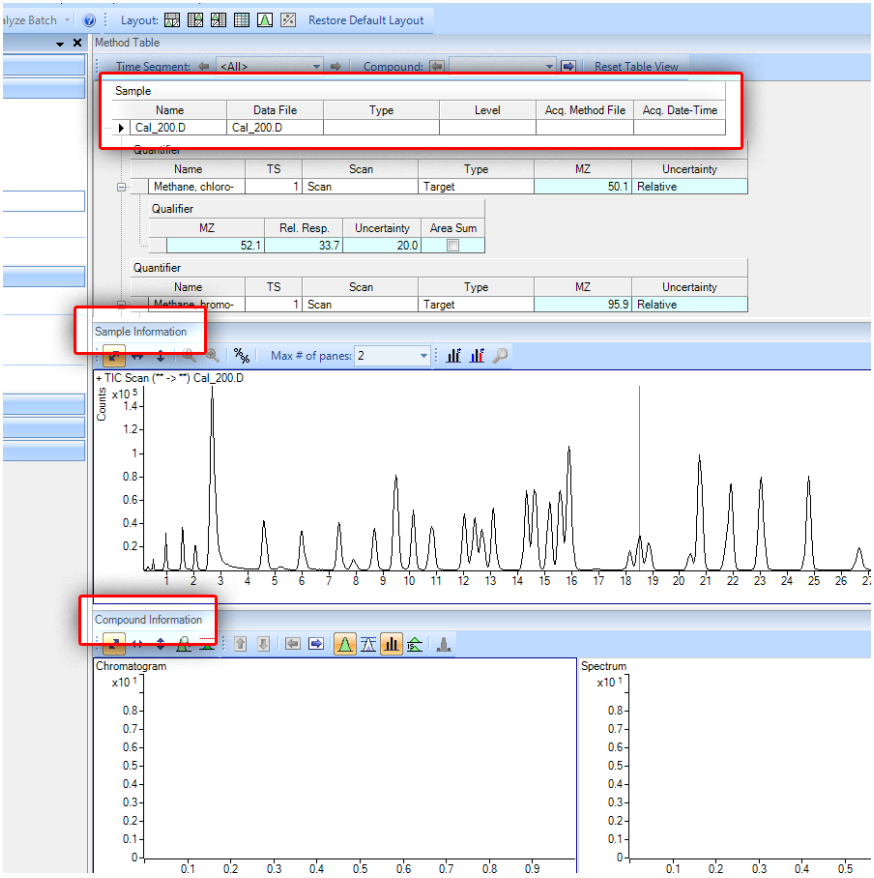


5 在**方法任务**区域中，选择**方法设置任务 > 定性离子设置**，以编辑识别有误的化合物参数。



6 请注意，选中了样品 **Cal_200.D**。带阴影的浅绿色条目是将定性离子关联到目标 （定量离子）化合物的参数。

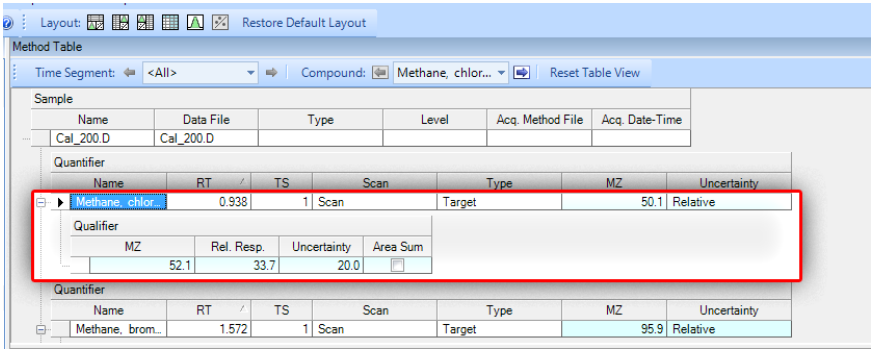
实心三角形表示该样品已被选中。**样品信息**窗口显示此样品的色谱图。由于没有在方法表中选择任何化合物，因此 “化合物信息”窗口是空的。



7 单击甲烷、甲基氯定量离子名称字段。

实心三角形表示该化合物已被选中。选定此化合物后，其峰值将在**样品信息色谱图**窗格中高亮显示，还会显示在**色谱图**和**质谱图**窗格中。

8 查看该化合物的定性离子。该化合物的定性离子显示在**方法表**中，就在**定量离子**条目下方。对于我们使用的定量离子，您可以看到 MassHunter 只选择了单个定性离子。

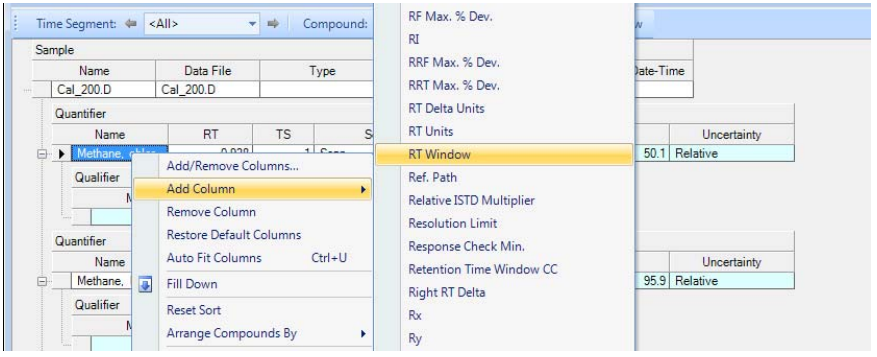


9 将**保留时间**添加到**方法表**。由于这些是已添加到校正样品的已知化合物，因此我们需要确认每个名称条目、目标离子、定性离子以及每个定性离子的相对响应因子。

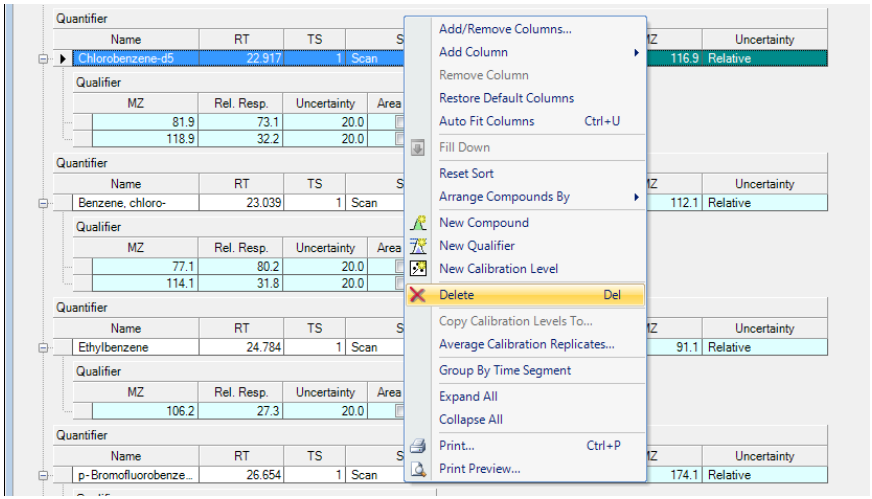
单击**最大化表**图标 。

在**视图**选项卡上，选择**最大化窗格 > 最大化表**。

10 右键单击任何定量离子条目，选择**添加列 > RT**，将**保留时间** (RT) 列添加到**方法表**。



11 在此示例中，我们知道 RT 为 2.678 的化合物乙腈、RT 为 21.71 的甲苯 -D8 和 RT 为 22.91 的氯苯 -d5 不是添加的校正化合物，因此可通过选择这些化合物，然后按 **Delete** 键将其删除。

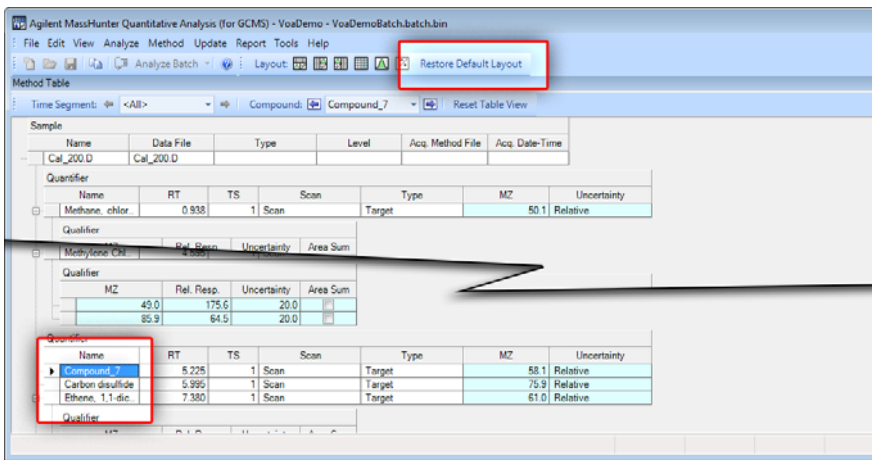


12 使用谱库检索功能尝试识别未知化合物。

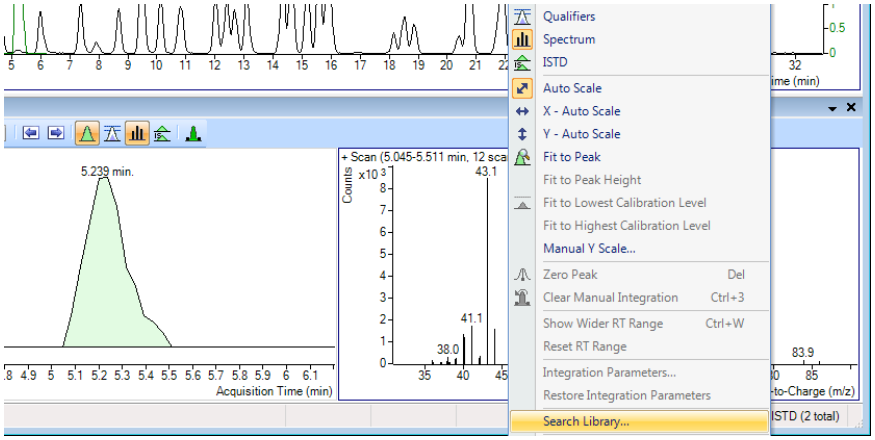
MassHunter 为无法识别的化合物指定了占位符名称 Compound_7。我们希望从校正样品获得丙酮。

a 选择 **Compound_7**。

b 单击**恢复缺省布局**。



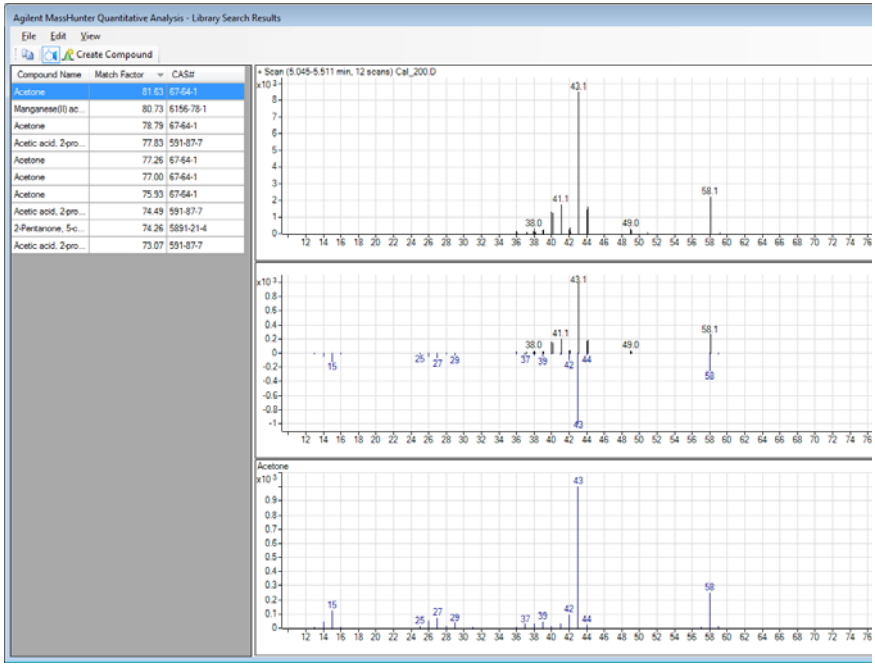
c 在**化合物信息**窗口的**质谱图**窗格中右键单击，然后选择**检索谱库**。



d 出现提示时选择您的谱库。这里我们将使用 NIST05 谱库。

e 单击**打开**以显示**谱库检索结果**窗口。

此化合物识别为**丙酮**，我们可以看到丙酮质谱图（下方的图形）在 43 m/z 处有一个目标峰，在 58 m/z 处有一个定性离子峰。上方的图形显示校正样品中的质谱图，中间的图形通过比较这两个谱图表明匹配良好。



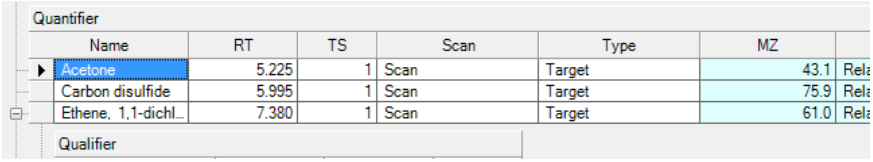
f 记录匹配因子值 81.63 和 CAS 编号 67-64-1 以便将来使用。

g 关闭**谱库检索结果**窗口。

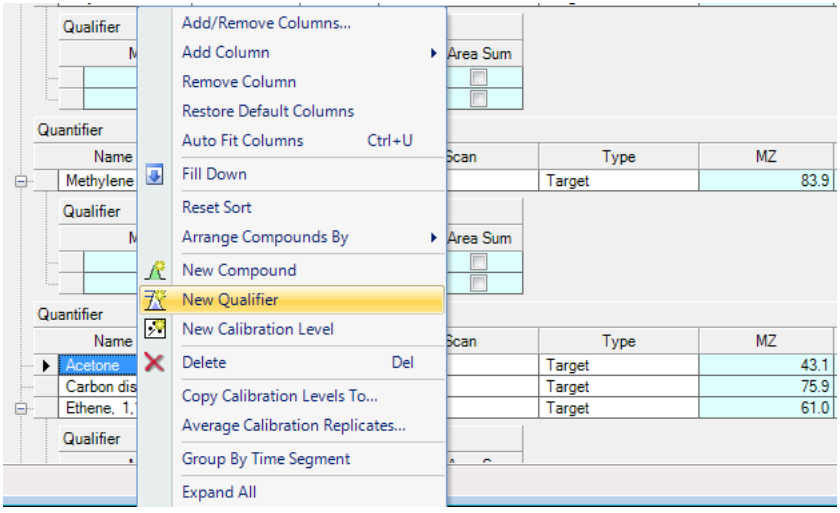
h 单击**最大化表** 。

在**视图**选项卡上，选择**最大化窗格 > 最大化表**。

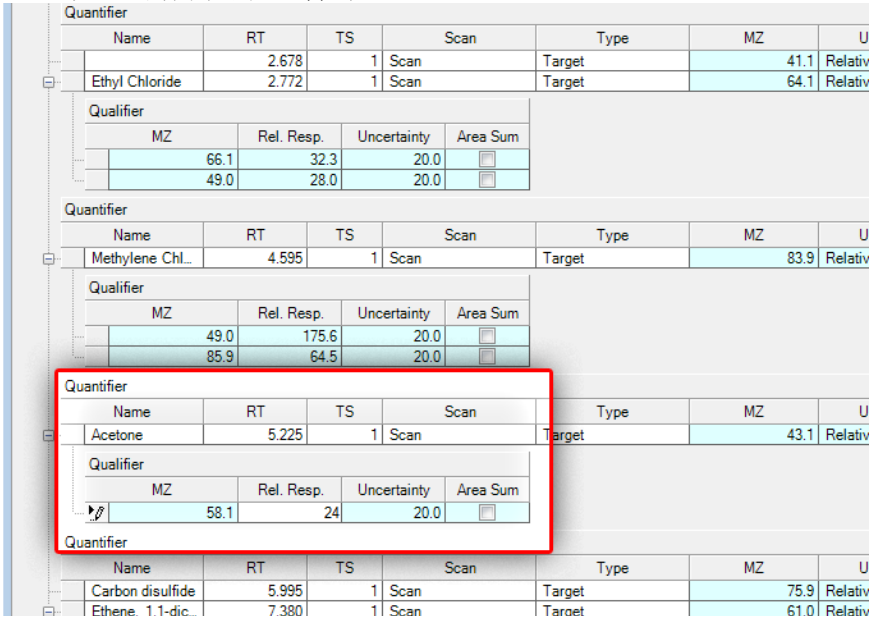
13 将 Compound_7 **名称**参数更改为**丙酮**，然后将丙酮 **MZ** 更改为 43.1。识别为定量离子的 58.1 实际上是定性离子。



14 通过右键单击**丙酮**，然后从上下文菜单中选择**新建定性离子**，将**丙酮**添加为定性离子。将在丙酮定量离子下方输入该定性离子。



15 输入 **58.1** 作为定性离子 **MZ**，以及 **24** 作为 **相对响应** （= 2.2/9，从样品 58.1 与 43.1 的离子响应比得到）。

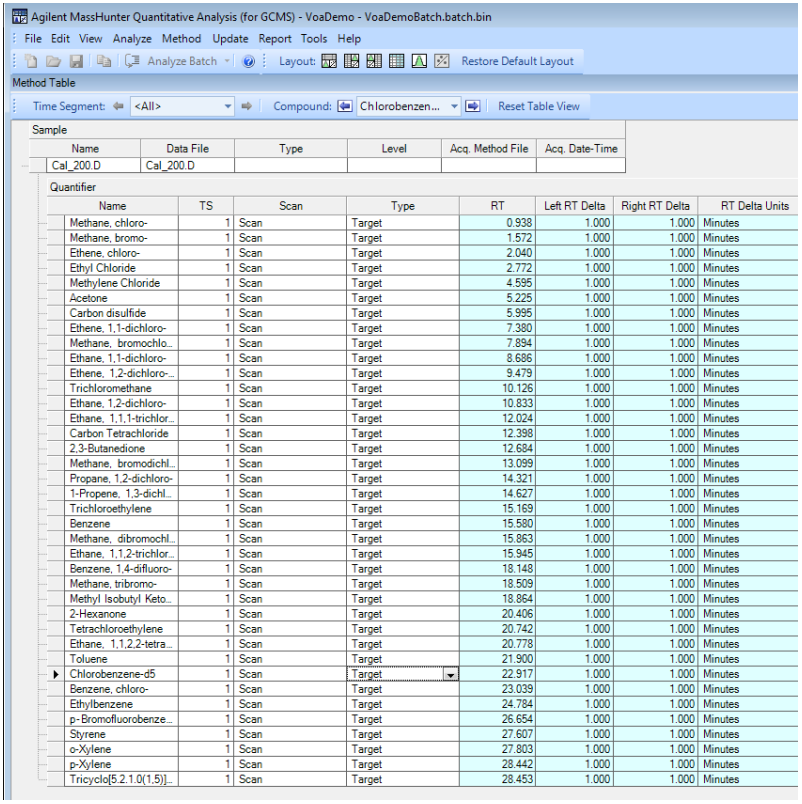


继续检查**方法表**中已识别的所有化合物及其定性离子。

16 检查保留时间。

a 单击**恢复缺省布局**，然后从**方法任务**区域中选择**方法设置任务 > 保留时间设置**。

b 单击**最大化表**以查看按 **RT** 排序的所有化合物。



缺省情况下，左侧 RT 变化量和右侧 RT 变化量将创建一个 2 分钟宽的窗口，围绕此处指定的 RT 居中。如果需要，编辑此窗口大小和 RT。

17 识别添加到样品的 ISTD。还没有将任何 ISTD 指定到化合物。

a 该样品数据文件包含溴氯甲烷、 1-4 二氟苯和氯苯 -d5 ISTD。

选择**方法 > 方法设置任务 > ISTD 设置**以访问 ISTD 设置，无需退出**最大化表**视图。

b 对于这三个 ISTD，选中 **ISTD 标记**，并请注意，选中该选项会将**类型**设置为 **ISTD**。清除该复选框需要将**类型**手动设置为**目标**。

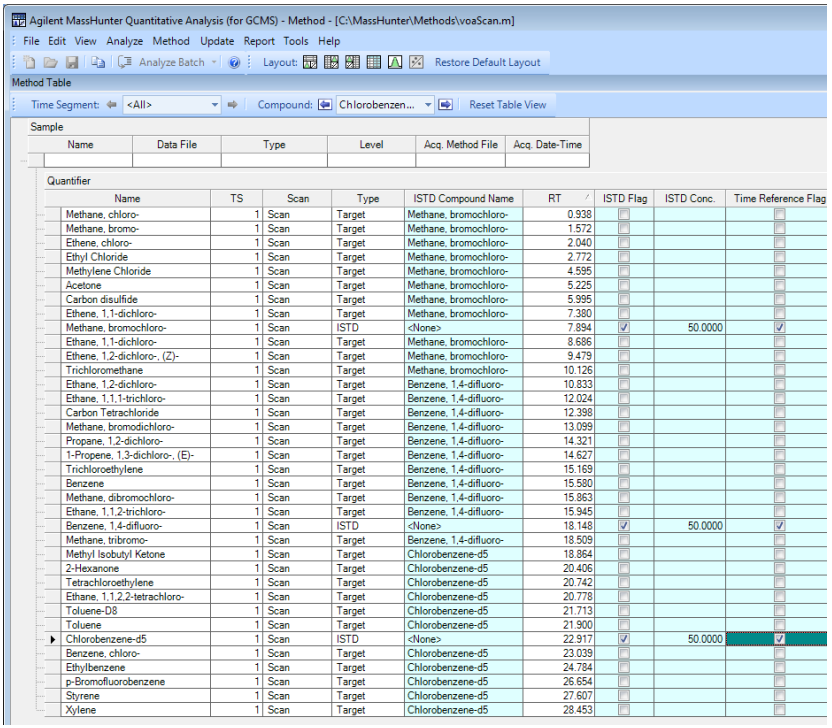
c 对于这三个 ISTD，还需要选中**时间参比**标记。这指定将 ISTD 的实际与预期时间比用作指定到 ISTD 的所有目标化合物的 RT 的乘积因子。

18 将**甲烷、溴氯甲烷** ISTD 指定到 RT 范围为 0.9 至 10.2 内的校正化合物。为此，可右键单击第一个化合物的 ISTD **化合物名称**，然后选择**向下填充**，将此 ISTD 复制到其下方的所有化合物。使用 “向下填充”选项时，必须将覆盖的 ISTD 的 ISTD **化合物名称**更改为 **< 无 >**。

19 将 1-4 二氟苯 ISTD 指定到 RT 范围为 10.8 至 18.5 内的校正化合物。

20 将氯苯 -d5 ISTD 指定到 RT 范围为 18.8 至 29 内的校正化合物。

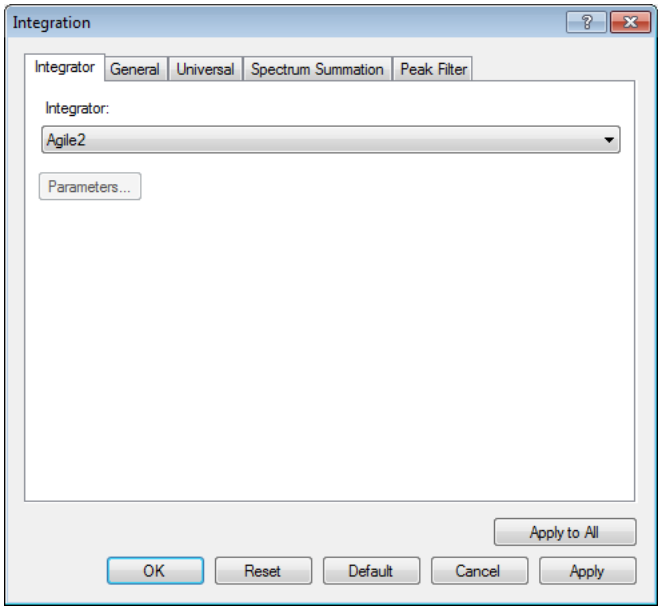
您的屏幕现在看起来应像下面这样。



Name	TS	Scan	Type	ISTD Compound Name	RT	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
Methane, chloro-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	0.938			
Methane, bromo-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	1.572			
Ethene, chloro-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	2.040			
Ethyl Chloride	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	2.772			
Methylene Chloride	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	4.595			
Acetone	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	5.225			
Carbon disulfide	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	5.995			
Ethene, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	7.380			
Methane, bromochloro-	1	Scan	ISTD	<None>	7.894	☑	50.0000	☑
Ethane, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	8.686			
Ethene, 1,2-dichloro-, (Z)-	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	9.479			
Trichloromethane	1	Scan	Target	Methane, bromochloro-	10.126			
Ethane, 1,2-dichloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	10.833			
Ethane, 1,1,1-trichloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	12.024			
Carbon Tetrachloride	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	12.398			
Methane, bromodichloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	13.099			
Propane, 1,2-dichloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	14.321			
1-Propene, 1,3-dichloro-, (E)-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	14.627			
Trichloroethylene	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	15.169			
Benzene	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	15.580			
Methane, dibromochloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	15.863			
Ethane, 1,1,2-trichloro-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	15.945			
Benzene, 1,4-difluoro-	1	Scan	ISTD	<None>	18.148	☑	50.0000	☑
Methane, tribromo-	1	Scan	Target	Benzene, 1,4-difluoro-	18.509			
Methyl Isobutyl Ketone	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	18.864			
2-Hexanone	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	20.406			
Tetrachloroethylene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	20.742			
Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	20.778			
Toluene-D8	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	21.713			
Toluene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	21.900			
Chlorobenzene-d5	1	Scan	ISTD	<None>	22.917	☑	50.0000	☑
Benzene, chloro-	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	23.039			
Ethylbenzene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	24.784			
p-Bromofluorobenzene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	26.654			
Styrene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	27.607			
Xylene	1	Scan	Target	Chlorobenzene-d5	28.453			

21 选择**方法 > 高级任务 > 积分参数设置**。缺省情况下，积分器设置为 Agile2。这是建议用于 MS-MS 数据的无参数积分器。由于我们将对 GC/MS 单四极杆数据进行积分，因此要选择更合适的积分器。

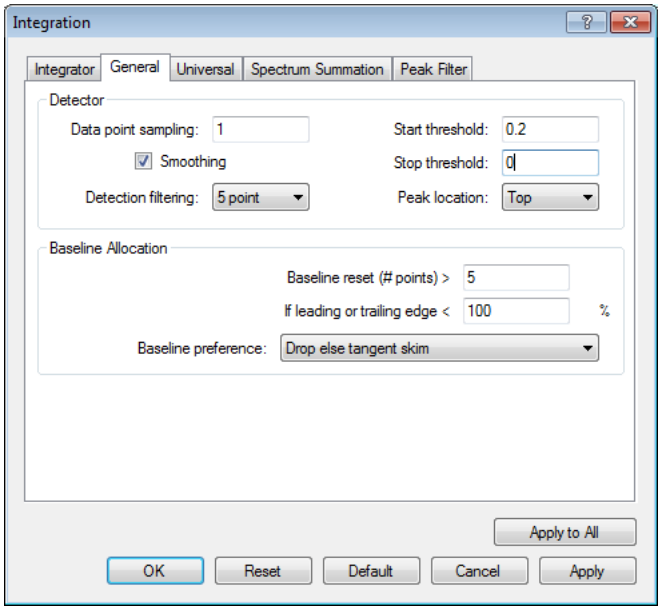
在**方法表**的第一个化合物的**积分器**列中，单击选择框。将显示**积分**对话框。 **Agile2** 显示为示例中的**积分器**。



22 从**积分器**下拉列表中选择**常规**。此积分器类似于为 GC/MS 积分优化的 Genie ChemStation 积分器。

23 单击**参数**以打开**常规**选项卡。

24 编辑设置以匹配下面的对话框。



25 单击**应用到所有**，此积分器以及这些参数设置将被复制到表中的每个化合物。单击**确定**以关闭对话框。

任务 4. 添加校正曲线

1 设置校正化合物的浓度级别。

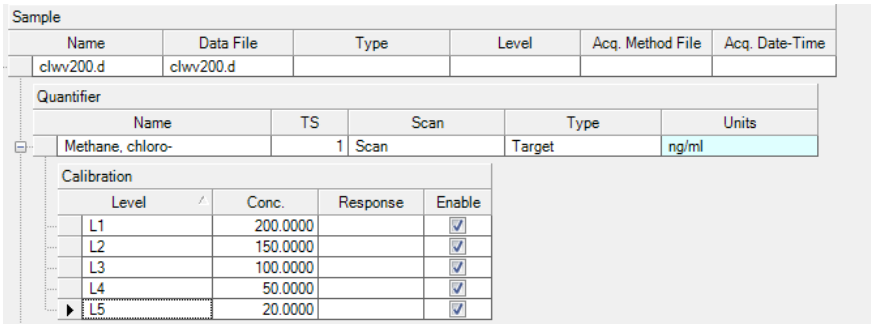
a 选择**方法 > 方法设置任务 > 浓度设置**。

b 选择表中的第一个目标化合物，然后右键单击，选择**新建校正级别**。将在**定量离子**表下方创建一个**校正**表，其中包含单个级别。

c 将其他四个级别添加到该表。

d 在**级别**列中，添加名称 **L1**、 **L2**、 **L3**、 **L4** 和 **L5**。

e 在**浓度**列中，添加数字 200、 150、 100、 50 和 20。请参考下图。



2 在**校正**表中右键单击，然后选择**复制校正级别到**。

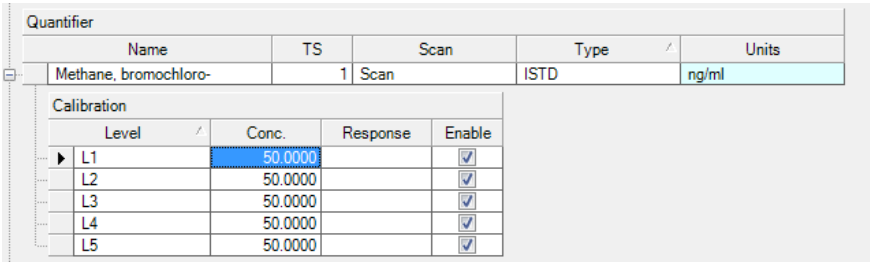


3 单击**全选**，然后单击**确定**，将该**校正**表复制到所有目标化合物。

4 设置三个内标的浓度级别。

a 在**定量离子**表中，单击**类型**列标题可对表进行排序。这三个 ISTD 将转到方法表顶部。请注意，这些级别未添加到 ISTD。

b 将包含五个级别的校正表添加到第一个 ISTD。为此，可选择 ISTD，然后右键单击并选择**新建校正级别**。将此过程重复四次。和以前一样，将级别标记为 L1 到 L5，然后为所有级别指定浓度 50。



c 重复此过程，将相同的校正表添加到其他两个 ISTD。

5 设置校正曲线。

a 选择**方法 > 方法设置任务 > 校正曲线设置**。

b 选择表中的第一个化合物。

c 从 **CF** 下拉列表中选择**平均响应因子**。该选项适用于我们的数据。

d 右键单击此最后一个条目，然后选择**向下填充**。显示的缺省曲线拟合 (CF) 参数是：

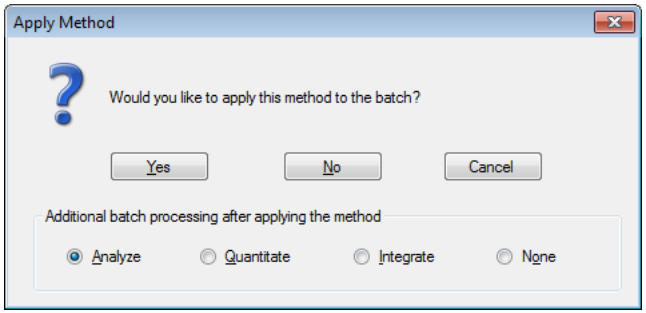
- 在 **CF 原点**列下方为**忽略**，
- 在 **CF 权重因子**列下方为**无**

保留这些设置用于示例。

6 选择**方法 > 退出**。

7 在将这个新方法应用于批处理后，选择**分析**以分析整个批处理。

8 设置 ISTD 浓度，然后单击**是**开始使用此方法进行分析。您将退出**方法编辑器**视图，并进入 “批处理分析” 视图。



由于数据采集序列指定每个校正样品中的化合物的响应因子将替代定量方法中的响应因子，因此，此批处理分析将使用化合物响应填充校正表。

9 检查校正曲线。

a 选择表中的第一个样品，注意，“校正曲线” 窗口将显示由 5 个浓度级别创建的曲线。

b 右键单击**批处理表**中的**样品**列标题，然后选择**自动调整列宽度**。

10 单击**最大化校正曲线**图标。

在**视图**选项卡上，选择**最大化窗格 > 最大化校正曲线**。

黑线表示先前应用于方法中的所有化合物的曲线拟合 (CF)。其参数在谱图左上方部分中，也用黑色表示。信息的第一行显示化合物名称、级别数和 CF 方程中使用的点数。



11 在**校正曲线**工具栏中单击几次右箭头图标，以选择**氯乙烷**化合物。

L5 级别校正点不在曲线上。现在看看是否能够指定其他 CF，以允许所有 5 个点都包括在曲线上。

12 浏览曲线拟合助手。

a 在**校正曲线**窗口中右键单击，然后选择**曲线拟合助手**。这将打开**曲线拟合**表。表中的第一行应为选中状态。彩色行表示在 “曲线拟合” 表中选定的 CF 的曲线。其参数位于当前指定的 CF 下方，颜色与曲线相同。

b 在**曲线拟合**表中，单击**被禁用的点数**漏斗图标，然后将列过滤器设置为 **0**。表中其余的所有选择都将通过所有 5 个点。

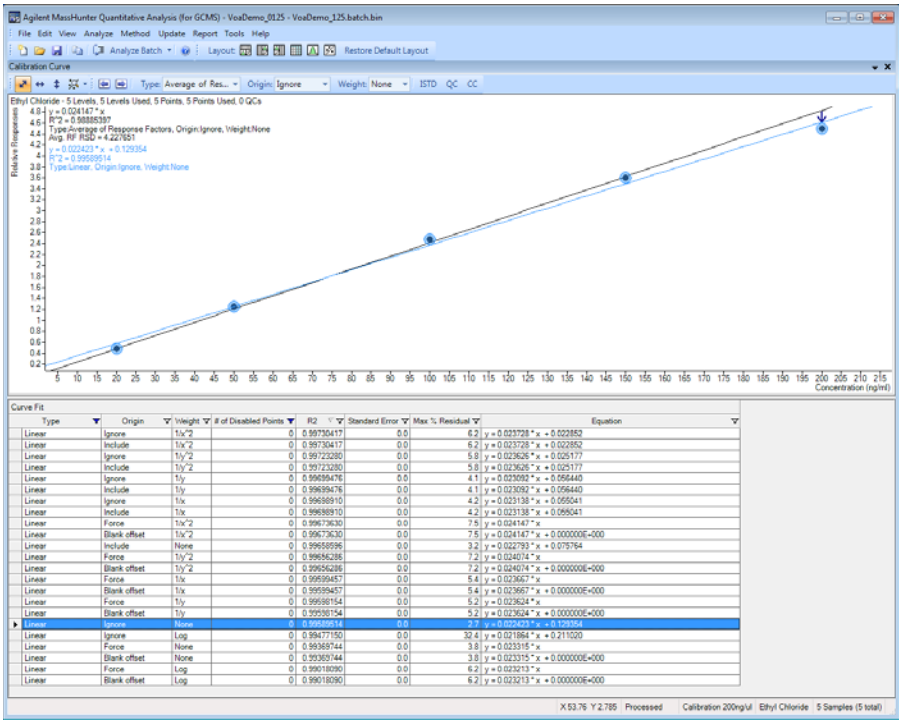
c 对 R2 列排序，使表中的第一个 CF 的值最接近 1.0。选择该线条以查看曲线如何完美地穿过所有 5 个点。这是加权的二次曲线，我们要看看更简单的方法是否有效。

d 单击**类型**漏斗图标，然后将列过滤器设置为**线性**。我们将跳过简单的响应因子平均值，因为它在浓度较高时不是较好的拟合。

e 选择不同的行并观察彩色曲线。具有忽略原点和同量加权的简单线性曲线是较好的拟合。

f 从**原点**下拉列表中选择**忽略**，从**权重**下拉列表中选择**无**。

g 在**曲线拟合**表中选中此线后 （显示实心三角形图标），在**校正曲线**窗口中右键单击，然后选择**接受辅助曲线**。



h 单击**校正曲线**工具栏中的**转到下一个化合物**箭头图标。

i 重复此曲线拟合检查过程，直到对所有校正化合物的曲线拟合感到满意为止。

j 右键单击并选择**曲线拟合助手**以退出助手。

13 在方法编辑器中检查曲线拟合变化。

a 选择**方法 > 编辑**以进入**方法编辑器**视图。

b 选择**方法 > 方法设置任务 > 校正曲线设置**。

c 右键单击**定量离子**表标签，然后选择**添加 / 删除列**。

d 添加 **CF 分子式**列以查看 CF 方程 （已选定）。曲线拟合助手将最初由此方法指定的响应因子平均值替换为下面高亮显示的线性 CF 参数和 CF 分子式。

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
Calibration 200n..	Cal_200.D	Cal	L1	VoaDemo	1/25/2014 1:15...

Quantifier

Name	TS	Scan	Type	CF	CF Origin	CF Weight	CF Formula
Methane, chloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.712715 * x
Methane, bromo-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.536230 * x
Ethene, chloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.961206 * x
Ethyl Chloride	1	Scan	Target	Linear	Ignore	None	y = 1.121169 * x + 0.129354
Methylene Chloride	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 2.065273 * x
Acetone	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 0.435916 * x
Carbon disulfide	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Include	None	y = 5.946581 * x
Ethene, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 3.769239 * x
Methane, bromochloro-	1	Scan	ISTD	Average of Response Factors			
Ethane, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 4.533245 * x

e 选择**方法 > 另存为**。浏览到要保存方法的位置。为该方法指定一个名称。在示例中，我们使用了 Voa。

f 选择**方法 > 退出**以进入 “批处理分析”视图。

g 保存批处理并退出 MassHunter。

任务 5. 将新化合物添加到方法

当方法包含校正化合物数据后，必须将新化合物添加到方法，方法是使用添加功能，或将单个化合物手动添加到方法。方法添加功能类似于前面的任务中以及联机帮助中介绍的功能。下面介绍如何将校正化合物手动添加到方法。

1 访问方法。

   a 选择**文件 > 打开批处理**，然后选择 **VOADemo.Batch.Bin** 文件。此批处理数据包含所有校正样品中的新校正化合物。

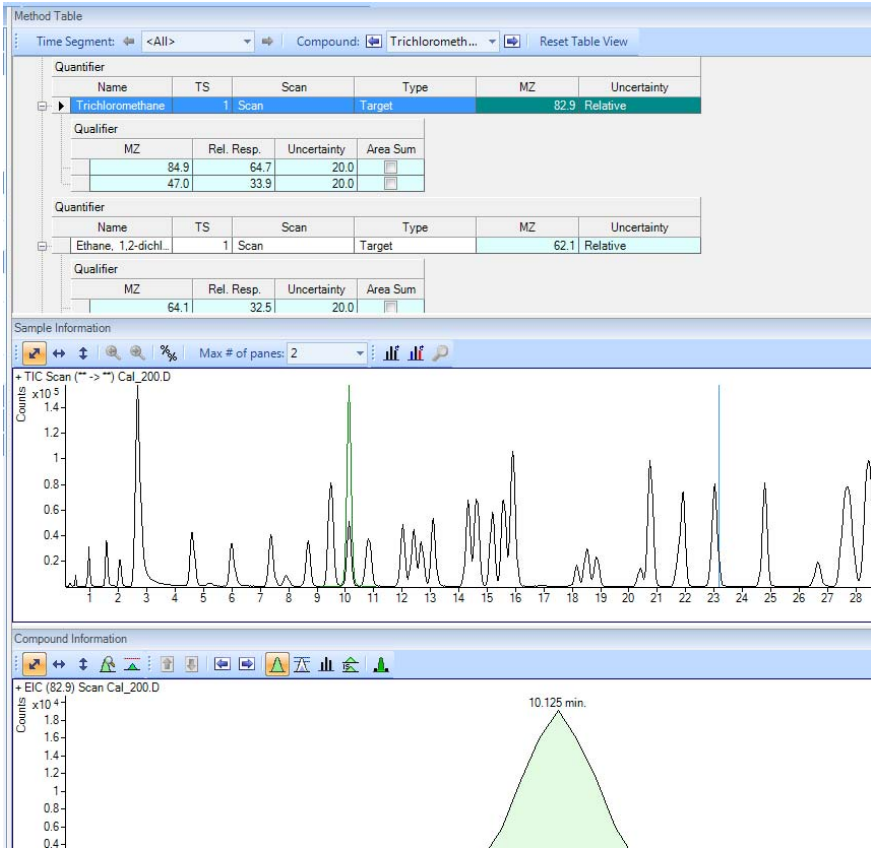
   b 在**批处理表**中，选择 **CAL_200** 样品，然后选择**方法 > 编辑**以访问**方法编辑器**。

2 准备方法数据以完成此演示。

   a 选择**方法 > 设置任务 > 定性离子设置**，然后选择化合物**氯仿**。我们将从该方法中删除此化合物，然后手动将其重新添加到方法，以演示此任务的过程。

   b 在删除此化合物之前，请注意目标参数和定性离子参数。还要注意在“样品信息”窗口和 “化合物信息”窗口中高亮显示的 RT 10.125 分钟处的化合物。这是我们将在此任务中使用的峰。

c 右键单击**定量离子**表中选择的化合物，然后选择**删除**。



3 将化合物添加到方法。

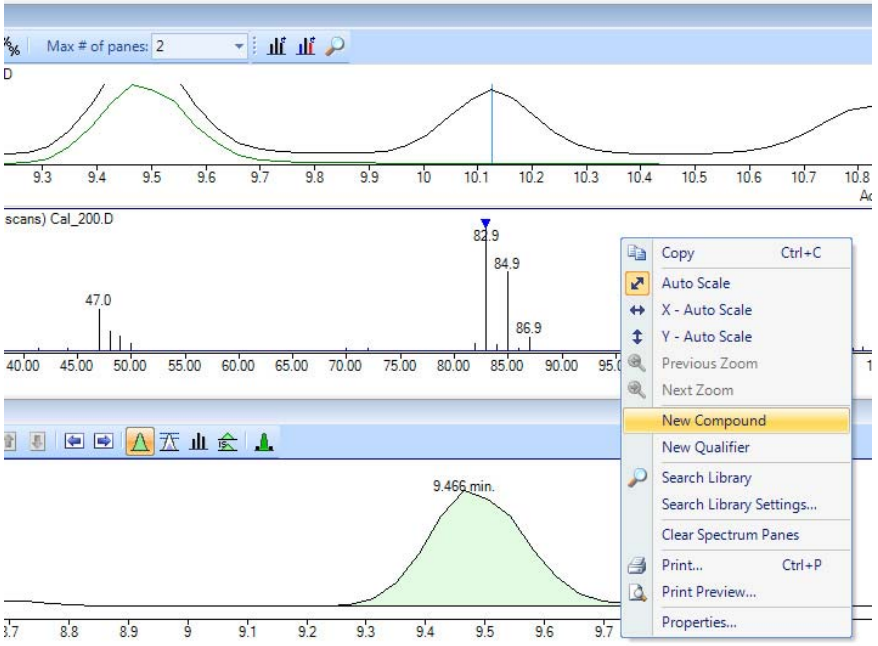
a 在**样品信息**窗口中，在 9 分钟和 11 分钟之间缩放（右键单击并拖动）。

b 单击峰顶点，以显示通过该顶点的线。

c 在窗口中右键单击，然后选择**提取质谱图**。检查质谱图，注意，根据丰度， **82.9** m/z 处的离子是目标化合物，定性离子是 **84.9** m/z 和 **47.0** m/z。

d 单击 **82.9** m/z 处的离子线。此线顶部的蓝色三角形表示离子已选定。右键单击并选择**新建化合物**。化合物按 RT 顺序添加到了**定量离子**表。

e 将**氯仿**添加到**定量离子**表的空白**名称**单元格中。在下面的步骤中添加定性离子时，使该化合物在**方法表**中保持选中状态。



4 显示该化合物的质谱图并添加其定性离子。

a 要再次显示**氯仿**的质谱图，请单击峰顶点以显示通过顶点的线。

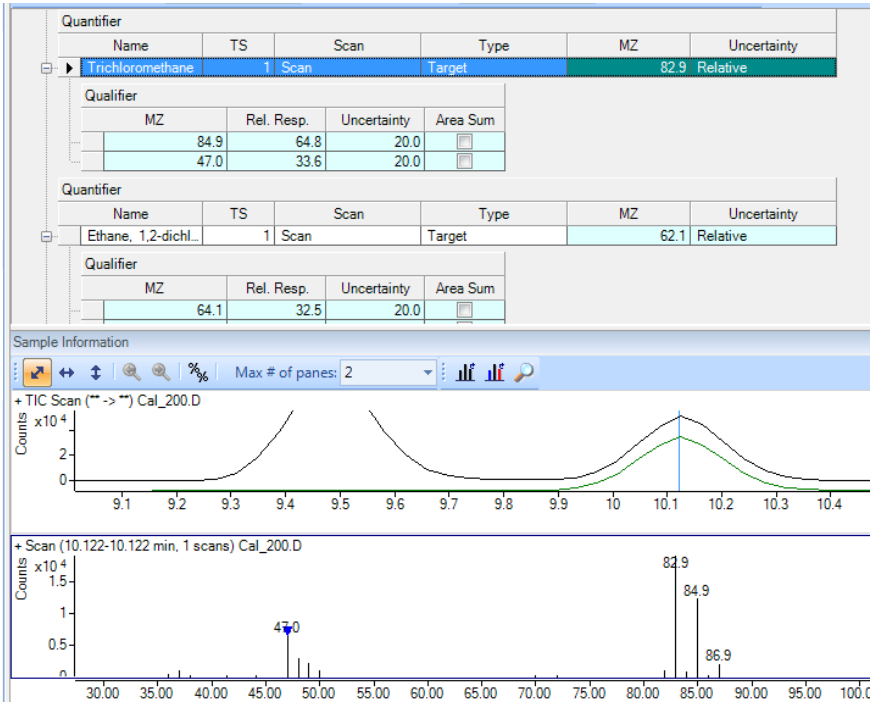
b 右键单击并选择**提取质谱图**。

c 选择质谱图窗格中 **84.9** m/z（蓝色三角形）处的离子，然后从上下文菜单中选择**新建定性离子**。该离子将添加到定性离子表。

5 添加第二个定性离子。

a 使用相同的过程将离子 **47.0** m/z 添加到**定性离子**表。

b 观察**方法表**中的**氯仿**条目。将计算已添加的定性离子的相对响应因子并将其添加到表。还将添加 20% 的缺省相对不确定度。



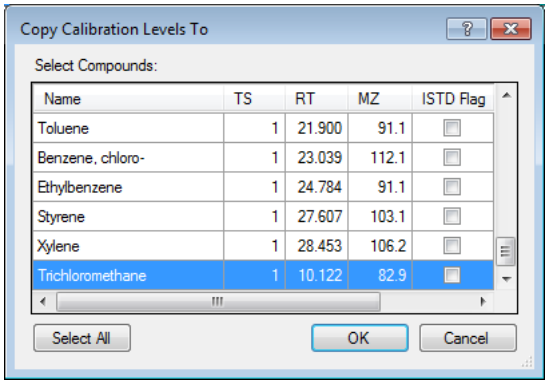
6 检查并更新此化合物的方法参数。

a 在**方法设置任务**中，单击每个任务，注意需要修改 MassHunter 缺省设置的地方。例如，需要为此新化合物指定 ISTD。

b 选择**方法设置任务 > 浓度设置**。

c 右键单击**方法表**中的相邻化合物，然后选择**复制校正级别到**。

d 选择**氯仿**，然后单击**确定**。



在分析此批处理时，复制的化合物的响应因子将替换为批处理中氯仿样品的响应因子。

任务 6. 将扫描方法转换为 SIM 方法

在使用单四极杆数据时，可以从扫描方法创建 SIM 方法，方法是更改单个方法参数，创建序列表校正运行，以代替目标化合物的所有响应因子和定性离子比。

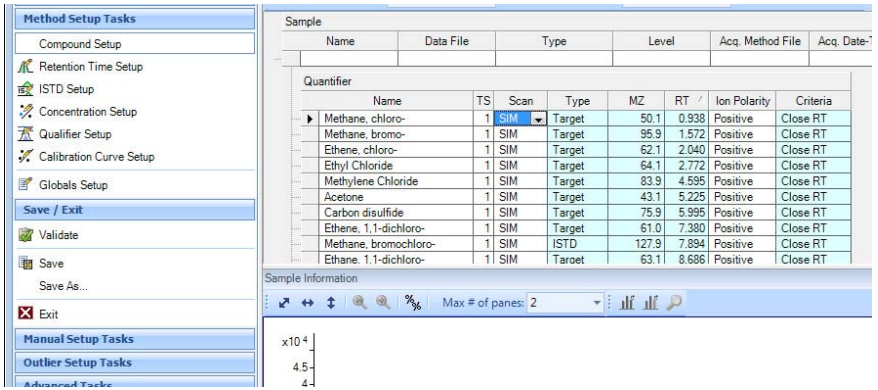
1 编辑方法。

a 选择**方法 > 打开 > 从现有文件打开方法**，然后选择要转换的方法。这里我们将使用 **VoaDemo.M**。

b 在**方法设置任务**中，单击**化合物设置**。

c 在表的第一个化合物的**扫描**列中，从下拉列表中选择 **SIM**。

d 右键单击，选择**向下填充**，以将 **SIM** 复制到表中的所有化合物。



2 选择**方法 > 另存为**，然后将此方法保存到用于 SIM 数据采集的同一方法位置。

3 创建序列，以代替方法响应因子和定性离子比。

a 创建对校正级别样品运行 SIM 数据采集的**序列**表，您的定量方法的校正曲线使用了这些样品。

b 将**序列**表的方法设置到 SIM 采集方法，该方法也包含此处创建的定量方法。

c 将该**序列表**设置为代替所有目标化合物的响应因子和定性离子比。

4 检查校正曲线。

a 在 MassHunter 定量分析中，打开批处理并**分析**校正数据。

b 使用曲线拟合助手检查校正曲线。

c 方法参数检查完成后，将定量方法保存回 SIM 数据采集文件。

现在，此方法已准备好处理这些化合物的 SIM 数据采集样品。

创建 SIM 方法

创建 SIM 定量方法类似于创建扫描定量方法。以下是 SIM 方法创建过程的概述。

从采集的 SIM 数据

在创建定量分析 SIM 方法的过程中，必须运行 SIM 校正样品并采集计算校正曲线所需的响应数据，如 **“任务 4. 添加校正曲线”（第 31 页）**中所述。这表示可以使该过程自动执行。在 MassHunter 数据采集中，在**单四极杆 MS 方法编辑器**中创建的 SIM 方法包含时间段、离子 m/z 和可选的化合物名称。如果选择**方法 > 从采集的 SIM 数据新建方法**，MassHunter 可使用为校正批处理采集的这些数据来填充定量方法中的化合物信息。它还可以使用批处理中的所有校正样品来创建方法的校正表，并根据校正曲线的缺省曲线类型来计算校正曲线。完成此任务后，该过程中其余与设置定量方法参数相关的部分类似于此扫描方法练习中说明的任务。

一次一个化合物

将单个化合物添加到 SIM 方法的过程类似于 **“任务 5. 将新化合物添加到方法”（第 37 页）**中介绍的扫描过程。

从 SIM 方法

可将新化合物添加到现有的 SIM 方法。为此，应创建仅包含新化合物的采集方法和序列。这将在定量分析中创建一个新的**批处理表**，该批处理表包含新化合物的校正数据。然后使用**方法 > 添加 > 从采集的 SIM 数据添加方法**自动执行将新化合物添加到现有的定量方法的过程。

从扫描方法

将扫描方法转换为 SIM 方法的过程已在前面的任务 **“任务 6. 将扫描方法转换为 SIM 方法”（第 42 页）**中介绍。

从采集的扫描数据创建新方法的练习到这里就结束了。继续阅读下一节以了解有关检查定量结果的信息。

2 检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果 45

任务 2. 更改主窗口布局 49

任务 3. 访问积分参数 56

任务 4. 配置 “化合物信息”窗口中的设置 58

任务 5. 将结果导出到 Excel 64

此练习中的任务说明如何检查批处理文件中的样品和化合物数据、自定义结果布局以及将数据导出到 Microsoft Excel。

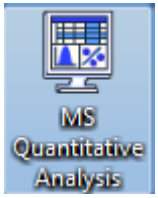
在本练习中将使用 **VoaSampleData** 批处理。此数据位于 Agilent GC/MS 软件信息存储器中，其中还包含 5973/5975 和 5977 GC/MS 仪器用户信息。

将此数据文件夹复制到您 PC 上的 MassHunter\GCMS\1\ 数据文件夹。

任务 1. 浏览批处理表结果

本任务说明如何浏览样品和化合物，观察批处理表中的变化以及化合物信息数据。该任务还说明如何显示各种样品类型。

1 要启动**定量分析**程序，请双击桌面上的 **MS 定量分析**图标。



2 单击工具栏中的**恢复缺省布局**。

在**首页**选项卡上，单击**恢复缺省布局**。

3 右键单击**批处理表**中的**样品**列标题，然后从上下文菜单中选择**恢复缺省列**。

4 单击工具栏上的**打开批处理**  。

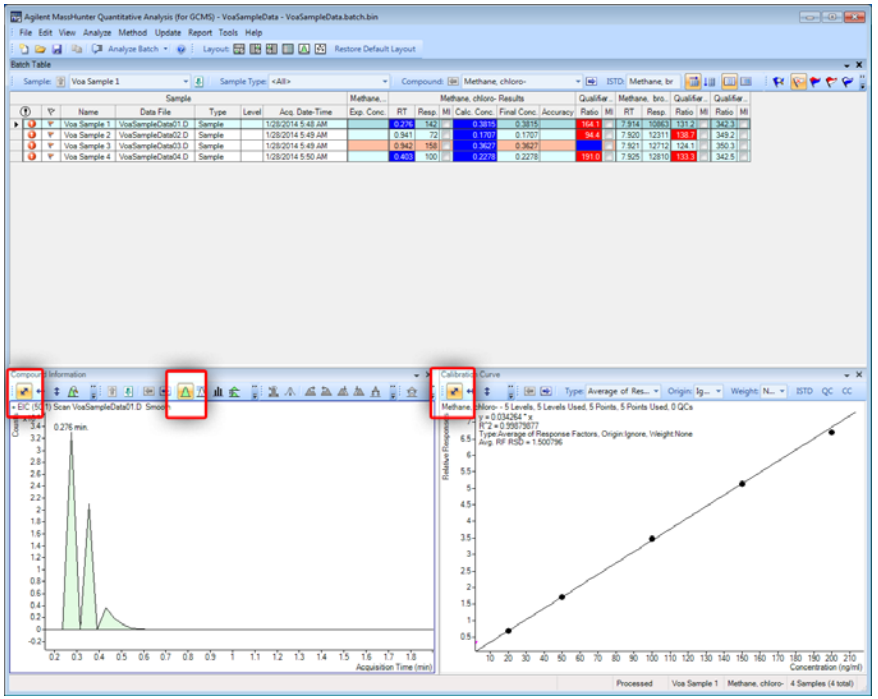
在**首页**选项卡上，单击**打开批处理**。

5 浏览到目录 **MassHunter\GCMS\1\data\VoaSampleData**，双击 **VoaSampleData.batch.bin**。所显示的主视图应如下所示。这是缺省布局，包含缺省列设置。

缺省布局是在出厂时设置好的，不能更改。如果您要创建自己的布局，请参见 **“任务 2. 更改主窗口布局”（第 49 页）**。

6 在**化合物信息**工具栏中，选择**打开 / 关闭自动调整**和**显示 / 隐藏色谱图**图标。

7 在**校正曲线**工具栏中，选择**打开 / 关闭自动调整**图标。



8 选择**视图 > 样品信息**以显示当前在**批处理表**中选定的样品的色谱图。选定的样品由表的最左侧列中的实心三角形表示。

在**视图**选项卡上，选择**窗格 > 样品信息**。

9 确保**打开 / 关闭自动调整**和**全部归一化**是**样品信息**窗口中唯一选择的图标。

10 使用**批处理表**标准工具栏中的**下一个样品**图标 检查每个样品的色谱图。

11 检查化合物如何同时显示在**批处理表**、**样品信息**窗口和**化合物信息**窗口中。

a 选择**批处理表**中的样品 **Voa 样品 3**。

b 在**样品信息**色谱图中右键单击，然后选择**化合物**。这将高亮显示从批处理表或 “化合物信息”窗口中选定的化合物的色谱图中的化合物峰。

c 使用**批处理表**工具栏中的**转到下一个化合物**图标在方法中的每个校正化合物中移动，同时查看：

- 批处理表中化合物的结果列
- “样品信息”窗口中化合物高亮显示的位置
- “化合物信息”窗口中化合物的峰

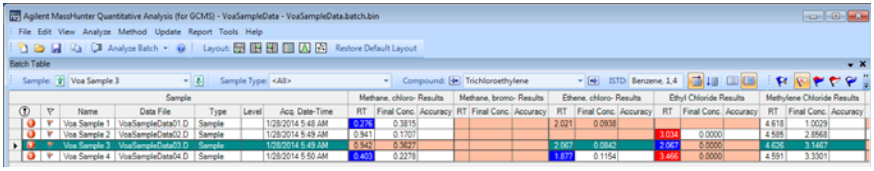
d 像上一个步骤中一样，使用**化合物信息**工具栏中的**转到下一个化合物**图标在校正化合物中移动。

12 在批处理表中显示所有校正化合物的结果。

a 单击工具栏中的**在批处理表中显示多个化合物 / 样品**视图图标，以显示所有目标化合物的定量结果。还可以单击**视图 > 批处理表布局 > 多个化合物 / 样品视图**。

在**视图**选项卡上，选择**批处理表布局 > 多个化合物 / 样品视图**。

b 注意**化合物**信息窗口中每个化合物的 **RT** 中的差异。



c 要返回显示选定目标化合物的详细定量结果，请单击工具栏中的**显示单个化合物 / 样品**图标 。

在**视图**选项卡上，选择**批处理表布局 > 单化合物 / 样品视图**。

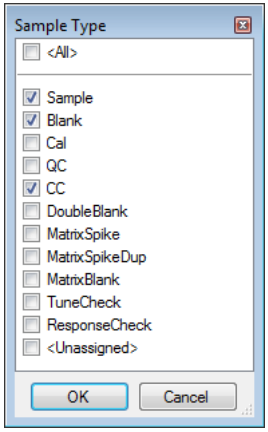
d 如果需要，单击**化合物**下拉列表，然后选择**可卡因**。

在处于 “多个化合物 / 样品视图”模式和 “单个化合物视图”模式中时，将显示不同的一组列。如果在处于 “多个化合物 / 样品视图”模式中时在表中添加列，这个变化不会自动反映在 “单个化合物 / 样品视图”模式中。

13 按样品类型过滤显示在**批处理表**中的样品。

a 单击**样品类型**下拉列表。将显示**样品类型**对话框。

b 清除 **< 全部 >** 复选框，然后选择**样品**、**空白**和 **CC** 样品类型。



c 单击**确定**关闭该对话框并应用此样品过滤器。

批处理表现在仅显示样品、空白和 CC 样品类型。批处理中包括的其他样品类型将被隐藏。

任务 2. 更改主窗口布局

本任务说明如何使用工具栏布局图标重新排列主窗口，将定性离子、质谱图和 ISTD 窗格添加到“化合物信息”窗口，保存和检索主窗口的自定义布局，以及将数据从批处理表导出到 Excel。

1 使用工具栏中的布局图标定位**批处理表**、**化合物信息**窗口和**校正曲线**窗口。

使用**视图**选项卡上的**预设布局**定位**批处理表**、**化合物信息**窗口和**校正曲线**窗口。

缺省布局称为**表顶部**，因为**批处理表**在主视图的顶部。将布局更改为**表左侧**、**表右侧**，然后返回到**表顶部**布局。

a 单击工具栏中的**布局 – 表左侧**图标 。

b 单击工具栏中的**布局 – 表右侧**图标 。

c 单击工具栏中的**布局 – 表顶部**图标 。

2 使用工具栏中的布局图标使每个窗口最大化。

使用**视图**选项卡上的**最大化窗格**使每个窗口最大化。

a 单击工具栏中的**最大化表**图标 。

b 单击工具栏中的**最大化化合物信息**图标 。

c 单击工具栏中的**最大化校正曲线**图标 。

d 要返回到缺省布局，请单击工具栏上的**恢复缺省布局**。

3 将窗格添加到**化合物信息**窗口。

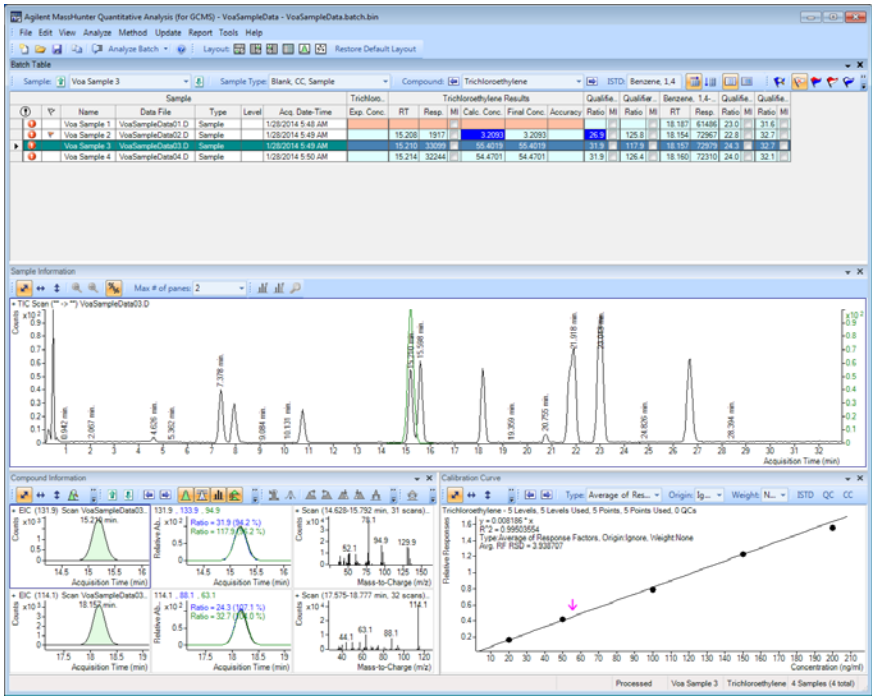
a 在**批处理表**中，选择 **Voa 样品 3**。

b 从**批处理表**标题中的**化合物**下拉列表中选择**三氯乙烯**。

c 在**化合物信息**工具栏中，单击**显示 / 隐藏定性离子**图标 。

d 单击**显示 / 隐藏质谱图**图标 。

e 单击**显示 / 隐藏 ISTD** 图标 。布局和结果如下图中所示。



4 保存没有校正曲线的缺省布局。

a 关闭**校正曲线**窗口。

b 单击**视图 > 窗口布局 > 保存布局**。

在**视图**选项卡上，选择**调用 / 保存布局 > 保存布局**。

c 将布局文件命名为**批处理表和化合物信息**，然后单击**保存**。

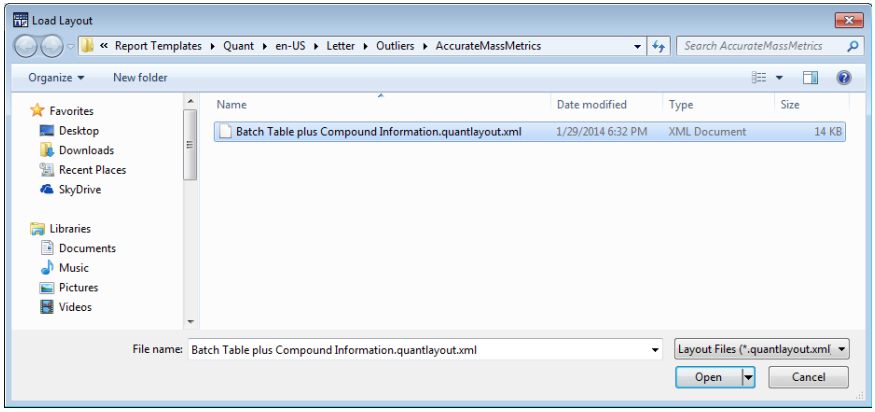
5 调用新创建的布局。

a 单击工具栏中的**恢复缺省布局**。

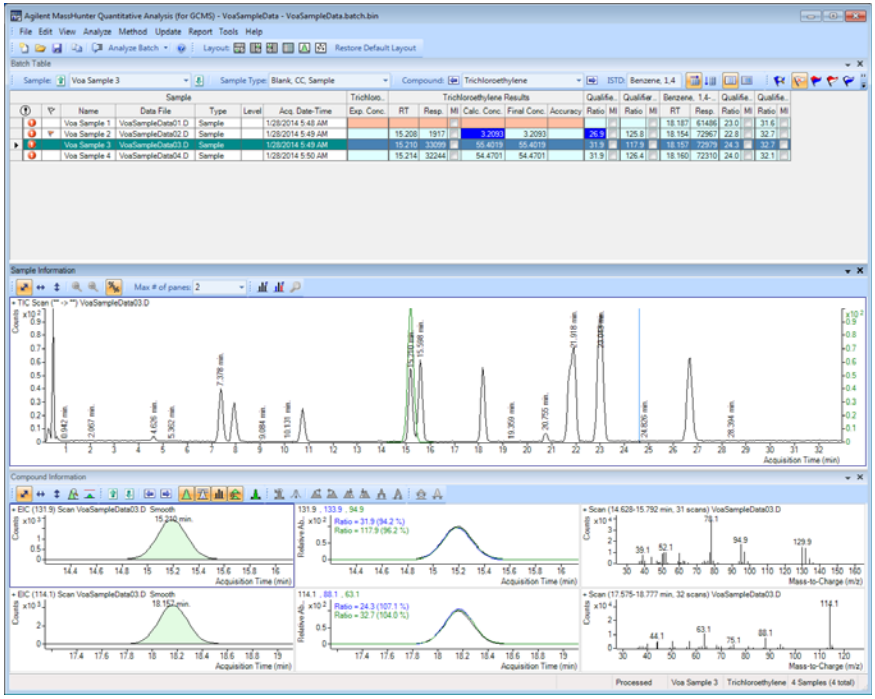
在**首页**选项卡上，单击**恢复缺省布局**。

b 单击**视图 > 窗口布局 > 调用布局**。

在**视图**选项卡上，选择**调用 / 保存布局 > 调用布局**。



c 选择**批处理表和化合物信息**，然后单击**打开**。将显示没有 “校正曲线” 窗口的主窗口布局。



6 创建自定义窗口布局。

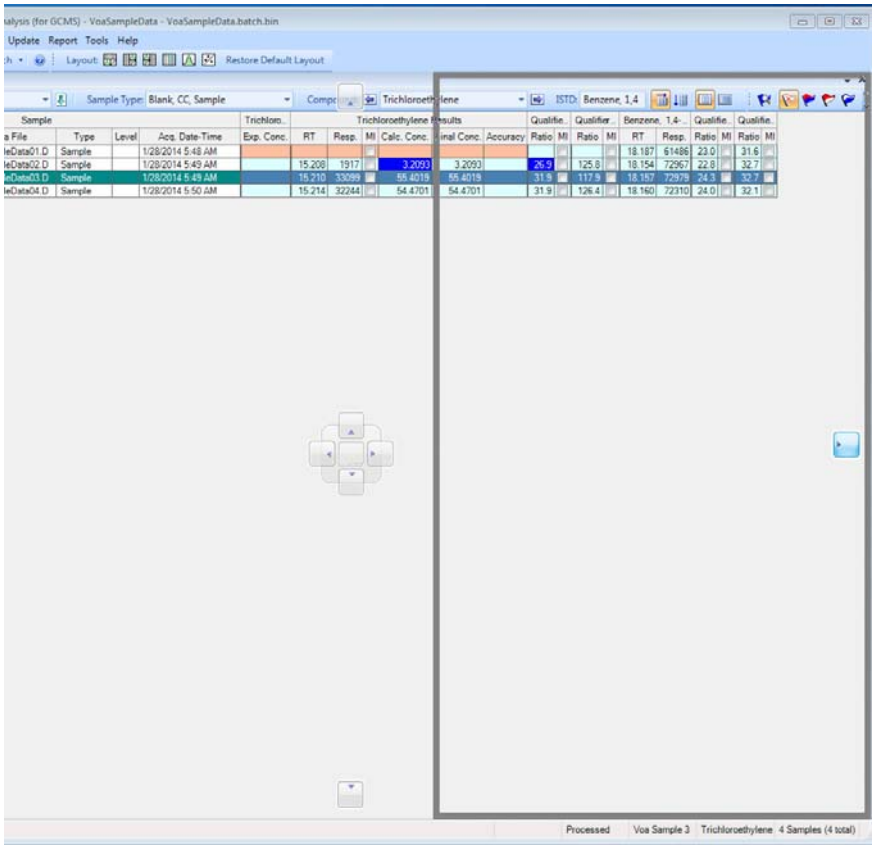
a 单击主窗口工具栏中的**恢复缺省布局**。

在**首页**选项卡上，单击**恢复缺省布局**。

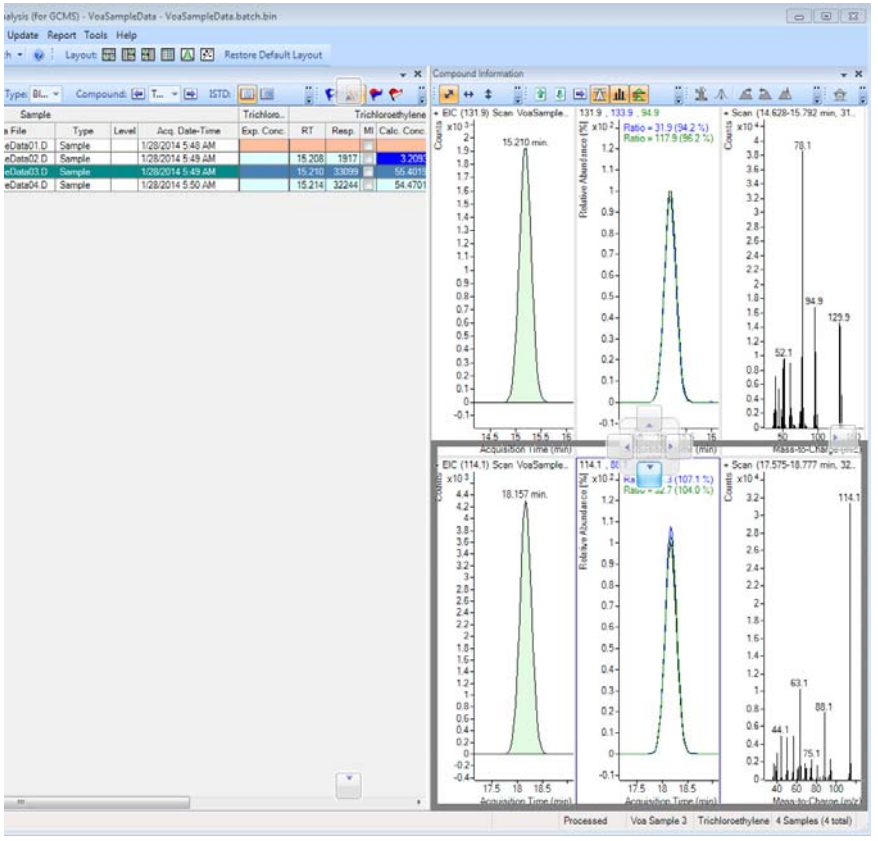
b 要断开**校正曲线**窗口与主窗口的连接，请双击标题栏，或者单击窗格关闭图标旁边的向下箭头，然后选择**浮动**。

c 要断开**化合物信息**窗口与主窗口的连接，请双击标题栏，或者单击窗格关闭图标旁边的向下箭头，然后选择**浮动**。

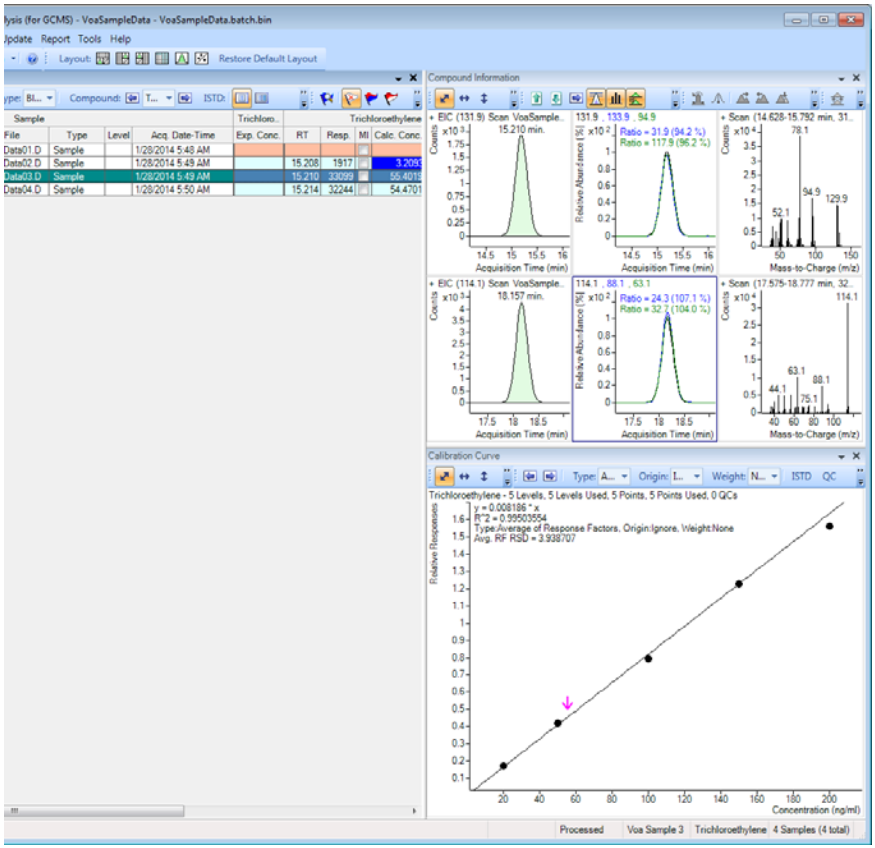
d 拖动**化合物信息**窗口的标题栏，将该窗口拖到主窗口右侧。将光标放在右侧锚按钮上，当锚按钮变为蓝色并且主窗口的轮廓如下图所示时，释放鼠标按钮。“化合物信息”窗口现在锚定到主窗口右侧。



e 拖动**校正曲线**窗口的标题栏，将该窗口拖到主窗口右侧。将光标放在底部中心锚按钮上，当锚按钮变为蓝色并且窗口的轮廓如下图所示时，释放鼠标按钮。“校正曲线”窗口现在锚定到主窗口的右侧下方。



自定义视图显示在下面的布局中。



f 单击主窗口工具栏中的**恢复缺省布局**。

任务 3. 访问积分参数

本任务说明如何从 “化合物信息” 窗口访问积分参数。

1 选择**文件 > 打开批处理**并调用 **VoaSampleData.batch.bin**。

2 设置用于本练习的 “化合物信息” 窗口。

a 单击**恢复缺省布局**。

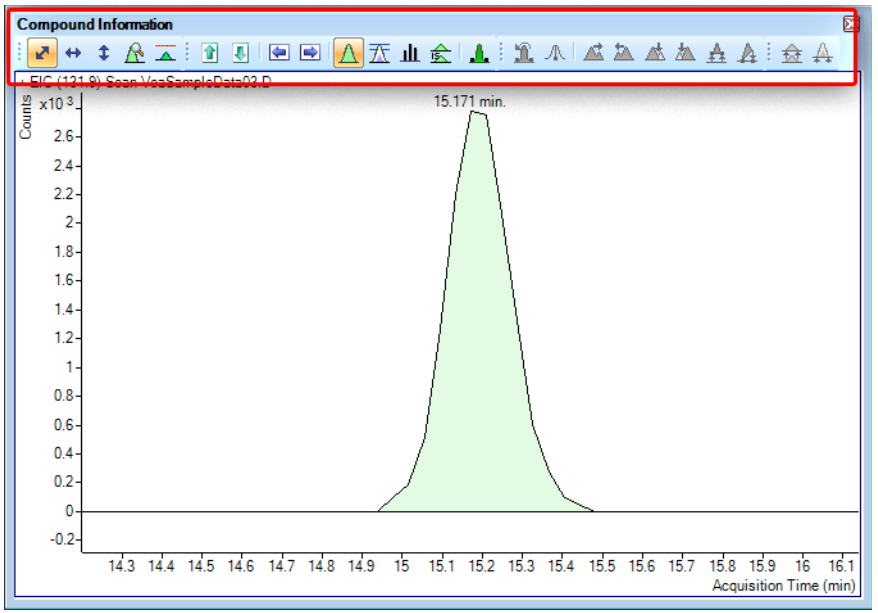
b 选择**批处理表**中的样品 **Voa 样品 3**。

c 在**批处理表**中选择**三氯乙烯**化合物。

d 在**化合物信息**窗口中右键单击，选择**属性**，然后在**属性**窗口中单击**缺省**。

e 在**化合物信息 (2)** 选项卡上，单击**缺省**，然后单击**确定**。

f 将光标放在**化合物信息**窗口和**校正曲线**窗口之间的边界上，将边界拖到右侧，直到所有图标都显示在**化合物信息**窗口中，如下图所示。

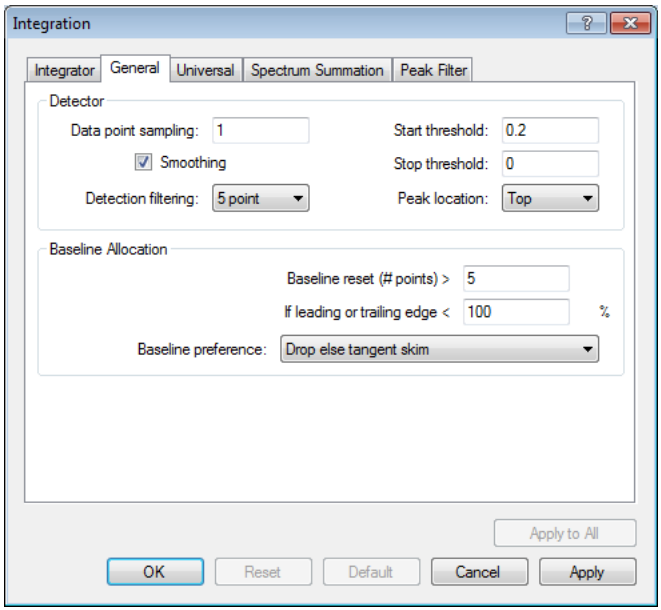


3 访问所显示的化合物的积分参数设置。

a 在**化合物信息**窗口中右键单击，然后选择**积分参数**。

b 单击**常规**选项卡以显示**常规**积分器的参数。

c **常规**积分器是在创建此方法时为所有化合物设置的。使用此对话框更改选定化合物的积分器设置。



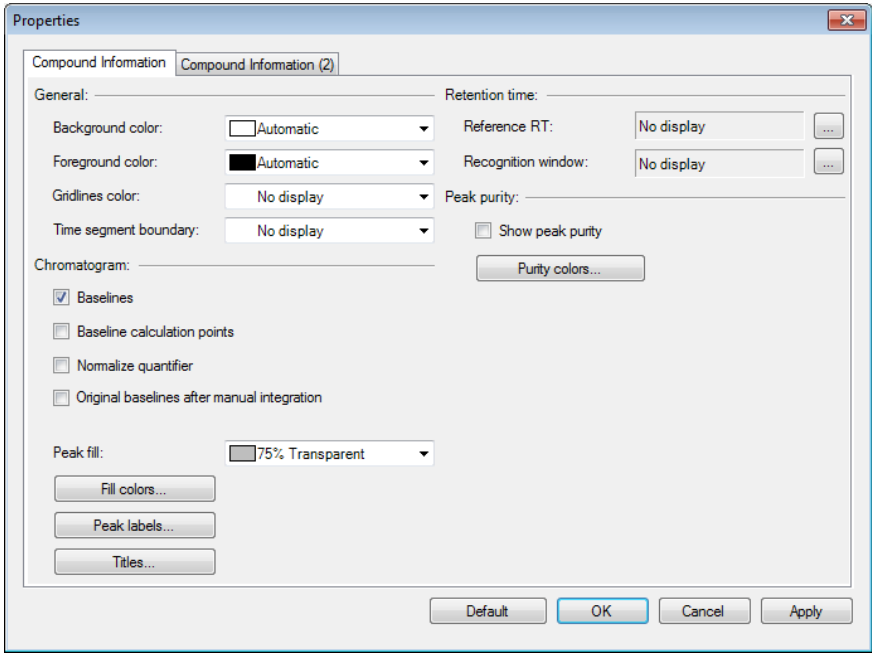
d 单击**确定**以关闭对话框。

任务 4. 配置 “化合物信息”窗口中的设置

本任务说明如何设置**化合物信息**窗口以检查积分结果。假设在前面的任务中设置了缺省设置。

1 右键单击**化合物信息**窗口，然后选择**属性**。

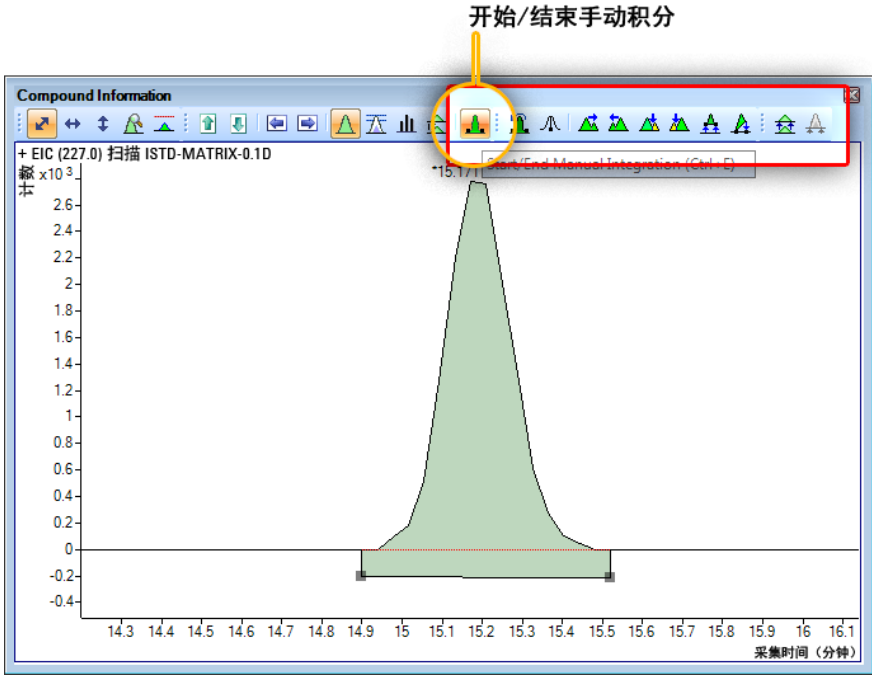
注意，**基线**是选定的缺省参数。该参数可显示 “化合物信息”窗口中峰的基线。



2 选择**手动积分后的原始基线**，然后单击**确定**。

3 在**化合物信息**工具栏中，选择**开始 / 结束手动积分**图标。现在可以看到此图标右侧的图标变为启用状态。将鼠标放在这些图标上方可查看其名称。

4 将基线端点向下拖动一点，注意红色点线。这是上面启用的原始基线的路径。



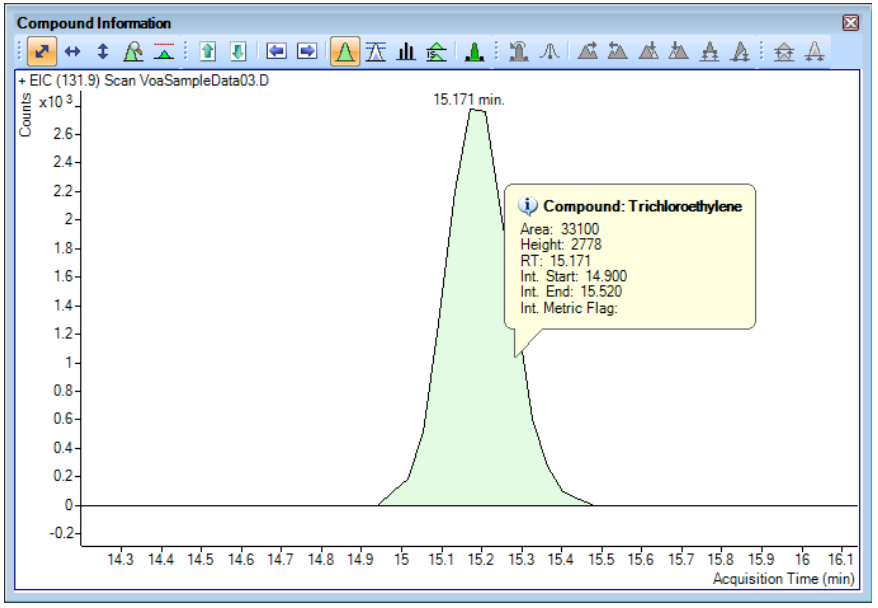
5 单击**清除手动积分**图标。可以看到对端点进行的更改已被删除。

6 单击**零峰**图标。可以看到基线是一个没有面积的单个垂直线，表示有效地删除了峰。此时，红色点线再次显示基线原来所在的位置。

7 单击**清除手动积分**图标和**开始 / 结束手动积分**图标，以恢复原始峰。

8 为色谱图添加标签。

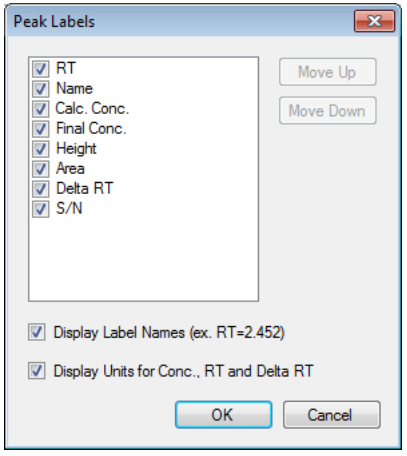
a 将鼠标放在峰上方以显示峰信息，如下图所示。您可能需要永久显示某些或所有信息，如下所述。



b 右键单击**化合物信息**窗口，然后选择**属性**。

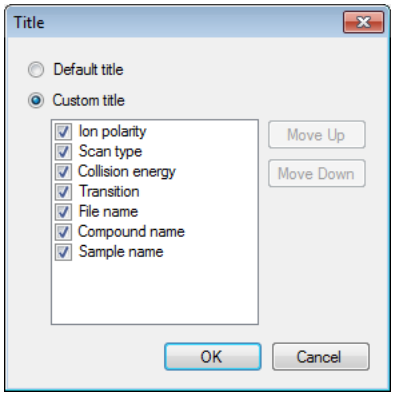
c 在**峰填充**区域中单击**峰标签**。此处选定的标签将显示在峰上方。

d 选择此对话框中的每个标签和选项，然后单击**确定**。

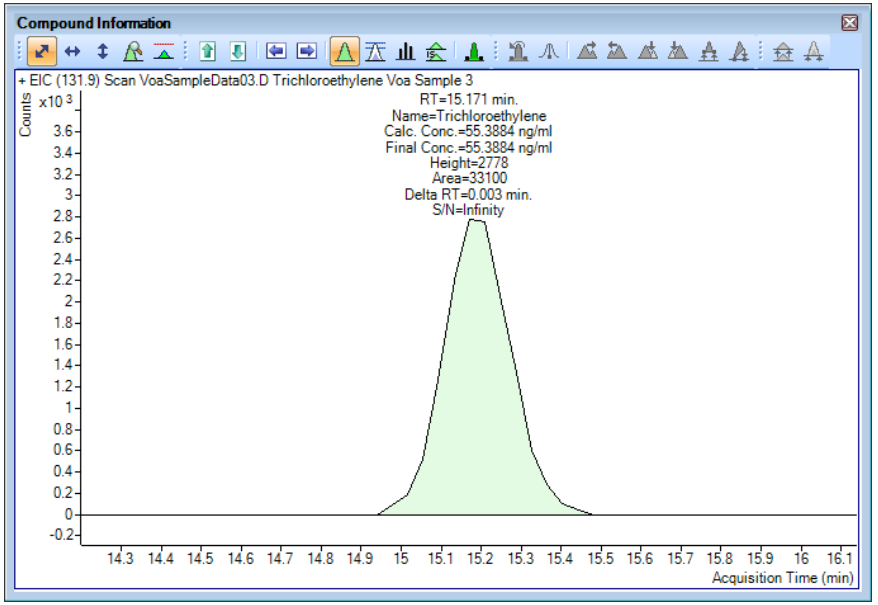


e 在**峰填充**区域中单击**标题**。此处选定的标题将显示在色谱图的右上方。

f 选择**自定义标题**，然后选择此窗口中的每个标签。



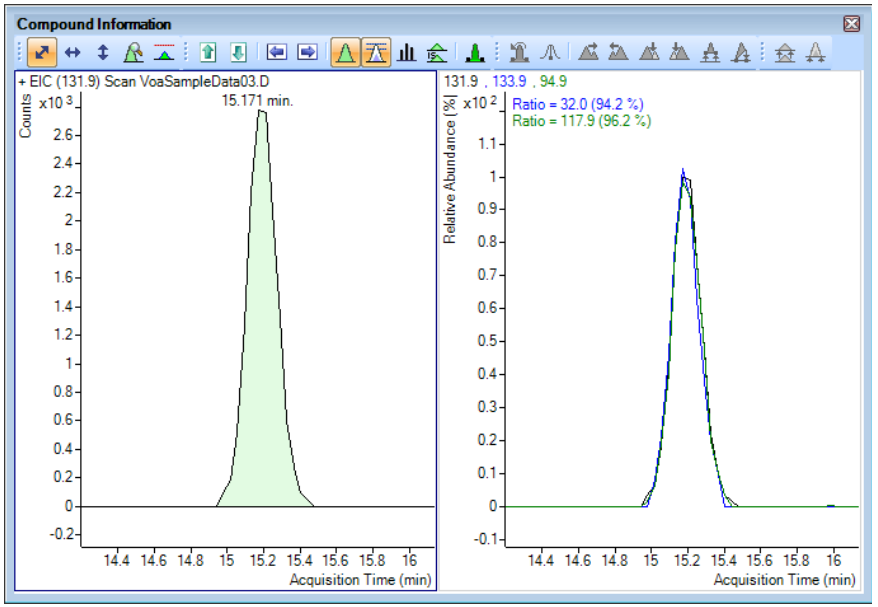
g 单击**确定**，然后单击**应用**。观察已应用的、修改后的标题和新的峰标签。



h 单击**缺省**，将设置恢复到缺省视图，然后单击**确定**。

9 设置定性离子峰的显示。

a 单击**显示 / 隐藏定性离子**，以在目标峰右侧显示定性离子峰。



b 右键单击 “化合物信息”窗口，然后选择**属性**。

c 单击**化合物信息 (2)** 选项卡。在**定性离子**下，清除**归一化定性离子**复选框。

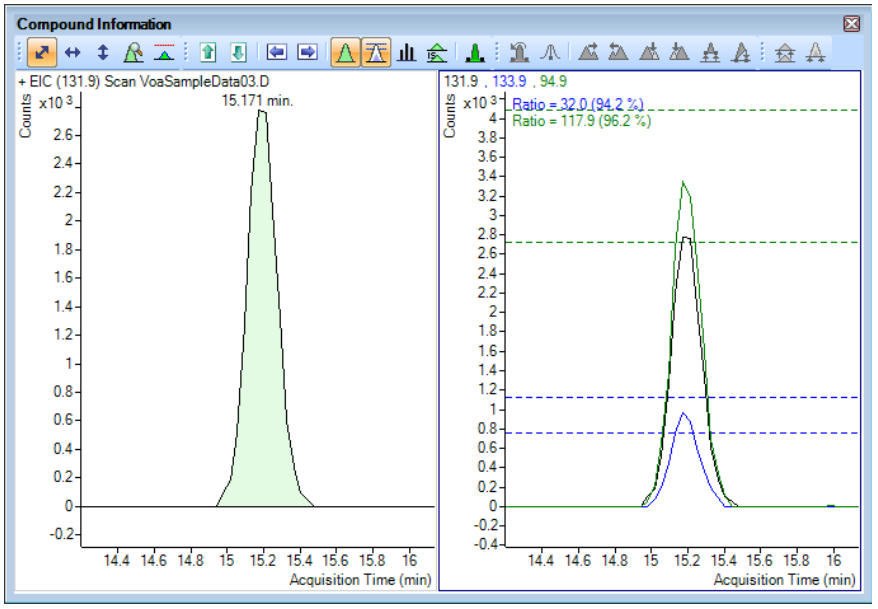
d 单击**应用**并查看两个定性离子峰。蓝色的定性离子峰及其批注位于 133.9 m/z。绿色的定性离子峰及其批注位于 94.9 m/z。要了解如何设置这些颜色，请单击**定性离子颜色**，并按蓝色、绿色和棕色的顺序查看定性离子颜色。

e 单击**取消**关闭此**定性离子颜色**对话框。

f 从**不确定带**下拉列表中选择虚线。

可以看到，绿色定性离子有绿色的不确定带，显示接近居中的预期比率的 96.2%。同样，蓝色定性离子显示接近居中的预期比率的 94.2%。这是比率和预期比率的百分比的缺省响应和比率标签设置。

还应注意，**填充峰**的缺省定性离子设置将填充限值外的定性离子峰。



g 单击**确定**接受**化合物信息**窗口中的这些设置。

任务 5. 将结果导出到 Excel

1 要激活 “批处理表”窗口，请单击 “批处理表”窗口的标题栏。

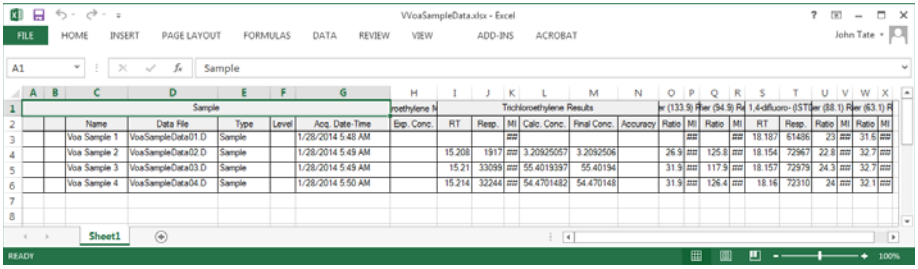
2 单击**文件 > 导出 > 导出表**。

在**批处理表**中右键单击，然后选择**导出表**。

3 选择**文档**作为目标目录，选择 **Excel 文件 (*.xlsx)** 作为 “另存为”类型。

4 输入 **VoaSampleDataBatch** 作为导出文件名。

5 单击**保存**。将打开 Excel 文件。



3 化合物概览

任务 1. 检查化合物概览窗口 66

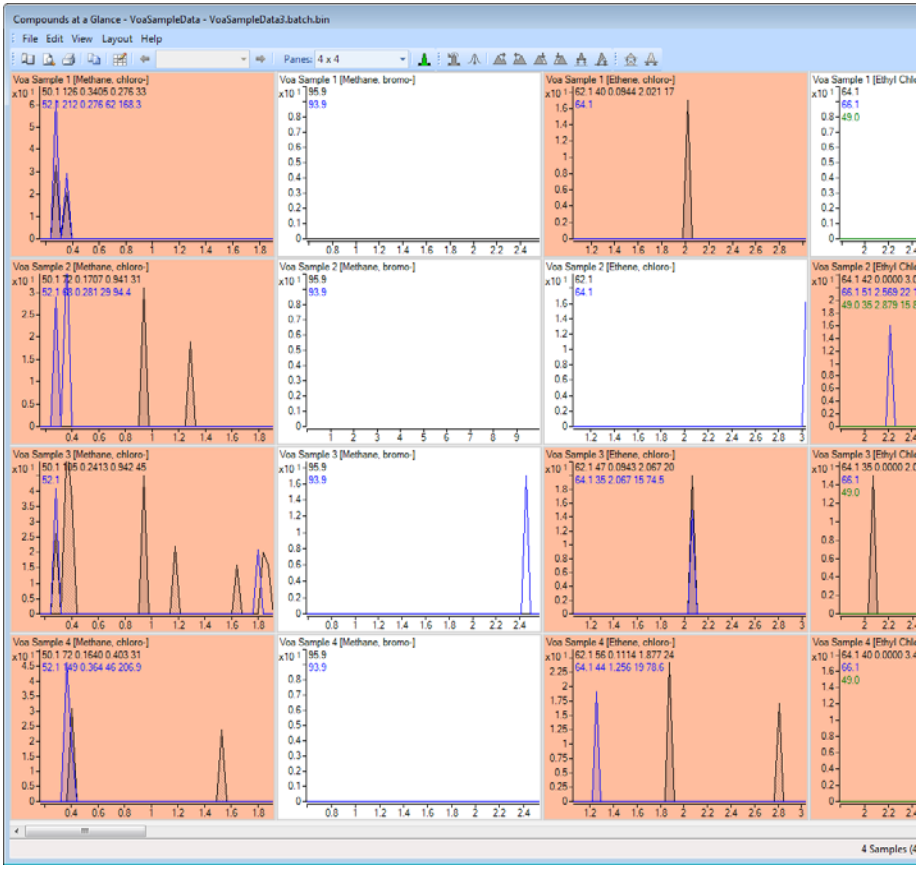
任务 2. 显示 “化合物概览” 窗口的属性 76

任务 1. 检查化合物概览窗口

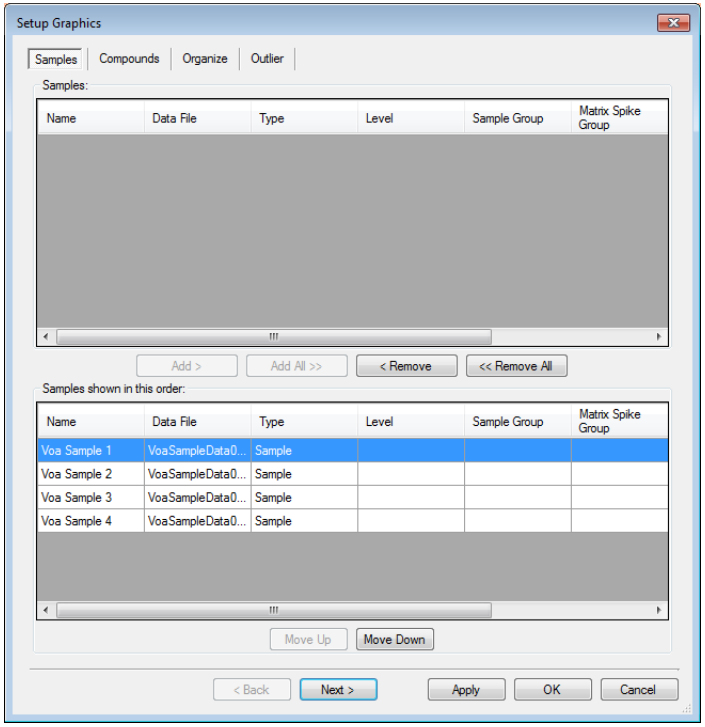
在**化合物概览**窗口中，您可以按化合物名称或样品检查批处理中的所有或选定的化合物色谱图。可以使用定性离子、 ISTD、基质加标、所有化合物或化合物组以及所有样品或样品组来覆盖化合物峰。可以从此窗口手动积分所有化合物。还可以在每个化合物峰上标识配置的离群值结果。

1 选择**文件 > 打开批处理**并调用 **VoaSampleData.batch.bin**。

2 选择**视图 > 化合物概览**。缺省情况下，窗口布局是上次配置的设置。

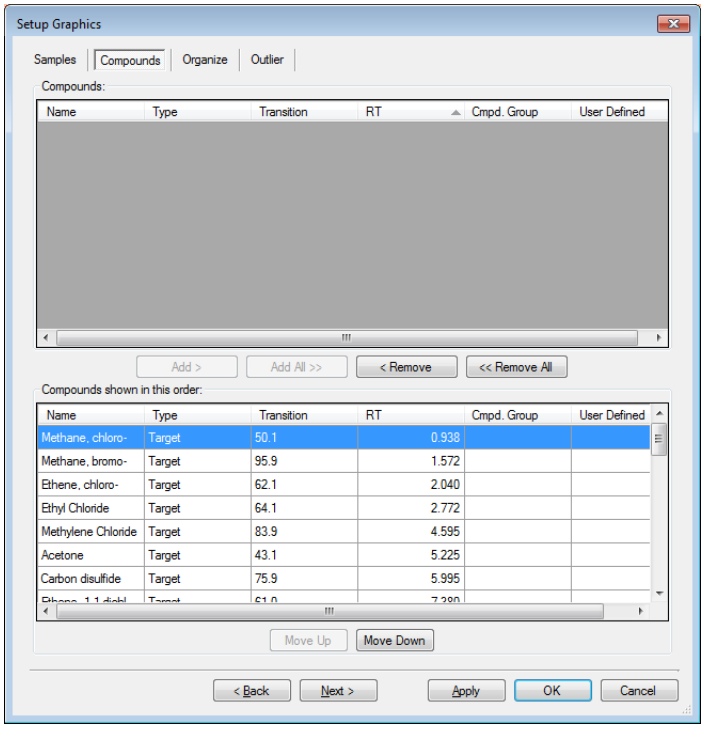


3 单击**设置布局**图标 可显示**设置图形**窗口的**样品**选项卡。



4 排列桌面显示内容，以便 “化合物概览” 窗口和 “设置图形” 窗口都可见。

5 在**设置图形**窗口的下方窗格中，选择要从**化合物概览**窗口中删除的样品，然后单击**删除**。在本示例中，我们将使用所有四个样品，因此不要从下方窗格删除样品。



6 单击**下一步**可显示**化合物**选项卡。

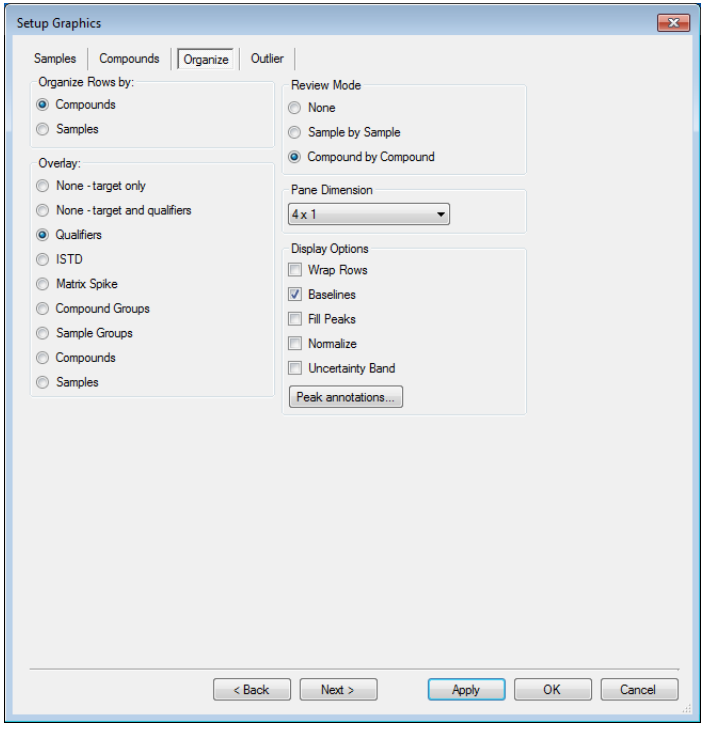
7 在**设置图形**窗口的下方窗格中，选择要从**化合物概览**窗口中删除的化合物，然后单击**删除**。在本示例中，我们将检查所有化合物，因此不要从下方窗格删除化合物。

8 单击**下一步**可显示**组织**选项卡。

9 在**排列方式**区域中，选择**化合物**。单击**应用**可在**化合物概览**窗口中看到所做的更改。

现在，每列都显示一个样品，并且每行都显示在所有四个样品中找到的选定的化合物。

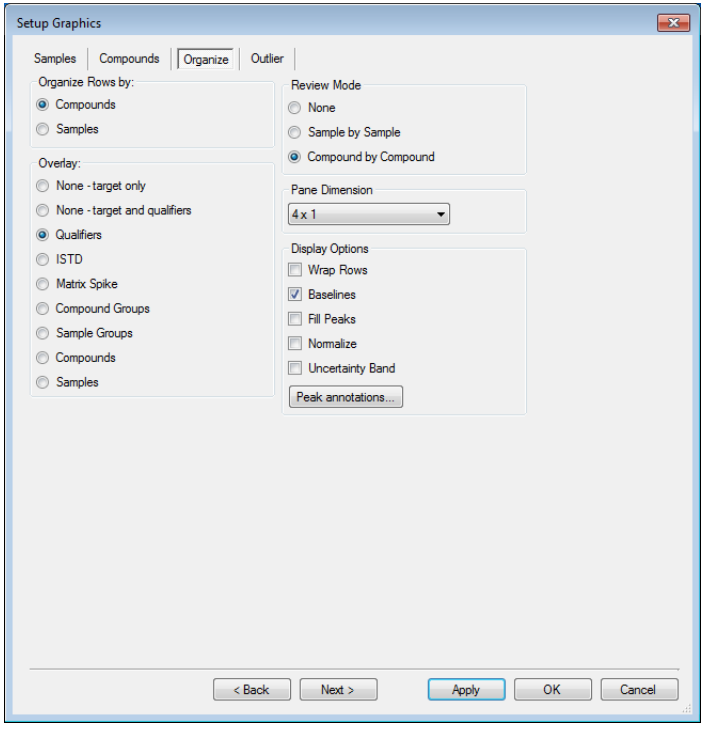
10 在**查看模式**区域中，选择**化合物到化合物**。单击**应用**可在**化合物概览**窗口中看到所做的更改。



化合物概览窗口的工具栏中的查看器模式现在为启用状态。在此查看模式中，由于先前选择了 “按样品排列行”，因此，列中会显示一个命名的化合物，并且，此列中的每一行都会显示所包含样品中的化合物结果。

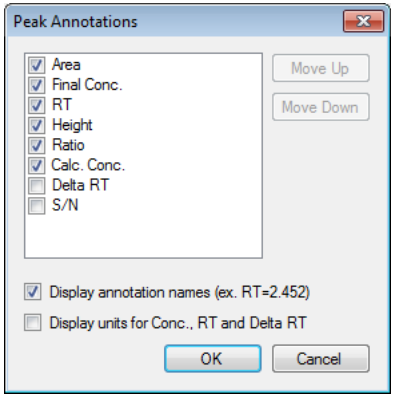
11 在**窗格大小**区域中选择下拉列表，将鼠标悬停在方框上，直到窗格显示 **4X1**。单击**应用**。

窗口现在显示包含单个化合物的所有 4 个样品中选定化合物的结果。



12 在**显示选项**区域中选择**基线**。单击**应用**可在**化合物概览**窗口中看到所做的更改。

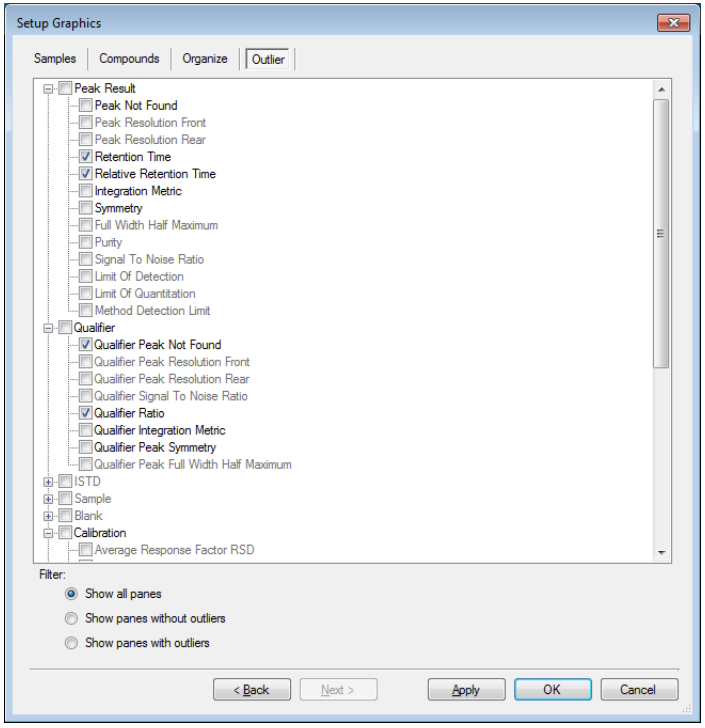
13 在**显示选项**区域中单击**峰注释**。单击**应用**可在**化合物概览**窗口中看到所做的更改。



14 单击**下一步**显示**离群值**选项卡。

15 使选择显示在本示例中：

- **峰结果** - **保留时间**和**相对保留时间**
- **定性离子** - **未找到定性离子峰**和**定性离子比值**
- **校正** - **校正范围**

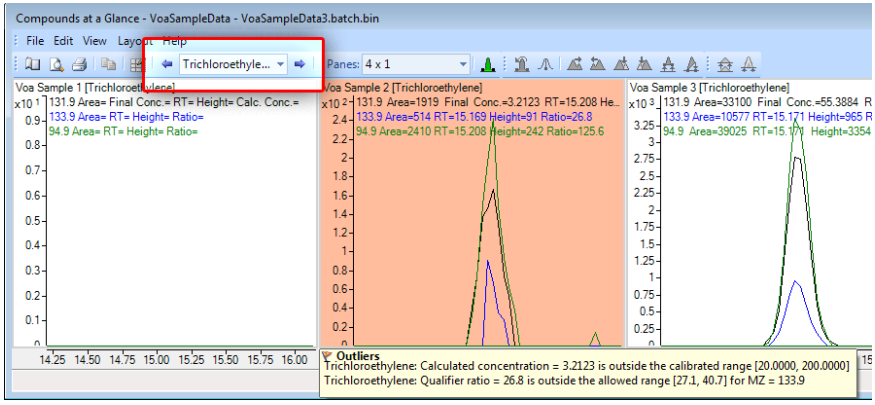


16 单击**确定**可关闭**设置图形**窗口，并注意**化合物概览**窗口中高亮显示的窗格。有关这些设置的详细信息，请参见 “任务 1. 检查离群值”（第 80 页）。

17 在**化合物概览**窗口中，从**检查**下拉列表，选择化合物**三氯乙烯**。

18 将鼠标悬停在**化合物概览**窗口中浅橙色高亮显示的窗格上，以查看分析结果的离群值消息。

我们看到此处计算得到的浓度在校正范围之外，定性离子比也在其允许的范围之外。

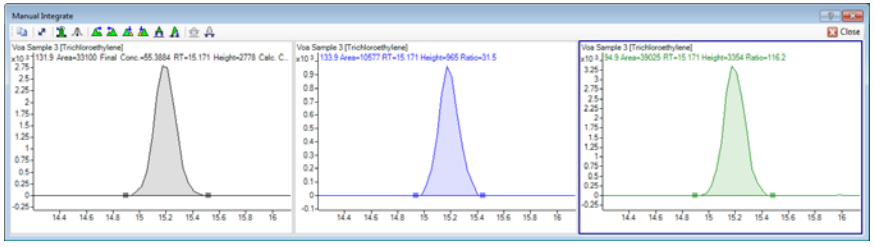


19 查看**链接全部 X 轴**的工作方式。

a 在任意窗格中右键单击，然后选择**链接全部 X 轴**。

b 要查看**链接全部 X 轴**功能的工作方式，请左键单击并拖动 RT 比例，然后观察峰在所有窗格中的移动情况。在一个色谱图中的某个区域上放大，该相同的区域也在其他色谱图中放大。

20 双击 **Voa 样品 3** 的窗格可打开包含三个窗格的**手动积分**窗口。第一个窗格包含目标窗格，其他两个窗格包含其定性离子。



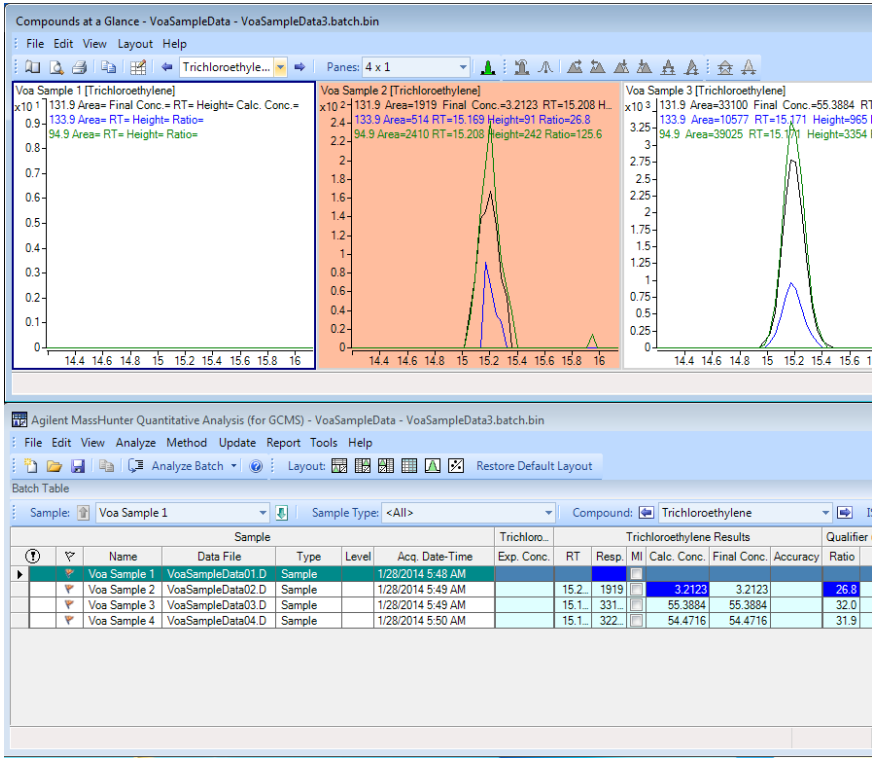
21 关闭**手动积分**窗口，通过在显示当前所检查的化合物名称的**检查**参数上单击**下一个**或**上一个**箭头图标来检查其余的化合物。

22 完成后，可以打印 “化合物概览” 窗口。使用 “页面设置” 设置页面属性。

23 使批处理表中的样品和化合物与“化合物概览”窗口同步。

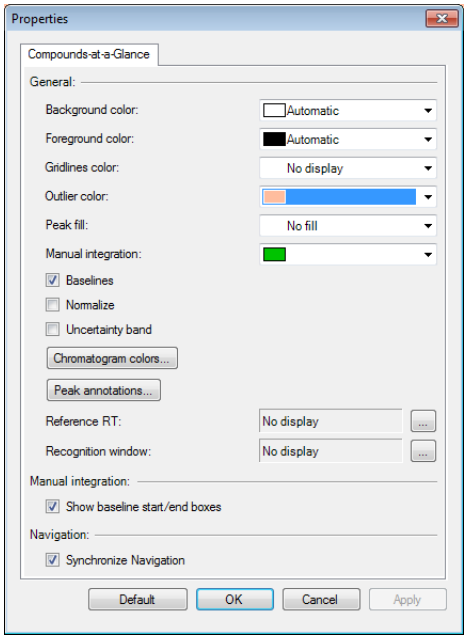
a 使用上面步骤中的**化合物概览**窗口完成此过程。

b 将**化合物概览**窗口和**定量分析**窗口的大小调整为宽度相同，并垂直放置它们，如下图所示。

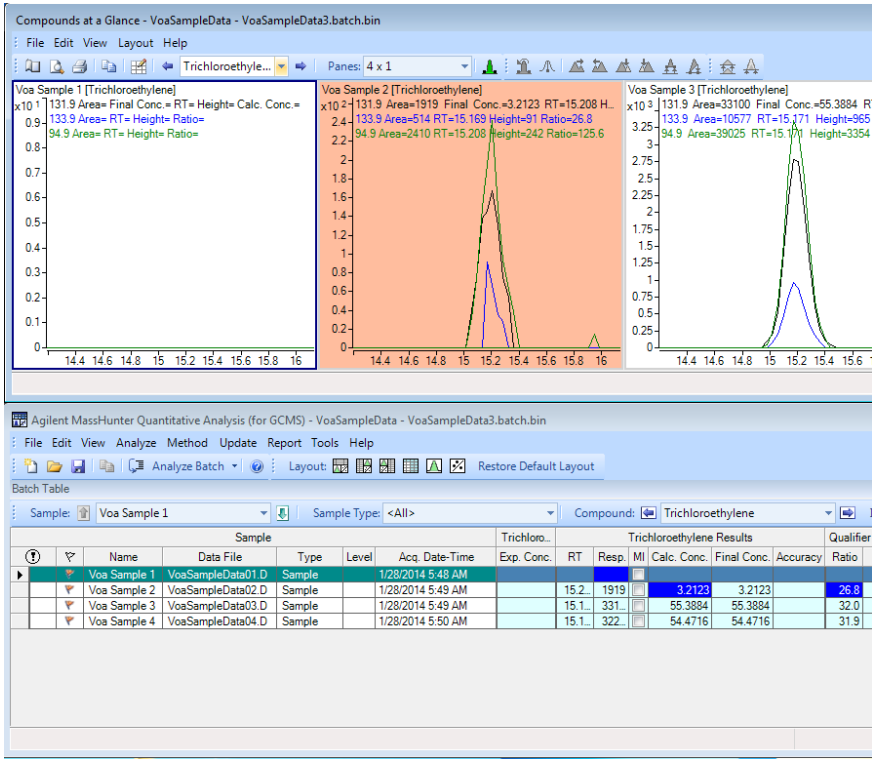


c 右键单击**化合物概览**窗口，然后选择**属性**。

d 在**导航**下，选择**同步导航**，然后单击**确定**关闭对话框。



e 选择**批处理表**中的一个化合物，该相同的化合物将在**化合物概览**窗口中被选定。选择**化合物概览**窗口中的化合物将会改变**批处理**表中的选择。

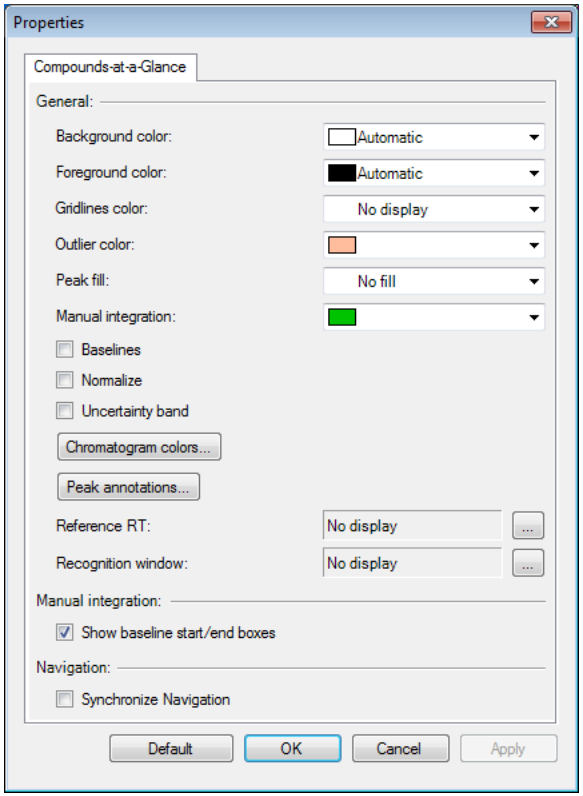


任务 2. 显示 “化合物概览” 窗口的属性

本任务说明如何设置 “化合物概览” 窗口的标签和颜色，以便检查结果。假设在前面的任务中配置了该窗口。

1 右键单击**化合物概览**窗口，然后选择**属性**。

2 单击**缺省**以将属性设置恢复到其缺省值。



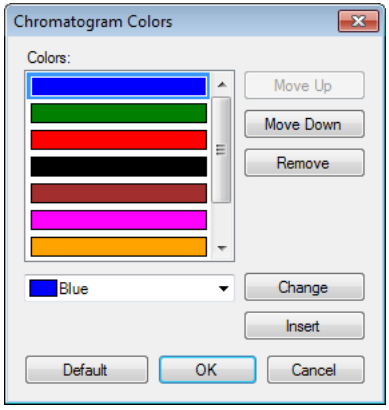
请注意，在**手动积分**下，选中了**显示基线起点 / 终点标记**。只有在启用了手动积分时才会显示该参数。

缺省离群值颜色是浅橙色。如果某个样品的化合物有离群值，则该色谱图有浅橙色背景。

3 在**常规**下，选择**不确定带**。

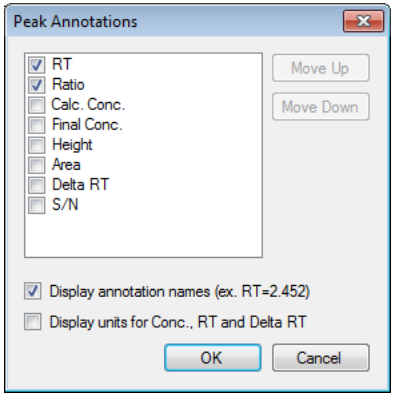
4 单击**色谱图颜色**，观察黑色、蓝色、绿色等的缺省顺序。

5 选定了顶部的黑色后，单击**下移**，使此顺序变为蓝色、绿色、红色，如下图所示。

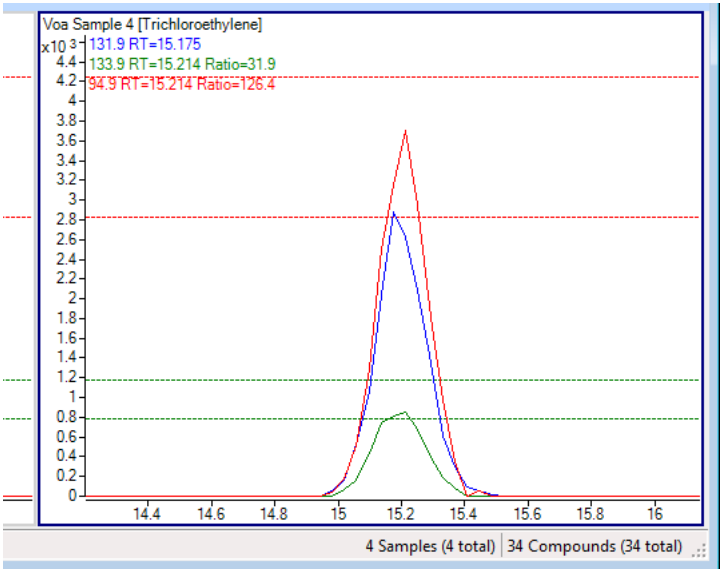


这些设置将目标化合物峰和标签变为蓝色，将第一个定性离子峰、标签和不确定带变为绿色，将第二个定性离子峰、标签和不确定带变为红色。单击**确定**。

6 单击**峰注释**并选择 **RT** 和**比率**，如下所示。单击**确定**。



7 单击**确定**关闭**属性**，并观察对显示进行的编辑效果。



可以观察到目标峰和峰标签为蓝色，如图所示。

绿色定性离子有比率为 31.9 的绿色不确定带，这使其位于带内。

红色定性离子显示比率 126.4，它在带中正好居中。

为 **RT** 和**比率**指定的标签根据峰的颜色进行设置。

4 离群值和定量消息

任务 1. 检查离群值 80

任务 2. 检查定量消息 85

任务 3. 设置离群值 87

在本练习中，您将学习如何使用批处理表离群值指示器和定量消息功能检查批处理的结果。还将检查**化合物概览**窗口的离群值设置。

离群值允许设置表示可接受的结果的参数范围。在这些可接受的参数范围外的结果被称作离群值。 MassHunter 可监测在每个样品的化合物中找到的离群值。它随后以图形方式在表中显示这些按颜色编码的结果。

任务 1. 检查离群值

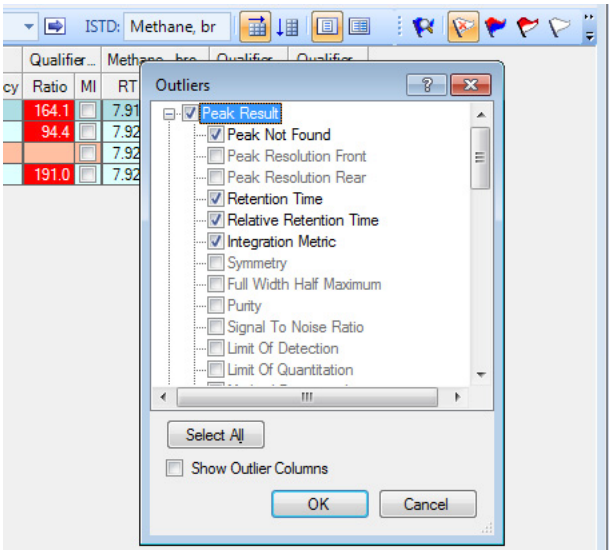
本任务说明批处理表中化合物的离群值的显示方式，以及如何使用离群值标记过滤结果。在此示例中，我们将此过滤器设置为仅显示 MassHunter 缺省设置的离群值。

1 初始化缺省离群值。

a 选择**文件 > 打开批处理**，浏览到 **VoaSampleData** 批处理文件并打开。

b 单击**选择离群值**  以显示**离群值**对话框。在**离群值**对话框中，仅选择**峰结果**、**定性离子**和**校正**组中以粗体显示的缺省离群值。

此处的过滤器设置仅应用于**批处理表**，对**化合物概览**窗口无效。



c 单击**确定**启用缺省离群值的显示。

2 检查批处理表中显示的离群值。

a 单击主窗口工具栏中的**分析批处理**。将查找并显示该批处理的离群值。

在**首页**选项卡上，单击**分析批处理**。

b 如果未选择，可单击**关闭离群值过滤器** ，以显示所有样品。

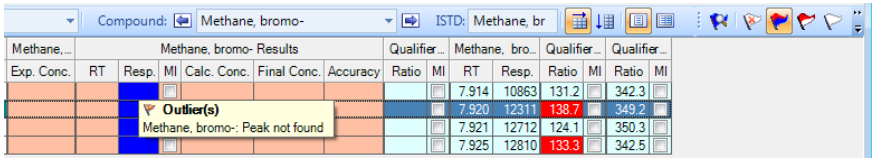
c 选择**批处理表**中的**一氯甲烷**，注意，有用红色和蓝色高亮显示的单元格表示的离群值。

d 单击**显示没有离群值的行**  。将隐藏所有样品，因为一氯甲烷在所有 4 个样品中都有离群值。

e 单击**显示具有高 / 低离群值的行**  ，以再次显示所有 4 个样品。

f 单击**批处理表**工具栏中的**下一个化合物**  ，以检查溴化甲烷的结果。此目标化合物的 “方法和结果”区域中浅橙色阴影表示未找到目标化合物。所有四个样品在目标的**响应**列中都有离群值。

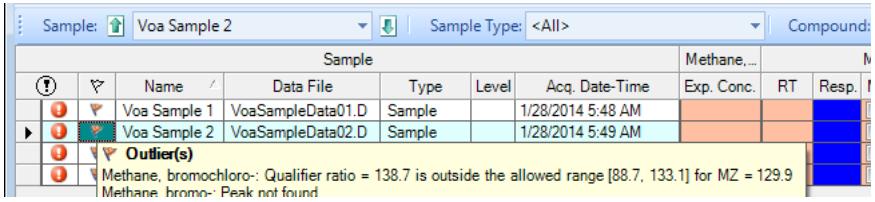
g 将鼠标放在蓝色单元格上可显示离群值消息。



对于为 **Voa 样品 2** 选定的化合物，有多个离群值，在目标**结果**区域中有一个带蓝色阴影的单元格，在第二个定性离子的**比率**列中有一个带红色阴影的单元格。

查看此样品的红色阴影单元格中的离群值消息。该单元格带红色阴影是因为检测到的比率值 138.7 大于此范围中允许的最大值 133.1。如果其值低于此范围中允许的最小值 88.7，则单元格带蓝色阴影。

h 将鼠标放在**离群值摘要**图标 （红色实心旗子）上可显示离群值消息。注意，在前面的步骤中，有两个离群值在两个不同的单元格中。它们的摘要如下。



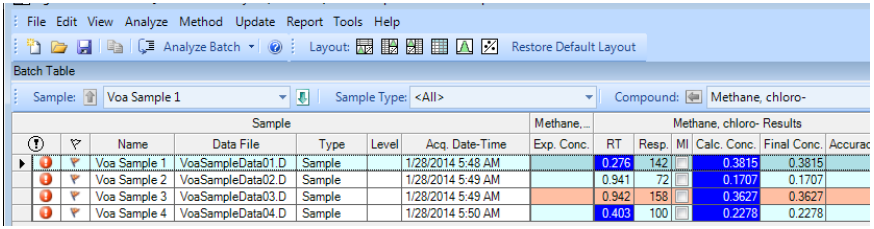
3 单击**选择离群值**  。

4 在**峰结果**下，清除**未找到峰**复选框。

批处理表现在仅包含两个样品，**未找到峰**不再是离群值。这是因为离群值过滤器设置为仅显示具有当前化合物的离群值的样品。这些离群值没有用处，因为定性离子与目标比不能在没有目标化合物的情况下存在。

5 单击**关闭离群值过滤器**  ，以显示所有样品。

6 重复单击**批处理表**工具栏中的**下一个化合物**  ，以检查所有四个样品中每个校正化合物的结果。



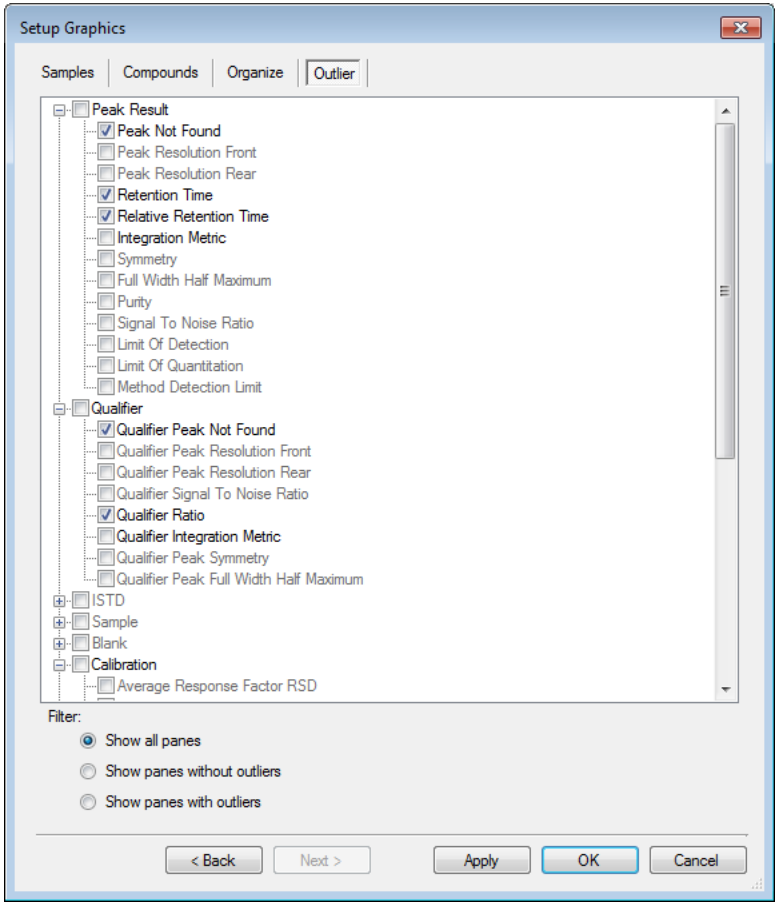
7 设置**化合物概览**窗口中的离群值显示。

a 在主窗口中，选择**视图 > 化合物概览**。

b 选择**布局 > 设置布局**。

在**首页**表上，单击**设置布局**。

c 单击**离群值**选项卡以显示用于调整离群值设置的**设置图形对话框**选项卡。**化合物概览**窗口中显示的离群值是在**设置图形**对话框**离群值**选项卡中设置的。

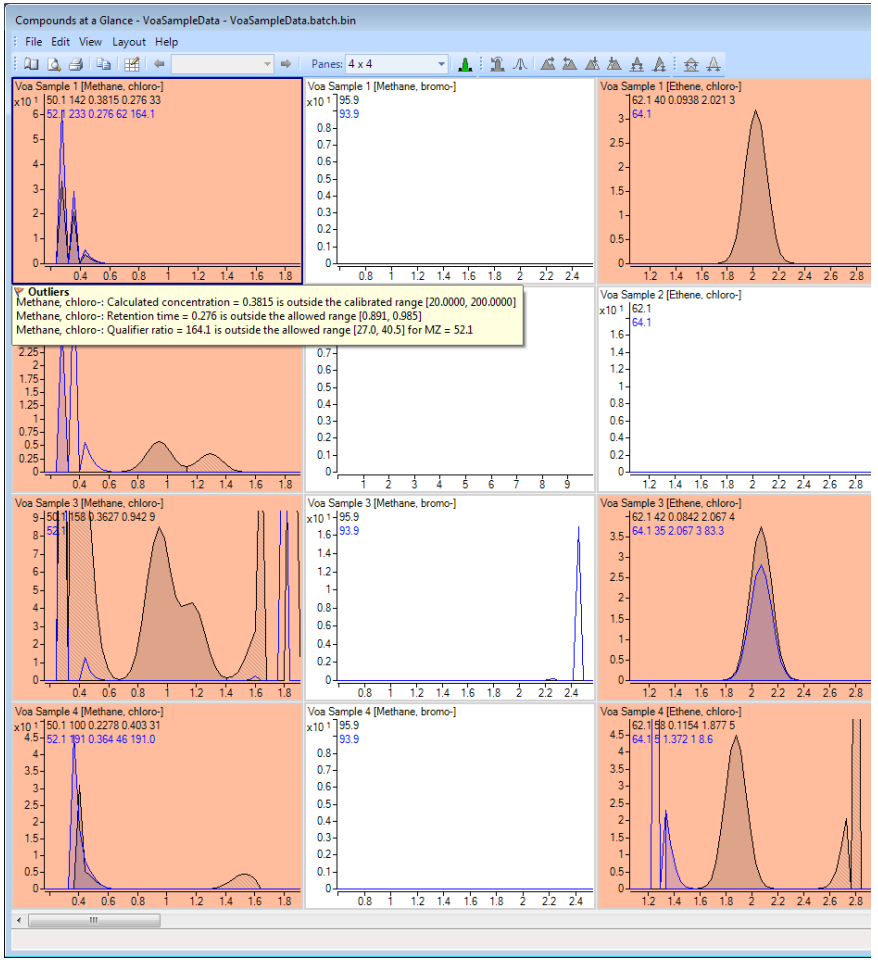


d 和以前对**批处理表**离群值设置进行的操作一样，选择以粗体表示的缺省设置，但清除**未找到峰**复选框。另外，清除**积分规格**和**定性离子积分规格**复选框，因为它们对**常规**积分器不起作用。

e 在**过滤器**下，选择**显示所有窗格**。

f 单击**确定**将这些设置应用于视图。浅橙色的色谱图表示具有离群值的样品中的化合物。

g 将鼠标悬停在色谱图上可显示该样品的化合物的**离群值摘要**。

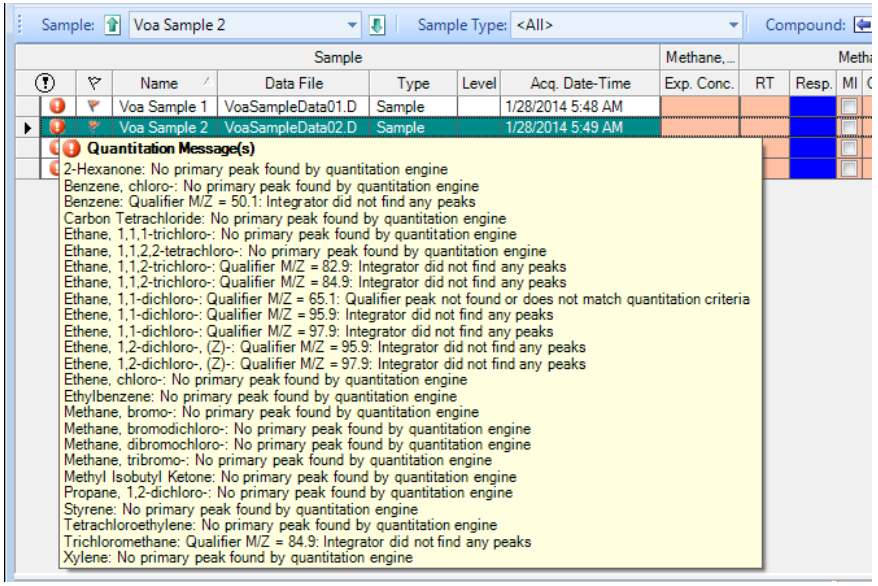


任务 2. 检查定量消息

定量消息是信息性消息，不一定会识别可接受的值条件范围内的离群值。定量消息的一个有效示例是未找到在未知样品的定量方法中定义的峰。我们将了解如何隐藏未找到峰消息。

1 查看**批处理表**中单个样品的定量消息。

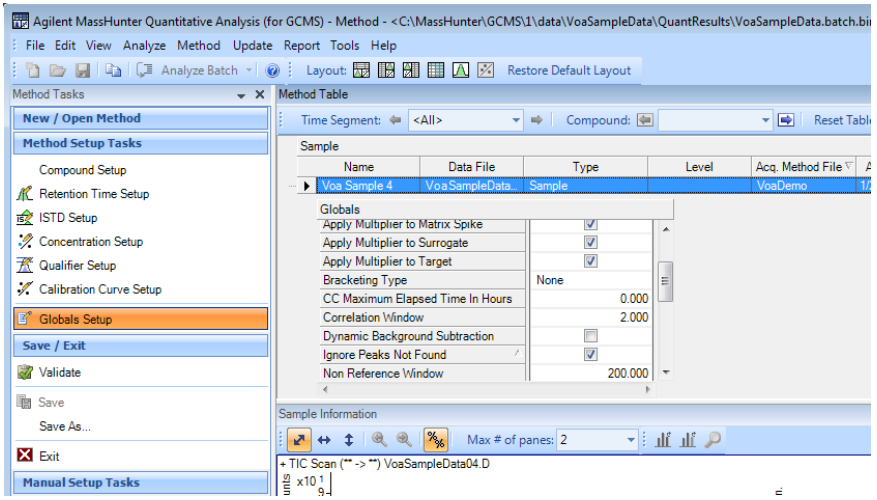
对于 **Voa 样品 2**，将鼠标悬停在**定量消息摘要**图标 （红色实心圆里有一个感叹号）上可显示**定量消息**。我们示例中的消息都是由于在样品中未找到校正化合物而生成的。



2 隐藏**批处理表**中与缺少峰相关的定量消息。

a 选择**方法 > 编辑**。

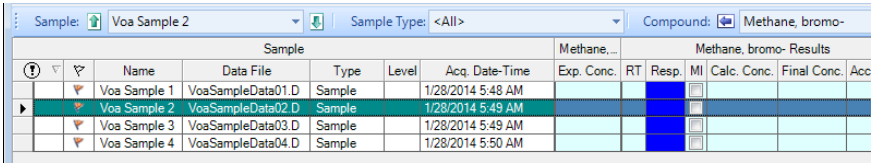
b 选择**方法任务**区域中的**全局设置**，然后选择**方法表**中的**忽略未找到的峰**。



c 选择**方法 > 退出**。这将显示**应用方法**对话框。

d 选择**分析**并单击**是**。这将使用修改后的方法设置运行分析。

e 注意，缺少了**定量消息摘要**图标。将此消息与 **Voa 样品 2** 的**定量消息摘要**图标中将**忽略未找到的峰**添加到方法之前的消息进行比较。



f 将方法保存为 **VoaSampleData2.batch.bin**。

任务 3. 设置离群值

本练习中前面的任务讨论了使用 MassHunter 缺省离群值设置来设置离群值视图。本任务将说明可以编辑的缺省离群值设置，并检查非缺省离群值的设置。

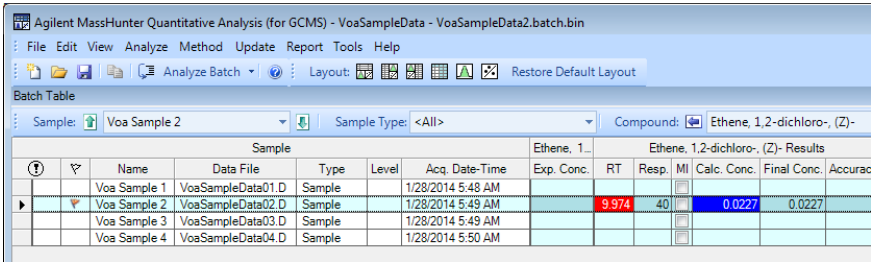
1 选择**文件 > 打开批处理**，然后调用 **VoaSampleData2.batch.bin** 文件。

2 编辑 RT 离群值的可接受范围。

a 从**批处理表**工具栏中的**化合物**下拉列表中选择**乙烯， 1,2- 二氯**。

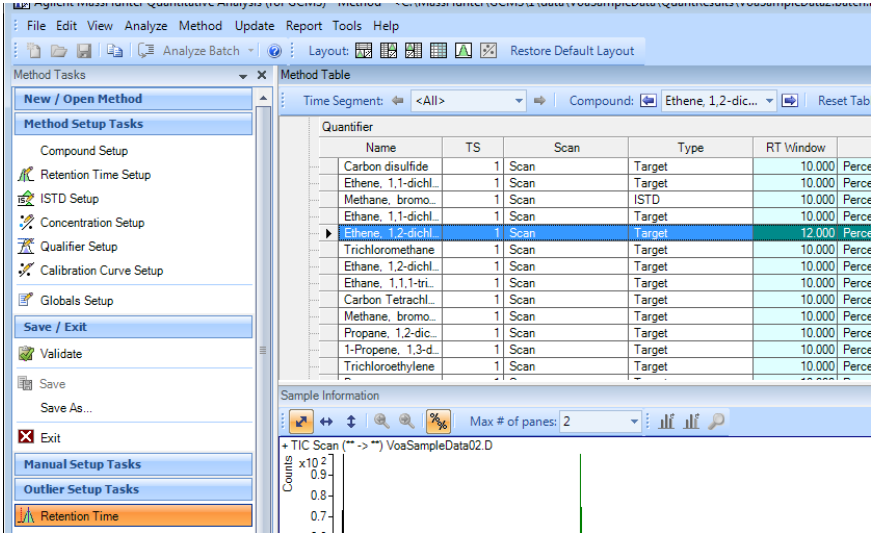
b 选择表中的 **Voa 样品 2** 样品。

注意选定样品的化合物的红色阴影 RT 单元格。



c 单击**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。

d 在**方法任务**窗口中，单击**离群值设置任务 > 保留时间**。在**定量离子**表中，注意，选定的化合物是在**批处理**表中选定的同一化合物。

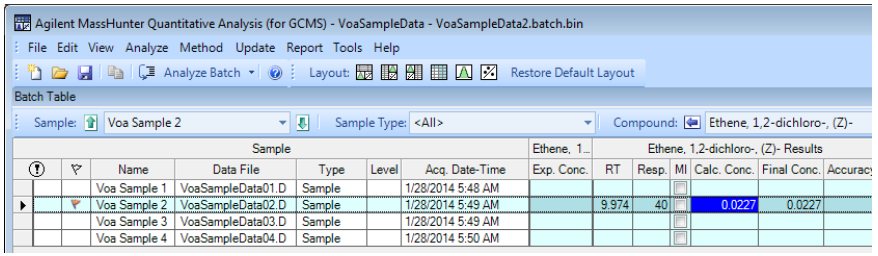


e 将 **RT 窗口**值设置为 **12**。

f 选择**方法 > 退出**。

g 选择**分析**并单击**是**。这将使用修改后的方法运行分析，该方法增大了保留时间的可接受范围。您将返回到**批处理表**。

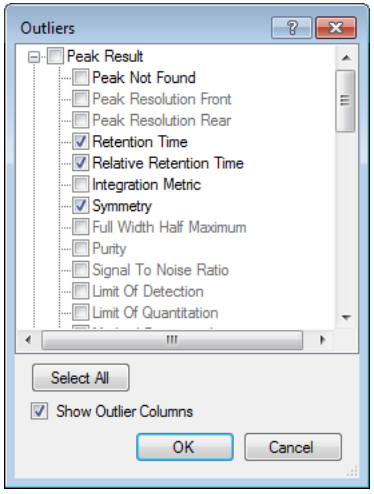
由红色阴影 **RT** 单元格表示的离群值现在消失了。这表示对可接受的 RT 范围进行的更改现在包括此结果。



3 允许在批处理表中显示新的离群值。

a 单击**选择离群值**  以显示**离群值**对话框。

b 在**峰结果**组中，选择**对称因子**离群值。



c 选择**显示离群值列**以将**对称因子**列添加到**批处理表**中目标化合物结果区域。

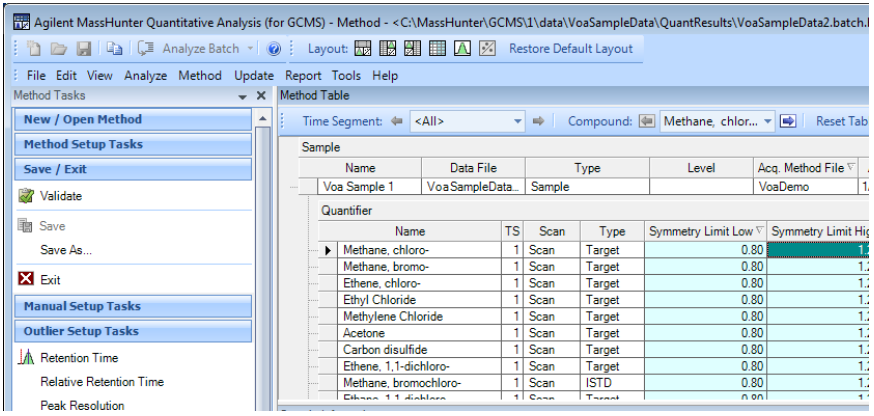
d 单击**确定**启用**对称因子**离群值的显示。

e 如果未选择，可单击**关闭离群值过滤器** ，以显示所有样品。

4 在方法中设置新离群值。

a 选择**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。

b 在**方法任务**窗口中，单击**离群值设置任务 > 峰对称因子**。

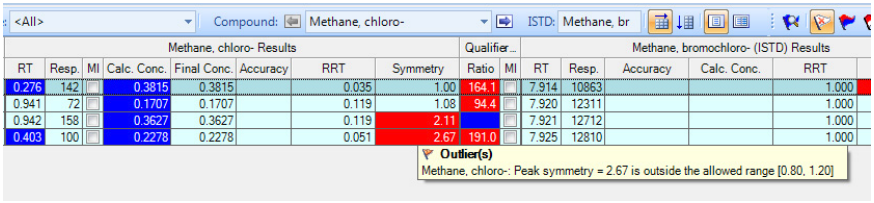


c 将**对称因子下限**值设置为 **0.80**。

d 将**对称因子上限**值设置为 **1.20**。

e 选择**方法 > 退出**。这将显示**应用方法**对话框。

f 选择**分析**并单击**是**。这将使用修改后的方法运行分析，并将**对称因子**离群值添加到该方法。



新对称因子离群值将检测两个样品中的一氯甲基化合物的峰拖尾，在“对称因子”列中以红色阴影单元格指示。

5 生成定量报告

任务 1. 开发报告方法 91

任务 2. 生成报告 96

此练习将帮助您学习如何执行下列任务：

- 使用一个或多个报告模板生成报告方法
- 生成报告

在本练习中将使用 **VoaSamples** 批处理。

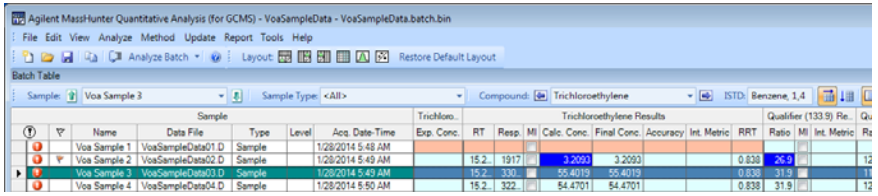
您开发的报告方法可确定您在 MassHunter 中创建的报告。报告方法是使用为满足您的报告要求而组合和编辑的一个或多个报告模板制作而成的。在开发报告方法时，您可以使用 Excel 或 PDF 模板。PDF 模板的生成报告的速度比 Excel 模板快 20 倍。此外，此类模板具有更多用于提高可扩展性和性能的选项。

任务 1. 开发报告方法

在此练习中，您将使用 PDF 模板开发报告方法。

1 要启动**定量分析**程序，请单击桌面上的 **MS 定量分析**图标。也可以通过单击 **Windows 开始 > 所有程序 > Agilent > MassHunter Workstation > MS 定量分析**来访问此程序。

如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**。在**首页**选项卡上，单击**恢复缺省布局**。



2 单击工具栏上的**打开批处理**  。

在**首页**选项卡上，单击**打开**。

3 浏览到包含 **VoaSamples** 批处理的目录。

4 在打开**批处理表**时，单击工具栏上的**分析批处理**以生成结果。

在**首页**选项卡上，单击**分析批处理**。

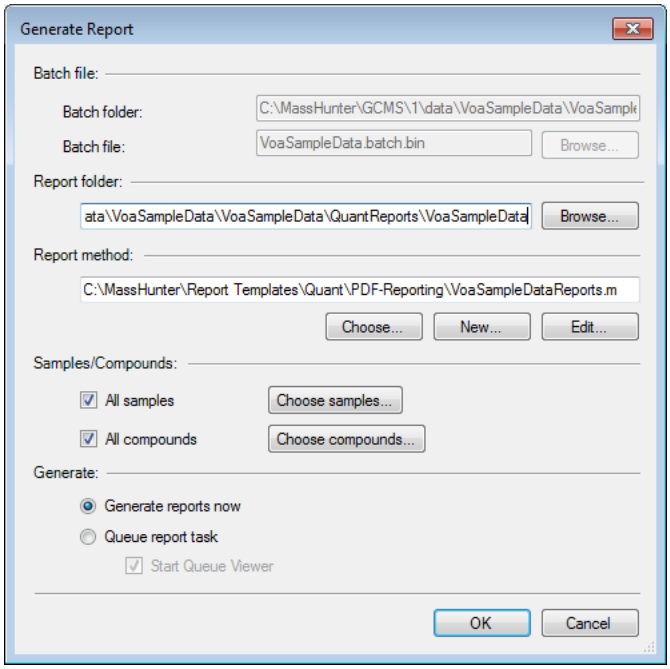
如果已对批处理进行了定量，则跳至步骤 5。

5 单击**文件 > 保存批处理**保存此批处理。定量报告中包含批处理期间生成的样品信息。在定量并保存样品结果之后，报告功能才起作用。

6 创建 PDF 报告方法。

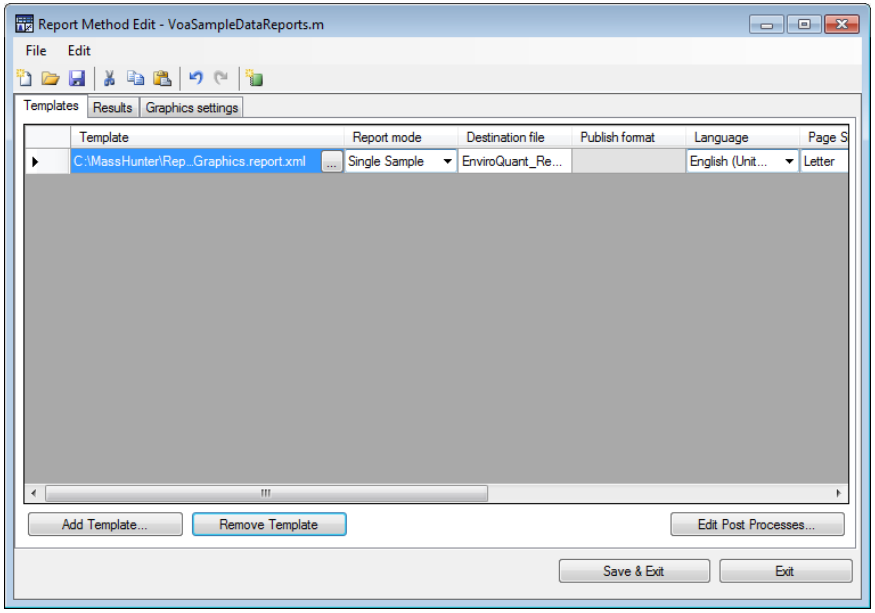
a 选择**报告 > 生成**。

在**首页**选项卡上，单击**生成报告**。



b 接受此报告的缺省**报告文件夹**目录。

c 在**报告方法**字段下，单击**新建**以创建新的报告方法。



d 单击**报告方法编辑**对话框中的**添加模板**打开浏览器。

e 浏览至 **MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting** 目录，选择模板，然后单击**打开**。程序将该模板添加到**报告方法编辑**对话框中的**模板**字段中。

f 重复步骤 **d** 和 **e** 以添加第二个模板。

您可以在**报告文件夹**字段中更改用于保存此报告的目标目录。

此软件的 “报告方法编辑” 功能可让您将现有模板组合到一个报告方法中，以便开发 Excel 或 PDF 报告，或这两种报告。

缺省情况下，软件将采用上次生成的报告所用的最后一个报告方法。如果适用，您可以使用缺省方法，或选择其他现有方法，而不是生成新的报告方法。

要选择现有报告方法，请单击**报告方法**字段下的**选择**，然后导航至相应文件夹选择您的方法。

7 编辑报告方法以创建单样品和批处理 PDF 报告。

报告方法编辑对话框可让您编辑您选择要包含在报告方法中的模板的某些特定功能。

您可通过 PDF 报告选项创建英文、中文、日文或俄文报告。 Excel 报告仅提供英文版本，因此，此选项将呈灰色显示。

在 Excel 报告中，对页面大小有一定的限制。 PDF 报告提供了一个选项。

您也可以选择您的**发布格式**。在 PDF 报告中，只有一种发布格式，因此，在此示例中，此字段呈灰色显示。

a 在**报告方法编辑**对话框中，在第一个模板线上的**报告模式**列中，从下拉列表中选择**单个样品**。

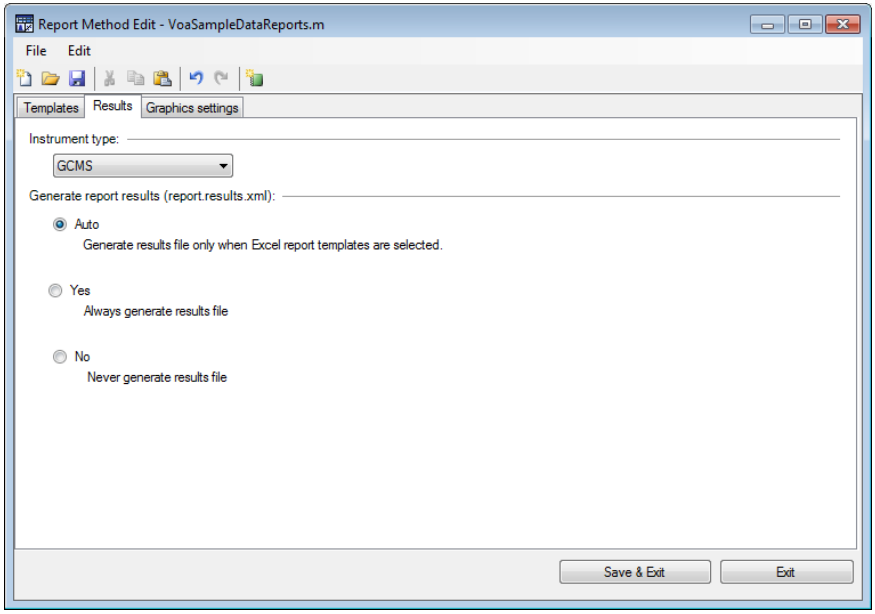
b 在第二个模板线上，从**报告模式**列的下拉列表中选择**批处理**。

c 在**语言**列中，从下拉列表中选择语言。

d 在**页面大小**字段中，从下拉列表中选择页面大小。

8 选择系统处理报告结果的方式。

a 在**结果**选项卡上，从**仪器类型**下拉列表中选择 **GCMS**。

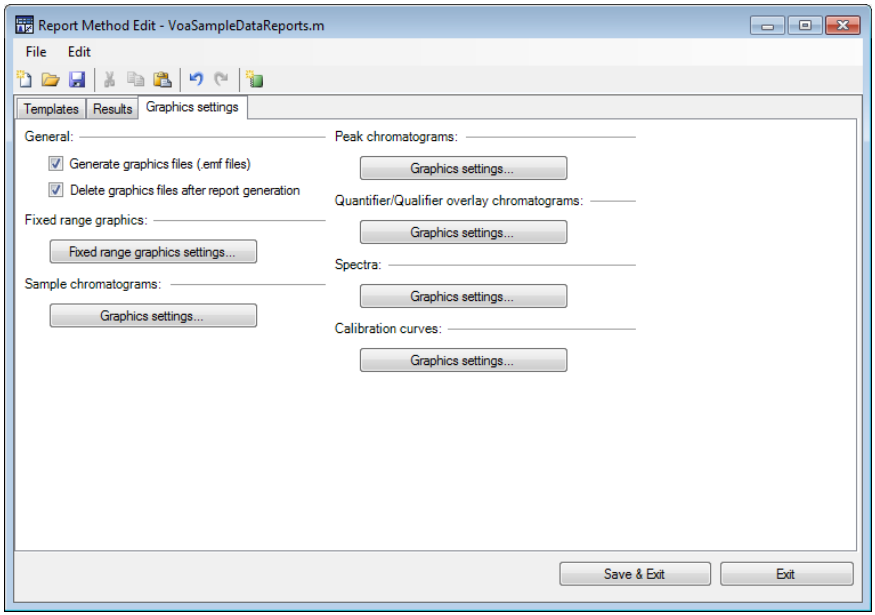


b 在**生成报告结果**下，选择**自动**。

在大多数情况下使用**自动**。对于仅选择了 Excel 报告的情况，这将限制 Excel 文件报告的生成。在没必要生成 Excel 文件时， PDF 报告便捷高效。

9 为此方法选择图形设置选项。

a 在**图形设置**选项卡上，选择**生成图形文件**以将图形添加到报告。



b 对于剩余的图形设置字段，保留缺省设置。

通过编辑**定量 / 定性离子叠加色谱图**、**质谱**、**样品色谱图**、**校正曲线**和**固定范围图形**设置，**图形设置**选项卡可让您指定报告中图形的显示外观。如果您不更改这些设置，此软件将提供适合您的数据的缺省设置。

10 单击**报告方法编辑**窗口中的**保存** 。

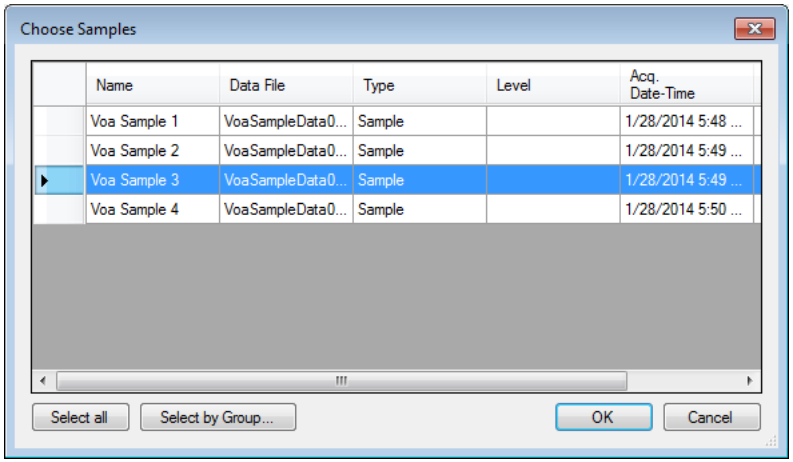
11 将报告方法命名为 **VoaSamples.m**。

12 单击**保存并退出**关闭**报告方法编辑**对话框，并返回到**生成报告**对话框。

任务 2. 生成报告

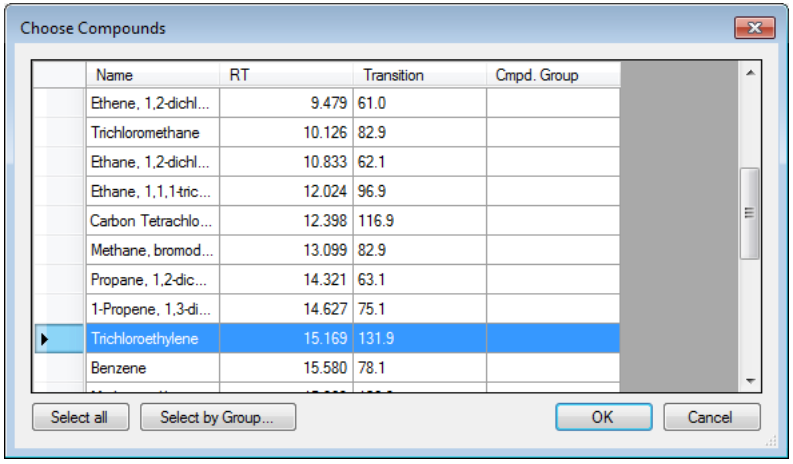
1 验证您刚创建的方法是否出现在**报告方法**字段中。

2 在**样品 / 化合物**字段中，单击**选择样品**以打开**选择样品**对话框。

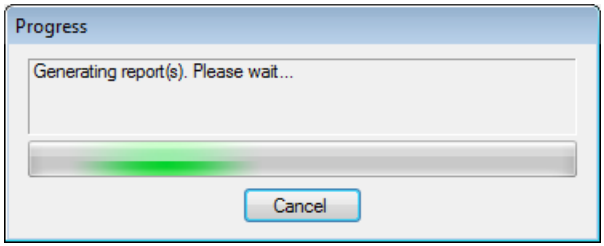


3 选择要包括在报告中的样品，然后单击**确定**。

4 单击**所有化合物**，选择要包括在报告中的化合物，然后单击**确定**。



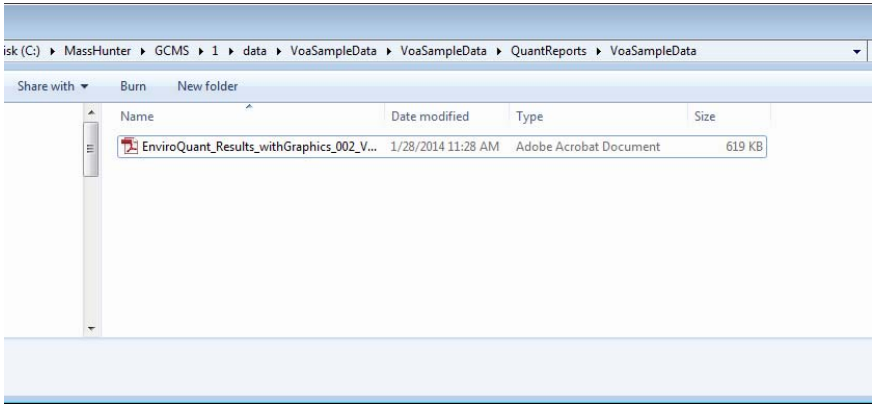
5 选择**立即生成报告**，然后单击**确定**以生成报告。



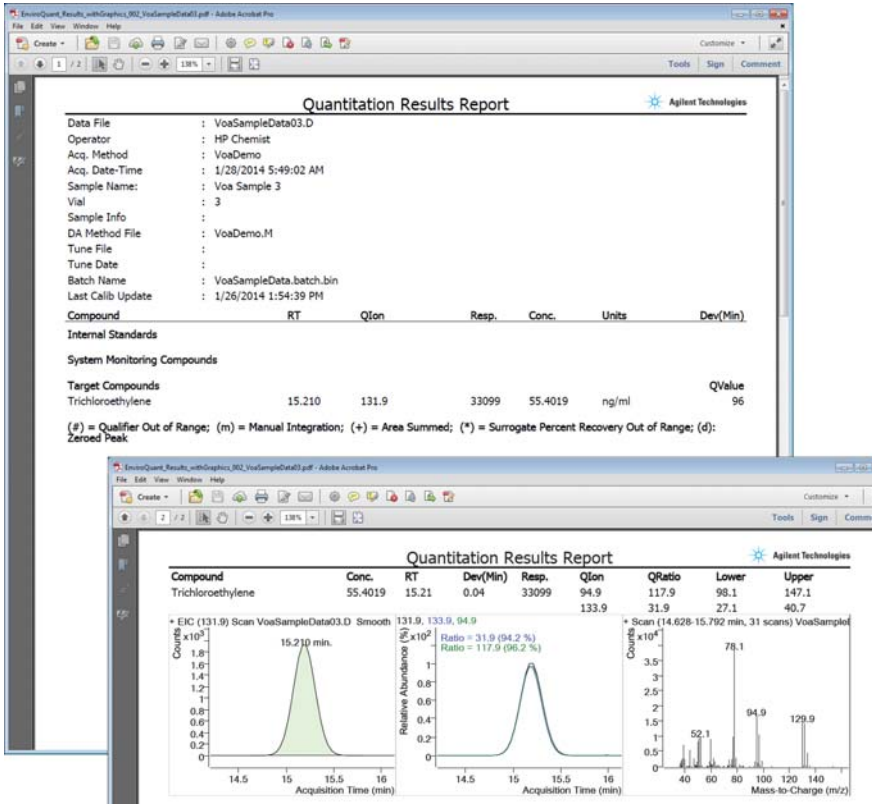
您可以选择显示所有样品和批处理中的所有化合物，或选择批处理表中的特定样品或化合物，以在报告中显示。

PDF 报告将快速生成，因此，**立即生成报告**是立即获取报告的最佳选项。如果您要生成 Excel 文件以及报告，您可以选择**队列报告任务**以查看将要生成的报告的进度。

可通过选择**报告 > 打开报告文件夹**来访问生成的所有报告。可以从您创建的 Excel 或 PDF 文件查看或打印报告。



6 双击文件以打开和显示报告。或者，可通过在 Windows 资源管理器中选择文件来打开此报告。



www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2018

2018 年 8 月

G7077-97026

Agilent