

Agilent MassHunter Workstation – 未知物分析

熟悉指南

内容提要 ...	3
开始进行这些练习之前	4
任务 1: 通过 TIC 分析识别化合物	5
任务 2: 通过解卷积识别化合物	17
任务 3: 生成报告	44

通过 TIC 分析
识别化合物

通过解卷积
识别化合物

生成报告



Agilent Technologies

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2017

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

手册部件号

G3335-97243

版本

2017 年 9 月

美国印刷

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

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

如果在履行美国政府某项重要合同或转包合同时要用此软件，将以以下方式提供并授权软件：DFAR 252.227-7014（1995 年 6 月）定义的“商业计算机软件”；FAR 2.101 (a) 定义的“商业项目”；FAR 52.227-19（1987 年 6 月）或任何同等机构规定或合同条款定义的“受限计算机软件”。使用、复制或披露软件受 Agilent Technologies 标准商业许可条款制约，美国政府的非 DOD 部门和机构所获得的权利不得超过 FAR 52.227-19(c)(1-2)（1987 年 6 月）中规定的受限权利。美国政府用户拥有的权利不得超出 FAR 52.227-14（1987 年 6 月）或 DFAR 252.227-7015 (b)(2)（1995 年 11 月）中定义的“受限权利”的范围（适用于所有技术数据）。

安全声明

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，可能会导致产品损坏或重要数据丢失。除非您已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视小心提示而继续进行操作。

警告

“警告”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。除非您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 ...

选择未知物分析 桌面图标

本指南提供分步练习，可帮助您了解如何使用未知物分析程序。您可以利用系统安装光盘附随的演示分析、方法和谱库文件或您采集的数据来完成这些练习。

定量分析 B.09.00 为**经典**用户界面和 **Quant-My-Way** 用户界面提供未知物分析桌面图标。**经典**用户界面的外观类似于定量分析 B.08.00 中提供的用户界面，工具和选项都位于一个菜单栏中。**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，并以橙色突出显示这些步骤



Unknowns
Analysis



Unknowns
Analysis
(Quant-My-
Way)

开始进行这些练习之前

将文件从安装介质复制到您的硬盘中

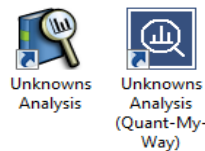
1. 浏览到安装介质上的 \Data 文件夹。
2. 如果此文件夹是压缩格式，请从其 zip 格式解压缩数据文件。
3. 将安装介质上未压缩格式的 **Data** 文件夹复制到您硬盘上的任意位置。

该文件夹包含做这些练习所需的所有数据、方法和谱库文件。请勿重复使用系统上已有的示例数据文件，除非您知道这些文件与介质上的原始文件相同。如果系统上已有的示例数据文件与介质上的原始文件不完全一致，那么在进行这些练习的过程中获得的结果将与本指南中显示的结果不一致。

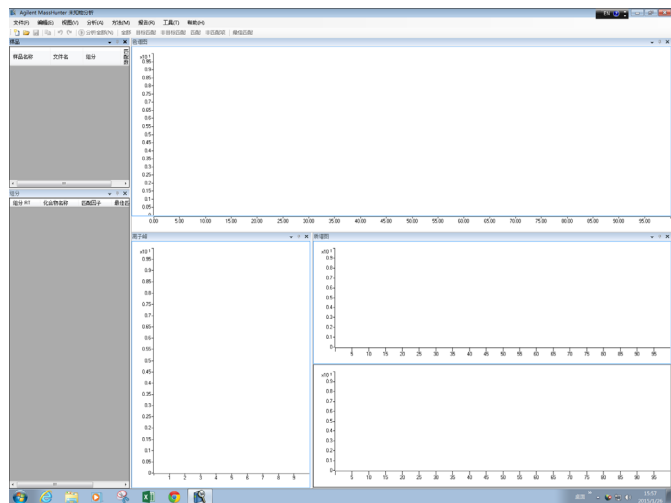
任务 1：通过 TIC 分析识别化合物

创建新分析

1. 双击桌面图标启动未知物分析，或单击开始 > Agilent > MassHunter Workstation > 未知物分析。

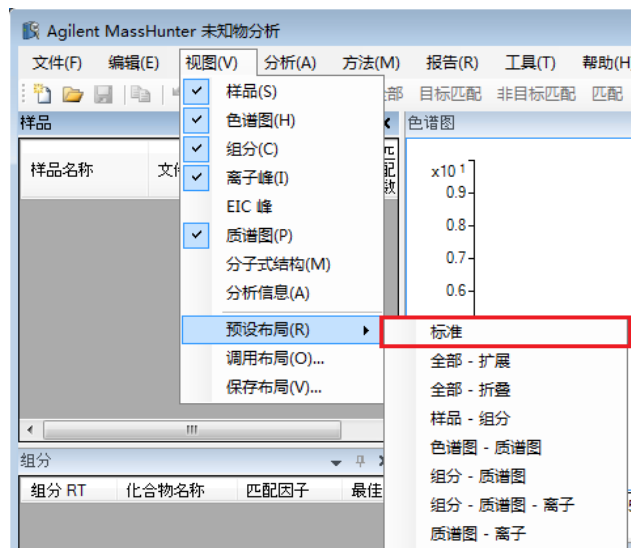


在您打开此程序时，将显示默认布局。



如果没有显示默认布局，请在创建新分析之前，单击视图 > 预设布局 > 标准来恢复默认布局。

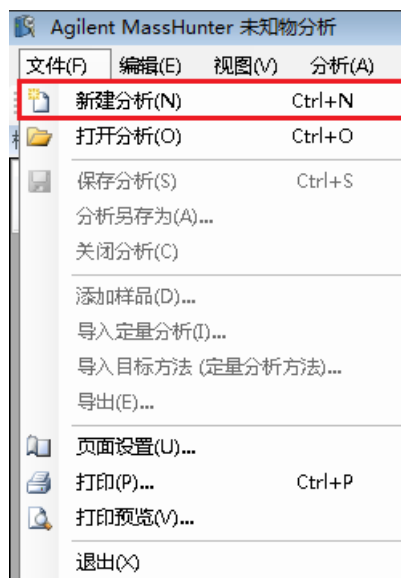
在 Quant-My-Way 用户界面中的视图选项卡上，单击预设的布局 > 标准。



任务 1：通过 TIC 分析识别化合物

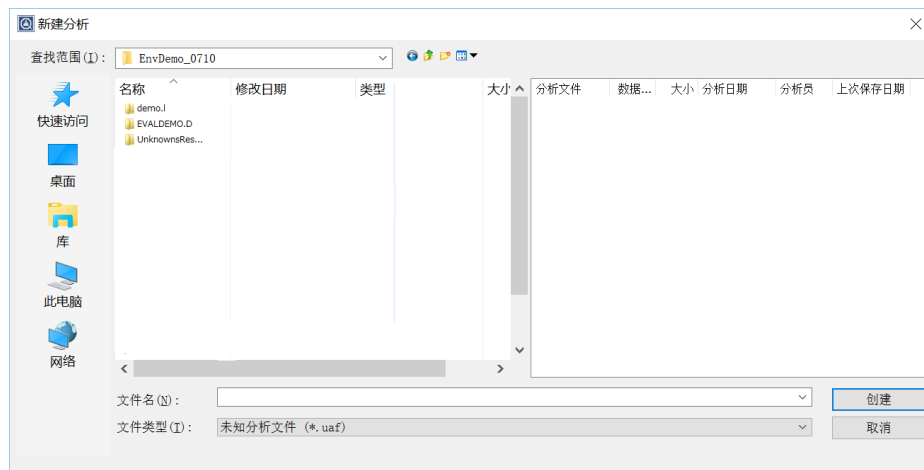
2. 选择文件 > 新建分析。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击**新建分析**。



3. 导航到 **MassHunter\Data\Evaldemo**，或用于存储要分析的数据文件的文件夹。

4. 为此分析键入分析名称 **evaldemo**，然后单击**创建**。



任务 1: 通过 TIC 分析识别化合物

将样品添加到分析中

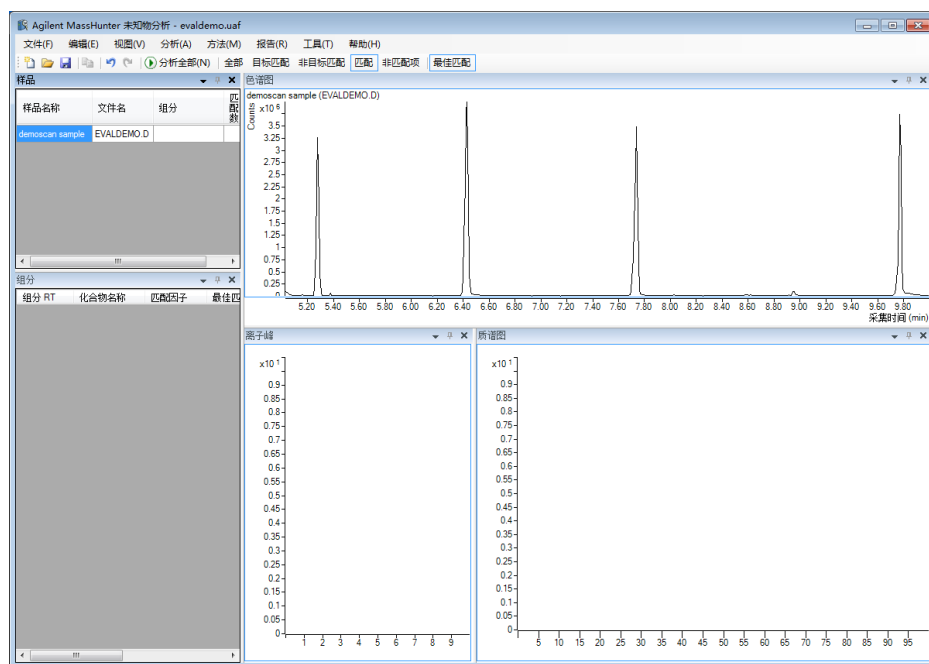
1. 选择文件 > 添加样品。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击添加样品。

2. 选择样品文件，然后单击**确定**以将样品添加到批处理中。



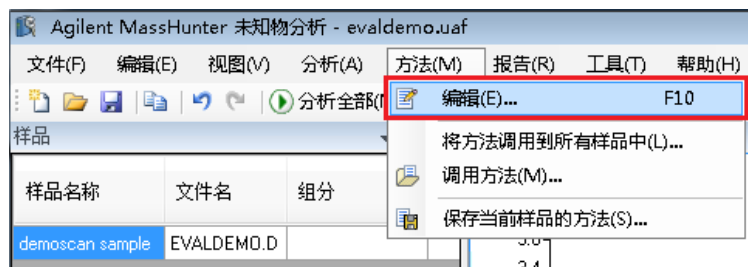
分析表不再是空的。现在它包含演示样品。



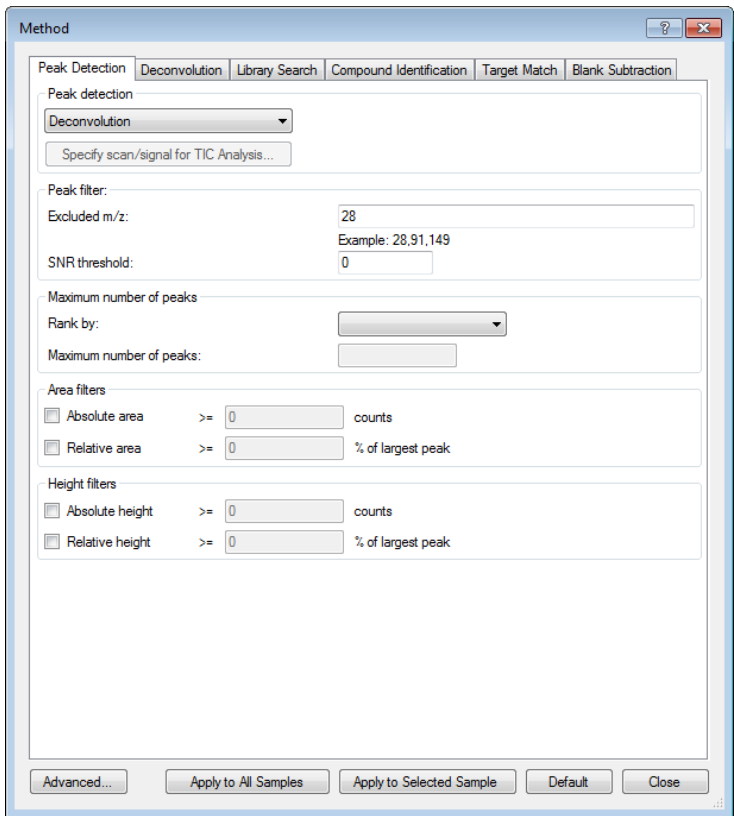
任务 1：通过 TIC 分析识别化合物

设置分析方法

选择方法 > 编辑。
在 **Quant-My-Way** 用户界面中的
主页选项卡上，单击**编辑方法**。



将显示 “方法” 对话框标准视图。对于此任务，我们将使用**标准**视图。



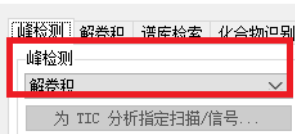
请注意，这些是此方法的默认参数。在下一步中创建新方法之前，您可以单击 “方法” 对话框底部的**默认**来恢复默认参数。

任务 1：通过 TIC 分析识别化合物

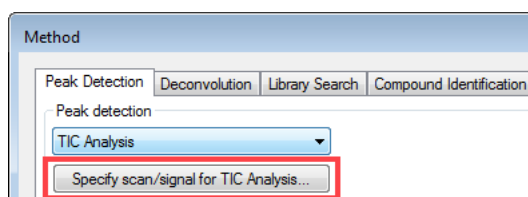
设置峰检测选项

1. 从**峰检测**下拉菜单中选择**TIC 分析**。
2. 单击**为 TIC 分析指定扫描 / 信号**以处理 GC 信号。
3. 在**最大峰数量**部分中，从**排序依据**下拉菜单中选择**面积**，然后为**最大峰数量**输入 5。
4. 在**面积过滤器**部分中，选择**相对峰面积**，然后为**最大峰百分比**输入 1。

谱库方法



- **TIC 分析**：使用积分而不是解卷积确定色谱峰。
- **解卷积**：对色谱图中的组分进行解卷积，并根据保留时间和峰形从背景噪音中提取“干净”的光谱。



最大峰数量

排序依据:

面积

最大峰数量:

5

面积过滤器

☐ 绝对峰面积

>=

0

counts

☒ 相对峰面积

>=

1

% (最大峰)

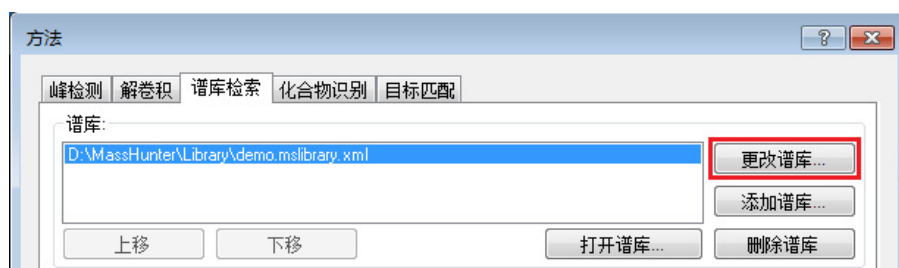
任务1：通过 TIC 分析识别化合物

设置谱库检索选项

1. 单击谱库检索。



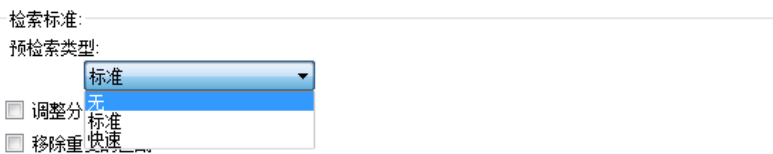
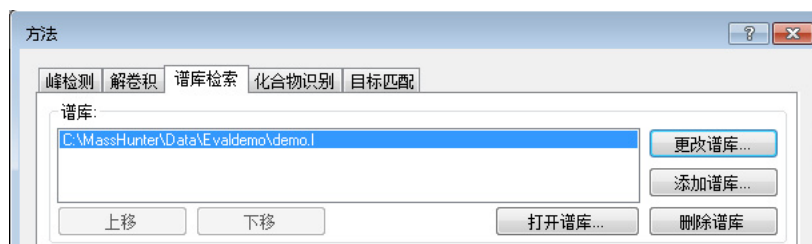
2. 单击更改谱库。



任务1：通过 TIC 分析识别化合物

3. 导航到 **MassHunter\Data\Evaldemo** 或相关文件夹，选择 **demo.L**，然后单击**打开**。

4. 在**检索标准**部分中，从**预检索类型**下拉菜单中选择**无**。



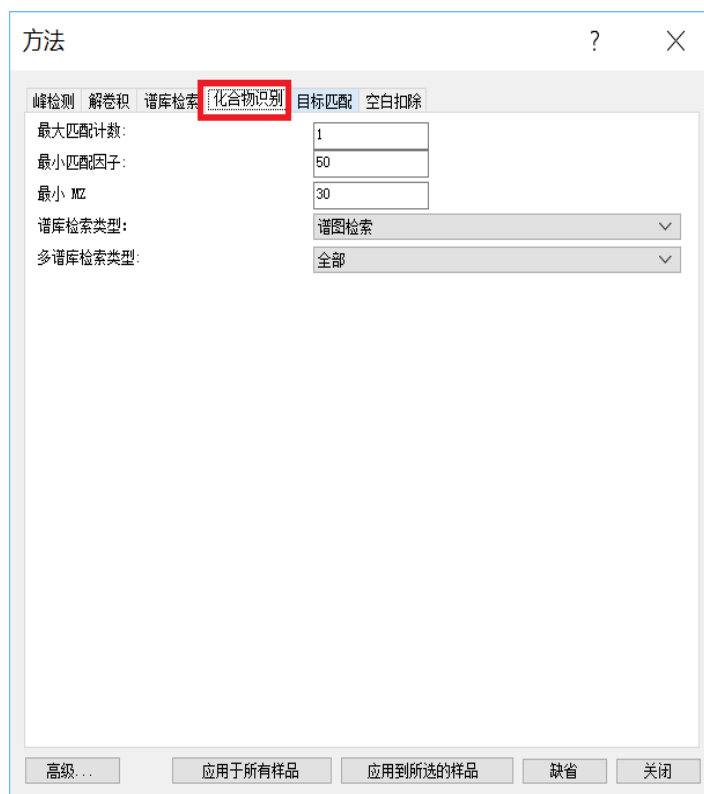
有三种类型的预检索可供使用：**无**、**标准**和**快速**。默认情况下，未知物分析使用**标准**类型。

- **无**：谱库检索不受初步筛选过程约束。
- **标准**：如果索引方案不会产生足够的候选物，则此筛选算法将使用整个谱库作为候选物列表。其速度比无预检索的速度快 50-100 倍，并且，对于高分匹配（匹配分数 > 80），误判率基本上是零。
- **快速**：此筛选算法使用它从索引中获取的候选物列表，避免进行整个谱库检索，即使没有找到足够的候选物也是如此。其速度比无预检索的速度快 100-1000 倍，但对于高分匹配，误判率为 $\geq 1\%$ 。

任务1：通过 TIC 分析识别化合物

设置化合物识别选项

1. 单击**化合物识别**。



对于此任务，我们将使用默认化合物识别参数。

2. 单击**应用到所有样品**，然后单击**关闭**。

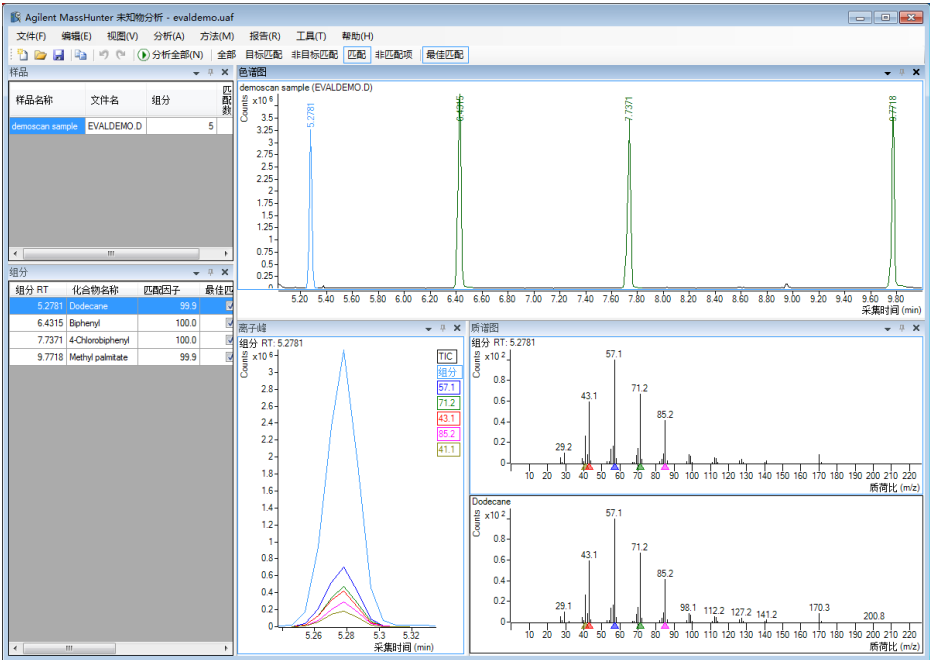
任务1：通过 TIC 分析识别化合物

分析并检查结果

1. 单击**全部分析**。

在分析完成后，显示的主视图应该如下例所示。这是默认布局，包含默认列设置。如果您看到不同于下例中的布局，请选择**视图 > 预设的布局 > 标准**来重置标准布局。

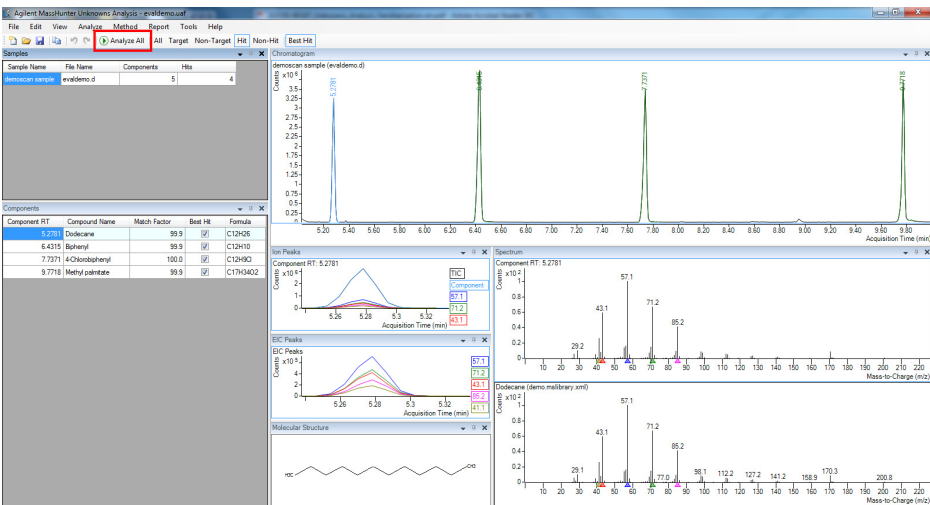
在 **Quant-My-Way** 用户界面中的**视图选项卡**上，选择**预设的布局 > 标准**。



2. 选择**视图 > 预设布局 > 全部 - 折叠**。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的**视图选项卡**上，选择**预设的布局 > 全部 - 折叠**。

系统将显示“全部 - 折叠”视图。

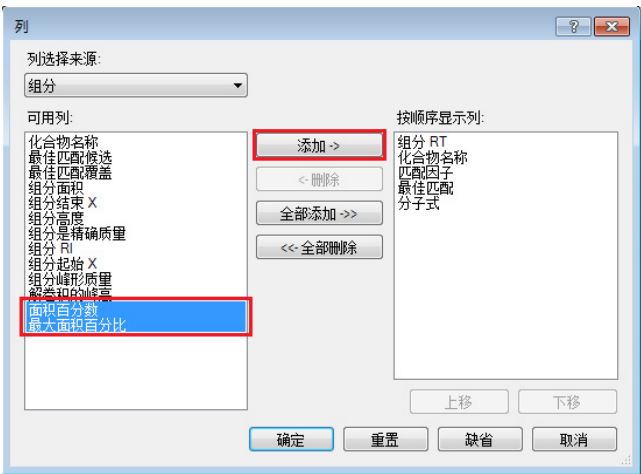
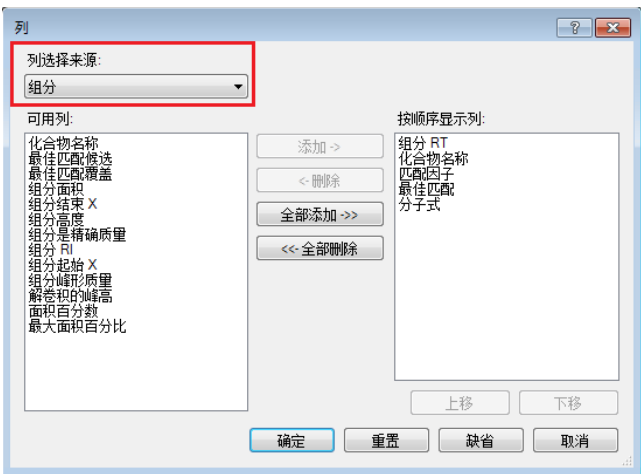


任务1：通过 TIC 分析识别化合物

- 从样品表中选择演示扫描样品。
- 右键单击组分窗口中的任何列标题，然后选择添加 / 删除列。
- 从选择列下拉菜单中选择组分。
- 从可用列列表中选择面积百分比和最大面积百分比，然后单击添加。

单击以下工具栏按钮之一，看看组分窗口中有什么变化。
在 Quant-My-Way 用户界面中，单击主页选项卡上的以下按钮之一。

- 全部：查看所有峰。
- 匹配项：查看在谱库检索中找到的峰。
- 非匹配项：查看在谱库检索中未找到的峰。



- 面积百分比：峰面积总和的百分比
- 最大面积百分比：最大峰面积的百分比

任务 1：通过 TIC 分析识别化合物

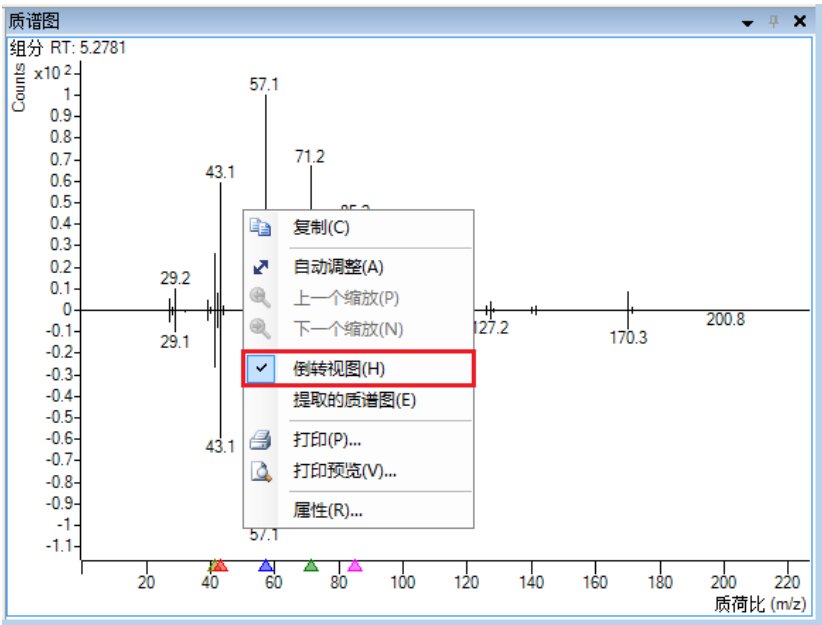
- 7. 验证选定的列是否已移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击确定。
- 8. 从组分表的组分保留时间列中选择一个组分。

组分 RT	化合物名称	匹配因子	最佳匹配	分子式	面积百分数	最大面积百分比
5.2781	Dodecane	99.9	☒	C12H26	19.158	63.44
6.4315	Biphenyl	100.0	☒	C12H10	30.196	100.00
7.7371	4-Chlorobiphenyl	100.0	☒	C12H9Cl	25.572	84.69
9.7718	Methyl palmitate	99.9	☒	C17H34O2	23.731	78.59

查看选定组分的色谱图、质谱图、离子峰、EIC 峰和分子结构。

在质谱图窗口中，顶部质谱图源自组分，底部质谱图源自谱库。组分表中的匹配因子可反映两个质谱图的匹配程度。

要更改为倒转视图，请在质谱图窗口内部右键单击，然后选择倒转。



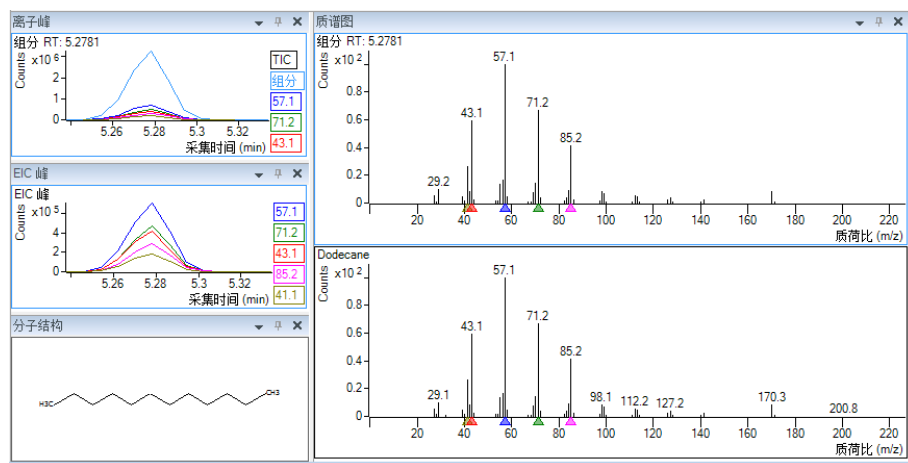
离子峰和 EIC 峰窗口将显示选定离子的提取色谱图。显示屏右侧的 EIC 谱图及其数字标识符带有颜色编码。

要在离子峰和 EIC 峰窗口中交互添加离子色谱图跟踪，请在质谱图窗口的任何质谱图显示区域中单击。如果选定的 m/z 色谱图没有显示出来，则它将添加到离子峰和 EIC 峰窗口中，并且，相同颜色的符号 ▲ 将出现在质谱图窗口中 X 轴下的对应的 m/z 位置。

任务1：通过 TIC 分析识别化合物

要从离子峰和 EIC 峰窗口中删除离子色谱图跟踪（及其数字标识符），请单击其数字标识符或质谱图窗口中对应的 m/z 值位置。

分子结构源自谱库。如果检索到的谱库不包含这些条目的结构，则分子结构窗口中不会显示任何内容。



9. 要保存此分析，请选择文件 > 保存分析。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击**保存分析**。

10. 单击**文件 > 退出**。

任务 2：通过解卷积识别化合物

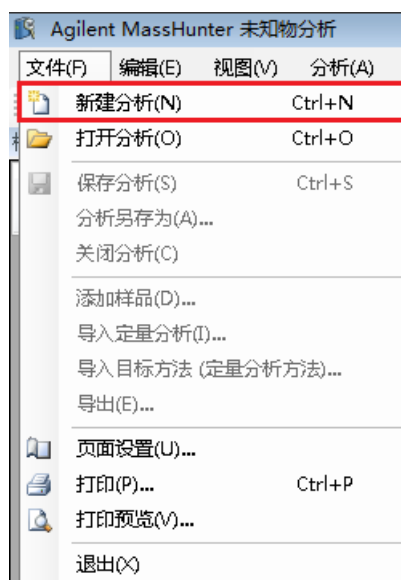
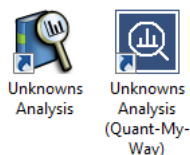
创建新分析

1. 双击桌面图标启动未知物分析，或单击开始 > Agilent > MassHunter Workstation > 未知物分析。

2. 选择文件 > 新建分析。

在 Quant-My-Way 用户界面中的主页选项卡上，单击新建分析。

3. 导航到 \ 您的目录 \ RI-PEST-MATRIX \。
4. 键入分析名称 **demo**，然后单击创建。

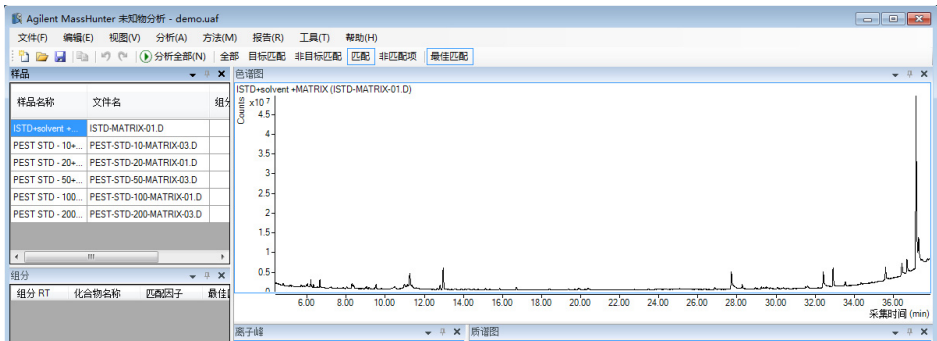


任务2：通过解卷积识别化合物

将样品添加到分析中

1. 选择文件 > 导入定量分析。
在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，选择导入 > 导入定量分析。
2. 选择 **TargetDemo.batch.bin**，然后单击打开。

验证是否已导入批处理。**样品**窗口现在包含一个基质空白和浓度水平各不相同的五个加标样品。**色谱图**会显示在**样品**窗口中选定的样品的 TIC。



任务 2：通过解卷积识别化合物

设置分析方法

按 **F10** 或选择方法 > 编辑。
在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主
页选项卡上，单击**编辑方法**。

设置峰检测选项

从**峰检测**下拉菜单中选择**解卷积**，
然后单击**应用到所有样品**。

谱库方法

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

峰检测

解卷积

为 TIC 分析指定扫描/信号...

峰过滤器:

排除的 m/z:

28

示例: 28, 91, 149

SNR 阈值:

0

最大峰数量

排序依据:

最大峰数量:

面积过滤器

☐ 绝对峰面积

>=

0

counts

☐ 相对峰面积

>=

0

% (最大峰)

峰高过滤器

☐ 绝对峰高

>=

0

counts

☐ 相对峰高

>=

0

% (最大峰)

保存并退出(E)

缺省

取消

任务2：通过解卷积识别化合物

设置解卷积选项

1. 单击解卷积。

方法 ? ×

峰检测 **解卷积** 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

分离度：
RT 窗口比例系数： 25, 50, 100, 200

提取窗口：
左侧 m/z 增值： 0.3
右侧 m/z 增值： 0.7
m/z 增量单位： AMU ▼

☒ 使用 m/z 整数值

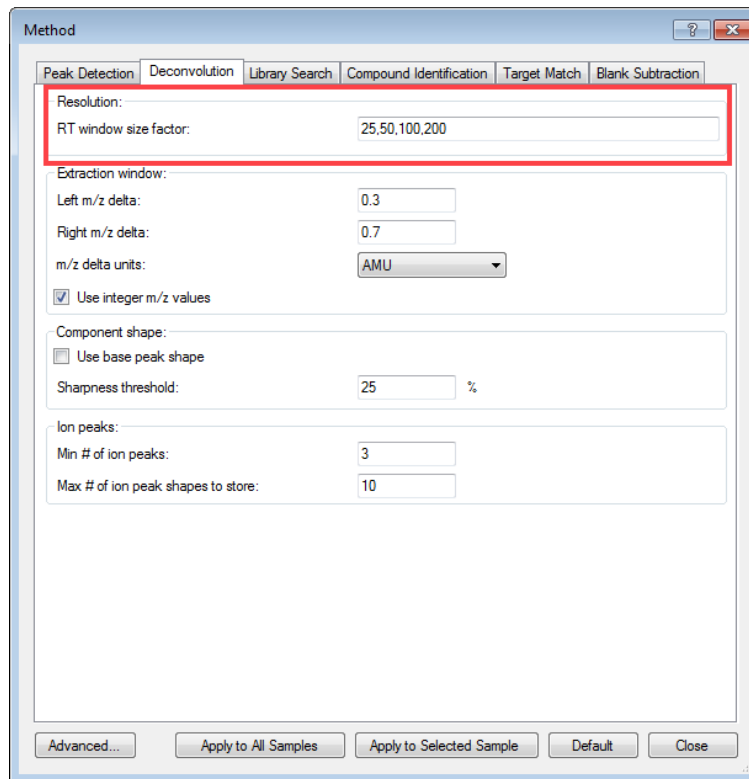
组分峰型：
☐ 使用基峰峰型
锐度阈值： 25 %

离子峰：
最少离子峰个数： 3
要存储的最大离子峰形个数： 10

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

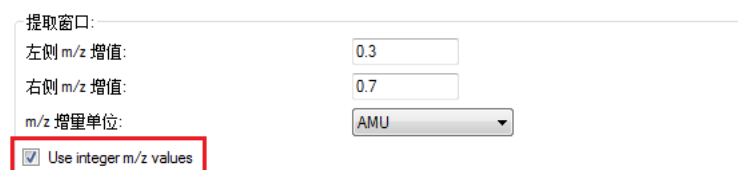
任务 2：通过解卷积识别化合物

将显示解卷积的默认参数。默认情况下，保留时间窗口大小因子有四个值（25、50、100、200）。选择采用逗号分隔格式的任意一组窗口大小因子 (WSF) 值。



WSF 表示用于将离子峰分组到组分中的相关性窗口的无因次比尺，等效于分离度和 AMDIS。更小的值（更高的分离度）可分离间隔很近的峰，找到更多组分，但运行时间更长。更大的值用于更宽的峰。使用多个值可以覆盖所有类型的峰，不必进行手动优化。

2. 在提取窗口部分中，选择使用 **m/z 整数值**。



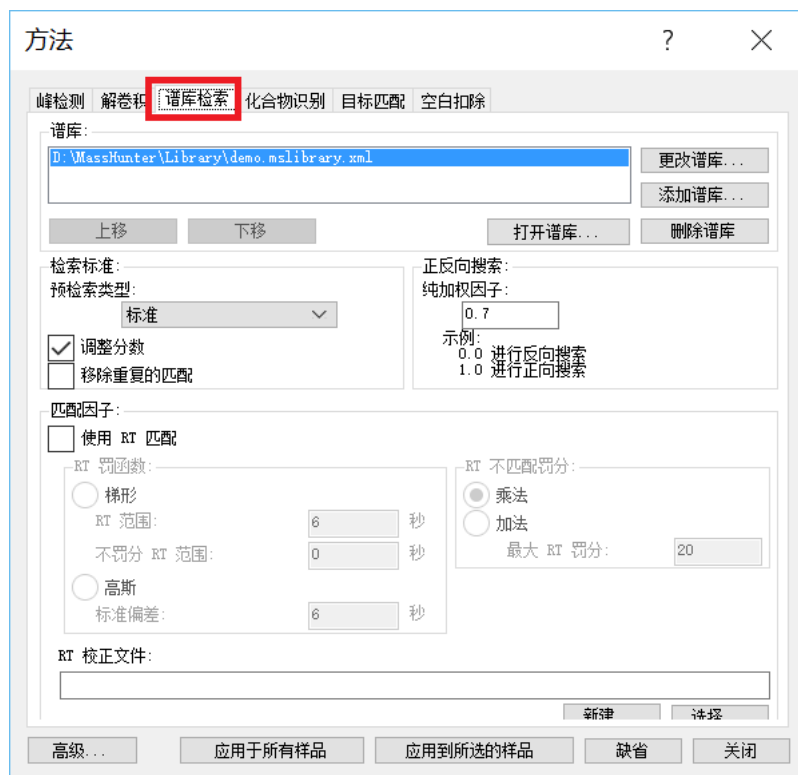
使用 **m/z 整数值** 可采用整数和过滤的 m/z 来进行解卷积，并提供最佳结果。

3. 单击 **应用到所有样品**。

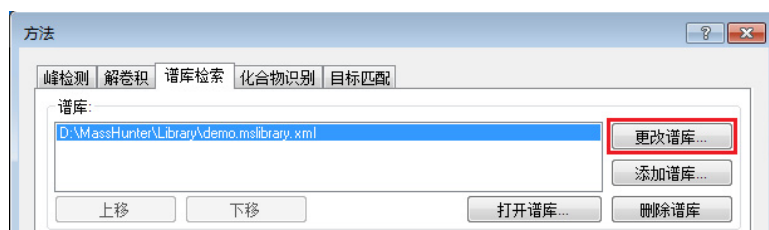
任务2：通过解卷积识别化合物

设置谱库检索选项

1. 单击谱库检索。



2. 单击更改谱库。



3. 导航到相关文件夹，选择 RI-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml，然后单击打开。

任务 2：通过解卷积识别化合物

4. 在检索标准部分中，从预检索下拉菜单中选择**标准**。

方法

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

谱库：
D:\MassHunter\Library\RT-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml
更改谱库...
添加谱库...
上移 下移 打开谱库... 删除谱库

检索标准：
预检索类型：**标准**
☒ 调整分数
☐ 移除重复的匹配

正反向搜索：
纯加权因子：
0.7
示例：
0.0 进行反向搜索
1.0 进行正向搜索

匹配因子：
☐ 使用 RT 匹配
RT 罚函数：
☐ 梯形
RT 范围：6 秒
不罚分 RT 范围：0 秒
☐ 高斯
标准偏差：6 秒
RT 不匹配罚分：
☒ 乘法
☐ 加法
最大 RT 罚分：20

RT 校正文件：
新建 选择

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

- 选择**调整分数**可将最接近的谱库匹配分数给予 NIST。
- 选择**移除重复的匹配**可移除出现在给定目标质谱图的匹配列表中的重复匹配。这可处理重复的和高度类似的谱库条目（如在 NIST 中所看到的条目），并且仅返回带有最高匹配分数的单个谱库条目。

任务 2：通过解卷积识别化合物

5. 在匹配因子部分中，选择使用保留时间匹配。

方法

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

谱库: D:\MassHunter\Library\demo.mslibrary.xml 更改谱库... 添加谱库... 上移 下移 打开谱库... 删除谱库

检索标准: 预检索类型: 标准 调整分数 移除重复的匹配

正反向搜索: 纯加权因子: 0.7 示例: 0.0 进行反向搜索 1.0 进行正向搜索

匹配因子: ☒ 使用 RT 匹配

RT 匹配函数: ☐ 梯形 RT 范围: 6 秒 不罚分 RT 范围: 0 秒 ☒ 高斯 标准偏差: 6 秒

RT 不匹配罚分: ☒ 乘法 ☐ 加法 最大 RT 罚分: 20

RT 校正文件: 新建... 选择...

高级... 应用于所有样品 应用到所选样品 缺省

6. 在保留时间罚分函数部分中，选择梯形，然后输入以下信息：
保留时间范围：9
无罚分保留时间范围：9

方法

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

谱库: D:\MassHunter\Library\RT-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml 更改谱库... 添加谱库... 上移 下移 打开谱库... 删除谱库

检索标准: 预检索类型: 标准 调整分数 移除重复的匹配

正反向搜索: 纯加权因子: 0.7 示例: 0.0 进行反向搜索 1.0 进行正向搜索

匹配因子: ☒ 使用 RT 匹配

RT 罚函数: ☒ 梯形 RT 范围: 9 秒 不罚分 RT 范围: 9 秒 ☐ 高斯 标准偏差: 6 秒

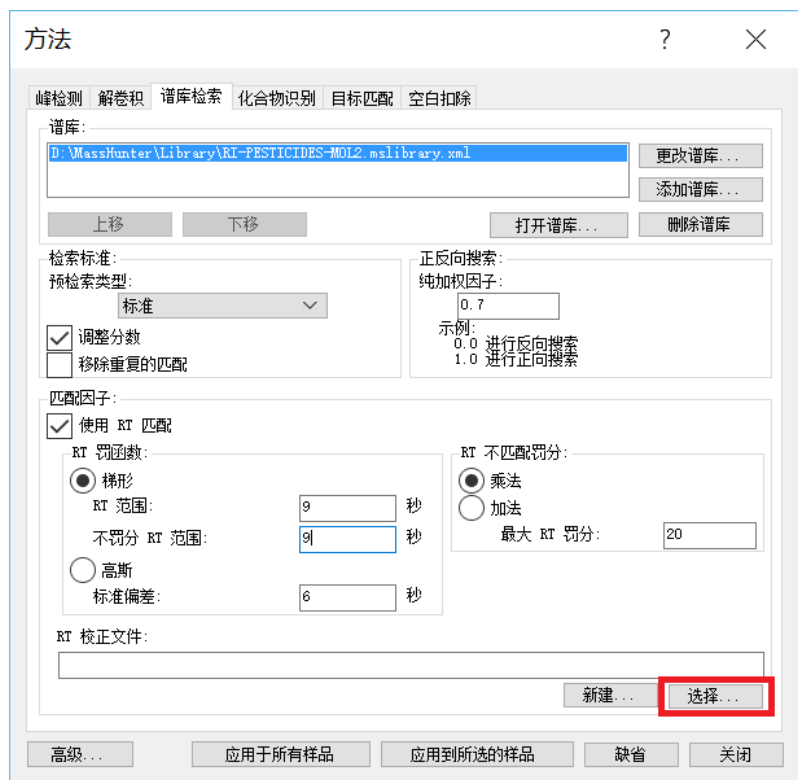
RT 不匹配罚分: ☒ 乘法 ☐ 加法 最大 RT 罚分: 20

RT 校正文件: 新建 选择

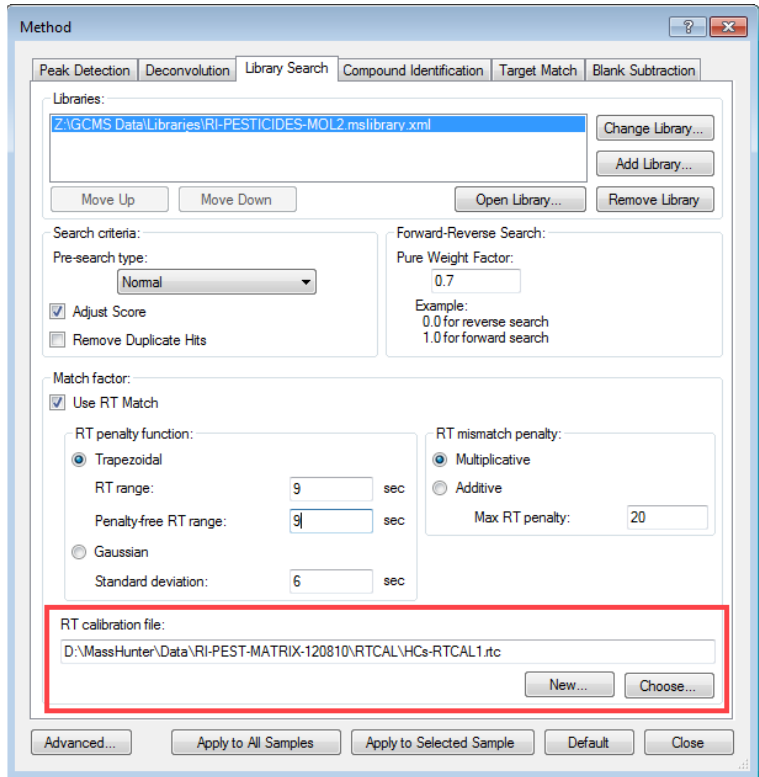
高级... 应用于所有样品 应用到所选样品 缺省 关闭

任务 2：通过解卷积识别化合物

7. 在“保留时间校正文件”部分中，单击**选择**。



8. 导航到相关文件夹，然后选择 **HCs-RTCAL1.rtc**。



任务 2：通过解卷积识别化合物

9. 在谱库部分中，单击**添加谱库**。

10. 导航到相关文件夹，然后选择 **NIST11.L**。

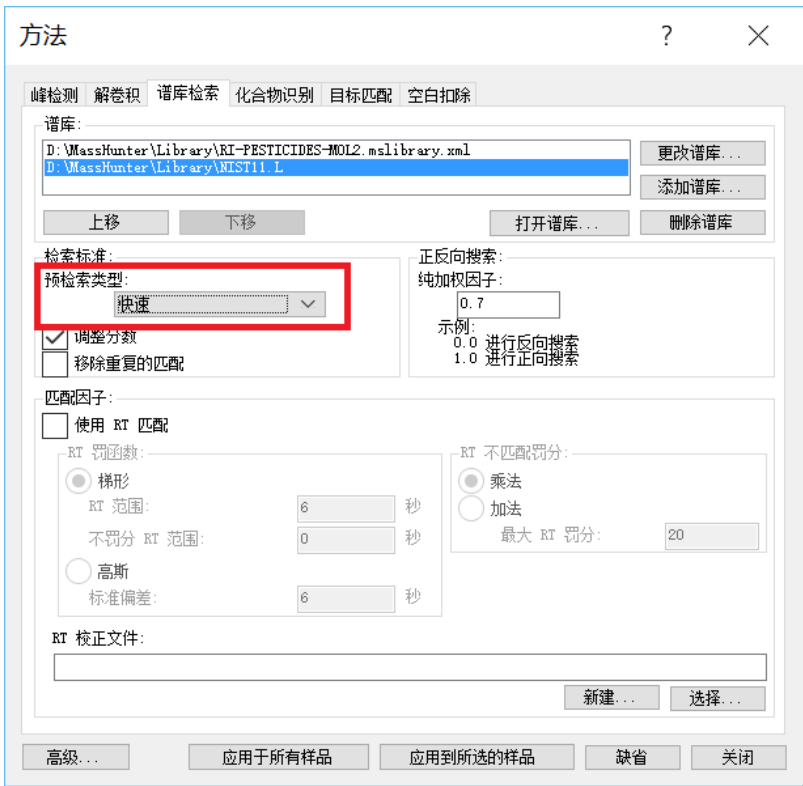
11. 从**预检索类型**下拉菜单中选择**快速**。

12. 单击**应用到所有样品**。

RT/RI 计算可用于将谱库与更低的误判率匹配。此窗口设置为 ± 9 秒，用于根据谱库检索确定匹配数。



可在谱库检索中使用多个谱库。对于此示例，目标 MS 谱库包含 900 多种农药以及保留指数 (RI) 信息。可将 NIST11.L 用于其他确认。



您可以为不同的谱库设置不同的谱库检索参数。

任务2：通过解卷积识别化合物

设置化合物识别选项

单击化合物识别。

方法

峰检测 解卷积 谱库检索 **化合物识别** 目标匹配 空白扣除

最大匹配计数: 1

最小匹配因子: 50

最小 MZ: 30

谱库检索类型: 谱图检索

多谱库检索类型: 全部

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

对于此示例，为了根据谱库检索识别化合物，**最小匹配因子**设置为 50。

- **最大匹配项计数**：要报告的每个组分的谱库检索匹配项的最大数量。
- **最小 MZ**：用于谱库匹配分数计算的 m/z 下限。
- **谱库检索类型**：可使用三种检索模式：
 - 谱图检索：检索谱图数据
 - 保留时间匹配：检索 GC 或 LC 数据
 - 精确质量方式匹配：检索精确质量 LCMS 数据
- **不确定度百分比**：仅在谱库检索中选择了**预检索类型**时适用。此值越大，生成的谱库检索候选匹配项越多，谱库检索过程也越长。
- **多谱库检索类型**：如果使用多个谱库，则有两种检索模式：
 - **全部**：检索所有谱库（默认）
 - **找到时停止**：在找到足够多的候选匹配项时就停止检索谱库

任务 2：通过解卷积识别化合物

设置目标匹配选项

1. 单击目标匹配。

方法 ? ×

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 **目标匹配** 空白扣除

目标要求：

☐ 最终浓度 ☐ 定性离子

☐ 目标响应 ☐ 定性离子比值

匹配项离子匹配标准：

☐ 目标离子 ☐ 定性离子

☐ 定性离子比值

匹配项 RT 匹配标准：

☒ 在目标化合物 RT 窗口内

其他目标匹配项匹配：

☒ 使用化合物名称 ☒ 使用 CAS 编号

估计响应因子：

估计值：
无估计 ▼

手动设置响应因子：

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

目标匹配可使用定量方法识别定量目标。可通过过滤掉目标匹配来简化识别非目标化合物的目的。对于**目标匹配**，可应用保留时间窗口、化合物名称和 CAS 编号。

任务 2：通过解卷积识别化合物

2. 在匹配项保留时间匹配标准部分中，选择在目标保留时间窗口内。

方法 ? X

峰检测 解卷积 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

目标要求:

☐ 最终浓度 ☐ 定性离子

☐ 目标响应 ☐ 定性离子比值

匹配项离子匹配标准:

☐ 目标离子 ☐ 定性离子

☐ 定性离子比值

匹配项 RT 匹配标准:

☒ 在目标化合物 RT 窗口内

其他目标匹配项匹配:

☒ 使用化合物名称 ☒ 使用 CAS 编号

估计响应因子:

估计值:

无估计

手动设置响应因子:

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

任务 2：通过解卷积分识别化合物

3. 在其他目标匹配项匹配部分中，选择使用化合物名称和使用 CAS 编号。

方法

峰检测 解卷积分 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

目标要求：

☐ 最终浓度 ☐ 定性离子

☐ 目标响应 ☐ 定性离子比值

匹配项离子匹配标准：

☐ 目标离子 ☐ 定性离子

☐ 定性离子比值

匹配项 RT 匹配标准：

☒ 在目标化合物 RT 窗口内

其他目标匹配项匹配：

☒ 使用化合物名称 ☒ 使用 CAS 编号

估计响应因子：

估计值：

无估计

手动设置响应因子：

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

4. 在估计响应因子部分中，从估计下拉菜单中选择相对 ISTD 估计值。

方法

峰检测 解卷积分 谱库检索 化合物识别 目标匹配 空白扣除

目标要求：

☐ 最终浓度 ☐ 定性离子

☐ 目标响应 ☐ 定性离子比值

匹配项离子匹配标准：

☐ 目标离子 ☐ 定性离子

☐ 定性离子比值

匹配项 RT 匹配标准：

☒ 在目标化合物 RT 窗口内

其他目标匹配项匹配：

☒ 使用化合物名称 ☒ 使用 CAS 编号

估计响应因子：

估计值：

相对 ISTD 估计值

手动设置响应因子：

高级... 应用于所有样品 应用到所选的样品 缺省 关闭

浓度估计利用定量目标响应因子 (RF)，该因子也适用于非目标匹配项。响应因子估计比较灵活，可以对其进行调整以满足特定的分析要求。

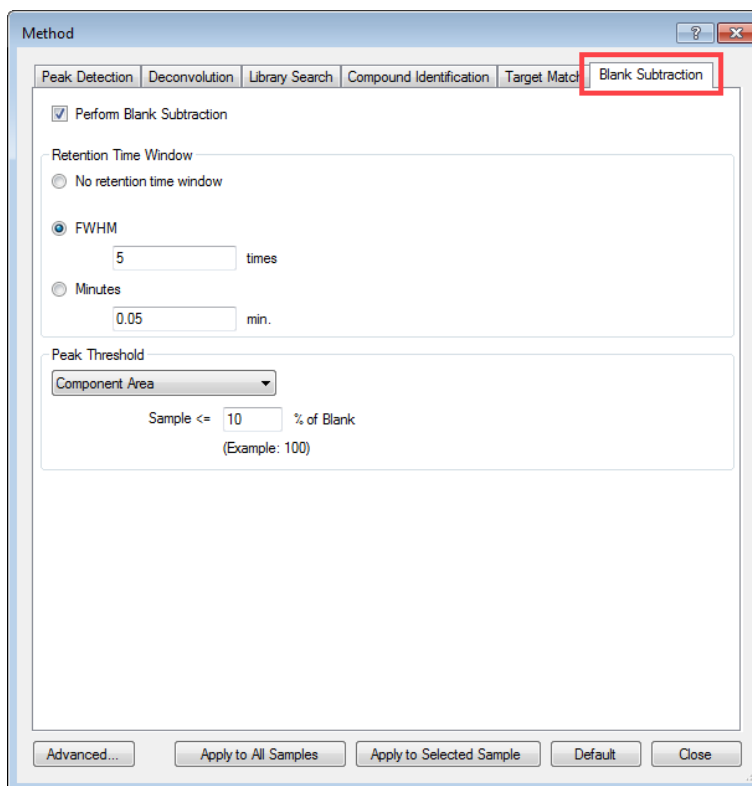
任务2：通过解卷积识别化合物

- 单击**应用到所有样品**，然后单击**关闭**。
- 要保存此分析，请选择**文件 > 保存分析**。



设置空白扣除选项

单击**空白扣除**。



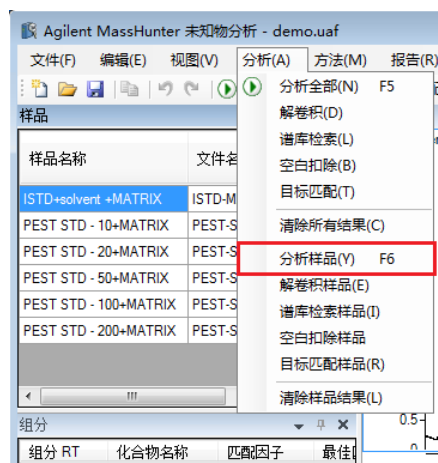
- **执行空白扣除**：选择以执行空白扣除。
- **保留时间窗口**：选择**无保留时间窗口**、**FWHM** 或 **min**。如果选定 **FWHM**，请指定次数。如果选定 **Minutes**，请指定分钟数。
- **峰阈值**：选择**无**、**组分面积**或**估计的浓度**。输入一个百分比。

任务2：通过解卷积识别化合物

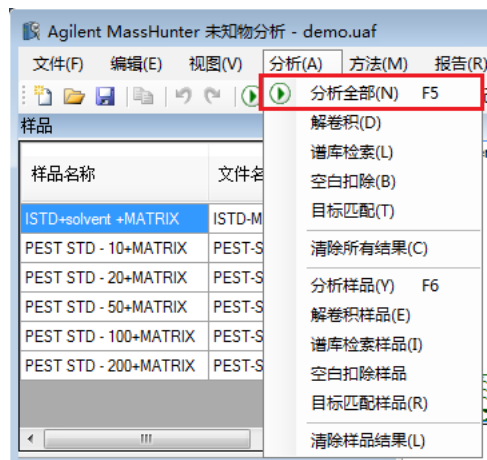
分析并检查结果

1. 在样品窗口中，选择样品
ISTD+ 溶剂 + 基质。
2. 选择分析 > 分析样品。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，选择**选定样品** > **分析样品**。



要分析剩余样品，请单击**全部分析**。如果没有更改方法中的任何参数，则分析将从其退出的位置开始，并跳过以前分析过的样品。

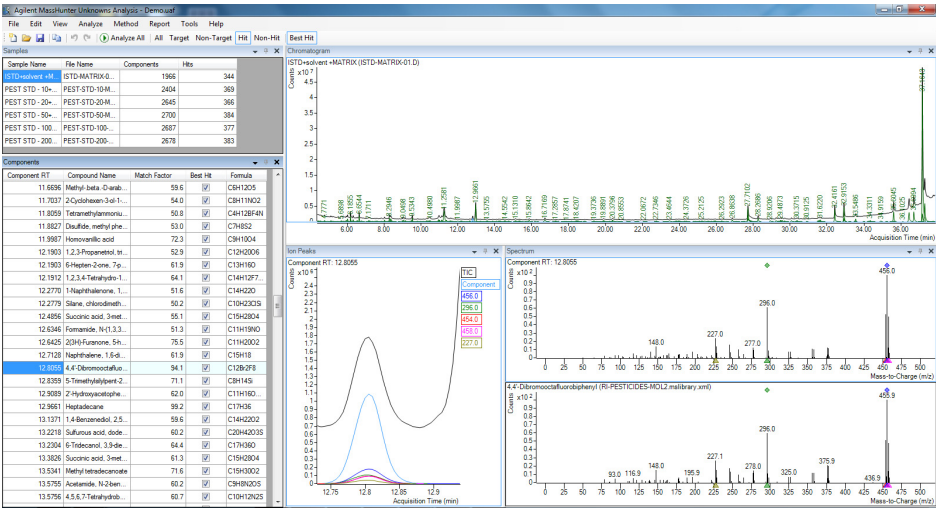


任务2：通过解卷积识别化合物

查看分析消息中的验证信息。

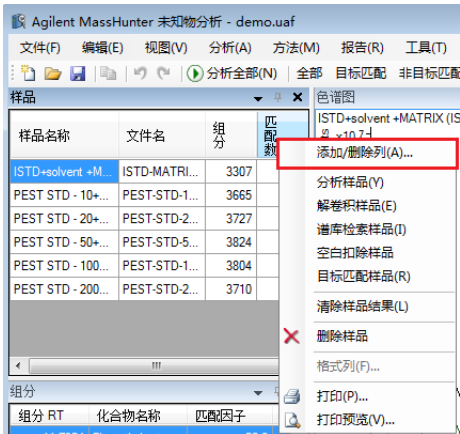
分析信息		
类型	目标	消息
	样品 ISTD+solvent +MATRIX	之前已执行过解卷积过程。正在跳过解卷积过程。
	样品 ISTD+solvent +MATRIX	之前已执行过谱库检索过程。正在跳过谱库检索...
	样品 ISTD+solvent +MATRIX	空白扣除操作已在以前执行。正在跳过空白扣除操...
	样品 ISTD+solvent +MATRIX	之前已执行过目标匹配过程。正在跳过目标化合...

在分析完成后，显示的主视图应该如下例所示。这是默认布局，包含默认列设置。



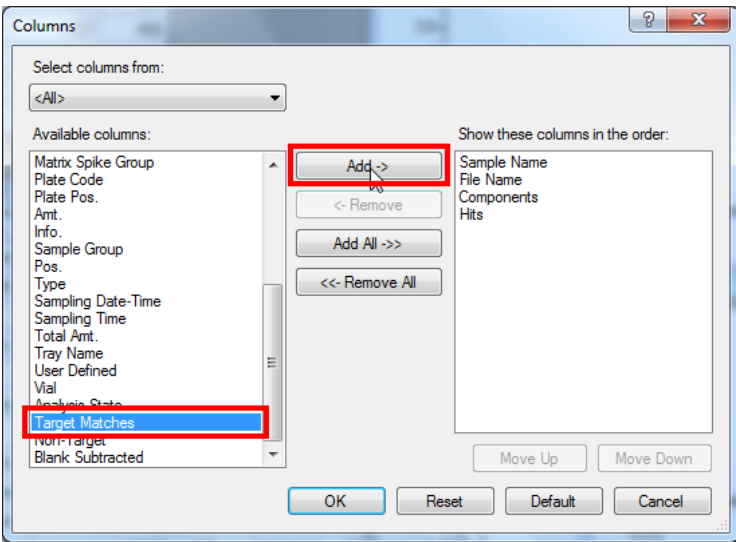
检查最佳匹配结果

1. 右键单击样品窗口中的任何列标题，然后选择添加 / 删除列。



任务2：通过解卷积识别化合物

2. 从可用列列表中选择目标匹配，然后单击添加。



3. 验证选定列是否移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击确定。

目标匹配列将添加到样品窗口中。

样品				
样品名称	文件名	组分	匹配数	目标匹配
ISTD+solvent +M...	ISTD-MATRI...	3307	575	2
PEST STD - 10+...	PEST-STD-1...	3665	452	43
PEST STD - 20+...	PEST-STD-2...	3727	470	43
PEST STD - 50+...	PEST-STD-5...	3824	506	52
PEST STD - 100...	PEST-STD-1...	3804	492	46
PEST STD - 200...	PEST-STD-2...	3710	541	48

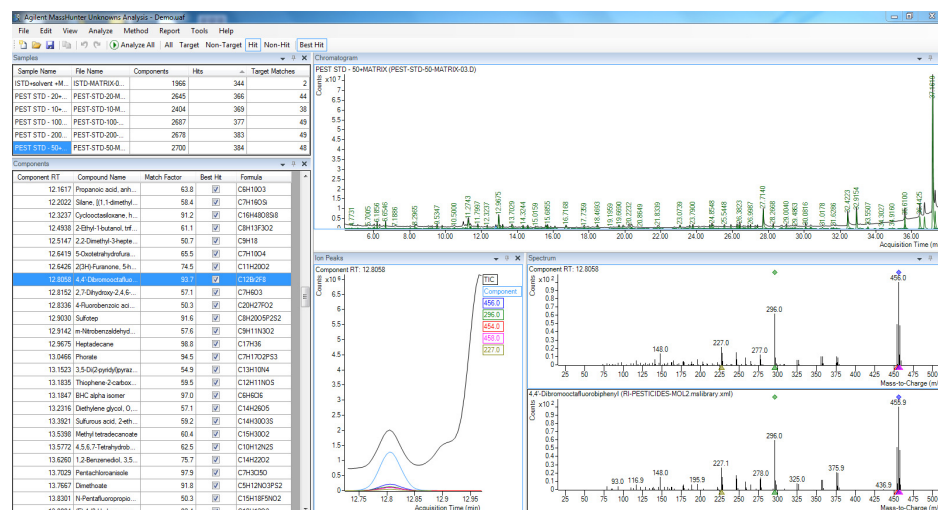
任务2：通过解卷积识别化合物

4. 在**样品**窗口中选择最后一个样品。

单击以下工具栏按钮之一，看看组分、色谱图、离子峰和质谱图窗口中有什么变化。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中，单击**主页**选项卡上的以下按钮之一。

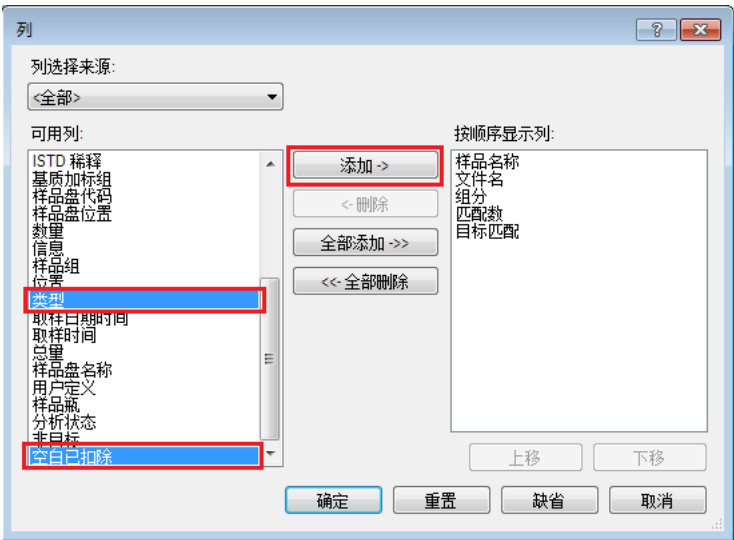
- **全部**：查看所有峰。
- **目标**：查看也在定量方法中的峰。
- **非目标**：查看不在定量方法中的峰。
- **匹配项**：查看在谱库检索中找到的峰。
- **非匹配项**：查看在谱库检索中未找到的峰。
- **最佳匹配项**：查看在不同分离度的同一化合物的多个匹配项中具有最高谱库匹配分数的组分。



任务2：通过解卷积分识别化合物

检查空白匹配项扣除结果

- 1. 右键单击样品窗口中的任何列标题，然后选择**添加 / 删除列**。
- 2. 从可用列列表中选择**类型**和**空白已扣除**，然后单击**添加**。

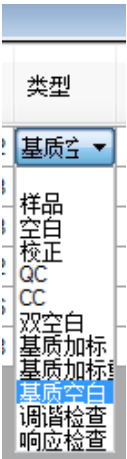


- 3. 验证选定的列是否已移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击**确定**。

类型和空白已扣除列已添加到样品窗口中。

样品						
样品名称	文件名	组分	匹配数	目标匹配	类型	空白已扣除
ISTD+solvent +M...	ISTD-MATRI...	3307	575	2	基...	0
PEST STD - 10+...	PEST-STD-1...	3665	452	43	样品	182
PEST STD - 20+...	PEST-STD-2...	3727	470	43	样品	164
PEST STD - 50+...	PEST-STD-5...	3824	506	52	样品	153
PEST STD - 100...	PEST-STD-1...	3804	492	46	样品	161
PEST STD - 200...	PEST-STD-2...	3710	541	48	样品	148

- 4. 请注意**类型**下拉菜单中的可用样品列表。



任务2：通过解卷积识别化合物

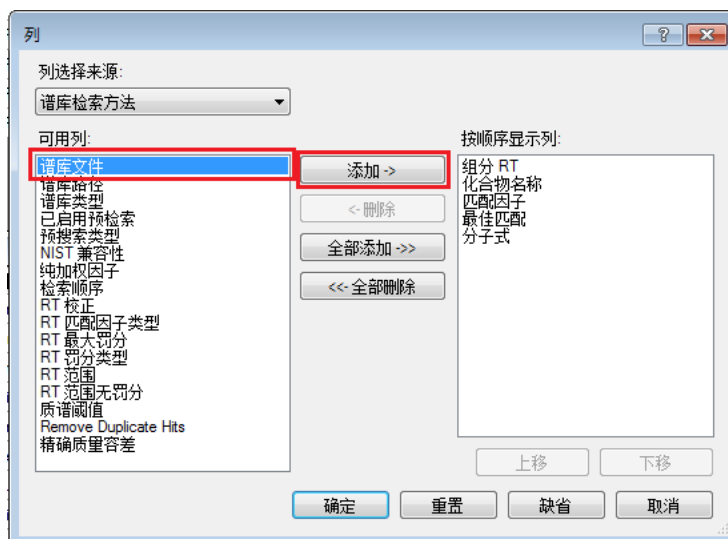
样品窗口中空白已扣除列内显示的值表示已从样品中进行空白扣除的匹配项的数量。

在带有 $RT \pm 5FWH$ 的空白中找到相同的匹配项时，样品中的匹配项标记为**空白扣除匹配项**。典型的 GC-MS 峰的 FWHM 为 1-2 秒。如果我们在此估计中使用 2 秒，则 $5FWHM = 10 \text{ 秒} = 0.17 \text{ 分钟}$ 。只有在工具栏中单击**全部**时，您才能看到**空白已扣除匹配项**。

将针对“空白”样品执行**空白匹配项扣除**。在此过程中，任何**样品类型**归类为**空白**、**双空白**或**基质空白**的样品中的匹配项都将从所有标准样品中自动扣除。您可以通过在**样品**中更改**样品类型**来指定“空白”样品，以达到空白扣除目的。如果没有“空白”样品，则不会出现**空白扣除**的情况。更改样品类型以关闭**空白扣除**。

使用“显示备选匹配项”评估结果

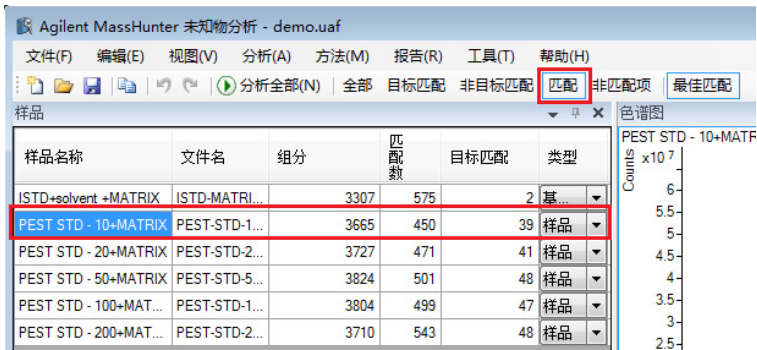
1. 右键单击**组分**窗口中的任何列标题，然后选择**添加 / 删除列**。
2. 从**可用列**列表中选择**谱库文件**，然后单击**添加**。



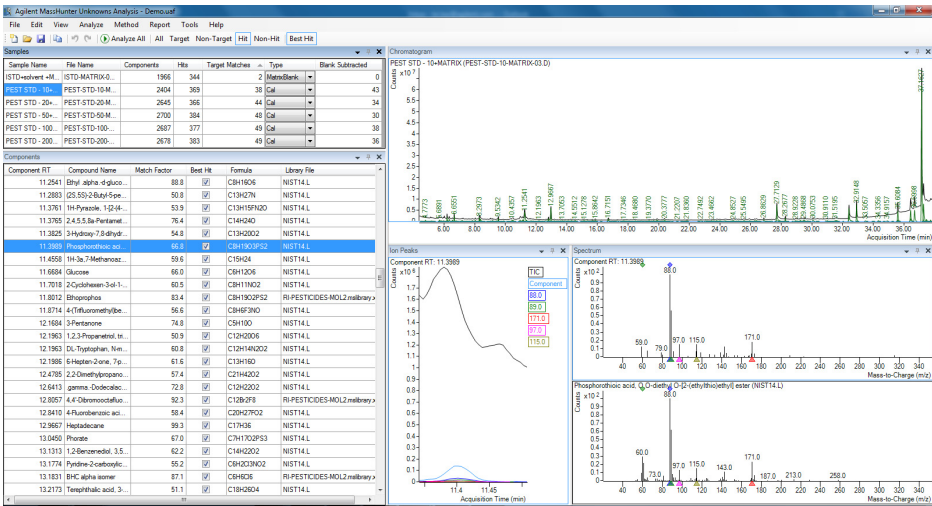
任务2：通过解卷积识别化合物

3. 验证选定的列是否已移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击确定。
4. 在样品窗口中选择 **PEST STD-10+** 基质样品，然后单击工具栏中的匹配，看看组分窗口是否有任何变化。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击**匹配**。



验证最佳匹配项是否来自不同的谱库。

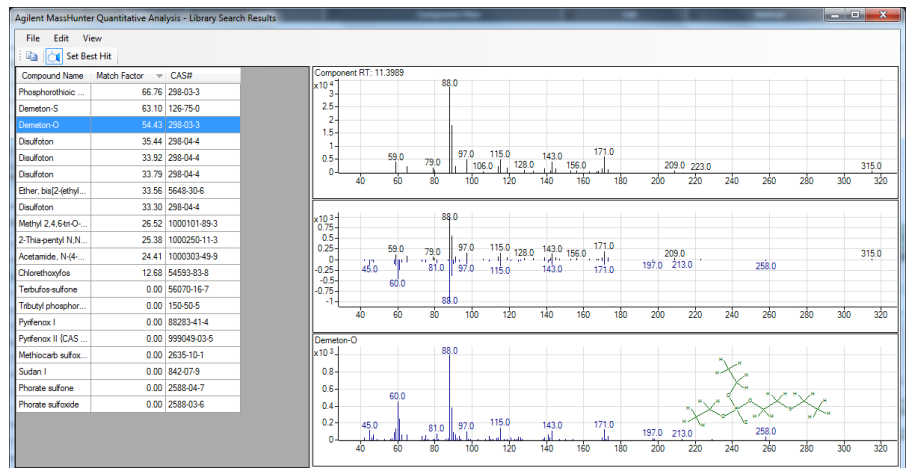


任务2：通过解卷积识别化合物

5. 右键单击化合物窗口中的硫代磷酸，然后选择显示备选匹配项。

组分			
组分 RT	化合物名称	匹配因子	最佳匹配
11.3765	2,4,5,5,8a-Pent...	78.0	☒
11.3825	3-Hydroxy-7,8-d...	61.9	☒
11.3989	Phosphomthiri	73.5	☒
11.4558	1H-3a		
11.4678	Phenc		
11.5422	Diphe		
11.5849	n-Prop		
11.6684	Glucos		
11.7018	2-Cycl		
11.8017	Ethop		
11.8717	3-Trifu		
11.8908	5-Pyrin		
11.9996	Homo		
12.0120	tau-M		

将显示谱库检索结果。

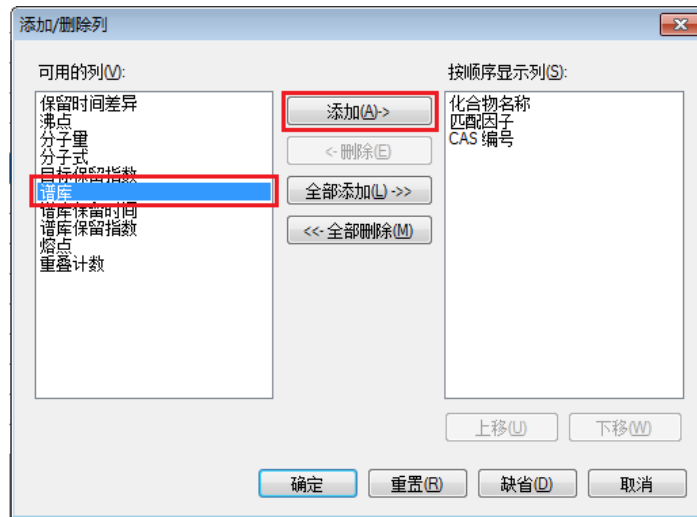


6. 右键单击谱库检索结果窗口中的任何列标题，然后选择添加 / 删除列。

Agilent MassHunter 定量分析 - 谱库检索结果			
最佳匹配比			
文件(F)	编辑(E)	视图(V)	
化合物名称	匹配因子	CAS 编号	组分 RT
Phosphorothioic ...	73.48	298-03-3	
Demeton-S	70.94	126-75-0	

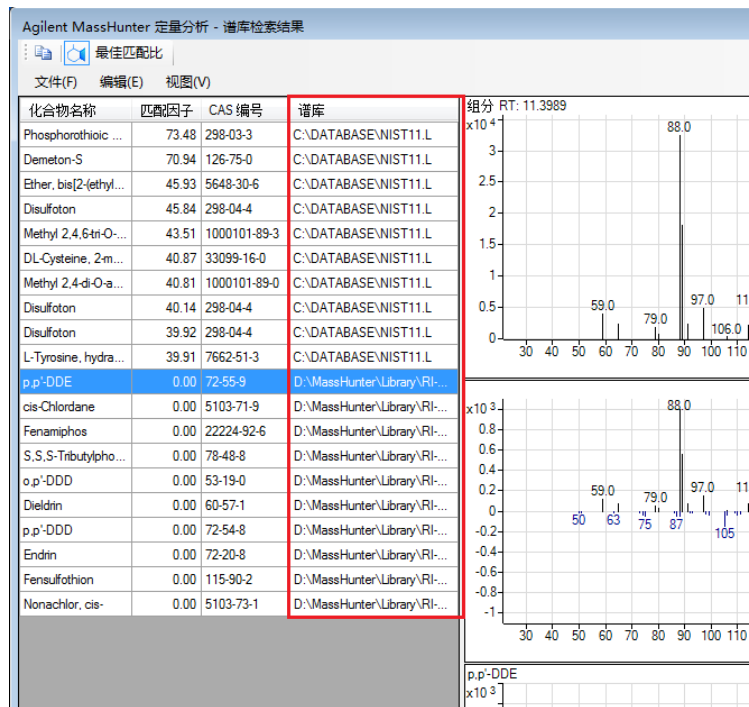
任务2：通过解卷积识别化合物

7. 从可用列列表中选择谱库，然后单击添加。

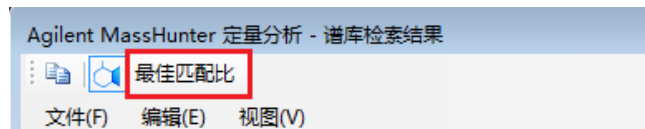


8. 验证选定的列是否已移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击确定。

谱库列将添加到此表中。



9. 选择 Demeton-0，然后单击设置最佳匹配项。



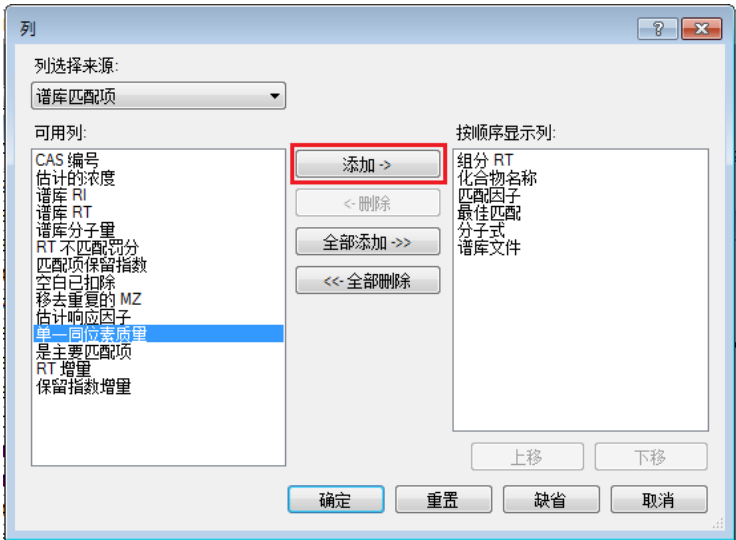
验证选定化合物是否将上一化合物替换为组分表中的当前最佳匹配项。

任务2：通过解卷积识别化合物

组分					
组分 RT	化合物名称	匹配因子	最佳匹配	分子式	谱库文件
11.2888	2-Butyl-5-pentyl...	52.0	☒	C13H27N	NIST11.L
11.3825	3-Hydroxy-7,8-d...	61.9	☒	C13H20O2	NIST11.L
11.3989	Demeton-S	70.9	☒	C8H19O3...	NIST11.L
11.4558	1H-3a,7-Metha...	58.0	☒	C15H24	NIST11.L
11.7018	2-Cyclohexen-3...	63.5	☒	C8H11NO2	NIST11.L
11.8009	Ethoprophos	84.7	☒	C8H19O2...	NIST11.L
11.8717	3-Trifluoromethy...	58.3	☒	C8H6F3NO	NIST11.L
11.8908	5-Pyrimidinol, 2-...	54.5	☒	C6H8N2O5	NIST11.L
12.0120	.tau.-Muurolol	51.9	☒	C15H26O	NIST11.L
12.1692	[1,3]Oxathiolan...	53.4	☒	C9H14O4S	NIST11.L
12.1954	DL-Tryptophan,...	59.2	☒	C12H14N...	NIST11.L
12.4782	2,2-Dimethylpro...	63.7	☒	C21H42O2	NIST11.L
12.5117	Cyclopropane, ...	51.9	☒	C10H20	NIST11.L
12.7925	2,3-Dihydro-5-m...	56.2	☒	C10H12O...	NIST11.L
12.8410	2-Fluorobenzoic...	71.8	☒	C13H8FN...	NIST11.L
12.9120	Sulfotep	72.5	☒	C8H20O5...	RI-PESTICID...
13.0450	Phorate	76.4	☒	C7H17O2...	NIST11.L
13.1774	Pyridine-2-carb...	58.4	☒	C6H2Cl3N...	NIST11.L
13.1831	BHC alpha isomer	87.3	☒	C6H6Cl6	RI-PESTICID...
13.1987	2-Amino-5-(2-m...	55.6	☒	C15H22N4	NIST11.L

检查浓度估计结果

1. 右键单击组分窗口中的任何列标题，然后选择添加 / 删除列。
2. 选择基峰解卷积的面积、估计响应因子、目标乘积因子、估计的浓度和目标计算浓度（从可用列列表中），然后单击添加。



任务 2：通过解卷积识别化合物

- 3. 验证选定的列是否已移动到按顺序显示这些列列表中，然后单击确定。
- 4. 在样品窗口中选择 **PEST STD-200+** 基质样品，然后单击工具栏中的目标，查看组分窗口中是否有任何变化。

Agilent MassHunter 未知物分析 - demo.uaf

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析全部(N) 全部 目标匹配 非目标匹配 匹配 非匹配项 最佳

样品

样品名称	文件名	组分	匹配数	目标匹配	类型	空白已扣除
ISTD+solvent +M...	ISTD-MATRI...	3307	1595	14	基...	0
PEST STD - 10+M...	PEST-STD-1...	3665	1064	196	样品	788
PEST STD - 20+M...	PEST-STD-2...	3727	1160	217	样品	774
PEST STD - 50+M...	PEST-STD-5...	3824	1314	265	样品	695
PEST STD - 100+...	PEST-STD-1...	3804	1301	280	样品	743
PEST STD - 200+...	PEST-STD-2...	3710	1426	307	样品	687

估计的浓度结果将在估计的浓度列中列出。对于目标化合物，您可以与定量计算的浓度进行比较。

使用以下公式计算估计的浓度：

$$EstimatedConcentration = \frac{BasePeakDeconvolutedArea}{RFforEstimation} \times Multiplier$$

组分

组分 RT	化合物名称	匹配因子	基峰解卷积的面积	目标化合物 乘积因子	目标计算浓度	估计的浓度	最
11.4021	Phosphorothiol...	94.9	2721304.4	1.0	142.9	178.5	
11.7973	Ethoprophos	98.6	2129122.9	1.0	80.42	92.27	
12.9031	Sulfotep	97.3	1015154.5	1.0	60.25	72.14	
13.0452	Phorate	97.5	3420580.5	1.0	69.67	91.54	
13.1816	BHC alpha isomer	98.9	1624103.4	1.0	50.15	53.25	
13.7016	Anisole, 2,3,4,5...	98.7	1731347.2	1.0	50.18	49.85	
13.7651	Dimethoate	95.5	2679103.0	1.0	79.82	97.3	
14.3218	BHC beta isomer	98.5	1014024.0	1.0	49.9	54.67	
14.5841	Lindane	97.9	1123973.2	1.0	50.03	54.59	
15.0133	Fonofos	97.4	2705421.8	1.0	60.18	73.58	
15.5881	Diazinon	98.1	2028613.6	1.0	79.21	96.89	
15.6787	Disulfoton	85.7	1203625.2	1.0	61	80.24	
15.6842	.delta.-Lindane	96.2	1201797.5	1.0	50.15	54.25	
17.7267	Methyl parathion	86.4	1539303.6	1.0	71.74	107.8	
17.7336	Chloropyrphos...	91.9	2612062.4	1.0	81.31	102.2	
17.9452	Heptachlor	95.7	598014.1	1.0	50.29	60.66	

任务2：通过解卷积识别化合物

5. 单击工具栏中的非目标以查看非目标的估计浓度。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击非目标。

6. 要保存此分析，请选择文件 > 保存分析。

在 **Quant-My-Way** 用户界面中的主页选项卡上，单击保存分析。



任务 3：生成报告

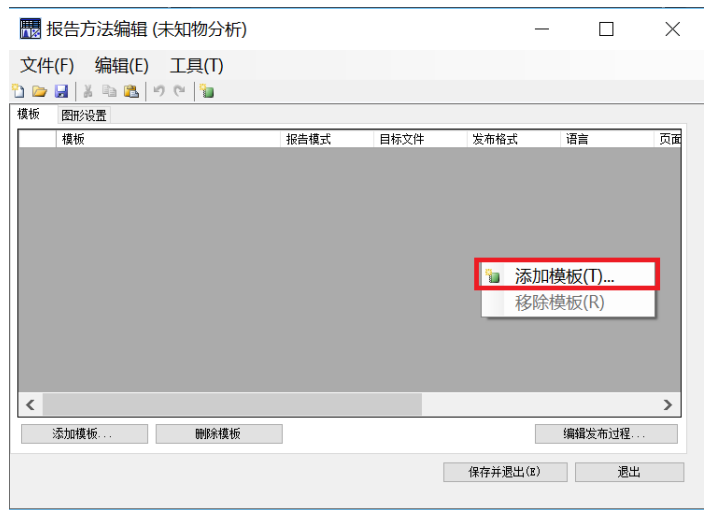
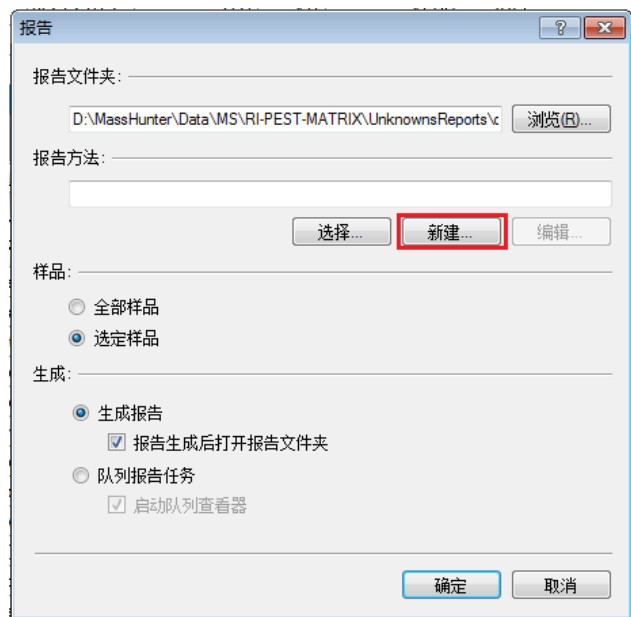
任务 3：生成报告

1. 选择报告 > 生成。

在 Quant-My-Way 用户界面中的主页选项卡上，单击生成报告。

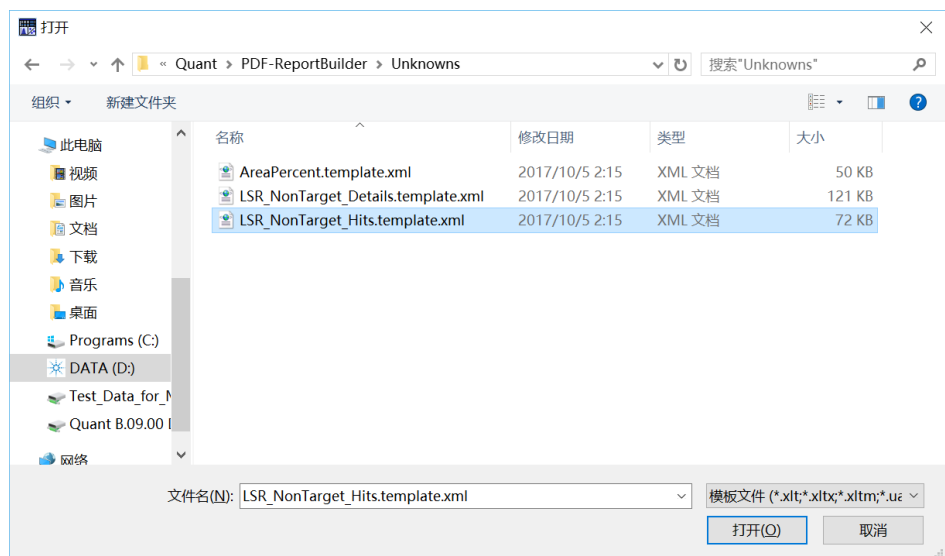
2. 在报告方法下，单击新建。

3. 在此窗口中右键单击，然后选择添加模板。

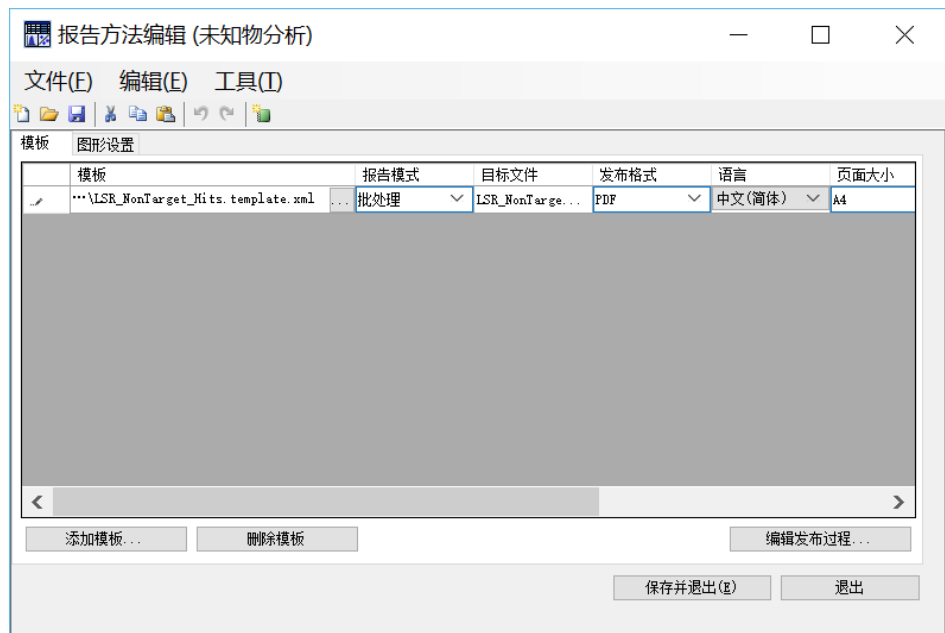


任务 3：生成报告

4. 浏览到 D:\MassHunter\Report Templates\Quant\PDF-Report-BUILDER\Unknowns, 选择 LSR_NonTarget_Hits.template.xml, 然后单击打开。

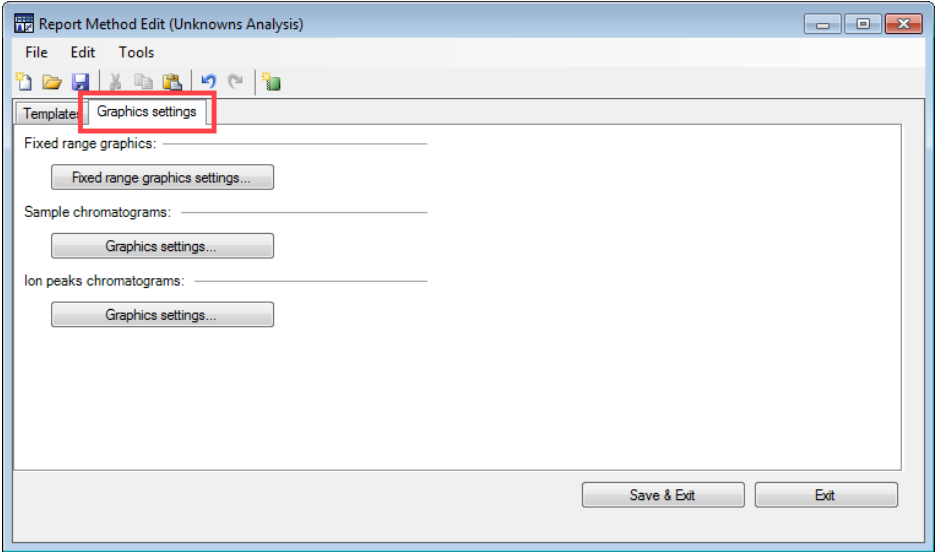


选择模板后, 您可以使用 *PDF*、*TEXT* 和 *CSV* 配置报告发布格式, 使用 *英语*、*中文*、*日语*和*俄语*配置语言, 使用 *A4* 和 *Letter* 配置页面大小和打印机, 并在生成报告后配置是否打开发布的文件。在完成报告任务后, 后处理也可用于进一步处理此报告。



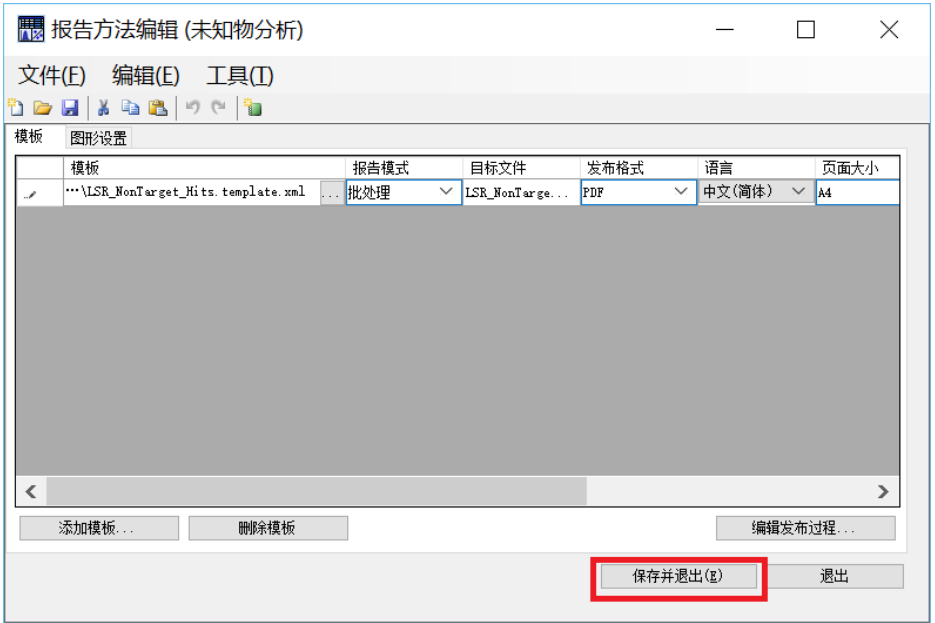
任务 3：生成报告

5. 单击**图形设置**。



- 单击**固定范围图形设置**以限制图形的范围，从而控制在报告中生成的图形的显示方式。
- 单击**样品色谱图**：**图形设置**可调整样品色谱图的外观。
- 单击**离子峰色谱图**：**图形设置**可调整离子峰色谱图的外观。

6. 单击**保存并退出**可将报告方法保存到所需的位置。



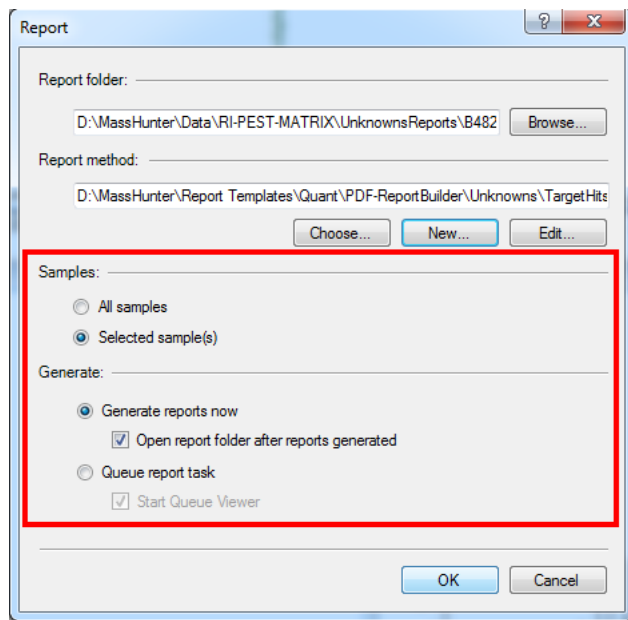
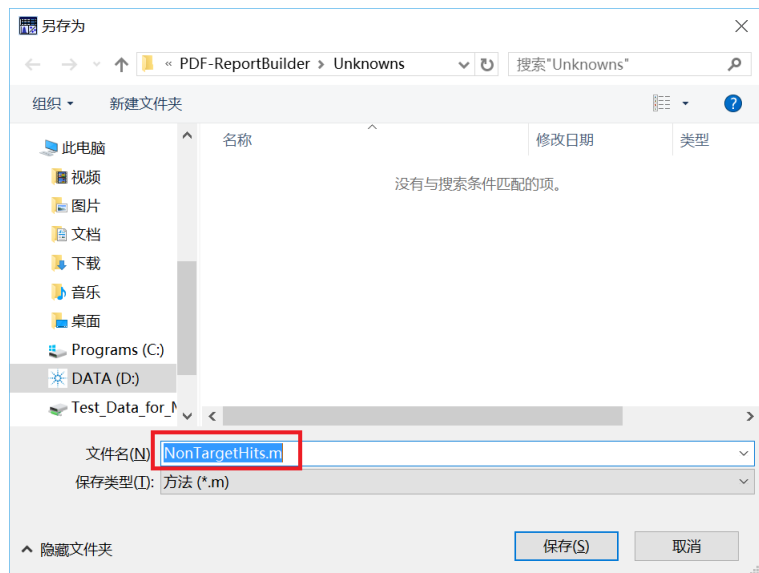
报告方法带有 .m 扩展名。

任务 3：生成报告

7. 对于样品，您可以为**所有样品**或**选定样品**生成报告。

对于报告生成模式，您可以选择**立即生成报告**或**队列报告任务**。

8. 单击**确定**开始生成报告。

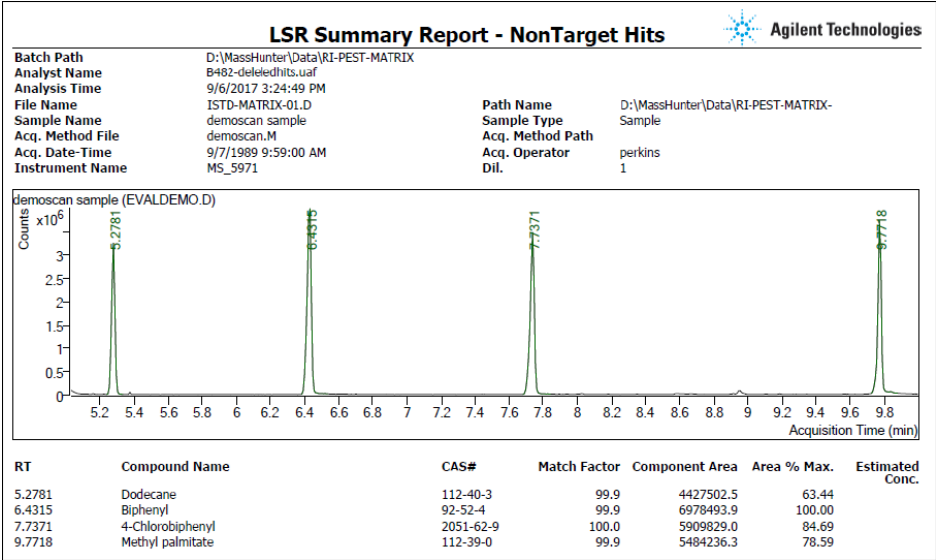


在报告生成完成后，将会自动打开报告文件夹。

此外，您还可以选择**菜单 > 打开报告文件夹**来查看刚生成的报告 **LSR_NonTarget_Hits.pdf**。此报告将在 Adobe Reader 中打开。

任务3：生成报告

- 9. 关闭此报告。
- 10. 要退出此程序，请选择文件 > 退出。



© Agilent Technologies, Inc.

美国印刷，2017 年 9 月



G3335-97243