



Agilent MassHunter Workstation Software

定量分析

Quant 经典版熟悉指南

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2021

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

G3336-97058

版本

第一版，2021 年 11 月

美国印刷

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

担保说明

本档内容按“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。

目录

简介

选择定量分析桌面图标	6
开始进行这些练习之前	6

练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 1. 设置新批处理	8
任务 2. 设置批处理新方法	10
任务 3. 设置目标化合物	13
任务 4. 设置定量	16
任务 5. 设置积分器	22
任务 6. 分析和保存批处理	24

练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理	27
任务 2. 设置批处理新方法	30
任务 3. 设置目标化合物	34
任务 4. 设置定量	35
任务 5. 分析和保存批处理	37

练习 3: 检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果	40
任务 2. 更改结果窗口布局	44
任务 3. 导出和打印结果	50

练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 1. 调整校正曲线拟合	54
任务 2. 无参数积分	56
任务 3. 检测离群值	70

练习 5: 生成定量报告

参考

十大主要功能	82
定量方法	85
无参数积分器	86
批处理概览: 结果	88
化合物概览	89
化合物确认	91
化合物校正	92

简介

选择定量分析桌面图标	6
开始进行这些练习之前	6

选择定量分析桌面图标

定量分析可为**经典**用户界面和 **Quant-My-Way** 用户界面提供桌面图标。“经典”用户界面的外观类似于定量分析中提供的用户界面，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。

根据您安装的定量分析程序的方式，您可能发现桌面上有几个不同的图标，每个代表不同的仪器类型。在从这些图标启动定量分析程序时，系统将针对选定的仪器类型对缺省值和一些功能进行自定义。

单击这些图标中的任何一个时，将显示所安装程序的完整名称。确保您选择的图标与您要分析的数据类型一致。

本熟悉指南沿用的是**经典**用户界面。

开始进行这些练习之前

确保完成本文档的练习后，您将要使用的数据文件都在您的 PC 中。

- 如果已完成缺省的 MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental 安装，那么这些练习所需的数据文件应出现在 **MassHunter/Data/QuantExamples** 中。
- 如果未完成缺省的 MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental 安装，则可以将安装介质中的数据 (**Supplemental/MassHunter/Data/QuantExamples**) 复制到您 PC 上的任何位置。

练习 1：设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 1. 设置新批处理	8
任务 2. 设置批处理新方法	10
任务 3. 设置目标化合物	13
任务 4. 设置定量	16
任务 5. 设置积分器	22
任务 6. 分析和保存批处理	24

在本练习中，您将为一批采集的数据文件设置定量方法。您将通过 **DrugsOfAbuse** 数据文件（请参见“[开始进行这些练习之前](#)”（第 6 页））进行该练习，并了解如何执行下列任务：


- 设置批处理表，包含滥用药物（即安非他明、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA）的未知样品和校正数据文件。
- 根据最高浓度校正标样设置新定量方法。
- 设置目标化合物。
 - 查看数据文件中化合物的 MRM 离子对和色谱图参数。
 - 设置每个化合物的内标。
- 设置方法的定量步骤。
 - 创建校正样品的级别。
 - 设置定性离子和校正曲线。
- 定量批处理并保存结果。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 1. 设置新批处理

任务 1. 设置新批处理

在此任务中，您将设置一个批处理表，其中包含三个未知样品以及几个滥用药物（苯丙胺、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA）校正样品的数据文件。

1 单击桌面上的**定量分析 (QQQ)** 图标以启动“定量分析”程序。

如果是首次使用该程序，则会显示缺省布局，如图 1 所示。

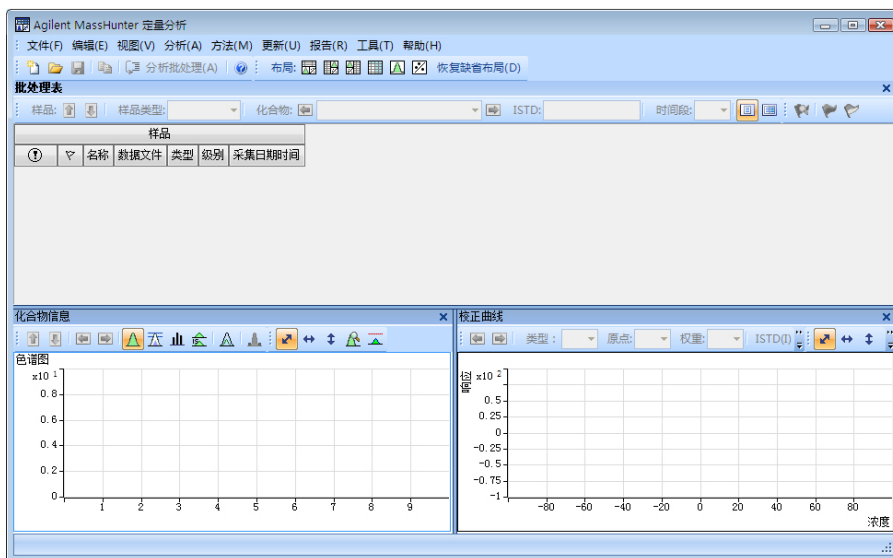


图 1. 缺省布局

也可以通过单击开始菜单中的**程序 > Agilent > MassHunter Workstation > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。

在处理 QQQ 数据时可使用不同功能。

如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再创建新批处理。

恢复缺省布局(D)

- 2 单击**文件 > 新建批处理**。系统将打开新建批处理对话框。
- 3 浏览至文件夹 **\您的目录\DrugsOfAbuse**。
- 4 输入批处理文件名 **iii_Test_01**，然后单击**创建**。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 1. 设置新批处理

5 应选择所有样品。单击**确定**将这些样品添加到批处理。

批处理表不再为空。现在它包含校正、QC 和未知样品。请参见图 2。



请注意，只有三个文件是未知样品，一个是空白，五个是不同校正级别的校正文件，另外两个是 QC 样品。

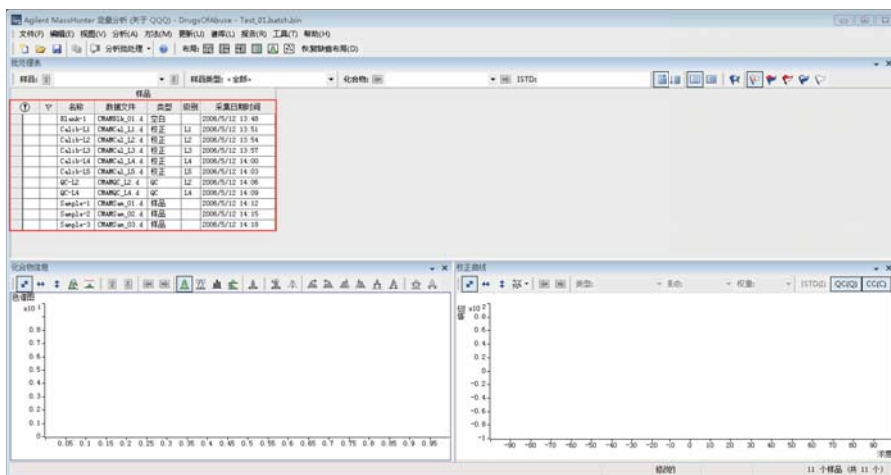


图 2. 在定量以前的包含滥用药物样品的批处理表

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

任务 2. 设置批处理新方法

此任务说明如何根据最高浓度样品的校正数据文件设置新定量方法。

- 1 使用光标选中具有最高浓度级别的校正标样，如下图所示。

使用具有化合物强信号的样品，如高浓度校正样品，让程序创建具有适当的保留时间和定性离子比的方法。



The screenshot shows the 'Batch Processing Table' (批处理表) in Agilent MassHunter. The table lists various samples with their names, data files, types, and levels. The 'Calib-L5' sample is highlighted with a red border, indicating it is the selected sample for the task.

样品					
名称	数据文件	类型	级别		
Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		200	
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	200	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	200	
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	200	
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	200	
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	200	
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	200	
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	200	
Sample-1	CMAMSam_01.d	样品		200	
Sample-2	CMAMSam_02.d	样品		200	
Sample-3	CMAMSam_03.d	样品		200	
Sample-added	CMAMSam_added.d	样品		200	

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

2 单击方法 > 编辑切换到方法编辑模式。

方法任务显示在视图左侧的列中, 如图 3 所示。

请注意, 图 3 显示方法编辑的缺省布局。

如果未显示缺省布局, 请单击工具栏中的恢复缺省布局, 然后在下一步创建新方法。

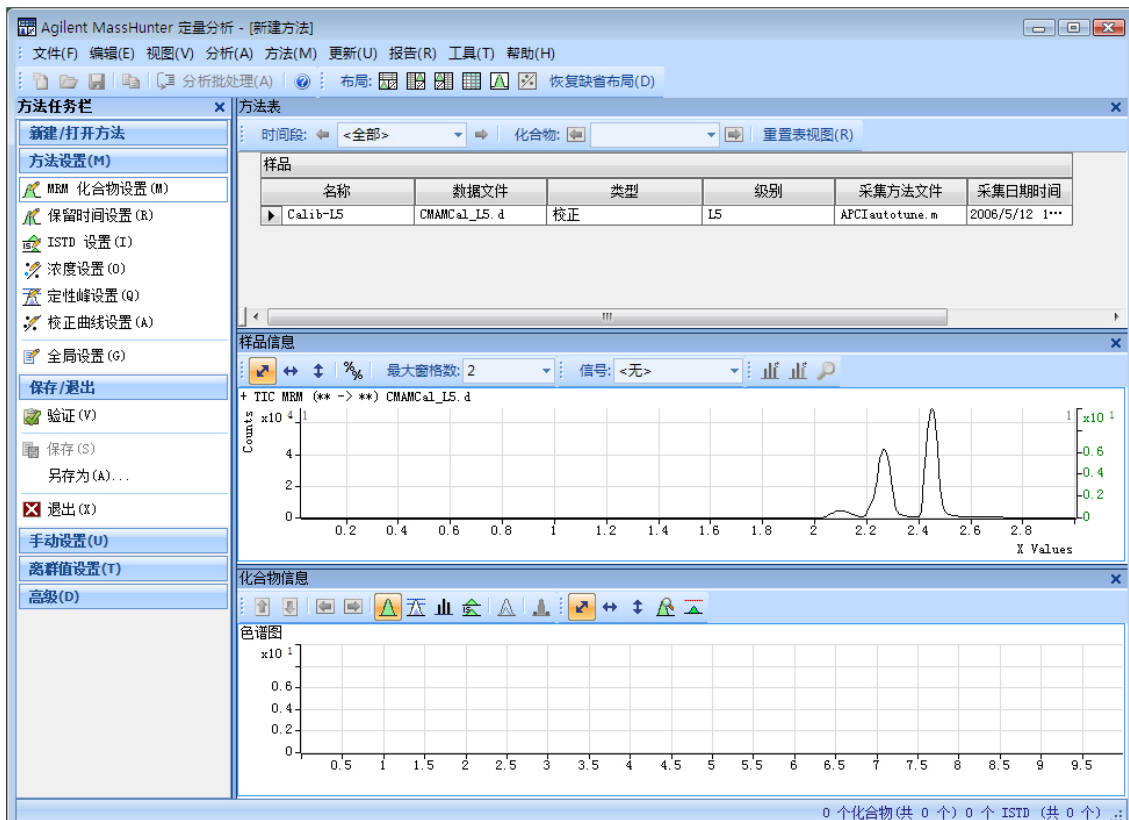


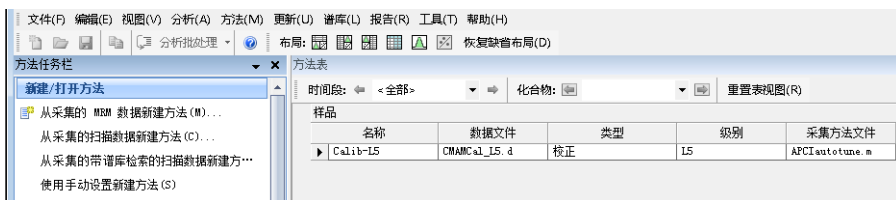
图 3. 方法编辑模式

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

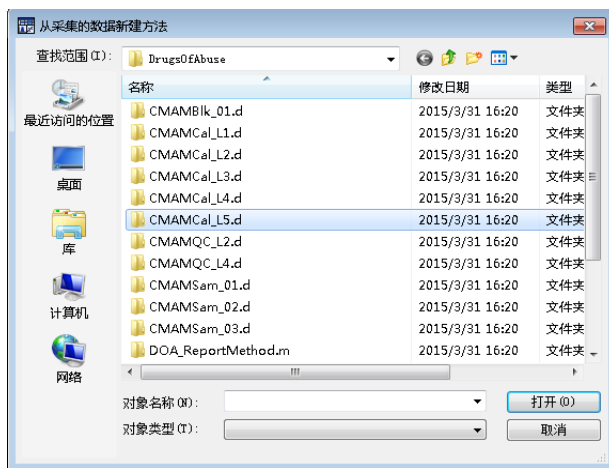
- 3 在方法表左侧的侧栏中的方法任务下方，单击**新建 / 打开方法 > 从采集的 MRM 数据新建方法**。

也可以单击**方法 > 新建 > 从采集的 MRM 数据新建方法**。



- 4 在显示**是否将此方法应用于批处理?**提示时选择**否**。系统将显示**从采集的数据新建方法对话框**。

- 5 单击 **CMAMCa_L5.d** 并单击**打开**，以导入采集方法信息。



2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 3. 设置目标化合物

任务 3. 设置目标化合物

通过此任务，您可以学习检查新定量方法的 MRM 离子对以及保留时间数据，并针对单个目标化合物进行更改。还可以学习为每个目标化合物设置 ISTD 化合物。

- 1 在方法表窗口左侧的侧栏中的方法任务下方，单击方法设置任务 > MRM 化合物设置。

与 MRM 离子对关联的化合物名称将输入到采集方法中。缺省情况下，选择最大信号作为定量离子。



The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window is titled "Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]". The "方法表" (Method Table) window is open, showing the "MRM 化合物设置 (M)" (MRM Compound Settings) task selected in the left sidebar. The "化合物" (Compound) dropdown is set to "Meth-d5". The "级别数" (Level Count) is set to 10. The "样品" (Sample) table shows a single entry for "Calib-L5" with data file "CMAMCal_L5.d" and type "校正". The "定量化合物" (Quantification Compound) table lists several compounds with their retention times, transitions, and MRM parameters.

名称	TS	转换	全扫描	类型	前级离子	产物离子
Amp	1 136.2 -> 91.4	MRM	目标		136.2	
Amp-d5	1 141.1 -> 93.4	MRM	ISTD		141.1	
Cocaine	1 304.1 -> 182.0	MRM	目标		304.1	
Cocaine-d3	1 307.1 -> 185.0	MRM	ISTD		307.1	
MDMA	1 194.2 -> 163.3	MRM	目标		194.2	
MDMA-d5	1 199.2 -> 164.3	MRM	ISTD		199.2	
Meth	1 150.1 -> 119.3	MRM	目标		150.1	
Meth-d5	1 155.2 -> 92.3	MRM	ISTD		155.2	

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 3. 设置目标化合物

2 要检查导入的保留时间数据, 请单击方法设置任务 > 保留时间设置。

您可以修改单个化合物的蓝色数据字段。



Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

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

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏

新建/打开方法
方法设置(M)
MRM 化合物设置(M)
保留时间设置(R)
ISTD 设置(I)
浓度设置(O)
定性峰设置(Q)
校正曲线设置(A)
全局设置(G)
保存/退出
验证(V)
保存(S)
另存为(A)...

方法表

时间段: <全部> 化合物: Meth-d5 重置视图(R)

级别名称前缀: L 级别数: 5 创建级别(C)

样品					
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Calib-L5	CMAMCa1_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1...

定量化合物								
名称	TS	转换	全扫描	类型	RT	左侧 RT 变化量	右侧 RT 变化量	RT 变化量单位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	2.101	1.000	1.000	分钟
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	2.076	1.000	1.000	分钟
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	2.448	1.000	1.000	分钟
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	2.448	1.000	1.000	分钟
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标	2.271	1.000	1.000	分钟
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	2.268	1.000	1.000	分钟
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	目标	2.237	1.000	1.000	分钟
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	2.231	1.000	1.000	分钟

3 将相应的氘代化合物指定为每个目标化合物的内标物 (ISTD)。

a 单击方法设置任务 > ISTD 设置。

b 对于每个目标化合物行, 单击 ISTD 化合物名称单元格中的向下箭头。不要尝试将 ISTD 名称输入到 ISTD 化合物行中。



Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

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

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏

新建/打开方法
方法设置(M)
MRM 化合物设置(M)
保留时间设置(R)
ISTD 设置(I)
浓度设置(O)
定性峰设置(Q)
校正曲线设置(A)
全局设置(G)
保存/退出

方法表

时间段: <全部> 化合物: Amp 重置视图(R)

级别名称前缀: 级别数: 10 创建级别(C)

样品				
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件
Calib-L5	CMAMCa1_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m

定量化合物						
名称	TS	转换	全扫描	类型	ISTD 化合物名称	ISTD 标记
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	Amp-d5	<input type="checkbox"/>
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	Cocaine-d3	<input type="checkbox"/>
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 3. 设置目标化合物

- c 单击与目标化合物关联的 ISTD 名称。
- d 输入每个 ISTD 化合物的 ISTD 浓度 (ISTD 浓度) (此例中为 50.0000)。

The screenshot shows the 'Method Table' (方法表) window in Agilent MassHunter. The window title is 'Agilent MassHunter 定量分析 - (新建方法)'. The '化合物' (Compound) dropdown is set to 'Amp'. The '级别名称前缀' (Level Name Prefix) is empty, and the '级别数' (Level Number) is 10. The '样品' (Sample) table shows a single entry: 'Calib-L5' with data file 'CMAMCal_L5.d', type '校正', level 'L5', acquisition method 'APCIautotune.m', and acquisition date '2006/5/12 1...'. Below this is the '定量化合物' (Quantification Compound) table, which lists several compounds with their ISTD concentrations highlighted in red:

名称	TS	转换	全扫描	类型	ISTD 化合物名称	ISTD 标记	ISTD 浓度	时间参比标记
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	Amp-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	Cocaine-d3	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标	MDMA-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	目标	Meth-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<无>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>

The status bar at the bottom indicates '4 个化合物 (共 4 个) 4 个 ISTD (共 4 个)'.

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 4. 设置定量

任务 4. 设置定量

此任务说明如何为方法设置定量参数:

- 校正级别
- 定性离子
- 校正曲线拟合

1 在主菜单中选择方法 > 从校正样品创建级别。

校正表在方法表中每个定量离子下方打开。

2 对于其中一个定量离子，将缺省浓度更改为每个级别的实际浓度。

- L1-2.5000
- L2-5.0000
- L3-12.5000
- L4-25.0000
- L5-125.0000

The screenshot shows the '定量离子' (Quantitative Ions) table in the software. The table has columns for Name, TS, Ion Pair, Scan, Type, Dilution Concentration, Dilution Method, and Unit. Two ions are listed: Amp and Cocaine. Below each ion, a calibration table is shown with columns for Level (L1-L5) and Concentration (2.5000, 5.0000, 12.5000, 25.0000, 125.0000).

定量离子							
名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标化合物	125.0000	1.5:2:2.5:2	ng/ml
校正							
级别	浓度						
L1	2.5000						
L2	5.0000						
L3	12.5000						
L5	125.0000						
定量离子							
名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			ng/ml
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标化合物			ng/ml
校正							
级别	浓度						
L1	2.5000						
L2	5.0000						
L3	12.5000						
L4	25.0000						
L5	125.0000						

3 单击方法 > 复制校正级别到 ...。

系统将显示复制校正级别对话框。

4 单击全选，然后单击确定。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件
任务 4. 设置定量



- 5 关闭定量分析主视图下半部分中的化合物信息窗口和样品信息窗口。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 4. 设置定量

- 6 浏览方法表，比较四个目标化合物（即安非他明、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA）的校正浓度设置。

已将该设置复制到可卡因、MDMA 和甲基丙胺。

名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标化合物	125.0000	1:5:2:2:5:2	ng/ml

名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			ng/ml
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标化合物			ng/ml

名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD			ng/ml
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标化合物	125.0000	1:5:2:2:5:2	ng/ml

名称	TS	离子对	扫描	类型	稀释高浓度	稀释方式	单位
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD			ng/ml

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 4. 设置定量

- 7 在方法设置任务下，单击定性离子设置，然后检查定性离子设置参数。

当系统导入 MRM 采集信息时，将自动填充定性离子设置参数。

在创建方法的过程中，除了化合物的定量离子外，还将其他 MRM 离子对指定为定性离子。

The screenshot displays the 'Method Table' (方法表) in Agilent MassHunter. The 'Qualitative Peaks' (定性峰) section is highlighted with a red box. The table shows the following data:

名称	TS	转换	全扫描	类型	前级离子	产物离子	不确定度
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	136.2	91.4	相对值
定性峰							
前级离子	产物离子	转换	相对响应	不确定度	面积加和		
136.2	119.4	136.2 -> 119.4	26.6	20.0	<input type="checkbox"/>		

Below this, another transition is shown:

名称	TS	转换	全扫描	类型	前级离子	产物离子	不确定度
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	相对值
定性峰							
前级离子	产物离子	转换	相对响应	不确定度	面积加和		
141.1	124.4	141.1 -> 124.4	26.5	20.0	<input type="checkbox"/>		

- 8 在方法设置任务下，单击校正曲线设置。

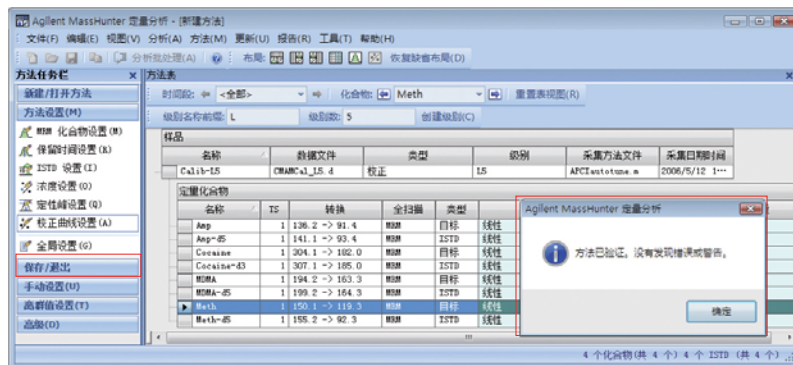
2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 4. 设置定量

9 对于每个目标化合物，将 CF 原点更改为强制。



10 在“保存/退出”下，单击“验证”以验证方法设置。您可以在屏幕底部查看发生的任何验证错误。



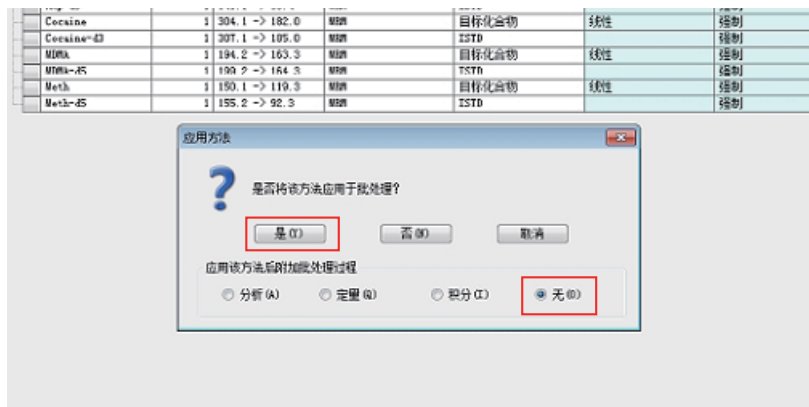
11 显示验证消息后，单击确定。

12 单击保存/退出 > 退出。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 4. 设置定量

- 13 在应用该方法后附加批处理过程下选择无，并且在显示是否将此方法应用于批处理？提示时单击是。



2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 5. 设置积分器

任务 5. 设置积分器

步骤 1 将缺省积分器更改为 MS-MS

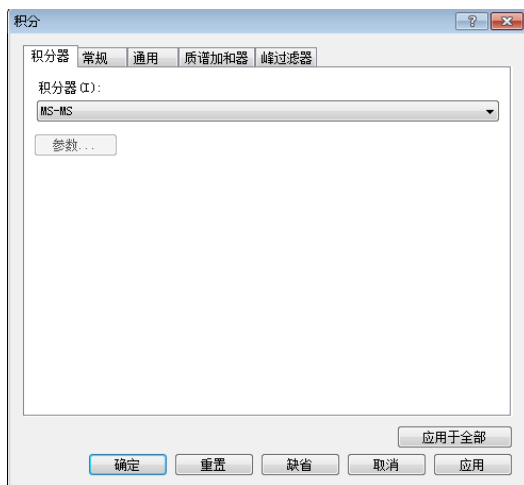
MassHunter 定量分析的缺省积分器以及 Agilent 建议使用的积分器为 Agile2 无参数积分器。此任务会将缺省 Agile2 积分器更改为 MS-MS 积分器，以演示在定量方法中为所有化合物更改积分器的步骤。

- 1 单击方法 > 编辑或按 F10。
- 2 单击方法 > 高级任务 > 积分参数设置。
- 3 在方法表中，单击位于积分器值右侧的框。

The screenshot shows the 'Method Table' (方法表) window in MassHunter. The window title is '方法表' and it contains a table with columns for '名称' (Name), '数据文件' (Data File), '类型' (Type), '级别' (Level), '采集方法文件' (Acquisition Method File), and '采集日期时间' (Acquisition Date/Time). The table lists a method named 'CAL1-L5' with data file 'CHMCKJ_L5_4', type '校正' (Correction), level 'L5', and acquisition method file 'APC1autotune.m'. Below the table, there are sections for '定量化合物' (Quantification Compound) and '定性峰' (Qualitative Peak). The '定量化合物' section has columns for '名称' (Name), 'TS' (Retention Time), '转换' (Transition), '全扫描' (Full Scan), '类型' (Type), '前级离子' (Precursor Ion), '产物离子' (Product Ion), and '不确定度' (Uncertainty). The '定性峰' section has columns for '前级离子' (Precursor Ion), '产物离子' (Product Ion), '转换' (Transition), '相对响应' (Relative Response), '不确定度' (Uncertainty), and '面积加和' (Area Sum). The 'Integrator' column is highlighted, indicating the step to click on the box next to the value.

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件
任务 5. 设置积分器

4 从下拉菜单选择 MS-MS。



5 单击全部适用。

6 单击确定。

7 在保存 / 退出下，单击退出。


8 在应用该方法后附加批处理过程下选择无，并且在显示是否将此方法应用于批处理？提示时单击是。

2 练习 1: 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 6. 分析和保存批处理

任务 6. 分析和保存批处理

在本练习中，您将定量批处理，然后保存结果。

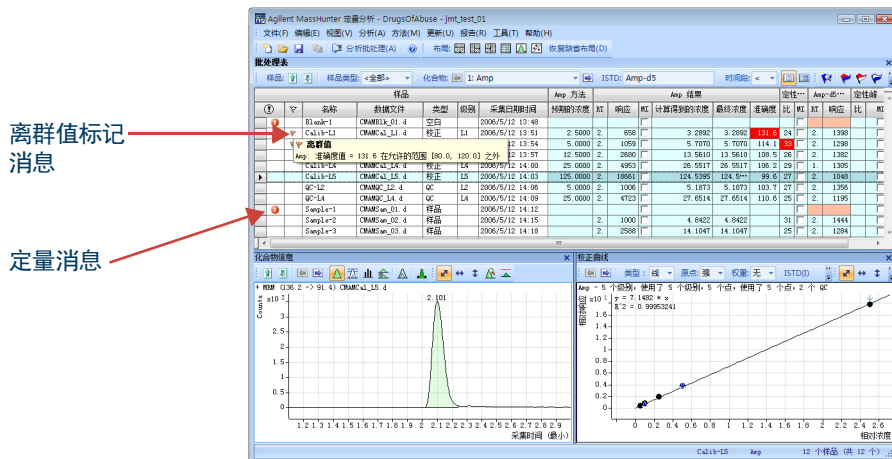
1 单击工具栏中的**分析批处理**图标  开始批处理分析。

2 使光标经过样品 1 的定量消息。

3 使光标经过前两个校正标样的标记。

请注意，两个校正标样包含离群值数据。

请注意，程序在样品 -1 中未找到安非他明 (Amp) 的数据。



4 单击文件 > 保存批处理。

5 单击文件 > 关闭批处理以关闭批处理。

练习 2：设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理	27
任务 2. 设置批处理新方法	30
任务 3. 设置目标化合物	34
任务 4. 设置定量	35
任务 5. 分析和保存批处理	37

在本练习中，您将为一批采集的 Q-TOF 数据文件设置定量方法。您将通过安装介质上的 **LC-QTOF Pesticide** 数据文件进行该练习，并了解如何执行下列任务：

- 设置一个批处理表，其中包含该溶剂的样品和校正数据文件。
- 根据最高浓度校正标样设置新定量方法。
- 设置目标化合物。
 - 查看数据文件中该溶剂化合物的产物离子和色谱图参数。
- 设置方法的定量步骤。
 - 创建校正样品的级别。
 - 设置定性离子和校正曲线。
- 定量批处理并保存结果。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

开始操作之前 ...


确保将 **LC-QTOF Pesticide** 文件夹从安装介质上的 **Supplemental/Data/Quant Examples/Q-TOF** 文件夹复制到您系统上的文件夹中。如果已完成缺省的 MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental 安装, 那么这些练习所需的数据文件应出现在 **MassHunter/Data/QuantExamples** 中。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理

任务 1. 设置新批处理

在此任务中，您将设置一个批处理表，其中包含该溶剂的校正样品的数据文件。本部分中的许多任务与练习 1 中的任务相似。

- 1 要启动定量分析程序，请单击桌面上的定量分析 (Q-TOF) 图标 。如果是首次使用该程序，则会显示缺省布局，如图 4 所示。

也可以通过单击“开始”菜单中的程序 > Agilent > MassHunter Workstation > 定量分析 (Q-TOF) 来访问该程序。

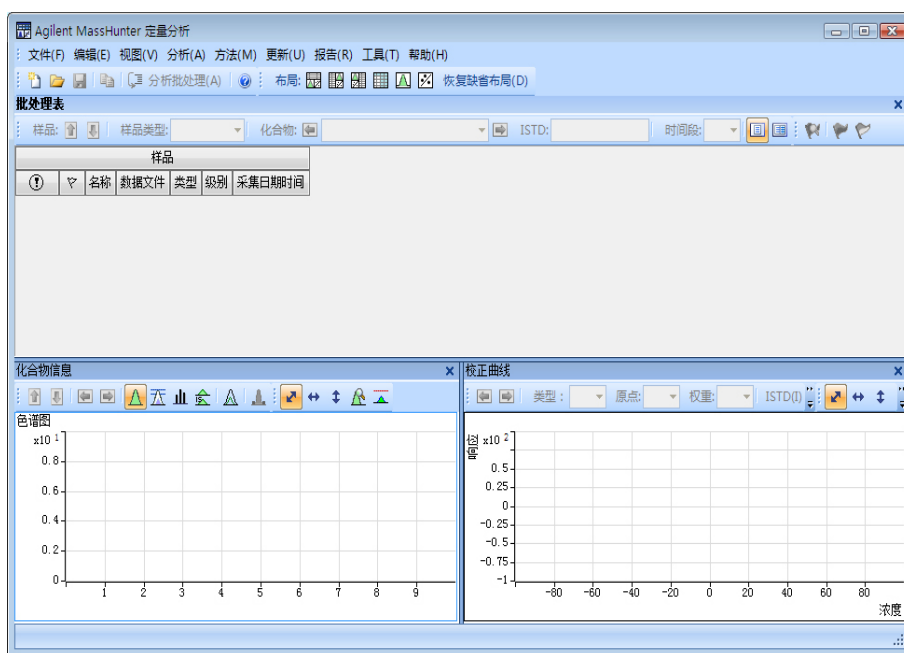


图 4. 缺省布局

- 2 单击文件 > 新建批处理。
系统将打开新建批处理对话框。
- 3 浏览至文件夹 \您的目录 \LC-QTOF Pesticide\。
- 4 输入批处理文件名 *iii_Test_01*，然后单击创建。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理

如果未显示缺省布局, 请单击工具栏中的恢复缺省布局, 然后再创建新批处理。

系统将显示添加样品对话框。应选择所有样品。

5 单击确定将这些样品添加到批处理。

批处理表不再为空。现在它包含样品。请参见图 5 (第 29 页)。

- 请注意, 有四个校正样品。



3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理

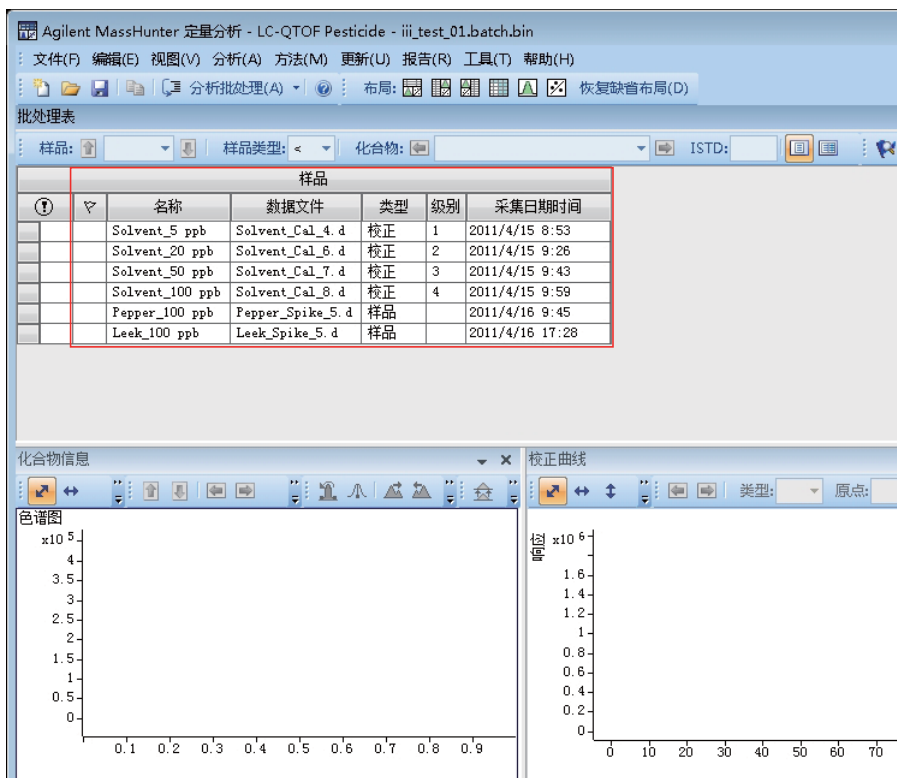


图 5. 定量之前包含样品的批处理表

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

任务 2. 设置批处理新方法

此任务说明如何根据含有校正样品数据文件的批处理设置新定量方法。在此任务中，我们将使用一个校正样品，并从中提取必要的信息，以便将校正化合物添加到方法中。

任务 2 中所述的步骤为手动步骤。此外，MassHunter 中也提供了一个自动步骤，借助此步骤，您可以创建一个定量方法，用来使用采集的扫描数据及库搜索功能，在单个步骤中添加大量校正化合物。在自动方法中，MassHunter 会分析数据文件，并使用指定的搜索 ID 参数，确定化合物名称、目标离子、定性离子和保留时间。接着，该方法使用此信息及其他缺省参数填充定量方法的初始值。此自动方法将极大缩短方法创建所需的时间。

此外，您也可使用 CEF 文件，将数据从定性传送到定量，从而添加在定性数据分析中发现的化合物。有关详细信息，请参考联机帮助。

1 使用光标选中具有最高浓度级别的校正标样，如下图所示。

使用具有化合物强信号的样品，如高浓度校正样品，让程序创建具有适当的保留时间和定性离子比的方法。

批处理表

样品: Solv... 样品类型: < 化合物:

样品						
?	▼	名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间
		Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4. d	校正	1	2011/4/15 8:53
		Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6. d	校正	2	2011/4/15 9:26
		Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7. d	校正	3	2011/4/15 9:43
▶		Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8. d	校正	4	2011/4/15 9:59
		Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5. d	样品		2011/4/16 9:45
		Leek_100 ppb	Leek_Spike_5. d	样品		2011/4/16 17:28

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

- 2 单击方法 > 编辑切换到方法编辑模式。
方法任务显示在视图左侧的列中, 如图 6 (第 31 页) 所示。
请注意, 图 6 显示方法编辑的缺省布局。
- 3 如果未显示缺省布局, 请单击工具栏中的恢复缺省布局, 然后在下一步创建新方法。

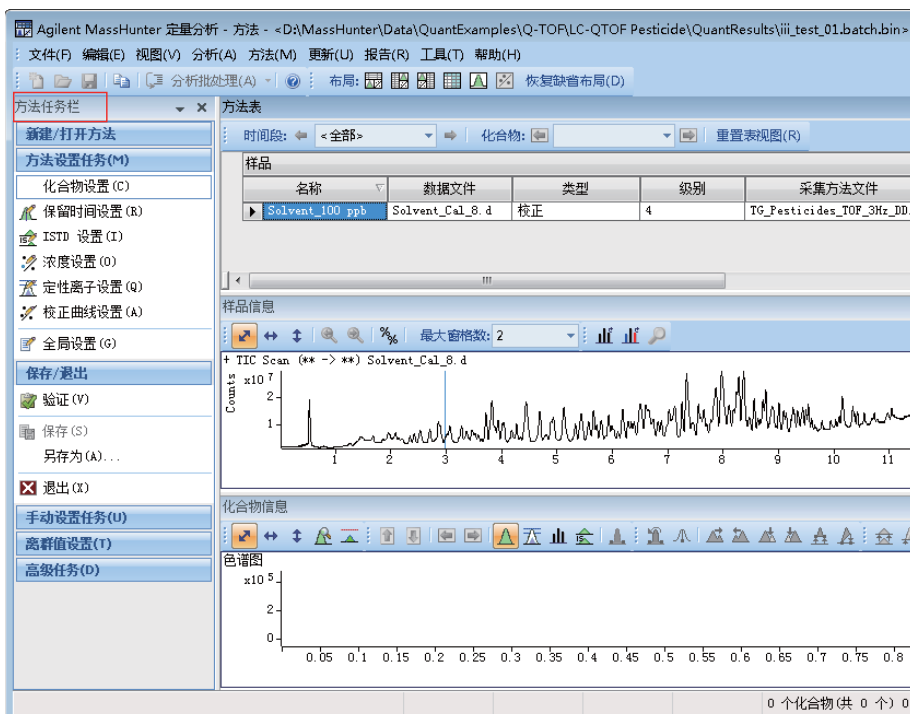


图 6. 方法编辑模式

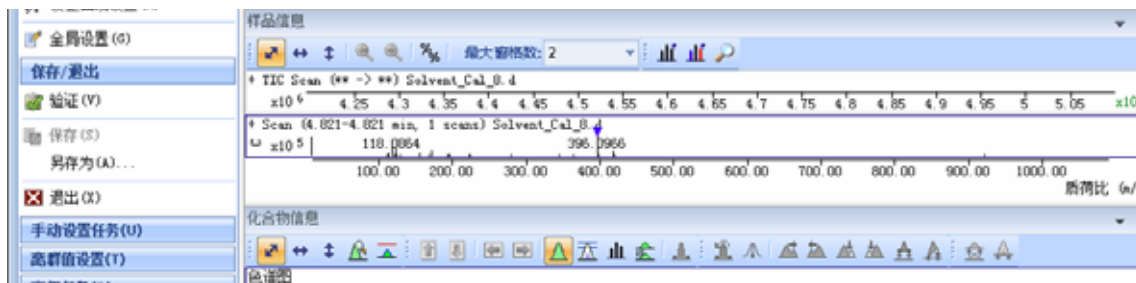
- 4 在样品信息窗口中, 单击 X 轴上约 4.82 处的色谱峰的中部。右键单击并单击提取质谱图。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

- 5 单击最大的离子 **396.0966**。右键单击该位置，然后单击**新建化合物**。

为正确选择图标，将鼠标悬停在质谱图上时按住鼠标右键，放大您正选择的图标周围范围。



- 6 在方法表中输入**苯磺隆**作为**名称**。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。
- 7 要再次显示**苯磺隆**的质谱图，请单击峰顶点以显示通过顶点的线。
- 8 单击 **418.0776** 选择该离子（蓝色实心三角形）。右键单击该位置，然后单击**新建定性离子**。

您可以选择多个定性离子。

蓝色三角形表示在质谱图中选定的 m/z 。
该定性离子即添加至方法表，如图所示。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 2. 设置批处理新方法

The screenshot displays the Agilent MassHunter software interface for method setup and data analysis. The main window is titled "Agilent MassHunter 定量分析 (关于 QTOF) - 方法 - <D:\quant data\SupplementalData\QuantExamples\Q-TOF\LC-QTOF Pesticide\QuantResults\iii_test_01_batch.bin>".

方法表 (Method Table):

名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8_d	校正	4	TG_Pesticides_T...	2011/4/15 9...

定量离子 (Quantitative Ion Table):

名称	TS	离子对	扫描	类型	前级离子	产物离子	不确定度
TriBenuron:meth	1	396.0960	扫描	目标化合物	0.0000	396.0960	相对值

定性离子 (Qualitative Ion Table):

前级离子	产物离子	离子对	相对响应	不确定度	峰面积和
0.0000	419.0022	419.0022	0.71	20.0	

样品信息 (Sample Information):

MS: 扫描 信号: <无> 最大增益: 2

TIC Scan Solvent_Cal_8_d: Total Ion Chromatogram showing counts vs. 采集时间 (min) from 0.5 to 12.5. The y-axis is scaled by $\times 10^7$.

Scan (4.802-4.802 min, 1 scans) Solvent_Cal_8_d: Mass spectrum showing relative intensity vs. 质荷比 (m/z) from 100.00 to 1000.00. Key peaks are labeled at m/z 118.0864, 171.1491, and 396.0968.

化合物信息 (Compound Information):

EIC (396.0960) Scan Solvent_Cal_8_d: Extracted Ion Chromatogram showing a single peak at 4.812 min. The y-axis is scaled by $\times 10^6$.

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 3. 设置目标化合物

任务 3. 设置目标化合物

通过此任务，您可以学习检查新定量方法的产物离子以及保留时间数据，并针对单个目标化合物进行更改。检查在样品信息窗口中为产物离子创建的新定量方法。

- 1 要检查从质谱图设置的保留时间，请单击方法设置任务 > 保留时间设置。
- 2 在左侧 RT 变化量列中，输入 0.2。
- 3 在右侧 RT 变化量列中，输入 0.2。

您可以修改单个化合物的蓝色数据字段。

方法表

时间段: <全部> 化合物: Tribenuron-... 重置视图(R)

样品					
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	校正	4	TG_Pesticides_T...	2011/4/15 9...

定量离子								
名称	TS	离子对	扫描	类型	RT	左侧 RT 变化量	右侧 RT 变化量	RT 变化量单位
Tribenuron-methyl	1	396.0966	扫描	目标化合物	4.813	0.200	0.200	min

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 4. 设置定量

任务 4. 设置定量

此任务说明如何为方法设置定量参数:

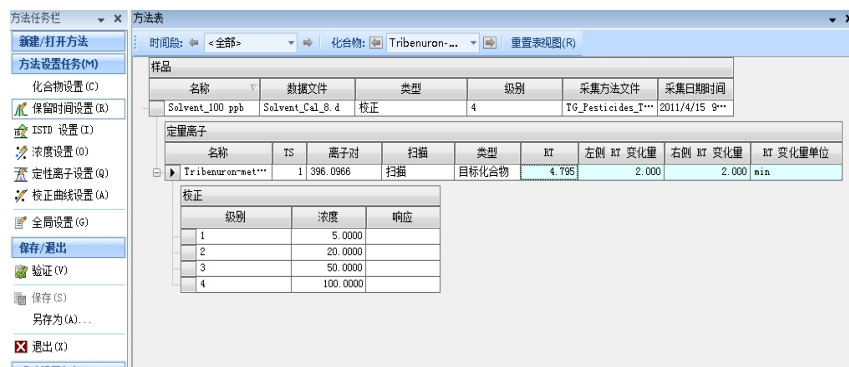
- 校正级别
- 定性离子
- 校正曲线拟合

1 在主菜单中选择
方法 > 从校正样品创建级别。

校正表在方法表中每个定量离子下方打开。

2 对于其中一个定量离子, 将缺省浓度更改为每个级别的实际浓度。

- L1-2.5000
- L2-20.0000
- L3-50.0000
- L4-100.0000



方法任务栏 方法表

新建/打开方法
方法设置任务(M)

化合物设置(C)
保留时间设置(R)
或 ISTD 设置(I)
浓度设置(O)
定性离子设置(Q)
校正曲线设置(A)
全局设置(G)
保存/退出
验证(V)
保存(S)
另存为(A)...
退出(X)

时间段: <全部> 化合物: Tribenuron-... 重置视图(R)

样品						
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间	
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	校正	4	TG_Pesticides_I...	2011/4/15	...

定量离子

名称	TS	离子对	扫描	类型	RT	左侧 RT 变化量	右侧 RT 变化量	RT 变化量单位
Tribenuron-met...	1 396.0966	扫描		目标化合物	4.795	2.000	2.000	min

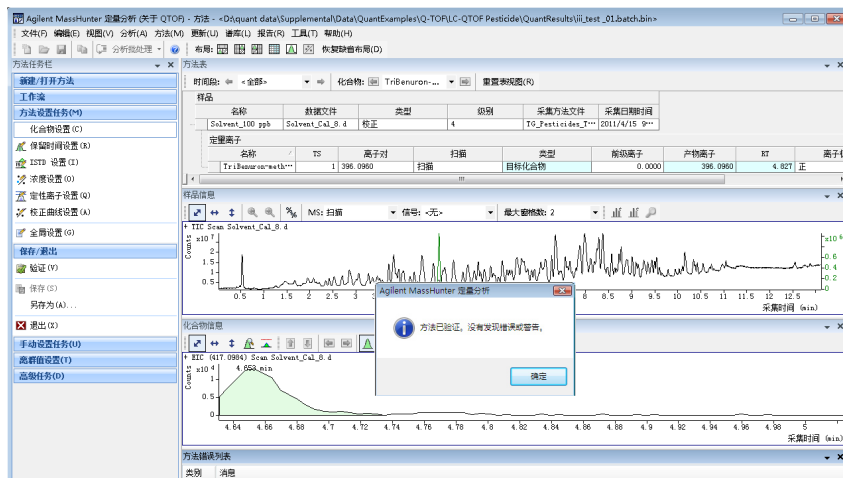
校正

级别	浓度	响应
1	5.0000	
2	20.0000	
3	50.0000	
4	100.0000	

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件 任务 4. 设置定量

3 单击保存 / 退出 > 验证验证方法设置。

您可以在屏幕底部查看发生的任何验证错误。



4 显示验证消息后, 单击确定。

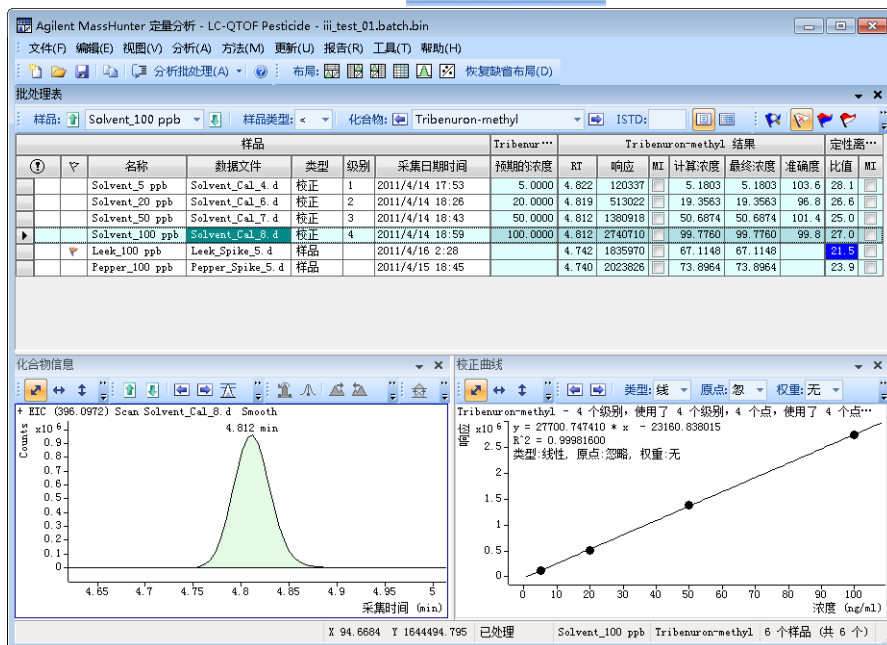
5 在保存 / 退出下, 单击退出, 然后选择应用该方法后附加批处理过程下的无, 并且在显示是否将此方法应用于批处理? 提示时单击是。

3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件 任务 5. 分析和保存批处理

任务 5. 分析和保存批处理

在本练习中，您将自动定量批处理，然后保存结果。

- 1 单击工具栏中的分析批处理图标  开始批处理分析。



- 2 单击文件 > 保存批处理。
- 3 单击文件 > 关闭批处理以关闭批处理。

- 3 练习 2: 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件
- 任务 5. 分析和保存批处理

练习 3：检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果 40

任务 2. 更改结果窗口布局 44

任务 3. 导出和打印结果 50

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、将数据导出到 Microsoft Excel 以及预览和打印数据。

使用此练习中的 **DrugsOfAbuse** 批处理。可使用三重四极杆数据文件、Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行类似任务。


4 练习 3: 检查定量结果

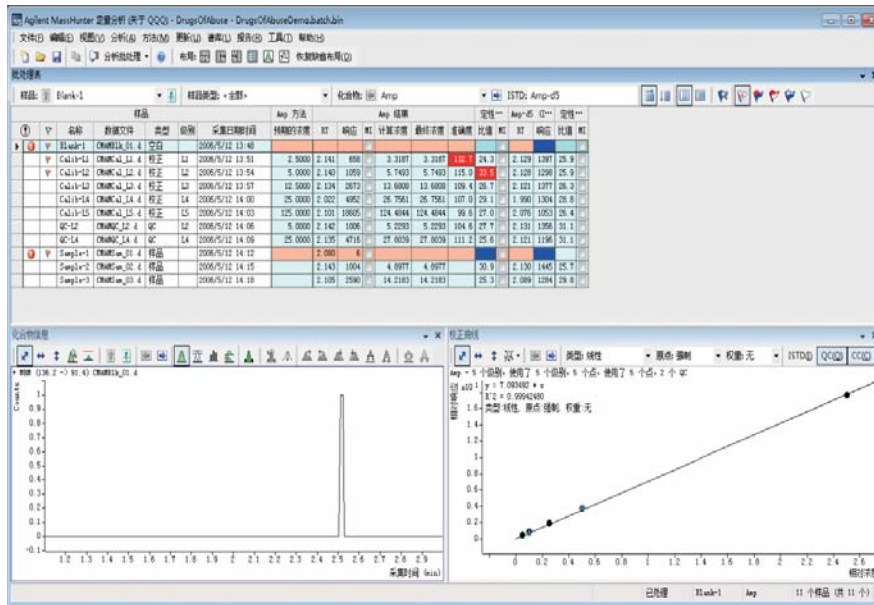
任务 1. 浏览批处理表结果

任务 1. 浏览批处理表结果

此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。

步骤 1 打开在练习 1 中创建的批处理文件 `iii_Test_01.batch.bin`。


- 1 要启动定量分析程序，请单击桌面上的定量分析图标。
- 2 单击工具栏中的打开批处理  以显示打开批处理对话框。
- 3 浏览至 `\您的目录\DrugsOfAbuse`，然后单击 `iii_Test_01.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。





4 练习 3: 检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果

步骤 2 (可选) 如果所显示的布局与上一页的图中的布局不同 ...

- 如果主视图中显示少于三个窗口，或它们的排列方式不同，请恢复缺省布局。
- 如果列设置不同，请恢复缺省列设置。
- 如果化合物信息窗口中显示除“色谱图”窗格以外的其他窗格，请隐藏其他窗格。
- 要恢复缺省布局，请在从一个样品滚动到另一个样品之前，单击工具栏中的“恢复缺省布局”。
- 要恢复缺省列设置，请在批处理表窗口中的任意位置上单击右键，然后单击恢复缺省列。
- 要隐藏其他窗格，请单击化合物信息工具栏中除“显示 / 隐藏色谱图”图标  以外的高亮显示的图标。
- 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. 更改结果窗口布局”（第 44 页）。

步骤 3 在样品之间滚动，直到达到批处理表末尾，然后返回到 Cal-L5。

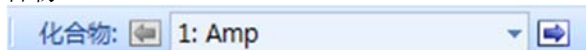
- 1 单击批处理表标准工具栏中的下一个样品箭头 ，直到系统显示所需的样品。
检查化合物信息窗口中的变化。
- 2 要返回到 Cal-L5，请单击批处理表标准工具栏中的上一个样品图标 。
- 3 选择批处理表窗口中样品 **Calib_L4** 行中的任何单元格，以查看变化。

记下批处理表中高亮显示的数据文件和化合物信息窗口中的色谱图之间的链接。

记下批处理表以及每个样品的安非他明化合物信息中的变化。

步骤 4 在所有四个化合物之间滚动浏览。

- 1 单击工具栏中的下一个化合物或上一个化合物箭头，直到系统显示所需的化合物。



- 2 检查批处理表、化合物信息和校正曲线窗口中的变化。
- 3 单击化合物列表旁边的向下箭头。
- 4 单击可卡因。

4 练习 3: 检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果

步骤 5 检查多个化合物的结果。

查看 Cal-L4 样品的每个化合物的保留时间。

在检查所有化合物的结果后，返回查看可卡因结果。

- 1 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**。
- 2 单击 Cal-L4 单元格，记下化合物信息窗口中每个化合物的保留时间差异。



样品				Amp 结果				Meth 结果				NIMA 结果				Cocaine 结果			
名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度
Blank-1	CRARCbl_01.d	空白		2006/5/12 13:40															
Calib-11	CRARCbl_11.d	校正	L1	2006/5/12 13:51	2.141	3.3167	133.3	2.247	2.5926	103.7	2.276	2.2824	91.3	2.453	2.3007	92.3			
Calib-12	CRARCbl_12.d	校正	L2	2006/5/12 13:54	2.140	5.7493	115.0	2.248	5.1011	102.0	2.277	4.6561	93.1	2.454	4.2982	85.4			
Calib-13	CRARCbl_13.d	校正	L3	2006/5/12 13:57	2.134	13.6808	109.4	2.247	15.1823	121.3	2.271	11.2728	90.2	2.459	11.5807	92.5			
Calib-L4	CRARCbl_14.d	校正	L4	2006/5/12 14:00	2.022	26.7561	107.0	2.228	27.2574	109.0	2.264	24.8702	99.5	2.449	25.2511	101.0			
Calib-15	CRARCbl_15.d	校正	L5	2006/5/12 14:03	2.101	124.4844	99.6	2.237	124.2764	99.4	2.271	125.1660	100.1	2.448	125.0768	100.1			
QC-12	CRARCbl_12.d	QC	L2	2006/5/12 14:06	2.142	5.2293	104.8	2.248	5.2414	104.8	2.276	4.8567	97.1	2.453	4.2831	86.7			
QC-14	CRARCbl_14.d	QC	L4	2006/5/12 14:09	2.135	27.8039	111.2	2.246	27.7713	111.1	2.276	23.0331	92.1	2.456	24.5377	98.2			
Sample-1	CRARCsan_01.d	样品		2006/5/12 14:12	2.200			2.208	3.2839		2.215	5.6139		2.408					
Sample-2	CRARCsan_02.d	样品		2006/5/12 14:15	2.143	4.8977		2.250	5.9102		2.280	5.1778		2.460	4.3795				
Sample-3	CRARCsan_03.d	样品		2006/5/12 14:18	2.105	14.2103		2.236	14.1976		2.267	10.7772		2.446	10.9299				

- 3 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**在批处理表中显示单个化合物 / 样品**图标。



- 4 如果需要，单击化合物列表旁边的向下箭头，然后单击可卡因。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。

步骤 6 查看选定的样品类型。仅显示校正标样，然后显示所有样品类型：

- 1 单击**样品类型**下拉列表中的向下箭头。将显示**样品类型**对话框。
- 2 清除 **< 全部 >** 复选框，并选中**校正**复选框。

4 练习 3: 检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果






- 3 单击确定。
批处理表应只包含可卡因的校正标样。
- 4 单击样品类型下拉列表中的向下箭头。
- 5 单击 <全部>, 然后单击确定。
系统将选中所有复选框并显示所有样品类型。




任务 2. 更改结果窗口布局

此任务说明如何自定义布局以及如何重新创建缺省布局。




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

- 1 单击工具栏中的布局 - 表左侧图标 。
- 2 单击工具栏中的布局 - 表右侧图标 。
- 3 单击布局 - 表顶部图标 。

步骤 2 使用工具栏中的布局图标使每个窗口最大化：

- 1 单击工具栏中的最大化表图标 。
- 2 单击工具栏中的最大化化合物信息图标 。
- 3 单击工具栏中的最大化校正曲线图标 。
- 4 要返回到缺省布局，请单击工具栏中的恢复缺省布局图标。

步骤 3 更改化合物信息窗口中 Cal-L4 的窗格：

- 1 在批处理表中，选择 **Cal-L4** 行。
- 2 在化合物信息工具栏中，单击显示 / 隐藏定性离子图标 。
- 3 单击显示 / 隐藏质谱图图标 。
- 4 单击显示 / 隐藏 ISTD 图标 。
布局 and 结果如下图中所示。

4 练习 3: 检查定量结果

任务 2. 更改结果窗口布局

此步骤假设您使用化合物信息窗口中的“色谱图”窗格开始执行此任务。



更改布局只会更改六个窗格的位置和可见性。化合物信息窗口中的窗格不受更改布局的影响。

步骤 4 保存没有校正曲线的缺省布局:

5 关闭校正曲线窗口。

6 单击视图 > 窗口布局 > 保存布局。

系统将显示保存布局文件对话框。

7 将布局文件命名为批处理表和化合物信息，然后单击保存。

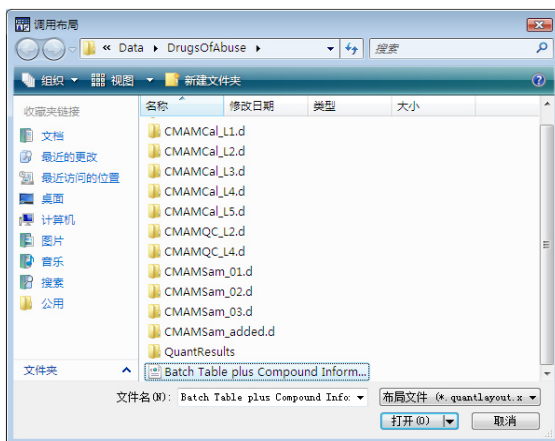
4 练习 3: 检查定量结果

任务 2. 更改结果窗口布局

步骤 5 调用新创建的布局。

- 1 单击工具栏中的恢复缺省布局。
- 2 单击视图 > 窗口布局 > 调用布局。

系统将显示调用布局对话框。



4 练习 3: 检查定量结果

任务 2. 更改结果窗口布局

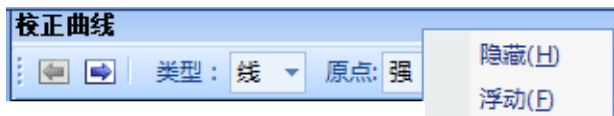
3 单击批处理表和化合物信息，然后单击打开。
现在，结果窗口如图 7（第 47 页）所示。



图 7. 结果窗口

步骤 6 创建如图 8（第 48 页）所示的布局：

- 1 恢复缺省布局（单击工具栏中的恢复缺省布局）。
- 2 在校正曲线窗口的标题栏中单击右键，然后选中浮动复选框。



- 3 右键单击化合物信息窗口的标题栏，然后选中浮动复选框。
- 4 调整窗口大小，以便与图 8 中的布局一致。

4 练习 3: 检查定量结果

任务 2. 更改结果窗口布局

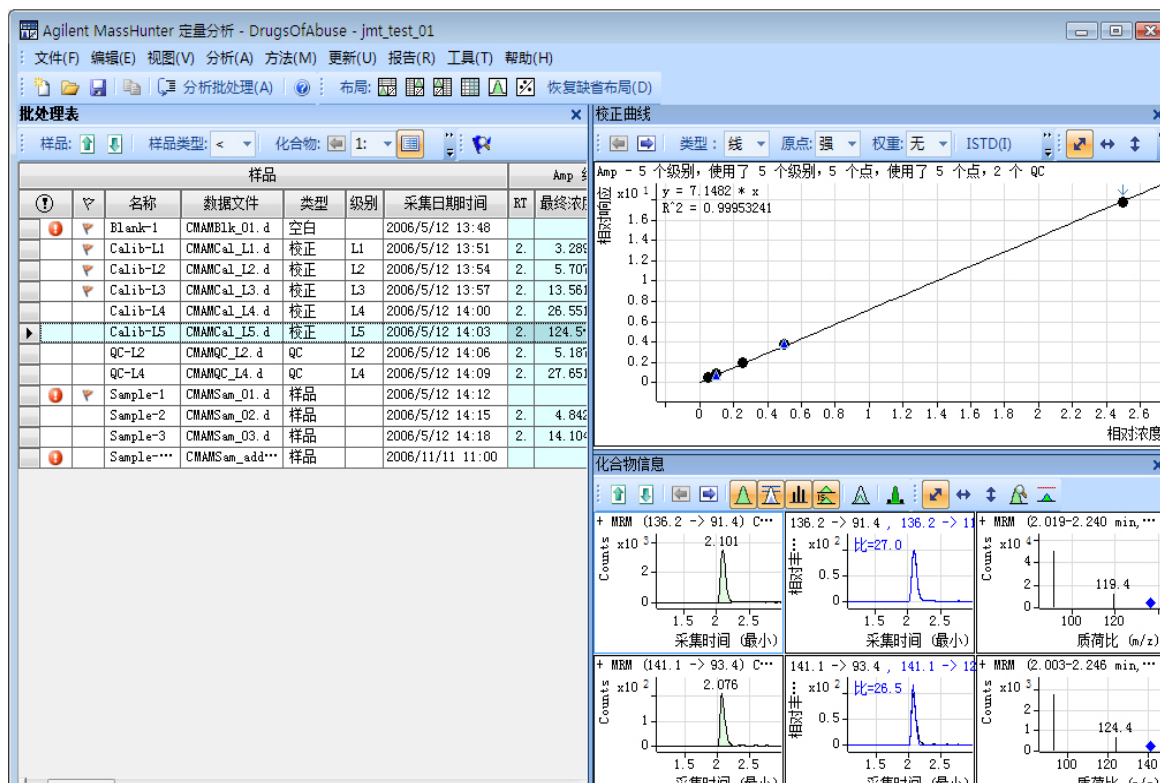


图 8. 显示处于浮动状态的“校正曲线”和“化合物信息”窗口

- 5 在化合物信息窗口的标题栏中右键单击，然后清除浮动复选框。

4 练习 3: 检查定量结果

任务 2. 更改结果窗口布局

6 调整窗口大小, 以便与图 9 中的布局一致。

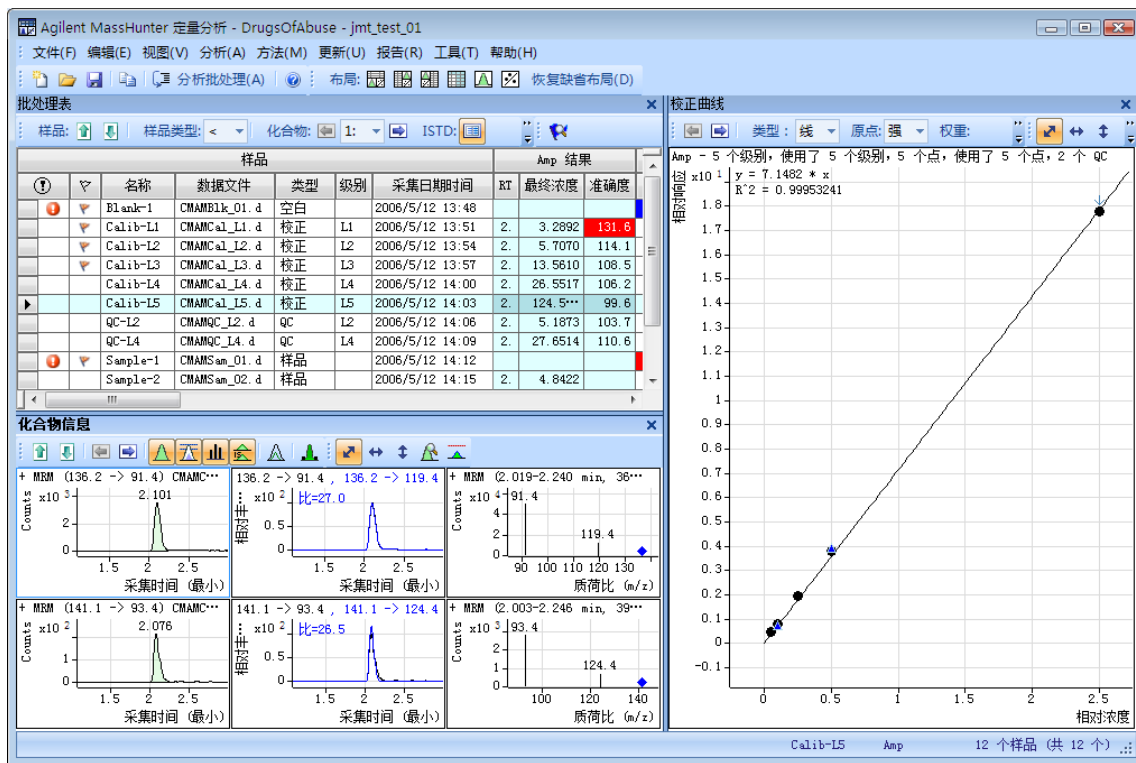


图 9. 调整大小后的窗口

- 在校正曲线窗口的标题栏中单击右键, 然后清除浮动复选框。
- 移动化合物信息窗口, 使布局对应于在任务开始时所显示的图中的布局。

步骤 7 重新创建 (不恢复) 缺省布局:

- 使程序主视图最大化。
 - 必须先锚定校正曲线窗口, 然后锚定化合物信息窗口, 这样才能重新创建缺省布局。
 - 如果在锚定两个窗口后, 校正曲线位于左侧, 则可右键单击校正曲线窗口的标题栏, 然后将其移至右侧。灰色矩形显示该窗口将放置在主视图中的位置。
 - 将校正曲线拖至主视图的右下角。

4 练习 3: 检查定量结果 任务 3. 导出和打印结果

任务 3. 导出和打印结果

此练习说明如何将数据导出到 Microsoft Excel 文件，以及如何预览和打印批处理表及化合物信息数据。

步骤 1 导出批处理文件 iii_Test_01。

- 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。
- 3 指定我的文档作为目标目录。
- 4 输入 *iii_Test_01.xlsx* 作为导出文件名。
- 5 单击保存。Excel 文件 My Documents\iii_Test_01.xlsx 自动打开。*iii* = 用户姓名首字母



图 10. 导出结果

4 练习 3: 检查定量结果

任务 3. 导出和打印结果

步骤 2 查看显示在 Excel 中的批处理结果，然后退出 Excel。

- 1 记下导出和未导出的内容。
- 2 完成后，关闭 Excel。

样品							Amp 方法		Amp 结果										
名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间	预期的浓度	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	比	MI	RT	响应	比	MI		
Amp-d5	Blank-1	CMAMBIk_01.d	空白	2006/5/12 13:48				##										FALSE	
Amp	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	2006/5/12 13:51	2.5	2	657.55	##	3.289177366	3.28918	131.6	24	##	2	1398		FALSE	
Amp	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	2006/5/12 13:54		5	1059.1	##	5.707033166	5.70703	114.1	33	##	2	1298		FALSE	
	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	2006/5/12 13:57			12.5	2	2679.9	##	13.5610074	13.561	108.5	27	##	2	1382	FALSE
	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	2006/5/12 14:00		25	2	4953	##	26.55172164	26.5517	106.2	29	##	2	1305	FALSE	
	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	2006/5/12 14:03		125	2	18661	##	124.5394901	124.539	99.63	27	##	2	1048	FALSE	
	QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/5/12 14:06		5	2	1005.6	##	5.187311945	5.18731	103.7	28	##	2	1356	FALSE	
	QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/5/12 14:09		25	2	4722.9	##	27.65144199	27.6514	110.6	26	##	2	1195	FALSE	
Amp-d5	Sample-1	CMAMSam_01	样品		2006/5/12 14:12				##									FALSE	
	Sample-2	CMAMSam_02	样品		2006/5/12 14:15		2	999.61	##	4.84215371	4.84215		31	##	2	1444		FALSE	
	Sample-3	CMAMSam_03	样品		2006/5/12 14:18		2	2588.4	##	14.10467025	14.1047		25	##	2	1284		FALSE	
Amp-d5	Sample-ad	CMAMSam_add	样品		2006/11/11 11:00				##									FALSE	

图 11. Excel 中的批处理表

步骤 3 预览批处理表和化合物信息数据的打印输出：

- 1 在 Excel 中，单击文件 > 打印。
- 2 检查打印预览窗口，确保它以所需的方式显示。
- 3 单击文件 > 打印。
- 4 对化合物信息重复“导出批处理文件 iii_Test01。”（第 50 页）中的步骤步骤 1- 步骤 5。
- 5 如果不想进行练习 4，请单击文件 > 保存批处理。
- 6 单击文件 > 退出。
您也可以从打印预览程序打印批处理表，方法是单击打印预览程序中的文件 > 打印菜单项。

4 练习 3: 检查定量结果
任务 3. 导出和打印结果

练习 4：使用三个工具评估结果

任务 1. 调整校正曲线拟合 54

任务 2. 无参数积分 56

任务 3. 检测离群值 70

在此练习中，您将使用三个工具帮助评估并获得更准确的定量结果：

- 曲线拟合助手，该工具将计算曲线的所有组合，并使用方程和置信带显示结果
- 无参数积分器，无需设置更改参数就可以改进积分结果
- 离群值消息，该工具可帮助您容易地检测出超出指定范围的结果值

在本练习中将使用 DrugsOfAbuse 批处理。可使用三重四极杆数据文件、Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行相同的任务。



5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 1. 调整校正曲线拟合

任务 1. 调整校正曲线拟合

此任务说明如何查找化合物的准确度离群值、调整其曲线拟合以及重新分析批处理。

步骤 1 如果需要，打开批处理文件 *iii_Test_01.batch.bin*:

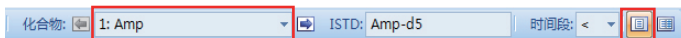
- 1 单击桌面上的**定量分析 (QQQ)** 图标  以启动定量分析程序。
- 2 单击工具栏中的**打开批处理**  以显示打开批处理对话框。
- 3 浏览至 *\您的目录\DrugsOfAbuse*，然后单击 *iii_Test_01.batch.bin*。

也可以通过单击开始菜单中的**程序 > Agilent > MassHunter Workstation > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。

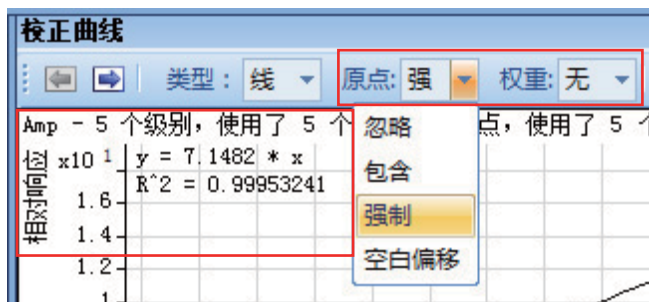
如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再打开批处理。

步骤 2 查找安非他明的准确度离群值，并更改曲线拟合。

- 1 确保将**批处理表**设置为单个化合物显示模式，并且所显示的目标化合物为**安非他明**。请参见下图中带框的部分。



- 2 指向 **Calib-L1** 行中的单元格以及**准确度**列，以显示离群值消息，如下所示。包含离群值的单元格可能是红色（高）或蓝色（低）。
- 3 在校正曲线窗口中，将**原点**设置为**忽略**，将**权重**设置为 **1/y**。程序将显示新的曲线拟合分子式以及 R^2 值。



曲线拟合原点

- **强制** - 强制曲线拟合线通过原点 ($X=0, Y=0$)。
- **忽略** - 不强制曲线拟合线使用原点 ($X=0, Y=0$)。


5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 1. 调整校正曲线拟合

曲线拟合权重

- 无 – 对所有数据点指定相同的权重。
- $1/Y$ – 将分子式 $1/Y$ 应用于数据点。此分子式将减少高 Y 值的影响，同时增加低 Y 值的影响。


步骤 3 分析批处理，并检查批处理表中的结果：

1 单击工具栏中的**分析批处理**图标 ，以分析批处理。

2 分析批处理后，检查**批处理表**中的结果。

准确度
131.8
114.1
108.5
106.2
99.6
103.7
110.8

步骤 4 查找其他化合物的准确度离群值（如果有）：

- 1 单击**批处理表**工具栏中的**下一个化合物** ，以查看单个化合物，如可卡因、MDMA 和甲基苯丙胺。
- 2 检查定量结果，特别是**准确度**列中的值。
请注意，安非他明的 Calib-L3 标样的准确度值超出了指定范围。

步骤 5 更改安非他明的曲线拟合，然后分析批处理：

- 1 在**校正曲线拟合**窗口中，将**原点**设置为**忽略**，将**权重**设置为 $1/y$ 。
定量分析程序将显示修改后的曲线拟合公式以及 R^2 值。
- 2 单击主工具栏中的**分析批处理**，以分析批处理。
分析批处理后，**批处理表**将显示新结果。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

任务 2. 无参数积分

此任务说明如何检查数据以正确进行积分。您将学习如何执行下列任务：

- 将积分列添加到批处理表
- 查看缺省积分值
- 仔细检查色谱图，查看如下详细信息：
 - 离群值消息
 - 基线参数
 - 峰标签

步骤 1 将积分列添加到批处理表：

- 1 在批处理表的任意位置上右键单击，然后单击添加 / 删除列。系统将显示列对话框。
- 2 从选择列下拉列表中选择化合物方法。

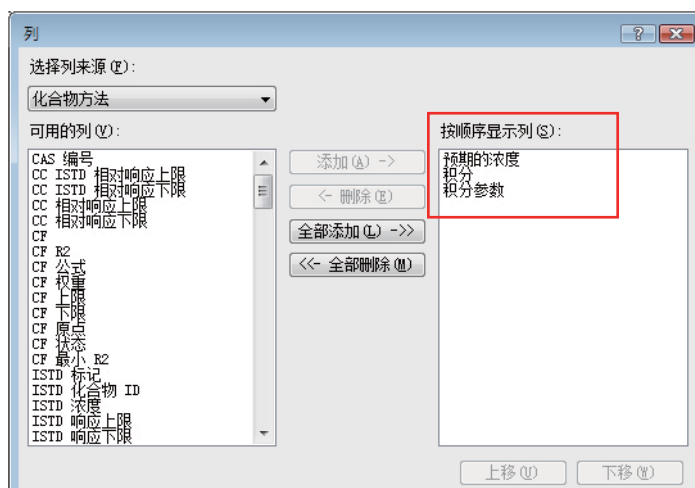
5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

- 3 从可用列列表中选择 **Int.**（积分器类型）和 **Int. Params.**（积分参数）并单击**添加**。

定量分析程序将选定的列移至**按顺序显示列**列表。

- 此任务假设已打开了批处理 **iii_Test_01**。如果未打开，请参见“**任务 1. 调整校正曲线拟合**”（第 54 页）中的**步骤 1**。

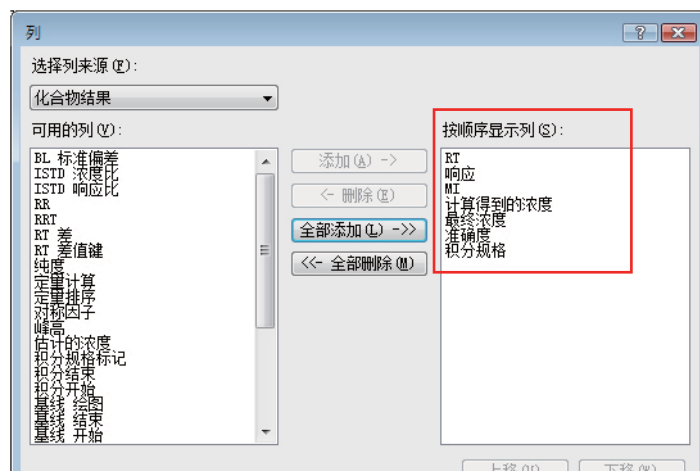


- 4 从列选择来源下拉列表中选择化合物结果。
- 5 从可用列列表中选择积分规格并单击添加。系统将选定的列移至**按顺序显示列**列表。


5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

6 单击确定。



步骤 2 查看安非他明的缺省积分值:

- 1 单击批处理表工具栏中的上一个化合物 , 查看安非他明 (Amp)。
- 2 检查批处理表中“积分器”和积分参数列的缺省值。

请注意，所使用的积分器是 MS-MS 积分器，该积分器不需要输入参数。这就是积分参数列为空白的原因。

积分	积分参数
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

3 检查“批处理表”中“积分规格”列的缺省值。


这些值反映了用于目标化合物安非他明的缺省积分质量规格。



		Amp 方法			Amp 结果					
采集日期时间	预期的浓度	积分	积分参数	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	积分法
2006/5/12 13:48		MS-MS (LC)				<input type="checkbox"/>				
2006/5/12 13:51	2.5000	MS-MS (LC)		2.	658	<input type="checkbox"/>	3.2892	3.2892	131.6	Accep
2006/5/12 13:54	5.0000	MS-MS (LC)		2.	1059	<input type="checkbox"/>	5.7070	5.7070	114.1	Accep
2006/5/12 13:57	12.5000	MS-MS (LC)		2.	2880	<input type="checkbox"/>	13.5610	13.5610	108.5	Accep
2006/5/12 14:00	25.0000	MS-MS (LC)		2.	4953	<input type="checkbox"/>	26.5517	26.5517	106.2	Accep
2006/5/12 14:03	125.0000	MS-MS (LC)		2.	18661	<input type="checkbox"/>	124.5395	124.5...	99.6	Accep
2006/5/12 14:06	5.0000	MS-MS (LC)		2.	1006	<input type="checkbox"/>	5.1873	5.1873	103.7	Accep
2006/5/12 14:09	25.0000	MS-MS (LC)		2.	4723	<input type="checkbox"/>	27.6514	27.6514	110.6	Accep
2006/5/12 14:12		MS-MS (LC)				<input type="checkbox"/>				
2006/5/12 14:15		MS-MS (LC)		2.	1000	<input type="checkbox"/>	4.8422	4.8422		Accep

步骤 3 查看可卡因和 MDMA 的积分问题:

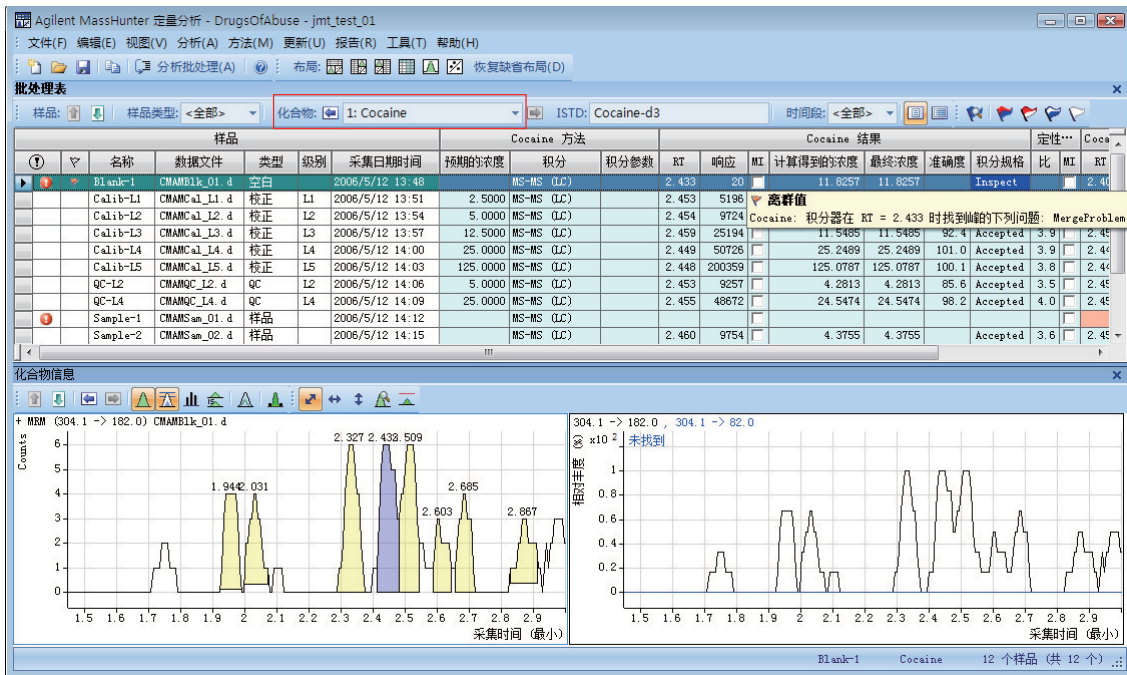
查看积分规格列和 **Blank-1** 样品交集的离群值消息。

- 1 关闭校正曲线窗口:
- 2 放大化合物信息工具栏的色谱图部分, 以便仅显示定量离子和定性离子色谱图。单击显示 / 隐藏质谱图图标。
- 3 也可以单击显示 / 隐藏 ISTD 图标。
- 4 单击批处理表工具栏中的下一个化合物图标 , 直到系统显示化合物可卡因。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

- 5 选择 **Blank-1** 行，将鼠标悬停在该行对应的积分规格列中**检查**一词上。系统将显示该数据的任何离群值消息，以及可卡因的积分色谱图。



- 6 单击批处理表标准工具栏中的下一个化合物图标 或“上一个化合物”图标 ，直到系统显示化合物 MDMA。

- 7 选择 **Blank-1** 行，然后指向 **Int. Metric**（积分规格）列。系统将显示该数据的任何离群值消息，以及 MDMA 的积分色谱图。

离群值消息显示“MDMA: Integrator found the following problems with the peak at RT = 2.4664: Interference Problem.”（MDMA：积分器在保留时间 = 2.4664 时发现峰具有下列问题：冲突问题。）

请注意，下列颜色表示不同的积分规格：


- 绿色 - 接受
- 蓝色 - 检查
- 红色 - 拒绝

这些颜色也反映在峰颜色中。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

步骤 4 更改噪音算法:

- 1 在批处理表的任意位置上右键单击，然后单击添加 / 删除列。系统将显示列对话框。
- 2 从列选择来源下拉列表中选择化合物方法。
- 3 从可用列列表选择噪音算法（噪音算法类型）并单击添加。系统将选定的列移至按顺序显示列表。
- 4 单击确定。
- 5 单击批处理表工具栏中的上一个化合物图标 ，直到系统显示化合物安非他明。
- 6 检查噪音算法和 S/N（信噪比）列中的值。



噪音算法	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	积分规格	信噪比	比	MI	RT
RMS	2.141	658	<input type="checkbox"/>	3.2892	3.2892	131.6	Accepted	48.96	24.3	<input type="checkbox"/>	2.129
RMS	2.140	1059	<input type="checkbox"/>	5.7070	5.7070	114.1	Accepted	42.25	33.5	<input type="checkbox"/>	2.128
RMS	2.134	2680	<input type="checkbox"/>	13.5610	13.5610	108.5	Accepted	106.52	26.6	<input type="checkbox"/>	2.121
RMS	2.022	4953	<input type="checkbox"/>	26.5517	26.5517	106.2	Accepted	20.26	29.0	<input type="checkbox"/>	1.990
RMS	2.101	18661	<input type="checkbox"/>	124.5395	124.5395	99.6	Accepted	51.59	27.0	<input type="checkbox"/>	2.076
RMS	2.142	1006	<input type="checkbox"/>	5.1873	5.1873	103.7	Accepted	80.96	27.6	<input type="checkbox"/>	2.131
RMS	2.135	4723	<input type="checkbox"/>	27.6514	27.6514	110.6	Accepted	98.30	25.6	<input type="checkbox"/>	2.121
RMS			<input type="checkbox"/>							<input type="checkbox"/>	
RMS	2.143	1000	<input type="checkbox"/>	4.8422	4.8422		Accepted	80.59	31.0	<input type="checkbox"/>	2.130
RMS	2.105	2588	<input type="checkbox"/>	14.1047	14.1047		Accepted	74.96	25.3	<input type="checkbox"/>	2.089
RMS			<input type="checkbox"/>							<input type="checkbox"/>	

步骤 5 练习将方法中的安非他明的噪音算法从 RSM 更改为 ASTM。退出但不保存方法:

- 1 单击方法 > 编辑切换到方法编辑模式。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

- 2 在方法任务列单击高级任务 > 信噪比设置。
系统将在方法表中显示积分器参数。



- 3 在方法表中，单击安非他明噪音算法列的下拉箭头。
将显示一系列可用的噪音算法。
- 4 单击 ASTM。



- 5 在方法任务 / 保存 / 退出下，单击退出。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分


- 6 在显示**是否将此方法应用于批处理?**提示时, 单击**否**。系统显示批处理分析模式。

步骤 6 关闭安非他明的基线 (最高浓度标样), 然后再次打开。比较两个色谱图, 一个基线打开, 另一个基线关闭:

- 1 选择样品 **Calib-L5** (如果未选中), 然后单击工具栏中的**最大化化合物信息**图标。

确保窗口中只显示“化合物信息”窗格。

请注意, 系统在定量离子色谱图中绘制基线, 以作为缺省设置。



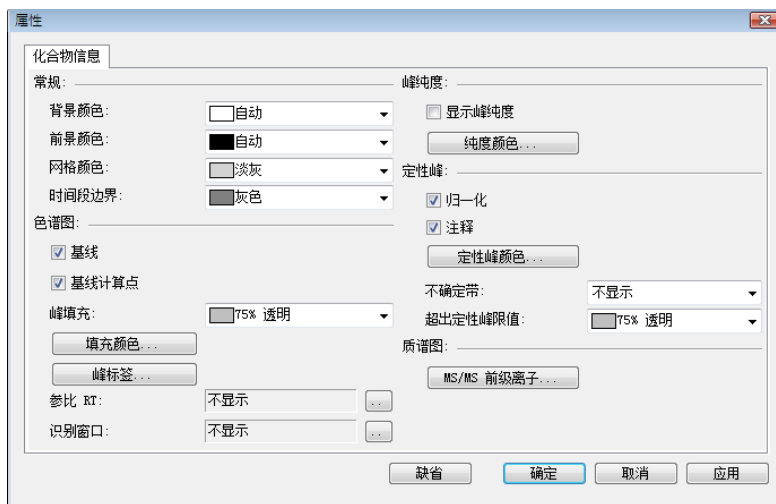
样品							
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间	转换	全扫描
Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		APCIautotune.m	2006/5/12 13:48	04.1 -> 182.0	MRM
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	APCIautotune.m	2006/5/12 13:51	04.1 -> 182.0	MRM
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	APCIautotune.m	2006/5/12 13:54	04.1 -> 182.0	MRM
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	APCIautotune.m	2006/5/12 13:57	04.1 -> 182.0	MRM
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	APCIautotune.m	2006/5/12 14:00	04.1 -> 182.0	MRM
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 14:03	04.1 -> 182.0	MRM
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	APCIautotune.m	2006/5/12 14:06	04.1 -> 182.0	MRM

- 2 右键单击任一色谱图, 以打开快捷菜单。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

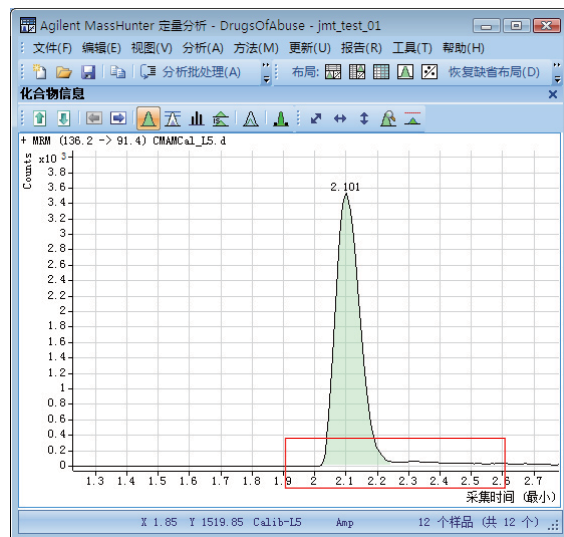
- 单击快捷菜单底部的属性以打开属性对话框。



- 清除属性对话框中的“基线”复选框。

- 单击应用按钮并观察没有基线的峰。

请注意，在清除了“基线”复选框后，基线将消失。

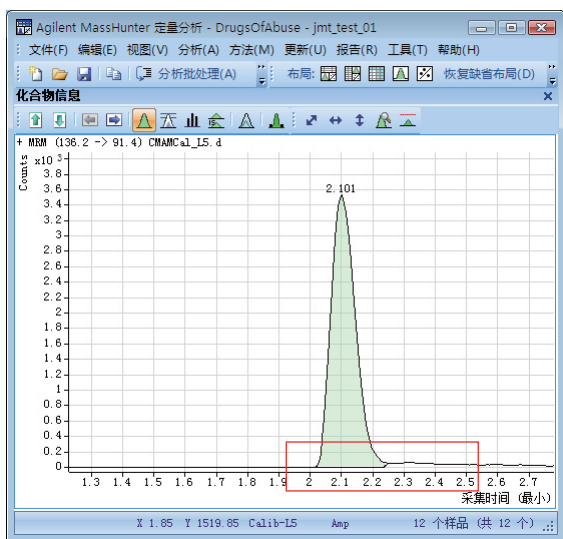


- 选中属性对话框中的基线复选框。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

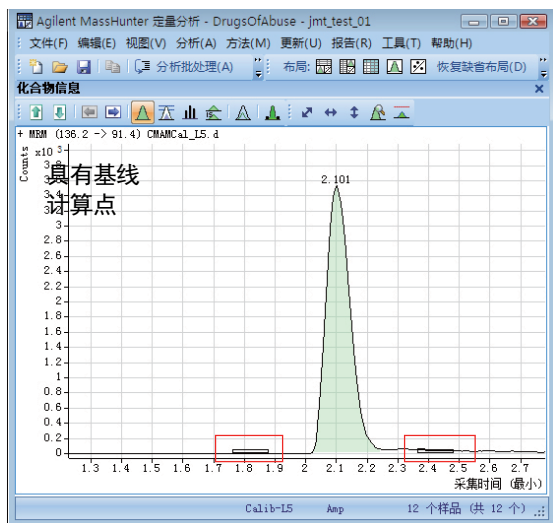
任务 2. 无参数积分

7 单击应用按钮并观察绘制有基线的峰:



步骤 7 检查安非他明的基线的计算点:

- 1 选中属性对话框中的基线计算点复选框。
- 2 单击应用并观察基线开始点和结束点的位置。

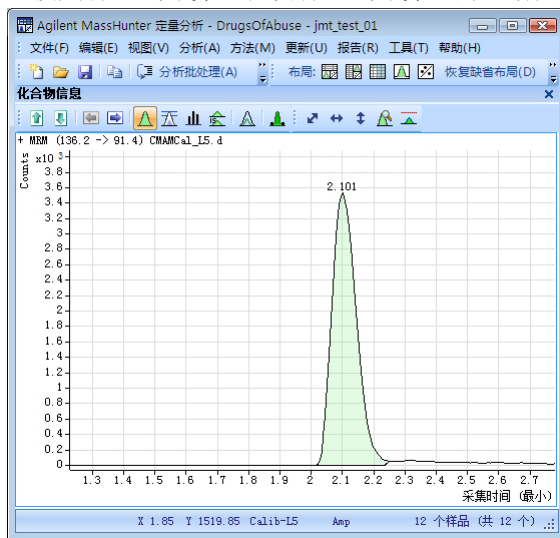


- 3 清除属性对话框中的基线计算点复选框。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

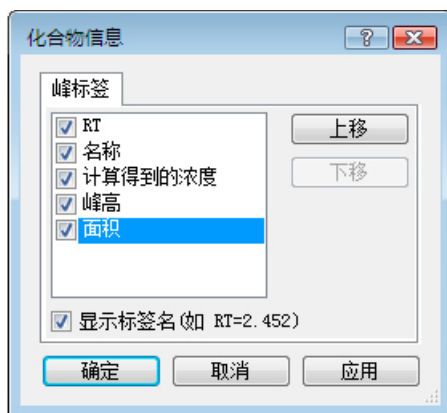
任务 2. 无参数积分

- 4 单击应用按钮并观察色谱图。
- 5 比较具有基线计算点和没有基线计算点的色谱图。



步骤 8 显示安非他明的峰标签。

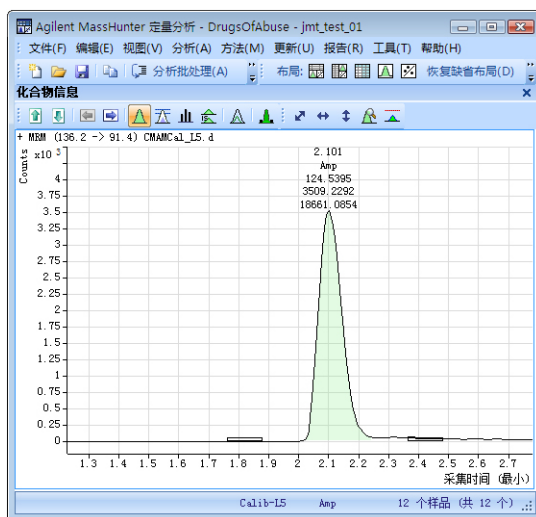
- 1 从属性对话框单击峰标签。
系统将显示峰标签对话框。
- 2 选中所有峰标签复选框以及显示标签名称复选框。
- 3 单击确定。



5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

- 单击属性对话框中的应用按钮。
现在，峰标签应与下面示例中显示的峰标签一致。



- 单击属性对话框中的峰标签。
系统将显示峰标签对话框。
- 清除除 RT（保留时间）以外的所有峰标签复选框。清除显示标签名称复选框，然后单击确定。
- 单击属性对话框中的应用并观察峰标签中的变化。

步骤 9 在右侧显示归一化之前和之后的定性离子色谱图：

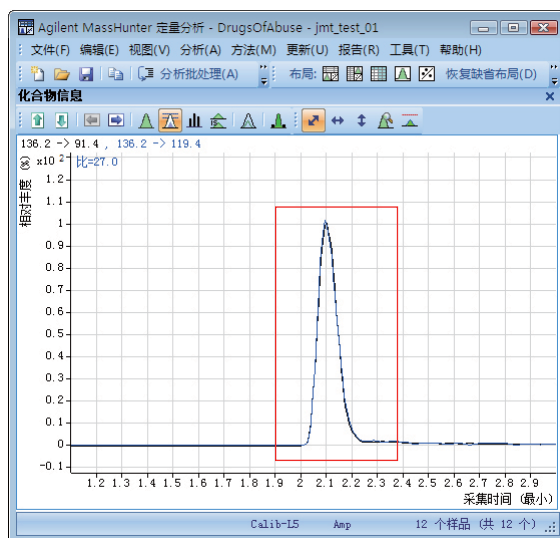
- 单击化合物信息 (2) 选项卡。在定性离子区域，勾选归一化复选框。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

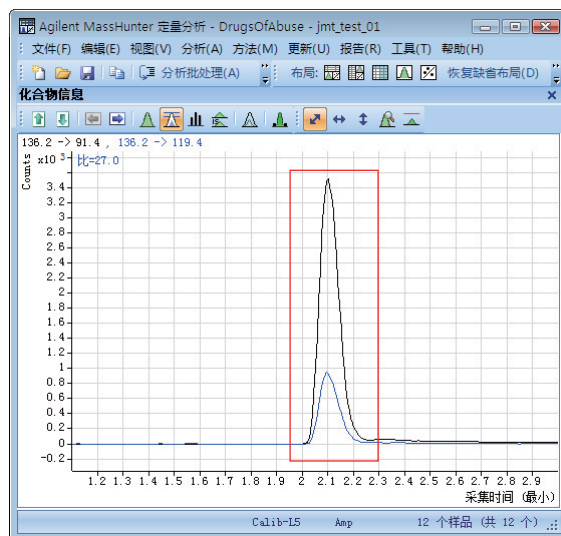
- 单击应用并观察这两个峰现在是否合并显示为一个峰。

对于 B.04.01 和更高版本: 请注意, 缺省设置显示, 归一化的定性离子峰是叠加在定量离子峰之上的。



- 清除属性对话框中的归一化定性离子复选框。

- 单击应用以再次显示定性离子第二个定量离子峰。

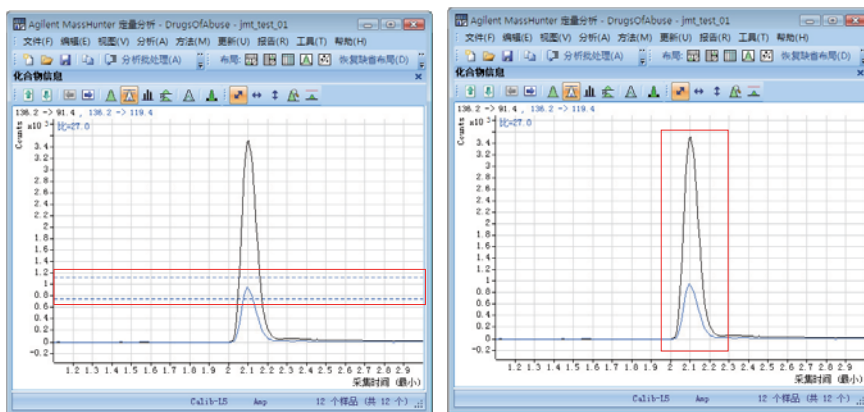


5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 2. 无参数积分

步骤 10 查看不确定带:

- 1 从属性对话框的**不确定带**字段的下拉菜单中选择要显示的不确定带的类型。单击**应用**，不确定带即显示在定性离子色谱图中。
- 2 从属性对话框的**不确定带**下拉菜单中选择**无显示**。单击**应用**可从定性离子色谱图中删除不确定带。
- 3 单击**确定**以关闭属性对话框。
- 4 比较具有和不具有**不确定带**的定性离子色谱图。
不确定带是虚线带，用于显示定性离子丰度的上限和下限



步骤 11 从批处理表删除积分器和积分参数列。

- 1 单击**恢复缺省布局**按钮。
- 2 右键单击批处理表的化合物方法部分，然后单击**添加 / 删除列**。
- 3 从右侧列表中选择 **Int.**（积分器）和 **Int. Params.**（积分参数）（化合物方法）。
- 4 单击**删除**，然后单击**确定**。

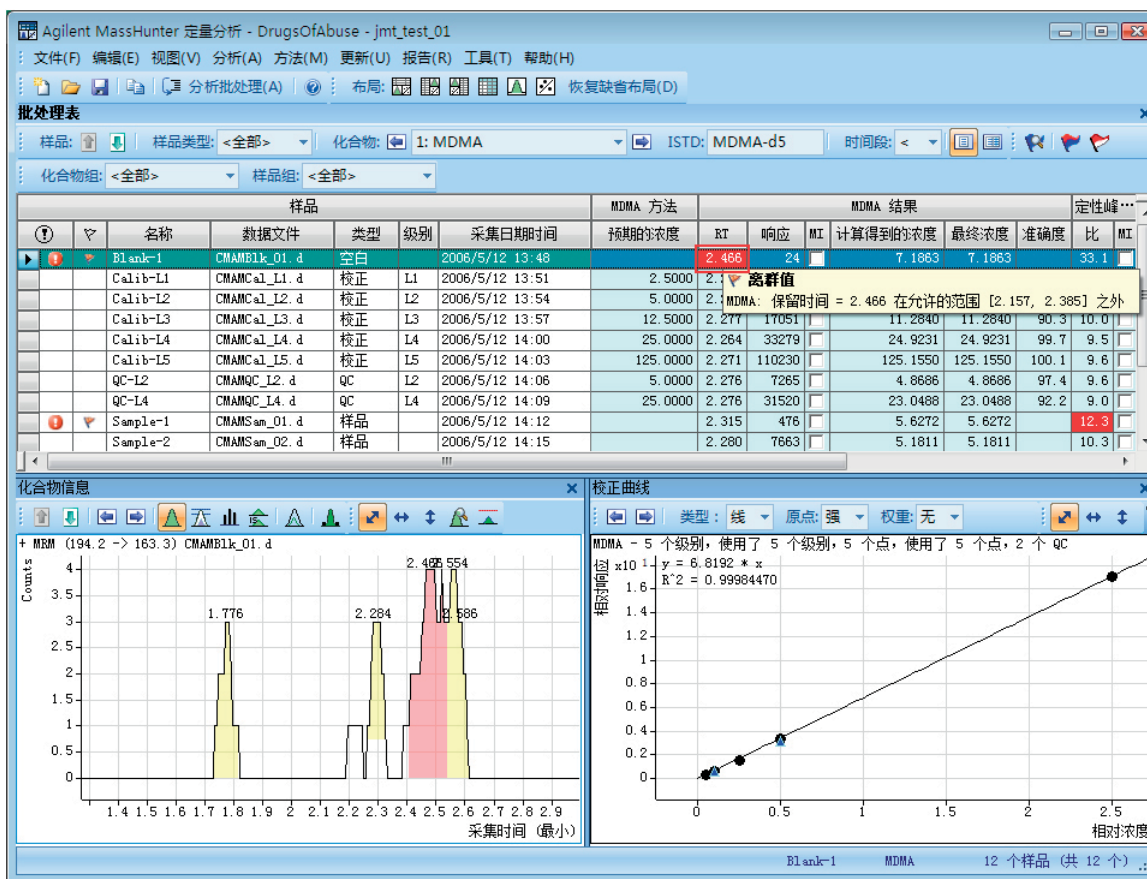
5 练习 4: 使用三个工具评估结果
任务 3. 检测离群值

任务 3. 检测离群值

此任务说明如何精确调谐化合物的准确度范围，以及隐藏和显示具有离群值标记的结果。

步骤 1 查看 MDMA 的离群值信息：

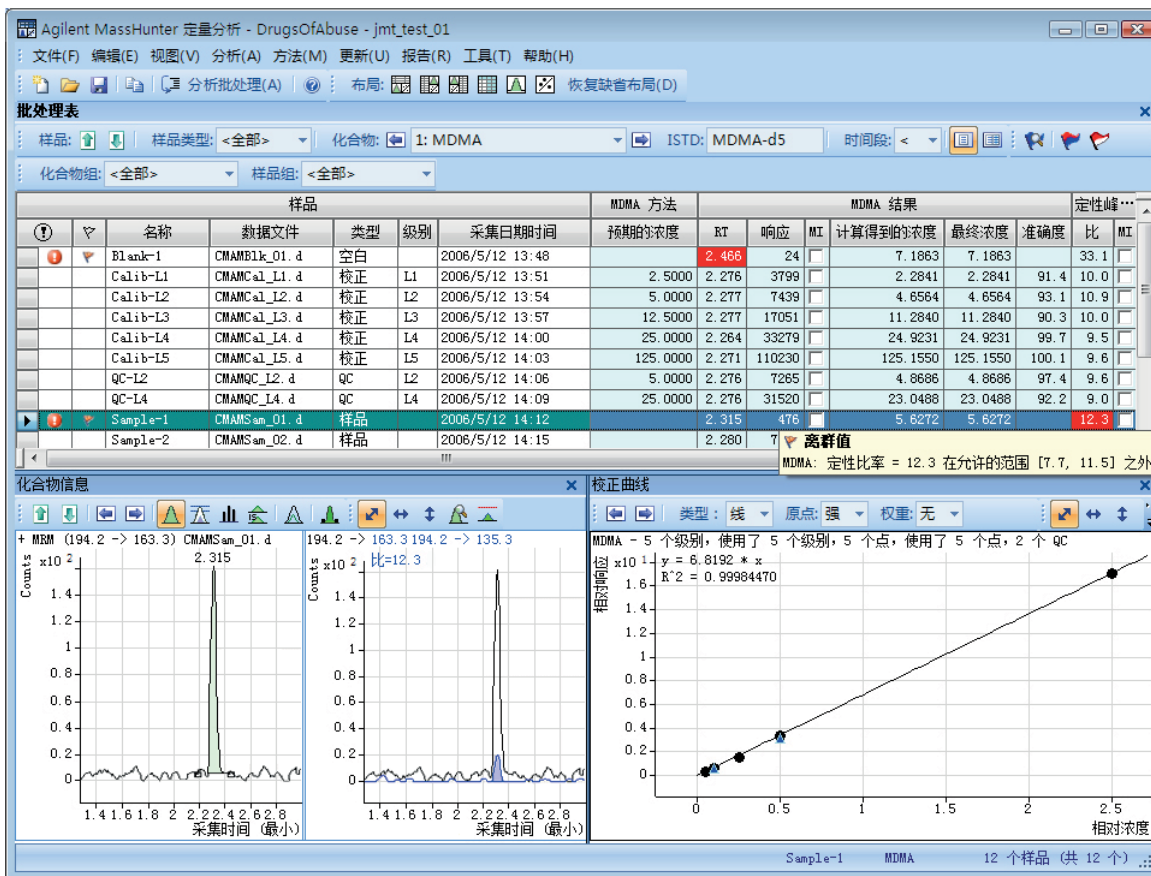
- 1 单击批处理表工具栏中的下一个化合物，直到系统显示化合物 MDMA。
- 2 选择 **Blank-1** 行，将光标指向 RT 列，如下面的示例中所示。




5 练习 4: 使用三个工具评估结果

任务 3. 检测离群值

- 3 检查样品 1 的定性离子 ... 结果 > 比值列中的离群值信息，如下面的示例中所示。



步骤 2 更改方法中安非他明的准确度范围，然后重新分析批处理：

- 1 单击工具栏中的上一个化合物图标 ，直到系统显示化合物安非他明。
- 2 选择表中的 **Calib-L5** 行。
- 3 单击方法 > 编辑切换到方法编辑模式。
- 4 在方法任务列，单击离群值设置任务 > 准确度。

5 练习 4：使用三个工具评估结果

任务 3. 检测离群值

- 5 将安非他明的准确度最大百分比偏差值设置为 5%。

您可以拆分方法表，方法是将小矩形拖至滚动条的左侧。在下面的示例中，使用底部滚动条旁边的矩形拆分方法表。两个部分中的信息完全相同。您可以使用这两个窗格同时查看表的两个部分。

Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

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

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏

新建/打开方法

方法设置(M)

保存/退出

手动设置(U)

离群值设置(T)

准确度(A)

平均响应

曲线拟合 R2 (2)

相对响应因子(L)

响应因子(S)

QC(Q)

QC 相对标准偏差(C)

定性比率(F)

检测限(D)

方法表

时间段: 化合物: A 级别名称前缀: 级别数: 1 创建级别(C)

样品		级别	采集方法文件	采集日期时间
名称	CMAMC	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1...

定量化合物		扫描	类型	准确度最大百分比偏差	LOQ	准确度乘积因子
Amp			目标	5.0		1.0
Amp-d5			ISTD	20.0		1.0
Cocaine			目标	20.0		1.0
Cocaine-d3			ISTD	20.0		1.0
MDMA			目标	20.0		1.0
MDMA-d5			ISTD	20.0		1.0
Meth			目标	20.0		1.0
Meth-d5			ISTD	20.0		1.0

4 个化合物 (共 4 个) 4 个 ISTD (共 4 个)

- 6 在方法任务列中，单击保存 / 退出 > 退出，然后选择“应用该方法后附加批处理过程”下的无，并且在显示是否将此方法应用于批处理？提示时单击是。

5 练习 4: 使用三个工具评估结果


任务 3. 检测离群值






- 按 F5 分析批处理。红色（高）和蓝色（低）离群值现在显示在安非他明的准确度列中

您也可以将批处理表拆分为两个部分。缺省情况下，样品列是锁定的，只能滚动其他列。如果将表拆分为两个部分，则可确定在每个部分中显示的列。如果要拆分批处理表，则需要清除“批处理表”快捷菜单中的锁定样品列菜单项。




样品				定性峰		
名称	数据文件	浓度	准确度	比		
Blank-1	CMAMBlk_01.d					
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	2892	131.6	24.3		
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	7070	114.1	33.5		
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	5610	108.5	26.6		
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	5517	106.2	29.0		
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	5395	99.6	27.0		
QC-L2	CMAMQC_L2.d	1873	103.7	27.6		
QC-L4	CMAMQC_L4.d	6514	110.6	25.6		
Sample-1	CMAMSam_01.d					
Sample-2	CMAMSam_02.d	8422		31.0		
Sample-3	CMAMSam_03.d	1047		25.3		
Sample-added	CMAMSam_added.d					

步骤 3 使用下列一组离群值标记图标 

- 单击工具栏中的显示具有高离群值的行图标 ，以仅显示具有高离群值的样品。
- 单击关闭离群值过滤器  图标，以显示所有样品。
- 单击工具栏中的显示具有高 / 低离群值的行图标 ，以仅显示具有低离群值的样品。
- 再次单击显示具有高 / 低离群值的行图标 ，以显示所有样品。
- 单击选择离群值图标 ，以显示离群值对话框。
- 清除准确度和保留时间复选框，然后单击确定。

5 练习 4：使用三个工具评估结果

任务 3. 检测离群值

- 7 单击**选择离群值**图标 ，以显示**离群值**对话框。
- 8 选中**准确度**和**保留时间**复选框，然后单击**确定**。
 - 请注意，要恢复**批处理表**以查看具有和不具有离群值的所有数据文件，只需再次单击选定进行离群值过滤的图标。

练习 5：生成定量报告

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 **DrugsOfAbuse** 批处理。可使用三重四极杆数据文件、Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行相同的任务。


我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或喜欢使用逐步指导学习过程，请使用这些详细说明。
- 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。

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 模板是此发行版中附带的模板，此类模板生成报告的速度是 Excel 模板的 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。

在此练习中，您将首先使用 PDF 模板创建一个报告方法，然后使用此相同的方法创建单样品和批处理报告。

步骤 1 打开批处理文件 *iii_Test_01.batch.bin*：

- 1 要启动定量分析程序，请单击桌面上的**定量分析 (QQQ)** 图标。
- 2 单击工具栏中的**打开批处理**  以显示打开批处理对话框。

6 练习 5: 生成定量报告

- 3 浏览至 \您的目录\DrugsOfAbuse, 然后单击 *iii_Test_01.batch.bin*。

如果批处理已打开, 则跳至步骤 2。

也可以通过单击开始菜单中的**程序 > Agilent > MassHunter Workstation > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。

如果未显示缺省布局, 请单击工具栏中的**恢复缺省布局**, 然后再打开批处理。

步骤 2 对此批处理的样品进行定量, 并保存所得结果:

- 1 在打开批处理表时, 单击工具栏上的**分析批处理**按钮以生成结果。
- 2 单击**文件 > 保存**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。

如果已对批处理进行了定量, 则跳至 **“创建 PDF 报告方法: ”**。

步骤 3 创建 PDF 报告方法:

- 1 单击工具栏中的**报告 > 生成**。

系统将显示**生成报告**对话框。

- 2 接受此报告的缺省**报告文件夹**目录。
- 3 在**报告方法**字段下, 单击**新建**按钮以生成新的报告方法。
- 4 单击**报告方法编辑**对话框中的**添加模板**按钮打开浏览器。
- 5 浏览至 **MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting** 目录, 选择 **DrugAnalysis.report.xml**, 然后单击**打开**。
程序将该模板添加到**报告方法编辑**窗格中的**模板**字段中。
- 6 重复步骤 **步骤 4** 到 **步骤 5** 以添加

`DrugAnalysis_DopingScreening.report.xml`。

- 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**按钮, 然后导航至相应文件夹选择您的方法。

6 练习 5: 生成定量报告

步骤 4 编辑报告方法以创建单样品和批处理 PDF 报告:

- 1 在**报告方法编辑**对话框中, 在 **DrugAnalysis.report** 模板线上的**报告模式**字段, 从下拉菜单选择**单个样品**。
- 2 在 **DrugAnalysis_Doping Screening.report** 模板线上, 从**报告模式**字段的下拉菜单选择**批处理**。
- 3 从**语言**字段中的下拉菜单中选择您的语言。
- 4 从**页面大小**字段中的下拉菜单中选择页面大小。
 - **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、中文或日文报告。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。

步骤 5 选择系统处理报告结果的方式:

- 1 选择**报告方法编辑**窗口的**结果**选项卡。
- 2 单击**生成报告结果文件**字段下的**自动**。

6 练习 5: 生成定量报告

- 3 从“仪器”字段的下拉菜单中选择 **QQQ**。

建议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。

步骤 6 为此方法选择图形设置选项：

- 1 单击**图形设置**选项卡查看图形设置。
- 2 选中**生成图形文件**复选框将图形添加到报告中。
- 3 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。

步骤 7 保存此报告方法：

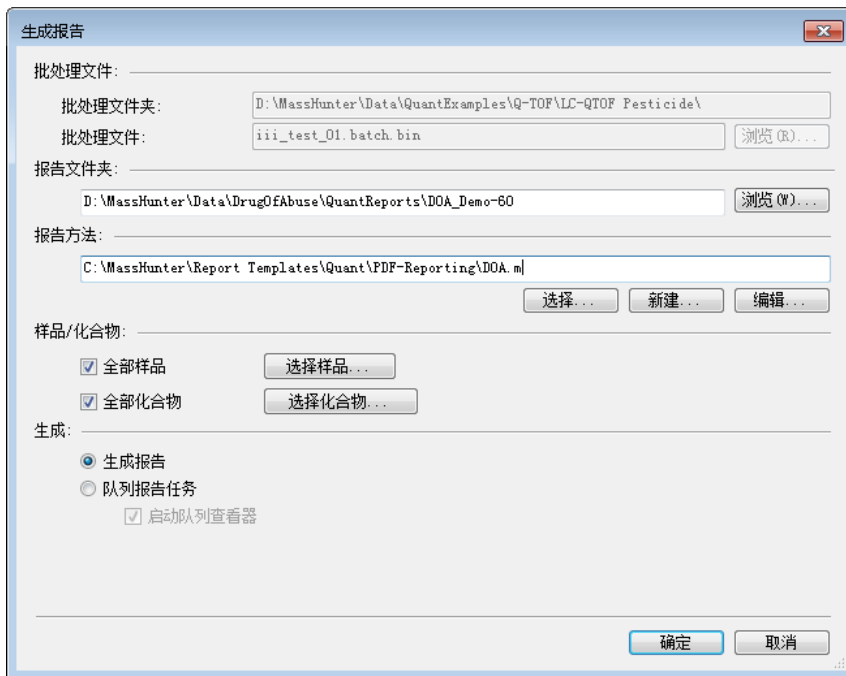
- 1 单击**报告方法编辑**窗口中的“保存”图标。
- 2 将报告方法命名为 **DOA.m**。

在您关闭此窗口和生成报告之前，必须保存此方法。

6 练习 5: 生成定量报告

步骤 8 关闭报告方法编辑窗口:

- 1 单击保存 & 退出关闭报告方法编辑对话框以返回到生成报告窗口。















步骤 9 根据此方法生成报告:

- 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, 取消选中所有样品以打开批处理表。
- 3 在批处理表窗口中突出显示其中一个样品, 然后单击确定。
- 4 单击所有化合物显示您选择的样品中的所有化合物。
- 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。
 - 所有生成的报告都将显示在查看器中。最新的报告将显示在列表顶部。

6 练习 5: 生成定量报告

- 可以从您创建的 Excel 或 PDF 文件查看或打印报告。

Name	Date modified	Type	Size
 DrugAnalysis_000_CMAMBIk_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	95 KB
 DrugAnalysis_001_CMAMCal_L1.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_002_CMAMCal_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_003_CMAMCal_L3.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_004_CMAMCal_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_005_CMAMCal_L5.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_006_CMAMQC_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_007_CMAMQC_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_008_CMAMSam_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	98 KB
 DrugAnalysis_009_CMAMSam_02.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_010_CMAMSam_03.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	166 KB

步骤 10 查看报告:

- 1 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。

参考

十大主要功能	82
定量方法	85
无参数积分器	86
批处理概览：结果	88
化合物概览	89
化合物确认	91
化合物校正	92

十大主要功能

定量分析程序包含十大功能，可帮助您更轻松有效地对数据进行积分、定量和检查：

批处理概览：批处理表设置

- 新建批处理 – 创建批处理表，您可以在该表中从单个视图对样品和化合物进行操作
- 分析 – 使用当前打开的方法重新创建校正曲线以及重新定量所有样品
- 定量 – 将现有的校正曲线应用于当前批处理、样品或化合物应用定量的粒度可帮助您对特定信号进行快速操作。
- 积分 – 对当前批处理、样品或化合物进行积分

方法编辑器

- MRM 设置 – 以简单的分步方式演示定量方法
- 根据采集的 MRM 数据创建方法 – 在只需要指定 ISTD 关系和浓度后，根据采集方法自动创建定量方法
- 使用“样品信息”窗口中的图形手动创建方法
- 按时间段分组 – 以时间段顺序按化合物组织方法
- 验证 – 确保定量方法符合严格标准
- 同位素稀释 – 支持根据 (Rx, Ry) Colby 常数计算进行调整

校正

- 曲线拟合助手 – 计算曲线的所有组合；选取禁用点；使用可按置信带排序以及可按 R^2 、标准差和最大百分比残差进行自定义过滤的方程显示结果
- 稀释助手 – 根据缺省值或指定的系列稀释方案计算和创建校正级别
- 复制校正级别 – 将校正级别从一个化合物复制到其他化合物
- 禁用校正点 – 根据级别、表中的单个化合物或在图形中以交互方式禁用校正点
- 曲线拟合 – 按下列对象支持曲线：
 - 类型：线性、二次、一阶 ln、二阶 ln、响应因子平均值
 - 原点：忽略、包含、强制、空白偏移
 - 权重：无、 $1/x$ 、 $1/x^2$ 、 $1/y$ 、 $1/y^2$ 、对数、 $1/SD^2$

7 参考

十大主要功能

- 替换曲线 – 根据现有的校正样品创建校正曲线
- 平均重复进样点 – 方法校正表中的平均重复进样点级别数。
- 导入级别 – 从文件导入校正级别和浓度
- 缩放图形 – 使图形能够按 X、Y、X-log 和 Y-log 进行自动缩放；进行智能缩放以适合指定的级别

积分器

- Agile 和 Agile2 积分器 – 对所有级别的信号提供无参数积分器，可减少手动积分工作量
- 积分器规格 – 生成规格，使信号的积分可接受、检查或拒绝积分
- 信噪比 – 计算峰的信噪比
- 图形 – 显示与化合物的绘图和峰信息的显示的高级交互情况

批处理概览：结果

- 导航 – 在样品、化合物、时间段和化合物组之间移动（上一个、下一个、直接）
- 化合物视图 – 在当前化合物 / 样品详细信息或多个化合物 / 样品的摘要信息之间切换
- 批处理表视图 – 支持平面表布局，或以垂直或水平方式钻取嵌套表以了解详细信息和化合物表布局
- 窗口布局 – 将屏幕重新组织为缺省设置，或保存或调用自定义窗口布局
- 自动检查 – 以自动和交互方式显示每个样品，允许您随时停止以进一步检查
- 列 – 允许添加、删除、重新排序、保存、调用、恢复或重置列
- 浮动窗格 – 使任何窗格浮动到另一个监视窗上面，以便进行双监视窗演示
- 导出表 – 将批处理概览表直接导出到 Excel 文件
- 导出图形 – 以多种格式将任何图形导出为自定义大小
- 复制 / 粘贴 – 将任何图形直接复制或粘贴到 Microsoft Office 应用程序中，如 Word、PowerPoint、Excel 等
- 打印 / 预览 – 以 WYSIWYG 格式（所见即所得）打印或预览屏幕内容
- 过滤器 – 显示样品类型的任意组合
- 排序 – 对表中显示的任何列进行排序

化合物概览：结果

- 打印 / 预览 – 打印或预览化合物色谱图。
- 复制 / 复制页面 – 将屏幕上选定的化合物色谱图或所有化合物色谱图复制到 Microsoft Office 应用程序中，如 Word、PowerPoint、Excel 等
- 编辑化合物色谱图 – 手动积分数据或选择零峰值化合物。
- 视图 – 显示色谱图详细信息，如基线、填充的峰。
- 调整轴 – 链接 / 取消链接 X 轴或 Y 轴，自动调整以适合窗格、适合峰或适合校正级别。
- 布局 – 按化合物或样品组织行，选择色谱图叠加，逐一查看样品或化合物，设置显示选项。
- 高亮显示 – 具有离群值的化合物

离群值检测

- 管理 – 设置和选择可被检测并单独控制的特定离群值
- 高亮显示 – 高亮显示结果表中的离群值（高显示为红色，低显示为蓝色）
- 过滤器 – 允许显示选定的过滤器类型的结果
- 离群值 – 支持对特定的数据类型进行离群值检测
- 定量消息 – 对在定量过程中发生严重问题的样品发出警告

报告

- 生成 – 生成图形和报告结果，以便导入和设置为 Excel XML 格式
- 自定义 – 可让您自定义 Excel 模板
- PDF 报告 - 用于自定义和生成 PDF 报告

更新

- 更新 / 计算保留时间平均值 – 更新化合物的保留时间或计算其加权平均值
- 更新定性离子比 – 根据化合物的当前样品更新定性离子比
- 更新质量指定 – 根据化合物的当前样品更新质量指定

定性

- 样品信息 – 允许显示当前样品的色谱图和提取质谱图
- 色谱图 / 质谱图 – 提供可用于浏览不同类型信号的质谱图的重要功能

定量方法

可使用方法编辑器从MRM采集数据文件（图12）、SIM数据、采集的扫描数据文件或以手动方式创建新定量方法。



图 12. 定量视图 - 方法编辑器

将从批处理表选定的文件用作开发方法设置的参考。然后，使用这些设置生成校正曲线并定量标样、QC 和样品。

无参数积分器

什么是无参数积分器？

Agilent 开发了特别适用于 MS/MS 数据的新的峰积分器算法。无参数积分器具有下列优点：

- 通过以统计方式设置峰的起点和终点，处理低噪音数据
- 自动调整阈值
- 不需要对低 MRM 信号的峰重新进行手动积分
- 识别可靠的峰和应丢弃的峰

积分结果示例

图 13 显示两个极端条件下的数据。

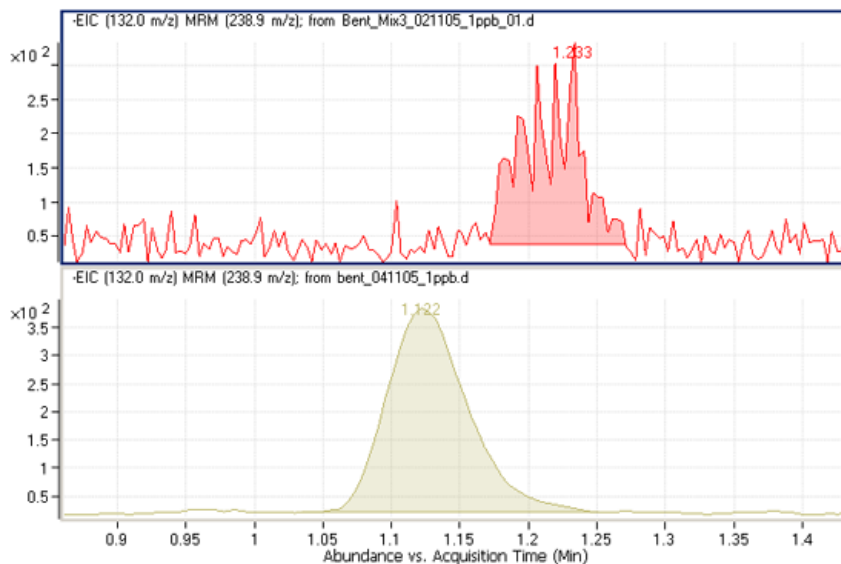


图 13. 无参数积分器 - 两个极端条件下的数据

7 参考

无参数积分器

下方的色谱峰很容易积分，因为它是一个完美的高斯形状的峰，但很难定义上方峰的基线。实际上，许多积分器算法会将这些结果解释为多个峰。

然而，Agilent 的新算法可以顺利地定义基线并将其识别为单个峰。实际上，即使基线处于上升而不是平的（如图所示），这种新的积分器算法也会将其作为单个峰积分。

批处理概览：结果

从安非他明 (Amp) 的分析获得的积分结果显示在图 14 中。这是批处理表、化合物信息和校正曲线的平面视图。



图 14. 安非他明结果

- 批处理表显示将定量方法应用于每个数据文件所得到的积分结果。带颜色的高亮显示的数据对应于低于（蓝色）或高于（红色）预期结果的结果。
- 在左下方的化合物信息窗口显示积分的色谱峰。
- 校正曲线显示在右下方。

化合物概览

化合物概览视图会显示在每个样品中检测到的特定化合物，如图 15 中所示。使用此功能可以查看化合物色谱图，并对其进行排列以便进行数据分析。对于在多批样品中寻找化合物动态的食品安全实验室而言，它特别有用。

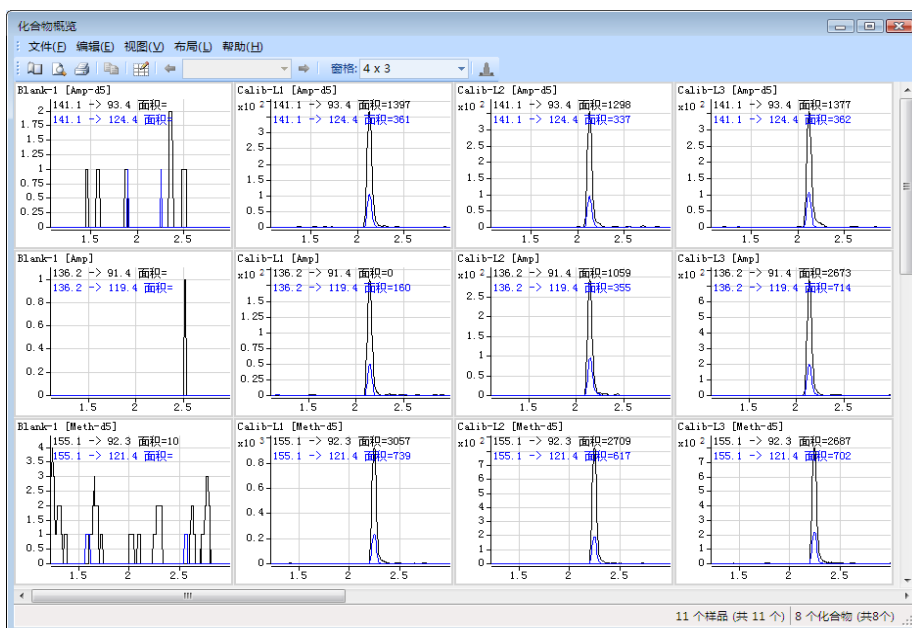


图 15. 定量分析中的化合物概览

可使用化合物概览中的设置功能选择要包括在视图中的化合物和样品。如图 16 所示，设置图形框顶部的不同选项卡提供用于选择和排列色谱图的各种选项。

- **样品**选项卡列出批处理中的所有样品，并提供用于选择所有样品或特定样品的选项。
- “**化合物**”选项卡列出在批处理中检测到的化合物。它允许您选择要查看的化合物。
- 使用**组织**选项卡可以根据样品和化合物指定色谱图的排列方式。它为化合物、样品和离群值提供了叠加选项。该选项卡提供用于调整色谱图的选项，如显示基线，或填充峰以最有效地说明化合物检测动态。
- **离群值**选项卡提供用于显示数据中的离群值的选项。

7 参考

化合物概览

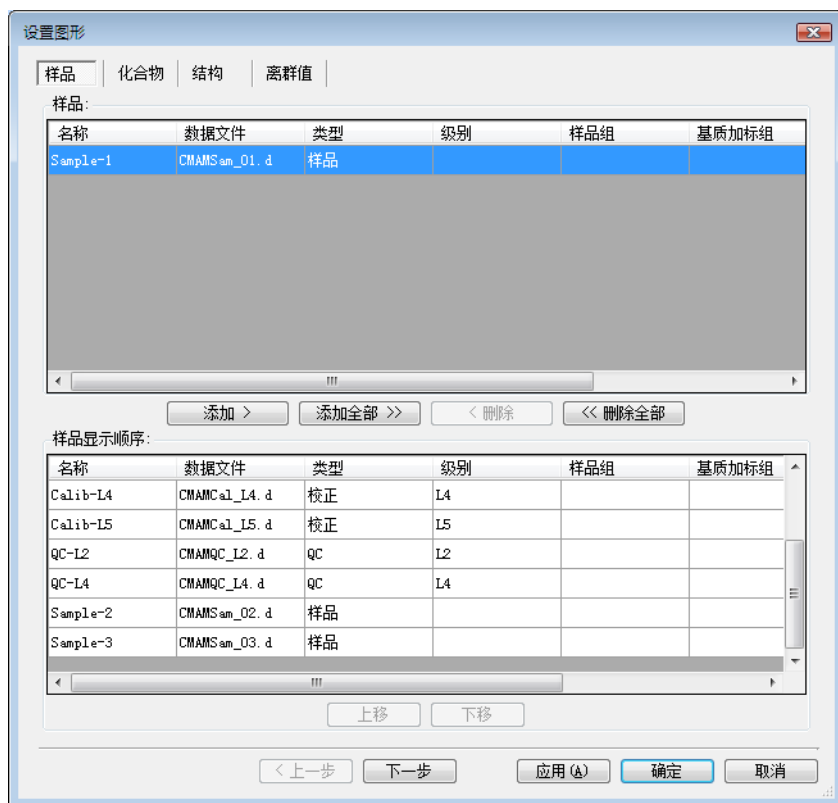


图 16. 化合物概览的设置选项

化合物确认

图 17 中显示的格式是认证的药物测试实验室的值。它显示两组可从 THC 分析中获得的图谱。

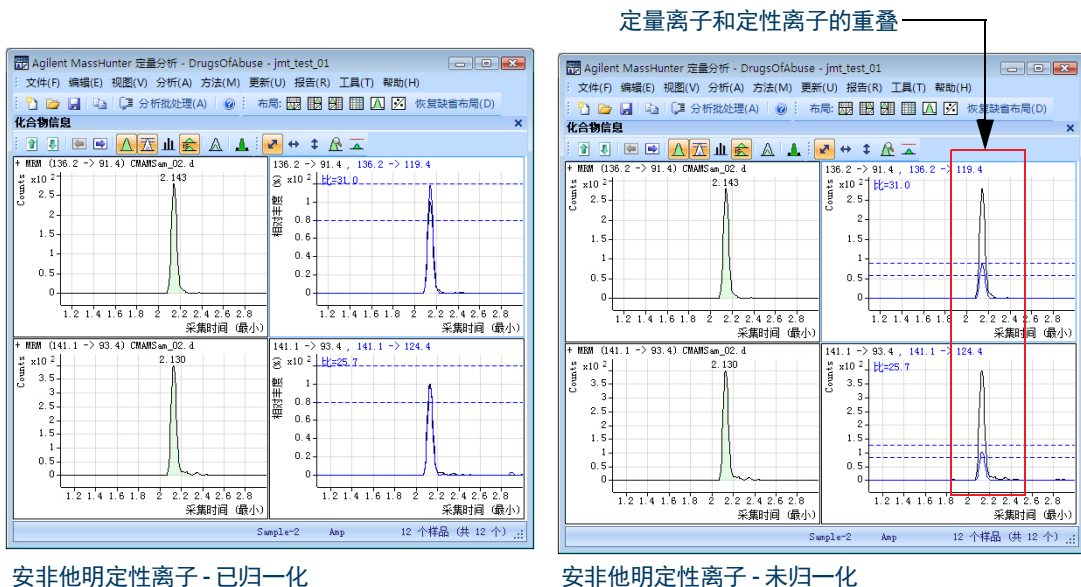


图 17. 定量分析中的安非他明

必须采集两个产物离子以作确认：定量离子和定性离子。通常，用于定量的定量离子是两个产物离子中丰度最大的那个。

要能够确认安非他明的存在，定性离子峰面积必须至少为定量离子的一定百分比，可在定量方法中设置该数字。在本例中，将使用 26.5%，窗口范围为 $\pm 20\%$ 。这意味着定性离子的面积必须在待测元素安非他明的定量离子的 21.2% 至 31.8% 范围内。ISTD 或 Amp-d5 的定性离子也必须在特定的范围内。

从左侧的图中很难确定定性离子是否在可接受窗范围内，因为定性峰的大小按因子 1/0.265 进行了归一化。在右侧的图中，在定量离子峰的 26.5% 处使接受窗口居中，绘制的定性离子未归一化，或绘制在与定量离子相同的刻度上。如果离子不在所要求的接受窗口范围内，则它带有蓝色阴影，但它仍是透明的，不会隐藏定量离子。这样可以容易地从视觉上确认化合物的存在。

化合物校正

定量分析程序包含有助于校正和定量化合物的多种工具：

- 曲线拟合助手
- 光标指针可获得数据点信息
- 数据点缩放

曲线拟合助手

曲线拟合助手提供评估可能的曲线拟合的分析视图（图 18）。

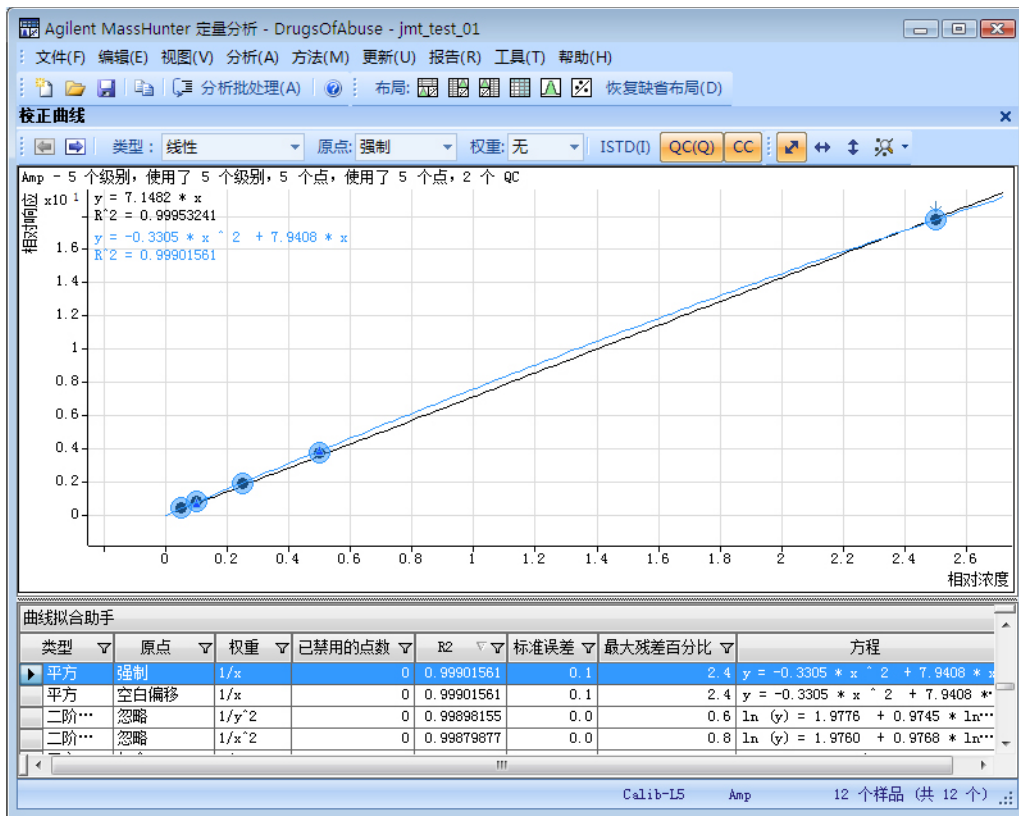


图 18. 曲线拟合助手

请注意，所绘制的通过数据点的黑色线条使用“二次”作为“拟合”，使用 $1/x$ 作为“权重”，使用“包含”作为“原点”，如顶部所示。曲线设置的其他多种组合列在校正曲线下方，其中以蓝色高亮显示选定的曲线。高亮显示的设置也在曲线窗口中也以蓝色绘制。

例如，您可以查找最佳曲线拟合，即对应于最高 R^2 值的曲线拟合，方法是按最佳到最差 R^2 值对所有可能的结果排序，然后确定将多少数据点看作离群值。

例如，列表中的第一组参数对应于线性拟合、忽略原点和相等权重。对应的 R^2 值是 0.9998001477，这个值非常好。只需在表中单击该条目即可绘制相应的曲线。

可使用这些设置重新定量数据。在某些实验室中，排除离群值是一个常见的标准操作程序 (SOP)。

数据点信息

在校正曲线中，重叠的数据点并不罕见，特别是在三重四极杆 MS 数据中，其中 %RSD 值非常低（图 19）。要区分数据点，可将光标移至数据点上方，以获得有关这些数据点的更多信息。

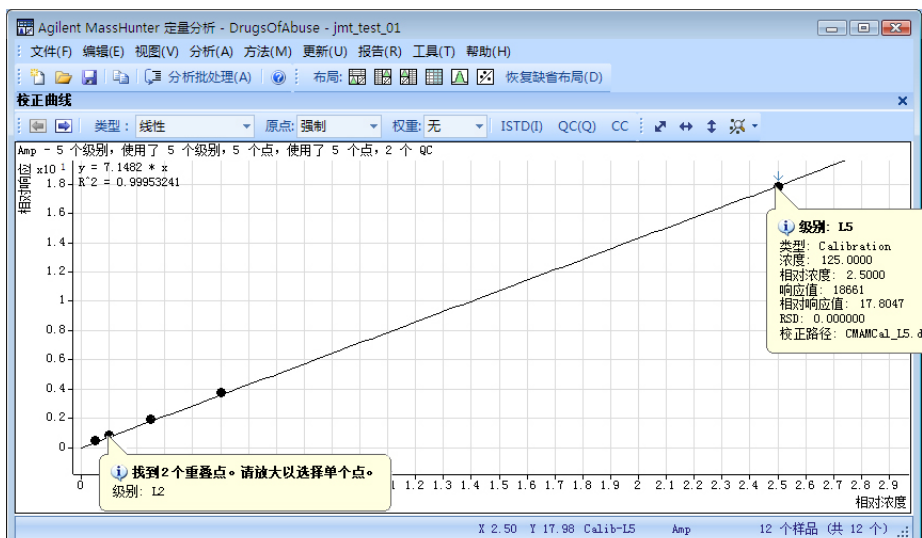


图 19. 安非他明结果：校正数据点信息

该图显示此类类型的信息的两个示例。第一个示例显示数据点重叠，并建议您放大以单独查看它们。第二个示例显示有关数据点本身的信息。

数据点缩放

您可以在重叠的数据点上放大，以查看视觉上无法看清的数据点。

7 参考

化合物校正

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2021

第一版，2021 年 11 月



G3336-97058

